

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6143748号  
(P6143748)

(45) 発行日 平成29年6月7日 (2017.6.7)

(24) 登録日 平成29年5月19日 (2017.5.19)

(51) Int. Cl.

F I

C O 7 D 235/18 (2006.01)

C O 7 D 235/18

C S P

C O 9 K 11/06 (2006.01)

C O 9 K 11/06

6 9 O

H O 1 L 51/50 (2006.01)

H O 5 B 33/14

B

請求項の数 3 (全 39 頁)

(21) 出願番号 特願2014-517179 (P2014-517179)  
 (86) (22) 出願日 平成24年6月21日 (2012.6.21)  
 (65) 公表番号 特表2014-524909 (P2014-524909A)  
 (43) 公表日 平成26年9月25日 (2014.9.25)  
 (86) 国際出願番号 PCT/US2012/043595  
 (87) 国際公開番号 W02012/177914  
 (87) 国際公開日 平成24年12月27日 (2012.12.27)  
 審査請求日 平成27年6月15日 (2015.6.15)  
 審判番号 不服2016-2323 (P2016-2323/J1)  
 審判請求日 平成28年2月16日 (2016.2.16)  
 (31) 優先権主張番号 13/166, 246  
 (32) 優先日 平成23年6月22日 (2011.6.22)  
 (33) 優先権主張国 米国 (US)

(73) 特許権者 000003964  
 日東電工株式会社  
 大阪府茨木市下穂積 1 丁目 1 番 2 号  
 (74) 代理人 110000729  
 特許業務法人 ユニাস国際特許事務所  
 (72) 発明者 チェン、シジュン  
 アメリカ合衆国 カリフォルニア州 92  
 129、サン ディエゴ、8309 オレ  
 ンジ ヘヴン プレイス  
 (72) 発明者 マ、リーピン  
 アメリカ合衆国 カリフォルニア州 92  
 130、サン ディエゴ、6203 ヴァ  
 ーダ レーン

早期審査対象出願

最終頁に続く

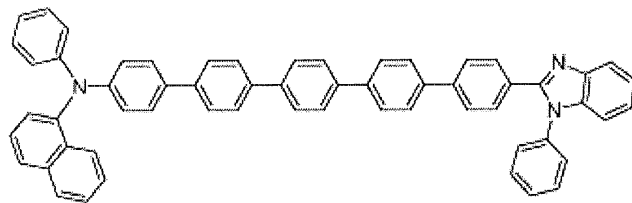
(54) 【発明の名称】 ポリフェニレンホスト化合物

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記式で表される化合物。

【化 1】



10

【請求項 2】

請求項 1 に記載の化合物を含むものである発光デバイス。

【請求項 3】

該化合物が発光層におけるホストである、請求項 2 に記載の発光デバイス。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

20

## 【 0 0 0 1 】

( 関連出願の相互参照 )

本出願は、2011年6月22日に出願された米国特許出願第13/166,246号の優先権を主張する。該米国特許出願の開示は引用によりその全体が本明細書に組み込まれる。

## 【 背景技術 】

## 【 0 0 0 2 】

( 発明の分野 )

本実施形態は、デバイスの発光層のためのホスト化合物に関する。

## 【 0 0 0 3 】

( 関連技術の記載 )

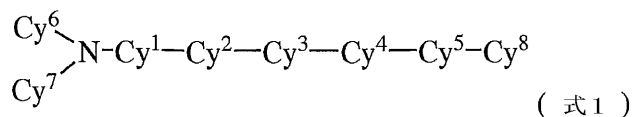
有機発光デバイス ( O L E D ) は、照明用途およびディスプレイ用途において次第に重要になってきている。O L E Dは、ホスト材料と該ホスト材料中に分散された発光成分を含む放出層または発光層を含むものであり得る。O L E Dにおけるホスト材料は、低い安定性、高い電荷注入障壁、および電荷の注入と移動度の不均衡という問題を有することがあり得る。このようなホスト材料に伴う潜在的欠陥は、該ホスト材料を含むものであるデバイスの低効率および短寿命の一因となり得る。

## 【 発明の概要 】

## 【 0 0 0 4 】

一部の実施形態は、式 1 :

## 【 化 1 】



で表され、

式中、 $\text{Cy}^1$ 、 $\text{Cy}^2$ 、 $\text{Cy}^3$ 、 $\text{Cy}^4$  および  $\text{Cy}^5$  は独立して、任意選択的に置換されている p - フェニレンであり； $\text{Cy}^6$  は、任意選択的に置換されているフェニルであり； $\text{Cy}^7$  は、任意選択的に置換されているフェニルまたは任意選択的に置換されているナフタレニルであり、ここで、 $\text{Cy}^6$  および  $\text{Cy}^7$  は任意選択で一体に連結されて、これらが結合している N を含む第 3 の環を形成しており； $\text{Cy}^8$  は、任意選択的に置換されている 1 - フェニル - 1 H - ベンゾ [ d ] イミダゾール - 2 - イルである化合物を包含するものである。

## 【 0 0 0 5 】

式 1 に関して、一部の実施形態では、 $\text{Cy}^1$ 、 $\text{Cy}^2$ 、 $\text{Cy}^3$ 、 $\text{Cy}^4$  および  $\text{Cy}^5$  は独立して、 $\text{C}_1 \sim 6$  アルキルおよび F から独立して選択される 1 個または 2 個の置換基で任意選択的に置換されている p - フェニレンであり； $\text{Cy}^6$  は、 $\text{C}_1 \sim 6$  アルキルおよび F から独立して選択される 1、2 または 3 個の置換基で任意選択的に置換されているフェニルであり； $\text{Cy}^7$  は、 $\text{C}_1 \sim 6$  アルキルおよび F から独立して選択される 1、2 または 3 個の置換基で任意選択的に置換されているナフタレン - 1 - イルであり； $\text{Cy}^8$  は、 $\text{C}_1 \sim 6$  アルキルおよび F から独立して選択される 1、2、3、4 または 5 個の置換基で任意選択的に置換されている 1 - フェニル - 1 H - ベンゾ [ d ] イミダゾール - 2 - イルである。

## 【 0 0 0 6 】

一部の実施形態は、任意選択的に置換されているペンタ ( パラ - フェニレニル ) 化合物、たとえば、任意選択的に置換されている 1 - ( 1 - フェニル - 1 H - ベンゾ [ d ] イミダゾール - 2 - イル ) - [ 4 - フェニル ( ナフタレン - 1 - イル ) アミノ ] ペンタ ( パラ - フェニレニル ) ；任意選択的に置換されている 1 - ( 1 - フェニル - 1 H - ベンゾ [

10

20

30

40

50

d]イミダゾール-2-イル)-[4<sup>e</sup>-(カルバゾール-9-イル)アミノ]ペンタ(パラ-フェニレニル);任意選択的に置換されている1-(1-フェニル-1H-ベンゾ[d]イミダゾール-2-イル)-[4<sup>e</sup>-ジフェニルアミノ]ペンタ(パラ-フェニレニル);任意選択的に置換されている1-(1-フェニル-1H-ベンゾ[d]イミダゾール-2-イル)-[4<sup>e</sup>-フェニル(ナフタレン-2-イル)アミノ]ペンタ(パラ-フェニレニル);任意選択的に置換されている1-(1-フェニル-1H-ベンゾ[d]イミダゾール-2-イル)-[4<sup>e</sup>-ジ(4-メチルフェニル)アミノ]ペンタ(パラ-フェニレニル);などを包含するものである。

【0007】

一部の実施形態は、本明細書に記載の化合物を含むものである発光デバイスを包含する。

10

【0008】

これらおよび他の実施形態を本明細書においてさらに詳細に説明する。

【図面の簡単な説明】

【0009】

【図1】図1は、本明細書に開示した化合物を含むものであるOLEDの一実施形態の模式図である。

【0010】

【図2】図2は、本明細書に開示した化合物を含むものであるデバイスのエレクトロルミネセンススペクトルである。

20

【0011】

【図3】図3は、本明細書に開示した化合物を含むものであるOLEDの一実施形態の駆動電圧の関数としての電流密度および輝度のプロットである。

【0012】

【図4】図4は、本明細書に開示した化合物を含むものであるOLEDの一実施形態の輝度の関数としての電流効率および電力効率のプロットである。

【発明を実施するための形態】

【0013】

特に記載のない限り、アリールなどの化合物または化学構造特徴部を「任意選択的に置換されている」という場合、これは、該特徴部が置換基を有していなくてもよく(すなわち、非置換である)、1個以上の置換基を有していてもよいことを意図する。「置換されている」特徴部は1つ以上の置換基を有する。用語「置換基」は、当業者に知られた通常の意味を有する。一部の実施形態では、置換基は、15g/mol~50g/mol、15g/mol~100g/mol、15g/mol~200g/mol、15g/mol~300g/molまたは15g/mol~500g/molの分子量(たとえば、該置換基の原子の原子量の和)を有するものであり得る当該技術分野で知られた通常の有機部分であり得る。一部の実施形態では、置換基は、0~30、0~20、0~10、または0~5個の炭素原子;およびN、O、S、Si、F、Cl、BrまたはIから独立して選択される0~30、0~20、0~10、または0~5個のヘテロ原子を含むものである;ただし、該置換基は、C、N、O、S、Si、F、Cl、BrまたはIから選択される少なくとも1個の原子を含むものとする。置換基の例としては、限定されないが、アルキル、アルケニル、アルキニル、ヘテロアルキル、ヘテロアルケニル、ヘテロアルキニル、アリール、ヘテロアリール、ヒドロキシ、アルコキシ、アリーロキシ、アシル、アシルオキシ、アルキルカルボキシレート、チオール、アルキルチオ、シアノ、ハロ、チオカルボニル、O-カルバミル、N-カルバミル、O-チオカルバミル、N-チオカルバミル、C-アミド、N-アミド、S-スルホンアミド、N-スルホンアミド、イソシアナト、チオシアナト、イソチオシアナト、ニトロ、シリル、スルフェニル、スルフィニル、スルホニル、ハロアルキル、ハロアルコキシル、トリハロメタンスルホニル、トリハロメタンスルホンアミド、アミノなどがあげられる。一部の実施形態では、2個の置換基が結合して環を形成していてもよい。一部の実施形態では、置換基は、2つ以上の構造特徴部に結合

30

40

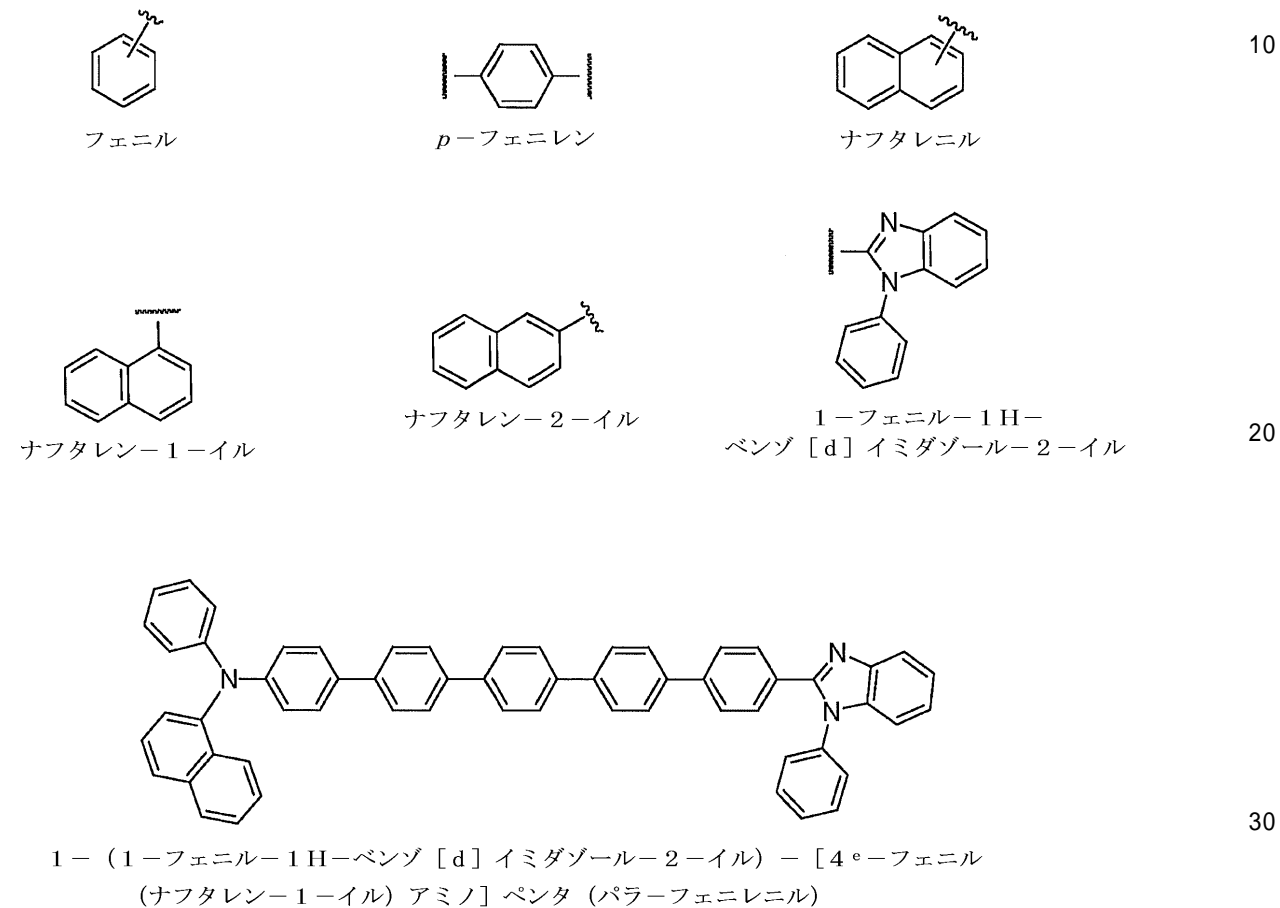
50

している連結基であり得、たとえば、置換基は、 $Cy^1$ 、 $Cy^2$  および連結置換基（たとえば、アルキル、 $-O-$ 、 $-NH-$  など）が三環式縮合環系（本明細書においてさらに詳細に記載している）を形成するような該連結置換基であり得る。

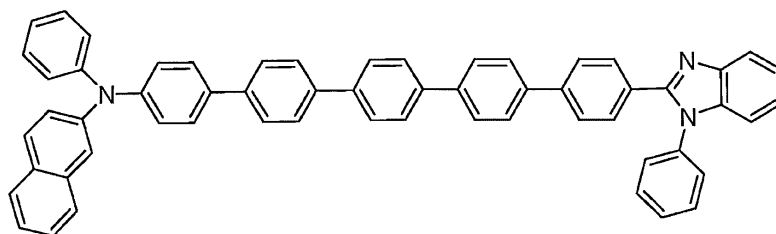
【0014】

本明細書において言及している化学名の一部と関連している構造を以下に示す。これらの構造は、以下に示すような非置換のものであってもよく、該構造が非置換である場合は通常、水素原子で占められている任意の位置に独立して置換基が存在していてもよい。

【化2】

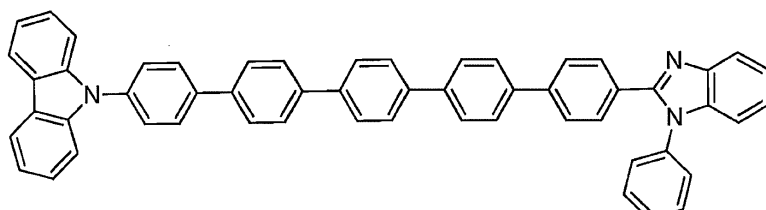


## 【化 3】

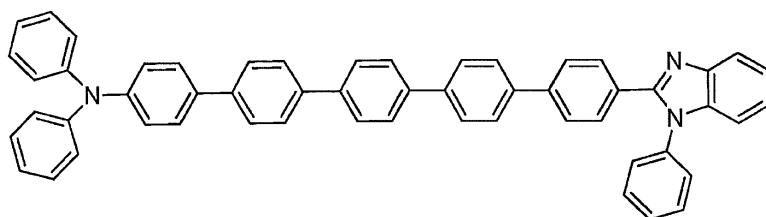


1 - (1-フェニル-1H-ベンゾ [d] イミダゾール-2-イル) - [4'-フェニル  
(ナフタレン-2-イル) アミノ] ペンタ (パラ-フェニレニル)

10

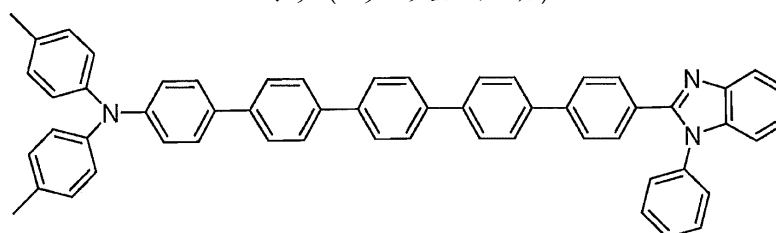


1 - (1-フェニル-1H-ベンゾ [d] イミダゾール-2-イル) - [4'- (カルバゾール-9-イル) アミノ]  
ペンタ (パラ-フェニレニル)



1 - (1-フェニル-1H-ベンゾ [d] イミダゾール-2-イル) - [4'-ジフェニルアミノ]  
ペンタ (パラ-フェニレニル)

20



1 - (1-フェニル-1H-ベンゾ [d] イミダゾール-2-イル) - [4'-ジ (4-メチルフェニル) アミノ]  
ペンタ (パラ-フェニレニル)

