

【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 01 L 51/50	(2006.01)
C 07 D 213/26	(2006.01)
C 07 D 213/30	(2006.01)
C 07 D 215/12	(2006.01)
C 07 F 15/00	(2006.01)
C 09 K 11/06	(2006.01)

【F I】

H 05 B 33/14	B
C 07 D 213/26	
C 07 D 213/30	
C 07 D 215/12	
C 07 F 15/00	E
C 09 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】 $\text{IrL}^a\text{L}^b\text{L}^c_x\text{L}'_y\text{L}''_z$
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、

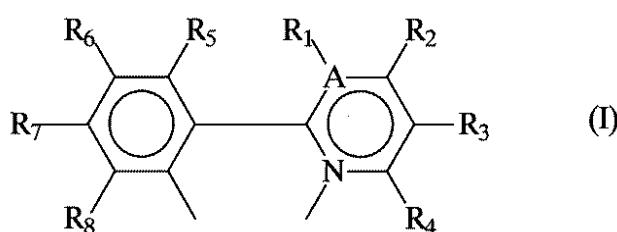
$x = 0$ 又は $y + z = 0$ であり、 $y = 2$ であるとき $z = 0$ であることを条件として、 $x = 0$ 又は1、 $y = 0$ 、1又は2、及び $z = 0$ 又は1であり；

L' 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、 $\text{L}' =$ 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'' 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、

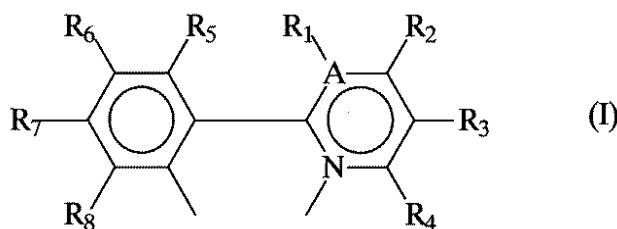
$y = 2$ であるとき $z = 0$ であることを条件として、 $y = 0$ 、1 又は 2、及び $z = 0$ 又は 1 であり；

L' が单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、 $L' =$ 二座配位子又は单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'_{y} は、单座配位子であり、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、

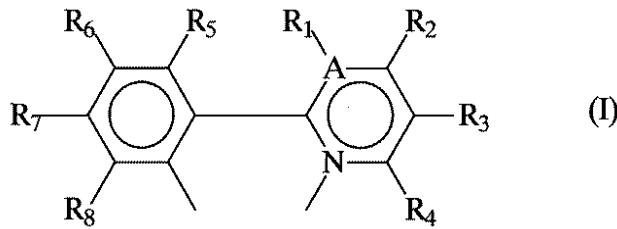
$R_1 - R_4$ 及び $R_5 - R_8$ の隣接対を接合させて 5 員環又は 6 員環を形成することができ、

$R_1 - R_8$ 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】 $f a c - I r (L)_3$ 、 $m e r - I r (L)_3$ 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 $\underline{1 - a} \sim \underline{1 - m}$ 及び $\underline{1 - q} \sim \underline{1 - v}$ の基から選択され、

