

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 7 部門第 2 区分

【発行日】平成 20 年 8 月 14 日 (2008.8.14)

【公表番号】特表 2004-503059 (P2004-503059A)

【公表日】平成 16 年 1 月 29 日 (2004.1.29)

【年通号数】公開・登録公報 2004-004

【出願番号】特願 2002-507959 (P2002-507959)

【国際特許分類】

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

C 0 7 D 213/26 (2006.01)

C 0 7 D 213/30 (2006.01)

C 0 7 D 215/12 (2006.01)

C 0 7 F 15/00 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

【 F I 】

H 0 5 B 33/14 B

C 0 7 D 213/26

C 0 7 D 213/30

C 0 7 D 215/12

C 0 7 F 15/00 E

C 0 9 K 11/06 6 6 0

【手続補正書】

【提出日】平成 20 年 6 月 27 日 (2008.6.27)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】特許請求の範囲

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】 $I r L^a L^b L^c x L^y L^z$

という化学式を有する少なくとも 1 つのイリジウム化合物を含む、発光層を含む有機電子デバイスにおいて、式中、

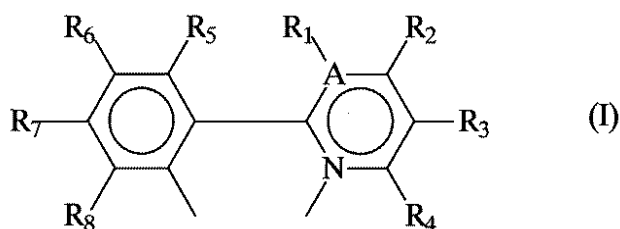
$x = 0$ 又は $y + z = 0$ であり、 $y = 2$ であるとき $z = 0$ であることを条件として、 $x = 0$ 又は 1、 $y = 0$ 、1 又は 2、及び $z = 0$ 又は 1 であり；

L^y が単座配位子であるとき $y + z = 2$ であり、 L^y が二座配位子であるとき $z = 0$ であることを条件として、 L^y = 単座配位子又は二座配位子でありかつフェニルピリジン、フェニルピリミジン又はフェニルキノリンではなく；

L^z は、単座配位子であり、かつフェニルピリジン及びフェニルピリミジン又はフェニルキノリンではなく；

L^a 、 L^b 及び L^c は互いに同様であるか又は異なり、 L^a 、 L^b 及び L^c の各々は

【化 1】



という構造 (I) を有し、式中、

$R_1 - R_4$ 及び $R_5 - R_8$ の隣接対を接合させて 5 員環又は 6 員環を形成することができ、

$R_1 - R_8$ の少なくとも 1 つは F 、 $C_n F_{2n+1}$ 、 $O C_n F_{2n+1}$ 及び $O C F_2 X$ から選択され、式中、 $n = 1 - 6$ 、 $X = H$ 、 Cl 又は Br であり、

$A = N$ であるとき R_1 は存在しないことを条件として、 $A = C$ 又は N であり、該イリジウム化合物が発光層の少なくとも 20 重量%の量で存在していることを特徴とする有機電子デバイス。

【請求項 2】 発光層が希釈剤及び



という第 2 化学式を有する少なくとも 1 つの化合物を 20 重量%未満含む、発光層を含む有機電子デバイスにおいて、式中、

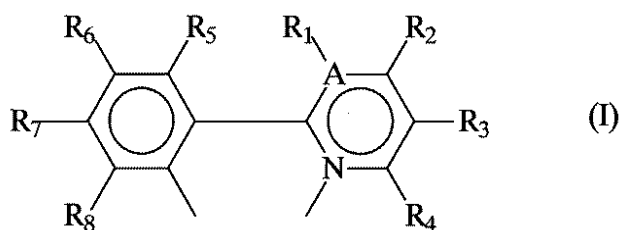
$y = 2$ であるとき $z = 0$ であることを条件として、 $y = 0$ 、1 又は 2、及び $z = 0$ 又は 1 であり；

L' が単座配位子であるとき $y + z = 2$ であり、 L' が二座配位子であるとき $z = 0$ であることを条件として、 $L' =$ 二座配位子又は単座配位子でありかつフェニルピリジン、フェニルピリミジン又はフェニルキノリンではなく；

L'' は、単座配位子であり、かつフェニルピリジン及びフェニルピリミジン又はフェニルキノリンではなく；かつ

L^a 及び L^b は互いに同様であるか又は異なり、 L^a 及び L^b の各々は、

【化 2】



という構造 (I) を有し、式中、

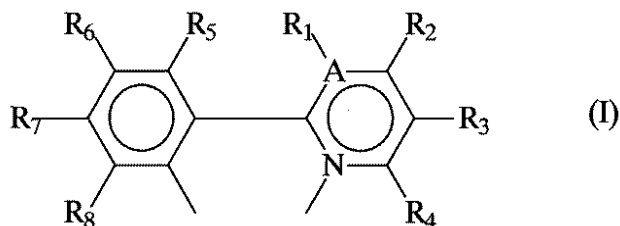
$R_1 - R_4$ 及び $R_5 - R_8$ の隣接対を接合させて 5 員環又は 6 員環を形成することができ、

