

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第4410631号  
(P4410631)

(45) 発行日 平成22年2月3日 (2010.2.3)

(24) 登録日 平成21年11月20日 (2009.11.20)

(51) Int. Cl.

F I

C O 9 K 11/06 (2006.01)

C O 9 K 11/06 6 6 0

H O 5 B 33/10 (2006.01)

H O 5 B 33/10

H O 1 L 51/50 (2006.01)

H O 5 B 33/14

B

C O 7 C 49/92 (2006.01)

C O 7 C 49/92

C O 7 F 15/00 (2006.01)

C O 7 F 15/00

E

請求項の数 10 外国語出願 (全 50 頁)

(21) 出願番号 特願2004-221628 (P2004-221628)

(22) 出願日 平成16年7月29日 (2004.7.29)

(65) 公開番号 特開2005-97549 (P2005-97549A)

(43) 公開日 平成17年4月14日 (2005.4.14)

審査請求日 平成19年7月27日 (2007.7.27)

(31) 優先権主張番号 92120909

(32) 優先日 平成15年7月30日 (2003.7.30)

(33) 優先権主張国 台湾 (TW)

(73) 特許権者 599142729

奇美電子股▲ふん▼有限公司

Chi Mei Optoelectronics Corporation

台湾台南県台南科学工業園区新市郷奇業路  
1号NO. 1, Chi-Yeh Road, T  
ainan Science-Base  
d Industrial Park, T  
ainan Country, Taiwa  
n, R. O. C.

(73) 特許権者 501008945

国立清華大学

台湾新竹市光復路二段101號

最終頁に続く

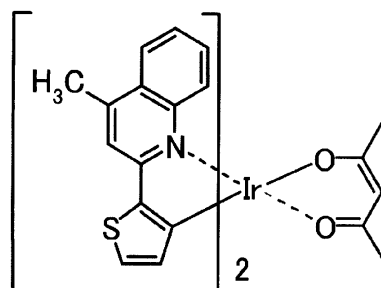
(54) 【発明の名称】 発光素子およびイリジウム錯体

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

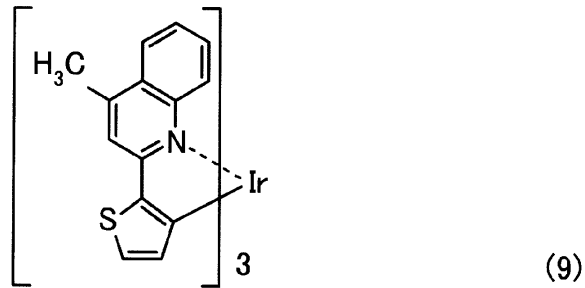
式 ( 8 ) 、 ( 9 ) 及び ( 1 5 ) から選択される化合物を含む、発光材料：

【化 1】



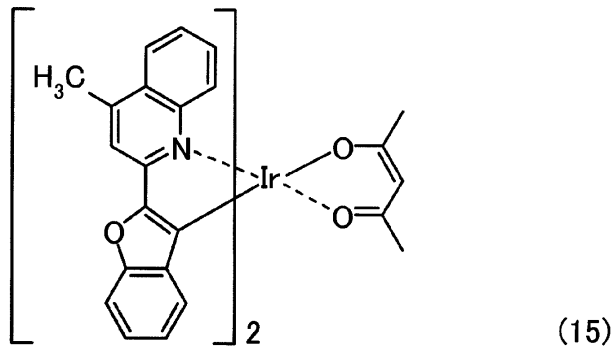
(8)

【化 2】



10

【化 3】



20

【請求項 2】

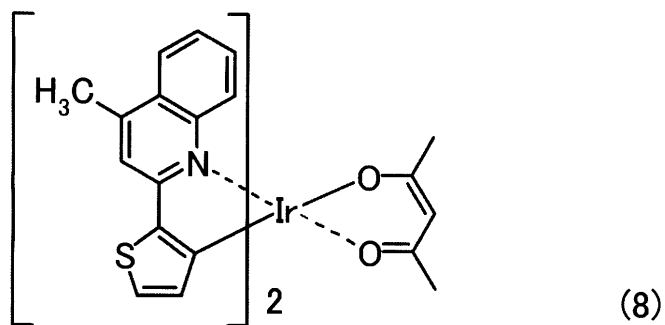
アノード、

カソード、および

該アノードと該カソードとの間に配置した発光層を含む有機層を含有する発光素子であって；

ただし、該発光層は式（ 8 ）、（ 9 ）及び（ 1 5 ）から選択される化合物を、少なくとも一種含有する発光素子；

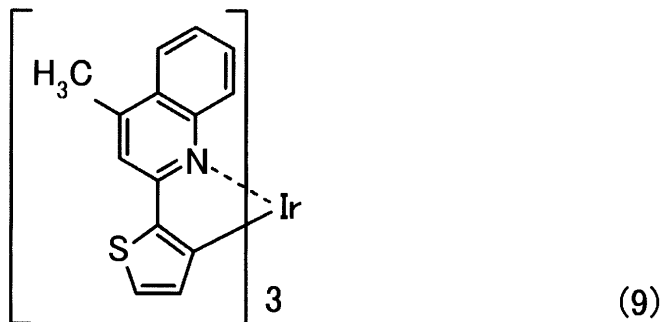
【化 4】



30

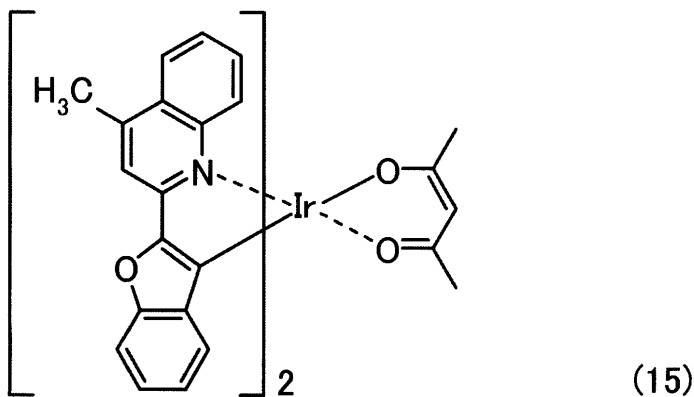
40

## 【化 5】



10

## 【化 6】



20

## 【請求項 3】

該有機層が、該カソードと該発光層の間に配置された電子輸送層、および該発光層と該アノードの間に配置された正孔輸送層をさらに含有する、請求項 2 に記載の発光素子。

## 【請求項 4】

該有機層が、該電子輸送層と該発光層の間に配置された正孔ブロッキング層、および該正孔輸送層および該アノードの間に配置された正孔注入層をさらに含有する、請求項 3 に記載の発光素子。

30

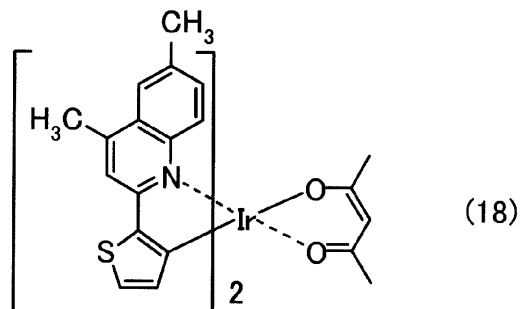
## 【請求項 5】

該アノード上に配置される光反射層を含有し、該カソードが光学透過性をもつ、請求項 2 に記載の発光素子。

## 【請求項 6】

式 (18)、(19)、(24)、(26)、(27) 及び (31) から選択される化合物を含む、発光材料：

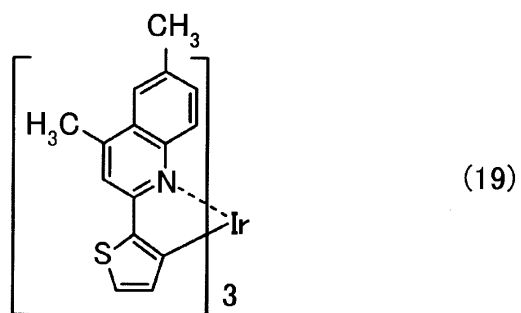
## 【化 7】



40

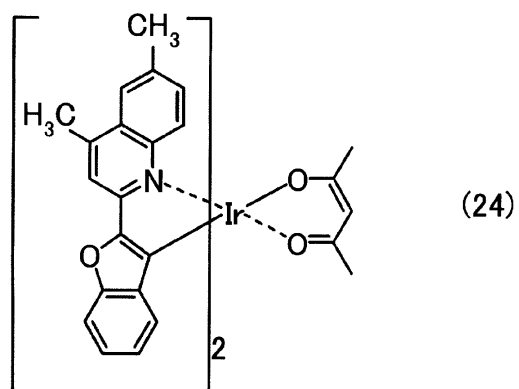
50

【化 8】



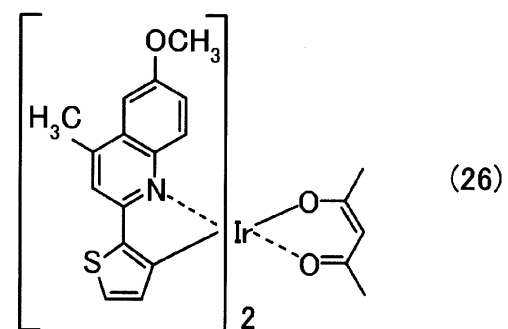
10

【化 9】



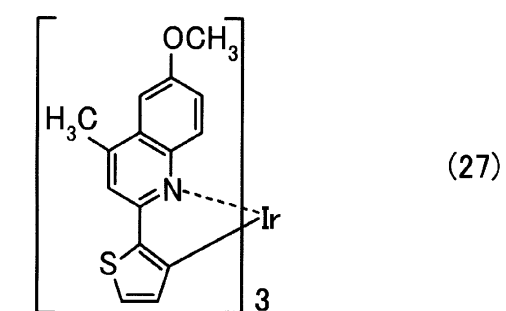
20

【化 10】



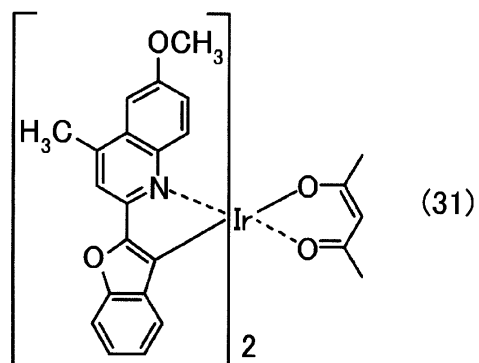
30

【化 11】



40

## 【化 1 2】



10

## 【請求項 7】

アノード、

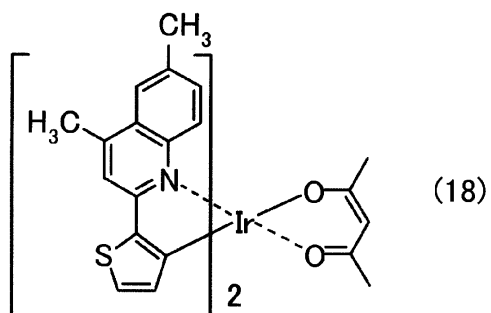
カソード、および

該アノードと該カソードの間に配置した発光層を含む有機層を含有する発光素子であって、

ただし、該有機層は、式 ( 1 8 )、( 1 9 )、( 2 4 )、( 2 6 )、( 2 7 ) 及び ( 3 1 ) から選択される化合物を、少なくとも一種含有する、発光素子：

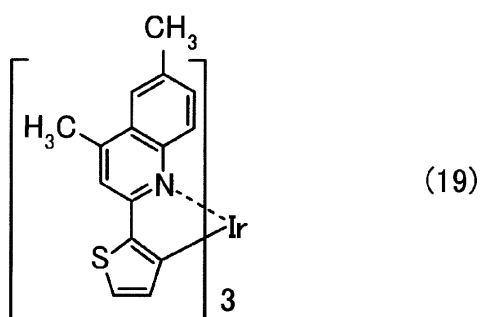
## 【化 1 3】

20



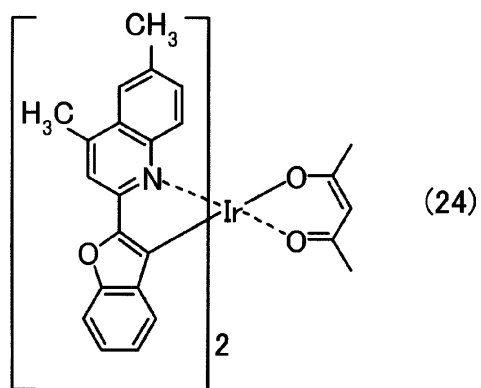
30

## 【化 1 4】



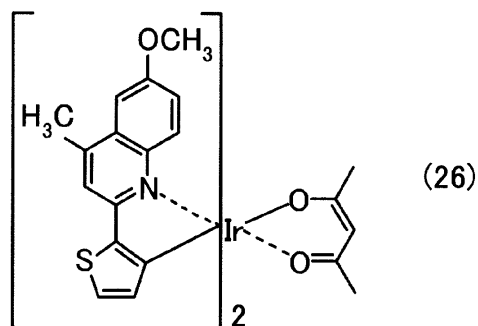
40

## 【化 1 5】



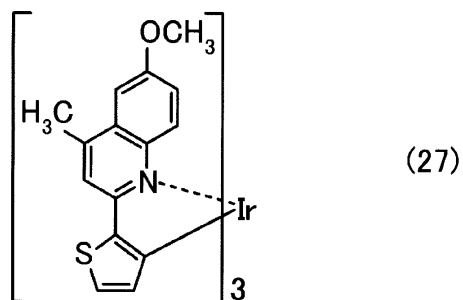
10

## 【化 1 6】



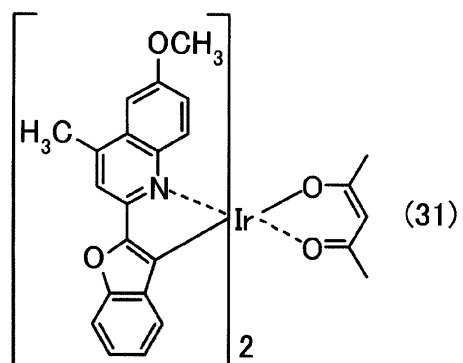
20

## 【化 1 7】



30

## 【化 1 8】



40

## 【請求項 8】

該有機層が、該カソードと該発光層の間に配置された電子輸送層、および該発光層と該アノードの間に配置された正孔輸送層をさらに含有する、請求項 7 に記載の発光素子。

## 【請求項 9】

該有機層が、該電子輸送層と該発光層の間に配置された正孔ブロッキング層、および該

50

正孔輸送層および該アノードの間に配置された正孔注入層をさらに含有する、請求項 8 に記載の発光素子。

【請求項 10】

該アノード上に配置される光反射層を含有し、該カソードが光学透過性をもつ、請求項 7 に記載の発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本開示は、イリジウム化合物およびイリジウム化合物を含有する発光素子に関する。水素原子以外の基がピリジン環の 4 位において置換された、2 アリールピリジン配位子を少なくとも 2 つ有するイリジウム化合物、および少なくとも 1 種以上の前記イリジウム化合物を含有する有機層を含む発光素子が開示される。前記イリジウム化合物を含む発光素子は、例えばディスプレイ機器、ディスプレイ、バックライト、および照明光源に用いることが可能である。

10

【背景技術】

【0002】

有機発光材料を用いたエレクトロルミネッセンス（“EL”）機器は、液晶ディスプレイ（“LCD”）に比べて視野角がより広く、そしてより応答速度が速いディスプレイを提供する可能性を持っている。自発発光を生み出す有機発光材料が、高速応答性および広範な視野角を提供し得ることが予想される。デジタルカメラ、携帯情報端末およびテレビ電話等の消費者向け電子機器に導入された場合、有機発光材料を用いた EL 機器は、電力消費量が低い、照度が高い、薄型軽量化が容易である、等の種々の利益をさらに提供することができる。

20

【0003】

ある種の有機 EL 機器は、電流を用いることによって光を放つことが可能な発光材料を含む有機薄型フィルム層を含有している。この有機薄型フィルム層は、アノードとカソードの間に形成することができる。フルカラーの EL ディスプレイパネルを製造するために、色度が適正かつ輝度効率が十分であるような、効率的な赤、緑及び青（RGB）の EL 材料を有することは有用たり得る。

【0004】

30

$\text{Ir}(\text{ppy})_3$ 、すなわち 2 - フェニルピリジンを含むイリジウム・トリス - オルトメタル化錯体（III）等のイリジウム化合物は、改良された輝度効率を持つ有機 EL 機器製造用の発光材料として使用することができる（Applied Physics Letters、75 巻、第 4 頁、1999 年）。こうした機器では、外部量子収率 8 % に到達することが可能であり、これは、従来の発光素子の外部量子収率 5 % より高いものである。

【0005】

他の発光材料は、米国出願公開 2003 / 0148142（Frydら、2003 年 8 月 7 日公開）、米国出願公開 2002 / 0121638（Grushinら、2002 年 9 月 5 日公開）、米国出願公開 2002 / 0024293（Igarashiら、2002 年 2 月 28 日公開）、米国出願公開 2001 / 0019782（Igarashiら、2001 年 9 月 6 日公開）、米国出願公開 2003 / 0096138（Leclouxら、2003 年 5 月 22 日公開）、米国出願公開 2002 / 0034656（Thompsonら、2002 年 3 月 21 日公開）、米国出願公開 2003 / 0173896（Grushinら、2003 年 9 月 18 日公開）、米国出願公開 2002 / 0182441（Lamanskyら、2002 年 12 月 5 日公開）、米国出願公開 2003 / 0162299（Hsiehら、2003 年 8 月 28 日公開）、米国出願公開 2003 / 0198831（Oshiyamaら、2003 年 10 月 23 日公開）、米国出願公開 2003 / 0017361（Thompsonら、2003 年 1 月 23 日公開）、国際公開 WO / 064700、および “Electrophosphorescent Light Emitting Devices Using New Iridium(III) Complexes（新規イリジウム（III）錯体を用いた電子リン光性発光機器）” と題された、刊行された論文 Mat. Res. Soc. Symp. Proc.、708 巻、2002 年、Ma

40

50

terials Research Society)に開示されているが、発光材料に関連する部分は、参照により本明細書に援用される。

【0006】

しかしながら、改良された輝度効率を持つ発光材料が引き続き求められている。

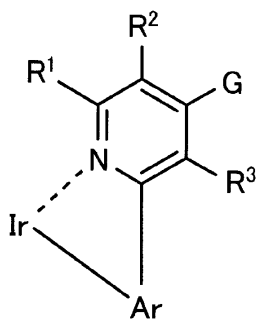
【発明の開示】

【0007】

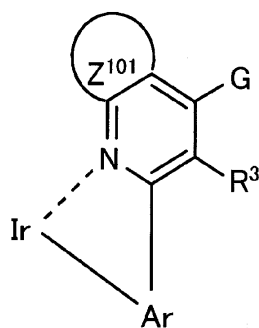
本開示は、2 - アリールピリジン配位子を少なくとも2つ有するイリジウム化合物であって、その中の非水素原子基がピリジン環の4位において置換されたイリジウム化合物を提供する。本開示における第一の態様では、式(I)および(II)より選ばれる部分構造を含む化合物を含有する発光材料が提供される。

【0008】

【化1】



(I)



(II)

