

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7644768号
(P7644768)

(45)発行日 令和7年3月12日(2025.3.12)

(24)登録日 令和7年3月4日(2025.3.4)

(51)国際特許分類	F I
H 1 0 K 85/30 (2023.01)	H 1 0 K 85/30
H 1 0 K 10/46 (2023.01)	H 1 0 K 10/46
H 1 0 K 19/10 (2023.01)	H 1 0 K 19/10
H 1 0 K 30/50 (2023.01)	H 1 0 K 30/50
H 1 0 K 30/86 (2023.01)	H 1 0 K 30/86

請求項の数 27 (全91頁) 最終頁に続く

(21)出願番号	特願2022-545878(P2022-545878)	(73)特許権者	503180100 ノヴァレッド ゲーエムベーハー ドイツ連邦共和国, 0 1 0 9 9 ドレス デン, エリーザ ベト - ベル - シュトラ ーセ 9
(86)(22)出願日	令和3年1月27日(2021.1.27)	(74)代理人	110000338 弁理士法人 HARAKENZO WOR LD PATENT & TRADEMA RK
(65)公表番号	特表2023-513463(P2023-513463 A)	(72)発明者	ローゼノ, トーマス ドイツ連邦共和国, 0 1 0 9 9 ドレス デン, エリーザベト - ベル - シュトラ ーセ 9, ツェーノオー ノヴァレッド ゲ ーエムベーハー
(43)公表日	令和5年3月31日(2023.3.31)	(72)発明者	ヤンクス, ヴィギンタス
(86)国際出願番号	PCT/EP2021/051884		
(87)国際公開番号	WO2021/151958		
(87)国際公開日	令和3年8月5日(2021.8.5)		
審査請求日	令和5年11月2日(2023.11.2)		
(31)優先権主張番号	20154082.0		
(32)優先日	令和2年1月28日(2020.1.28)		
(33)優先権主張国・地域又は機関	欧州特許庁(EP)		

最終頁に続く

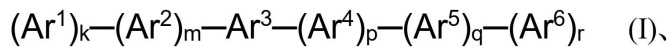
(54)【発明の名称】 正孔輸送化合物を含む正孔注入層を備えている有機電子デバイス

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

陽極層、陰極層および正孔注入層を含む有機電子デバイスであって、
前記正孔注入層は、前記陽極層と、前記陰極層と、の間に配置され、
前記正孔注入層は、正孔輸送化合物および金属錯体を含み、
- 前記正孔輸送化合物は、式(I)を有し：

【化1】



式中、

k、m、q、r は、互いに独立して、0、1または2であり、

p は、1、2または3であり、

2 ≤ k + m + q + r + p ≤ 11であり、

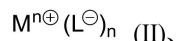
Ar¹ ~ Ar⁶ は、独立して、置換もしくは非置換の不飽和5 ~ 7員環複素環、置換もしくは非置換のC₆ - C₃₀アリール、置換もしくは非置換のC₃ - C₃₀ヘテロアリール、置換もしくは非置換のフルオレン、または、2個 ~ 6個の置換もしくは非置換の5 ~ 7員環を含む縮合環系であって、当該環は、(i) 不飽和5 ~ 7員環複素環、(ii) 5 ~ 6員芳香族複素環、(iii) 不飽和5 ~ 7員環非複素環、(iv) 6員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、から選択され；

ここで、Ar¹ ~ Ar⁶に含まれる置換基は、H、D、C₁ - C₁₂アルキル、非

置換の C₆ - C₁₈アリアル、非置換の C₃ - C₁₈ヘテロアリアル、2個～6個の非置換の5～7員環を含む縮合環系であって、当該環は、不飽和5～7員環複素環、5～6員芳香族複素環、不飽和5～7員環非複素環、および、6員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、の群から選択され；ならびに、

- 前記金属錯体は、式 (II) を有し：

【化2】



式中、

Mは、金属イオンであり、

nは、Mの原子価であり、nは、1～4の整数であり、

Lは、少なくとも2個の炭素原子を含むリガンドであり；

前記式 (II) の金属錯体は、400 g/mol および 1500 g/mol の分子量 Mw を有し；ならびに、

前記正孔注入層は、前記陽極層に隣接して配置される、有機電子デバイス。

【請求項2】

前記正孔輸送化合物の HOMO 準位は、同じ条件下で測定された、N4, N4''' - ジ (ナフタレン - 1 - イル) - N4, N4''' - ジフェニル - [1, 1' : 4', 1'' : 4'', 1''' - クアテルフェニル] - 4, 4''' - ジアミンの HOMO 準位よりも、真空準位からさらに離れている、請求項1に記載の有機電子デバイス。

【請求項3】

前記正孔注入層は、非発光性である、請求項1に記載の有機電子デバイス。

【請求項4】

式 (I) の前記正孔輸送化合物は、400 g/mol および 2000 g/mol の分子量 Mw を有する、請求項1に記載の有機電子デバイス。

【請求項5】

Mは、対応する金属が2.4未満のアレンの電気陰性度の値を有する金属イオン、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属または遷移金属、原子質量 24 Da の金属、原子質量 24 Da であり、かつ、Mが、酸化数 2である金属、を含む群より選択される、請求項1に記載の有機電子デバイス。

【請求項6】

Lは、下記を含む群より選択される、請求項1に記載の有機電子デバイス：

- 少なくとも3個の炭素原子、もしくは少なくとも4個の炭素原子、および/または、
 - 少なくとも2個の酸素原子、もしくは1個の酸素原子および1個の窒素原子；2個～4個の酸素原子；2個～4個の酸素原子および0個～2個の窒素原子；および/または、
 - ハロゲン、F、CN、置換もしくは非置換の C₁ - C₆アルキル、置換もしくは非置換の C₁ - C₆アルコキシより選択される少なくとも1個以上の基；あるいは、ハロゲン、F、CN、置換もしくは非置換の C₁ - C₆アルキル、置換もしくは非置換の C₁ - C₆アルコキシより選択される2個以上の基；ハロゲン、F、CN、置換 C₁ - C₆アルキル、置換 C₁ - C₆アルコキシより選択される1個以上の基；あるいは、ハロゲン、F、CN、全フッ素化 C₁ - C₆アルキル、全フッ素化 C₁ - C₆アルコキシより選択される2個以上の基；置換もしくは非置換の C₁ - C₆アルキル、置換もしくは非置換の C₆ - C₁₂アリアル、および/または、置換もしくは非置換の C₃ - C₁₂ヘテロアリアルより選択される少なくとも1個以上の基、

ここで、Lに含まれる置換基は、D、C₆アリアル、C₃ - C₉ヘテロアリアル、C₁ - C₆アルキル、C₁ - C₆アルコキシ、C₃ - C₆分枝アルキル、C₃ - C₆環式アルキル、C₃ - C₆分枝アルコキシ、C₃ - C₆環式アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化 C₁ - C₁₆アルキル、部分的もしくは全フッ素化 C₁ - C₁₆アルコキシ、部分的もしくは全重水素化 C₁ - C₆アルキル、部分的もしくは全重水素化 C₁ - C₆アルコキシ、C₆R⁶、C₆OOR⁶、ハロゲン、FまたはCNより選択され；

10

20

30

40

50

ここで、 R^6 は、 C_6 アリール、 $C_3 - C_9$ ヘテロアリール、 $C_1 - C_6$ アルキル、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 $C_3 - C_6$ 分枝アルキル、 $C_3 - C_6$ 環式アルキル、 $C_3 - C_6$ 分枝アルコキシ、 $C_3 - C_6$ 環式アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化 $C_1 - C_{16}$ アルキル、部分的もしくは全フッ素化 $C_1 - C_{16}$ アルコキシ、部分的もしくは全重水素化 $C_1 - C_6$ アルキル、部分的もしくは全重水素化 $C_1 - C_6$ アルコキシより選択される。

【請求項 7】

式 (I I) の前記金属錯体は、非発光性である、請求項 1 に記載の有機電子デバイス。

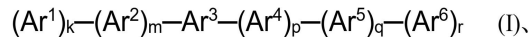
【請求項 8】

前記正孔注入層は、正孔輸送化合物および金属錯体を含み、

前記正孔輸送化合物は、式 (I) を有し、

10

【化 3】



式中、

k 、 m 、 q 、 r は、互いに独立して、0、1 または 2 であり、

p は、1、2 または 3 であり、

$2 \leq k + m + q + r + p \leq 11$ であり、

$Ar^1 \sim Ar^6$ は、独立して、置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{30}$ アリール、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{30}$ ヘテロアリール、置換もしくは非置換のフルオレン、または、2 個 ~ 6 個の置換もしくは非置換の 5 ~ 7 員環を含む縮合環系であって、当該環は、(i) 不飽和 5 ~ 7 員環複素環、(ii) 5 ~ 6 員芳香族複素環、(iii) 不飽和 5 ~ 7 員環非複素環、(iv) 6 員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、から選択され；

20

$k = 1$ である場合の Ar^2 、 Ar^3 、 $q = 1$ である場合の Ar^4 、 $r = 1$ である場合の Ar^5 は、独立して、置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{30}$ アリール、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{30}$ ヘテロアリール、置換もしくは非置換のピフェニレン、置換もしくは非置換のフルオレン、置換もしくは非置換のナフタレン、置換もしくは非置換のアントラセン、置換もしくは非置換のフェナントレン、置換もしくは非置換のピレン、置換もしくは非置換のペリレン、置換もしくは非置換のトリフェニレン、置換もしくは非置換のテトラセン、置換もしくは非置換のテトラフェン、置換もしくは非置換のジベンゾフラン、置換もしくは非置換のジベンゾチオフエン、置換もしくは非置換のキサテン、置換もしくは非置換のカルバゾール、置換もしくは非置換のアゼピン、置換もしくは非置換のジベンゾ [b, f] アゼピン、9, 9' - スピロピ [フルオレン]、置換もしくは非置換のスピロ [フルオレン - 9, 9' - キサンテン]、置換もしくは非置換の 9, 14 - ジヒドロジベンゾ [2, 3 : 6, 7] アゼピノ [4, 5 - b] インドール、または、置換もしくは非置換の芳香族縮合環系であって、置換もしくは非置換の非ヘテロ 5 員環、置換もしくは非置換のヘテロ 5 員環、置換もしくは非置換の 6 員環、および / または、置換もしくは非置換の 7 員環を含む群より選択される少なくとも 3 個の置換もしくは非置換の芳香環を含む、芳香族縮合環系、より選択され；

30

$k = 0$ である場合の Ar^2 、 $m = 0$ および $k = 0$ である場合の Ar^3 、 $q = 0$ および $r = 0$ である場合の Ar^4 、 $r = 0$ である場合の Ar^5 は、独立して、置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{30}$ アリール、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{30}$ ヘテロアリール、置換もしくは非置換のピフェニル、置換もしくは非置換のフルオレニル、置換もしくは非置換のナフタレニル、置換もしくは非置換のアントラセニル、置換もしくは非置換のフェナントレニル、置換もしくは非置換のピレニル、置換もしくは非置換のペリレニル、置換もしくは非置換のトリフェニレニル、置換もしくは非置換のテトラセニル、置換もしくは非置換のテトラフェニル、置換もしくは非置換のジベンゾフラニル、置換もしくは非置換のジベンゾチオフエニル、置換もしくは非置換のキサテニル、置換もしくは非置換のカルバゾール、置換もしくは非置換のアゼピン、置換もしくは非置換のジベンゾ [b, f] アゼピン、9, 9' - スピロピ [フルオレニル]、

40

50

置換もしくは非置換のスピロ [フルオレニル - 9, 9' - キサンテン]、置換もしくは非置換の 9, 14 - ジヒドロジベンゾ [2, 3 : 6, 7] アゼピノ [4, 5 - b] インドール、または、置換もしくは非置換の芳香族縮合環系であって、置換もしくは非置換の非ヘテロ 5 員環、置換もしくは非置換のヘテロ 5 員環、置換もしくは非置換の 6 員環、および / または、置換もしくは非置換の 7 員環を含む群より選択される少なくとも 3 個の置換もしくは非置換の芳香環を含む、芳香族縮合環系、より選択され；

ここで、 $Ar^1 \sim Ar^6$ に含まれる置換基は、H、D、 $C_1 - C_{12}$ アルキル、非置換の $C_6 - C_{18}$ アリール、または、非置換の $C_3 - C_{18}$ ヘテロアリールより選択され；
ならびに、

前記金属錯体は、式 (II) を有する、請求項 1 に記載の有機電子デバイス。

10

【請求項 9】

前記正孔輸送化合物は、複素環式芳香環を含む少なくとも 1 個 ~ 6 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系；少なくとも 1 個 ~ 3 個の置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、複素環式芳香環を含む 2 個 ~ 5 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系；少なくとも 1 個 ~ 3 個の置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、複素環式芳香環を含む 3 個または 4 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系；少なくとも 1 個 ~ 3 個の置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、を含む化合物の群より選択され、

複素環式芳香環を含む芳香族縮合環系は、非置換であり、または、少なくとも 1 個 ~ 3 個の非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環である、請求項 1 に記載の有機電子デバイス。

20

【請求項 10】

請求項 1 に記載の前記正孔輸送化合物は、置換もしくは非置換の非複素環式芳香環、置換もしくは非置換のヘテロ 5 員環、置換もしくは非置換の 6 員環、および / または、置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、を含む群より選択される、少なくとも 2 個 ~ 6 個の縮合芳香環を有する、置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、非置換の非複素環式芳香環、非置換のヘテロ 5 員環、非置換の 6 員環、および、非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環を含む群より選択される、少なくとも 2 個 ~ 6 個の縮合芳香環を有する、非置換の芳香族縮合環系、を含む化合物の群より選択される、請求項 1 に記載の有機電子デバイス。

【請求項 11】

30

請求項 1 に記載の前記正孔輸送化合物は、少なくとも 1 個の不飽和 5 員環、少なくとも 1 個の不飽和 6 員環、少なくとも 1 個の不飽和 7 員環、少なくとも 1 個の不飽和 5 員環、または、少なくとも 1 個 ~ 3 個のヘテロ原子を含む少なくとも 1 個の不飽和 7 員環、を有する、少なくとも 1 個 ~ 6 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系を含む化合物の群より選択される、請求項 1 に記載の有機電子デバイス。

【請求項 12】

請求項 1 に記載の前記正孔輸送化合物は、下記を含む化合物の群より選択され：

- 少なくとも 6 個 ~ 12 個の芳香環、
- 少なくとも 4 個 ~ 11 個の非複素環式芳香環、
- 少なくとも 1 個 ~ 4 個の芳香族 5 員環、
- 少なくとも 1 個もしくは 2 個の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、
- 少なくとも 6 個 ~ 12 個の芳香環、ここで当該芳香環のうち、
少なくとも 4 個 ~ 11 個が、非複素環式芳香環であり、および、
少なくとも 1 個 ~ 4 個の芳香環は複素環式芳香環であり、非複素環式芳香環および複素環式芳香環の総数は、12 個の芳香環を超えず、
- 少なくとも 6 個 ~ 12 個の芳香環、ここで当該芳香環のうち、
少なくとも 4 個 ~ 11 個が、非複素環式芳香環であり、および、
少なくとも 1 個 ~ 4 個の芳香環は複素環式芳香環であり、非複素環式芳香環および複素環式芳香環の総数は、12 個の芳香環を超えず、および、