30

## 【0015】

本明細書で用いる場合、用語「アルキル」は、当該技術分野で一般的に理解されている通常の意味を有し、炭素と水素で構成されており、二重結合または三重結合を含まない部分が包含され得る。アルキルは線状アルキル、分枝状アルキル、シクロアルキルまたはその組合せであり得、一部の実施形態では1～35個の炭素原子を含むものであり得る。一部の実施形態では、アルキルとしては、 $C_{1 \sim 10}$  線状アルキル、たとえば、メチル ( $-CH_3$ )、エチル ( $-CH_2CH_3$ )、 $n$ -プロピル ( $-CH_2CH_2CH_3$ )、 $n$ -ブチル ( $-CH_2CH_2CH_2CH_3$ )、 $n$ -ペンチル ( $-CH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ )、 $n$ -ヘキシル ( $-CH_2CH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ) など； $C_{3 \sim 10}$  分枝状アルキル、たとえば、 $C_3H_7$  (たとえば、イソプロピル)、 $C_4H_9$  (たとえば、分枝状ブチル異性体)、 $C_5H_{11}$  (たとえば、分枝状ペンチル異性体)、 $C_6H_{13}$  (たとえば、分枝状ヘキシル異性体)、 $C_7H_{15}$  (たとえば、ヘプチル異性体) など； $C_{3 \sim 10}$  シクロアルキル、たとえば、 $C_3H_5$  (たとえば、シクロプロピル)、 $C_4H_7$  (たとえばシクロブチル異性体、たとえば、シクロブチル、メチルシクロプロピルなど)、 $C_5H_9$  (たとえばシクロペンチル異性体、たとえば、シクロペンチル、メチルシクロブ

40

50

チル、ジメチルシクロプロピルなど)  $C_6H_{11}$  (たとえば、シクロヘキシル異性体)、 $C_7H_{13}$  (たとえば、シクロヘプチル異性体) など; などがあげられ得る。一部の実施形態では、アルキルは、2つ以上の構造特徴部に結合している連結基であり得、たとえば、アルキルは、 $Cy^1$ 、 $Cy^2$  および連結置換基が三環式縮合環系 (以下においてさらに詳細に記載している) を形成するような該連結置換基であり得る。

【0016】

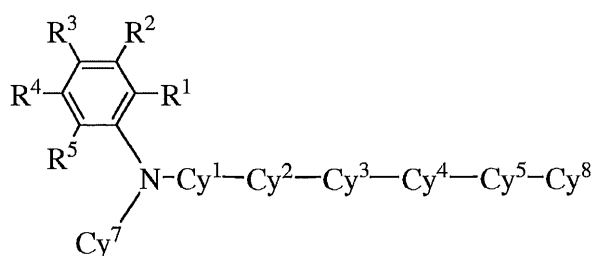
本明細書で用いる場合、用語「アルコキシ」には、 $-O-$ アルキル、たとえば、 $-OCH_3$ 、 $-OC_2H_5$ 、 $-OC_3H_7$  (たとえばプロポキシ異性体、たとえば、イソプロポキシ、 $n$ -プロポキシなど)、 $-OC_4H_9$  (たとえば、ブトキシ (b u t y o x y) 異性体)、 $-OC_5H_{11}$  (たとえば、ペントキシ異性体)、 $-OC_6H_{13}$  (たとえば、ヘキソキシ異性体)、 $-OC_7H_{15}$  (たとえば、ヘプトキシ異性体) などが包含される。