$R_1 - R_8$ の少なくとも 1 つは F 、 $C_n F_{2n+1}$ 、 $O C_n F_{2n+1}$ 及び $O C F_2 X$ から選択され、式中、 $n = 1 - 6$ 、 $X = H$ 、 Cl 又は Br であり、

$A = N$ であるとき R_1 は存在しないことを条件として、 $A = C$ 又は N であることを特徴とする有機電子デバイス。

【請求項 3】 $fac - Ir(L)_3$ 、 $mer - Ir(L)_3$ 及びそれらの組合せから選択された化学式を有する化合物において、式中、 L は、表 1 に示される 1 - a ~ 1 - m 及び 1 - q ~ 1 - v の基から選択され、

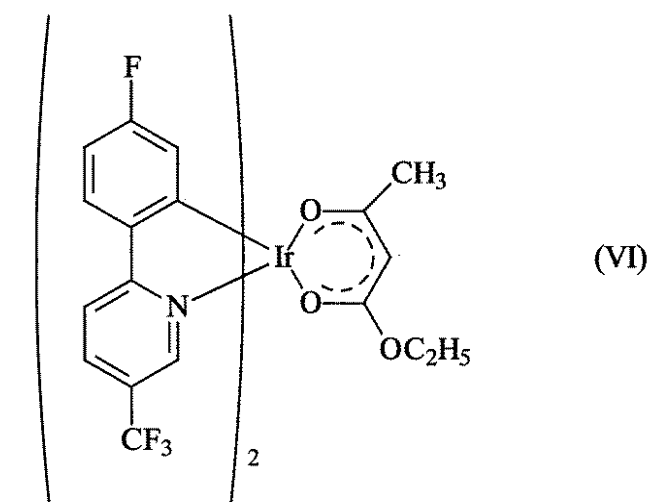
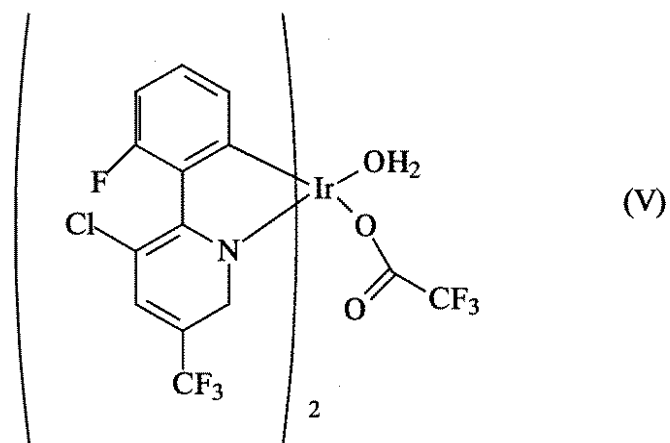
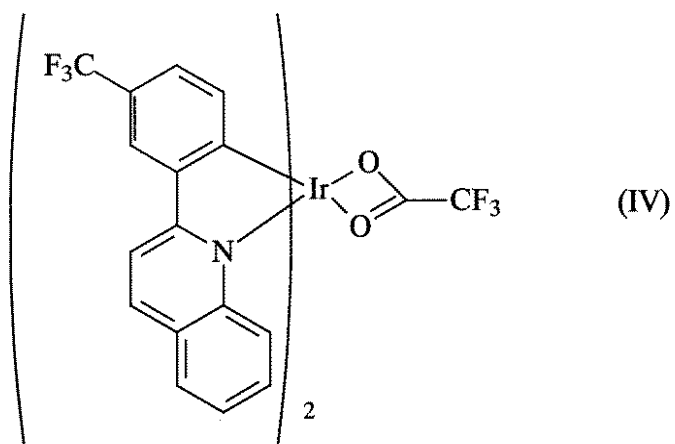
【化 3】



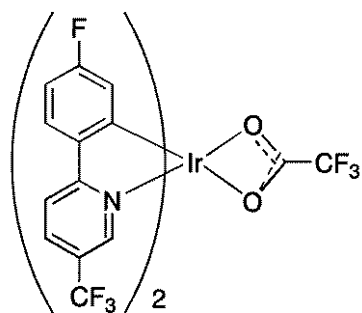
という構造 (I) を有することを特徴とする化合物。

【請求項 4】 以下の構造 (IV)、(V)、(VI)、(IX) 及び (X)：

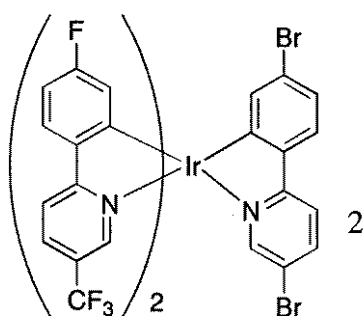
【化 4】



【化 5】



(IX)



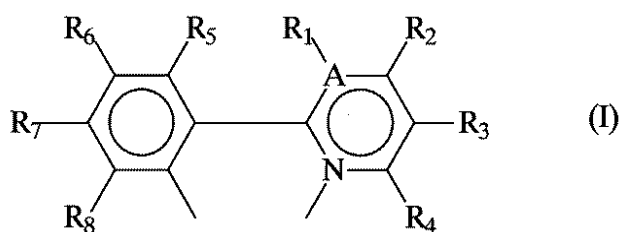
(X)