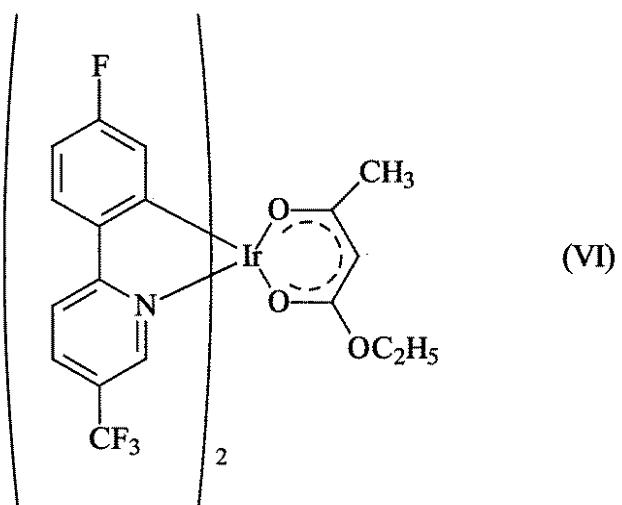
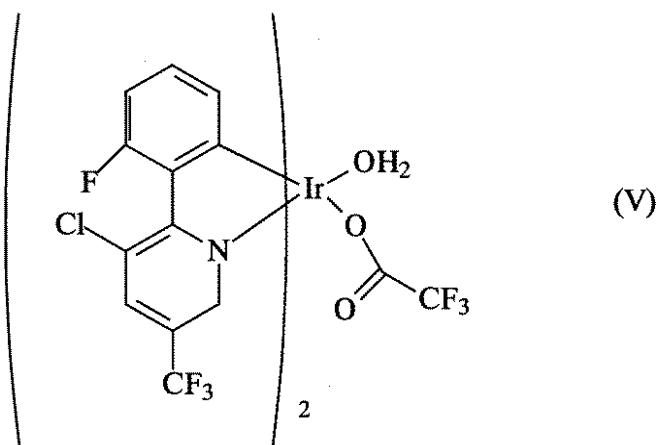
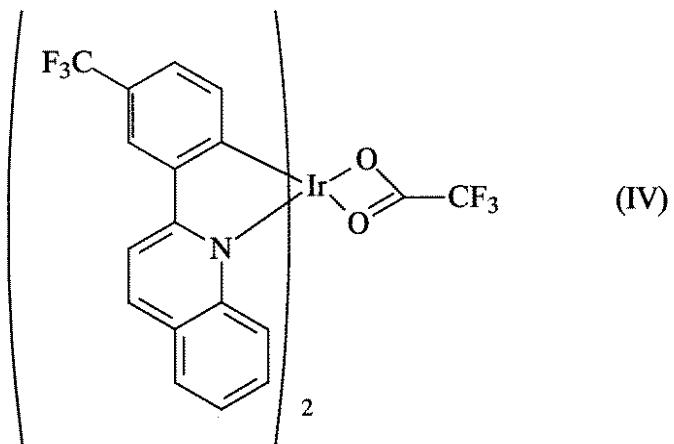
【化 3】



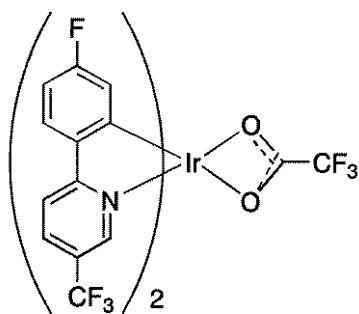
という構造(I)を有することを特徴とする化合物。

【請求項 4】 以下の構造(IV)、(V)、(VI)、(IX)及び(X)：

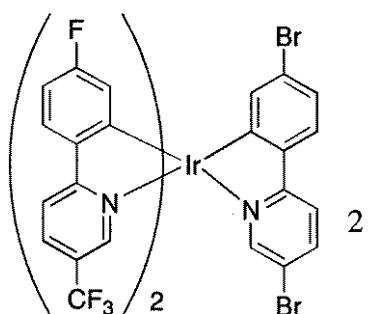
【化 4】



【化5】



(IX)



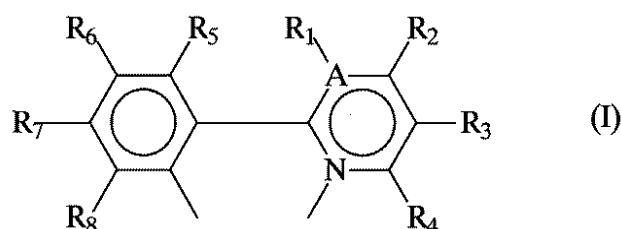
(X)