10

【0017】

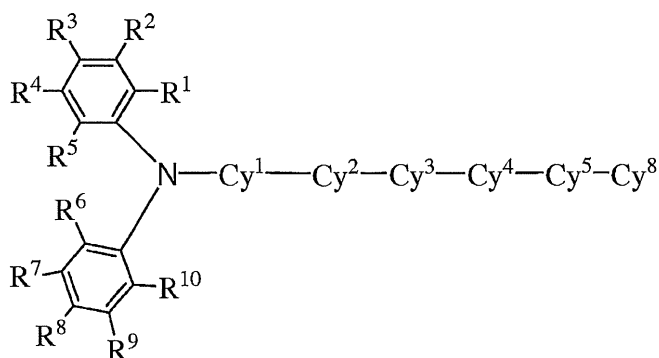
式1には、式2～24で示されるものなどの化合物が包含される。

【化4】



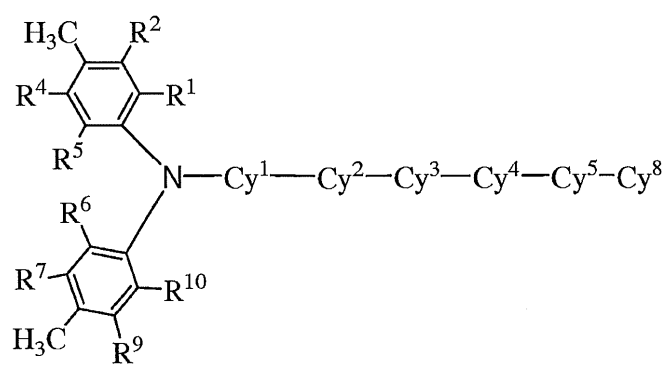
20

式2



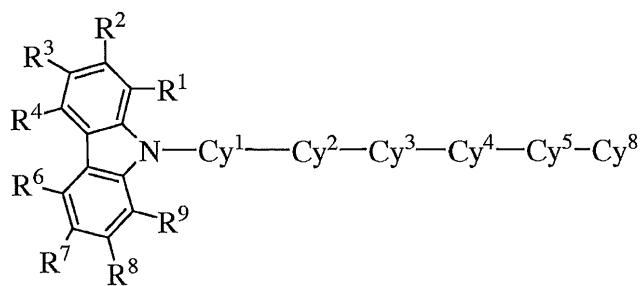
30

式3



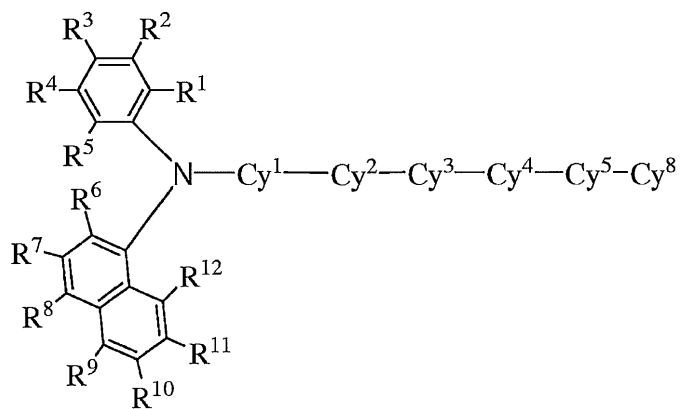
式4

10



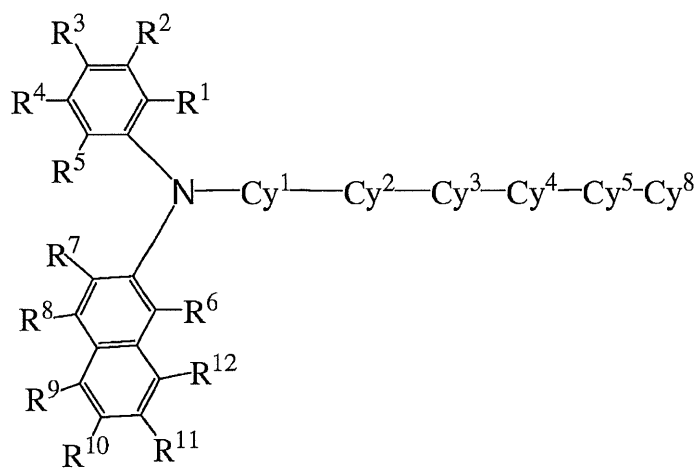
式5

20



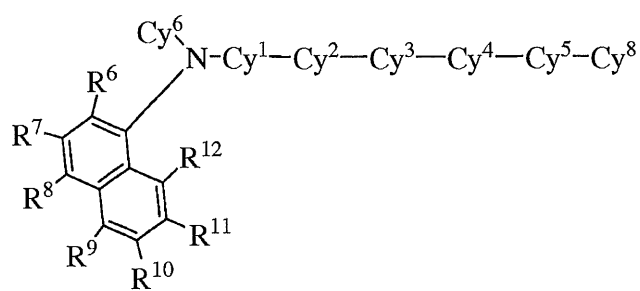
式6

30



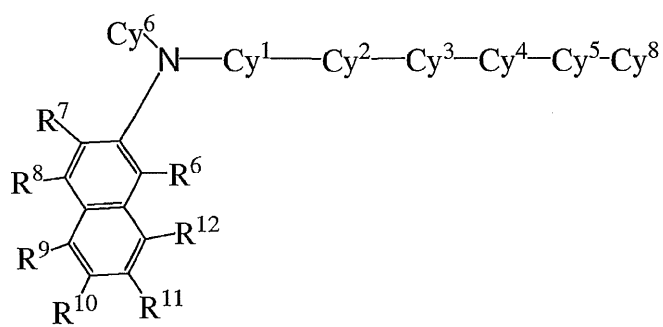
式 7

10



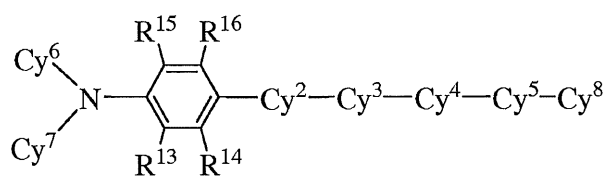
式 8

20



式 9

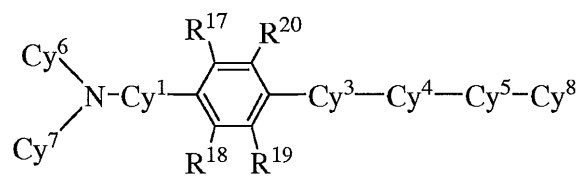
30



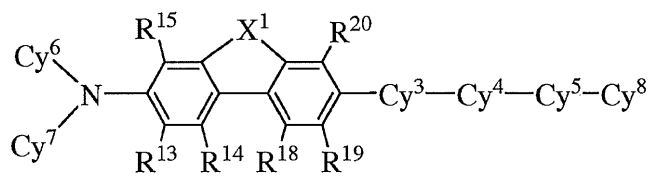
式 1 0

40

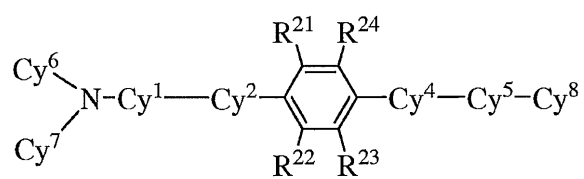




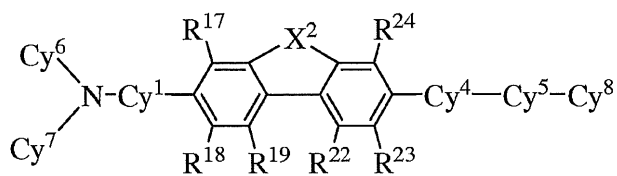
式 1 1



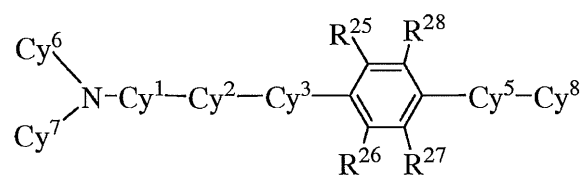
式 1 2



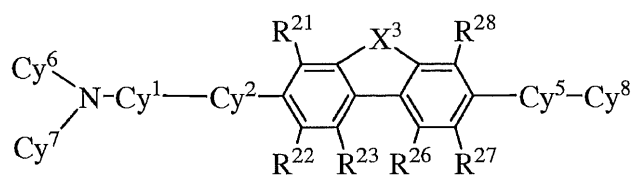
式 1 3



式 1 4



式 1 5



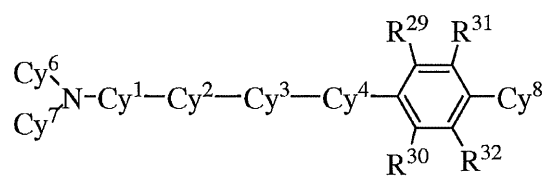
式 1 6

10

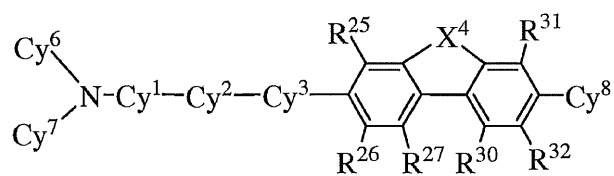
20

30

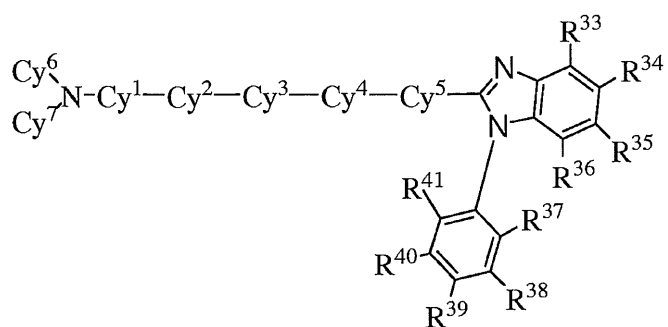
40



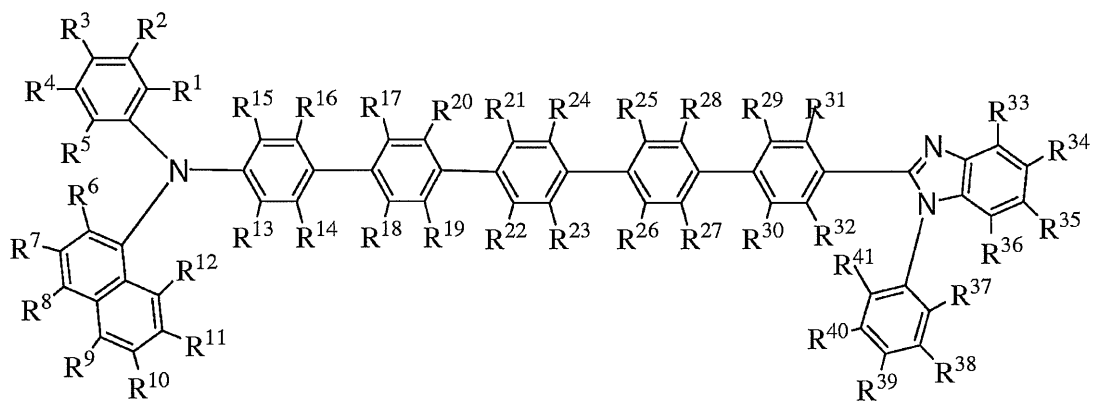
式 1 7



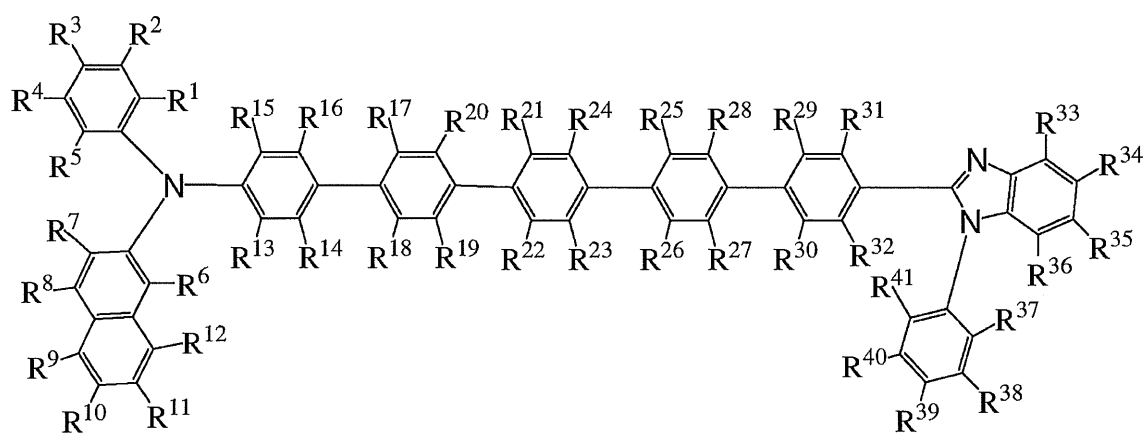
式 1 8



式 1 9

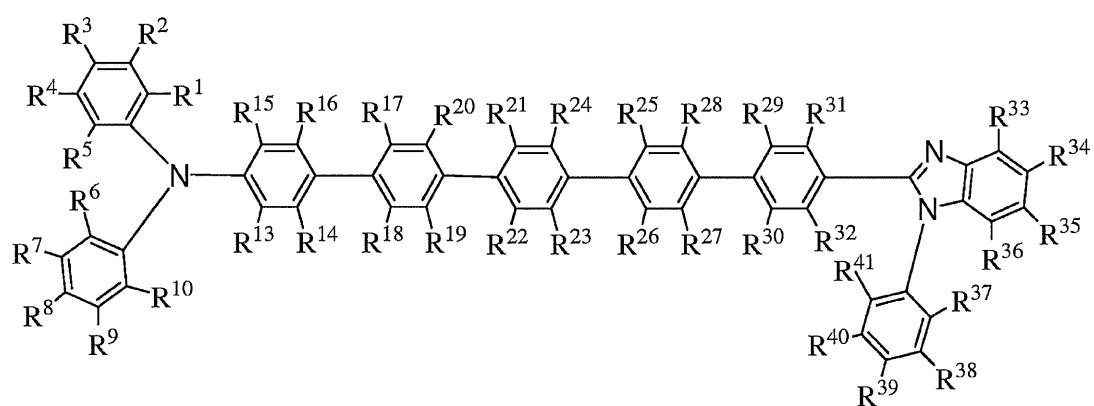


式 2 0



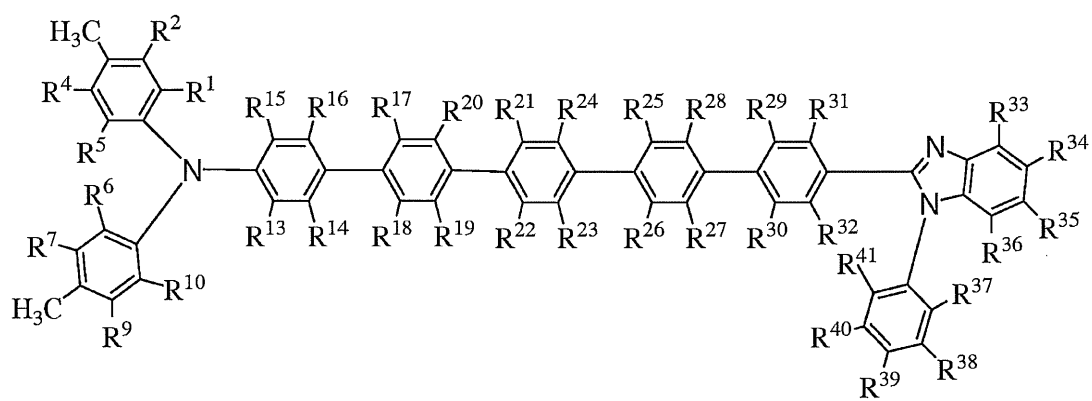
式 2 1

10



式 2 2

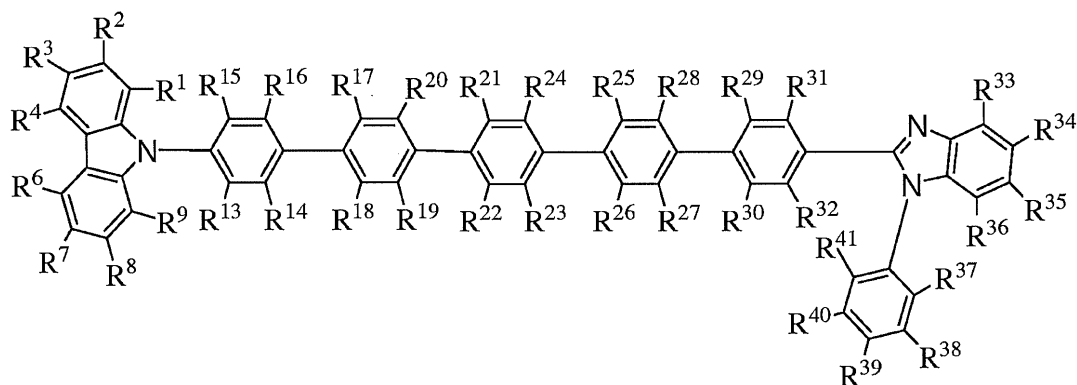
20



式 2 3

30

40



10

式 2 4

## 【 0 0 1 8 】

本明細書における任意の該当する式または構造図示に関して、C y 1、C y 2、C y 3、C y 4 および C y 5 は、独立して、任意選択的に置換されている p - フェニレンであり得る。当業者には、隣接した 5 つの p - フェニレン部分を有する化合物の合成では、かなりの技術的および合成的困難が提示されるが明白な有益性はないことが容易に認識されよう。したがって、本明細書に教示が示されていなくても、当業者はかかる分子立体配置を回避する傾向にある。一部の実施形態において、該 p - フェニレンが置換されている場合、これは 1、2、3 または 4 個の置換基を有するものであり得る。一部の実施形態では、該 p - フェニレン上の置換基の一部または全部が、0 ~ 10 個の炭素原子ならびに O、N、S、F、Cl、Br および I から独立して選択される 0 ~ 10 個のヘテロ原子；および / または 15 g / mol ~ 500 g / mol の分子量を有するものであり得る。たとえば、該置換基は、C 1 ~ 10 アルキル、たとえば、CH<sub>3</sub>、C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>、環状 C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>、C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>、環状 C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>、C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>、環状 C<sub>5</sub>H<sub>9</sub>、C<sub>6</sub>H<sub>13</sub>、環状 C<sub>6</sub>H<sub>11</sub> など；C 1 ~ 10 アルコキシ；ハロ、たとえば、F、Cl、Br、I；OH；CN；NO<sub>2</sub>；C 1 ~ 6 フルオロアルキル、たとえば、CF<sub>3</sub>、CF<sub>2</sub>H、C<sub>2</sub>F<sub>5</sub> など；C 1 ~ 10 エステル、たとえば、- O<sub>2</sub>CCCH<sub>3</sub>、- CO<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、- O<sub>2</sub>CC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、- CO<sub>2</sub>C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、- O<sub>2</sub>C - フェニル、- CO<sub>2</sub> - フェニルなど；C 1 ~ 10 ケトン、たとえば、- COCH<sub>3</sub>、- COC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、- COC<sub>3</sub>H<sub>7</sub>、- CO - フェニルなど；または C 1 ~ 10 アミン、たとえば、NH<sub>2</sub>、NH(CH<sub>3</sub>)、N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、N(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub> などであり得る。一部の実施形態では、該 p - フェニレンは、C<sub>1</sub> ~ C<sub>6</sub> アルキルおよび F から独立して選択される 1 個または 2 個の置換基で任意選択的に置換されている。

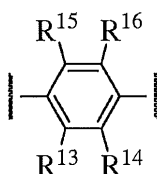
20

30

## 【 0 0 1 9 】

一部の実施形態では、C y<sup>1</sup> が：

## 【 化 5 】



40

であり得る。

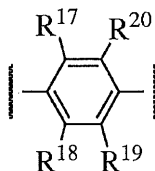
## 【 0 0 2 0 】

一部の実施形態では、C y<sup>1</sup> が非置換である。

## 【 0 0 2 1 】

一部の実施形態では、C y<sup>2</sup> が：

## 【化 6】



であり得る。

## 【0022】

一部の実施形態では、 $Cy^2$  が非置換である。

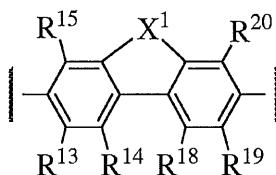
## 【0023】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式 1、2、3、4、5、6、7、8、9、13、15、16、17、18 および 19 に関して、一部の実施形態では、 $Cy^1$  および  $Cy^2$  が非置換である。

## 【0024】

一部の実施形態では、 $Cy^1$  と  $Cy^2$  が連結置換基を、 $Cy^1$ 、 $Cy^2$  および該連結置換基が三環式縮合環系を形成するように共有しているものであり得る。たとえば、 $-Cy^1 - Cy^2 -$  は：

## 【化 7】



であり得る。

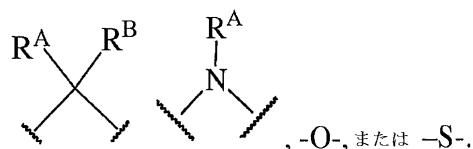
## 【0025】

上記の任意の該当する式または構造図示に関して、 $X^1$  は、 $Cy^1$  を  $Cy^2$  に連結させる任意の置換基であり得る。一部の実施形態では、 $Cy^1$  を  $Cy^2$  に連結させる置換基は、0 ~ 15 個の炭素原子ならびに O、N、S、F、Cl、Br および I から独立して選択される 0 ~ 10 個のヘテロ原子；および / または 15 g/mol ~ 500 g/mol の分子量を有するものであり得る。

## 【0026】

一部の実施形態では、 $X^1$  が：

## 【化 8】

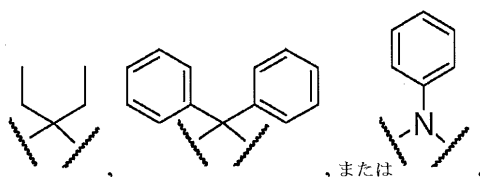


であり得る。

## 【0027】

一部の実施形態では、 $X^1$  が：

## 【化 9】

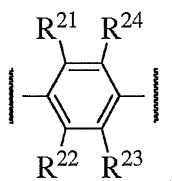


であり得る。

## 【0028】

一部の実施形態では、 $Cy^3$  が：

【化 1 0】



であり得る。

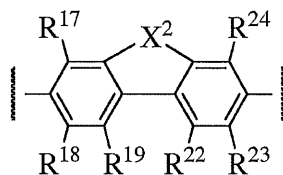
【0029】

一部の実施形態では、 $Cy^3$  が非置換である。

【0030】

一部の実施形態では、 $Cy^2$  と  $Cy^3$  が連結置換基を、 $Cy^2$ 、 $Cy^3$  および該連結置換基が三環式縮合環系を形成するように共有しているものであり得る。たとえば、 $-Cy^2 - Cy^3 -$  は：

【化 1 1】



であり得る。

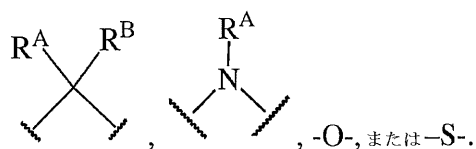
【0031】

上記の任意の該当する式または構造図示に関して、 $X^2$  は、 $Cy^2$  を  $Cy^3$  に連結させる任意の置換基であり得る。一部の実施形態では、 $Cy^2$  を  $Cy^3$  に連結させる置換基は、0 ~ 15 個の炭素原子ならびに O、N、S、F、Cl、Br および I から独立して選択される 0 ~ 10 個のヘテロ原子；および / または 15 g/mol ~ 500 g/mol の分子量を有するものであり得る。

【0032】

一部の実施形態では、 $X^2$  が：

【化 1 2】

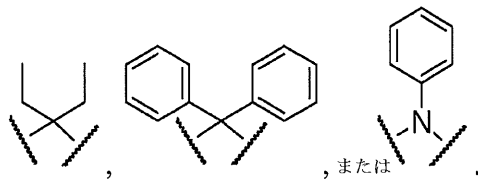


であり得る。

【0033】

一部の実施形態では、 $X^2$  が：

【化 1 3】



であり得る。

【0034】

一部の実施形態では、 $Cy^4$  が：

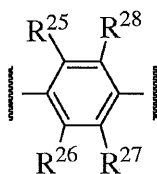
10

20

30

40

## 【化 1 4】



であり得る。

## 【0035】

一部の実施形態では、 $Cy^4$  が非置換である。

10

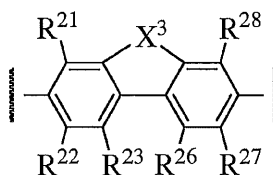
## 【0036】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式 1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、17 および 19 に関して、一部の実施形態では、 $Cy^3$  および  $Cy^4$  が非置換である。

## 【0037】

一部の実施形態では、 $Cy^3$  と  $Cy^4$  が連結置換基を、 $Cy^3$ 、 $Cy^4$  および該連結置換基が三環式縮合環系を形成するように共有しているものであり得る。たとえば、 $-Cy^3 - Cy^4 -$  は：

## 【化 1 5】



20

であり得る。

## 【0038】

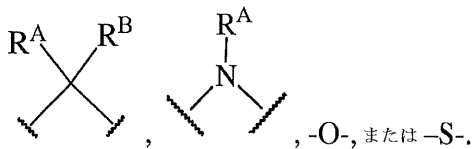
上記の任意の該当する式または構造図示に関して、 $X^3$  は、 $Cy^3$  を  $Cy^4$  に連結させる任意の置換基であり得る。一部の実施形態では、 $Cy^3$  を  $Cy^4$  に連結させる置換基は、0 ~ 15 個の炭素原子ならびに O、N、S、F、Cl、Br および I から独立して選択される 0 ~ 10 個のヘテロ原子；および / または 15 g/mol ~ 500 g/mol の分子量を有するものであり得る。

30

## 【0039】

一部の実施形態では、 $X^3$  が：

## 【化 1 6】



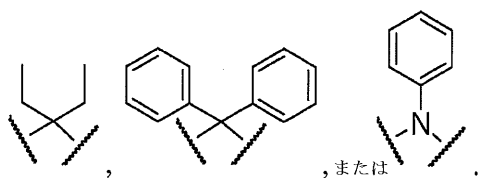
であり得る。

40

## 【0040】

一部の実施形態では、 $X^3$  が：

## 【化 1 7】



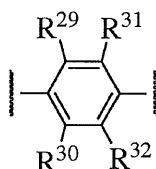
であり得る。

50

## 【 0 0 4 1 】

一部の実施形態では、 $Cy^5$  が：

## 【 化 1 8 】



であり得る。

## 【 0 0 4 2 】

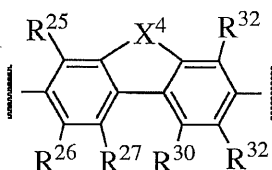
10

一部の実施形態では、 $Cy^5$  が非置換である。

## 【 0 0 4 3 】

一部の実施形態では、 $Cy^4$  と  $Cy^5$  が連結置換基を、 $Cy^4$ 、 $Cy^5$  および該連結置換基が三環式縮合環系を形成するように共有しているものであり得る。たとえば、 $-Cy^4 - Cy^5 -$  は：

## 【 化 1 9 】



20

であり得る。

## 【 0 0 4 4 】

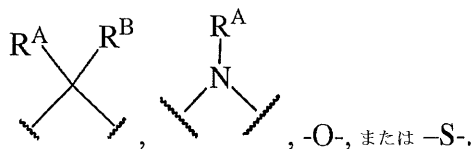
上記の任意の該当する式または構造図示に関して、 $X^4$  は、 $Cy^4$  を  $Cy^5$  に連結させる任意の置換基であり得る。一部の実施形態では、 $Cy^4$  を  $Cy^5$  に連結させる置換基は、0 ~ 15 個の炭素原子ならびに O、N、S、F、Cl、Br および I から独立して選択される 0 ~ 10 個のヘテロ原子；および / または 15 g / mol ~ 500 g / mol の分子量を有するものであり得る。

## 【 0 0 4 5 】

一部の実施形態では、 $X^4$  が：

30

## 【 化 2 0 】



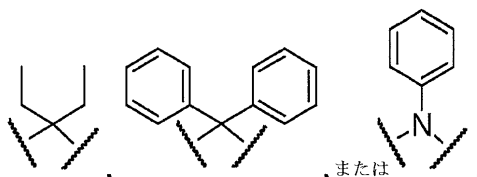
であり得る。

## 【 0 0 4 6 】

一部の実施形態では、 $X^4$  が：

## 【 化 2 1 】

40



であり得る。

## 【 0 0 4 7 】

上記の任意の該当する式または構造図示に関して、 $Cy^6$  は、任意選択的に置換されているフェニルであり得る。一部の実施形態において、該フェニルが置換されている場合、

50

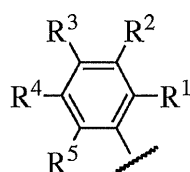


これは1、2、3、4または5個の置換基を有するものであり得る。任意の置換基が該フェニル上に含められ得る。一部の実施形態では、該フェニル上の置換基の一部または全部が、0～15個の炭素原子ならびにO、N、S、F、Cl、BrおよびIから独立して選択される0～10個のヘテロ原子；および/または15g/mol～500g/molの分子量を有するものであり得る。たとえば、該置換基は、C<sub>1</sub>～<sub>10</sub>アルキル、たとえば、CH<sub>3</sub>、C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>、環状C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>、C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>、環状C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>、C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>、環状C<sub>5</sub>H<sub>9</sub>、C<sub>6</sub>H<sub>13</sub>、環状C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>など；C<sub>1</sub>～<sub>10</sub>アルコキシ；ハロ、たとえば、F、Cl、Br、I；OH；CN；NO<sub>2</sub>；C<sub>1</sub>～<sub>6</sub>フルオロアルキル、たとえば、CF<sub>3</sub>、CF<sub>2</sub>H、C<sub>2</sub>F<sub>5</sub>など；C<sub>1</sub>～<sub>10</sub>エステル、たとえば、-O<sub>2</sub>CCH<sub>3</sub>、-CO<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-O<sub>2</sub>CC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、-CO<sub>2</sub>C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、-O<sub>2</sub>C-フェニル、-CO<sub>2</sub>-フェニルなど；C<sub>1</sub>～<sub>10</sub>ケトン、たとえば、-COCH<sub>3</sub>、-COC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、-COC<sub>3</sub>H<sub>7</sub>、-CO-フェニルなど；またはC<sub>1</sub>～<sub>10</sub>アミン、たとえば、NH<sub>2</sub>、NH(CH<sub>3</sub>)、N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、N(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、NH-フェニルなどであり得る。一部の実施形態では、該フェニルは、C<sub>1</sub>～<sub>6</sub>アルキルおよびFから独立して選択される1、2または3個の置換基で任意選択的に置換されている。一部の実施形態では、Cy<sup>6</sup>は非置換である。

#### 【0048】

一部の実施形態では、Cy<sup>6</sup>が：

#### 【化22】



であり得る。

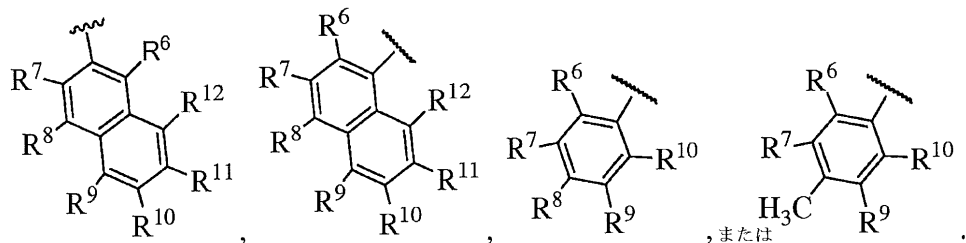
#### 【0049】

上記の任意の該当する式または構造図示に関して、Cy<sup>7</sup>は、任意選択的に置換されているフェニルまたは任意選択的に置換されているナフタレニルであり得、ここで、Cy<sup>6</sup>およびCy<sup>7</sup>は任意選択で一体に連結されて、Nを含む三環式縮合環系を形成していてもよい。一部の実施形態において、該フェニルが置換されている場合、これは1、2、3、4または5個の置換基を有するものであり得る。一部の実施形態において、該ナフタレニルが置換されている場合、これは1、2、3、4、5、6または7個の置換基を有するものであり得る。任意の置換基が該フェニルまたは該ナフタレニル上に含められ得る。一部の実施形態では、該フェニルまたは該ナフタレニル上の置換基の一部または全部が、0～15個の炭素原子ならびにO、N、S、F、Cl、BrおよびIから独立して選択される0～10個のヘテロ原子；および/または15g/mol～500g/molの分子量を有するものであり得る。たとえば、該置換基は、C<sub>1</sub>～<sub>10</sub>アルキル、たとえば、CH<sub>3</sub>、C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>、環状C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>、C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>、環状C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>、C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>、環状C<sub>5</sub>H<sub>9</sub>、C<sub>6</sub>H<sub>13</sub>、環状C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>など；C<sub>1</sub>～<sub>10</sub>アルコキシ；ハロ、たとえば、F、Cl、Br、I；OH；CN；NO<sub>2</sub>；C<sub>1</sub>～<sub>6</sub>フルオロアルキル、たとえば、CF<sub>3</sub>、CF<sub>2</sub>H、C<sub>2</sub>F<sub>5</sub>など；C<sub>1</sub>～<sub>10</sub>エステル、たとえば、-O<sub>2</sub>CCH<sub>3</sub>、-CO<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-O<sub>2</sub>CC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、-CO<sub>2</sub>C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、-O<sub>2</sub>C-フェニル、-CO<sub>2</sub>-フェニルなど；C<sub>1</sub>～<sub>10</sub>ケトン、たとえば、-COCH<sub>3</sub>、-COC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、-COC<sub>3</sub>H<sub>7</sub>、-CO-フェニルなど；またはC<sub>1</sub>～<sub>10</sub>アミン、たとえば、NH<sub>2</sub>、NH(CH<sub>3</sub>)、N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、N(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>などであり得る。一部の実施形態では、該フェニルまたは該ナフタレニルは、C<sub>1</sub>～<sub>6</sub>アルキルおよびFから独立して選択される1、2または3個の置換基で任意選択的に置換されている。一部の実施形態では、Cy<sup>7</sup>が非置換である。