40

前記正孔輸送化合物は、少なくとも 1 個 ~ 4 個の芳香族 5 員環を含む、請求

50

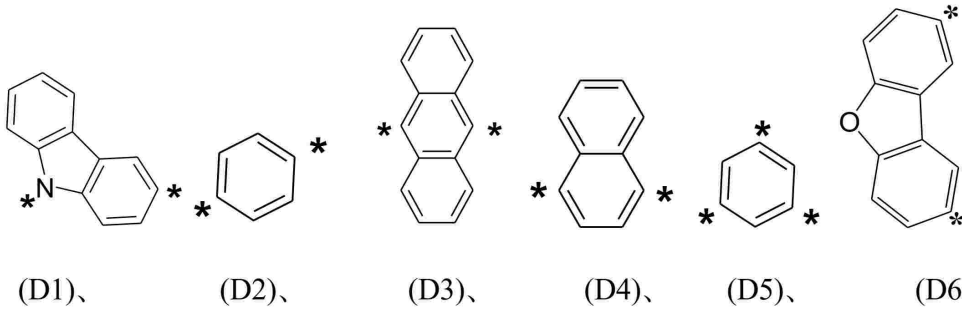
項 1 または 2 に記載の有機電子デバイス。

【請求項 1 3】

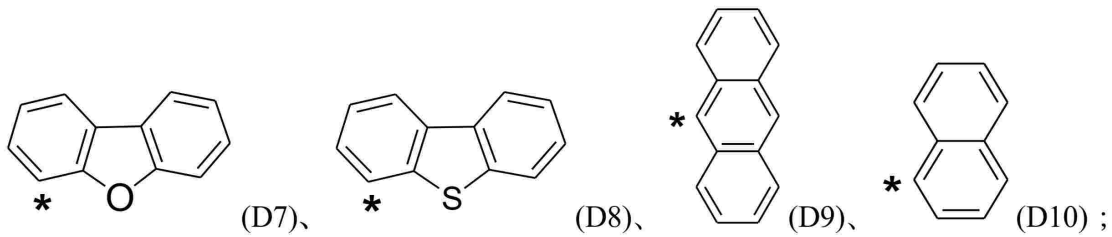
式 (I) にて：

Ar^3 は、D 1 ~ D 1 7 より選択され：

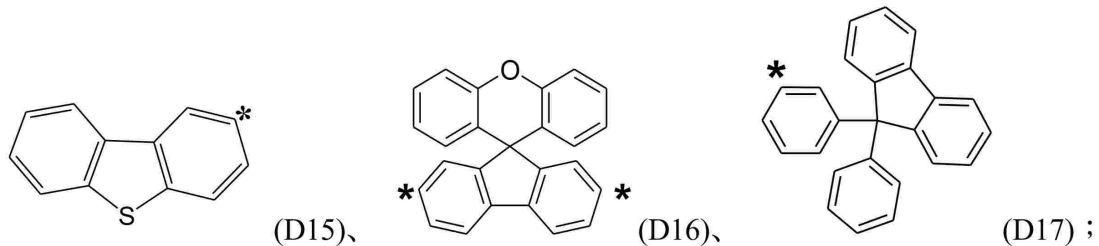
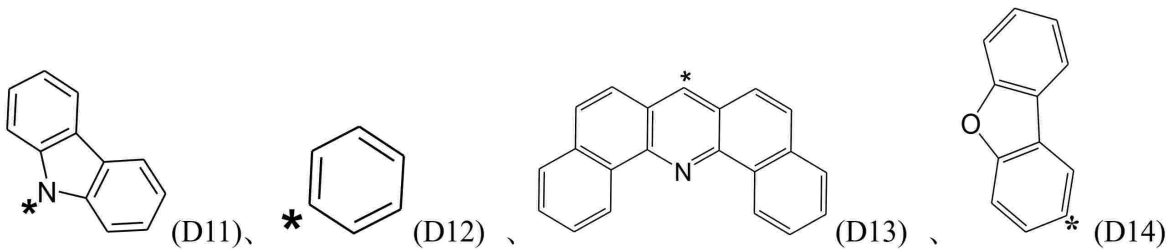
【化 4】



10



20



30

Ar^1 は、 $m > 0$ および $k > 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 および D 1 7 より選択され、 $k > 0$ および $m = 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 および D 1 7 より選択され、 $k > 1$ である場合は、D 1 ~ D 6 より選択され；

Ar^2 は、 $m > 0$ および $k > 0$ である場合は、D 1 ~ D 6 より選択され、 $m > 0$ および $k = 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 および D 1 7 より選択され；

40

Ar^4 は、 $q > 0$ である場合は、D 1 ~ D 6 より選択され、 $q = 0$ および $r > 0$ である場合は、D 1 ~ D 6 より選択され、 $q = 0$ および $r = 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 および D 1 7 より選択され；

Ar^5 は、 $q > 0$ および $r > 0$ である場合は、D 1 ~ D 6 より選択され、 $q > 0$ および $r = 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 および D 1 7 より選択され；

Ar^6 は、 $r > 0$ 、 $q > 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 および D 1 7 より選択され、 $r > 0$ 、 $q = 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 および D 1 7 より選択され、 $r > 1$ である場合は、D 1 ~ D 6 より選択される、請求項 1 に記載の有機電子デバイス。

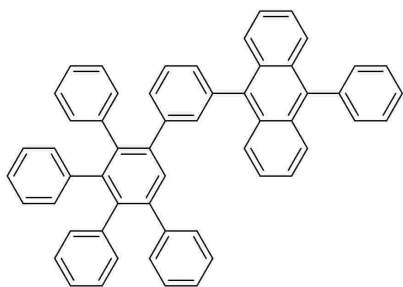
【請求項 1 4】

式 (I) の前記正孔輸送化合物は、F 1 ~ F 1 3 より選択される、請求項 1 に記載の有

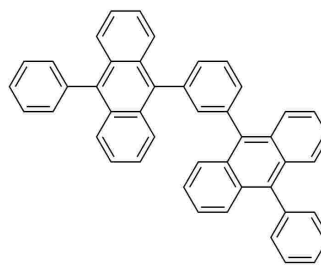
50

機電子デバイス：

【化5】

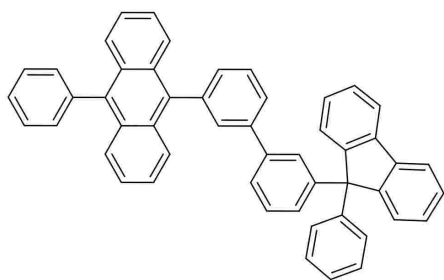


(F1)、

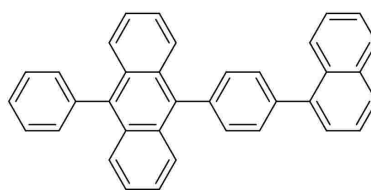


(F2)、

10

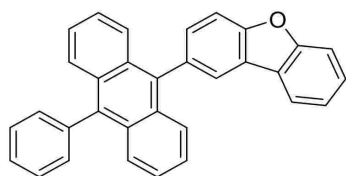


(F3)、

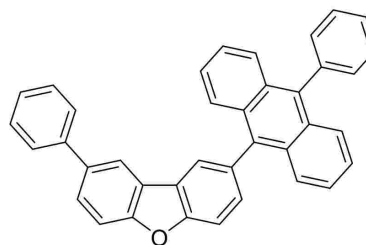


(F4)、

20

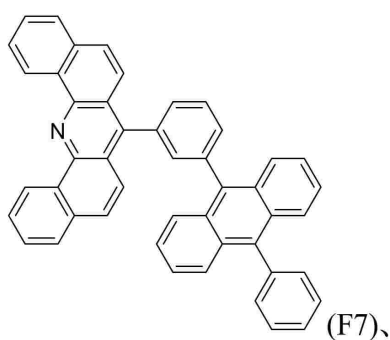


(F5)、

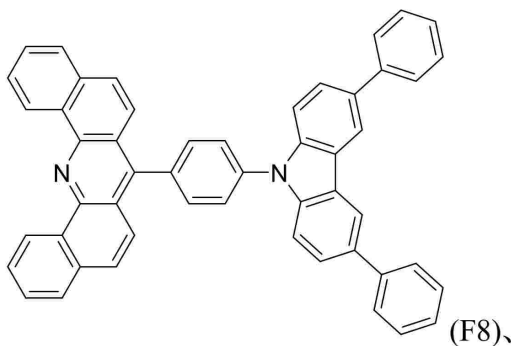


(F6)、

30

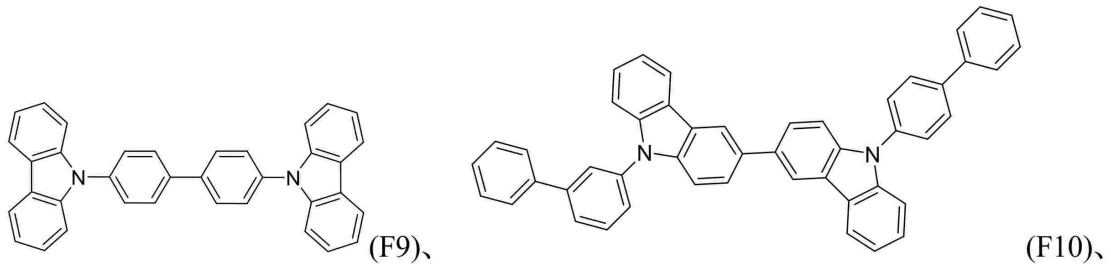


(F7)、

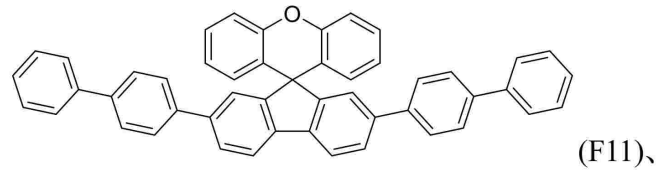


(F8)、

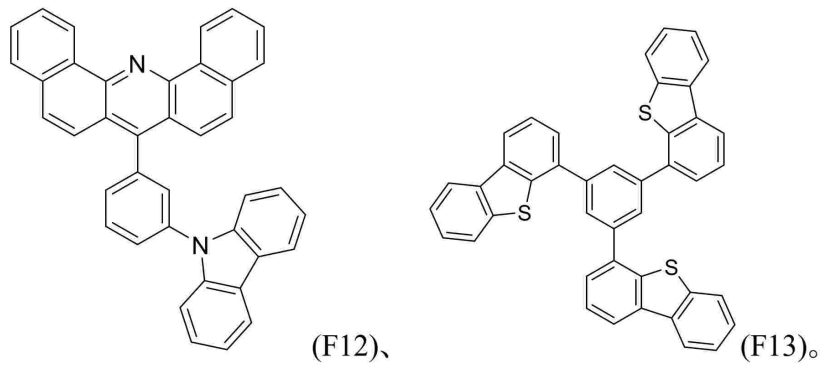
40



10



20



【請求項 15】

n は、1 ~ 4 の整数である、請求項 1 に記載の有機電子デバイス。

【請求項 16】

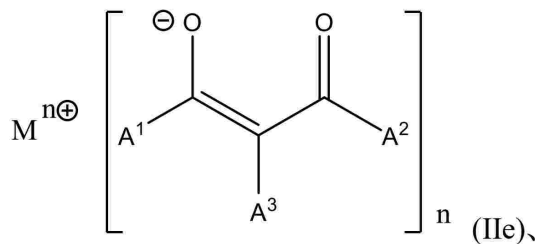
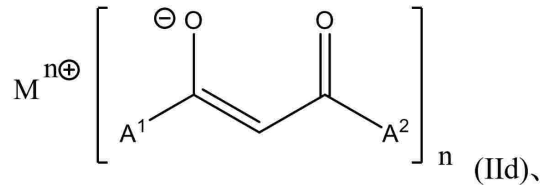
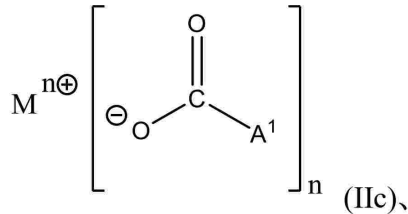
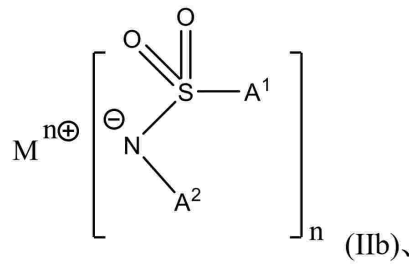
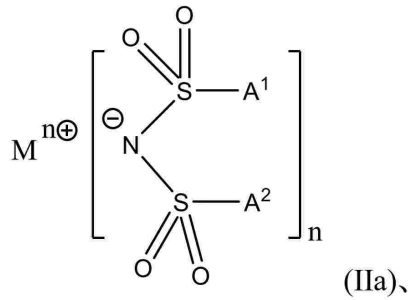
前記金属錯体は、下記式 (II a) ~ (II e) より選択され得る、請求項 1 に記載の有機電子デバイス：

30

40

50

【化 6】



式中、

Mは、金属イオンであり、

nは、Mの原子価であり、nは、1～4の整数であり；

A¹およびA²は、独立して、置換もしくは非置換のC₁-C₁₂アルキル、置換もしくは非置換のC₆-C₁₂アリール、置換もしくは非置換のC₃-C₁₂ヘテロアリールより選択され；

A³は、H、D、置換もしくは非置換のC₁-C₁₂のアルキル、置換もしくは非置換のC₆-C₁₂アリール、置換もしくは非置換のC₃-C₁₂ヘテロアリールより選択され；

ここで、A¹およびA²および/またはA³に含まれる置換基は、独立して、D、C₆アリール、C₃-C₉ヘテロアリール、C₁-C₆アルキル、C₁-C₆アルコキシ、C₃-C₆分枝アルキル、C₃-C₆環状アルキル、C₃-C₆分枝アルコキシ、C₃-C₆環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルキル、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルコキシ、部分的もしくは全重水素化C₁-C₆アルキル、部分的もしくは全重水素化C₁-C₆アルコキシ、COR¹、COOR¹、ハロゲン、FまたはCNより選択され、

ここで、R¹は、C₆アリール、C₃-C₉ヘテロアリール、C₁-C₆アルキル、C₁-C₆アルコキシ、C₃-C₆分枝アルキル、C₃-C₆環状アルキル、C₃-C₆分枝アルコキシ、C₃-C₆環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルキル、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルコキシ、部分的もしくは全重水素化C₁-C₆アルキル、部分的もしくは全重水素化C₁-C₁₆アルコキシより選択される。

【請求項 17】

A¹およびA²および/またはA³は次の群より選択される、

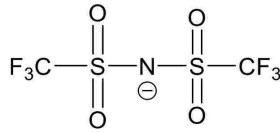
A¹およびA²および/またはA³の少なくとも1個は、置換基を含み、ここで、A¹およびA²および/またはA³の前記置換基の少なくとも1個は、独立して、C₃-C₉ヘテロアリール、C₁-C₆アルコキシ、C₃-C₆分枝アルコキシ、C₃-C₆環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルキル、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルコキシ、部分的もしくは全重水素化C₁-C₆アルコキシ、COR¹、COOR¹、ハロゲン、FまたはCNより選択される、

A¹ および A² および / または A³ の少なくとも 1 個は、少なくとも 2 個の置換基を含み、ここで、A¹ および A² および / または A³ の前記置換基は、独立して、C₃ - C₉ ヘテロアリール、C₁ - C₆ アルコキシ、C₃ - C₆ 分枝アルコキシ、C₃ - C₆ 環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化 C₁ - C₁₆ アルキル、部分的もしくは全フッ素化 C₁ - C₁₆ アルコキシ、部分的もしくは全重水素化 C₁ - C₆ アルコキシ、COR¹、COOR¹、ハロゲン、F または CN より選択される、請求項 1.6 に記載の有機電子デバイス。

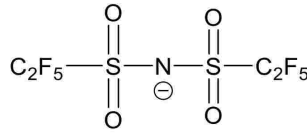
【請求項 1.8】

L は、独立して、G1 ~ G64 より選択される、請求項 1 または 1.7 に記載の有機電子デバイス：

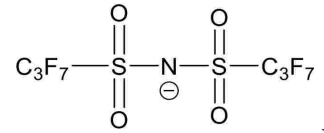
【化 7】



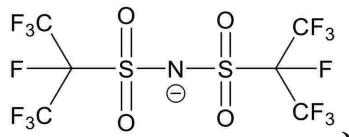
(G1)



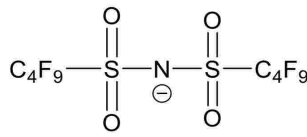
(G2)



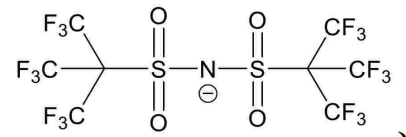
(G3)



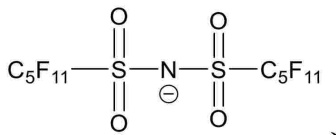
(G4)



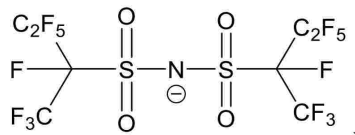
(G5)