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、

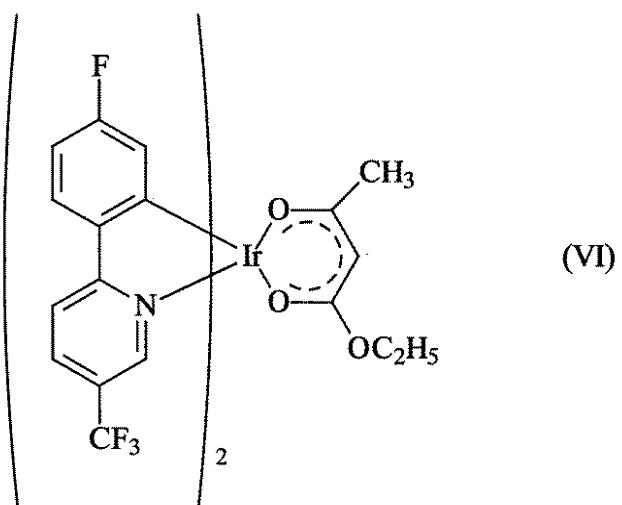
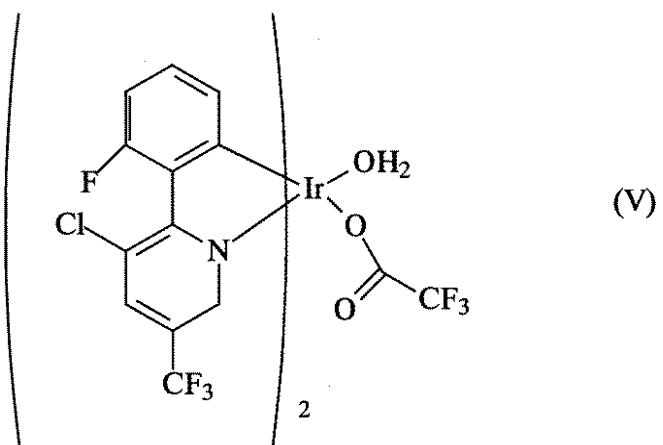
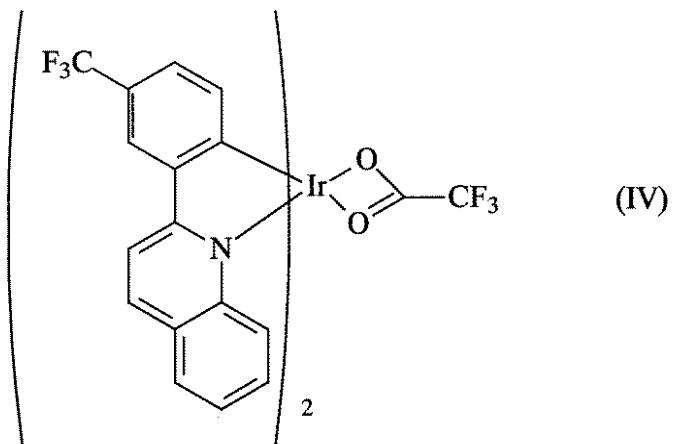
【化6】



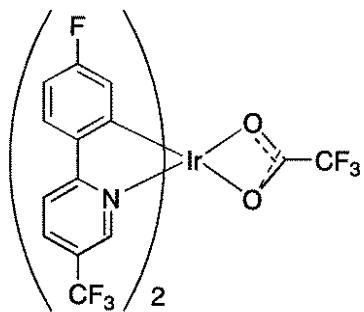
という構造(I)を有する化合物；

(i ii)

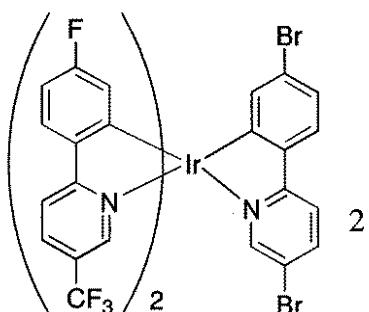
【化7】



【化8】



(IX)

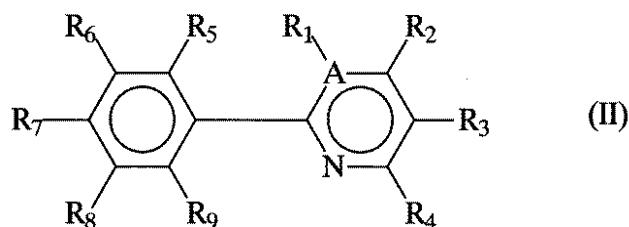


という構造 (IV)、(V)、(VI)、(IX) 及び (X) のうちの 1 つを有する化合物、

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(II)：

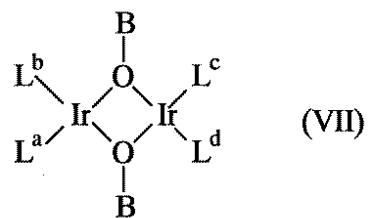
【化 9】



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 - aa 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 III :