#### 【0050】

一部の実施形態では、Cy<sup>7</sup>が：

## 【化 2 3】

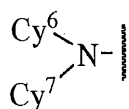


であり得る。

## 【 0 0 5 1】

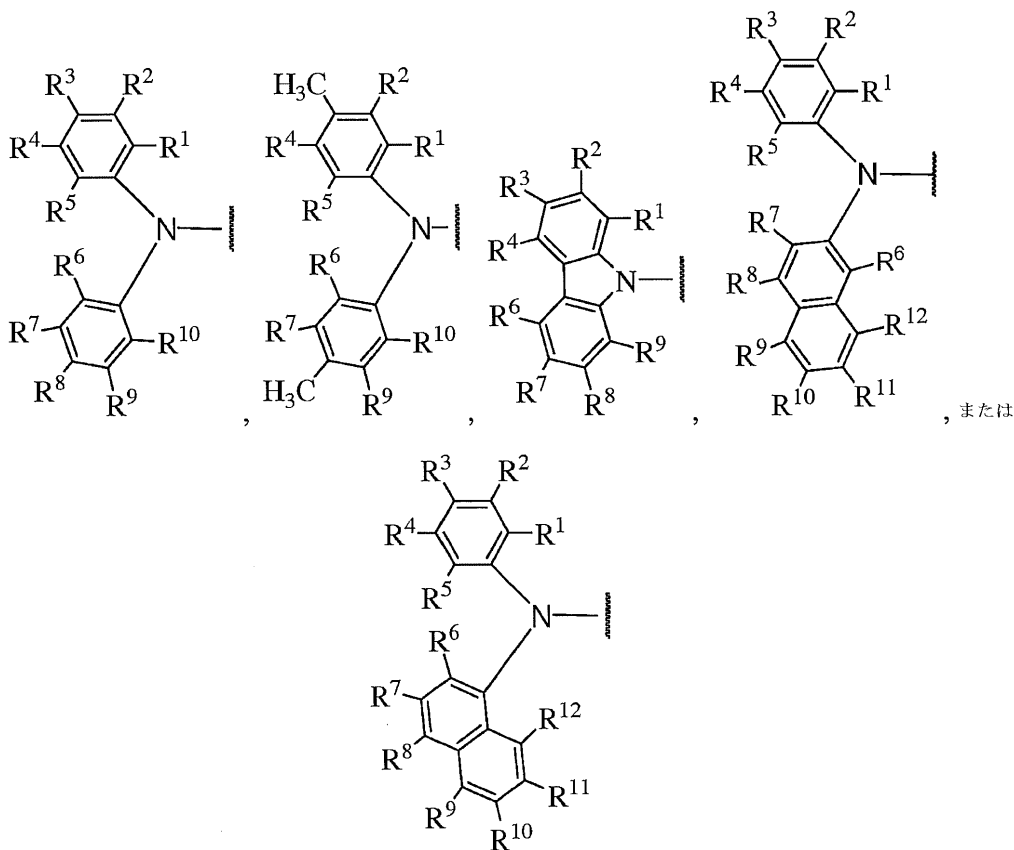
一部の実施形態では

## 【化 2 4】



が：

## 【化 2 5】



であり得る。

## 【 0 0 5 2】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式 1、10、11、12、13、14、15、16、17、18 および 19 に関して、一部の実施形態では、 $Cy^6$  および  $Cy^7$  が非置換である。

## 【 0 0 5 3】

上記の任意の該当する式または構造図示に関して、 $Cy^8$  は、任意選択的に置換されている 1 - フェニル - 1 H - ベンゾ [ d ] イミダゾール - 2 - イルであり得る。一部の実施形態において、該 1 - フェニル - 1 H - ベンゾ [ d ] イミダゾール - 2 - イルが置換され

10

20

30

40

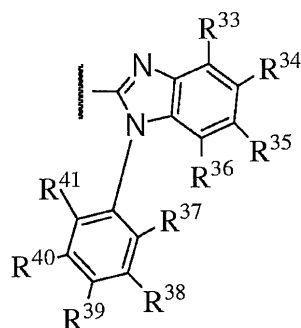
50

ている場合、これは1、2、3、4、5、6、7、8または9個の置換基を有するものであり得る。任意の置換基が含まれ得る。一部の実施形態では、該フェニル上の置換基の一部または全部が、0～10個の炭素原子ならびにO、N、S、F、Cl、BrおよびIから独立して選択される0～10個のヘテロ原子；および/または15 g/mol～500 g/molの分子量を有するものであり得る。たとえば、該置換基は、C<sub>1</sub>～10アルキル、たとえば、CH<sub>3</sub>、C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>、環状C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>、C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>、環状C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>、C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>、環状C<sub>5</sub>H<sub>9</sub>、C<sub>6</sub>H<sub>13</sub>、環状C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>など；C<sub>1</sub>～10アルコキシ；ハロ、たとえば、F、Cl、Br、I；OH；CN；NO<sub>2</sub>；C<sub>1</sub>～6フルオロアルキル、たとえば、CF<sub>3</sub>、CF<sub>2</sub>H、C<sub>2</sub>F<sub>5</sub>など；C<sub>1</sub>～10エステル、たとえば、-O<sub>2</sub>CCH<sub>3</sub>、-CO<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-O<sub>2</sub>CC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、-CO<sub>2</sub>C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、-O<sub>2</sub>C-フェニル、-CO<sub>2</sub>-フェニルなど；C<sub>1</sub>～10ケトン、たとえば、-COCH<sub>3</sub>、-COC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、-COC<sub>3</sub>H<sub>7</sub>、-CO-フェニルなど；またはC<sub>1</sub>～10アミン、たとえば、NH<sub>2</sub>、NH(CH<sub>3</sub>)、N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、N(CH<sub>3</sub>)C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>などであり得る。一部の実施形態では、Cy<sup>8</sup>は、C<sub>1</sub>～6アルキルおよびFから独立して選択される1、2または3個の置換基で任意選択的に置換されている。一部の実施形態では、Cy<sup>8</sup>は非置換である。

#### 【0054】

一部の実施形態では、Cy<sup>8</sup>が：

#### 【化26】



であり得る。

#### 【0055】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11、12、13、14、15および16に関して、一部の実施形態では、Cy<sup>5</sup>およびCy<sup>8</sup>が非置換である。

#### 【0056】

本明細書における任意の該当する式または構造図示に関して、各R<sup>A</sup>は独立して、H；C<sub>1</sub>～3アルキル、ハロ、OHもしくはC<sub>1</sub>～3アルコキシから選択される1、2、3、4または5個の置換基で任意選択的に置換されているフェニル；またはC<sub>1</sub>～12アルキル、たとえば：式C<sub>a</sub>H<sub>2a+1</sub>（式中、aは1、2、3、4、5、6、7、8、9、10、11または12である）を有する線状もしくは分枝状アルキル、たとえば：CH<sub>3</sub>、C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>、C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>、C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>、C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>、C<sub>6</sub>H<sub>13</sub>、C<sub>7</sub>H<sub>15</sub>、C<sub>8</sub>H<sub>17</sub>、C<sub>9</sub>H<sub>19</sub>、C<sub>10</sub>H<sub>21</sub>など、もしくは式C<sub>b</sub>H<sub>2b-1</sub>（式中、bは3、4、5、6、7、8、9、10、11または12である）を有するシクロアルキル、たとえば：C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>、C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>、C<sub>5</sub>H<sub>9</sub>、C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>、C<sub>7</sub>H<sub>13</sub>、C<sub>8</sub>H<sub>15</sub>、C<sub>9</sub>H<sub>17</sub>、C<sub>10</sub>H<sub>19</sub>などであり得る。

#### 【0057】

本明細書における任意の該当する式または構造図示に関して、各R<sup>B</sup>は独立して、H；C<sub>1</sub>～3アルキル、ハロ、OHもしくはC<sub>1</sub>～3アルコキシから選択される1、2、3、4または5個の置換基で任意選択的に置換されているフェニル；またはC<sub>1</sub>～12アルキル、たとえば：式C<sub>a</sub>H<sub>2a+1</sub>（式中、aは1、2、3、4、5、6、7、8、9、1

0、11または12である)を有する線状もしくは分枝状アルキル、たとえば： $\text{CH}_3$ 、 $\text{C}_2\text{H}_5$ 、 $\text{C}_3\text{H}_7$ 、 $\text{C}_4\text{H}_9$ 、 $\text{C}_5\text{H}_{11}$ 、 $\text{C}_6\text{H}_{13}$ 、 $\text{C}_7\text{H}_{15}$ 、 $\text{C}_8\text{H}_{17}$ 、 $\text{C}_9\text{H}_{19}$ 、 $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$ など、もしくは式 $\text{C}_b\text{H}_{2b-1}$ (式中、 $b$ は3、4、5、6、7、8、9、10、11または12である)を有するシクロアルキル、たとえば： $\text{C}_3\text{H}_5$ 、 $\text{C}_4\text{H}_7$ 、 $\text{C}_5\text{H}_9$ 、 $\text{C}_6\text{H}_{11}$ 、 $\text{C}_7\text{H}_{13}$ 、 $\text{C}_8\text{H}_{15}$ 、 $\text{C}_9\text{H}_{17}$ 、 $\text{C}_{10}\text{H}_{19}$ などであり得る。

#### 【0058】

上記の任意の該当する式または構造図示に関して、 $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^2$ 、 $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ 、 $\text{R}^5$ 、 $\text{R}^6$ 、 $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$ 、 $\text{R}^{10}$ 、 $\text{R}^{11}$ 、 $\text{R}^{12}$ 、 $\text{R}^{13}$ 、 $\text{R}^{14}$ 、 $\text{R}^{15}$ 、 $\text{R}^{16}$ 、 $\text{R}^{17}$ 、 $\text{R}^{18}$ 、 $\text{R}^{19}$ 、 $\text{R}^{20}$ 、 $\text{R}^{21}$ 、 $\text{R}^{22}$ 、 $\text{R}^{23}$ 、 $\text{R}^{24}$ 、 $\text{R}^{25}$ 、 $\text{R}^{26}$ 、 $\text{R}^{27}$ 、 $\text{R}^{28}$ 、 $\text{R}^{29}$ 、 $\text{R}^{30}$ 、 $\text{R}^{31}$ 、 $\text{R}^{32}$ 、 $\text{R}^{33}$ 、 $\text{R}^{34}$ 、 $\text{R}^{35}$ 、 $\text{R}^{36}$ 、 $\text{R}^{37}$ 、 $\text{R}^{38}$ 、 $\text{R}^{39}$ 、および $\text{R}^{41}$ (「 $\text{R}^{1-41}$ 」)は独立して、Hまたは任意の置換基、たとえば、0～6個の炭素原子ならびにO、N、S、F、Cl、BrおよびIから独立して選択される0～5個のヘテロ原子を有する置換基であり得、ここで、該置換基は15g/mol～300g/molの分子量を有するものである。任意の $\text{R}^{1-41}$ の非限定的な例としては、独立して、 $\text{R}^A$ 、F、Cl、CN、 $\text{OR}^A$ 、 $\text{CF}_3$ 、 $\text{NO}_2$ 、 $\text{NR}^A\text{R}^B$ 、 $\text{COR}^A$ 、 $\text{CO}_2\text{R}^A$ 、 $\text{OCOR}^A$ などがあげられ得る。一部の実施形態では、 $\text{R}^{1-41}$ のいずれかは独立して、H、 $\text{C}_{1-6}$ アルキル、たとえば、メチル、エチル、プロピル異性体、シクロプロピル、ブチル異性体、シクロブチル異性体、ペンチル異性体、シクロペンチル異性体、ヘキシル異性体、シクロヘキシル異性体など、または $\text{C}_{1-6}$ アルコキシ、たとえば、-O-メチル、-O-エチル、-O-プロピルの異性体、-O-シクロプロピル、-O-ブチルの異性体、-O-シクロブチルの異性体、-O-ペンチルの異性体、-O-シクロペンチルの異性体、-O-ヘキシルの異性体、-O-シクロヘキシルの異性体などであり得る。一部の実施形態では、 $\text{R}^{1-41}$ のいずれかは独立して、H、F、メチル、エチル、プロピルまたはイソプロピルであり得る。一部の実施形態では、 $\text{R}^{1-41}$ のいずれかはHであり得る。一部の実施形態では、 $\text{R}^{1-41}$ のいずれかは独立して、2つ以上の構造特徴部に結合している連結基であり得、たとえば、 $\text{R}^{1-41}$ のいずれかは、 $\text{Cy}^1$ 、 $\text{Cy}^2$ および連結置換基が三環式縮合環系(本明細書においてさらに詳細に記載している)を形成するような該連結置換基であり得る。

#### 【0059】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式2、3、6、7、20、21および22に関して、一部の実施形態では、 $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^2$ 、 $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ および $\text{R}^5$ は独立して、H、F、メチル、エチル、プロピルまたはイソプロピルである。一部の実施形態では、 $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^2$ 、 $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ および $\text{R}^5$ がHである。

#### 【0060】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式4および23に関して、一部の実施形態では、 $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^2$ 、 $\text{R}^4$ および $\text{R}^5$ は独立して、H、F、メチル、エチル、プロピルまたはイソプロピルである。一部の実施形態では、 $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^2$ 、 $\text{R}^4$ および $\text{R}^5$ がHである。

#### 【0061】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式6、7、8、9、20および21に関して、一部の実施形態では、 $\text{R}^6$ 、 $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$ 、 $\text{R}^{10}$ 、 $\text{R}^{11}$ および $\text{R}^{12}$ は独立して、H、F、メチル、エチル、プロピルまたはイソプロピルである。一部の実施形態では、 $\text{R}^6$ 、 $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$ 、 $\text{R}^{10}$ 、 $\text{R}^{11}$ および $\text{R}^{12}$ がHである。

#### 【0062】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式6、7、20および21に関して、一部の実施形態では、 $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^2$ 、 $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ 、 $\text{R}^5$ 、 $\text{R}^6$ 、 $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$ 、 $\text{R}^{10}$ 、 $\text{R}^{11}$ および $\text{R}^{12}$ は独立して、H、F、メチル、エチル、プロピルまたはイソプロピルである。一部の実施形態では、 $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^2$ 、 $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ 、 $\text{R}^5$ 、 $\text{R}^6$ 、 $\text{R}^7$ 、 $\text{R}^8$ 、 $\text{R}^9$ 、 $\text{R}^{10}$ 、 $\text{R}^{11}$ および $\text{R}^{12}$ がHである。

## 【 0 0 6 3 】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式 3、および 2 2 に関して、一部の実施形態では、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、および  $R^{10}$  は独立して、H、F、メチル、エチル、プロピルまたはイソプロピルである。一部の実施形態では、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、および  $R^{10}$  が H である。

## 【 0 0 6 4 】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式 1 0、2 0、2 1、2 2、2 3 および 2 4 に関して、一部の実施形態では、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$  および  $R^{16}$  は独立して、H、F、メチル、エチル、プロピルまたはイソプロピルである。一部の実施形態では、 $R^{13}$ 、 $R^{14}$ 、 $R^{15}$  および  $R^{16}$  が H である。

10

## 【 0 0 6 5 】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式 1 1、2 0、2 1、2 2、2 3 および 2 4 に関して、一部の実施形態では、 $R^{17}$ 、 $R^{18}$ 、 $R^{19}$  および  $R^{20}$  は独立して、H、F、メチル、エチル、プロピルまたはイソプロピルである。一部の実施形態では、 $R^{17}$ 、 $R^{18}$ 、 $R^{19}$  および  $R^{20}$  が H である。

## 【 0 0 6 6 】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式 1 3、2 0、2 1、2 2、2 3 および 2 4 に関して、一部の実施形態では、 $R^{21}$ 、 $R^{22}$ 、 $R^{23}$  および  $R^{24}$  は独立して、H、F、メチル、エチル、プロピルまたはイソプロピルである。一部の実施形態では、 $R^{21}$ 、 $R^{22}$ 、 $R^{23}$  および  $R^{24}$  が H である。

20

## 【 0 0 6 7 】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式 1 5、2 0、2 1、2 2、2 3 および 2 4 に関して、一部の実施形態では、 $R^{25}$ 、 $R^{26}$ 、 $R^{27}$  および  $R^{28}$  は独立して、H、F、メチル、エチル、プロピルまたはイソプロピルである。一部の実施形態では、 $R^{25}$ 、 $R^{26}$ 、 $R^{27}$  および  $R^{28}$  が H である。