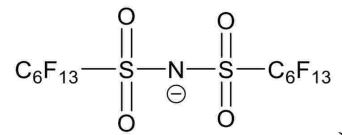
(G6)



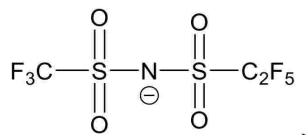
(G7)



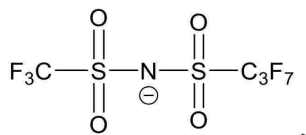
(G8)



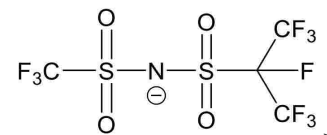
(G9)



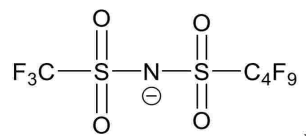
(G10)



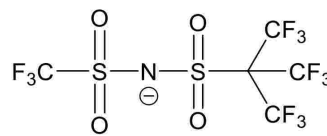
(G11)



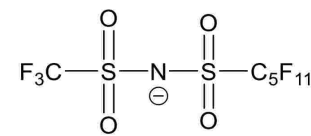
(G12)



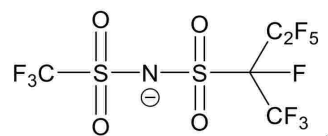
(G13)



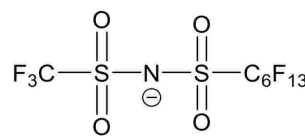
(G14)



(G15)



(G16)



(G17)

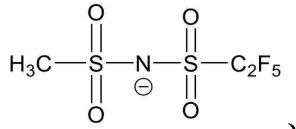
10

20

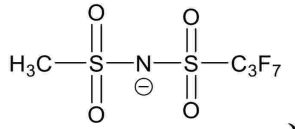
30

40

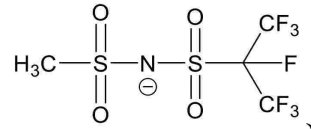
50



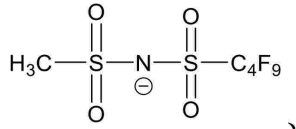
(G18)



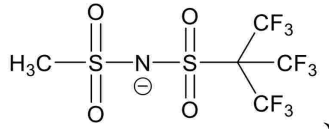
(G19)



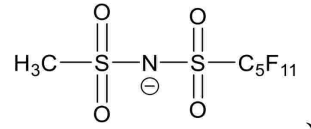
(G20)



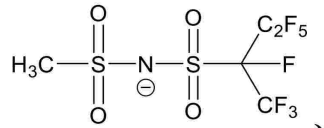
(G21)



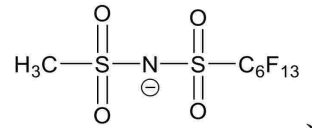
(G22)



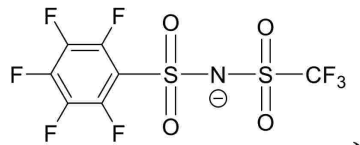
(G23)



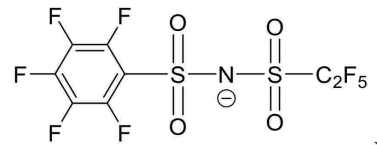
(G24)



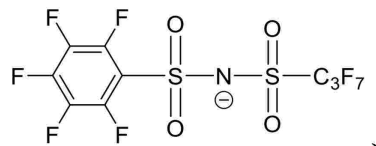
(G25)



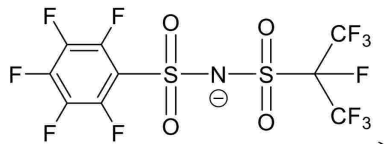
(G26)



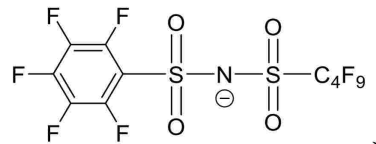
(G27)



(G28)



(G29)



(G30)

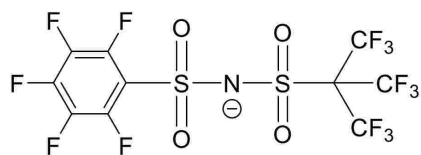
10

20

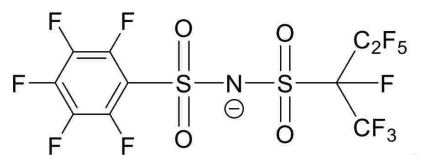
30

40

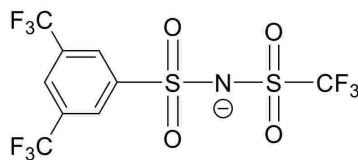
50



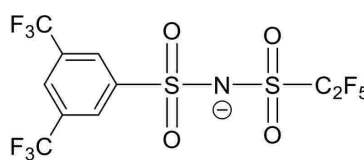
(G31)



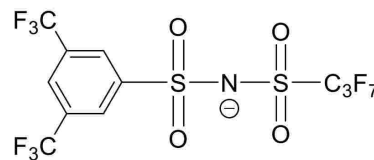
(G32)



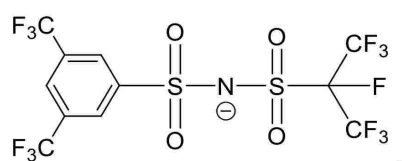
(G33)



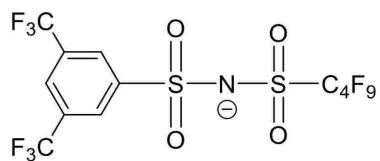
(G34)



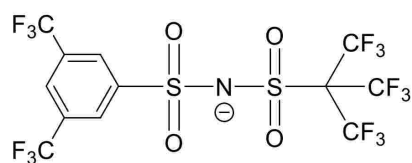
(G35)



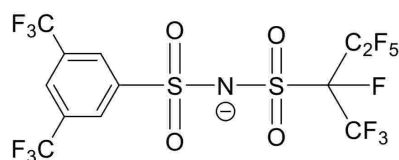
(G36)



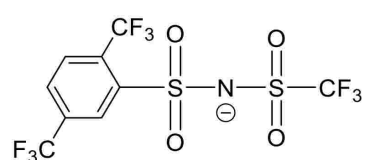
(G37)



(G38)



(G39)



(G40)

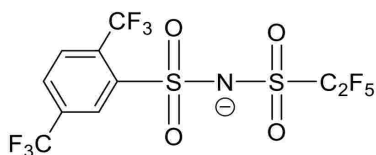
10

20

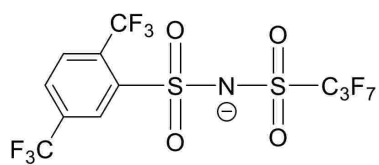
30

40

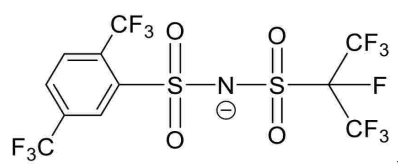
50



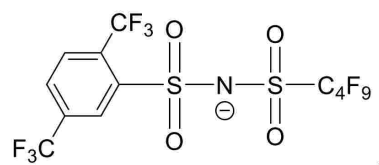
(G41)



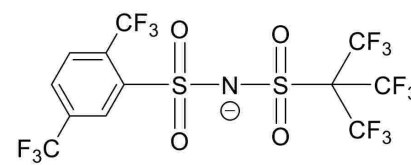
(G42)



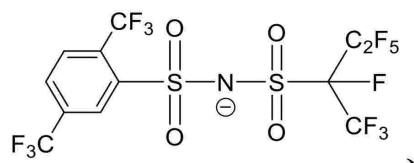
(G43)



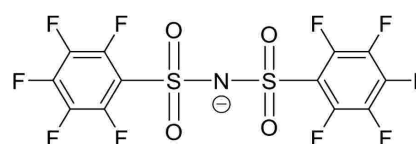
(G44)



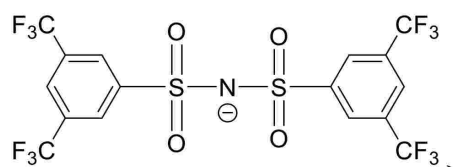
(G45)



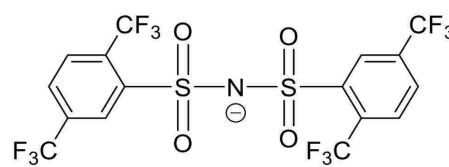
(G46)



(G47)



(G48)



(G49)

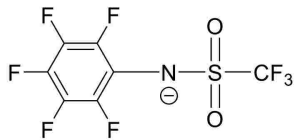
10

20

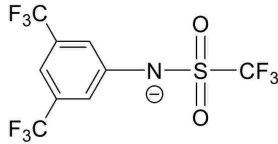
30

40

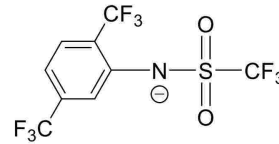
50



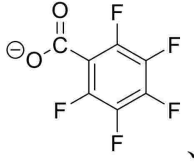
(G50)



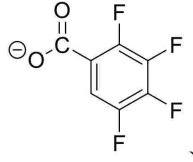
(G51)



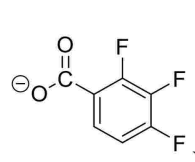
(G52)



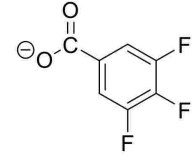
(G53)



(G54)

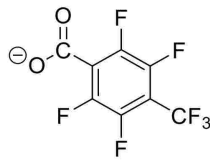


(G55)

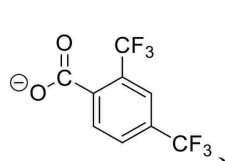


(G56)

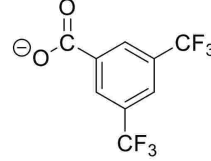
10



(G57)

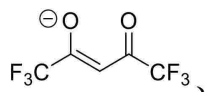


(G58)

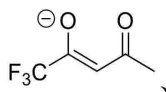


(G59)

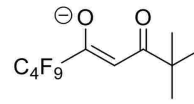
20



(G60)

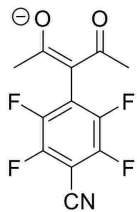


(G61)

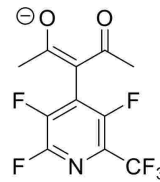


(G62)

30



(G63)



(G64)。

40

【請求項 19】

前記有機電子デバイスは、少なくとも1層の光活性層をさらに含み、

前記光活性層は、前記正孔注入層と、前記陰極層と、の間に配置される、請求項1に記載の有機電子デバイス。

【請求項 20】

前記少なくとも1層の光活性層は発光層である、請求項1に記載の有機電子デバイス。

【請求項 21】

前記正孔注入層は、式(II)の前記金属錯体を含む第1の副層と、式(I)の正孔輸送化合物を含む第2の副層と、を含み、

50

前記第 1 の副層は、前記陽極層のより近くに配置され、前記第 2 の副層は、前記陰極層のより近くに配置される、請求項 1 に記載の有機電子デバイス。

【請求項 2 2】

前記正孔注入層は、式 (I I) の前記金属錯体からなる第 1 の副層と、式 (I) の正孔輸送化合物を含む第 2 の副層と、を含み、

前記第 1 の副層は、前記陽極層のより近くに配置され、前記第 2 の副層は、前記陰極層のより近くに配置される、請求項 1 に記載の有機電子デバイス。

【請求項 2 3】

前記正孔注入層は、式 (I I) の前記金属錯体を含む第 1 の副層と、式 (I) の前記正孔輸送化合物および前記金属錯体を含む第 2 の副層と、を含み、

前記第 1 の副層は、前記陽極層のより近くに配置され、前記第 2 の副層は、前記陰極層のより近くに配置される、請求項 1 に記載の有機電子デバイス。

【請求項 2 4】

前記有機電子デバイスは、正孔輸送層をさらに含み、

前記正孔輸送層は、前記正孔注入層と、前記陰極層と、の間に配置される、あるいは、前記正孔輸送層は、前記正孔注入層と、前記少なくとも 1 層の光活性層または少なくとも 1 層の発光層と、の間に配置される、請求項 1 に記載の有機電子デバイス。

【請求項 2 5】

前記正孔輸送層は、請求項 1 に記載の前記正孔輸送化合物を含む、請求項 2 4 に記載の有機電子デバイス。

【請求項 2 6】

式 (I) の前記正孔輸送化合物は、前記正孔注入層中および前記正孔輸送層中にて、同じものが選択される、請求項 2 4 または 2 5 に記載の有機電子デバイス。

【請求項 2 7】

前記電子デバイスは、発光デバイス、薄膜トランジスタ、表示デバイスまたは光電池である、請求項 1 に記載の有機電子デバイス。

【発明の詳細な説明】

【0001】

〔技術分野〕

本発明は、陽極層、陰極層および正孔注入層を含み、当該正孔注入層は正孔輸送化合物を含む、有機電子デバイスに関する。

【0002】

〔背景技術〕

自己発光デバイスである有機電子デバイス（例えば、有機発光ダイオード OLED）は、広い視野角、優れたコントラスト、迅速な応答性、高輝度、優れた動作電圧性能および色再現性を有する。一般的な OLED は、陽極層、正孔注入層 HIL、正孔輸送層 HTL、発光層 EML、電子輸送層 ETL および陰極層を含み、これらは、基板上に連続して積層される。ここで、HIL、HTL、EML および ETL は、有機化合物より形成される薄膜である。

【0003】

陽極および陰極に電圧を印加すると、陽極から注入された正孔は、HIL および HTL を経て EML に移動し、陰極から注入された電子は、ETL を経て EML に移動する。正孔および電子は、EML 内で再結合して励起子を生成する。励起子が励起状態から基底状態に落ちると、光が放出される。正孔および電子の注入ならびに流出は平衡を保つ必要があり、その結果、上述の構造を有する OLED は、低い動作電圧、優れた効率および/または長い寿命を有する。

【0004】

有機発光ダイオードの性能は、正孔注入層の性能の影響を受け得る。有機発光ダイオードの性能は、その中でも、正孔注入層に含まれる正孔輸送化合物および金属錯体の性能の影響を受け得る。

10

20

30

40

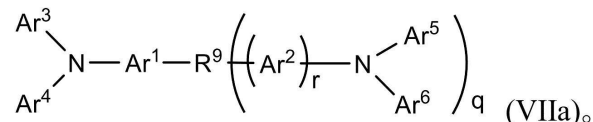
50

【 0 0 0 5 】

WO 2 0 1 7 0 2 9 3 7 0 は、一般式 I a の金属アミド、および有機発光ダイオード (O L E D) 用の正孔注入層 (H I L) としての金属アミドの使用、並びに、一般式 I a の金属アミドを含む正孔注入層を含む有機発光ダイオード (O L E D) の製造方法に関する。WO 2 0 1 7 0 2 9 3 7 0 には、式 V I I a を有するトリアリールアミン化合物をさらに含み得る、正孔輸送層が開示されている：

【 0 0 0 6 】

【 化 1 】



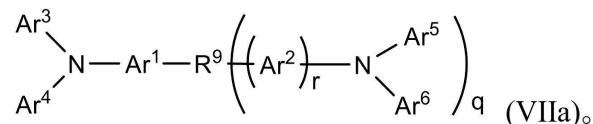
10

【 0 0 0 7 】

WO 2 0 1 7 0 2 9 3 6 6 は、電荷中性金属アミド化合物でドーパされたトリアリールアミン化合物を含む O L E D 用の正孔注入層であって、前記正孔注入層は少なくとも約 2 0 n m ~ 約 1 0 0 0 n m の厚さを有し、前記電荷中性金属アミド化合物は式 I a を有することを特徴とする正孔注入層に関する。WO 2 0 1 7 0 2 9 3 6 6 には、式 V I I a を有するトリアリールアミン化合物を含む正孔注入層 (H I L) が開示されている：

