

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5878461号
(P5878461)

(45) 発行日 平成28年3月8日 (2016.3.8)

(24) 登録日 平成28年2月5日 (2016.2.5)

(51) Int. Cl.

F I

C O 7 F 15/00 (2006.01)

H O 1 L 51/50 (2006.01)

C O 9 K 11/06 (2006.01)

C O 7 D 491/048 (2006.01)

C O 7 D 495/04 (2006.01)

C O 7 F 15/00 C S P E

H O 5 B 33/14 B

C O 9 K 11/06 6 6 O

C O 7 D 491/048

C O 7 D 495/04 1 O 5 A

請求項の数 47 (全 130 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2012-504780 (P2012-504780)
 (86) (22) 出願日 平成22年4月6日 (2010.4.6)
 (65) 公表番号 特表2012-522844 (P2012-522844A)
 (43) 公表日 平成24年9月27日 (2012.9.27)
 (86) 国際出願番号 PCT/US2010/030098
 (87) 国際公開番号 W02010/118029
 (87) 国際公開日 平成22年10月14日 (2010.10.14)
 審査請求日 平成25年4月1日 (2013.4.1)
 (31) 優先権主張番号 61/167,014
 (32) 優先日 平成21年4月6日 (2009.4.6)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)

(73) 特許権者 503055897
 ユニバーサル ディスプレイ コーポレイ
 ション
 アメリカ合衆国、ニュージャージー、ユー
 イング、 フィリップス ブールバード
 375
 (74) 代理人 100108453
 弁理士 村山 靖彦
 (74) 代理人 100064908
 弁理士 志賀 正武
 (74) 代理人 100110364
 弁理士 実広 信哉

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 新規な配位子構造を含む金属錯体

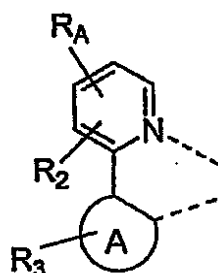
(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

40より大きい原子量を有する金属と、前記金属に配位している配位子とを含む化合物
 であって、

前記配位子が、下記構造：

【化 1】

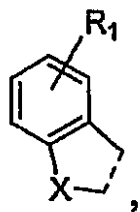


式 I

[式中、A は、5 員環または 6 員環の芳香族環またはヘテロ芳香族環であり；

R_A は、下記構造：

【化 2】



を有する置換基であり、 R_A は、前記構造の点線部分で式 I のピリジン環に縮合しており

10

；
 X は、 CRR 、 $C=O$ 、 O 、 S 、および Se からなる群から選択され；

R および R' は、独立に、水素およびアルキルから選択され；

R_1 、 R_2 、および R_3 は、モノ-、ジ-、トリ-、またはテトラ置換基を表すことができ；かつ、

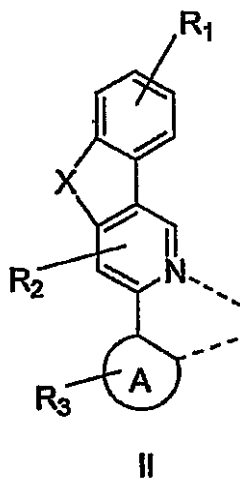
R_1 、 R_2 、および R_3 は、それぞれ独立に、水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリールアルキル、アリール、およびヘテロアリールからなる群から選択される」を有する、化合物。

【請求項 2】

前記配位子が、下記構造：

【化 3】

20



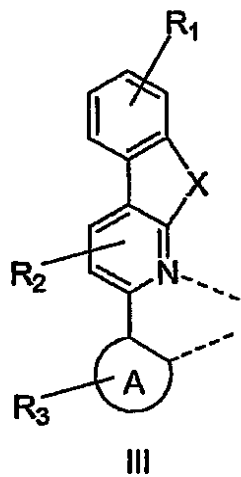
30

を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

前記配位子が、下記構造：

【化 4】



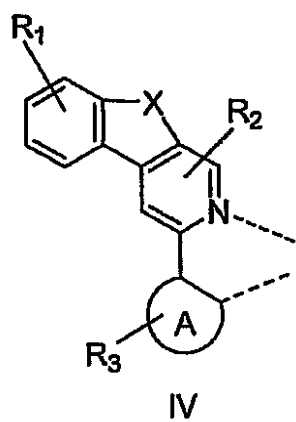
10

を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 4】

前記配位子が、下記構造：

【化 5】



20

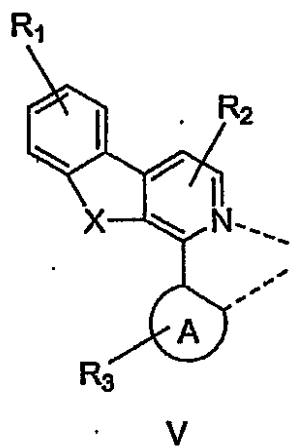
30

を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 5】

前記配位子が、下記構造：

【化 6】



40

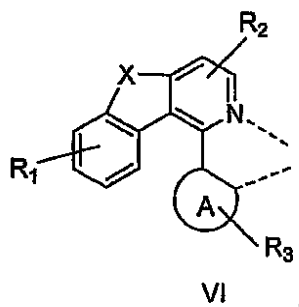
を有する、請求項 1 に記載の化合物。

50

【請求項 6】

前記配位子が、下記構造：

【化 7】



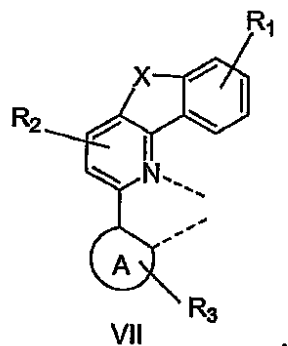
10

を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 7】

前記配位子が、下記構造：

【化 8】



20

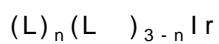
を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 8】

前記金属が、Irである、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 9】

前記化合物が、式：

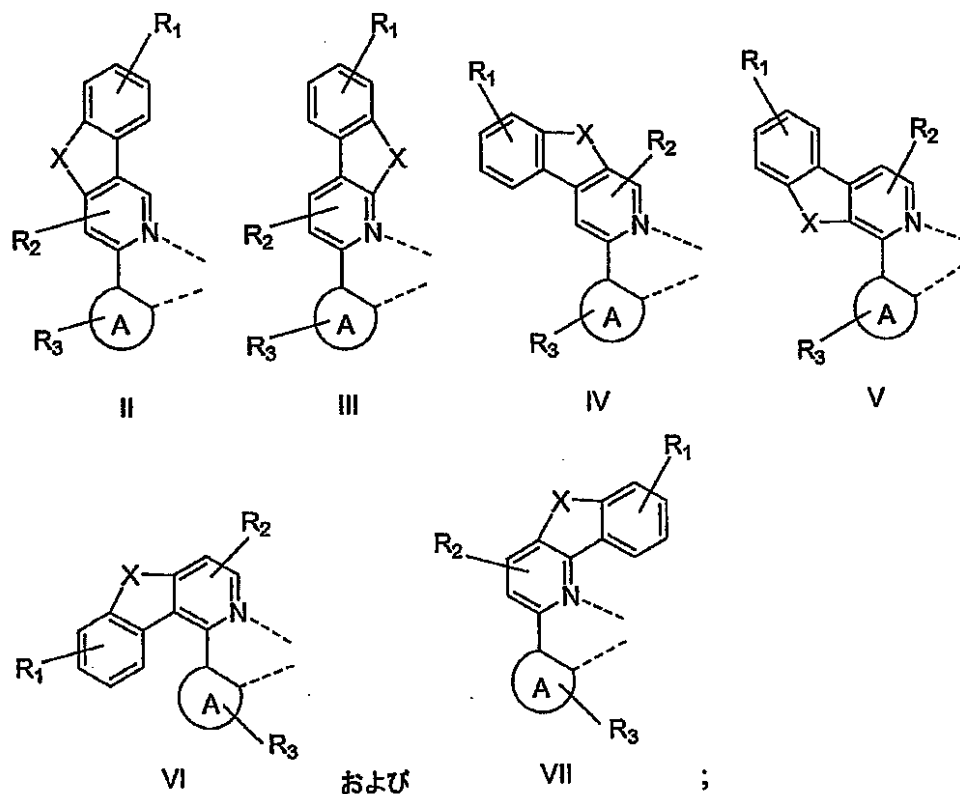


[式中、nは1、2、または3であり；

Lは、以下：

30

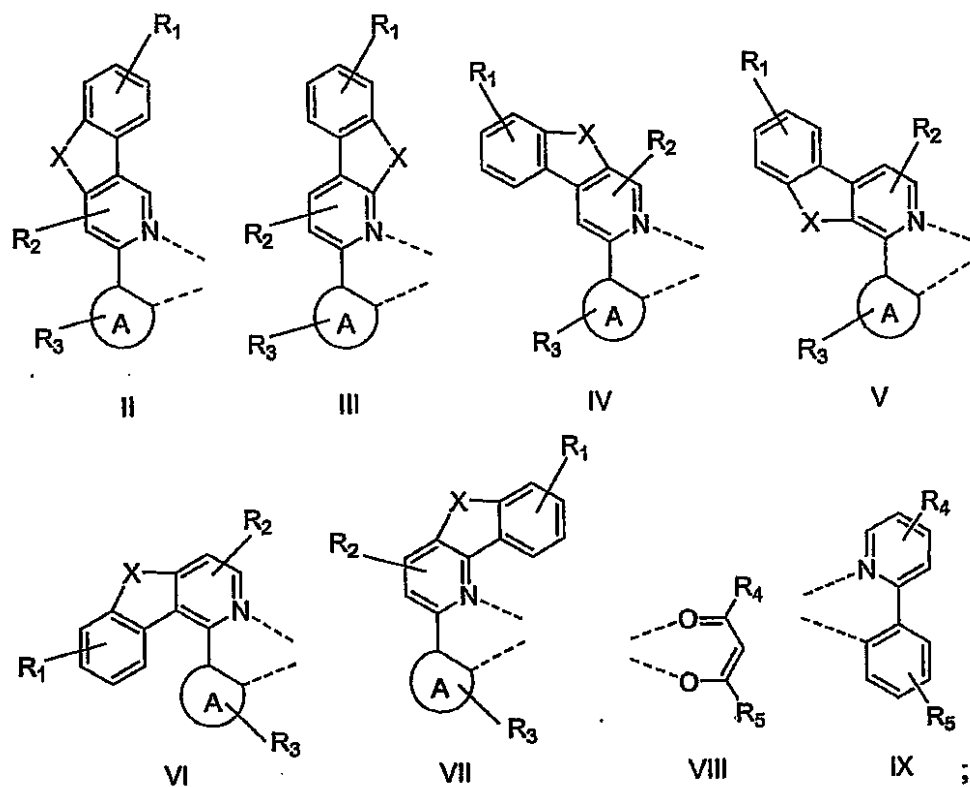
【化9】



からなる群から選択され；

L' は、以下：

【化10】



からなる群から選択される

(式中、X は、CRR'、C=O、O、S、およびSeからなる群から選択され；

R および R' は、独立に、水素およびアルキルから選択され；

10

20

30

40

50

A は、5 員環または 6 員環の芳香族環またはヘテロ芳香族環であり；

R₄ および R₅ は、モノ-、ジ-、トリ-、またはテトラ置換基を表すことができ；かつ、
R₄ および R₅ は、それぞれ独立に、水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリールアルキル、アリール、およびヘテロアリールからなる群から選択される）]

を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 10】

R₁、R₂、R₃、R₄、および R₅ が、それぞれ独立に、水素およびアルキルから選択される、請求項 9 に記載の化合物。

【請求項 11】

A がベンゼンである、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 12】

A が、フラン、チオフェン、およびピロールから選択される、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 13】