## 【 0 0 6 8 】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式 1 7、2 0、2 1、2 2、2 3 および 2 4 に関して、一部の実施形態では、 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 、 $R^{31}$  および  $R^{32}$  は独立して、H、F、メチル、エチル、プロピルまたはイソプロピルである。一部の実施形態では、 $R^{29}$ 、 $R^{30}$ 、 $R^{31}$  および  $R^{32}$  が H である。

30

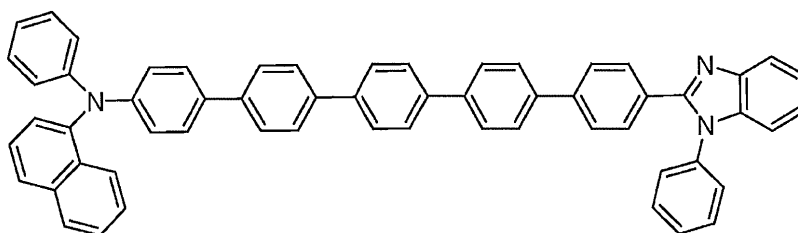
## 【 0 0 6 9 】

上記の任意の該当する式または構造特徴部、たとえば、式 1 9、2 0、2 1、2 2、2 3 および 2 4 に関して、一部の実施形態では、 $R^{33}$ 、 $R^{34}$ 、 $R^{35}$ 、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ 、 $R^{38}$ 、 $R^{39}$ 、 $R^{40}$  および  $R^{41}$  は独立して、H、F、メチル、エチル、プロピルまたはイソプロピルである。一部の実施形態では、 $R^{33}$ 、 $R^{34}$ 、 $R^{35}$ 、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ 、 $R^{38}$ 、 $R^{39}$ 、 $R^{40}$  および  $R^{41}$  が H である。

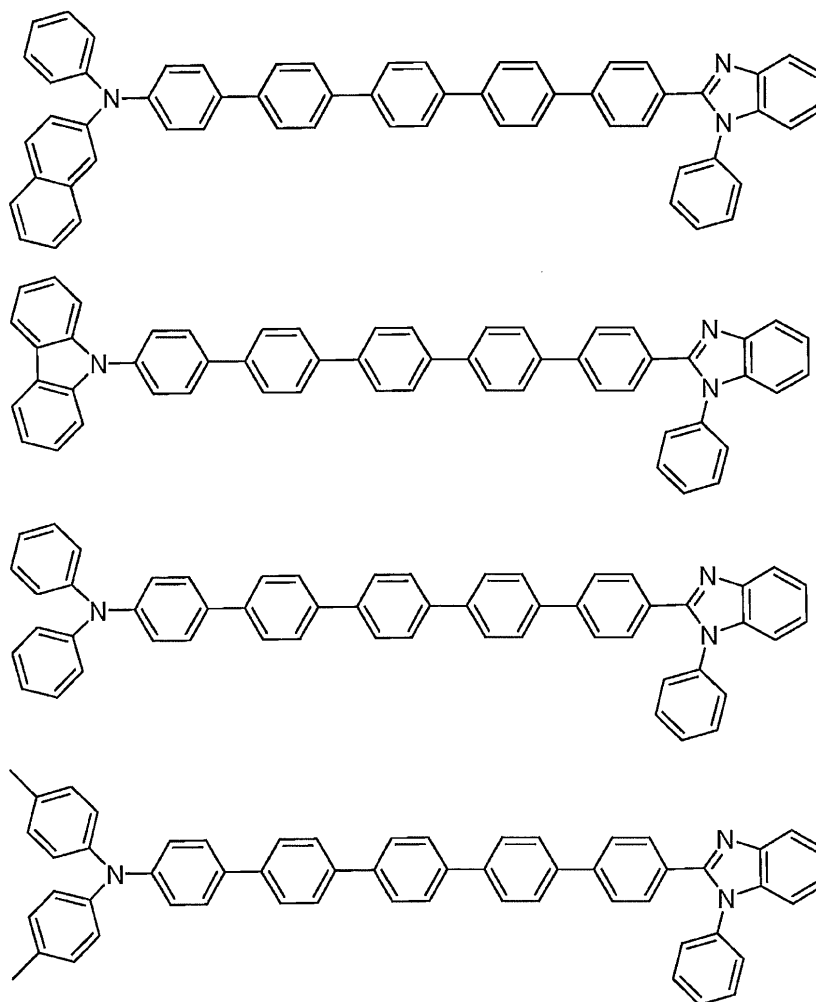
## 【 0 0 7 0 】

一部の実施形態は、以下：

## 【 化 2 7 】



40



の化合物のうちの１種類を包含するものであり得る。

【００７１】

一部の実施形態は、式１～２４のいずれか１つの化合物または本明細書において図示もしくは名称を示した特定化合物（以下、本明細書において「対象化合物」という）を含む組成物を包含するものである。対象化合物を含む組成物は、さらに蛍光化合物またはリン光化合物を含んでいてもよく、有機発光デバイスなどのデバイスにおける発光に有用なものであり得る。

【００７２】

一部の実施形態において、有機発光デバイスは対象化合物を含むものである。たとえば、対象化合物を含む発光層はアノードとカソードの間に配設され得る。該デバイスは、電子をカソードから発光層に移行させ得、正孔をアノードから発光層に移行させ得るように構成される。

【００７３】

対象化合物は、有機発光デバイスにおいて高い光安定性と熱安定性を有するものであり得る。また、対象化合物は、バランスのよい正孔と電子の注入速度と移動度を有するものであり得る。これにより、高効率および／または長寿命を有するＯＬＥＤデバイスが得られ得る。また、対象化合物は、非晶質固体を形成し得、これにより該化合物がフィルムに形成され易くなり得る。

【００７４】

アノードは、金属、混合金属、合金、金属酸化物または混合金属酸化物、導電性ポリマーおよび／または無機材料（カーボンナノチューブ（ＣＮＴ）など）などの慣用的な材料を含む層であり得る。好適な金属の例としては、１族金属、４、５、６族の金属、および８～１０族の遷移金属があげられる。アノード層を光伝達性にする場合、１０族および１

10

20

30

40

50

1 族の金属 (Au、Pt および Ag もしくはその合金など) ; または 12、13 および 14 族の金属の混合金属酸化物 (酸化インジウムスズ (ITO)、酸化インジウム亜鉛 (IZO) など) などが使用され得る。一部の実施形態では、アノード層は、ポリアニリンなどの有機材料であり得る。ポリアニリンの使用は、"Flexible light-emitting diodes made from soluble conducting polymer," Nature, 第 357 巻、477-479 頁 (1992 年 6 月 11 日) に記載されている。一部の実施形態では、アノード層は、約 1 nm ~ 約 1000 nm の範囲の厚さを有するものであり得る。

#### 【0075】

カソードは、アノード層よりも低い仕事関数を有する材料を含む層であり得る。カソード層に好適な材料の例としては、1 族のアルカリ金属、2 族金属、12 族金属 (たとえば、希土類元素、ランタニドおよびアクチニド)、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材料、ならびにその組合せから選択されるものがあげられる。また、動作電圧を下げるために、Li 含有有機金属化合物、LiF および Li<sub>2</sub>O を有機層とカソード層の間に蒸着してもよい。好適な低仕事関数金属としては、限定されないが、Al、Ag、Mg、Ca、Cu、Mg/Ag、LiF/Al、CsF、CsF/Al またはその合金があげられる。一部の実施形態では、カソード層は、約 1 nm ~ 約 1000 nm の範囲の厚さを有するものであり得る。

#### 【0076】

一部の実施形態では、発光層は、発光成分とホストとして対象化合物とを含むものであり得る。発光層中のホストの量は様々であり得る。一実施形態において、発光層中のホストの量は発光層の約 1% ~ 約 99.9% (重量基準) の範囲である。別の実施形態では、発光層中のホストの量は発光層の約 90% ~ 約 99% (重量基準) の範囲である。別の実施形態では、発光層中のホストの量は発光層の約 97 重量% である。一部の実施形態では、発光成分の質量は発光層の質量の約 0.1% ~ 約 10%、約 1% ~ 約 5% または約 3% である。発光成分は蛍光化合物および/またはリン光化合物であり得る。

#### 【0077】

発光成分は、イリジウム配位化合物、たとえば: ビス - { 2 - [ 3, 5 - ビス (トリフルオロメチル) フェニル ] ピリジナト - N, C 2' } イリジウム (III) - ピコリネート; ビス (2 - [ 4, 6 - ジフルオロフェニル ] ピリジナト - N, C 2' ) イリジウム (III) ピコリネート; ビス (2 - [ 4, 6 - ジフルオロフェニル ] ピリジナト - N, C 2' ) イリジウム (アセチルアセトナート); イリジウム (III) ビス (4, 6 - ジフルオロフェニルピリジナト) - 3 - (トリフルオロメチル) - 5 - (ピリジン - 2 - イル) - 1, 2, 4 - トリアゾレート; イリジウム (III) ビス (4, 6 - ジフルオロフェニルピリジナト) - 5 - (ピリジン - 2 - イル) - 1H - テトラゾレート; ビス [ 2 - (4, 6 - ジフルオロフェニル) ピリジナト - N, C 2' ] イリジウム (III) テトラ (1 - ピラゾリル) ボレート; ビス [ 2 - (2' - ベンゾチエニル) - ピリジナト - N, C 3' ] イリジウム (III) (アセチルアセトナート); ビス [ (2 - フェニルキノリル) - N, C 2' ] イリジウム (III) (アセチルアセトナート); ビス [ (1 - フェニルイソキノリナト - N, C 2' ) ] イリジウム (III) (アセチルアセトナート); ビス [ (ジベンゾ [f, h] キノキサリノ - N, C 2' ) イリジウム (III) (アセチルアセトナート); トリス (2, 5 - ビス - 2' - (9', 9' - ジヘキシルフルオレン) ピリジン) イリジウム (III); トリス [ 1 - フェニルイソキノリナト - N, C 2' ] イリジウム (III); トリス - [ 2 - (2' - ベンゾチエニル) - ピリジナト - N, C 3' ] イリジウム (III); トリス [ 1 - チオフェン - 2 - イルイソキノリナト - N, C 3' ] イリジウム (III); トリス [ 1 - (9, 9 - ジメチル - 9H - フルオレン - 2 - イル) イソキノリナト - (N, C 3' ) イリジウム (III) ); ビス (2 - フェニルピリジナト - N, C 2' ) イリジウム (III) (アセチルアセトナート) [ Ir (ppy)<sub>2</sub> (acac) ]; ビス (2 - (4 - トリル) ピリジナト - N, C 2' ) イリジウム (III) (アセチルアセトナート) [ Ir (mpppy)<sub>2</sub> (acac) ]; ビス (2

10

20

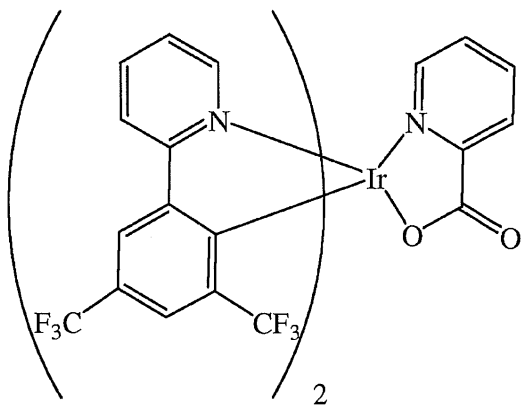
30

40

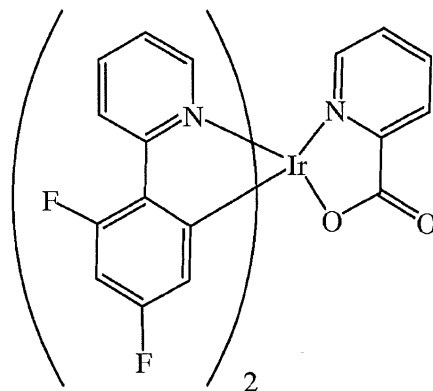
50

- (4-tert-ブチル)ピリジナト-N, C2')イリジウム(III)(アセチルアセトナート)  $[\text{Ir}(\text{t-BuPy})_2(\text{acac})]$ ; トリス(2-フェニルピリジナト-N, C2')イリジウム(III)  $[\text{Ir}(\text{ppy})_3]$ ; ビス(2-フェニルオキサゾリナト-N, C2')イリジウム(III)(アセチルアセトナート)  $[\text{Ir}(\text{op})_2(\text{acac})]$ ; トリス(2-(4-トリル)ピリジナト-N, C2')イリジウム(III)  $[\text{Ir}(\text{mppy})_3]$ ; ビス[2-フェニルベンゾチアゾラト-N, C2']イリジウム(III)(アセチルアセトナート); ビス[2-(4-tert-ブチルフェニル)ベンゾチアゾラト-N, C2']イリジウム(III)(アセチルアセトナート); ビス[(2-(2'-チエニル)ピリジナト-N, C3')]イリジウム(III)(アセチルアセトナート); トリス[2-(9,9-ジメチルフルオレン-2-イル)ピリジナト-(N, C3')]イリジウム(III); トリス[2-(9,9-ジメチルフルオレン-2-イル)ピリジナト-(N, C3')]イリジウム(III); ビス[5-トリフルオロメチル-2-[3-(N-フェニルカルバゾリル(carbazoly))ピリジナト-N, C2']]イリジウム(III)(アセチルアセトナート); (2-PhPyCz) $_2$ Ir(III)(acac); などを含むものであり得る。

## 【化28】



ビス- {2-[3, 5-ビス(トリフルオロメチル)フェニル]ピリジナト-N, C2'}イリジウム(III)-ピコリネート  $[\text{Ir}(\text{CF}_3\text{ppy})_2(\text{Pic})]$



ビス(2-[4, 6-ジフルオロフェニル]ピリジナト-N, C2')イリジウム(III)ピコリネート  $[\text{FIrPic}]$

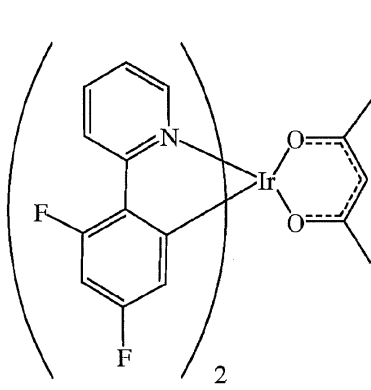
10

20

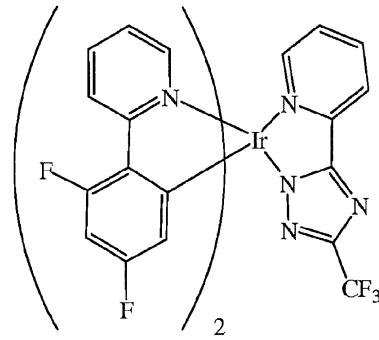
30



## 【化 29】

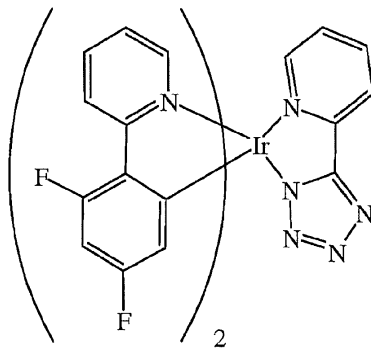


ビス (2- [4, 6-ジフルオロフェニル] ピリジナト-  
N, C2') イリジウム (アセチルアセトナート) [F I r (a c a c)]

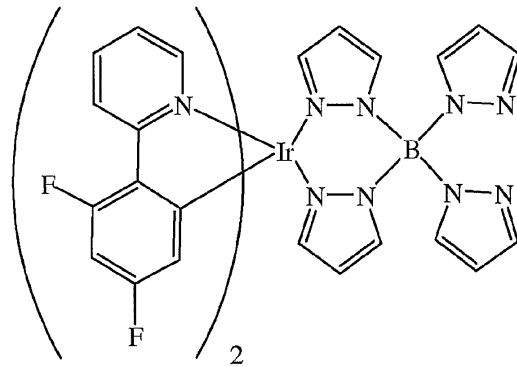


イリジウム (I I I) ビス (4, 6-ジフルオロフェニルピリジナト) -  
3- (トリフルオロメチル) -5- (ピリジン-2-イル) -1, 2, 4-  
トリアゾレート (F I r t a z)

10



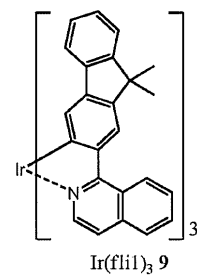
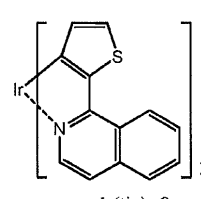
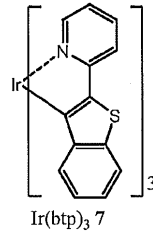
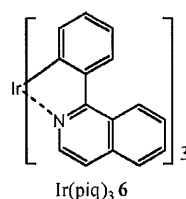
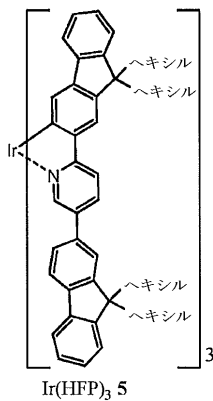
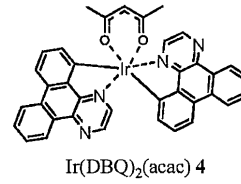
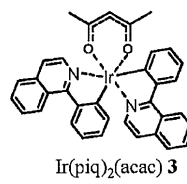
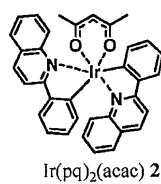
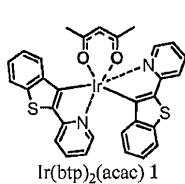
イリジウム (I I I) ビス (4, 6-  
ジフルオロフェニルピリジナト) -5- (ピリジン-2-イル) -  
1H-テトラゾレート (F I r N 4)