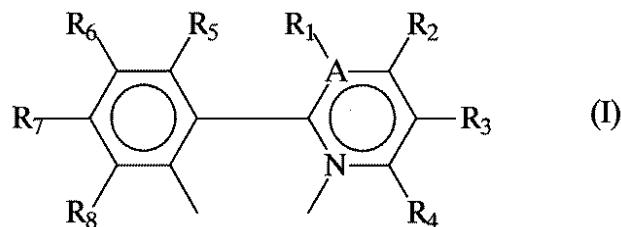
【化 1 0】



を有する化合物において、式中、 $B = H$ 、 C_3H 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、 $C_n F_{2n+1}$ 、 $O C_n F_{2n+1}$ 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。

【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ることを意味し、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引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 $I_r L^a L^b L^c_x L'_{y} L''_{z}$

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、

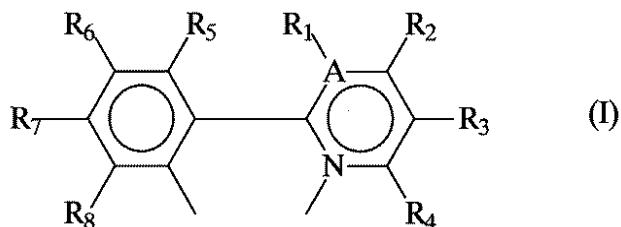
$x = 0$ 又は $y + z = 0$ であり、 $y = 2$ であるとき $z = 0$ であることを条件として、 $x = 0$ 又は 1、 $y = 0$ 、1 又は 2、及び $z = 0$ 又は 1 であり；

L' が单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、 $L' =$ 二座配位子又は单座配位子であり、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、单座配位子であり、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、 $n = 1 - 6$ 、 $X = H$ 、 C 1 又は B_r 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 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] R₃ が C F₃ であることを特徴とする [1] に記載のデバイス。
 [5] R₅ - R₈ のうち少なくとも 1 つが F、C_nF_{2n+1}、OC_nF_{2n+1} 及び OC_nF₂X から選択され、式中、n = 1 ~ 6、X = H、C 1 又は B r であることを特徴とする [4] に記載のデバイス。

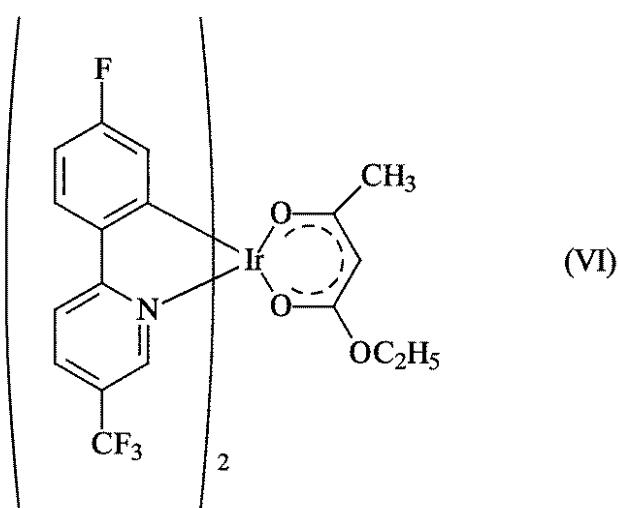
[6] A = C、 $R_3 = CF_3$ 、 $R_7 = F$ であり、 R_1 、 R_2 、 $R_4 - R_6$ 及び $R_8 = H$ であることを特徴とする「?」に記載のデバイス

[7] A = C、R₃及びR₆ = C F₃であり、R₁、R₂、R₄、R₅、R₇及びR₈ = Hであることを特徴とする[2]に記載のデバイス

[8] A = C、 $R_3 = CF_3$ 、 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「？」に記載のデバイス。

[9]

【化 1 3】



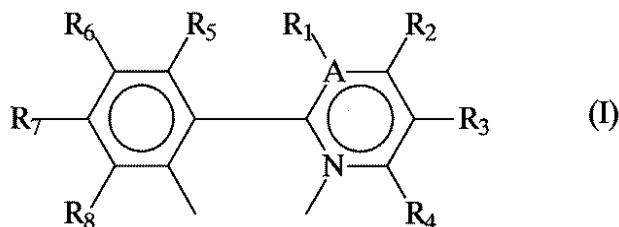
という構造（V1）を有し、 $x = 0$ 及び $y = 1$ であることを特徴とする [1] に記載のデバイス。