から選択される構造を有することを特徴とする化合物。

【請求項5】 以下の(i)および(ii)：

(i) $fac - Ir(L)_3$ 、 $mer - Ir(L)_3$ 及びそれらの組合せから選択された化学式を有する化合物であって、式中、Lは、表1に示される 1 - a ~ 1 - m 及び 1 - q ~ 1 - v から選択された基であり、

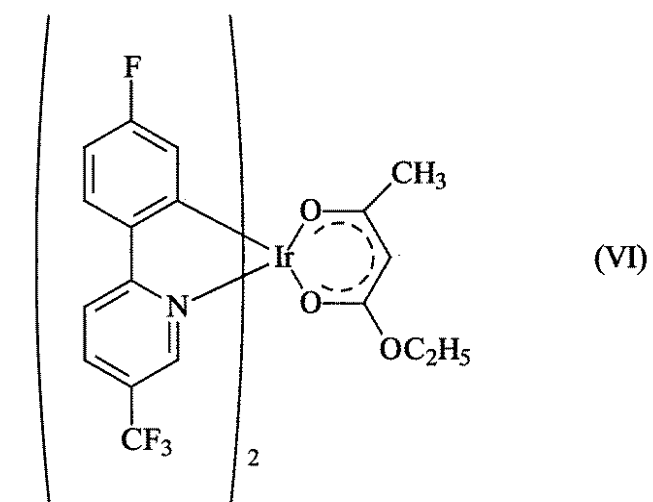
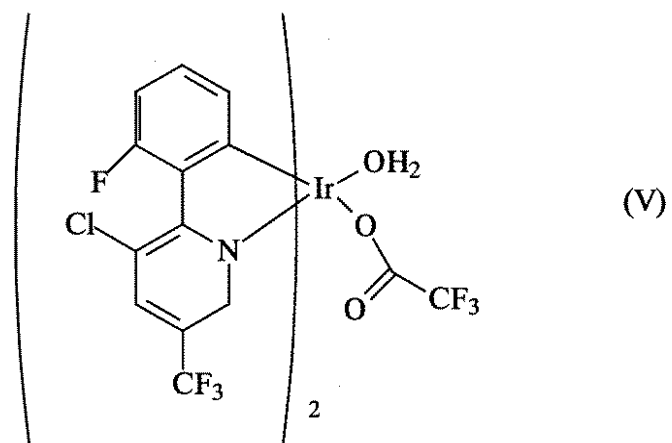
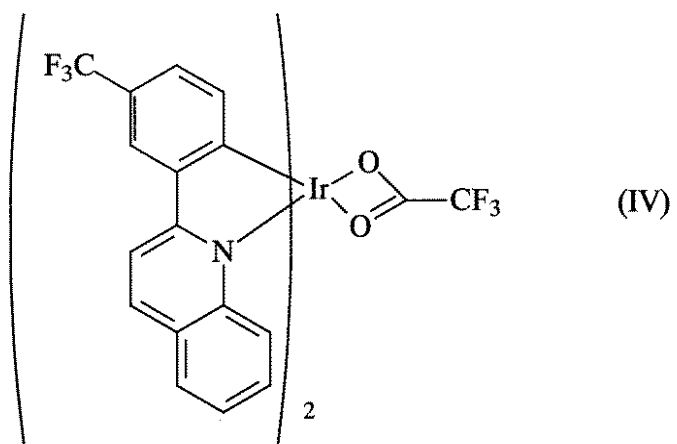
【化6】



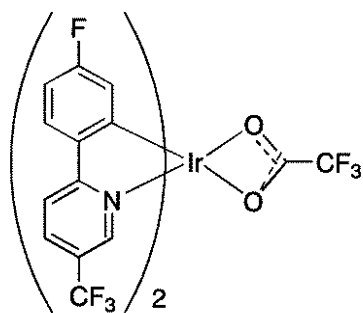
という構造(I)を有する化合物；

(ii)

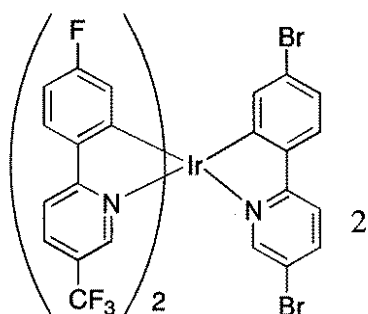
【化7】



【化 8】



(IX)

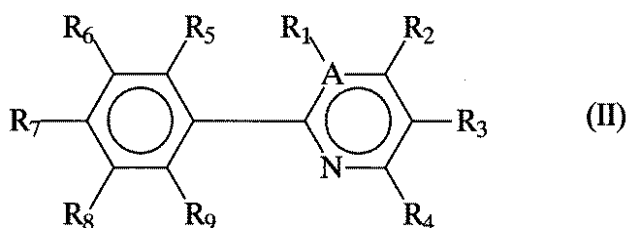


という構造 (I V)、(V)、(V I)、(I X) 及び (X) のうちの 1 つを有する化合物、

から選択される化合物を含む、発光層を含むことを特徴とする有機電子デバイス。

【請求項 6】 以下の構造 (I I) :