ビス [2- (4, 6-ジフルオロフェニル) ピリジナト-  
N, C2'] イリジウム (I I I) テトラ (1-ピラゾリル) ボレート (F i r 6)

20

## 【化 30】



40

ピリジナト - N , C 3 ' ] イリジウム ( I I I ) ( アセチルアセトナート )

2 . ( P q ) <sub>2</sub> I r ( I I I ) ( a c a c ) ; ビス [ ( 2 - フェニルキノリル ) - N , C 2 ' ] イリジウム ( I I I ) ( アセチルアセトナート )

3 . ( P i q ) <sub>2</sub> I r ( I I I ) ( a c a c ) ; ビス [ ( 1 - フェニルイソキノリナト - N , C 2 ' ) ] イリジウム ( I I I ) ( アセチルアセトナート )

4 . ( D B Q ) <sub>2</sub> I r ( a c a c ) ; ビス [ ( ジベンゾ [ f , h ] キノキサリノ - N , C 2 ' ) ] イリジウム ( I I I ) ( アセチルアセトナート )

5 . [ I r ( H F P ) <sub>3</sub> ] 、 トリス ( 2 , 5 - ビス - 2 ' - ( 9 ' , 9 ' - ジヘキシルフルオレン ) ピリジン ) イリジウム ( I I I )

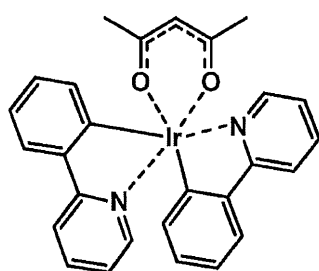
6 . I r ( p i q ) <sub>3</sub> ; トリス [ 1 - フェニルイソキノリナト - N , C 2 ' ] イリジウム ( I I I ) 10

7 . I r ( b t p ) <sub>3</sub> ; トリス - [ 2 - ( 2 ' - ベンゾチエニル ) - ピリジナト - N , C 3 ' ] イリジウム ( I I I )

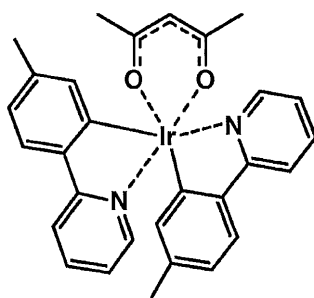
8 . I r ( t i q ) <sub>3</sub> , トリス [ 1 - チオフェン - 2 - イルイソキノリナト - N , C 3 ' ] イリジウム ( I I I )

9 . I r ( f l i q ) <sub>3</sub> ; トリス [ 1 - ( 9 , 9 - ジメチル - 9 H - フルオレン - 2 - イル ) イソキノリナト - ( N , C 3 ' ) ] イリジウム ( I I I )

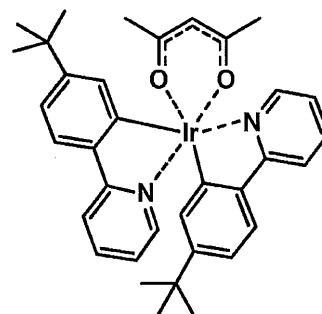
【化 3 1】



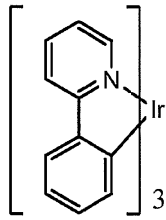
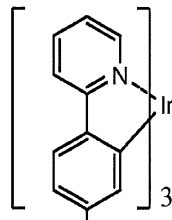
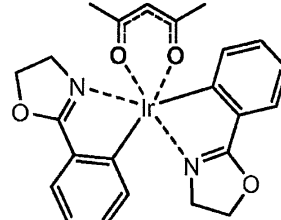
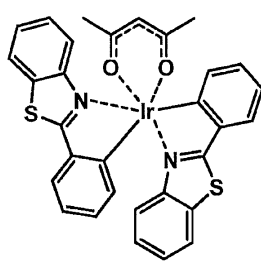
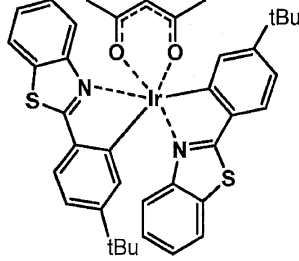
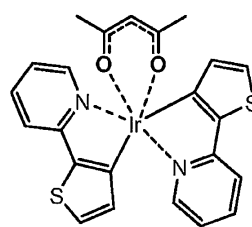
Ir(ppy)<sub>2</sub>(acac)



Ir(mppy)<sub>2</sub>(acac)



Ir(t-Buppy)<sub>2</sub>(acac)

Ir(ppy)<sub>3</sub>Ir(mppy)<sub>3</sub>Ir(op)<sub>2</sub>(acac)(bt)<sub>2</sub>Ir(III)(acac)(t-bt)<sub>2</sub>Ir(III)(acac)(thp)<sub>2</sub>Ir(III)(acac)

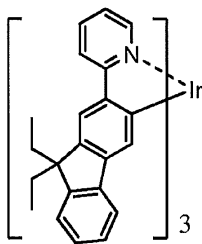
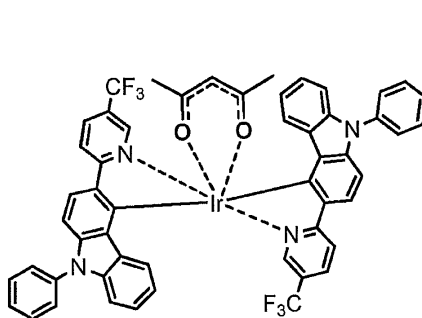
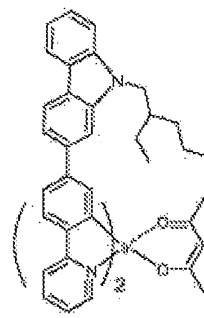
ビス [ 2 -  
フェニルベンゾチアゾレート  
N, C 2' ] イリジウム  
( I I I ) (アセチルアセトナート)

ビス [ 2 - ( 4 - t e r t - ブチルフェニル )  
ベンゾチアゾレート - N, C 2' ] イリジウム ( I I I )  
(アセチルアセトナート)

ビス [ ( 2 - ( 2' - チエニル ) ピリジナト -  
N, C 3' ) ] イリジウム ( I I I )  
(アセチルアセトナート)

10

20

[Ir(Flpy)<sub>3</sub>](Cz-CF<sub>3</sub>)Ir(III)(acac)(2-PhPyCz)<sub>2</sub>Ir(III)(acac)

トリス [ 2 - ( 9 -  
ジメチルフルオレン - 2 - イル )  
ピリジナト - ( N, C 3' ) ]  
イリジウム ( I I I )

ビス [ 5 - トリフルオロメチル - 2 - [ 3 -  
( N - フェニルカルバゾリル ) ピリジナト -  
N, C 2' ] イリジウム ( I I I ) (アセチルアセトナート)

30

## 【 0 0 7 8 】

発光層の厚さは様々であり得る。一実施形態において、発光層は、約 1 n m ~ 約 1 5 0 n m または約 2 0 0 n m の範囲の厚さを有する。

## 【 0 0 7 9 】

一部の実施形態は、図 1 に模式的に示す構造を有するものであり得る。発光層 2 0 はアノード 5 とカソード 3 5 の間に配設されている。任意選択の電子輸送層 3 0 は発光層 2 0 とカソード 3 5 の間に配設され得る。任意選択の正孔注入層 1 0 は発光層 2 0 とアノード 5 の間に配設され得、任意選択の正孔輸送層 1 5 は正孔注入層 1 0 と発光層 2 0 の間に配設され得る。

## 【 0 0 8 0 】

正孔輸送層は、少なくとも 1 種類の正孔輸送材料を含むものであり得る。正孔輸送材料

40

50

としては、限定されないが、芳香族置換アミン、カルバゾール、ポリビニルカルバゾール（PVK）、たとえば、ポリ（9 - ビニルカルバゾール）；ポリフルオレン；ポリフルオレンコポリマー；ポリ（9, 9 - ジ - n - オクチルフルオレン - alt - ベンゾチアジアゾール）；ポリ（パラフェニレン）；ポリ〔2 - （5 - シアノ - 5 - メチルヘキシルオキシ） - 1, 4 - フェニレン〕；ベンジジン；フェニレンジアミン；フタロシアニン金属錯体；ポリアセチレン；ポリチオフェン；トリフェニルアミン；オキサジアゾール；銅フタロシアニン；1, 1 - ビス（4 - ビス（4 - メチルフェニル）アミノフェニル）シクロヘキサン；2, 9 - ジメチル - 4, 7 - ジフェニル - 1, 10 - フェナントロリン；3, 5 - ビス（4 - tert - ブチル - フェニル） - 4 - フェニル〔1, 2, 4〕トリアゾール；3, 4, 5 - トリフェニル - 1, 2, 3 - トリアゾール；4, 4', 4'' - トリス（3 - メチルフェニルフェニルアミノ）トリフェニルアミン（MTDATA）；, ' - ビス（3 - メチルフェニル）N, N' - ジフェニル - [1, 1' - ビフェニル] - 4, 4' - ジアミン（TPD）；4, 4' - ビス〔N - （ナフタレニル） - N - フェニル - アミノ〕ビフェニル（ - NPD）；4, 4', 4'' - トリス（カルバゾール - 9 - イル） - トリフェニルアミン（TCTA）；4, 4' - ビス〔N, N' - （3 - トリル）アミノ〕 - 3, 3' - ジメチルビフェニル（HMTPD）；4, 4' - N, N' - ジカルバゾール - ビフェニル（CBP）；1, 3 - N, N - ジカルバゾール - ベンゼン（mCP）；ビス〔4 - （p, p' - ジトリル - アミノ）フェニル〕ジフェニルシラン（DTASi）；2, 2' - ビス（4 - カルバゾリルフェニル） - 1, 1' - ビフェニル（4CzPPB）；N, N' - N'' - 1, 3, 5 - トリカルバゾロイルベンゼン（tCP）；N, N' - ビス（4 - ブチルフェニル） - N, N' - ビス（フェニル）ベンジジン；などがあげられ得る。

#### 【0081】

正孔注入層は任意の適切な正孔注入材料を含むものであり得る。好適な正孔注入材料（複数可）としては、限定されないが、以下のもの：酸化モリブデン（MoO<sub>3</sub>）、ポリチオフェン誘導体、たとえば、ポリ（3, 4 - エチレンジオキシチオフェン（PEDOT）/ポリスチレンスルホン酸（PSS）、ベンジジン誘導体、たとえば、N, N, N', N' - テトラフェニルベンジジン、ポリ（N, N' - ビス（4 - ブチルフェニル） - N, N' - ビス（フェニル）ベンジジン）、トリフェニルアミンまたはフェニレンジアミン誘導体、たとえば、N, N' - ビス（4 - メチルフェニル） - N, N' - ビス（フェニル） - 1, 4 - フェニレンジアミン、4, 4', 4'' - トリス（N - （ナフタレン - 2 - イル） - N - フェニルアミノ）トリフェニルアミン、オキサジアゾール誘導体、たとえば、1, 3 - ビス（5 - （4 - ジフェニルアミノ）フェニル - 1, 3, 4 - オキサジアゾール - 2 - イル）ベンゼン、ポリアセチレン誘導体、たとえば、ポリ（1, 2 - ビス - ベンジルチオ - アセチレン）、およびフタロシアニン金属錯体誘導体、たとえば、フタロシアニン銅から選択される任意選択的に置換されている化合物があげられる。

#### 【0082】

電子輸送層は少なくとも1種類の電子輸送材料を含むものであり得る。電子輸送材料の例としては、限定されないが、2 - （4 - ビフェニルイル） - 5 - （4 - tert - ブチルフェニル） - 1, 3, 4 - オキサジアゾール（PBD）；1, 3 - ビス（N, N - t - ブチル - フェニル） - 1, 3, 4 - オキサジアゾール（OXD - 7）、1, 3 - ビス〔2 - （2, 2' - ビピリジン - 6 - イル） - 1, 3, 4 - オキサジアゾ - 5 - イル〕ベンゼン；3 - フェニル - 4 - （1' - ナフタレニル） - 5 - フェニル - 1, 2, 4 - トリアゾール（TAZ）；2, 9 - ジメチル - 4, 7 - ジフェニル - フェナントロリン（バトクブロインもしくはBCP）；トリス（8 - ヒドロキシキノラート（quinolate））アルミニウム（Alq<sub>3</sub>）；および1, 3, 5 - トリス（2 - N - フェニルベンゾイミダゾリル）ベンゼン；1, 3 - ビス〔2 - （2, 2' - ビピリジン - 6 - イル） - 1, 3, 4 - オキサジアゾ - 5 - イル〕ベンゼン（BPY - OXD）；3 - フェニル - 4 - （1' - ナフタレニル） - 5 - フェニル - 1, 2, 4 - トリアゾール（TAZ）、2, 9 - ジメチル - 4, 7 - ジフェニル - フェナントロリン（バトクブロインもしくはBCP）；ならびに1, 3, 5 - トリス〔2 - N - フェニルベンゾイミダゾール - z - イル〕ベンゼン（

10

20

30

40

50

TPBI) があげられ得る。一実施形態では、電子輸送層は、アルミニウムキノラート (Alq<sub>3</sub>)、2-(4-ピフェニルイル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(PBD)、フェナントロリン、キノキサリン、1,3,5-トリス[N-フェニルベンゾイミダゾール-z-イル]ベンゼン(TPBI)もしくはその誘導体または組合せである。

#### 【0083】

所望により、さらなる層を発光デバイスに含めてもよい。このようなさらなる層としては、カソードと発光層の間の電子注入層(EIL)、アノードと発光層の間の正孔阻止層(HBL)、および/または発光層とアノードおよび/またはカソードの間の励起子阻止層(EBL)があげられ得る。別々の層に加え、このような材料のいくつかを合わせて単一の層にしてもよい。

10

#### 【0084】

一の実施形態において、発光デバイスは、カソード層と発光層の間に電子注入層を含むものであり得る。電子注入層に含めることができる好適な材料(複数可)の例としては、限定されないが、以下のもの: フッ化リチウム(LiF)、アルミニウムキノラート(Alq<sub>3</sub>)、2-(4-ピフェニルイル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(PBD)、フェナントロリン、キノキサリン、1,3,5-トリス[N-フェニルベンゾイミダゾール-z-イル]ベンゼン(TPBI)、トリアジン、8-ヒドロキシキノリンの金属キレート、たとえば、トリス(8-ヒドロキシキノラート(quinolate))アルミニウム、および金属チオキシノイド(thioxinoid)化合物、たとえば、ピス(8-キノリンチオラト)亜鉛から選択される任意選択的に置換されている化合物があげられる。一実施形態では、電子注入層は、アルミニウムキノラート(Alq<sub>3</sub>)、2-(4-ピフェニルイル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(PBD)、フェナントロリン、キノキサリン、1,3,5-トリス[N-フェニルベンゾイミダゾール-z-イル]ベンゼン(TPBI)、もしくはその誘導体または組合せである。

20

#### 【0085】

一の実施形態では、該デバイスは、たとえばカソードと発光層の間に正孔阻止層を含むものであり得る。正孔阻止層に含めることができる種々の好適な正孔阻止材料が当業者に知られている。好適な正孔阻止材料(複数可)としては、限定されないが、以下のもの: バトクブロイン(BCP)、3,4,5-トリフェニル-1,2,4-トリアゾール、3,5-ピス(4-tert-ブチル-フェニル)-4-フェニル-[1,2,4]トリアゾール、2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン、および1,1-ピス(4-ピス(4-メチルフェニル)アミノフェニル)-シクロヘキサンから選択される任意選択的に置換されている化合物があげられる。

30

#### 【0086】

一の実施形態では、発光デバイスは、たとえば発光層とアノードの間に励起子阻止層を含むものであり得る。一実施形態において、励起子阻止層を構成する材料(複数可)のバンドギャップは、励起子の拡散を実質的に抑制するのに十分な大きさである。励起子阻止層に含めることができるいくつかの好適な励起子阻止材料が当業者に知られている。励起子阻止層を構成し得る材料(複数可)の例としては、以下のもの: アルミニウムキノラート(Alq<sub>3</sub>)、4,4'-ピス[N-(ナフタレニル)-N-フェニル-アミノ]ピフェニル(-NPD)、4,4'-N,N'-ジカルバゾール-ピフェニル(CBP)およびバトクブロイン(BCP)、ならびに励起子の拡散を実質的に抑制するのに十分な大きさのバンドギャップを有する任意の他の材料(複数可)から選択される任意選択的に置換されている化合物があげられる。

40

#### 【0087】

対象化合物を含む発光デバイスは、本明細書において提供した指針によって情報が得られる当該技術分野で知られた手法を用いて製作され得る。たとえば、ガラス基板は、アノードとしての機能を果たし得る高仕事関数金属(ITOなど)で被覆され得る。アノード

50

層のパターン形成後、発光成分を含む発光層がアノード上に蒸着され得る。一部の実施形態では、さらなる任意選択の層（正孔輸送層、正孔注入層および／または励起子阻止層など）が発光層とアノードの間に、気相蒸着、スパッタリングまたはスピンコーティングなどの方法によって蒸着され得る。次いで、低仕事関数金属（たとえば、Mg:Ag）を含むカソード層が発光層上に、たとえば、気相蒸着、スパッタリングまたはスピンコーティングによって蒸着され得る。一部の実施形態では、さらなる任意選択の層（電子輸送層、電子注入層および／または励起子阻止層など）が該デバイスに、適当な手法（気相蒸着、スパッタリングまたはスピンコーティングなど）を用いて付加され得る。

#### 【0088】

一部の実施形態では、対象化合物を含むデバイスでは、市販の化合物と比べて顕著に長いデバイス寿命がもたらされ得る。一部の実施形態では、該デバイスでは、少なくとも約125時間、150時間、175時間、185時間および／または200時間の寿命である10,000ニトにおけるT50（時間）がもたらされ得る。一部の実施形態において、所望の寿命は、約13.2mm<sup>2</sup>の能動放出表面積を有するデバイスについて106mAの定電流をデバイスに負荷した（約10000cd/m<sup>2</sup>に相当）後の発光（たとえば、単位：cd/m<sup>2</sup>）を測定することによってデバイスの発光／放出減衰を調べることでより測定され得る。