【 0 0 0 8 】

【 化 2 】



20

【 0 0 0 9 】

WO 2 0 1 7 1 0 2 8 6 1 は、下記式 1 のフッ素化スルホンアミド金属塩を有する、少なくとも 1 層の有機層 (3) を含む有機電子素子 (1 0) に関する：(1) 式中、M は、2 6 g / m o l 超の原子質量を有する二価の金属またはそれより高い原子価の金属、あるいは、3 9 g / m o l 以上の原子質量を有する一価の金属のいずれかである。式中、1 n 7 であり、R 1、R 2 は、互いに独立して、フッ素置換アリールラジカル、フッ素置換アルキルラジカルおよびフッ素置換アリールアルキルラジカルを含む群より選択される。マトリックスの材料は、正孔輸送材料である。

30

【 0 0 1 0 】

WO 2 0 1 7 1 7 8 4 7 3 A 1 は、第 1 有機機能層の積層体 (S 1) および第 2 有機機能層の積層体 (S 2) と、これらの間に配置された電荷キャリア生成層 (5) と、を含む有機電子部品 (1 0 0) に関する。電荷キャリア生成層 (5) は、n - コンダクト (n - c o n d u c t i n g) 領域 (5 b) と、ドーパされた有機 p - ドープ領域 (5 a) と、これらの間に配置された 0 . 1 n m ~ 2 0 n m の層厚を有する中間領域 (5 c) と、を有する。ドーパされた有機 p - ドープ領域 (5 a) は、p - ドーパントとして、下記式 1 のフッ素化スルホンイミド金属塩を有し、M は、2 6 g / m o l 超の原子質量を有する二価の金属またはそれより高い原子価の金属、あるいは、3 9 g / m o l 以上の原子質量を有する一価の金属のいずれかである。式中、1 n 7 であり、R 1、R 2 は、互いに独立して、フッ素置換アリールラジカル、フッ素置換アルキルラジカル、およびフッ素置換アリールアルキルラジカルを含む群より選択される。

40

【 0 0 1 1 】

性能の改善した正孔注入層を設けることによって (特に、正孔注入層および有機電子デバイスの性能の改善を通して、動作電圧の改善を達成することによって)、有機電子デバイスの性能を改善する必要性が残されている。

【 0 0 1 2 】

その上、真空準位からさらに離れた H O M O 準位を有する化合物を含む隣接する層への

50

注入を可能にする正孔注入層を提供する必要性が残されている。

【0013】

さらなる目的は、大量生産に適した条件下で、真空熱蒸発によって蒸着し得る化合物を含む正孔注入層を提供することである。

【0014】

〔開示〕

本発明の一態様は、陽極層、陰極層および正孔注入層を含む有機電子デバイスであって、前記正孔注入層は、前記陽極層と、前記陰極層と、の間に配置され、前記正孔注入層は、正孔輸送化合物および金属錯体を含み、ここで、

- 前記正孔輸送化合物は、下記より選択される共有結合した原子を含み： 10

共有結合したC、H、O、N、Siおよび/もしくはS；または、
共有結合したC、H、O、N、BおよびP、ならびに、

ここで、

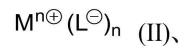
- 前記正孔輸送化合物は、400 g/molおよび2000 g/molの分子量Mwを有し、

- 前記正孔輸送化合物のHOMO準位は、同じ条件下で測定された、N4, N4'''-ジ(ナフタレン-1-イル)-N4, N4'''-ジフェニル-[1, 1':4', 1''':4'', 1''-クアテルフェニル]-4, 4'''-ジアミンのHOMO準位よりも、真空準位からさらに離れており；ならびに、

- 前記金属錯体は、式(II)を有し： 20

【0015】

【化3】



【0016】

式中、

Mは、金属イオンであり、

nは、Mの原子価であり、nは、1~4の整数であり、

Lは、少なくとも2個の炭素原子を含むリガンドであり；ならびに、

ここで、前記正孔注入層は、前記陽極層に隣接して配置される、有機電子デバイス、を 30
提供する。

【0017】

一実施形態では、前記有機電子デバイスは、陽極層、陰極層および正孔注入層を含み、前記正孔注入層は、前記陽極層と、前記陰極層と、の間に配置され、前記正孔注入層は、正孔輸送化合物および金属錯体を含み、ここで、

- 前記正孔輸送化合物は、下記より選択される共有結合した原子を含み：

共有結合したC、H、O、N、Siおよび/もしくはS；または、
共有結合したC、H、O、N、BおよびP、ならびに、

ここで、

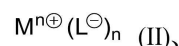
- 前記正孔輸送化合物は、400 g/molおよび2000 g/molの分子量Mwを有し、 40

- 前記正孔輸送化合物のHOMO準位は、同じ条件下で測定された、N4, N4'''-ジ(ナフタレン-1-イル)-N4, N4'''-ジフェニル-[1, 1':4', 1''':4'', 1''-クアテルフェニル]-4, 4'''-ジアミンのHOMO準位よりも、真空準位からさらに離れており；ならびに、

前記金属錯体は、式(II)を有し：

【0018】

【化4】



【0019】

ここで、

- 前記金属錯体は、 400 g/mol および 2000 g/mol の分子量Mwを有し、

Mは、金属イオンであり、

nは、Mの原子価であり、nは、1～4の整数であり、

Lは、少なくとも2個の炭素原子を含むリガンドであり；ならびに、

ここで、前記正孔注入層は、前記陽極層に隣接して配置され；ならびに、

ここで、任意に、前記正孔輸送化合物は、トリアリールアミン正孔輸送化合物であり、

ここで、前記アリール置換基は、単結合によって前記第三級アミンへ結合され、複素環の一部を形成する前記アリール置換基は除外される。

10

【0020】

本発明におけるトリアリールアミン正孔輸送化合物としては、例えば、N, N, N', N'-テトラキス(4-メチルフェニル)-ベンジジン、N4, N4, N4', N4'-テトラ(ピフェニル-4-イル)ピフェニル-4, 4'-ジアミン、ピフェニル-4-イル(9, 9-ジフェニル-9H-フルオレン-2-イル)-[4-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)フェニル]-アミン、N, N'-ビス(ナフタレン-1-イル)-N, N'-ビス(フェニル)-ベンジジン、N1, N3-ジ([1, 1'-ピフェニル]-4-イル)-5-(9, 9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-N1, N3-ビス(3, 5-ジメチルフェニル)ベンゼン-1, 3-ジアミン、N1, N3-ジ([1, 1'-ピフェニル]-4-イル)-5-(9, 9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-N1, N3-ジメシチルベンゼン-1, 3-ジアミン、N, N'-((9H-フルオレン-9, 9-ジイル)ビス(4, 1-フェニレン))ビス(N-([1, 1'-ピフェニル]-4-イル)-[1, 1'-ピフェニル]-4-アミン)、N4, N4''-ジ(ナフタレン-1-イル)-N4, N4''-ジフェニル-[1, 1':4', 1''-テルフェニル]-4, 4''-ジアミン(CAS 139255-16-6)、4, 4'-ビス-(N-(1-ナフチル)-N-フェニル-アミノ)-クアテルフェニル(CAS 650609-47-5)、4, 4', 4''-トリス(カルバゾール-9-イル)-トリフェニルアミンが挙げられる。

20

【0021】

一実施形態では、有機電子デバイスは、陽極層、陰極層および正孔注入層を含み、前記正孔注入層は、前記陽極層と、前記陰極層と、の間に配置され、前記正孔注入層は、正孔輸送化合物および金属錯体を含み、ここで、

30

- 前記正孔輸送化合物は、下記より選択される共有結合した原子を含み：

共有結合したC、H、O、N、Siおよび/またはS；または、

共有結合したC、H、O、N、BおよびP、ならびに、

ここで、

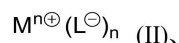
- 前記正孔輸送化合物は、 400 g/mol および 2000 g/mol の分子量Mwを有し、

- 前記正孔輸送化合物のHOMO準位は、同じ条件下で測定された、N4, N4'''-ジ(ナフタレン-1-イル)-N4, N4'''-ジフェニル-[1, 1':4', 1''':4', 40, 1''-クアテルフェニル]-4, 4'''-ジアミンのHOMO準位よりも、真空準位からさらに離れており；ならびに、

- 前記金属錯体は、式(II)を有し：

【0022】

【化5】



【0023】

ここで、

- 前記金属錯体は、 400 g/mol および 2000 g/mol の分子量Mwを有

50

し、

Mは、金属イオンであり、

nは、Mの原子価であり、nは、1～4の整数であり、

Lは、少なくとも2個の炭素原子を含むリガンドであり；ならびに、

ここで、前記正孔注入層は、前記陽極層に隣接して配置され；ならびに、

ここで、任意に、前記正孔輸送化合物は、トリアリールアミン正孔輸送化合物であり、

ここで、前記アリール置換基は、単結合によって前記第三級アミンへ結合され、複素環の一部を形成する前記アリール置換基は除外され；かつ、 sp^3 混成炭素原子を有する正孔輸送化合物は除外される。

【0024】

10

用語「HOMO準位」は、最高被占分子軌道を意味し、eV（電子ボルト）で測定されると理解されたい。

【0025】

用語「真空準位からさらに離れたHOMO準位」は、HOMO準位の絶対値が参照化合物のHOMO準位の絶対値よりも高いことを意味すると理解されたい。例えば、用語「N4, N4''' - ジ（ナフトレン - 1 - イル） - N4, N4''' - ジフェニル - [1, 1' : 4', 1'' : 4''', 1'''' - クアテルフェニル] - 4, 4''' - ジアミンのHOMO準位よりも真空準位からさらに離れた」は、有機マトリックス化合物（OMC）のHOMO準位の絶対値が、N4, N4''' - ジ（ナフトレン - 1 - イル） - N4, N4''' - ジフェニル - [1, 1' : 4', 1'' : 4''', 1'''' - クアテルフェニル] - 4, 4''' - ジアミンのHOMO準位よりも高いことを意味すると理解されたい。

【0026】

用語「絶対値」は、「-」記号なしの値を意味すると理解されたい。本発明の一実施形態では、正孔輸送化合物のHOMO準位は、量子力学的方法によって計算され得る。

【0027】

正孔輸送化合物のHOMO準位が当該方法によって計算される場合は、正孔輸送化合物のHOMO準位は、N4, N4''' - ジ（ナフトレン - 1 - イル） - N4, N4''' - ジフェニル - [1, 1' : 4', 1'' : 4''', 1'''' - クアテルフェニル] - 4, 4''' - ジアミンのHOMO準位未満である。

【0028】

30

正孔輸送化合物のHOMO準位が当該方法によって計算される場合は、正孔輸送化合物のHOMO準位の絶対値は、N4, N4''' - ジ（ナフトレン - 1 - イル） - N4, N4''' - ジフェニル - [1, 1' : 4', 1'' : 4''', 1'''' - クアテルフェニル] - 4, 4''' - ジアミンのHOMO準位の絶対値よりも高い。

【0029】

本発明の一実施形態では、正孔輸送化合物のHOMO準位は、「TURBOMOLE GmbH、Litzenhardtstrasse 19、76135 Karlsruhe、ドイツ」より入手可能なプログラムパッケージ TURBOMOLE V6.5を使用して計算される。

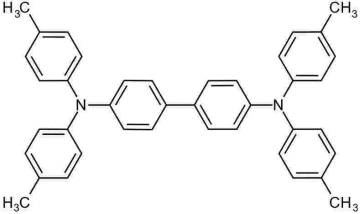
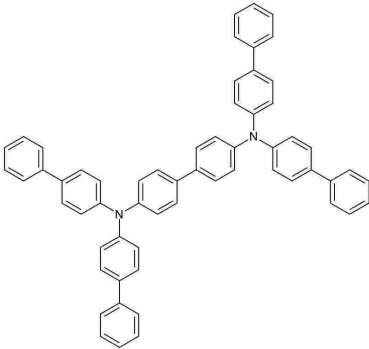
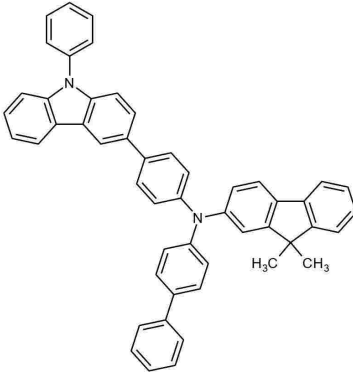
【0030】

40

当該方法によって計算される場合は、N4, N4''' - ジ（ナフトレン - 1 - イル） - N4, N4''' - ジフェニル - [1, 1' : 4', 1'' : 4''', 1'''' - クアテルフェニル] - 4, 4''' - ジアミンのHOMO準位は、 -4.85 eVである。HOMO準位が当該方法によって計算される場合は、従来技術の正孔輸送化合物は、下記のHOMO準位を有する。比較のために、酸化還元電位から計算されたHOMO準位も提供される。

【0031】

【表 1】

名称	構造式	WO 2017029370に開示された酸化還元電位に基づくHOMO準位 (e V)	TURBO MOLE V 6.5で計算したHOMO準位 (e V)
N, N, N', N' -テトラキス(4-メチルフェニル) -ベンジジン (T-1)		- 4.99	-
N4, N4, N4', N4' -テトラ(ビフェニル-4-イル) ビフェニル-4, 4' -ジアミン (T-2)		- 5.08	- 4.73
ビフェニル-4-イル(9,9-ジフェニル-9H-フルオレン-2-イル) - [4-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)フェニル] - アミン (T-3)		- 5.10	- 4.69

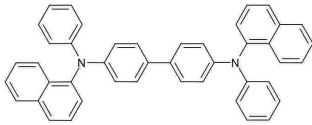
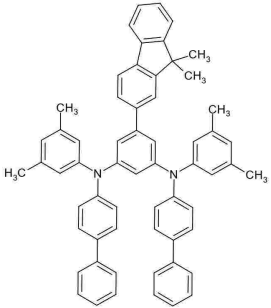
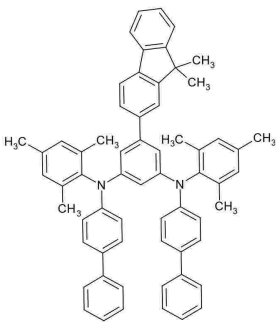
10

20

30

40

50

名称	構造式	WO 2017029370に開示された酸化還元電位に基づくHOMO準位 (eV)	TURBO MOLE V6.5で計算したHOMO準位 (eV)
N, N'-ビス(ナフタレン-1-イル)-N, N'-ビス(フェニル)-ベンジジン (T-4)		-5.11	-4.72
N1, N3-ジ([1,1'-ビフェニル]-4-イル)-5-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-N1, N3-ビス(3,5-ジメチルフェニル)ベンゼン-1,3-ジアミン (T-5)		-5.18	-4.79
N1, N3-ジ([1,1'-ビフェニル]-4-イル)-5-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-N1, N3-ジメシチルベンゼン-1,3-ジアミン		-5.22	-4.68

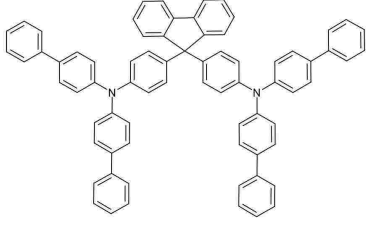
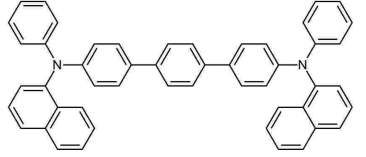
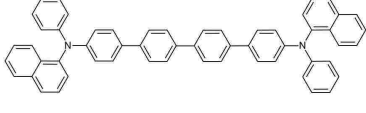
10

20

30

40

50

名称	構造式	WO2017029370に開示された酸化還元電位に基づくHOMO準位 (eV)	TURBO MOLE V6.5で計算したHOMO準位 (eV)
(T-6)			
<p>N, N' - ((9H-フルオレン-9,9-ジイル)ビス(4,1-フェニレン))</p> <p>ビス(N-([1,1'-ビフェニル]-4-イル) - [1,1'-ビフェニル]-4-アミン)</p> <p>(T-7)</p>		- 5. 2 4	- 4. 8 6
<p>N4, N4'' - ジ (ナフタレン-1-イル) - N4, N4'' - ジフェニル - [1,1':4',1''-テルフェニル]-4,4'' - ジアミン (CAS 139255-16-6)</p> <p>(T-8)</p>		- 5. 2 5	- 4. 8 1
<p>4,4' - ビス - (N-(1-ナフチル) - N-フェニル - アミノ) -</p>		- 5. 3 3	- 4. 8 5