n が 3 である、請求項 9 に記載の化合物。

【請求項 14】

n が 2 である、請求項 9 に記載の化合物。

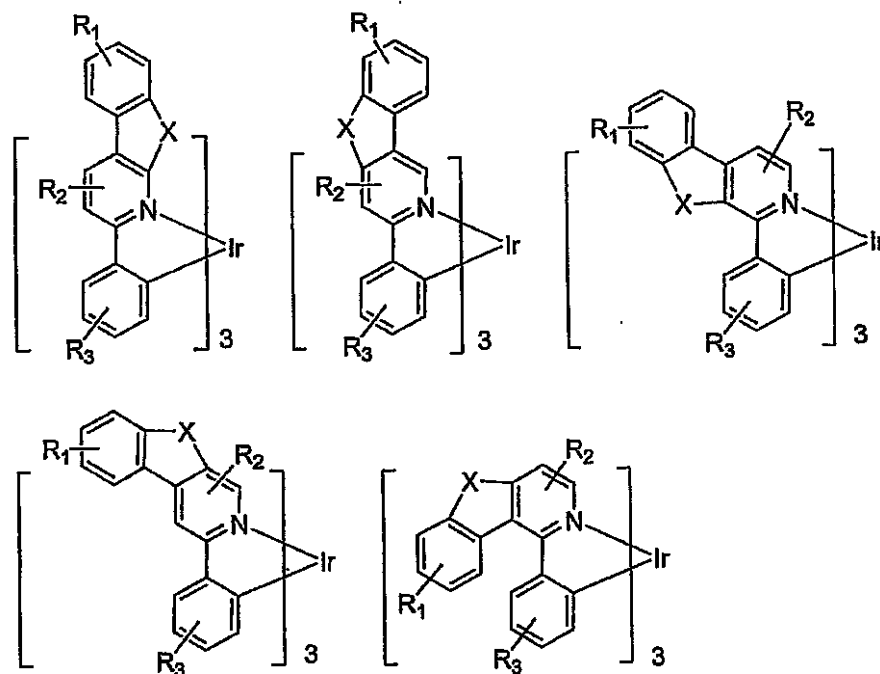
【請求項 15】

n が 1 である、請求項 9 に記載の化合物。

【請求項 16】

以下からなる群から選択される、請求項 9 に記載の化合物。

【化 11A】



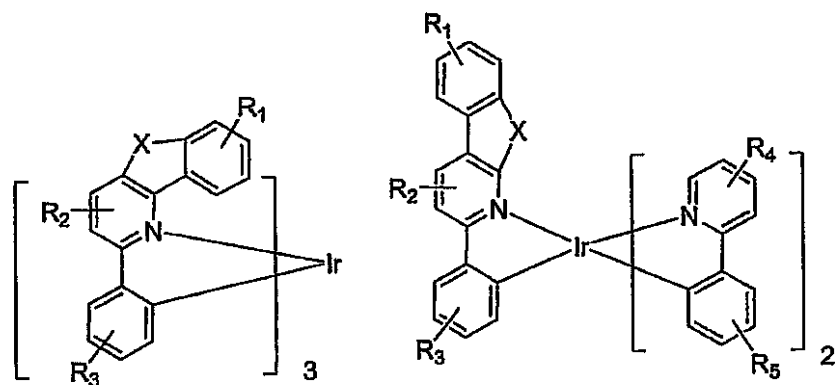
10

20

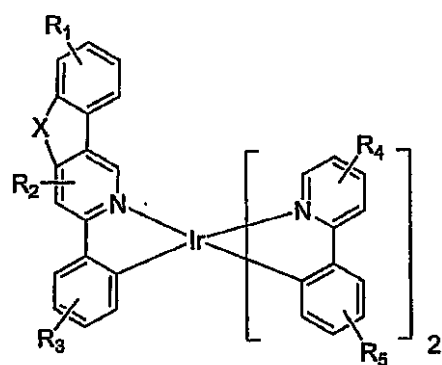
30

40

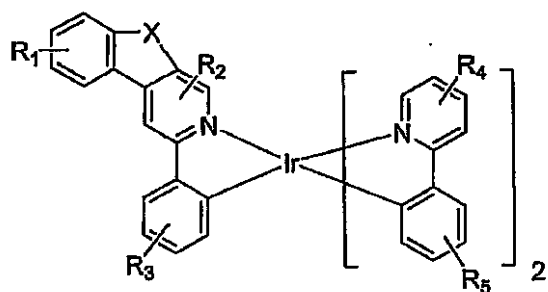
【化 1 1 B】



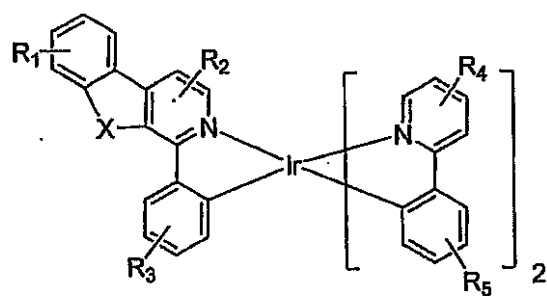
10



20

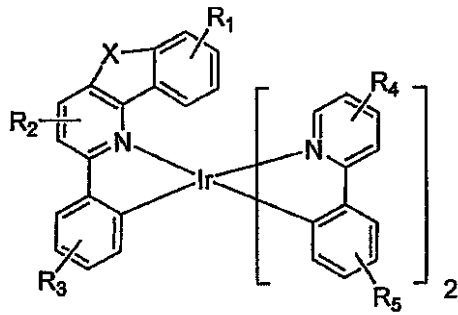


30

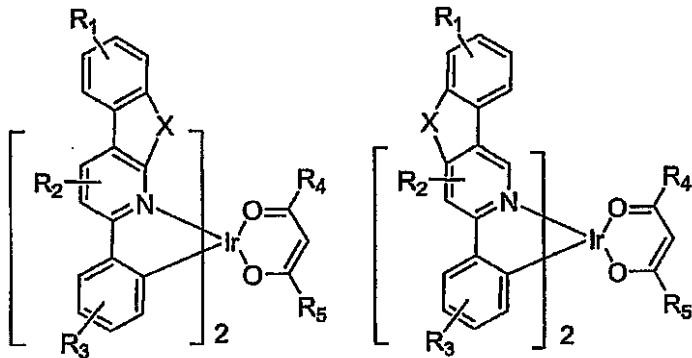


40

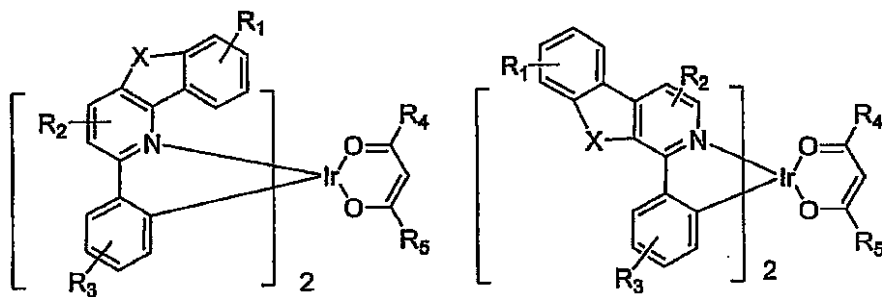
【化 1 1 C】



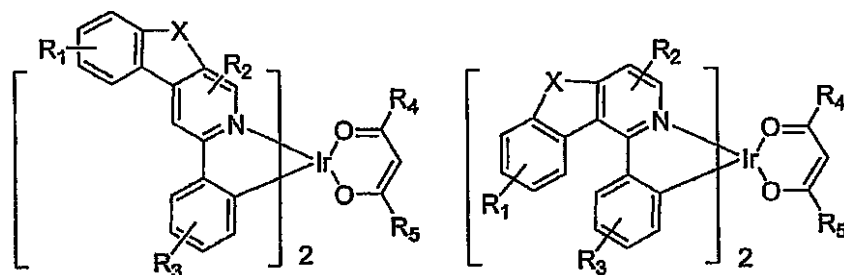
10



20



30

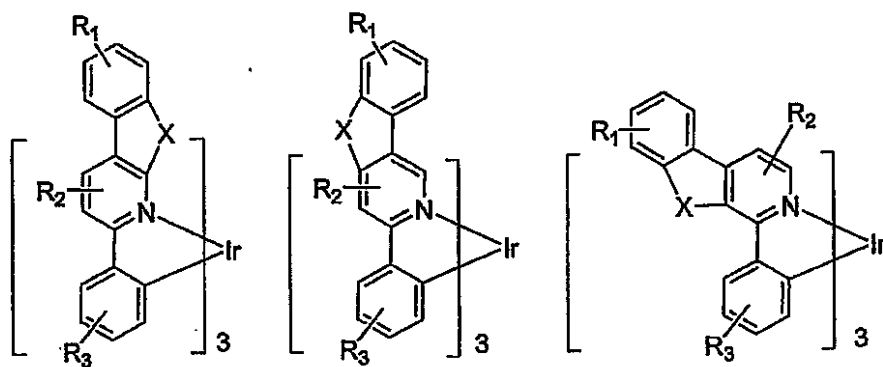


【請求項 17】

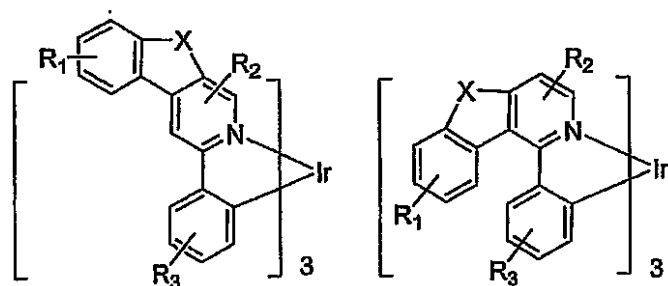
以下からなる群から選択される、請求項 9 に記載の化合物。

40

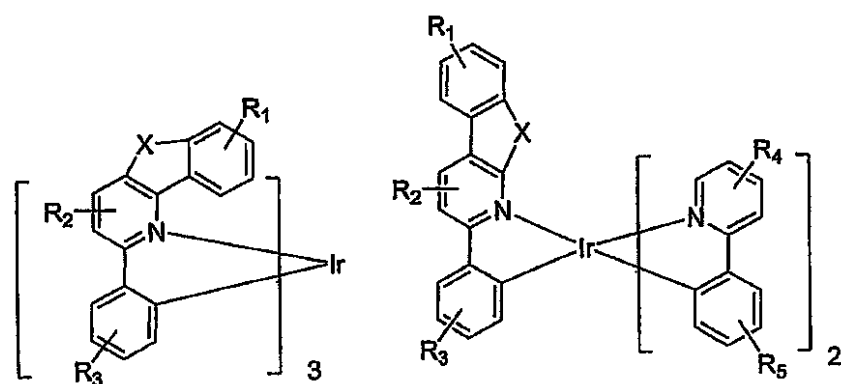
【化 1 2 A】



10

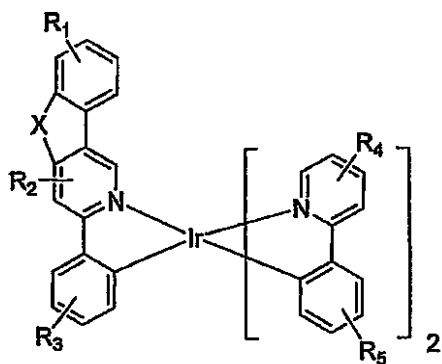


20

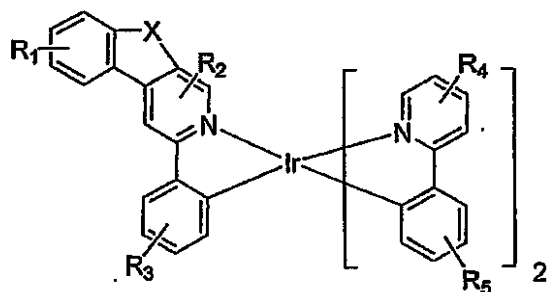


30

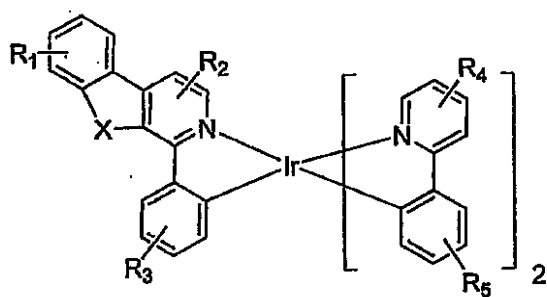
【化 1 2 B】



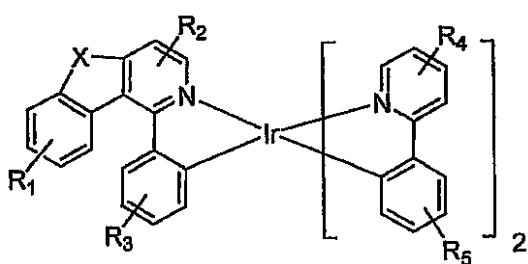
10



20



30

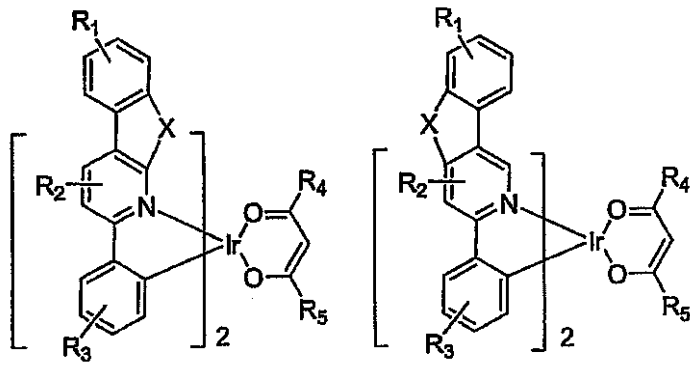


40

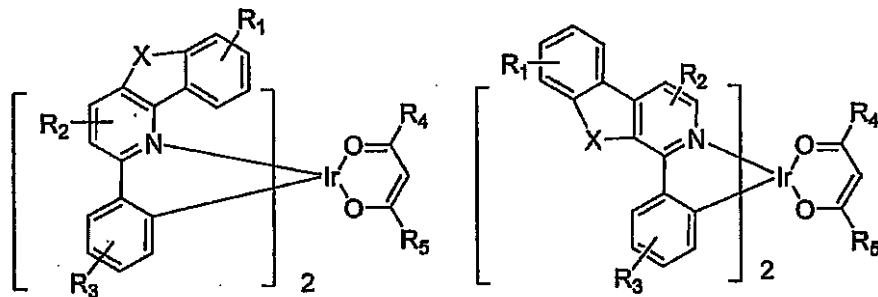
【請求項 1 8】

以下からなる群から選択される、請求項 9 に記載の化合物。

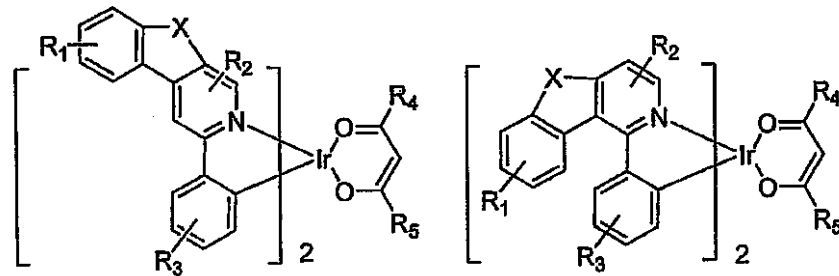
【化 1 3】



10



20

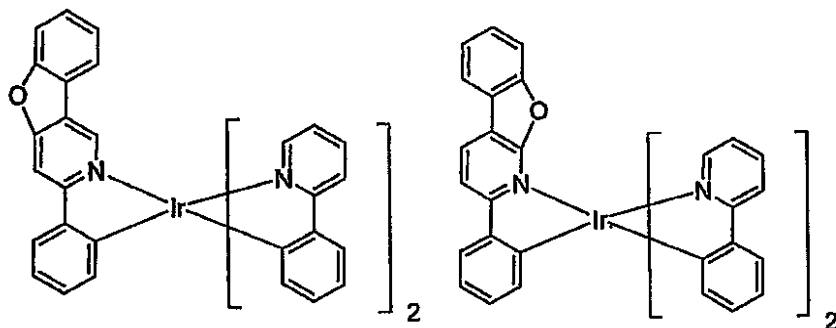


【請求項 1 9】

30

以下からなる群から選択される、請求項 1 に記載の化合物。

【化 1 4 A】

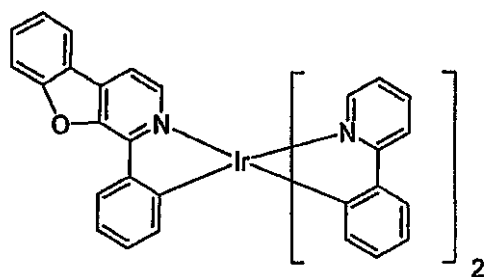


化合物1

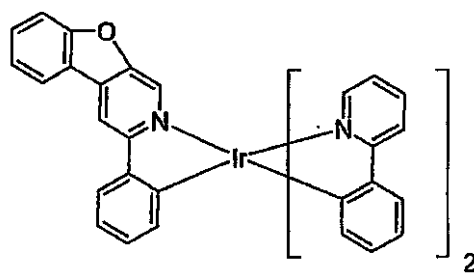
化合物2

40

【化 1 4 B】

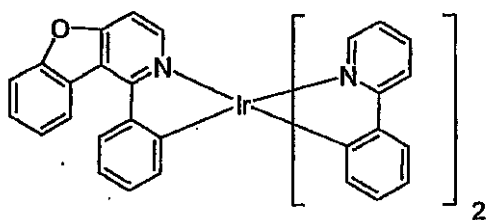


化合物3

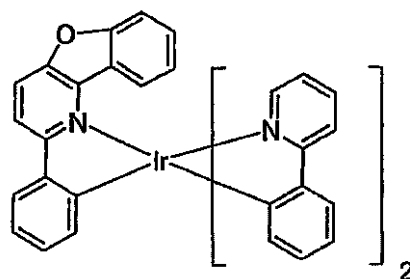


化合物4

10

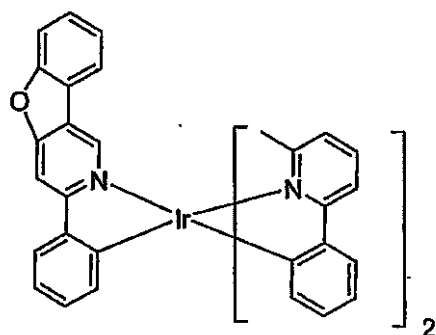


化合物5

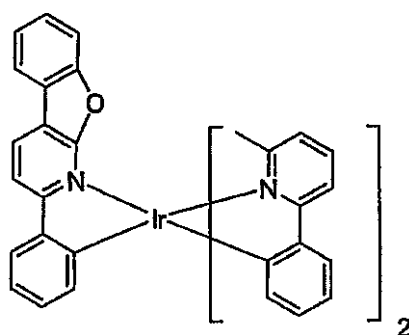


化合物6

20

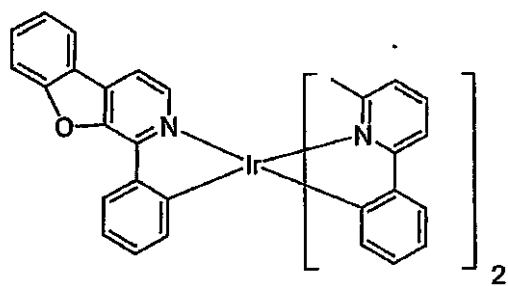


化合物7

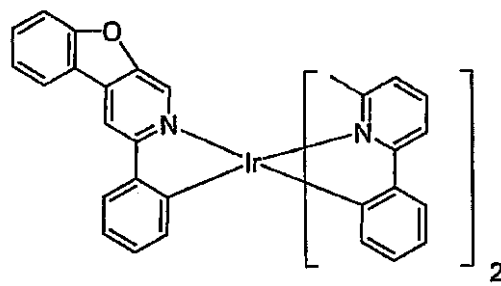


化合物8

30



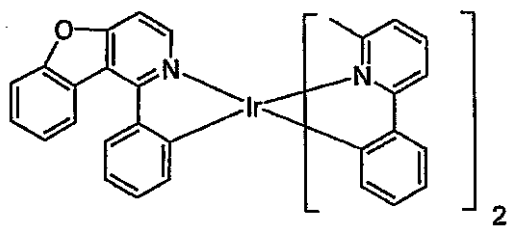
化合物9



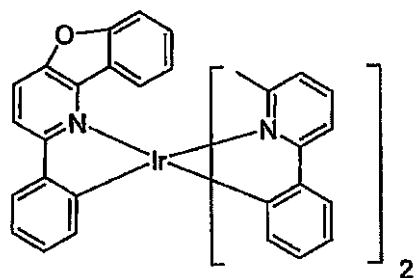
化合物10

40

【化 1 4 C】

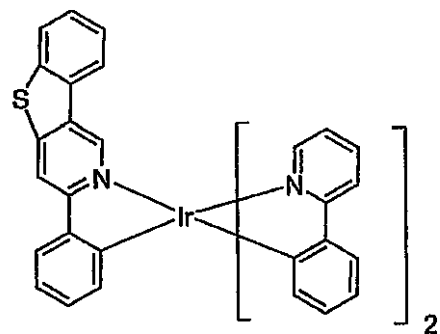


化合物11

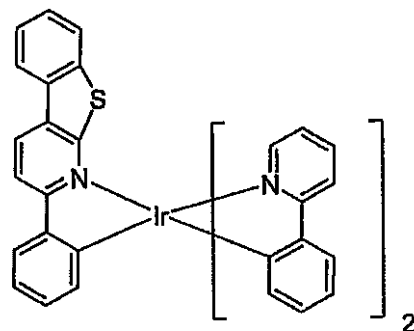


化合物12

10

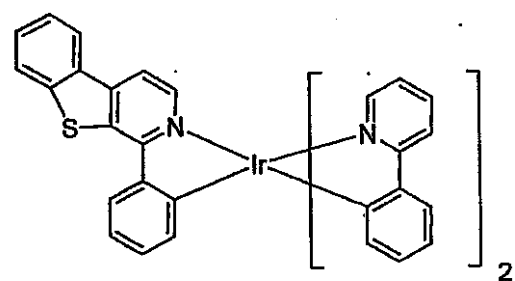


化合物13

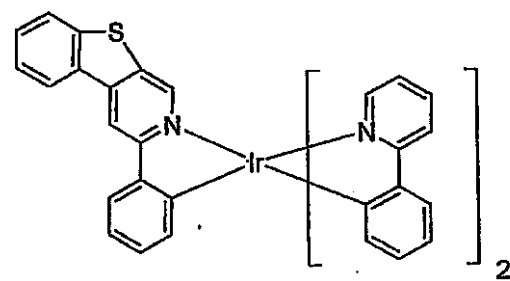


化合物14

20

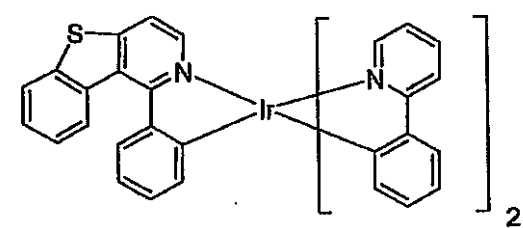


化合物15

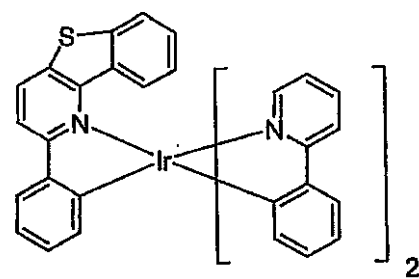


化合物16

30



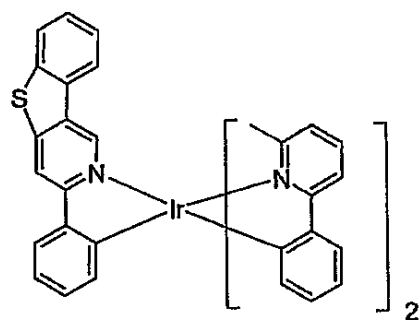
化合物17



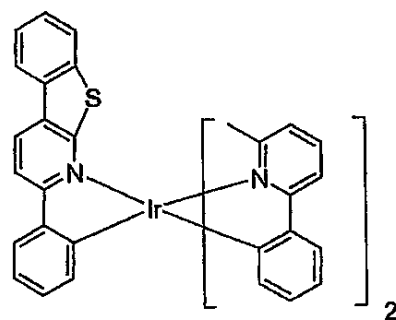
化合物18

40

【化 1 4 D】

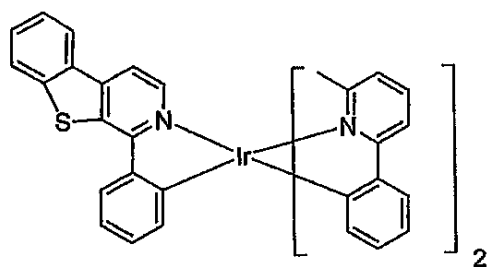


化合物19

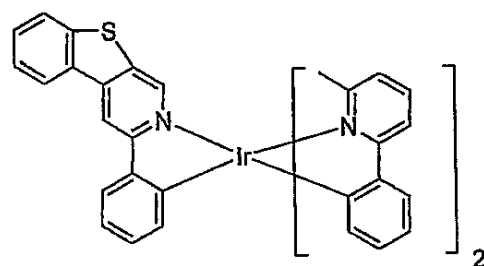


化合物20

10

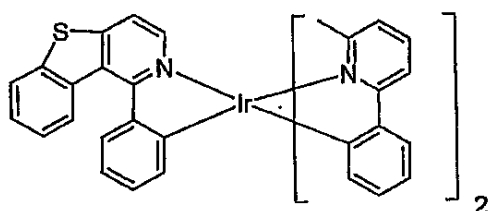


化合物21

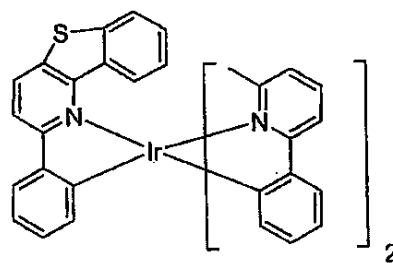


化合物22

20

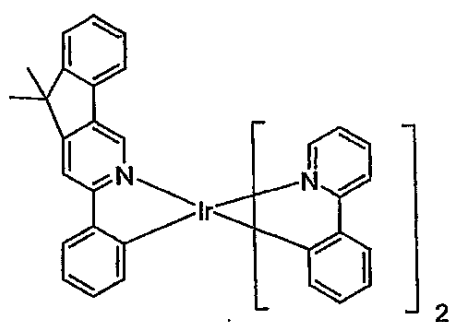


化合物23

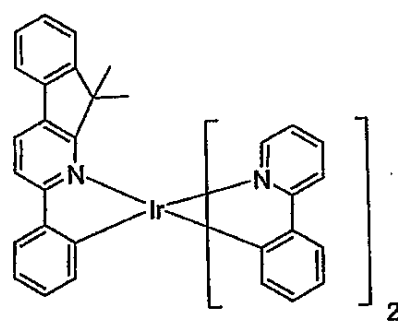


化合物24

30



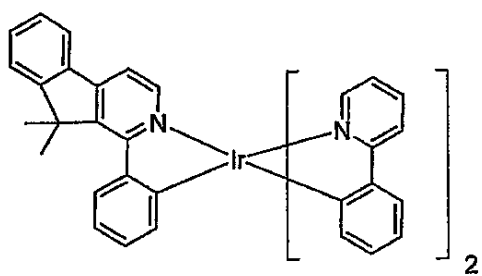
化合物37



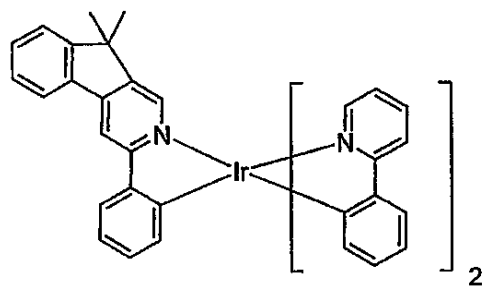
化合物38

40

【化 1 4 E】

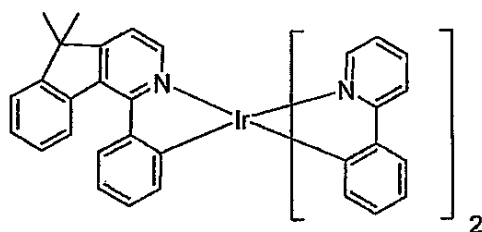


化合物39

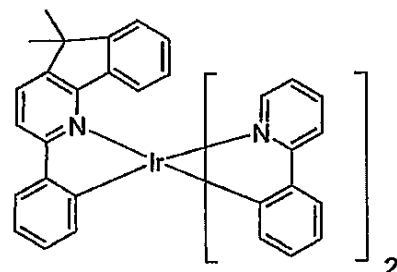


化合物40

10

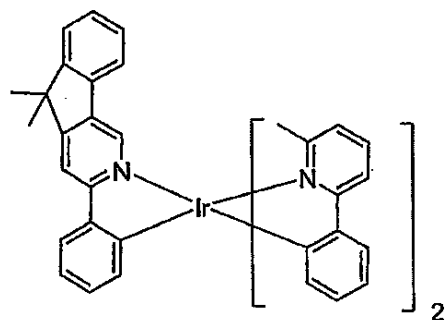


化合物41

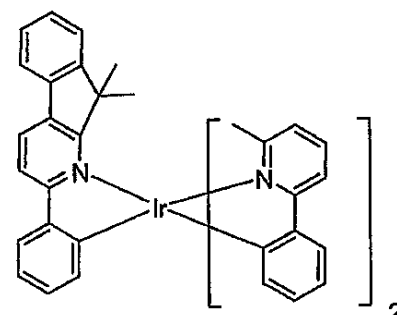


化合物42

20

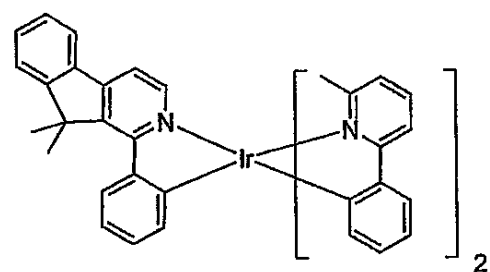


化合物43

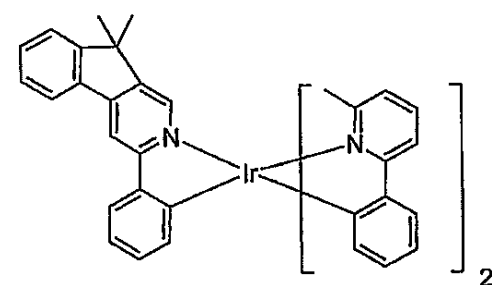


化合物44

30



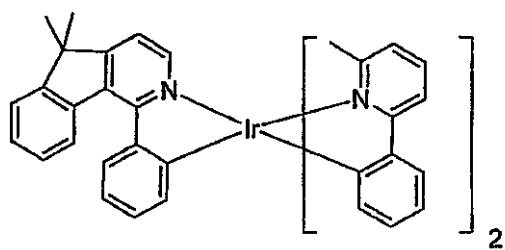
化合物45



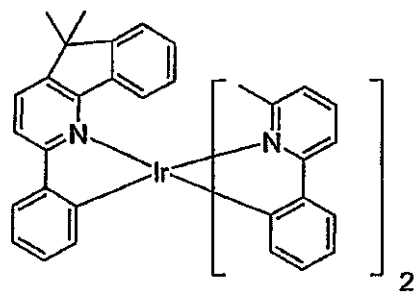
化合物46

40

【化 1 4 F】

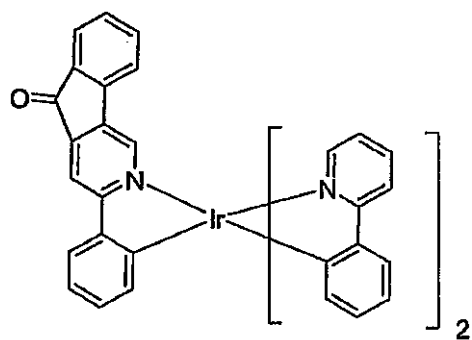


化合物47

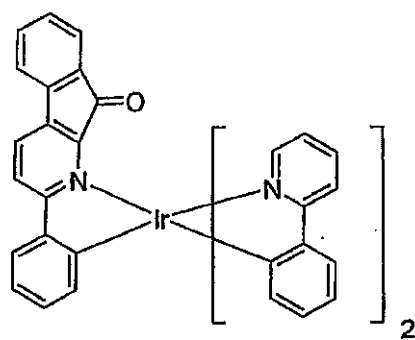


化合物48

10

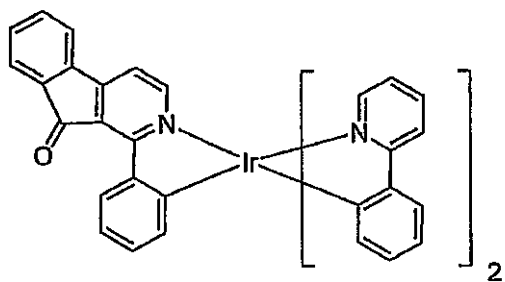


化合物49

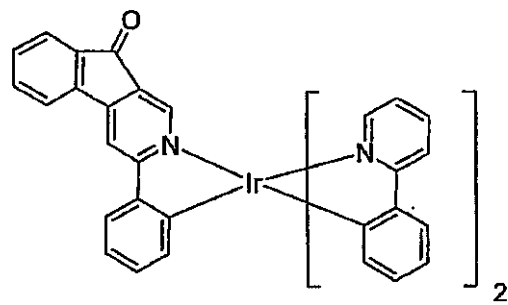


化合物50

20

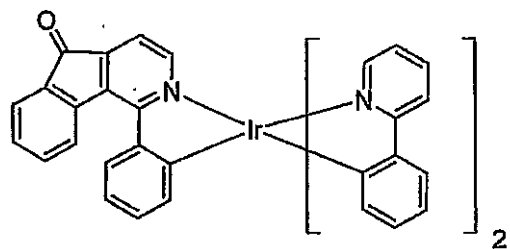


化合物51

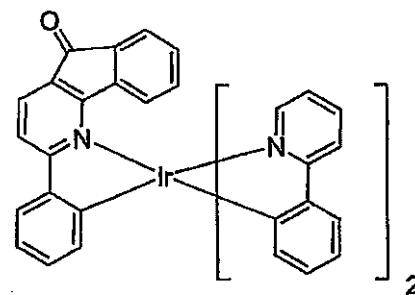


化合物52

30



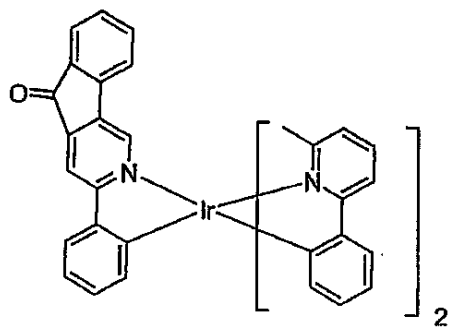
化合物53



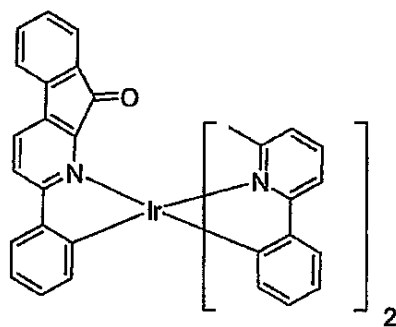
化合物54

40

【化 1 4 G】

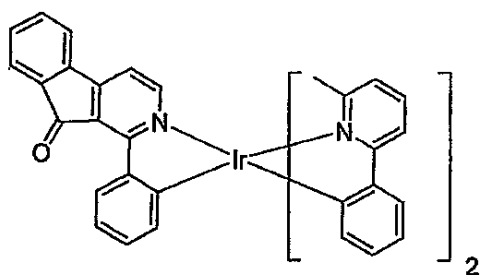


化合物55

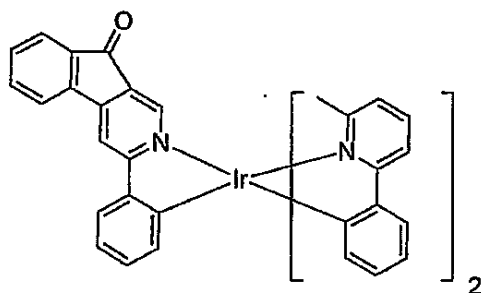


化合物56

10

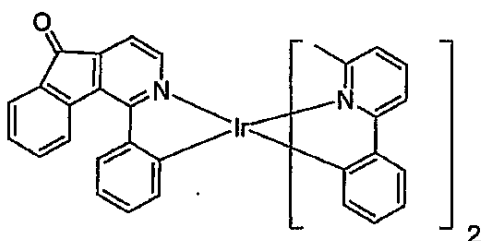


化合物57

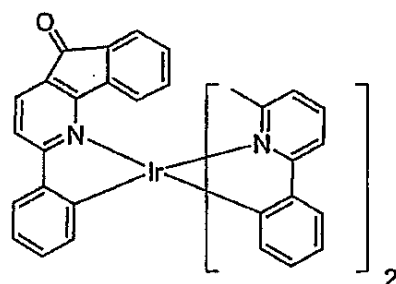


化合物58

20

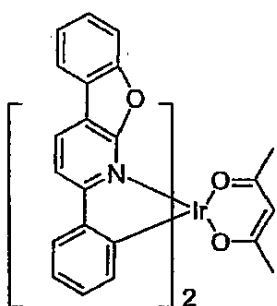


化合物59

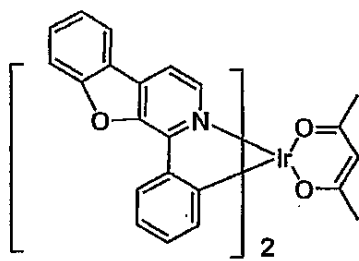


化合物60

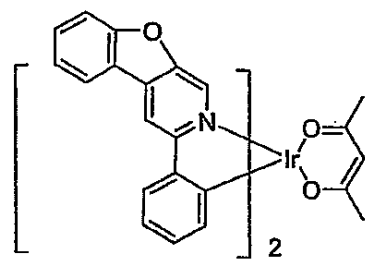
30



化合物61



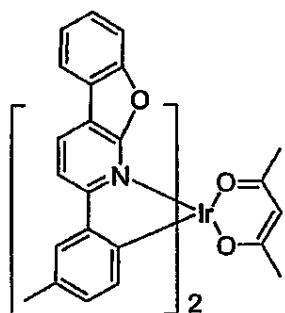
化合物62



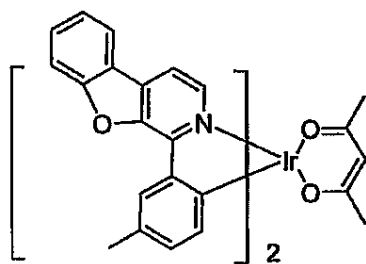
化合物63

40

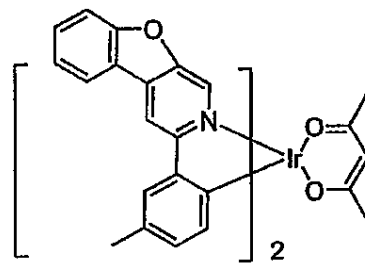
【化 1 4 H】



化合物64

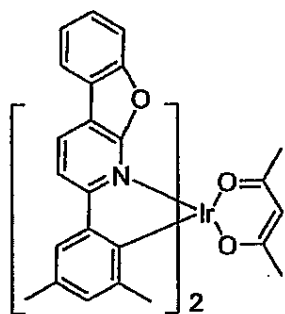


化合物65

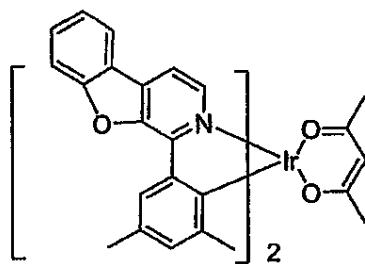


化合物66

10

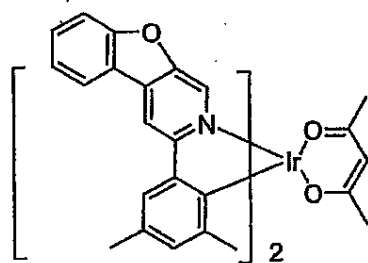


化合物67



化合物68

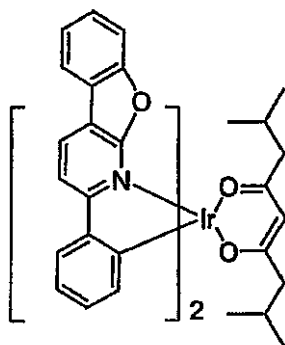
20



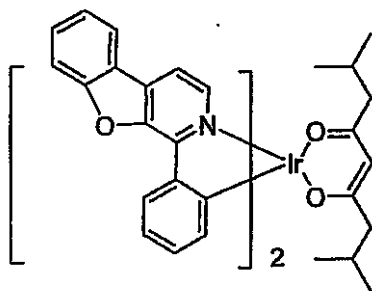
化合物69

30

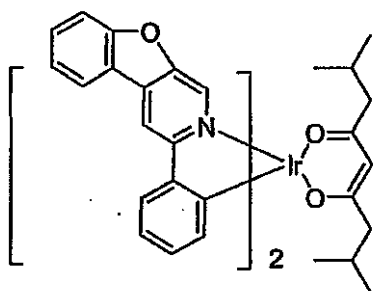
【化 1 4 I】



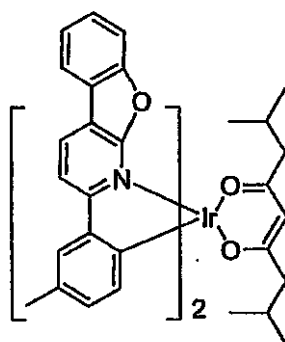
化合物70



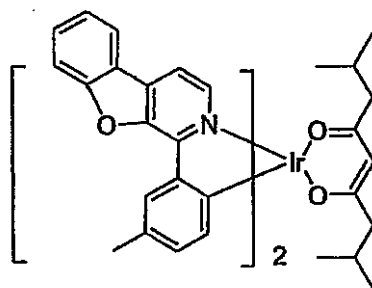
化合物71



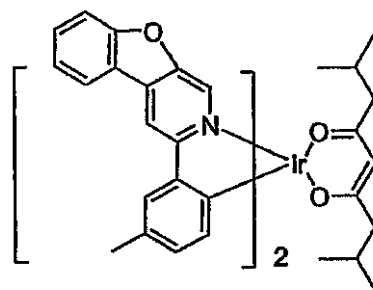
化合物72



化合物73



化合物74



化合物75

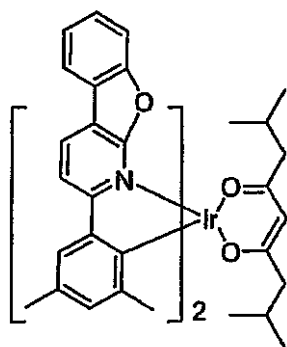
10

20

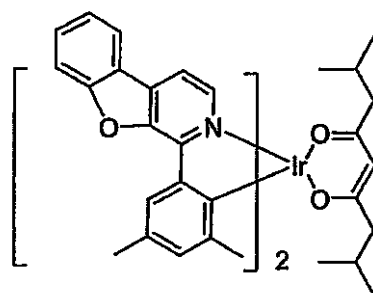
30

40

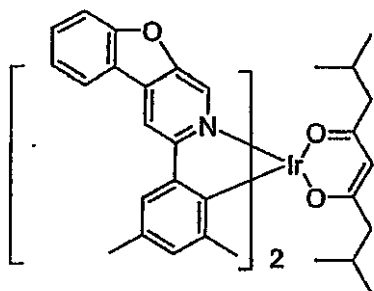
【化 1 4 J】



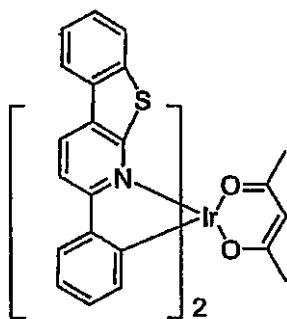
化合物76



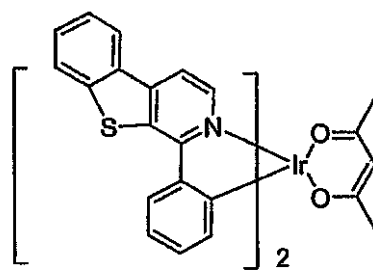
化合物77



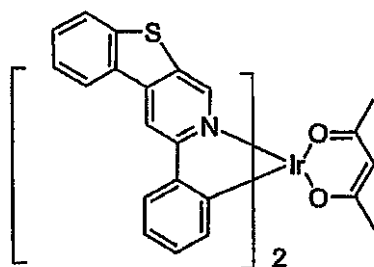
化合物78



化合物79



化合物80



化合物81

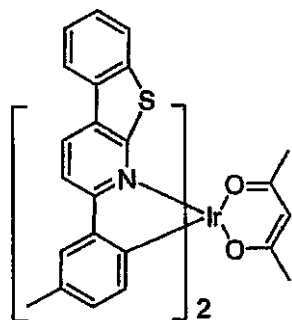
10

20

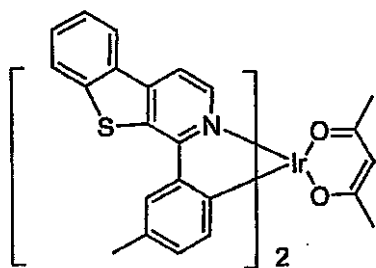
30

40

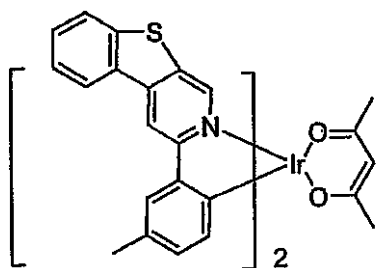
【化 1 4 K】



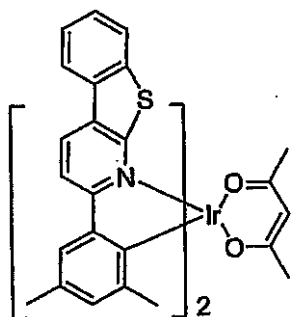
化合物82



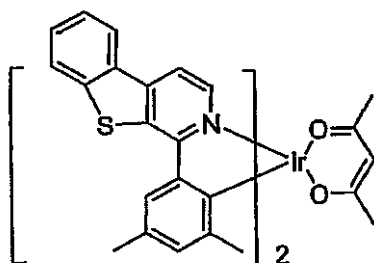
化合物83



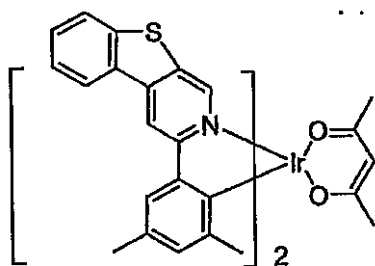
化合物84



化合物85



化合物86



化合物87

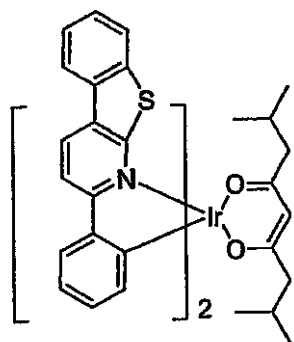
10

20

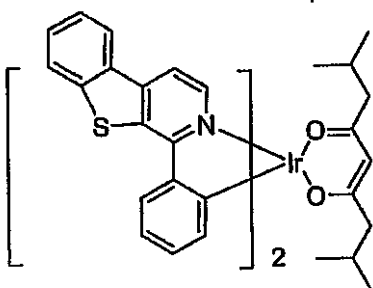
30

40

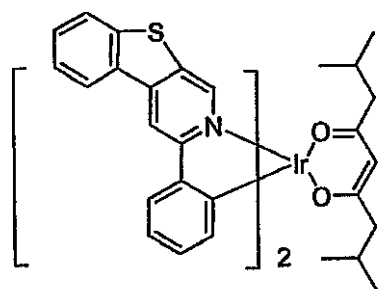
【化 1 4 L】



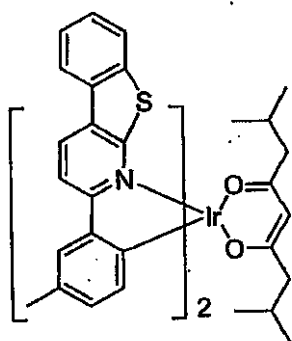
化合物88



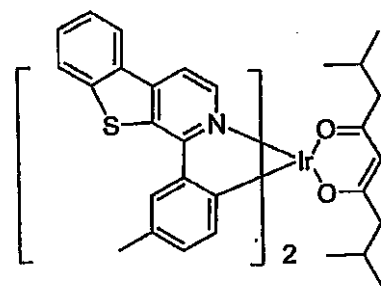
化合物89



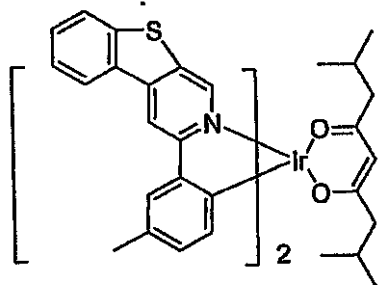
化合物90



化合物91



化合物92



化合物93

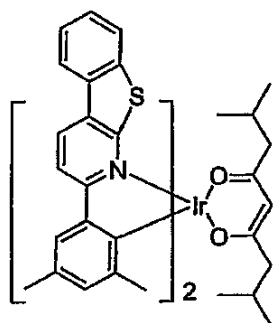
10

20

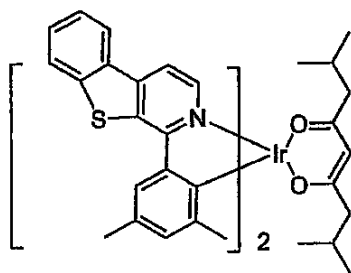
30

40

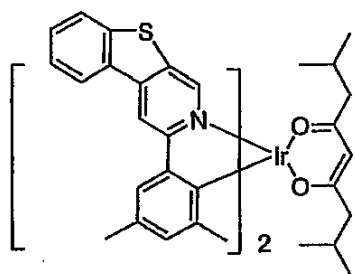
【化 1 4 M】



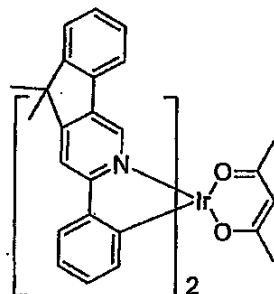
化合物94



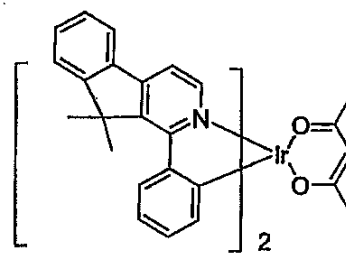
化合物95



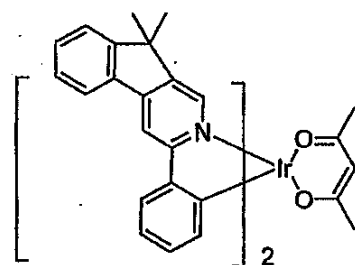
化合物96



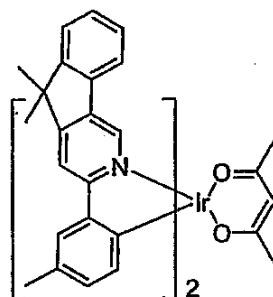
化合物115



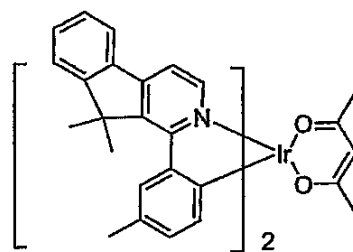
化合物116



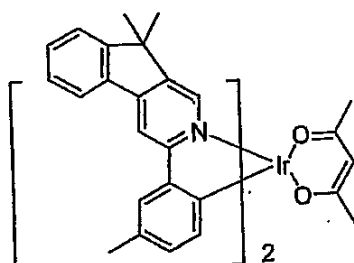
化合物117



化合物118



化合物119



化合物120

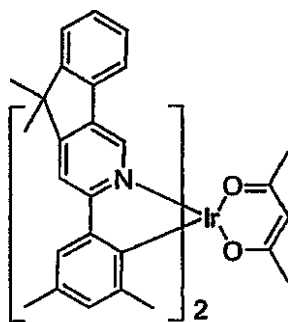
10

20

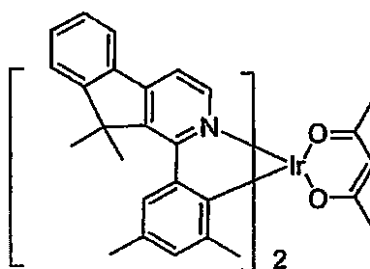
30

40

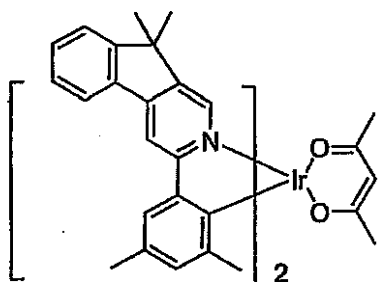
【化 1 4 N】



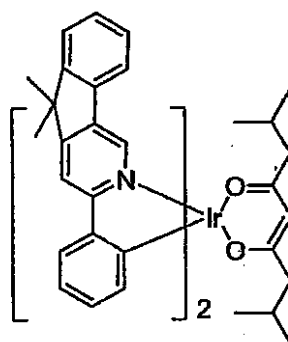
化合物121



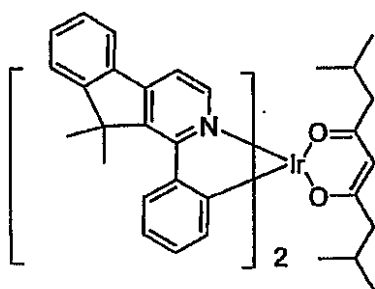
化合物122



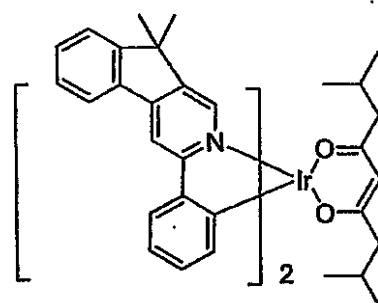
化合物123



化合物124



化合物125



化合物126

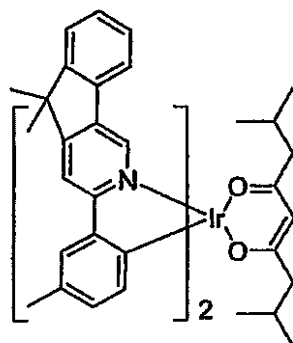
10

20

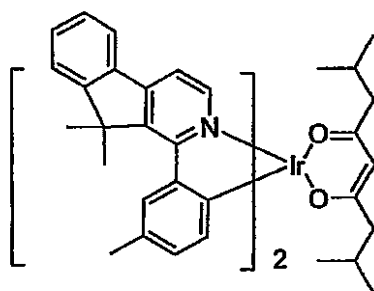
30

40

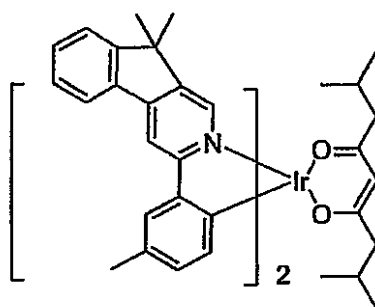
【化 1 4 0】



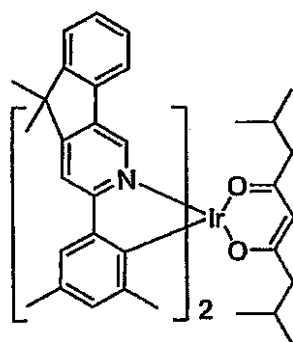
化合物127



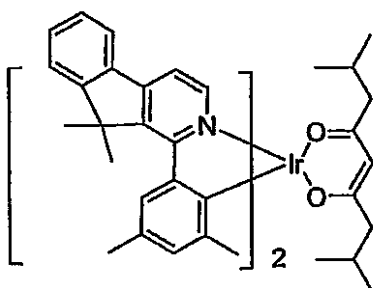
化合物128



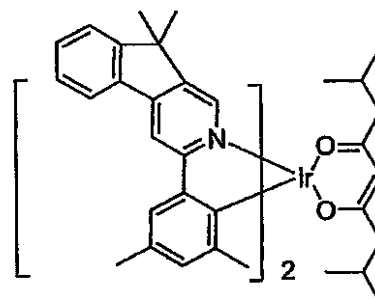
化合物129



化合物130



化合物131



化合物132

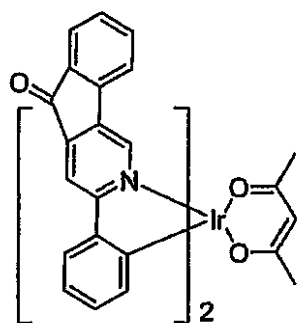
10

20

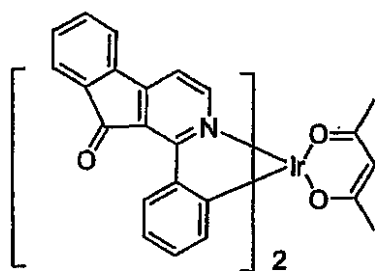
30

40

【化 1 4 P】

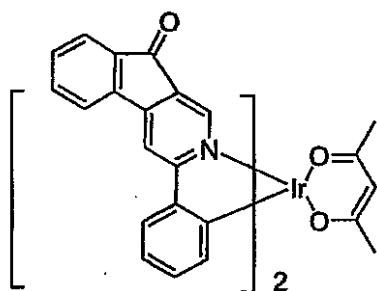


化合物133



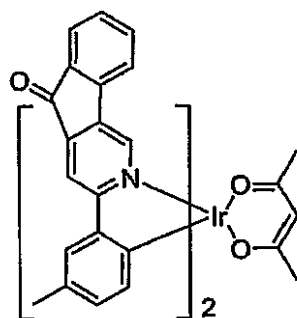
化合物134

10

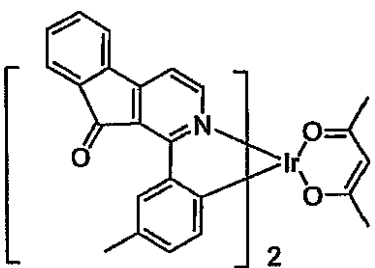


化合物135

20

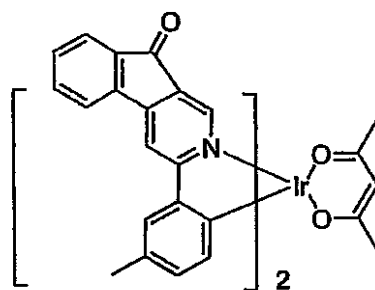


化合物136



化合物137

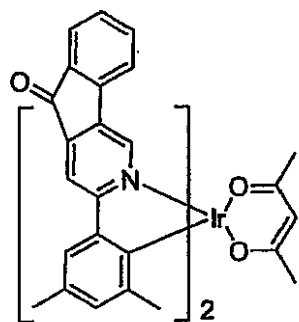
30



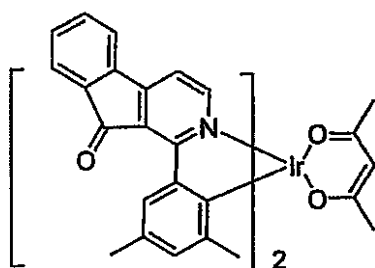
化合物138

40

【化 1 4 Q】

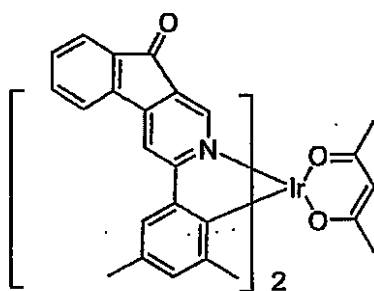


化合物139



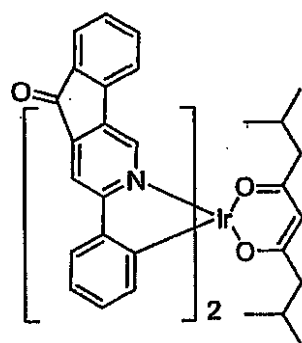
化合物140

10

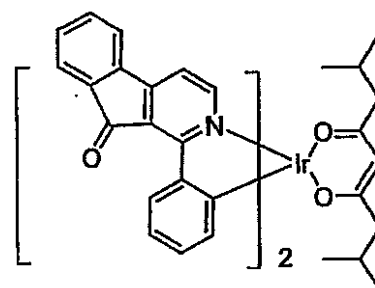


化合物141

20

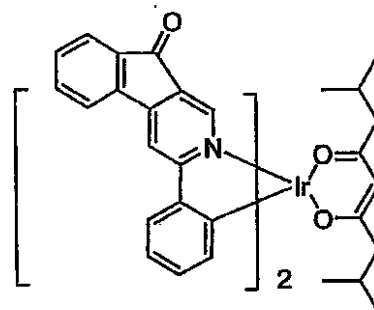


化合物142



化合物143

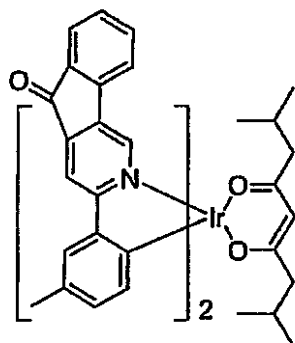
30



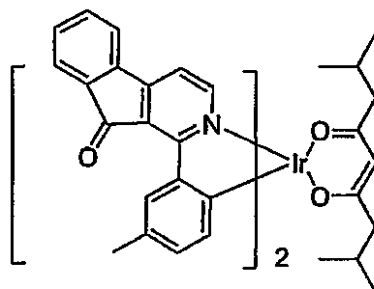
化合物144

40

【化 1 4 R】

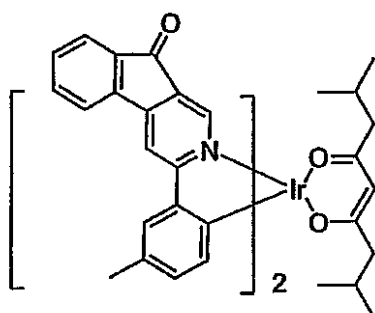


化合物145



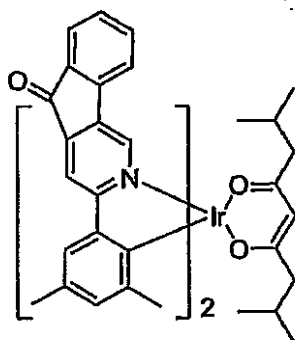
化合物146

10

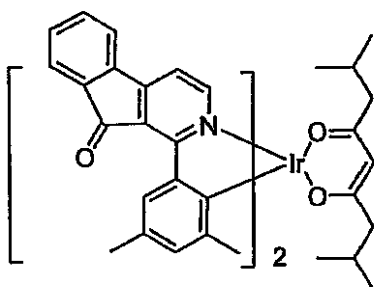


化合物147

20

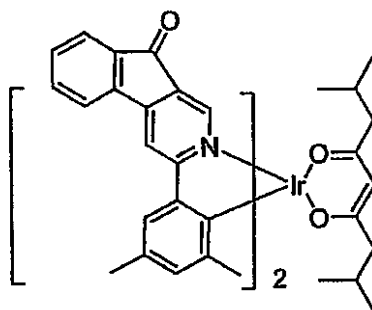


化合物148



化合物149

30



化合物150

40

【請求項 2 0】

X が0である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 2 1】

化合物 1 ~ 化合物 1 2 および化合物 6 1 ~ 化合物 7 8 からなる群から選択される、請求項 1 9 に記載の化合物。

【請求項 2 2】

50

化合物 1 ~ 化合物 12 からなる群から選択される、請求項 19 に記載の化合物。

【請求項 23】

化合物 61 ~ 化合物 78 からなる群から選択される、請求項 19 に記載の化合物。

【請求項 24】

X が S である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 25】

化合物 13 ~ 化合物 24 および化合物 79 ~ 化合物 96 からなる群から選択される、請求項 19 に記載の化合物。

【請求項 26】

化合物 13 ~ 化合物 24 からなる群から選択される、請求項 19 に記載の化合物。

10

【請求項 27】

化合物 79 ~ 化合物 96 からなる群から選択される、請求項 19 に記載の化合物。

【請求項 28】

X が CRR である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 29】

化合物 37 ~ 化合物 48 および化合物 115 ~ 化合物 132 からなる群から選択される、請求項 19 に記載の化合物。

【請求項 30】

化合物 37 ~ 化合物 48 からなる群から選択される、請求項 19 に記載の化合物。

【請求項 31】

20

化合物 115 ~ 化合物 132 からなる群から選択される、請求項 19 に記載の化合物。

【請求項 32】

X が C=O である、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 33】

化合物 49 ~ 化合物 60 および化合物 133 ~ 化合物 150 からなる群から選択される、請求項 19 に記載の化合物。

【請求項 34】

化合物 49 ~ 化合物 60 からなる群から選択される、請求項 19 に記載の化合物。

【請求項 35】

化合物 133 ~ 化合物 150 からなる群から選択される、請求項 19 に記載の化合物。

30

【請求項 36】

アノード；

カソード；

前記アノードとカソードとの間に配置された有機層

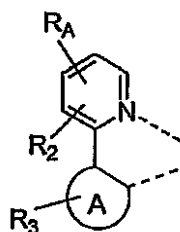
を含む有機発光デバイスであって、

前記有機層が、40 より大きい原子量を有する金属と、前記金属に配位している配位子とを含む化合物を含み、

前記配位子が、下記構造：

【化 15】

40

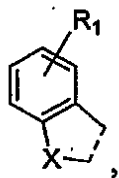


式 I

〔式中、A は、5 員環または 6 員環の芳香族環またはヘテロ芳香族環であり；

R_A は、下記構造：

【化 1 6】



を有する置換基であり、 R_A は、前記構造の点線部分で式 I のピリジン環に縮合しており

;

X は、CRR、C=O、O、S、および Se からなる群から選択され;

R および R' は、独立に、水素およびアルキルから選択され;

R_1 、 R_2 、および R_3 は、モノ-、ジ-、トリ-、またはテトラ置換基を表すことができ;

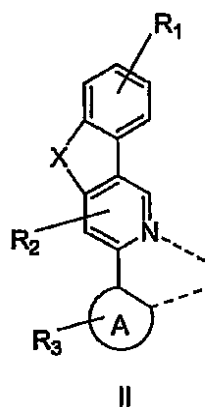
かつ、
 R_1 、 R_2 、および R_3 は、それぞれ独立に、水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリーラルキル、アリール、およびヘテロアリールからなる群から選択される]

を有する、有機発光デバイス。

【請求項 3 7】

前記配位子が、下記構造:

【化 1 7】

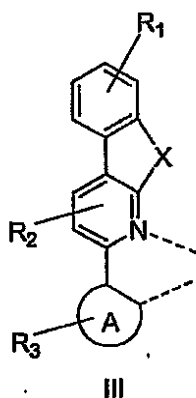


を有する、請求項 3 6 に記載のデバイス。

【請求項 3 8】

前記配位子が、下記構造:

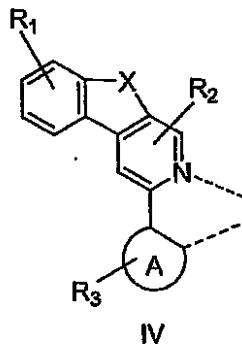
【化 1 8】



を有する、請求項 3 6 に記載のデバイス。

【請求項 3 9】

前記配位子が、下記構造：
【化 19】

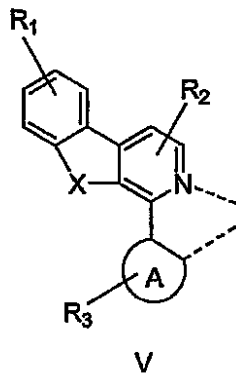


10

を有する、請求項 36 に記載のデバイス。

【請求項 40】

前記配位子が、下記構造：
【化 20】

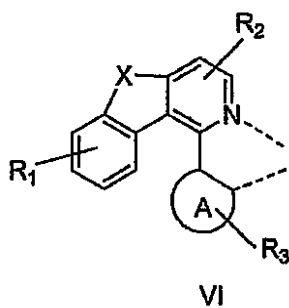


20

を有する、請求項 36 に記載のデバイス。

【請求項 41】

前記配位子が、下記構造：
【化 21】



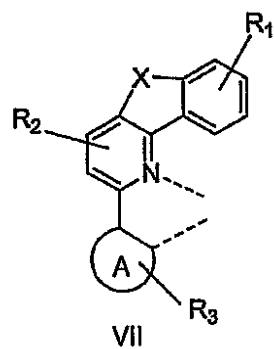
40

を有する、請求項 36 に記載のデバイス。

【請求項 42】

前記配位子が、下記構造：

【化 2 2】



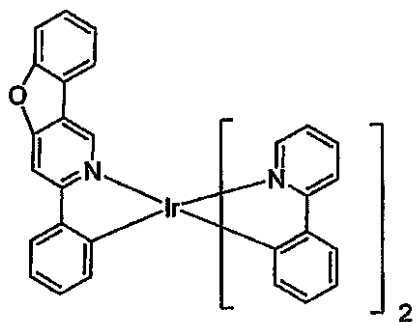
10

を有する、請求項 3 6 に記載のデバイス。

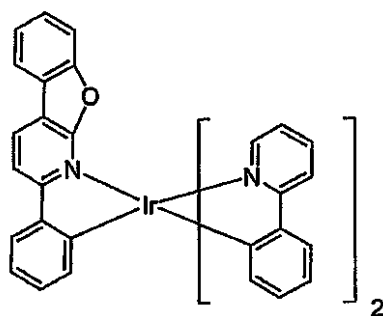
【請求項 4 3】

前記化合物が、以下からなる群から選択される、請求項 3 6 に記載のデバイス。

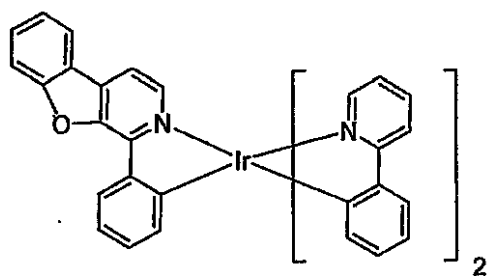
【化 2 3 A】



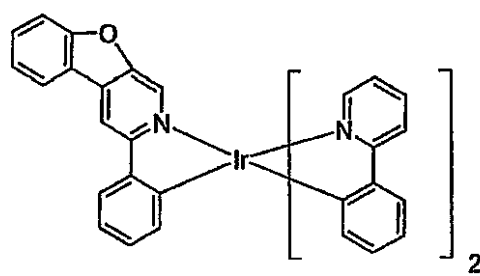
化合物1



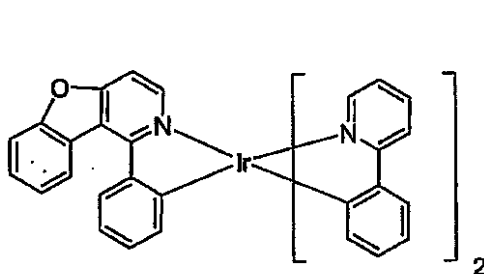
化合物2



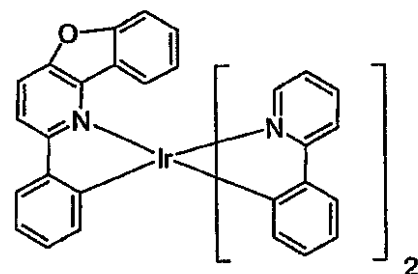
化合物3



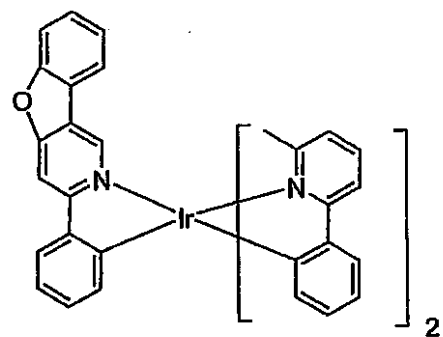
化合物4



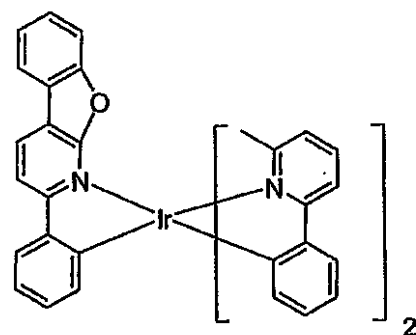
化合物5



化合物6



化合物7



化合物8

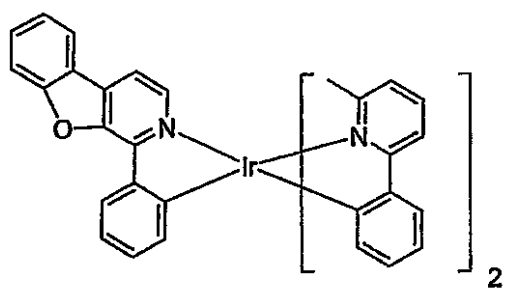
10

20

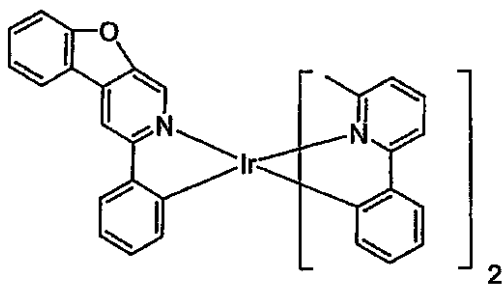
30

40

【化 2 3 B】

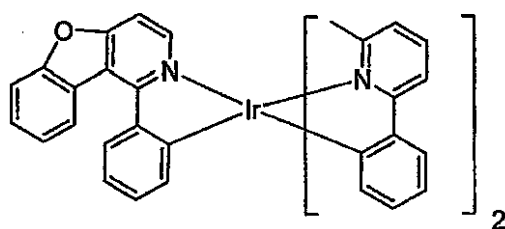


化合物9

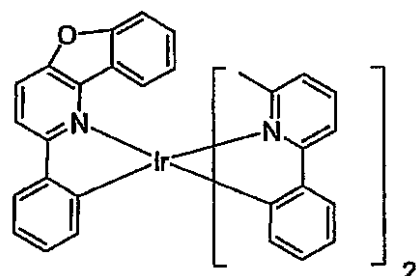


化合物10

10

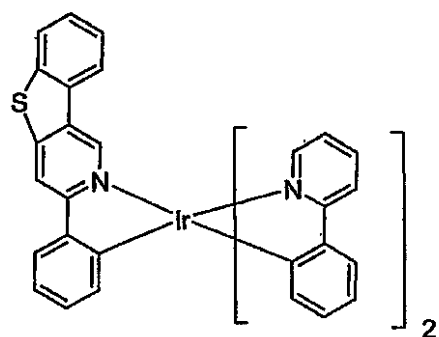


化合物11

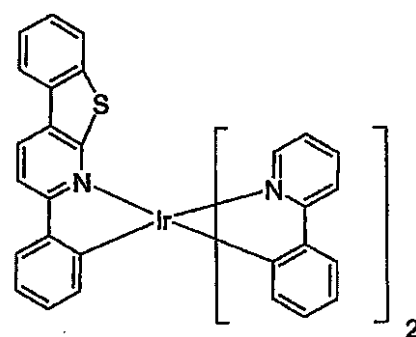


化合物12

20

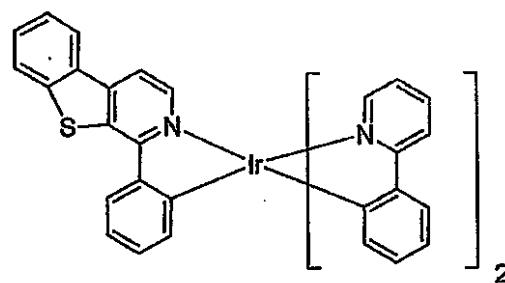


化合物13

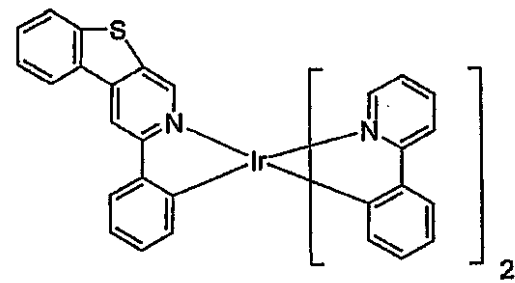


化合物14

30



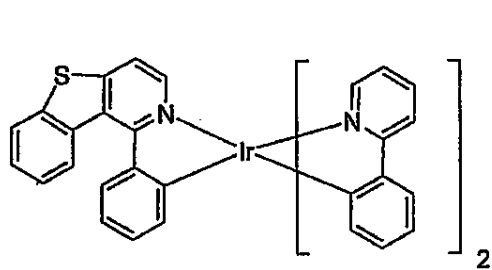
化合物15



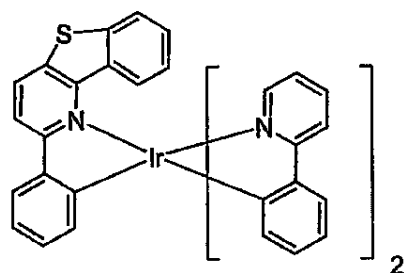
化合物16

40

【化 2 3 C】

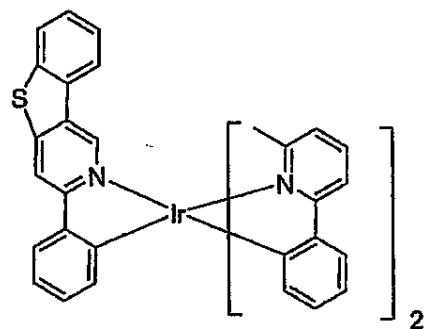


化合物17

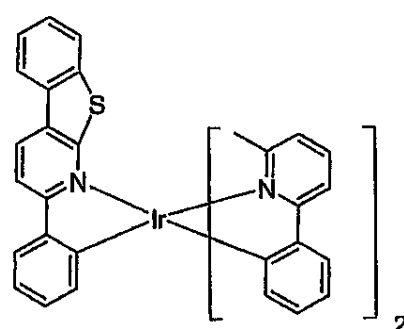


化合物18

10

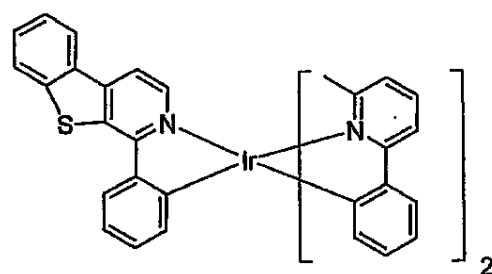


化合物19

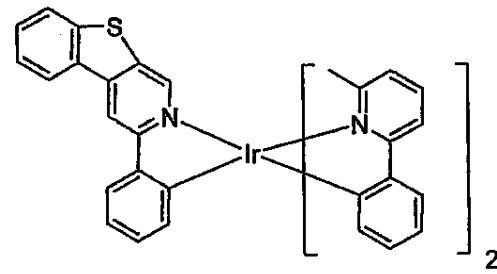


化合物20

20

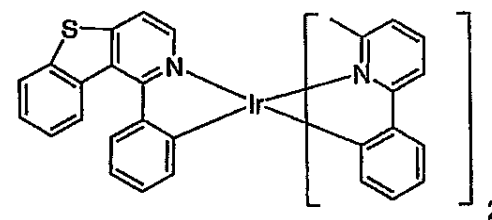


化合物21

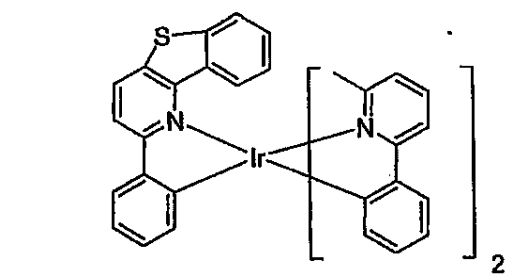


化合物22

30



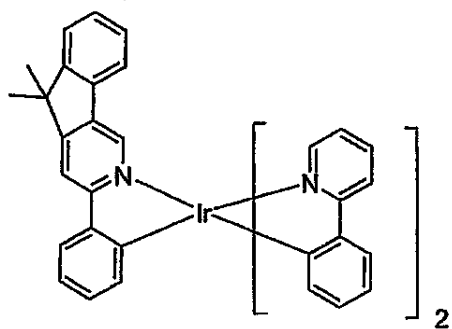
化合物23



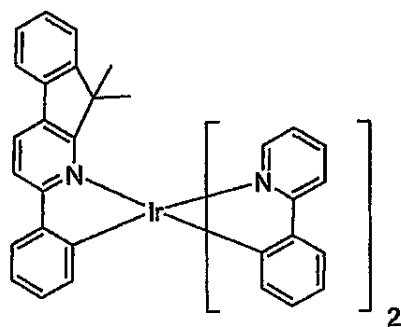
化合物24

40

【化 2 3 D】

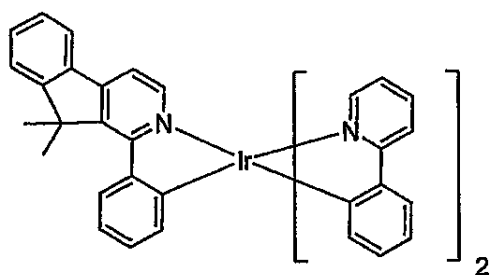


化合物37

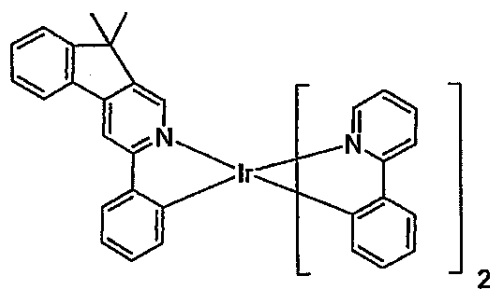


化合物38

10

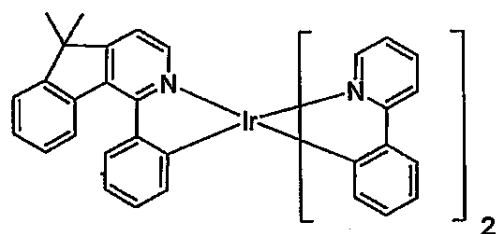


化合物39

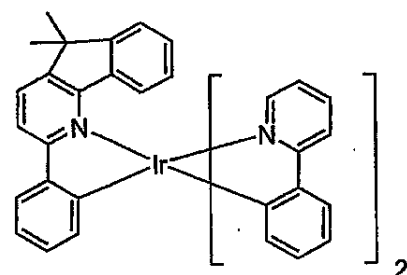


化合物40

20

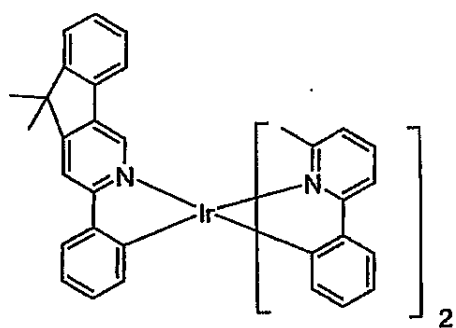


化合物41

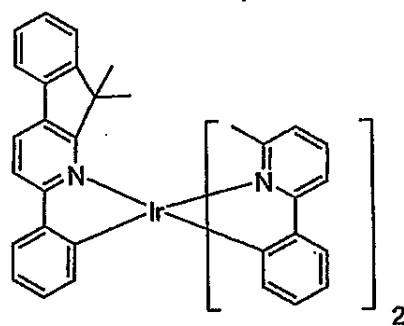


化合物42

30



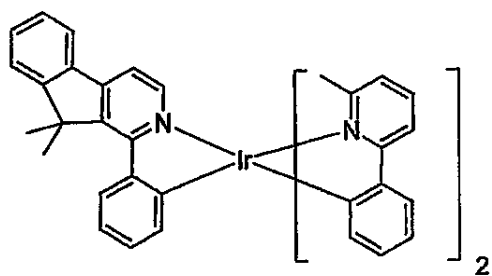
化合物43



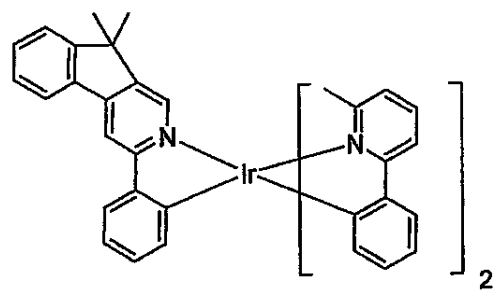
化合物44

40

【化 2 3 E】

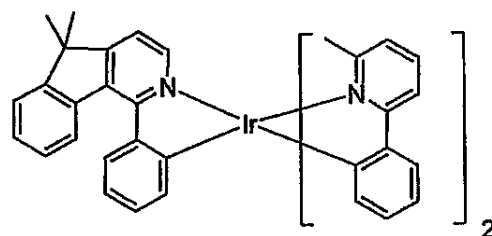


化合物45

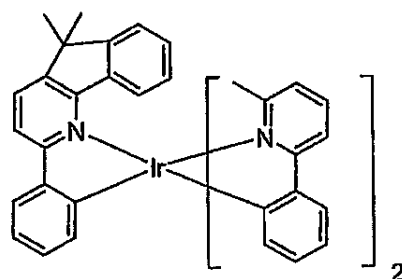


化合物46

10

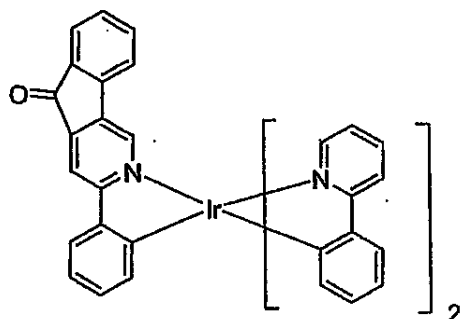


化合物47

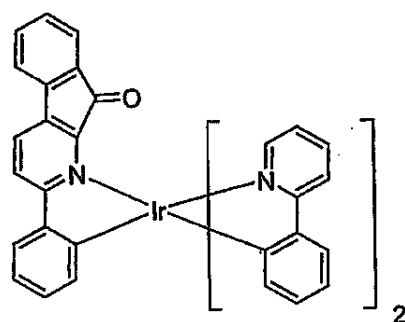


化合物48

20

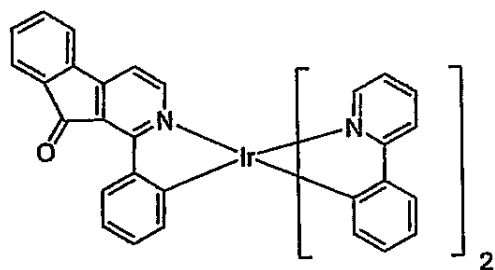


化合物49

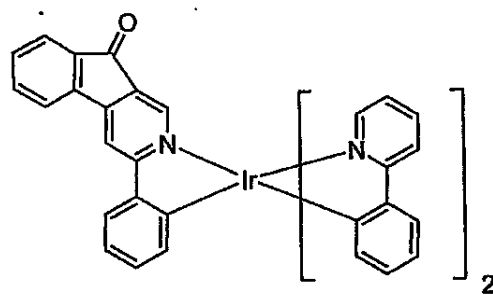


化合物50

30



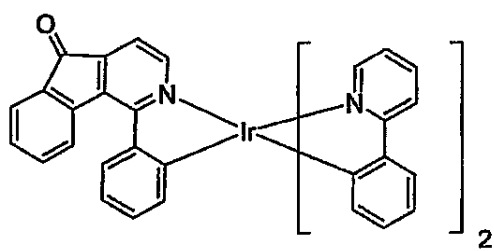
化合物51



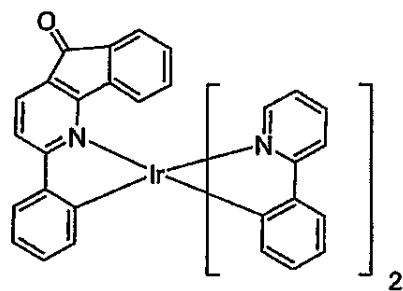
化合物52

40

【化 2 3 F】

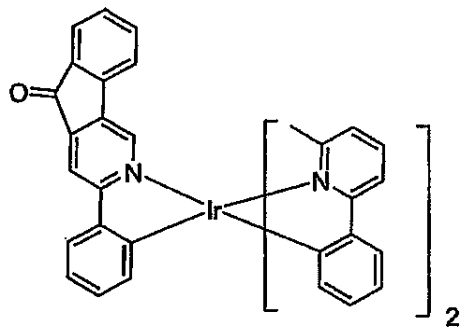


化合物53

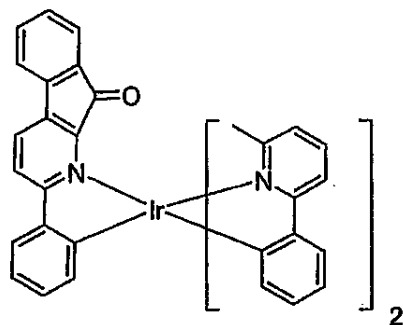


化合物54

10

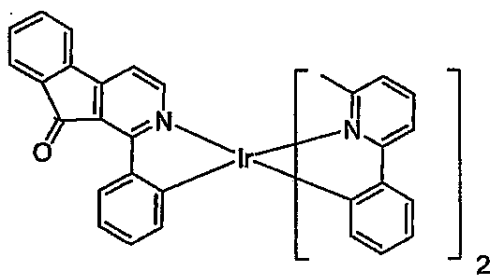


化合物55

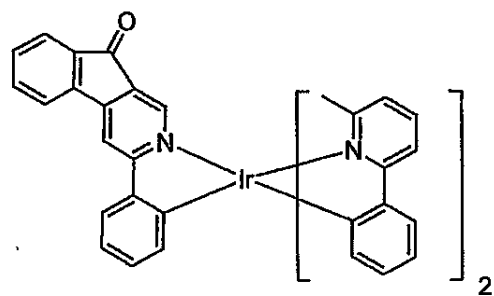


化合物56

20

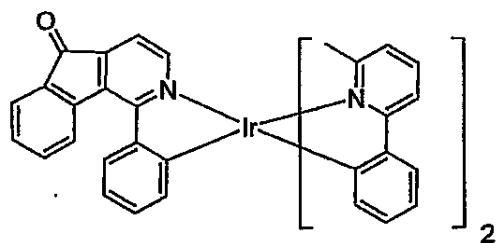


化合物57

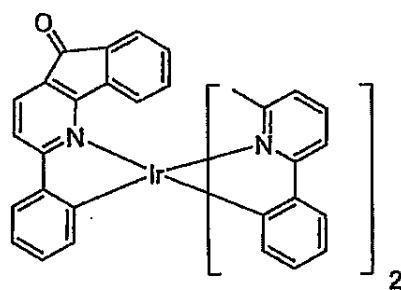


化合物58

30



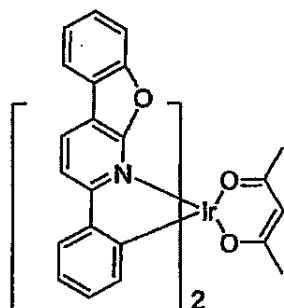
化合物59



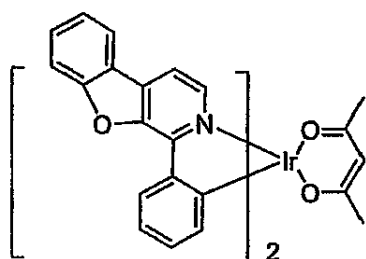
化合物60

40

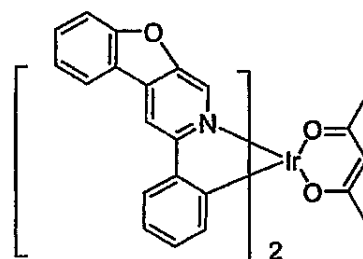
【化 2 3 G】



化合物61

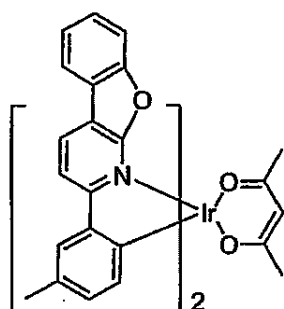


化合物62

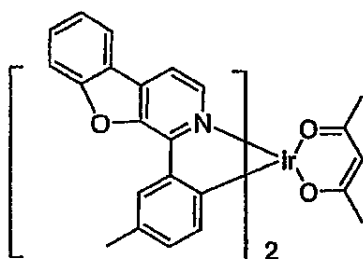


化合物63

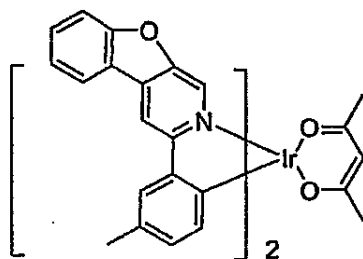
10



化合物64

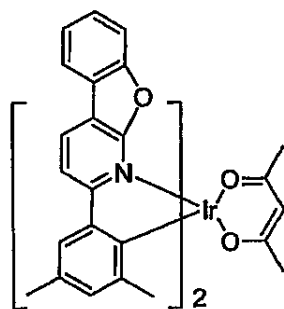


化合物65

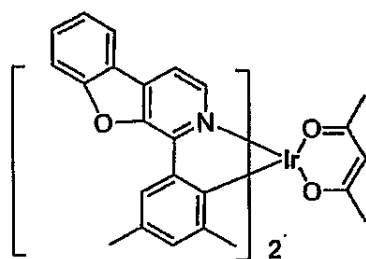


化合物66

20

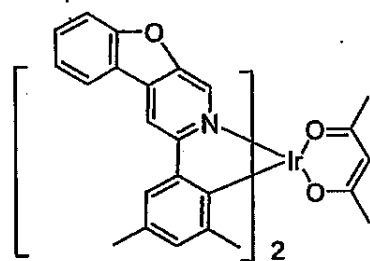


化合物67



化合物68

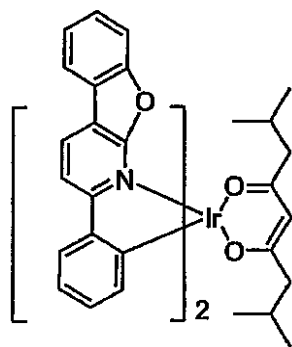
30



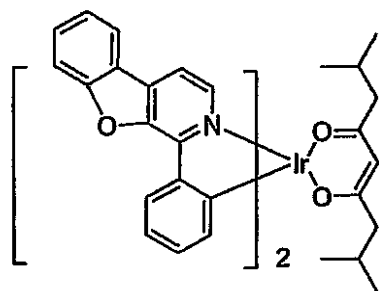
化合物69

40

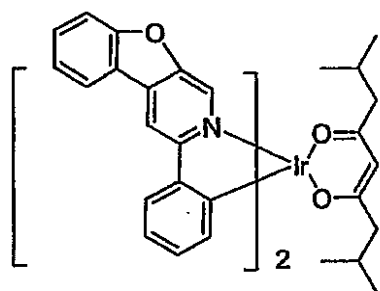
【化 2 3 H】



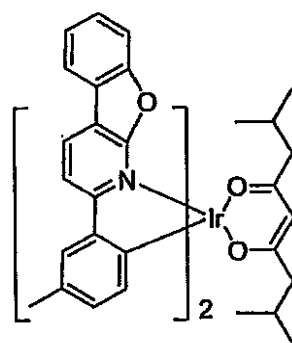
化合物70



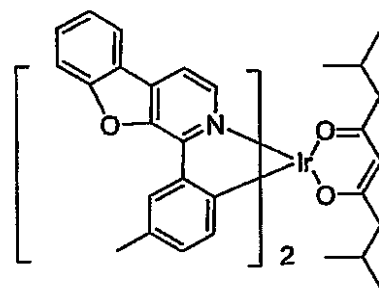
化合物71



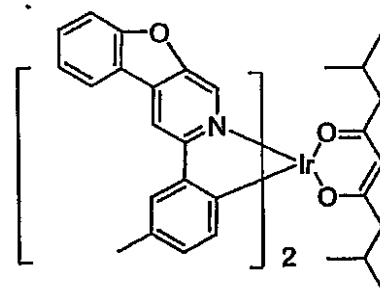
化合物72



化合物73



化合物74



化合物75

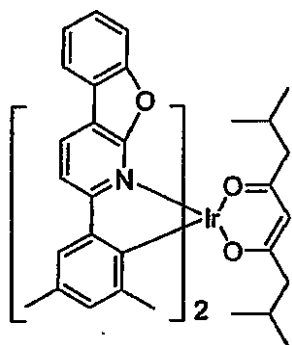
10

20

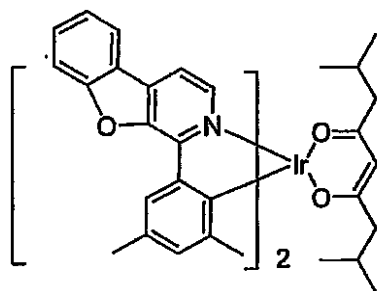
30

40

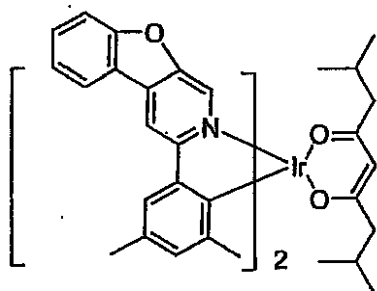
【化 2 3 I】



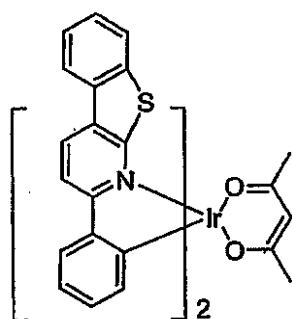
化合物76



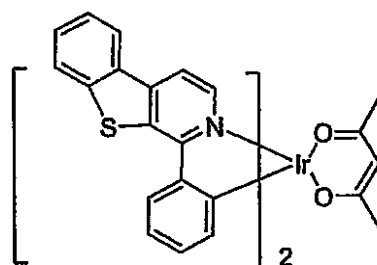
化合物77



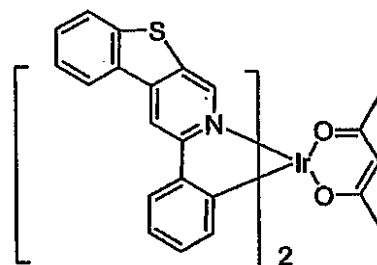
化合物78



化合物79



化合物80



化合物81

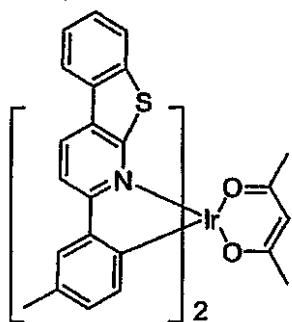
10

20

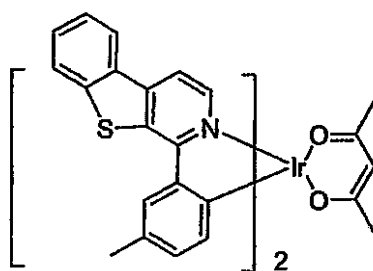
30

40

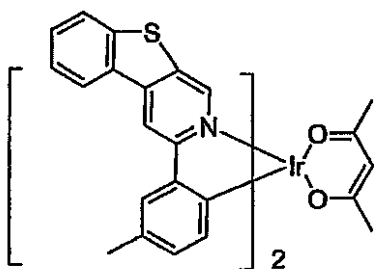
【化 2 3 J】



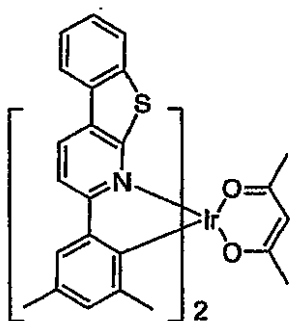
化合物82



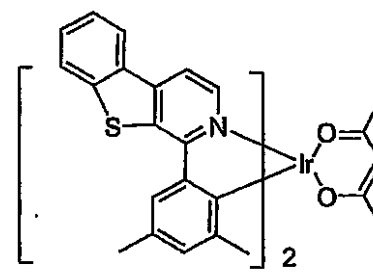
化合物83



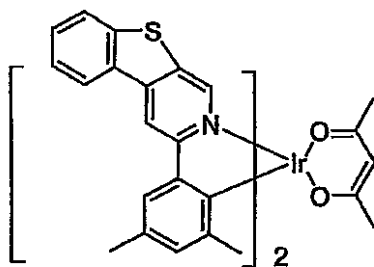
化合物84



化合物85



化合物86



化合物87

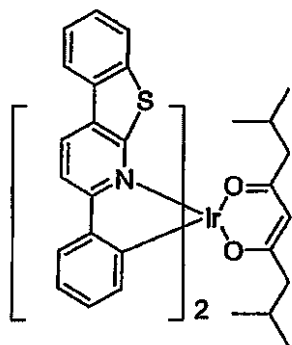
10

20

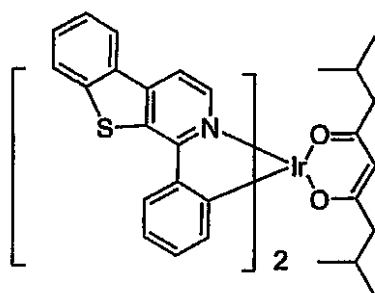
30

40

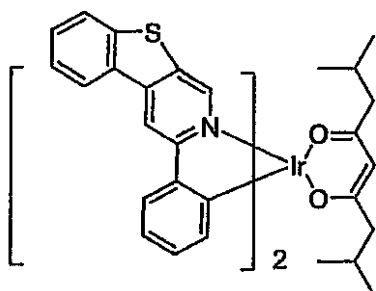
【化 2 3 K】



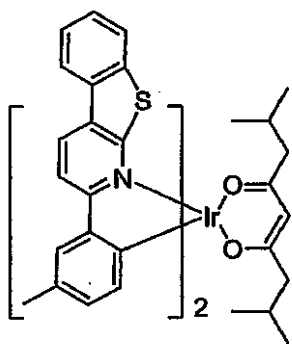
化合物88



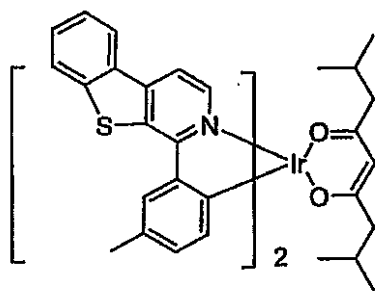
化合物89



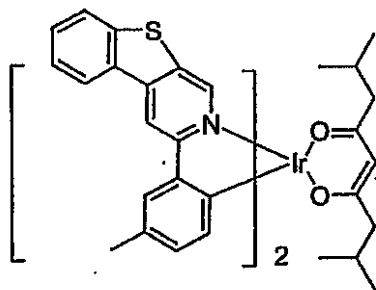
化合物90



化合物91



化合物92



化合物93

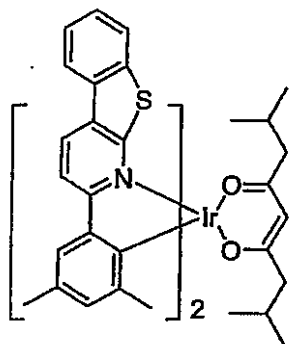
10

20

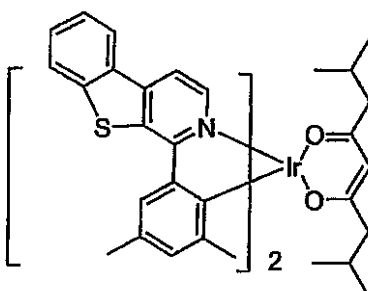
30

40

【化 2 3 L】

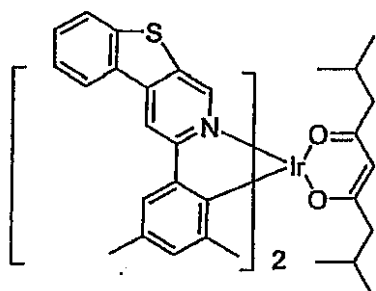


化合物94



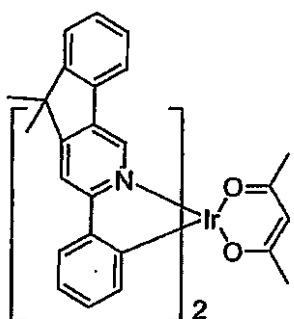
化合物95

10

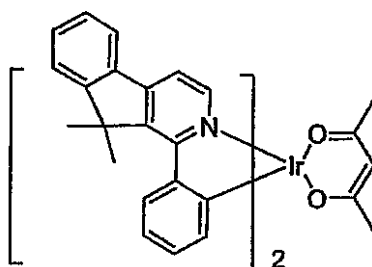


化合物96

20

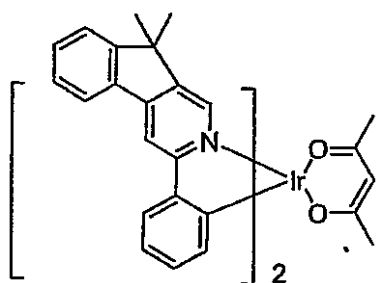


化合物115



化合物116

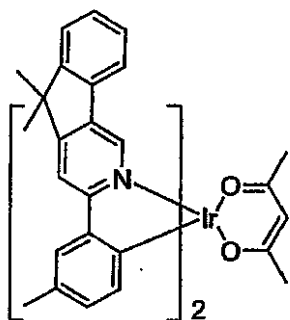
30



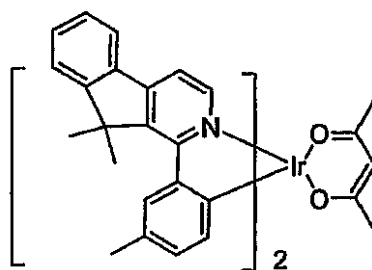
化合物117

40

【化 2 3 M】

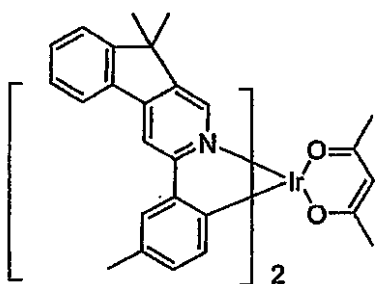


化合物118



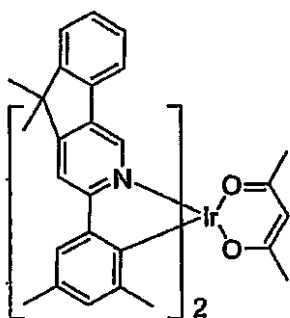
化合物119

10

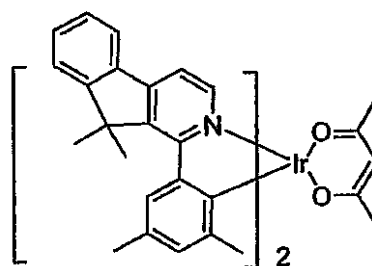


化合物120

20

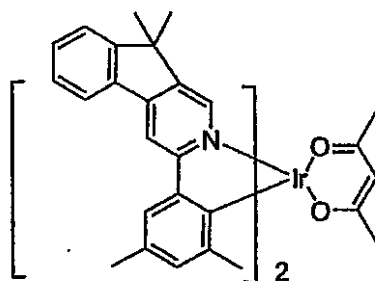


化合物121



化合物122

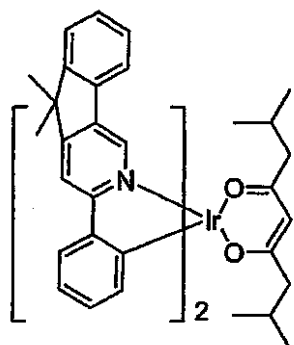
30



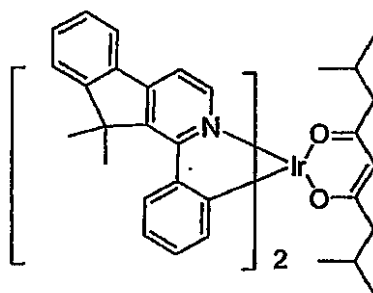
化合物123

40

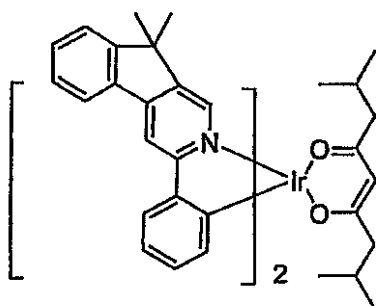
【化 2 3 N】



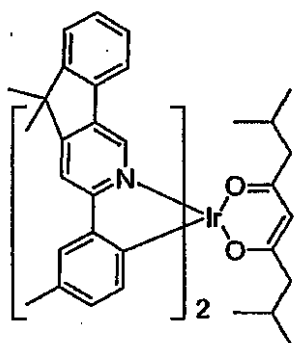
化合物124



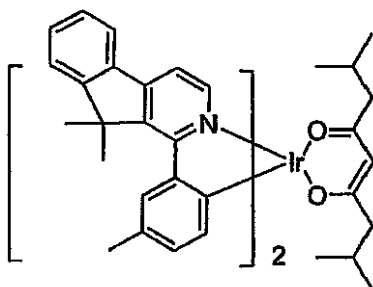
化合物125



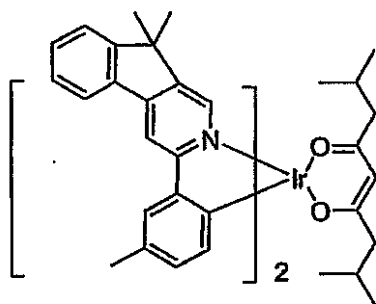
化合物126



化合物127



化合物128



化合物129

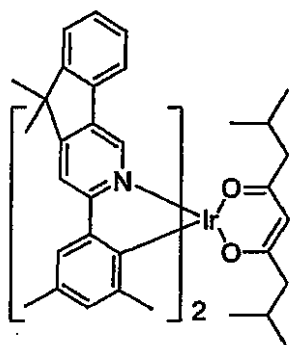
10

20

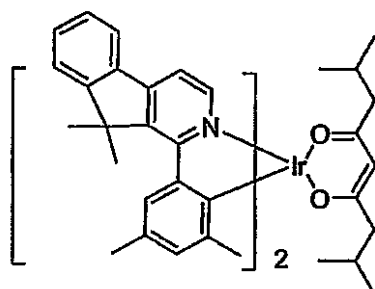
30

40

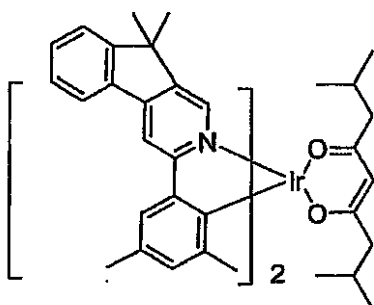
【化 2 3 0】



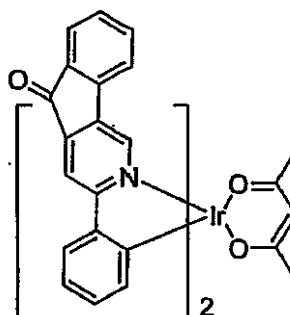
化合物130



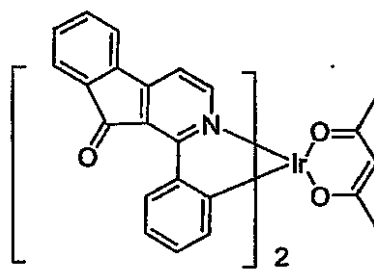
化合物131



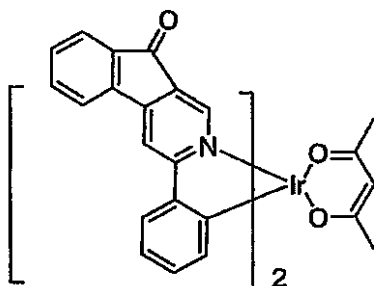
化合物132



化合物133



化合物134



化合物135

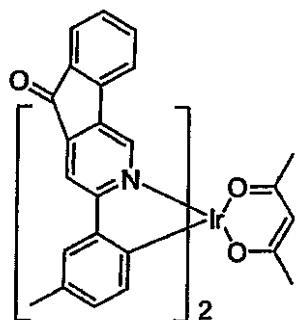
10

20

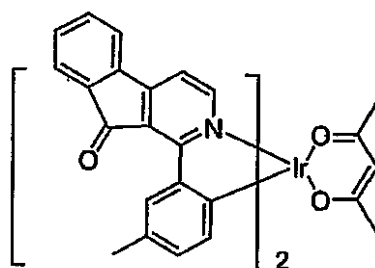
30

40

【化 2 3 P】

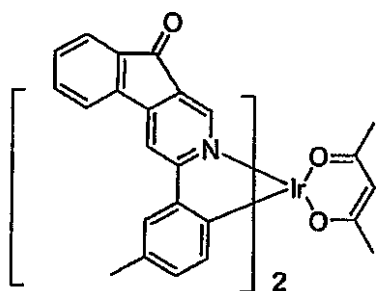


化合物136



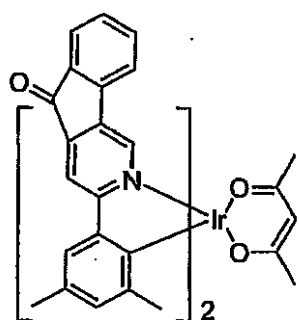
化合物137

10

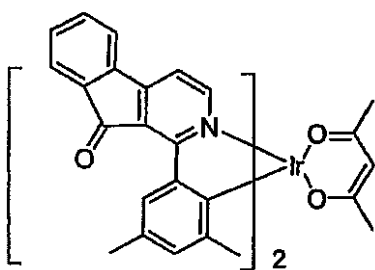


化合物138

20

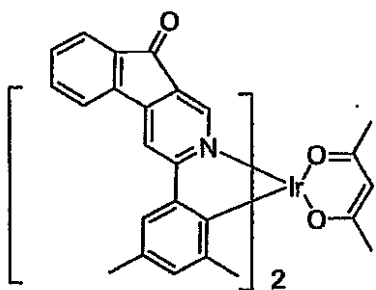


化合物139



化合物140

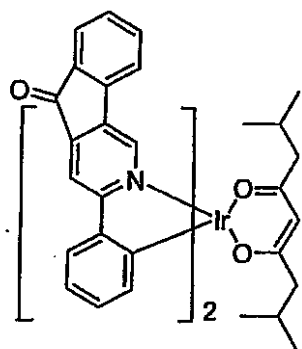
30



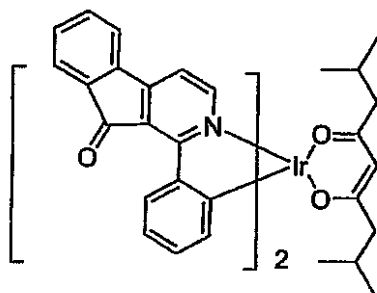
化合物141

40

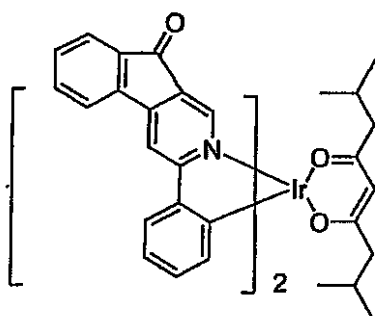
【化 2 3 Q】



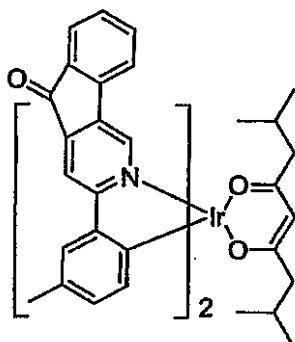
化合物142



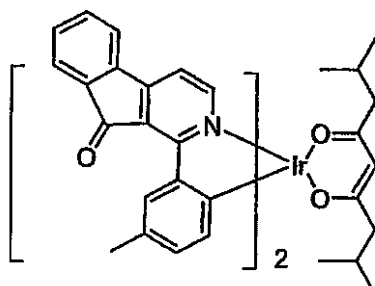
化合物143



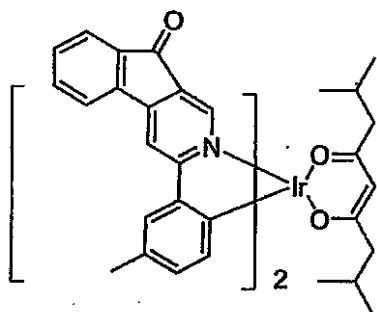
化合物144



化合物145



化合物146



化合物147

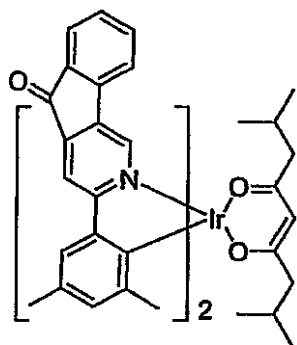
10

20

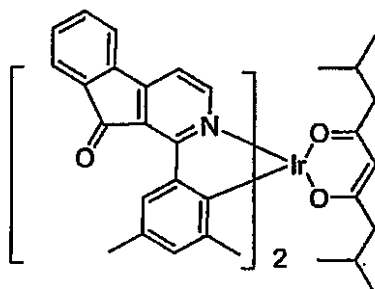
30

40

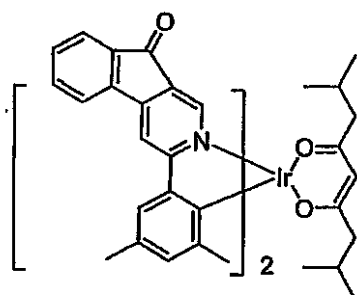
【化 2 3 R】



化合物148



化合物149



化合物150

【請求項 4 4】

前記有機層が発光層であり、前記化合物が発光ドーパントである、請求項 3 6 に記載のデバイス。

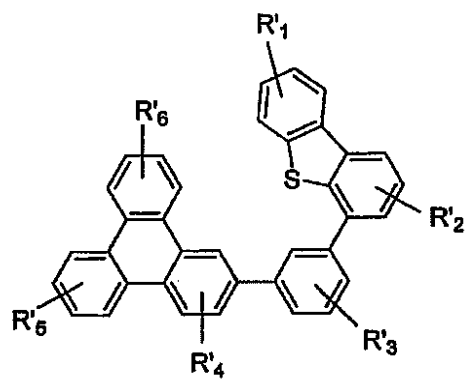
【請求項 4 5】

前記有機層がホストをさらに含む、請求項 3 6 に記載のデバイス。

【請求項 4 6】

前記ホストが、下記式：

【化 2 4】



〔式中、 R_1' 、 R_2' 、 R_3' 、 R_4' 、 R_5' 、および R_6' は、モノ-、ジ-、トリ-、またはテトラ置換基を表すことができ；かつ、

R_1' 、 R_2' 、 R_3' 、 R_4' 、 R_5' 、および R_6' は、それぞれ独立に、水素、アルキル、およびアリールからなる群から選択される〕

を有する、請求項 4 5 に記載のデバイス。

【請求項 4 7】

有機発光デバイスを含む製品であって、

前記有機発光デバイスが、

アノード；

10

20

30

40

50

カソード；

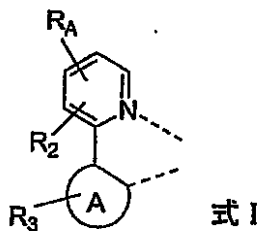
前記アノードとカソードとの間に配置された有機層

を含み、

前記有機層が、40より大きい原子量を有する金属と、前記金属に配位している配位子とを含む化合物を含み、

前記配位子が、下記構造：

【化25】

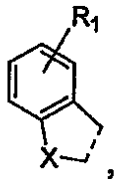


10

〔式中、Aは、5員環または6員環の芳香族環またはヘテロ芳香族環であり；

R_Aは、下記構造：

【化26】



20

を有する置換基であり、R_Aは、前記構造の点線部分で式Iのピリジン環に縮合しており；

Xは、CRR'、C=O、O、S、およびSeからなる群から選択され；

RおよびR'は、独立に、水素およびアルキルから選択され；

R₁、R₂、およびR₃は、モノ-、ジ-、トリ-、またはテトラ置換基を表すことができ；

30

R₁、R₂、およびR₃は、それぞれ独立に、水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリーラルキル、アリール、およびヘテロアリールからなる群から選択される〕

を有し、

フラットパネルディスプレイ、コンピュータのモニタ、テレビ、広告板、室内もしくは屋外の照明および/または信号灯、ヘッドアップディスプレイ、完全に透明なディスプレイ、フレキシブルディスプレイ、レーザープリンタ、電話機、携帯電話、携帯情報端末（PDA）、ラップトップコンピュータ、デジタルカメラ、カムコーダ、ビューファインダー、マイクロディスプレイ、乗り物、大面積壁面、映画館またはスタジアムのスクリーン、ならびに標識から選択される、製品。

40

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

この特許請求の範囲に記載した発明は、共同の大学・企業研究契約に関わる以下の団体：ミシガン大学評議員会、プリンストン大学、サザン・カリフォルニア大学、及びユニバーサルディスプレイコーポレーションの1つ以上の団体によって、1つ以上の団体のために、及び/又は1つ以上の団体と関係して行われた。上記契約は、特許請求の範囲に記載された発明がなされた日及びそれ以前に発効しており、特許請求の範囲に記載された発明は、前記契約の範囲内で行われた活動の結果としてなされた。