【0009】

式中、 $R^1$ 、 $R^2$ および $R^3$ は、独立して水素、ハロゲン、アルキル、置換アルキル、アルコキシ、置換アルコキシ、シクロアルキル、置換シクロアルキル、アルケニル、置換アルケニル、アルキニル、置換アルキニル、アリール、置換アリール、ヘテロアリール、置換ヘテロアリール、アルキルチオ、アルキルアルコキシ、置換アルキルアルコキシ、アシル、アシルオキシ、アミノアシル、スルホニル、スルフィニル、シリルおよびホウ素基から選択され、

【0010】

Arはアリーレン、置換アリーレン、ヘテロアリーレンおよび置換ヘテロアリーレン基から選択され、

【0011】

Gは、アルキル、置換アルキル、アリール、置換アリール、ヘテロアリール、置換ヘテロアリール、アルコキシ、置換アルコキシ、アリールオキシ、置換アリールオキシ、ジアルキルアミノ、置換ジアルキルアミノ、アルキルアミノ、置換アルキルアミノ、ジアリールアミノ、置換ジアリールアミノ、アミノ、置換アミノ、シアノ、F、シリル、ホウ素基等の非水素原子基から選択され、ならびに

【0012】

$Z^{101}$ は基を含み、ただし $Z^{101}$ は $Z^{101}$ に結合する炭素原子と共にアリール、置換アリール

10

20

30

40

50



、ヘテロアリーールまたは置換ヘテロアリーール環を形成し、

【 0 0 1 3 】

以下の条件： $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ およびGは、F、 $-C_nF_{2n+1}$ 、 $-OC_nF_{2n+1}$ および $-OCF_2X$ （式中、 $n$ は1～6の整数、XはH、ClおよびBrから選択される）から選択されず、

【 0 0 1 4 】

Arが置換アリーレンから選択される場合には、この置換基はF、 $-C_nF_{2n+1}$ 、 $-OC_nF_{2n+1}$ および $-OCF_2X$ （式中、 $n$ は1～6の整数、XはH、ClおよびBrから選択される）から選択されず、そして

【 0 0 1 5 】

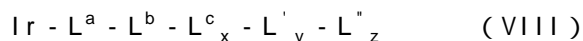
Gが $-OCH_3$ および $-N(CH_3)_2$ から選択される場合には、Arはフェニレンではない、を満たす。 10

【 0 0 1 6 】

本開示の第二の態様では、アノード、カソード、ならびに該アノードと該カソードとの間に配置した発光層を含む有機層を含有し、該発光層が式（I）および（II）から選択される部分構造を有する化合物を少なくとも一種含有する発光素子が提供される。

【 0 0 1 7 】

本開示の第三の態様では、式（VIII）の化合物を含有する発光素子が提供される。



【 0 0 1 8 】

式中、 $x$ は0および1から選択され、 20

【 0 0 1 9 】

$y$ は0、1および2から選択され、

【 0 0 2 0 】

$z$ は0および1から選択され、

【 0 0 2 1 】

$L^{'}$ は単座配位子および二座配位子から選択され、

【 0 0 2 2 】

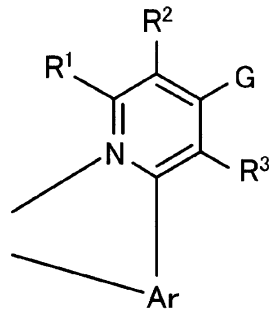
$L^{''}$ は単座配位子から選択され、

【 0 0 2 3 】

$L^a$ 、 $L^b$ および $L^c$ は独立して式（IX）および（X）から選択され、 30

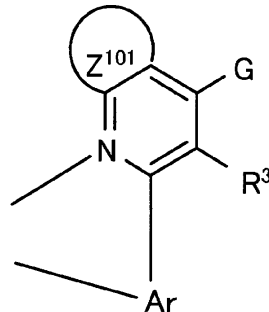
【 0 0 2 4 】

## 【化 2】



(IX)

10



(X)

20

【 0 0 2 5 】

式中、

【 0 0 2 6 】

x = 0 または y + z = 0 であり、

【 0 0 2 7 】

y = 2 の場合、z = 0 であり、

【 0 0 2 8 】

L' および L'' はリン配位子から選択されず、

【 0 0 2 9 】

L' が単座配位子である場合、y + z = 2 であり、

30

【 0 0 3 0 】

L' が二座配位子である場合、y = 1、z = 0 であり、

【 0 0 3 1 】

R¹、R² および R³ は、独立して水素、ハロゲン、アルキル、置換アルキル、アルコキシ、置換アルコキシ、シクロアルキル、置換シクロアルキル、アルケニル、置換アルケニル、アルキニル、置換アルキニル、アリール、置換アリール、ヘテロアリール、置換ヘテロアリール、アルキルチオ、アルキルアルコキシ、置換アルキルアルコキシ、アシル、アシルオキシ、アミノアシル、スルホニル、スルフィニル、シリルおよびホウ素基から選択され、

【 0 0 3 2 】

Ar はアリーレン、置換アリーレン、ヘテロアリーレンおよび置換ヘテロアリーレン基から選択され、

40

【 0 0 3 3 】

G は、アルキル、置換アルキル、アルコキシ、置換アルコキシ、アリール、置換アリール、ヘテロアリール、置換ヘテロアリール、アミノ、置換アミノ、シアノ、F、シリル、ホウ素基から選択され、ならびに

【 0 0 3 4 】

Z¹⁰¹ は基を含み、ただし Z¹⁰¹ は Z¹⁰¹ に結合する炭素原子と共にアリール、置換アリール、ヘテロアリールまたは置換ヘテロアリール環を形成し、

【 0 0 3 5 】

50

以下の条件、

【 0 0 3 6 】

$R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ およびGは、F、 $-C_nF_{2n+1}$ 、 $-OC_nF_{2n+1}$ および $-OCF_2X$ （式中、nは1～6の整数、XはH、ClおよびBrから選択される）から選択されず、

【 0 0 3 7 】

Arが置換アリーレンから選択される場合には、この置換基はF、 $-C_nF_{2n+1}$ 、 $-OC_nF_{2n+1}$ および $-OCF_2X$ （式中、nは1～6の整数、XはH、ClおよびBrから選択される）から選択されず、

【 0 0 3 8 】

Gが $-OCH_3$ および $-N(CH_3)_2$ から選択される場合には、Arは $C_6$ アリーレンではない、を満

10

【 0 0 3 9 】

本開示の第4の態様では、アノード、カソード、ならびに該アノードと該カソードとの間に配置した有機層を含有し、該有機層が発光層を含有し、該発光層が式(IV)の化合物を含有する発光素子が提供される。

【発明を実施するための最良の形態】

【 0 0 4 0 】

本発明の更なる実施態様は、以下の記載に記述されるか、あるいは本発明の実施により確認される場合がある。

【 0 0 4 1 】

20

本開示で使用される定義

別段明示しない限り、明細書および特許請求の範囲に使用される、成分量、反応条件およびその他を表現する全ての数字は、全ての例において「約」という用語によって修飾されると理解される。従って、そうでないことを明記しない限り、以下の明細書および添付された請求の範囲に記載される数値的なパラメータは概算のものであり、各検査測定法に用いられる標準偏差によって変動する場合がある。最後に、そして特許請求の範囲への均等論の適用の制限が意図されないよう、請求項に記載されるそれぞれの数値的なパラメータは、少なくとも報告された有効桁数に鑑み、また、通常の周辺技術を適用して解釈されるべきである。

【 0 0 4 2 】

30

「アシル」とは $-C(O)R$ である基を指し、ここでRは、ここで定義される通り、水素、アルキル、シクロアルキル、アリール、アリールアルキル、ヘテロアルキル、およびヘテロアリールである。代表例は、ホルミル、アセチル、シクロヘキシカルボニル、シクロヘキシルメチルカルボニル、ベンゾイル、ベンジルカルボニル、ピバロイルなどであるが、これに限定されるものではない。

【 0 0 4 3 】

「アシルオキシ」とは $-OC(O)R$ である基を指し、ここでRは、ここで定義される通り、水素、アルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、またはアリールアルキルである。

【 0 0 4 4 】

40

「アルコキシカルボニルアミノ」とは $-NHC(O)OR$ である基を指し、ここでRは、ここで定義される通り、水素、アルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、またはアリールアルキルである。

【 0 0 4 5 】

「アミノアシル」とは $-NRC(O)R'$ である基を指し、ここでRおよびR'は、ここで定義される通り、独立して水素、アルキル、シクロアルキル、アリール、アリールアルキル、ヘテロアルキル、およびヘテロアリールから選択される。代表例としてはホルミルアミノ、アセチルアミノ、シクロヘキシカルボニルアミノ、シクロヘキシルメチルカルボニルアミノ、ベンゾイルアミノ、ベンジルカルボニルアミノなどが含まれるが、これらに限定されるものではない。

50

## 【 0 0 4 6 】

「アルケニル」とは、母体となるアルケンの一炭素原子から、一個の水素原子を除去して得られ、少なくともひとつの炭素 - 炭素の二重結合を持つ、不飽和で分岐、直鎖または環状のアルキル基を指す。このような基は、二重結合に関してシス型、トランス型のいずれの構造であっても良い。典型的なアルケニル基には、エテニル；プロブ - 1 - エン - 1 - イル、プロブ - 1 - エン - 2 - イル、プロブ - 2 - エン - 1 - イル（アリル）、プロブ - 2 - エン - 2 - イル、シクロプロブ - 1 - エン - 1 - イル、シクロプロブ - 2 - エン - 1 - イルなどのプロペニル；ブタ - 1 - エン - 1 - イル、ブタ - 1 - エン - 2 - イル、2 - メチル - プロブ - 1 - エン - 1 - イル、ブタ - 2 - エン - 1 - イル、ブタ - 2 - エン - 1 - イル、ブタ - 2 - エン - 2 - イル、ブタ - 1、3 - ジエン - 1 - イル、ブタ - 1、3 - ジエン - 2 - イル、シクロブタ - 1 - エン - 1 - イル、シクロブタ - 1 - エン - 3 - イル、シクロブタ - 1、3 - ジエン - 1 - イルなどのブテニル；などが含まれるが、これらに限定されるものではない。特定の実施態様において、アルケニル基は2 ~ 20個の炭素原子を有し、その他の実施態様では、2 ~ 6個の炭素原子を有する。

10

## 【 0 0 4 7 】

「アルコキシ」とは - ORである基を指し、ここでRは、ここで定義される通り、アルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、またはアリールアルキル基である。代表例としてメトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、シクロヘキシルオキシなどが含まれるが、これらに限定されるものではない。

20

## 【 0 0 4 8 】

「アルコキシカルボニル」とは - C(=O) - アルコキシである基を指し、アルコキシはここで定義される通りである。

## 【 0 0 4 9 】

「アルキル」とは飽和あるいは不飽和の、分岐、直鎖、あるいは環状の一価の炭化水素基であって、母体となるアルカン、アルケン又はアルキンの一炭素原子から、一個の水素原子を除去して得られるものを指す。典型的なアルキル基には、メチル；エタニル、エテニル、エチニルなどのエチル；プロパン - 1 - イル、プロパン - 2 - イル、シクロプロパン - 1 - イル、プロブ - 1 - エン - 1 - イル、プロブ - 1 - エン - 2 - イル、プロブ - 2 - エン - 1 - イル（アリル）、シクロプロブ - 1 - エン - 1 - イル、シクロプロブ - 2 - エン - 1 - イル、プロブ - 1 - イン - 1 イル、プロブ - 2 - イン - 1 イルなどのプロピル；ブタン - 1 - イル、ブタン - 2 - イル、2 - メチル - プロパン - 1 - イル、2 - メチル - プロパン - 2 - イル、シクロブタン - 1 - イル、ブタ - 1 - エン - 1 - イル、ブタ - 1 - エン - 2 - イル、2 - メチル - プロブ - 1 - エン - 1 - イル、ブタ - 2 - エン - 1 - イル、ブタ - 2 - エン - 2 - イル、ブタ - 1、3 - ジエン - 1 - イル、ブタ - 1、3 - ジエン - 2 - イル、シクロブタ - 1 - エン - 1 - イル、シクロブタ - 1 - エン - 3 - イル、シクロブタ - 1、3 - ジエン - 1 - イル、ブタ - 1 - イン - 1 - イル、ブタ - 1 - イン - 3 - イル、ブタ - 3 - イン - 1 - イルなどのブチル；などが含まれるが、これらに限定されるものではない。

30

## 【 0 0 5 0 】

「アルキル」という用語は、いかなる飽和度または飽和レベルを持つ基、すなわち、一重炭素 - 炭素結合だけを有する基、ひとつまたはそれ以上の二重炭素 - 炭素結合を有する基、ひとつまたはそれ以上の三重炭素 - 炭素結合を有する基、ならびに一重、二重および三重炭素 - 炭素結合を併せ持つ基、のいずれであっても含むことを特に意図している。特定の飽和レベルが意図された場合には、「アルカニル」、「アルケニル」および「アルキニル」の表現が使用される。ある特定の実施態様では、アルキル基は1 ~ 20個の炭素原子を有する。別の実施態様では、アルキル基は1 ~ 6個の炭素原子を有し、これを低級アルキル基と呼ぶ。

40

## 【 0 0 5 1 】

「アルキルアミノ」は、- NHRである基を指し、ここでRは、ここで定義される通りアルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、又はアリールアル

50

キル基である。代表例にはメチルアミノ、エチルアミノ、1-メチルエチルアミノ、シクロヘキシルアミノなどが含まれるが、これらに限定されるものではない。

【0052】

「アルキルチオ」とは、-SRである基を指し、ここでRは、ここで定義される通りアルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、またはアリールアルキル基であり、ここで定義される通り任意に置換されていてよい。代表例にはメチルチオ、エチルチオ、プロピルチオ、ブチルチオなどが含まれるが、これらに限定されるものではない。

【0053】

「アルキルチオカルボニル」とは、-C(S)Rである基を指し、ここでRは、ここで定義される通り、水素、アルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、またはアリールアルキル基である。

10

【0054】

「アルキニル」とは、不飽和で分岐、直鎖または環状のアルキル基で、少なくともひとつの炭素-炭素の三重結合を有し、母体となるアルキンの一炭素原子から、一個の水素原子を除去して得られるものを指す。典型的なアルキニル基には、エチニル；プロプ-1-イン-1イル、プロプ-2-イン-1イルなどのプロピニル；ブタ-1-イン-1-イル、ブタ-1-イン-3-イル、ブタ-3-イン-1-イルなどのブチニル；などが含まれるが、これらに限定されるものではない。特定の実施態様では、アルキニル基は2~20個の炭素原子を有し、他の実施態様では、3~6個の炭素原子を有している。

20

【0055】

「アミノ」とは、-NH<sub>2</sub>である基を指す。

【0056】

「アミノカルボニル」とは、-C(O)NRR'である基を指し、ここでRおよびR'は、ここで定義される通り、独立して水素、アルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、またはアリールアルキルから選択されるか、あるいは、任意にRおよびR'はRおよびR'に結合する窒素原子と共にひとつ以上の複素環または置換複素環を形成する。ここで用いられる通り、アミノカルボニルはまたカルバモイルとも称される。

【0057】

「アミノスルホニル」とは、-S(O<sub>2</sub>)NRR'である基を指し、ここでRおよびR'は、ここで定義される通り、独立して、水素、アルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、またはアリールアルキルから選択されるか、あるいは、任意にRおよびR'はRおよびR'に結合する窒素原子と共にひとつ以上の複素環または置換複素環を形成する。ここで用いられる通り、アミノスルホニルはまたスルファモイルとも称される。

30

【0058】

「アリール」とは、母体となる芳香族環系の一炭素原子から、一個の水素原子を除去して誘導される、一価の芳香族炭化水素基を指す。典型的なアリール基には、アセアントリレン、アセナフチレン、アセフェナントリレン、アントラセン、アズレン、ベンゼン、クリセン、コロネン、フルオランテン、フルオレン、ヘキサセン、ヘキサフェン、ヘキサレン、as-インダセン、s-インダセン、インダン、インデン、ナフタレン、オクタセン、オクタフェン、オクタレン、オバレン、ペンタ-2、4-ジエン、ペンタセン、ペンタレン、ペンタフェン、ペリレン、フェナレン、フェナントレン、ピセン、プレイアデン、ピレン、ピラントレン、ルビセン、トリフェニレン、トリナフタレンなどから誘導される基が含まれるが、これらに限定されるものではない。特定の実施態様において、アリール基は6~20個の炭素原子から構成されることができる。

40

【0059】

「アリーレン」とは、母体となる芳香族環系から誘導される、二価の芳香族炭化水素基を指す。典型的なアリーレン基には、アセアントリレン、アセナフチレン、アセフェナントリレン、アントラセン、アズレン、ベンゼン、クリセン、コロネン、フルオランテン、フルオレン、ヘキサセン、ヘキサフェン、ヘキサレン、as-インダセン、s-インダセン

50

、インダン、インデン、ナフタレン、オクタセン、オクタフェン、オクタレン、オバレン、ペンタ - 2、4 - ジエン、ペンタセン、ペンタレン、ペンタフェン、ペリレン、フェナレン、フェナントレン、ピセン、プレイアデン、ピレン、ピラントレン、ルピセン、トリフェニレン、トリナフタレンなどから誘導される基が含まれるが、これらに限定されるものではない。特定の実施態様において、アリーレン基は 6 ~ 20 個の炭素原子から構成されることができる。

【0060】

「アリールアルキル」とは、非環式アルキル基において、その中の炭素原子、典型的には末端または $sp^3$ 炭素原子、に結合している水素原子のひとつがアリール基に置換されているものを指す。典型的なアリールアルキル基には、ベンジル、2 - フェニルエタン - 1 - イル、2 - フェニルエテン - 1 - イル、ナフチルメチル、2 - ナフチルエタン - 1 - イル、2 - ナフチルエテン - 1 - イル、ナフトベンジル、2 - ナフトフェニルエタン - 1 - イルなどが含まれるが、これらに限定されるものではない。特定のアルキル部分を意図する場合は、アリールアルカニル、アリールアルケニルおよび/またはアリールアルキニルの命名が使用される。特定の実施態様において、アリールアルキル基は( $C_{6-30}$ )アリールアルキルとすることができる。例えばアリールアルキル基のアルカニル、アルケニルまたはアルキニル部分を( $C_{1-10}$ )と、アリール部分を( $C_{6-20}$ )とすることができる。

【0061】

「アリールアルキルオキシ」とは、アリールアルキル - O - である基を指しており、ただしアリールアルキルはここに定義される通りである。

【0062】

「アリールオキシカルボニル」とは、-C(O)-O-アリールである基を指しており、ただしアリールはここに定義される通りである。

【0063】

「カルボニル」とは、-C(O)基を指す。

【0064】

「カルボキシ」とは、-C(O)OH基を指す。

【0065】

「本開示の化合物」とは、ここに開示される一般式およびこれらの一般式の亜属により包含される化合物、およびこれらの一般式およびその亜属の範囲内の全ての特定の化合物を指す。本開示の化合物は、特定の種、亜属、または、これより大きな属を含み、これらはそれぞれ化学構造あるいは化学名で特定される。さらに、本開示の化合物には、ここに示される、これらの種、亜属または属のいずれかの置換または修飾もまた包含される。