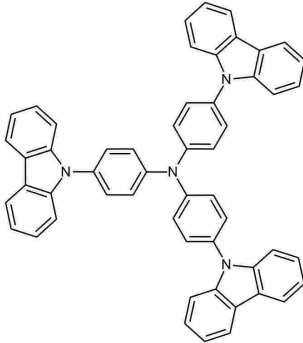
10

20

30

40

50

名称	構造式	WO 2017029370に開示された酸化還元電位に基づくHOMO準位 (eV)	TURBO MOLE V 6.5で計算したHOMO準位 (eV)
クアテルフェニル (CAS 650609-47-5) (T-9)			
4, 4', 4''-トリス (カルバゾール-9-イル) -トリフェニルアミン (T-10)		-5.7	-5.09

10

20

【0032】

HOMO準位が真空準位から遠く離れている場合は、酸化還元電位を正確に測定することは、もはや実現できない可能性がある。したがって、特に明記されていない限り、本明細書中にて、HOMO準位は量子力学的方法によって測定される。

30

【0033】

リガンドLは、負電荷を有することに留意されたい。

【0034】

一実施形態では、リガンドLは、1個の負電荷を有する。換言すれば、リガンドLは、モノ陰イオンである。

【0035】

一実施形態では、リガンドLの負電荷は、金属イオンMの原子価に対応し得る。

【0036】

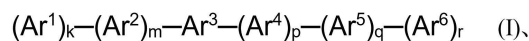
別の態様では、陽極層、陰極層および正孔注入層を含む有機電子デバイスであって、前記正孔注入層は、前記陽極層と、前記陰極層と、の間に配置され、前記正孔注入層は、正孔輸送化合物および金属錯体を含み、ここで、

40

- 前記正孔輸送化合物は、式(I)を有し：

【0037】

【化6】



【0038】

式中、

k、m、q、rは、互いに独立して、0、1または2より選択され、
pは、1、2または3であり、

50

2 $k + m + q + r + p = 11$ であり、

$Ar^1 \sim Ar^6$ は、独立して、置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{30}$ アリール、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{30}$ ヘテロアリール、置換もしくは非置換のフルオレン、または、2 個 ~ 6 個の置換もしくは非置換の 5 ~ 7 員環を含む縮合環系であって、当該環は、(i) 不飽和 5 ~ 7 員環複素環、(ii) 5 ~ 6 員芳香族複素環、(iii) 不飽和 5 ~ 7 員環非複素環、(iv) 6 員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、から選択され；好ましくは、独立して、置換もしくは非置換のピフェニレン、置換もしくは非置換のフルオレン、置換もしくは非置換のナフタレン、置換もしくは非置換のアントラセン、置換もしくは非置換のフェナントレン、置換もしくは非置換のピレン、置換もしくは非置換のペリレン、置換もしくは非置換のトリフェニレン、置換もしくは非置換のテトラセン、置換もしくは非置換のテトラフェン、置換もしくは非置換のジベンゾフラン、置換もしくは非置換のジベンゾチオフエン、置換もしくは非置換のキサントレン、置換もしくは非置換のカルバゾール、置換もしくは非置換のアゼピン、置換もしくは非置換のジベンゾ [b , f] アゼピン、9 , 9' - スピロビ [フルオレン]、置換もしくは非置換のスピロ [フルオレン - 9 , 9' - キサントレン]、置換もしくは非置換の 9 , 14 - ジヒドロジベンゾ [2 , 3 : 6 , 7] アゼピノ [4 , 5 - b] インドール、または、置換もしくは非置換の芳香族縮合環系であって、置換もしくは非置換の非ヘテロ 5 員環、置換もしくは非置換のヘテロ 5 員環、置換もしくは非置換の 6 員環、および / または、置換もしくは非置換の 7 員環を含む群より選択される少なくとも 3 個の置換もしくは非置換の芳香環を含む芳香族縮合環系、から選択され、

10

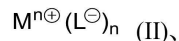
20

ここで、前記置換基は、H、D、 $C_1 - C_{12}$ アルキル、非置換の $C_6 - C_{18}$ アリール、非置換の $C_3 - C_{18}$ ヘテロアリール、2 個 ~ 6 個の非置換の 5 ~ 7 員環を含む縮合環系であって、当該環は、不飽和 5 ~ 7 員環複素環、5 ~ 6 員芳香族複素環、不飽和 5 ~ 7 員環非複素環、および、6 員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、の群から選択され；ならびに、

前記金属錯体は、式 (I I) を有し：

【 0 0 3 9 】

【 化 7 】



30

【 0 0 4 0 】

ここで、

M は、金属イオンであり、

n は、M の原子価であり、n は、1 ~ 4 の整数であり、

L は、少なくとも 2 個の炭素原子を含むリガンドであり；ならびに、

前記正孔注入層は、前記陽極層に隣接して配置される。

【 0 0 4 1 】

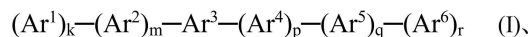
一実施形態では、有機電子デバイスは、陽極層、陰極層および正孔注入層を含み、前記正孔注入層は、前記陽極層と、前記陰極層と、の間に配置され、前記正孔注入層は、正孔輸送化合物および金属錯体を含み、ここで、

40

- 前記正孔輸送化合物は、式 (I) を有し：

【 0 0 4 2 】

【 化 8 】



【 0 0 4 3 】

式中、

k、m、q、r は、互いに独立して、0、1 または 2 より選択され、

p は、1、2 または 3 であり、

2 $k + m + q + r + p = 11$ であり、

50

Ar¹ ~ Ar⁶ は、独立して、置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、置換もしくは非置換の C₆ - C₃₀ アリール、置換もしくは非置換の C₃ - C₃₀ ヘテロアリール、置換もしくは非置換のフルオレン、または、2 個 ~ 6 個の置換もしくは非置換の 5 ~ 7 員環を含む縮合環系であって、当該環は、(i) 不飽和 5 ~ 7 員環複素環、(ii) 5 ~ 6 員芳香族複素環、(iii) 不飽和 5 ~ 7 員環非複素環、(iv) 6 員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、から選択され；好ましくは、独立して、置換もしくは非置換のビフェニレン、置換もしくは非置換のフルオレン、置換もしくは非置換のナフタレン、置換もしくは非置換のアントラセン、置換もしくは非置換のフェナントレン、置換もしくは非置換のピレン、置換もしくは非置換のペリレン、置換もしくは非置換のトリフェニレン、置換もしくは非置換のテトラセン、置換もしくは非置換のテトラフェン、置換もしくは非置換のジベンゾフラン、置換もしくは非置換のジベンゾチオフエン、置換もしくは非置換のキサテン、置換もしくは非置換のカルバゾール、置換もしくは非置換のアゼピン、置換もしくは非置換のジベンゾ [b , f] アゼピン、9 , 9' - スピロビ [フルオレン]、置換もしくは非置換のスピロ [フルオレン - 9 , 9' - キサテン]、置換もしくは非置換の 9 , 14 - ジヒドロジベンゾ [2 , 3 : 6 , 7] アゼピノ [4 , 5 - b] インドール、または、置換もしくは非置換の芳香族縮合環系であって、置換もしくは非置換の非ヘテロ 5 員環、置換もしくは非置換のヘテロ 5 員環、置換もしくは非置換の 6 員環、および / または、置換もしくは非置換の 7 員環を含む群より選択される少なくとも 3 個の置換もしくは非置換の芳香環を含む芳香族縮合環系、から選択され、

10

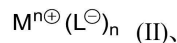
ここで、前記置換基は、H、D、C₁ - C₁₂ アルキル、非置換の C₆ - C₁₈ アリール、非置換の C₃ - C₁₈ ヘテロアリール、2 個 ~ 6 個の非置換の 5 ~ 7 員環を含む縮合環系であって、当該環は、不飽和 5 ~ 7 員環複素環、5 ~ 6 員芳香族複素環、不飽和 5 ~ 7 員環非複素環、および、6 員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、の群から選択され；ならびに、

20

前記金属錯体は、式 (I I) を有し：

【 0 0 4 4 】

【 化 9 】



【 0 0 4 5 】

前記金属錯体は、400 g / mol および 2000 g / mol の分子量 Mw を有し、M は、金属イオンであり、n は、M の原子価であり、n は、1 ~ 4 の整数であり、L は、少なくとも 2 個の炭素原子を含むリガンドであり；ならびに、ここで、前記正孔注入層は、前記陽極層に隣接して配置され；ならびに、ここで、任意に、前記正孔輸送化合物は、トリアリールアミン正孔輸送化合物であり、ここで、前記アリール置換基は、単結合によって第三級アミンへ結合され、複素環の一部を形成する前記アリール置換基は、除外される。

30

【 0 0 4 6 】

一実施形態では、有機電子デバイスは、陽極層、陰極層および正孔注入層を含み、前記正孔注入層は、前記陽極層と、前記陰極層と、の間に配置され、前記正孔注入層は、正孔輸送化合物および金属錯体を含み、ここで、

40

- 前記正孔輸送化合物は、400 g / mol および 2000 g / mol の分子量 Mw を有し、前記正孔輸送化合物は、式 (I) を有し：

【 0 0 4 7 】

【 化 1 0 】



【 0 0 4 8 】

式中、

50

k、m、q、r は、互いに独立して、0、1または2より選択され、
 p は、1、2または3であり、
 $2 \leq k + m + q + r + p \leq 11$ であり、

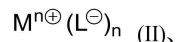
$A r^1 \sim A r^6$ は、独立して、置換もしくは非置換の不飽和5～7員環複素環、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{30}$ アリアル、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{30}$ ヘテロアリアル、置換もしくは非置換のフルオレン、または、2個～6個の置換もしくは非置換の5～7員環を含む縮合環系であって、当該環は、(i)不飽和5～7員環複素環、(ii)5～6員芳香族複素環、(iii)不飽和5～7員環非複素環、(iv)6員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、から選択され；好ましくは、独立して、置換もしくは非置換のピフェニレン、置換もしくは非置換のフルオレン、置換もしくは非置換のナフタレン、置換もしくは非置換のアントラセン、置換もしくは非置換のフェナントレン、置換もしくは非置換のピレン、置換もしくは非置換のペリレン、置換もしくは非置換のトリフェニレン、置換もしくは非置換のテトラセン、置換もしくは非置換のテトラフェン、置換もしくは非置換のジベンゾフラン、置換もしくは非置換のジベンゾチオフエン、置換もしくは非置換のキサテン、置換もしくは非置換のカルバゾール、置換もしくは非置換のアゼピン、置換もしくは非置換のジベンゾ[*b*, *f*]アゼピン、9, 9'-スピロビ[フルオレン]、置換もしくは非置換のスピロ[フルオレン-9, 9'-キサテン]、置換もしくは非置換の9, 14-ジヒドロジベンゾ[2, 3:6, 7]アゼピノ[4, 5-*b*]インドール、または、置換もしくは非置換の芳香族縮合環系であって、置換もしくは非置換の非ヘテロ5員環、置換もしくは非置換のヘテロ5員環、置換もしくは非置換の6員環、および/または、置換もしくは非置換の7員環を含む群より選択される少なくとも3個の置換もしくは非置換の芳香環を含む芳香族縮合環系、から選択され、

ここで、前記置換基は、H、D、 $C_1 - C_{12}$ アルキル、非置換の $C_6 - C_{18}$ アリアル、非置換の $C_3 - C_{18}$ ヘテロアリアル、2個～6個の非置換の5～7員環を含む縮合環系であって、当該環は、不飽和5～7員環複素環、5～6員芳香族複素環、不飽和5～7員環非複素環、および、6員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、の群から選択され；ならびに、

前記金属錯体は、式(II)を有し：

【0049】

【化11】



【0050】

式中、

- 前記金属錯体は、400 g/molおよび2000 g/molの分子量Mwを有し、

Mは、金属イオンであり、

nは、Mの原子価であり、nは、1～4の整数であり、

Lは、少なくとも2個の炭素原子を含むリガンドであり；ならびに、

前記正孔注入層は、前記陽極層に隣接して配置され；ならびに、

ここで、任意に、前記正孔輸送化合物は、トリアリアルアミン正孔輸送化合物であり、

ここで、前記アリアル置換基は、単結合によって第三級アミンへ結合され、複素環の一部を形成する前記アリアル置換基は、除外される。

【0051】

一実施形態では、有機電子デバイスは、陽極層、陰極層および正孔注入層を含み、前記正孔注入層は、前記陽極層と、前記陰極層と、の間に配置され、前記正孔注入層は、正孔輸送化合物および金属錯体を含み、ここで、

- 前記正孔輸送化合物は、400 g/molおよび2000 g/molの分子量Mwを有し、前記正孔輸送化合物は、式(I)を有し：

【0052】

10

20

30

40

50

【化12】



【0053】

式中、

k、m、q、rは、互いに独立して、0、1または2より選択され、

pは、1、2または3であり、

$2 \leq k + m + q + r + p \leq 11$ であり、

$Ar^1 \sim Ar^6$ は、独立して、置換もしくは非置換の不飽和5～7員環複素環、置換

もしくは非置換の $C_6 - C_{30}$ アリール、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{30}$ ヘテロアリー

ル、置換もしくは非置換のフルオレン、または、2個～6個の置換もしくは非置換の5～

7員環を含む縮合環系であって、当該環は、(i)不飽和5～7員環複素環、(ii)5

～6員芳香族複素環、(iii)不飽和5～7員環非複素環、(iv)6員環芳香族非複

素環を含む群より選択される縮合環系、から選択され；好ましくは、独立して、置換もし

くは非置換のピフェニレン、置換もしくは非置換のフルオレン、置換もしくは非置換のナ

フタレン、置換もしくは非置換のアントラセン、置換もしくは非置換のフェナントレン、

置換もしくは非置換のピレン、置換もしくは非置換のペリレン、置換もしくは非置換のト

リフェニレン、置換もしくは非置換のテトラセン、置換もしくは非置換のテトラフェン、

置換もしくは非置換のジベンゾフラン、置換もしくは非置換のジベンゾチオフエン、置換

もしくは非置換のキサテン、置換もしくは非置換のカルバゾール、置換もしくは非置換

のアゼピン、置換もしくは非置換のジベンゾ[*b*, *f*]アゼピン、9, 9'-スピロビ[フル

オレン]、置換もしくは非置換のスピロ[フルオレン-9, 9'-キサテン]、置換も

しくは非置換の9, 14-ジヒドロジベンゾ[2, 3:6, 7]アゼピノ[4, 5-*b*]

インドール、または、置換もしくは非置換の芳香族縮合環系であって、置換もしくは非置

換の非ヘテロ5員環、置換もしくは非置換のヘテロ5員環、置換もしくは非置換の6員環

、および/または、置換もしくは非置換の7員環を含む群より選択される少なくとも3個

の置換もしくは非置換の芳香環を含む芳香族縮合環系、から選択され、

ここで、前記置換基は、H、D、 $C_1 - C_{12}$ アルキル、非置換の $C_6 - C_{18}$ アリ

ール、非置換の $C_3 - C_{18}$ ヘテロアリール、2個～6個の非置換の5～7員環を含む縮合

環系であって、当該環は、不飽和5～7員環複素環、5～6員芳香族複素環、不飽和5～

7員環非複素環、および、6員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、の群

から選択され；ならびに、

前記金属錯体は、式(II)を有し：

【0054】

【化13】



【0055】

式中、

- 前記金属錯体は、400 g/molおよび2000 g/molの分子量Mwを有し、

Mは、金属イオンであり、

nは、Mの原子価であり、nは、1～4の整数であり、

Lは、少なくとも2個の炭素原子を含むリガンドであり；ならびに、

前記正孔注入層は、前記陽極層に隣接して配置され；ならびに、

ここで、任意に、前記正孔輸送化合物は、トリアリールアミン正孔輸送化合物であり、

ここで、前記アリール置換基は、単結合によって第三級アミンへ結合され、複素環の

一部を形成する前記アリール置換基は、除外され、

ここで、 sp^3 混成炭素原子を有する正孔輸送化合物は、除外される。

【0056】

10

20

30

40

50

一実施形態では、トリアリールアミン正孔輸送化合物（ここで、前記アリール置換基は、単結合によって第三級アミンへ結合され、前記アリール置換基が結合した第三級アミンは、複素環の一部ではない）は、除外され得、および/または、 sp^3 混成炭素を有する正孔輸送化合物は、除外され得る。

