

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2016-76696

(P2016-76696A)

(43) 公開日 平成28年5月12日(2016.5.12)

(51) Int.Cl.		F I		テーマコード (参考)
H 0 1 L 51/50	(2006.01)	H 0 5 B 33/14	B	3 K 1 0 7
C 0 9 K 11/06	(2006.01)	C 0 9 K 11/06	6 6 0	

審査請求 未請求 請求項の数 6 O L (全 65 頁)

(21) 出願番号	特願2015-190534 (P2015-190534)	(71) 出願人	503055897
(22) 出願日	平成27年9月29日 (2015. 9. 29)		ユニバーサル ディスプレイ コーポレイ ション
(31) 優先権主張番号	14/509, 274		アメリカ合衆国、ニュージャージー、ユー イング、 フィリップス プールバード
(32) 優先日	平成26年10月8日 (2014. 10. 8)		3 7 5
(33) 優先権主張国	米国 (US)	(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
		(74) 代理人	100163038
			弁理士 山下 武志

最終頁に続く

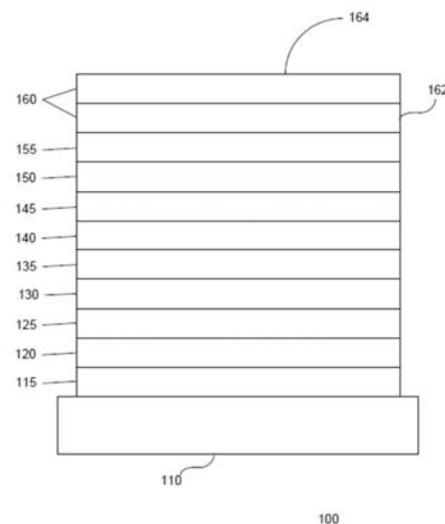
(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス材料及びデバイス

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】良好なデバイス効率、および良好なデバイス寿命を示す、新規な有機発光デバイス用組成物を提供する。

【解決手段】有機発光デバイス 1 0 0 中のリン光発光体として機能する金属錯体を含む組成物であって、金属錯体は、少なくとも一つの芳香族環及び少なくとも一つの置換基 R を有し、置換基 R は部分的にフッ素化されたアルキル、部分的にフッ素化されたシクロアルキル、及びこれらの組合せからなる群から選択され、かつ芳香族環に直接結合され、F を結合して有する C は、少なくとも一つの炭素原子によって、芳香族環から離れている、組成物。

【選択図】 図 1



【特許請求の範囲】

【請求項 1】

第 1 の化合物を含む組成物であって、

前記第 1 の化合物は、室温で有機発光デバイス中のリン光発光体として機能することができ；

前記第 1 の化合物は、少なくとも 1 つの芳香族環及び少なくとも 1 つの置換基 R を有し；

前記少なくとも 1 つの置換基 R は、それぞれ独立して、部分的にフッ素化されたアルキル、部分的にフッ素化されたシクロアルキル、及びこれらの組合せからなる群から選択され；

前記少なくとも 1 つの置換基 R は、それぞれ前記芳香族環の 1 つに直接結合し；

前記少なくとも 1 つの置換基 R のそれぞれにおいて、F を結合して有する C は、少なくとも 1 つの炭素原子によって、前記芳香族環から離れていることを特徴とする組成物。

10

【請求項 2】

前記第 1 の化合物が室温で、三重項励起状態から基底一重項状態に発光することができる請求項 1 に記載の組成物。

【請求項 3】

前記第 1 の化合物が金属 - 炭素結合を有する金属配位錯体であり、前記金属が Ir、Rh、Re、Ru、Os、Pt、Au、及び Cu からなる群から選択される請求項 1 に記載の組成物。

20

【請求項 4】

前記第 1 の化合物が $M(L^1)_x(L^2)_y(L^3)_z$ の式で表される請求項 1 に記載の組成物。

(式中、 L^1 、 L^2 、及び L^3 は、同じでも異なってもよく；

x は、1、2、又は 3 であり；

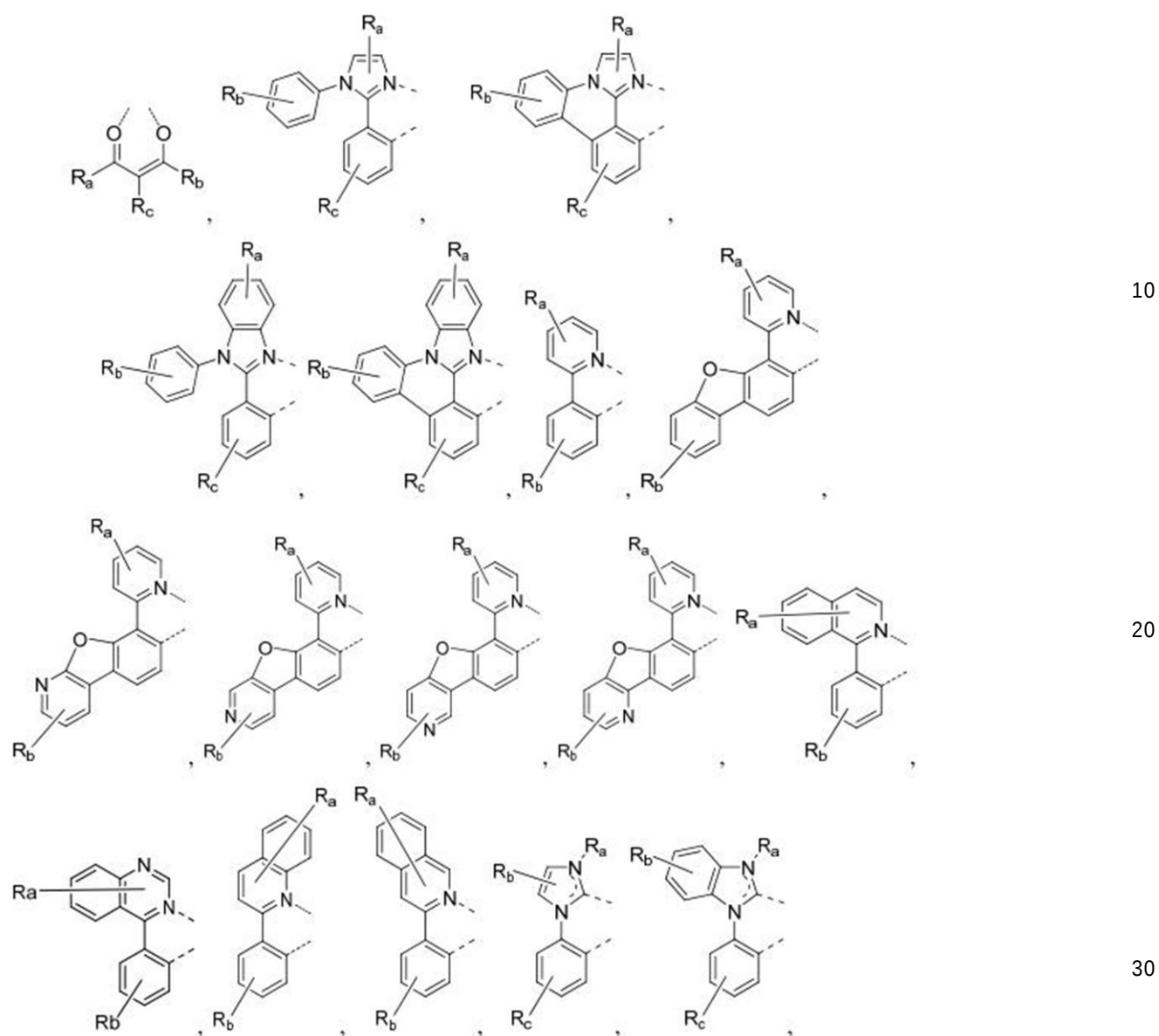
y は、0、1、又は 2 であり；

z は、0、1、又は 2 であり；

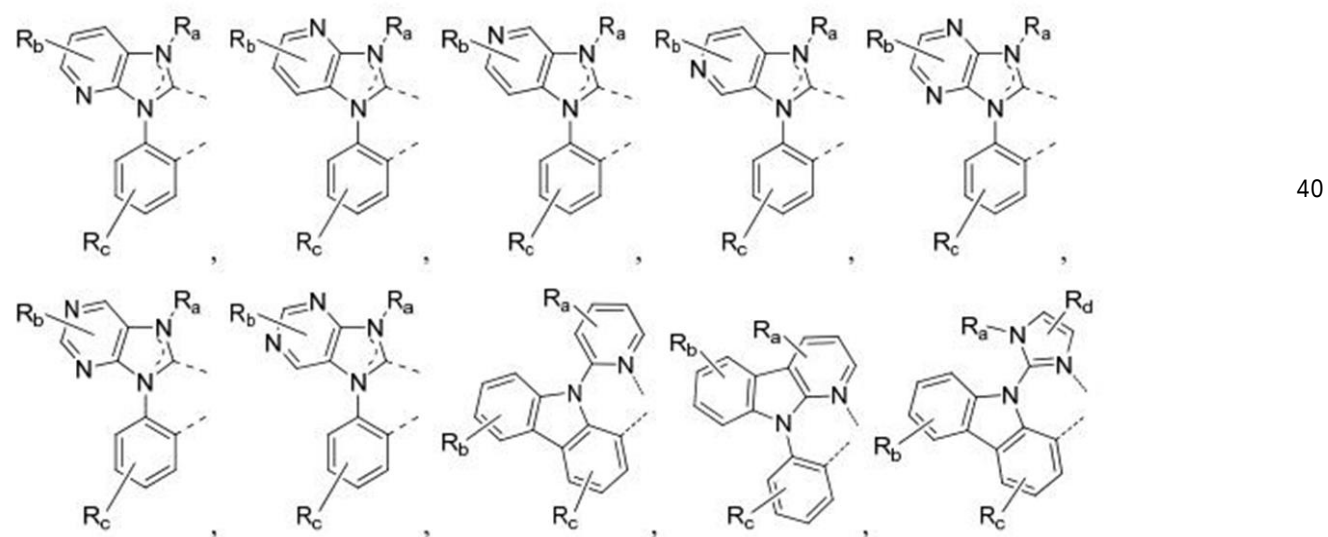
$x + y + z$ は、前記金属 M の酸化状態であり；

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

【化 1】



【化 2】



(式中、 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d は、独立して、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す、又は無置換を表し；

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

R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d の2つの隣接する置換基は、結合して環又は多座配位子を形成してもよく；

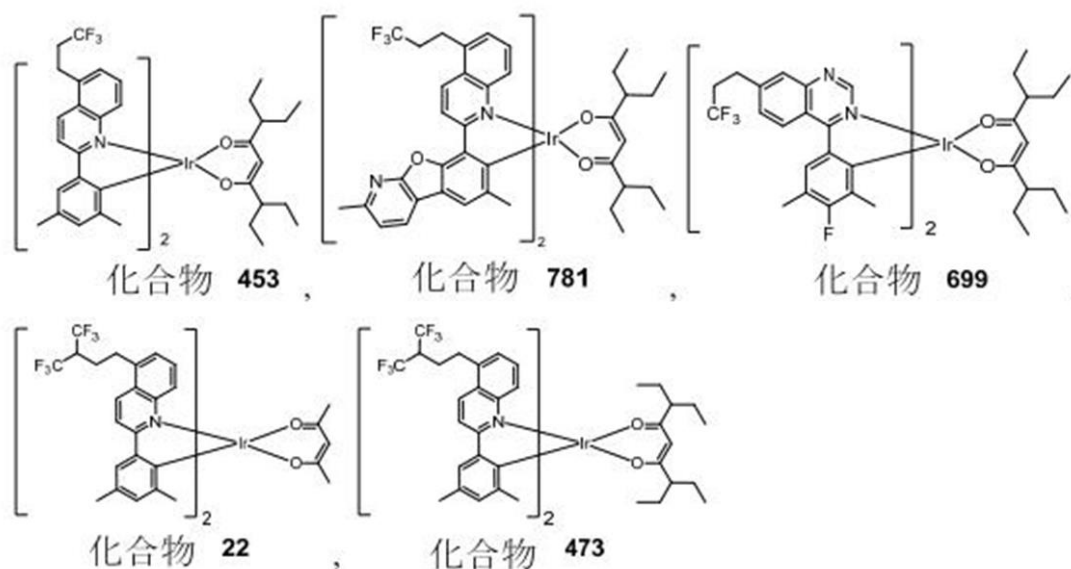
R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d の少なくとも1つは、少なくとも1つの置換基Rを含む。

10

【請求項5】

前記第1の化合物が下記からなる群から選択される請求項1に記載の組成物。

【化3】



20

30

【請求項6】

第1の有機発光デバイスを含む第1のデバイスであって、前記第1の有機発光デバイスは、

アノードと；

カソードと；

前記アノードと前記カソードとの間に配置され、第1の化合物を含む有機層と、を含み；

前記第1の化合物は、室温でリン光発光体として機能することができ；

前記第1の化合物は、少なくとも1つの芳香族環及び少なくとも1つの置換基Rを有し；

40

前記少なくとも1つの置換基Rは、それぞれ独立して、部分的にフッ素化されたアルキル、部分的にフッ素化されたシクロアルキル、及びこれらの組合せからなる群から選択され；

前記少なくとも1つの置換基Rは、それぞれ前記芳香族環の1つに直接結合し；

前記少なくとも1つの置換基Rのそれぞれにおいて、Fを結合して有するCは、少なくとも1つの炭素原子によって、前記芳香族環から離れていることを特徴とする第1のデバイス。

50

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

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。

10

【0002】

本発明は、発光体としての使用のための金属錯体のための新規の配位子、及び前記配位子を含む有機発光ダイオード等のデバイスに関する。

【背景技術】

【0003】

有機材料を利用する光電子デバイスは、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、有機発光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ティング等の用途において使用するためのますます興味深い技術となりつつある。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。

30

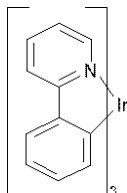
【0005】

リン光性発光分子の1つの用途は、フルカラーディスプレイである。そのようなディスプレイの業界標準は、「飽和(saturated)」色と称される特定の色を放出するように適合された画素を必要とする。特に、これらの標準は、飽和した赤色、緑色及び青色画素を必要とする。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。

【0006】

緑色発光分子の一例は、下記の構造：

【化1】



40

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

【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(ここではIr)への配位結合を直線として描写する。

【0008】

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

50

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」クラスから分子を排除しない。小分子は、例えばポリマー骨格上のペンダント基として、又は該骨格の一部として、ポリマーに組み込まれてもよい。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もできる。デンドリマーのコア部分は、蛍光性又はリン光性小分子発光体であってよい。デンドリマーは「小分子」であってよく、OLEDの分野において現在使用されているデンドリマーはすべて小分子であると考えられている。

【0009】

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ってもよい。例えば、間に種々の有機層があるとしても、カソードはアノード「の上に配置されている」と記述され得る。

10

【0010】

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。

【0011】

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

20

【0012】

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」(HOMO)又は「最低空分子軌道」(LUMO)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HOMO又はLUMOエネルギー準位「よりも大きい」又は「よりも高い」。イオン化ポテンシャル(IP)は、真空準位と比べて負のエネルギーとして測定されるため、より高いHOMOエネルギー準位は、より小さい絶対値を有するIP(あまり負でないIP)に相当する。同様に、より高いLUMOエネルギー準位は、より小さい絶対値を有する電子親和力(EA)(あまり負でないEA)に相当する。頂部に真空準位がある従来のエネルギー準位図において、材料のLUMOエネルギー準位は、同じ材料のHOMOエネルギー準位よりも高い。「より高い」HOMO又はLUMOエネルギー準位は、「より低い」HOMO又はLUMOエネルギー準位よりもそのような図の頂部に近いように思われる。

30

【0013】

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に遠く離れているものとして例証される。故に、HOMO及びLUMOエネルギー準位の定義は、仕事関数とは異なる慣例に準ずる。

40

【0014】

OLED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】

本発明は、有機発光デバイス中のリン光発光体として有用である金属錯体のための新規

50

の配位子を開示する。出願者は、配位子の新しい側鎖の組み入れは、良好なデバイス効率及びデバイス寿命を維持しつつ、金属錯体の発光の細かな調節を可能にすると考える。

【0016】

実施形態によれば、新規の化合物を含む組成物が開示され、前記化合物は、室温で有機発光デバイス中のリン光発光体として機能することができる。前記化合物は、少なくとも1つの芳香族環及び少なくとも1つの置換基Rを有し、前記少なくとも1つの置換基Rは、それぞれ独立して、部分的にフッ素化されたアルキル、部分的にフッ素化されたシクロアルキル、及びこれらの組合せからなる群から選択され；前記少なくとも1つの置換基Rは、それぞれ前記芳香族環の1つに直接結合し、前記少なくとも1つの置換基Rのそれぞれにおいて、Fを結合して有するCは、少なくとも1つの炭素原子によって、前記芳香族環から離れている。

10

【0017】

他の実施形態によれば、第1の有機発光デバイスを含む第1のデバイスも提供される。前記第1の有機発光デバイスは、アノードと、カソードと、前記アノードと前記カソードとの間に配置された有機層とを含むことができる。前記有機層は、少なくとも1つの芳香族環及び少なくとも1つの置換基Rを有する前記化合物を含むことができ、前記少なくとも1つの置換基Rは、それぞれ部分的にフッ素化されたアルキル、部分的にフッ素化されたシクロアルキル、及びこれらの組合せからなる群から選択され；前記少なくとも1つの置換基Rは、それぞれ前記芳香族環の1つに直接結合し、前記少なくとも1つの置換基Rのそれぞれにおいて、Fを結合して有するCは、少なくとも1つの炭素原子によって、前記芳香族環から離れている。前記第1のデバイスは、消費者製品、有機発光デバイス、及び/又は照明パネルであることができる。

20

【図面の簡単な説明】

【0018】

【図1】図1は、有機発光デバイスを示す。

【0019】

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

【発明を実施するための形態】

【0020】

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サイプレックス上に局在し得る。熱緩和等の無輻射機構が発生する場合もあるが、概して望ましくないとみなされている。

30

【0021】

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

40

【0022】

ごく最近では、三重項状態から光を放出する発光材料（「リン光」）を有するOLEDが実証されている。参照によりその全体が組み込まれる、Baldoら、「Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices」、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）（「

50

Baldon - 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。

【0023】

図 1 は、有機発光デバイス 100 を示す。図は必ずしも一定の縮尺ではない。デバイス 100 は、基板 110、アノード 115、正孔注入層 120、正孔輸送層 125、電子ブロッキング層 130、発光層 135、正孔ブロッキング層 140、電子輸送層 145、電子注入層 150、保護層 155、カソード 160、及びバリア層 170 を含み得る。カソード 160 は、第一の導電層 162 及び第二の導電層 164 を有する複合カソードである。デバイス 100 は、記述されている層を順に堆積させることによって製作され得る。これらの種々の層の特性及び機能並びに材料例は、参照により組み込まれる US 7, 279, 704、6 ~ 10 段において更に詳細に記述されている。

10

【0024】

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

20

30

【0025】

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

【0026】

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、ホスト及びドープア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

40

50

しく限定することを意図するものではない。例えば、デバイス 200 において、正孔輸送層 225 は正孔を輸送し、正孔を発光層 220 に注入し、正孔輸送層又は正孔注入層として記述され得る。一実施形態において、OLED は、カソード及びアノードの間に配置された「有機層」を有するものとして記述され得る。有機層は単層を含んでいてよく、又は、例えば図 1 及び 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。

【0027】

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。

10

【0028】

別段の規定がない限り、種々の実施形態の層のいずれも、任意の適切な方法によって堆積され得る。有機層について、好ましい方法は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第 6,013,982 号及び同第 6,087,196 号において記述されているもの等の熱蒸着、インクジェット、参照によりその全体が組み込まれる Forrestらの米国特許第 6,337,102 号において記述されているもの等の有機気相堆積 (OVPD)、並びに参照によりその全体が組み込まれる米国特許第 7,431,968 号において記述されているもの等の有機気相ジェットプリンティング (OVJP) による堆積を含む。他の適切な堆積法は、スピンコーティング及び他の溶液ベースのプロセスを含む。溶液ベースのプロセスは、好ましくは、窒素又は不活性雰囲気中で行われる。他の層について、好ましい方法は熱蒸着を含む。好ましいパターンニング法は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第 6,294,398 号及び同第 6,468,819 号において記述されているもの等のマスク、冷間圧接を経由する堆積、並びにインクジェット及び OVJD 等の堆積法のいくつかに関連するパターンニングを含む。他の方法を使用してもよい。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アル基等の置換基は、溶液プロセッシングを受ける能力を増強するために、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。溶液プロセッシングを受ける小分子の能力を増強するために、 dendrimer 置換基が使用され得る。

20

30

40

【0029】

本発明の実施形態に従って製作されたデバイスは、バリア層を更に含んでいてよい。バリア層の 1 つの目的は、電極及び有機層を、水分、蒸気及び/又はガス等を含む環境における有害な種への損傷性暴露から保護することである。バリア層は、基板、電極の上、下若しくは隣に、又はエッジを含むデバイスの任意の他の部分の上に堆積し得る。バリア層は、単層又は多層を含んでいてよい。バリア層は、種々の公知の化学気相堆積技術によって形成され得、単相を有する組成物及び多相を有する組成物を含み得る。任意の適切な材料又は材料の組合せをバリア層に使用してよい。バリア層は、無機若しくは有機化合物又は両方を組み込み得る。好ましいバリア層は、参照によりその全体が本明細書に組み込まれる、米国特許第 7,968,146 号、PCT 特許出願第 PCT/US2007/02

50

3098号及び同第PCT/US2009/042829号において記述されている通りの、ポリマー材料及び非ポリマー材料の混合物を含む。「混合物」とみなされるためには、バリア層を構成する前記のポリマー及び非ポリマー材料は、同じ反応条件下で及び/又は同時に堆積されるべきである。ポリマー材料対非ポリマー材料の重量比は、95:5から5:95の範囲内となり得る。ポリマー材料及び非ポリマー材料は、同じ前駆体材料から作成され得る。一例において、ポリマー材料及び非ポリマー材料の混合物は、ポリマーケイ素及び無機ケイ素から本質的になる。

【0030】

本発明の実施形態にしたがって作製されたデバイスは、種々の電気製品又は中間部品に組み込まれることができる多種多様な電子部品モジュール（又はユニット）に組み込まれることができる。このような電気製品又は中間部品としては、エンドユーザーの製品製造者によって利用されることができるディスプレイスクリーン、照明デバイス（離散的光源デバイス又は照明パネル等）が挙げられる。このような電子部品モジュールは、駆動エレクトロニクス及び/又は電源を任意に含むことができる。本発明の実施形態にしたがって作製されたデバイスは、組み込まれた1つ以上の電子部品モジュール（又はユニット）を有する多種多様な消費者製品に組み込まれることができる。このような消費者製品は、1つ以上の光源及び/又は1つ以上のある種の表示装置を含む任意の種類の製品を含む。このような消費者製品の幾つかの例としては、フラットパネルディスプレイ、コンピュータモニター、メディカルモニター、テレビ、掲示板、屋内若しくは屋外照明及び/又は信号送信用のライト、ヘッドアップディスプレイ、完全又は部分透明ディスプレイ、フレキシブルディスプレイ、レーザープリンター、電話、携帯電話、タブレット、ファブレット、パーソナルデジタルアシスタント（PDA）、ラップトップコンピュータ、デジタルカメラ、カムコーダー、ビューファインダー、マイクロディスプレイ、3-D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。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での使用が意図されているが、この温度範囲外、例えば、摂氏-40度～+80度で用いることもできる。