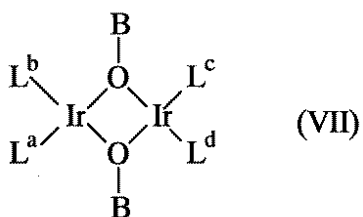
【化 9】



を有し、表 2 に示される化合物 2 - a ~ 2 - d、2 - f ~ 2 - r、2 - t ~ 2 - w 及び 2 - y ~ 2 - a a から選択されることを特徴とする化合物。

【請求項 7】 以下の構造 V I I :

【化 1 0】

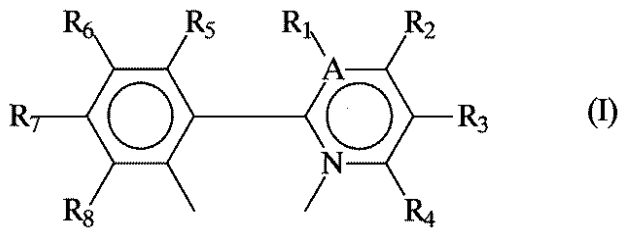


を有する化合物において、式中、 $B = H$ 、 CH_3 又は C_2H_5 であり、

L^a 、 L^b 、 L^c 及び L^d は互いに同じであるか又は異なり、 L^a 、 L^b 、 L^c 及び L^d

^d の各々は

【化 1 1】



という構造 (I) を有し、式中、

$R_1 - R_4$ 及び $R_5 - R_8$ の隣接対を接合させて 5 員環又は 6 員環を形成することができ、

$R_1 - R_8$ の少なくとも 1 つは F 、 $C_n F_{2n+1}$ 、 $OC_n F_{2n+1}$ 及び $OCF_2 X$ から選択され、式中、 $n = 1 - 6$ 、 $X = H$ 、 Cl 又は Br であり、

$A = N$ であるとき R_1 は存在しないことを条件として、 $A = C$ 又は N であることを特徴とする化合物。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0104

【補正方法】変更

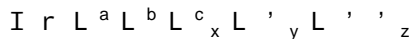
【補正の内容】

【0104】

ピーク効率は、デバイス内のエレクトロルミネセント化合物の値を最も良く示すものである。それは、一定数の光子を出すために (放射輝度) デバイス内にどれほどの電子を入力しなければならないかの尺度を与える。それは、発光材料の固有の効率を反映する根本的に重要な数値である。より高い効率は、同じ放射輝度を達成するためにより少ない電子しか必要とされないことを意味し、そのこと自体より低い電力消費量を意味することから、実践的利用分野のためにもこれは重要である。より効率の高いデバイスは又、注入された電子が熱を発生するか又は望ましくない化学的副反応をひき起こす代りにより高い割合で光子に変換されることから、より長い寿命を有する傾向を有する。本発明のイリジウム錯体の大部分は、親 *fac*-トリス (2-フェニルピリジン) イリジウム錯体に比べてはるかに高いピーク効率を有する。より低い効率を有する錯体も又、上述のように、リン光性又は光ルミネセント材料として又は触媒としての有用性を見い出すことができる。

以下に、本発明の好ましい態様を示す。

[1] 発光層を含む有機電子デバイスにおいて、発光層の少なくとも 20 重量 % が



という化学式を有する少なくとも 1 つの化合物を含み、式中、

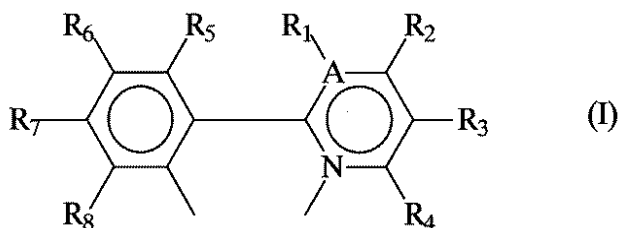
$x = 0$ 又は $y + z = 0$ であり、 $y = 2$ であるとき $z = 0$ であることを条件として、 $x = 0$ 又は 1、 $y = 0$ 、1 又は 2、及び $z = 0$ 又は 1 であり；

L' が単座配位子であるとき $y + z = 2$ であり、 L' が二座配位子であるとき $z = 0$ であることを条件として、 $L' =$ 二座配位子又は単座配位子であり、かつフェニルピリジン、フェニルピリミジン又はフェニルキノリンではなく；

L'' は、単座配位子であり、かつフェニルピリジン及びフェニルピリミジン又はフェニルキノリンではなく；

L^a 、 L^b 及び L^c は互いに同様であるか又は異なり、 L^a 、 L^b 及び L^c の各々は

【化 1 2】



という構造 (I) を有し、式中、

$R_1 - R_4$ 及び $R_5 - R_8$ の隣接対を接合させて 5 員環又は 6 員環を形成することができ、
 $R_1 - R_8$ の少なくとも 1 つは F 、 $C_n F_{2n+1}$ 、 $O C_n F_{2n+1}$ 及び $O C F_2 X$ から選択され、
 式中、 $n = 1 - 6$ 、 $X = H$ 、 Cl 又は Br であり、