【0066】

化学構造と化学名に不一致が生じた場合は、化学構造によって化合物の特定が行なわれる。本開示の化合物はひとつ以上のキラル中心および/または二重結合を含有し得るもので、したがって、二重結合による異性体(すなわち、幾何異性体)、エナンチオマーまたはジアステレオマーなどが立体異性体として存在し得る。したがって、本明細書における表現の範疇にあり、全体または部分的に関連する形を有する化学構造のいずれであっても、立体異性体として純粋な形状であるもの(例えば、幾何異性体として純粋、エナンチオマーとして純粋、あるいはジアステレオマーとして純粋)、およびエナンチオマー的および立体異性的な混成物を含む、示されている化合物のエナンチオマーおよび立体異性体として可能性を持つもの全てを包含する。さらに、本開示の化合物の部分構造が例示されている場合、アスタリスクは、残りの分子に対してこの部分構造が結合するポイントを示している。エナンチオマー的及び立体異性的な混成物は、当業者に周知の分離技術またはキラル合成技術を用いてエナンチオマーまたは立体異性体成分へと分割されることが可能である。

【0067】

「シアノ」とは、-CNである基を指す。

【0068】

「シクロアルキル」とは、飽和あるいは不飽和の環状アルキル基を指す。特定の飽和レベルを意図する場合は、「シクロアルカニル」または「シクロアルケニル」の命名が用いられる。典型的なシクロアルキル基にはシクロプロパン、シクロブタン、シクロペンタン、シクロヘキサンなどから誘導される基が含まれるが、これらに限定されるものではない。特定の実施態様において、シクロアルキル基は、例えば $C_{3-6}$ シクロアルキルなどの $C_{3-10}$ シクロアルキルとすることができる。

#### 【0069】

「ジアルキルアミノ」とは、 $-NRR'$ 基である基を指し、ここでRおよびR'は独立して、ここに定義される通り水素、アルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、またはアリールアルキルから選択されるか、あるいは、任意にR'およびR'はR'およびR'に結合する窒素原子と共にひとつ以上の複素環または置換複素環を形成する。代表例には、ジメチルアミノ、メチルエチルアミノ、ジ-(1-メチルエチル)アミノ、(シクロヘキシル)(メチル)アミノ、(シクロヘキシル)(エチル)アミノ、(シクロヘキシル)(プロピル)アミノなどが含まれるが、これらに限定されるものではない。

10

#### 【0070】

「ハロゲン」とは、フルオロ、クロロ、ブロモ、またはヨード基を指す。

#### 【0071】

「ヘテロアルキル、ヘテロアルカニル、ヘテロアルケニル、ヘテロアルキニル」とは、それぞれアルキル、アルカニル、アルケニルおよびアルキニル基において、各基の中のひとつ以上の炭素原子（およびこれに結合している水素原子全て）がそれぞれ独立して同一または異種のヘテロ原子基によって置換されているものを指す。典型的なヘテロ原子基には、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-O-O-$ 、 $-S-S-$ 、 $-O-S-$ 、 $-NR'-$ 、 $=N-N=$ 、 $-N=N-$ 、 $-N=N-NR'-$ 、 $-PH-$ 、 $-P(O)_2-$ 、 $-O-P(O)_2-$ 、 $-S(O)-$ 、 $-S(O)_2-$ および $-SnH_2-$ （ただしR'は水素、アルキル、置換アルキル、シクロアルキル、置換シクロアルキル、アリールまたは置換アリール）などが含まれるが、これらに限定されるものではない。

20

#### 【0072】

「ヘテロアリール」とは、母体である芳香族複素環系において、1原子から1個の水素を除去して誘導される、一価の芳香族複素環基を指す。典型的なヘテロアリール基には、アクリジン、アルシンドール、カルバゾール、 $\beta$ -カルボリン、クロマン、クロメン、シンノリン、フラン、イミダゾール、インダゾール、インドール、インドリン、インドリジン、イソベンゾフラン、イソクロメン、イソインドール、イソインドリン、イソキノリン、イソチアゾール、イソオキサゾール、ナフチリジン、オキサジアゾール、オキサゾール、ペリミジン、フェナントリジン、フェナンスロリン、フェナジン、フタラジン、プテリジン、プリン、ピラン、ピラジン、ピラゾール、ピリダジン、ピリジン、ピリミジン、ピロール、ピロリジン、キナゾリン、キノリン、キノリジン、キノキサリン、テトラゾール、チアジアゾール、チアゾール、チオフェン、トリアゾール、キサンテンなどから誘導されるものが含まれるが、これらに限定されるものではない。特定の実施態様において、ヘテロアリール基は5～20の員から構成されるヘテロアリール、例えば5～10の員から構成されるヘテロアリールなどとすることができる。特定の実施態様において、ヘテロアリール基はチオフェン、ピロール、ベンゾチオフェン、ベンゾフラン、インドール、ピリジン、キノリン、イミダゾール、オキサゾールおよびピラジンから誘導されたものとすることができる。

30

40

#### 【0073】

「ヘテロアリーレン」とは、母体である芳香族複素環系において、1原子から、または2個の異なる原子から2個の水素を除去して誘導される、二価の芳香族複素環基を指す。典型的なヘテロアリーレン基には、アクリジン、アルシンドール、カルバゾール、 $\beta$ -カルボリン、クロマン、クロメン、シンノリン、フラン、イミダゾール、インダゾール、インドール、インドリン、インドリジン、イソベンゾフラン、イソクロメン、イソインドール、イソインドリン、イソキノリン、イソチアゾール、イソオキサゾール、ナフチリジン

50

、オキサジアゾール、オキサゾール、ペリミジン、フェナントリジン、フェナンスロリン、フェナジン、フタラジン、プテリジン、プリン、ピラン、ピラジン、ピラゾール、ピリダジン、ピリジン、ピリミジン、ピロール、ピロリジン、キナゾリン、キノリン、キノリジン、キノキサリン、テトラゾール、チアジアゾール、チアゾール、チオフェン、トリアゾール、キサンテンなどから誘導されるものが含まれるが、これらに限定されるものではない。特定の実施態様において、ヘテロアリーレン基は5～20の員から構成されるヘテロアリーレン、例えば5～10の員から構成されるヘテロアリーレンとすることができる。特定の実施態様において、ヘテロアリーレン基はチオフェン、ピロール、ベンゾチオフェン、ベンゾフラン、インドール、ピリジン、キノリン、イミダゾール、オキサゾールおよびピラジンから誘導されたものとすることができる。

10

#### 【0074】

「置換」とは、ひとつ以上の水素原子が、それぞれ独立して同一または異種の置換基で置き換えられた基のことを指す。典型的な置換基には、 $-X$ 、 $-R^{10}$ 、 $-O^-$ 、 $=O$ 、 $-OR^{10}$ 、 $-SR^{10}$ 、 $-S^-$ 、 $=S$ 、 $-NR^{10}R^{11}$ 、 $=NR^{10}$ 、 $-CX_3$ 、 $-CF_3$ 、 $-CN$ 、 $-OCN$ 、 $-SCN$ 、 $-NO$ 、 $-NO_2$ 、 $=N_2$ 、 $-N_3$ 、 $-S(O)_2O^-$ 、 $-S(O)_2OH$ 、 $-S(O)_2R^{10}$ 、 $-OS(O)_2O^-$ 、 $-OS(O)_2R^{10}$ 、 $-P(O)(O^-)_2$ 、 $-P(O)(OR^{10})(O^-)$ 、 $-OP(O)(OR^{10})(OR^{11})$ 、 $-C(O)R^{10}$ 、 $-C(S)R^{10}$ 、 $-C(O)OR^{10}$ 、 $-C(O)NR^{10}R^{11}$ 、 $-C(O)O^-$ 、 $-CS(O)OR^{10}$ 、 $-NR^{10}C(O)NR^{10}R^{11}$ 、 $-NR^{10}C(S)NR^{10}R^{11}$ 、 $-NR^{10}C(NR^{10})NR^{10}R^{11}$ 、 $-C(NR^{10})NR^{10}R^{11}$ 、 $-S(O)_2NR^{10}R^{11}$ 、 $-NR^{10}S(O)_2R^{11}$ 、 $-NR^{10}C(O)R^{11}$ および $-S(O)R^{10}$ （ただし $X$ はそれぞれ独立してハロゲンであり； $R^{10}$ および $R^{11}$ はそれぞれ独立して水素、アルキル、置換アルキル、アリール、置換アリール、アリールアルキル、置換アリールアルキル、シクロアルキル、置換シクロアルキル、ヘテロアルキル、置換ヘテロアルキル、ヘテロアリール、置換ヘテロアリール、 $-NR^{12}R^{13}$ 、 $-C(O)R^{12}$ または $-S(O)_2R^{12}$ であり、あるいは、任意に $R^{10}$ および $R^{11}$ は、 $R^{10}$ および $R^{11}$ が結合する原子と共にひとつ以上のヘテロアリール、または置換ヘテロアリール環を形成し；また、 $R^{12}$ および $R^{13}$ は独立して水素、アルキル、置換アルキル、アリール、置換アリール、アリールアルキル、置換アリールアルキル、シクロアルキル、置換シクロアルキル、ヘテロアルキル、置換ヘテロアルキル、ヘテロアリール、または置換ヘテロアリールであり、あるいは任意に $R^{12}$ および $R^{13}$ は、 $R^{12}$ および $R^{13}$ が結合する窒素原子と共にひとつ以上のヘテロアリール、または置換ヘテロアリール環を形成する）などが含まれるが、これらに限定されるものではない。特定の実施態様において、第三アミンまたは芳香族窒素は、対応する窒素酸化物が形成されるように、ひとつ以上の酸素原子で置換されていてもよい。

20

30

#### 【0075】

「スルホニル」とは、 $-S(O)_2R$ である基を指し、ここで $R$ は、ここに定義される通り水素、アルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、またはアリールアルキルである。

#### 【0076】

「スルホニルアミノ」とは、 $-NHS(O)_2R$ である基を指し、ここで $R$ は、ここで定義される通り、水素、アルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、またはアリールアルキルである。

#### 【0077】

「スルフィニル」とは、 $-S(O)R$ である基を指し、ここで $R$ は、ここに定義される通り、水素、アルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、またはアリールアルキルである。

40

#### 【0078】

「シリル」とは、 $-SiRR'R''$ である基を指し、ここで $R$ 、 $R'$ 、 $R''$ は、ここで定義される通り、独立に、水素、アルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、アリール、またはヘテロアリールである。

#### 【0079】

「ホウ素基」とは、 $-BRR'$ である基を指し、ここで $R$ および $R'$ は、ここで定義される通り、独立に、水素、アルキル、ヘテロアルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル

50



、アリアル、またはヘテロアリアルである。

【 0 0 8 0 】

これより、本開示の実施態様について詳細に言及する。本開示中のある特定の実施態様について説明がなされるが、本開示の実施態様をこれらの記載された実施態様に限定することを意図したものではないことが理解される。これとは逆に、本開示の実施態様に対する言及は、代替、変更、および均等物を、添付の特許請求の範囲で定義される本開示の実施態様の精神と範囲に含まれうるものとして、包含することを意図するものである。

【 0 0 8 1 】

明細書および添付の特許請求の範囲における単数形（原文の“a”、“an”、“the”）には、文脈からそうではないことが明らかでない限り、複数形についての引用が包含される。

10

【 0 0 8 2 】

本開示は、概して2-アリアルピリジン配位子を少なくとも2以上含むイリジウム化合物であって、その中の非水素原子基がピリジン環の4位において置換されたイリジウム化合物に関する。このようなイリジウム化合物は、例えば内部量子収率100%を生み出す可能性を有している。イリジウム化合物の化学構造は、色彩調節、エネルギー伝達形態、凝集防止および発光のクエンチングを目的として修飾することが可能である。置換基の役割は、電子的効果および立体構造における相互作用において、非常に明らかである。置換基の配位子への導入は、吸収および発光スペクトルにおける小さな変化を、これらのスペクトルの原因である電子伝達の基本的な性質を大きく変化させずに引き起こすことが可能である。しかしながら、配位子の置換基は、発光状態の失活を著しく低下させることが可能であり、これによって量子収量が増加する。嵩高い置換基は、分子の凝集を回避し、濃度消光を減少させることができる。立体構造における相互作用は、複数環の間の非局在化における変化による、p-対称性配位子の電子軌道（オービタル）が関与する励起状態のエネルギーに影響を及ぼすこともまた予想される。

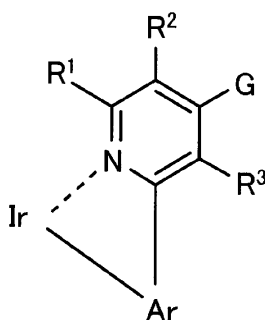
20

【 0 0 8 3 】

本開示における特定の実施態様は、式（I）および（II）から選択される部分構造を含むイリジウム化合物に関する。

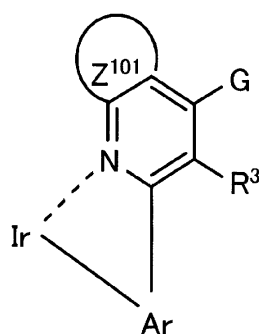
【 0 0 8 4 】

## 【化 3】



(I)

10



(II)

20

## 【 0 0 8 5 】

式中、 $R^1$ 、 $R^2$ および $R^3$ は、独立して水素、ハロゲン、アルキル、置換アルキル、アルコキシ、置換アルコキシ、シクロアルキル、置換シクロアルキル、アルケニル、置換アルケニル、アルキニル、置換アルキニル、アリール、置換アリール、ヘテロアリール、置換ヘテロアリール、アルキルチオ、アルキルアルコキシ、置換アルキルアルコキシ、アシル、アシルオキシ、アミノアシル、スルホニル、スルフィニル、シリルおよびホウ素基から選択され、

## 【 0 0 8 6 】

Arはアリーレン、置換アリーレン、ヘテロアリーレンおよび置換ヘテロアリーレン基から選択され、

## 【 0 0 8 7 】

Gは、アルキル、置換アルキル、アルコキシ、置換アルコキシ、アリール、置換アリール、ヘテロアリール、置換ヘテロアリール、アリールオキシ、置換アリールオキシ、ジアルキルアミノ、置換ジアルキルアミノ、アルキルアミノ、置換アルキルアミノ、ジアリールアミノ、置換ジアリールアミノ、アミノ、置換アミノ、シアノ、F、シリル、ホウ素基等の非水素原子基から選択され、

## 【 0 0 8 8 】

$Z^{101}$ は基を含み、ただし $Z^{101}$ は $Z^{101}$ に結合する炭素原子と共にアリール、置換アリール、ヘテロアリールまたは置換ヘテロアリール環を形成し、

## 【 0 0 8 9 】

ただし $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ およびGは、F、 $-C_nF_{2n+1}$ 、 $-OC_nF_{2n+1}$ および $-OCF_2X$ （式中、nは1～6の整数、XはH、ClおよびBrから選択される）から選択されず、Arが置換アリーレンから選択される場合には、この置換基はF、 $-C_nF_{2n+1}$ 、 $-OC_nF_{2n+1}$ および $-OCF_2X$ （式中、nは1～6の整数、XはH、ClおよびBrから選択される）から選択されず、そして、Gが $-OCH_3$ および $-N(CH_3)_2$ から選択される場合には、Arは $C_6$ アリーレンではない、という条件を満たす。

## 【 0 0 9 0 】

特定の実施態様において、Gは、アルキル、アリール、ヘテロアリール、アルコキシ、

30

40

50

アリールオキシ、N - N' - ジアルキルアミノ、N - N' - ジアリールアミノ、アルキルエーテル、アルキルアミノ、シアノ、フッ素、シリルおよびホウ素基から選択することができる。特定の実施態様において、Gは、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、イソブチル基およびネオブチル基などの、1 ~ 8 個の炭素原子を有するアルキル基から選択することができる。特定の実施態様において、Gは、例えば置換または非置換のフェニレン基、置換または非置換のナフタレン基、置換または非置換のアントラセン基、置換または非置換のフェニレン - ビニレン基、置換または非置換のナフタレン - ビニレン基、および置換または非置換のアントラセン - ビニレン基などの、アリール基から選択することができる。特定の実施態様において、Gは、例えば置換または非置換のチオフェン基、置換または非置換のカルバゾール基、置換または非置換のピロール基、置換または非置換のピリジン基、置換または非置換のチオフェン - ビニレン基、あるいは非置換のカルバゾール - ビニレン基、ならびに置換または非置換のピロール - ビニレン基などの、ヘテロアリール基から選択することができる。

10

## 【0091】

式(Ⅰ)および(Ⅱ)の化合物の特定の実施態様において、Gは、C<sub>1-8</sub>アルキル、C<sub>1-8</sub>置換アルキル、C<sub>5-10</sub>アリール、C<sub>5-10</sub>置換アリール、C<sub>5-10</sub>ヘテロアリール、C<sub>5-10</sub>置換ヘテロアリール、C<sub>1-8</sub>アルコキシ、C<sub>1-8</sub>置換アルコキシ、C<sub>1-8</sub>ジアルキルアミノ、C<sub>1-8</sub>置換ジアルキルアミノ、C<sub>1-8</sub>ヘテロアルキル、C<sub>1-8</sub>置換ヘテロアルキル、C<sub>1-8</sub>アルキルアミノ、C<sub>1-8</sub>置換アルキルアミノ、-CNおよびFから選択される。

## 【0092】

20

式(Ⅰ)および(Ⅱ)の化合物の特定の実施態様において、Gは、C<sub>1-4</sub>アルキル、C<sub>1-4</sub>置換アルキル、C<sub>1-4</sub>アルコキシ、C<sub>1-4</sub>置換アルコキシから選択される。

## 【0093】

式(Ⅰ)および(Ⅱ)の化合物の特定の実施態様において、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>およびR<sup>3</sup>置換基は、独立してアルキル、置換アルキル、アルコキシ、置換アルコキシ、アミノ、アルキルアミノ、置換アルキルアミノ、ジアルキルアミノ、置換ジアルキルアミノ、アシル、置換アシル、アルコキシカルボニル、置換アルコキシカルボニル、アシルオキシ、置換アシルオキシ、アミノアシル、置換アミノアシル、アルコキシカルボニルアミノ、置換アルコキシカルボニルアミノ、スルホニルアミノ、置換スルホニルアミノ、アミノスルホニル、置換アミノスルホニル、アミノカルボニル、置換アミノカルボニル、スルホニル、置換スルホニル、スルフィニル、置換スルフィニル、ウレイド、置換ウレイド、ホスホアミド、置換ホスホアミド、-OH、-CN、ハロゲン、-S(O)<sub>2</sub>OH、-COOH、-N(O)<sub>2</sub>、-NHOH、-SOOH、-NHNH<sub>2</sub>、-NH<sub>2</sub>、シリルおよび置換シリルから選択される。

30

## 【0094】

式(Ⅱ)の化合物の特定の実施態様において、Z<sup>101</sup>およびZ<sup>101</sup>に結合する炭素原子は、非置換または置換の芳香族六員環を形成する。

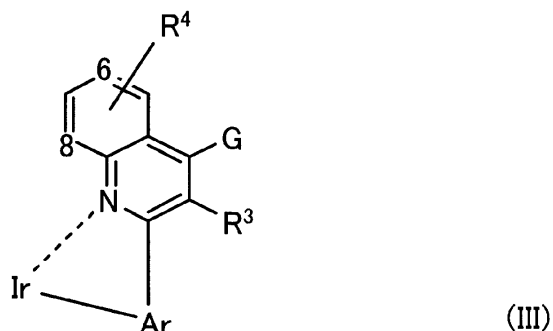
## 【0095】

式(Ⅱ)の化合物の特定の実施態様において、イリジウム化合物は式(Ⅲ)の部分構造を含有する：

## 【0096】

40

## 【化 4】



10

## 【0097】

式中、 $R^4$ は6および8位で置換され、そして各 $R^4$ は独立して水素、アルキル、置換アルキル、ヘテロアルキル、置換ヘテロアルキル、アリールおよび置換アリールから選択される。 $R^3$ 、ArおよびGは、前記式(Ⅰ)および(Ⅱ)に対する記述の通り定義づけることができる。

