

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5688098号
(P5688098)

(45) 発行日 平成27年3月25日 (2015.3.25)

(24) 登録日 平成27年1月30日 (2015.1.30)

(51) Int. Cl.

F I

H O 1 L 51/50 (2006.01)

H O 5 B 33/14 B

C O 9 K 11/06 (2006.01)

C O 9 K 11/06 6 6 0

C O 7 C 211/54 (2006.01)

C O 9 K 11/06 6 9 0

C O 7 C 211/59 (2006.01)

C O 7 C 211/54

C O 7 C 211/59

請求項の数 2 (全 59 頁)

(21) 出願番号 特願2012-546170 (P2012-546170)
 (86) (22) 出願日 平成22年12月21日 (2010.12.21)
 (65) 公表番号 特表2013-515380 (P2013-515380A)
 (43) 公表日 平成25年5月2日 (2013.5.2)
 (86) 国際出願番号 PCT/US2010/061672
 (87) 国際公開番号 W02011/087811
 (87) 国際公開日 平成23年7月21日 (2011.7.21)
 審査請求日 平成25年10月31日 (2013.10.31)
 (31) 優先権主張番号 12/643, 381
 (32) 優先日 平成21年12月21日 (2009.12.21)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)

(73) 特許権者 390023674
 イー・アイ・デュポン・ドウ・ヌムール・
 アンド・カンパニー
 E. I. DU PONT DE NEMO
 URS AND COMPANY
 アメリカ合衆国、デラウェア州、ウイルミ
 ントン、マーケット・ストリート 100
 7
 (74) 代理人 110001243
 特許業務法人 谷・阿部特許事務所
 (72) 発明者 マイケル ヘンリー ハワード ジュニア
 アメリカ合衆国 19710 デラウェア
 州 モンチャニン モンチャニン ロード
 908

最終頁に続く

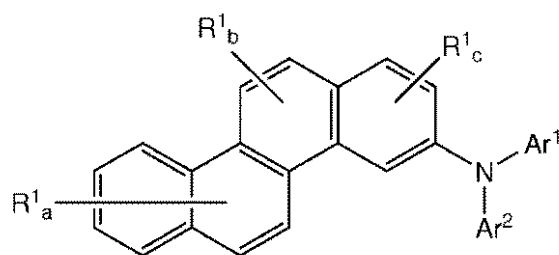
(54) 【発明の名称】 電気活性組成物、およびその組成物を用いて作製した電子デバイス

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

重水素化された第1のホスト物質とエレクトロルミネセンスドーパント物質とを含む電
 気活性組成物であって、前記第1のホスト物質が式ⅠⅠ：

【化 1】



式Ⅱ

〔式中：〕

R¹は、それぞれの出現において同一または異なっていて、D、アルキル、アルコキシ
 、シリル、シロキサンからなる群から選択される、あるいは隣接したR¹基は互いに結合
 して5または6員の脂肪族環を形成してもよく、

$A r^1$ および $A r^2$ は同一または異なっていて、アリール基であり、

a は0～6の整数であり；

b は0～2の整数であり；

c は0～3の整数である]

を有し、重水素化されている化合物である、電気活性組成物。

【請求項2】

2つの電気接触層とそれらの間の有機電気活性層を含む有機発光デバイスであって、前記電気活性層が：重水素化された第1のホスト物質とエレクトロルミネセンスドーパント物質とを含み、前記第1のホストが、請求項1に記載の化合物であり、前記電気活性層が、フェナントロリン類、キノキサリン類、フェニルピリジン類、ベンゾジフラン類、ジフ
10
ラノベンゼン類、インドロカルバゾール類、ベンゾイミダゾール類、トリアゾロピリジン類、ジヘテロアリールフェニル類、金属キノリネート錯体類、それらの置換誘導体、それらの重水素化類似体、およびそれらの組み合わせからなる群から選択される第2のホスト物質を任意選択的にさらに含む、有機発光デバイス。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本開示は、一般に、有機電子デバイス中で有用な電気活性組成物に関する。

【背景技術】

【0002】

OLEDディスプレイを構成する有機発光ダイオード（「OLED」）などの有機電気活性電子デバイス中では、OLEDディスプレイ中の2つの電気接触層の間に有機活性層が挟まれている。OLED中で、電気接触層に電圧を印加すると、有機活性層は光透過性の電気接触層を通して光を発する。

【0003】

発光ダイオードの活性成分として有機エレクトロルミネセンス化合物を使用することはよく知られている。単純な有機分子、共役ポリマー、および有機金属錯体が使用されている。

【0004】

電気活性物質を使用するデバイスは、多くの場合、電気活性（たとえば、発光）層と接触層（正孔注入接触層）との間に配置される1つまたは複数の電荷輸送層を含む。1つのデバイスは2つ以上の接触層を含むことができる。電気活性層と正孔注入接触層の間には正孔輸送層を配置することができる。正孔注入接触層は陽極と呼ばれる場合もある。電気活性層と電子注入接触層の間には電子輸送層を配置することができる。電子注入接触層は陰極と呼ばれる場合もある。電荷輸送物質は、電気活性物質とともにホストとして使用することもできる。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

電子デバイス用の新規の物質および組成物が引き続き必要とされている。

【課題を解決するための手段】

【0006】

重水素化された第1のホスト物質とエレクトロルミネセンスドーパント物質とを含む電気活性組成物であって、重水素化された第1のホスト物質が、式I：

【0007】

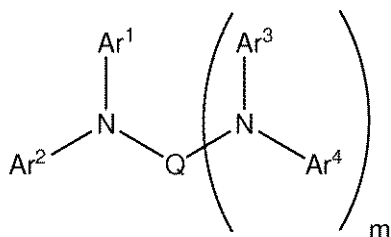
10

20

30

40

【化 1】



【 0 0 0 8 】

10

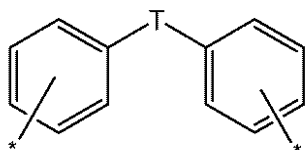
[式中：

Ar¹ ~ Ar⁴は同一または異なっていて、アリールであり；

Qは、多価アリール基、および

【 0 0 0 9 】

【化 2】



20

【 0 0 1 0 】

からなる群から選択され；

Tは、(CR')_a、SiR₂、S、SO₂、PR、PO、PO₂、BR、およびRからなる群から選択され；

Rは、それぞれの出現において同一または異なっていて、アルキル、およびアリールからなる群から選択され；

R'は、それぞれの出現において同一または異なっていて、H、D、およびアルキルからなる群から選択され；

aは1 ~ 6の整数であり；

mは0 ~ 6の整数である]

30

を有し、重水素化されている化合物である、電気活性組成物が提供される。

【 0 0 1 1 】

第2のホスト物質をさらに含む上記電気活性組成物も提供される。

【 0 0 1 2 】

2つの電気接触層とそれらの間の有機電気活性層とを含む有機電子デバイスであって、電気活性層が上述の電気活性組成物を含む有機電子デバイスも提供される。

【 0 0 1 3 】

以上の一般的説明および以下の詳細な説明は、単に例示的および説明的なものであり、添付の請求項において定義される本発明を限定するものではない。

40

【 0 0 1 4 】

本明細書で提示する概念がいっそう理解されるように添付図で実施形態を説明する。

【図面の簡単な説明】

【 0 0 1 5 】

【図 1】例示的な有機デバイスの説明図を含む。

【図 2】例示的な有機デバイスの説明図を含む。

【 0 0 1 6 】

図中の物体は、簡単にするためまた明快にするために例示されているのであり、必ずしも縮尺通り描かれてはいないことは、当業者なら理解することである。例えば、図中の一部の物体の大きさは、実施形態をいっそう理解するのを助けるために、他の物体との関係

50

で誇張されていることがある。

【発明を実施するための形態】

【0017】

多くの態様および実施形態が以上に記載されているが、それらは例示的なものであり、限定するものではない。本明細書を読めば、本発明の範囲から逸脱することなく他の態様および実施形態が可能であることが、当業者には理解されよう。

【0018】

実施形態のいずれか1つまたはそれ以上における他の特徴および利点は、以下の詳細な説明および請求項から明らかとなるであろう。詳細な説明では、最初に用語の定義と説明を扱い、その後、電気活性組成物、電子デバイス、そして最後に実施例を扱う。

10

【0019】

1. 用語の定義と説明

以下に説明する実施形態の詳細を扱う前に、一部の用語について定義または説明を行う。

【0020】

「アルキル」という用語は、脂肪族炭化水素に由来する基を意味することを意図する。実施形態によっては、アルキル基は1～20個の炭素原子を有する。

【0021】

「アリール」という用語は、芳香族炭化水素に由来する基を意味することを意図する。「芳香族化合物」という用語は、非局在パイ電子を有する少なくとも1つの不飽和環状基を含む有機化合物を意味することを意図する。この用語は、炭素原子および水素原子のみを有する芳香族化合物と、環状基中の1つまたは複数の炭素原子が窒素、酸素、硫黄などの別の原子で置換されている複素環式芳香族化合物との両方を含むことを意図する。実施形態によっては、アリール基は4～30個の炭素原子を有する。

20

【0022】

「電荷輸送」という用語は、層、物質、部材、または構造を表す場合、そのような層、物質、部材、または構造が、比較的効率的かつ少ない電荷損失で、そのような層、物質、部材、または構造の厚さを通してそのような電荷の移動を促進することを意味することを意図する。正孔輸送物質は正電荷を促進し；電子輸送物質は負電荷を促進する。発光物質も、ある程度の電荷輸送特性を有する場合があるが、「電荷を輸送する層、物質、部材、または構造」という用語は、主要な機能が発光である層、物質、部材、または構造を含むことを意図しない。

30

【0023】

「重水素化(されている)」という用語は、少なくとも1つの利用可能なHがDで置換されていることを意味することを意図する。「重水素化類似体」という用語は、1つまたは複数の利用可能な水素が重水素で置換されている化合物または基の構造類似体を意味する。重水素化化合物中または重水素化類似体中、重水素は、天然存在レベルの少なくとも100倍存在する。

【0024】

「ドーパント」という用語は、ホスト物質を含む層中で、その層の電子的特性、あるいは放射線の放出、受容、またはフィルタリングの目標波長を、そのような材料を含まない層の電子的特性、あるいは放射線の放出、受容、またはフィルタリングの波長に対して変化させる物質を意味することを意図する。

40

【0025】

「電氣的活性」という用語は、層または物質に言及している場合、デバイスの動作が電子的に促進される層または物質を指すことを意図する。電気活性物質の例としては、電荷の伝導、注入、輸送または遮断を行う物質(電荷は電子または正孔のいずれかでありうる)、または放射線を発するかまたは電子-正孔ペアの濃度の変化を示す(放射線を受けたとき)物質があるが、これらに限定されない。不活性物質の例としては、平坦化物質、絶縁物質、および環境障壁物質(environmental barrier mate

50

rials)があるが、これらに限定されない。

【0026】

「エレクトロルミネセンス」という用語は、物質を通過する電流に応答したその物質から光の放出を意味する。「エレクトロルミネセンスの」は、エレクトロルミネセンスが可能な物質を意味する。

【0027】

「発光極大」という用語は、発せられる放射線の最高強度を意味することを意図する。発光極大は、対応する波長を有する。

【0028】

「縮合アリール」という用語は、2つ以上の縮合芳香環を有するアリール基を意味する。

10

【0029】

「HOMO」という用語は、最高被占分子軌道を意味する。HOMOエネルギー準位は、図1Aに示されるように真空準位に対して測定される。慣例により、HOMOは負の値で与えられ、すなわち真空準位が0に設定され、束縛電子エネルギー準位はこれより深くなる。「より浅い」は、準位が真空準位により近いことを意味する。これは図1B中に示されており、HOMO BはHOMO Aよりも浅い。

【0030】

「ホスト物質」という用語は、ドーパントが加えられる場合も加えられない場合もある、通常は層の形態である物質を意味することを意図する。ホスト物質は、電子的特性、あるいは放射線を放出、受容、またはフィルタリングする能力を有する場合もあるいは有さない場合もある

20

【0031】

「層」という用語は、「膜」という用語と同義語的に使用され、目的の領域を覆うコーティングを表す。この用語は大きさによって限定されるものではない。この領域は、デバイス全体と同じくらい大きくても、あるいは実際の表示装置など特定の機能領域と同じくらい小さくても、あるいは単一のサブピクセルと同じくらい小さくても構わない。層および膜は、蒸着、液体付着（連続技法および不連続技法）、および熱転写を含め、従来の任意の付着技法で形成できる。連続付着技法としては、スピンコーティング、グラビアコーティング、カーテンコーティング、浸漬被覆、スロットダイコーティング(slot-die coating)、吹付け塗り、および連続ノズルコーティングがあるが、これらに限定されない。不連続付着技法としては、インクジェット印刷、グラビア印刷、およびスクリーン印刷があるが、これらに限定されない。

30

【0032】

「LUMO」という用語は、最低空分子軌道を意味する。LUMOエネルギー準位は、図1A中に示されるように、真空準位に対してeVの単位で測定される。慣例により、LUMOは負の値であり、すなわち真空準位が0に設定され、束縛電子エネルギー準位はこれより深くなる。「より深い」準位では、真空準位からさらに遠くにはなされている。これは図1B中に示されており、LUMO BはLUMO Aよりも深い。

【0033】

「有機電子デバイス」またはときにはただの「電子デバイス」という用語は、1種または複数種の有機半導体活性層または有機半導体活性物質を含むデバイスを意味することを意図する。

40

【0034】

「シリル」という用語は、 $-SiR_3$ 基[ここで、Rは、それぞれの出現において同一または異なっていて、アルキル基、およびアリール基からなる群から選択される]を意味する。

【0035】

「Tg」という用語は、物質のガラス転移温度を意味する。

【0036】

50

「三重項エネルギー」という用語は、 eV の単位での物質の最低励起三重項状態を意味する。三重項エネルギーは、正の数で報告され、通常は一重項状態である基底状態の上の三重項状態のエネルギーを表す。

【0037】

特に記載のない限り、すべての基は置換されていても非置換であってもよい。特に記載のない限り、すべての基は、可能であれば、直鎖状、分枝状、または環状であってもよい。実施形態によっては、置換基は、アルキル、アルコキシ、アリール、およびシリルからなる群から選択される。

【0038】

本明細書で使用される「含んでなる」、「含んでなること」、「含む」、「含むこと」、「有する」、「有すること」という用語、またはそれらの他のあらゆる変形は、非排他的な包含を扱うことを意図する。例えば、ある一連の要素を含むプロセス、方法、物品、または装置は、それらの要素にのみに必ずしも限定されるわけではなく、そのようなプロセス、方法、物品、または装置に関して明示されず固有のものでもない他の要素を含むことができる。さらに、反対の意味で明記されない限り、「または」は、包含的なまたはを意味するのであって、排他的なまたはを意味するのではない。例えば、条件AまたはBが満たされるのは、Aが真であり（または存在し）Bが偽である（または存在しない）、Aが偽であり（または存在せず）Bが真である（または存在する）、ならびにAおよびBの両方が真である（または存在する）のいずれか1つによってである。

【0039】

また、本明細書に記載する要素および成分を説明するために「a」または「an」が使用される。これは単に便宜的なものであり、本発明の範囲の一般的な意味を提供するために行われている。この記述は、1つまたは少なくとも1つを含むものと読むべきであり、明らかに他の意味となる場合を除けば、単数形は複数形をも含んでいる。

【0040】

元素周期表中の縦列に対応する族の番号は、CRC Handbook of Chemistry and Physics, 81st Edition (2000-2001)に見ることができる「新表記法」(New Notation)の規則を使用している。

【0041】

特に定義されていない限り、本明細書に用いられている技術用語および科学用語はすべて、本発明が関係する技術分野の当業者が一般的に理解するのと同じ意味を有する。本明細書に記載する方法および物質と同様または同等の方法および物質を本発明の実施または試験に使用できるが、好適な方法および物質を以下に記載しておく。本明細書で挙げる刊行物、特許出願、特許、および他の文献はすべて、特定の節が引用される場合を除けば、それらの記載内容全体が援用される。矛盾が生じる場合には、定義を含めて本明細書に従うものとする。さらに、そうした物質、方法、および実施例は例示にすぎず、限定することを意図するものではない。

【0042】

本明細書に記載されていない程度の、具体的な物質、処理行為、および回路に関する多くの詳細は従来通りであり、それらについては、有機発光ダイオードディスプレイ、光検出器、光電池、および半導体要素の技術分野の教科書およびその他の情報源中に見ることができる。

【0043】

2. 電気活性組成物

本明細書に記載の電気活性組成物は、重水素化された第1のホスト物質とエレクトロルミネセンスドーパント物質とを含み、重水素化された第1のホスト物質は式I：

【0044】

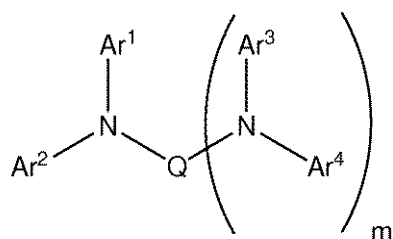
10

20

30

40

【化 3】



【 0 0 4 5 】

10

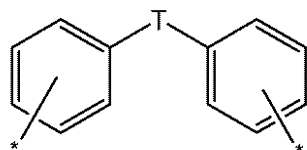
[式中：

Ar¹ ~ Ar⁴は同一または異なっていて、アリールであり；

Qは、多価アリール基、および

【 0 0 4 6 】

【化 4】



20

【 0 0 4 7 】

からなる群から選択され；

Tは、(CR')_a、SiR₂、S、SO₂、PR、PO、PO₂、BR、およびRからなる群から選択され；

Rは、それぞれの出現において同一または異なっていて、アルキル、およびアリールからなる群から選択され；

R'は、それぞれの出現において同一または異なっていて、H、D、およびアルキルからなる群から選択され；

aは1 ~ 6の整数であり；

mは0 ~ 6の整数である]

30

を有する化合物であり、この化合物は重水素化されている。

【 0 0 4 8 】

実施形態によっては、重水素化されたホスト物質は、トルエンに対する溶解度が少なくとも0.6重量%である。実施形態によっては、トルエンに対する溶解度は少なくとも1重量%である。

【 0 0 4 9 】

実施形態によっては、重水素化された第1のホスト物質は95°を超えるT_gを有する。

【 0 0 5 0 】

40

実施形態によっては、電気活性組成物は第2のホスト物質をさらに含む。実施形態によっては、一方のホスト物質が正孔輸送物質であり、他方のホスト物質が電子輸送物質である。実施形態によっては、第1の重水素化されたホストが正孔輸送物質である。実施形態によっては、第1の重水素化されたホストが電子輸送物質である。実施形態によっては、第2のホスト物質は重水素化されている。

【 0 0 5 1 】

実施形態によっては、一方のホスト物質が-5.6 eVまたはそれより浅いHOMOエネルギー準位を有し、他方のホスト物質が-2.0 eVよりも深いLUMOを有する。実施形態によっては、第1の重水素化されたホスト物質は、-5.6 eVまたはそれより浅いHOMOエネルギー準位を有する。実施形態によっては、第1の重水素化されたホスト

50

物質は - 2 . 0 e V よりも深い L U M O を有する。H O M O エネルギー準位の測定方法は、十分に知られており理解されている。実施形態によっては、準位は紫外光電子分光法 (「U P S」) によって測定される。実施形態によっては、H O M O は - 5 . 0 ~ - 5 . 6 e V の間である。L U M O は逆光電子分光法 (「I P E S」) を使用して測定することができる。