$A = N$ であるとき R_1 は存在しないことを条件として、 $A = C$ 又は N であることを特徴とする有機電子デバイス。

[2] $x = 1$ 、 $y = 0$ および $z = 0$ であることを特徴とする [1] に記載のデバイス。

[3] $A = C$ であり、 $R_1 - R_8$ のいずれもニトロから選択されないことを特徴とする [2] に記載のデバイス。

[4] R_3 が $C F_3$ であることを特徴とする [1] に記載のデバイス。

[5] $R_5 - R_8$ のうち少なくとも 1 つが F 、 $C_n F_{2n+1}$ 、 $O C_n F_{2n+1}$ 及び $O C F_2 X$ から選択され、式中、 $n = 1 \sim 6$ 、 $X = H$ 、 Cl 又は Br であることを特徴とする [4] に記載のデバイス。

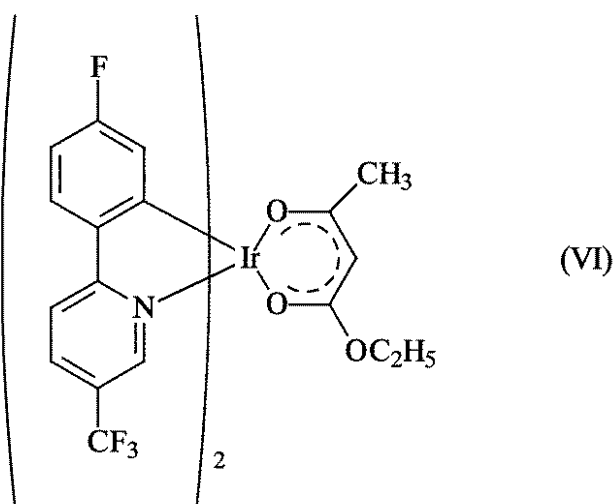
[6] $A = C$ 、 $R_3 = C F_3$ 、 $R_7 = F$ であり、 R_1 、 R_2 、 $R_4 - R_6$ 及び $R_8 = H$ であることを特徴とする [2] に記載のデバイス。

[7] $A = C$ 、 R_3 及び $R_6 = C F_3$ であり、 R_1 、 R_2 、 R_4 、 R_5 、 R_7 及び $R_8 = H$ であることを特徴とする [2] に記載のデバイス。

[8] $A = C$ 、 $R_3 = C F_3$ 、 R_6 及び $R_8 = F$ 、及び R_1 、 R_2 、 R_4 、 R_5 及び $R_7 = H$ であることを特徴とする [2] に記載のデバイス。

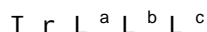
[9]

【化 1 3】



という構造 (VI) を有し、 $x = 0$ 及び $y = 1$ であることを特徴とする [1] に記載のデバイス。

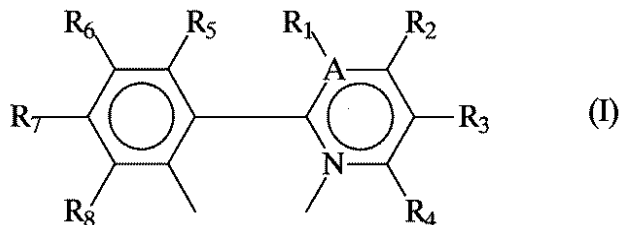
[1 0] 発光層を含む有機電子デバイスにおいて、発光層が希釈剤及び



という化学式を有する少なくとも 1 つの化合物を 20 重量%未満含む、式中、

L^a 、 L^b 及び L^c は互いに同様であるか又は異なり、 L^a 、 L^b 及び L^c の各々は

【化 1 4】



という構造 (I) を有し、式中、

$R_1 - R_4$ 及び $R_5 - R_8$ の隣接対を接合させて 5 員環又は 6 員環を形成することができ、
 $R_1 - R_8$ の少なくとも 1 つは F 、 $C_n F_{2n+1}$ 、 $O C_n F_{2n+1}$ 及び $O C F_2 X$ から選択され、
 式中、 $n = 1 - 6$ 、 $X = H$ 、 Cl 又は Br であり、

$A = N$ であるとき R_1 は存在しないことを条件として、 $A = C$ 又は N であることを特徴とする有機電子デバイス。

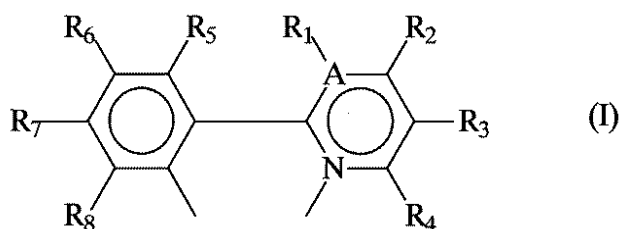
[1 1] 希釈剤が、ポリ (N - ビニルカルバゾール)、ポリシラン、4, 4' - N, N' - ジカルバゾールビフェニル及び第 3 級芳香族アミンから選択されることを特徴とする [1 0] に記載のデバイス。