【0002】

50

本発明は、有機発光デバイスに有用であり得る有機物質に関する。より詳細には、このようなデバイスに用いる有機燐光材料に関する。より詳細には、本発明は、新規な配位子構造を有する金属錯体を含む化合物、およびこのような化合物を組み込んだデバイスに関する。

【背景技術】

【0003】

有機物質を用いるオプトエレクトロニクスデバイスは、多くの理由によりますます望ましいものとなってきている。そのようなデバイスを作るために用いられる多くの物質はかなり安価であり、そのため有機オプトエレクトロニクスデバイスは、無機デバイスに対してコスト上の優位性について潜在力をもっている。加えて、有機物質固有の特性、例えばそれらの柔軟性は、それらを柔軟な基材上への製作などの特定用途に非常に適したものにしうる。有機オプトエレクトロニクスデバイスの例には、有機発光デバイス（OLED）、有機光トランジスタ、有機光電池、及び有機光検出器が含まれる。OLEDについては、有機物質は、従来の物質に対して性能上優位性をもちうる。例えば、有機発光層が発光する波長は、一般に、適切なドーパントで容易に調節することができる。

【0004】

OLEDは、そのデバイスを横切って電圧を印加した場合に光を発する薄い有機膜（有機フィルム）を用いる。OLEDは、フラットパネルディスプレイ、照明、及びバックライトなどの用途で用いるためのますます興味ある技術となってきている。いくつかのOLEDの物質と構成が、米国特許第5,844,363号明細書、同6,303,238号明細書、及び同5,707,745号明細書に記載されており、これらの明細書はその全体を参照により本明細書に援用する。

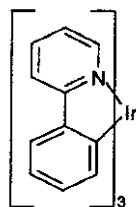
【0005】

燐光発光分子の一つの用途は、フルカラーディスプレイである。そのようなディスプレイのための工業規格は、「飽和」色といわれる特定の色を発光するように適合された画素（ピクセル）を要求している。特に、これらの規格は、飽和の赤、緑、及び青の画素を必要としている。色はCIE座標を用いて測定でき、CIE座標は当分野で周知である。

【0006】

緑色発光分子の一例は、 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ で表されるトリス(2-フェニルピリジン)イリジウムであり、これは下記の構造を有する。

【化1】



【0007】

この式及び本明細書の後の図で、窒素から金属（ここではIr）への供与結合は直線で表す。

【0008】

本明細書で用いるように、「有機」の用語は、有機オプトエレクトロニクスデバイスを製作するために用いることができるポリマー物質並びに小分子有機物質を包含する。「小分子(small molecule)」とは、ポリマーではない任意の有機物質をいい、「小分子」は、実際は非常に大きくてもよい。小分子はいくつかの状況では繰り返し単位を含んでもよい。例えば、置換基として長鎖アルキル基を用いることは、分子を「小分子」の群から排除しない。小分子は、例えばポリマー主鎖上のペンダント基として、あるいは主鎖の一部として、ポリマー中に組み込まれてもよい。小分子は、コア残基上に作り上げられた一連の

化学的殻からなるデンドリマーのコア残基として働くこともできる。デンドリマーのコア残基は、蛍光性又は燐光性小分子発光体であることができる。デンドリマーは「小分子」であることができ、OLEDの分野で現在用いられている全てのデンドリマーは小分子であると考えられる。

【0009】

本明細書で用いるように「トップ」は、基材から最も遠くを意味する一方で、「ボトム」は基材に最も近いことを意味する。第一の層が第二の層の「上に配置される」と記載した場合は、第一の層は基材から、より遠くに配置される。第一の層が第二の層と「接触している」と特定されていない限り、第一の層と第二の層との間に別な層があってもよい。例えば、カソードとアノードとの間に様々な有機層があったとしても、カソードはアノードの「上に配置される」と記載できる。

10

【0010】

本明細書で用いるように、「溶液処理（加工）可能」とは、溶液もしくは懸濁液の形態で、液体媒体中に溶解され、分散され、又は液体媒体中で輸送され、及び／又は液体媒体から堆積されうことを意味する。

【0011】

配位子が発光物質の光活性特性に直接寄与していると考えられる場合は、その配位子は「光活性」ということができる。配位子が発光物質の光活性特性に寄与していないと考えられる場合は、配位子は「補助」ということができるが、補助配位子は光活性配位子の特性を変えうる。

20

【0012】

本明細書で用いるように、かつ当業者によって一般に理解されているように、第一の「最高被占分子軌道」（HOMO）又は「最低空分子軌道」（LUMO）のエネルギー準位は、その第一のエネルギー準位が真空のエネルギー準位により近い場合には、第二のHOMO又はLUMOよりも「大きい」あるいは「高い」。イオン化ポテンシャル（IP）は真空準位に対して負のエネルギーとして測定されるので、より高いHOMOエネルギー準位は、より小さな絶対値をもつIPに対応する（より小さな負のIP）。同様に、より高いLUMOエネルギー準位は、より小さな絶対値をもつ電子親和力（EA）に対応する（より小さな負のEA）。上（トップ）に真空準位をもつ従来のエネルギー準位図の上では、物質のLUMOエネルギー準位はその同じ物質のHOMOエネルギー準位よりも高い。「より高い」HOMO又はLUMOエネルギー準位は、「より低い」HOMO又はLUMOエネルギー準位よりも、そのような図のトップの近くに現れる。

30

【0013】

本明細書で用いるように、また当業者によって一般に理解されるように、第一の仕事関数は、その第一の仕事関数がより高い絶対値を有する場合には、第二の仕事関数よりも「大きい」あるいは「高い」。仕事関数は通常、真空準位に対して負の値として測定されるので、このことは「より高い」仕事関数は、より負であることを意味する。上（トップ）に真空準位をもつ従来のエネルギー準位図の上では、「より高い」仕事関数は真空準位から下向きの方へさらに離れて図示される。したがって、HOMO及びLUMOエネルギー準位の定義は、仕事関数とは異なる慣例に従う。

40

【0014】

OLEDについてのさらなる詳細及び上述した定義は、米国特許第7,279,704号明細書に見ることができ、その全体を参照により本明細書に援用する。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0015】

【特許文献1】米国特許第5,844,363号明細書

【特許文献2】米国特許第6,303,238号明細書

【特許文献3】米国特許第5,707,745号明細書

【特許文献4】米国特許第7,279,704号明細書

50

【非特許文献】

【0016】

【非特許文献1】Baldoら, “Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices”, Nature, vol. 395, 151-154, 1998

【非特許文献2】Baldoら, “Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence”, Appl. Phys. Lett., vol. 75, No. 3, 4-6 (1999)

【発明の概要】

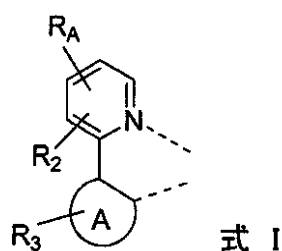
【課題を解決するための手段】

【0017】

10

新規な配位子構造を有する金属錯体を含む化合物を提供する。この化合物は、有機発光素子として有用であり得る。特に、この化合物は、有機発光素子における燐光発光ドープメントとして有用であり得る。この新規な化合物は、下記構造を有する配位子を含む。

【化2】

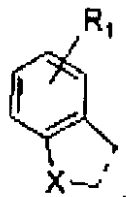


20

【0018】

Aは、5員環または6員環の芳香族環またはヘテロ芳香族環である。1つの側面では、好ましくは、Aはベンゼンである。別の側面では、好ましくは、Aは、フラン、チオフェン、およびピロールからなる群から選択される。R_Aは、下記構造：

【化3】



30

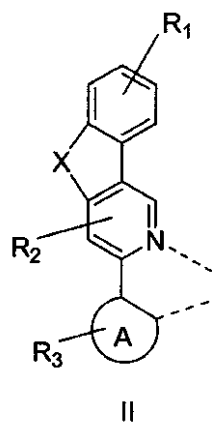
を有する置換基であり、R_Aは、式Iのピリジン環に縮合している。この構造式に存在する点線は、この置換基が式Iのピリジン環に縮合している位置を示している。Xは、CRR、C=O、BR、O、S、およびSeからなる群から選択される。RおよびR'は、独立に、水素およびアルキルから選択される。R₁、R₂、およびR₃は、モノ-、ジ-、トリ-、またはテトラ置換基を表すことができ、R₁、R₂、およびR₃は、それぞれ独立に、水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリーラルキル、アリール、およびヘテロアリールからなる群から選択される。この配位子は、40より大きい原子量を有する金属に配位する。好ましくは、金属は、Irである。

40

【0019】

1つの側面では、下記構造を有するアザジベンゾ-置換（アザ-D B X）配位子を含む化合物を提供する。

【化 4】

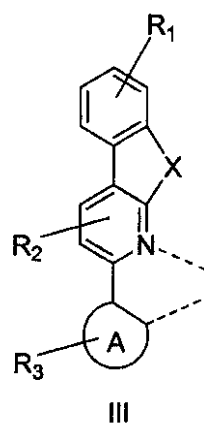


10

【 0 0 2 0 】

別の側面では、配位子が下記構造を有する化合物を提供する。

【化 5】



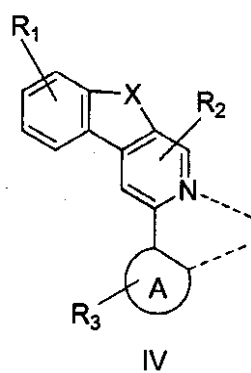
20

【 0 0 2 1 】

さらに別の側面では、配位子が下記構造を有する化合物を提供する。

30

【化 6】

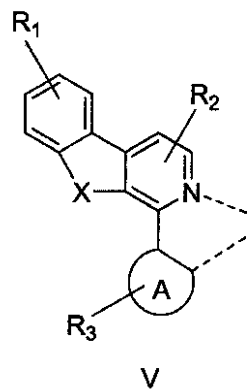


40

【 0 0 2 2 】

さらに別の側面では、配位子が下記構造を有する化合物を提供する。

【化 7】

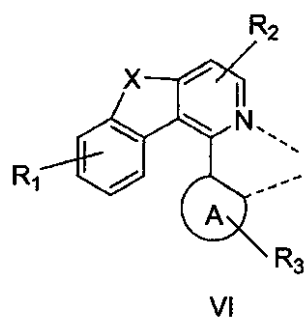


10

【 0 0 2 3 】

さらに別の側面では、配位子が下記構造を有する化合物を提供する。

【化 8】

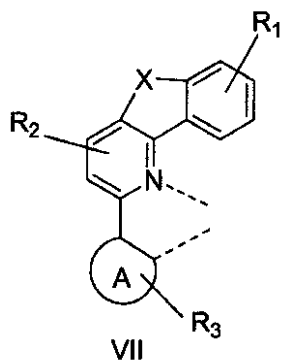


20

【 0 0 2 4 】

さらに別の側面では、配位子が下記構造を有する化合物を提供する。

【化 9】



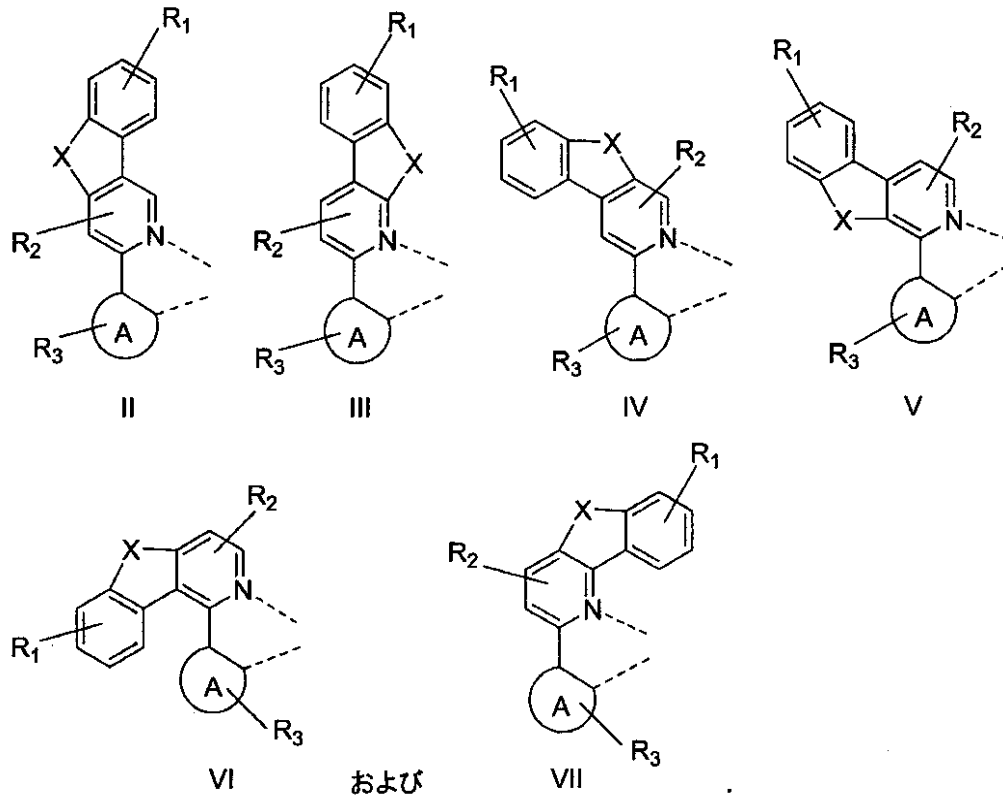
30

【 0 0 2 5 】

好ましくは、化合物は、式： $(L)_n(L)_{3-n}Ir$ を有する。L は、以下：

40

【化10】

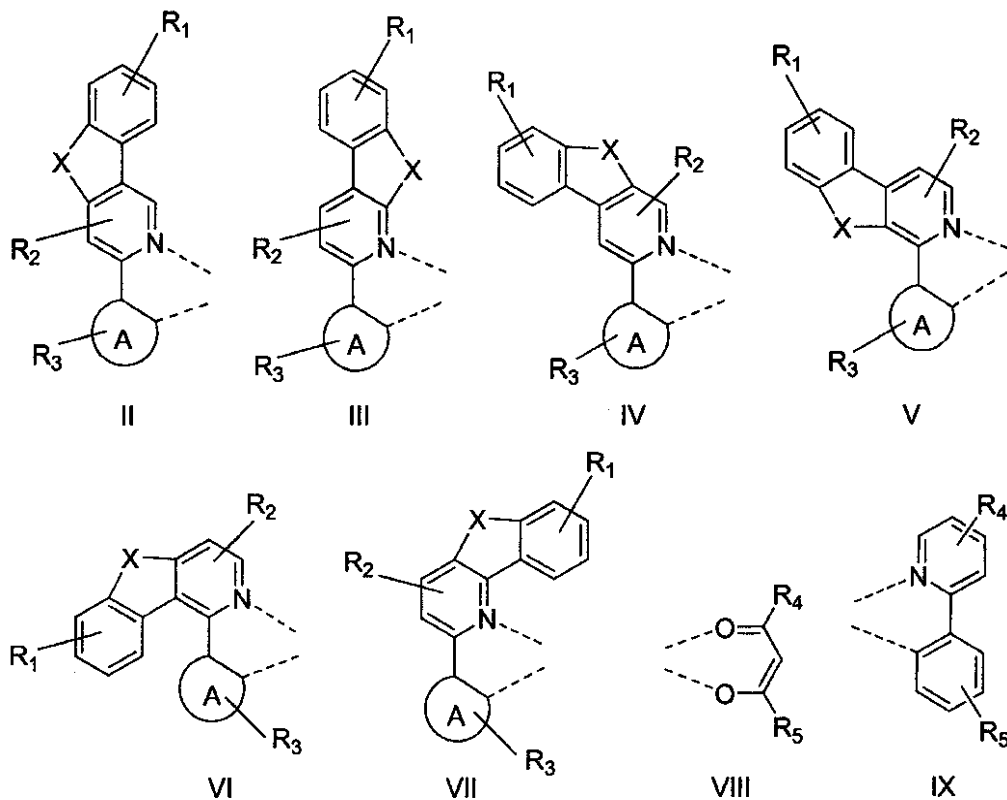


からなる群から選択される。

【0026】

L'は、以下：

【化11】



からなる群から選択される。

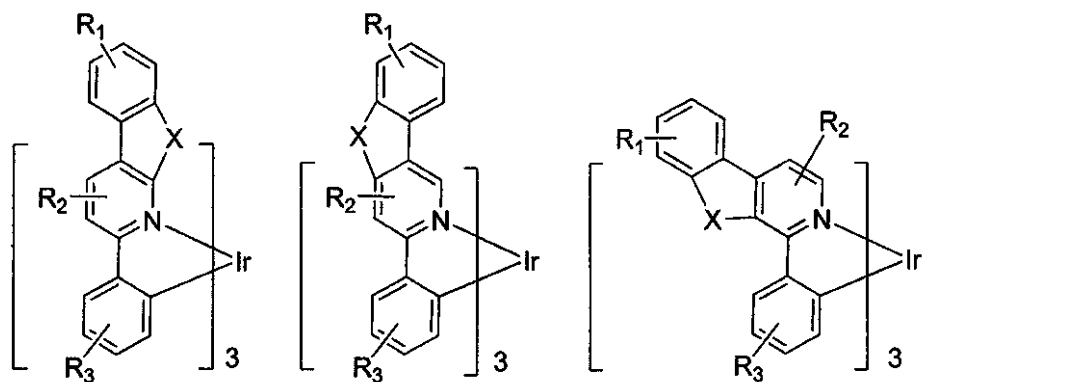
【 0 0 2 7 】

n は 1、2、または 3 である。1 つの側面では、n は 1 である。別の側面では、n は 2 である。さらに別の側面では、n は 3 である。R₄ および R₅ は、モノ-、ジ-、トリ-、またはテトラ置換基を表すことができ、かつ、R₄ および R₅ は、独立に、水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリールアルキル、アリール、およびヘテロアリールからなる群から選択される。好ましくは、R₄ および R₅ は、独立に、水素およびアルキルからなる群から選択される。

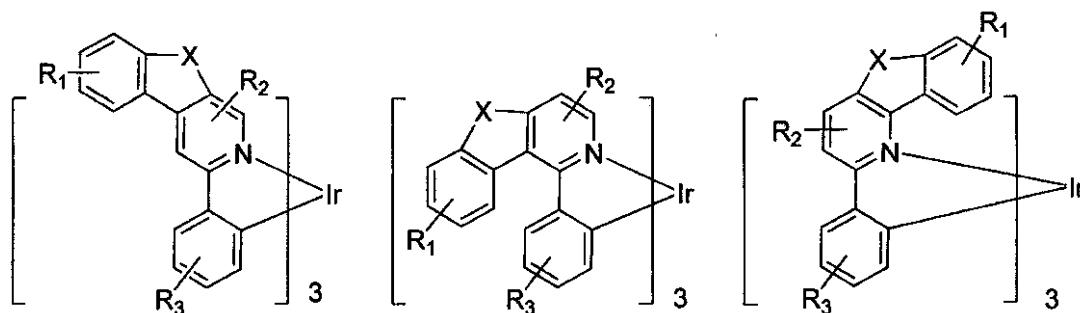
【 0 0 2 8 】

別の側面では、化合物は、以下からなる群から選択される。

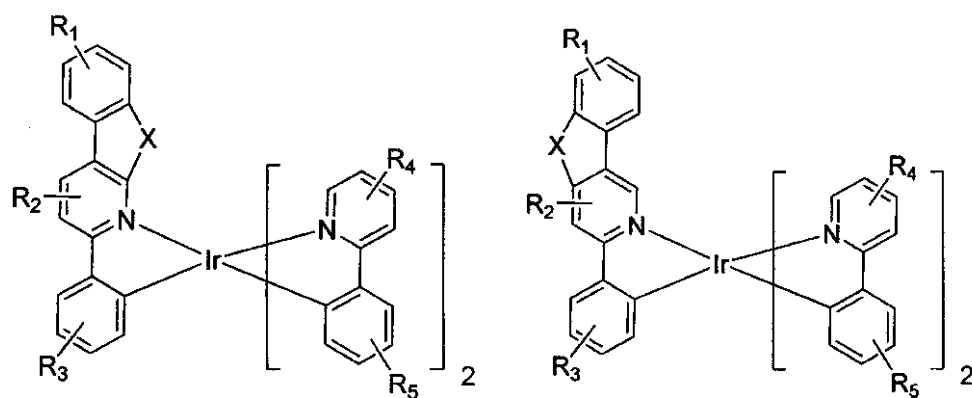
【化 1 2 A】



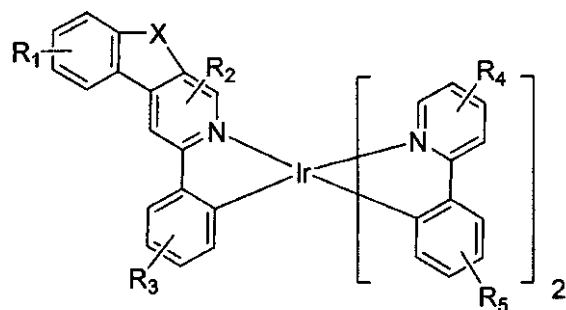
10



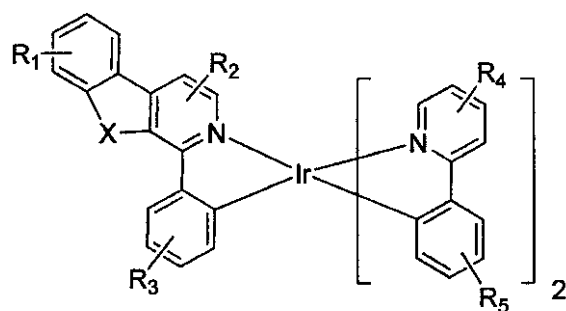
20



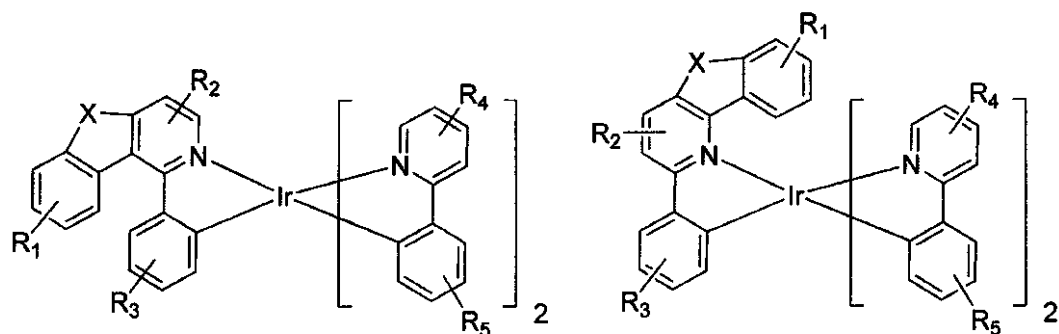
30



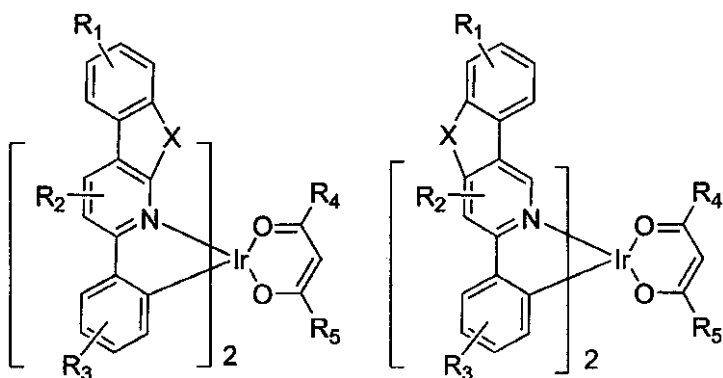
40



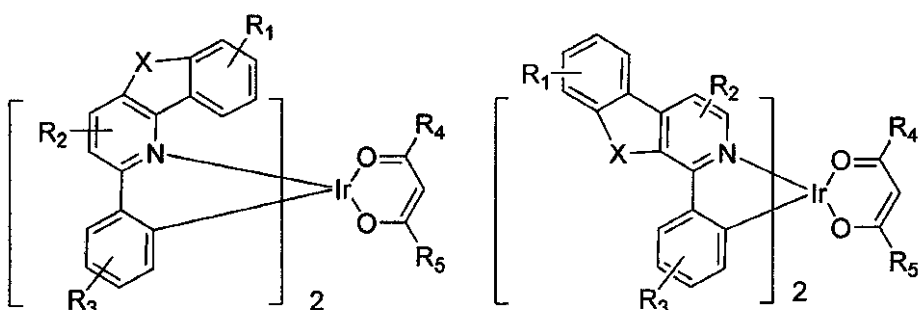
【化 1 2 B】



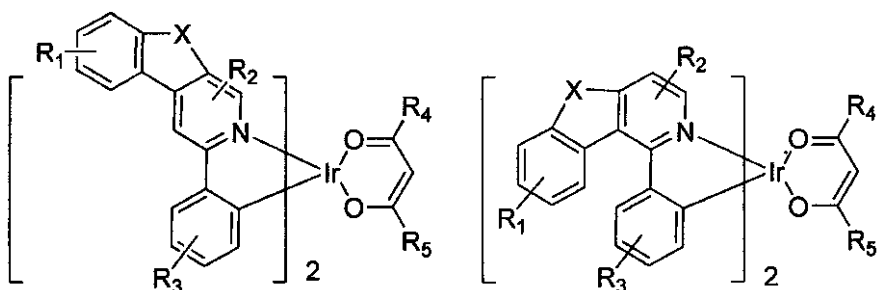
10



20



30



【 0 0 2 9】

40

特別な側面では、アザDBX配位子および/またはフェニルピリジン配位子を含む化合物が好ましい。別の側面では、アザDBX配位子および/または補助配位子（例えば、acacなど）を含む化合物が好ましい。

【 0 0 3 0】

式Iを有する配位子を含む化合物の具体的な例を提供する。これらには、化合物1～24、37～96、および115～150が含まれる。1つの側面では、XがOである化合物（例えば、アザジベンゾフラン）を提供する。これらには、化合物1～12および/または化合物61～78が含まれる。別の側面では、XがSである化合物（例えば、アザジベンゾチオフェン）を提供する。これらには、化合物13～24および/または化合物79～96が含まれる。さらに別の側面では、XがCRRである化合物（例えば、アザジフ

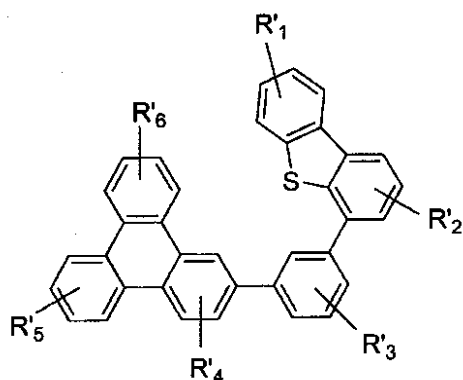
50

ルオレン)を提供する。これらには、化合物 37 ~ 48 よび / または化合物 115 ~ 132 が含まれる。さらに別の側面では、X が C=O である化合物 (例えば、アザフルオレン) を提供する。これらには、化合物 49 ~ 60 よび / または化合物 133 ~ 150 が含まれる。

【0031】

加えて、有機発光デバイスも提供する。このデバイスは、アノード、カソード、およびアノードとカソードとの間に配置された有機層を含む。さらに、この有機層は、上述した式 I を有する配位子を含む化合物を含む。特に、有機層は、上述した構造 II、III、IV、V、VI、または VII を有する配位子を有する化合物を含む。とりわけ、有機層は、化合物 1 ~ 24、37 ~ 96、および 115 ~ 150 からなる群から選択される化合物を含む。好ましくは、有機層は、発光層であり、化合物は、発光ドーパントである。この発光層は、さらにホストを含んでいてよい。好ましくは、このホストは、下記式を有する。

【化 13】



式中、 R_1' 、 R_2' 、 R_3' 、 R_4' 、 R_5' 、および R_6' は、モノ-、ジ-、トリ-、またはテトラ置換基を表し、かつ、 R_1' 、 R_2' 、 R_3' 、 R_4' 、 R_5' 、および R_6' は、それぞれ独立に、水素、アルキル、およびアリールからなる群から選択される。式 I の化合物について記述した好ましいヘテロ原子および置換基の選択は、式 I の化合物を含むデバイスのための使用にも好ましい。記述した置換基の選択には、X、A、 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、および R_5 についての選択が含まれる。

【0032】

消費財製品も提供する。この製品は、アノード、カソード、およびアノードとカソードとの間に配置された有機層を含む。さらに、この有機層は、上述した式 I を有する配位子を含む化合物を含む。式 I の化合物について記述した好ましいヘテロ原子および置換基の選択は、式 I の化合物を含むデバイスのための使用にも好ましい。記述した置換基の選択には、X、A、 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、および R_5 についての選択が含まれる。

【図面の簡単な説明】

【0033】

【図 1】図 1 は、有機発光デバイスを示す。

【図 2】図 2 は、別個の電子輸送層を持たない倒置型有機発光デバイスを示す。

【図 3】図 3 は、配位子を示す。

【図 4】図 4 は、代表的なアザ DBX 配位子を示す。

【発明を実施するための形態】

【0034】

一般に、OLED は、アノードとカソードとの間に配置され且つそれらに電気的に結合された少なくとも 1 つの有機層を含む。電流を流した場合、その有機層 (1 又は複数) に、アノードは正孔を注入し、カソードは電子を注入する。注入された正孔及び電子はそれぞれ反対に帯電した電極に向かって移動する。同じ分子上に電子と正孔とが局在した場合、「励起子」(これは励起エネルギー状態を有する局在化した電子-正孔対である) が形成される。励起子が発光機構を介して緩和する時に、光が発せられる。一部の場合には、

励起子はエキシマー又はエキシプレックス上に局在化されうる。非発光機構、例えば熱緩和も起こりうるが、一般的には望ましくないと考えられる。

【0035】

初期のOLEDは、一重項状態から光を発する（「蛍光」）発光分子を用いており、例えば、米国特許第4,769,292号明細書（この全体を参照により援用する）に記載されているとおりである。蛍光発光は、一般に、10ナノ秒よりも短いタイムフレームで起こる。

【0036】

より最近、三重項状態から光を発する（「燐光」）発光物質を有するOLEDが実証されている。Baldoら、“Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices”, Nature, vol. 395, 151-154, 1998 (“Baldo-I”);

10

及び、Baldoら、“Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence”, Appl. Phys. Lett., vol. 75, No. 3, 4-6 (1999) (“Baldo-II”), これらを参照により全体を援用する。燐光は、米国特許第7,279,704号明細書の第5～6欄により詳細に記載されており、これを参照により援用する。

【0037】

図1は、有機発光デバイス100を示している。この図は、必ずしも一定の縮尺で描かれていない。デバイス100は、基板110、アノード115、正孔注入層120、正孔輸送層125、電子阻止層130、発光層135、正孔阻止層140、電子輸送層145、電子注入層150、保護層155、およびカソード160を含み得る。カソード160は、第一導電層162および第二導電層164を有する複合カソードである。デバイス100は、記載した層を順次、堆積させることによって作製できる。これらの様々な層の特性及び機能、並びに例示物質は、米国特許第7,279,704号明細書の第6～10欄により詳細に記載されており、これを参照により援用する。

20

【0038】

これらの層のそれぞれについてのより多くの例が得られる。例えば、可撓性且つ透明な基材とアノードの組み合わせが米国特許第5,844,363号明細書に開示されており、参照により全体を援用する。p型ドーブ正孔輸送層の例は、50:1のモル比で、F₄-TCNQでドーブしたm-MTDATAであり、これは米国特許出願公開第2003/0230980号公報に開示されているとおりであり、その全体を参照により援用する。発光物質及びホスト物質の例は、Thompsonらの米国特許第6,303,238号明細書に開示されており、その全体を参照により援用する。n型ドーブ電子輸送層の例は、1:1のモル比でLiでドーブされたBPhenであり、これは米国特許出願公開第2003/0230980号公報に開示されているとおりであり、その全体を参照により援用する。米国特許第5,703,436号明細書及び同5,707,745号明細書（これらはその全体を参照により援用する）は、Mg:Agなどの金属の薄層を、その上に重ねられた透明な電気導電性のスパッタリングによって堆積されたITO層と共に有する複合カソードを含むカソードの例を開示している。阻止層の理論と使用は、米国特許第6,097,147号明細書及び米国特許出願公開第2003/0230980号公報により詳細に記載されており、その全体を参照により援用する。注入層の例は、米国特許出願公開第2004/0174116号公報に開示されており、その全体を参照により援用する。保護層の記載は米国特許出願公開第2004/0174116号公報にみられ、その全体を参照により援用する。

30

【0039】

図2は倒置型(inverted)OLED200を示している。このデバイスは、基板210、カソード215、発光層220、正孔輸送層225、およびアノード230を含む。デバイス200は記載した層を順に堆積させることによって製造することができる。最も一般的なOLEDの構成はアノードの上方に配置されたカソードを有し、デバイス200はアノード230の下方に配置されたカソード215を有するので、デバイス200を「倒置型」OLEDとよぶことができる。デバイス100に関して記載したものと同様の物質を、デバイス200の対応する層に使用できる。図2は、デバイス100の構造からどのようにいくつかの層を省けるかの1つの例を提供している。

40

【0040】

図1および2に例示した簡単な層状構造は非限定的な例として提供するものであり、本

50

発明の実施形態は多様なその他の構造と関連して使用することができることが理解される。記載した具体的な物質および構造は事実上例示であり、その他の物質および構造も使用できる。設計、性能、およびコスト要因に基づいて、実用的なO L E Dは、様々なやり方で、上述により記載した様々な層を組み合わせることによって実現することができ、あるいは、いくつかの層は完全に省くことができる。具体的に記載していない他の層を含むこともできる。具体的に記載したもの以外の物質を用いてもよい。本明細書に記載した例の多くは、単一の物質を含むものとして様々な層を記載したが、物質の組合せ（例えばホストおよびドーパントの混合物、またはより一般的には混合物）を用いてもよいことが理解される。また、層は様々な副層（sublayer）を有してもよい。本明細書において様々な層に与えた名称は、厳格に限定することを意図するものではない。例えば、デバイス200において、正孔輸送層225は正孔を輸送し且つ発光層220に正孔を注入するので、正孔輸送層としても、正孔注入層としても説明することができる。一実施形態において、O L E Dは、カソードとアノードとの間に配置された「有機層」を有するものとして説明できる。この有機層は単一の層を含んでいても、例えば図1および2に関連して記載したように様々な有機物質の複数の層をさらに含んでいてもよい。

10

【0041】

具体的に記載されていない構造および物質、例えばFriendらの米国特許第5,247,190号（これはその全体を参照により援用する）に開示されているようなポリマー物質で構成されるO L E D（P L E D）、も使用することができる。さらなる例として、単一の有機層を有するO L E Dを使用することができる。O L E Dは、例えば、Forrestらの米国特許第5,707,745号（これはその全体を参照により援用する）に記載されているように、積み重ねられていてもよい。O L E Dの構造は、図1および2に示されている簡単な層状構造から逸脱していてもよい。例えば、基板は、光取出し（out-coupling）を向上させるために、Forrestらの米国特許第6,091,195号（これはその全体を参照により援用する）に記載されているメサ構造、および/またはBulovicらの米国特許第5,834,893号（これはその全体を参照により援用する）に記載されているピット構造などの、角度の付いた反射表面を含みうる。

20

【0042】

特に断らないかぎり、様々な実施形態の層のいずれも、何らかの適切な方法によって堆積することができる。有機層については、好ましい方法には、熱蒸着（thermal evaporation）、インクジェット（例えば、米国特許第6,013,982号および米国特許第6,087,196号（これらはその全体を参照により援用する）に記載されている）、有機気相成長（organic vapor phase deposition、OVPD）（例えば、Forrestらの米国特許第6,337,102号（その全体を参照により援用する）に記載されている）、ならびに有機気相ジェットプリンティング（organic vapor jet printing、OVJP）による堆積（例えば、米国特許出願第10/233,470号（これはその全体を参照により援用する）に記載されている）が含まれる。他の適切な堆積方法には、スピニングおよびその他の溶液に基づく方法が含まれる。溶液に基づく方法は、好ましくは、窒素または不活性雰囲気中で実施される。その他の層については、好ましい方法には熱蒸着が含まれる。好ましいパターンニング方法には、マスクを通しての堆積、圧接（cold welding）（例えば、米国特許第6,294,398号および米国特許第6,468,819号（これらはその全体を参照により援用する）に記載されている）、ならびにインクジェットおよびOVJDなどの堆積方法のいくつかに関連するパターンニングが含まれる。その他の方法も用いることができる。堆積される物質は、それらを特定の堆積方法に適合させるために改変されてもよい。例えば、分枝した又は分枝していない、好ましくは少なくとも3個の炭素を含むアルキルおよびアリール基などの置換基が、溶液加工性を高めるために、小分子に用いることができる。20個又はそれより多い炭素を有する置換基を用いてもよく、3～20炭素が好ましい範囲である。非対称構造を有する物質は対称構造を有するものよりも良好な溶液加工性を有しうるが、これは、非対称物質はより小さな再結晶化傾向を有しうるからである。デンドリマー置換基は、小分子が溶液加工を受け

30

40

50

【 0 0 4 3 】

本発明の実施形態により製造されたデバイスは多様な消費者製品に組み込むことができ、これらの製品には、フラットパネルディスプレイ、コンピュータのモニタ、テレビ、広告板、室内もしくは屋外の照明灯および/または信号灯、ヘッドアップディスプレイ、完全に透明な (fully transparent) ディスプレイ、フレキシブルディスプレイ、レーザープリンタ、電話機、携帯電話、携帯情報端末 (personal digital assistant、PDA)、ラップトップコンピュータ、デジタルカメラ、カムコーダ、ビューファインダー、マイクロディスプレイ、乗り物、大面積壁面 (large area wall)、映画館またはスタジアムのスクリーン、あるいは標識が含まれる。パッシブマトリクスおよびアクティブマトリクスを含めて、様々な制御機構を用いて、本発明にしたがって製造されたデバイスを制御できる。デバイスの多くは、18 から 30 、より好ましくは室温 (20 ~ 25) などの、人にとって快適な温度範囲において使用することが意図されている。

10

【 0 0 4 4 】

本明細書に記載した物質及び構造は、O L E D以外のデバイスにおける用途を有しうる。例えば、その他のオプトエレクトロニクスデバイス、例えば、有機太陽電池及び有機光検出器は、これらの物質及び構造を用いることができる。より一般には、有機デバイス、例えば、有機トランジスタなどは、これらの物質及び構造を用いることができる。

【 0 0 4 5 】

ハロ、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、アルケニル、アルキニル、アリールアルキル、ヘテロ環基、アリール、芳香族基、及びヘテロアリールの用語は、当分野で公知であり、米国特許第7,279,704号明細書の第31 ~ 32欄で定義されており、これを参照により援用する。

20

【 0 0 4 6 】

本明細書では、新規な部類の化合物を提供する。これらの化合物は、(図3に図示した) 新規な構造を有する配位子を含む。これらの化合物は、有機燐光発光デバイスに有利に使用することができる。好ましくは、これらの化合物は、発光層の発光ドーパントとして使用することができる。特に、式Iを有する新規な配位子は、そのピリジン環が芳香族アザ基で置き換えられて新規な構造を形成しているフェニルピリジン配位子(以下、「アザDBX」配位子または「アザ-ジベンゾ置換」配位子と呼ぶ)を構成する。アザ-ジベンゾ置換配位子には、アザジベンゾフラン、アザジベンゾチオフェン、アザフルオレン、アザフルオレノン、アザカルバゾール、およびアザジベンゾセレノフェンが含まれる。本明細書における化合物は、アザDBX配位子を含み、ここで、Xは、アザ構造内の化学置換基を表す。この置換基は、化合物がより望ましい特性(例えば、色または安定性)を有するように調整するために用いられる。例えば、アザDBX配位子をヘテロ原子、例えば、O、S、またはNなどで置換すると、化合物の電気化学的特性および光物理的特性が変化する。

30

【 0 0 4 7 】

加えて、本明細書において提供するこれらの化合物は、この特別な配位子構造に基づいてさまざまな性質を有し得る。特に、配位子が反転して、同じ原子構成を有するにもかかわらず、配位子が異なって配向されることによって、この配位子を含む化合物の全体的な特性が影響を受ける(例えば、IIIと比較したII、Vと比較したIV、およびVIIと比較したVI)。例えば、化合物1および化合物8は、いずれもアザDBX配位子であってXがOであるもの(すなわちジベンゾフラン)を有するが、化合物2に対して化合物1は異なる配向を有する配位子であり、その結果、これらの化合物の間には、赤方偏移が存在する。

40

【 0 0 4 8 】

アザ-ジベンゾ置換配位子を有するイリジウム錯体は、多くの望ましい性質を発揮しうる。理論に拘束されることは望まないが、本明細書におけるこれらの新規化合物は、P E H O L E Dにおけるより安定な発光体(emitter)となり得ると考えられる。フェニルピリジンイリジウム錯体のL U M Oは、通常配位子状に局在しているのに対し、本明細書におけるこれらの化合物は、アザ-ジベンゾ置換配位子を介して、より良い電子の不安定化

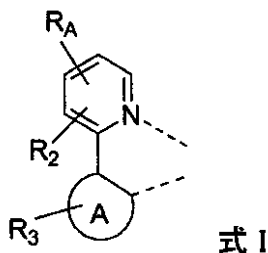
50

をもたらす。したがって、これらの化合物は、電子に対してより安定であり、より安定な発光体となり得ると考えられる。加えて、これらの化合物は、改良された寿命およびより低い駆動電圧を有するデバイスを提供することもできる。

【 0 0 4 9 】

本明細書において提供する化合物は、下記構造を有する配位子を含む。

【 化 1 4 】



10

【 0 0 5 0 】

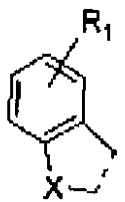
A は、5 員環または 6 員環の芳香族環またはヘテロ芳香族環である。1 つの側面では、1 の側面では、A は 6 員環であり、好ましくは、A はベンゼンである。別の側面では、A は 5 員環であり、好ましくは、A は、フラン、チオフェン、およびピロールからなる群から選択される。A 環として用いることができる 5 員環の例には、フラン、チオフェン、ピ
 20

20

【 0 0 5 1 】

R A は、下記構造：

【 化 1 5 】



30

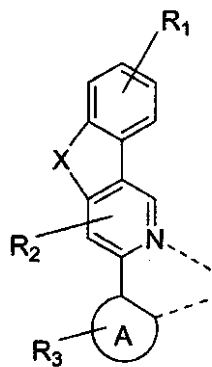
を有する置換基であり、R A は、式 I のピリジン環に縮合している。この構造式に存在する点線は、この置換基が式 I のピリジン環に接合している位置を示している。X は、CRR、C=O、BR、O、S、および Se からなる群から選択される。R および R ' は、独立に、水素 およびアルキルから選択される。R₁、R₂、および R₃ は、モノ-、ジ-、トリ-、またはテトラ置換基を表すことができ、R₁、R₂、および R₃ は、それぞれ独立に、水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリーラルキル、アリール、およびヘテロアリールからなる群から選択される。この配位子は、40 より大きい原子量を有する金属に配位する。好ましくは、金属は、Ir である。