【 0 0 5 2 】

実施形態によっては、第 1 のホスト物質対第 2 のホスト物質の重量比は 9 9 : 1 ~ 1 : 9 9 の範囲内である。実施形態によっては、この比は 9 9 : 1 ~ 1 . 5 : 1 の範囲内であり ; 実施形態によっては 1 9 : 1 ~ 2 : 1 の範囲内であり ; 実施形態によっては 9 : 1 ~ 2 . 3 : 1 の範囲内である。第 1 のホスト物質は第 2 のホスト物質とは異なる。

10

【 0 0 5 3 】

実施形態によっては、第 1 および第 2 のホスト物質のそれぞれは、トルエンに対する溶解度が少なくとも 0 . 6 重量 % である。実施形態によっては、溶解度は少なくとも 1 重量 % である。

【 0 0 5 4 】

実施形態によっては、全ホスト物質 (第 1 のホスト + 第 2 のホスト (存在する場合)) 対ドーパントの重量比は 5 : 1 ~ 2 5 : 1 の範囲内であり ; 実施形態によっては 1 0 : 1 ~ 2 0 : 1 の範囲内である。

【 0 0 5 5 】

実施形態によっては、電気活性組成物は、2 種類以上のエレクトロルミネセンスドーパント物質を含む。実施形態によっては、組成物は 3 種類のドーパントを含む。

20

【 0 0 5 6 】

実施形態によっては、電気活性組成物は、第 1 のホスト物質および 1 つまたは複数のドーパント物質から本質的になる。実施形態によっては、電気活性組成物は、上記のように定義され範囲が記載される第 1 のホスト物質、第 2 のホスト物質、および 1 つまたは複数のエレクトロルミネセンスドーパント物質から本質的になる。

【 0 0 5 7 】

本発明の組成物は、O L E D デバイス用の、溶液処理が可能な電気活性組成物として有用である。この結果得られるデバイスは、高い効率および長い寿命を有する。実施形態によっては、本発明の物質は、光起電力技術および T F T などのあらゆる印刷エレクトロニクス用途に有用である。

30

【 0 0 5 8 】

a . 重水素化された第 1 のホスト物質

第 1 のホスト物質は、式 I を有し、重水素化された物質である。実施形態によっては、第 1 のホストは少なくとも 1 0 % が重水素化されている。これは、H の少なくとも 1 0 % が D で置換されていることを意味する。実施形態によっては、第 1 のホストは少なくとも 2 0 % が重水素化されており ; 実施形態によっては、少なくとも 3 0 % が重水素化されており ; 実施形態によっては、少なくとも 4 0 % が重水素化されており ; 実施形態によっては、少なくとも 5 0 % が重水素化されており ; 実施形態によっては、少なくとも 6 0 % が重水素化されており ; 実施形態によっては、少なくとも 7 0 % が重水素化されており ; 実施形態によっては、少なくとも 8 0 % が重水素化されており ; 実施形態によっては、少なくとも 9 0 % が重水素化されており。実施形態によっては、ホストは 1 0 0 % が重水素化されている。

40

【 0 0 5 9 】

重水素化は、コア Q 部分の上、アリール基 A r ¹ ~ A r ⁴ の上、アリール基上の置換基上、またはそれらのあらゆる組み合わせの上で行うことができる。

【 0 0 6 0 】

式 I の実施形態によっては、少なくとも 1 つの D が、アリール環上の置換基上に存在する。実施形態によっては、この置換基はアルキルおよびアリールから選択される。

【 0 0 6 1 】

50

式 I の実施形態によっては、 $Ar^1 \sim Ar^4$ の少なくとも 1 つが重水素化アリールである。

【0062】

式 I の実施形態によっては、 $Ar^1 \sim Ar^4$ は少なくとも 10 % が重水素化されている。「% 重水素化されている」または「% 重水素化」は、パーセント値で表される重陽子の、水素 + 重陽子の合計に対する比を意味する。ジウテリウムは、同一または異なる Ar 基上に存在してよい。式 I の実施形態によっては、 $Ar^1 \sim Ar^4$ は少なくとも 20 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 30 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 40 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 50 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 60 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 70 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 80 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 90 % が重水素化されており；実施形態によっては、100 % が重水素化されている。

10

【0063】

式 I の実施形態によっては、隣接した Ar 基は、結合してカルバゾール等の環を形成する。式 I 中、「隣接した」は、複数の Ar 基が同じ N に結合していることを意味する。

【0064】

実施形態によっては、 $Ar^1 \sim Ar^4$ は独立して、フェニル、ビフェニル、ターフェニル、クアテルフェニル、ナフチル、フェナントリル、ナフチルフェニル、フェナントリルフェニル、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。5 ~ 10 個のフェニル環または重水素化フェニル環を有するクアテルフェニルよりも高次の類似体を使用することもできる。

20

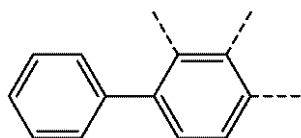
【0065】

上記の基は以下のように定義され、ここで破線は、可能性のある結合点を表している。

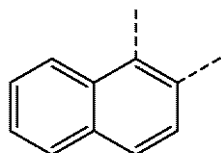
【0066】

【化 5】

ビフェニル：

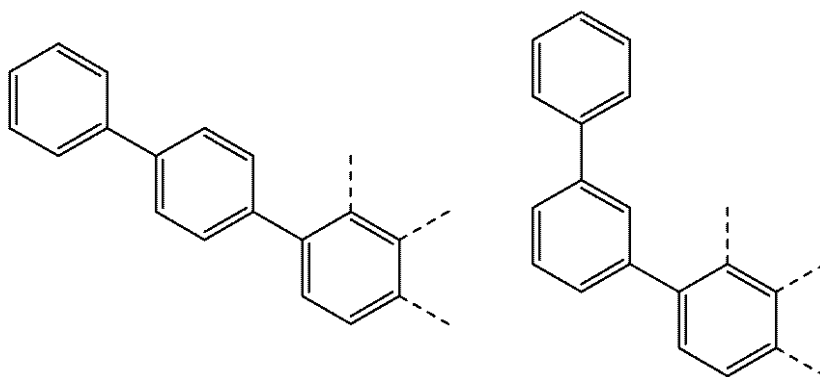


ナフチル：

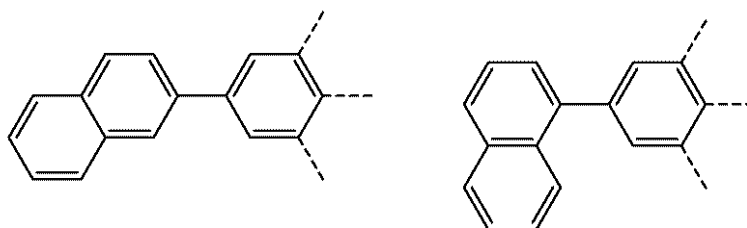


10

ターフェニル：

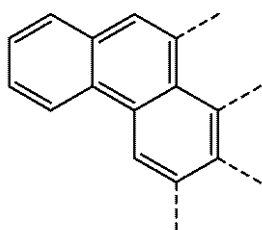


20

ナフチルイフェニル
(naphthylphenyl)：

30

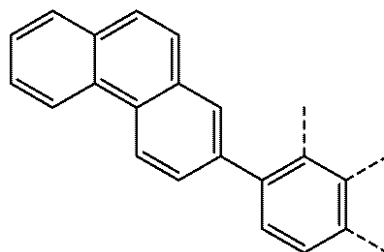
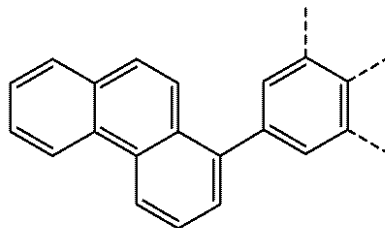
フェナントリル：



40

【化 6】

フェナントリルフェニル：



10

【 0 0 6 8 】

実施形態によっては、 $Ar^1 \sim Ar^4$ の少なくとも1つは、D以外の少なくとも1つの置換基を有する。置換基は、ホスト物質の物理的または電子的性質を変化させるために存在することができる。実施形態によっては、置換基によって、ホスト物質の加工性が改善される。実施形態によっては、置換基によって、ホスト物質の溶解性が増加し、および/またはTgが上昇する。実施形態によっては、置換基は、アルキル基、アルコキシ基、シリル基、それらの重水素化類似体、およびそれらの組み合わせからなる群から選択される。

20

【 0 0 6 9 】

実施形態によっては、Qは、少なくとも2つの縮合環を有するアリール基である。実施形態によっては、Qは、3～5個の縮合芳香環である。実施形態によっては、Qは、アントラセン類、クリセン類、ピレン類、フェナントレン類、トリフェニレン類、フェナントロリン類、ナフタレン類、アントラセン類、キノリン類、イソキノリン類、キノキサリン類、フェニルピリジン類、ジベンゾフラン類、ジフラノベンゼン類、インドロカルバゾール類、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

30

【 0 0 7 0 】

mは0～6の値を有することができるが、一部のQ基の場合、その基の化学的性質によってmの値が限定されることを理解されたい。実施形態によっては、mは0または1である。

【 0 0 7 1 】

式Iの実施形態によっては、 R' はフッ素化アルキル基である。実施形態によっては、 R' は、1～5個の炭素を有する過フッ素化アルキル基である。

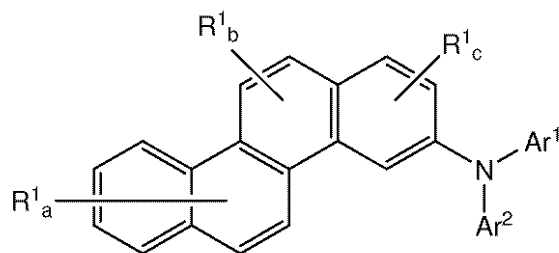
40

【 0 0 7 2 】

実施形態によっては、重水素化された第1のホスト物質は式II

【 0 0 7 3 】

【化 7】



式 II

10

【 0 0 7 4 】

[式中：

R^1 は、それぞれの出現において同一または異なっていて、D、アルキル、アルコキシ、シリル、シロキサンからなる群から選択される、あるいは隣接した R^1 基は互いに結合して5または6員の脂肪族環を形成してもよく、

$A r^1$ および $A r^2$ は同一または異なっていて、アリール基であり、

aは0～6の整数であり；

bは0～2の整数であり；

cは0～3の整数である]

20

を有する。

【 0 0 7 5 】

実施形態によっては、 R^1 がDであり、a、b、およびcの少なくとも1つが0を超える。実施形態によっては、 R^1 がDであり、a、b、およびcのすべてが0を超える。実施形態によっては R^1 がDであり、a = 5～6、b = 1～2、およびc = 2～3である。

【 0 0 7 6 】

実施形態によっては、少なくとも1つの R^1 が分枝状アルキル基である。実施形態によっては、分枝状アルキル基は、2 - プロピル基、t - ブチル基、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

30

【 0 0 7 7 】

実施形態によっては、 $A r^1$ および $A r^2$ は、D、アルキル、シリル、フェニル、ナフチル、N - カルバゾリル、フルオレニル、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される1つまたは複数の置換基を有するフェニル基である。

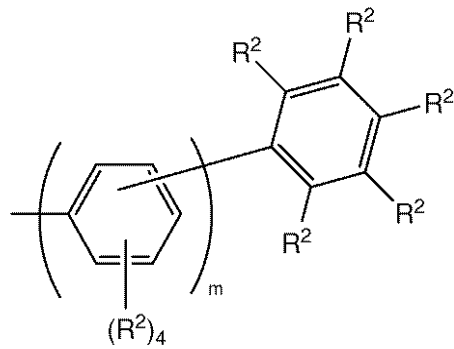
【 0 0 7 8 】

実施形態によっては、 $A r^1$ および $A r^2$ は、フェニル、ピフェニル、ナフチル、フェナントリル、アントラセニル、4 - ナフチルフェニル、4 - フェナントリルフェニル（ここで、以上の基はいずれも、D、アルキル基、シリル基、およびフェニルからなる群から選択される1つまたは複数の置換基でさらに置換されていてよい）、および式 I I I：

【 0 0 7 9 】

40

【化 8】



式 III

10

【 0 0 8 0 】

[式中：

R^2 は、それぞれの出現において同一または異なっていて、H、D、アルキル、アルコキシ、シロキサン、およびシリルからなる群から選択されるか、あるいは隣接した R^2 基は結合して芳香環を形成してもよく；

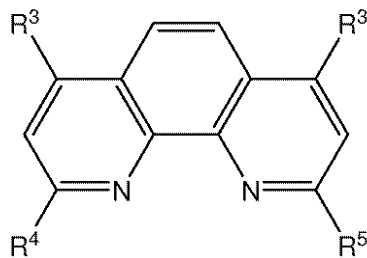
m は、それぞれの出現において同一または異なっていて、1～6の整数である]を有する基からなる群から選択される。

【 0 0 8 1 】

実施形態によっては、重水素化された第1のホスト物質は、式IV：

【 0 0 8 2 】

【化 9】



式 IV

30

【 0 0 8 3 】

[式中：

R^3 は同一または異なっていて、フェニル、ナフチル、ナフチルフェニル、トリフェニルアミノ、カルバゾリルフェニル、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択され；

R^4 および R^5 は同一または異なっていて、フェニル、ピフェニル、ナフチル、ナフチルフェニル、フェナントリル、トリフェニルアミノ、カルバゾリルフェニル、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される]

を有するフェナントロリン化合物である。

【 0 0 8 4 】

式IVの実施形態によっては、 $R^3 \sim R^5$ は、フェニル、置換フェニル、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

【 0 0 8 5 】

式IVの実施形態によっては、両方の R^3 がフェニルであり、 R^4 および R^5 は、2-ナフチル、ナフチルフェニル、フェナントリル、トリフェニルアミノ、m-カルバゾリルフェニル、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

【 0 0 8 6 】

上述していない基について、以下に定義するが、ここで破線は可能性のある結合点を表

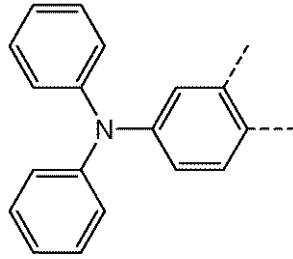
50

している。

【 0 0 8 7 】

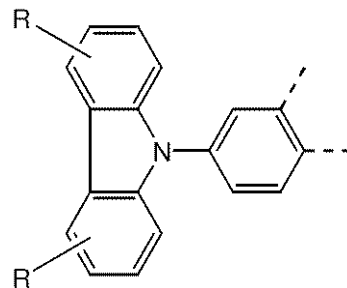
【 化 1 0 】

トリフェニルアミノ：



10

カルバゾリルフェニル：



[ここで R = アリール、アルキル]

20

【 0 0 8 8 】

実施形態によっては、フェナントロリン化合物は対称であり、両方の R^3 が同一であり、 $R^4 = R^5$ である。実施形態によっては、 $R^3 = R^4 = R^5$ である。実施形態によっては、フェナントロリン化合物は非対称であり、2つの R^3 基は同一であるが、 R^4 R^5 である；2つの R^3 基が異なり、 $R^4 = R^5$ である；または2つの R^3 基が異なり、 R^4 R^5 である。

【 0 0 8 9 】

実施形態によっては、 R^3 基は同一であり、フェニル、トリフェニルアミノ、カルバゾリルフェニル、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。実施形態によっては、 R^3 基は、p - トリフェニルアミノ（結合点が窒素に対しパラ位である）、m - カルバゾリルフェニル（結合点が窒素に対してメタ位である）、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

30

【 0 0 9 0 】

実施形態によっては、 $R^4 = R^5$ であり、トリフェニルアミノ、ナフチルフェニル、トリフェニルアミノ、m - カルバゾリルフェニル、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

【 0 0 9 1 】

実施形態によっては、第1のホスト物質は T_g が 95 を超える。高い T_g によって、平滑で丈夫な膜の形成が可能となる。通常、 T_g が測定される方法には、主として示差走査熱量測定（「DSC」）、および熱機械分析（「TMA」）の2つが存在する。実施形態によっては、 T_g はDSCによって測定される。実施形態によっては、 T_g は 100 ~ 150 の間である。

40

【 0 0 9 2 】

実施形態によっては、第1のホスト物質は 2.0 eV を超える三重項エネルギー準位を有する。このことは、発光の消光を防止するためにドープントが有機金属物質である場合に特に有用である。三重項エネルギーは、先験的に計算することができ、パルスラジオリシスまたは低温ルミネセンス分光法を使用して測定することもできる。

【 0 0 9 3 】

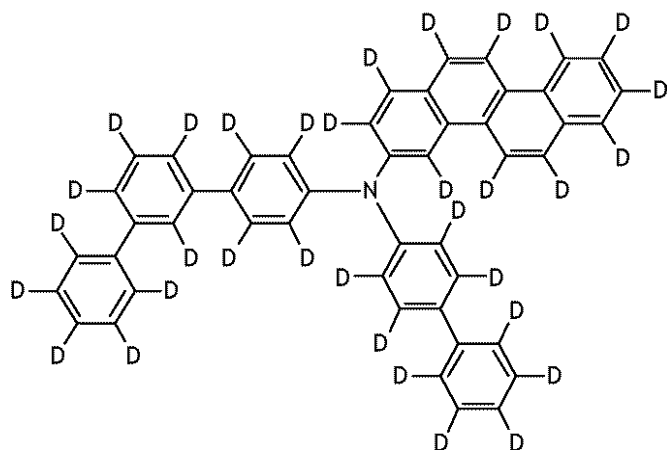
50

重水素化された第 1 のホスト物質の例としては、以下の化合物 A 1 ~ A 1 9 があるが、これらに限定されない。

【 0 0 9 4 】

【 化 1 1 】

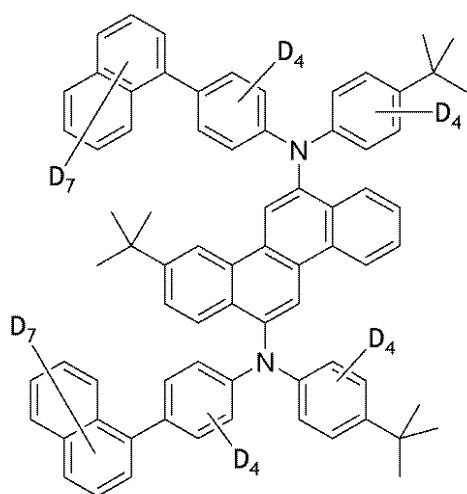
A1:



10

20

A2:



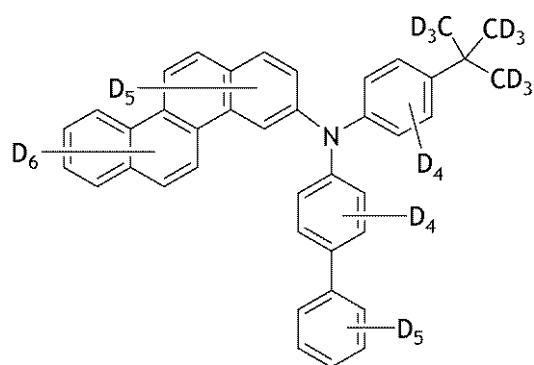
30

40

【 0 0 9 5 】

【化 1 2】

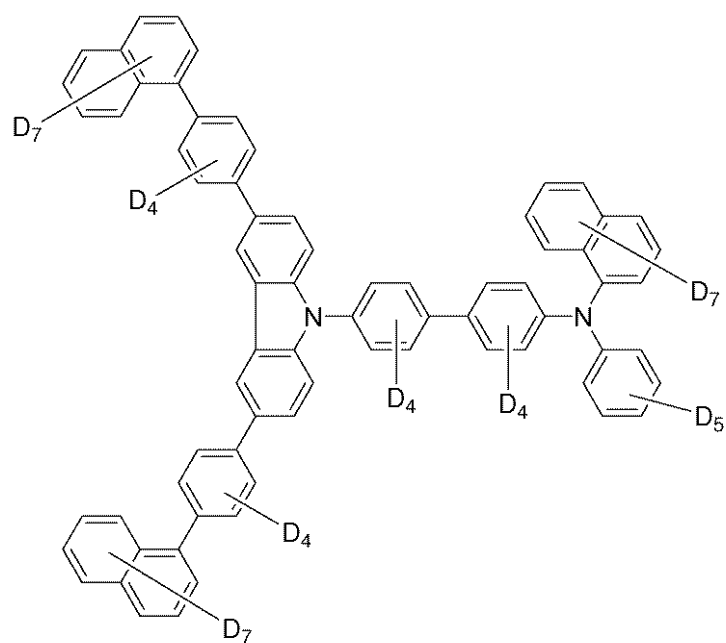
A3:



10

20

A4:



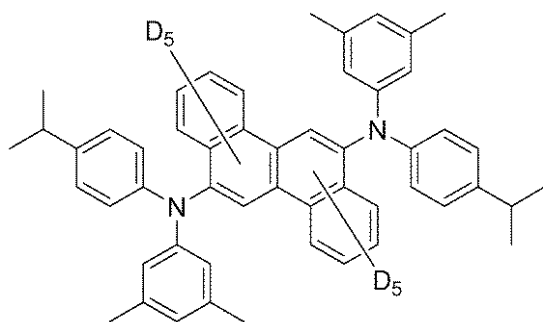
30

40

【 0 0 9 6 】

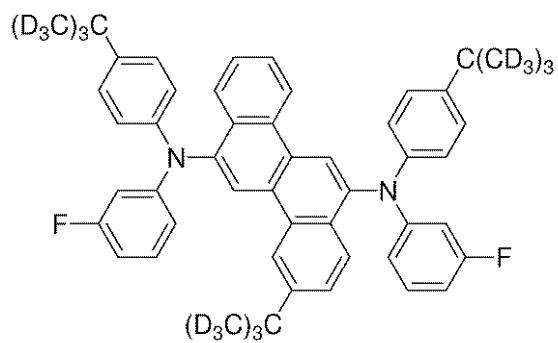
【化 1 3】

A5:



10

A6:



20

30

【 0 0 9 7 】

A7:



20

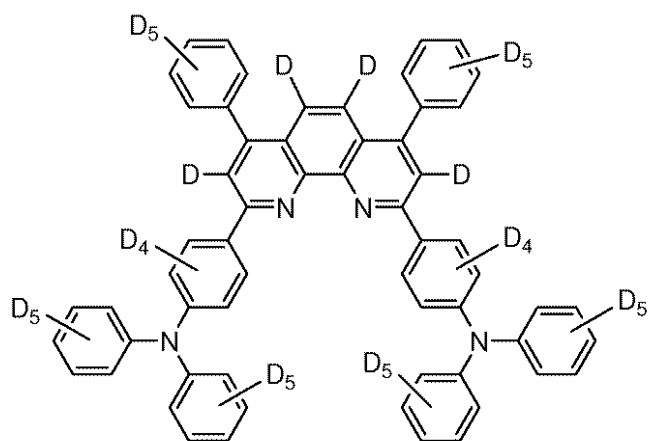
A8:



【 0 0 9 8 】

【化 1 5】

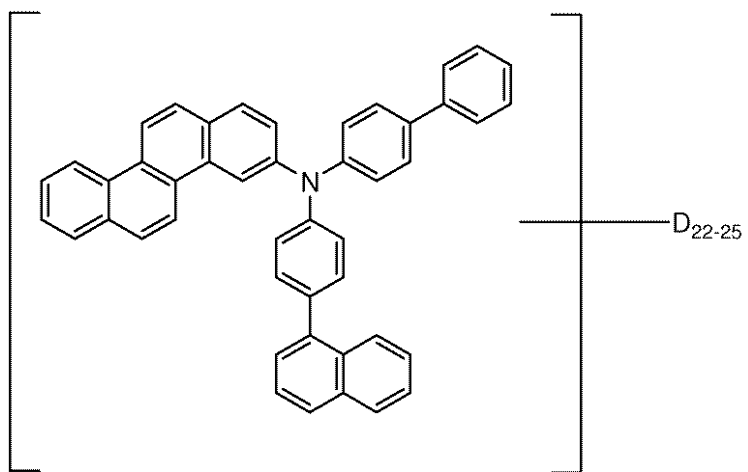
A9:



10

20

A10:

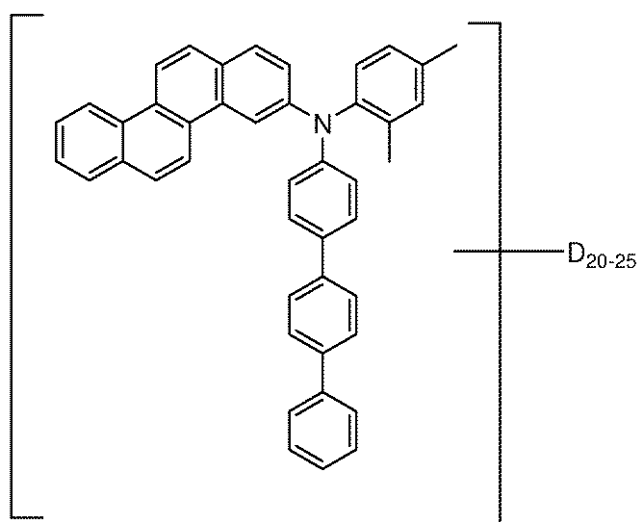


30

【 0 0 9 9 】

【化 1 6】

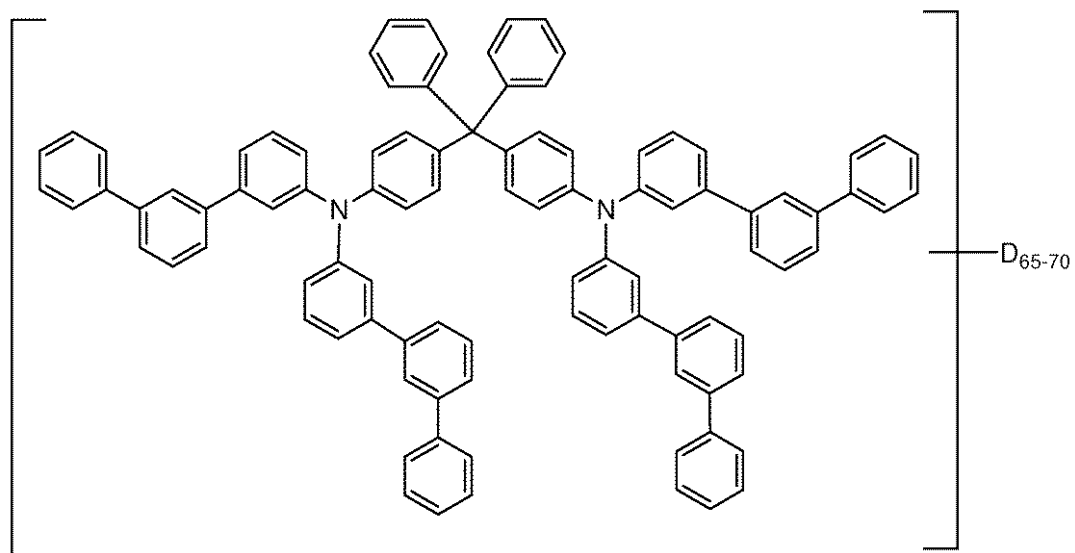
A11:



10

20

A12:



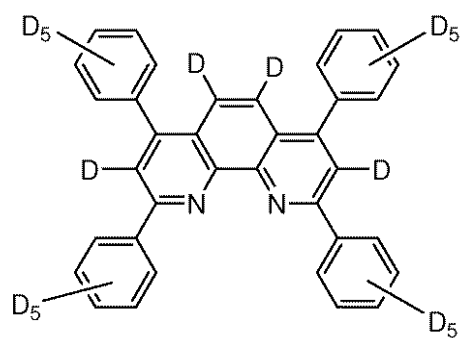
30

40

【 0 1 0 0 】

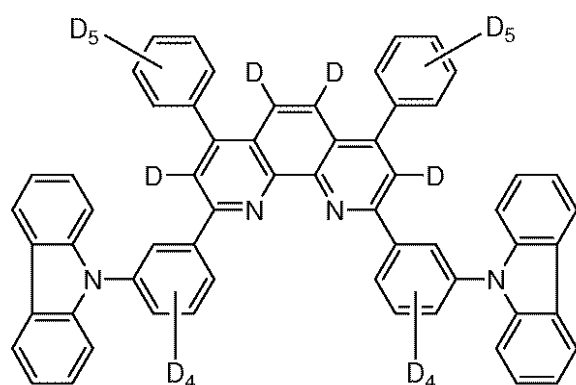
【化 1 7】

A13:



10

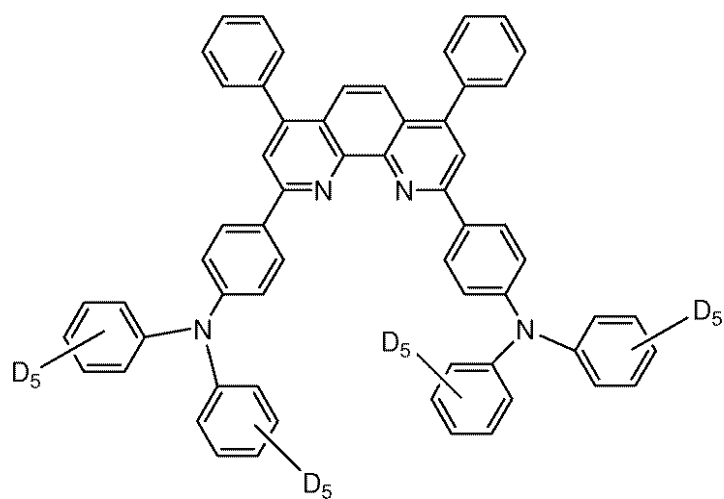
A14:



20

30

A15:



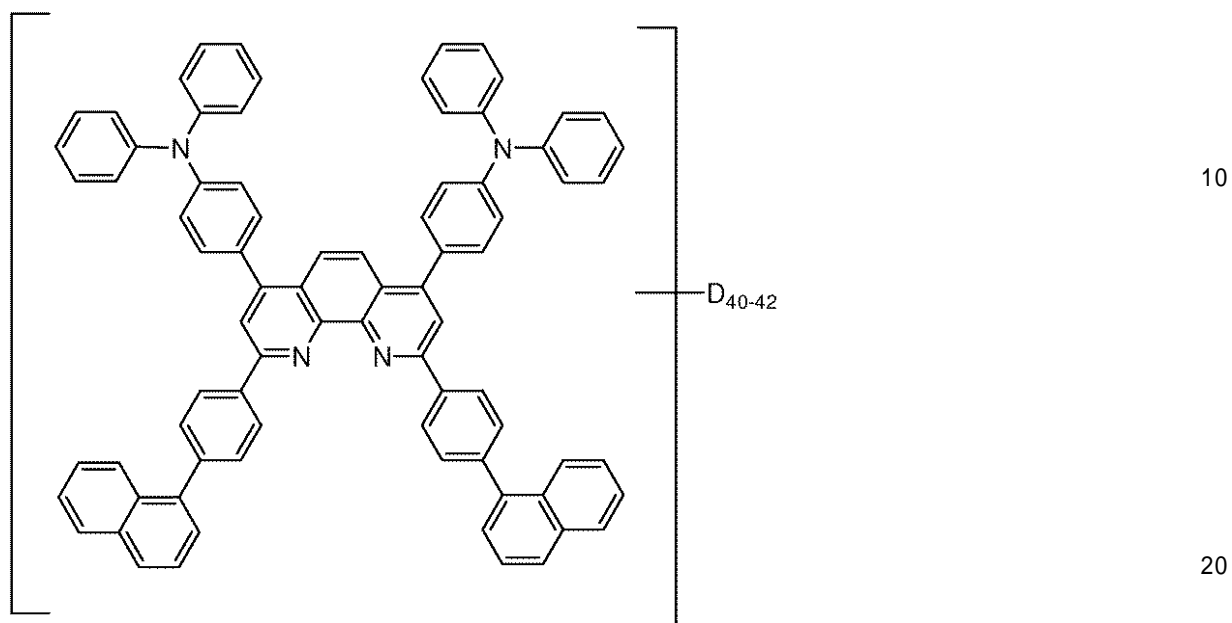
40

【 0 1 0 1 】

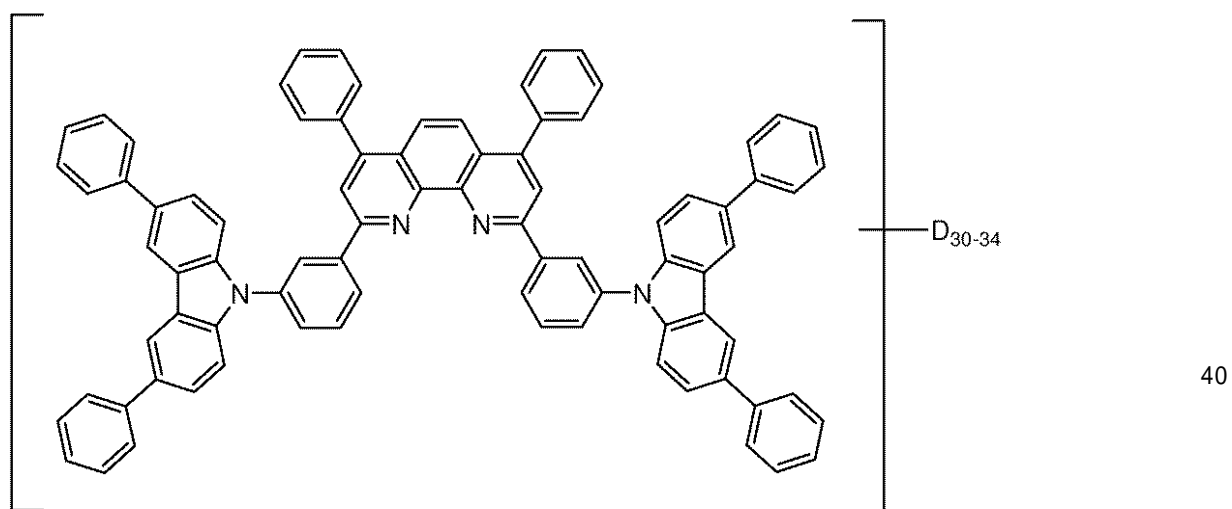
50

【化 1 8】

A16:



A17:



【0102】

第1のホスト化合物の非重水素化類似体は、周知のカップリング反応および置換反応で調製できる。実施形態によっては、フェナントロリンホスト化合物は、ジクロロフェナントロリンと所望の置換基のボロン酸類似体との鈴木カップリングで調製される。次いで新規の重水素化合物は、重水素化前駆体物質を使用した類似の方法で調製することができるか、あるいは、より一般的には、三塩化アルミニウムまたは塩化エチルアルミニウムなど

のルイス酸H/D交換触媒の存在下で非重水素化合物をd6-ベンゼンなどの重水素化溶媒で処理することによって、あるいは非重水素化合物をCF₃COOD、DCIなどの酸で処理することによって調製することができる。例示的な調製を実施例に示す。重水素化のレベルは、NMR分析によって、および大気圧固体分析プローブ質量分析(ASAP-MS)などの質量分析によって求めることができる。

【0103】

過重水素化または部分重水素化された芳香族化合物またはアルキル化合物の出発物質は、市販品供給元から購入できるか、または周知の方法を用いて得ることができる。そのような方法の幾つかの例は、a) "Efficient H/D Exchange Reactions of Alkyl-Substituted Benzene Derivatives by Means of the Pd/C-H₂-D₂O System" Hiro Yoshi Esaki, Fumiy Aoki, Miho Umemura, Masatsugu Kato, Tomohiro Maegawa, Yasunari Monguchi, and Hironao Sajiki Chem. Eur. J. 2007, 13, 4052-4063. b) "Aromatic H/D Exchange Reaction Catalyzed by Groups 5 and 6 Metal Chlorides" GUO, Qiao-Xia, SHEN, Bao-Jian; GUO, Hai-Qing TAKAHASHI, Tamotsu Chinese Journal of Chemistry, 2005, 23, 341-344; c) "A novel deuterium effect on dual charge-transfer and ligand-field emission of the cis-dichlorobis(2,2'-bipyridine)iridium(III)ion" Richard J. Watts, Shlomo Efrima, and Horia Metiu J. Am. Chem. Soc., 1979, 101(10), 2742-2743; d) "Efficient H-D Exchange of Aromatic Compounds in Near-Critical D₂O Catalysed by a Polymer-Supported Sulphonic Acid" Carmen Boix and Martyn Poliakov Tetrahedron Letters 40(1999)4433-4436; e) 米国特許第3849458号明細書; f) "Efficient C-H/C-D Exchange Reaction on the Alkyl Side Chain of Aromatic Compounds Using Heterogeneous Pd/C in D₂O" Hironao Sajiki, Fumiy Aoki, Hiro Yoshi Esaki, Tomohiro Maegawa, and Kosaku Hirota Org. Lett., 2004, 6(9), 1485-1487の中に見出すことができる。

【0104】

例示的な調製を実施例に示す。

本明細書に記載の化合物は、液体付着技法を用いて膜にすることができる。驚くべきことに、こうした化合物は、予想外にも類似の非重水素化合物と比べて非常に特性が向上している。本明細書に記載の化合物を持つ活性層を含んだ電子デバイスは、大幅に向上した寿命を持つ。加えて、デバイスの他の性質を犠牲にすることなく、寿命が増加する。実施形態によっては、寿命は、高い量子効率および良好な彩度とともに増加する。さらに、本明細書に記載の重水素化合物は、非重水素化類似体よりも空気耐性が高い。このため、物質の調製および精製と、物質を使用した電子デバイスの形成との両方での加工許容範囲(processing tolerance)を広げることができる。

【0105】

b. ドーパント物質

ドーパントは、380~750nmの間の発光極大を有するエレクトロルミネセンスが可能な電気活性物質である。実施形態によっては、ドーパントは赤色、緑色、または青色

の光を発する。実施形態によっては、ドーパントも重水素化されている。

【0106】

実施形態によっては、ドーパントは、少なくとも10%が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも20%が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも30%が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも40%が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも50%が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも60%が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも70%が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも80%が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも90%が重水素化されており；実施形態によっては、100%が重水素化されている。

10

【0107】

エレクトロルミネセンスドーパント物質としては、小分子有機ルミネセンス化合物、ルミネセンス金属錯体、およびそれらの組み合わせがある。小分子ルミネセンス化合物の例としては、ピレン、ペリレン、ルブレン、クマリン、それらの誘導体、およびそれらの混合物があるが、これらに限定されない。金属錯体の例としては、金属キレート化合物（トリス（8-ヒドロキシキノラト）アルミニウム（ALQ）など）；シクロメタレート化イリジウムおよび白金エレクトロルミネセンス化合物（イリジウムと、フェニルピリジン配位子、フェニルキノリン配位子、フェニルイソキノリン配位子、またはフェニルピリミジン配位子との錯体など）があるが、これらに限定されない。