[1 2] 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)、- 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 又は $DEASP$)、1, 2 - トランス - ビス (9 H - 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)、ポルフィリン化合物、及びそれらの組み合わせから選択されるホール輸送層をさらに含むことを特徴とする [1] に記載のデバイス。

[1 3] トリス (8 - ヒドロキシキノラト) アルミニウム、2, 9 - ジメチル - 4, 7 - ジフェニル - 1, 10 - フェナントロリン ($DDPA$)、4, 7 - ジフェニル - 1, 10 - フェナントロリン (DPA)、2 (4 - ビフェニリル) - 5 - (4 - t - ブチルフェニル) - 1, 3, 4 - オキサジアゾール (PBD)、3 - (4 - ビフェニリル) - 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)、及びそれらの組み合わせから選択される電子輸送層をさらに含むことを特徴とする [1] に記載のデバイス。

[1 4] $fac - Ir(L)_3$ 、 $mer - Ir(L)_3$ 及びそれらの組合せから選択される化学式を有する化合物において、式中、 L は、表 1 に示される 1 - a ~ 1 - m 及び 1 - q ~ 1 - v の基から選択され、

【化 1 5】



という構造 (I) を有し、式中、

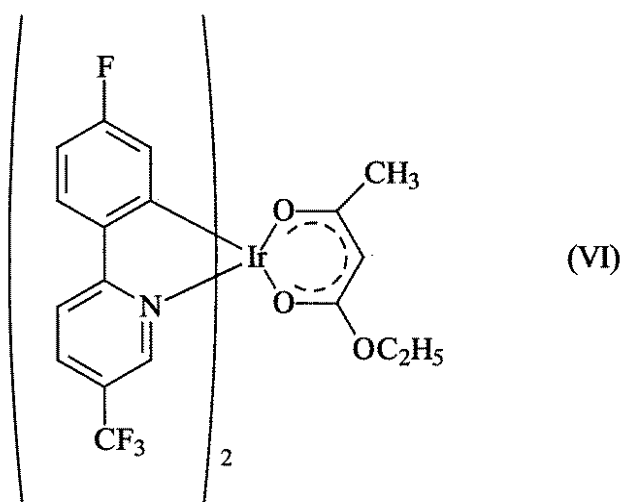
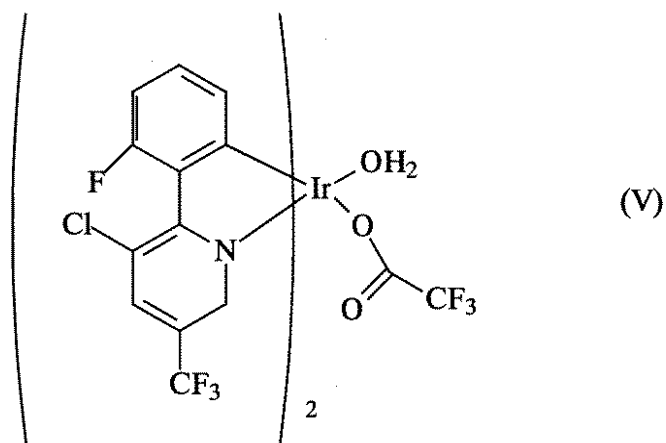
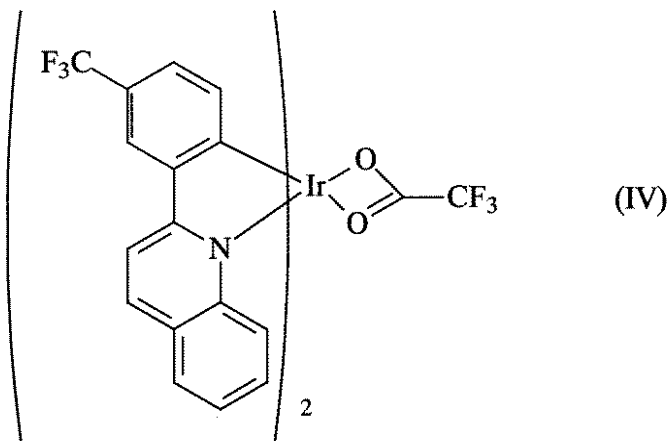
$R_1 - R_4$ 及び $R_5 - R_8$ の隣接対を接合させて 5 員環又は 6 員環を形成することができ、

$R_1 - R_8$ の少なくとも 1 つは F 、 $C_n F_{2n+1}$ 、 $O C_n F_{2n+1}$ 及び $O C F_2 X$ から選択され、式中、 $n = 1 - 6$ 、 $X = H$ 、 Cl 又は Br であり、

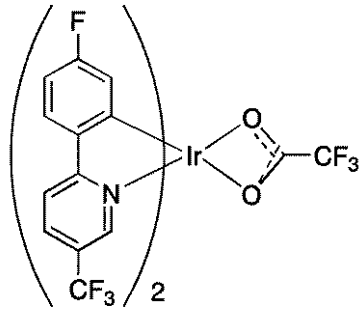
$A = N$ であるとき R_1 は存在しないことを条件として、 $A = C$ 又は N であることを特徴とする化合物。

[15] 以下の構造 (IV)、(V)、(VI)、(IX) 及び (X)