[10] 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
I r L^a L^b L^c

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14】



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、 $n = 1 - 6$ 、 $X = H$ 、C1 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。

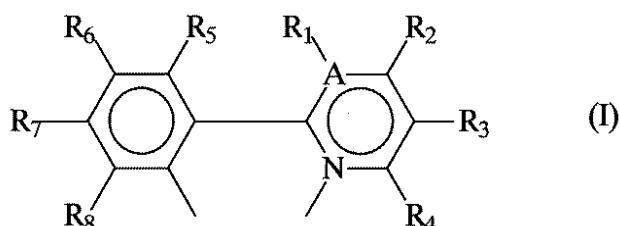
[11] 希釈剤が、ポリ(N-ビニルカルバゾール)、ポリシラン、4,4'-N,N'-ジカルバゾールビフェニル及び第3級芳香族アミンから選択されることを特徴とする[10]に記載のデバイス。

[12] 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(9H-カルバゾル-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。

[13] 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)、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。

[14] 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15】



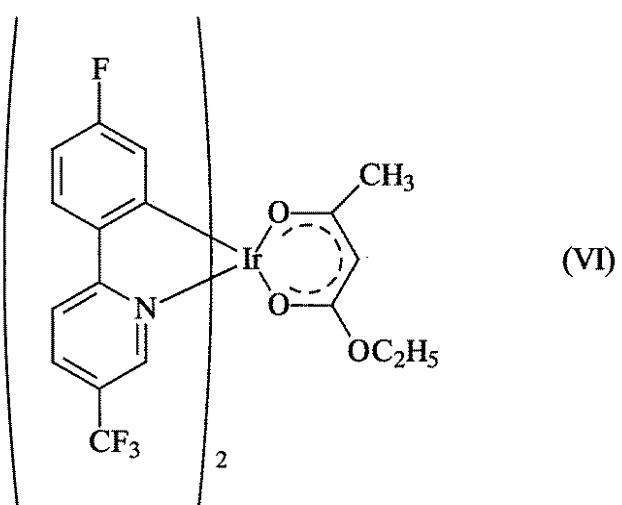
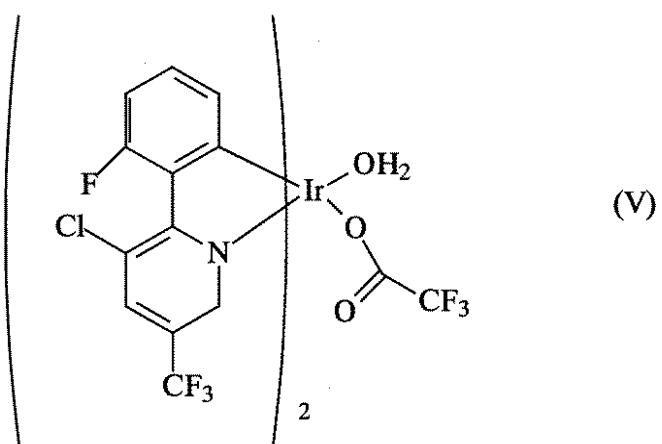
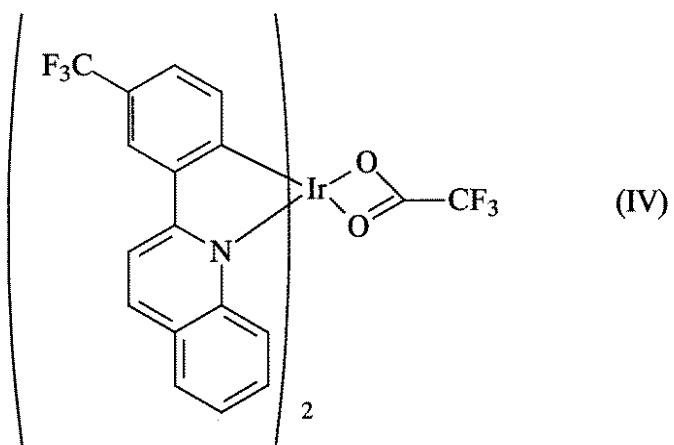
という構造(Ⅰ)を有し、式中、

$R_1 - R_4$ 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、 $n = 1 - 6$ 、 $X = H$ 、C1又はBrであり、