【 0 0 5 2 】

1 つの側面では、下記構造を有する配位子を含む化合物を提供する。

40

【化 1 6】



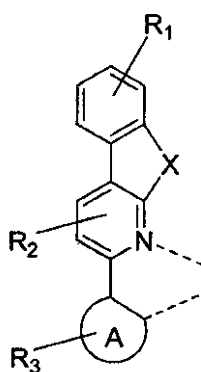
II

10

【 0 0 5 3】

別の側面では、下記構造を有する配位子を含む化合物を提供する。

【化 1 7】



III

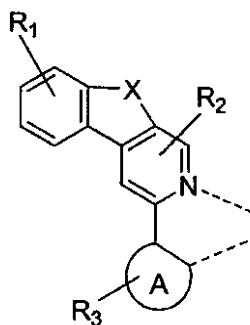
20

【 0 0 5 4】

さらに別の側面では、下記構造を有する配位子を含む化合物を提供する。

30

【化 1 8】



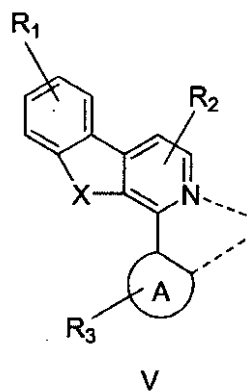
IV

40

【 0 0 5 5】

別の側面では、下記構造を有する配位子を含む化合物を提供する。

【化 19】

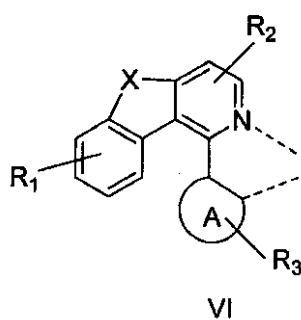


10

【 0 0 5 6 】

別の側面では、下記構造を有する配位子を含む化合物を提供する。

【化 20】

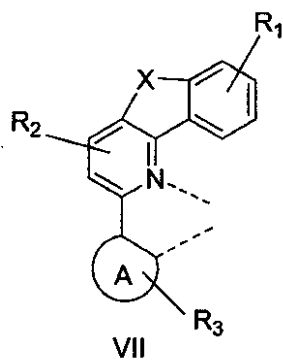


20

【 0 0 5 7 】

別の側面では、下記構造を有する配位子を含む化合物を提供する。

【化 21】



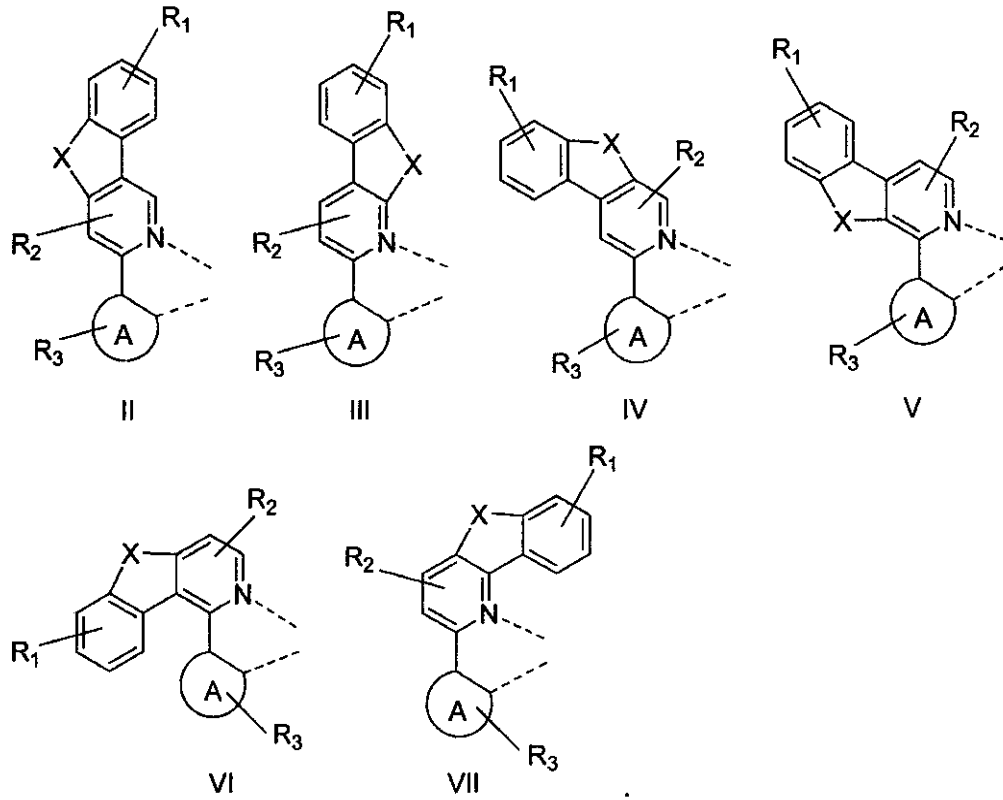
30

【 0 0 5 8 】

1つの側面では、化合物は、式： $(L)_n(L)_{3-n}Ir$ を有する。Lは、以下：

40

【化 2 2 A】

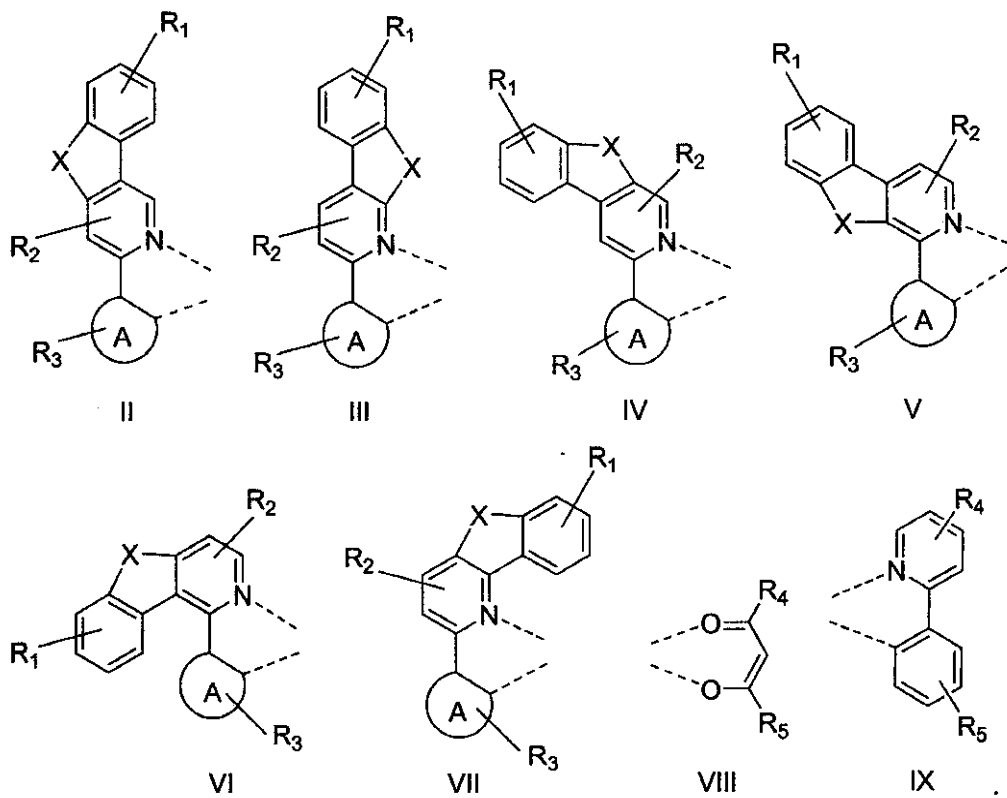


10

20

からなる群から選択される。L' は、以下：

【化 2 2 B】



30

40

からなる群から選択される。

【0059】

n は 1、2、または 3 である。n が 3 である場合、化合物はホモレプティック化合物で

50

ある。別の側面では、 n は2である。さらに別の側面では、 n は1である。 n が1または2である場合、化合物はヘテロレプティック化合物である。

【0060】

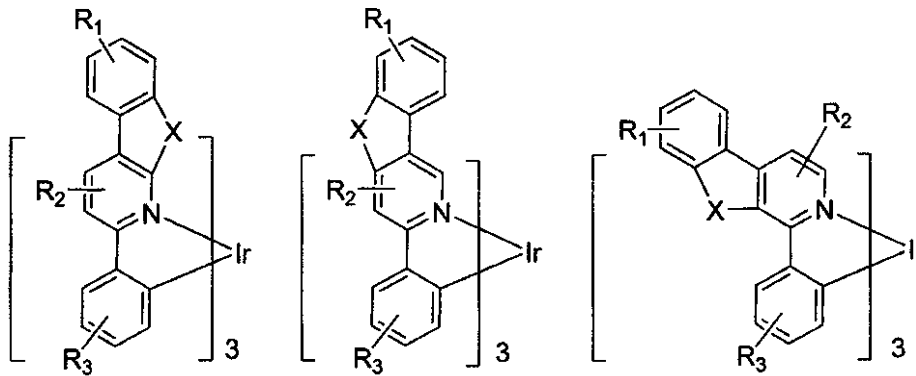
R_4 および R_5 は、モノ-、ジ-、トリ-、またはテトラ置換基を表すことができ、かつ、 R_4 および R_5 は、独立に、水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリールキル、アリール、およびヘテロアリールからなる群から選択される。好ましくは、 R_4 および R_5 は、独立に、水素およびアルキルからなる群から選択される。

【0061】

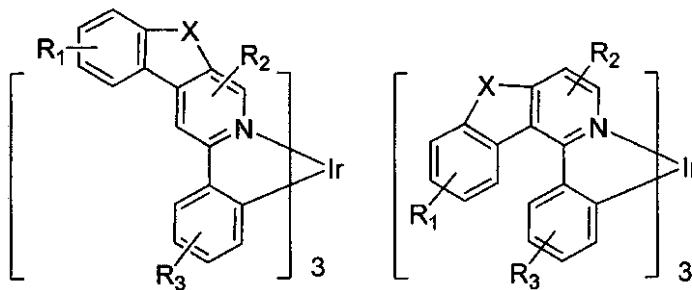
本明細書において提供する化合物には、ホモレプティック金属錯体およびヘテロレプティック金属錯体が含まれる。特に、下記群から選択される化合物を提供する。

10

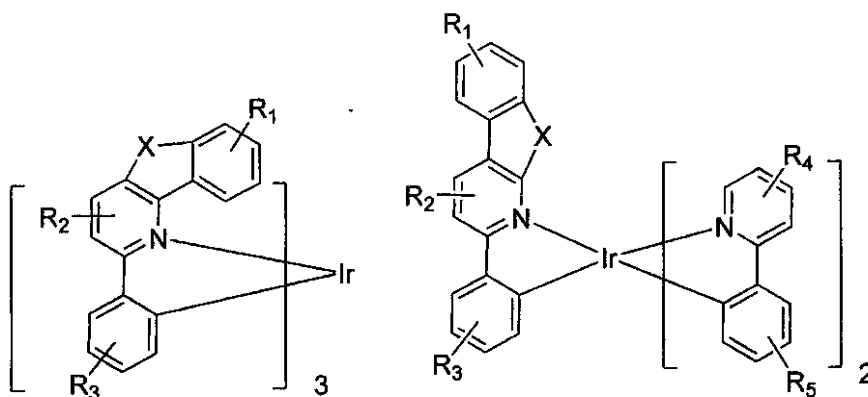
【化23A】



20

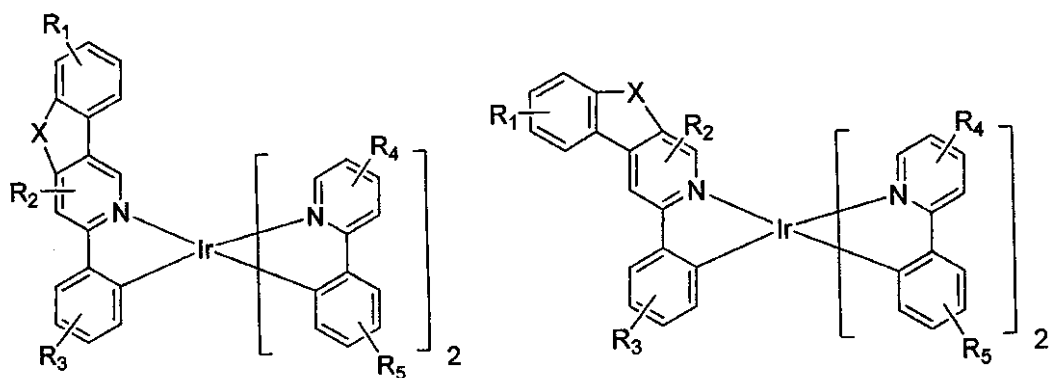


30

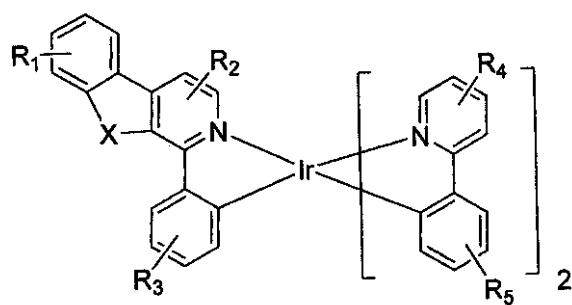


40

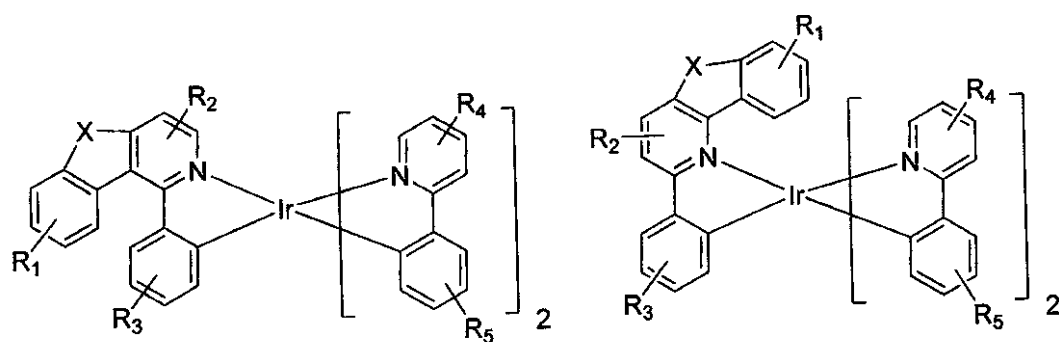
【化 2 3 B】



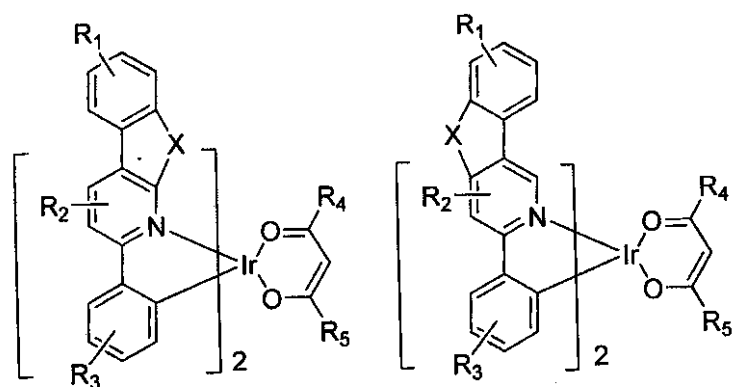
10



20

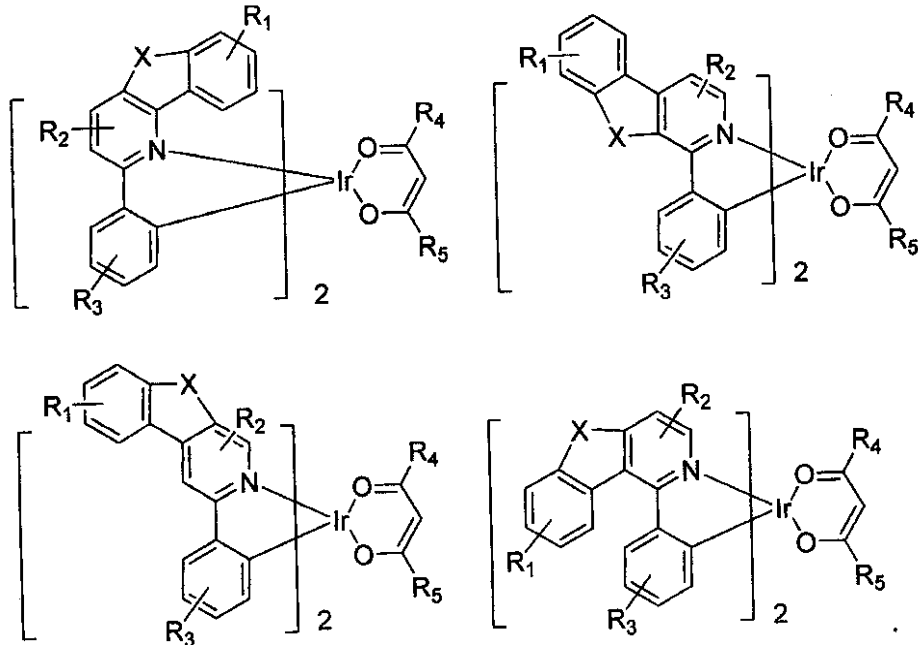


30



40

【化 2 3 C】



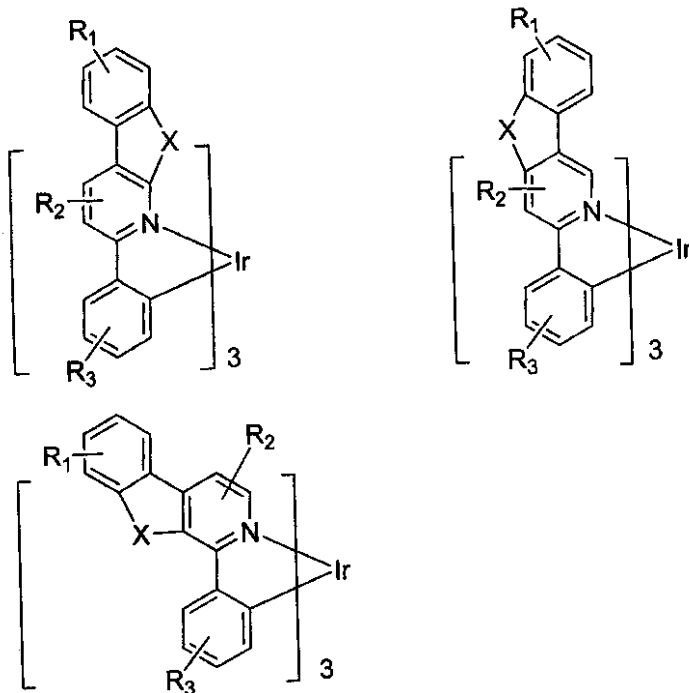
10

【 0 0 6 2 】

1つの側面では、フェニルピリジン配位子、ピリジルアザDBX配位子、または両方の配位子を含む化合物が好ましい。これらの化合物には、新規な配位子を含むホモレプティックおよびヘテロレプティックの両方の金属錯体が含まれる。特に、下記群から選択される化合物が含まれる。

20

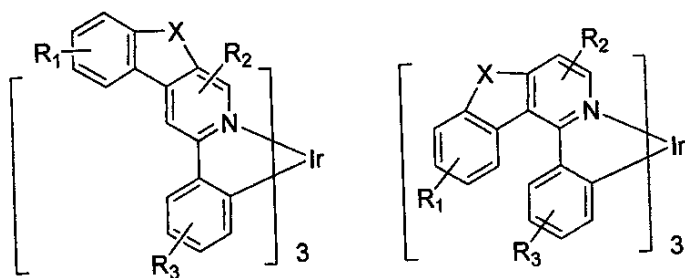
【化 2 4 A】



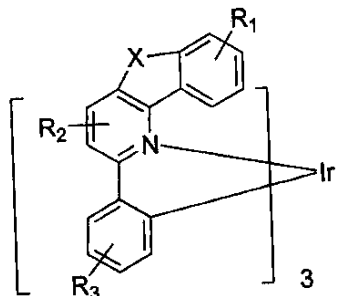
30

40

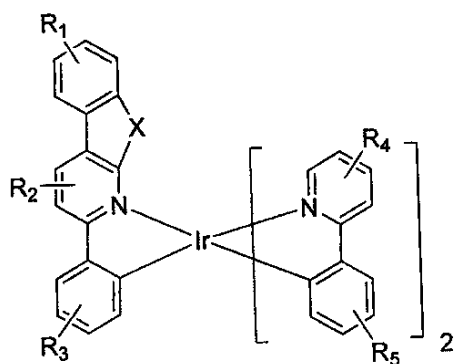
【化 2 4 B】



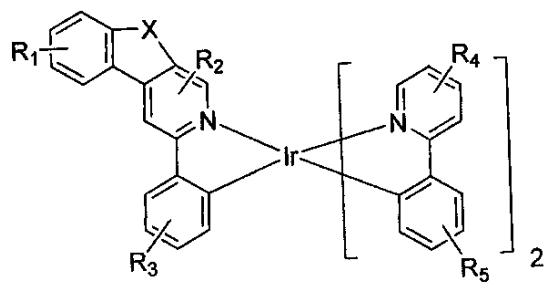
10



20

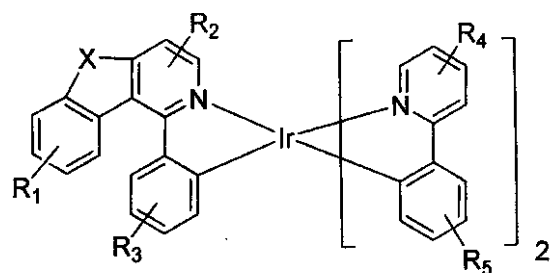


30

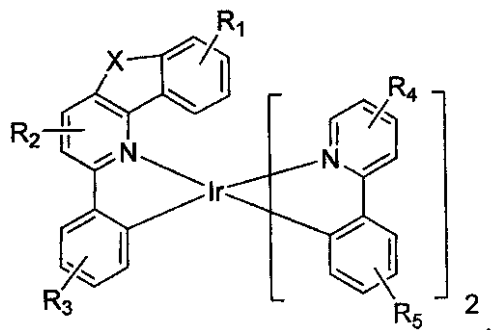


40

【化 2 4 C】



10

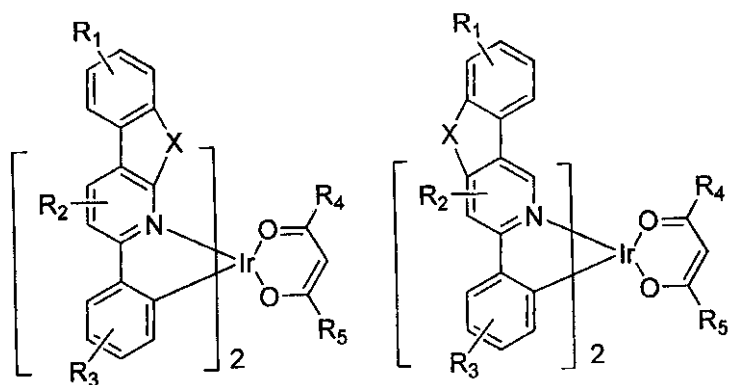


【 0 0 6 3】

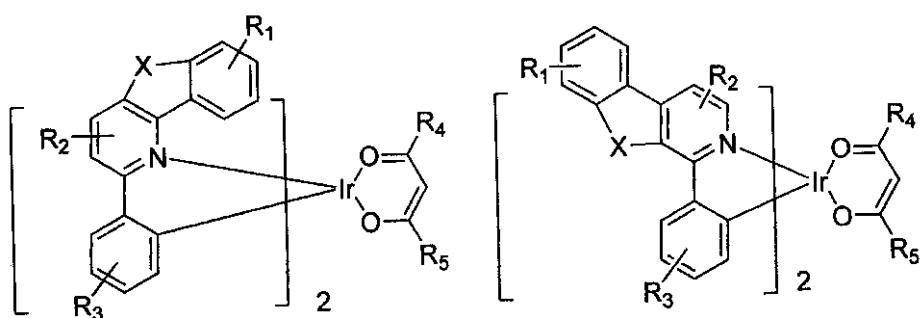
20

別の側面では、ピリジルアザジベンゾ置換配位子および補助配位子（例えば、acacなど）を含む化合物が好ましい。特に、下記群から選択される化合物が好ましい。

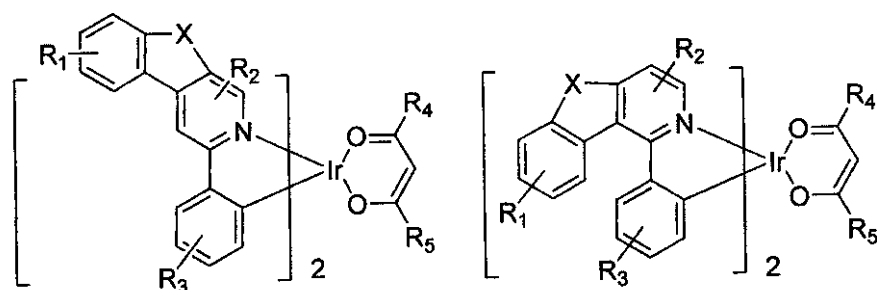
【化 2 5】



10



20



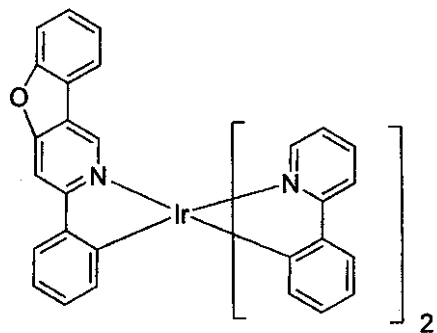
30

【 0 0 6 4】

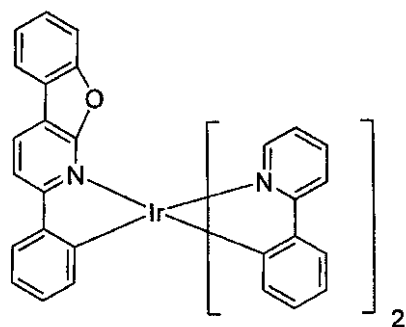
式Iを有する配位子を含む新規な化合物の特定例には、下記からなる群から選択される化合物が含まれる。