【0031】

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。

【0032】

本明細書において、「ハロ」、「ハライド」、又は「ハロゲン」という用語は、フッ素、塩素、臭素、及びヨウ素を含む。

【0033】

本明細書において、「アルキル」という用語は、直鎖及び分岐鎖アルキル基のいずれをも意味する。好ましいアルキル基としては、1～15個の炭素原子を含むアルキル基であり、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、ブチル、イソブチル、tert-ブチル等を含む。更に、前記アルキル基は、置換されていてもよい。

【0034】

本明細書において、「シクロアルキル」という用語は、環状アルキル基を意味する。好ましいシクロアルキル基としては、3～7個の炭素原子を含むシクロアルキル基であり、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシル等を含む。更に、前記シクロアルキル基は置換されていてもよい。

【0035】

本明細書において、「アルケニル」という用語は、直鎖及び分岐鎖アルケニル基のいずれをも意味する。好ましいアルケニル基としては、2～15個の炭素原子を含むアルケニ

ル基である。更に、前記アルケニル基は、置換されていてもよい。

【0036】

本明細書において、「アルキニル」という用語は、直鎖及び分岐鎖アルキン基のいずれをも意味する。好ましいアルキニル基は、2～15個の炭素原子を含むアルキニル基である。更に、前記アルキニル基は置換されていてもよい。

【0037】

本明細書において、「アラルキル」又は「アリーラルキル」という用語は、相互交換可能に使用され、置換基として芳香族基を有するアルキル基を意味する。更に、前記アラルキル基は、置換されていてもよい。

【0038】

本明細書において、「ヘテロ環基」という用語は、芳香族環基及び非芳香族環基を意味する。ヘテロ芳香族環基は、ヘテロアリールも意味する。好ましいヘテロ非芳香族環基は、3又は7個の環原子を含む少なくとも1つのヘテロ原子であり、モルホリノ、ピペリジノ、ピロリジノ等の環状アミンを含み、及びテトラヒドロフラン、テトラヒドロピラン等の環状エーテルを含む。更に、前記ヘテロ環基は、置換されていてもよい。

【0039】

本明細書において、「アリール」又は「芳香族基」は、単環及び多環系を意味する。多環とは、2つの隣接する環（前記環は、「縮合」している）により2つの炭素が共有されている2つ以上の環を有することができ、前記環の少なくとも1つは、芳香族であり、例えば、他の環は、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロ環、及び/又はヘテロアリールである。更に、前記アリール基は、置換されていてもよい。

【0040】

本明細書において、「ヘテロアリール」は、例えば、ピロール、フラン、チオフェン、イミダゾール、オキサゾール、チアゾール、トリアゾール、ピラゾール、ピリジン、ピラジン、及びピリミジン等、1～3個のヘテロ原子を含む単環の複素芳香族基を意味する。ヘテロアリールという用語も、2つの隣接する環（前記環は、「縮合」している）により2つの原子が共されている2つ以上の環を有する多環のヘテロ芳香族系を含み、前記環の少なくとも1つは、ヘテロアリールであり、例えば、他の環は、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロ環、及び/又はヘテロアリールであることができる。更に、前記ヘテロアリールは、置換されていてもよい。

【0041】

前記アルキル、前記シクロアルキル、前記アルケニル、前記アルキニル、前記アラルキル、前記ヘテロ環、前記アリール、及び前記ヘテロアリールは、水素、重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリーラルキル、アルコキシ、アリーロキシ、アミノ、環状アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボニル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルフォニル、ホスフィノ及びこれらの組合せから選択される1つ以上の置換基で置換されていてもよい。

【0042】

本明細書において、「置換（された）」は、H以外の置換基が炭素等の関連している位置に結合していることを示す。したがって、例えば、 R^1 が一置換である場合、 R^1 はH以外でなくてはならない。同様に、 R^1 が二置換である場合、 R^1 のうちの2つは、H以外でなくてはならない。同様に、 R^1 が無置換である場合、 R^1 は全ての置換位置において水素である。

【0043】

本明細書において記述されるフラグメント、例えば、アザ-ジベンゾフラン、アザ-ジベンゾチオフェン等の中の「アザ」という名称は、各フラグメント中のC-H基の1つ以上が窒素原子に置き換わることができることを意味し、例えば、何ら限定するものではないが、アザトリフェニレンは、ジベンゾ[f, h]キノキサリンとジベンゾ[f, h]キノ

10

20

30

40

50

ノリンのいずれをも包含する。当業者であれば、上述のアザ誘導体の他の窒素アナログを容易に想像することができ、このようなアナログ全てが本明細書に記載の前記用語によって包含されることが意図される。

【0044】

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

【0045】

実施形態によれば、新規の第1の化合物を含む組成物が開示され、前記第1の化合物は、室温で有機発光デバイス中のリン光発光体として機能することができる。前記第1の化合物は、少なくとも1つの芳香族環及び少なくとも1つの置換基Rを有し、前記少なくとも1つの置換基Rは、それぞれ独立して、部分的にフッ素化されたアルキル、部分的にフッ素化されたシクロアルキル、及びこれらの組合せからなる群から選択され；前記少なくとも1つの置換基Rは、それぞれ前記芳香族環の1つに直接結合し、前記少なくとも1つの置換基Rのそれぞれにおいて、Fを結合して有するCは、少なくとも1つの炭素原子によって、前記芳香族環から離れている。

【0046】

前記少なくとも1つの置換基Rのそれぞれが前記芳香族環の1つに直接結合していることは、それぞれのRが異なる芳香族環に結合することができる、又は前記Rの一部が同じ芳香族環に結合することができることを意味する。部分的にフッ素化された基は、基において全ての炭素-水素結合が炭素-フッ素結合で置き換わるわけではなく、言い換えれば、その基において少なくとも1つの炭素-水素結合が残っていることを意味する。

【0047】

1つの実施形態においては、前記第1の化合物は、室温で、三重項励起状態から基底一重項状態に発光することができる。

【0048】

1つの実施形態においては、前記第1の化合物は、金属-炭素結合を有する金属配位錯体である。前記金属は、Ir、Rh、Re、Ru、Os、Pt、Au、及びCuからなる群から選択されることができる。1つの好ましい実施形態においては、前記金属は、Irである。他の好ましい実施形態においては、前記金属は、Ptである。

【0049】

前記第1の化合物の1つの実施形態においては、Fを結合して有するCは、少なくとも2つの炭素原子によって、前記芳香族環から離れている。他の実施形態においては、Fを結合して有するCは、少なくとも3つの炭素原子によって、前記芳香族環から離れている。

【0050】

前記第1の化合物の1つの実施形態においては、前記少なくとも1つの置換基Rは、それぞれ少なくとも1つのCF₃基を含む。好ましい実施形態においては、前記少なくとも1つの置換基Rは、それぞれCF₃基のみを含み、CF基又はCF₂基を含まない。他の実施形態においては、前記少なくとも1つの置換基Rは、任意のCF₃基を含まない。

【0051】

1つの実施形態においては、前記第1の化合物は、少なくとも1つの置換基R中のF原子以外で、F原子を有さない。

【0052】

前記第1の化合物の1つの実施形態においては、前記芳香族環は、前記第1の化合物のLUMO電子密度を含む。

【0053】

前記第1の化合物の1つの実施形態においては、式C_nH_{2n+1-m}F_m及びC_qH

10

20

30

40

50

$2q - 1 - m$ F_m 中の m は、3 の倍数ではない。他の実施形態においては、 m は 3 の倍数である。

【0054】

本開示の態様によれば、上記で定義されている前記第 1 の化合物は、 $M(L^1)_x(L^2)_y(L^3)_z$ の式で表され； L^1 、 L^2 、及び L^3 は、同じでも異なってもよい。

式中、 x は、1、2、又は 3 であり；

y は、0、1、又は 2 であり；

z は、0、1、又は 2 であり；

$x + y + z$ は、前記金属 M の酸化状態であり；

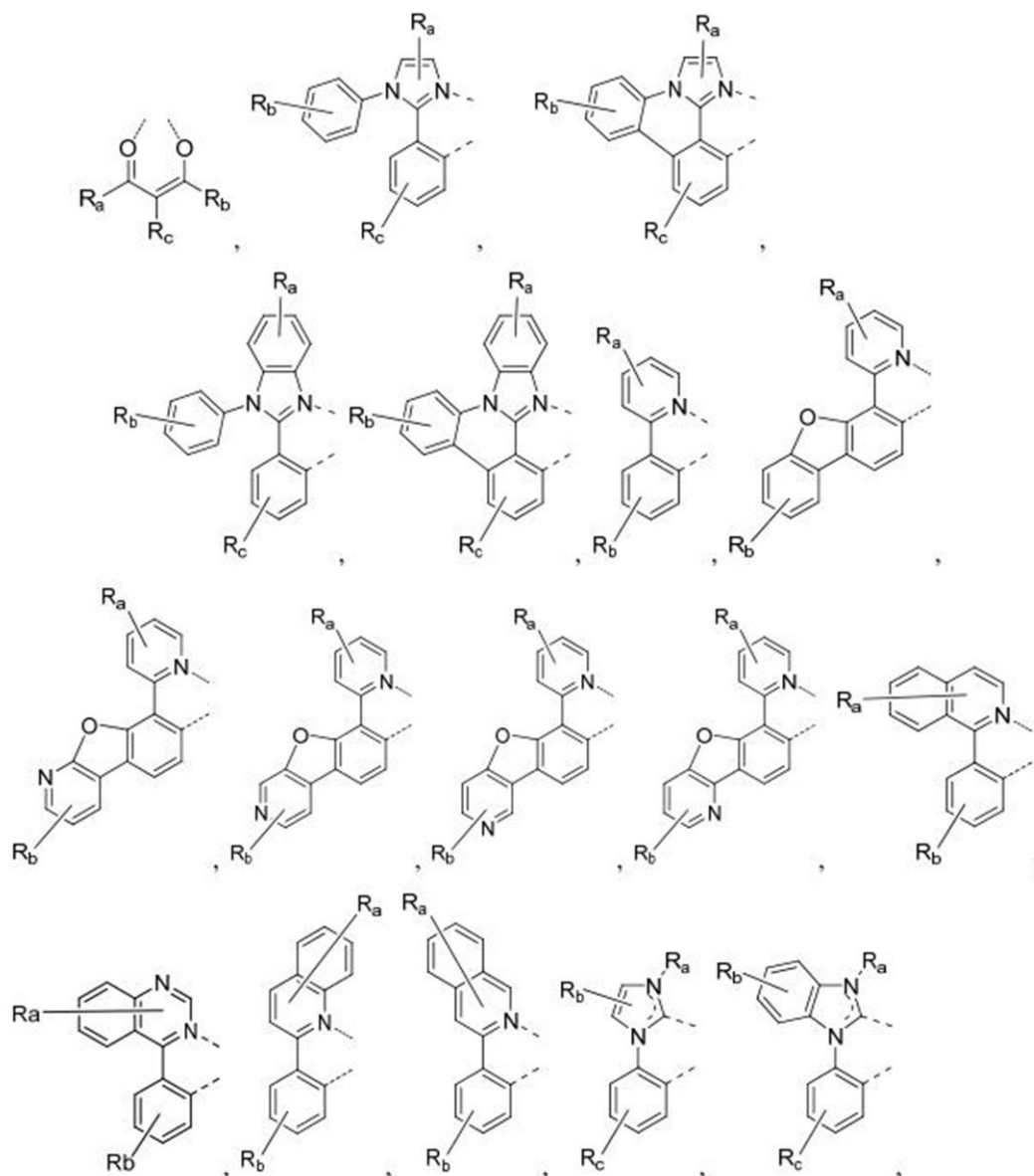
L^1 、 L^2 、及び L^3 は、それぞれ独立して、下記からなる群から選択される。

10

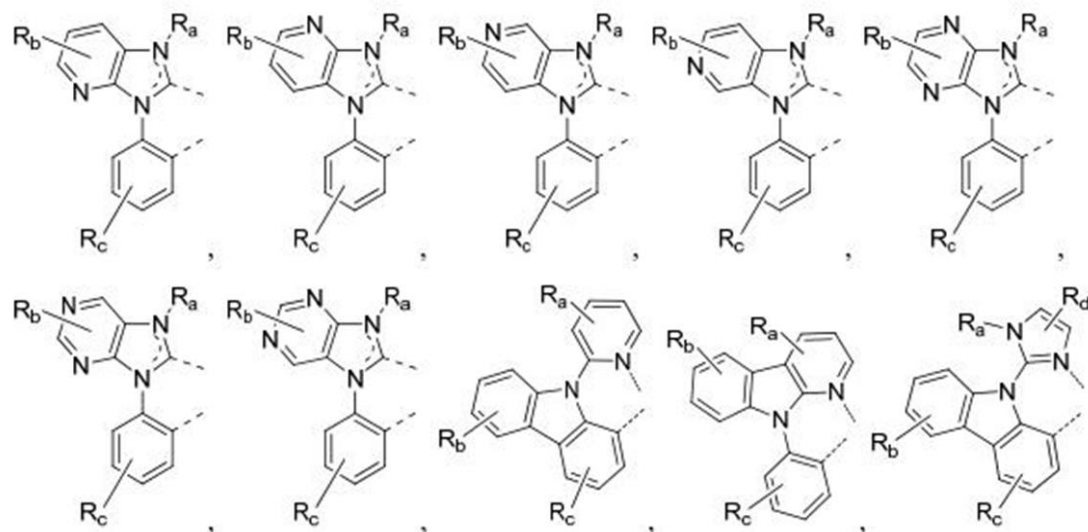
20

30

40



【化 3】



10

式中、 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d は、独立して、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す、又は無置換を表し；

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

20

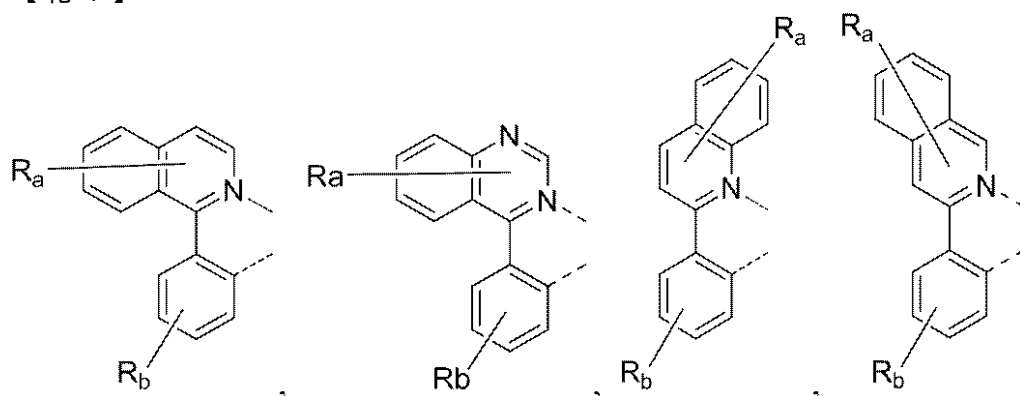
R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d の2つの隣接する置換基は、結合して環又は多座配位子を形成してもよく； R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d の少なくとも1つは、少なくとも1つのRを含む。

【0055】

上記で定義されている前記第1の化合物の1つの実施形態においては、Mは、Irであり、前記第1の化合物は、 $Ir(L^1)_2(L^2)$ の式で表される。前記 $Ir(L^1)_2(L^2)$ の式で表される前記第1の化合物において、 L^1 は、下記からなる群から選択される式で表され；

30

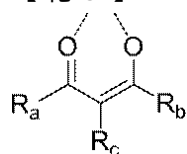
【化 4】



40

L^2 は、下記の式で表され；

【化 5】



50

式中、 R_a 、 R_b 、及び R_c は、独立して、モノ、ジ、トリ、又はテトラ置換を表す、又は無置換を表し；

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

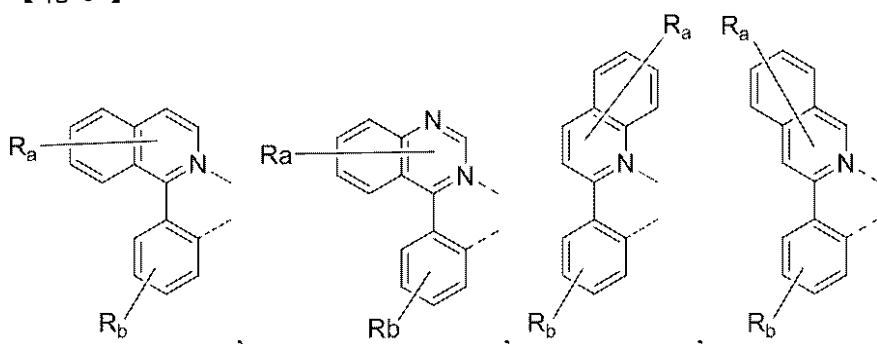
R_a 、 R_b 、及び R_c の2つの隣接する置換基は、結合して環又は多座配位子を形成してもよく； R_a 、 R_b 、及び R_c の少なくとも1つは、少なくとも1つのRを含む。

10

【0056】

上記で定義されている前記第1の化合物の他の実施形態においては、Mは、Irであり、前記第1の化合物は、式 $Ir(L^1)_2(L^2)$ で表され、 L^1 は、下記からなる群から選択され；

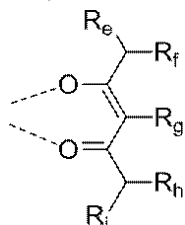
【化6】



20

L^2 は、下記の式で表され；

【化7】



30

R_a 及び R_b は、上記で定義され、 R_e 、 R_f 、 R_h 、及び R_i は、独立して、アルキル、シクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；

R_e 、 R_f 、 R_h 、及び R_i の少なくとも1つは、少なくとも2つの炭素原子を有し；

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

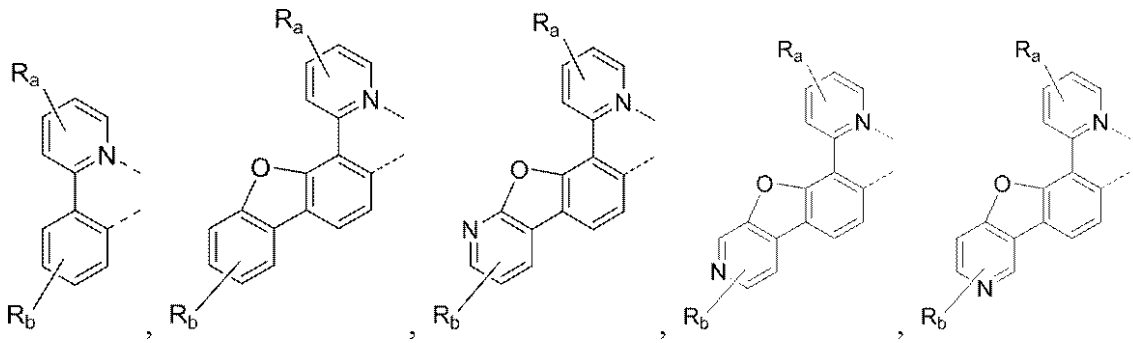
40

R_a 及び R_b の少なくとも1つは、少なくとも1つのRを含む。

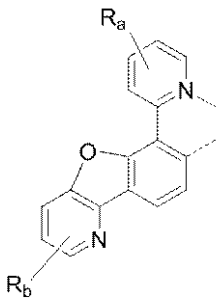
【0057】

上記で定義されている $Ir(L^1)_2(L^2)$ の式で表される前記第1の化合物の他の実施形態においては、 L^1 及び L^2 は、異なっており、それぞれ独立して、下記からなる群から選択され；

【化 8】



10



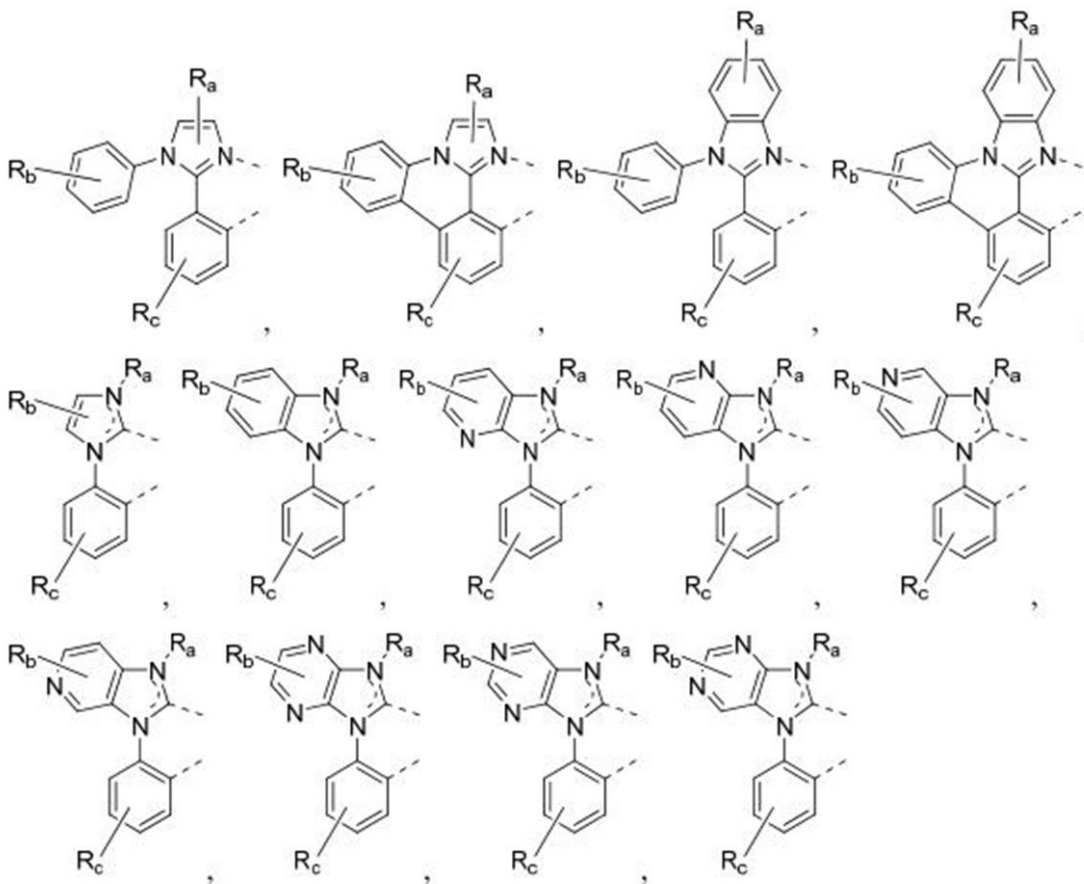
R_a 及び R_b の少なくとも 1 つは、少なくとも 1 つの R を含む。

【 0 0 5 8】

20

$Ir(L^1)_2(L^2)$ の式で表される前記第 1 の化合物の他の実施形態においては、 L^1 及び L^2 は、それぞれ独立して、下記からなる群から選択される。

【化 9】



30

40

式中、 R_a 、 R_b 、及び R_c の少なくとも 1 つは、少なくとも 1 つの R を含む。

【 0 0 5 9】

前記第 1 の化合物が上記で定義されている式 $M(L^1)_x(L^2)_y(L^3)_z$ の構造

50

で表される実施形態においては、前記化合物は、 $Pt(L^1)_2$ 又は $Pt(L^1)(L^2)$ で表される。 $Pt(L^1)_2$ の式で表される化合物においては、 L^1 は、他の L^1 と結合することができる。式 $Pt(L^1)(L^2)$ で表される化合物においては、 L^1 は、 L^2 と結合し、四座配位子を形成することができる。1つの実施形態においては、 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d の少なくとも1つは、 CD 、 CD_2 、又は CD_3 を含むアルキル基又はシクロアルキル基を含み、 D は重水素である。