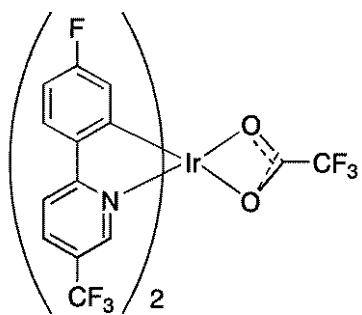
$A = N$ であるとき R_1 は存在しないことを条件として、 $A = C$ 又は N であることを特徴とする化合物。

[15] 以下の構造(IV)、(V)、(VI)、(IX)及び(X)

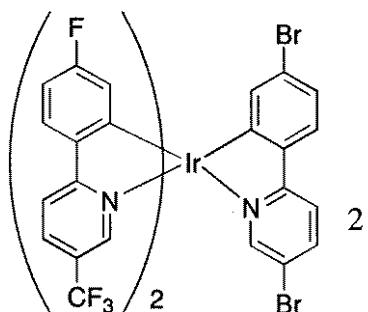
【化16】



【化17】



(IX)



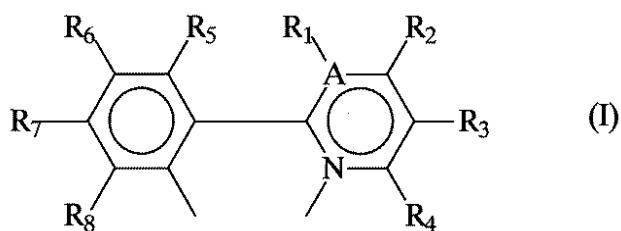
(X)

から選択される構造を有することを特徴とする化合物。

[16] 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18】

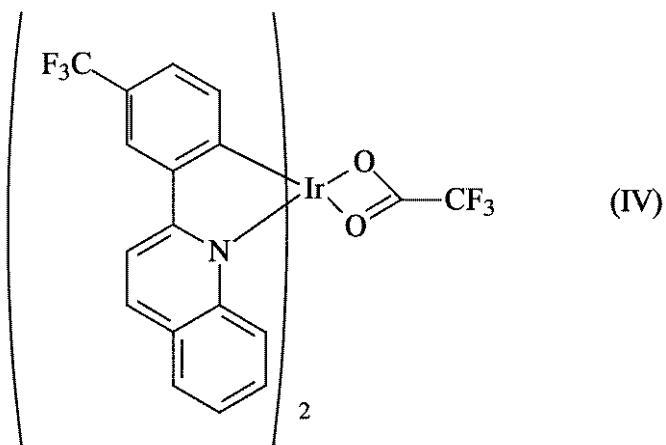


という構造(I)を有し、式中、

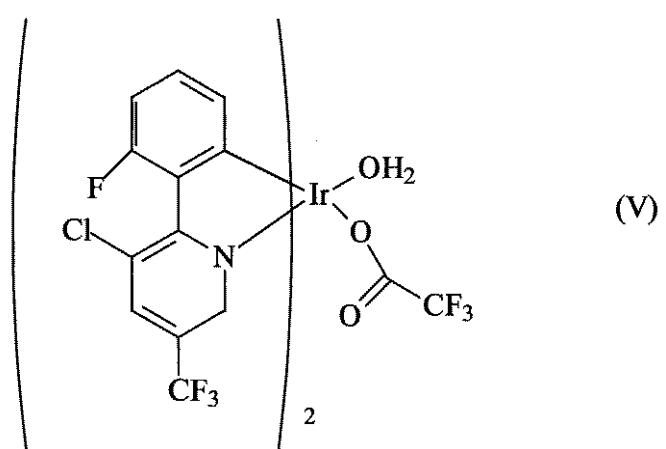
R₁～R₄及びR₅～R₈の隣接対を接合させて5員環又は6員環を形成することができ、R₁～R₈の少なくとも1つはF、C_nF_{2n+1}、OC_nF_{2n+1}及びOCF₂Xから選択され、式中、n=1～6、X=H、Cl又はBrであり、

A=NであるときR₁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；(ii)