## 【0098】

式(Ⅲ)の化合物の特定の実施態様において、各 $R^4$ は互いに独立して $C_{1-4}$ アルキル、 $C_{1-4}$ 置換アルキル、 $C_{1-4}$ アルコキシ、および $C_{1-4}$ 置換アルコキシから選択される。

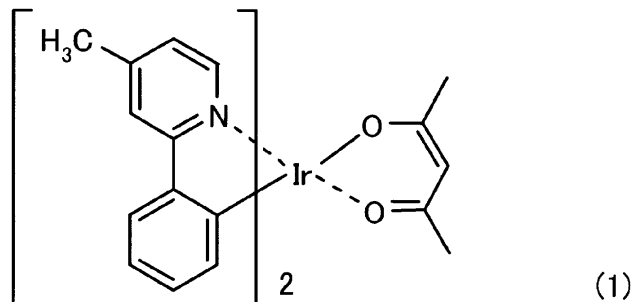
## 【0099】

式(Ⅰ)および(Ⅱ)の化合物の特定の実施態様において、該化合物は式(1)および式(2)から選択される：

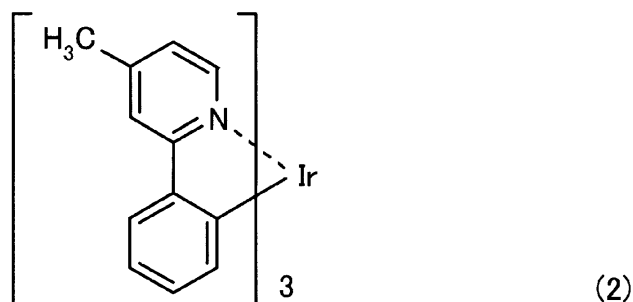
20

## 【0100】

## 【化 5】



30



40

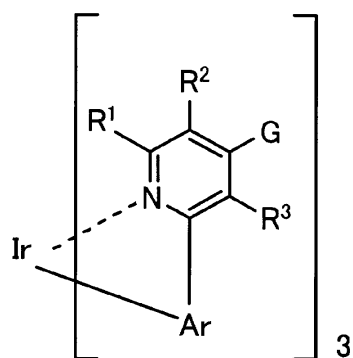
## 【0101】

本開示におけるイリジウム化合物のあるものは、同一構造を持つ配位子を含有することができる。例えば、本開示におけるイリジウム化合物のあるものは、式(Ⅳ)および式(Ⅴ)の構造を有している。

## 【0102】

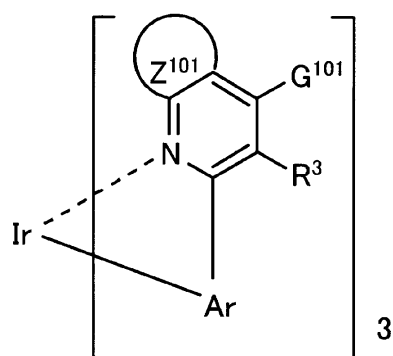
50

【化 6】



(IV)

10



(V)

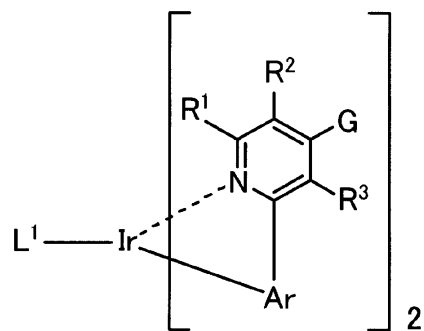
20

【 0 1 0 3 】

本開示におけるイリジウム化合物のあるものは、異なる構造を持つ配位子を含有している。例えば、本開示における特定のイリジウム化合物は、式(VI)および式(VII)で表されるものなど、複数の構造を有する配位子を含有することができる：

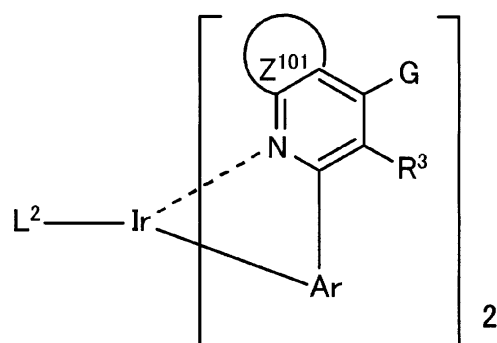
【 0 1 0 4 】

## 【化 7】



(VI)

10



(VII)

20

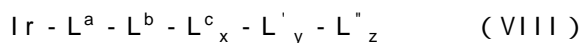
## 【0105】

式 (VI) および (VII) において、 $L^1$  および  $L^2$  は単座配位子および二座配位子から選択される。 $L^1$  および  $L^2$  は、例えば、遷移金属錯体化学において知られる従来の配位子などの適当な配位子であれば、いずれをも含むことができる。単座配位子の例には、塩化物、硝酸イオンおよびモノアミンが含まれる。二座配位子の例には、エチレンジアミン、置換エチレンジアミン、アセチルアセトネートおよび置換アセチルアセトネートなどの2個の配位基を有する化合物が含まれる。

30

## 【0106】

特定の実施態様において、本開示の化合物は式 (VIII) の化合物に関するものである：



## 【0107】

式中、 $x$  は0および1から選択され、

## 【0108】

$y$  は0、1および2から選択され、

## 【0109】

$z$  は0および1から選択され、

## 【0110】

$L^d$  は単座配位子および二座配位子から選択され、

40

## 【0111】

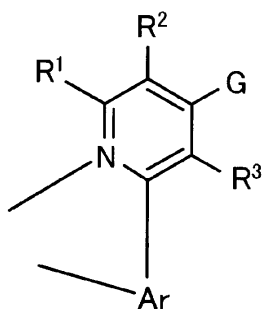
$L^e$  は単座配位子から選択され、

## 【0112】

$L^a$ 、 $L^b$  および  $L^c$  は独立して式 (IX) および (X) から選択され、

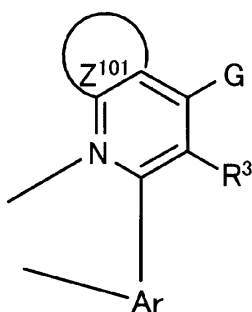
## 【0113】

## 【化 8】



(IX)

10



(X)

20

【 0 1 1 4 】

式中、

【 0 1 1 5 】

x = 0 または y + z = 0 のいずれかであり、

【 0 1 1 6 】

y = 2 の場合、z = 0 であり、

【 0 1 1 7 】

L' および L'' はリン配位子から選択されず、

30

【 0 1 1 8 】

L' が単座配位子である場合、y + z = 2 であり、

【 0 1 1 9 】

L' が二座配位子である場合、y = 1、z = 0 であり、

【 0 1 2 0 】

R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup> および R<sup>3</sup> は、独立して水素、ハロゲン、アルキル、置換アルキル、アルコキシ、置換アルコキシ、シクロアルキル、置換シクロアルキル、アルケニル、置換アルケニル、アルキニル、置換アルキニル、アリール、置換アリール、ヘテロアリール、置換ヘテロアリール、アルキルチオ、アルキルアルコキシ、置換アルキルアルコキシ、アシル、アシルオキシ、アミノアシル、スルホニル、スルフィニル、シリルおよびホウ素基から選択され

40

【 0 1 2 1 】

Ar はアリーレン、置換アリーレン、ヘテロアリーレンおよび置換ヘテロアリーレン基から選択され、

【 0 1 2 2 】

G は、アルキル、置換アルキル、アルコキシ、置換アルコキシ、アリール、置換アリール、ヘテロアリール、置換ヘテロアリール、アリールオキシ、置換アリールオキシ、ジアルキルアミノ、置換ジアルキルアミノ、アルキルアミノ、置換アルキルアミノ、ジアリールアミノ、置換ジアリールアミノ、アミノ、置換アミノ、シアノ、F、シリルおよびホウ素基等の非水素原子基から選択され、ならびに

50

## 【 0 1 2 3 】

$Z^{101}$ は基を含み、ただし $Z^{101}$ は $Z^{101}$ に結合する炭素原子と共にアリール、置換アリール、ヘテロアリールまたは置換ヘテロアリール環を形成し、

## 【 0 1 2 4 】

以下の条件、

## 【 0 1 2 5 】

$R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ およびGは、F、 $-C_nF_{2n+1}$ 、 $-OC_nF_{2n+1}$ および $-OCF_2X$ （式中、nは1～6の整数、XはH、ClおよびBrから選択される）から選択されず、

## 【 0 1 2 6 】

Arが置換アリールから選択される場合には、この置換基はF、 $-C_nF_{2n+1}$ 、 $-OC_nF_{2n+1}$ および $-OCF_2X$ （式中、nは1～6の整数、XはH、ClおよびBrから選択される）から選択されず、

10

## 【 0 1 2 7 】

Gが $-OCH_3$ および $-N(CH_3)_2$ から選択される場合には、Arはフェニレンではない、を満たす。

## 【 0 1 2 8 】

特定の実施態様において、Gは、アルキル、アリール、ヘテロアリール、アルコキシ、アリールオキシ、 $N,N'$ -ジアルキルアミノ、 $N,N'$ -ジアリールアミノ、アルキルエーテル、アルキルアミノ、シアノおよびフッ素から選択することができる。特定の実施態様において、Gは、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、イソブチル基およびネオブチル基などの、1～8個の炭素原子を有するアルキル基から選択することができる。特定の実施態様において、Gは、例えば置換または非置換のフェニレン基、置換または非置換のナフタレン基、置換または非置換のアントラセン基、置換または非置換のフェニレン-ビニレン基、置換または非置換のナフタレン-ビニレン基、および置換または非置換のアントラセン-ビニレン基などの、アリール基から選択することができる。特定の実施態様において、Gは、例えば置換または非置換のチオフェン基、置換または非置換のカルバゾール基、置換または非置換のピロール基、置換または非置換のピリジン基、置換または非置換のチオフェン-ビニレン基、あるいは非置換のカルバゾール-ビニレン基、ならびに置換または非置換のピロール-ビニレン基などの、ヘテロアリール基から選択することができる。

20

30

## 【 0 1 2 9 】

式(VIII)の化合物の特定の実施態様において、Gは、 $C_{1-8}$ アルキル、 $C_{1-8}$ 置換アルキル、 $C_{5-10}$ アリール、 $C_{5-10}$ 置換アリール、 $C_{5-10}$ ヘテロアリール、 $C_{5-10}$ 置換ヘテロアリール、 $C_{1-8}$ アルコキシ、 $C_{1-8}$ 置換アルコキシ、 $C_{1-8}N,N'$ -ジアルキルアミノ、 $C_{1-8}$ 置換 $N,N'$ -ジアルキルアミノ、 $C_{1-8}$ ヘテロアルキル、 $C_{1-8}$ 置換ヘテロアルキル、 $C_{1-8}$ アルキルアミノ、 $C_{1-8}$ 置換アルキルアミノ、 $-CN$ およびFから選択される。

## 【 0 1 3 0 】

式(VIII)の化合物の特定の実施態様において、Gは、 $C_{1-4}$ アルキル、 $C_{1-4}$ 置換アルキル、 $C_{1-4}$ アルコキシおよび $C_{1-4}$ 置換アルコキシから選択される。

## 【 0 1 3 1 】

式(VIII)の化合物の特定の実施態様において、Gは、 $C_{1-8}$ アルキル、 $C_{1-8}$ 置換アルキル、 $C_{5-14}$ アリールおよび $C_{5-14}$ 置換アリールから選択される。

40

## 【 0 1 3 2 】

式(VIII)の化合物の特定の実施態様において、 $R^1$ 、 $R^2$ および $R^3$ 置換基は、独立してアルキル、置換アルキル、アルコキシ、置換アルコキシ、アミノ、アルキルアミノ、置換アルキルアミノ、ジアルキルアミノ、置換ジアルキルアミノ、アシル、置換アシル、アルコキシカルボニル、置換アルコキシカルボニル、アシルオキシ、置換アシルオキシ、アミノアシル、置換アミノアシル、アルコキシカルボニルアミノ、置換アルコキシカルボニルアミノ、スルホニルアミノ、置換スルホニルアミノ、アミノスルホニル、置換アミノスルホニル、アミノカルボニル、置換アミノカルボニル、スルホニル、置換スルホニル、スルフ

50



ィニル、置換スルフィニル、ウレイド、置換ウレイド、ホスホアミド、置換ホスホアミド、  
- OH、- CN、ハロゲン、- S(O)<sub>2</sub>OH、- COOH、- N(O)<sub>2</sub>、- NHOH、- SOOH、- NHNH<sub>2</sub>、- N  
H<sub>2</sub>、シリルおよび置換シリルから選択される。

【 0 1 3 3 】

式 (VIII) の化合物の特定の実施態様において、Z<sup>101</sup> および Z<sup>101</sup> に結合する炭素原子は、  
非置換または置換の芳香族六員環を形成する。

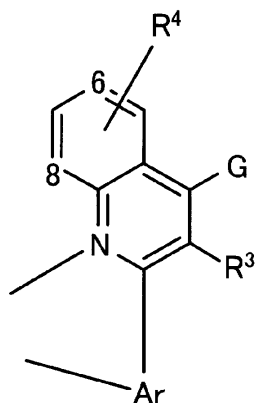
【 0 1 3 4 】

式 (VIII) の化合物の特定の実施態様において、配位子 L<sup>a</sup>、L<sup>b</sup> および L<sup>c</sup> のひとつ以上が  
独立して式 (XI) から選択され、

【 0 1 3 5 】

【 化 9 】

10



(XI)

20

【 0 1 3 6 】

式中、R<sup>4</sup>は6および8位で置換され、そして各R<sup>4</sup>は独立して水素、アルキル、置換アル  
キル、ヘテロアルキル、置換ヘテロアルキル、アリールおよび置換アリールから選択され  
る。R<sup>3</sup>、ArおよびGは、前記式 (I) および (II) に対する記述の通り定義づけることが  
できる。

【 0 1 3 7 】

式 (XI) の化合物の特定の実施態様において、各R<sup>4</sup>は独立してC<sub>1-4</sub>アルキル、C<sub>1-4</sub>置換  
アルキル、C<sub>1-4</sub>アルコキシ、およびC<sub>1-4</sub>置換アルコキシから選択される。

30

【 0 1 3 8 】

本開示のイリジウム化合物ピリジン環の3位および/または4位への置換基の導入は、  
非放射減衰率および自己消光現象を減少させることができる。非放射減衰および自己消光  
は、励起状態のエネルギーの減少につながる代替機構を提供する。したがって、非放射減  
衰率および自己消光の減少は、発光効率の増強を導くことが可能である。特定の電子供与  
および電子求引特性を持つピリジン環の3位および/または4位における置換のバリエー  
ションは、本開示のイリジウム化合物のエレクトロルミネセント特性の微調整を容易にし  
うる。3位および/または4位における置換基の選択は、本開示のイリジウム化合物のEL  
発光素子の効率および輝度の最適化のために利用することが可能である。

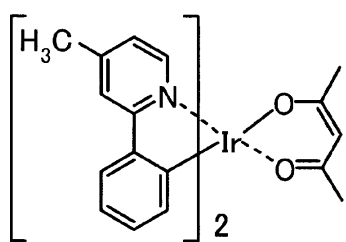
40

【 0 1 3 9 】

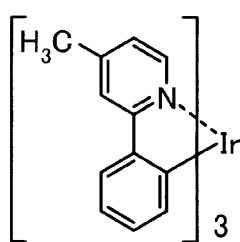
本開示のイリジウム化合物のいくつかの例としては、式 (1) ~ (64) の化学構造を  
有するものが含まれるが、これらに限定されるものではない：