【0108】

20

赤色発光物質の例としては、フェニルキノリン配位子またはフェニルイソキノリン配位子を有するIrのシクロメタレート化錯体、ペリフランテン類、フルオランテン類、およびペリレン類があるが、これらに限定されない。赤色発光物質は、例えば、米国特許第6,875,524号明細書、および米国特許出願公開第2005-0158577号明細書に開示されている。

【0109】

緑色発光物質の例としては、ビス（ジアリールアミノ）アントラセン類、およびポリフェニレンビニレンポリマー類があるが、これらに限定されない。緑色発光物質は、たとえば、国際公開第2007/021117号パンフレットに開示されている。

【0110】

30

青色発光物質の例としては、ジアリールアントラセン類、ジアミノクリセン類、ジアミノピレン類、およびポリフルオレンポリマー類があるが、これらに限定されない。青色発光物質は、たとえば、米国特許第6,875,524号明細書、ならびに米国特許出願公開第2007-0292713号明細書および米国特許出願公開第2007-0063638号明細書に開示されている。

【0111】

実施形態によっては、ドーパントは有機金属錯体である。実施形態によっては、ドーパントは、イリジウムまたは白金のシクロメタレート化錯体である。このような材料は、たとえば、米国特許第6,670,645号明細書、ならびに国際公開第03/063555号パンフレット、国際公開第2004/016710号パンフレット、および国際公開第03/040257号パンフレットに開示されている。

40

【0112】

実施形態によっては、ドーパントは、式 $\text{Ir}(\text{L}1)_a(\text{L}2)_b(\text{L}3)_c$ [式中、
L1は、炭素および窒素を介して配位するモノアニオン性二座シクロメタレート化配位子であり；

L2は、炭素を介しては配位しないモノアニオン性二座配位子であり；

L3は単座配位子であり；

aは1～3であり；

bおよびcは独立して0～2であり；

a、b、およびcは、イリジウムが六配位となり、錯体が電氣的に中性となるように選

50

択される]

を有する有機金属錯体である。

式の一部の例としては、 $\text{Ir}(\text{L}1)_3$; $\text{Ir}(\text{L}1)_2(\text{L}2)$; および $\text{Ir}(\text{L}1)_2(\text{L}3)(\text{L}3')$ [ここで、 $\text{L}3$ はアニオン性であり、 $\text{L}3'$ は非イオン性である] があるが、これらに限定されない。

【0113】

$\text{L}1$ 配位子の例としては、フェニルピリジン類、フェニルキノリン類、フェニルピリミジン類、フェニルピラゾール類、チエニルピリジン類、チエニルキノリン類、およびチエニルピリミジン類、および重水素化された類似体があるが、これらに限定されない。本明細書において使用される場合、反対の意味で明記されない限り、用語「キノリン類」は「イソキノリン類」を含んでいる。フッ素化誘導体は、1つまたは複数のフッ素置換基を有することができる。実施形態によっては、配位子の非窒素環上に1～3個のフッ素置換基が存在する。

10

【0114】

モノアニオン性二座配位子 $\text{L}2$ は、金属配位化学の分野においては周知である。一般に、これらの配位子は、N、O、P、またはSを配位原子として有し、イリジウムに配位すると5または6員環を形成する。好適な配位基としては、アミノ、イミノ、アミド、アルコキシド、カルボキシレート、ホスフィノ、チオレートなどがある。これらの配位子の好適な親化合物の例としては、 β -ジカルボニル類 (β -エノラート配位子)、ならびにそれらのNおよびS類似体; アミノカルボン酸類 (アミノカルボキシレート配位子); ピリジンカルボン酸類 (イミノカルボキシレート配位子); サリチル酸誘導体類 (サリチレート配位子); ヒドロキシキノリン類 (ヒドロキシキノリネート配位子) およびそれらのS類似体; ホスフィノアルカノール類 (ホスフィノアルコキシド配位子); ならびにそれらの重水素化類似体がある。

20

【0115】

単座配位子 $\text{L}3$ は、アニオン性または非イオン性であってよい。アニオン性配位子としては、 H^- (「水素化物」)、ならびに配位原子としてC、O、またはSを有する配位子があるが、これらに限定されない。配位基としては、アルコキシド、カルボキシレート、チオカルボキシレート、ジチオカルボキシレート、スルホネート、チオレート、カルバメート、ジチオカルバメート、チオカルバゾン陰イオン、スルホンアミド陰イオン、それらの重水素化類似体などがあるが、これらに限定されない。場合によっては、 β -エノラート類およびホスフィノアルコキシド類などの $\text{L}2$ として上述した配位子が、単座配位子として機能する場合がある。単座配位子は、ハライド、シアニド、イソシアニド、ニトレート、サルフェート、ヘキサハロアンチモネートなどの配位陰イオンであってもよい。これらの配位子は一般に市販されている。

30

【0116】

単座 $\text{L}3$ 配位子は、COまたは単座ホスフィン配位子などの非イオン性配位子であってもよい。

【0117】

実施形態によっては、1つまたは複数の配位子は、Fおよびフッ素化アルキルからなる群から選択される少なくとも1つの置換基を有する。

40

【0118】

イリジウム錯体ドーパントは、例えば、米国特許第6,670,645号明細書に記載されるような標準的合成技法を使用して調製することができる。

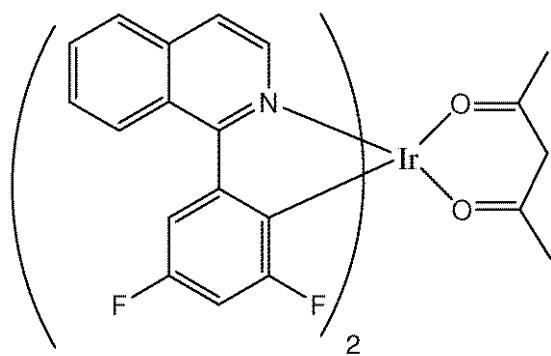
【0119】

実施形態によっては、ドーパントは赤色発光有機金属化合物である。赤色ドーパントの一部の非限定例は以下の化合物D1～D7である。

【0120】

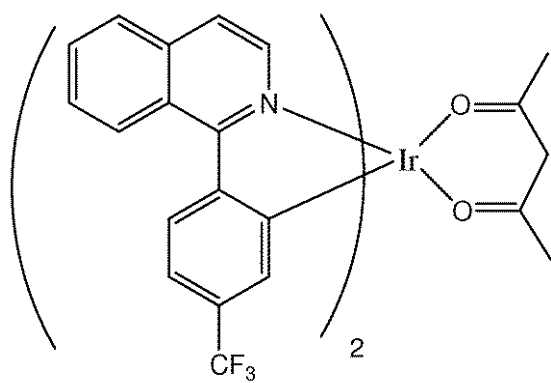
【化 1 9】

D1:



10

D2:

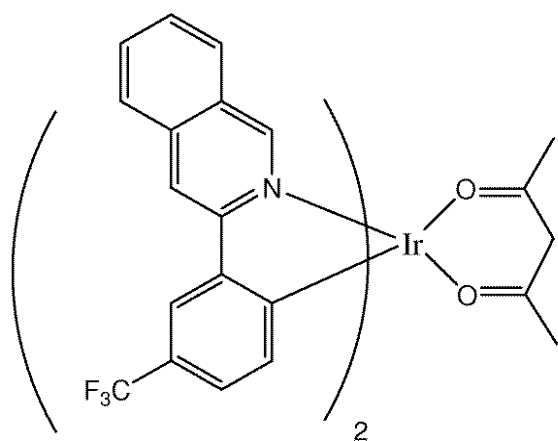


30

【 0 1 2 1 】

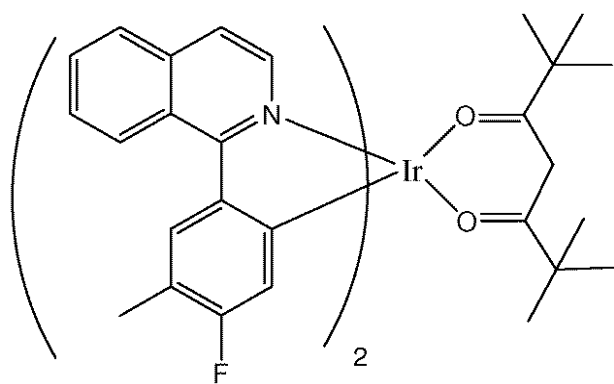
【化 2 0】

D3:



10

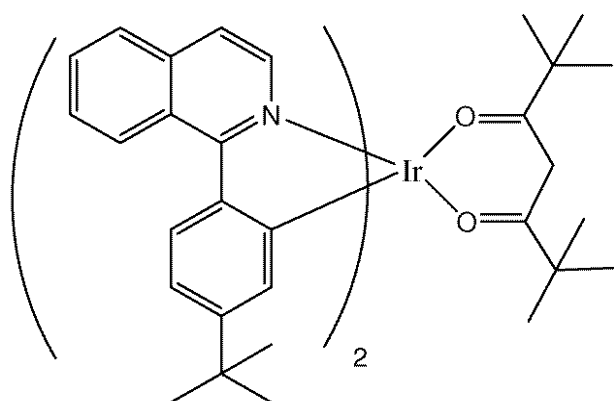
D4:



20

30

D4:

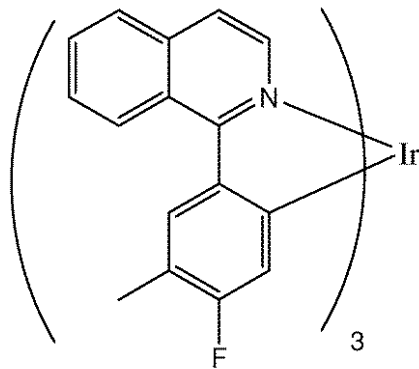


40

【 0 1 2 2】

【化 2 1】

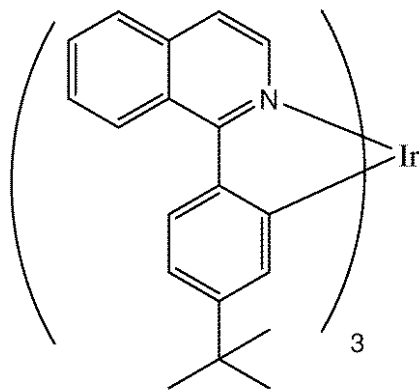
D6:



10

20

D7:



30

【 0 1 2 3】

実施形態によっては、電気活性ドーパントは、非ポリマーのスピロビフルオレン化合物、フルオランテン化合物、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

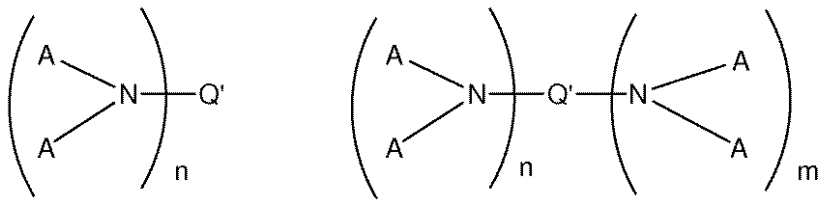
【 0 1 2 4】

実施形態によっては、電気活性ドーパントは、アリールアミン基を有する化合物である。実施形態によっては、電気活性ドーパントは以下の式：

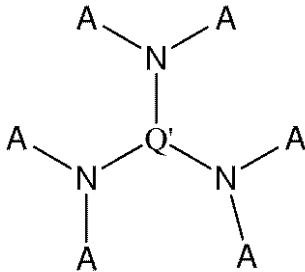
40

【 0 1 2 5】

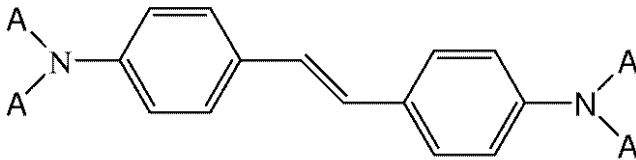
【化 2 2】



10



20



【0 1 2 6】

30

〔式中：〕

Aは、それぞれの出現において同一または異なっていて、3～60個の炭素原子を有する芳香族基であり；

Q'は、単結合、または3～60個の炭素原子を有する芳香族基であり；

nおよびmは独立して、1～6の整数である〕

から選択される。

上記式中、nおよびmは、コアQ'基上の利用可能な場所の数によって限定されうる。

【0 1 2 7】

上記式の実施形態によっては、各式中のAおよびQの少なくとも1つが少なくとも3つの縮合環を有する。実施形態によっては、mおよびnは1である。

40

【0 1 2 8】

実施形態によっては、Q'はスチリルまたはスチリルフェニル基である。

【0 1 2 9】

実施形態によっては、Q'は、少なくとも2つの縮合環を有する芳香族基である。実施形態によっては、Q'は、ナフタレン、アントラセン、ベンゾ[a]アントラセン、ジベンゾ[a,h]アントラセン、フルオランテン、フルオレン、スピロフルオレン、テトラセン、クリセン、ピレン、テトラセン、キサントン、ペリレン、クマリン、ローダミン、キナクリドン、ルブレン、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

【0 1 3 0】

50

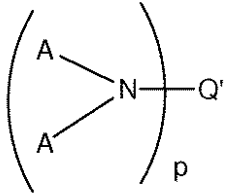
実施形態によっては、Aは、フェニル、ビフェニル、トリル、ナフチル、ナフチルフェニル、アントラセニル、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

【0131】

実施形態によっては、エレクトロルミネセンス物質は、

【0132】

【化23】



10

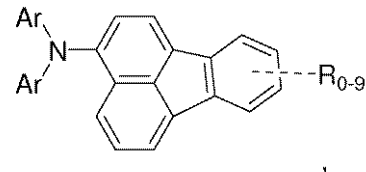
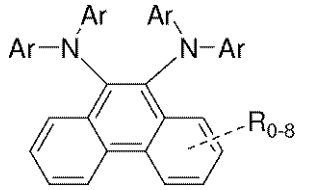
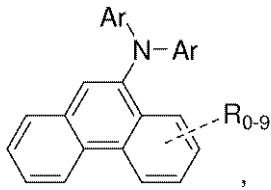
【0133】

を有し、

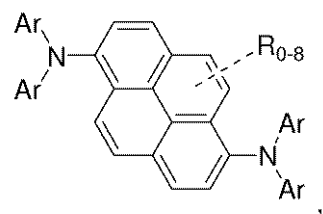
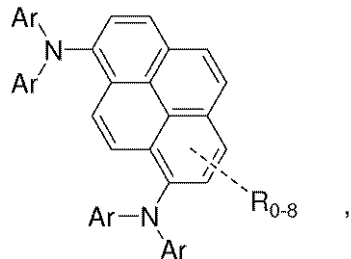
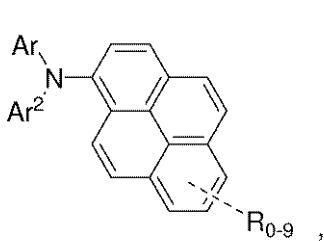
ここで、Aは芳香族基であり、pは1または2であり、Q'は：

【0134】

【化24】



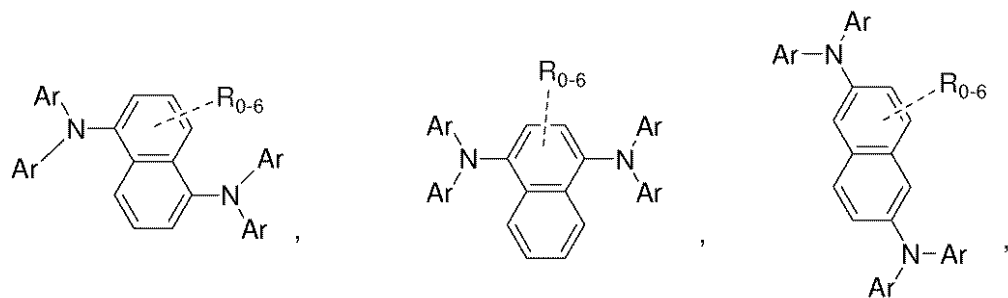
20



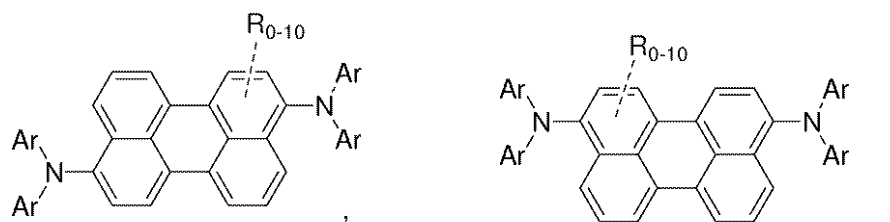
30

【0135】

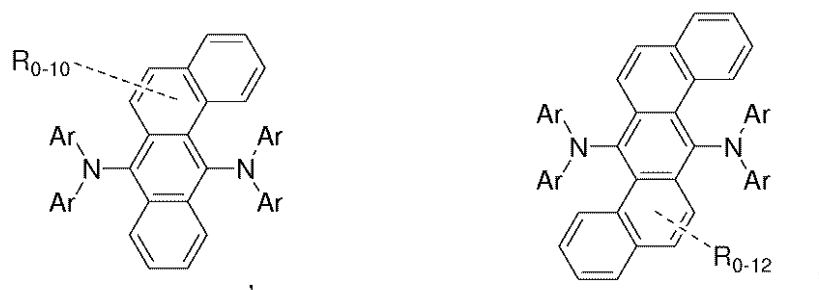
【化 2 5】



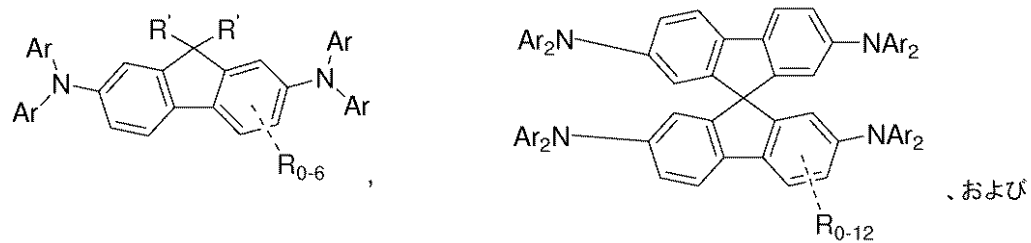
10



20



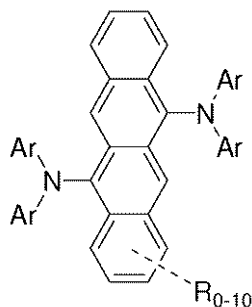
30



40

【 0 1 3 6 】

【化 2 6】



10

【0 1 3 7】

からなる群から選択され、

式中：

R は、それぞれの出現において同一または異なっていて、D、アルキル、アルコキシ、およびアリールからなる群から選択され、隣接した R 基は結合して 5 または 6 員の脂肪族環を形成してよく；