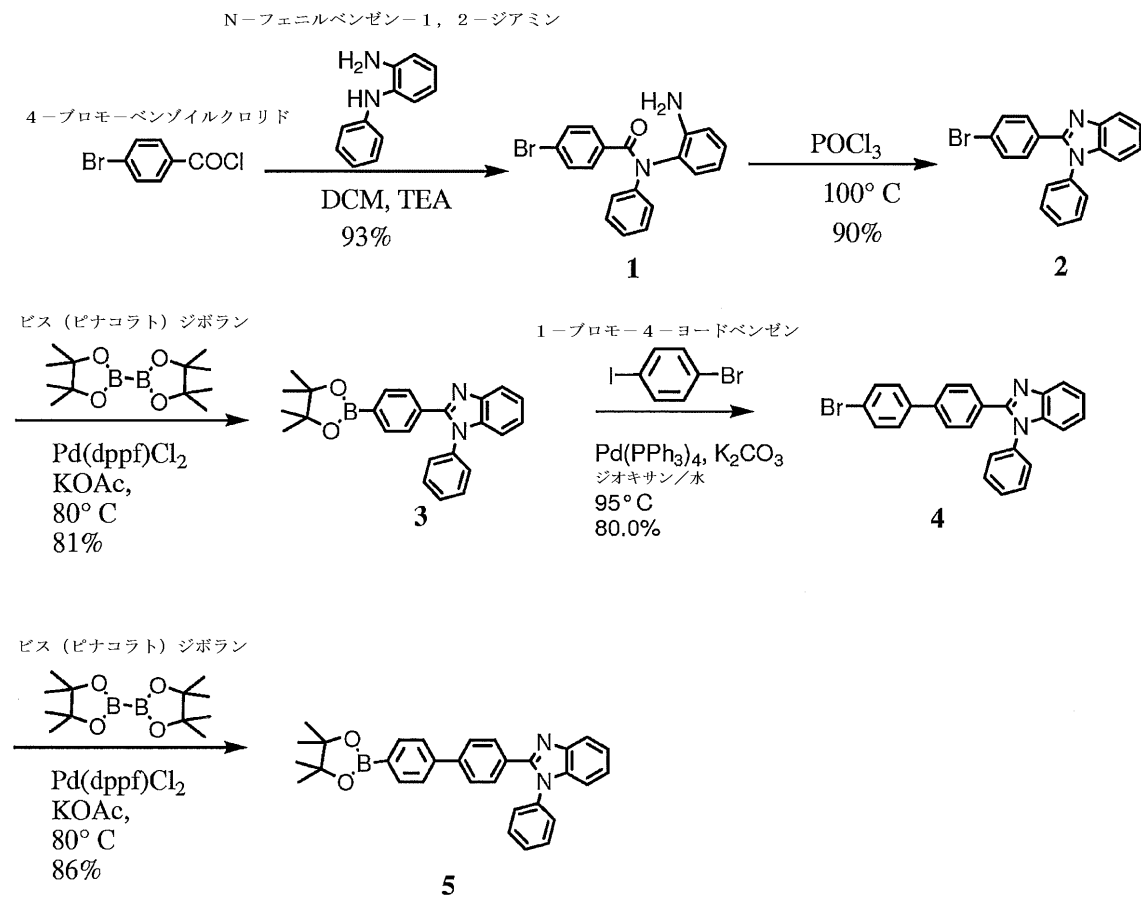
#### 【実施例】

#### 【0089】

（合成例）

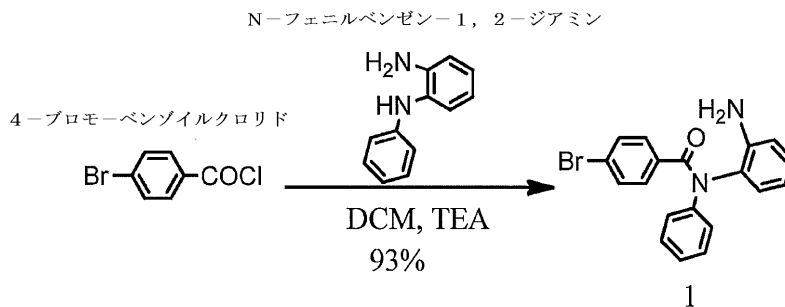
〔実施例1.1〕

#### 【化32】



〔実施例1.1.1〕

## 【化 3 3】



4-ブロモ-N-(2-(フェニルアミノ)フェニル)ベンズアミド(1):

10

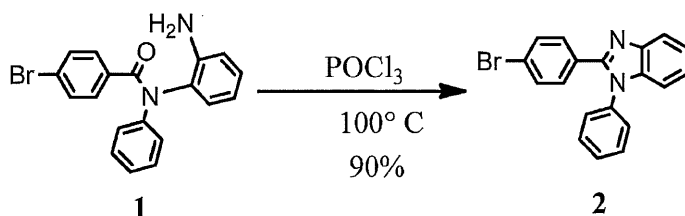
4-ブロモベンゾイルクロリド(11g, 50mmol)の無水ジクロロメタン(DCM)(100ml)溶液にN-フェニルベンゼン-1,2-ジアミン(10.2g, 55mmol)を、次いでトリエチルアミン(TEA)(17ml, 122mmol)をゆっくり添加した。全体を室温(RT)で一晩撹拌した。濾過により白色固形物1(6.5g)を得た。濾液を水(300ml)で後処理し、次いでDCM(300ml)で3回抽出した。有機相を収集し、MgSO<sub>4</sub>上で乾燥させ、濃縮し、DCM/ヘキサン中で再結晶させ、さらなる分量の白色固形物1(10.6g)を得た。生成物1の総量は17.1g(93%収率)である。

【0090】

〔実施例1.1.2〕

20

## 【化 3 4】



2-(4-ブロモフェニル-1-フェニル-1H-ベンゾ[d]イミダゾール(2):

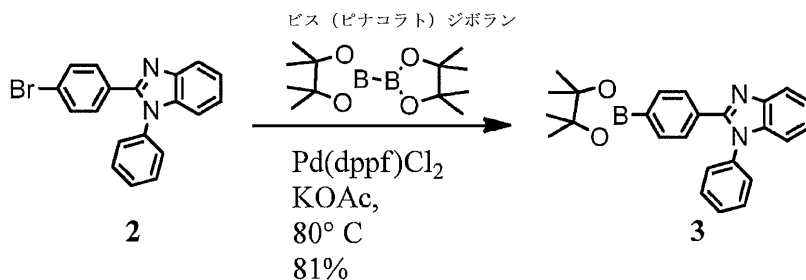
アミド1(9.6g, 26mmol)の無水1,4-ジオキサン(100mL)懸濁液にオキシ塩化リン(POCl<sub>3</sub>)(9.2mL, 100mmol)をゆっくり添加した。次いで、全体を100℃で一晩加熱した。RTまで冷却後、混合物を撹拌しながら氷(200g)に注入した。濾過、続いてDCM/ヘキサン中での再結晶により薄灰色固形物2(8.2g, 90%収率)を得た。

30

【0091】

〔実施例1.1.3〕

## 【化 3 5】



40

1-フェニル-2-(4-(4,4,5,5-テトラメチル-1,3,2-ジオキサボロラン-2-イル)フェニル)-1H-ベンゾ[d]イミダゾール(3):

化合物2(0.70g, 2mmol)、ビス(ピナコラト)ジボラン(0.533g, 2.1mmol)、ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]ジクロロパラジウム(Pd(dppf)Cl<sub>2</sub>)(0.060g, 0.08mmol)および無水酢酸カリウム(

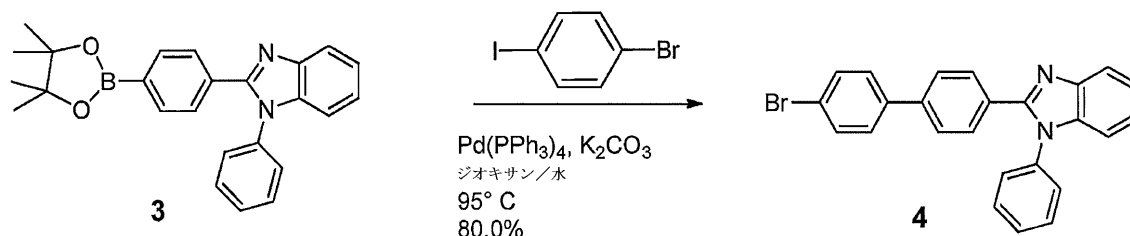
50

KOAc) (0.393 g, 4 mmol) と 1, 4 - ジオキサン (20 ml) との混合物を 80 でアルゴン下、一晩加熱した。RTまで冷却後、全体を酢酸エチル (80 ml) で希釈し、次いで濾過した。溶液をシリカゲルに吸収させ、次いでカラムクロマトグラフィーによって精製し (5 : 1 から 3 : 1 までのヘキサン / 酢酸エチル)、白色固形物 3 (0.64 g, 81 % 収率) を得た。

【0092】

〔実施例 1.1.3〕

【化 36】



10

2 - (4' - ブロモ - [1, 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 1 - フェニル - 1H - ベンゾ[d]イミダゾール (4) :

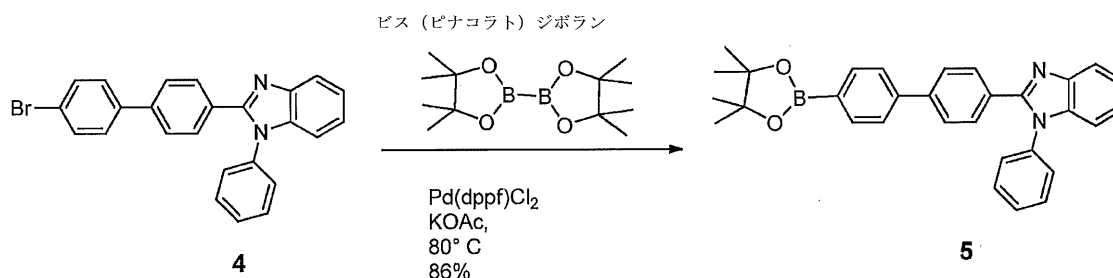
化合物 3 (4.01 g, 10.1 mmol)、1 - ブロモ - 4 - ヨードベンゼン (5.73 g, 20.2 mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.58 g, 0.5 mmol) および炭酸カリウム (4.2 g, 30 mmol) とジオキサン / 水 (60 ml / 10 ml) との混合物を脱気し、95 で一晩加熱した。RTまで冷却後、混合物を酢酸エチル (250 ml) に注入し、ブラインで洗浄し、Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 上で乾燥させ、次いでシリカゲル上に負荷し、フラッシュカラムによって精製し (ヘキサン対ヘキサン / 酢酸エチル、4 : 1)、淡黄色固形物 (メタノールでの洗浄および風乾) (3.39 g, 80 % 収率) を得た。

20

【0093】

〔実施例 1.1.4〕

【化 37】



30

1 - フェニル - 2 - (4' - (4, 4, 5, 5 - テトラメチル - 1, 3, 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - [1, 1' - ビフェニル] - 4 - イル) - 1H - ベンゾ[d]イミダゾール (5) :

40

化合物 4 (1.2 g, 2.82 mmol)、ビス (ピナコラト) ジボラン (0.72 g, 2.82 mmol)、ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン]ジクロロパラジウム (Pd(dppf)Cl<sub>2</sub>) (0.10 g, 0.14 mmol) および無水酢酸カリウム (KOAc) (2.0 g, 20 mmol) と 1, 4 - ジオキサン (45 ml) との混合物を 80 でアルゴン下、一晩加熱した。RTまで冷却後、全体を酢酸エチル (150 ml) で希釈し、次いで濾過した。溶液をシリカゲルに吸収させ、次いでカラムクロマトグラフィーによって精製し (ヘキサン / 酢酸エチル、5 : 1 ~ 3 : 1)、白色固形物 5 (1.14 g, 86 % 収率) を得た。

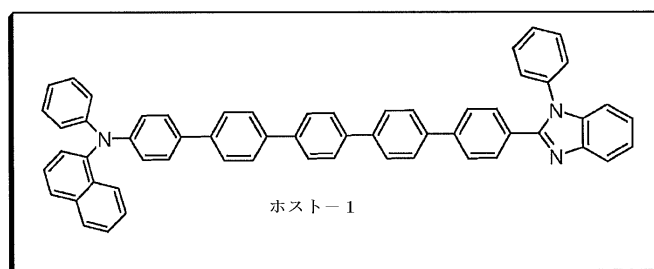
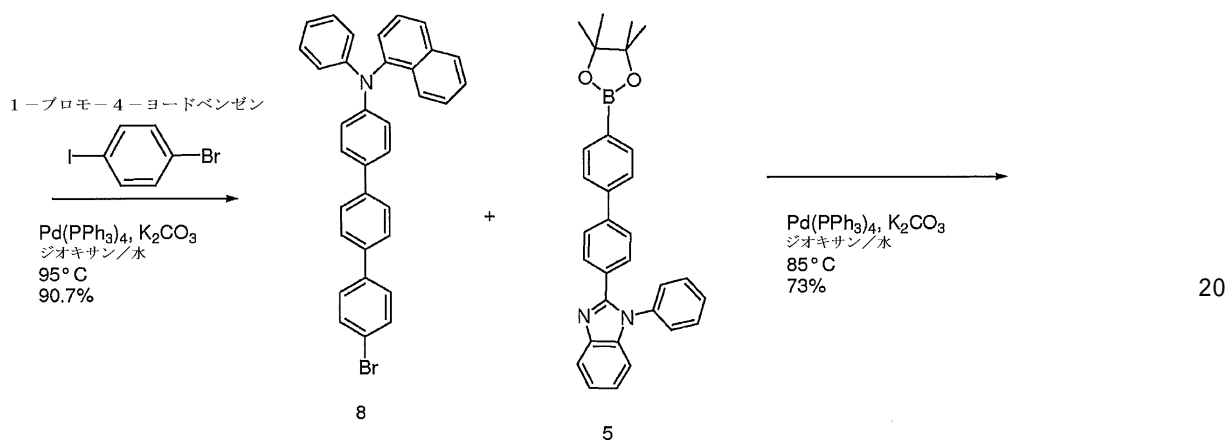
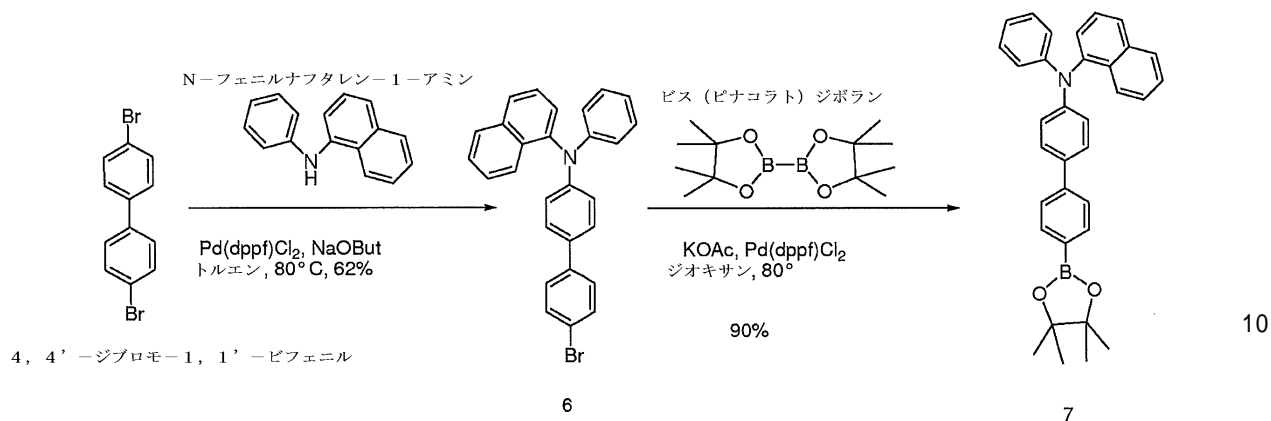
【0094】

〔実施例 1.2〕

50

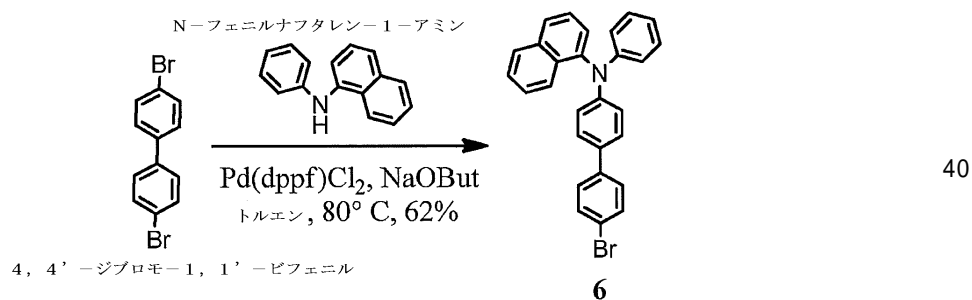


## 【化 3 8】



## 【実施例 1 . 2 . 1】

## 【化 3 9】



N - ( 4' - ブロモ - 1, 1' - ビフェニル ] - 4 - イル ) - N - フェニルナフタレン - 1 - アミン ( 6 ) :