【 0 1 4 0 】

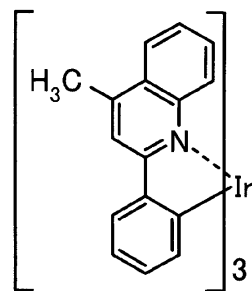
【化 1 0】



1

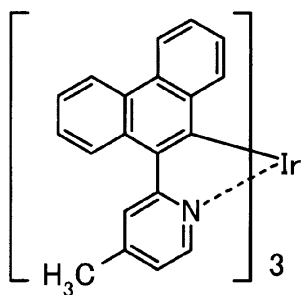


2

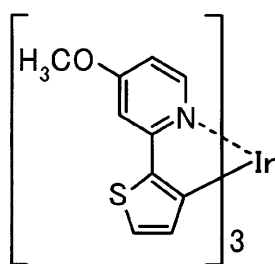


3

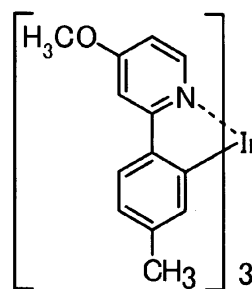
10



4

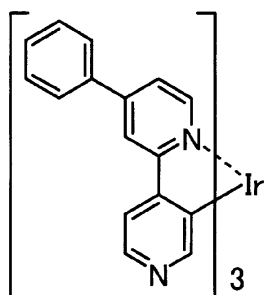


5

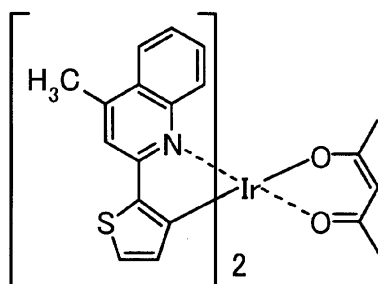


6

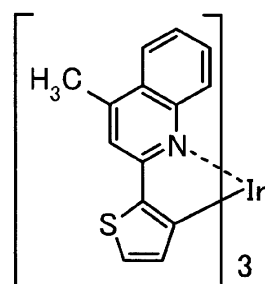
20



7



8

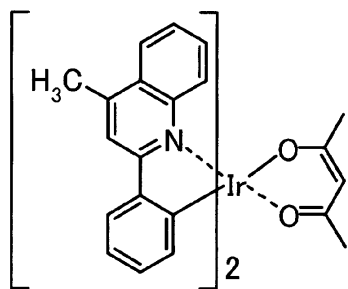


9

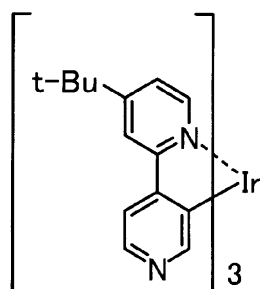
30

【 0 1 4 1】

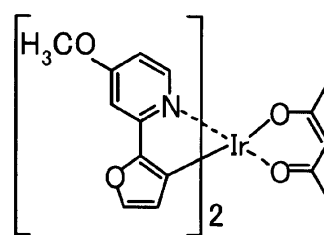
## 【化 1 1】



10

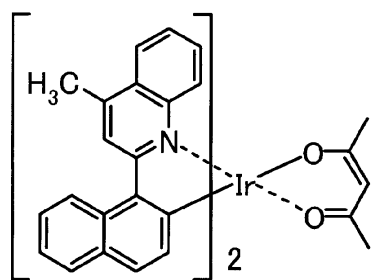


11

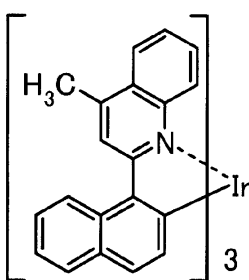


12

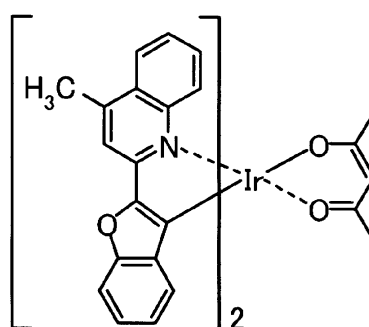
10



13

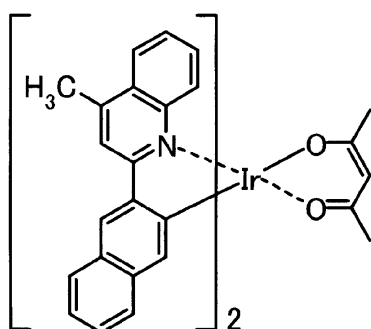


14

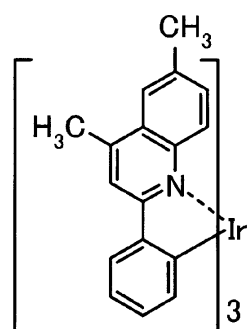


15

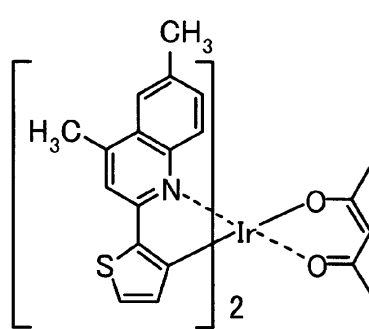
20



16



17

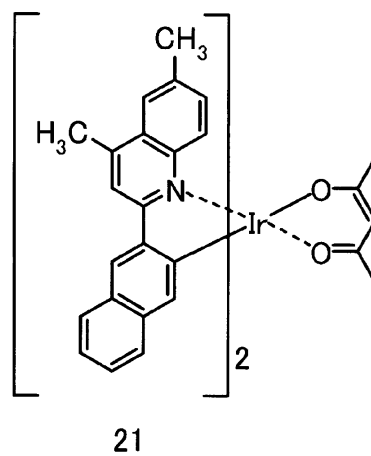
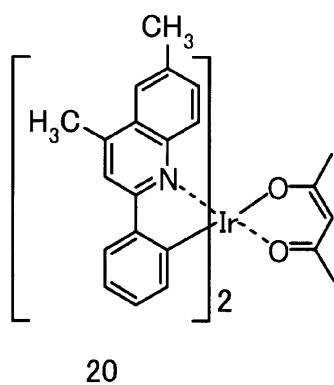
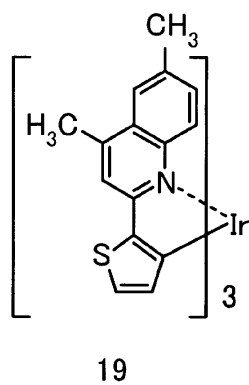


18

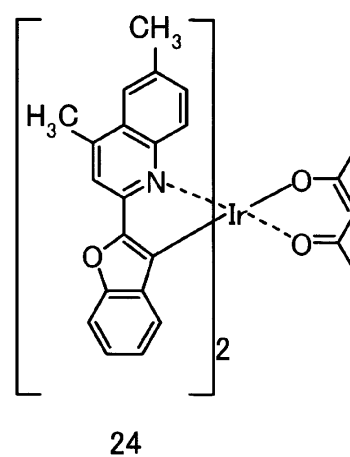
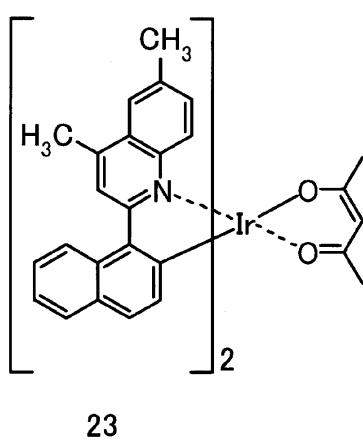
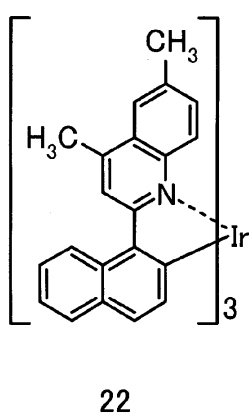
30

## 【 0 1 4 2 】

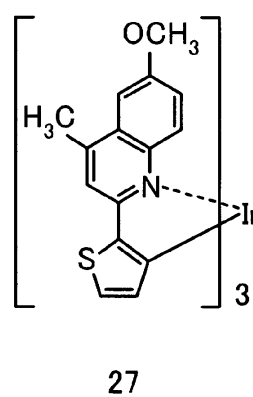
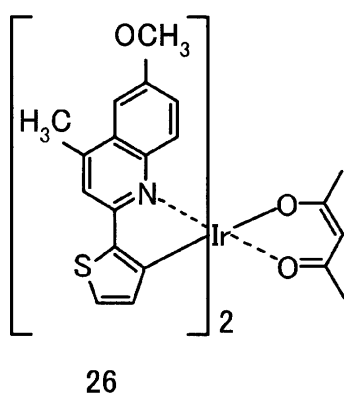
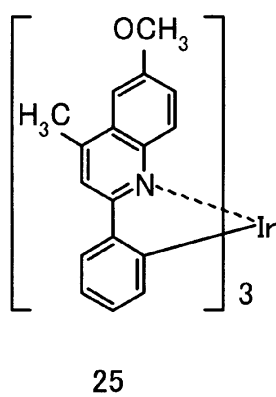
## 【化 1 2】



10



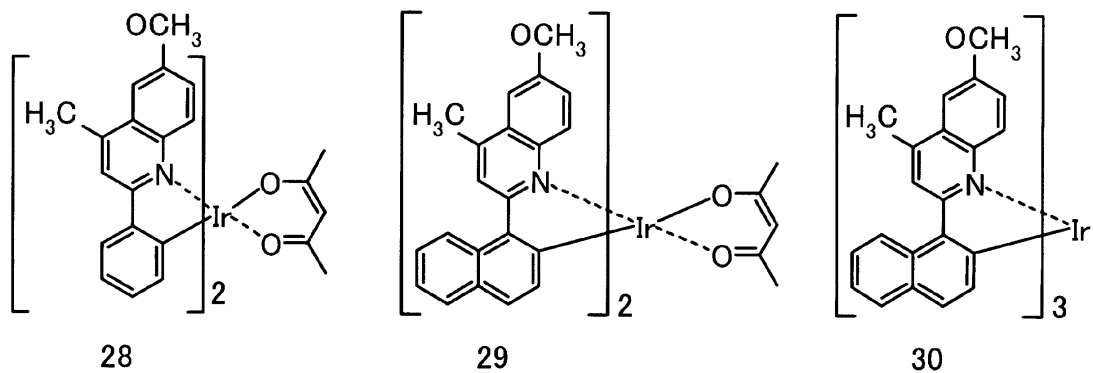
20



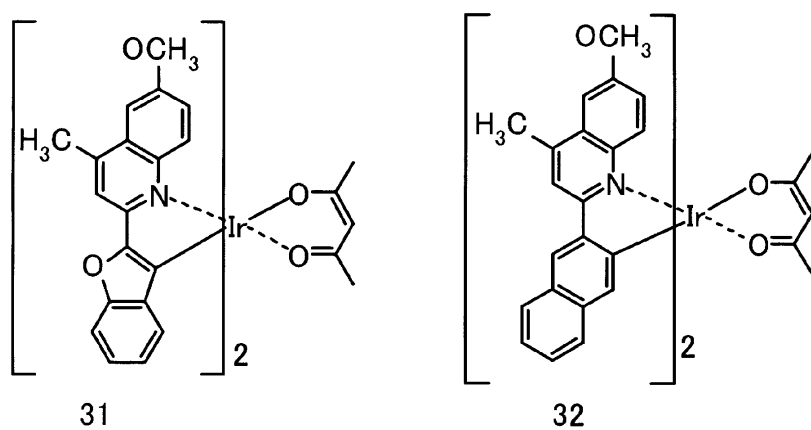
30

## 【 0 1 4 3 】

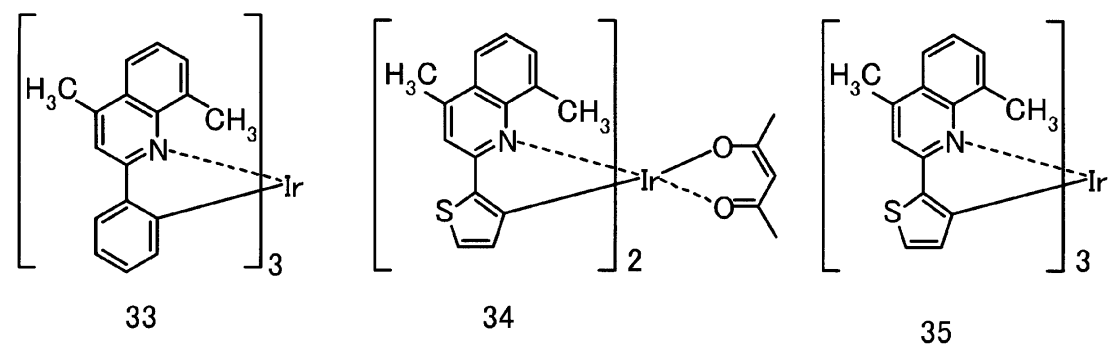
## 【化 1 3】



10



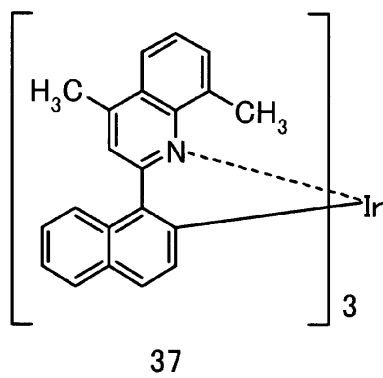
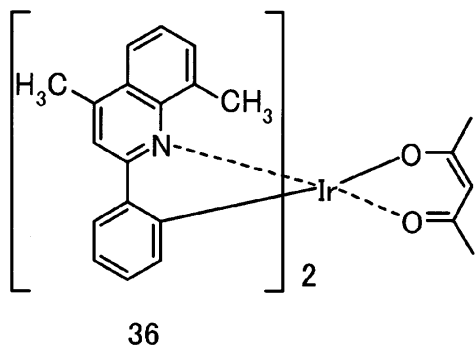
20



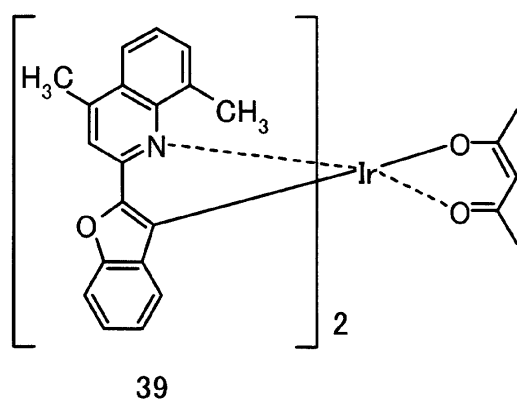
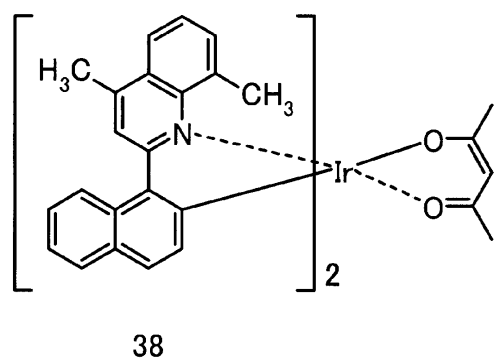
30

## 【 0 1 4 4 】

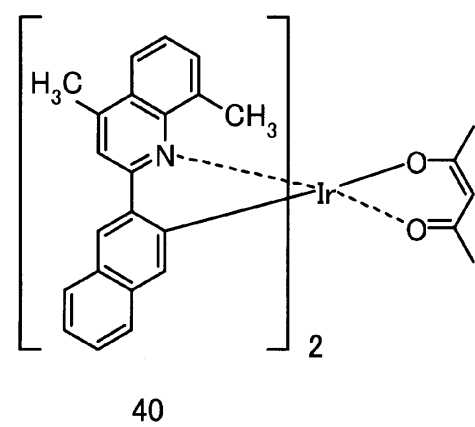
## 【化 1 4】



10



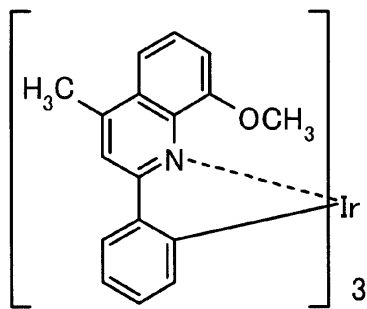
20



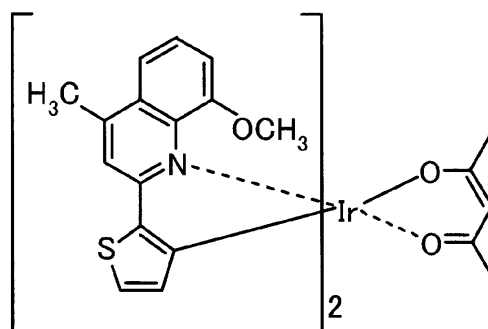
30

## 【 0 1 4 5 】

【化 1 5】

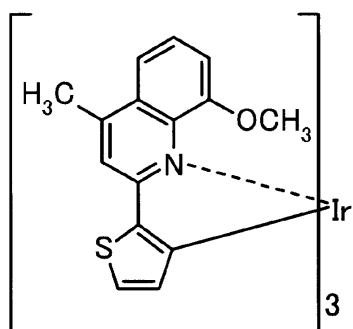


41

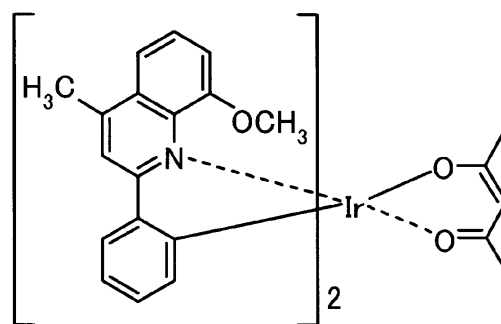


42

10

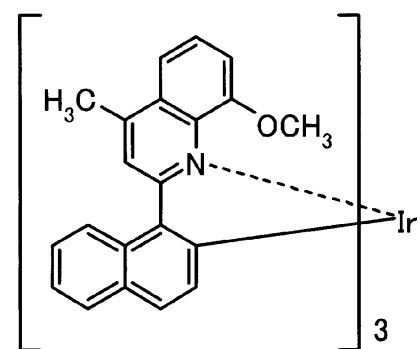


43

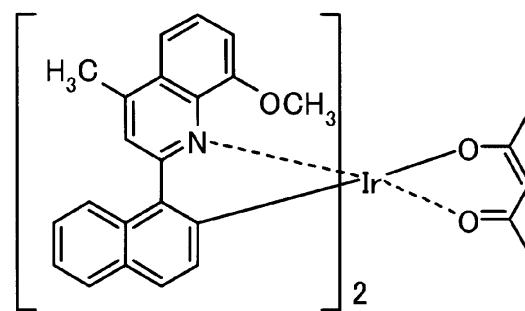


44

20



45

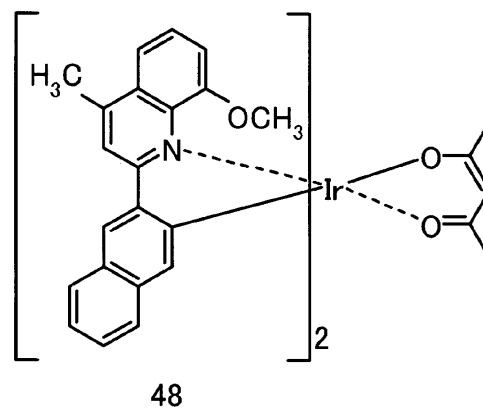
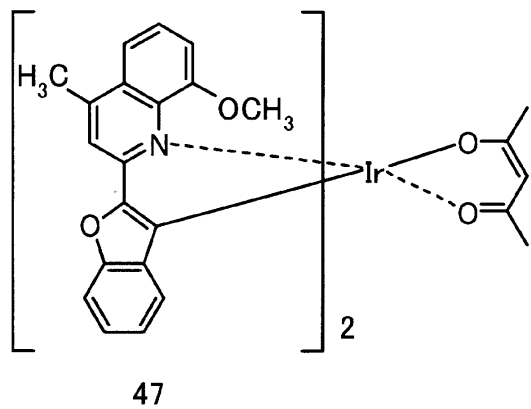


46

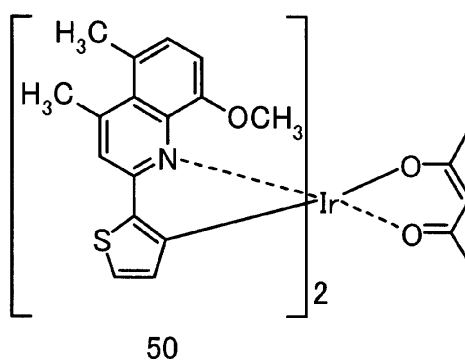
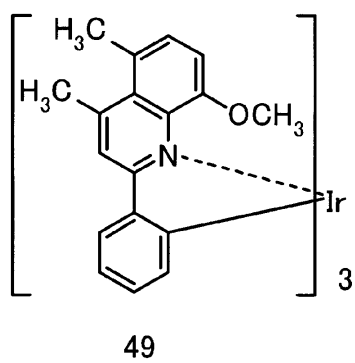
30

【 0 1 4 6 】

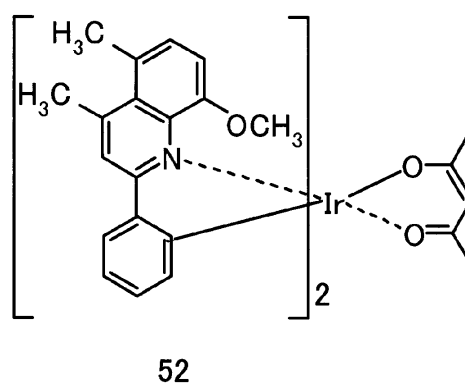
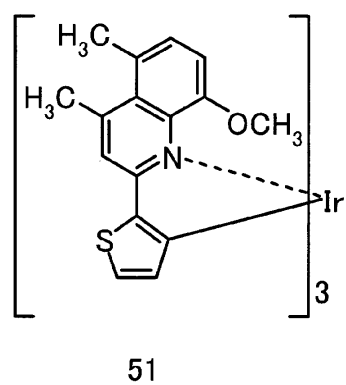
【化 1 6】