【0060】

本開示の他の態様によれば、 $M(L^1)_x(L^2)_y(L^3)_z$ の式で表される前記第1の化合物においては；

L^1 、 L^2 、及び L^3 は、同じでも異なってもよく；

x は、1、2、又は3であり；

y は、0、1、又は2であり；

z は、0、1、又は2であり；

$x + y + z$ は、前記金属 M の酸化状態であり；

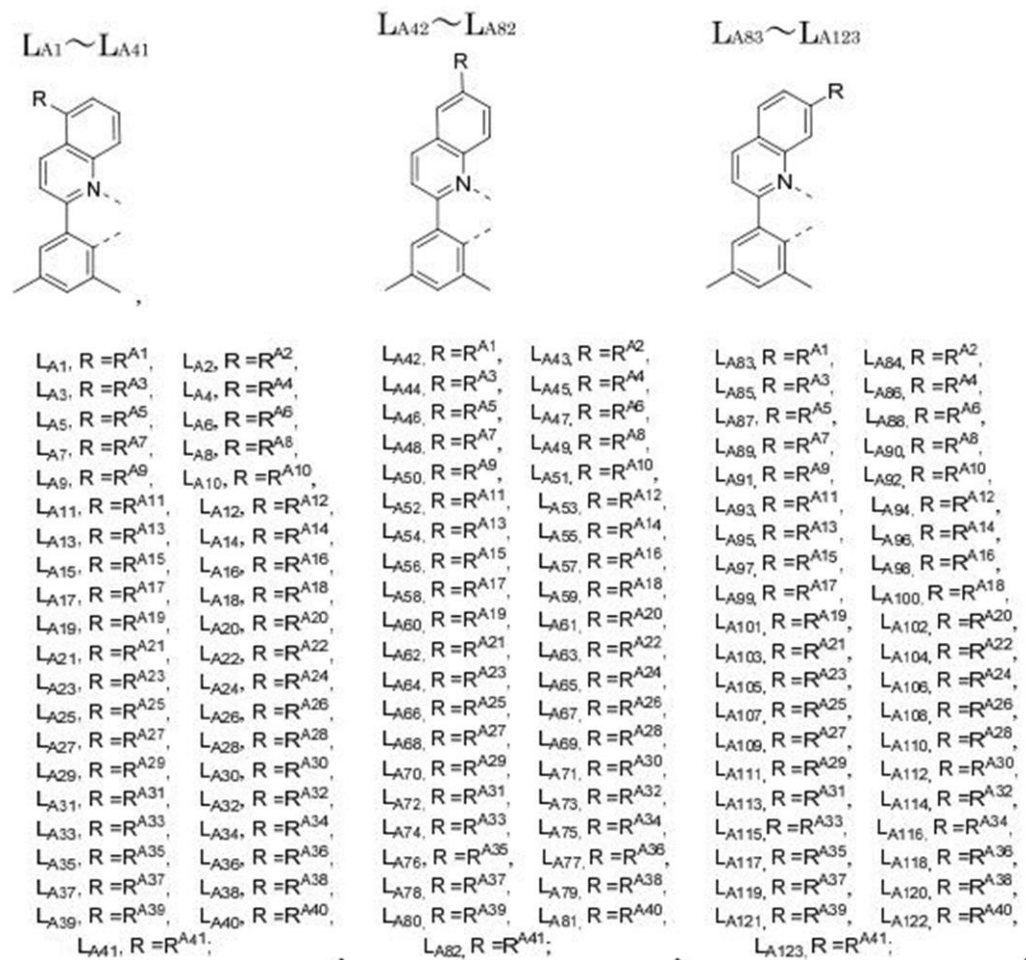
L^1 、 L^2 、及び L^3 は、それぞれ独立して、下記からなる群から選択される。

10

20

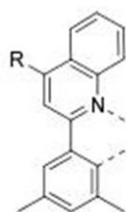
30

40

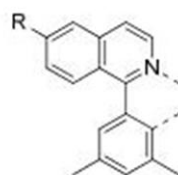


【化 1 1】

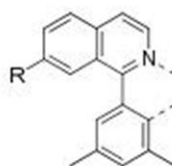
LA124~LA164



LA165~LA205



LA206~LA246



LA124, R=R^{A1},
 LA126, R=R^{A3},
 LA128, R=R^{A5},
 LA130, R=R^{A7},
 LA132, R=R^{A9},
 LA134, R=R^{A11},
 LA136, R=R^{A13},
 LA138, R=R^{A15},
 LA140, R=R^{A17},
 LA142, R=R^{A19},
 LA144, R=R^{A21},
 LA146, R=R^{A23},
 LA148, R=R^{A25},
 LA150, R=R^{A27},
 LA152, R=R^{A29},
 LA154, R=R^{A31},
 LA156, R=R^{A33},
 LA158, R=R^{A35},
 LA160, R=R^{A37},
 LA162, R=R^{A39},
 LA164, R=R^{A41},

LA125, R=R^{A2},
 LA127, R=R^{A4},
 LA129, R=R^{A6},
 LA131, R=R^{A8},
 LA133, R=R^{A10},
 LA135, R=R^{A12},
 LA137, R=R^{A14},
 LA139, R=R^{A16},
 LA141, R=R^{A18},
 LA143, R=R^{A20},
 LA145, R=R^{A22},
 LA147, R=R^{A24},
 LA149, R=R^{A26},
 LA151, R=R^{A28},
 LA153, R=R^{A30},
 LA155, R=R^{A32},
 LA157, R=R^{A34},
 LA159, R=R^{A36},
 LA161, R=R^{A38},
 LA163, R=R^{A40},

LA165, R=R^{A1},
 LA167, R=R^{A3},
 LA169, R=R^{A5},
 LA171, R=R^{A7},
 LA173, R=R^{A9},
 LA175, R=R^{A11},
 LA177, R=R^{A13},
 LA179, R=R^{A15},
 LA181, R=R^{A17},
 LA183, R=R^{A19},
 LA185, R=R^{A21},
 LA187, R=R^{A23},
 LA189, R=R^{A25},
 LA191, R=R^{A27},
 LA193, R=R^{A29},
 LA195, R=R^{A31},
 LA197, R=R^{A33},
 LA199, R=R^{A35},
 LA201, R=R^{A37},
 LA203, R=R^{A39},
 LA205, R=R^{A41},

LA166, R=R^{A2},
 LA168, R=R^{A4},
 LA170, R=R^{A6},
 LA172, R=R^{A8},
 LA174, R=R^{A10},
 LA176, R=R^{A12},
 LA178, R=R^{A14},
 LA180, R=R^{A16},
 LA182, R=R^{A18},
 LA184, R=R^{A20},
 LA186, R=R^{A22},
 LA188, R=R^{A24},
 LA190, R=R^{A26},
 LA192, R=R^{A28},
 LA194, R=R^{A30},
 LA196, R=R^{A32},
 LA198, R=R^{A34},
 LA200, R=R^{A36},
 LA202, R=R^{A38},
 LA204, R=R^{A40},

LA206, R=R^{A1},
 LA208, R=R^{A3},
 LA210, R=R^{A5},
 LA212, R=R^{A7},
 LA214, R=R^{A9},
 LA216, R=R^{A11},
 LA218, R=R^{A13},
 LA220, R=R^{A15},
 LA222, R=R^{A17},
 LA224, R=R^{A19},
 LA226, R=R^{A21},
 LA228, R=R^{A23},
 LA230, R=R^{A25},
 LA232, R=R^{A27},
 LA234, R=R^{A29},
 LA236, R=R^{A31},
 LA238, R=R^{A33},
 LA240, R=R^{A35},
 LA242, R=R^{A37},
 LA244, R=R^{A39},
 LA246, R=R^{A41},

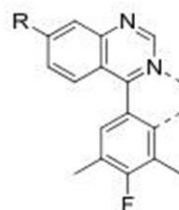
LA207, R=R^{A2},
 LA209, R=R^{A4},
 LA211, R=R^{A6},
 LA213, R=R^{A8},
 LA215, R=R^{A10},
 LA217, R=R^{A12},
 LA219, R=R^{A14},
 LA221, R=R^{A16},
 LA223, R=R^{A18},
 LA225, R=R^{A20},
 LA227, R=R^{A22},
 LA229, R=R^{A24},
 LA231, R=R^{A26},
 LA233, R=R^{A28},
 LA235, R=R^{A30},
 LA237, R=R^{A32},
 LA239, R=R^{A34},
 LA241, R=R^{A36},
 LA243, R=R^{A38},
 LA245, R=R^{A40},

10

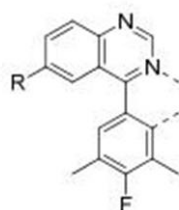
20

【化 1 2】

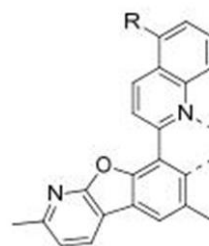
LA247~LA287



LA288~LA328



LA329~LA369



LA247, R = R^{A1}, LA248, R = R^{A2},
 LA249, R = R^{A3}, LA250, R = R^{A4},
 LA251, R = R^{A5}, LA252, R = R^{A6},
 LA253, R = R^{A7}, LA254, R = R^{A8},
 LA255, R = R^{A9}, LA256, R = R^{A10},
 LA257, R = R^{A11}, LA258, R = R^{A12},
 LA259, R = R^{A13}, LA260, R = R^{A14},
 LA261, R = R^{A15}, LA262, R = R^{A16},
 LA263, R = R^{A17}, LA264, R = R^{A18},
 LA265, R = R^{A19}, LA266, R = R^{A20},
 LA267, R = R^{A21}, LA268, R = R^{A22},
 LA269, R = R^{A23}, LA270, R = R^{A24},
 LA271, R = R^{A25}, LA272, R = R^{A26},
 LA273, R = R^{A27}, LA274, R = R^{A28},
 LA275, R = R^{A29}, LA276, R = R^{A30},
 LA277, R = R^{A31}, LA278, R = R^{A32},
 LA279, R = R^{A33}, LA280, R = R^{A34},
 LA281, R = R^{A35}, LA282, R = R^{A36},
 LA283, R = R^{A37}, LA284, R = R^{A38},
 LA285, R = R^{A39}, LA286, R = R^{A40},
 LA287, R = R^{A41}.

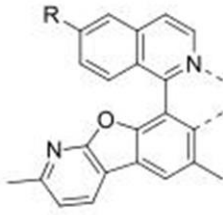
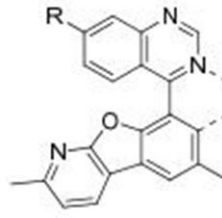
LA288, R = R^{A1}, LA289, R = R^{A2},
 LA290, R = R^{A3}, LA291, R = R^{A4},
 LA292, R = R^{A5}, LA293, R = R^{A6},
 LA294, R = R^{A7}, LA295, R = R^{A8},
 LA296, R = R^{A9}, LA297, R = R^{A10},
 LA298, R = R^{A11}, LA299, R = R^{A12},
 LA300, R = R^{A13}, LA301, R = R^{A14},
 LA302, R = R^{A15}, LA303, R = R^{A16},
 LA304, R = R^{A17}, LA305, R = R^{A18},
 LA306, R = R^{A19}, LA307, R = R^{A20},
 LA308, R = R^{A21}, LA309, R = R^{A22},
 LA310, R = R^{A23}, LA311, R = R^{A24},
 LA312, R = R^{A25}, LA313, R = R^{A26},
 LA314, R = R^{A27}, LA315, R = R^{A28},
 LA316, R = R^{A29}, LA317, R = R^{A30},
 LA318, R = R^{A31}, LA319, R = R^{A32},
 LA320, R = R^{A33}, LA321, R = R^{A34},
 LA322, R = R^{A35}, LA323, R = R^{A36},
 LA324, R = R^{A37}, LA325, R = R^{A38},
 LA326, R = R^{A39}, LA327, R = R^{A40},
 LA328, R = R^{A41}.

LA329, R = R^{A1}, LA330, R = R^{A2},
 LA331, R = R^{A3}, LA332, R = R^{A4},
 LA333, R = R^{A5}, LA334, R = R^{A6},
 LA335, R = R^{A7}, LA336, R = R^{A8},
 LA337, R = R^{A9}, LA338, R = R^{A10},
 LA339, R = R^{A11}, LA340, R = R^{A12},
 LA341, R = R^{A13}, LA342, R = R^{A14},
 LA343, R = R^{A15}, LA344, R = R^{A16},
 LA345, R = R^{A17}, LA346, R = R^{A18},
 LA347, R = R^{A19}, LA348, R = R^{A20},
 LA349, R = R^{A21}, LA350, R = R^{A22},
 LA351, R = R^{A23}, LA352, R = R^{A24},
 LA353, R = R^{A25}, LA354, R = R^{A26},
 LA355, R = R^{A27}, LA356, R = R^{A28},
 LA357, R = R^{A29}, LA358, R = R^{A30},
 LA359, R = R^{A31}, LA360, R = R^{A32},
 LA361, R = R^{A33}, LA362, R = R^{A34},
 LA363, R = R^{A35}, LA364, R = R^{A36},
 LA365, R = R^{A37}, LA366, R = R^{A38},
 LA367, R = R^{A39}, LA368, R = R^{A40},
 LA369, R = R^{A41}.

10

20

【化 1 3】

L_A370 ~ L_A410L_A411 ~ L_A451

L_A370, R = R^{A1}, L_A371, R = R^{A2},
 L_A372, R = R^{A3}, L_A373, R = R^{A4},
 L_A374, R = R^{A5}, L_A375, R = R^{A6},
 L_A376, R = R^{A7}, L_A377, R = R^{A8},
 L_A378, R = R^{A9}, L_A379, R = R^{A10},
 L_A380, R = R^{A11}, L_A381, R = R^{A12},
 L_A382, R = R^{A13}, L_A383, R = R^{A14},
 L_A384, R = R^{A15}, L_A385, R = R^{A16},
 L_A386, R = R^{A17}, L_A387, R = R^{A18},
 L_A388, R = R^{A19}, L_A389, R = R^{A20},
 L_A390, R = R^{A21}, L_A391, R = R^{A22},
 L_A392, R = R^{A23}, L_A393, R = R^{A24},
 L_A394, R = R^{A25}, L_A395, R = R^{A26},
 L_A396, R = R^{A27}, L_A397, R = R^{A28},
 L_A398, R = R^{A29}, L_A399, R = R^{A30},
 L_A400, R = R^{A31}, L_A401, R = R^{A32},
 L_A402, R = R^{A33}, L_A403, R = R^{A34},
 L_A404, R = R^{A35}, L_A405, R = R^{A36},
 L_A406, R = R^{A37}, L_A407, R = R^{A38},
 L_A408, R = R^{A39}, L_A409, R = R^{A40},
 L_A410, R = R^{A41},

L_A411, R = R^{A1}, L_A412, R = R^{A2},
 L_A413, R = R^{A3}, L_A414, R = R^{A4},
 L_A415, R = R^{A5}, L_A416, R = R^{A6},
 L_A417, R = R^{A7}, L_A418, R = R^{A8},
 L_A419, R = R^{A9}, L_A420, R = R^{A10},
 L_A421, R = R^{A11}, L_A422, R = R^{A12},
 L_A423, R = R^{A13}, L_A424, R = R^{A14},
 L_A425, R = R^{A15}, L_A426, R = R^{A16},
 L_A427, R = R^{A17}, L_A428, R = R^{A18},
 L_A429, R = R^{A19}, L_A430, R = R^{A20},
 L_A431, R = R^{A21}, L_A432, R = R^{A22},
 L_A433, R = R^{A23}, L_A434, R = R^{A24},
 L_A435, R = R^{A25}, L_A436, R = R^{A26},
 L_A437, R = R^{A27}, L_A438, R = R^{A28},
 L_A439, R = R^{A29}, L_A440, R = R^{A30},
 L_A441, R = R^{A31}, L_A442, R = R^{A32},
 L_A443, R = R^{A33}, L_A444, R = R^{A34},
 L_A445, R = R^{A35}, L_A446, R = R^{A36},
 L_A447, R = R^{A37}, L_A448, R = R^{A38},
 L_A449, R = R^{A39}, L_A450, R = R^{A40},
 L_A451, R = R^{A41},

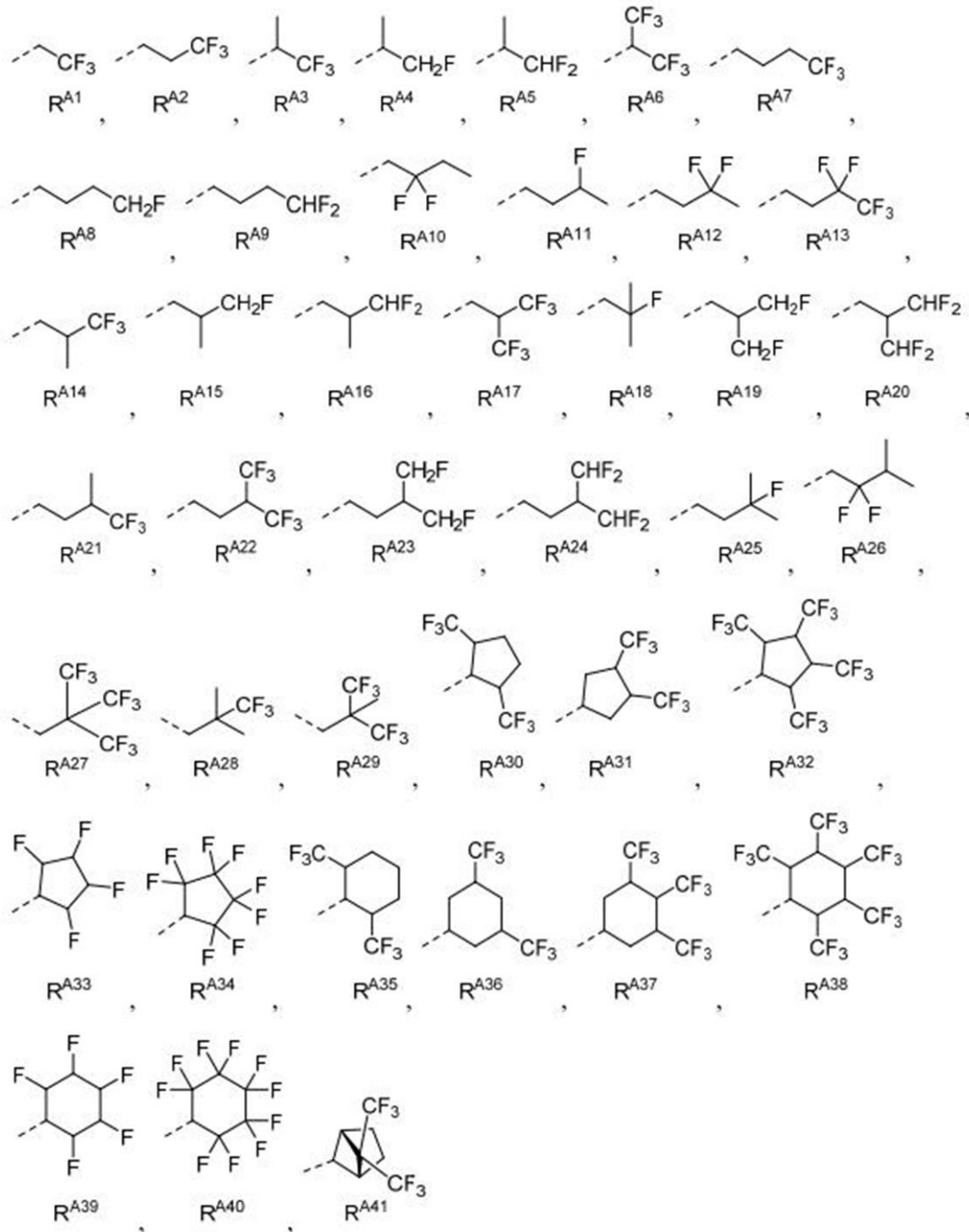
式中、R^{A1} ~ R^{A41}は、下記の式で表される。

10

20

30

【化 1 4】



10

20

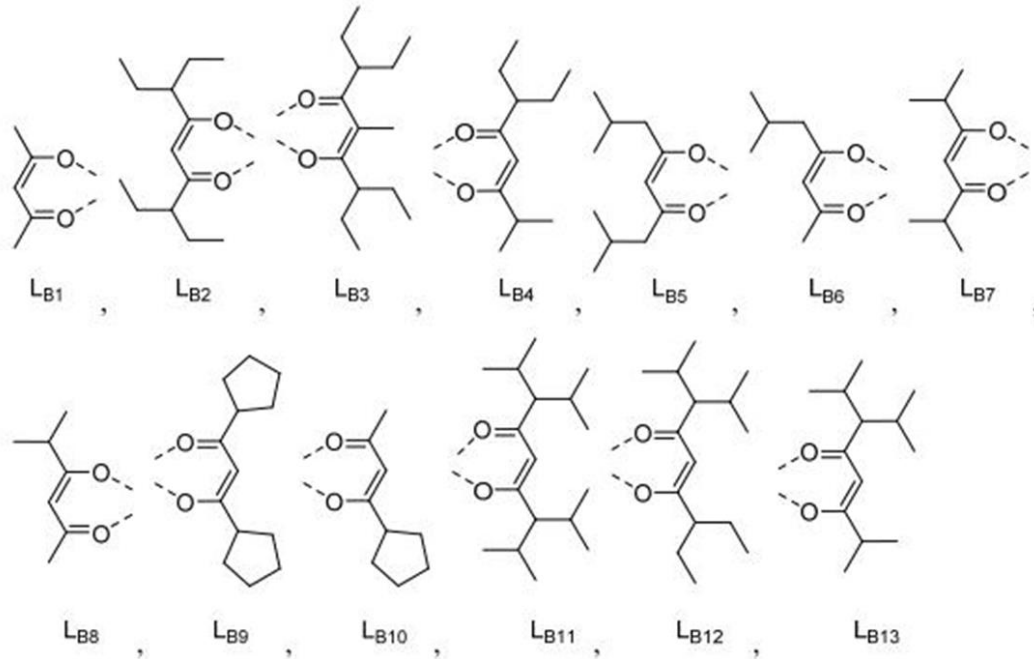
30

【0061】

1つの実施形態においては、前記第1の化合物は、 $Ir(L^1)_2(L^2)$ の式の構造で表され、 L^1 は、 $L_{A1} \sim L_{A450}$ 、及び L_{A451} からなる群から選択され、 L^2 は、下記からなる群から選択される。

40

【化 1 5】



10

【0062】

20

上記の構造においては、破線は、現行の基と結合する次の基との間の結合を表す。例えば、 L_{A1} においては、破線は、前記Mと配位子との間の結合を表し； R^{A1} においては、破線は、Rと前記芳香族環との間の結合を表す。

【0063】

他の実施形態においては、前記第1の化合物は、化合物1～化合物5，863からなる群から選択され、化合物xは、それぞれ式 $I_r(L_{A_k})_2(L_{B_j})$ で表され、 $x = 451j + k - 451$ であり、kは1から451までの整数であり、jは1から13までの整数である。 $L_{A1} \sim L_{A451}$ 及び $L_{B1} \sim L_{B13}$ は、上記で定義される。