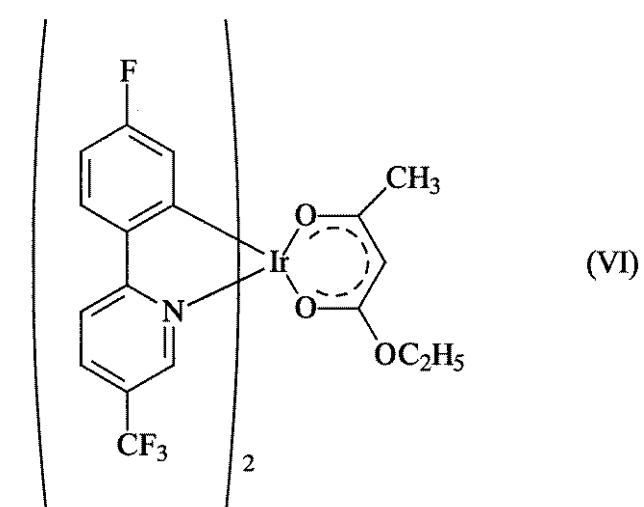
【化19】



(IV)

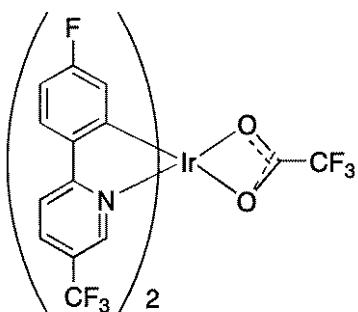


(V)

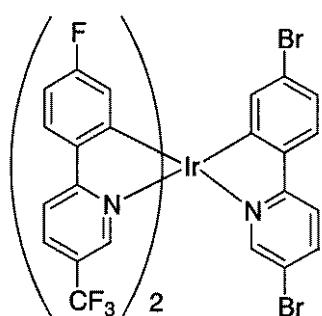


(VI)

【化20】



(IX)



(X)

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

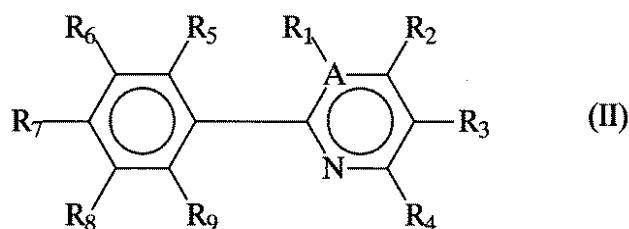
から選択される化合物を含む発光層を含むことを特徴とする有機電子デバイス。

[17] 発光層がさらに希釈剤を含むことを特徴とする [16] に記載のデバイス。

[18] 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 [17] に記載のデバイス。

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

【化21】



(式中、

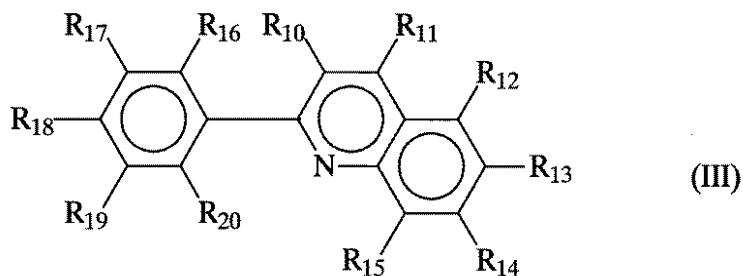
R₉はHであり、

R₁-R₄及びR₅-R₈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、R₁-R₈の少なくとも1つはF、C_nF_{2n+1}、OC_nF_{2n+1}及びOCF₂X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R₁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) :

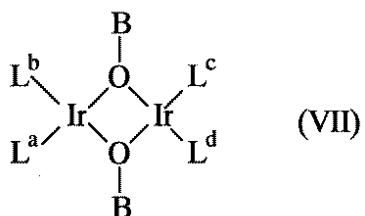
【化 2 2 】



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 :

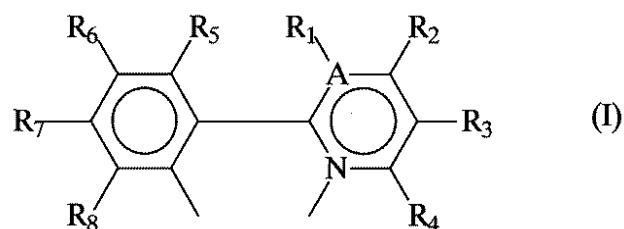
【化 2 3 】



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、 $n = 1 - 6$ 、 $X = H$ 、 C_1 又は B_r 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。