Ar は同一または異なっていて、アリール基からなる群から選択される。

【0 1 3 8】

式中の破線は、R 基が存在する場合に、R 基がコア Q' 基上の任意の位置に存在できることを示すことを意図する。

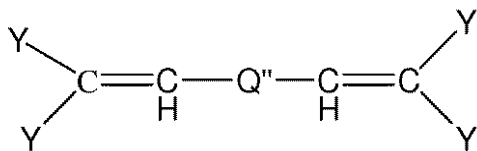
20

【0 1 3 9】

実施形態によっては、電気活性ドーパントは以下の式：

【0 1 4 0】

【化 2 7】



30

【0 1 4 1】

[式中：

Y は、それぞれの出現において同一または異なっていて、3 ~ 60 個の炭素原子有する芳香族基であり；

Q'' は、芳香族基、二価のトリフェニルアミン残基、または単結合である] を有する。

【0 1 4 2】

実施形態によっては、電気活性ドーパントはアリールアセンである。実施形態によっては、電気活性ドーパントは非対称アリールアセンである。

40

【0 1 4 3】

実施形態によっては、電気活性ドーパントはクリセン誘導体である。「クリセン」という用語は、1, 2 - ベンゾフェナントレンを意味することを意図する。実施形態によっては、電気活性ドーパントは、アリール置換基を有するクリセンである。実施形態によっては、電気活性ドーパントは、アリールアミノ置換基を有するクリセンである。実施形態によっては、電気活性ドーパントは、2 つの異なるアリールアミノ置換基を有するクリセンである。実施形態によっては、クリセン誘導体は濃い青色発光を示す。

【0 1 4 4】

実施形態によっては、異なる色を得るために、異なるドーパントを有する別の電気活性組成物が用いられる。実施形態によっては、ドーパントは、赤色、緑色、および青色の発

50

光を示すように選択される。本明細書において使用される場合、赤色は600～700 nmの範囲内の波長極大を有する光を意味し；緑色は500～600 nmの範囲内の波長極大を有する光を意味し；青色は400～500 nmの範囲内の波長極大を有する光を意味する。

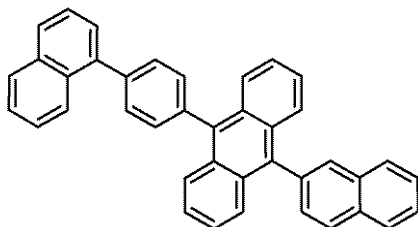
【0145】

小分子有機ドーパント物質の例としては、以下の化合物D8～D13があるが、これらに限定されない。

【0146】

【化28】

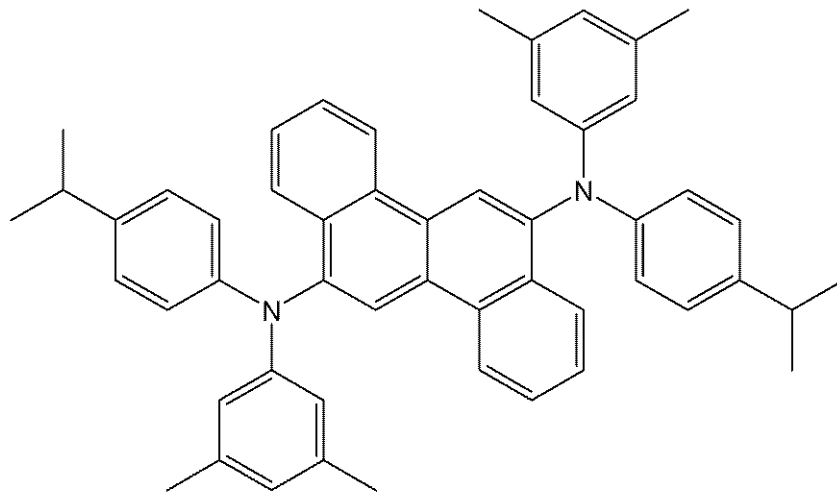
D8



【0147】

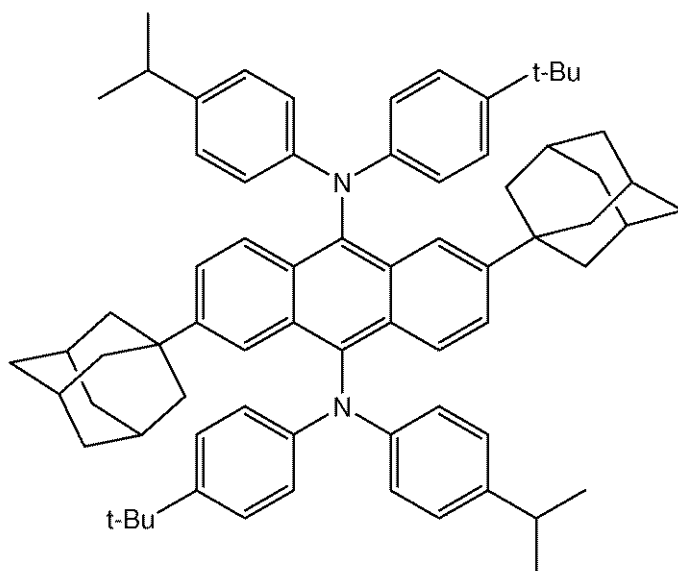
【化 2 9】

D9



10

D10



20

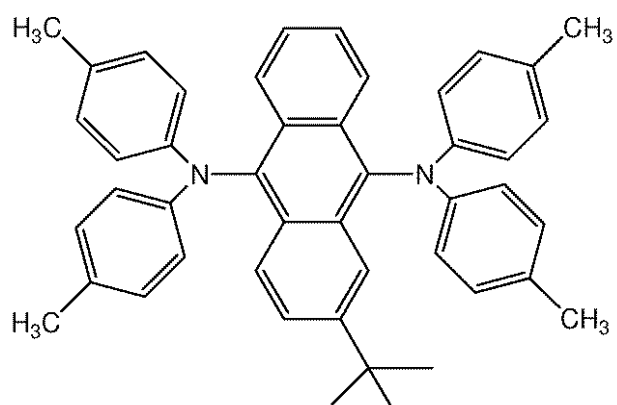
30

【 0 1 4 8 】

40

【化 3 0】

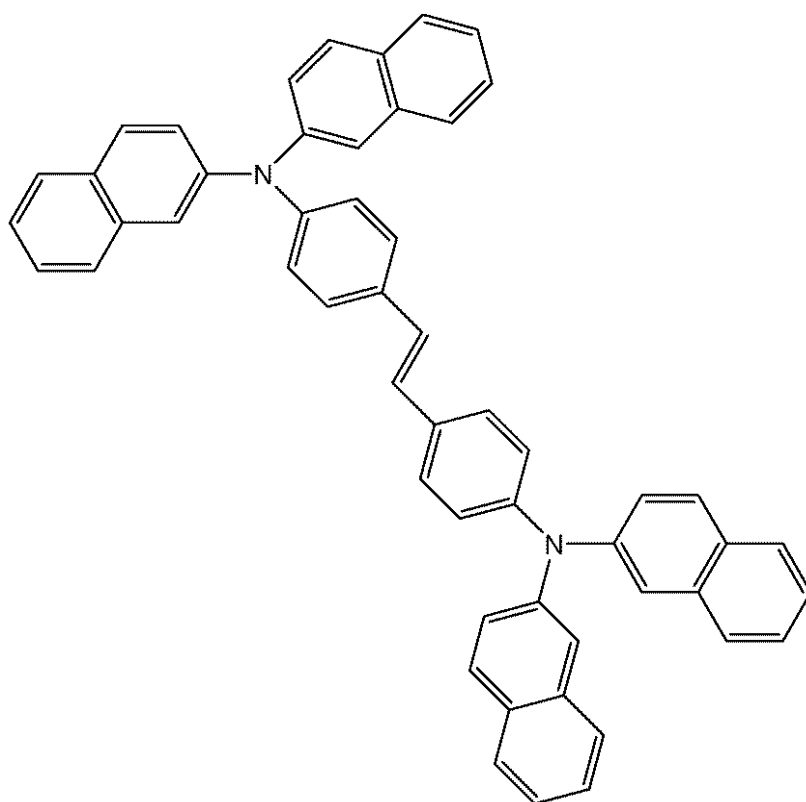
D11



10

,

20



30

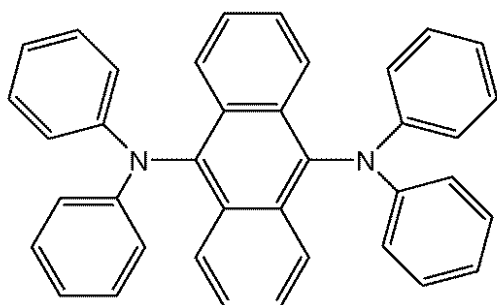
40

D12

【 0 1 4 9】

【化 3 1】

D13



10

【 0 1 5 0 】

c. 任意選択の第 2 のホスト物質

実施形態によっては、第 2 のホスト物質が電気活性組成物中に存在する。第 2 のホスト物質は任意選択的な成分である。

【 0 1 5 1 】

実施形態によっては、第 2 のホストは少なくとも 1 0 % が重水素化されている。これは、H の少なくとも 1 0 % が D で置換されていることを意味する。実施形態によっては、第 2 のホストは、少なくとも 2 0 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 3 0 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 4 0 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 5 0 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 6 0 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 7 0 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 8 0 % が重水素化されており；実施形態によっては、少なくとも 9 0 % が重水素化されている。実施形態によっては、第 2 のホストは 1 0 0 % が重水素化されている。

20

【 0 1 5 2 】

第 2 のホストは、第 1 のホスト物質に関して上述した任意の物質であってよい。実施形態によっては、第 2 のホスト物質は、フェナントロリン類、キノキサリン類、フェニルピリジン類、ベンゾジフラン類、ジフラノベンゼン類、インドロカルバゾール類、ベンゾイミダゾール類、トリアゾロピリジン類、ジヘテロアリールフェニル類、金属キノリネート錯体類、それらの置換誘導体、それらの重水素化類似体、およびそれらの組み合わせからなる群から選択される。実施形態によっては、上記の第 2 のホスト化合物は、アリール、アルキル、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される置換基を有する。実施形態によっては、ヘテロアリール基は、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン類、テトラジン類、キナゾリン、キノキサリン、ナフチルピリジン類、それらのヘテロビアリール類似体、それらのヘテロトリアリール類似体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される。

30

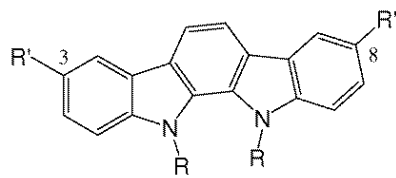
【 0 1 5 3 】

実施形態によっては、第 2 のホストは、以下の構造 1 ~ 9

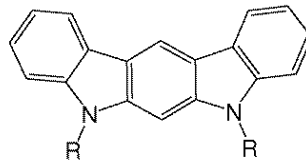
40

【 0 1 5 4 】

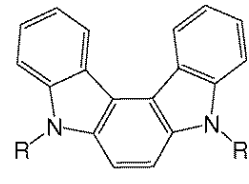
【化 3 2】



1
インドロ [2,3-a] カルバゾール
R' = H, D, R

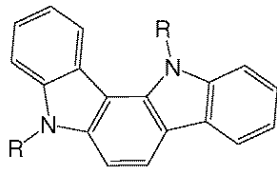


2
インドロ [2,3-b] カルバゾール

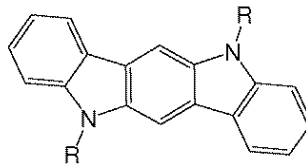


3
インドロ [2,3-c] カルバゾール

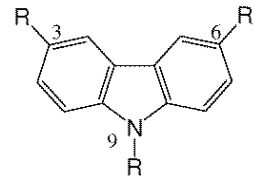
10



4
インドロ [3,2-a] カルバゾール

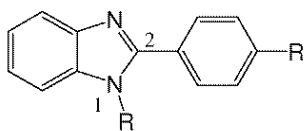


5
インドロ [3,2-b] カルバゾール

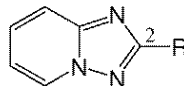


6
9H-カルバゾール
3,6,9-三置換が示されている

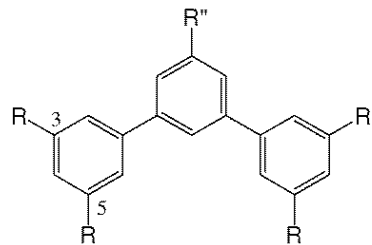
20



7
1H-ベンズイミダゾール
1,2-二置換が示されている



8
[1,2,4]トリアゾロ [1,5-a] ピリジン
2-置換が示されている



9
3,5-ジヘテロアールフェニル
R'' = H, D, CH₃, CD₃

30

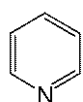
【 0 1 5 5】

[式中、R は、アリール、ヘテロアリール、およびアルキルから選択される]
、またはそれらの重水素化類似体から選択される。実施形態によっては、ヘテロアリール基は、以下の構造 1 0 ~ 2 0

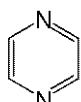
【 0 1 5 6】

40

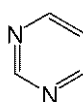
【化 3 3】



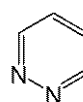
10
ピリジン



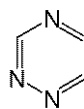
11
ピラジン



12
ピリミジン



13
ピリダジン



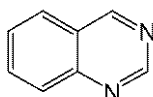
14
1,2,4-トリアジン



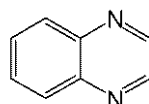
15
1,3,5-トリアジン



16
1,2,5,6-テトラジン

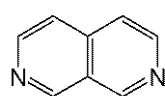


17
キナゾリン

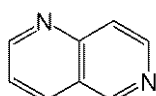


18
キノキノリン
(quinoxaline)

10



19
2,7-ナフチリジン



20
1,6-ナフチリジン

20

【0157】

またはそれらの重水素化類似体から選択される。

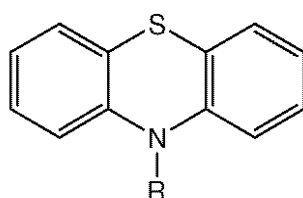
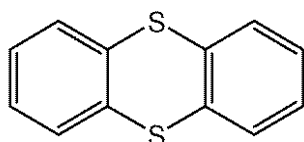
実施形態によっては、この基は、ヘテロビアリール誘導体またはヘテロトリアリール誘導体である。

【0158】

実施形態によっては、第2のホスト物質は以下に示す構造

【0159】

【化 3 4】



30

【0160】

[式中、R は、アリール、ヘテロアリール、およびアルキルから選択される]

の1つを有する。実施形態によっては、上記構造は、アリール基またはヘテロアリール基でさらに置換されている。実施形態によっては、ヘテロアリール基は、上述の構造10～20、またはそれらの重水素化類似体から選択される。

40

【0161】

実施形態によっては、第2のホスト物質も2.0 eVを超える三重項エネルギー準位を有する。このことは、発光の消光を防止するためにドープントが有機金属物質である場合に特に有用である。実施形態によっては、第1のホスト物質および第2のホスト物質の両方が2.0 eVを超える三重項エネルギー準位を有する。

【0162】

第2のホスト化合物は、周知の合成技法によって製造できる。

【0163】

50

3. 電子デバイス

本明細書に記載の電気活性組成物を有することで恩恵を受けることのできる有機電子デバイスとしては、(1)電気エネルギーを放射線に変換するデバイス(例えば、発光ダイオード、発光ダイオードディスプレイ、またはダイオードレーザー)、(2)エレクトロニクスの処理による信号を検出するデバイス(例えば、光検出器、光導電セル、フォトレジスタ、光スイッチ、光トランジスタ、光電管、IR検出器、バイオセンサー)、(3)放射線を電気エネルギーに変換するデバイス(たとえば、光起電性デバイスまたは太陽電池)、および(4)1つまたは複数の有機半導体層を含む1つまたは複数の電子部品(たとえば、トランジスタまたはダイオード)を含むデバイスがあるが、これらに限定されない。

10

【0164】

実施形態によっては、有機発光デバイスは：

陽極；

正孔輸送層；

電気活性層；

電子輸送層、および

陰極を含み；

電気活性層が上述の組成物を含む。

【0165】

有機電子デバイス構造の1つの説明図を図1に示す。デバイス100は、第1電気接触層である陽極層110と、第2電気接触層である陰極層160と、それらにある電気活性層140とを有する。陽極の隣には正孔注入層120がある。正孔注入層の隣には、正孔輸送物質を含む正孔輸送層130がある。陰極の隣には、電子輸送物質を含む電子輸送層150があつてよい。任意選択で、デバイスでは、陽極110の隣の1つまたは複数の更なる正孔注入層または正孔輸送層(図示せず)及び/または陰極160の隣の1つまたは複数の更なる電子注入層または電子輸送層(図示せず)を使用してよい。

20

【0166】

層120～150は、個別にも集合的にも活性層と呼ばれる。

【0167】

実施形態によっては、図2に示されるように、電気活性層140はピクセル化される。層140はピクセルまたはサブピクセル単位141、142、および143に分割され、これらは層全体にわたって繰り返される。ピクセルまたはサブピクセル単位のそれぞれが異なる色を表す。実施形態によっては、サブピクセル単位は赤色、緑色、および青色用である。3つのサブピクセルが図中に示されているが、2つまたは4つ以上のサブピクセル単位を使用してもよい。

30

【0168】

1つの実施形態では、種々の層の厚さの範囲は以下の通りである：陽極110は500～5000で、1つの実施形態では1000～2000であり；正孔注入層120は50～3000で、1つの実施形態では200～1000であり；正孔輸送層130は50～2000で、1つの実施形態では200～1000であり；電気活性層140は10～2000で、1つの実施形態では100～1000であり；層150は50～2000で、1つの実施形態では100～1000であり；陰極160は200～10000で、1つの実施形態では300～5000である。デバイス中の電子-正孔再結合域の場所(したがってデバイスの発光スペクトル)は、各層の相対的厚さによって影響されうる。層の厚さの所望の比率は、使用する物質のまさにその性質によって異なるであろう。

40

【0169】

デバイス100の用途に応じて、電気活性層140は、印加電圧によって活性化される発光層であつてよい(発光ダイオードまたは発光電気化学セルの場合など)、あるいはバイアス印加電圧の有無にかかわらず放射エネルギーに反応して信号を発生する物質の

50

層（光検出器の場合など）であってよい。光検出器の例としては、光伝導セル、フォトレジスタ、光電スイッチ、フォトランジスタ、および光電管、および光起電力セルがあり、これらの用語は、Markus, John, Electronics and Nucleonics Dictionary, 470 and 476 (McGraw Hill, Inc. 1966) に記載されている通りである。

【0170】

a. 電気活性層

電気活性層は、上述の電気活性組成物を含む。

【0171】

電気活性層は、前述のように液体組成物から液体付着によって形成することができる。実施形態によっては、電気活性層は蒸着によって形成される。

10

【0172】

実施形態によっては、赤色、緑色、および青色のサブピクセルを形成するために、3つの異なる電気活性組成物が液体付着によって塗布される。実施形態によっては、有色サブピクセルのそれぞれが、本発明に記載の新規の電気活性組成物を用いて形成される。実施形態によっては、全ての色でホスト物質が同一である。実施形態によっては、異なる色に異なるホスト物質が用いられる。