【0064】

本明細書に開示される前記第1の化合物の例は、1-フェニルイソキノリン、2-フェニルキノリン、8-(キノリン-2-イル)ベンゾフロ[2,3-b]ピリジン、8-(イソキノリン-1-イル)ベンゾフロ[2,3-b]ピリジン、4-(4-フルオロフェニル)キナゾリン、又は2-フェニルピリジン等を含む配位子に基づいた金属錯体である。前記配位子は、それぞれ、ベンジルではない、少なくとも1つのフッ素原子を含むアルキル化された側鎖を含む。これらの側鎖の存在は、主に僅かな赤色シフトとして、金属錯体の色の細かな調節を提供する。芳香族ユニットとフッ素原子との間のスペース(space)が短いほど、最終錯体における赤色シフトは大きくなる。良好な効率はいくつかの化合物から観察された。より重要なことには、ベンジル部分にフッ素を有する化合物よりも、発明化合物がより良好な寿命を示したことが予想外に観察された。トリフルオロメチル置換及びパーフルオロアルキル置換を有する従来の化合物は、非常に不十分なデバイス安定性を示した。

30

40

【0065】

他の態様によれば、第1の有機発光デバイスを含む第1のデバイスが開示される。前記第1の有機発光デバイスは、アノードと；カソードと；前記アノードと前記カソードの間に配置された有機層とを含むことができる。前記有機層は、本明細書に開示される前記第1の化合物を含む。前記第1のデバイスに組み込まれた前記第1の化合物は、実施形態及び本明細書に記載される前記第1の化合物の具体化合物のいずれか1つ以上であることができる。例えば、前記第1の化合物は、室温でリン光発光体として機能することができ、前記第1の化合物は、少なくとも1つの芳香族環及び少なくとも1つの置換基Rを有し、前記少なくとも1つの置換基Rは、それぞれ独立して、部分的にフッ素化されたアルキル

50

、部分的にフッ素化されたシクロアルキル、及びこれらの組合せからなる群から選択され；前記少なくとも1つの置換基Rは、それぞれ前記芳香族環の1つに直接結合し、前記少なくとも1つの置換基Rのそれぞれにおいて、Fを結合して有するCは、少なくとも1つの炭素原子によって、前記芳香族環から離れている。

【0066】

実施形態によれば、前記第1のデバイスは、消費者製品、電子部品モジュール、有機発光デバイス、及び照明パネルからなる群から選択される。

【0067】

前記第1のデバイスにおいては、前記有機層は発光層であり、前記化合物は、発光ドーパントである。

10

【0068】

前記第1のデバイスの1つの実施形態においては、前記有機層は、更にホストも含み；前記ホストは、ベンゾ縮合チオフエン又はベンゾ縮合フランを含むトリフェニレンを含み；前記ホスト材料中のいずれの置換基は、独立して、 C_nH_{2n+1} 、 OC_nH_{2n+1} 、 OAr_1 、 $N(C_nH_{2n+1})_2$ 、 $N(Ar_1)(Ar_2)$ 、 $CH=CH-C_nH_{2n+1}$ 、 $C\equiv C-C_nH_{2n+1}$ 、 Ar_1 、 Ar_1-Ar_2 、及び $C_nH_{2n}-Ar_1$ からなる群から選択される非縮合置換基である、又は無置換であり；nは1から10であり； Ar_1 及び Ar_2 は、独立して、ベンゼン、ビフェニル、ナフタレン、トリフェニレン、カルバゾール、及びこれらの複素芳香族類似物からなる群から選択されることができる。

20

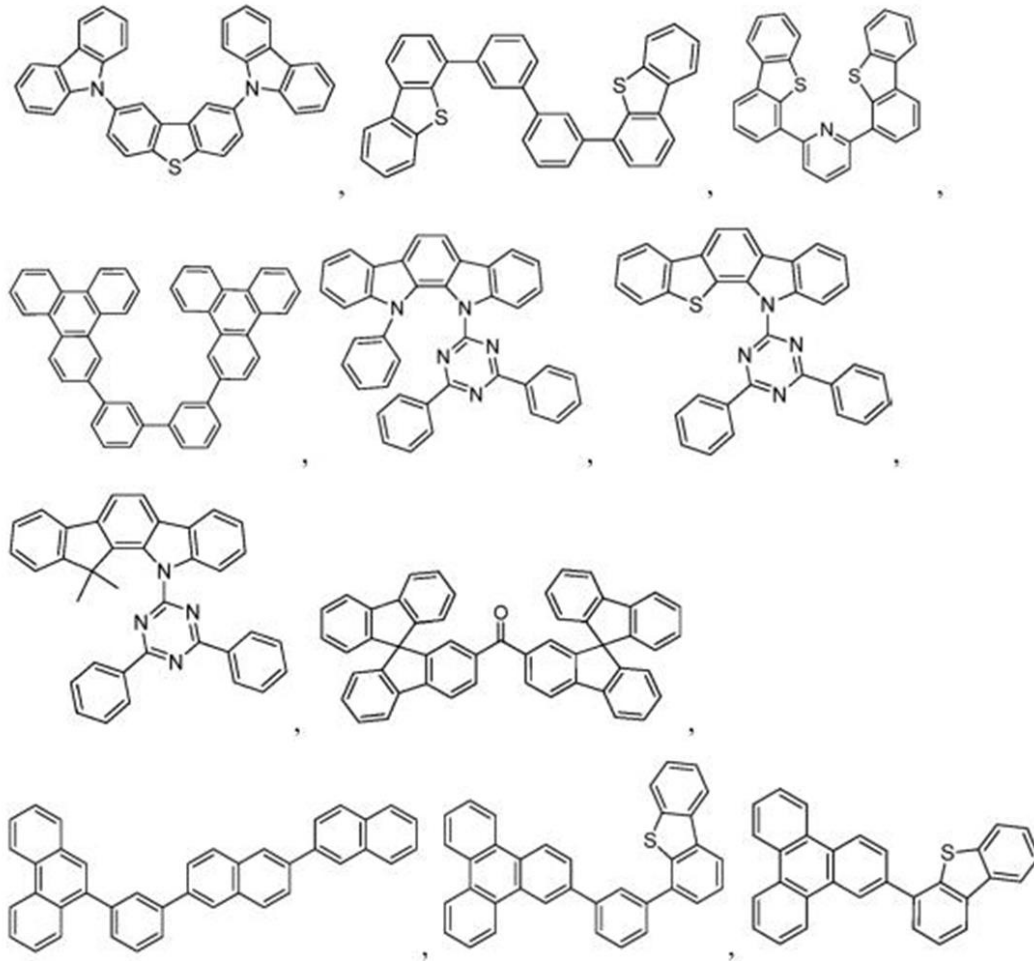
【0069】

前記第1のデバイス中の前記ホストは、トリフェニレン、カルバゾール、ジベンゾチオフエン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、アザトリフェニレン、アザカルバゾール、アザ-ジベンゾチオフエン、アザ-ジベンゾフラン、及びアザ-ジベンゾセレノフェンからなる群から選択される少なくとも1つの化学基を含むことができる。

【0070】

前記ホストは、下記からなる群から選択されることができる。

【化 1 6】



及びこれらの組み合わせ

【0071】

請求項 6 に記載の第 1 のデバイスにおいて、前記ホスト材料は、金属錯体を含む。

【0072】

本開示の更に別の態様に置いては、 $C_n H_{2n+1-m} F_m$ 及び $C_q H_{2q-1-m} F_m$ からなる群から選択される、少なくとも 1 つの非共役の置換基 R を有する化合物を含む組成物が開示され；R は、芳香族環に直接結合される。n は、1 超の整数であり、q は 2 超の整数であり、m は 0 超の整数であり、F を結合して有する C は、少なくとも 1 つの炭素原子によって、前記芳香族環から離れている。前記組成物は、本明細書に記載される溶媒、ホスト、正孔注入材料、正孔輸送材料、及び電子輸送層材料からなる群から選択される 1 つ以上の成分を含むことができる。

【0073】

材料合成

【0074】

特段の断りがない限り、反応はいずれも、窒素保護下で行われた。反応のための溶媒は、いずれも無水であり、商業的供給源から入手したものを使用した。

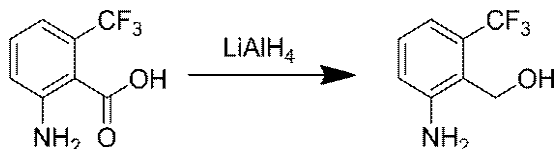
【0075】

比較化合物 1 の合成

【0076】

(2 - アミノ - 6 - (トリフルオロメチル)フェニル)メタノールの合成

【化 17】



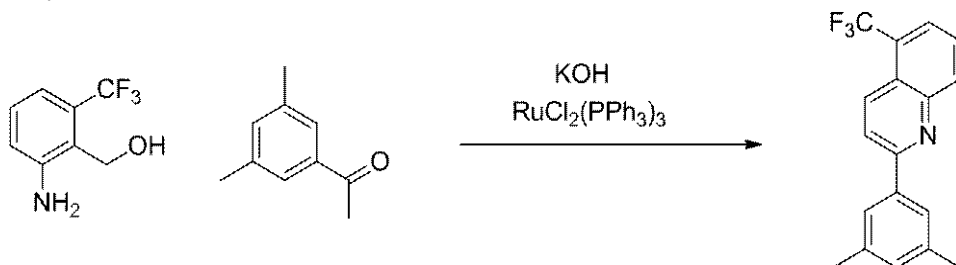
添加の漏斗及び冷却器を装備した三ツ口のRBフラスコ中で、テトラヒドロフラン（120 mL）中で2 - アミノ - 6 - （トリフルオロメチル）安息香酸（20 g、97 mmol）を溶解した。溶液を氷水浴中で冷却した。 LiAlH_4 （83 mL、166 mmol）（THF中2 M溶液）をその後滴下した。全ての LiAlH_4 溶液を添加した後、反応混合物を室温まで温め、室温で一晩撹拌した。10 mLの水を添加し、その後10 mLの15% NaOH を添加し、更にその後25 mLの水を添加して、反応物をクエンチした。塩を濾過し、溶媒を真空下で蒸発させた。生成物をそのまま用いた（18 g、収率97%）。

10

【0077】

2 - （3, 5 - ジメチルフェニル） - 5 - （トリフルオロメチル）キノリンの合成

【化 18】



20

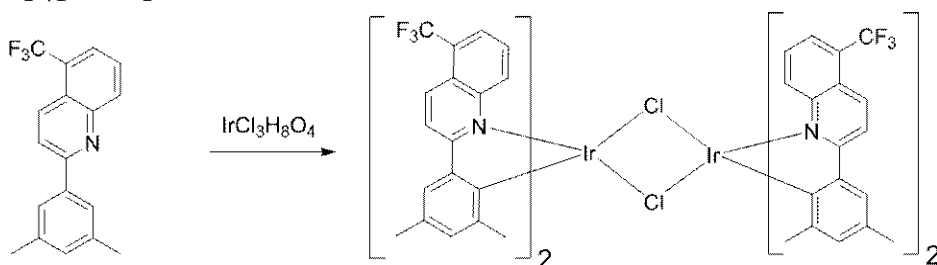
トルエン（310 mL）中、（2 - アミノ - 6 - （トリフルオロメチル）フェニル）メタノール（18 g、94 mmol）、1 - （3, 5 - ジメチルフェニル）エタノン（19.5 mL、130 mmol）、粉末状水酸化カリウム（0.90 g、16.0 mmol）、及び $\text{RuCl}_2(\text{PPh}_3)_3$ （0.45 g、0.47 mmol）との混合物を一晩還流した。室温まで冷却すると、混合物を水で洗浄し、酢酸エチルで抽出した（3回）。粗生成物をセライトに塗布し、ヘプタン中5% EAを用いて始めるCCで精製した。得られた生成物をメタノールから再結晶化し、黄色結晶として2 - （3, 5 - ジメチルフェニル） - 5 - （トリフルオロメチル）キノリンを得た（10 g、収率35%）。

30

【0078】

$\text{Ir}(\text{III})$ 二量体の合成

【化 19】



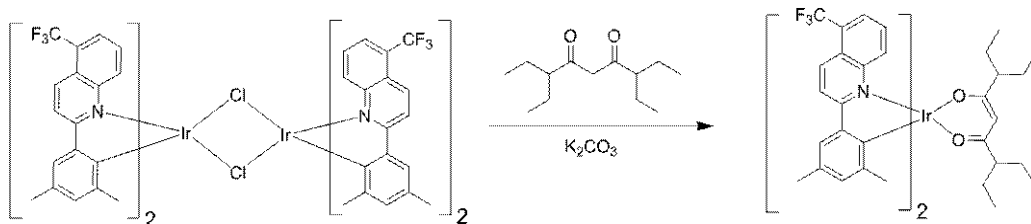
40

エトキシエタノール（30 mL）及び水（10 mL）中で、2 - （3, 5 - ジメチルフェニル） - 5 - （トリフルオロメチル）キノリン（3.00 g、9.96 mmol）を溶解し、30分間窒素で脱気した。その後、塩化イリジウム（0.92 g、2.49 mmol）を溶液に添加し、反応物を窒素下で24時間還流した。室温まで冷却した後、固体を濾過し、メタノールで洗浄し、乾燥して、茶色の粉末として、 $\text{Ir}(\text{III})$ 二量体を得た（1.0 g、収率49%）。

【0079】

比較化合物 1 の合成

【化 2 0】



Ir (I I I) 二量体 (1 . 0 8 g 、 0 . 6 5 m m o l) 及び 3 , 7 - ジエチルノナン - 4 , 6 - ジオン (1 . 3 8 g 、 6 . 5 2 m m o l) をエトキシエタノール (2 2 m L) 中で希釈し、混合物を 1 5 分間窒素ガスでバブルして脱気した。K₂CO₃ (0 . 9 0 g 、 6 . 5 2 m m o l) をその後添加し、反応物を室温で一晩攪拌した。混合物をジクロロメタン (“ D C M ”) で希釈し、セライトのパッドに通して濾過し、D C M で洗浄した。ヘプタン / D C M が 8 0 / 2 0 の溶媒系を用いたカラムクロマトグラフィー (トリエチルアミン (T E A) で前処理したシリカ) で粗生成物を精製した。回収された純粋な画分をメタノールから粉砕し、ジクロロメタン / メタノールから固体を再結晶化し、暗赤色の粉末として比較化合物 1 を得た (0 . 8 5 g 、 収率 6 5 %) 。

10

【 0 0 8 0 】

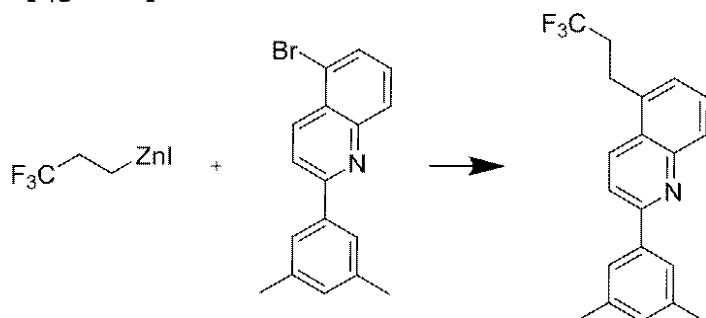
化合物 4 5 3 の合成

【 0 0 8 1 】

2 - (3 , 5 - ジメチルフェニル) - 5 - (3 , 3 , 3 - トリフルオロプロピル) キノリンの合成

20

【化 2 1】



30

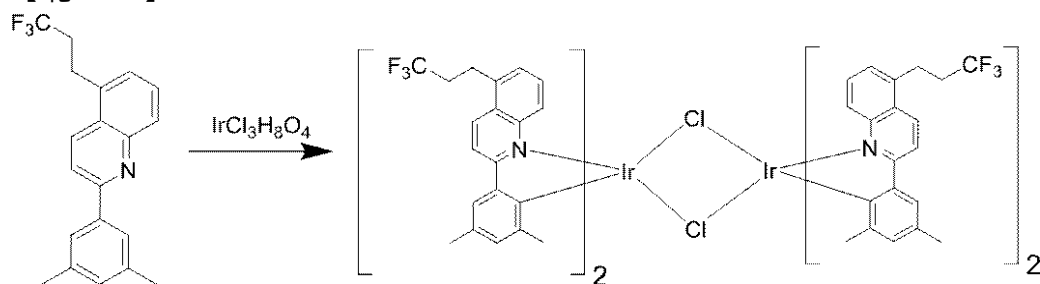
5 - ブロモ - 2 - (3 , 5 - ジメチルフェニル) キノリン (1 . 1 5 g 、 3 . 6 8 m m o l) 、酢酸パラジウム (I I) (0 . 0 1 7 g 、 0 . 0 7 4 m m o l) 、及び C P h o s (0 . 0 6 4 g 、 0 . 1 4 7 m m o l) をフラスコに投入し、1 0 0 m L のテトラヒドロフランで希釈した。この混合物を窒素で脱気し、シリンジを介して (3 , 3 , 3 - トリフルオロプロピル) ヨウ化亜鉛 (I I) (1 . 0 7 g 、 3 . 6 8 m m o l) を添加した。反応混合物を室温で一晩攪拌した。反応混合物を塩化アンモニウム水溶液でクエンチし、その後 2 0 0 m L の酢酸エチルで 2 回抽出し、硫酸ナトリウムで乾燥した。粗生成物をセライトに塗布し、2 0 % のヘプタン中 D C M 溶媒系を用いたカラムクロマトグラフィーで精製した。生成物をヘプタン中で再結晶化し、0 . 9 0 g の目的化合物を得た (収率 8 1 %) 。

40

【 0 0 8 2 】

Ir (I I I) 二量体の合成

【化 2 2】



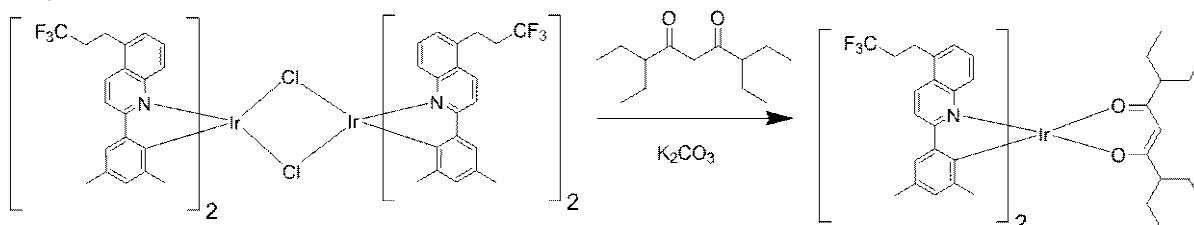
エトキシエタノール（15 mL）及び水（5 mL）中に、2 - （3，5 - ジメチルフェニル） - 5 - （3，3，3 - トリフルオロプロピル）キノリン（1.80 g、5.47 mmol）を溶解し、30分間窒素で脱気した。その後、塩化イリジウム（0.54 g、1.46 mmol）を溶液に添加し、反応物を窒素下で24時間還流した。室温まで冷却した後、固体を濾過し、メタノールで洗浄し、乾燥し、茶色の粉末としてIr（III）二量体を得た（0.95 g、収率74%）。

10

【0083】

化合物453の合成

【化 2 3】



20

Ir（III）二量体（0.95 g、0.537 mmol）及び3，7 - ジエチルノン - 4，6 - ジオン（1.14 g、5.37 mmol）をエトキシエタノール（15 mL）中で希釈し、混合物を窒素ガスで15分間バブルして脱気した。その後、K₂CO₃（0.74 g、5.37 mmol）を添加し、反応物を室温で一晩撹拌した。混合物をDCMで希釈し、セライトのパッドに通して濾過し、DCMで洗浄した。ヘプタン/DCM（100/0～97/3）の溶媒系を用いたカラムクロマトグラフィー（TEAで前処理したシリカ）で粗生成物を精製した。回収した純粋な画分をメタノールから粉碎し、ジクロロメタン/メタノールから固体を再結晶化し、暗赤色の粉末として化合物453を得た（0.83 g、収率73%）。

30

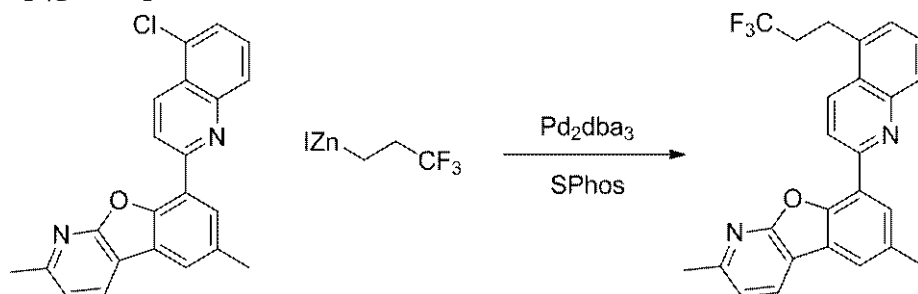
【0084】

化合物781の合成

【0085】

2，6 - ジメチル - 8 - （5 - （3，3，3 - トリフルオロプロピル）キノリン - 2 - イル）ベンゾフロ[2，3 - b]ピリジンの合成

【化 2 4】



40

8 - （5 - クロロキノリン - 2 - イル） - 2，6 - ジメチルベンゾフロ[2，3 - b]ピリジン（3.40 g、9.48 mmol）、2' - （ジシクロヘキシルホスフィノ） - N2，N2，N6，N6 - テトラメチル - [1，1' - ビフェニル] - 2，6 - ジアミン

50

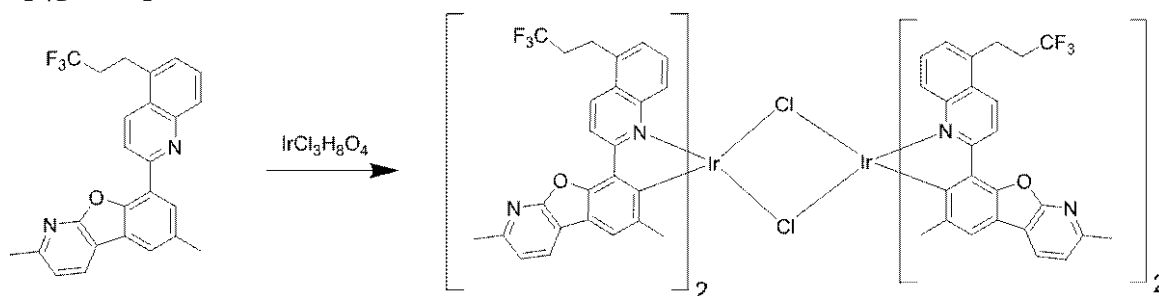
(0.33 g、0.76 mmol)、及びジアセトキシパラジウム(0.09 g、0.38 mmol)をフラスコに投入し、THF(150 mL)で希釈した。この混合物を窒素でバブルして脱気し、その後、シリンジを介して(3,3,3-トリフルオロプロピル)ヨウ化亜鉛(II)(40 mL、11.8 mmol)を添加した。この混合物を室温で一晩撹拌した。反応が完了すると、塩化アンモニウム水溶液でクエンチし、その後2回200 mLの酢酸エチルで抽出した。これらの抽出物を硫酸マグネシウムで乾燥し、その後濾過し、真空下で濃縮した。20/80の酢酸エチル/ヘプタンを用いたカラムクロマトグラフィーで粗残渣を精製した。合わせた画分をヘプタン中で粉砕し、オフホワイトの粉末として2,6-ジメチル-8-(5-(3,3,3-トリフルオロプロピル)キノリン-2-イル)ベンゾフロ[2,3-b]ピリジンを得た(2.55 g、収率64%)。