10



20

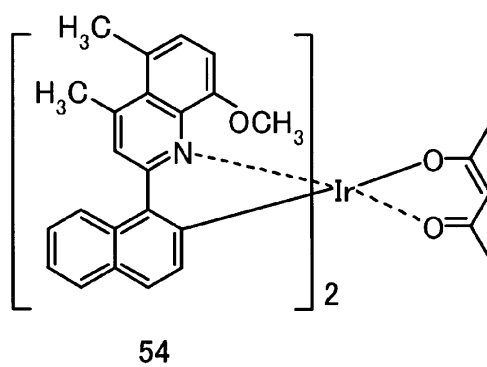
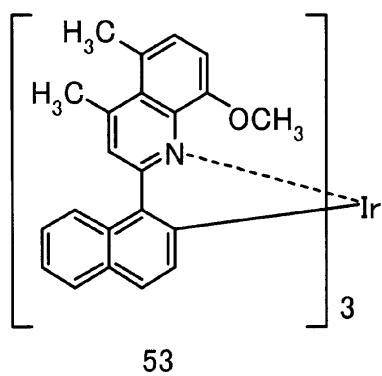


30

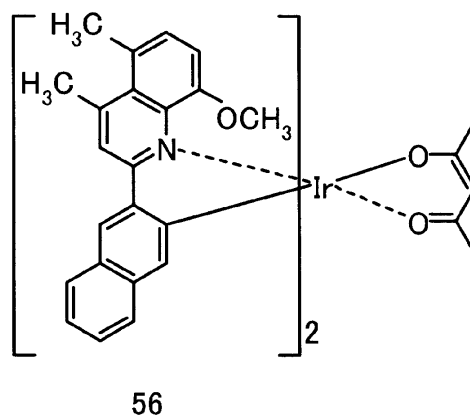
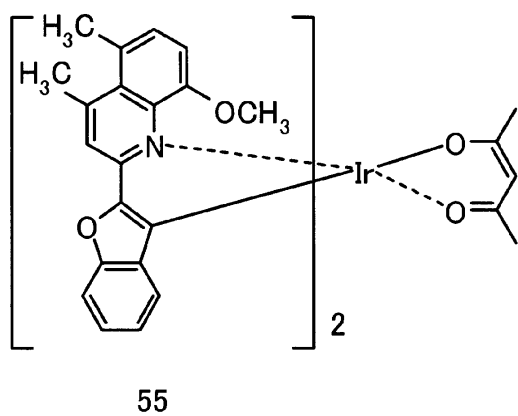
【 0 1 4 7 】



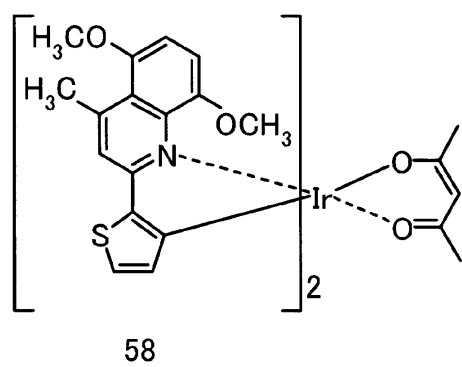
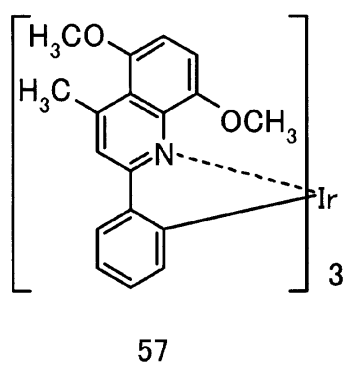
【化 17】



10



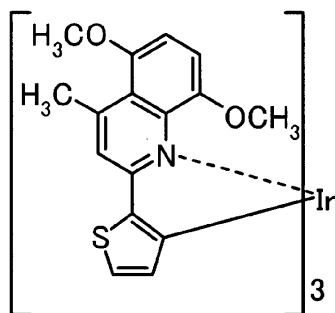
20



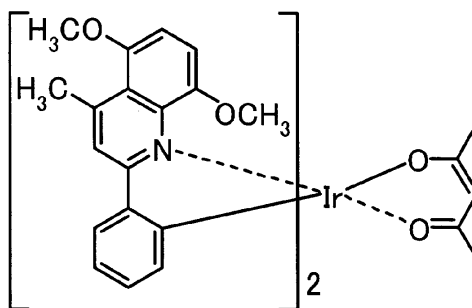
30

【 0 1 4 8 】

## 【化 18】

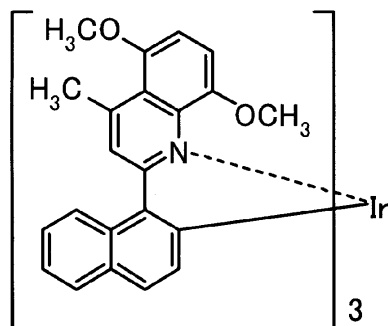


59

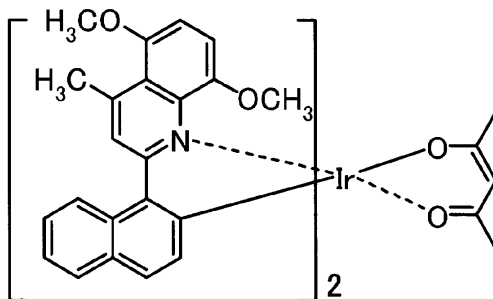


60

10

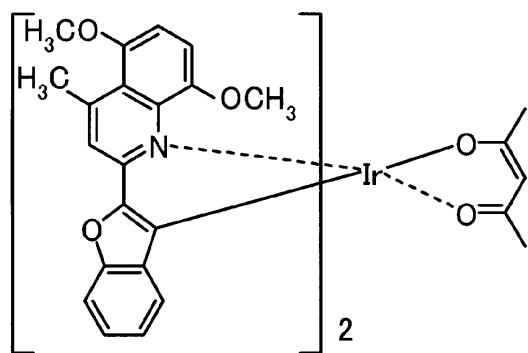


61

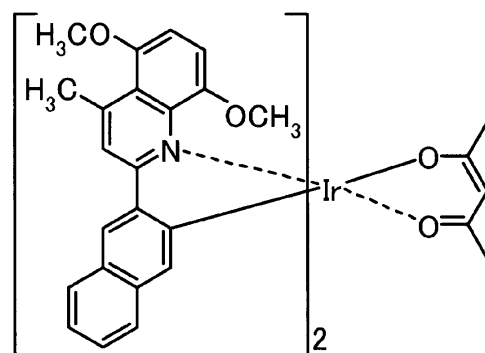


62

20



63



64

30

## 【0149】

特定の実施態様において、本開示のイリジウム化合物は発光素子の発光層として使用、あるいは組み込むことが可能である。発光素子は、アノードとカソードとの間に配置した発光層を含む有機層を含有することができる。有機層は、少なくとも一種の本開示のイリジウム化合物を含む、単層の発光層を含有することが可能である。特定の実施態様において、有機層は、少なくともひとつの発光素子を含む多数の層を含有することが可能である。例えば、以下に詳しく記載されるように、少なくとも一種の本開示のイリジウム化合物は、電子輸送層と正孔輸送層との間に配置される発光層としての形を取ることができる。本開示の発光素子は、そのシステム、制御方法、および/または利用方式において特に限定されるものではない。発光素子の代表例は、有機発光ダイオード（OLED）を用いた機器である。

40

## 【0150】

50

図 1、2 および 3 は、本開示による発光素子の実施態様を説明している。図中、番号 10 は発光素子形成用の基板を示しており、この基板は、例えば、ガラス、プラスチック、金属、セラミックおよび/またはその他の適切な材料、および/またはこれらの組み合わせを含有することが可能である。番号 20 はアノードを示しており、このアノードは、例えば金属、合金、金属酸化物、導電性化合物、および/またはこれらの組み合わせなどの導電性材料を含んでいる。番号 50 は有機発光層を示しており、この層は発光性材料として本発明のイリジウム化合物を一種以上含むことが可能である。有機発光層 50 はアノード 20 の表面上に形成されることが可能であり、また、分子線法、抵抗加熱法および熱的蒸発法などの物理的蒸着を含むがこれらに限定されない適切な方法により形成されることが可能である。番号 30 はカソードを示しており、このカソードは、例えば金属、合金、金属酸化物、導電性有機化合物、および/またはこれらの組み合わせなどの導電性材料を含んでいる。発光素子の断面における概略図は、図 1 において示されている。図 1 に示されるように、発光素子は、基板 10 上に配置されたアノード 20、アノード 20 上に配置された有機発光層 50、および有機発光層 50 上に配置されたカソード 30 を含有している。

10

#### 【0151】

特定の実施態様において、アノードは、例えば酸化スズ、酸化亜鉛、酸化インジウム、インジウムスズ酸化物 (ITO) といった導電性金属酸化物；例えば金、銀、クロム、およびニッケルといった金属；あるいは、これらの金属および/または導電性金属酸化物の組み合わせ、および/またはこれらの積層物、を含有することができる。特定の実施態様において、アノードは光学透過性である導電性材料、例えば ITO などの金属酸化物のように最小限の可視光線の吸収を示すものを含むことが可能である。

20

#### 【0152】

発光素子のアノードおよびカソードに電位がかけられると、アノードは、正孔注入層、正孔輸送層または発光層へと正孔を注入する。特定の実施態様では、アノード材料は少なくとも 4 eV の仕事関数を示す。少なくとも 4 eV の作業関数を示す材料の例には、酸化スズ、酸化亜鉛、酸化インジウム、および ITO などの導電性金属酸化物；金、銀、クロム、およびニッケルなどの金属；このような金属および導電性金属酸化物の混合物または積層物；ヨウ化銅および硫酸銅などの導電性無機材料、ポリアニリン、ポリチオフェンおよびポリピロールなどの導電性有機材料、および ITO によるこれらの材料の積層物が含まれる。アノードの厚さは、少なくとも部分的にアノードを形成する材料に依存しうる。例えば、特定の実施態様において、アノードの厚さは 10 nm ~ 5 μm の範囲であることが可能であり、また特定の実施態様において、厚さは 50 nm ~ 1 μm の範囲であることが可能であり、また特定の実施態様において、厚さは 100 nm ~ 500 nm の範囲であることが可能である。

30

#### 【0153】

アノードは、例えばソーダ石灰ガラス、無アルカリガラス、シリカ、セラミック、ポリマー、金属、透明樹脂基板、および/またはこれらの組み合わせなどの基板上に配置することが可能である。特定の実施態様において、ガラスは、自身から溶出するイオンの量を減らすため、無アルカリガラスを含有し得る。特定の実施態様において、基板は光学的に透明なものとすることができる。特定の実施態様において、基板は障壁層で被覆され得る。例えば、ソーダ石灰ガラスはシリカなどの障壁で被覆され得る。基板の厚さおよび寸法については、発光素子を支えるに足る機構的強度を保持するものである限り、特に限定されるものではない。例えば、ガラス基板であれば、厚さは少なくとも 0.2 mm 以上であることが可能であり、特定の実施態様では少なくとも 0.7 mm 以上であることが可能である。

40

#### 【0154】

アノードは、基板およびアノードを形成する材料に少なくとも部分的に依存する、いずれかの適切な方法を用いて蒸着することが可能である。例えば、ITO を含むアノードは、電子ビームの蒸着、スパッタリング、抵抗加熱真空蒸発、化学反応法 (ゾル - ゲル法)、

50

あるいはインジウムスズ酸化物などの懸濁液の被覆を含む方法により形成しうる。

【0155】

アノードは、機器の駆動電圧を低下させるか、または機器の発光効率を強化するように、洗浄するかまたは他の処理を施すことができる。例えば、ITOを含有するアノードに対してUV - オゾン処理、プラズマ処理、または他の工程を行なうことが可能である。

【0156】

カソードは、金属、合金、ハロゲン化金属、金属酸化物、導電性化合物、および/またはこれらの混合物などの導電性材料を含むことが可能である。Li、Na、Kおよびこれらのフッ化物などのアルカリ金属；Mg、Caおよびこれらのフッ化物などのアルカリ土類金属；金、銀、鉛、アルミニウム、ナトリウム - カリウム合金およびこれらの混合物；リチウム - アルミニウム合金およびそれらの混合物；マグネシウム - 銀合金およびそれらの混合物；インジウム、イッテルビウムなどの希土類金属がこうした材料に含まれるが、これらに限定されるものではない。カソードは、例えばインジウムスズ酸化物を含有し得る。カソードは、一種以上の前記化合物または組み合わせを含む一層構造の形をとることができ、あるいは一種以上の前記材料によって形成される多数層を含有する積層化構造を含みうる。

【0157】

カソードは、電子注入層、電子輸送層または発光層へと電子を供給する。適切なカソード材料は、電子注入層、電子輸送層または発光層などの隣接層へのカソード材料の付着、イオン化電位、および安定性により、少なくとも部分的に決定される。特定の実施態様において、仕事関数が4.5 eV以下の材料が使用される。特定の実施態様において、カソード材料はアルミニウム、リチウム - アルミニウム合金、リチウムとアルミニウムの混合物、マグネシウム - 銀合金、ならびにマグネシウムと銀の混合物から選択され得る。カソードは、前記化合物またはそれらの混合物を一種以上含有する一層構造の形であり得るが、あるいはその代わりに、前記化合物またはそれらの混合物を一種以上含有する積層構造の形状となり得る。カソード層の厚さは、これを形成する材料に、少なくとも部分的に依存しうる。例えば、カソードの厚さは10 nm ~ 5 μmの範囲であることが可能であり、また特定の実施態様において、厚さは50 nm ~ 1 μmの範囲であることが可能であり、また特定の実施態様において、厚さは100 nm ~ 1 μmの範囲であることが可能である。

【0158】

カソードは、例えば、電子ビーム法、スパッタ法、抵抗加熱真空蒸発法、およびコーティング法などのいずれかの適切な方法を用いて形成することが可能である。真空蒸発法が使用される場合、単一の材料を真空蒸発してもよく、あるいはその代わりに、2種以上の化合物を同時に真空蒸発しても良い。さらに、合金電極を形成するために複数の金属を真空蒸発することが可能である。または、先に準備しておいた合金を真空蒸発することも可能である。

【0159】

特定の態様において、アノードおよびカソードのシート抵抗は最小化され、したがって、例えば、数百 / 以下とすることができる。

【0160】

本開示の特定の発光素子において、有機層50は複数の有機層を含有することが可能である。複数の有機層を含有する有機層50の例は、図2に概略的に図示される。図2に示されるように、有機層50は電子輸送層50a、正孔ブロッキング層50b、発光層50c、正孔輸送層50d、および正孔注入層50eを含んでいる。発光層50cは、本開示のイリジウム化合物を少なくとも一種以上含有することができる。特定の実施態様において、発光層50cは、その中に少なくとも一種以上の本開示のイリジウム化合物がゲストとして存在する一種以上のホスト材料を含有することができる。ホスト材料は、例えば、一種またはそれ以上の置換トリアリルアミンなどの正孔輸送材料を含有することが可能であり、あるいはホスト材料は、一種またはそれ以上の金属系キノキサレート (metal quinoxalate)、オキサジアゾール、およびトリアゾールなどの電子輸送材料を含有することが可

10

20

30

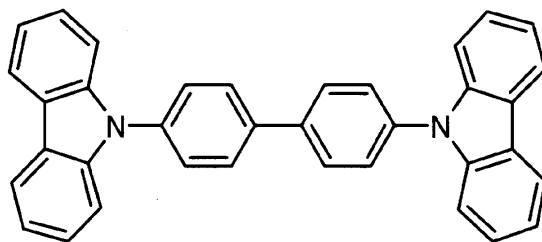
40

50

能である。ホスト材料の例は、以下の式を持つ 4,4'-N,N'-ジカルバゾール-ビフェニル (CBP) である：

【0161】

【化19】



10

【0162】

電子輸送層 50a は、カソード 30 から発光層 50c へと電子を輸送することができる。電子輸送層 50a は、金属キノキソラート、オキサジアゾール、トリアゾールおよび / またはこれらの組み合わせの一種以上などの電子輸送材料により形成することができるが、これらに限定されない。電子輸送材料の例は、トリス - (8 - ヒドロキシキノリン) アルミニウム ( $\text{Alq}_3$ ) である。

【0163】

電子輸送層 50a は、カソード 30 にバイアスをかけた場合に電子を注入する能力を有し、電子を輸送する能力を有し、且つアノードにおける構造に正孔を注入する障壁として作用する能力を有する適切な材料をすべて含み得る。電子輸送層 50a を形成する材料の例には金属錯体が含まれるが、これらに限定されるものではない。金属錯体の例には複素環テトラカルボン酸無水物、例えばトリアゾール誘導体、オキサゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体；フルオレノン誘導体；アントラキノジメタン誘導体；アントロン誘導体；ジフェニルキノン誘導体；チオピランジオキシド誘導体；カルボジイミド誘導体；フルオレニリデンメタン誘導体；ジスチリルピラジン誘導体；ナフタレンペリレン；フタロシアニン誘導体；8 - キノリノール誘導体；金属フタロシアニン、ベンゾオキサゾールまたはベンゾチアゾールを配位子として含む金属錯体；有機シラン誘導体；本明細書に開示の配位子、から選択される配位子を持つ金属錯体が含まれる。

20

30

【0164】

電子輸送層 50a には、真空蒸発法；Langmuir - Blodgett 法；スピンコーティング法、キャスト法、浸漬被覆法などの溶剤コーティング法；インクジェット法；および印刷法などの既知の方法のいずれによっても形成することが可能である。溶液又は懸濁液のコーティング法の場合、前記の陽電子注入または電子輸送材料は、樹脂成分の入った溶剤中に溶解あるいは分散することが可能である。樹脂成分は、ここに開示される正孔注入層 50e および正孔輸送層 50d を形成するための一種以上の樹脂を含むことが可能である。

【0165】

電子輸送層 50a の厚さはいずれの適切な厚さであっても良い。特定の実施態様において、層 50a の厚さは 1 nm ~ 5  $\mu\text{m}$  の範囲であることが可能であり、また特定の実施態様において、厚さは 5 nm ~ 1  $\mu\text{m}$  の範囲であることが可能であり、また特定の実施態様において、厚さは 10 nm ~ 500 nm の範囲であることが可能である。電子注入層 30a および電子輸送層 50a は、一種またはそれ以上の前記材料を含む単一層または複数層を含有することができ、また、複数層の各層は、同一または異なる材料および / または組成物を含有することができる。

40

【0166】

正孔輸送層 50d は、正孔注入層 50e から発光層 50c へと正孔を輸送することができる。正孔輸送層 50d は、例えば - ナフチルフェニルベンジジン ( - NPB ) を含有することができる。

【0167】

50

正孔輸送層 5 0 d および正孔注入層 5 0 e は、アノードから正孔を注入することが可能で、正孔を輸送することが可能で、且つカソードから注入された電子に対して障壁として作用することが可能である材料を含み得る。このような材料の例には、カルバゾール誘導体、トリアゾール誘導体、オキサゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、ポリアリアルカン誘導体、ピラゾリン誘導体、ピラズロン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、アリアルアミン誘導体、アミノ置換カルコン誘導体、スチリルアントラセン誘導体、フルオレノン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、シラザラン誘導体、芳香族第 3 アミン化合物、スチリルアミン化合物、芳香族ジメチリジン化合物、ポルフィリン化合物、ポリシラン化合物、ポリ(N-ビニルカルバゾール)誘導体、アニリン共重合体、チオフェンオリゴマーおよびポリチオフェン、有機シラン誘導体、炭素膜、