【0173】

b. デバイスの他の層

デバイス中の他の層は、そのような層に有用であることが知られている任意の物質で作ることができる。

20

【0174】

陽極110は、正の電荷担体を注入するのに特に効率的な電極である。それは、例えば、金属を含む物質、混合金属、合金、金属酸化物または混合金属酸化物で作ることができるか、またはそれは導電性ポリマーにすることができるか、あるいはそれらの混合物にすることもできる。好適な金属としては、11族の金属、4～6族の金属、および8～10族の遷移金属がある。陽極を光透過性にする場合、12族、13族および14族の金属の混合金属酸化物（インジウム - スズ - 酸化物など）が一般的に使用される。陽極110は、“Flexible light-emitting diodes made from soluble conducting polymer,” Nature vol. 357, pp 477-479 (11 June 1992) に記載されているようにポリアニリンなどの有機物質を含むこともできる。生じた光を見ることができるよう、陽極および陰極のうちの少なくとも1つが、望ましくは少なくとも部分的に透明である。

30

【0175】

正孔注入層120は正孔注入物質を含み、有機電子デバイスにおいて1つまたは複数の機能を有する。その機能としては、下にある層の平坦化、電荷輸送特性及び/または電荷注入特性、不純物（酸素または金属イオンなど）の除去、および有機電子デバイスの性能を促進または向上させる他の側面があるが、それらに限定されない。正孔注入物質は、ポリマー、オリゴマー、または小分子でありうる。それらは、溶液、分散液、懸濁液、エマルジョン、コロイド状混合物、または他の組成物の形であり得る液体から付着させるか、あるいは蒸着させることができる。

40

【0176】

正孔注入層は、ポリアニリン（PANI）またはポリエチレンジオキシチオフェン（PEDOT）などの高分子材料（プロトニック酸がドーブされることが多い）によって形成させることができる。プロトニック酸は、例えば、ポリ（スチレンスルホン酸）、ポリ（2-アクリルアミド-2-メチル-1-プロパンスルホン酸）などであってよい。

【0177】

正孔注入層は、銅フタロシアニンおよびテトラチアフルバレン - テトラシアノキノジメタン系（TTF - TCNQ）などの電荷移動化合物などを含むことができる。

50

【 0 1 7 8 】

実施形態によっては、正孔注入層は、少なくとも1種類の導電性ポリマーおよび少なくとも1種類のフッ素化酸ポリマーを含む。このような物質は、例えば、米国特許出願公開第2004/0102577号明細書、米国特許出願公開第2004/0127637号明細書、米国特許出願公開第2005/0205860号明細書、および国際公開第2009/018009号パンフレットに記載されている。

【 0 1 7 9 】

層130用の他の正孔輸送物質の例は、例えば、Y. WangによってKirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, Fourth Edition, Vol. 18, p. 837-860, 1996にまとめられている。正孔輸送分子および正孔輸送ポリマーの両方を使用できる。通常用いられる正孔輸送分子は以下のものである：N, N'-ジフェニル-N, N'-ビス(3-メチルフェニル)-[1, 1'-ビフェニル]-4, 4'-ジアミン(TPD)、1, 1'-ビス[(ジ-4-トリルアミノ)フェニル]シクロヘキサン(TAPC)、N, N'-ビス(4-メチルフェニル)-N, N'-ビス(4-エチルフェニル)-[1, 1'-(3, 3'-ジメチル)ビフェニル]-4, 4'-ジアミン(ETPD)、テトラキス-(3-メチルフェニル)-N, N, N', N'-2, 5-フェニレンジアミン(PDA)、a-フェニル-4-N, N-ジフェニルアミノスチレン(TPS)、p-(ジエチルアミノ)-ベンズアルデヒドジフェニルヒドラゾン(DEH)、トリフェニルアミン(TPA)、ビス[4-(N, N-ジエチルアミノ)-2-メチルフェニル](4-メチルフェニル)メタン(MPMP)、1-フェニル-3-[p-(ジエチルアミノ)スチリル]-5-[p-(ジエチルアミノ)フェニル]ピラゾリン(PPRまたはDEASP)、1, 2-trans-ビス(9H-カルバゾール-9-イル)シクロブタン(DCZB)、N, N, N', N'-テトラキス(4-メチルフェニル)-(1, 1'-ビフェニル)-4, 4'-ジアミン(TTB)、N, N'-ビス(ナフタレン-1-イル)-N, N'-ビス-(フェニル)ベンジジン(-NPB)、およびボルフィリン化合物(銅フタロシアニンなど)。通常用いられる正孔輸送ポリマーは、ポリビニルカルバゾール、(フェニルメチル)-ポリシラン、およびポリアニリンである。正孔輸送分子(上述したものなど)をポリマー(ポリスチレンおよびポリカーボネートなど)にドーピングすることによって、正孔輸送ポリマーを得ることも可能である。場合によっては、トリアリールアミンポリマー、特にトリアリールアミン-フルオレンコポリマーが使用される。場合によっては、これらのポリマーおよびコポリマーは架橋性である。実施形態によっては、正孔輸送層はp-ドーパントをさらに含む。実施形態によっては、正孔輸送層はp-ドーパントがドーピングされる。p-ドーパントの例としては、テトラフルオロテトラシアノキノジメタン(F4-TCNQ)およびペリレン-3, 4, 9, 10-テトラカルボン酸-3, 4, 9, 10-二無水物(PTCDA)があるが、これらに限定されない。

【 0 1 8 0 】

層150中に使用できる電子輸送物質の例としては、金属キレートオキシノイド化合物(トリス(8-ヒドロキシキノラト)アルミニウム(AlQ)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(p-フェニルフェノラト)アルミニウム(BAlq)、テトラキス-(8-ヒドロキシキノラト)ハフニウム(HfQ)、およびテトラキス-(8-ヒドロキシキノラト)ジルコニウム(ZrQ)などの金属キノレート誘導体など)；およびアゾール化合物(2-(4-ビフェニル)-5-(4-t-ブチルフェニル)-1, 3, 4-オキサジアゾール(PBD)、3-(4-ビフェニル)-4-フェニル-5-(4-t-ブチルフェニル)-1, 2, 4-トリアゾール(TAZ)、および1, 3, 5-トリ(フェニル-2-ベンゾイミダゾール)ベンゼン(TPBI)など)；キノキサリン誘導体(2, 3-ビス(4-フルオロフェニル)キノキサリンなど)；フェナントロリン類(4, 7-ジフェニル-1, 10-フェナントロリン(DPA)および2, 9-ジメチル-4, 7-ジフェニル-1, 10-フェナントロリン(DDPA)など)；およびそれらの混合物があるが、これらに限定されない。実施形態によっては、電子輸送層はn-ドーパント

10

20

30

40

50

をさらに含む。n - ドーパント物質はよく知られている。n - ドーパントとしては、1 族および 2 族の金属；1 族および 2 族の金属塩（LiF、CsF、および Cs₂CO₃ など）；1 族および 2 族の金属有機化合物（Li キノレートなど）；ならびに分子 n - ドーパント（ロイコ染料など）、金属錯体（W₂(hpp)₄ [ここで hpp = 1, 3, 4, 6, 7, 8 - ヘキサヒドロ - 2H - プリミド - [1, 2 - a] - プリミジンである]、およびコバルトセンなど）、テトラチアナフタセン、ビス（エチレンジチオ）テトラチアフルバレン、複素環式ラジカルまたはジラジカル、ならびに複素環式ラジカルまたはジラジカルのダイマー、オリゴマー、ポリマー、ジスピロ化合物、および多環化合物があるが、これらに限定されない。

【0181】

10

陰極 160 は、電子または負の電荷担体を注入するのに特に効率的な電極である。陰極は、陽極よりも仕事関数の小さい任意の金属または非金属であってよい。陰極用の物質は、1 族のアルカリ金属（例えば、Li、Cs）、2 族の（アルカリ土類）金属、12 族の金属（希土類元素およびランタニドを含む）、およびアクチニドから選択できる。アルミニウム、インジウム、カルシウム、バリウム、サマリウムおよびマグネシウムなどの物質、ならびにそれらの組合せを使用できる。動作電圧を下げるために、有機層と陰極層との間に Li 含有の有機金属化合物、LiF、および Li₂O を付着させることもできる。

【0182】

有機電子デバイス中に別の層を設けることが知られている。例えば、注入される正電荷の量を制御するため、かつ/または層のバンドギャップを一致させるため、あるいは保護層として機能するための、陽極 110 と正孔注入層 120 との間の層（図示せず）があつてよい。当該技術分野において知られている層を使用でき、それには、銅フタロシアニン、酸窒化ケイ素、フルオロカーボン類、シラン類、または金属（Pt など）の極薄層がある。あるいはまた、陽極層 110、活性層 120、130、140、および 150、または陰極層 160 の一部または全部を表面処理して、電荷担体輸送効率を増大させることができる。各成分層の物質の選択は、好ましくは、デバイスが高いエレクトロルミネセンス効率となるように正電荷と負電荷を釣り合わせることににより決定する。

20

【0183】

各機能層は、複数の層で構成できることが理解される。

【0184】

30

c. デバイスの製造

デバイス層は、蒸着、液体付着、および熱転写などのあらゆる付着技法または技法の組み合わせによって形成することができる。ガラス、プラスチック、および金属などの基板を使用することができる。熱蒸着、化学蒸着などの従来の蒸着技法を使用できる。有機層は、限定するものではないが、スピンコーティング、浸漬被覆、ロール・トゥ・ロール技法、インクジェット印刷、連続ノズル印刷、スクリーン印刷、グラビア印刷などの従来のコーティングまたは印刷技法を使用して、好適な溶媒中の溶液または分散体から塗布することができる。

【0185】

実施形態によっては、有機発光デバイスの製造方法は：

40

パターン化された陽極を上にも有する基板を提供するステップと；

（a）重水素化された第 1 のホスト物質、（b）エレクトロルミネセンスドーパント物質、および（c）液体媒体を含む第 1 の液体組成物を付着させることによって電気活性層を形成するステップと；

陰極全体を形成するステップとを含む。

【0186】

「液体組成物」という用語は、1 つまたは複数の物質が溶解して溶液を形成する液体媒体、1 つまたは複数の物質が分散して分散液を形成する液体媒体、あるいは 1 つまたは複数の物質が懸濁して懸濁液またはエマルジョンを形成する液体媒体を意味することを意図している。

50

【0187】

実施形態によっては、本発明の方法は：

電気活性層を形成する前に正孔輸送層を形成するステップであって、正孔輸送層が、正孔輸送物質を第2の液体媒体中に含む第2の液体組成物を付着させることによって形成されるステップをさらに含む。

【0188】

実施形態によっては、本発明の方法は：

電気活性層を形成した後に電子輸送層を形成するステップであって、電子輸送層が、電子輸送物質を第3の液体媒体中に含む第3の液体組成物を付着させることによって形成されるステップをさらに含む。

10

【0189】

連続および不連続技法などのあらゆる周知の液体付着技法または技法の組み合わせを使用することができる。連続液体付着技法の例としては、スピンコーティング、グラビアコーティング、カーテンコーティング、浸漬被覆、スロットダイコーティング、吹付け塗り、および連続ノズルコーティングがあるが、これらに限定されない。不連続付着技法としては、インクジェット印刷、グラビア印刷、およびスクリーン印刷があるが、これらに限定されない。実施形態によっては、電気活性層は、連続ノズルコーティングおよびインクジェット印刷から選択される方法によってあるパターンで形成される。ノズル印刷は、連続技法と見なすことができるが、層を形成するための所望の領域上のみにノズルを配置することによってパターンを形成することができる。例えば、連続した列のパターンを形成することができる。

20

【0190】

付着させる特定の組成物に好適な液体媒体は、当業者によって容易に決定することができる。一部の用途では、化合物を非水溶媒中に溶解させることが望ましい。このような非水溶媒は、($C_1 \sim C_{20}$ アルコール、エーテル、および酸エステルなど)であってよく、比較的非極性($C_1 \sim C_{12}$ アルカン、あるいはトルエン、キシレン、トリフルオロトルエンなどの芳香族など)であってもよい。新規の化合物を含む本明細書に記載の溶液または分散体のいずれかとしての液体組成物の製造に用いると好適な別の液体としては、塩素化炭化水素(塩化メチレン、クロロホルム、クロロベンゼンなど)、芳香族炭化水素(置換または非置換のトルエンまたはキシレンなど、たとえばトリフルオロトルエン)、極性溶媒(テトラヒドロフラン(THF)、N-メチルピロリドン(NMP)など)、エステル(エチルアセテートなど)、アルコール(イソプロパノールなど)、ケトン(シクロペンタトン(cyclopentanone)など)、またはそれらのあらゆる混合物があるが、これらに限定されない。発光物質用の溶媒の混合物の例は、例えば、米国特許出願公開第2008-0067473号明細書に記載されている。

30

【0191】

実施形態によっては、全ホスト物質(第1のホストと、第2のホストが存在する場合にはそれとを合わせたもの)対ドーパントの重量比は、5:1~25:1の範囲内である。

【0192】

付着後、物質を乾燥させて層を形成する。加熱、真空、およびそれらの組み合わせなどの任意の従来の乾燥技法を使用できる。

40

【0193】

実施形態によっては、デバイスは、正孔注入層、正孔輸送層、および電気活性層の液体付着と、陽極、電子輸送層、電子注入層、および陰極の蒸着とによって製造される。

【実施例】

【0194】

以下の実施例において、本明細書に記載の概念をさらに説明するが、これらの実施例は、請求項に記載の本発明の範囲を限定するものではない。

【0195】

実施例1

50

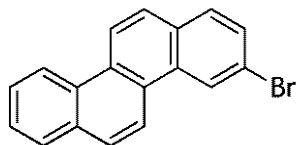
この実施例は、重水素化ホスト化合物 A 1 の調製を例示するものである。

【0196】

a. 3 - プロモクリセンの調製

【0197】

【化35】



10

【0198】

(i) 1 - (4 - プロモスチリル) ナフタレンの調製

オーブンで乾燥させた 2 リットルの 4 口丸底フラスコに、磁気攪拌子、滴下漏斗、温度計アダプター、および窒素注入口を取り付け、(1 - ナブチルメチル)トリフェニルホスホニウムクロライド (49.87 g、113.6 mmol) および乾燥 THF (970 ml) を投入した。得られたスラリーを -5℃ まで冷却し、滴下漏斗により n-BuLi (50 ml、125 mmol、2.5 M 溶液) を 25 分間かえて加えた。残留 n-BuLi を 10 mL の THF で滴下漏斗から洗い流した。非常に暗い赤色の溶液が形成され、15 分間攪拌を続けた。次いで反応混合物を -75℃ まで冷却し、乾燥 THF (約 75 ml) 中に溶解させた 4 - プロモベンズアルデヒド (21.0 g、113.6 mmol) を、-75℃ に温度を維持しながら、30 分かけて滴下した。20 mL の THF で滴下漏斗から残留アルデヒドを洗い流した。反応混合物を冷浴中から、徐々に室温まで加温しながら、終夜攪拌した。翌日、反応を水 (30 ml) でクエンチして、ロータバップ (rotavap) 上で揮発分を除去した。残留物を 500 ml のヘキサン中で攪拌し、次いで濾過した。固体をヘキサンで洗浄した。濾液を濃縮して、粗生成物が得られ、これをカラムクロマトグラフィー (ヘキサン中 0 ~ 100% の CH_2Cl_2) によって精製した。収量 17.7 g (50%)。構造を ^1H NMR 分光法によって確認した。

20

【0199】

(ii) 3 - プロモクリセンの調製

30

窒素注入口および攪拌子を取り付けた 1 リットルの光化学容器中で 1 - (4 - プロモスチリル) ナフタレン (5.0 g、16.2 mmol) を乾燥トルエン (1 l) 中に溶解させた。乾燥プロピレンオキシドの入った瓶を氷水で冷却した後、100 ml のそのエポキシドをシリンジで抜き取り、反応混合物に加えた。最後にヨウ素 (4.2 g、16.5 mmol) を加えた。光化学容器の上部に冷却器を取り付け、ハロゲンランプ (Hanovia、450 W) のスイッチを入れた。ヨウ素が反応混合物中に残存しないことが、ヨウ素の色が消失したことで明らかとなってから、ランプのスイッチを切ることで、反応を停止させた。この反応は 2 時間で完了した。トルエンおよび過剰のプロピレンオキシドを減圧下で除去すると、暗黄色固体が得られた。粗生成物をジエチルエーテルで洗浄すると、3.4 g (68%) の 3 - プロモクリセンがオフホワイトの固体として得られた。構造を ^1H NMR 分光法によって確認した。

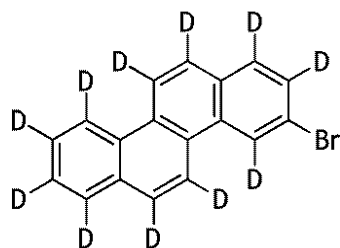
40

【0200】

b. パージュウテロ - 3 - プロモクリセンの調製

【0201】

【化 3 6】



【 0 2 0 2】

10

グローブボックス中で、3 - ブロモクリセン (2 g、6 . 5 m m o l) をフラスコ中に入れ、1 0 0 m l の乾燥 C_6D_6 中に溶解させた。次いで三塩化アルミニウム (0 . 2 6 g、1 . 9 5 m m o l) を加え、続いてさらに 2 0 m l の C_6D_6 を加えた。反応混合物は 5 分以内に暗色になり、3 0 分間攪拌を続けた。混合物を D_2O (2 0 m l) でクエンチし、2 5 分間攪拌し (暗色は消えた)、分液漏斗に移した。有機層を取り出し、水 (2 回) およびブライン (3 回) で洗浄した。その有機層を $MgSO_4$ 上で乾燥させ、次いで濃縮して粗生成物を得て、これにジエチルエーテルを加えて粉碎した。収量 1 . 8 g (8 7 %) の白色固体。内部標準に対して 1H NMR 分光法によって測定すると、この生成物は 9 5 . 4 % が重水素化されている。質量分析および液体クロマトグラフィーによって生成物の同定および純度の確認を行った。

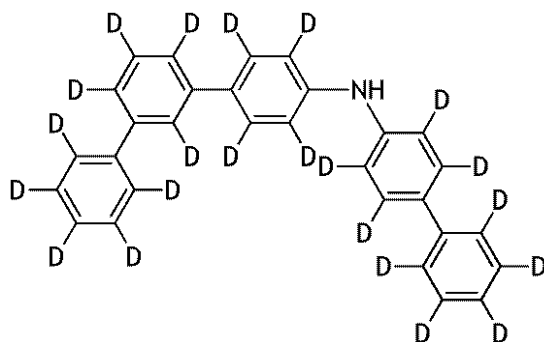
20

【 0 2 0 3】

c . パージュウテロ - N - ([1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - イル) - [1 , 1 ' : 3 ' , 1 ' ' - ターフェニル] - 4 - アミンの調製

【 0 2 0 4】

【化 3 7】



30

【 0 2 0 5】

パージュウテロ - 3 - ブロモクリセンに関して前述した方法と同様にして、4 - ブロモビフェニルおよび 4 - ブロモ - 1 , 1 ' : 3 ' , 1 ' ' - ターフェニルの重水素化を行った。 1H NMR 分光法、質量分析、および液体クロマトグラフィーによって、これらの生成物の同定および純度の確認を行った。

40

【 0 2 0 6】

(i) パージュウテロ - 4 - アミノビフェニルの調製

ドライボックス中で、[1 , 1 ' - ビフェニル] - 2 - イルジシクロヘキシルホスフィン (3 4 . 7 m g、0 . 0 9 9 m m o l)、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (3 7 . 8 m g、0 . 0 4 1 m m o l)、およびリチウムヘキサメチルジシラジド (1 . 6 6 g、9 . 9 1 m m o l) を厚肉ガラス管中に入れた。パージュウテロ - 4 - ブロモビオフェニル (p e r d e u t e r o - 4 - b r o m o b i o p h e n y l) を 1 9 m l のトルエン中に溶解させ、上記混合物に加えた。管を封止し、ドライボックスから取り出し、8 0 で 1 6 時間加熱した。反応混合物を室温まで冷却し、8 0 m l の 1 M