10

【0086】

Ir(III)二量体の合成

【化25】



20

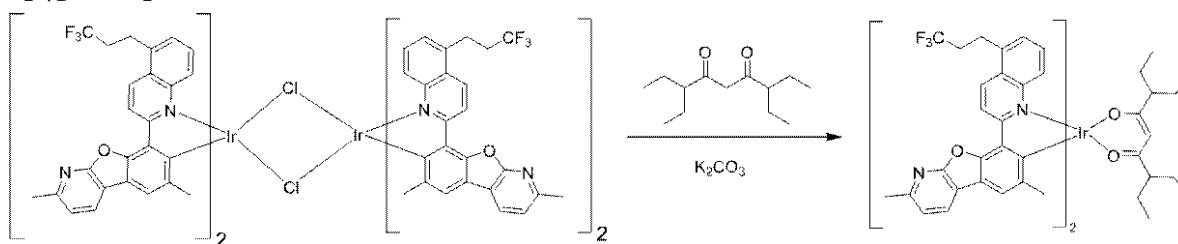
2,6-ジメチル-8-(5-(3,3,3-トリフルオロプロピル)キノリン-2-イル)ベンゾフロ[2,3-b]ピリジン(2.55 g、6.07 mmol)を2-エトキシエタノール(19 mL)及び水(6 mL)中に溶解し、窒素で30分間バブルして脱気した。その後、塩化イリジウム(0.56 g、1.52 mmol)を溶液(幾つかの配位子が沈殿した)に添加し、反応物を窒素下で24時間還流した。室温まで冷却した後、固体を濾過し、メタノールで洗浄し、赤色粉末としてIr(III)二量体を得た(1.10 g、収率68%)。

【0087】

化合物781の合成

30

【化26】



Ir(III)二量体(1.00 g、0.47 mmol)及び3,7-ジエチルノナン-4,6-ジオン(0.91 g、4.26 mmol)を2-エトキシエタノール(14 mL)中で希釈し、混合物を窒素ガスで15分間バブルして脱気した。その後、K₂CO₃(0.59 g、4.26 mmol)を添加し、反応物を室温で一晩撹拌した。混合物をジクロロメタンで希釈し、セライトのパッドに通して濾過し、DCMで洗浄した。ヘプタン/ジクロロメタンが80/20の溶媒系を用いたカラムクロマトグラフィー(TEAで前処理したシリカ)で粗生成物を精製した。合わせた画分をメタノールから粉砕し、固体をジクロロメタン/メタノールから1回再結晶化した。表題の生成物を赤色粉末として得た(0.8 g、収率76%)。

40

【0088】

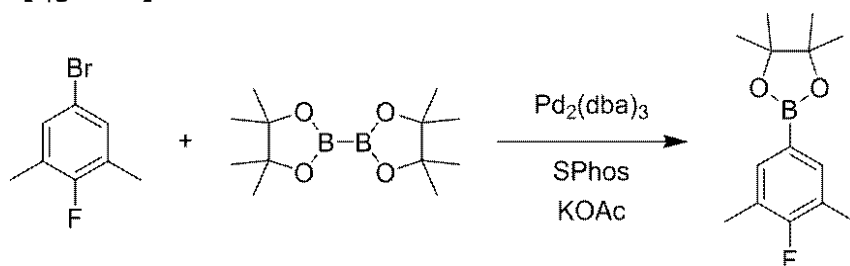
化合物699の合成

【0089】

50

2 - (4 - フルオロ - 3 , 5 - ジメチルフェニル) - 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロランの合成

【化 2 7】



10

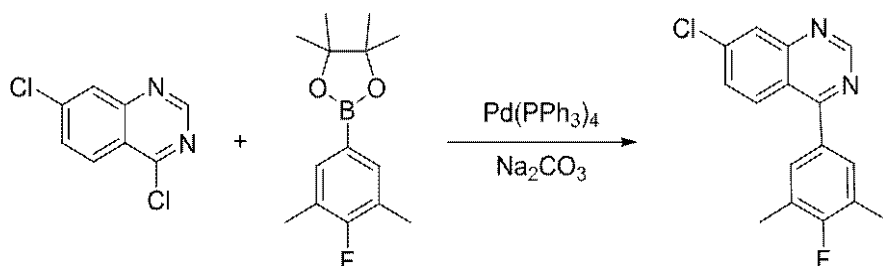
5 - ブロモ - 2 - フルオロ - 1 , 3 - ジメチルベンゼン (2 0 g 、 1 0 0 m m o l) 、 4 , 4 , 4 ' , 4 ' , 5 , 5 , 5 ' , 5 ' - オクタメチル - 2 , 2 ' - ビ (1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン) (5 1 g 、 2 0 0 m m o l) 、 $Pd_2(dba)_3$ (1 . 8 3 g 、 2 . 0 0 m m o l) 、 ジシクロヘキシル (2 ' , 6 ' - ジメトキシ - [1 , 1 ' - ビフェニル] - 2 - イル) ホスフィン (S P h o s) (3 . 2 8 g 、 8 . 0 0 m m o l) 、 酢酸カリウム (2 4 . 5 g 、 2 5 0 m m o l) 、 及びジオキサソ (6 0 0 m L) を三ツ口丸底フラスコに合わせた。冷却器を取り付け、系を排気し、窒素で 3 回バージした。反応物を加熱して一晩還流した。完了すると、反応物をセライトに通して濾過し、酢酸エチルで洗浄した。濾液を暗赤色の油状物に濃縮し、4 0 0 m L のヘプタン中に溶解し、焼結フィルター漏斗においてシリカゲルのプラグに充填した。シリカゲルを 2 L のヘプタンで洗浄し、その後 9 8 / 2 のヘプタン / 酢酸エチル 1 L を添加し、生成物の多くを再結晶化し、ビスピノコレートを除去した。これらの部分を合わせて、濃縮し、3 0 g の黄色油状物を得て、ヘプタン ~ 9 5 / 5 ヘプタン / 酢酸エチル溶媒系を用いたシリカゲルで精製した。所望の生成物を含む画分を合わせて、濃縮し、1 7 . 5 g の淡黄色の固体を 7 0 % の収率で得た。

20

【 0 0 9 0】

7 - クロロ - 4 - (4 - フルオロ - 3 , 5 - ジメチルフェニル) キナゾリンの合成

【化 2 8】



30

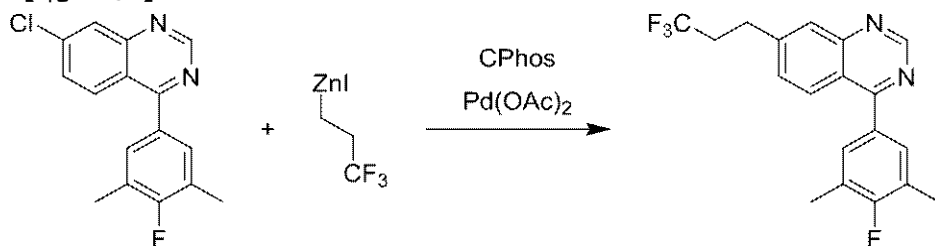
4 , 7 - ジクロロキナゾリン (4 . 0 g 、 2 0 . 1 m m o l) 、 2 - (4 - フルオロ - 3 , 5 - ジメチルフェニル) - 4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン (5 . 5 3 g 、 2 2 . 1 m m o l) 、 炭酸ナトリウム (5 . 3 3 g 、 5 0 . 2 m m o l) 、 パラジウムテトラキス (0 . 7 0 g 、 0 . 6 0 m m o l) 、 ジメトキシエタン (“ D M E ”) (1 6 0 m L) 、 及び水 (4 0 m L) を三ツ口丸底フラスコに合わせた。冷却器を取り付け、その後系を排気し、窒素で 3 回バージした。反応物を一晩活炭に還流した。反応物を酢酸エチル、水、及び食塩水で希釈した。水溶液を分割し、有機物を食塩水で一回洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、その後濃縮して黄色固体とした。D C M ~ 8 5 / 1 5 D C M / 酢酸エチル溶媒系を用いたシリカゲルで黄色固体を精製し、淡黄色の固体 4 . 1 g を収率 7 1 % で得た。

40

【 0 0 9 1】

4 - (4 - フルオロ - 3 , 5 - ジメチルフェニル) - 7 - (3 , 3 , 3 - トリフルオロプロピル) キナゾリンの合成

【化 29】

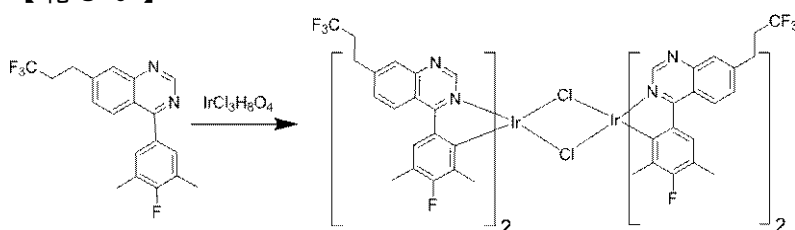


7 - クロロ - 4 - (4 - フルオロ - 3 , 5 - ジメチルフェニル) キナゾリン (2 . 7 5 g 、 9 . 5 9 m m o l) , 2 ' - (ジシクロヘキシルホスフィノ) - N 2 , N 2 , N 6 , N 6 - テトラメチル - [1 , 1 ' - ビフェニル] - 2 , 6 - ジアミン (C P h o s) (0 . 3 4 g 、 0 . 7 7 m m o l) 、 及びジアセトキシパラジウム (0 . 0 9 0 g 、 0 . 3 8 m m o l) 、 及び 1 0 0 m L の無水 T H F をオープン乾燥した (炉乾燥した) 3 つ口丸底フラスコに置いた。系を排気し、窒素で 3 回パージした。(3 , 3 , 3 - トリフルオロプロピル) ヨウ化亜鉛 (I I) (8 6 m l 、 1 9 . 2 m m o l) をシリンジを介して添加した。反応が完了すると、塩化アンモニウム溶液でクエンチし、酢酸エチルが入った分液漏斗に移した。水溶液を分離し、有機物を食塩水で一回洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過し濃縮した。D C M ~ 9 0 / 1 0 D C M / 酢酸エチル溶媒系を用いたシリカゲルで粗固体を精製し、紅褐色固体を 3 . 3 g 得た。8 0 / 2 0 ~ 8 5 / 1 5 アセトニトリル / 水の溶媒系を用いた C 1 8 カートリッジを用いて、3 . 3 g の固体を精製した。合わせた画分を濃縮し、一晚真空オープンで乾燥し、2 . 3 6 g の白色固体を 7 1 % の収率で得た。

【 0 0 9 2 】

I r (I I I) 二量体の合成

【化 30】

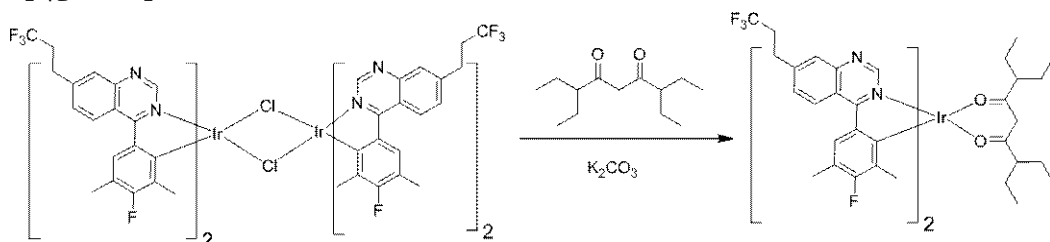


4 - (4 - フルオロ - 3 , 5 - ジメチルフェニル) - 7 - (3 , 3 , 3 - トリフルオロプロピル) キナゾリン (2 . 5 6 g 、 7 . 3 4 m m o l) を R B F に入れ、エトキシエタノール (2 3 m L) 及び水 (8 m L) 中に溶解した。混合物を 1 5 分間窒素ガスで脱気し、その後塩化イリジウム (0 . 6 8 g 、 1 . 8 4 m m o l) を入れ、反応物を 1 0 5 で 2 4 時間加熱した。反応物を室温まで冷却し、1 0 m L の M e O H で希釈し、M e O H で洗浄した。オレンジ色の粉末として I r (I I I) 二量体を得た (1 . 5 0 g 、 収率 8 9 %) 。

【 0 0 9 3 】

化合物 6 8 1 の合成

【化 31】



前記二量体 (1 . 5 0 g 、 0 . 8 1 m m o l) 、 3 , 7 - ジエチルノナン - 4 , 6 - ジオン (1 . 7 3 g 、 8 . 1 3 m m o l) 、 及び 2 - エトキシエタノール (5 0 m l) を丸底フラスコに合わせた。1 5 分間窒素を懸濁液に直接バブルした。炭酸カリウム (1 . 1

2 g、8.13 mmol) を添加し、反応を室温で一晩進めた。完了すると、赤色になるまで、DCMを用いて反応物をセライトに通して濾過した。溶液を濃縮して暗赤色の油状固体を得て、DCM中に溶解し、セライトに吸着させた。サンプルをシリカゲルで精製し、0.24 gの暗赤色固体を13%の収率で得た。

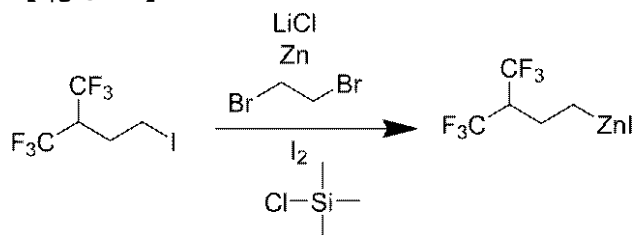
【0094】

化合物22の合成

【0095】

(4,4,4-トリフルオロ-3-(トリフルオロメチル)ブチル)ヨウ化亜鉛(II)の合成

【化32】

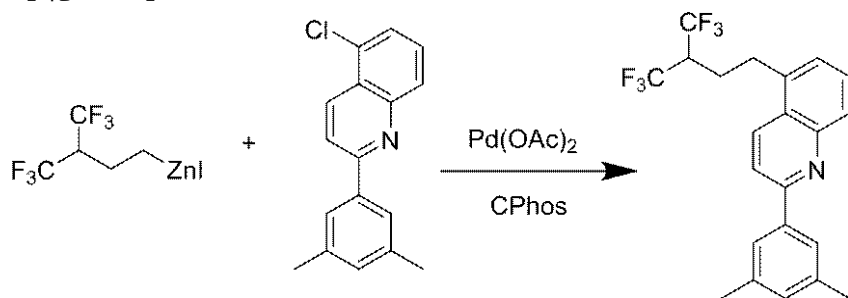


塩化リチウム(1.87 g、44.1 mmol)を反応フラスコに投入した。フラスコを排気し、ヒートガンで10分間加熱した。フラスコを室温まで冷却し、亜鉛(2.88 g、44.1 mmol)をフラスコに添加した。フラスコを再度排気し、ヒートガンで10分間加熱した。フラスコを室温まで冷却し、THF(80 mL)を反応物に注入し、1,2-ジブromoエタン(0.42 mL、4.90 mmol)を添加した。この混合物を60℃に設定したオイルバス中で30分間撹拌した。4 mLのTHFに溶解した二ヨウ素(0.25 g、0.98 mmol)及びクロロトリメチルシラン(0.12 mL、0.98 mmol)を添加して、混合物を室温まで冷却した。混合物を再度60℃に設定したオイルバス中で30分間撹拌した。混合物を再度室温まで冷却した。その後、シリンジを介して反応混合物に1,1,1-トリフルオロ-4-ヨード-2-(トリフルオロメチル)ブタン(7.50 g、24.5 mmol)を注入した。不均一な反応混合物を撹拌し、50℃に設定したオイルバス中で一晩加熱した。反応混合物を室温まで冷却し、撹拌を停止した。生成物をそのまま使用した。

【0096】

2-(3,5-ジメチルフェニル)-5-(4,4,4-トリフルオロ-3-(トリフルオロメチル)ブチル)キノリンの合成

【化33】



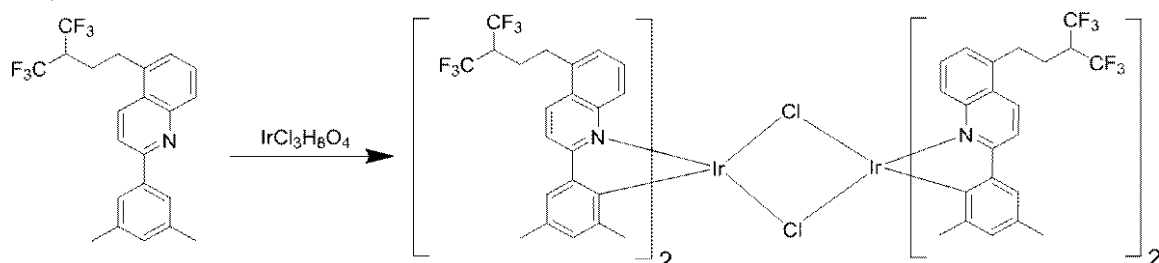
8-(5-クロロキノリン-2-イル)-2,6-ジメチルベンゾフロ[2,3-b]ピリジン(3.40 g、9.48 mmol)、2'-(ジシクロヘキシルホスフィノ)-N2,N2,N6,N6-テトラメチル-[1,1'-ビフェニル]-2,6-ジアミン(CPhos)(0.33 g、0.76 mmol)、及びジアセトキシパラジウム(0.09 g、0.38 mmol)をTHF(190 mL)で希釈した。この混合物を窒素ガスで15分間バブルして脱気し、シリンジを介して(3,3,3-トリフルオロプロピル)ヨウ化亜鉛(II)(35 mL、10.4 mmol)を添加した。この混合物を室温で一晩撹拌した。反応が完了すると、混合物を塩化アンモニウム水溶液でクエンチし、200 mLの酢酸エチルで2回抽出した。これらの抽出物を硫酸マグネシウムで乾燥し、濾過し

、真空下で濃縮した。ヘプタン/E A (9 5 / 5 ~ 9 0 / 1 0) の溶媒系を用いたカラムクロマトグラフィーを介して粗生成物を精製した。生成物をメタノールで粉碎し、ヘプタンから再結晶化し、白色固体として 2 - (3 , 5 - ジメチルフェニル) - 5 - (4 , 4 , 4 - トリフルオロ - 3 - (トリフルオロメチル) ブチル) キノリンを得た (2 . 5 g 、収率 5 1 %) 。

【 0 0 9 7 】

I r (I I I) 二量体の合成

【 化 3 4 】



10

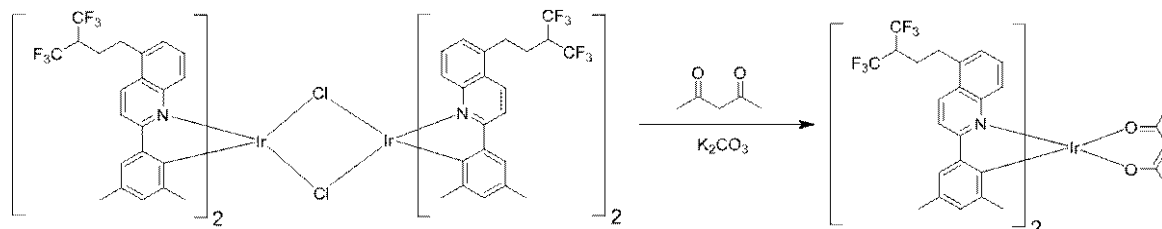
2 - (3 , 5 - ジメチルフェニル) - 5 - (4 , 4 , 4 - トリフルオロ - 3 - (トリフルオロメチル) ブチル) キノリン (2 . 4 8 g 、 6 . 0 2 m m o l) を丸底フラスコに入れ、エトキシエタノール (2 4 m L) 及び水 (8 m L) 中に溶解した。混合物を窒素ガスで 1 5 分間バブルして脱気し、その後塩化イリジウム (0 . 7 2 g 、 1 . 9 4 m m o l) を入れて、反応物を 1 0 5 ° で 2 4 時間加熱した。反応物を室温まで冷却し、1 0 m L の M e O H で希釈し、濾過し、M e O H で洗浄し、I r (I I I) 二量体を得た (1 . 2 g 、収率 5 9 %) 。

20

【 0 0 9 8 】

化合物 2 2 の合成

【 化 3 5 】



30

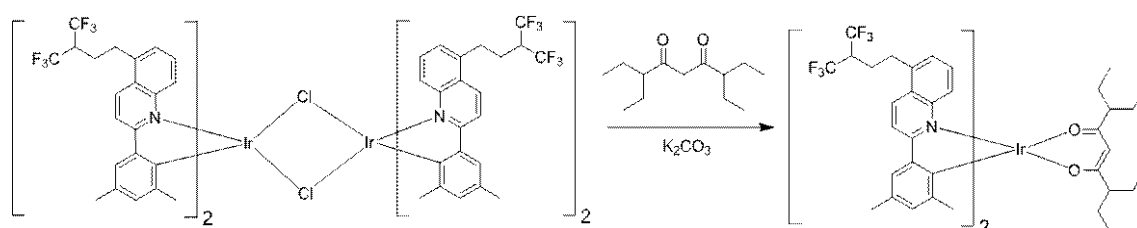
I r (I I I) 二量体 (0 . 5 0 g 、 0 . 2 4 m m o l) をエトキシエタノール (8 m L) 中に溶解し、ペンタン - 2 , 4 - ジオン (0 . 2 5 m L 、 2 . 3 9 m m o l) を添加した。混合物を窒素ガスで 1 5 分間バブルして脱気し、その後 K ₂ C O ₃ (0 . 3 3 g 、 2 . 3 9 m m o l) を添加し、反応物を室温で一晩撹拌した。反応が完了すると、混合物を D C M で希釈し、セライトに通して濾過し、D C M で洗浄した。粗生成物をセライトに塗布し、ヘプタン / D C M (9 5 / 5) の溶媒系を用いたカラムクロマトグラフィー (T E A で前処理した) を介して精製した。M e O H / D C M 、 E t O H / D C M 、 及び T H F / i - P r O H から生成物を数回 (5 回) 再結晶化し、0 . 1 8 g の目的化合物を得た (収率 3 4 %) 。

40

【 0 0 9 9 】

化合物 4 7 3 の合成

【 化 3 6 】



I r (I I I) 二量体 (0 . 7 0 g 、 0 . 3 3 m m o l) をエトキシエタノール (1 5

50

m L) 中に溶解し、3, 7 - ジエチルノナン - 4, 6 - ジオン (0.71 g、3.34 mmol) を添加した。混合物を15分間窒素ガスでバブルして脱気し、その後 K_2CO_3 (0.46 g、3.34 mmol) を添加し、反応物を室温で一晩撹拌した。反応が完了すると、混合物をDCMで希釈し、セライトに通して濾過し、DCMで洗浄した。粗生成物をセライトに塗布し、ヘプタン/DCM (95/5 ~ 90/10) の溶媒系を用いたカラムクロマトグラフィー (TEAで前処理した) を介して精製した。生成物をメタノールから粉砕し、0.21 g のドーパントを得た (収率26%)。

他の材料との組合せ

【0100】

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、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。

HIL/HTL:

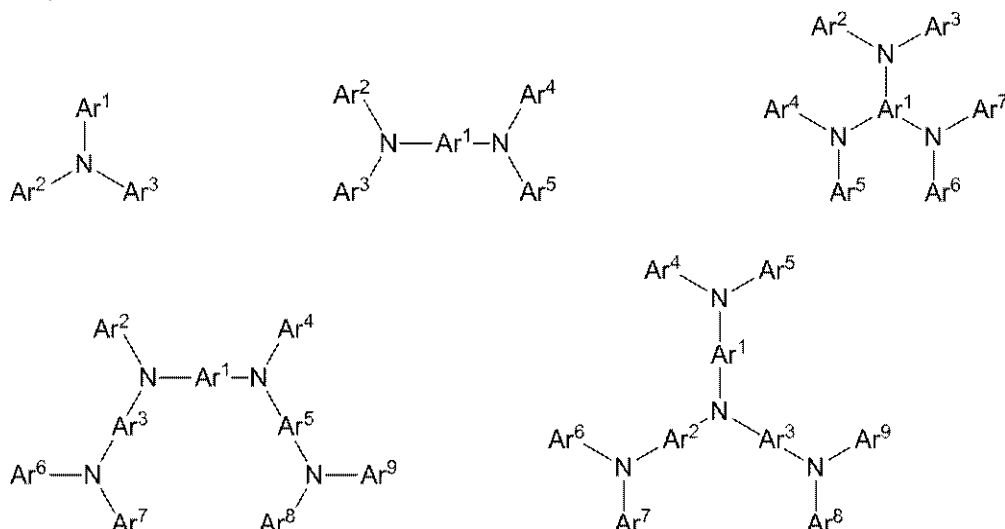
【0101】

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ボルフィリン誘導体；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；PEDOT/PSS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； MoO_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。

【0102】

HIL又はHTL中に使用される芳香族アミン誘導体の例は、下記の一般構造を含むがこれらに限定されない。

【化37】



【0103】

Ar^1 から Ar^9 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、オキサトリアゾール、ジオキサゾール、チアジアゾール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、オキサジン、オキサチアジン、オキサジアジン、インドール、ベンズイミダゾール、インダゾール、インドキサジン、ベンゾオキサゾール、ベンズイソオキサゾール、ベンゾチアゾール、キノリン、イソキノリン、シンノリン、キナゾリン、キノキサリン、ナフチリジン、フタラジン、プテリジン、キサンテン、アクリジン、フェナジン、フェノチアジン、フェノキサジン、ベンゾフロピリジン、フロジピリジン、ベンゾチエノピリジン、チエノジピリジン、ベンゾセレノフェノピリジン及びセレノフェノジピリジン等の芳香族複素環式化合物からなる群；並びに芳香族炭化水素環式基及び芳香族複素環式基から選択される同じ種類又は異なる種類の基である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Arは、水素、重水素、ハライド、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボニル、カルボン酸、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルフォニル、ホスフィノ及びこれらの組み合わせ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。

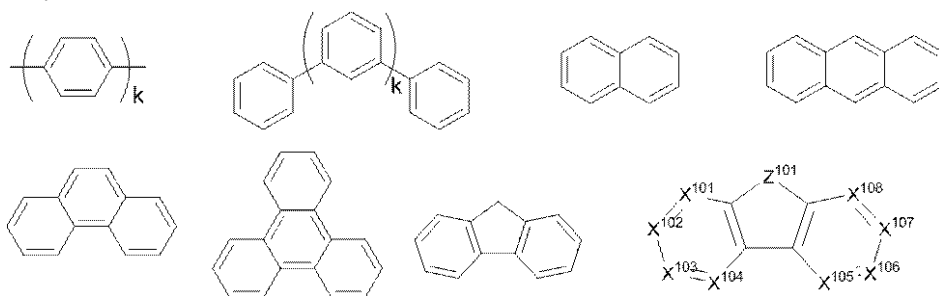
10

20

【0104】

一態様において、Ar¹からAr⁹は、

【化38】



30

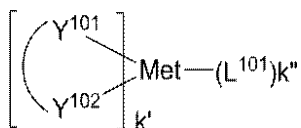
からなる群から独立に選択される。

式中、kは1から20までの整数であり；X¹⁰¹からX¹⁰⁸はC（CHを含む）又はNであり；Z¹⁰¹はNAr¹、O、又はSであり；Ar¹は、上記で定義したものと同一基を有する。

【0105】

HIL又はHTL中に使用される金属錯体の例は、下記の一般式を含むがこれに限定されない。

【化39】



40

式中、Metは、40より大きい原子量を有し得る金属であり；(Y¹⁰¹ - Y¹⁰²)は二座配位子であり、Y¹⁰¹及びY¹⁰²は、C、N、O、P及びSから独立に選択され；L¹⁰¹は補助配位子であり；k'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、k' + k''は、金属に付着し得る配位子の最大数である。

【0106】

一態様において、(Y¹⁰¹ - Y¹⁰²)は2-フェニルピリジン誘導体である。別の態様において、(Y¹⁰¹ - Y¹⁰²)はカルベン配位子である。別の態様において、Metは、Ir、Pt、Os及びZnから選択される。更なる態様において、金属錯体は、

50

Fc^+ / Fc カップルに対して、溶液中で約 0.6 V 未満の最小酸化電位を有する。

ホスト：

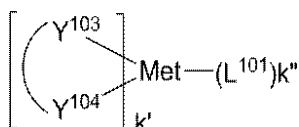
【0107】

本発明の有機 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よい。下記の表において、各色を発光するデバイスに好ましいホスト材料が分類されているが、三重項の基準が満たされれば、いずれのホスト材料もいずれのドーパントと共に用いてもよい。

【0108】

ホスト材料として使用される金属錯体の例は、下記の一般式を有することが好ましい。

【化 40】

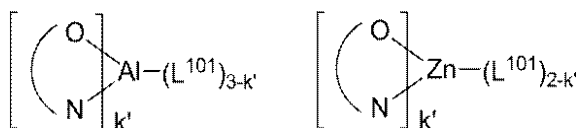


式中、Met は金属であり； $(Y^{103} - Y^{104})$ は二座配位子であり、 Y^{103} 及び Y^{104} は、C、N、O、P 及び S から独立に選択され； L^{101} は他の配位子であり； k' は、1 から金属に付着し得る配位子の最大数までの整数値であり；且つ、 $k' + k''$ は、金属に付着し得る配位子の最大数である。

【0109】

一態様において、金属錯体は、下記の錯体である。

【化 41】



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

【0110】

別の態様において、Met は、Ir 及び Pt から選択される。更なる態様において、 $(Y^{103} - Y^{104})$ はカルベン配位子である。

【0111】

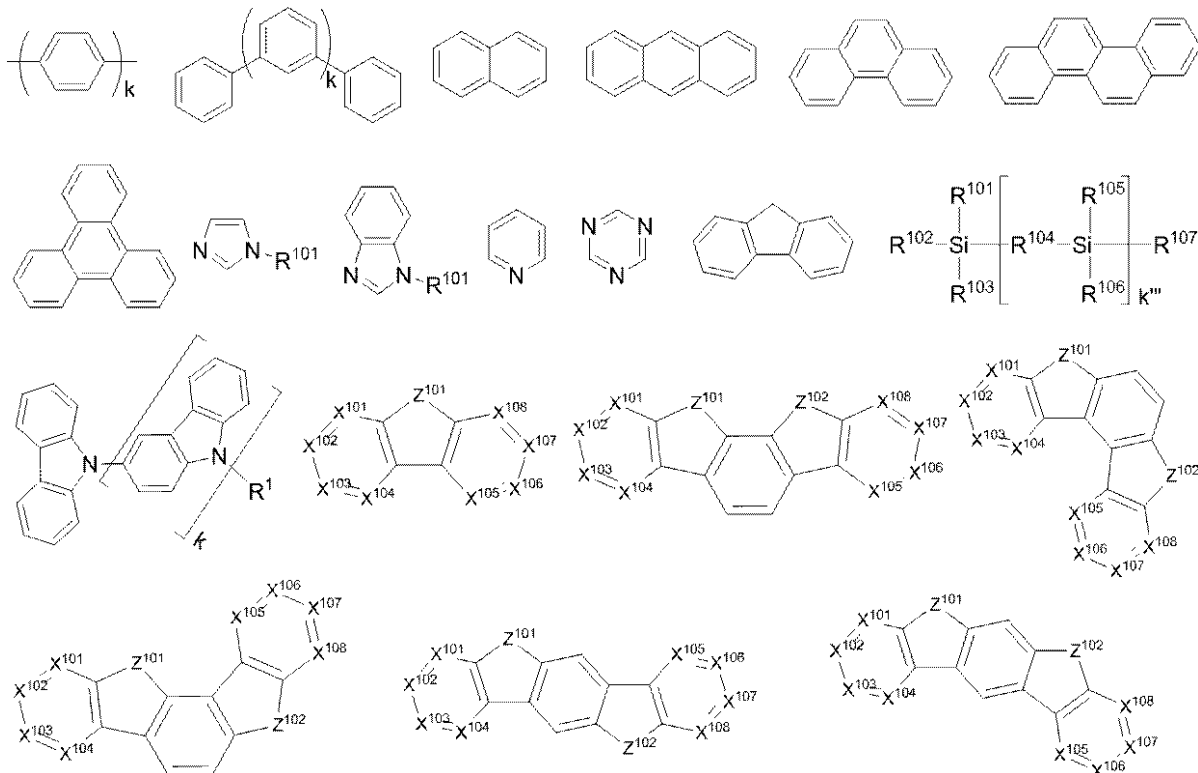
ホスト材料として使用される有機化合物の例は、ベンゼン、ビフェニル、トリフェニル、トリフェニレン、ナフタレン、アントラセン、フェナレン、フェナントレン、フルオレン、ピレン、クリセン、ペリレン、アズレン等の芳香族炭化水素環式化合物からなる群；ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、フラン、チオフェン、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、ベンゾセレノフェン、カルバゾール、インドロカルバゾール、ピリジルインドール、ピロロジピリジン、ピラゾール、イミダゾール、トリアゾール、オキサゾール、チアゾール、オキサジアゾール、オキサトリアゾール、ジオキサゾール、チアジアゾール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、オキサジン、オキサチアジン、オキサジアジン、インドール、ベンズイミダゾール、インダゾール、インドキサジン、ベンゾオキサゾール、ベンズイソオキサゾール、ベンゾチアゾール、キノリン、イソキノリン、シンノリン、キナゾリン、キノキサリン、ナフチリジン、フタラジン、プテリジン、キサンテン、アクリジン、フェナジン、フェノチアジン、フェノキサジン、ベンゾフロピリジン、フロジピリジン、ベンゾチエノピリジン、チエノジピリジン、ベンゾセレノフェノピリジン及びセレノフェノジピリジン等の芳香族複素環式化合物からなる群；並びに芳香族炭化水素環式基及び芳香族複素環式基から選択される同じ種類又は異なる種類の基であり、且つ、直接的に、又は酸素原子、窒素原子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子、ホウ素原子、鎖構造単位及び脂肪族環式基の少なくとも 1 つを介して互いに結合している 2 から 10 個の環式構造単位からなる群から選択される。各基は

、水素、重水素、ハライド、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリアルアルキル、アルコキシ、アリアルオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリアル、ヘテロアリアル、アシル、カルボニル、カルボン酸、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルフォニル、ホスフィノ、及びこれらの組み合わせ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。

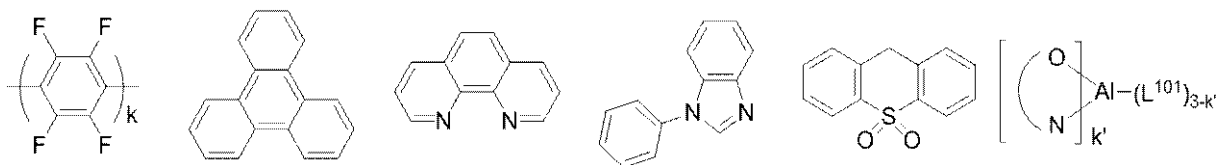
【0112】

一態様において、ホスト化合物は、分子中に下記の群の少なくとも1つを含有する。

【化42】



【化 4 3】



式中、 k は 1 から 20 までの整数であり； L^{101} は他の配位子であり、 k' は 1 から 3 までの整数である。

E T L :

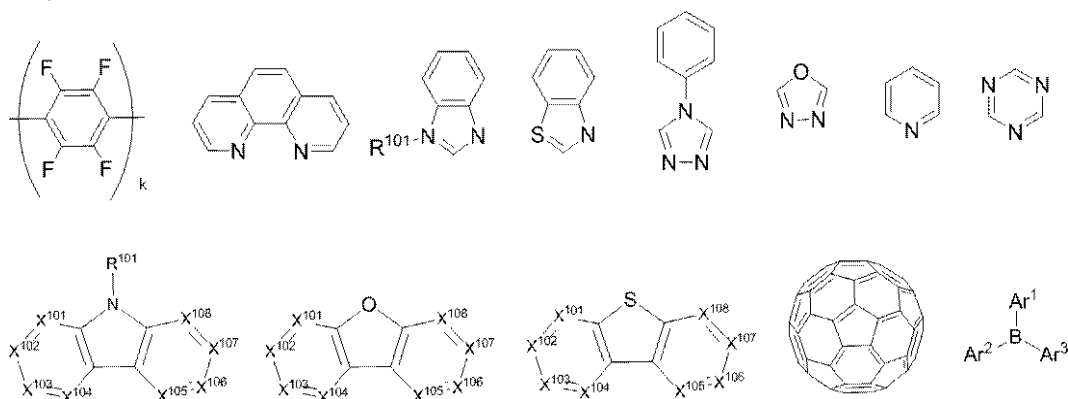
【0116】

電子輸送層 (E T L) 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 (ドーピングされていない) か、又はドーピングされている。ドーピングを使用して、伝導性を増強することができる。E T L 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。

【0117】

一態様において、前記 E T L 中に使用される前記化合物は、分子中に下記の群の少なくとも 1 つを含有する。

【化 4 4】

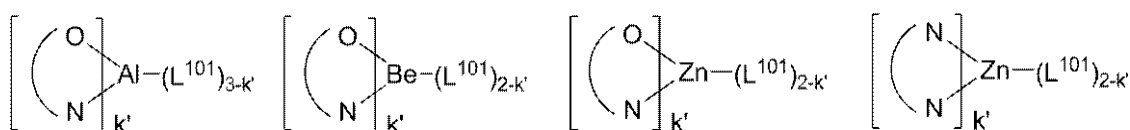


式中、 R^{101} は、水素、重水素、ハライド、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボニル、カルボン酸、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルフォニル、ホスフィノ及びこれらの組み合わせからなる群から選択され、それがアリール又はヘテロアリールである場合、上記で言及した Ar のものと同様の定義を有する。 Ar^1 から Ar^3 は、上記で言及した Ar のものと同様の定義を有する。 k は 1 から 20 までの整数である。 X^{101} から X^{108} は C (C H を含む) 又は N から選択される。

【0118】

別の態様において、前記 E T L 中に使用される金属錯体は、下記の一般式を含有するがこれらに限定されない。

【化 4 5】



式中、(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^{101} は他の配位子であり； k' 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 1 9 】

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。故に、メチル、フェニル、ピリジル等であるがこれらに限定されない任意の具体的に挙げられている置換基は、それらの重水素化されていない、部分的に重水素化された、及び完全に重水素化されたバージョンを包含する。同様に、アルキル、アリール、シクロアルキル、ヘテロアリール等であるがこれらに限定されない置換基のクラスは、それらの重水素化されていない、部分的に重水素化された、及び完全に重水素化されたバージョンも包含する。

【 0 1 2 0 】

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Aに収載する。表A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 A - 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		A p p l . P h y s . L e t t . 6 9 , 2 1 6 0 (1 9 9 6)
星形 トリアリールアミン		J . L u m i n . 7 2 - 7 4 , 9 8 5 (1 9 9 7)
C F _x フッ化炭化水 素ポリマー	$\left[\text{CH}_x\text{F}_y \right]_n$	A p p l . P h y s . L e t t . 7 8 , 6 7 3 (2 0 0 1)
導電性ポリマー（例 えば、PEDOT： PSS、ポリアニリ ン、ポリチオフェン ）		S y n t h . M e t . 8 7 , 1 7 1 (1 9 9 7) W O 2 0 0 7 0 0 2 6 8 3
ホスホン酸及びシラ ンSAM		U S 2 0 0 3 0 1 6 2 0 5 3
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		E P 1 7 2 5 0 7 9 A 1

10

20

30

40

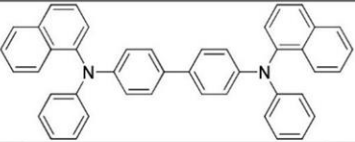
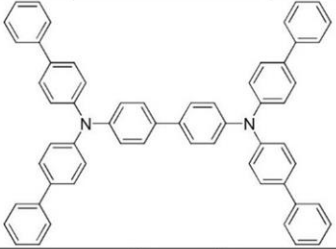
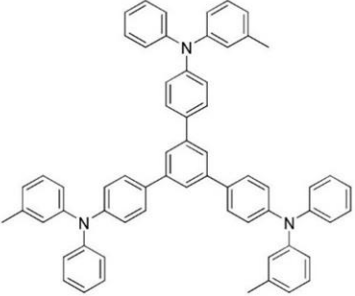
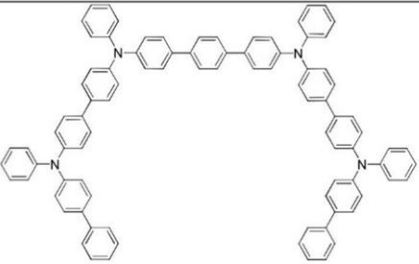
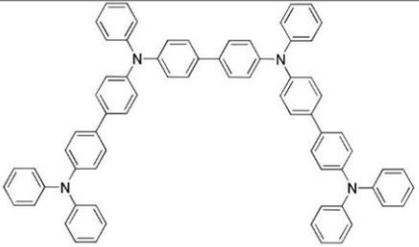
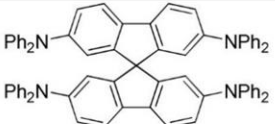
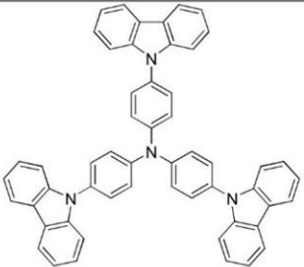
10

20

30

40

【表 A - 3】

		U S 5 0 6 1 5 6 9
		E P 6 5 0 9 5 5
		J . M a t e r . C h e m . 3 , 3 1 9 (1 9 9 3)
		A p p l . P h y s . L e t t . 9 0 , 1 8 3 5 0 3 (2 0 0 7)
		A p p l . P h y s . L e t t . 9 0 , 1 8 3 5 0 3 (2 0 0 7)
スピロフルオレンコ ア上のトリアリール アミン		S y n t h . M e t . 9 1 , 2 0 9 (1 9 9 7)
アリールアミンカル バゾール化合物		A d v . M a t e r . 6 , 6 7 7 (1 9 9 4) , U S 2 0 0 8 0 1 2 4 5 7 2

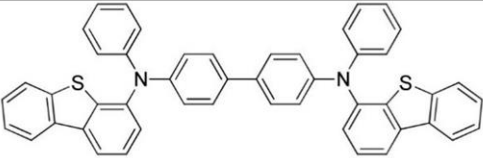
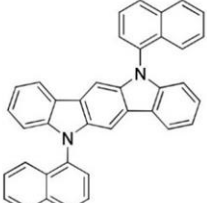
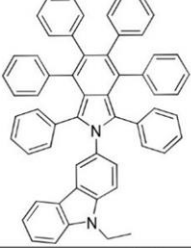
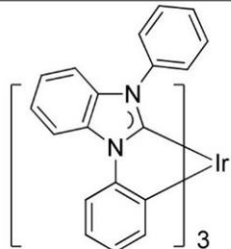
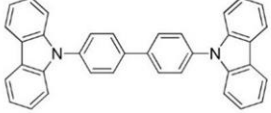
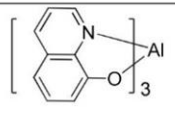
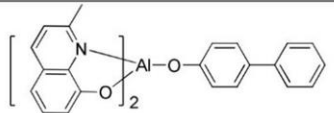
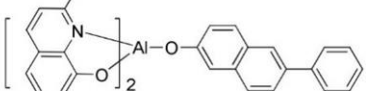
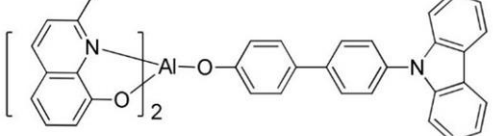
10

20

30

40

【表 A - 4】

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		U S 2 0 0 7 0 2 7 8 9 3 8 , U S 2 0 0 8 0 1 0 6 1 9 0 U S 2 0 1 1 0 1 6 3 3 0 2
インドロカルバゾール		S y n t h . M e t . 1 1 1 , 4 2 1 (2 0 0 0)
イソインドール化合物		C h e m . M a t e r . 1 5 , 3 1 4 8 (2 0 0 3)
金属カルベン錯体		U S 2 0 0 8 0 0 1 8 2 2 1
リン光性 O L E D ホスト材料		
赤色ホスト		
アリールカルバゾール		A p p l . P h y s . L e t t . 7 8 , 1 6 2 2 (2 0 0 1)
金属 8-ヒドロキシ キノレート (例えば 、 A l q ₃ 、 B A l q)		N a t u r e 3 9 5 , 1 5 1 (1 9 9 8)
		U S 2 0 0 6 0 2 0 2 1 9 4
		W O 2 0 0 5 0 1 4 5 5 1
		W O 2 0 0 6 0 7 2 0 0 2

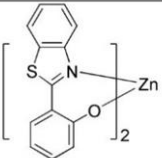
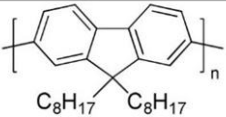
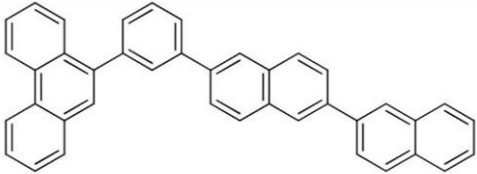
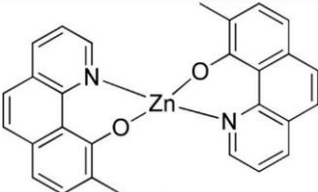
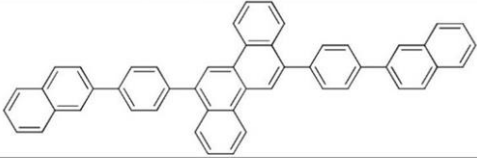
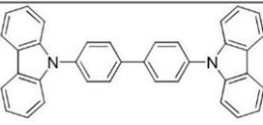
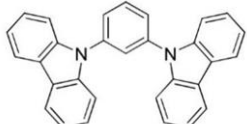
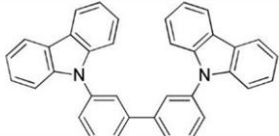
10

20

30

40

【表 A - 5】

金属フェノキシベン ゾチアゾール化合物		Appl. P hys. Le tt. 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. El ectron. 1, 15 (2000)
芳香族縮合環		WO20090 66779, WO20090 66778, WO20090 63833, US20090 045731, US2009 0045730 , WO20090 08311, US20090 008605, US2009 0009065
亜鉛錯体		WO20100 56066
クリセンベースの化 合物		WO20110 86863
緑色ホスト		
アリールカルバゾール		Appl. P hys. Le tt. 78, 1622 (2001)
		US20030 175553
		WO20010 39234