10

#### 【 0 1 6 8 】

正孔注入層 5 0 e および正孔輸送層 5 0 d の厚さは適切であればいずれの厚さであっても良い。特定の実施態様において、正孔注入層 5 0 e および正孔輸送層 5 0 d の厚さは 1 nm ~ 5 μm の範囲であることが可能であり、また特定の実施態様において、厚さは 5 nm ~ 1 μm の範囲であることが可能であり、また特定の実施態様において、厚さは 1 0 nm ~ 5 0 0 nm の範囲であることが可能である。正孔注入層 5 0 e および正孔輸送層 5 0 d はそれぞれ、単一層または複数層を含有することができ、ここで複数層の各層は、同一または異なる材料および / または組成物を含有することができる。

#### 【 0 1 6 9 】

20

正孔注入層 5 0 e および正孔輸送層 5 0 d は、真空蒸発法 ; Langmuir - Blodgett 法 ; スピンコーティング法、キャスト法、浸漬被覆法などの溶剤コーティング法 ; インクジェット法 ; および印刷法などの、当業界で既知の適切な方法のいずれかを用いて形成することができる。溶剤コーティング法の場合、一種またはそれ以上の正孔注入材料あるいは正孔輸送材料は、任意に樹脂成分が含まれた溶剤中に溶解あるいは分散することが可能である。樹脂成分の例には、塩化ポリビニル、ポリカーボネート、ポリスチレン、ポリメチルメタクリレート、ポリブチルメタクリレート、ポリエステル、ポリスルホン、酸化ポリフェニレン、ポリブタジエン、ポリ(N-ビニルカルバゾール)、炭化水素樹脂、ケトン樹脂、フェノキシ樹脂、ポリアミド、エチルセルロース、酢酸ビニル、アクリロニトリル - ブタジエン - スチレン樹脂、ポリウレタン、メラミン樹脂、不飽和ポリエステル樹脂、アルキル樹脂、エポキシ樹脂、およびシリコン樹脂が含まれる。

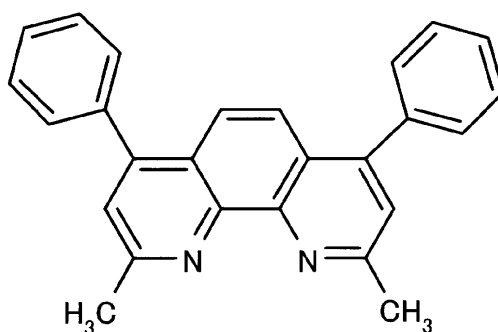
30

#### 【 0 1 7 0 】

特定の実施態様において、正孔ブロッキング層 5 0 b は、励起子を発光層 5 0 c 内に閉じ込めることができる。特定の実施態様において、正孔ブロッキング層 5 0 b は、次式を有する 2, 9 - ジメチル - 4, 7 - ジフェニル - 1, 1 0 - フェネントロリン (BCP) を含有することができる :

#### 【 0 1 7 1 】

#### 【 化 2 0 】



40

#### 【 0 1 7 2 】

図 2 に示されるように、保護層 4 0 は、発光素子の機械的、化学的、熱的および / また

50

は環境的な劣化を最小限とするため、カソード 30 上に配置され得る。例えば、特定の実施態様において、保護層 40 は  $O_2$ 、水および / または有害ガスが機器内に入ることにより、機器の性能が劣化することを最小限化、あるいは防止することができる。保護層 40 は In、Sn、Pb、Au、Cu、Ag、Al、Ti、および Ni ;  $MgO$ 、 $SiO$ 、 $SiO_2$ 、 $Al_2O_3$ 、 $GeO$ 、 $NiO$ 、 $CaO$ 、 $BaO$ 、 $Fe_2O_3$ 、 $Y_2O_3$  および  $TiO_2$  などの金属酸化物 ;  $MgF_2$ 、 $LiF$ 、 $AlF_3$  および  $CaF_2$  などのフッ化金属 ;  $ZnS$ 、 $ZnSe$ 、アリルアミン、アリルフルオリド、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリメチルメタクリレート、ポリイミド、ポリ尿素、ポリテトラフルオロエチレン、ポリクロロトリフルオロエチレン、ポリジクロロフルオロエチレン、クロロトリフルオロエチレンとジクロロジフルオロエチレンとの重合体、テトラフルオロエチレンと少なくとも一種以上の単量体を含む単量体混合物との共重合により得られる共重合体、共重合体の主鎖に環状構造をもつフッ素含有共重合体、1 % またはそれ以上の吸水率を有する吸水性材料、および 0.1 % またはそれ以下の吸水率を有する耐水性材料を含む材料から形成することが可能であるが、これらに限定されるものではない。保護層 40 は、例えば、一種以上の前記材料を含有する単一層あるいは複数層とすることができ、ここで各複数層が同一または異種の材料および / または材料の量を含むことができる。特定の実施態様において、保護層 40 は光学透過性を有することが可能である。

10

#### 【0173】

図 2 に示される発光素子は、ここに「ボトムエミッション」構造と称される。「ボトムエミッション」構造において、発光層 50c により発生した光はアノード 20 および基板 10 を通過して放射される。「ボトムエミッション」構造を採用した、図 2 に説明される発光素子は、輝度において空間的な輝度の不均一化を生み出しうるが、これは寸法が大きな発光素子に対してとりわけ明白となりうる。輝度の均一化が改善された発光素子は、図 3 で説明される「トップエミッション」の採用によって提供することが可能である。

20

#### 【0174】

光学透過性カソード 30、ならびにアノード 20 および基板 10 の間に配置された反射層 60 を含む、「トップエミッション」型の発光素子の断面図を、図 3 に示す。図 3 に示されるトップエミッション型の発光素子において、発光層 50c により発生した光学的な放射光は、機器から、光学透過性のカソード 30 および保護層 40 を通過して放射される。図 3 に示されるように、基板 10 およびアノード 20 の間に配置された光学的反射層 60 は、発光層 50c からカソード 30 方向への入射光を反射する。

30

#### 【0175】

特定の化合物の合成

本開示のイリジウム錯体はいずれかの既知の方法によって合成することができる。このような方法の例は、Inorg. Chem., No. 30、第 1685 ページ、1991 年 ; Inorg. Chem., No. 27、第 3464 ページ、1988 年 ; Inorg. Chem., No. 33、第 545 ページ、1994 年 ; Inorg. Chem. Acta., No. 181、第 245 ページ、1991 年 ; J. Organomet. Chem., No. 35、第 293 ページ、1987 年 ; J. Am. Chem. Soc., No. 107、第 1431 ページ、1985 年、に開示されている。これらの各参考文献の関連部分は参照により本明細書中に援用される。

#### 【0176】

本開示の化合物は、以下に示す一般的手法および手順、ならびに実施例の開示に従って、容易に入手できる出発材料から調製することが可能である。反応温度、時間、反応材料のモル比、溶媒、圧力などの典型的なあるいは好適な工程の条件が記載されている場合、別段の記載がない限り、その他の工程の条件も使用可能であることが認識される。使用される反応物質または溶媒により、反応条件が変化する場合があるが、このような条件は、当業者による通常行なわれる最適化の手順によって決定され得るものである。

40

#### 【0177】

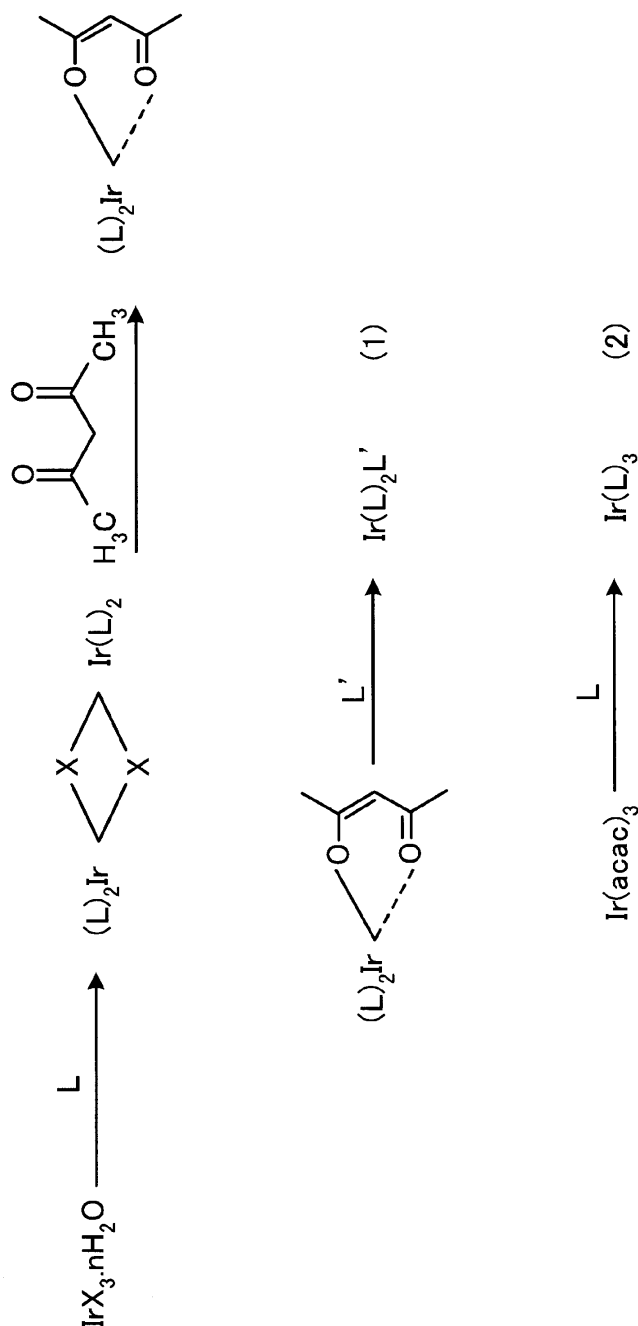
本開示の化合物を調製するために使用される一般合成スキームおよび個々の反応プロトコルは、ここに提供される反応スキーム及び実施例に提示される。例えば、トリス - ハロゲン化イリジウム (III) およびトリシアセチルアセトナト イリジウム (III) は、本開

50

示の化合物の合成の出発材料として使用することができる：

【 0 1 7 8 】

【 化 2 1 】



【 実施例 】

【 0 1 7 9 】

本開示の実施態様は、本開示のイリジウム化合物および発光素子の調製、ならびに本開示のイリジウム化合物および発光素子を特徴付けるための手順の詳細を記載した以下の実施例を参照することにより、さらに規定されうる。本開示の範囲を逸脱することなく、材料および方法の双方に対する数多くの変更が行なわれ得ることは、当業者にとって明白である。

【 0 1 8 0 】

下記実施例において、以下の略語は以下の意味を持つものとする。略語が定義されていない場合、一般的に理解されている意味を持つものとする。

【 0 1 8 1 】

$\text{Ir}(\text{acac})_3$  = トリスアセチルアセトナト イリジウム (III)



【 0 1 8 2 】

g = グラム

【 0 1 8 3 】

mL = ミリリットル

【 0 1 8 4 】

min = 分

【 0 1 8 5 】

mm = ミリメートル

【 0 1 8 6 】

- NBP = - ナフチルフェニルベンジジン

10

【 0 1 8 7 】

CBP = 4, 4' - N, N' - ジカルバゾール - ビフェニル

【 0 1 8 8 】

BCP = 2, 9 - ジメチル - 4, 7 - ジフェニル - 1, 10 - フェナントロリン

【 0 1 8 9 】

(Alq)<sub>3</sub> = トリス - ( 8 - ヒドロキシキノリン ) アルミニウム

【 0 1 9 0 】

ITO = インジウムスズ酸化物

【 0 1 9 1 】

hr = 時間

20

【 0 1 9 2 】

mol = モル

【 0 1 9 3 】

n - BuLi = n - ブチルリチウム

【 0 1 9 4 】

nm = ナノメートル

【 0 1 9 5 】

cd / A = 外部量子収率

【 0 1 9 6 】

Ir(ppy)<sub>3</sub> = トリス( 2 - フェニルピリジン ) イリジウム

30

【 0 1 9 7 】

## 実施例 1

## 化合物 1 の合成

還流濃縮器を取り付け攪拌棒を入れた 2 ツ口の丸底フラスコ ( 2 5 0 mL ) を真空とし、窒素ガスパージを行なった。乾燥エーテル ( 5 0 mL ) およびプロモベンゼン ( 0 . 0 1 9 1 mol、 3 . 0 g ) をフラスコに加えた後、シリンジポンプを用いて n - BuLi ( 0 . 0 2 2 9 mol、 9 . 1 7 mL ) をゆっくりと加えた。反応混合物は室温にて 3 0 ~ 4 0 分攪拌した後、4 - メチルピリジン ( 0 . 0 1 9 1 mol、 1 . 7 7 9 g ) をゆっくりと加えた。次に反応混合物を 2 ~ 3 時間還流した。その後、反応混合物を室温に冷却し、塩水溶液 ( aqueous brine solution ) で希釈して、エーテル ( 3 × 3 0 mL ) で抽出した。合わせた抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥し、減圧下で濃縮した。残渣は、ヘキサン / EA を溶離液としたカラムクロマトグラフィーを用いて精製した。目的の 4 - メチル - 2 - フェニルピリジンが得られた ( 1 . 1 5 g、収率 3 6 % ) 。

40

【 0 1 9 8 】

IrCl<sub>3</sub> · nH<sub>2</sub>O ( 1 4 . 9 g )、4 - メチル - 2 - フェニルピリジン ( 3 0 . 8 g )、水 ( 1 0 mL ) および 2 - エトキシエタノール ( 4 0 0 mL ) の混合物を、1 0 時間、還流下で激しく攪拌した。次に、1 0 % HCl ( 5 0 mL ) 溶液を加え、さらに 2 時間、還流下で混合物を攪拌した。次に混合物を室温に冷却し、5 0 mL のメタノールで希釈し、そしてろ過を行なった。固形物を水で洗浄し、真空下で乾燥したところ、2 1 g のイリジウム・クロロ二量体を得られた。

50

## 【0199】

イリジウム・クロロ二量体 (11.3 g)、アセチルアセトン (6.4 g)、 $\text{Na}_2\text{CO}_3$  (2.1 g) および 2 - エトキシエタノール (100 mL) の混合物を 8 時間、還流下で攪拌した。次に混合物を室温に冷却し、50 mL のメタノールで希釈し、そしてろ過を行なった。固形物を水で洗浄し、真空下で乾燥したところ、5.2 g のイリジウム化合物 1 が得られた (収率 45%)。化合物 1 を真空昇華によって精製し、この化合物の溶液蛍光スペクトラムを測定した。化合物 1 の蛍光スペクトラムは、 $\lambda_{\text{max}}$  511 nm ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) を示した。 $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz) (ppm): 1.75 (s, 6H), 2.54 (s, 6H), 5.17 (s, 1H), 6.26 (d,  $J=8.0$  Hz, 2H), 6.65 (t,  $J=7.2$  Hz, 2H), 6.76 (t,  $J=7.2$  Hz, 2H), 6.93 (d,  $J=6.0$  Hz, 2H), 7.79 (d,  $J=8.4$  Hz, 2H), 7.62 (s, 2H), 8.32 (d,  $J=5.6$  Hz, 2H)。

10

## 【0200】

## 実施例 2

## 化合物 2 の合成

3.0 g の 4 - メチル - 2 - フェニルピリジン、1.3 g のトリスアセチルアセトナト イリジウム (III) および 50 mL のグリセロールを混合し、200 、窒素雰囲気下で 16 時間攪拌した。室温に冷却した後、反応混合物に 200 mL のメタノールを加え、固形沈殿物をろ過により取った。固形物を真空昇華によって精製し、2.0 g のイリジウム化合物 2 を得た (収率 58%)。化合物 2 を真空昇華によって精製した。化合物 2 の溶液蛍光スペクトラムは、 $\lambda_{\text{max}}$  516 nm ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) を示した。 $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz) (ppm): 2.54 (s, 6H), 6.26 (d,  $J=8.0$  Hz, 2H), 6.65 (t,  $J=7.2$  Hz, 2H), 6.76 (t,  $J=7.2$  Hz, 2H), 6.93 (d,  $J=6.0$  Hz, 2H), 7.79 (d,  $J=8.4$  Hz, 2H), 7.62 (s, 2H), 8.32 (d,  $J=5.6$  Hz, 2H)。

20

## 【0201】

## 実施例 3

## 化合物 8 の合成

還流濃縮器を取り付け攪拌棒を入れた 2 ツ口の丸底フラスコ (250 mL) を真空とし、窒素ガスパージを行なった。乾燥エーテル (50 mL) および 2 - プロモチオフェン (0.0191 mol、3.06 g) をフラスコに加えた後、シリンジポンプを用いて  $n\text{-BuLi}$  (0.0229 mol、9.17 mL) をゆっくりと加えた。反応混合物は室温にて 30 ~ 40 分攪拌した後、4 - メチルキノリン (0.0191 mol、2.72 g) をゆっくりと加えた。反応混合物をさらに 2 ~ 3 時間還流した。その後、反応混合物を室温に冷却し、塩水溶液で希釈して、エーテル (3 x 30 mL) で抽出した。合わせた抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥し、減圧下で濃縮した。残渣は、ヘキサン/ $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  を溶離液としたカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、2.77 g の 4 - メチル - (2 - チオフェニル) キノリンを得た (収率 65%)。

30

## 【0202】

$\text{IrCl}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$  (14.9 g)、4 - メチル - 2 - チオフェニルキノリン (40.5 g)、水 (10 mL) および 2 - エトキシエタノール (400 mL) の混合物を、10 時間、還流下で激しく攪拌した。次に、10% HCl (50 mL) 溶液を加え、さらに 2 時間、還流下で混合物を攪拌した。混合物を室温に冷却し、50 mL のメタノールで希釈し、そしてろ過を行なった。固形物を水で洗浄し、真空下で乾燥したところ、25 g のイリジウム・クロロ二量体を得られた。

40

## 【0203】

イリジウム・クロロ二量体 (14 g)、アセチルアセトン (6.4 g)、 $\text{Na}_2\text{CO}_3$  (2.1 g) および 2 - エトキシエタノール (100 mL) の混合物を 8 時間、還流下で攪拌した。混合物を室温に冷却し、50 mL のメタノールで希釈し、そしてろ過を行なった。固形沈殿物を水で洗浄し、真空下で乾燥したところ、5.0 g のイリジウム化合物 8 が得られた (収率 35%)。化合物 8 の溶液蛍光スペクトラムは、 $\lambda_{\text{max}}$  614 nm ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) を示した。 $^1\text{H}$  NMR: 1.59 (s, 6H), 2.86 (s, 6H), 4.81 (s, 1H), 6.21 (d,  $J=6.4$

50

Hz, 2H), 7.07 (d, J=6.4 Hz, 2H), 7.42 (m, 4H), 7.54 (s, 2H), 7.85 (d, J=7.2 Hz, 2H), 8.34 (d, J=7.2 Hz, 2H)。

【0204】

実施例 4

化合物 13 の合成

還流濃縮器を取り付け攪拌棒を入れた、2ツ口の丸底フラスコ(250 mL)を真空とし、窒素ガスパージを行なった。乾燥エーテル(50 mL)および 2-ブロモ-ナフタレン(0.0191 mol、3.95 g)をフラスコに加えた後、シリンジポンプを用いてn-BuLi(0.0229 mol、9.17 mL)をゆっくりと加えた。反応混合物は室温にて30~40分攪拌した後、4-メチルキノリン(0.0191 mol、2.72 g)をゆっくりと加えた。反応混合物をさらに2~3時間還流した。その後、反応混合物を室温に冷却し、塩水溶液で希釈して、エーテル(3×30 mL)で抽出した。合わせた抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥し、減圧下で濃縮した。残渣は、ヘキサン/EAを溶離液としたカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、4.08 gの4-メチル-(2-ナフタレン)キノリンを得た(収率80%)。