【0057】

一実施形態では、リン光発光化合物である式（II）の正孔輸送化合物および/または金属錯体は、除外される。

【0058】

一実施形態では、トリアリールアミン正孔輸送化合物（ここで、前記アリール置換基は、単結合によって第三級アミンへ結合され、前記アリール置換基が結合した第三級アミンは、複素環の一部ではない）は、除外され得、リン光発光化合物である正孔輸送化合物は、除外される。

10

【0059】

一実施形態では、トリアリールアミン正孔輸送化合物（ここで、前記アリール置換基は、単結合によって第三級アミンへ結合され、前記アリール置換基が結合した第三級アミンは、複素環の一部ではない）は、除外され得、 sp^3 混成炭素を有する正孔輸送化合物は、除外され得、リン光発光化合物である正孔輸送化合物は、除外され得る。

【0060】

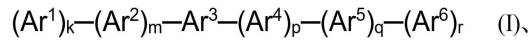
一実施形態では、有機電子デバイスは、陽極層、陰極層および正孔注入層を含み、前記正孔注入層は、前記陽極層と、前記陰極層と、の間に配置され、前記正孔注入層は、正孔輸送化合物および金属錯体を含み、ここで、

20

- 正孔輸送化合物は、式（I）を有し：

【0061】

【化14】



【0062】

式中、

k、m、q、rは、互いに独立して、0、1または2より選択され、

pは、1、2または3であり、

30

$2 \leq k + m + q + r + p \leq 11$ であり、

$Ar^1 \sim Ar^6$ は、独立して、置換もしくは非置換の不飽和5～7員環複素環、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{30}$ アリール、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{30}$ ヘテロアリール、置換もしくは非置換のフルオレン、または、2個～6個の置換もしくは非置換の5～7員環を含む縮合環系であって、当該環は、(i)不飽和5～7員環複素環、(ii)5～6員芳香族複素環、(iii)不飽和5～7員環非複素環、(iv)6員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、から選択され得；

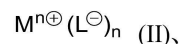
ここで、前記置換基は、H、D、 $C_1 - C_{12}$ アルキル、非置換の $C_6 - C_{18}$ アリール、非置換の $C_3 - C_{18}$ ヘテロアリール、2個～6個の非置換の5～7員環を含む縮合環系であって、当該環は、不飽和5～7員環複素環、5～6員芳香族複素環、不飽和5～7員環非複素環、および、6員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、の群から選択され；ならびに、

40

前記金属錯体は、式（II）を有し：

【0063】

【化15】



【0064】

ここで、

Mは、金属イオンであり、

50

n は、Mの原子価であり、n は、1 ~ 4の整数であり、
L は、少なくとも2個の炭素原子を含むリガンドであり；ならびに、
前記正孔注入層は、前記陽極層に隣接して配置される。

【0065】

別の態様では、前記正孔輸送化合物または式(I)の前記正孔輸送化合物は、電子対を共有する正孔輸送化合物(covalent hole transport compound)であってもよい。

【0066】

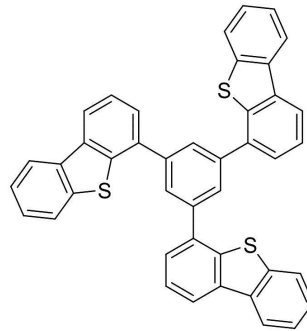
一実施形態では、n は、1 ~ 4、好ましくは1 ~ 3、さらに好ましくは2または3の整数であり得る。

【0067】

k、m、q、r は、隣接するAr部分の置換基の数を表すことに留意されたい。例えば、式(I)の化合物F7が挙げられる：

【0068】

【化16】



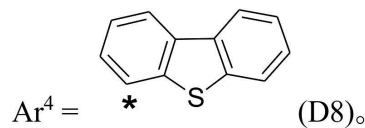
【0069】

(F7) は、 $Ar^3 = \text{フェニレン}$ 、 $k = 0$ 、 $m = 0$ 、 $q = 0$ 、 $r = 0$ および $p = 3$ で表され、

ここで、

【0070】

【化17】



【0071】

一実施形態では、前記正孔注入層は、非発光性である。

【0072】

本発明の一実施形態では、前記正孔注入層、および/または、式(I)の前記正孔輸送化合物、および/または、式(II)の前記金属錯体は、非発光性である。

【0073】

本明細書との関連において、用語「本質的に非発光性」または「非発光性」は、有機電子デバイス(例えば、OLEDまたは表示デバイス)に由来する可視発光スペクトルに対する、前記正孔輸送化合物、金属錯体および/または層(例えば、正孔注入層)の寄与が、可視発光スペクトルに対して10%未満、好ましくは5%未満であることを意味する。可視発光スペクトルは、約380nm~約780nmの波長を有する発光スペクトルである。

【0074】

特に明記されていない限り、本出願および本特許請求の範囲の全体を通して、いずれの $Ar^1 \sim Ar^6$ なども、同じ部分を指すことに留意されたい。

【0075】

本明細書中にて、定義が別途規定されていない場合には、「置換された」は、H、重水

10

20

30

40

50

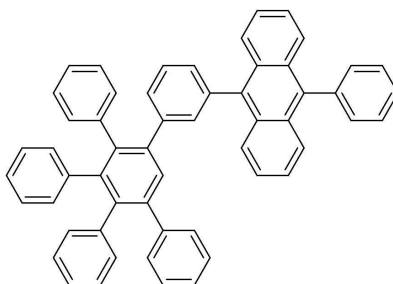
素、 $C_1 - C_{12}$ アルキル、非置換の $C_6 - C_{18}$ アリール、および非置換の $C_3 - C_{18}$ ヘテロアリールによって置換されたものを指す。

【0076】

本明細書中にて、定義が別途規定されていない場合には、少なくとも6個のC環原子を有するアリール基は、1個、2個、3個、4個または5個の置換基によって置換されてもよい。例えば、置換 C_6 アリール基は、1個、2個、3個、4個または5個のフェニル置換基を有してもよい。下記は、4個のフェニル基を有する置換 C_6 アリール基の例である：

【0077】

【化18】



10

【0078】

しかしながら、本明細書中にて、「アリール置換」は、1個以上のアリール基による置換を指す。アリール基自体は、1個以上のアリール基および/またはヘテロアリール基によって置換されてもよい。

20

【0079】

同様に、本明細書中にて、「ヘテロアリール置換」は、1個以上のヘテロアリール基による置換を指す。ヘテロアリール基自体は、1個以上のアリール基および/またはヘテロアリール基によって置換されてもよい。

【0080】

本明細書中にて、定義が別途規定されていない場合には、「アルキル基」は、飽和脂肪族ヒドロカルビル基を指す。アルキル基は、 $C_1 - C_{12}$ アルキル基であってもよい。より具体的には、アルキル基は、 $C_1 - C_{10}$ アルキル基または $C_1 - C_6$ アルキル基であってもよい。例えば、 $C_1 - C_4$ アルキル基は、アルキル鎖中に1個~4個の炭素を含み、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*sec*-ブチルおよび*tert*-ブチルより選択され得る。

30

【0081】

アルキル基の具体例として、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、*sec*-ブチル基、*tert*-ブチル基、ペンチル基、分枝ペンチル基、ヘキシル基などを挙げるができる。

【0082】

用語「シクロアルキル」は、対応するシクロアルカンに含まれる環原子から1個の水素原子を形式的に引き抜く(formal abstraction)ことによってシクロアルカンより誘導される、飽和ヒドロカルビル基を指す。シクロアルキル基の例として、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、メチルシクロヘキシル基、アダマンチル基などを挙げるができる。

40

【0083】

用語「ヘテロ」は、共有結合した炭素原子によって形成することができる構造中の少なくとも1個の炭素原子が、別の多価原子によって置換された状態であると理解されたい。好ましくは、ヘテロ原子は、B、Si、N、P、O、Sより選択され、より好ましくは、ヘテロ原子は、N、P、O、Sより選択される。

【0084】

電子対を共有する正孔輸送化合物であり得る正孔輸送化合物の好ましい例として、共有結合したC、H、O、N、Sから主に成る有機化合物が挙げられる。当該有機化合物は、

50

任意に、共有結合したB、PまたはSiも含んでもよい。一実施形態では、電子対を共有する化合物であり得る正孔輸送化合物は、金属原子を含まず、その骨格原子の大部分がC、O、S、Nより選択され得る。あるいは、電子対を共有する化合物は、金属原子を含まず、その骨格原子の大部分がCおよびNより選択され得る。

【0085】

本明細書中にて、「アリール基」および「芳香環」は、対応する芳香族炭化水素中の芳香環から1個の水素原子を形式的に引き抜くことによって生成することができる、ヒドロカルビル基を指す。芳香族炭化水素は、少なくとも1個の芳香環または芳香環系 (aromatic ring system) を含む、炭化水素を指す。芳香環または芳香環系は、共有結合した炭素原子の平面環または環系を指し、当該平面環または環系は、ヒュッケル則を満たす非局在化電子の共役系を含む。アリール基の例として、単環式基 (例えば、フェニルまたはトリル)、単結合によって連結された複数個の芳香環を含む多環式基 (例えば、ピフェニル)、および、縮合環を含む多環式基 (例えば、ナフチルまたはフルオレニル) が挙げられる。

10

【0086】

同様に、「ヘテロアリール」および「複素環式芳香族化合物」の下では、少なくとも1個の当該環を含む化合物中の複素環式芳香環から1個の環水素を形式的に引き抜くことによって誘導される基が、特に好適であると理解されたい。

【0087】

用語「非複素環」は、環の要素としてヘテロ原子を含まない、環または環系を意味すると理解されたい。

20

【0088】

用語「複素環」は、1個以上のヘテロ原子を含む少なくとも1個の環を含む複素環を意味すると理解されたい。1個より多い環を含む複素環は、全ての環がヘテロ原子を含むもの、または、少なくとも1個の環がヘテロ原子を含み、かつ、少なくとも1個の環がC原子のみを含んでヘテロ原子を含まないもの、を意味する。

【0089】

ヘテロシクロアルキル下では、少なくとも1個の当該環を含む化合物中の飽和シクロアルキル環から1個の環水素を形式的に引き抜くことによって誘導される基が、特に好適であると理解されたい。

【0090】

用語「縮合アリール環 (fused aryl rings)」または「縮合アリール環 (condensed aryl rings)」は、2個のアリール環が、少なくとも2個の共通sp²混成炭素原子を共有する場合に、縮合 (fused) または縮合 (condensed) していると考えられる状態であると理解されたい。

30

【0091】

用語「縮合環系」は、2個以上の環が少なくとも2個の原子を共有する環系を意味すると理解されたい。

【0092】

用語「5員環、6員環または7員環」は、5個、6個または7個の原子を含む環を意味すると理解されたい。当該原子は、Cおよび1個以上のヘテロ原子より選択され得る。

40

【0093】

本明細書中にて、単結合は直接結合を指す。

【0094】

本発明との関連において、「異なる (different)」は、化合物が同一の化学構造を有さないことを意味する。

【0095】

用語「含まない (free of)」、「含まない (does not contain)」、「含まない (does not comprise)」は、蒸着前の正孔輸送化合物に存在し得る不純物を除外するものではない。不純物は、本発明によって達成される目的に関して、技術的な影響を有さない。

【0096】

50

用語「～に隣接する」は、層間の距離が2 nm未満であり得るか、または、隣接して配置された層が互いに接触することを意味すると理解されたい。用語「間に挟まれて接触している」は、中間の層が2層の隣接する層と直接接触する、3層の配置を指す。

【0097】

用語「光吸収層(light-absorbing layer)」および「光吸収層(light absorption layer)」は、同義的に使用される。

【0098】

用語「発光層(light-emitting layer)」、「発光層(light emission layer)」および「発光層(emission layer)」は、同義的に使用される。

【0099】

用語「OLED」、「有機発光ダイオード」および「有機発光デバイス」は、同義的に使用される。

【0100】

用語「陽極」、「陽極層」および「陽極電極」は、同義的に使用される。

【0101】

用語「陰極」、「陰極層」および「陰極電極」は、同義的に使用される。

【0102】

用語「正孔注入層」は、陽極層から有機電子デバイス中のさらなる層への、または、有機電子デバイスのさらなる層から陽極への、電荷注入を改善する層を意味すると理解されたい。

【0103】

用語「正孔輸送層」は、正孔注入層と、正孔注入層および陰極層の間に配置されたさらなる層と、の間で正孔(hole)を輸送する層を意味すると理解されたい。

【0104】

動作電圧Uは、ボルトで測定される。

【0105】

本明細書中にて、正孔性能は、電場が印加された場合に電子を供与して正孔を形成する能力を指し、最高被占分子軌道(HOMO)準位に応じた導電性能によって、陽極に形成された正孔が発光層に注入され、発光層中を輸送され易いことを指す。

【0106】

さらに、電子性能は、電場が印加された場合に電子を受領する能力を指し、最低被占有分子軌道(LUMO)準位に応じた導電性能によって、陰極に形成された電子が発光層に注入され、発光層中を輸送され易いことを指す。

【0107】

〔有利な効果〕

驚くべきことに、本発明による有機電子デバイスは、有機電子デバイス(例えば、有機発光ダイオード)を、当該技術分野で公知の有機電子デバイスよりも優れた様々な態様にすることによって(特に、動作電圧に関して)、本発明の根底にある課題を解決することが見出された。

【0108】

さらに、大量生産に適した条件下で真空熱蒸発による蒸着に適した化合物を提供することによって、本発明の根底にある課題を解決できることが見出された。特に、本発明の正孔輸送化合物および金属錯体の速度開始温度(rate onset temperature)は、大量生産に適した範囲であり得る。

【0109】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、同じ条件下で測定した場合に、N4,N4'-ジ(ナフタレン-1-イル)-N4,N4'-ジフェニル-[1,1':4',1''':4''',1''''-クアテルフェニル]-4,4''',ミンのHOMO準位(本明細書中に記載の方法による計算で、-4.85 eV)よりも、真空準位からさらに離れている。

10

20

30

40

50

【0110】

好ましくは、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、 $N, N' - ((9H - \text{フルオレン} - 9, 9 - \text{ジイル}) \text{ピス}(4, 1 - \text{フェニレン})) \text{ピス}(N - ([1, 1' - \text{ビフェニル}] - 4 - \text{イル}) - [1, 1' - \text{ビフェニル}] - 4 - \text{アミン})$ のHOMO準位(本明細書中に記載の方法による計算で、 -4.86 eV)よりも、真空準位からさらに離れており;あるいは、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、 $9 - \text{フェニル} - 10 - (3', 4', 5' - \text{トリフェニル} - [1, 1': 2', 1'' - \text{テルフェニル}] - 3 - \text{イル})$ アントラセンのHOMO準位(本明細書中に記載の方法による計算で、 -5.04 eV)と同じ、または、当該HOMO準位よりも真空準位からさらに離れており;あるいは、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、 $\text{トリス}(4 - (9H - \text{カルバゾール} - 9 - \text{イル}) \text{フェニル}) \text{アミン}$ のHOMO準位(本明細書中に記載の方法による計算で、 -5.09 eV)と同じか、または、当該HOMO準位よりも真空準位からさらに離れている。