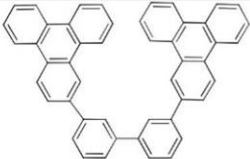
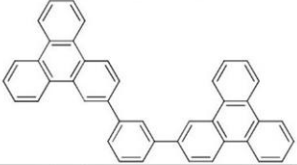
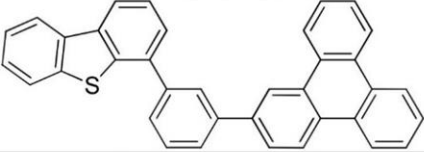
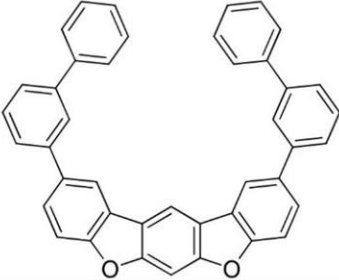
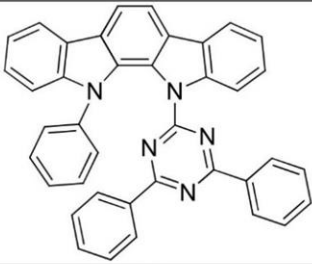
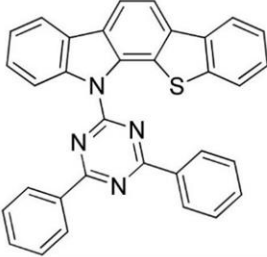
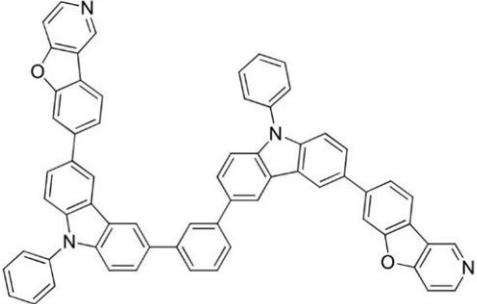
10

20

30

40

【表 A - 6】

アリールトリフェニレン化合物		US 20060280965
		US 20060280965
		WO 2009021126
ポリ縮合ヘテロアリアル化合物		US 20090309488 US 20090302743 US 20100012931
ドナーアクセプター型分子		WO 2008056746
		WO 2010107244
アザールカルバゾール／DBT／DBF		JP 2008074939

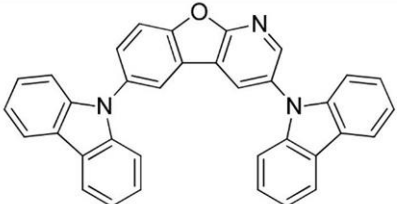
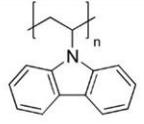
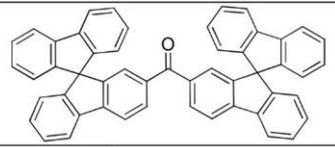
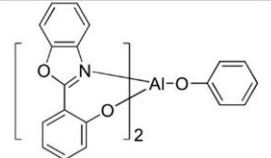
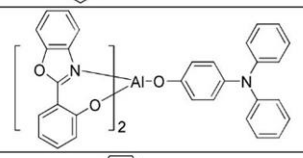
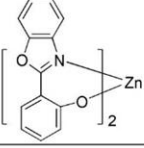
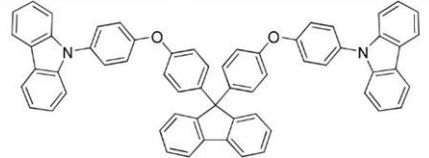
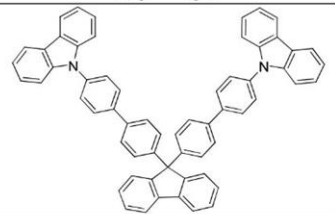
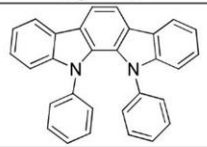
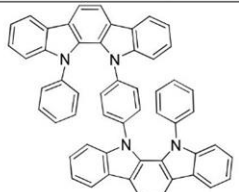
10

20

30

40

【表 A - 7】

		US 20100 187984
ポリマー（例えば、 PVK）		App1. P hys. Le tt. 77, 2280 (2000)
スピロフルオレン化合物		WO 20040 93207
金属フェノキシベン ゾオキサゾール化合物		WO 20050 89025
		WO 20061 32173
		JP 20051 1610
スピロフルオレンー カルバゾール化合物		JP 20072 54297
		JP 20072 54297
インドロカルバゾール		WO 20070 63796
		WO 20070 63754

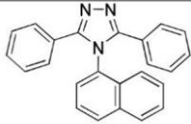
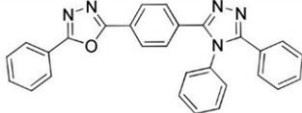
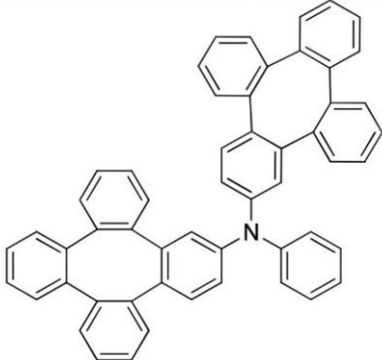
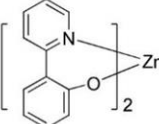
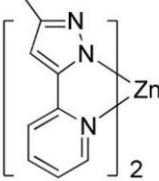
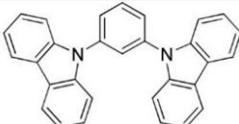
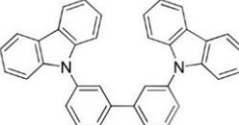
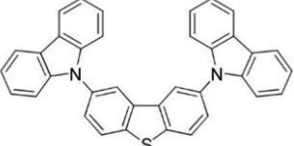
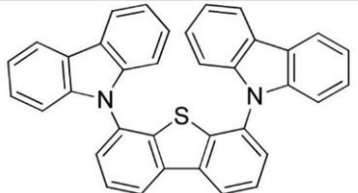
10

20

30

40

【表 A - 8】

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 . A p p l . P h y s . 9 0 , 5 0 4 8 (2 0 0 1)
		W O 2 0 0 4 1 0 7 8 2 2
テトラフェニレン錯体		U S 2 0 0 5 0 1 1 2 4 0 7
金属フェノキシピリジン化合物		W O 2 0 0 5 0 3 0 9 0 0
金属配位錯体（例えば、Zn、AlとN ⁻ N配位子）		U S 2 0 0 4 0 1 3 7 2 6 8 , U S 2 0 0 4 0 1 3 7 2 6 7
青色ホスト		
アリールカルバゾール		A p p l . P h y s . L e t t , 8 2 , 2 4 2 2 (2 0 0 3)
		U S 2 0 0 7 0 1 9 0 3 5 9
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		W O 2 0 0 6 1 1 4 9 6 6 , U S 2 0 0 9 0 1 6 7 1 6 2
		U S 2 0 0 9 0 1 6 7 1 6 2

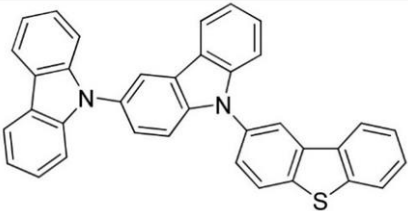
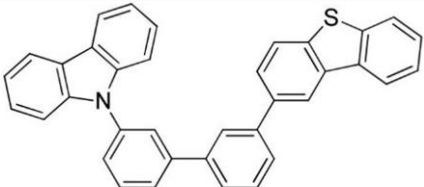
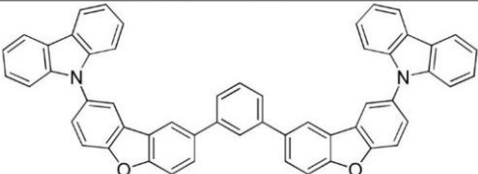
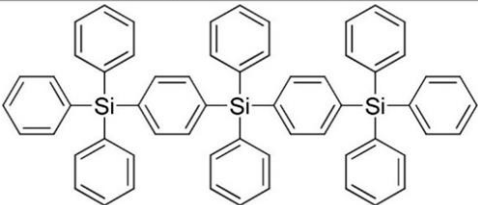
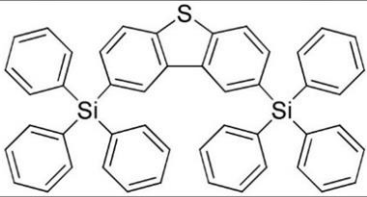
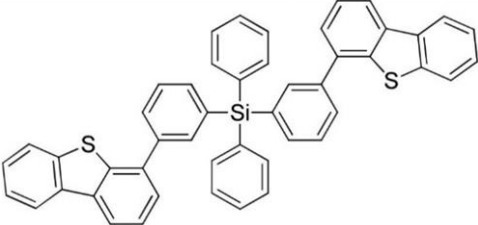
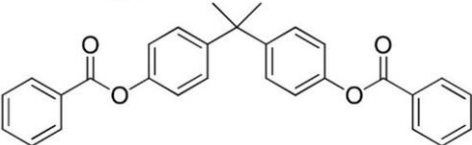
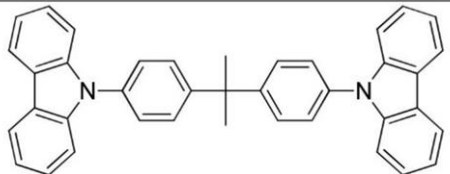
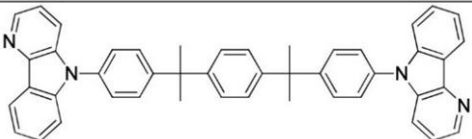
10

20

30

40

【表 A - 9】

		WO 2 0 0 9 0 8 6 0 2 8
		US 2 0 0 9 0 0 3 0 2 0 2 , US 2 0 0 9 0 0 1 7 3 3 0
		US 2 0 1 0 0 0 8 4 9 6 6
ケイ素アリール化合物		US 2 0 0 5 0 2 3 8 9 1 9
		WO 2 0 0 9 0 0 3 8 9 8
ケイ素／ゲルマニウムアリール化合物		EP 2 0 3 4 5 3 8 A
アリールベンゾイルエステル		WO 2 0 0 6 1 0 0 2 9 8
非共役基によって架橋されたカルバゾール		US 2 0 0 4 0 1 1 5 4 7 6
アザーカルバゾール		US 2 0 0 6 0 1 2 1 3 0 8

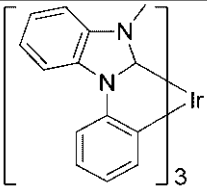
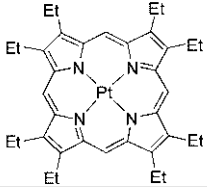
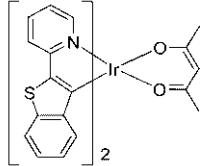
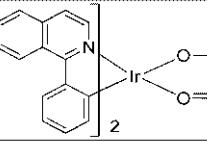
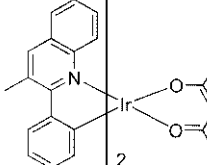
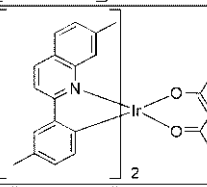
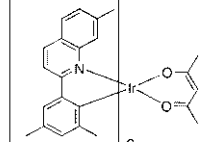
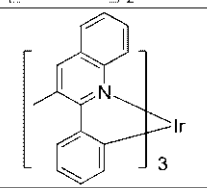
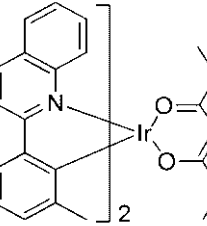
10

20

30

40

【表 A - 1 0】

高三重項金属有機金属錯体		US 7 1 5 4 1 1 4
リン光性ドーパント		
赤色ドーパント		
重金属ポルフィリン (例えば、PtOEP)		Nature 395, 15 1 (1998)
イリジウム(III) 有機金属錯体		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US 2003 007296 4
		US 2003 007296 4
		US 20060 202194
		US 20060 202194
		US 20070 087321
		US 20080 261076 US 20100 090591

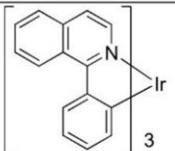
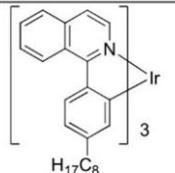
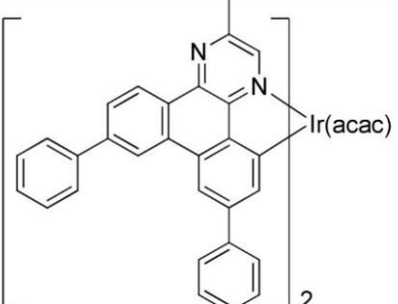
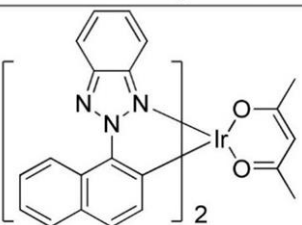
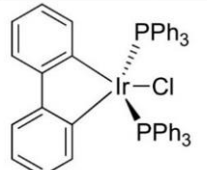
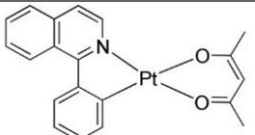
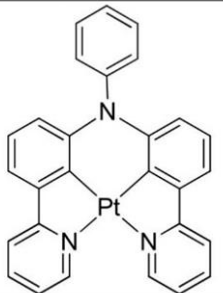
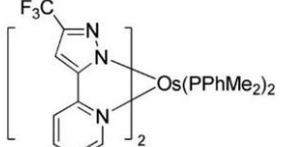
10

20

30

40

【表 A - 1 1】

		U S 2 0 0 7 0 0 8 7 3 2 1
		A d v . M a t e r . 1 9 , 7 3 9 (2 0 0 7)
		W O 2 0 0 9 1 0 0 9 9 1
		W O 2 0 0 8 1 0 1 8 4 2
		U S 7 2 3 2 6 1 8
白金 (I I) 有機金 属錯体		W O 2 0 0 3 0 4 0 2 5 7
		U S 2 0 0 7 0 1 0 3 0 6 0
オスミウム (I I I) 錯体		C h e m . M a t e r . 1 7 , 3 5 3 2 (2 0 0 5)

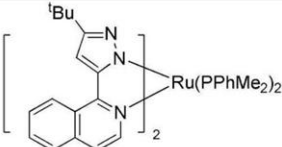
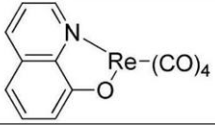
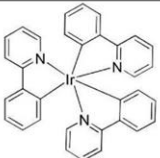
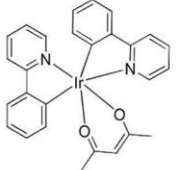
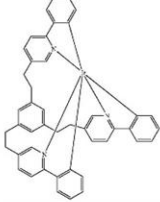
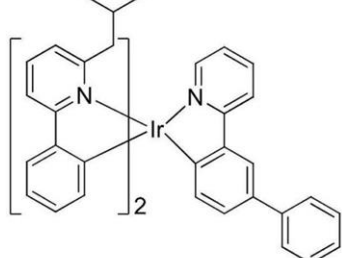
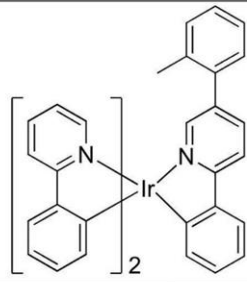
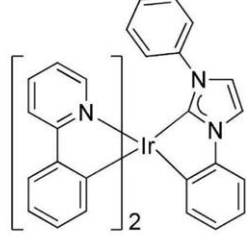
10

20

30

40

【表 A - 1 2】

ルテニウム (I I) 錯体		A d v . M a t e r . 1 7 , 1 0 5 9 (2 0 0 5)
レニウム (I) 、 (I I) 及び (I I I) 錯体		U S 2 0 0 5 0 2 4 4 6 7 3
緑色ドーパント		
イリジウム (I I I)) 有機金属錯体	 及びその誘導体	I n o r g . C h e m . 4 0 , 1 7 0 4 (2 0 0 1)
		U S 2 0 0 2 0 0 3 4 6 5 6
		U S 7 3 3 2 2 3 2
		U S 2 0 0 9 0 1 0 8 7 3 7
		W O 2 0 1 0 0 2 8 1 5 1
		E P 1 8 4 1 8 3 4 B

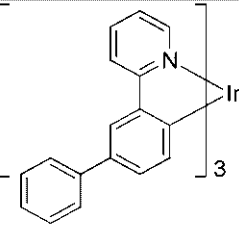
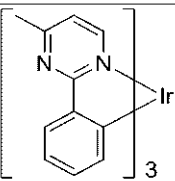
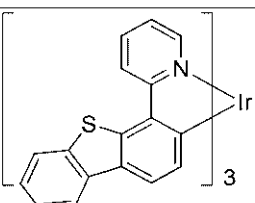
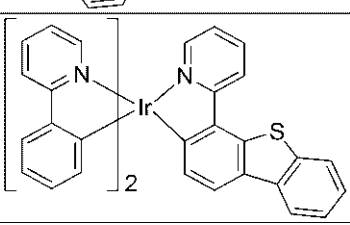
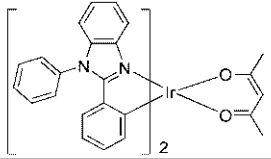
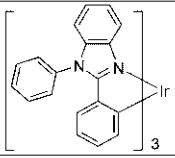
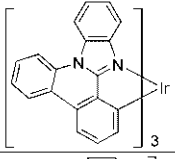
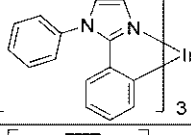
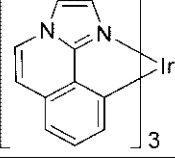
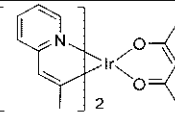
10

20

30

40

【表 A - 1 3】

		US 2 0 0 6 0 1 2 7 6 9 6
		US 2 0 0 9 0 0 3 9 7 7 6
		US 6 9 2 1 9 1 5
		US 2 0 1 0 0 2 4 4 0 0 4
		US 6 6 8 7 2 6 6
		Chem. Mater. 16, 2 4 8 0 (2 0 0 4)
		US 2 0 0 7 0 1 9 0 3 5 9
		US 2 0 0 6 0 0 0 8 6 7 0 JP 2 0 0 7 1 2 3 3 9 2
		WO 2 0 1 0 0 8 6 0 8 9, WO 2 0 1 1 0 4 4 9 8 8
		Adv. Mater. 16, 2 0 0 3 (2004)

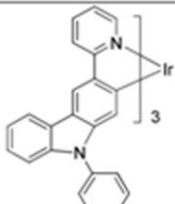
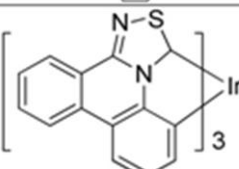
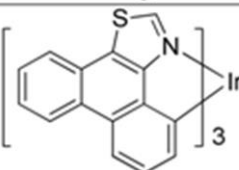
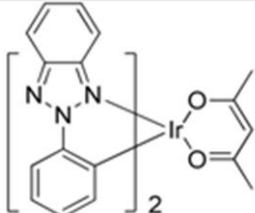
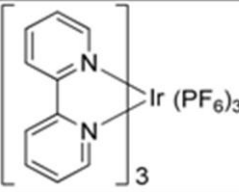
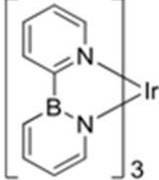
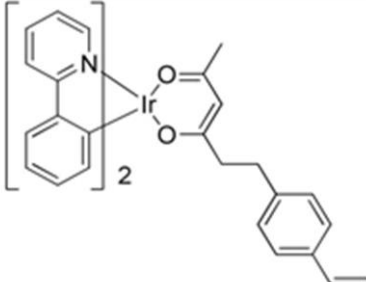
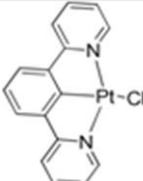
10

20

30

40

【表 A - 1 4】

		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
		WO 2009050290
		US 20090165846
		US 20080015355
		US 20010015432
		US 20100295032
ポリマー金属有機金属化合物の単量体		US 7250226, US 7396598
多座配位子を含む Pt (II) 有機金属錯体		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)

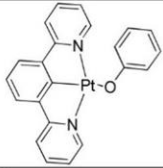
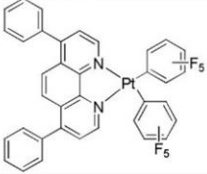
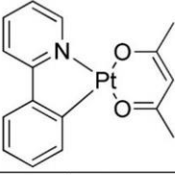
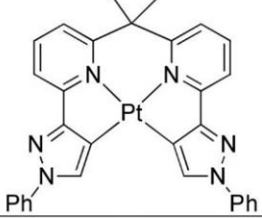
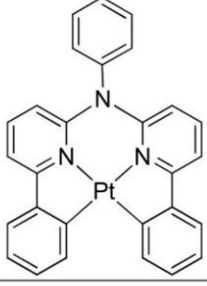
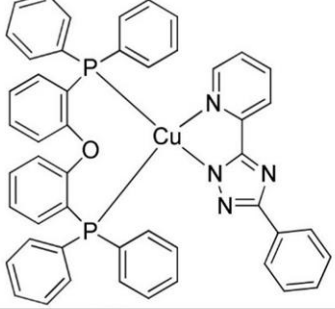
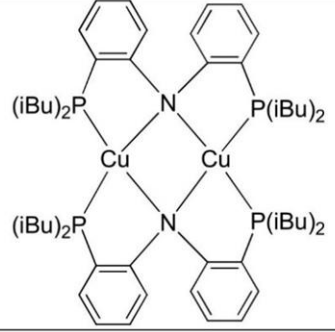
10

20

30

40

【表 A - 1 5】

		App l . P h y s . L e t t . 8 6 , 1 5 3 5 0 5 (2 0 0 5)
		C h e m . L e t t . 3 4 , 5 9 2 (2 0 0 5)
		W O 2 0 0 2 0 1 5 6 4 5
		U S 2 0 0 6 0 2 6 3 6 3 5
		U S 2 0 0 6 0 1 8 2 9 9 2 U S 2 0 0 7 0 1 0 3 0 6 0
C u 錯体		W O 2 0 0 9 0 0 0 6 7 3
		U S 2 0 0 7 0 1 1 1 0 2 6

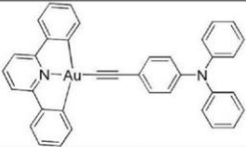
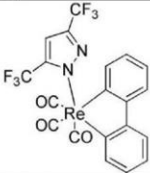
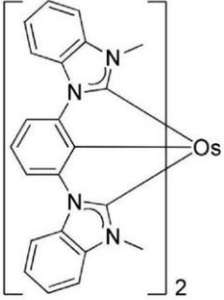
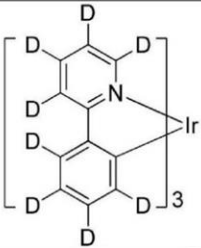
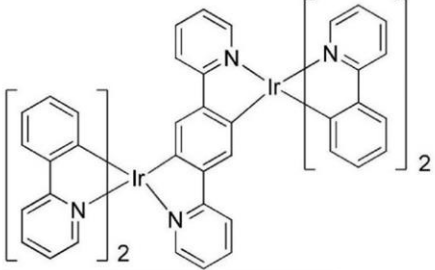
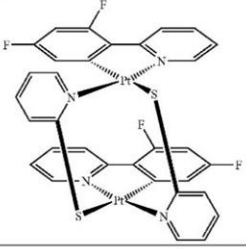
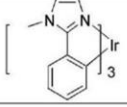
10

20

30

40

【表 A - 1 6】

金錯体		Chem. Commun. 2906 (2005)
レニウム (III) 錯体		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
オスミウム (II) 錯体		US 7 279 704
重水素化有機金属錯体		US 2 003 013 865 7
2 つ以上の金属中心を持つ有機金属錯体		US 2 003 015 280 2
		US 7 090 928
青色ドーパント		
イリジウム (III) 有機金属錯体		WO 2 002 002 714
		WO 2 006 009 024