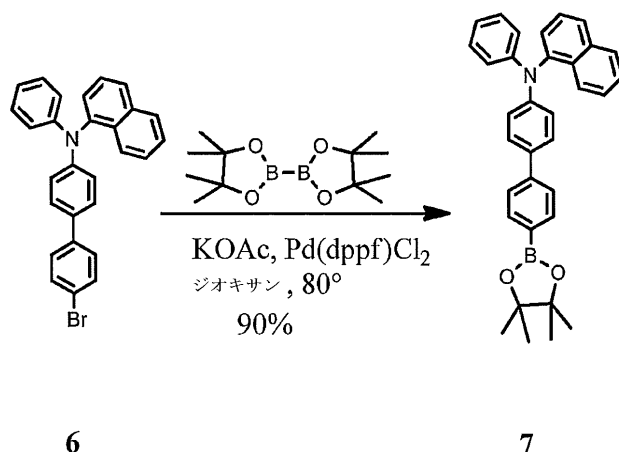
N - フェニルナフタレン - 1 - アミン ( 4.41 g, 20 mmol )、4, 4' - ジブロモ - 1, 1' - ビフェニル ( 15 g, 48 mmol )、ナトリウム *tert* - ブトキシド ( 4.8 g, 50 mmol ) および Pd ( dppf ) Cl<sub>2</sub> ( 0.44 g, 0.6 mmol ) と無水トルエン ( 100 ml ) との混合物を脱気し、80 で 10 時間加熱した。RT まで冷却後、混合物をジクロロメタン ( 400 ml ) に注入し、30 分間攪拌し、次

いでブライン (100 ml) で洗浄した。有機液を収集し、 $\text{Na}_2\text{SO}_4$  上で乾燥させ、シリカゲル上に負荷し、フラッシュカラムによって精製し (ヘキサン対ヘキサン/酢酸エチル、90 : 1)、固形物を得、これをメタノールで洗浄し、風乾させ、白色固形物 4 (5.58 g, 62% 収率) を得た。

【0095】

〔実施例 1.2.2〕

【化 40】



10

20

N - フェニル - N - (4' - (4, 4, 5, 5 - テトラメチル - 1, 3, 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) - [1, 1' - ピフェニル] - 4 - イル) ナフタレン - 1 - アミン (7) :

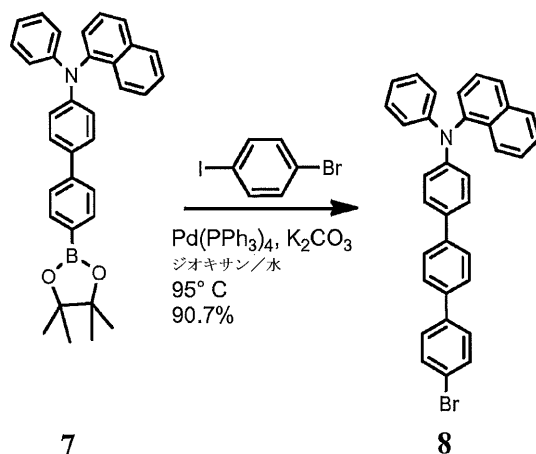
化合物 6 (5.5 g, 12.2 mmol)、ビス (ピナコラト) ジボラン (3.10 g, 12.2 mmol)、 $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$  (0.446 mg, 0.6 mmol) および  $\text{KOAc}$  (5.5 g, 56 mmol) と無水ジオキサン (60 ml) との混合物を脱気し、80 で一晩加熱した。RT まで冷却後、混合物を酢酸エチル (200 ml) に注入し、ブライン (150 ml) で洗浄した。有機溶液を  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  上で乾燥させ、シリカゲル上に負荷し、フラッシュカラムによって精製し (ヘキサン対ヘキサン/酢酸エチル、30 : 1)、主要画分を収集した。溶媒の除去後、固形物をメタノールで洗浄し、濾過し、風乾させ、白色固形物 7 (5.50 g, 90% 収率) を得た。

30

【0096】

〔実施例 1.2.3〕

【化 41】



40

N - (4'' - ブロモ - [1, 1' : 4', 1'' - ターフェニル] - 4 - イル) - N - フェニルナフタレン - 1 - アミン (8) :

化合物 7 (4.5 g, 9.0 mmol)、1 - ブロモ - 4 - ヨードベンゼン (5.12

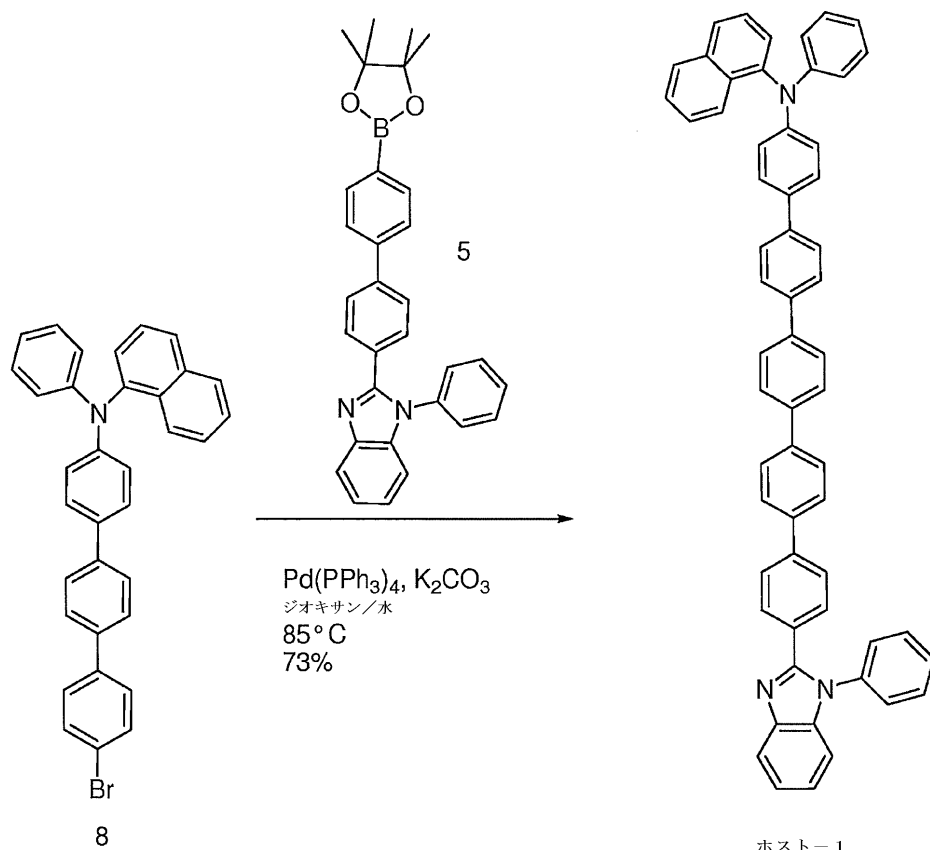
50

g, 18 mmol)、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.52 g, 0.45 mmol) および炭酸カリウム (4.436 g, 32 mmol) とジオキサン/水 (150 ml / 30 ml) との混合物を脱気し、95℃で一晩加熱した。RTまで冷却後、混合物をジクロロメタン (300 ml) に注入し、ブラインで洗浄し、Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 上で乾燥させ、次いでシリカゲル上に負荷し、フラッシュカラムによって精製し (ヘキサン対ヘキサン/酢酸エチル、20 : 1)、淡黄色固形物 8 (4.30 g, 90.7 収率) を得た。

【 0 0 9 7 】

〔 实施例 1 . 2 . 4 〕

【化 4 2】



ホスト - 1 :

化合物 8 ( 1 . 5 0 g , 2 . 4 7 m m o l )、化合物 5 ( 1 . 1 1 g , 2 . 3 5 m m o l )、Pd ( P P h <sub>3</sub> )<sub>4</sub> ( 0 . 1 6 g , 0 . 1 4 m m o l ) および炭酸カリウム ( 1 . 3 8 g , 1 0 m m o l ) とジオキサン / 水 ( 6 0 m l / 1 0 m l ) との混合物を脱気し、8 5 °C で 1 8 時間加熱した。RT まで冷却後、混合物を濾過した。固形物と濾液を別々に収集した。最初の濾過による固形物をジクロロメタン ( 1 0 0 m l ) に再溶解させ、シリカゲル上に負荷し、フラッシュカラムによって精製し ( ジクロロメタン対ジクロロメタン / 酢酸エチル、9 : 1 )、所望の画分を収集し、濃縮した。白色析出物を濾過し、風乾させ、淡黄色固形物のホスト - 1 ( 1 . 3 5 g ) を得た。全収率は 7 3 % である。LCMS データ : C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>N<sub>3</sub> の計算値 ( M + H ) : 7 9 2 . 3 ; 実測値 m / e = 7 9 2 .

【 0 0 9 8 】

( 8 - 2 . O L E D デバイスの構成および性能の実施例 )

〔実施例 2 . 1 〕（デバイス - A）- 発光デバイスの製作：

デバイス（デバイス A）を以下のものと同様の様式で製作した。約 14 オーム / スクエアのシート抵抗を有する ITO 基板を超音波処理により、逐次、デタージェント、水、アセトン、次いでイソプロピルアルコール（IPA）中で清浄にし；次いで、周囲環境下、約 80 °C の炉内で約 30 分間乾燥させた。次いで、基板を周囲環境で約 200 °C にて約 1 時間、次いで、UV - オゾン処理下で約 30 分間焼成した。次いで、この焼鈍した基板上

に P E D O T : P S S (正孔注入材料)を、約 4 0 0 0 r p m で約 3 0 秒間スピンコーティングした。次いで、このコーティング層を周囲環境で約 1 0 0 ° にて 3 0 分間焼成した後、グローブボックス内部 (N<sub>2</sub> 環境) で 2 0 0 ° にて 3 0 分間焼成した。次いで、基板を真空チャンバ内に移し、ここで、4,4'-ビス [N-(ナフタレニル)-N-フェニル-アミノ] ピフェニル (NPB) を約  $2 \times 10^{-7}$  トールの底面圧下、約 0.1 nm/秒の速度で真空蒸着させた。ビス (1-フェニルイソキノリン) (アセチルアセトナート) イリジウム (III) (「Ir (piq)<sub>2</sub>acac」) (6 重量%) を発光層として、ホスト-1 ホスト材料とともに適切な厚さ比となるようにそれぞれ約 0.01 nm/秒および約 0.10 nm/秒で同時蒸着させた。

【0099】

10

次いで、1,3,5-トリス (1-フェニル-1H-ベンゾイミダゾール-) 2-イルベンゼン (TPBI) を発光層上に約 0.1 nm/秒の速度で蒸着させた。フッ化リチウム (LiF) (電子注入材料) の層を約 0.005 nm/秒の速度で蒸着させた後、アルミニウム (Al) のカソードを約 0.3 nm/秒の速度で蒸着させた。この代表的なデバイス構造は: ITO (約 150 nm 厚) / P E D O T : P S S (約 30 nm 厚) / N P B (約 40 nm 厚) / ホスト-1 : Ir (piq)<sub>2</sub>acac (約 30 nm 厚) / T P B I (約 30 nm 厚) / L i F (約 0.5 nm 厚) / A l (約 120 nm 厚) であった。次いで、このデバイスを、湿気、酸化または機械による損傷から保護するために、O L E D デバイスの発光領域を覆うゲッター付きガラスキャップで封入した。

【0100】

20

個々の各デバイスは約 13.2 mm<sup>2</sup> の面積を有していた。

【0101】

〔実施例 3〕: デバイスの性能

〔実施例 3.1〕

スペクトルはすべて、P R 6 7 0 分光放射計 (Photo Research, Inc, チャッツワース、カリフォルニア、米国) で測定し、I-V-L 特性値は、Keithley 2612 SourceMeter (Keithley Instruments, Inc., クリーブランド、オハイオ、米国) で取得した。デバイスの動作はすべて、窒素を充填したグローブボックス内部で行なった。ホスト-1 : Ir (piq)<sub>2</sub>acac を含む、赤色発光デバイスであり、実施例 2.1 に従って製作したデバイス A を、デバイスの放出性の品質を調べるために駆動電圧の関数としての電流密度および輝度を調べることにより (図 3 に示す) 試験した。デバイスの立ち上がり電圧は約 2.5 ボルトであり、輝度は、13.2 mm<sup>2</sup> の面積のデバイスで約 6 V のとき約 8,000 cd/m<sup>2</sup> であった。

30

【表 1】

デバイス	PE (Lm/w)	LE (cd/A)
デバイス A	9.8	10.4

40

【0102】

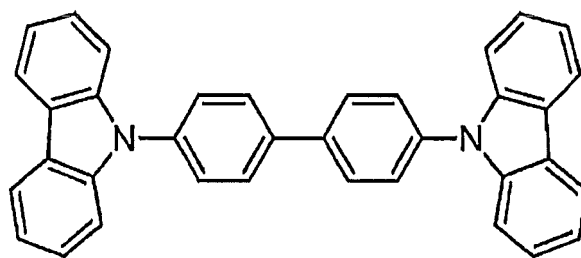
このように、化合物ホスト-1 は、有機発光デバイスにおけるホスト材料としての有効性が実証された。

【0103】

〔実施例 3.2〕

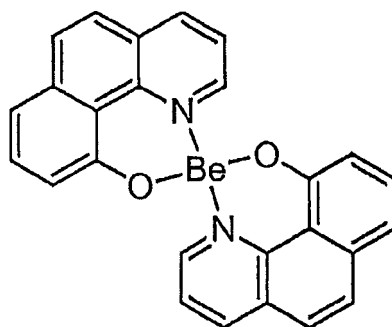
ホスト-1 : Ir (piq)<sub>2</sub>acac を含むものである発光デバイスであり、実施例 2.1 に従って製作したデバイス A を、デバイスの寿命 (10,000 h における T<sub>50</sub> (時間)) を調べるために試験した。他のデバイス (比較デバイス X [Bebq2] および比較デバイス Y [CBP]) を、それぞれの

## 【化 4 3】



CBP

10

Bebq<sub>2</sub>

20

デバイスで、比較化合物 X、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム(Bebq<sub>2</sub> (94%)とビス(1-フェニルイソキノリン)(アセチルアセトナート)イリジウム(III) (「Ir(piq)<sub>2</sub>acac」) (6%)、および比較化合物 Y、4,4'-ビス(カルバゾール-9-イル)ピフェニルCBP (94%)とビス(1-フェニルイソキノリン)(アセチルアセトナート)イリジウム(III) (「Ir(piq)<sub>2</sub>acac」) (6%)をそれぞれNPBの上面に同時蒸着させ、30nm厚の発光層20を形成したこと以外は実施例2.1に従って構築した。

30

## 【0104】

スペクトルはすべて、PR670分光放射計(Photo Research, Inc., チャットワース、カリフォルニア、米国)で測定した(また、I-V-L特性値は、Keithley 2612 SourceMeter(Keithley Instruments, Inc., クリーブランド、オハイオ、米国)で取得した。デバイスの動作はすべて、封入せずに、窒素を充填したグローブボックス内部で行なった。

## 【0105】

表2は、実施例2.2および2.3に従って製作したデバイスのデバイス寿命を示す。

40

【表2】

デバイス	10000 <u>n i t</u> におけるT50 (時間)
デバイスA	200
比較デバイスX	100
比較デバイスY	6

## 【0106】

50

このように、少なくともホスト - 1 は、発光有機発光デバイス (light emitting organic light emitting devices) における長期持続性化合物としての有効性が実証された。

【図 1】

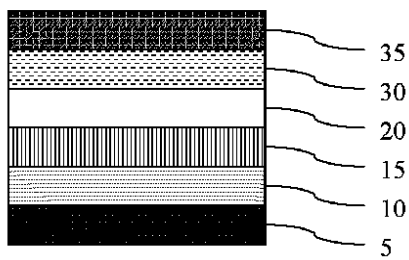
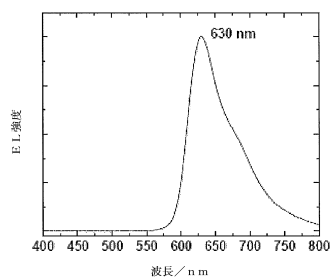
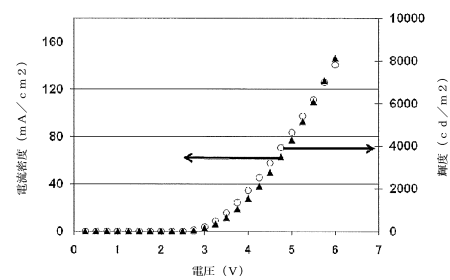


FIG. 1

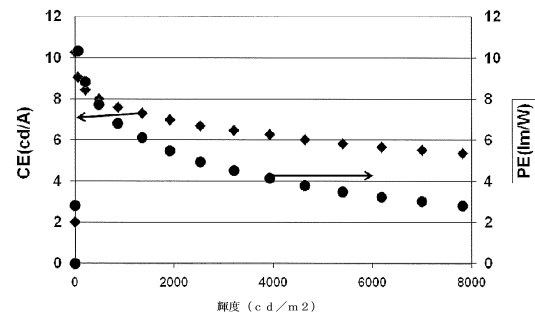
【図 2】



【図 3】



【図 4】



## フロントページの続き

- (72)発明者 望月 周  
アメリカ合衆国 カリフォルニア州 92011、カールスバッド、961 メラルーカ アベニュー、アパートメント エル
- (72)発明者 ライ、チエンシ  
アメリカ合衆国 カリフォルニア州 92081、ヴィスタ、1946 ウェリントン レーン #67
- (72)発明者 カーン、サザドゥール、ラフマン  
アメリカ合衆国 カリフォルニア州 92122、サン ディエゴ、7650 パルミラ ドライブ #2
- (72)発明者 リー、シェン  
アメリカ合衆国 カリフォルニア州 92081、ヴィスタ、2075 セコイア クレスト
- (72)発明者 ハーディング、ブレット、ティー、  
アメリカ合衆国 カリフォルニア州 92009、カールスバッド、6816 ウルブ ストリート
- (72)発明者 チェ、ヒョンシク  
アメリカ合衆国 カリフォルニア州 92122、サン ディエゴ、8840 コスタ ヴェルデ ブールヴァード #3305
- (72)発明者 ロメロ、レベッカ  
アメリカ合衆国 カリフォルニア州 92025、エスコンディード、638 エヌ、フィグ ストリート
- (72)発明者 シスク、デイヴィッド、ティー、  
アメリカ合衆国 カリフォルニア州 92128、サン ディエゴ、11329 プロヴェンカル プレイス

## 合議体

審判長 中田 とし子

審判官 木村 敏康

審判官 齊藤 真由美

(56)参考文献 米国特許出願公開第2011/0140093(US, A1)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C07D235/18