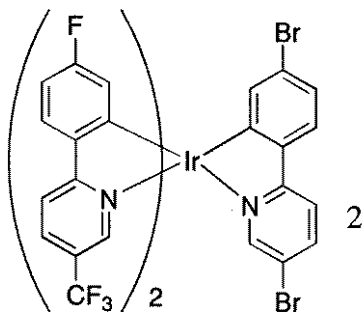
【化 16】



【化 1 7】



(IX)



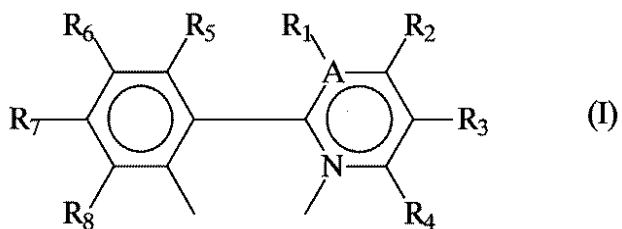
(X)

から選択される構造を有することを特徴とする化合物。

[1 6] 以下の (i) および (i i) :

(i) $fac - Ir(L)_3$ 、 $mer - Ir(L)_3$ 及びそれらの組合せから選択される化学式を有する化合物であって、式中、L は、表 1 に示される 1 - a ~ 1 - m 及び 1 - q ~ 1 - v から選択される基であり、

【化 1 8】

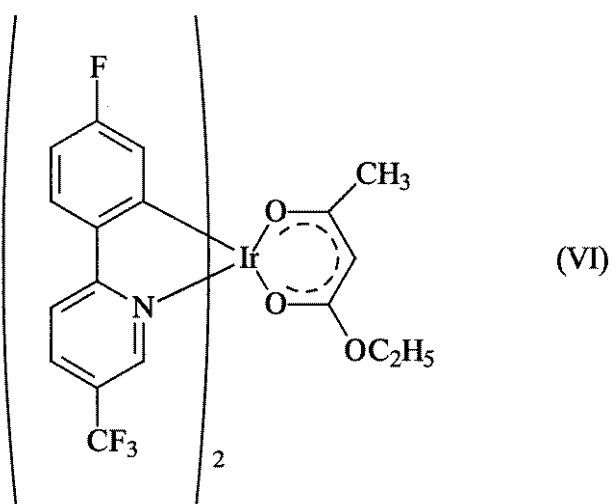
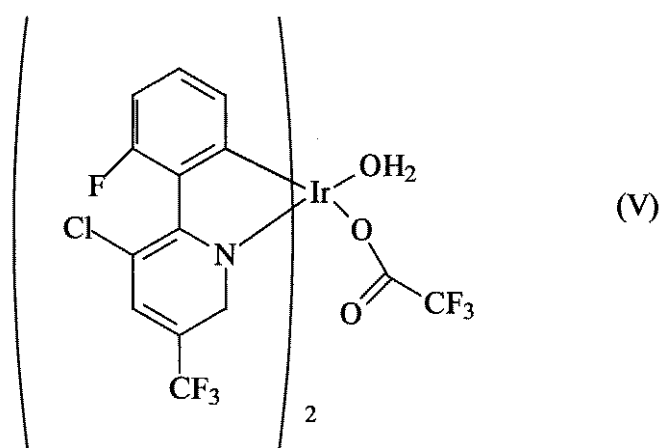
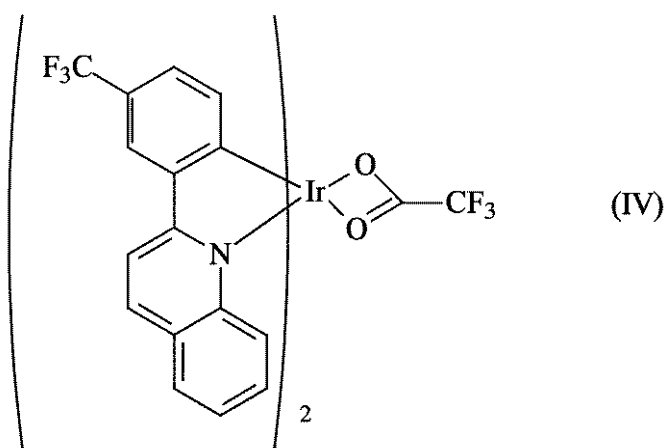


(I)

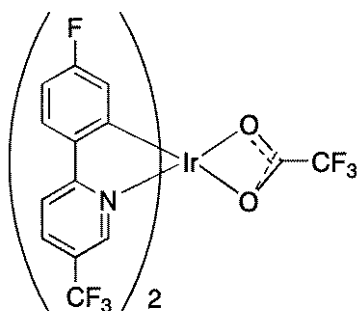
という構造 (I) を有し、式中、

$R_1 - R_4$ 及び $R_5 - R_8$ の隣接対を接合させて 5 員環又は 6 員環を形成することができ、
 $R_1 - R_8$ の少なくとも 1 つは F、 $C_n F_{2n+1}$ 、 $O C_n F_{2n+1}$ 及び $O C F_2 X$ から選択され、
 式中、 $n = 1 - 6$ 、 $X = H$ 、 Cl 又は Br であり、
 $A = N$ であるとき R_1 は存在しないことを条件として、 $A = C$ 又は N である、化合物；
 (i i)