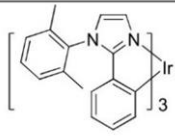
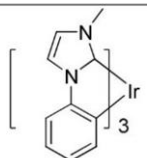
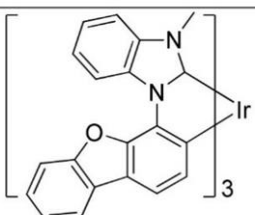
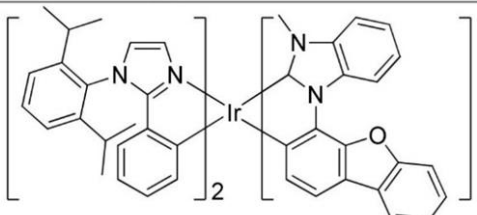
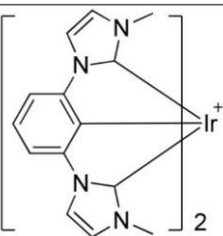
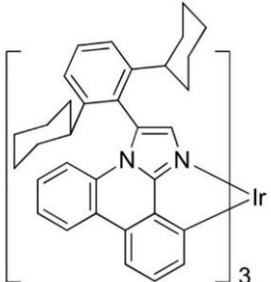
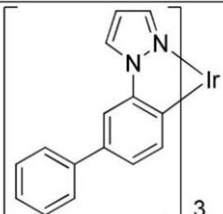
10

20

30

40

【表 A - 1 7】

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

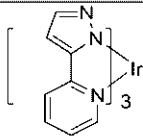
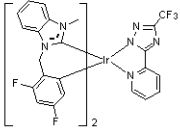
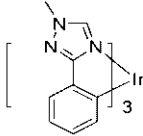
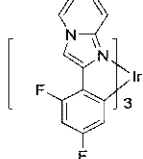
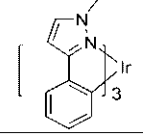
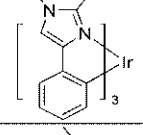
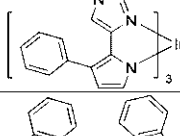
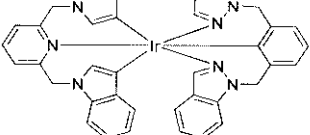
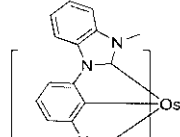
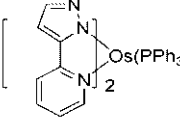
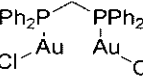
10

20

30

40

【表 A - 18】

		U S 2 0 0 2 0 1 3 4 9 8 4
		A n g r e w . C h e m . I n t . E d . 4 7 , 4 5 4 2 (2 0 0 8)
		C h e m . M a t e r . 1 8 , 5 1 1 9 (2 0 0 6)
		I n o r g . C h e m . 4 6 , 4 3 0 8 (2 0 0 7)
		W O 2 0 0 5 1 2 3 8 7 3
		W O 2 0 0 5 1 2 3 8 7 3
		W O 2 0 0 7 0 0 4 3 8 0
		W O 2 0 0 6 0 8 2 7 4 2
オスミウム (I I) 錯体		U S 7 2 7 9 7 0 4
		O r g a n o m e t a l l i c s 2 3 , 3 7 4 5 (2 0 0 4)
金錯体		A p p l . P h y s L e t t . 7 4 , 1 3 6 1 (1 9 9 9)

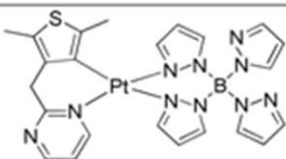
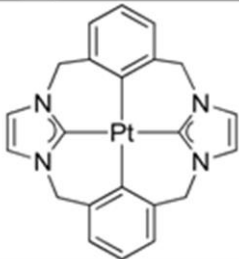
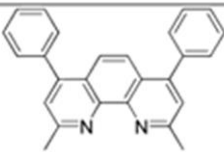
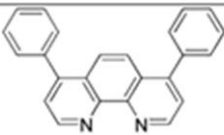
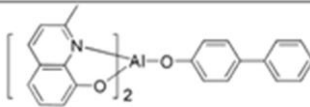
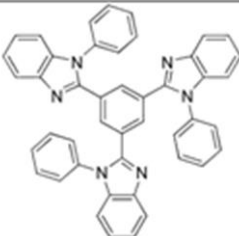
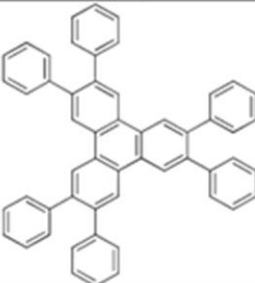
10

20

30

40

【表 A - 19】

白金 (I I) 錯体		WO 2 0 0 6 0 9 8 1 2 0 , WO 2 0 0 6 1 0 3 8 7 4
少なくとも 1 つの金属-カルベン結合を持つ Pt 四座錯体		US 7 6 5 5 3 2 3
励起子/正孔ブロッキング層材料		
バソクプロイン化合物 (例えば、BCP、BPhen)		App l . P h y s . L e t t . 7 5 , 4 (1 9 9 9)
		App l . P h y s . L e t t . 7 9 , 4 4 9 (2 0 0 1)
金属 8-ヒドロキシキノレート (例えば、BALq)		App l . P h y s . L e t t . 8 1 , 1 6 2 (2 0 0 2)
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		App l . P h y s . L e t t . 8 1 , 1 6 2 (2 0 0 2)
トリフェニレン化合物		US 2 0 0 5 0 0 2 5 9 9 3

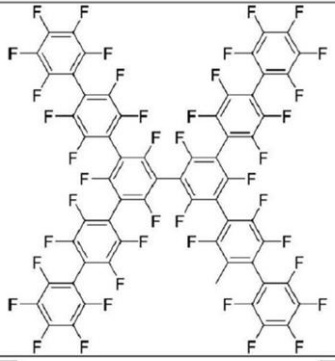
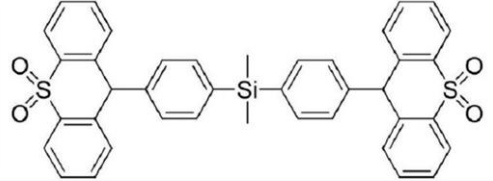
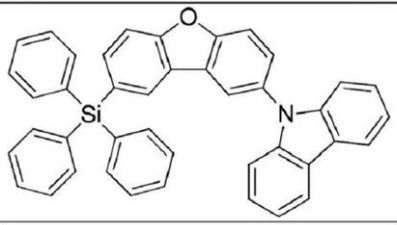
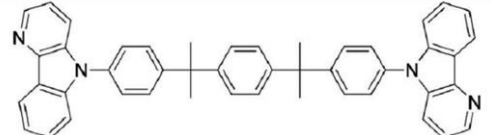
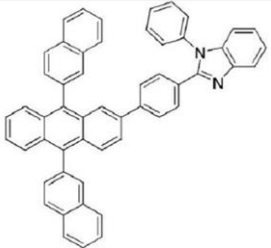
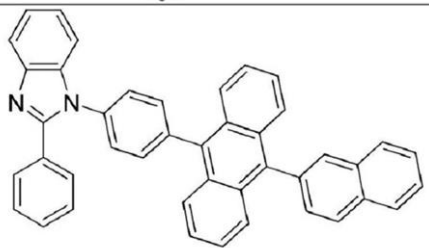
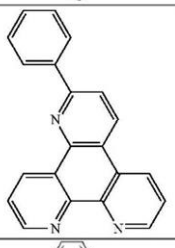
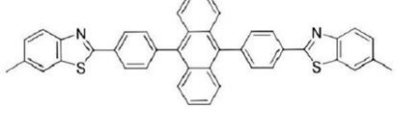
10

20

30

40

【表 A - 20】

フッ素化芳香族化合物		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)
フェノチアジーン-S-オキシド		WO 2008 132085
シリル化された5員の窒素、酸素、硫黄又はリンジベンゾ複素環		WO 2010 079051
アザーカルバゾール		US 2006 0121308
電子輸送材料		
アントラセナーベンゾイミダゾール化合物		WO 2003 060956
		US 2009 0179554
アザトリフェニレン誘導体		US 2009 0115316
アントラセナーベンゾチアゾール化合物		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)

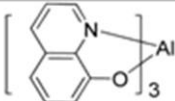
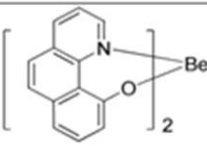
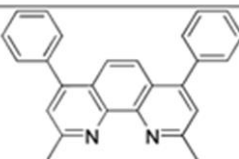
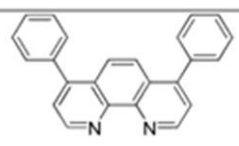
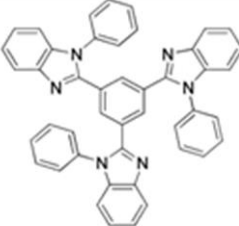
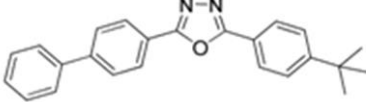
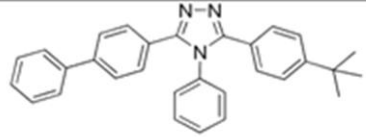
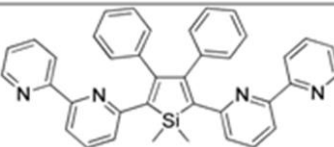
10

20

30

40

【表 A - 2 1】

金属 8-ヒドロキシキノレート (例えば、 Alq_3 、 $Zr q_4$)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987) US 7 230 107
金属ヒドロキシベノキノレート (hydroxybenoquinolates)		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
BCP、BPhen等のバソクブロン化合物		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)
		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)

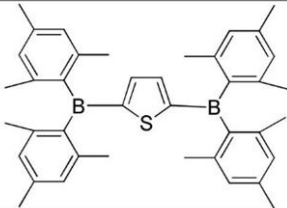
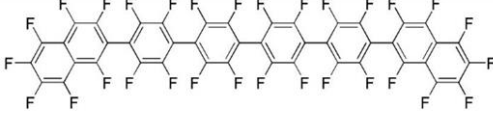
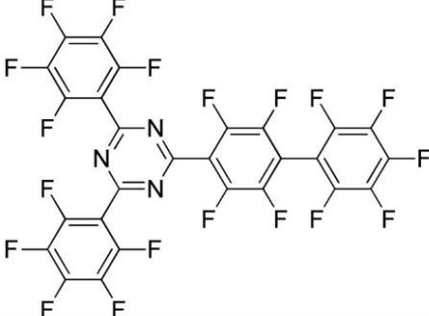
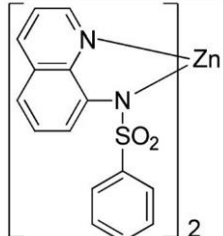
10

20

30

40

【表 A - 2 2】

アリールボラン化合物		J . A m . C h e m . S o c . 1 2 0 , 9 7 1 4 (1 9 9 8)
フッ素化芳香族化合物		J . A m . C h e m . S o c . 1 2 2 , 1 8 3 2 (2 0 0 0)
フラーレン（例えば、C 6 0）		U S 2 0 0 9 0 1 0 1 8 7 0
トリアジン錯体		U S 2 0 0 4 0 0 3 6 0 7 7
Zn (N ^ N) 錯体		U S 6 5 2 8 1 8 7

【実施例】

【0121】

デバイス実施例

【0122】

実施例デバイスはいずれも高真空下（ $< 10^{-7}$ Torr）における熱蒸着で作製した。アノード電極は、1200 の酸化インジウムスズ（ITO）であった。カソードは、10 のLiFと、1,000のAlとからなった。デバイはいずれも、作製後直ちに、窒素グローブボックス（ H_2O 及び O_2 は、 < 1 ppm）中で、エポキシ樹脂で封止したガラス製の蓋で封入し、水分ゲッターをパッケージに入れた。デバイス実施例の有機積層体は、ITO表面から順に、正孔注入層（HIL）として100のLG101（LG chemから購入）と；正孔輸送層（HTL）として400の4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ピフェニル（NPD）と；ホストとして化合物H（79%）、安定ドーパント（SD）（18%）、及び発光体として化合物453、化合物781、又は化合物699を含む300の発光層（EML）と；ブロッキング層として100の化合物Hと；及びETLとして450のAlq₃（トリス-8-ヒドロキシキノリンアルミニウム）とからなった。発光体は、所望の色を提供するために選ばれ、安定ドーパント（SD）は、電子輸送ホスト及び発光体と混合し、発光層中で正荷電

10

20

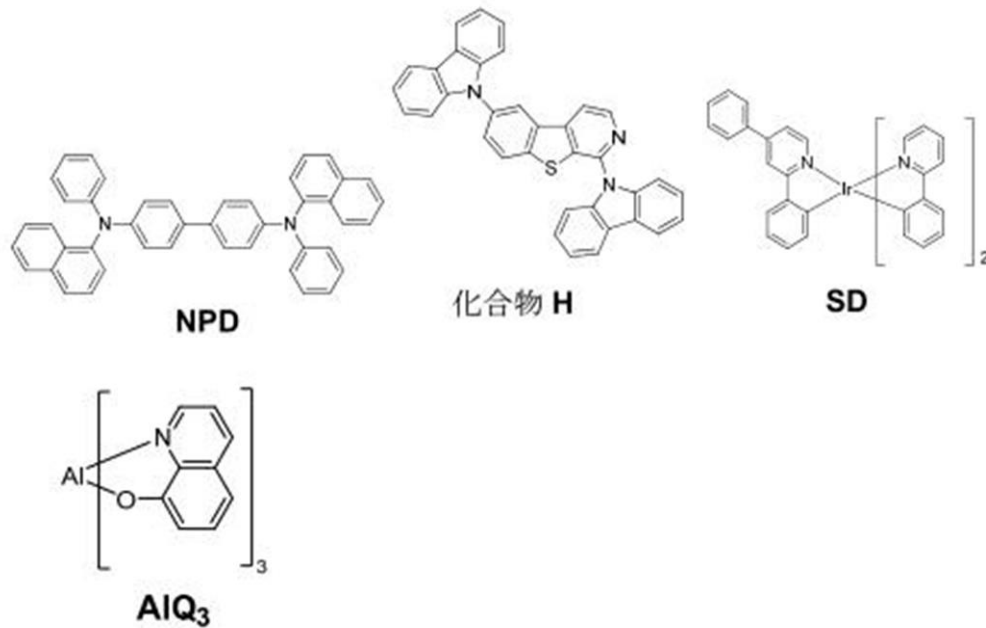
30

40

50

を輸送することを助ける。EML中の発光体として比較化合物1を使用した以外は、比較例デバイスは、デバイス実施例と同様に作製した。表1は、デバイス中のEMLの組成を表し、デバイス結果及びデータは表2にまとめた。本明細書では、NPD、化合物H、SD、及びAlQ₃は、下記の構造で表される。

【化46】

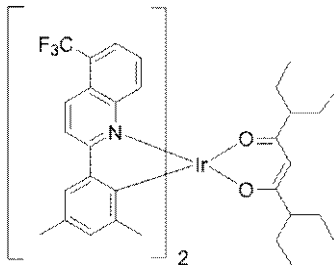


【0123】

比較例

実験で使用された比較化合物1は、下記の構造で表される。

【化47】



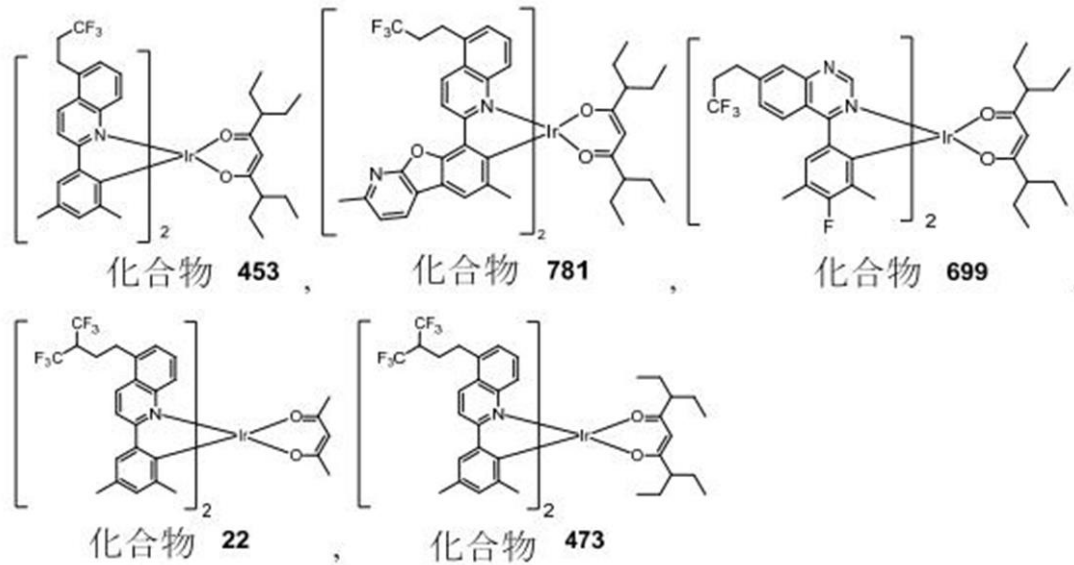
比較化合物1

【0124】

発明化合物：

実験で使用された代表的な発明化合物である化合物453、化合物781、化合物699、化合物22、及び化合物473は、下記の構造で表される。

【化 4 8】



【 0 1 2 5】

下記表 1 は、実験デバイスにおける E M L 層中の発光ドーパントとして使用された化合物の一覧である。

【表 1】

実施例	発光体
発明デバイス実施例 1	化合物453
発明デバイス実施例 2	化合物781
発明デバイス実施例 3	化合物699
発明デバイス実施例 4	化合物22
発明デバイス実施例 5	化合物473
比較デバイス例 1	比較化合物1

【 0 1 2 6】

下記表 2 は、発明デバイス実施例 1、2、3、4、及び 5、並びに比較デバイス例 1 のデバイス性能データを提供する。

【表 2】

	1931 CIE		$\lambda_{\max}$ [nm]	1,000ニト における EQE [cd/A]	1,000ニト における LT _{95%} [h]
	X	y			
発明デバイス 実施例 1	0.65	0.35	620	1.74	8.55
発明デバイス 実施例 2	0.64	0.36	614	1.74	9.09
発明デバイス 実施例 3	0.66	0.34	618	1.82	5.73
発明デバイス 実施例 4	0.65	0.35	627	1.64	1.53
発明デバイス 実施例 5	0.65	0.35	624	1.80	1.54
比較例1	0.66	0.34	644	1.00	1.00

【 0 1 2 7】

表 2 は、実験デバイスの性能をまとめる。1931 CIE 値を 10 mA / cm² で測定した。発光効率を 1000 cd / m² で測定した。比較例 1 の EQE 及び LT₉₅% は、1.00 の値とした。発明実施例から得られた値は、比較例から得られた値に対する相対値である。発明デバイス実施例のいずれも、比較例 1 よりもより高い外部量子効率 (EQE) を示す (1.74、1.74、1.82、1.64、及び 1.80 対 1.00)。発明化合物である化合物 453、781、699、22、及び 473 (発明デバイス実施例 1、2、3、4、及び 5) の 1,000 ニトにおける、LT₉₅% で表される寿命も、比較化合物 1 (比較例 1) の寿命よりもより安定していた (8.55、9.09、5.73、1.53、及び 1.54 対 1.00)。

【0128】

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。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0129】

【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

【符号の説明】

【0130】

100 有機発光デバイス

110 基板

115 アノード

120 正孔注入層

125 正孔輸送層

130 電子ブロッキング層

135 発光層

140 正孔ブロッキング層

145 電子輸送層

150 電子注入層

155 保護層

160 カソード

162 第一の導電層

164 第二の導電層

200 反転させた OLED、デバイス

210 基板

215 カソード

220 発光層

225 正孔輸送層

230 アノード

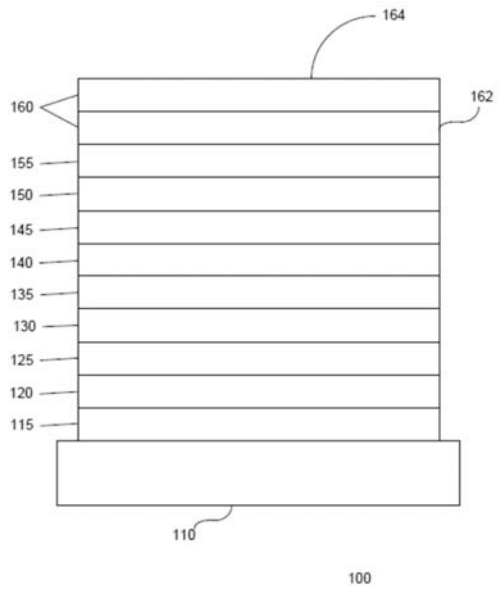
10

20

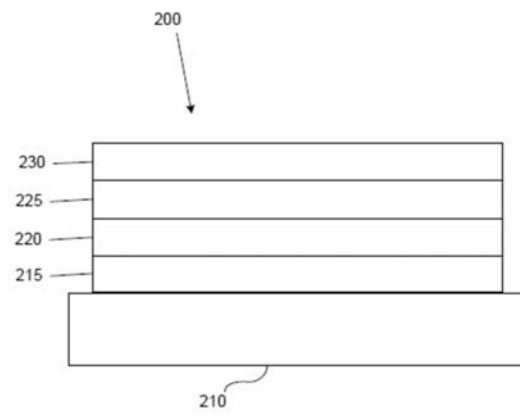
30

40

【 図 1 】



【 図 2 】



フロントページの続き

(72)発明者 ピエール・ルク・ティー・ブードロー

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 ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション内

(72)発明者 ウォルター・イエーガー

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 ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション内

(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 ユニバーサル ディスプレイ コーポレーション内

F ターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 BB03 CC04 CC21 DD64 DD67

专利名称(译)	有机电致发光材料和器件		
公开(公告)号	JP2016076696A	公开(公告)日	2016-05-12
申请号	JP2015190534	申请日	2015-09-29
[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		
[标]发明人	ピエールルクティーブードロー ウォルターイエーガー チュアンジュンシャ		
发明人	ピエール・ルク・ティーブードロー ウォルター・イエーガー チュアンジュン・シャ		
IPC分类号	H01L51/50 C09K11/06		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/0085 H01L51/5016 C07F15/0033 C09K2211/1007 C09K2211/1029 C09K2211/1033 C09K2211/1044 C09K2211/185 H01L51/5024 H01L51/5206 H01L51/5221		
FI分类号	H05B33/14.B C09K11/06.660		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/BB03 3K107/CC04 3K107/CC21 3K107/DD64 3K107/DD67		
代理人(译)	广田幸一 山下武		
优先权	14/509274 2014-10-08 US		
其他公开文献	JP6640509B2		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)	(21) 出願番号 特願2015-190534 (P2015-190534) (22) 出願日 平成27年9月29日 (2015. 9. 29) (31) 優先権主張番号 14/509, 274 (32) 優先日 平成26年10月8日 (2014. 10. 8) (33) 優先権主張国 米国 (US)	(71) 出願人 503055897 ユニバーサル ディスプレイ コーポレイション アメリカ合衆国、ニュージャージー、ユーイング、 フィリップス ブールバード 375 (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 (74) 代理人 100163038 弁理士 山下 武志
要解决的问题：提供一种用于有机发光器件的新型组合物，其具有良好的器件效率和良好的器件寿命。 A1。一种组合物，其包含在有机发光器件中用作磷光发射体的金属配合物，该金属配合物具有至少一个芳环和至少一个取代基R，以及取代基。 R选自部分氟化的烷基，部分氟化的环烷基及其组合，并直接键合至芳环，且具有F键合的C为C。 一种与芳香环隔开至少一个碳原子的组合物。 [选型图]图1	最終頁に続く	