【0111】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、 $N4, N4'' - \text{ジ}(ナフタレン - 1 - \text{イル}) - N4, N4'' - \text{ジフェニル} - [1, 1': 4', 1'': 4'' - \text{クアテルフェニル}] - 4, 4'' - \text{ジアミン}$ のHOMO準位よりも、真空準位からさらに離れており、同じ条件下で測定した場合には、 $4, 4', 4'' - (1, 3, 5 - \text{ベンゼントリイル}) \text{トリス}[ジベンゾチオフェン]$ のHOMO準位と同じか、または、当該HOMO準位よりも真空準位により近く;好ましくは、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、 $N, N' - ((9H - \text{フルオレン} - 9, 9 - \text{ジイル}) \text{ピス}(4, 1 - \text{フェニレン})) \text{ピス}(N - ([1, 1' - \text{ビフェニル}] - 4 - \text{イル}) - [1, 1' - \text{ビフェニル}] - 4 - \text{アミン})$ のHOMO準位よりも、真空準位からさらに離れており、 $4, 4', 4'' - (1, 3, 5 - \text{ベンゼントリイル}) \text{トリス}[ジベンゾチオフェン]$ のHOMO準位と同じか、または、当該HOMO準位よりも真空準位により近く;あるいは、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、 $9 - \text{フェニル} - 10 - (3', 4', 5' - \text{トリフェニル} - [1, 1': 2', 1'' - \text{テルフェニル}] - 3 - \text{イル})$ アントラセンのHOMO準位と同じか、または、当該HOMO準位よりも真空準位からさらに遠く離れており、 $4, 4', 4'' - (1, 3, 5 - \text{ベンゼントリイル}) \text{トリス}[ジベンゾチオフェン]$ のHOMO準位と同じか、または、当該HOMO準位よりも真空準位により近く;あるいは、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、 $\text{トリス}(4 - (9H - \text{カルバゾール} - 9 - \text{イル}) \text{フェニル}) \text{アミン}$ のHOMO準位よりも、真空準位からさらに遠く離れており、 $4, 4', 4'' - (1, 3, 5 - \text{ベンゼントリイル}) \text{トリス}[ジベンゾチオフェン]$ (本明細書中に記載の方法による計算で、 -5.67 eV)と同じか、または、当該HOMO準位よりも真空準位により近い。

【0112】

用語「真空準位により近いHOMO準位」は、HOMO準位の絶対値が参照化合物のHOMO準位の絶対値よりも低いことを意味すると理解されたい。例えば、用語「 $4, 4', 4'' - (1, 3, 5 - \text{ベンゼントリイル}) \text{トリス}[ジベンゾチオフェン]$ のHOMO準位よりも真空準位に近い」は、有機マトリックス化合物(OMC)のHOMO準位の絶対値が、 $4, 4', 4'' - (1, 3, 5 - \text{ベンゼントリイル}) \text{トリス}[ジベンゾチオフェン]$ のHOMO準位よりも低いことを意味すると理解されたい。

【0113】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、同じ条件下で測定した場合は、 $N4, N4'' - \text{ジ}(ナフタレン - 1 - \text{イル}) - N4, N4'' - \text{ジフェニル} - [1, 1': 4', 1'': 4'', 1''': 4'''] - \text{クアテルフェニル}] - 4, 4'' - \text{ジアミン}$ のHOMO準位よりも、真空準位からさらに離れており;ここで、 $N4, N4'' - \text{ジ}(ナフタレン - 1 - \text{イル}) - N4, N4'' - \text{ジフェニル} - [1, 1': 4', 1'': 4'', 1''': 4'''] - \text{クアテルフェニル}] - 4, 4'' - \text{ジアミン}$ のHOMO準位は、 -4.85 eV であり;好ましくは、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、同じ条

件下で測定した場合は、N, N' - ((9 H - フルオレン - 9 , 9 - ジイル) ビス (4 , 1 - フェニレン)) ビス (N - ([1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - イル) - [1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - アミン) の H O M O 準位よりも、真空準位からさらに離れており；ここで、N, N' - ((9 H - フルオレン - 9 , 9 - ジイル) ビス (4 , 1 - フェニレン)) ビス (N - ([1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - イル) - [1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - アミン) の H O M O 準位は、- 4 . 8 6 e V であり；あるいは、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物の H O M O 準位は、9 - フェニル - 1 0 - (3 ' , 4 ' , 5 ' - トリフェニル - [1 , 1 ' : 2 ' , 1 ' ' - テルフェニル] - 3 - イル) アントラセンの H O M O 準位と同じか、または、当該 H O M O 準位よりも真空準位からさらに離れており、ここで 9 - フェニル - 1 0 - (3 ' , 4 ' , 5 ' - トリフェニル - [1 , 1 ' : 2 ' , 1 ' ' - テルフェニル] 403 - イル) アントラセンの H O M O 準位は、- 5 . 0 4 e V であり；あるいは、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物の H O M O 順位は、トリス (4 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) アミンの H O M O 準位と同じか、または、当該 H O M O 準位よりも真空準位からさらに離れており、ここでトリス (4 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) アミンの H O M O 準位は、- 5 . 0 9 e V である。

【 0 1 1 4 】

好適に使用することができる正孔輸送化合物は、(例えば、有機電子デバイスの正孔注入層中のマトリックス材料として)式 (I) を有してもよい：

【 0 1 1 5 】

【 化 1 9 】



20

【 0 1 1 6 】

式中、

k、m、q、r は、互いに独立して、0、1または2より選択され得、

p は、1、2または3であり、

2 k + m + q + r + p = 11 であり、

Ar¹ ~ Ar⁶ は、独立して、置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、置換もしくは非置換の C₆ - C₃₀ アリール、置換もしくは非置換の C₃ - C₃₀ ヘテロアリール、置換もしくは非置換のフルオレン、または、2個 ~ 6個の置換もしくは非置換の 5 ~ 7 員環を含む縮合環系であって、当該環は、(i) 不飽和 5 ~ 7 員環複素環、(i i) 5 ~ 6 員芳香族複素環、(i i i) 不飽和 5 ~ 7 員環非複素環、(i v) 6 員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、から選択され；

30

ここで、前記置換基は、H、D、C₁ - C₁₂ アルキル、非置換の C₆ - C₁₈ アリール、非置換の C₃ - C₁₈ ヘテロアリール、2個 ~ 6個の非置換の 5 ~ 7 員環を含む縮合環系であって、当該環は、不飽和 5 ~ 7 員環複素環、5 ~ 6 員芳香族複素環、不飽和 5 ~ 7 員環非複素環、および 6 員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、の群から選択される。

【 0 1 1 7 】

一実施形態では、Ar¹ ~ Ar⁶ は、独立して、置換もしくは非置換のビフェニレン、置換もしくは非置換のフルオレン、置換もしくは非置換のナフタレン、置換もしくは非置換のアントラセン、置換もしくは非置換のフェナントレン、置換もしくは非置換のピレン、置換もしくは非置換のペリレン、置換もしくは非置換のトリフェニレン、置換もしくは非置換のテトラセン、置換もしくは非置換のテトラフェン、置換もしくは非置換のジベンゾフラン、置換もしくは非置換のジベンゾチオフェン、置換もしくは非置換のキサテン、置換もしくは非置換のカルバゾール、置換もしくは非置換のアゼピン、置換もしくは非置換のジベンゾ [b , f] アゼピン、9 , 9 ' - スピロビ [フルオレン]、置換もしくは非置換のスピロ [フルオレン - 9 , 9 ' - キサンテン]、置換もしくは非置換の 9 , 1 4 - ジヒドロジベンゾ [2 , 3 : 6 , 7] アゼピノ [4 , 5 - b] インドール、または、置換もしくは非置換の芳香族縮合環系であって、置換もしくは非置換の非ヘテロ 5 員環、置換も

40

50

しくは非置換のヘテロ5員環、置換もしくは非置換の6員環、および/または、置換もしくは非置換の7員環を含む群より選択される少なくとも3個の置換もしくは非置換の芳香環を含む、芳香族縮合環系、より選択され得、

ここで、前記置換基は、H、D、C₁-C₁₂アルキル、非置換のC₆-C₁₈アリール、非置換のC₃-C₁₈ヘテロアリール、2個~6個の非置換の5~7員環を含む縮合環系であって、当該環は、不飽和5~7員環複素環、5~6員芳香族複素環、不飽和5~7員環非複素環、および6員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、の群から選択される。

【0118】

一実施形態では、式(I)の正孔輸送化合物は、400g/molおよび2000g/molの分子量Mw、好ましくは450g/molおよび1500g/molの分子量Mw、より好ましくは500g/molおよび1000g/molの分子量Mw、さらに好ましくは550g/molおよび900g/molの分子量Mw、特に好ましくは600g/molおよび800g/molの分子量Mwを有し得る。

10

【0119】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、-4.85eV未満、好ましくは-4.86eV未満、好ましくは-4.9eV未満、あるいは-4.95eV未満、あるいは-5eV未満、あるいは-5.05eV未満、あるいは-5.09eV未満であり得る。

【0120】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、-4.85eV未満および-7eV超、好ましくは-4.86eV未満および-7eV超、より好ましくは-4.9eV未満および-7eV超、あるいは-4.95eV未満および-7eV超、あるいは-5eV未満および-7eV超、あるいは-5.05eV未満および-7eV超、あるいは-5.09eV未満および-7eV超であり得る。

20

【0121】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、-4.85eV未満および-6.5eV超、好ましくは-4.86eV未満および-6.5eV超、より好ましくは-4.9eV未満および-6.5eV超、あるいは-4.95eV未満および-6.5eV超、あるいは-5eV未満および-6.5eV超、あるいは-5.05eV未満および-6.5eV超、あるいは-5.09eV未満および-6.5eV超であり得る。

30

【0122】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物のHOMO準位は、-4.85eV未満および-6eV超、好ましくは-4.86eV未満および-6.5eV超、より好ましくは-4.9eV未満および-6eV超、あるいは-4.95eV未満および-6eV超、あるいは-5eV未満および-6eV超、あるいは-5.05eV未満および-6eV超、あるいは-5.09eV未満および-6eV超であり得る。

【0123】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物は、複素環式芳香環を含む少なくとも1個~6個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系を含み得る。

40

【0124】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物は、複素環式芳香環を含む少なくとも1個~6個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、および、少なくとも1個~3個の置換もしくは非置換の不飽和5~7員環複素環、好ましくは、複素環式芳香環を含む2個~5個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、を含み得る。

【0125】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物は、複素環式芳香環を含む少なくとも1個~6個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、および、少なくとも1個~3個の置換もしくは非置換の不飽和5~7員環複素環、好ましくは、複

50

素環式芳香環を含む 2 個 ~ 5 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、および、少なくとも 1 個 ~ 3 個の置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、さらに好ましくは、複素環式芳香環を含む 3 個または 4 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、および、任意の少なくとも 1 個 ~ 3 個の置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、を含み得、特に好ましくは、前記複素環式芳香環を含む芳香族縮合環系は、非置換であり、かつ、任意で少なくとも 1 個 ~ 3 個の非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、を含み得る。

【0126】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、少なくとも 1 個 ~ 6 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、好ましくは 2 個 ~ 5 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、さらに好ましくは 3 個または 4 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、を含み得る。

10

【0127】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、少なくとも 1 個 ~ 6 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、好ましくは 2 個 ~ 5 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、さらに好ましくは 3 個または 4 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系を含み得、置換もしくは非置換の複素環式芳香環を含む。

【0128】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、少なくとも 1 個 ~ 3 個または 2 個の置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環を含み得る。

20

【0129】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、少なくとも 1 個 ~ 3 個または 2 個の置換もしくは非置換の不飽和 7 員環複素環を含み得る。

【0130】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系は、少なくとも 1 個 ~ 3 個または 2 個の置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環を含み得る。

【0131】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系は、少なくとも 1 個 ~ 3 個または 2 個の置換もしくは非置換の不飽和 7 員環複素環を含み得る。

30

【0132】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、少なくとも 1 個 ~ 6 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、好ましくは 2 個 ~ 5 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、さらに好ましくは 3 個または 4 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系を含み得、ここで、当該芳香族縮合環系は、置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環を含む。

【0133】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、少なくとも 1 個 ~ 6 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、好ましくは 2 個 ~ 5 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、さらに好ましくは 3 個または 4 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系を含み得、置換もしくは非置換の複素環式芳香環を含み、ここで、当該芳香族縮合環系は、置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環を含む。

40

【0134】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、少なくとも 1 個 ~ 6 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、好ましくは 2 個 ~ 5 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、さらに好ましくは 3 個または 4 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系を含み得、ここで、当該芳香族縮合環系は、少なくとも 1 個 ~ 3 個または 2 個の置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環を含む。

【0135】

50

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(Ⅰ)の正孔輸送化合物は、少なくとも 1 個 ~ 6 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、好ましくは 2 個 ~ 5 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、さらに好ましくは 3 個または 4 個の置換もしくは非置換の芳香族縮合環系を含み得、置換もしくは非置換の複素環式芳香環を含み、ここで、当該芳香族縮合環系は、少なくとも 1 個 ~ 3 個または 2 個の置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環を含む。

【0136】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(Ⅰ)の正孔輸送化合物は、下記を含み得る：

- 置換もしくは非置換の非複素環式芳香環、置換もしくは非置換のヘテロ 5 員環、置換もしくは非置換の 6 員環、および/または、置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環を含む群より選択される、少なくとも 2 個 ~ 6 個、好ましくは 3 個 ~ 5 個、もしくは 4 個の縮合芳香環を有する、置換もしくは非置換の芳香族縮合環系、または、

10

- 非置換の非複素環式芳香環、非置換のヘテロ 5 員環、非置換の 6 員環、および/または、非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環を含む群より選択される、少なくとも 2 個 ~ 6 個、好ましくは 3 個 ~ 5 個または 4 個の縮合芳香環を有する、非置換の芳香族縮合環系。

【0137】

ここで、用語「芳香族縮合環系」は、少なくとも 1 個の芳香環、および、少なくとも 1 個の置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環を含み得ることに留意されたい。ここで、置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環は、芳香環でなくてもよいことに留意されたい。

20

【0138】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(Ⅰ)の正孔輸送化合物は、少なくとも、少なくとも 1 個 ~ 6 個、好ましくは 2 個 ~ 5 個、さらに好ましくは 3 個もしくは 4 個の、下記を有する置換もしくは非置換の芳香族縮合環系を含み得る：

- 少なくとも 1 個の不飽和 5 員環、および/または、
 - 少なくとも 1 個の不飽和 6 員環、および/または、
 - 少なくとも 1 個の不飽和 7 員環；ここで、好ましくは少なくとも 1 個の不飽和 5 員環、および/または、少なくとも 1 個の不飽和 7 員環は、少なくとも 1 個 ~ 3 個、好ましくは 1 個のヘテロ原子を含む。

【0139】

30

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(Ⅰ)の正孔輸送化合物は、少なくとも 1 個 ~ 6 個、好ましくは 2 個 ~ 5 個、さらに好ましくは 3 個もしくは 4 個の、下記を有する置換もしくは非置換の芳香族縮合環系を含み得る：

- 少なくとも 1 個の芳香族 5 員環、および/または、
 - 少なくとも 1 個の芳香族 6 員環、および/または、
 - 少なくとも 1 個の芳香族 7 員環；ここで、好ましくは少なくとも 1 個の不飽和 5 員環、および/または、少なくとも 1 個の芳香族 7 員環は、少なくとも 1 個 ~ 3 個、好ましくは 1 個のヘテロ原子を含み；

ここで、置換もしくは非置換の芳香族縮合環系は、少なくとも 1 個 ~ 3 個、もしくは 2 個の置換もしくは非置換の不飽和 5 ~ 7 員環複素環を含む。

40

【0140】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(Ⅰ)の正孔輸送化合物は、下記を含み得る：

- 少なくとも 6 個 ~ 12 個、好ましくは 7 個 ~ 11 個、さらに好ましくは 8 個 ~ 10 個もしくは 9 個の芳香環；および/または、

- 少なくとも 4 個 ~ 11 個、好ましくは 5 個 ~ 10 個、さらに好ましくは 6 個 ~ 9 個、特に好ましくは 7 個もしくは 8 個の非複素環式芳香環、好ましくは当該非複素環式芳香環が芳香族 C₆ 環であり；および/または、

- 少なくとも 1 個 ~ 4 個、好ましくは 2 個もしくは 3 個の芳香族 5 員環、好ましくは複素環式芳香族 5 員環；および/または、

- 少なくとも 1 個もしくは 2 個の不飽和 5 ~ 7 員環複素環、好ましくは少なくとも 1 個

50

もしくは2個の不飽和7員環複素環；

- 少なくとも6個～12個、好ましくは7個～11個、さらに好ましくは8個～10個もしくは9個の芳香環であり、ここで、

少なくとも4個～11個、好ましくは5個～10個、さらに好ましくは6個～9個、特に好ましくは7個もしくは8個は、非複素環式芳香環であり、ならびに、

少なくとも1個～4個、好ましくは2個もしくは3個の芳香環は、複素環式芳香環であり、ここで、非複素環式芳香環および複素環式芳香環の総数は、12個の芳香環を超えず；および/または、