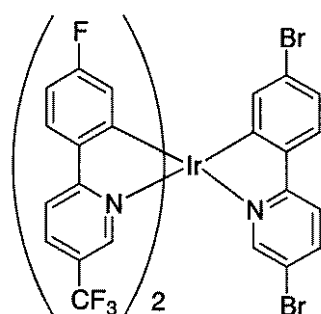
【化 1 9】



【化 2 0】



(IX)



(X)

という構造 (I V)、(V)、(V I)、(I X) 及び (X) のうちの 1 つを有する化合物、

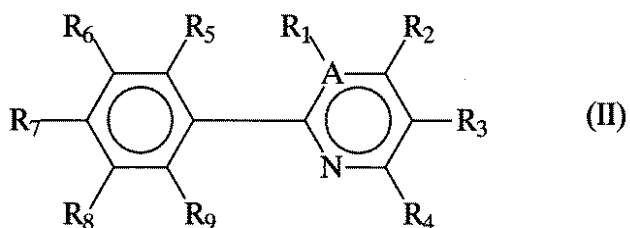
から選択される化合物を含む発光層を含むことを特徴とする有機電子デバイス。

[1 7] 発光層がさらに希釈剤を含むことを特徴とする [1 6] に記載のデバイス。

[1 8] 希釈剤が、ポリ (N - ビニルカルバゾール)、ポリシラン、4, 4' - N, N' - ジカルバゾールビフェニル及び第 3 級芳香族アミンから選択されることを特徴とする [1 7] に記載のデバイス。

[1 9] 表 2 に示される化合物 2 - a ~ 2 - a a から選択され、以下の構造 (I I) :

【化 2 1】



(式中、

R_9 は H であり、

$R_1 - R_4$ 及び $R_5 - R_8$ の隣接対を接合させて 5 員環又は 6 員環を形成することができ、

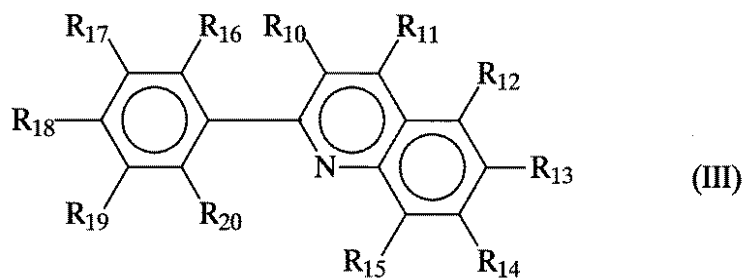
$R_1 - R_8$ の少なくとも 1 つは F、 $C_n F_{2n+1}$ 、 $O C_n F_{2n+1}$ 及び $O C F_2 X$ から選択され、式中、 $n = 1 - 6$ 、 $X = H$ 、Cl 又は Br であり、

$A = N$ であるとき R_1 は存在しないことを条件として、 $A = C$ 又は N である)

を有することを特徴とする化合物。

[2 0] 以下の構造 (I I I) :

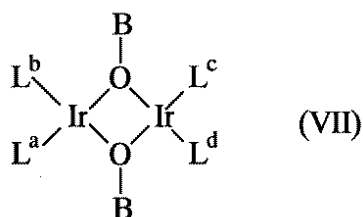
【化 2 2】



を有し、式中、 $R_{17} = CF_3$ であり $R_{10} - R_{16}$ 及び $R_{18} - R_{20}$ がHであることを特徴とする化合物。

[2 1] 以下の構造 V I I :

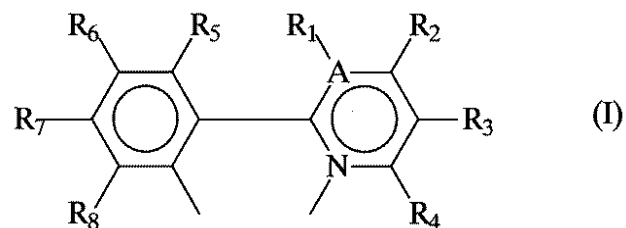
【化 2 3】



を有する化合物において、式中、 $B = H$ 、 CH_3 又は C_2H_5 であり、

L^a 、 L^b 、 L^c 及び L^d は互いに同じであるか又は異なり、 L^a 、 L^b 、 L^c 及び L^d の各々は

【化 2 4】



という構造 (I) を有し、式中、

$R_1 - R_4$ 及び $R_5 - R_8$ の隣接対を接合させて5員環又は6員環を形成することができ、

$R_1 - R_8$ の少なくとも1つはF、 C_nF_{2n+1} 、 OC_nF_{2n+1} 及び OCF_2X から選択され、式中、 $n = 1 - 6$ 、 $X = H$ 、 Cl 又は Br であり、

$A = N$ であるとき R_1 は存在しないことを条件として、 $A = C$ 又は N であることを特徴とする化合物。

[2 2] $L^a = L^b = L^c = L^d$;

$B = H$;

$R_3 = CF_3$;

$R_7 = F$;

R_1 、 R_2 、 $R_4 - R_6$ 及び $R_8 = H$ である

ことを特徴とする [2 1] に記載の化合物。