【 0 0 6 5】

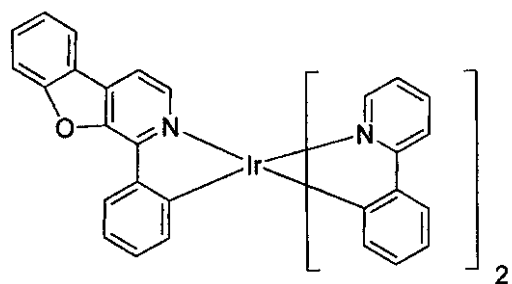
【化 2 6 A】



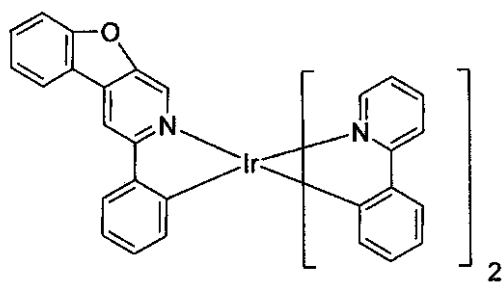
化合物1



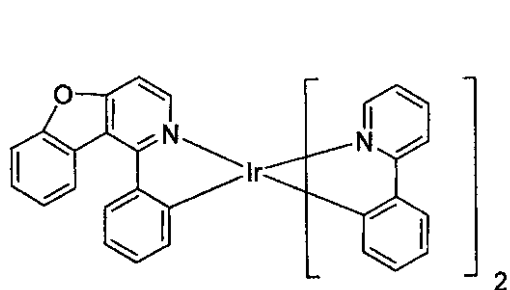
化合物2



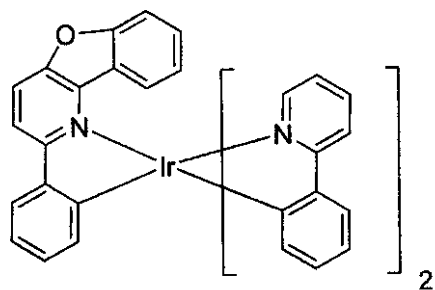
化合物3



化合物4



化合物5



化合物6

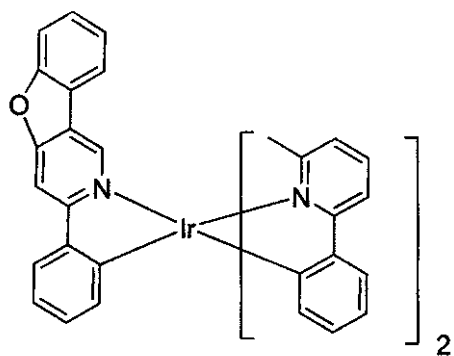
【 0 0 6 6 】

10

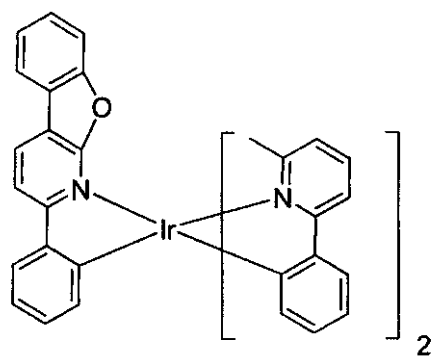
20

30

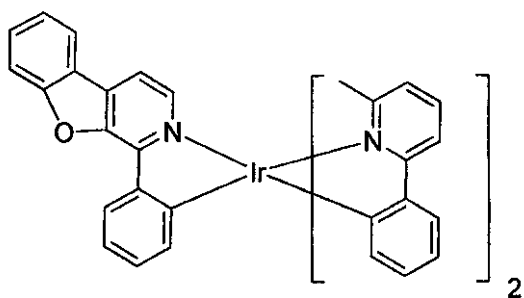
【化 2 6 B】



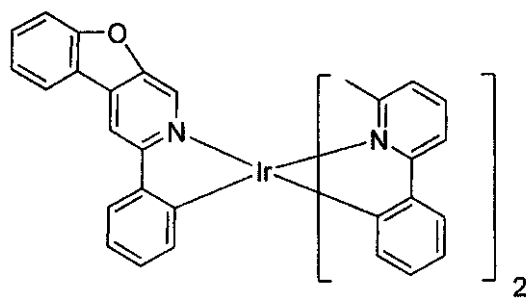
化合物7



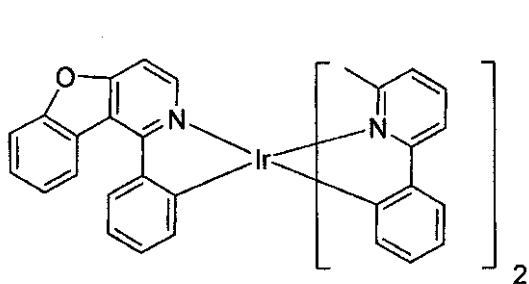
化合物8



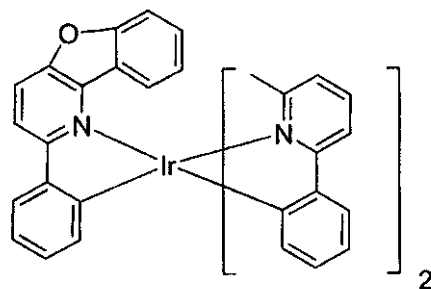
化合物9



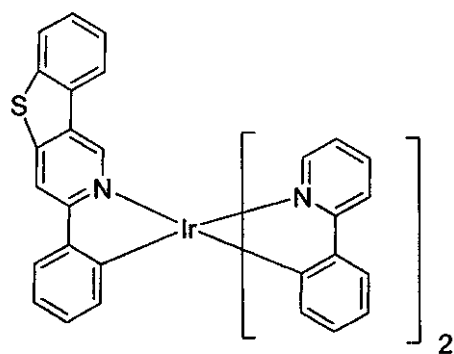
化合物10



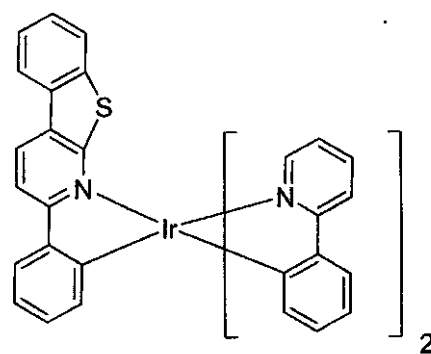
化合物11



化合物12



化合物13



化合物14

【 0 0 6 7 】

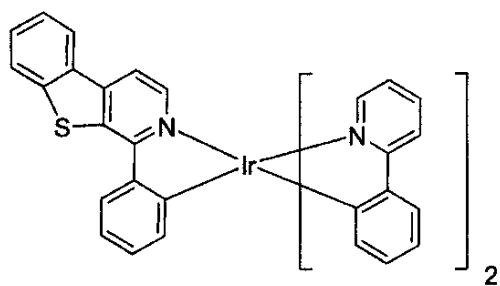
10

20

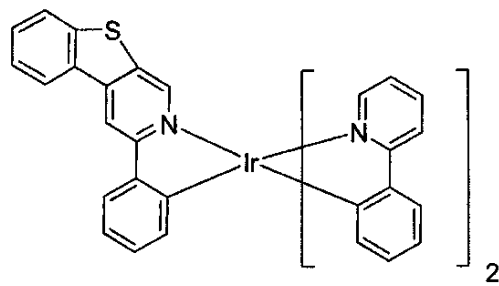
30

40

【化 2 6 C】

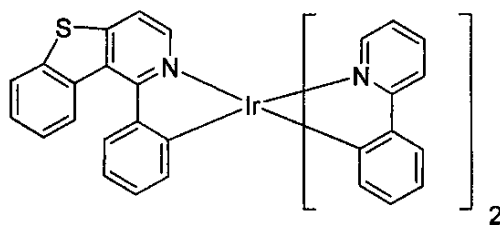


化合物15

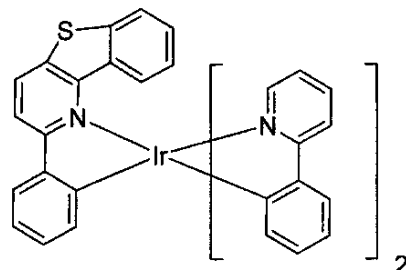


化合物16

10

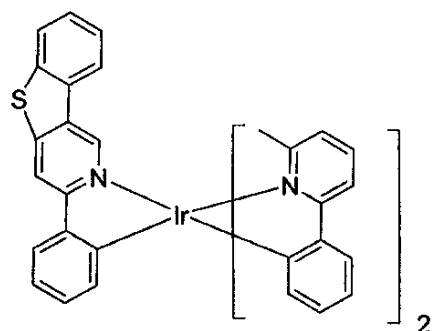


化合物17

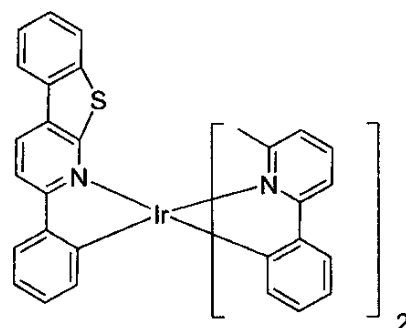


化合物18

20

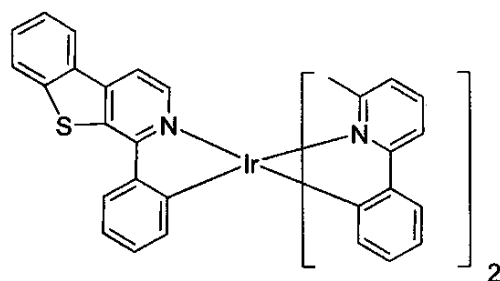


化合物19

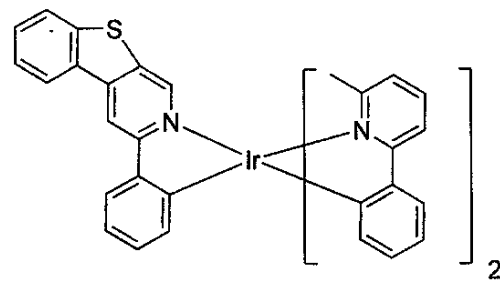


化合物20

30



化合物21

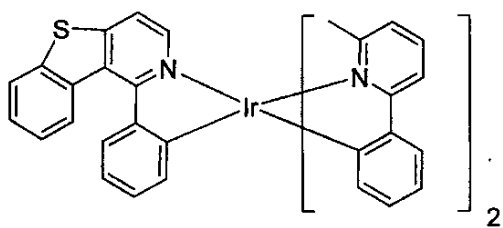


化合物22

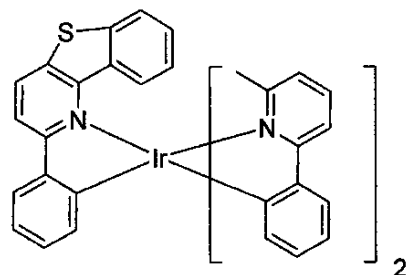
40

【 0 0 6 8 】

【化 2 6 D】

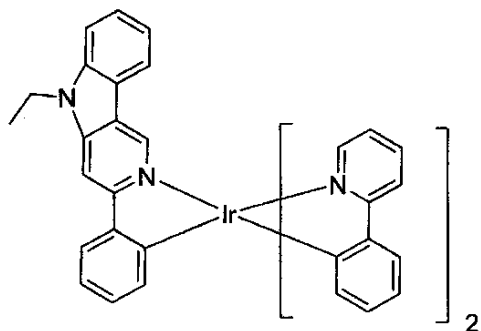


化合物23

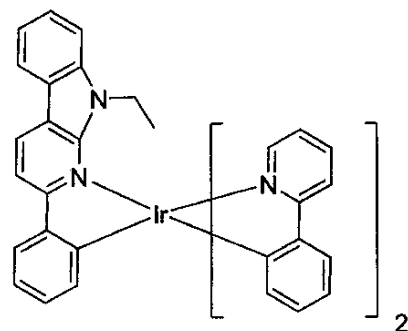


化合物24

10

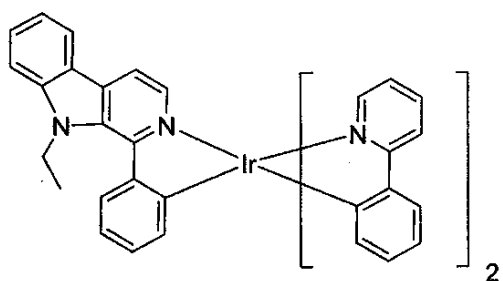


化合物25

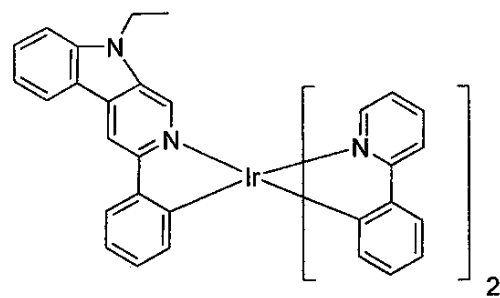


化合物26

20

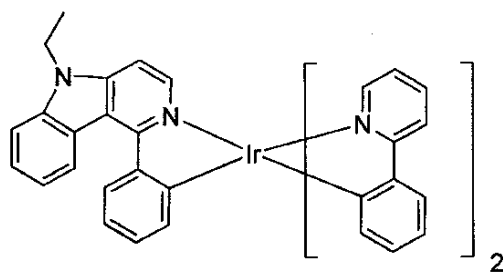


化合物27

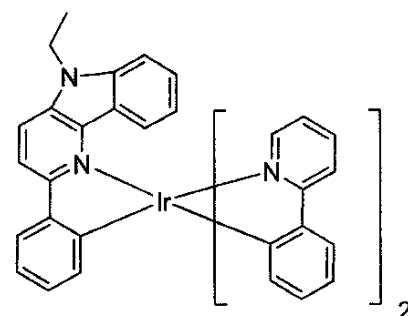


化合物28

30



化合物29

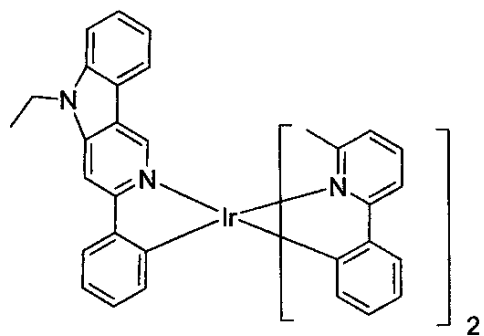


化合物30

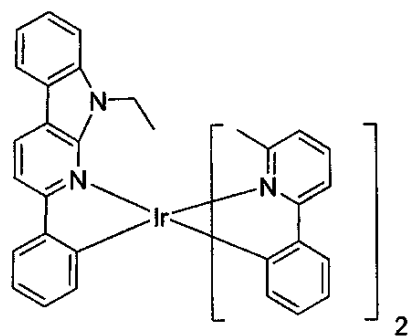
40

【 0 0 6 9 】

【化 2 6 E】

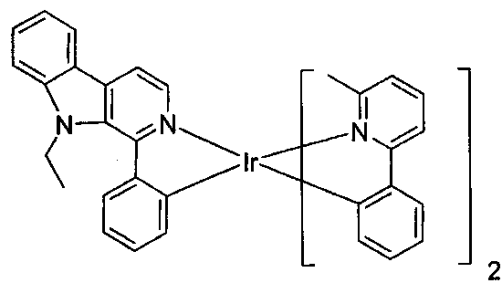


化合物31

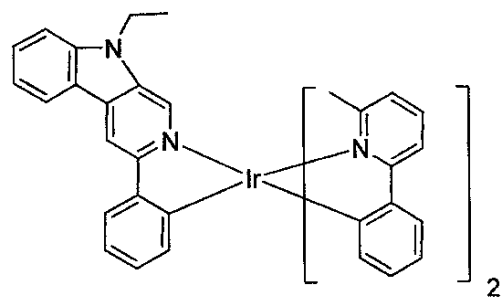


化合物32

10

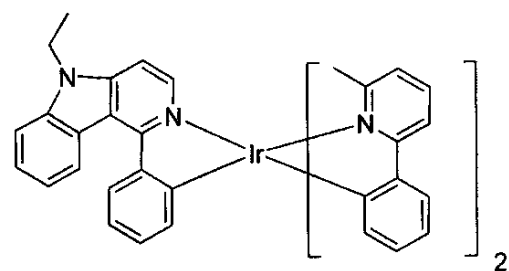


化合物33

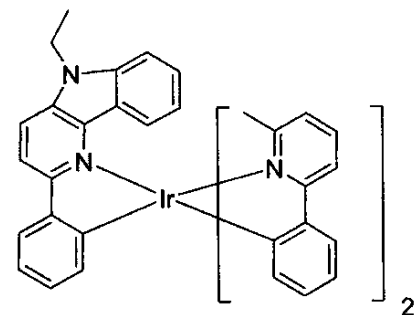


化合物34

20

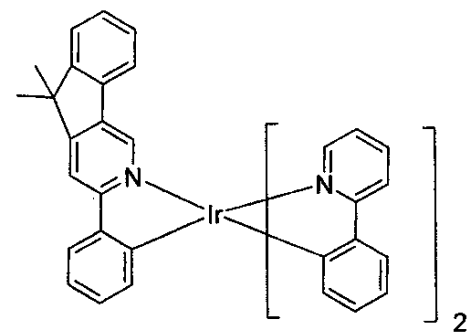


化合物35

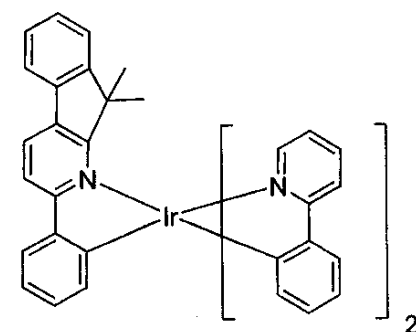


化合物36

30



化合物37

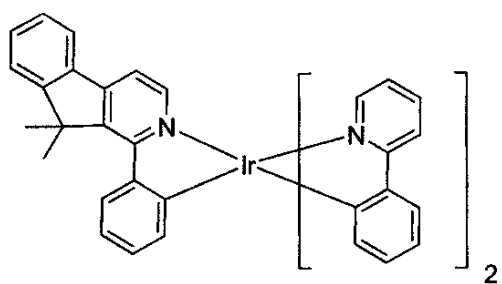


化合物38

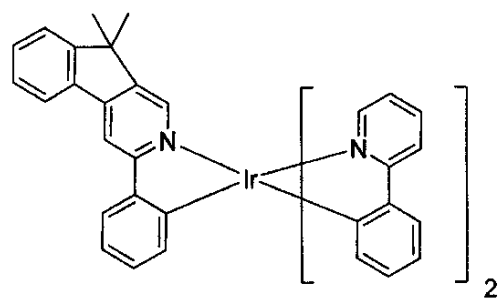
40

【 0 0 7 0 】

【化 2 6 F】

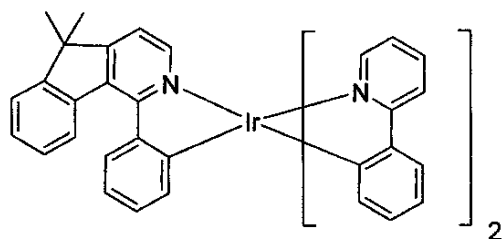


化合物39

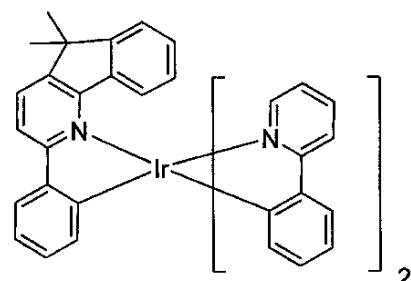


化合物40

10

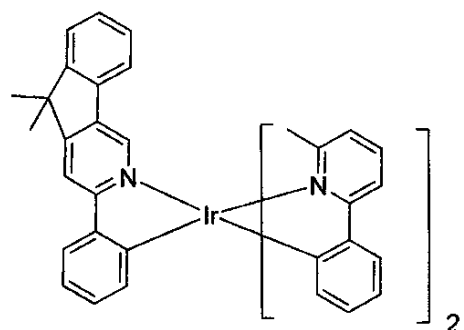


化合物41

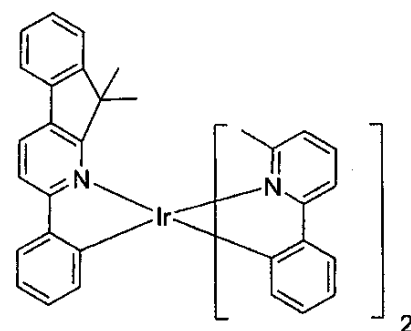


化合物42

20

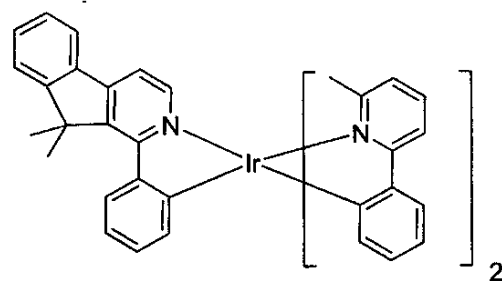


化合物43

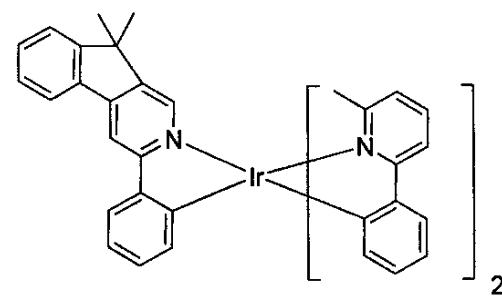


化合物44

30



化合物45

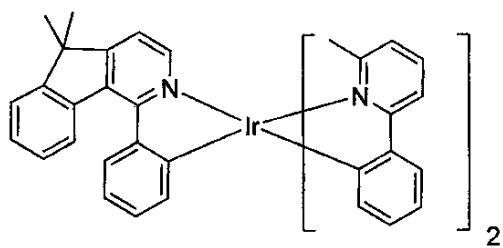


化合物46

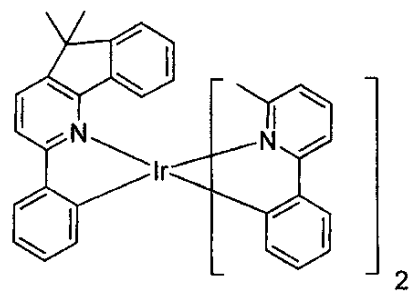
40

【 0 0 7 1 】

【化 2 6 G】

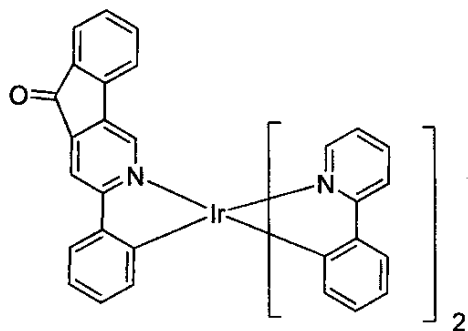


化合物47

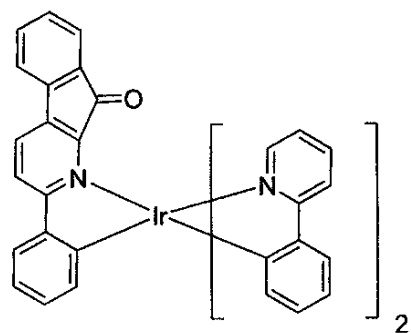


化合物48

10

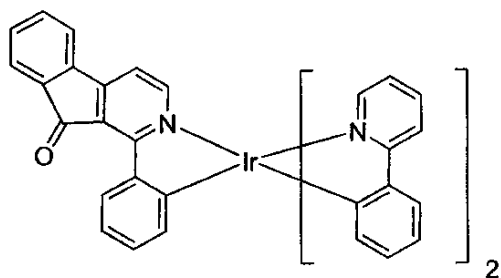


化合物49

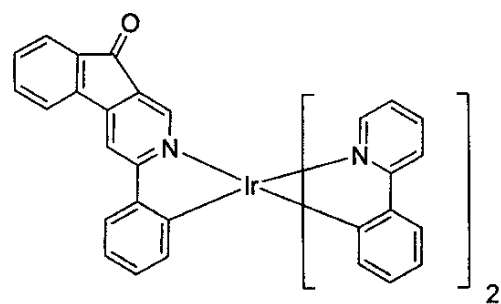


化合物50

20

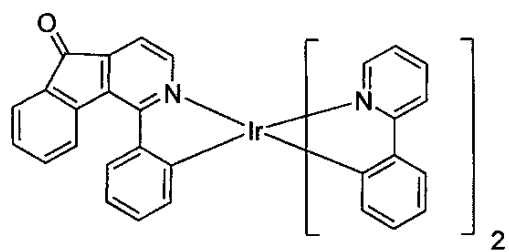


化合物51

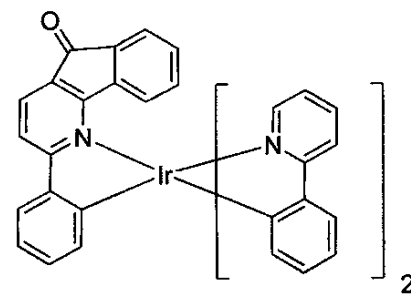


化合物52

30



化合物53

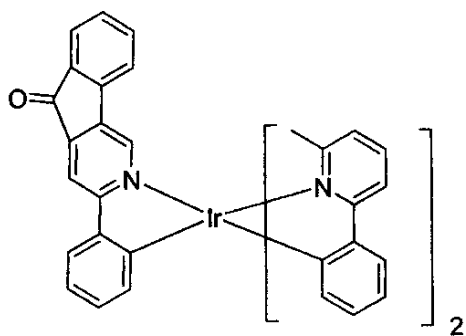


化合物54

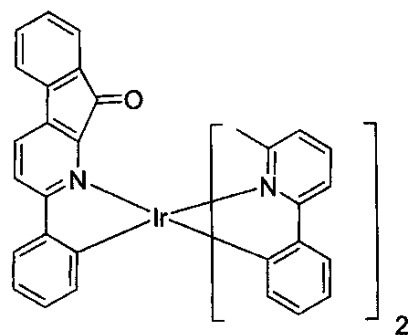
40

【 0 0 7 2 】

【化 2 6 H】

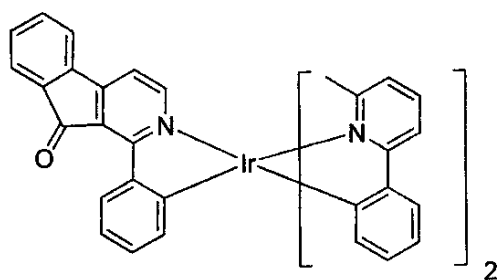


化合物55

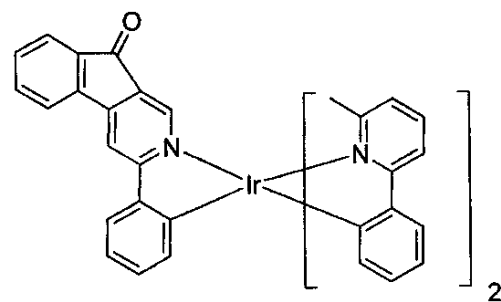


化合物56

10

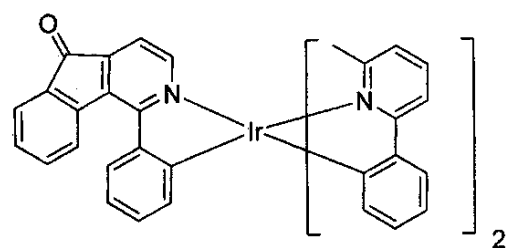


化合物57

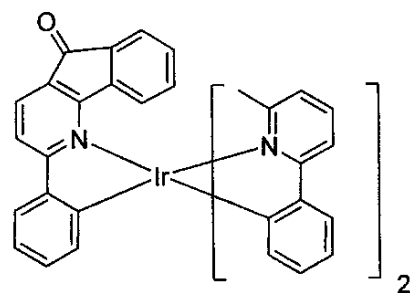


化合物58

20

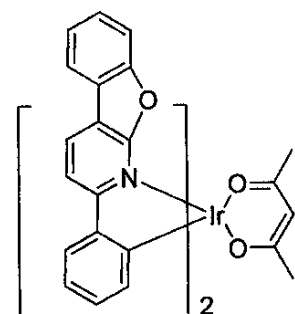


化合物59

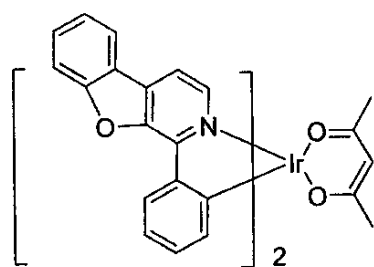


化合物60

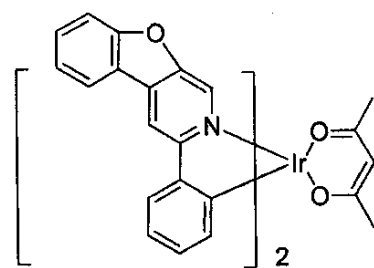
30



化合物61



化合物62

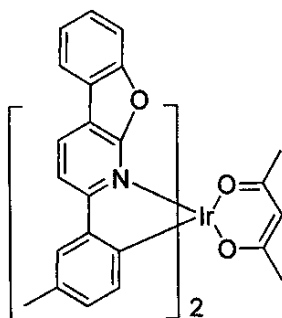


化合物63

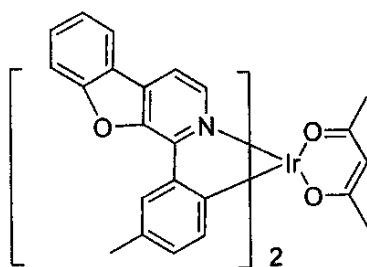
40

【 0 0 7 3 】

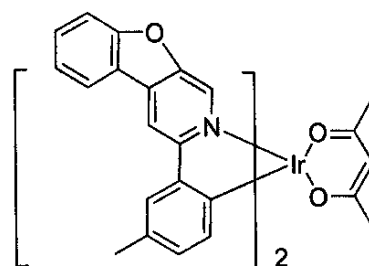
【化 2 6 I】



化合物64

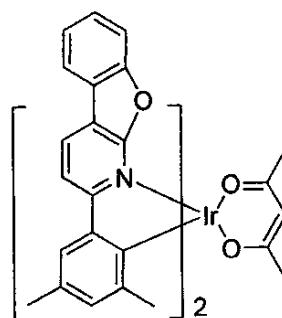


化合物65

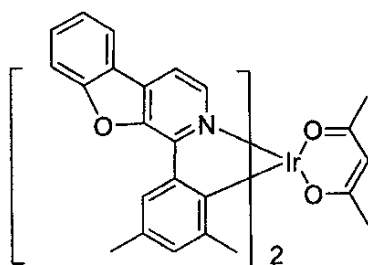


化合物66

10

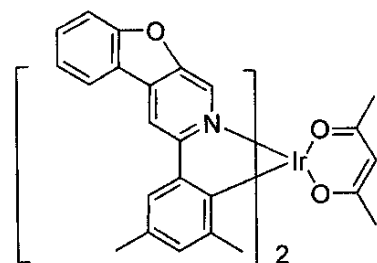


化合物67



化合物68

20

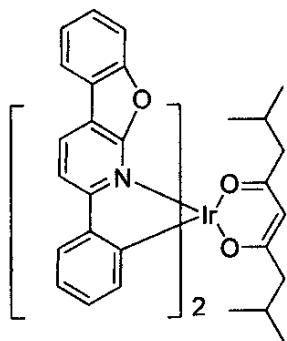


化合物69

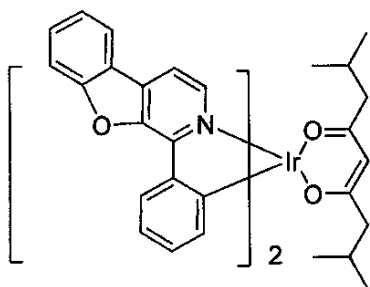
30

【 0 0 7 4 】

【化 2 6 J】

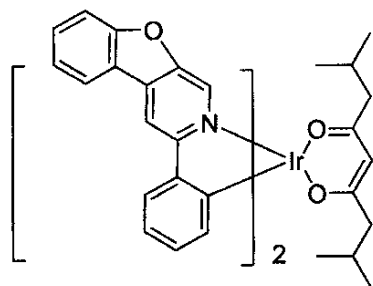


化合物70



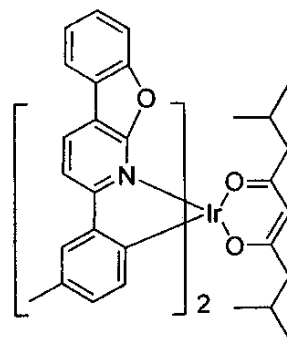
化合物71

10

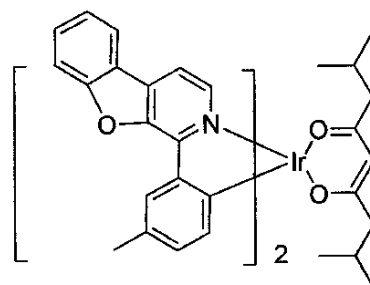


化合物72

20

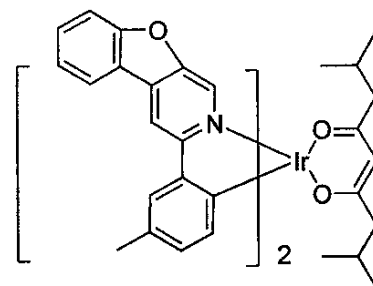


化合物73



化合物74

30

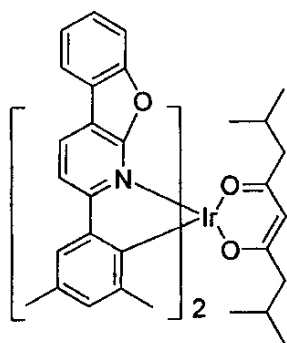


化合物75

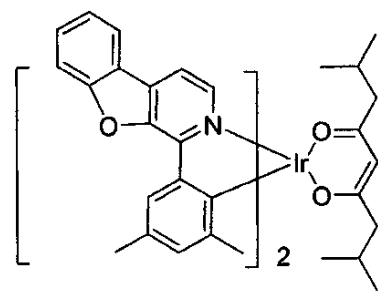
40

【 0 0 7 5 】

【化 2 6 K】

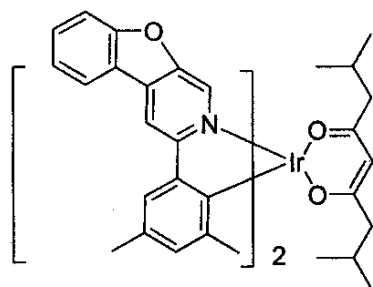


化合物76



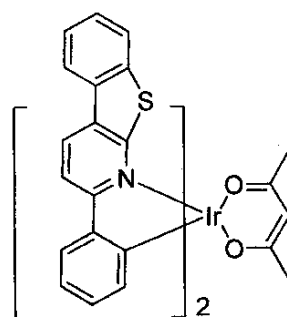
化合物77

10

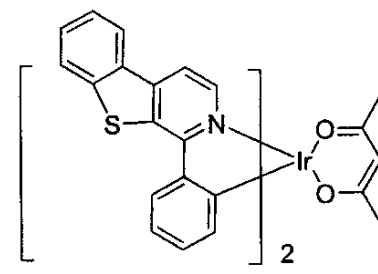


化合物78

20

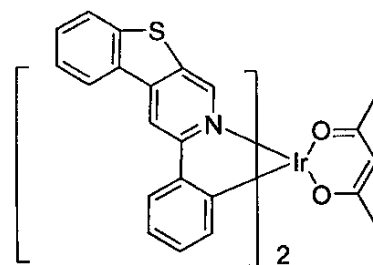


化合物79



化合物80

30

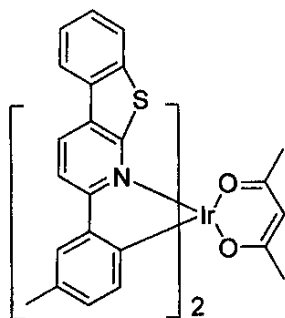


化合物81

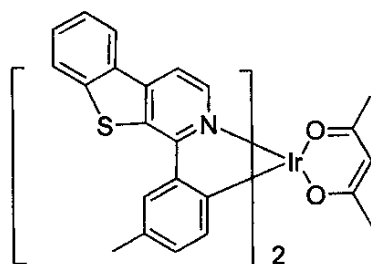
40

【 0 0 7 6 】

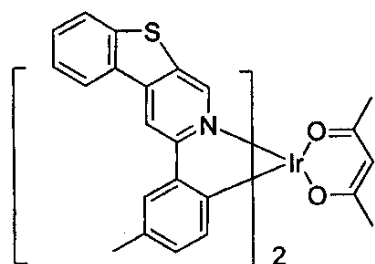
【化 2 6 L】



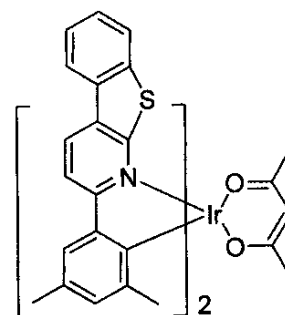
化合物82



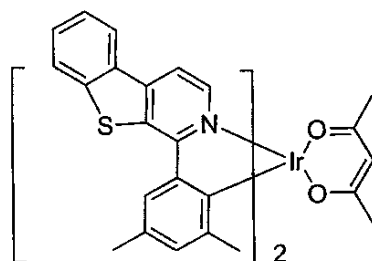
化合物83



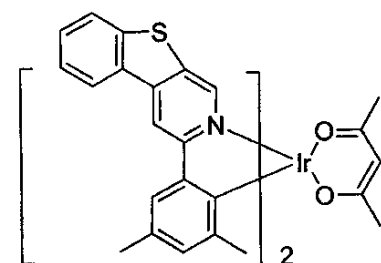
化合物84



化合物85



化合物86



化合物87

【 0 0 7 7 】

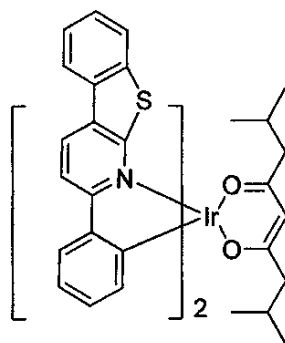
10

20

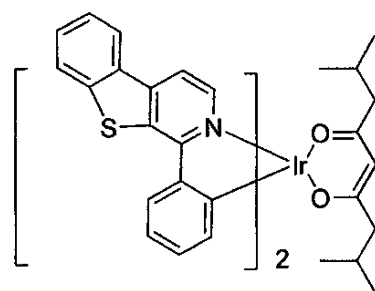
30

40

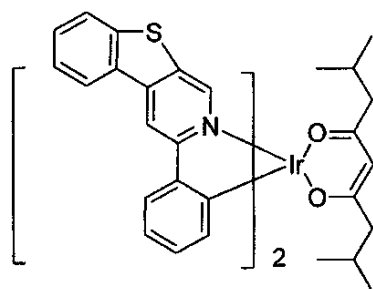
【化 2 6 M】



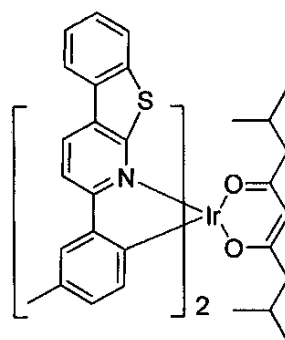
化合物88



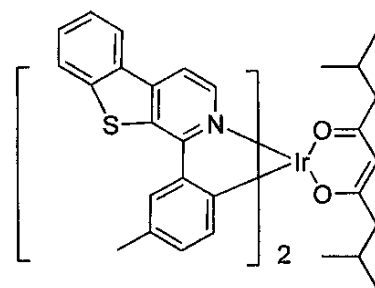
化合物89



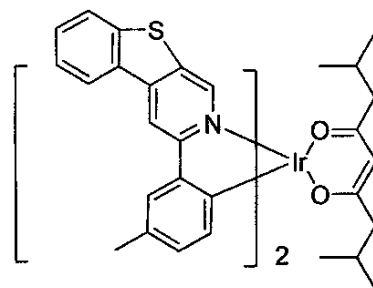
化合物90



化合物91



化合物92



化合物93

【 0 0 7 8 】

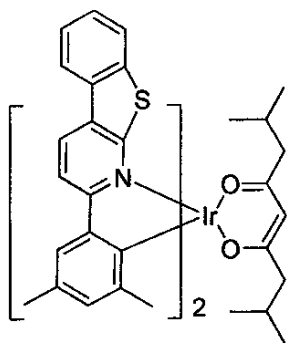
10

20

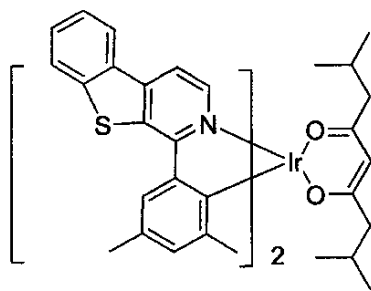
30

40

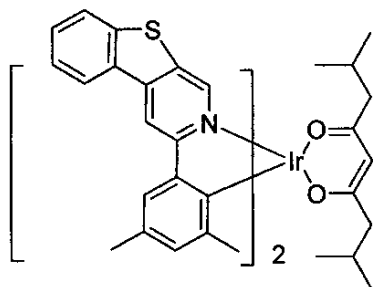
【化 2 6 N】



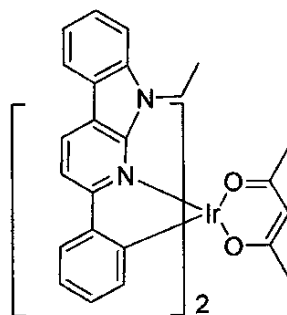
化合物94



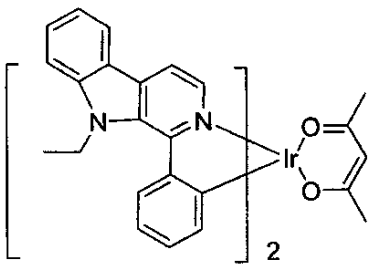
化合物95



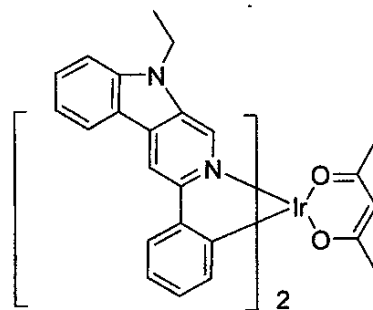
化合物96



化合物97



化合物98



化合物99

【 0 0 7 9 】

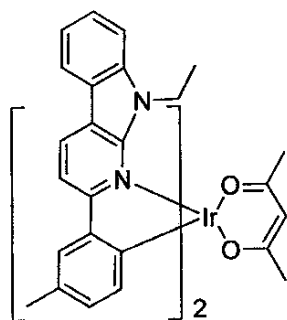
10

20

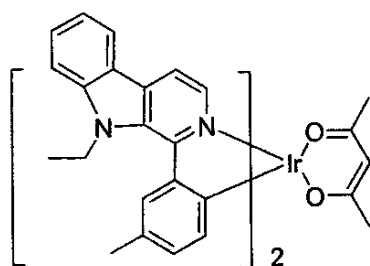
30

40

【化 2 6 0】

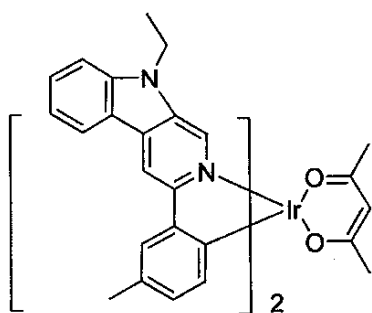


化合物100



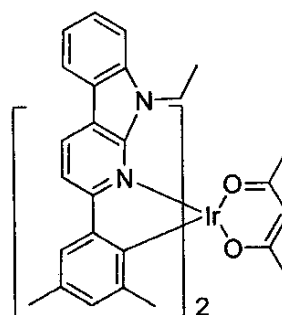
化合物101

10

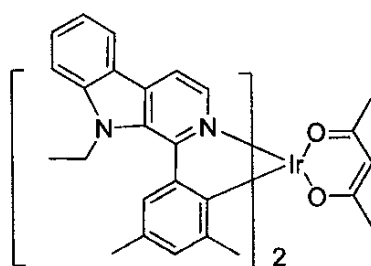


化合物102

20

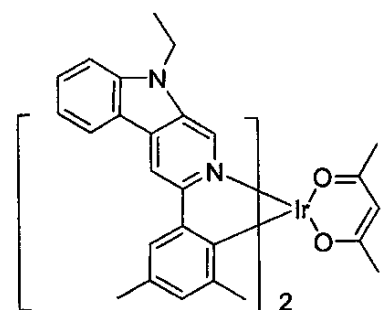


化合物103



化合物104

30

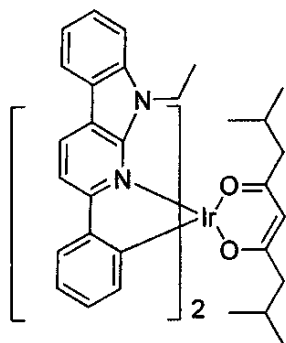


化合物105

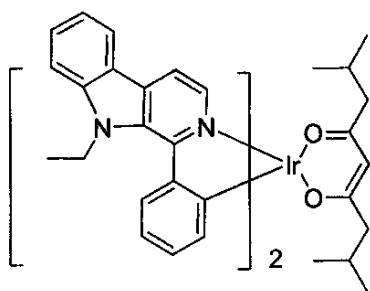
40

【 0 0 8 0 】

【化 2 6 P】

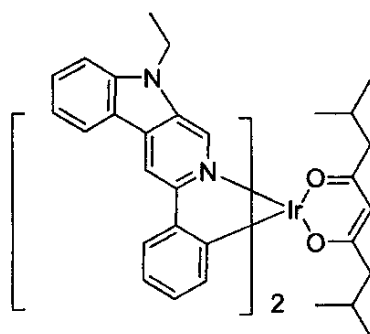


化合物106



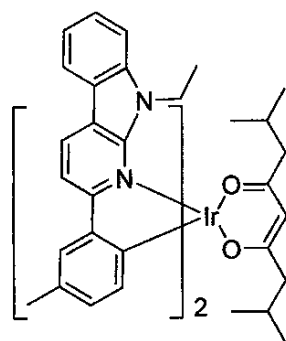
化合物107

10

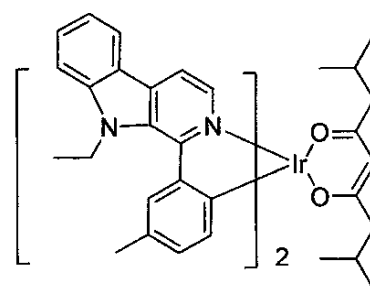


化合物108

20

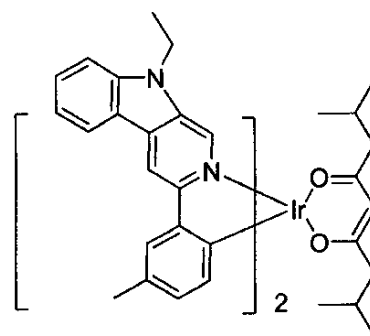


化合物109



化合物110

30

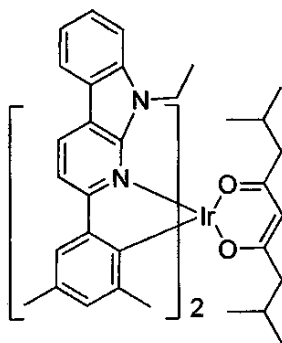


化合物111

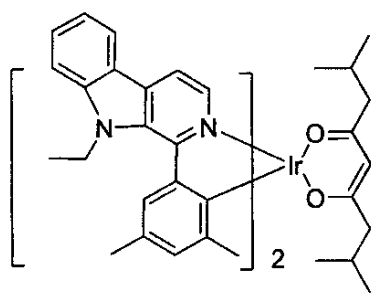
40

【 0 0 8 1 】

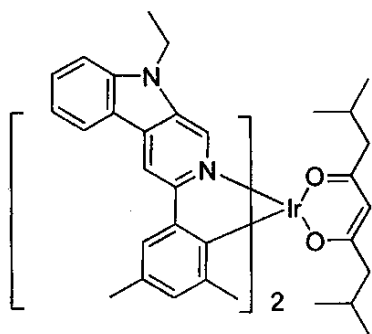
【化 2 6 Q】



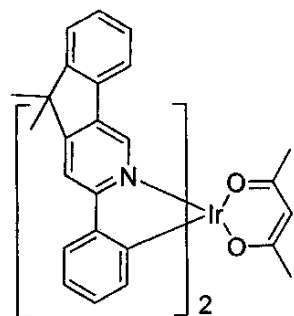
化合物112



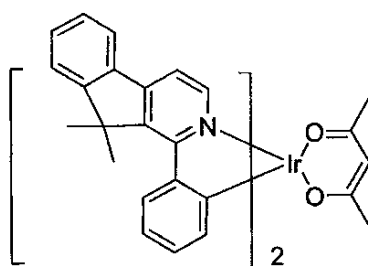
化合物113



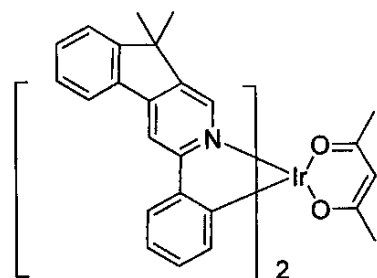
化合物114



化合物115



化合物116



化合物117

【 0 0 8 2 】

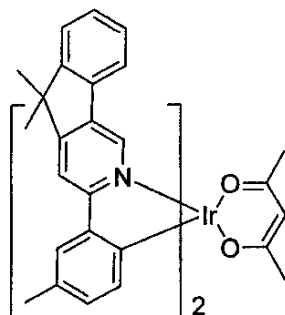
10

20

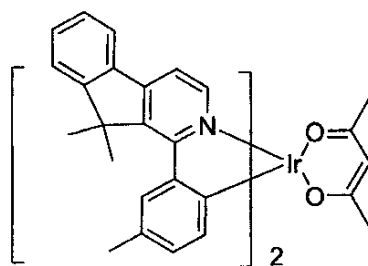
30

40

【化 2 6 R】

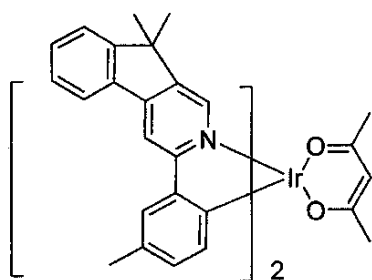


化合物118



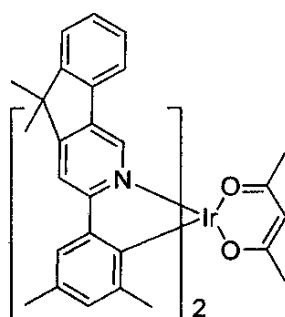
化合物119

10

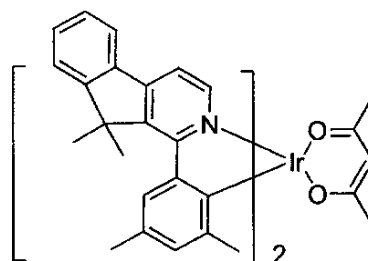


化合物120

20

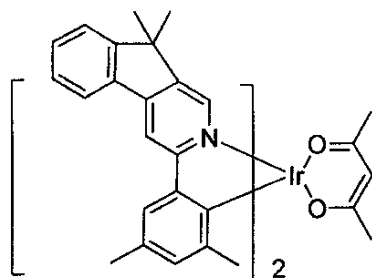


化合物121



化合物122

30

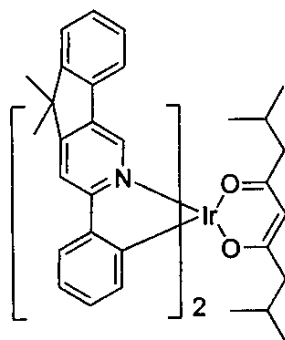


化合物123

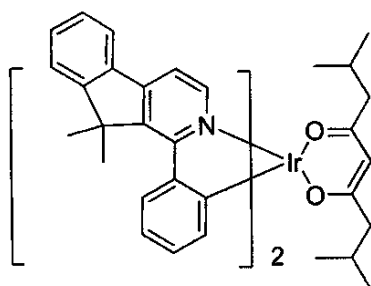
40

【 0 0 8 3 】

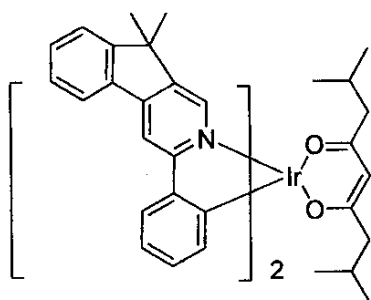
【化 2 6 S】



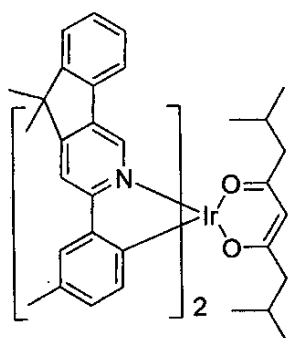
化合物124



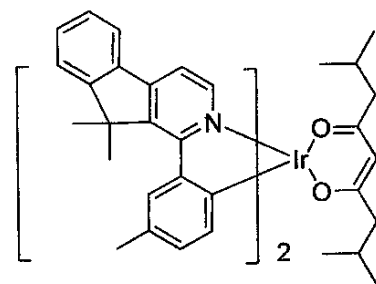
化合物125



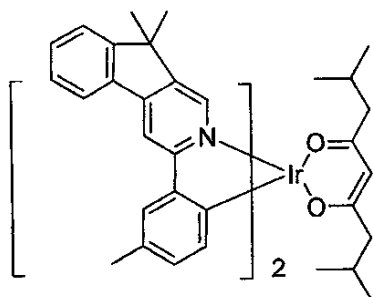
化合物126



化合物127



化合物128



化合物129

【 0 0 8 4 】

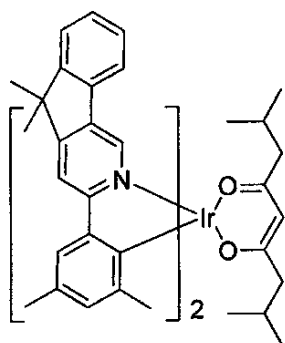
10

20

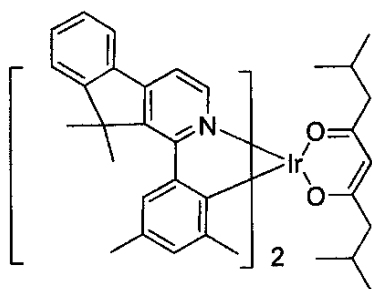
30

40

【化 2 6 T】

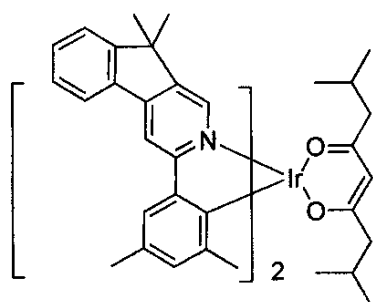


化合物130



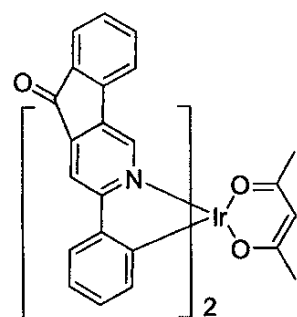
化合物131

10

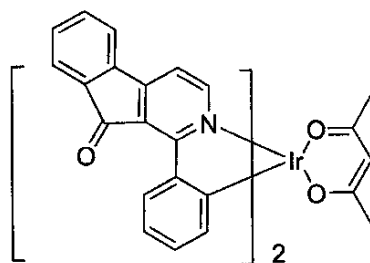


化合物132

20

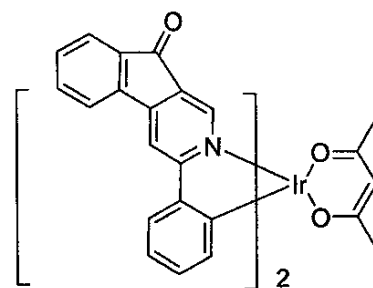


化合物133



化合物134

30

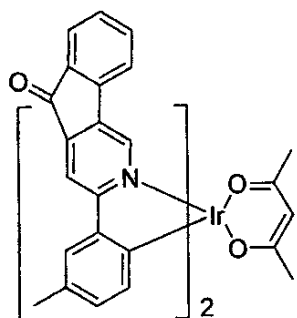


化合物135

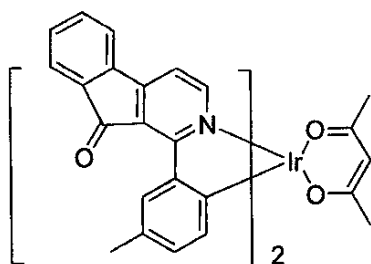
40

【 0 0 8 5 】

【化 2 6 U】

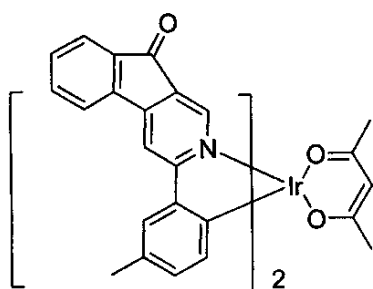


化合物136



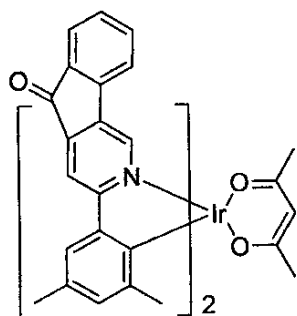
化合物137

10

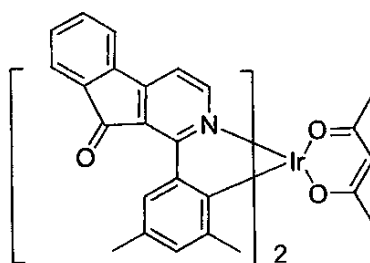


化合物138

20

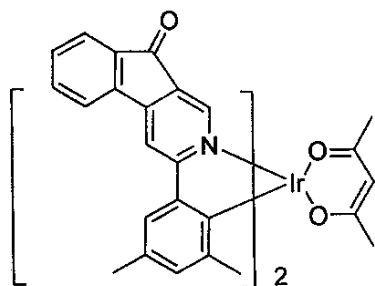


化合物139



化合物140

30

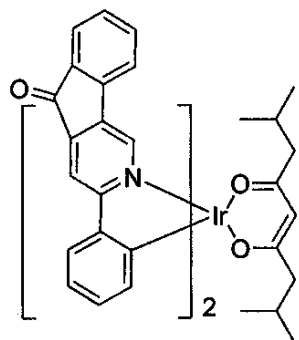


化合物141

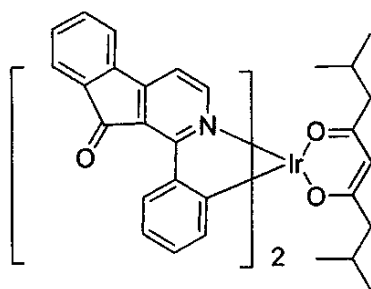
40

【 0 0 8 6 】

【化 2 6 V】

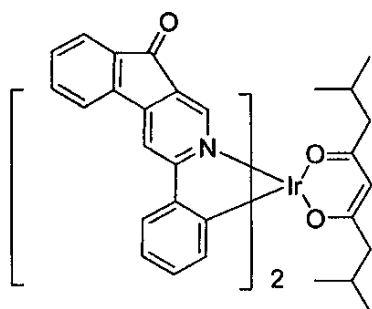


化合物142



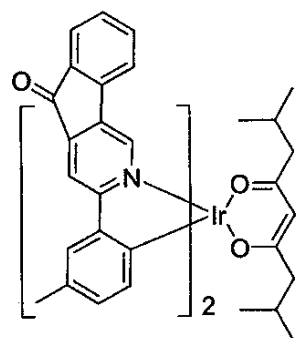
化合物143

10

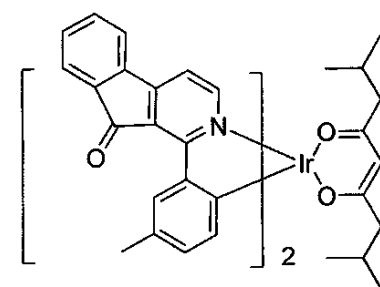


化合物144

20

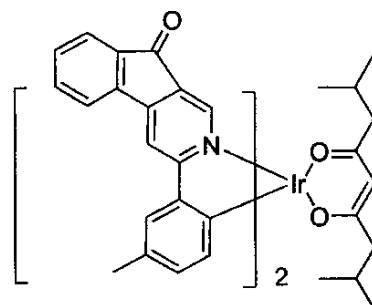


化合物145



化合物146

30

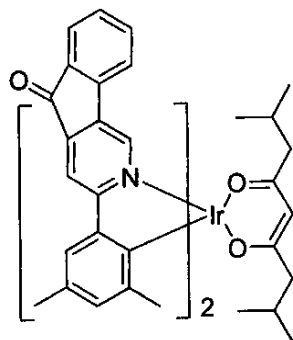


化合物147

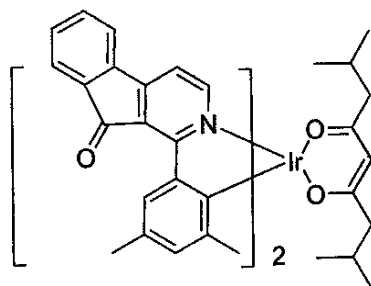
40

【 0 0 8 7 】

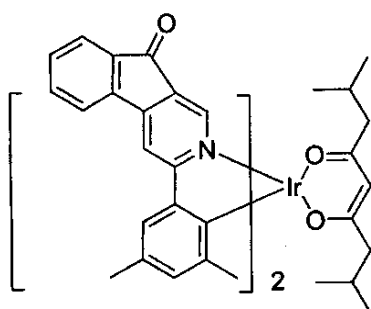
【化 2 6 W】



化合物148



化合物149



化合物150

【 0 0 8 8 】

上で議論したとおり、アザDBX配位子を置換するために用いる化学基を用いて、化合物が改良された化合物およびデバイスをもたらす特性を調整することができる。例えば、アザDBX配位子を、さまざまなヘテロ原子で置換することができる。1つの側面では、XがOである化合物を提供する。アザジベンゾフラン配位子を有するこのような化合物は、改良された安定性および改良された効率を有し得る。XがOである化合物を含むデバイスは、改良された安定性、改良された効率、および長い寿命を実現し得るためとりわけ好ましい。

【 0 0 8 9 】

別の側面では、XがSである化合物を提供する。XがSである代表的な化合物には、化合物13～24および/または化合物79～96が含まれる。アザジベンゾチオフェン配位子を有するこのような化合物は、改良された安定性、改良された効率、および長い寿命を有し得る。XがSである化合物を含むデバイスは、改良された効率および長い寿命の高度に望ましい組合せを実現し得るためとりわけ好ましい。

【 0 0 9 0 】

別の側面では、XがNRである化合物を提供する。XがNRである代表的な化合物には、化合物25～36および/または化合物97～114が含まれる。アザカルバゾール配位子を有するこのような化合物は、改良された効率および長い寿命を有し得る。

【 0 0 9 1 】

アザDBX配位子は、炭素含有化学基で置換されてもよい。1つの側面では、XがCRRである化合物を提供する。XがCRRである代表的な化合物には、化合物37～48および/または化合物115～132が含まれる。別の側面では、XがC=Oである化合物を提供する。XがC=Oである代表的な化合物には、化合物49～60および/または化合物133～150が含まれる。