50

のHCl水溶液でクエンチした。混合物を5分間攪拌した後、2MのNaOH水溶液でpH = 11まで中和した。有機物をCH₂Cl₂ (2 × 40 ml) で抽出し、次いでブライン (150 ml) およびNa₂SO₄で乾燥させた。揮発分をロータバップ上で除去した。粗生成物をフラッシュカラムクロマトグラフィー (ヘキサン中70 ~ 85 %のCH₂Cl₂) で精製した。収量820 mg (56 %)。生成物は、内部標準に対して¹H NMR分光法によって測定した重水素化度を維持していた。¹H NMR分光法、質量分析、および液体クロマトグラフィーによって、生成物の同定および純度の確認を行った。

【0207】

(ii) パージュウテロ - N - ([1, 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - [1, 1' : 3', 1'' - ターフェニル] - 4 - アミンの調製

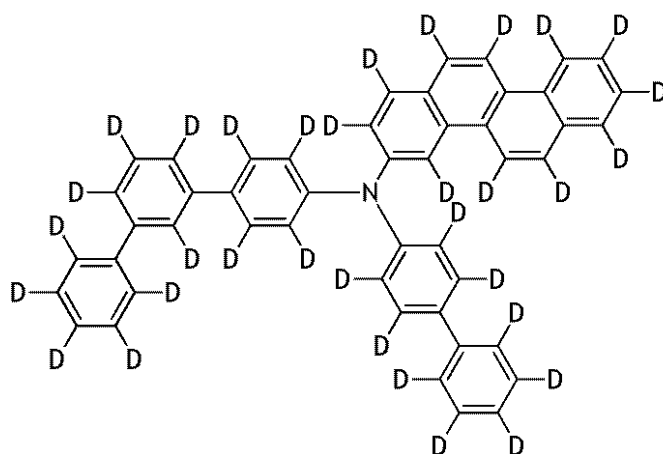
ドライボックス中で、パージュウテロ - 4 - アミノビフェニル (0.542 g、3.04 mmol) およびパージュウテロ - 4 - ブロモ - 1, 1' : 3', 1'' - ターフェニル (0.89 g、2.76 mmol) を丸底フラスコ中で混合し、10 mlの乾燥トルエン中に溶解させた。トリス (tert - ブチル) ホスフィン (0.022 g、0.11 mmol) およびトリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (0.05 g、0.055 mmol) を10 mlの乾燥トルエン中に溶解させ、5分間攪拌した。この触媒溶液を上記反応混合物に加え、2分間攪拌し、続いてナトリウム tert - ブトキシド (0.32 g、3.3 mmol) を加えた。フラスコに蓋をして、ドライボックス中で室温において終夜攪拌を続けた。翌日、反応混合物をドライボックスから取り出し、上部にセライトを有する1インチのシリカゲルプラグで濾過し、500 mlのジクロロメタンで洗浄した。減圧下で揮発分を除去すると、黄色固体が得られた。粗生成物にジエチルエーテルを加えて粉砕することによって精製して、0.85 g (73 %) の白色固体を得た。内部標準に対して¹H NMR分光法によって測定すると、生成物は80 %重水素化されている。質量分析および液体クロマトグラフィーによって、生成物の同定および純度の確認を行った。

【0208】

d. パージュウテロ - N - ([1, 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - N - ([1, 1' : 3', 1'' - ターフェニル] - 4 - イル) クリセン - 3 - アミンである化合物A1の調製

【0209】

【化38】



【0210】

ドライボックス中で、パージュウテロ - N - ([1, 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - [1, 1' : 3', 1'' - ターフェニル] - 4 - アミン (0.849 g、2.02 mmol) およびパージュウテロ - 3 - ブロモクリセン (0.59 g、1.85 mmol) を厚肉ガラス管中で混合し、20 mlの乾燥トルエン中に溶解させた。トリス (tert

- ブチル)ホスフィン(7.5 mg、0.037 mmol)およびトリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)(17 mg、0.019 mmol)を10 mlの乾燥トルエン中に溶解させ、10分攪拌した。この触媒溶液を上記反応混合物に加え、5分間攪拌し、続いてナトリウムtert-ブトキシド(0.194 g、2.02 mmol)および20 mlの乾燥トルエンを加えた。さらに10分後、反応フラスコをドライボックスから取り出し、80℃の浴中に入れて終夜攪拌した。翌日、反応混合物を室温まで冷却し、上部に2分の1インチのCeliteを有する3インチのシリカゲルプラグで濾過し、400 mlのクロロホルムで洗浄した。減圧下で揮発分を除去すると、黄色固体が得られた。粗生成物を、ヘキサン中のクロロホルムを使用してカラムクロマトグラフィーによって精製した。収量1.05 g(87.5%)の白色固体。質量分析および液体クロマトグラフィーによって生成物の同定および純度の確認を行った。

10

【0211】

化合物A1のTgは約110℃であった。トルエンおよびアニソールの両方に対する溶解度は20 mg/mlを超えた。

【0212】

実施例2

この実施例は、重水素化ホスト化合物A17の調製を例示するものである。

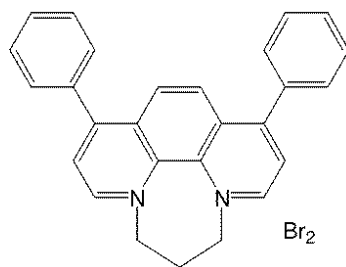
【0213】

a) Yamada et al Bull Chem Soc Jpn, 63, 2710, 1990の手順を使用して、トリメチレン架橋したバソフェナントロリンを以下のように調製した: 2 gのバソフェナントロリンを20 gの1,3-ジブロモプロパン中に加え、空气中で還流した。約30分後、得られた濃いオレンジ色のスラリーを冷却した。メタノールを加えて固体を溶解させ、。次いでアセトンを加えると明るいオレンジ色の固体が沈殿した。これを濾過し、トルエンおよびジクロロメタン(「DCM」)で洗浄すると、オレンジ色の粉末が2.8 gの収量で得られた。

20

【0214】

【化39】



C₂₇H₂₂Br₂N₂
 厳密な質量: 532.01
 分子量: 534.29
 C, 60.70; H, 4.15; Br, 29.91; N, 5.24

30

【0215】

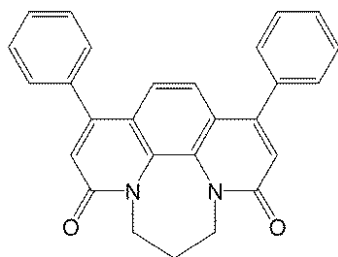
b) 上記の精製物2.8 gを12 mLの水中に溶解させ、これを、30 mLの水中の21 gのフェリシアン化カリウムおよび10 gの水酸化ナトリウムの氷冷した溶液中に約30分かけて加え、次いで90分間攪拌した。これを再び氷冷し、60 mLの4 MのHClを使用してpHが約8となるまで中和した。得られた淡褐色/黄色の固体を濾過し、真空乾燥した。濾過した固体を、ソックスレー中に入れ、クロロホルムで抽出すると、褐色溶液が抽出された。これを褐色油状固体となるまで蒸発させ、次いで少量のメタノールで洗浄して、淡褐色固体(約1.0 g、47%)を得た。生成物は、混合物からクロロホルムを蒸発させることによって、クロロホルム/メタノールから金色の小板として再結晶させることができる。NMRにより、構造を以下のジケトンとして確認した。

40

【0216】

50

【化 4 0】



$C_{27}H_{20}N_2O_2$
 厳密な質量: 404.15
 分子量: 404.46
 C, 80.18; H, 4.98; N, 6.93; O, 7.91

10

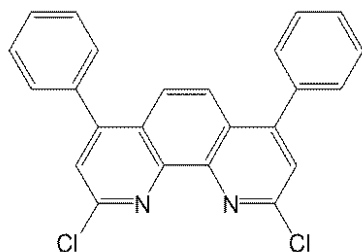
【 0 2 1 7】

c) 上記のステップ (b) から得られたジケトンをもとめた合計 5.5 g (13.6 mM) の部分を、39 mL の $POCl_3$ 中に懸濁させ、5.4 g の PCl_5 を加えた。これを脱気し、窒素下で 8 時間還流した。過剰の $POCl_3$ を蒸発によって除去した。氷を加えて残留する塩化物を分解させ、混合物をアンモニア溶液中で中和した。得られた褐色沈殿物を回収し、真空乾燥し、母液は塩化メチレンで抽出した。すべての褐色物質を 1 つにまとめ、褐色ゴム状となるまで蒸発させ、メタノールを加えた。振盪および攪拌の後、淡黄色固体が単離され、これを $CHCl_3$ およびメタノール (1:10) からオフホワイトの針状物質として再結晶させた。NMR による分析から、構造が以下に示す 2,9-ジクロロ-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリンであることが示された。

20

【 0 2 1 8】

【化 4 1】



$C_{24}H_{14}Cl_2N_2$
 厳密な質量: 400.05
 分子量: 401.29
 C, 71.83; H, 3.52; Cl, 17.67; N, 6.98

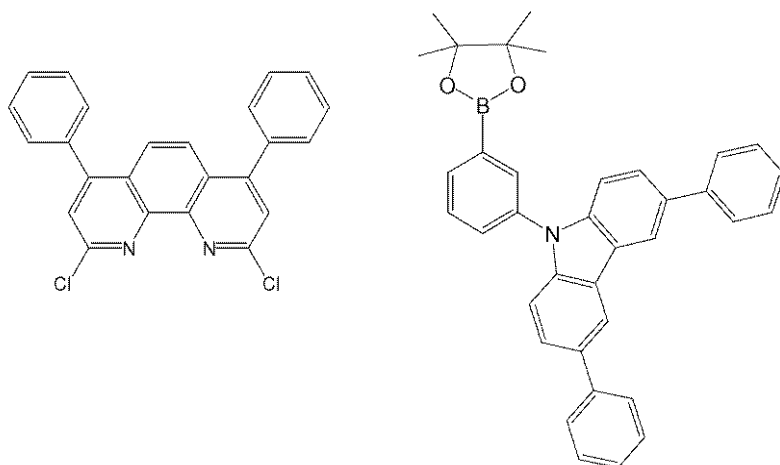
30

【 0 2 1 9】

d) 以下に示す 2,9-ジクロロ-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリンとボロン酸エステルとの鈴木カップリングを使用して非重水素化類似化合物を調製した。

【 0 2 2 0】

【化 4 2】



10

【 0 2 2 1】

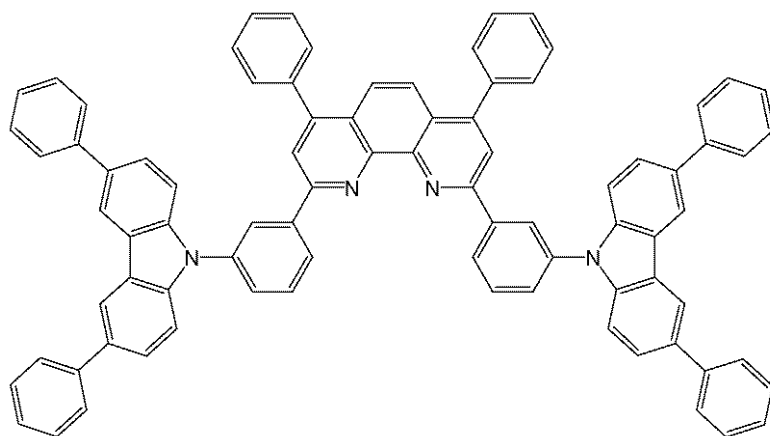
グローブボックス中で1.0 gのジクロロフェン(2.5 mM)を取り出し、3.12 g(6 mM)のボロン酸エステルを加える。0.15 gの Pd_2DBA_3 (DBA = ジベンジリデンアセトン)(0.15 mM)、0.1 gのトリシクロヘキシルホスフィン(0.35 mM)、および2.0 gのリン酸カリウム(9 mM)を加え、すべてを30 mLのジオキサンおよび15 mLの水中に溶解させる。グローブボックス中100°Cのマントル中で1時間加熱混合し、次いで窒素下で穏やかに加温した(最低のレオスタット設定)。溶液は直ちに暗紫色になったが、約80°Cに到達すると淡褐色スラリーとなり、ゆっくりと透明な褐色となり濃厚な沈殿が得られた。溶液を還流させると(空気コンデンサー)、褐色ゴム状物質が形成される。グローブボックスから取り出すことで、冷却およびワークアップを行い、水を加える。DCM中に抽出させ、硫酸マグネシウム上で乾燥させる。DCM次いで2:1のDCM/メタノールで溶出させることで、クロマトグラフィーによる精製を行った。淡黄色溶液が回収させ、これを蒸発させ、メタノールを加えると、白色/淡黄色の固体が沈殿した。NMR分析によって、この構造が、以下に示す化合物B-1であることが確認された。

20

30

【 0 2 2 2】

【化 4 3】



40

B-1

【 0 2 2 3】

化合物B-1はT_gが約220 °であった。トルエンに対する溶解度は24.7 mg/mLであった。アニソールに対する溶解度は23.3 mg/mLであった。

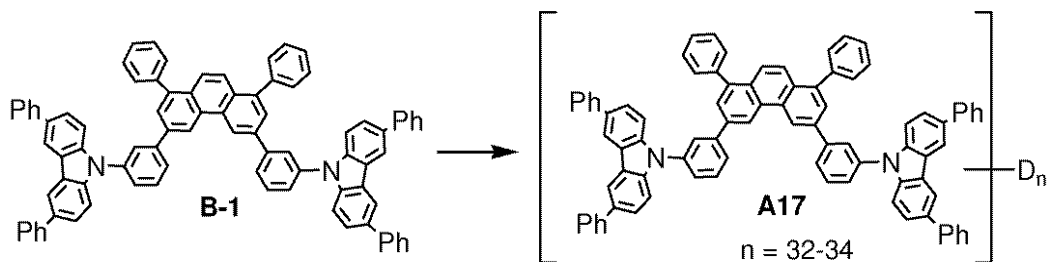
50

【 0 2 2 4 】

e) 化合物 A 1 7 を非重水素化類似化合物 B - 1 から作製した。

【 0 2 2 5 】

【 化 4 4 】



10

【 0 2 2 6 】

窒素雰囲気下、上記ステップ (d) で得た化合物 (1 . 9 2 5 g) を C_6D_6 (2 0 0 m L) 中に溶解させ、これに CF_3OSO_2D (1 3 . 2 m L) を滴下した。反応混合物を室温で終夜攪拌し、次いで飽和 Na_2CO_3 / D_2O でクエンチした。有機層を分離し、 $MgSO_4$ 上で乾燥させた。生成物を、シリカクロマトグラフィー (CH_2Cl_2 : ヘキサン) を使用して精製して、1 . 7 0 g の物質を得た。単離した物質の NMR スペクトルから、構造が 3 2 ~ 3 4 個の D で H が置換された A 1 7 であることを確認した。

20

【 0 2 2 7 】

化合物 A 1 7 の T g は約 2 2 0 であつた。トルエンに対する溶解度は 2 4 . 7 m g / m l であつた。アニソールに対する溶解度は 2 3 . 3 m g / m l であつた。

【 0 2 2 8 】

実施例 3

この実施例は、重水素化されていない第 2 のホスト化合物である化合物 B - 2 の調製を例示するものである。

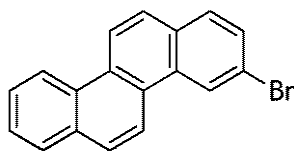
【 0 2 2 9 】

a . 3 - プロモクリセンの調製

【 0 2 3 0 】

30

【 化 4 5 】



【 0 2 3 1 】

(i) 1 - (4 - プロモスチリル) ナフタレンの調製

オーブンで乾燥させた 2 リットルの 4 口丸底フラスコに、磁気攪拌子、滴下漏斗、温度計アダプター、および窒素注入口を取り付け、(1 - ナプチルメチル) トリフェニルホスホニウムクロライド (4 9 . 8 7 g 、 1 1 3 . 6 m m o l) および乾燥 THF (9 7 0 m l) を投入した。得られたスラリーを - 5 まで冷却し、滴下漏斗により n - BuLi (5 0 m l 、 1 2 5 m m o l 、 2 . 5 M 溶液) を 2 5 分間かけて加えた。残留 n - BuLi を 1 0 m L の THF で滴下漏斗から洗い流した。非常に暗い赤色の溶液が形成され、1 5 分間攪拌を続けた。次いで反応混合物を - 7 5 まで冷却し、乾燥 THF (約 7 5 m l) 中に溶解させた 4 - プロモベンズアルデヒド (2 1 . 0 g 、 1 1 3 . 6 m m o l) を、- 7 5 に温度を維持しながら、3 0 分かけて滴下した。2 0 m L の THF で滴下漏斗から残留アルデヒドを洗い流した。反応混合物を冷浴中から、徐々に室温まで加温しながら、終夜攪拌した。翌日、反応を水 (3 0 m l) でクエンチして、ロータバップ上で揮発分を除去した。残留物を 5 0 0 m l のヘキサン中で攪拌し、次いで濾過した。固体をヘキサン

40

50

で洗浄した。濾液を濃縮して、粗生成物が得られ、これをカラムクロマトグラフィー（ヘキサン中 0 ～ 100 % の CH_2Cl_2 ）によって精製した。収量 17.7 g（50 %）。構造を ^1H NMR 分光法によって確認した。

【0232】

(ii) 3 - プロモクリセンの調製

窒素注入口および攪拌子を取り付けた 1 リットルの光化学容器中で 1 - (4 - プロモチリル) ナフタレン (5.0 g、16.2 mmol) を乾燥トルエン (1 l) 中に溶解させた。乾燥プロピレンオキシドの入った瓶を氷水で冷却した後、100 ml のそのエポキシドをシリンジで抜き取り、反応混合物に加えた。最後にヨウ素 (4.2 g、16.5 mmol) を加えた。光化学容器の上部に冷却器を取り付け、ハロゲンランプ (Hanovia、450 W) のスイッチを入れた。ヨウ素が反応混合物中に残存しないことが、ヨウ素の色が消失したことで明らかとなってから、ランプのスイッチを切ることで、反応を停止させた。この反応は 2 時間で完了した。トルエンおよび過剰のプロピレンオキシドを減圧下で除去すると、暗黄色固体が得られた。粗生成物をジエチルエーテルで洗浄すると、3.4 g (68 %) の 3 - プロモクリセンがオフホワイトの固体として得られた。構造を ^1H NMR 分光法によって確認した。

10

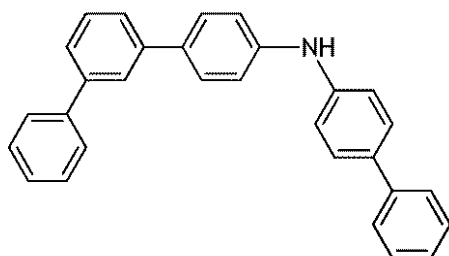
【0233】

b. N - ([1, 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - [1, 1' : 3', 1'' - ターフェニル] - 4 - アミンの調製