【0205】

IrCl<sub>3</sub>·nH<sub>2</sub>O(14.9 g)、4-メチル-(2-ナフタレン)キノリン(48.42 g)、水(10 mL)および2-エトキシエタノール(400 mL)の混合物を、10時間、還流下で激しく攪拌した。次に、10% HCl(50 mL)溶液を加え、さらに2時間、還流下で混合物を攪拌した。混合物を室温に冷却し、50 mLのメタノールで希釈し、そしてろ過を行なった。固形沈殿物を水で洗浄し、真空下で乾燥したところ、25 gのイリジウム・クロロ二量体を得られた。

【0206】

イリジウム・クロロ二量体(14 g)、アセチルアセトン(6.4 g)、Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(2.1 g)および2-エトキシエタノール(100 mL)の混合物を8時間、還流下で攪拌した。混合物を室温に冷却し、50 mLのメタノールで希釈し、そしてろ過を行なった。固形沈殿物を水で洗浄し、真空下で乾燥したところ、7.2 gのイリジウム化合物13が得られた(収率52%)。化合物13を真空昇華によって精製した。この化合物13の溶液蛍光スペクトラムは、 $\lambda_{\max}$  625 nm (CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>)を示した。<sup>1</sup>H NMR: 1.42 (s, 6H), 2.96 (s, 6H), 4.53 (s, 1H), 6.72 (d, J=8.8 Hz, 2H), 6.95 (d, J=8.4 Hz, 2H), 7.30 (m, 4H), 7.48 (m, 4H), 7.62 (d, J=8.4 Hz, 2H), 7.93 (d, J=8.4 Hz, 2H), 8.28 (d, J=8.8 Hz, 2H), 8.52 (s, 2H), 8.68 (d, J=8.8 Hz, 2H)。

【0207】

実施例 5

化合物 15 の合成

還流冷却器を取り付け攪拌棒を入れた2ツ口の丸底フラスコ(250 mL)を真空とし、窒素ガスパージを行なった。乾燥エーテル(50 mL)および2,3-ベンゾフラン(0.0191 mol、2.24 g)をフラスコに加えた後、シリンジポンプを用いてn-BuLi(0.0229 mol、9.17 mL)をゆっくりと加えた。反応混合物は室温にて30~40分攪拌した後、4-メチルキノリン(0.0191 mol、2.72 g)をゆっくりと加えた。反応混合物をさらに2~3時間還流した。その後、反応混合物を室温に冷却し、塩水溶液で希釈して、エーテル(3×30 mL)で抽出した。合わせた抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥し、減圧下で濃縮した。残渣は、ヘキサン/EAを溶離液としたカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、2.95 gの4-メチル-[2-(2,3-ベンゾフラン)]キノリンを得た(収率60%)。

【0208】

IrCl<sub>3</sub>·nH<sub>2</sub>O(14.9 g)、4-メチル-[2-(2,3-ベンゾフラン)]キノリン(46.62 g)、水(10 mL)および2-エトキシエタノール(400 mL)の混合物を、10時間、還流下で激しく攪拌した。次に、10% HCl(50 mL)溶液を加え、2時間、還

流下で混合物を攪拌した。混合物を室温に冷却し、50 mLのメタノールで希釈し、そしてろ過を行なった。固形沈殿物を水で洗浄し、真空下で乾燥したところ、2.5 gのイリジウム・クロロ二量体を得られた。

#### 【0209】

イリジウム・クロロ二量体 (1.4 g)、アセチルアセトン (6.4 g)、 $\text{Na}_2\text{CO}_3$  (2.1 g) および 2-エトキシエタノール (100 mL) の混合物を8時間、還流下で攪拌した。混合物を室温に冷却し、50 mLのメタノールで希釈し、そしてろ過を行なった。固形沈殿物を水で洗浄し、真空下で乾燥したところ、7 gのイリジウム化合物 15 が得られた (収率 50%)。化合物 15 を真空昇華によって精製した。溶液蛍光スペクトラムは、 $\lambda_{\text{max}}$  625 nm ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) を示した。 $^1\text{H}$  NMR: 1.58 (s, 6H), 2.97 (s, 6H), 4.82 (s, 1H), 6.00 (d,  $J=7.6$  Hz, 2H), 6.56 (d,  $J=7.6$  Hz, 2H), 7.00 (m, 2H), 7.38 (m, 6H), 7.72 (s, 2H), 7.85 (d,  $J=8.0$  Hz, 2H), 8.32 (d,  $J=8.0$  Hz, 2H)。

10

#### 【0210】

#### 実施例 6

#### 化合物 16 の合成

還流冷却器を取り付け攪拌棒を入れた2ツ口の丸底フラスコ (250 mL) を真空とし、窒素ガスパージを行なった。乾燥エーテル (50 mL) および 2-ブロモ-ナフタレン (0.0191 mol, 3.95 g) をフラスコに加えた後、シリンジポンプを用いて  $n\text{-BuLi}$  (0.0229 mol, 9.17 mL) をゆっくりと加えた。反応混合物は室温にて30~40分攪拌した後、4-メチルキノリン (0.0191 mol, 2.72 g) をゆっくりと加えた。反応混合物をさらに2~3時間還流した。その後、反応混合物を室温に冷却し、塩水溶液で希釈して、エーテル (3×30 mL) で抽出した。合わせた抽出物を硫酸マグネシウム上で乾燥し、減圧下で濃縮した。残渣は、ヘキサン/EAを溶離液としたカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、2.55 gの4-メチル-(2-ナフタレン)キノリンを得た (収率 50%)。

20

#### 【0211】

$\text{IrCl}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$  (1.49 g)、4-メチル-(2-ナフタレン)キノリン (4.66 g)、水 (2 mL) および 2-エトキシエタノール (40 mL) の混合物を、10時間、還流下で激しく攪拌した。次に、10% HCl (5 mL) 溶液を加え、さらに2時間、還流下で混合物を攪拌した。混合物を室温に冷却し、5 mLのメタノールで希釈し、そしてろ過を行なった。固形沈殿物を水で洗浄し、真空下で乾燥したところ、2.5 gのイリジウム・クロロ二量体を得られた。

30

#### 【0212】

イリジウム・クロロ二量体 (1.4 g)、アセチルアセトン (0.64 g)、 $\text{Na}_2\text{CO}_3$  (0.21 g) および 2-エトキシエタノール (10 mL) の混合物を8時間、還流下で攪拌した。混合物を室温に冷却し、5 mLのメタノールで希釈し、そしてろ過を行なった。固形沈殿物を水で洗浄し、真空下で乾燥したところ、0.85 gのイリジウム化合物 16 が得られた (収率 61%)。化合物 16 を真空昇華によって精製した。溶液蛍光スペクトラムは、 $\lambda_{\text{max}}$  616 nm ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) を示した。 $^1\text{H}$  NMR: 1.45 (s, 6H), 3.00 (s, 6H), 4.61 (s, 1H), 6.88 (s, 2H), 7.10 (m, 6H), 7.38 (m, 2H), 7.45 (d,  $J=8.0$  Hz, 2H), 7.77 (d,  $J=8.0$  Hz, 2H), 8.00 (d,  $J=8.0$  Hz, 2H), 8.19 (s, 2H), 8.35 (s, 2H), 8.60 (d,  $J=8.4$  Hz, 2H)。

40

#### 【0213】

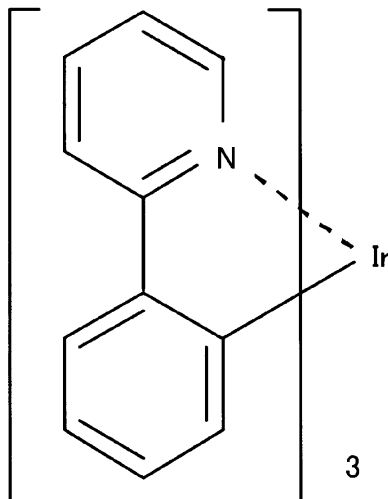
#### 実施例 7

#### 比較化合物Aを含むボトムエミッションOLED機器

比較化合物Aである  $\text{Ir}(\text{ppy})_3$  は下記の構造を有している。

#### 【0214】

## 【化 2 2】



10

## 【 0 2 1 5】

50 ~ 200 nmの厚さを有するインジウムスズ酸化物 (ITO) 層を、ガラス基板上に蒸着した。不要のITOを 1 N HCl 溶液でエッチングしてITOをパターン化し、第一電極パターンを形成した。次に、水性界面活性剤溶液中で超音波によるITOパターン化基板の浄化が行なわれた。その後、蒸留水、次いでイソプロパノールを用いてITOパターン化基板のすすぎを行なった。浄化したITOパターン化基板を真空槽に搭載し、この槽を  $10^{-6}$  torrにポンプダウンした。全ての薄膜蒸着のための到達真空度は  $10^{-6}$  torrの範囲であった。その後、ITOパターン化基板は、さらに5 ~ 10 分の間、酸素プラズマによって浄化された。

20

## 【 0 2 1 6】

薄膜の多重層を、熱的蒸発法によりITOパターン化基板上に順次蒸着した。まず、-N PB (N,N' - ジフェニル - N,N' - ジ ( - ナフチル ) ベンジジン ) 層を、50 nmの厚さとなるようにITOパターン化基板の上に真空蒸着した。次に、比率 10 : 1 の化合物CBPおよびイリジウム化合物を、30 nmの厚さとなるように、-NPB層の上に同時に真空蒸着した。次に、化合物BCPを、10 nmの厚さとなるように真空蒸着した。Alq<sub>3</sub>を、40 nmの厚さとなるようにBCP層の上に真空蒸着した。

30

## 【 0 2 1 7】

次に、パターン化金属電極を、まず始めにマスクを位置合わせすることにより、3 mm × 3 mmの発光領域が規定されるように有機層の上に蒸着した。マグネシウムおよび銀を、薄い有機層の上に 10 : 1 の割合で、55 nmの厚さとなるように真空メタライザー ( vacuum metallizer ) 中で同時に真空蒸着した。次に、銀をMg / Ag層の上に50 nmの厚さとなるように真空蒸着した。最後に、保護層をAgカソードの上に蒸着した。

## 【 0 2 1 8】

これらの層の厚さは蒸着中に水晶モニタを使用して測定した。完成OLED機器は、窒素雰囲気中にて特徴付けが行なわれた。一定の直流電圧をOLED機器に加えることで、光を放つよう調製した。

40

## 【 0 2 1 9】

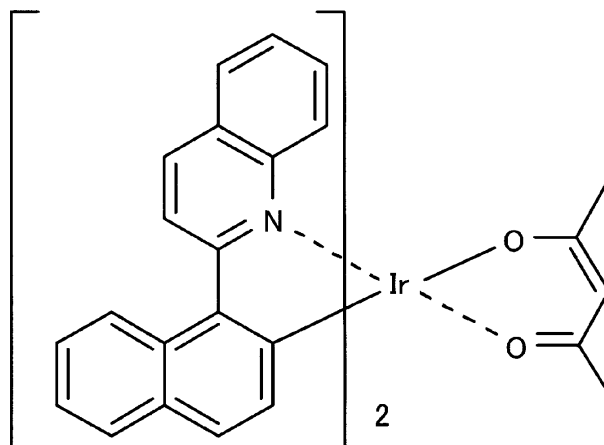
実施例 8

比較化合物Bを含むボトムエミッションOLED機器

比較化合物Bは下記の構造を有している。

## 【 0 2 2 0】

## 【化 2 3】



10

## 【 0 2 2 1】

イリジウム化合物Aを比較用イリジウム化合物Bで代用したことを除いて、前記実施例 7の方法を用いてOLED機器が調製された。

## 【 0 2 2 2】

実施例 9

化合物 2 を含むボトムエミッションOLED機器

20

イリジウム化合物Aを本開示によるイリジウム化合物 2 で代用したことを除いて、前記実施例 7の方法を用いてOLED機器が調製された。

## 【 0 2 2 3】

実施例 1 0

化合物 8 を含むボトムエミッションOLED機器

イリジウム化合物Aを本開示によるイリジウム化合物 8 で代用したことを除いて、前記実施例 7の方法を用いてOLED機器が調製された。

## 【 0 2 2 4】

実施例 1 1

化合物 1 3 を含むボトムエミッションOLED機器

30

イリジウム化合物Aを本開示によるイリジウム化合物 1 3 で代用したことを除いて、前記実施例 7の方法を用いてOLED機器が調製された。

## 【 0 2 2 5】

実施例 1 2

トップエミッションOLED機器

「ボトムエミッション」構造を採用したOLED機器の作成のためにここに記載した方法、手順および装置を用いて、図 3 に示される「トップエミッション」構造を採用したOLED機器が作成された。「トップエミッション」型OLED機器には、以下の層が含まれていた：Al / Ni 金属アノード、NPB正孔注入層、CBP / イリジウム複合体、BCP正孔ブロック層、Alq<sub>3</sub>電子輸送層、カルシウムカソードおよび保護層。Al / Niアノードのマルチプレイヤーはガラス基板上に順次蒸着された。反射層を形成するAl層の厚さは20 ~ 500 nmの間で変動する。Niの厚さは1 ~ 100 nmの間で変動する。Al / Niの蒸着の間、Al / Niのマルチプレイヤーは金属マスクにより、領域と形状を規定するためにパターン化された。さらに、酸素プラズマを用いてAl / Ni基板の浄化が行なわれた。

40

## 【 0 2 2 6】

完成したEL機器は、( 1 ) 電流-電圧 ( I-V ) 曲線、( 2 ) エレクトロルミネセンス放射輝度対 電圧、および( 3 ) エレクトロルミネセンススペクトラム 対 印加電圧、を測定することにより特徴付けられた。I-V曲線は、Keithley Source-Measurement Unit ( SMU ) 、2400型を使用して測定された。cd / m<sup>2</sup>を単位とするエレクトロルミネセンス放射輝度および印加電圧作用に関するエレクトロルミネセンススペクトラムは、Photo Research

50

PR 6 5 0 分光放射計を用いて測定され、一方電圧はKeithley SMUを使用してスキャンされた。外部量子効率である  $\eta_{\text{qe}}$  は、PR 6 5 0 分光放射計を用いて測定された。それはまた、計測されたランバート分布 (Lambertian distribution) と共に、光子束の測定を提供した。 $\text{cd/A}$  を単位とする特定の印加電圧におけるOLED機器の効率は、OLED機器のエレクトロルミネセンス放射輝度を、機器を稼働させるために必要な電流密度で割ることにより決定された。

【 0 2 2 7 】

OLED機器の特性の測定値を、表 1、2、3 に示す。

【 0 2 2 8 】

【表 1】

10

表 1 緑色の放出

化合物	機器の構造	外部量子効率	電圧	ピーク効率 $\text{cd/A}$	波長 $\lambda_{\text{max}}$ (nm)
化合物 A	ボトム エミッション	8.0 5 %	7.5	3 0.2 3	5 1 4
化合物 2	ボトム エミッション	9.0 5 %	7.5	3 5.7	5 1 3
化合物 A	トップ エミッション	1 0.6 5 %	6	4 0.1	5 1 4
化合物 2	トップ エミッション	1 2.5 %	6	4 7	5 1 3

20

【 0 2 2 9 】

【表 2】

表 2 赤色の放出

化合物	機器の構造	外部量子効率	電圧	ピーク効率 $\text{cd/A}$	波長 $\lambda_{\text{max}}$ (nm)
化合物 B	ボトム エミッション	3.6 4 %	7.5	2.7 3	6 3 4
化合物 1 3	ボトム エミッション	5.9 1 %	7.5	5.4 0	6 3 0
化合物 1 3	トップ エミッション	1 1.8 %	7.5	1 0.8	6 3 0

30

【 0 2 3 0 】

40

【表 3】

表 3 その他の放出波長

化合物	機器の構造	外部量子効率	電圧	ピーク効率 cd/A	波長 $\lambda_{\max}$ (nm)
化合物 8	ボトム エミッション	12.5 3%	7.5	18.2	614
化合物 8	トップ エミッション	17.2%	7.5	25	614

10

## 【0231】

ピーク効率はエレクトロルミネセント機器の重要な特性である。ピーク効率は、一定数の放射光子を生成するために必要な注入電子の数の測定値を提供するものであり、したがって、これは機器の効率についての測定値である。効率がより高くなるにつれて、特定の放射輝度に対する消費電力が低下する。また電子の光子転換効率がより高くなるにつれて、可能性を持つ非放射過程が減少する。そのように減少しないと熱を発生し、望ましくない化学反応を生じうる。表 1 および 2 に示すように、本開示のイリジウム錯体は、対応する親化合物に比べて、より高いピーク効率を示す。

20

## 【0232】

本開示の他の実施態様は、明細書の検討、およびここに開示されている発明の実施から、当業者にとって自明であろう。明細書の記載および実施例は例示に過ぎず、本開示の真の権利範囲と精神は、特許請求の範囲によって示されることを意図するものである。

## 【図面の簡単な説明】

## 【0233】

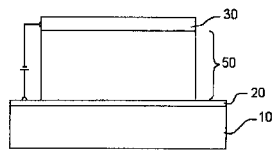
【図 1】図 1 は、本開示の一実施態様による発光素子の断面における概略図である。

【図 2】図 2 は、本開示の他の実施態様による発光素子の断面における概略図である。

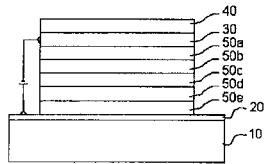
【図 3】図 3 は、本開示の他の実施態様による発光素子の断面における概略図である。



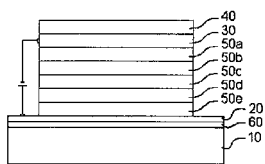
【図 1】



【図 2】



【図 3】



---

フロントページの続き

(74)代理人 100089118

弁理士 酒井 宏明

(72)発明者 チエン - ホン, チェン

台湾新竹市光復路二段 1 0 1 號 国立清華大学内

(72)発明者 ルイ - ミン, チェン

台湾台南県台南科学工業園区新市郷奇業路 1 号 奇美電子股 ぶん 有限公司内

(72)発明者 チェン - ウエイ, フアン

台湾台南県台南科学工業園区新市郷奇業路 1 号 奇美電子股 ぶん 有限公司内

(72)発明者 チェン - チュン, ヤン

台湾台南県台南科学工業園区新市郷奇業路 1 号 奇美電子股 ぶん 有限公司内

審査官 木村 伸也

(56)参考文献 国際公開第 0 2 / 0 6 4 7 0 0 ( WO , A 1 )

特開 2 0 0 1 - 2 4 7 8 5 9 ( JP , A )

国際公開第 0 2 / 0 4 5 4 6 6 ( WO , A 1 )

国際公開第 0 0 / 0 5 7 6 7 6 ( WO , A 1 )

(58)調査した分野(Int.Cl. , DB名)

C 0 9 K 1 1 / 0 6 - 1 1 / 0 7

H 0 1 L 5 1 / 5 0 - 5 1 / 5 6

H 0 5 B 3 3 / 1 0

C 0 7 C 4 9 / 9 2

C 0 7 F 1 5 / 0 0 - 1 5 / 0 6

C A p l u s ( STN )

R E G I S T R Y ( STN )