【 0 0 9 2 】

加えて、有機発光デバイスも提供する。このデバイスは、アノード、カソード、およびアノードとカソードとの間に配置された有機発光層を含む。この有機発光層は、上述した

10

20

30

40

50

ように、式 I の構造を有する配位子を含む化合物を含む。式 I を有する化合物について記述した好ましいヘテロ原子および置換基の選択は、式 I の化合物を含むデバイスのための使用にも好ましい。記述した置換基の選択には、X、A、 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、および R_5 についての選択が含まれる。

【0093】

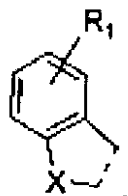
A は、5 員環または 6 員環の芳香族環またはヘテロ芳香族環である。1 つの側面では、好ましくは、A はベンゼンである。別の側面では、好ましくは、A は、フラン、チオフェン、およびピロールからなる群から選択される。

【0094】

RA は、下記構造：

10

【化 27】



を有する置換基であり、 R_A は、式 I のピリジン環に縮合している。X は、CRR、C=O、BR、NR、O、S、および Se からなる群から選択される。 R および R' は、独立に、水素およびアルキルから選択される。 R_1 、 R_2 、および R_3 は、モノ-、ジ-、トリ-、またはテトラ置換基を表すことができ、 R_1 、 R_2 、および R_3 は、それぞれ独立に、水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリールキル、アリール、およびヘテロアリールからなる群から選択される。この配位子は、40 より大きい原子量を有する金属に配位する。好ましくは、金属は、Ir である。

20

【0095】

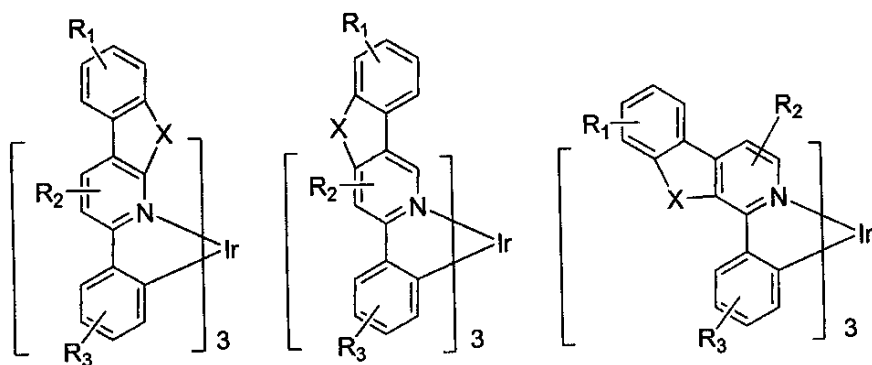
1 つの側面では、化合物が構造 II を有する配位子を含むデバイスを提供する。別の側面では、化合物が構造 III を有する配位子を含むデバイスを提供する。さらに別の側面では、化合物が構造 IV を有する配位子を含むデバイスを提供する。さらに別の側面では、化合物が構造 V を有する配位子を含むデバイスを提供する。さらに別の側面では、化合物が構造 VI を有する配位子を含むデバイスを提供する。さらに別の側面では、化合物が構造 VII

30

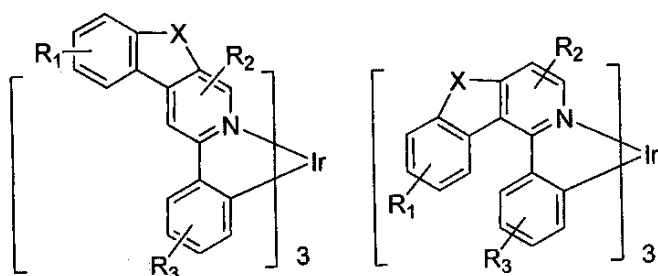
【0096】

1 つの側面では、化合物が下記からなる群から選択されるデバイスを提供する。

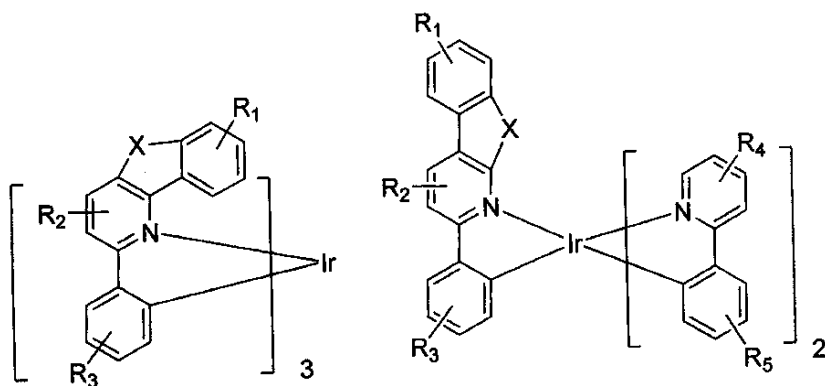
【化 2 8 A】



10

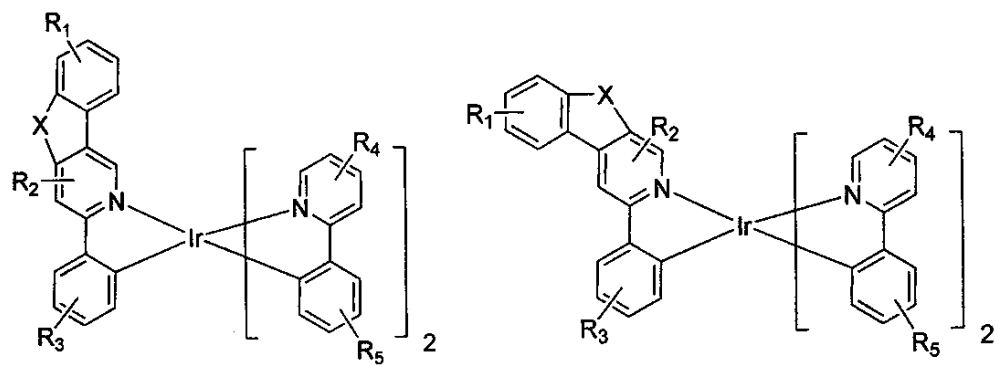


20

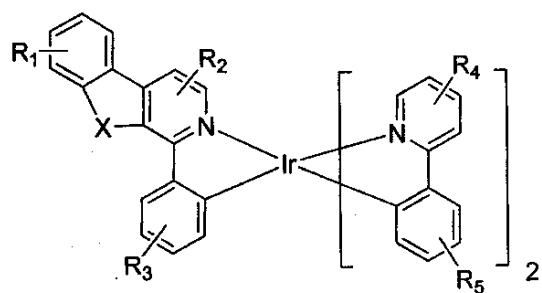


30

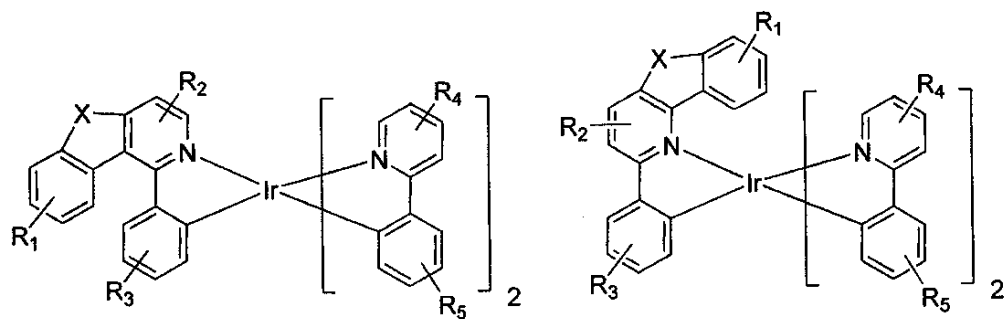
【化 28 B】



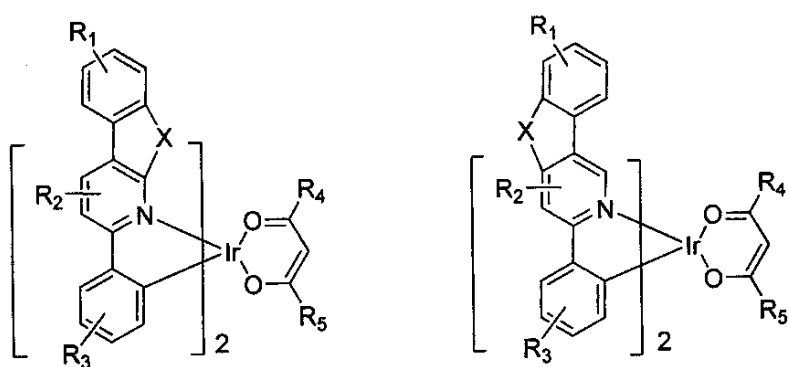
10



20

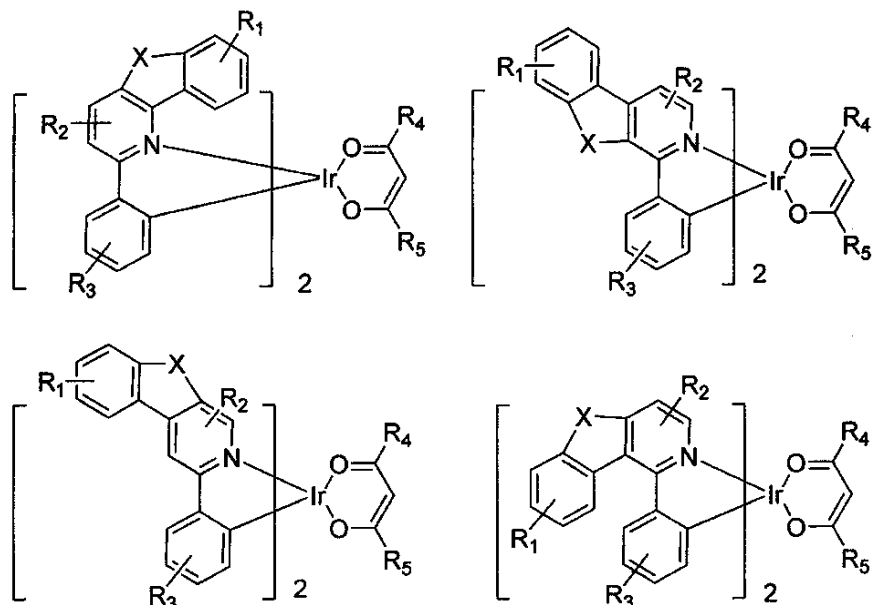


30



40

【化 28 C】



10

【0097】

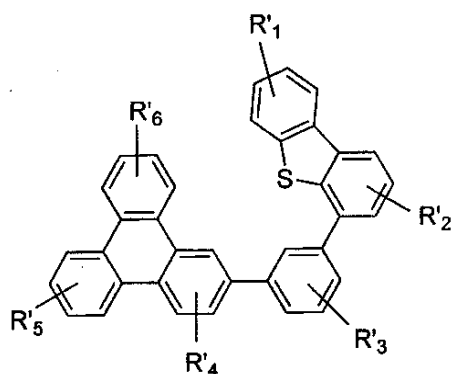
特定のデバイスとして、上に示した化合物 1 ~ 150 からなる群から選択される化合物を含む有機層を含むデバイスを提供する。

20

【0098】

1つの側面では、有機層は発光層であり、化合物は、発光ドーパントである。この有機層さらにホストを含んでいてよい。好ましくは、このホストは、下記構造を有する。

【化 29】



30

式中、 R_1' 、 R_2' 、 R_3' 、 R_4' 、 R_5' 、および R_6' は、モノ-、ジ-、トリ-、またはテトラ置換基を表し、かつ、 R_1' 、 R_2' 、 R_3' 、 R_4' 、 R_5' 、および R_6' は、それぞれ独立に、水素、アルキル、およびアリールからなる群から選択される。

40

【0099】

消費財製品も提供する。この製品は、アノード、カソード、およびアノードとカソードとの間に配置された有機層を含む。さらに、この有機層は、上述した式 I を有する配位子を含む化合物を含む。式 I の化合物について記述した好ましいヘテロ原子および置換基の選択は、式 I の化合物を含むデバイスのための使用にも好ましい。記述した置換基の選択には、X、A、 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、および R_5 についての選択が含まれる。

【0100】

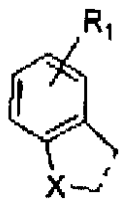
A は、5員環または6員環の芳香族環またはヘテロ芳香族環である。

【0101】

RA は、下記構造：

50

【化 3 0】



を有する置換基であり、 R_A は、式Iのピリジン環に縮合している。この構造式に存在する点線は、この置換基が式Iのピリジン環に接合している位置を示している。Xは、CRR、C=O、BR、NR、O、S、およびSeからなる群から選択される。RおよびR'は、独立に、水素およびアルキルから選択される。 R_1 、 R_2 、および R_3 は、モノ-、ジ-、トリ-、またはテトラ置換基を表すことができ、 R_1 、 R_2 、および R_3 は、それぞれ独立に、水素、アルキル、アルコキシ、アミノ、アルケニル、アルキニル、アリールアルキル、アリール、およびヘテロアリールからなる群から選択される。この配位子は、40より大きい原子量を有する金属に配位する。

10

【0102】

有機発光デバイスにおける特定の層に有用であるとして本明細書に記載した材料は、有機発光デバイスに存在する広範な他の材料との組合せで使用することができる。例えば、本明細書で開示した発光ドーパントを、存在し得る広範な、ホスト、輸送層、阻止層、注入層、変曲、および他の層と併せて使用することができる。以下に記述または参照する材料は、本明細書において開示した化合物との組合せにおいて有用である材料の非限定的な例であり、当業者であれば、組合せにおいて有用となりうる他の材料を、容易に文献で調べ出すことができる。

20

【0103】

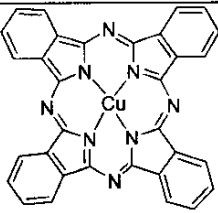
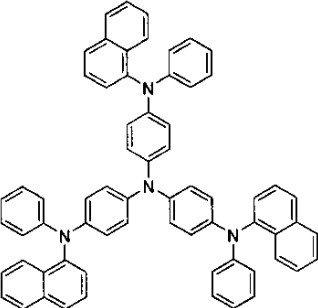
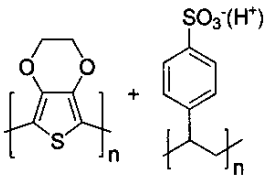
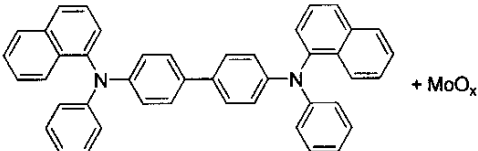
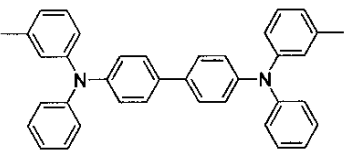
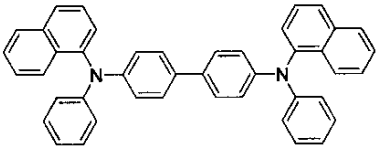
本明細書において開示した化合物に加えて、かつ／あるいは本明細書において開示した化合物と組み合わせて、多くの正孔注入材料、正孔輸送材料、ホスト材料、ドーパント材料、エキシトン／正孔阻止層材料、電子輸送および電子注入材料を、OLEDにおいて用いることができる。OLEDにおいて本明細書において開示した化合物と組み合わせて用いることができる材料の非限定的な材料の例を、下記表1に列挙する。表1には、非限定的な材料の部類、各部類の化合物の非限定的な例、およびその材料を開示している参考文献が列挙されている。

30

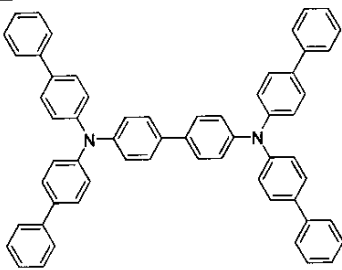
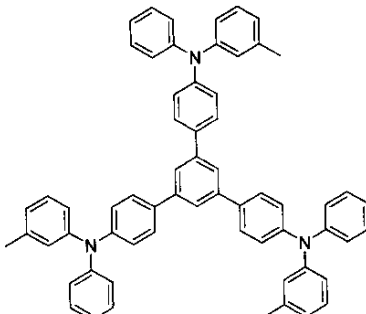
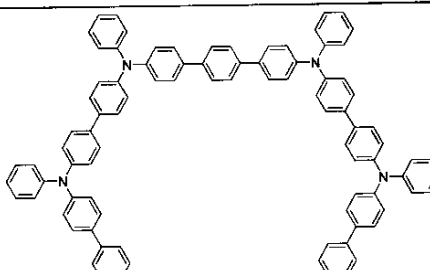
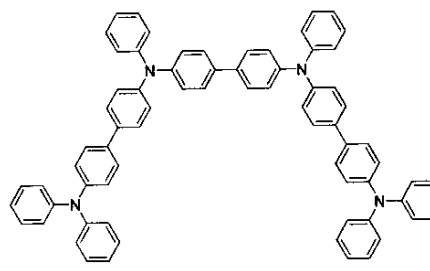
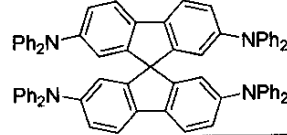
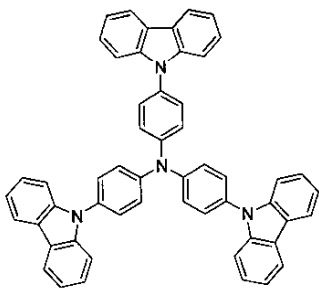
【0104】

【表 1 A】

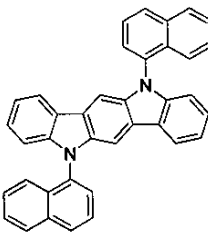
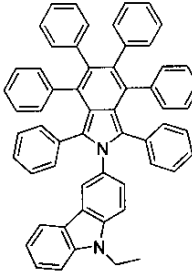
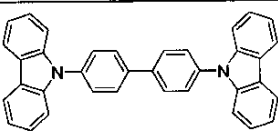
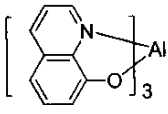
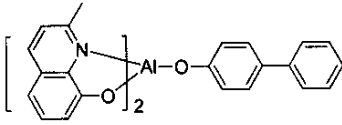
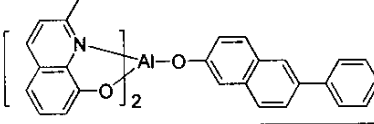
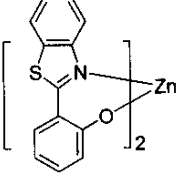
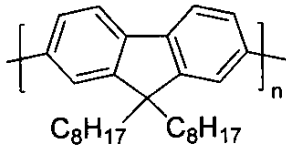
表 1

材料	材料例	刊行物
正孔注入材料		
フタロシアニンおよびポルフィリン化合物		Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)
スターバースト・トリアリールアミン		J. Lumin. 72-74, 985 (1997)
C F _x フルオロハイドロカーボンポリマー	$\left[\text{CH}_x\text{F}_y \right]_n$	Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)
導電性ポリマー (例えばPEDOT:PSS、ポリアニリン、ポリチオフェン)		Synth. Met. 87, 171 (1997)
酸化モリブデン及び酸化タングステンなどの金属酸化物と錯体化されたトリールアミン		SID Symposium Digest, 37, 923 (2006)
正孔輸送材料		
トリアリールアミン類 (例えばTPD、α-NPD)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)
		米国特許第5061569号 明細書

【表 1 B】

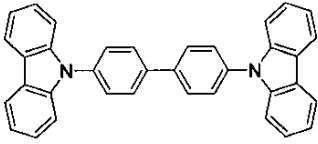
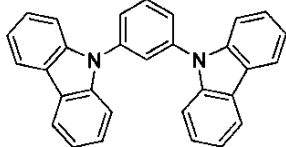
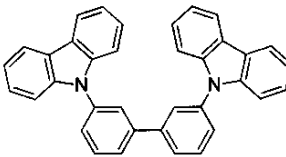
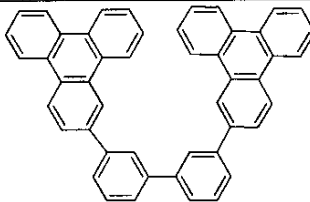
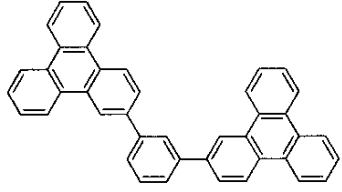
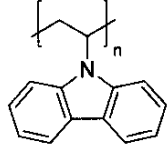
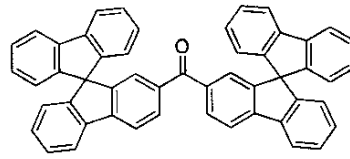
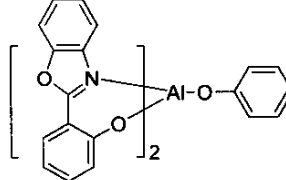
		欧州特許第650955号 明細書	10
		J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)	
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)	20
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)	30
スピロフルオレンコア上の トリアリールアミン		Synth. Met. 91, 209 (1997)	
アリールアミンカルバゾール化合物		Adv. Mater, 6, 677 (1994)	40

【表 1 C】

インドロカルバゾール類		Synth. Met. 111, 421 (2000)
イソインドール化合物		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)
燐光性OLEDホスト材料		
赤色ホスト		
アリールカルバゾール類		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
金属8-ヒドロキシキノレート類 (例えば、Alq ₃ 、BAIq)		Nature 395, 151 (1998)
		米国特許出願公開第20060202194号公報
		国際公開第2005014551号パンフレット
金属フェノキシベンゾチアゾール化合物		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
共役オリゴマー及びポリマー (例えば、ポリフルオレン)		Org. Electron. 1, 15 (2000)

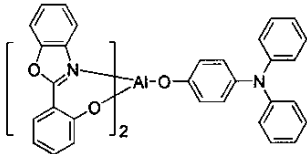
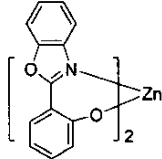
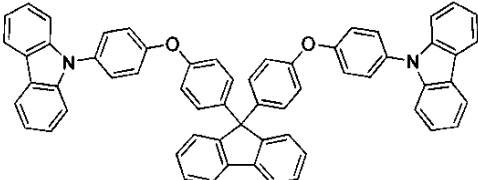
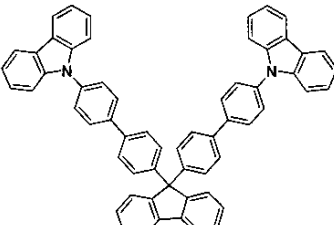
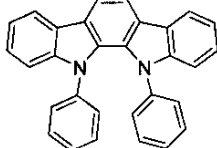
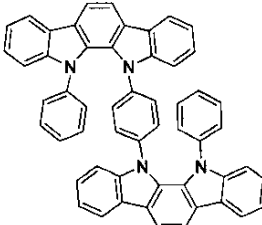
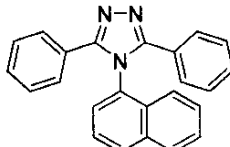
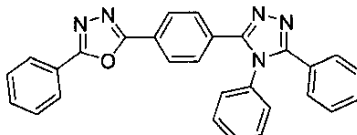
【 0 1 0 7 】

【表 1 D】

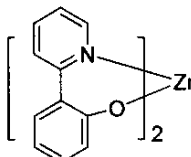
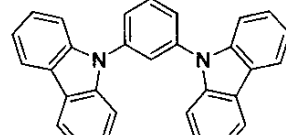
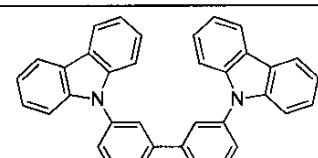
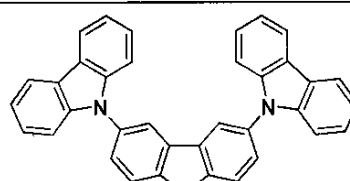
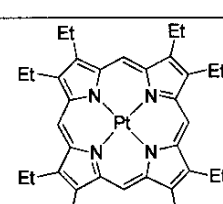
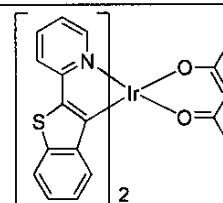
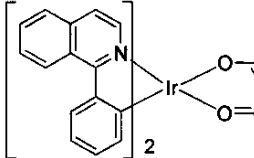
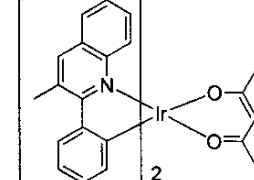
緑色ホスト アリールカルバゾール		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		米国特許出願公開第2 0030175553号公報
		国際公開第200103923 4号パンフレット
アリールトリフェニレン 化合物		米国特許出願公開第2 0060280965号公報
		米国特許出願公開第2 0060280965号公報
ポリマー (例えば、PVK)		Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)
スピロフルオレン化合物		国際公開第200409320 7号パンフレット
金属フェノキシベンゾオ キサゾール化合物		国際公開第200508902 5号パンフレット

【 0 1 0 8 】

【表 1 E】

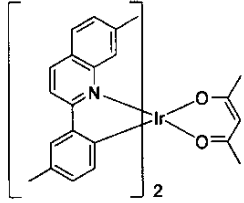
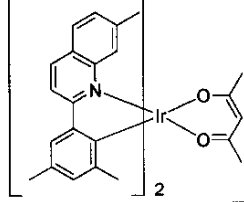
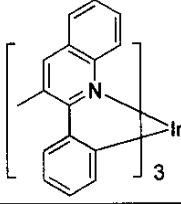
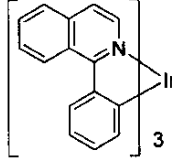
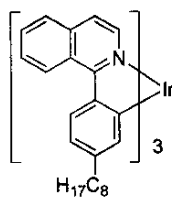
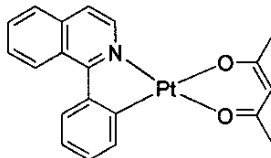
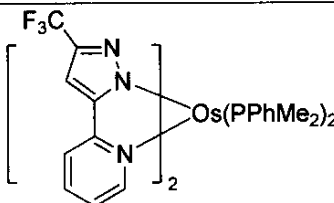
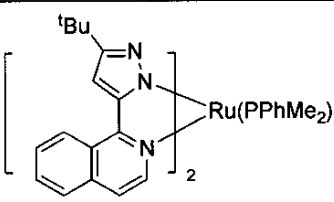
		国際公開第200613217 3号パンフレット
		特開2005- 11610号公報
スピロフルオレンーカル バゾール化合物		特開2007- 254297号明細書
		特開2007- 254297号公報
インドールカルバゾール 類		国際公開第200706379 6号パンフレット
		国際公開第200706375 4号パンフレット
5員環電子欠損複素環 (例えば、トリアゾール 、オキサジサゾール)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)
		国際公開第200410782 2号パンフレット

【表 1 F】

金属フェノキシピリジン化合物		国際公開第200503090 0号パンフレット
青色ホスト		
アリールカルバゾール類		Appl. Phys. Lett. 82, 2422 (2003)
		米国特許出願公開第2 0070190359号公報
ジベンゾチオフェン-カルバゾール化合物		国際公開第200611496 6号パンフレット
燐光性ドーパント		
赤色ドーパント		
重金属ポルフィリン類 (例えばPtOEP)		Nature 395, 151 (1998)
イリジウム(III)有機金属錯体		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		米国特許第6835469号 明細書
		米国特許第6835469号 明細書

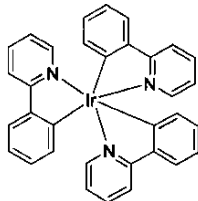
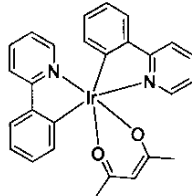
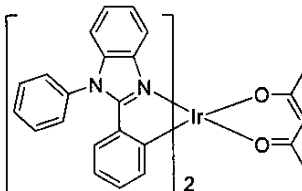
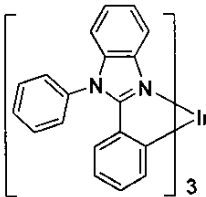
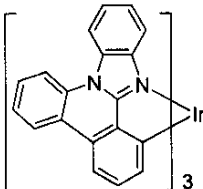
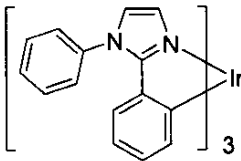
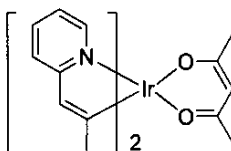
【 0 1 1 0 】

【表 1 G】

		米国特許出願公開第20060202194号公報
		米国特許出願公開第20060202194号公報
		米国特許第7087321号明細書
		米国特許第7087321号明細書
		Adv. Mater. 19, 739 (2007)
プラチナ(II)有機金属錯体		国際公開第2003040257号パンフレット
オスミウム(III)錯体		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)
ルテニウム(II)錯体		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)

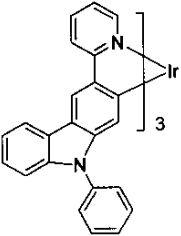
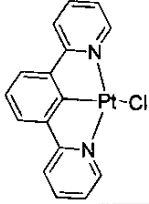
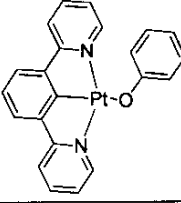
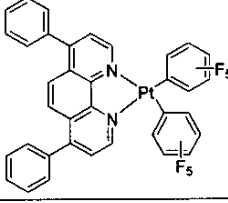
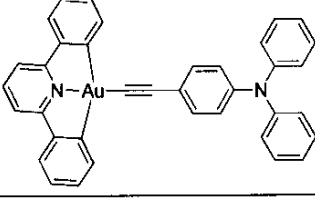
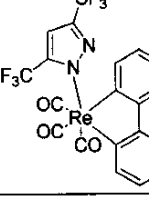
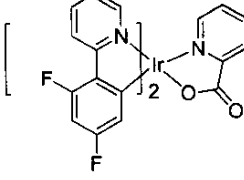
【 0 1 1 1 】

【表 1 H】

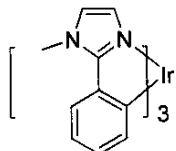
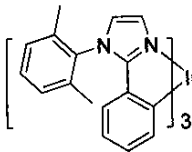
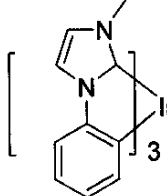
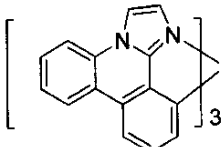
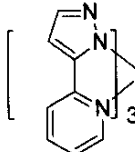
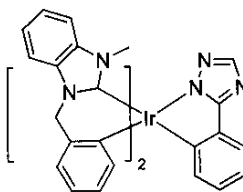
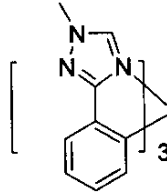
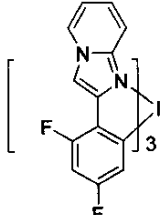
緑色ドーパント		
イリジウム(III)有機金属錯体		Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)
	及びこの誘導体	
		米国特許出願公開第20020034656号公報
		米国特許第6687266号明細書
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)
		米国特許出願公開第20070190359号公報
		米国特許出願公開第20060008670号公報, 特開2007-123392号公報
		Adv. Mater. 16, 2003 (2004)

【 0 1 1 2 】

【表 1 I】

		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
Pt(II)有機金属錯体		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
金錯体		Chem. Commun. 2906 (2005)
レニウム(III)錯体		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
青色ドーパント		
イリジウム(III)有機金属錯体		国際公開第20020027 14号パンフレット

【表 1 J】

		国際公開第20060090 24号パンフレット
		米国特許出願公開第 20060251923号公報
		国際公開第20060564 18号パンフレット、 米国特許出願公開第 20050260441号公報
		米国特許出願公開第 20070190359号公報
		米国特許出願公開第 20020134984号公報
		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)
		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)
		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)

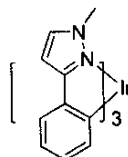
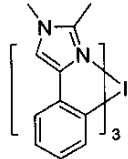
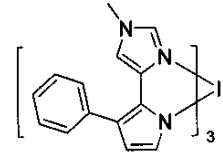
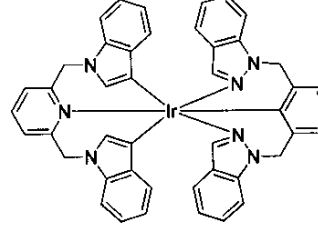
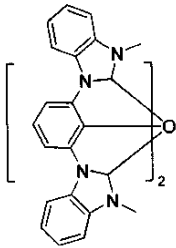
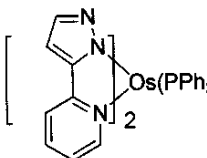
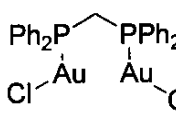
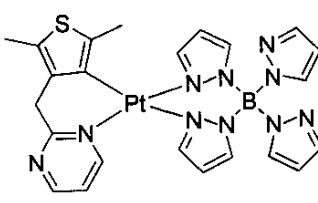
10

20

30

40

【表 1 K】

		国際公開第20051238 73号パンフレット
		国際公開第20051238 73号パンフレット
		国際公開第20070043 80号パンフレット
		国際公開第20060827 42号パンフレット
オスミウム(II) 錯体		米国特許出願公開第 20050260449号公報
		Organometallics 23, 3745 (2004)
金錯体		Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)
プラチナ(II) 錯体		国際公開第20060981 20号パンフレット、 国際公開第20061038 74号パンフレット

【表 1 L】

励起子／正孔阻止層材料		
バソクプリン化合物（例えば、BCP、BPhen）		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
金属8-ヒドロキシキノレート類（例えば、BAIq）		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
5員環電子欠乏複素環、例えばトリアゾール、オキサジアゾール、イミダゾール、ベンゾイミダゾール		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
トリフェニレン化合物		米国特許出願公開第20050025993号公報
フッ素化芳香族化合物		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)

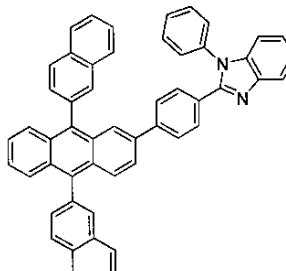
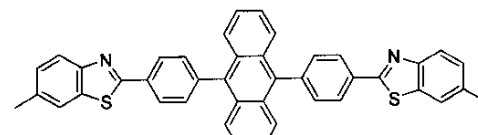
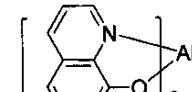
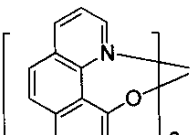
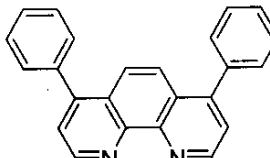
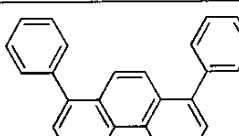
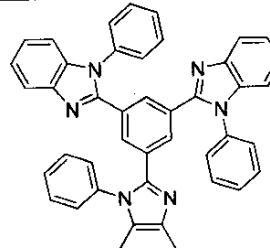
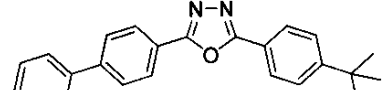
10

20

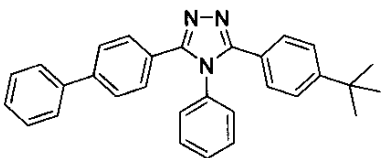
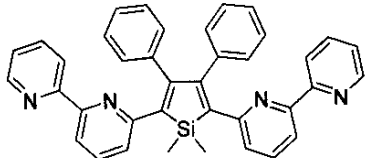
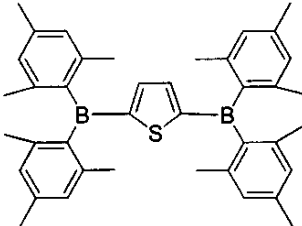
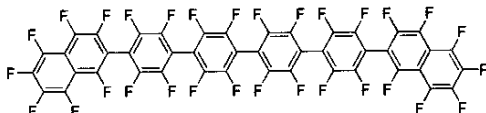
30

40

【表 1 M】

電子輸送材料		
アントラセン-ベンゾイミダゾール化合物		国際公開第2003060956号パンフレット
アントラセン-ベンゾチアゾール化合物		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
金属 8-ヒドロキシキノレート類 (例えば Alq ₃)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)
金属ヒドロキシベノキレート類		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
バソクプリン化合物、例えば BCP、BPhen など		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
5員環電子欠乏複素環、例えば トリアゾール、オキサジアゾール、イミダゾール、ベンゾイミダゾール		Appl. Phys. Lett. 74, 865 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)

【表 1 N】

		Jpn. J. Apply. Phys. 32, L917 (1993)
シロール化合物		Org. Electron. 4, 113 (2003)
アリールボラン化合物		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714 (1998)
フッ素化芳香族化合物		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)

10

20

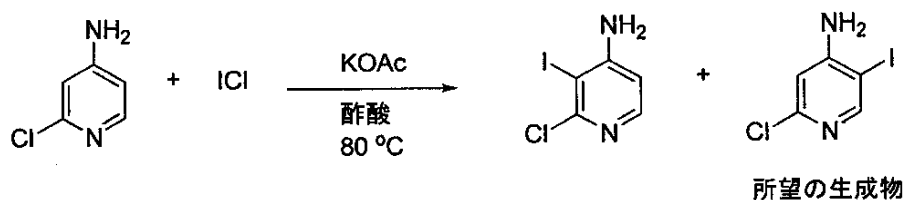
【実施例】

【0118】

[化合物例]

[実施例1]：化合物1の合成

【化31】



30

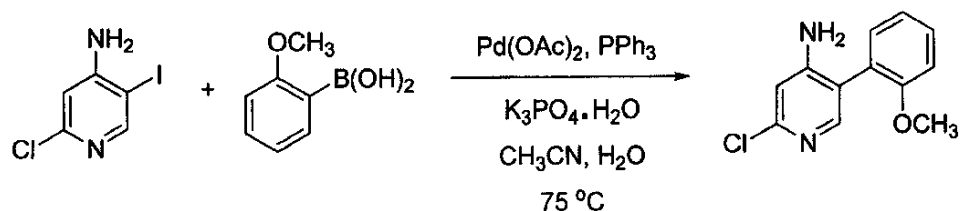
【0119】

2-クロロ-5-ヨード-4-アミノピリジンの合成：

2-クロロ-4-アミノピリジン(25 g, 194 mmol)および酢酸カリウム(19.05 g, 194 mmol)を、250 mLの酢酸に溶解し、80 に加熱した。ICl(31.56 g, 194 mmol)の酢酸(40 mL)溶液を滴下により添加し、反応混合物を80 にて3時間加熱した。この反応混合物を室温に冷却し、飽和NaHCO₃溶液で中和した。暗白色固体が析出し、これを、塩化メチレンで抽出した。飽和NaHCO₃溶液で洗浄し、Na₂SO₄で無水にし、濃縮し、ヘキサンおよび酢酸エチルを用いるカラムクロマトグラフィーによって精製した。11.6 gの表題化合物を単離し、13.4 gの望ましくない異性体を得た。

40

【化32】



50

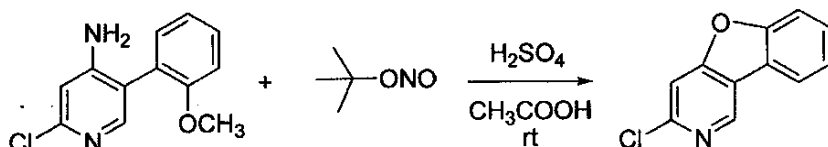
【 0 1 2 0 】

2-クロロ-5-(2-メトキシフェニル)ピリジン-4-アミンの合成：

リン酸カリウム (18.28 g, 79 mmol)、トリフェニルホスフィン(1.04 g, 3.97 mmol)、2-クロロ-5-ヨード-4-アミノピリジン(10.1 g, 39. mmol)、2-メトキシベンゼンボロン酸(8.44 g, 55.57 mmol)、および酢酸パラジウム(0.45 g, 1.98 mmol)を、窒素雰囲気下、脱気したアセトニトリル(300 mL)および水(100 mL)に、順次添加した。この反応混合物を、75 にて一晩加熱した後、室温に冷却した。有機層を分離し、水性相を酢酸エチルで抽出した。合わせた有機相を硫酸ナトリウムで無水にし、濃縮し、ヘキサンおよび酢酸エチルを溶出液として用いるカラムクロマトグラフィーを実施した。7.5 gの表題化合物を単離した。

10

【 化 3 3 】



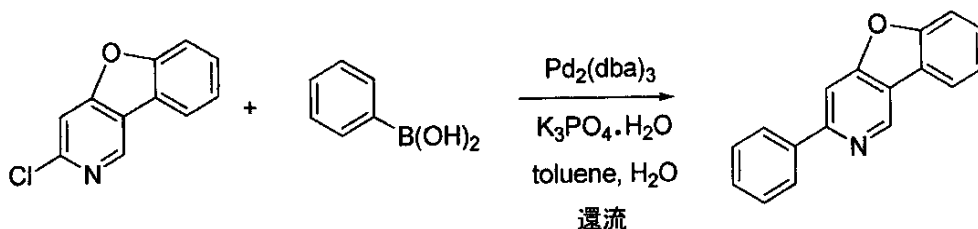
【 0 1 2 1 】

3-クロロベンゾフロ[3,2-c]ピリジンの合成：

2-クロロ-5-(2-メトキシフェニル)ピリジン-4-アミン(7.5 g, 31.96 mmol)を、氷酢酸(200 mL)および濃硫酸(1 mL)に溶解させた。亜硝酸t-ブチル(11.39 mL, 95.87 mmol)の、酢酸10 mL中の溶液を、滴下により添加し、30分間撹拌した。この反応混合物を、減圧下で濃縮し、塩化メチレンに溶解させた。この反応混合物を、硫酸ナトリウムで無水にし、濃縮し、残渣をヘキサンおよび酢酸エチルを溶出液として用いるカラムクロマトグラフィーによって精製して、5.0 gの表題化合物を得た。

20

【 化 3 4 】



30

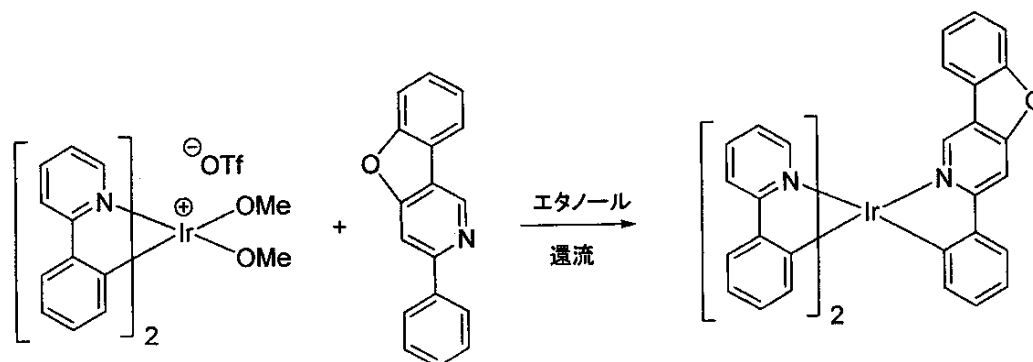
【 0 1 2 2 】

3-フェニルベンゾフロ[3,2-c]ピリジンの合成：

3-クロロベンゾフロ[3,2-c]ピリジン(2.89 g, 14 mmol)、フェニルボロン酸(2.56 g, 21 mmol)、リン酸カリウム(9.6 g, 42 mmol)、2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2',6'-ジメトキシビフェニル(0.45 g, 1.12 mmol)、およびPd₂(bda)₃ (0.256 g, 0.28 mmol)を、トルエン(100 mL)および水(10 mL)に添加した。この溶液に窒素を30分間バブルさせた後、この溶液を窒素雰囲気下で一晩還流させた。次いで、この反応物を室温に冷却し、有機相を水性相から分離した。水性相を酢酸エチルで洗浄し、有機画分を合わせて硫酸ナトリウムで無水にし、溶媒を減圧下で除去した。生成物を、酢酸エチルおよびヘキサンを溶出液として用い、シリカゲルを使用してクロマトグラフィーにかけた。溶媒を除去して2.77 gの表題化合物を得た。