【0234】

20

【化 46】



【0235】

30

ドライボックス中で、4 - アミノビフェニル (0.542 g) および 4 - プロモ - 1, 1' : 3', 1'' - ターフェニル (0.89 g) を丸底フラスコ中で混合し、10 ml の乾燥トルエン中に溶解させた。トリス (tert - ブチル) ホスフィン (0.022 g、0.11 mmol) およびトリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (0.05 g、0.055 mmol) を 10 ml の乾燥トルエン中に溶解させ、5 分間攪拌した。この触媒溶液を上記反応混合物に加え、2 分間攪拌し、続いてナトリウム tert - ブトキシド (0.32 g、3.3 mmol) を加えた。フラスコに蓋をして、ドライボックス中で室温において終夜攪拌を続けた。翌日、反応混合物をドライボックスから取り出し、上部にセライトを有する 1 インチのシリカゲルプラグで濾過し、500 ml のジクロロメタンで洗浄した。減圧下で揮発分を除去すると、黄色固体が得られた。粗生成物にジエチルエーテルを加えて粉碎することによって精製して、0.85 g (73 %) の白色固体を得た。構造を ^1H NMR 分光法によって確認した。

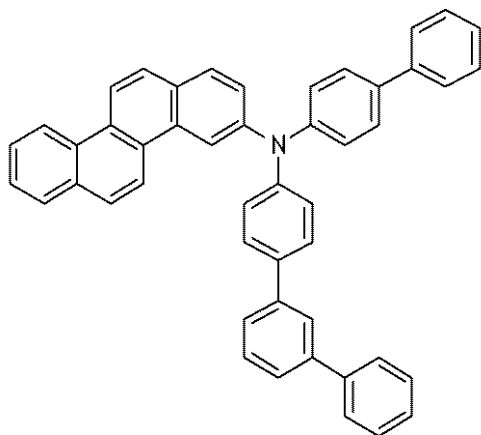
40

【0236】

c. 化合物 B - 2 の調製

【0237】

【化 47】



10

【0238】

ドライボックス中で、N - ([1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - イル) - [1 , 1 ' : 3 ' , 1 ' ' - ターフェニル] - 4 - アミン (2 . 0 2 m m o l) および 3 - プロモクリセン (1 . 8 5 m m o l) を厚肉ガラス管中で混合し、20 ml の乾燥トルエン中に溶解させた。トリス (tert - ブチル) ホスフィン (7 . 5 m g 、 0 . 0 3 7 m m o l) およびトリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (1 7 m g 、 0 . 0 1 9 m m o l) を 1 0 m l の乾燥トルエン中に溶解させ、10分攪拌した。この触媒溶液を反応混合物に加え、5分間攪拌し、続いてナトリウム tert - ブトキシド (0 . 1 9 4 g 、 2 . 0 2 m m o l) および 2 0 m l の乾燥トルエンを加えた。さらに10分後、反応フラスコをドライボックスから取り出し、80 °C の浴中に入れて終夜攪拌した。翌日、反応混合物を室温まで冷却し、上部に2分の1インチの Celite を有する3インチのシリカゲルプラグで濾過し、400 ml のクロロホルムで洗浄した。減圧下で揮発分を除去すると、黄色固体が得られた。粗生成物を、ヘキサン中のクロロホルムを使用してカラムクロマトグラフィーによって精製した。収量 1 . 0 5 g (8 7 . 5 %) の白色固体。¹H NMR、質量分析、および液体クロマトグラフィーによって生成物の同定および純度の確認を行った。

20

30

【0239】

化合物 B - 2 の T g は約 216 °C であった。トルエンに対する溶解度は 22 . 8 m g / m l であった。アニソールに対する溶解度は 22 . 2 m g / m l であった。

【0240】

実施例 4 ~ 6 および比較例 A ~ C

これらの例は、OLED デバイスの製造および性能を示すことである。

【0241】

デバイスは、ガラス基板上に以下の構造を有した：

インジウムスズ酸化物 (ITO) : 50 nm

正孔注入層 = H I J - 1 (50 nm)、これは導電性ポリマーおよびポリマーフッ素化スルホン酸の水性分散液である。このような物質は、例えば、米国特許出願公開第 2004 / 0102577 号明細書、米国特許出願公開第 2004 / 0127637 号明細書、米国特許出願公開第 2005 / 0205860 号明細書、および国際公開第 2009 / 018009 号パンフレットに記載されている。

40

【0242】

正孔輸送層 = H T - 1 (20 nm)、これはトリアリールアミン含有コポリマーである。このような物質は、例えば、国際公開第 2009 / 067419 号パンフレットに記載されている。

【0243】

エレクトロルミネセンスの層は表 1 中に示している。全ての場合で、ドーパントは D 7

50

であった。

電子輸送層 = 化合物 B - 1 (1 0 n m)

電子注入層 / 陰極 = C s F / A l (0 . 7 / 1 0 0 n m)

【 0 2 4 4 】

O L E D デバイスは、溶液処理と熱蒸発技法とを併用することによって作製した。パターン化インジウム・スズ・酸化物 (I T O) で被覆されたガラス基板 (T h i n F i l m D e v i c e s , I n c からのも) を使用した。こうした I T O 基板は、シート抵抗が 3 0 / であり光透過率が 8 0 % である I T O で被覆された C o r n i n g 1 7 3 7 ガラスをベースにしている。パターン化 I T O 基板を、洗浄剤水溶液中で超音波を使って清浄にし、蒸留水ですすいだ。その後、パターン化 I T O をアセトン中で超音波を使って清浄にし、イソプロパノールですすぎ、窒素流で乾燥させた。

10

【 0 2 4 5 】

デバイスの作製の直前に、清浄にしたパターン化 I T O 基板を紫外オゾンで 1 0 分間処理した。冷却直後に、H I J - 1 の水性分散液を、I T O 表面を覆うようにスピンコーティングし、加熱して溶媒を除去した。冷却後、基板に正孔輸送物質をスピンコーティングし、加熱して溶媒を除去した。冷却後、基板に、電気活性層物質のトルエン中の溶液をスピンコーティングし、加熱して溶媒を除去した。基板をマスキングし、真空チャンバーに入れた。電子輸送層を熱蒸発によって付着させ、その後、C s F 層を付着させた。次いで真空中でマスクを変え、A l 層を熱蒸発で付着させた。チャンバーのガス抜きを行い、ガラスの蓋、乾燥剤、および紫外線硬化性エポキシを用いてデバイスを封入した。

20

【 0 2 4 6 】

O L E D 試料は、(1) 電流 - 電圧 (I - V) 曲線、(2) エレクトロルミネセンスの輝度対電圧、および (3) エレクトロルミネセンススペクトル対電圧を測定して特徴を決定した。3 種類の測定はすべて同時にコンピュータで実行し制御した。ある一定電圧でのデバイスの電流効率は、L E D のエレクトロルミネセンス輝度を、デバイスを作動させるのに必要な電流密度で割ることによって求められる。単位は c d / A である。結果を表 2 に示す。

【 0 2 4 7 】

【表 1】

30

表 1. エレクトロルミネセンス層

例	第 1 の ホスト	第 2 の ホスト	重量比 第 1 のホスト: 第 2 の ホスト: ドーパント	厚さ (nm)
実施例 4	A1	B-1	67:25:8	73
比較例 A	B-2	B-1	67:25:8	79
実施例 5	A1	B-1	67:25:8	70
比較例 B	B-2	B-1	67:25:8	70
実施例 6	A17	B-2	25:67:8	76
比較例 C	B-1	B-2	25:67:8	77

40

【 0 2 4 8 】

【表 2】

表 2.デバイス性能

例	CIE (x,y)	電圧 (V)	C.E. (cd/A)	E.Q.E. (%)	P.E. (lm/W)	寿命試験 電流密度 (mA/cm ²)	寿命試験 輝度(ニト)	元の T50 (h)	1000 ニト における 予測寿命 T50
4	0.680, 0.318	5.6	13.8	17.2	7.7	123	8366	2450	112,119
A	0.680, 0.318	5.9	13.6	17.1	7.3	129	8698	1130	55,464
5	0.680, 0.318	5.8	13.0	16.9	7.0	127	8300	3000	135,341
B	0.680, 0.318	5.8	12.3	15.8	6.7	125	7692	1442	56,736
6	0.681, 0.317	5.8	12.7	16.6	6.9	125	8222	1741	77,231
C	0.681, 0.317	6.0	12.8	17.2	6.7	125	8055	1350	57,707

*すべてのデータは 1000 ニトにおけるものであり、C.E. = 電流効率であり、; CIE_x および CIE_y は、は、C.I.E.色度図(Commission Internationale de L'Eclairage,1931)に準拠した x および y の色座標を意味する。E.Q.E.は量子効率であり、P.E.は出力効率である。元の T50 は、デバイスが、特定の寿命試験輝度における初期輝度の 50% に到達するまでの時間の単位での時間である。予測 T50 は、1.8 の促進因子を使用した 1000 ニトにおける予測寿命である。

【 0 2 4 9 】

概要および実施例において上で述べた作業のすべてが必要であるわけではないこと、特定作業の一部は必要ではないことがあること、また説明したものに加えて 1 つまたは複数の更なる作業が実行されうること留意されたい。またさらに、列挙されている作業の順序は、必ずしもそれらが実行される順序ではない。

【 0 2 5 0 】

上記の明細書により、各概念が特定の実施形態に関連して説明された。しかし、以下の請求項に記載した本発明の範囲から逸脱することなく様々な修正および変更を行うことができることは、当業者により理解される。したがって、明細書および図は、制限的な意味ではなく例示的なものと見なすべきであり、そのような修正はすべて本発明の範囲に含まれることが意図される。

【 0 2 5 1 】

上記において、便益、他の利点、および問題の解決法は、特定の実施形態に関連して説明されている。しかし、便益、利点、問題の解決法、ならびにいずれかの便益、利点、または解決法をもたらしうるかまたはより顕著なものにしうるどの特徴も、いずれかまたはすべての請求項の重要な特徴、必須の特徴、または基本的特徴と解釈すべきではない。

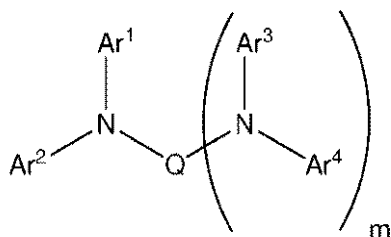
【 0 2 5 2 】

明快にするために別々の実施形態の文脈において本明細書で説明されている特定の複数の特徴を、1 つの実施形態で兼ね備えさせることもできることを理解すべきである。その逆に、簡潔にするために 1 つの実施形態の文脈で説明されている様々な特徴を、別個に、あるいは任意の副次的な組合せで備えさせることもできる。さらに、範囲内に示されている値に言及する場合、それはその範囲内の各値およびすべての値を含む。

本出願は、特許請求の範囲に記載の発明を含め、以下の発明を包含する。

(1) 重水素化された第 1 のホスト物質とエレクトロルミネセンスドーパント物質とを含む電気活性組成物であって、前記第 1 のホスト物質が式 I :

【化 1】



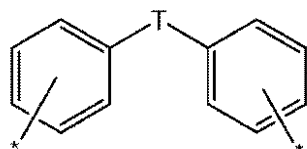
[式中 :

10

Ar¹ ~ Ar⁴は同一または異なっていて、アリールであり ;

Q は、多価アリール基、および

【化 2】



からなる群から選択され ;

20

T は、(CR')_a、SiR₂、S、SO₂、PR、PO、PO₂、BR、および R からなる群から選択され ;

R は、それぞれの出現において同一または異なっていて、アルキル、およびアリールからなる群から選択され ;

R' は、それぞれの出現において同一または異なっていて、H、D、およびアルキルからなる群から選択され ;

a は 1 ~ 6 の整数であり ;

m は 0 ~ 6 の整数である]

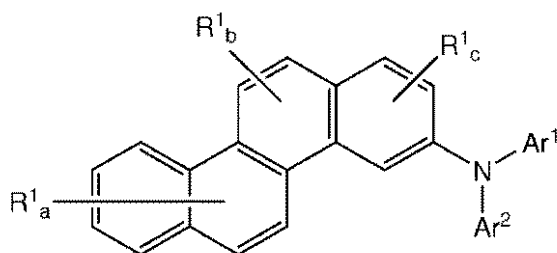
を有し、重水素化されている化合物である、電気活性組成物。

(2) Q が、アントラセン類、クリセン類、ピレン類、フェナントレン類、トリフェニレン類、フェナントロリン類、ナフタレン類、アントラセン類、キノリン類、イソキノリン類、キノキサリン類、フェニルピリジン類、ジベンゾフラン類、ジフラノベンゼン類、インドロカルバゾール類、それらの置換誘導体、およびそれらの重水素化類似体からなる群から選択される、(1) に記載の組成物。

30

(3) 前記第 1 のホスト物質が式 I I

【化 3】



40

式 II

[式中 :

R¹ は、それぞれの出現において同一または異なっていて、D、アルキル、アルコキシ、シリル、およびシロキサンからなる群から選択されるか、あるいは隣接した R¹ 基は互

50

いに結合して5または6員の脂肪族環を形成してもよく、
 Ar^1 および Ar^2 は同一または異なっていて、アリール基であり、
 a は0～6の整数であり；
 b は0～2の整数であり；
 c は0～3の整数である]

を有する、(1)に記載の組成物。

(4) (c)第2のホスト物質をさらに含む、(1)に記載の組成物。

(5) 前記第2のホスト物質が、フェナントロリン類、キノキサリン類、フェニルピリジン類、ベンゾジフラン類、ジフラノベンゼン類、インドロカルバゾール類、ベンゾイミダゾール類、トリアゾロピリジン類、ジヘテロアリールフェニル類、金属キノリネート錯体類、それらの置換誘導体、それらの重水素化類似体、およびそれらの組み合わせからなる群から選択される、(4)に記載の組成物。

10

(6) 前記第1のホスト物質対前記第2のホスト物質の重量比が99：1～1：5の範囲内である、(4)に記載の組成物。

(7) 前記第1のホストおよび前記第2のホストのそれぞれのトルエンに対する溶解度が少なくとも0.6重量%である、(4)に記載の組成物。

(8) 前記ドーパント物質が有機金属錯体である、(1)に記載の組成物。

(9) 前記ドーパント物質がIrのシクロメタレート化錯体である、(8)に記載の組成物。

(10) 2つの電気接触層とそれらの間の有機電気活性層を含む有機発光デバイスであって、前記電気活性層が：重水素化された第1のホスト物質とエレクトロルミネセンスドーパント物質とを含み、前記第1のホストが、上記(1)～(9)のいずれか一項に記載の化合物であり、任意選択的に、前記電気活性層が、フェナントロリン類、キノキサリン類、フェニルピリジン類、ベンゾジフラン類、ジフラノベンゼン類、インドロカルバゾール類、ベンゾイミダゾール類、トリアゾロピリジン類、ジヘテロアリールフェニル類、金属キノリネート錯体類、それらの置換誘導体、それらの重水素化類似体、およびそれらの組み合わせからなる群から選択される第2のホスト物質をさらに含む、有機発光デバイス。

20

(11) $Ar^1 \sim Ar^4$ が独立して、フェニル、ビフェニル、ターフェニル、クアルテルフェニル(quarter phenyl)、ナフチル、フェナントリル、ナフチルフェニル、およびフェナントリルフェニルからなる群から選択される、(10)に記載のデバイス。

30

(12) $Ar^1 \sim Ar^4$ の少なくとも1つが、アルキル基、アルコキシ基、およびシリル基からなる群から選択される少なくとも1つの置換基を有する、(10)に記載のデバイス。

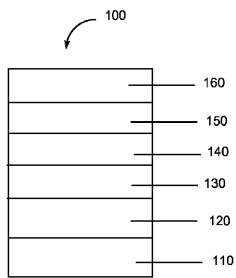
(13) Qが、少なくとも2つの縮合芳香環を有するアリール基である、(10)に記載のデバイス。

(14) Qが3～5個の縮合芳香環を有する、(13)に記載のデバイス。

(15) Qがクリセンであり、mが1または2である、(13)に記載のデバイス。

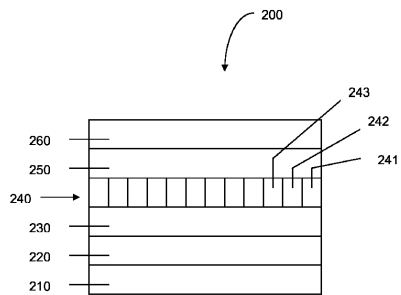
【 図 1 】

FIG. 1



【 図 2 】

FIG. 2



フロントページの続き

- (72)発明者 ノーラ サビナ ラドゥ
アメリカ合衆国 1 9 3 5 0 ペンシルベニア州 ランデンバーグ ストーニー リッジ ロード
1 0 9
- (72)発明者 ウェイシ ウー
アメリカ合衆国 1 9 3 5 0 ペンシルベニア州 ランデンバーグ トータスシェル レーン 1
- (72)発明者 ガオ ウェイイン
アメリカ合衆国 1 9 3 5 0 ペンシルベニア州 ランデンバーグ チェインゲート サークル
2 2 3
- (72)発明者 ノーマン ヘロン
アメリカ合衆国 1 9 7 1 1 デラウェア州 ニューアーク アップル ロード 4 0 8
- (72)発明者 エリック モーリス スミス
アメリカ合衆国 1 9 7 0 7 デラウェア州 ホッケシン スプリングハウス レーン 3 5 9
- (72)発明者 クリスティーナ エム・オールダー
アメリカ合衆国 1 9 8 0 8 デラウェア州 ウィルミントン パーチ サークル 4 8 0 9
- (72)発明者 アダム フェニモア
アメリカ合衆国 1 9 8 0 8 デラウェア州 ウィルミントン アビー ロード 7 0 4
- (72)発明者 イン ワン
アメリカ合衆国 1 9 8 1 0 デラウェア州 ウィルミントン グリーンマウント ロード 4 0
1 0
- (72)発明者 ダニエル デービッド ルクルー
アメリカ合衆国 4 8 6 4 2 ミシガン州 ミッドランド ウッド ポワンテ レーン 1 6 0 6
ナンバー 2
- (72)発明者 カリンディ ドグラ
アメリカ合衆国 1 9 8 0 8 デラウェア州 ウィルミントン チャンピオンズ ドライブ 3 2
5 0
- (72)発明者 フセボロド ロストフツェフ
アメリカ合衆国 1 9 0 8 1 ペンシルベニア州 スワースモア ケニオン アベニュー 2 4 3
- (72)発明者 ジェラルド フェルドマン
アメリカ合衆国 1 9 8 0 2 デラウェア州 ウィルミントン チャニング ロード 4 4 0 3
- (72)発明者 シッダールタ シェノイ
アメリカ合衆国 1 9 8 0 6 デラウェア州 ウィルミントン シャルクロス アベニュー 1 3
2 7

審査官 素川 慎司

- (56)参考文献 特開 2 0 0 9 - 2 7 7 7 9 0 (J P , A)
特開 2 0 0 4 - 1 1 1 3 7 9 (J P , A)
特表 2 0 0 9 - 5 3 0 3 7 1 (J P , A)
特表 2 0 0 9 - 5 0 2 7 7 8 (J P , A)
特開 2 0 0 4 - 1 8 2 7 3 7 (J P , A)
特開 2 0 1 1 - 6 0 8 7 8 (J P , A)
特表 2 0 1 3 - 5 0 1 7 8 3 (J P , A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

H 0 1 L 5 1 / 5 0
C 0 9 K 1 1 / 0 6
C 0 7 C 2 1 1 / 5 4
C 0 7 C 2 1 1 / 5 9

C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)