40

【化 3 5】



10

【 0 1 2 3 】

化合物 1 の合成：

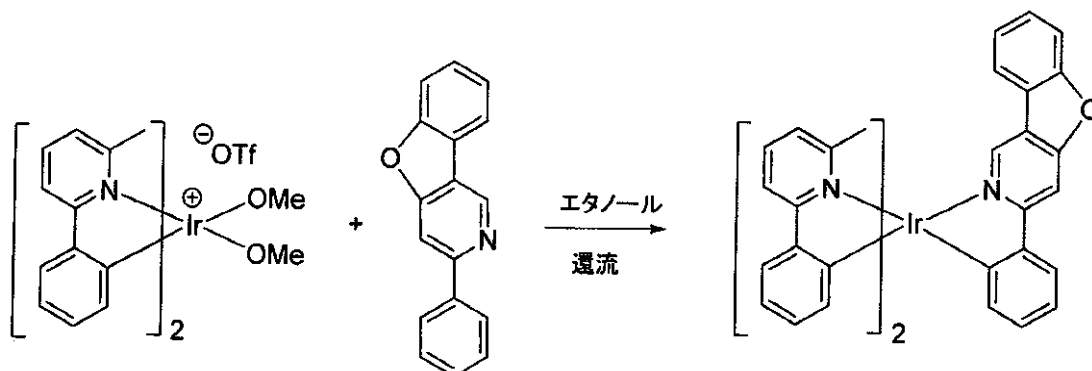
イリジウム中間体 (2.67 g, 3.76 mmol) および 3-フェニルベンゾフロ[3,2-c]ピリジン (2.77 g, 11.29 mmol) を、50 mL の無水エタノール中で混合した。この混合物を、窒素下で加熱して 24 時間還流させた。この反応混合物を室温に冷却し、沈殿物を濾過によって集めた。粗沈殿物 (1.9 g) を、ジクロロメタンおよびヘキサン (2:3) を用いるシリカカラムによって精製して、カラム精製後、0.9 g の所望の精製物を得た。この化合物を、290 °C の高真空昇華によってさらに精製して、0.55 g の生成物を得た (HPLC 純度 99.7%)。

20

【 0 1 2 4 】

[実施例 2]：化合物 7 の合成

【化 3 6】



30

【 0 1 2 5 】

化合物 7 の合成：

イリジウム中間体 (1.82 g, 2.46 mmol) および 3-フェニルベンゾフロ[3,2-c]ピリジン (1.81 g, 7.38 mmol) を、40 mL の無水エタノール中で混合した。この混合物を、窒素下で加熱して、24 時間還流させた。この反応混合物を室温に冷却し、沈殿物を濾過によって集めた。粗沈殿物 (1.8 g) を、ジクロロメタンを用いる短いシリカカラムによって精製した。この化合物を、290 °C の高真空昇華によってさらに精製して、0.64 g の生成物を得た (HPLC 純度 99%)。

40

【 0 1 2 6 】

[実施 3]：化合物 8 の合成

【化 3 7】



50

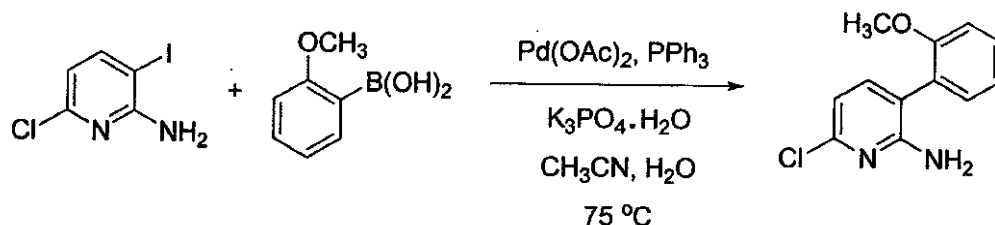
【0127】

6-クロロ-5-ヨード-2-アミノピリジンの合成：

2-クロロ-6-アミノピリジン(23.0 g, 178 mmol)および酢酸カリウム(17.5 g, 178 mmol)を、200 mLの酢酸に溶解させ、80 に加熱した。ICI (29.05 g, 178 mmol)の酢酸(40 mL)中の溶液を滴下により添加し、反応混合物を、80 にて4時間撹拌した。反応混合物を室温に冷却し、減圧下で酢酸を除去した。残渣を酢酸エチルに溶解させ、飽和NaHSO₃水溶液によって中和した。有機相を飽和NaHSO₃水溶液で洗浄し、Na₂SO₄で無水にし、濃縮し、ヘキサンおよび酢酸エチルを溶出液として用いるシリカカラムによって精製した。6.1 gの表題化合物を単離した。

【化38】

10



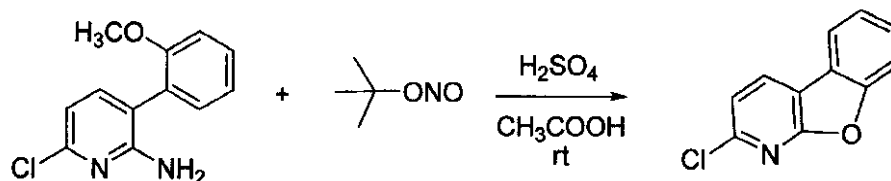
【0128】

6-クロロ-3-(2-メトキシフェニル)ピリジン-2-アミンの合成：

リン酸カリウム (12.72 g, 60 mmol)、トリフェニルホスフィン(0.682 g, 2.40 mmol)、6-クロロ-5-ヨード-2-アミノピリジン(6.1 g, 24 mmol)、2-メトキシベンゼンボロン酸(5.10 g, 33.5 mmol)、および酢酸パラジウム(0.27 g, 1.20 mmol)を、窒素下で、脱気したアセトニトリル(200 mL)に順次添加した。反応混合物を75 にて一晩加熱した後、室温に冷却した。有機相を分離し、水性相を酢酸エチルで抽出した。合わせた有機相を、硫酸ナトリウムで無水にし、濃縮し、ヘキサンおよび酢酸エチルを溶出液として用いるシリカカラムによって精製して、4.05 gの表題化合物を得た。

20

【化39】



30

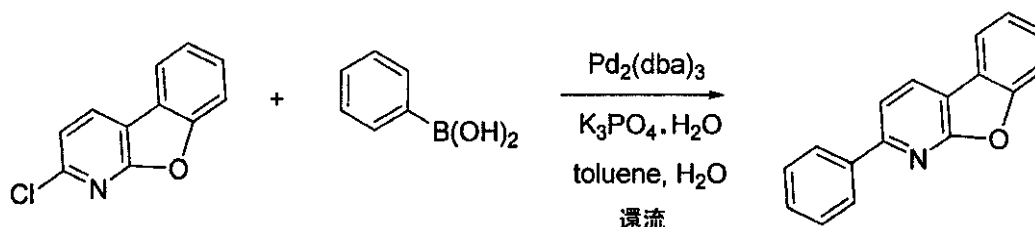
【0129】

2-クロロベンゾフロ[2,3-b]ピリジンの合成：

6-クロロ-3-(2-メトキシフェニル)ピリジン-2-アミン(4.0 g, 17.04 mmol)を、氷酢酸(100 mL)および濃硫酸 (1 mL)に溶解させた。N-ブチルニトリル(6.1 mL, 51.2 mmol)の酢酸6 mL中の溶液を滴下により添加し、30分間撹拌した。この反応混合物を、減圧下で濃縮し、塩化メチレンに溶解させた。この反応混合物を、飽和NaHCO₃水溶液で中和し、有機相を水性相から分離した。水性相を塩化メチレンで抽出し、合わせた有機相を硫酸ナトリウムで無水にし、濃縮し、残渣をヘキサンおよび酢酸エチルを溶出液として用いるシリカカラムによって精製して、1.85 gの表題化合物を得た。

40

【化40】



50

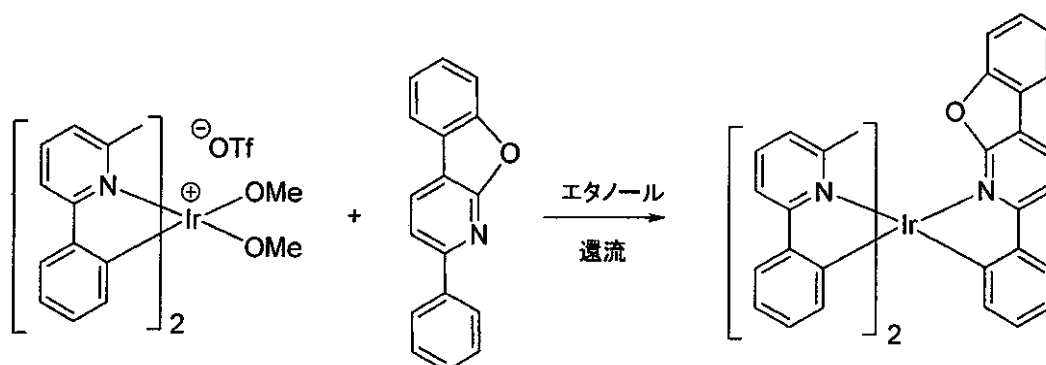
【 0 1 3 0 】

2-フェニルベンゾフロ[2,3-b]ピリジンの合成：

2-クロロベンゾフロ[2,3-b]ピリジン(1.33 g, 6.53 mmol)、フェニルボロン酸(1.19 g, 9.80 mmol)、リン酸カリウム(4.51 g, 19.59 mmol)、2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2',6'-ジメトキシビフェニル(0.214 g, 0.522 mmol)、およびPd₂(bda)₃ (0.119 g, 0.13 mmol)を、トルエン (40 mL)および水(4 mL)に添加した。この溶液に窒素を30分間バブリングさせた後、この溶液を窒素下で一晩還流させた。次いで、反応物を、室温に放冷し、有機相を水性相から分離した。水性相を酢酸エチルで抽出し、有機画分を合わせて硫酸ナトリウムで無水にし、溶媒を減圧下で除去した。生成物を酢酸エチルおよびヘキサンを溶出液として用いるシリカゲルを使用してクロマトグラフィーにかけた。溶媒を除去して1.45 gの表題化合物を得た。

10

【化 4 1】



20

【 0 1 3 1 】

化合物 8 の合成：

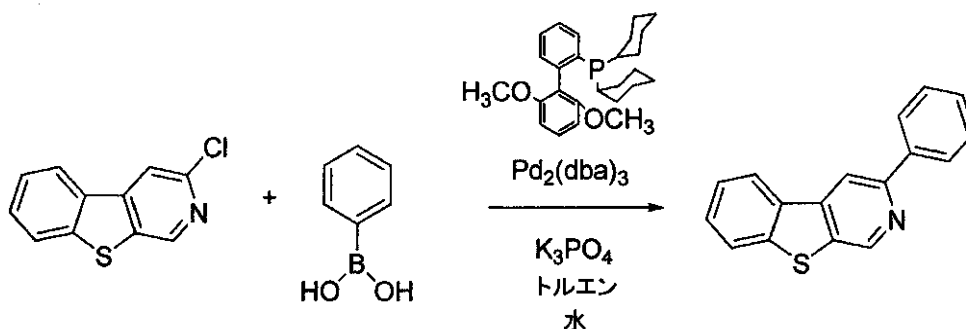
イリジウム中間体(1.15 g, 1.55 mmol)および2-フェニルベンゾフロ[2,3-b]ピリジン(1.14 g, 4.66 mmol)を、30 mLの無水エタノール中で混合した。この混合物を、窒素下で加熱して24時間還流させた。この反応混合物を室温に冷却し、沈殿物を濾過によって集めた。粗沈殿物(1.0 g)を、ジクロロメタンおよびヘキサンを溶出液として用いるシリカカラムによって精製した。化合物を290 °Cでの高真空昇華によって精製して、0.3 gの生成物を得た (HPLC純度99%)。

30

【 0 1 3 2 】

[実施 4]：化合物 2 2 の合成

【化 4 2】



40

【 0 1 3 3 】

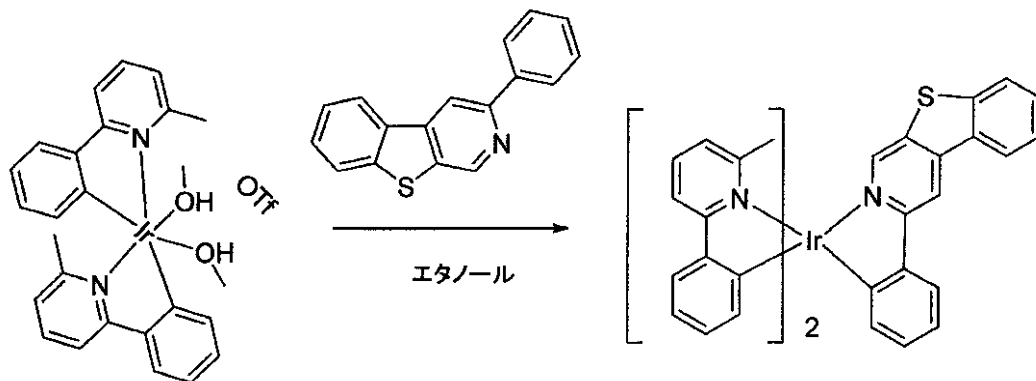
2-フェニル-3-アザジベンゾチオフエンの合成：

2-クロロ-3-アザジベンゾチオフエン(1.3 g, 5.7 mmol)、フェニルボロン酸(0.87 g, 7.1 mmol)、ジシクロヘキシル(2',6'-ジメトキシビフェニル-2-イル)ホスフィン(S-Phos)(0.09 g, 0.23 mmol)、およびリン酸カリウム(3.3 g, 14.3 mmol)を、60 mLのトルエンおよび6 mLの水の中で混合した。この混合物中に窒素を、30分間直接バブリングさせた。次

50

いで、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.05 g, 0.05 mmol)を添加し、混合物を窒素下で3日間加熱還流させた。この混合物を冷却し、有機相を分離した。有機相を塩水で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥し、濾過し、蒸発させて残渣を得た。残渣を、5%酢酸エチル/ヘキサンを用いて溶出させるカラムクロマトグラフィーによって精製した。精製後、0.4 gの所望の生成物を得た。

【化43】



化合物22

【0134】

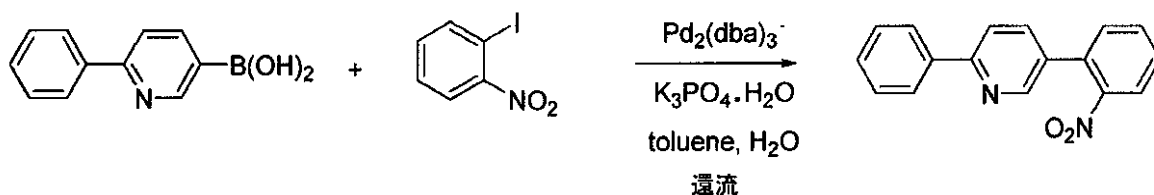
化合物22の合成：

イリジウムトリフレート前駆体(0.4 g, 1.5 mmol)および2-フェニル-3-アザジベンゾチオフェン(0.4 g, 0.5 mmol)を、20 mLのエタノール中で混合した。この混合物を、窒素下で24時間加熱還流させた。還流中に沈殿物が生成した。この反応混合物をセライト層を通してろ過した。生成物をメタノールおよびヘキサンで洗浄した。この固体を塩化メチレンに溶解させ、ジクロロメタンおよびヘキサン(1:1)を用いるカラムによって精製した。カラム精製後、0.34 gの純粋な生成物が得られた(HPLC純度99.3%)。

【0135】

【実施5】：化合物31の合成

【化44】

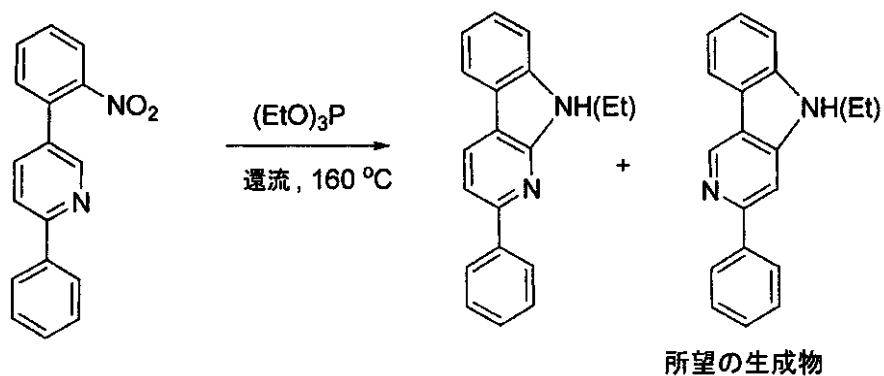


【0136】

5-(2-ニトロフェニル)-2-フェニルピリジンの合成：

2-ヨード-1-ニトロベンゼン(6.88 g, 27.64 mmol)、6-フェニル-3-ピリジニルボロン酸(5.5 g, 27.64 mmol)、リン酸カリウム(17.6 g, 82.91 mmol)、2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2',6'-ジメトキシビフェニル(0.451 g, 0.522 mmol)、および $\text{Pd}_2(\text{bda})_3$ (0.119 g, 0.55 mmol)を、トルエン(150 mL)および水(12 mL)に添加した。この溶液に、窒素を30分間バブリングさせた後、この溶液を、窒素雰囲気下で一晩還流させた。次いで、反応物を、室温に放冷し、有機相を水性相から分離した。水性相を酢酸エチルで抽出し、有機画分を合わせて硫酸ナトリウムで無水にし、溶媒を減圧下で除去した。生成物を、酢酸エチルおよびヘキサンを溶出液として用い、シリカゲルを使用してクロマトグラフィーにかけた。溶媒を除去して、5.02 gの表題化合物を得た。

【化 4 5】



10

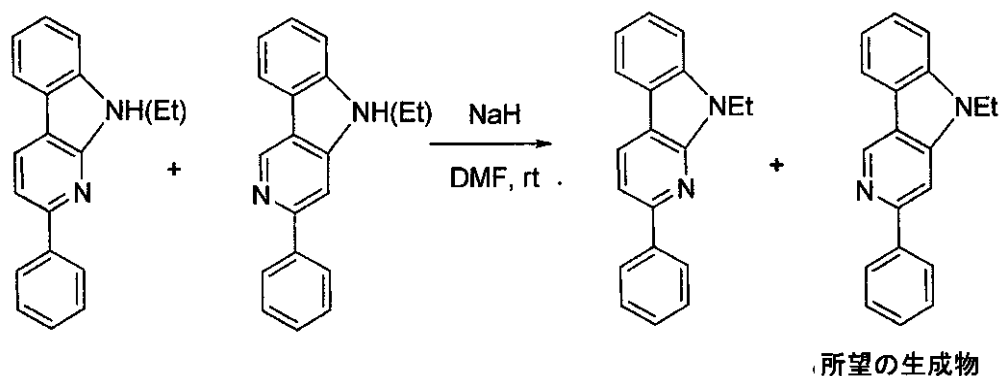
【 0 1 3 7】

アザ-カルバゾールの合成：

5-(2-ニトロフェニル)-2-フェニルピリジン(5.0 g, 18.10 mmol)およびリン酸トリエチル(30 g, 180.97 mmol)を、窒素雰囲気下、160 にて一晩加熱した。その後、反応混合物を室温に冷却し、6N HCl (60 mL)を添加した。この酸性溶液を、NaOHペレットでpHが12になるまで中和した。この反応混合物を、酢酸エチルで抽出し、合わせた有機相を硫酸ナトリウムで無水にし、溶媒を減圧下で除去した。生成物を、酢酸エチルおよびヘキサンを溶出液として用い、シリカゲルを使用してクロマトグラフィーにかけた。溶媒を除去して、3.0 gのカルバゾール生成物を得た。

20

【化 4 6】



30

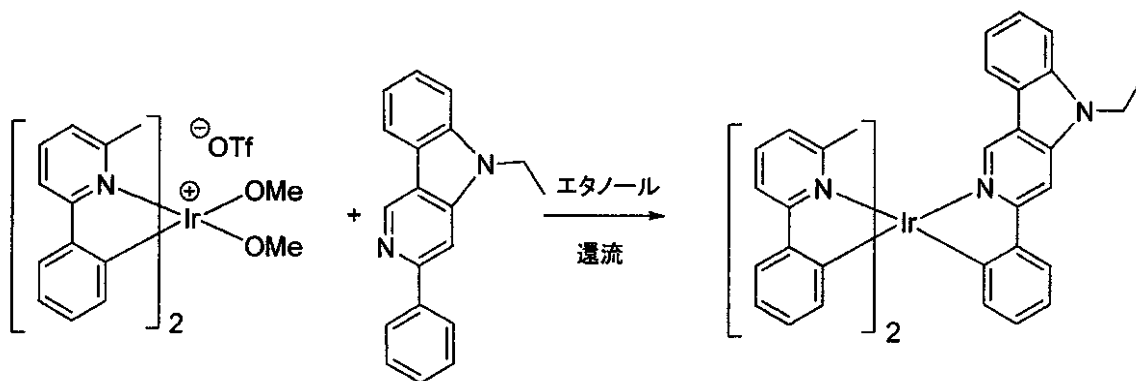
【 0 1 3 8】

5-エチル-3-フェニル-5H-ピリド[4,3-b]インドールの合成：

カルバゾール(1.90 g, 7.78 mmol)および水素化ナトリウム(0.55 g, 23.33 mmol)を入れたフラスコに、無水DMF (50 mL)を添加し、反応物を室温にて30分間撹拌した。その後、ヨウ化エチルを添加し、反応物を一晩撹拌した。TLCによって反応が完結したことが示され、反応をNaCl溶液を用いて停止させた。この混合物を、酢酸エチルで抽出し、合わせた有機画分をNaCl溶液、LiCl溶液で洗浄し、硫酸ナトリウムで無水にし、減圧下で溶媒を除去した。生成物を、酢酸エチルおよびヘキサンを溶出液として用い、シリカゲルを使用してクロマトグラフィーにかけた。溶媒を除去して、502 mgの所望の表題生成物を得た。

40

【化47】



【0139】

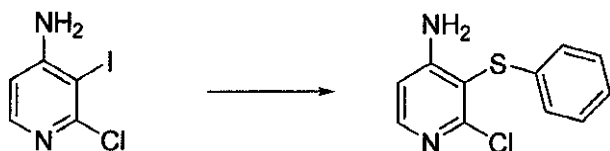
化合物31の合成：

イリジウム中間体(0.416 g, 0.563 mmol)および5-エチル-3-フェニル-5H-ピリド[4,3-b]インドール(0.46 g, 1.69 mmol)を、10 mLの無水エタノール中で混合した。この混合物を、窒素下で加熱して24時間還流させた。この反応混合物を室温に冷却し、沈殿物を濾過によって集めた。粗沈殿物を、ジクロロメタンおよびヘキサンを溶出液として用いるシリカカラムによって精製して、0.35 gの錯体を得た。

【0140】

[実施6]：化合物86の合成

【化48】

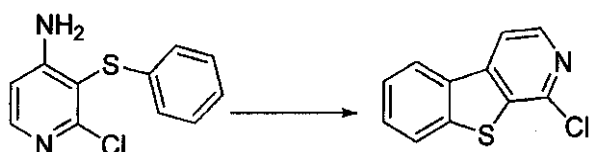


【0141】

2-クロロ-3-(フェニルチオ)ピリジン-4-アミンの合成：

250 mLの丸底フラスコに、2-クロロ-3-ヨード-4-アミノピリジン(3.0 g, 11.8 mmol)、チオフェノール(1.3 g, 11.8 mmol)、ヨウ化銅(I) (0.11 g, 0.58 mmol)、エチレングリコール(1.5 g, 24 mmol)、および炭酸カリウム(3.3 g, 24 mol)を入れた。次いで、100mLの2-プロパノールを、この反応混合物に添加し、混合物を18時間加熱還流させた。この反応混合物を室温に冷却し、減圧下で濾過した。濾液を200 mLの水で希釈した後、150 mLの酢酸エチルで2回抽出した。抽出物を硫酸マグネシウムで無水にした後、濾過し、減圧下でストリッピングさせた。制せ得物を2~14%の酢酸エチル/ジクロロメタンを移動相として用いるシリカゲルクロマトグラフィーを用いて精製した。2.0 gの生成物を得た(収率72%)。

【化49】



【0142】

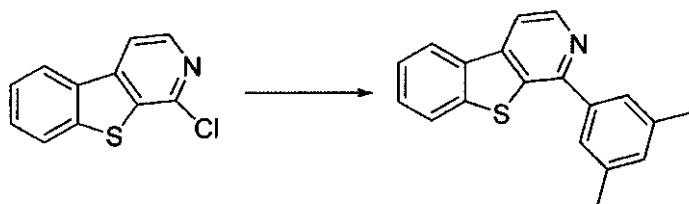
3-アザ-4-クロロジベンゾチオフェンの合成：

250 mLの丸底フラスコに、アミノピリジン(2.0 g, 8.5mmol)を入れた。この物質を30 mLの水酢酸に溶解させ、室温で撹拌した。この混合物に、亜硝酸t-ブチル(0.87 g, 8.5 mol)を、15分間かけて滴下により添加した。次いで、この混合物を室温にて1時間撹拌した。次に、亜硝酸t-ブチル(0.44 g, 0.0043 mol)を反応混合物に添加し、これを室温にてさ

50

らに2時間撹拌した。この反応混合物を、氷に注ぎ、炭酸ナトリウムを用いて塩基性にした。この混合物を、酢酸エチルで抽出し、抽出物を硫酸ナトリウムで無水にした。次いで、抽出物を濾過し、減圧下でストリッピングした。生成物を、10~20%酢酸エチル/ヘキサンを移動相として用いるシリカゲルクロマトグラフィーを用いて精製した。1.55 gの生成物を集めた(収率83%)。

【化50】



10

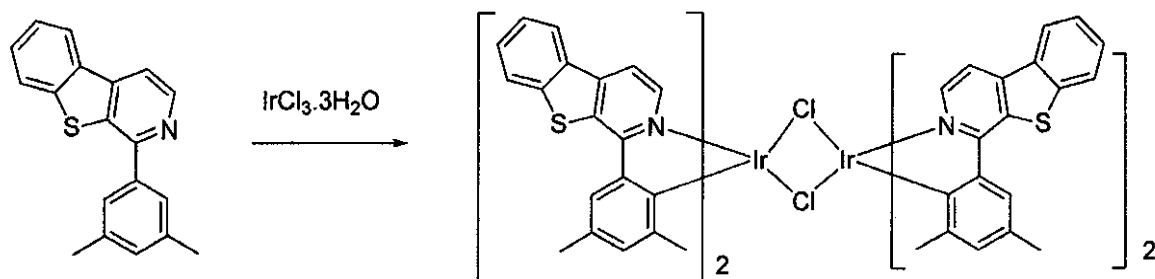
【0143】

4-(3',5'-ジメチルフェニル)-3-アザジベンゾチオフエンの合成：

250 mLの丸底フラスコに、クロロアザベンゾチオフエン(1.55 g, 7.1 mmol)、3,5-ジメチルフェニルボロン酸(1.70 g, 11 mmol)、三リン酸カリウム水和物(7.6 g, 33 mol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.065 g, 0.071 mol)、および2-ジシクロヘキシルホスフィノ-2',6'-ジメトキシビフェニル(0.12 g, 0.28 mol)を入れた。この混合物に、200 mLのトルエンおよび30 mLの水を添加した。この混合物を脱気し、窒素で再び満たした。この操作を3回繰り返した。この反応混合物を、18時間撹拌および加熱した。トルエン相を分離し、硫酸マグネシウムで無水にした。次いで、この有機物を濾過し、減圧下でストリッピングさせた。この生成物を、10~20%酢酸エチル/ヘキサンを移動相として用いるシリカゲルクロマトグラフィーを用いて精製した。2.0 gの生成物を集めた(収率97%)。

20

【化51】



30

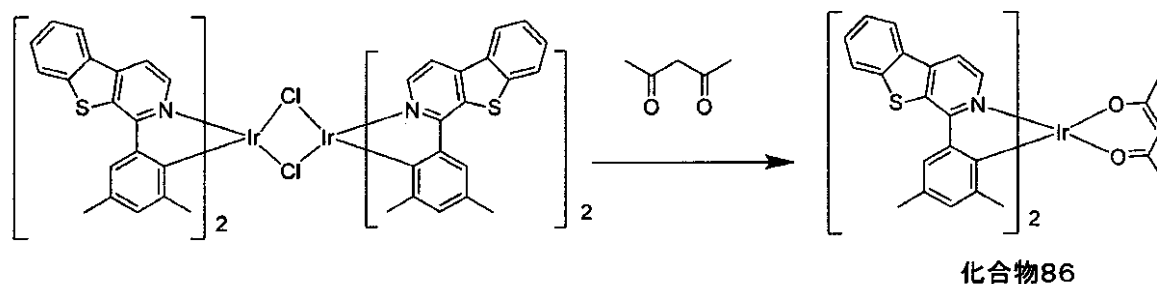
【0144】

ダイマーの合成：

4-(3',5'-ジメチルフェニル)-3-アザジベンゾチオフエン(2.0 g, 6.9 mmol)、2-エトキシエタノール(25 mL)、および水(5 mL)を、100 mLの三口丸底フラスコに入れた。この反応混合物に、窒素を45分間バブリングさせた。次いで、 $\text{IrCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (0.6 g, 2 mmol)を添加し、反応混合物を窒素下で17時間加熱還流させた。この反応混合物を、室温に冷却し、濾過した。橙/赤の残渣を集め、メタノール(2 x 15 mL)で洗浄し、次いでヘキサン(2 x 15 mL)で洗浄した。乾燥させた後1.0グラムのジクロロ架橋されたイリジニウムダイマーが得られた。

40

【化52】



10

【0145】

化合物86の合成：

ジクロロ架橋されたイリジニウムダイマー(1.0 g, 0.7 mmol)、10 mol当量の2,4-ペンタンジオン(1.4 g)、20 mol当量の Na_2CO_3 (2.0 g)、および25 mLの2-エトキシエタノールを、250 mLの丸底フラスコに入れた。この反応混合物を、室温にて24時間撹拌した。1 gのセライトおよび100 mLのジクロロメタンを、この反応混合物に加えて、生成物を溶解させた。次いで、この混合物を、セライトの層を通してろ過した。次いで、濾液をシリカ/アルミナのプラグに通し、ジクロロメタンで洗浄した。次いで、この透明になった溶液を、GF/Fフィルターペーパーを通してろ過し、濾液を加熱してジクロロメタンのほとんどを除去した。次いで、10 mLのイソプロパノールを添加し、スラリーを室温に冷却し、生成物を濾過し、イソプロパノールで洗浄し、乾燥させて、1.0 gの粗生成物を得た(収率57%)。次いで、この生成物を、ジクロロメタンおよびイソプロパノールを用いて2回再結晶させた後、昇華させた。

20

【0146】

[デバイス例]

全てのデバイス例は、高真空($<10^{-7}$ Torr)の熱蒸着によって作製した。アノード電極は800 Åのインジウム錫オキシド(ITO)である。カソードは10 ÅのLiFとそれに続く1000 ÅのAl(アルミニウム)からなる。全てのデバイスは作製後直ちに窒素グローブボックス(<1 ppmの H_2O 及び O_2)内でエポキシ樹脂を用いて封止したガラス蓋に密封し、吸湿剤をそのパッケージ内に組み込んだ。

30

【0147】

本発明の化合物である化合物1、化合物7、化合物8、化合物22、および化合物31が発光ドーパントであり、H1がホストであるデバイスをそれぞれ準備した。全てのデバイス例は、ITO表面から順に、正孔注入層(HIL)としての100 ÅのE1、正孔輸送層(HTL)としての300 Åの4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ピフェニル(-NPD)、発光層(EML)としての300 ÅのH1(ホスト物質、7%および10%の本発明の化合物でドーピングされたもの)(すなわち、A%は、EML層に存在するドーパント化合物の割合を示す)、阻止層(BL)としての50 ÅのH1、および電子輸送層(ETL)としての400 Åの Alq_3 (トリス-8-ヒドロキシキノリンアルミニウム)からなる積層した有機層を有している。

【0148】

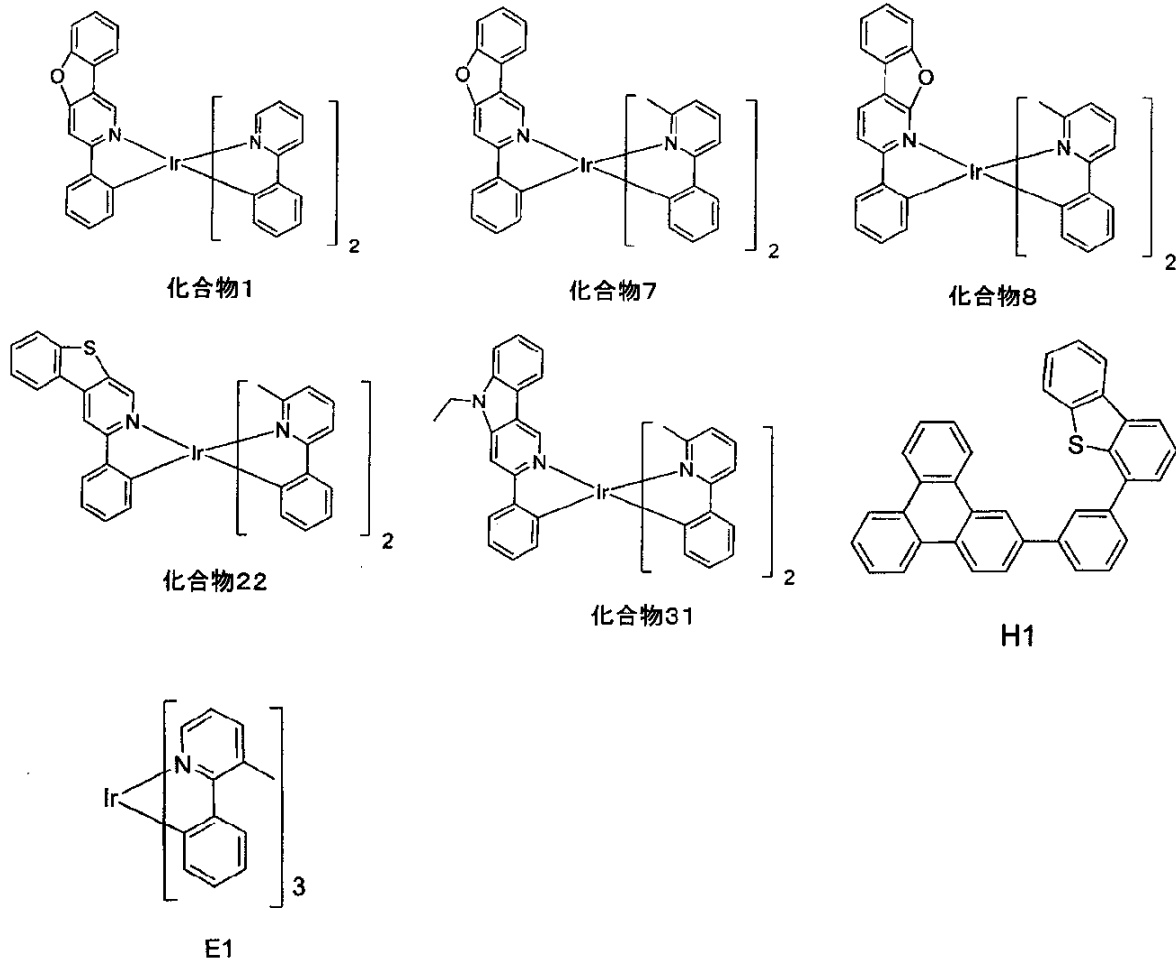
比較例1は、EMLにH1をホストとして含ませ、これを7%のE1でドーピングした以外は、デバイス例と同様にして作製した。

40

【0149】

ここでは、下記構造を有する以下の化合物を用いた。

【化 5 3】



10

20

【0150】

OLEDに用いる個々の物質を準備した。特に、OLEDの発光層中の発光ドーパントとして用いることができる材料であって、特に良好な特性を有するデバイスをもたらすものを準備した。これらのデバイスの構造を、表2に示し、相当する測定データを表3に示す。化合物1、7、8、22、および31を含む発光層を有するデバイスは、高いデバイス効率、低減された駆動電圧、および長い寿命を示した。

30

【0151】

以下の用語を表2および3で用いる。これらの定義は以下のとおりである：

「例」は、実施例の略語である。「比較例」は、比較実施例の略語である。「LE」は、発光効率であり、輝度をOLEDの駆動電流密度で割った値として定義される。「EQE」は、外部量子効率であり、光子の測定数の、接合部を通過した電子に対する比率として定義される。「PE」は、電力効率であり、発光した光束の合計を投入した電力の合計で割った値として定義される。「 L_0 」は初期の輝度であり、特定の電流密度における初期の明度として定義される。「 $RT_{80\%}$ 」は、寿命の測定値であり、室温、 40 mA/cm^2 の一定の電流密度で、初期の輝度 L_0 がその80%の値に減衰するために必要とされる時間として定義される。

40

【0152】

【表 2】

表2

例	HIL	HTL	ホスト	A%	BL	ETL
例1	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	化合物1 7%	H1 50 Å	Alq ₃ 400 Å
例2	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	化合物1 10%	H1 50 Å	Alq ₃ 400 Å
例3	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	化合物7 7%	H1 50 Å	Alq ₃ 400 Å
例4	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	化合物7 10%	H1 50 Å	Alq ₃ 400 Å
例5	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	化合物8 7%	H1 50 Å	Alq ₃ 400 Å
例6	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	化合物8 10%	H1 50 Å	Alq ₃ 400 Å
例7	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	化合物22 7%	H1 50 Å	Alq ₃ 400 Å
例8	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	化合物22 10%	H1 50 Å	Alq ₃ 400 Å
例9	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	化合物31 7%	H1 50 Å	Alq ₃ 400 Å
例10	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	化合物31 10%	H1 50 Å	Alq ₃ 400 Å
比較例1	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	E1 7%	H1 50 Å	Alq ₃ 400 Å

10

20

30

【 0 1 5 3 】

【表 3】

表3

例	λ_{\max} nm	CIE		1000 nitsにて				RT 40 mA/cm ² にて	
		X	Y	V (V)	LE (cd/A)	EQE (%)	PE (lm/W)	L ₀ nits	RT _{80%} h
例1	526	0.336	0.618	5.9	60.9	16.7	32.2	16,756	42
例2	524	0.346	0.614	5.5	59.3	16.3	34.0	17,225	28
例3	522	0.336	0.619	5.6	68.9	18.9	38.7	18,954	31
例4	522	0.344	0.616	5.1	71.7	19.6	44.1	21,234	16
例5	562	0.488	0.507	5.3	66.9	20.7	39.9	21,511	68
例6	564	0.493	0.503	5.1	67.1	21	41.7	22,767	44
例7	540	0.376	0.596	5.6	69.2	18.8	38.8	18,869	120
例8	546	0.396	0.583	5.1	66.9	18.4	41.2	20,471	120
例9	520	0.333	0.618	5.6	55.8	15.4	31.3	15,085	71
例10	526	0.344	0.614	5.1	65.6	18	40.8	20,055	52
比較例1	527	0.344	0.614	6.4	56.7	15.6	27.6	15,436	155

【0154】

デバイス例1～10から、緑色燐光OLEDの発光ドーパントとしての本発明の化合物（化合物1、7、8、22、および31）が、高いデバイス効率（すなわち、1000 cd/m²でLE>60 cd/A）をもたらすことが分かる。このことから、新規な配位子構造が、緑色の燐光のために十分に高い三重項エネルギーを有していることを示している。同時に注目すべき点は、本発明の化合物を発光ドーパントとして含むデバイスの高い安定性である。寿命RT_{80%}は、化合物22について120時間である。このように、本発明の化合物は、改良された効率および長い寿命を有するデバイスをもたらす得る。

【0155】

加えて、本発明の化合物を組み込むデバイスは、低減された駆動電圧を示す。例えば、化合物1、化合物7、化合物8、化合物22、および化合物31はいずれも、1000 cd/m²で6.4 Vの駆動電圧を有するE1と比較して、より低い駆動電圧（それぞれ、1000 cd/m²で5.5 V、1000 cd/m²で5.1 V、1000 cd/m²で5.1 V、1000 cd/m²で5.1 V、および1000 cd/m²で5.1 V）を与える。

【0156】

これらのデータは、アザDBX配位子を含有するこれらの新規な金属錯体が、燐光OLEDの優れた発光ドーパントであり、低い駆動電圧、高い効率、および長い寿命を有するデバイスをもたらす得ることを示している。まとめると、このことは、提供した新規な化合物が、一般的に用いられている業界標準の特性を示す発光ドーパント（例えばIr(ppy)₃など）を超える改良品となり得ることを示している。

【0157】

本明細書に記載した様々な態様は例示のみを目的としており、本発明の範囲を制限することを意図していないことが理解される。例えば、本明細書に記載した物質及び構造の多くは、別の物質及び構造と、本発明の精神から離れることなく置き換えることができる。特許請求の範囲に係る本発明は、したがって、本明細書に記載した具体例及び好ましい態様からの変形を含むことができ、このことは当業者には明らかであろう。本発明が何故機能するかについての様々な理論は限定されることを意図していないことが理解される。

【図 1】

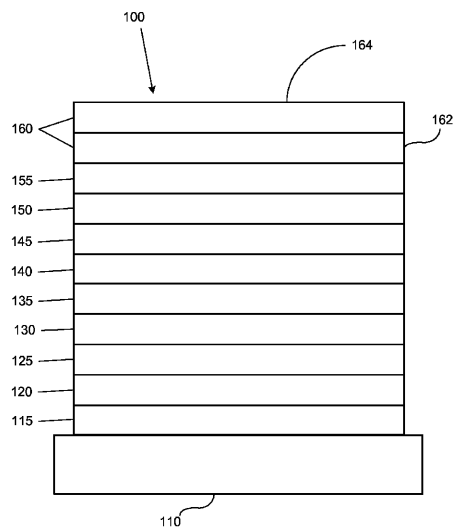


FIGURE 1

【図 2】

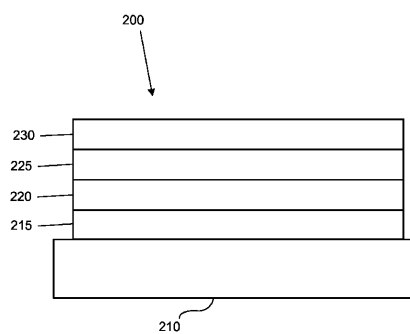


FIGURE 2

【図 3】

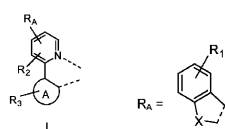


FIGURE 3

【図 4】

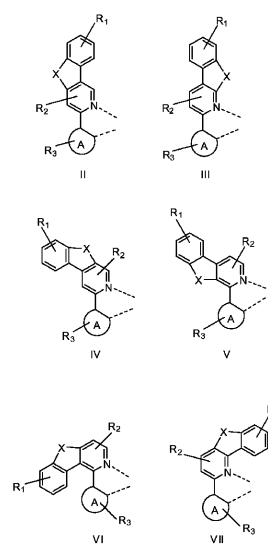


FIGURE 4

フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I
C 0 7 D 213/16 (2006.01) C 0 7 D 213/16

- (72)発明者 ディネシュ・ラヤバラブ
アメリカ合衆国・ニュー・ジャージー・0 7 4 6 3・ウォルドウィック・シェリダン・アヴェニュー・9 6
- (72)発明者 チュアンジュン・シャ
アメリカ合衆国・ニュー・ジャージー・0 8 6 4 8・ローレンスヴィル・クリーヴデン・コート・1 6
- (72)発明者 レイモンド・クウォン
アメリカ合衆国・ニュー・ジャージー・0 8 5 3 6・ブレインズボロ・バー・コート・1
- (72)発明者 ピン・マー
アメリカ合衆国・ニュー・ジャージー・0 8 5 5 0・ウェスト・ウィンザー・テイラー・コート・9 2 3 2
- (72)発明者 ウォルター・イエガー
アメリカ合衆国・ペンシルヴァニア・1 9 0 6 7・ヤードリー・ヒッコリー・ロード・2 7 4
- (72)発明者 パート・アレイン
アメリカ合衆国・ニュー・ジャージー・0 8 6 1 8・ユーイング・マスターソン・コート・5 4 3

審査官 石井 徹

- (56)参考文献 国際公開第2 0 0 8 / 0 4 4 7 2 3 (WO , A 1)
特開2 0 0 5 - 2 7 6 7 9 9 (JP , A)
国際公開第2 0 0 8 / 0 6 9 3 2 2 (WO , A 1)
米国特許出願公開第2 0 0 5 / 0 1 1 9 4 8 5 (US , A 1)
特開2 0 0 4 - 3 1 9 4 3 8 (JP , A)
国際公開第2 0 0 5 / 1 0 1 9 1 2 (WO , A 1)
特表2 0 0 8 - 5 0 5 9 2 5 (JP , A)
国際公開第2 0 0 8 / 1 0 9 8 2 4 (WO , A 1)
国際公開第2 0 0 4 / 1 1 1 0 6 6 (WO , A 1)
特開2 0 0 2 - 3 3 2 2 9 1 (JP , A)
特開2 0 0 6 - 0 0 8 9 2 7 (JP , A)

(58)調査した分野(Int.Cl. , DB名)

C 0 7 C
C 0 7 D
C 0 7 F
CAplus / REGISTRY (STN)