- 少なくとも6個～12個、好ましくは7個～11個、さらに好ましくは8個～10個もしくは9個の芳香環、ここで、

少なくとも4個～11個、好ましくは5個～10個、さらに好ましくは6個～9個、特に好ましくは7個もしくは8個は、非複素環式芳香環であり、および、

少なくとも1個～4個、好ましくは2個または3個の芳香環は、複素環式芳香環であり、ここで、非複素環式芳香環および複素環式芳香環の総数は、12個の芳香環を超えず；ならびに、

正孔輸送化合物または式Iの正孔輸送化合物は、少なくとも1個～4個、好ましくは2個もしくは3個の芳香族5員環、好ましくは複素環式芳香族5員環を含み、および/または、

正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物は、少なくとも1個もしくは2個の不飽和5～7員環複素環、好ましくは少なくとも1個もしくは2個の不飽和7員環複素環を含む。

【0141】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物は、ヘテロ原子を含み得、当該ヘテロ原子は、O、S、N、BまたはPを含む群より選択され得、好ましくは、当該ヘテロ原子は、O、SまたはNを含む群より選択され得る。

【0142】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物は、少なくとも、少なくとも1個～6個、好ましくは2個～5個、さらに好ましくは3個もしくは4個の、下記を有する置換もしくは非置換の芳香族縮合環系を含み得る：

- 少なくとも1個の芳香族5員環、および/または、

- 少なくとも1個の芳香族6員環、および/または、

- 少なくとも1個の芳香族7員環；ここで、好ましくは、少なくとも1個の芳香族5員環、および/または、少なくとも1個の芳香族7員環は、少なくとも1個～3個、好ましくは1個のヘテロ原子を含み；

ここで、置換もしくは非置換の芳香族縮合環系は、任意に、少なくとも1個～3個もしくは2個の置換もしくは非置換の不飽和5～7員環複素環を含み；ここで、前記置換もしくは非置換の芳香族縮合環系は、ヘテロ原子を含み、当該ヘテロ原子は、O、S、N、B、PまたはSiを含む群より選択され得、好ましくは、当該ヘテロ原子は、O、SまたはNを含む群より選択され得る。

【0143】

一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物は、芳香環の一部ではないヘテロ原子、および/または、不飽和7員環の一部ではないヘテロ原子を含まなくてもよく、好ましくは、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物は、芳香環の一部であるN原子または不飽和7員環の一部であるN原子を除いて、N原子を含まなくてもよい。

【0144】

一実施形態では、正孔輸送化合物は、2個のカルバゾール基、少なくとも1個のジベンゾフラン基、少なくとも1個のジベンゾチオフエン基、および/または、少なくとも1個のアントラセン基、を含む。

【0145】

10

20

30

40

50

一実施形態では、正孔輸送化合物は、2個のカルバゾール基、1個～3個のジベンゾフラン基、1個～3個のジベンゾチオフェン基、および/または、1個～2個のアントラセン基、を含む。

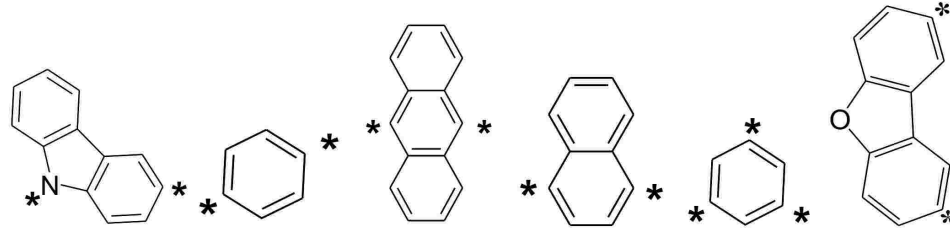
【0146】

一実施形態では、式(I)の正孔輸送化合物について：

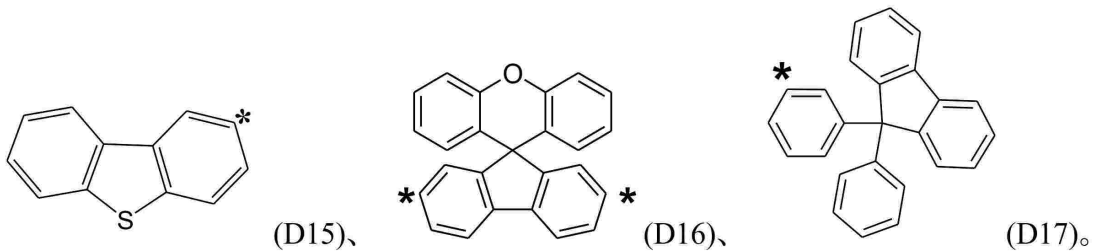
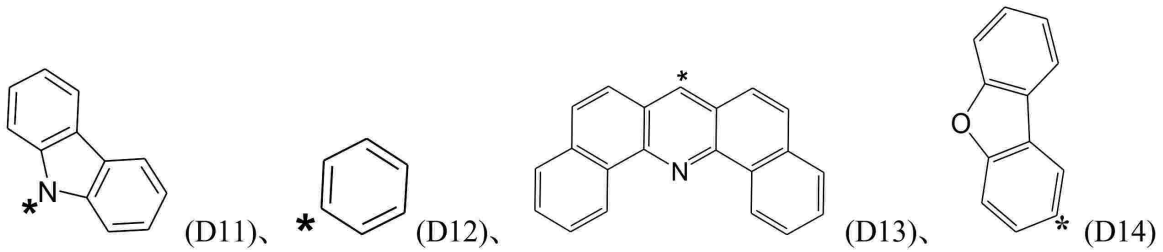
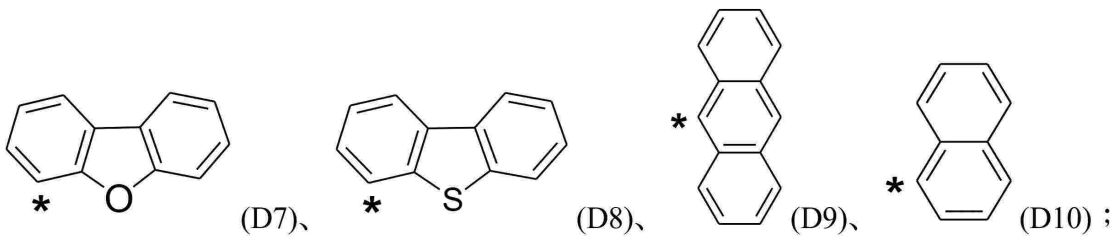
Ar^3 は、D1～D17、好ましくはD1～D6およびD16より選択され得る：

【0147】

【化20】



(D1)、 (D2)、 (D3)、 (D4)、 (D5)、 (D6)；



【0148】

一実施形態では、 Ar^1 は、D7～D15およびD17より選択され得る。 Ar^2 は、D1～D6、D7～D15およびD17より選択され得る。 Ar^4 は、D1～D6、D7～D15およびD17より選択され得る。 Ar^5 は、D1～D6、D7～D15およびD17より選択され得る。 Ar^6 は、D7～D15およびD17より選択され得る。

【0149】

一実施形態では、式(I)の正孔輸送化合物について：

Ar^3 は、D1～D17、好ましくはD1～D6およびD16より選択され得る：

【0150】

10

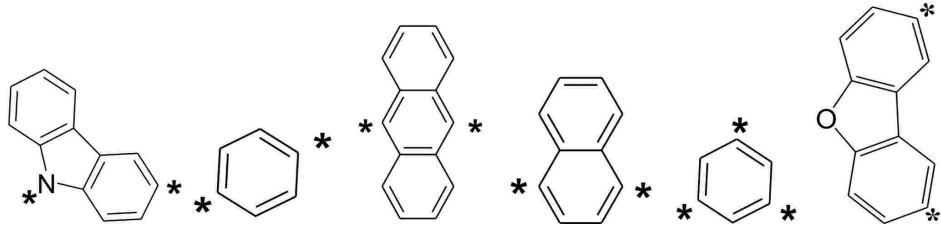
20

30

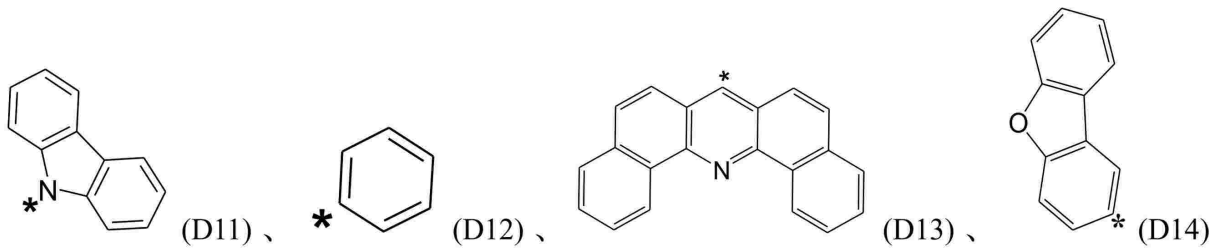
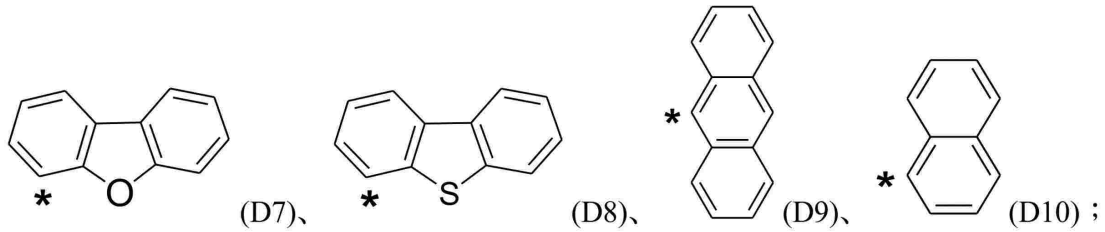
40

50

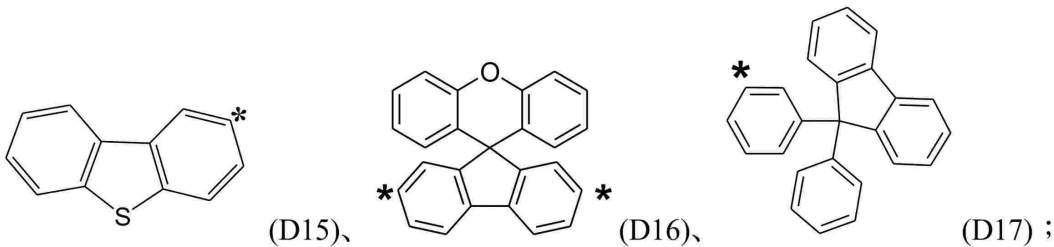
【化 2 1】



10



20



30

【0151】

Ar^1 は、 $m > 0$ および $k > 0$ である場合は、D7 ~ D15 および D17 より選択され、 $k > 0$ および $m = 0$ である場合は、D7 ~ D15 および D17 より選択され、 $k > 1$ である場合は、D1 ~ D6 より選択され；

Ar^2 は、 $m > 0$ および $k > 0$ である場合は、D1 ~ D6 より選択され；または、 $m > 0$ および $k = 0$ である場合は、D7 ~ D15 および D17 より選択され；

Ar^4 は、 $q > 0$ である場合は、D1 ~ D6 より選択され、 $q = 0$ および $r > 0$ である場合は、D1 ~ D6 より選択され； $q = 0$ および $r = 0$ である場合は、D7 ~ D15 および D17 より選択され；

40

Ar^5 は、 $q > 0$ および $r > 0$ である場合は、D1 ~ D6 より選択され、 $q > 0$ および $r = 0$ である場合は、D7 ~ D15 および D17 より選択され；

Ar^6 は、 $r > 0$ 、 $q > 0$ である場合は、D7 ~ D15 および D17 より選択され、 $r > 0$ 、 $q = 0$ である場合は、D7 ~ D15 および D17 より選択され、 $r > 1$ である場合は、D1 ~ D6 より選択される。

【0152】

一実施形態では、式(I)において、 Ar^3 基は、アントラセン、カルバゾール、ジベンゾチオフェン、および/または、ジベンゾフランより選択される。

【0153】

一実施形態では、式(I)において、 Ar^3 基は、アントラセンが選択される。

50

【0154】

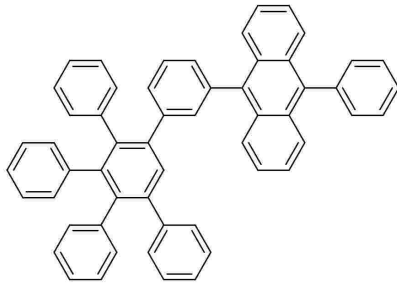
一実施形態では、式(I)において、 Ar^3 基は、カルバゾール、ジベンゾチオフェン、および/または、ジベンゾフランより選択される。

【0155】

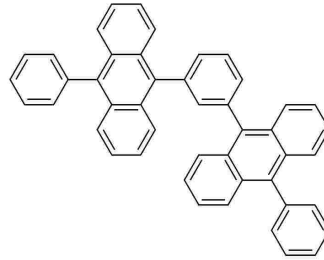
一実施形態では、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物は、F1～F13より選択され得る：

【0156】

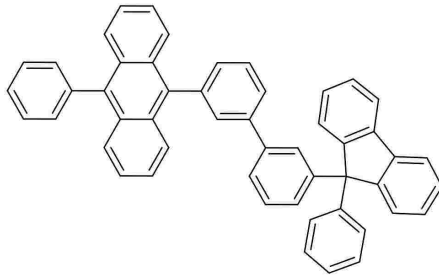
【化22】



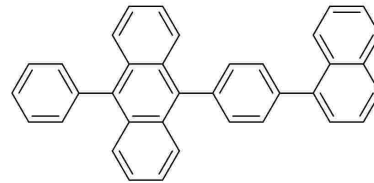
(F1)、



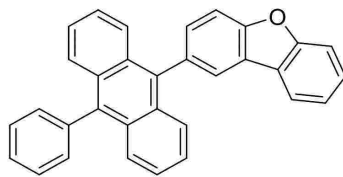
(F2)、



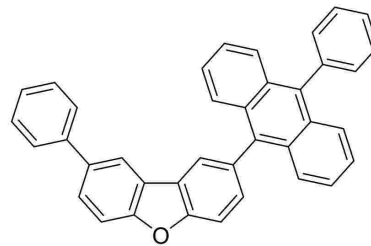
(F3)、



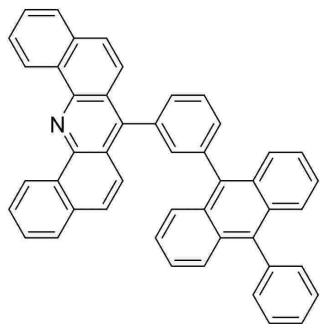
(F4)、



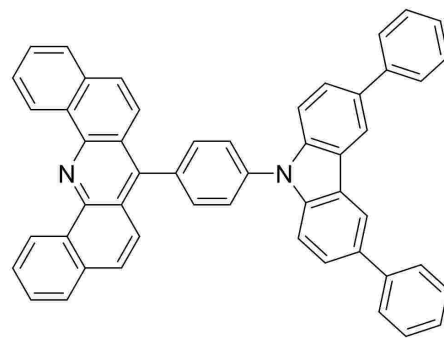
(F5)、



(F6)、



(F7)、



(F8)、

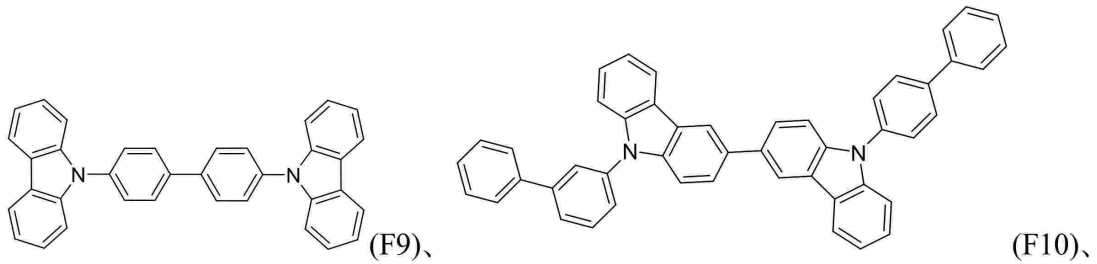
10

20

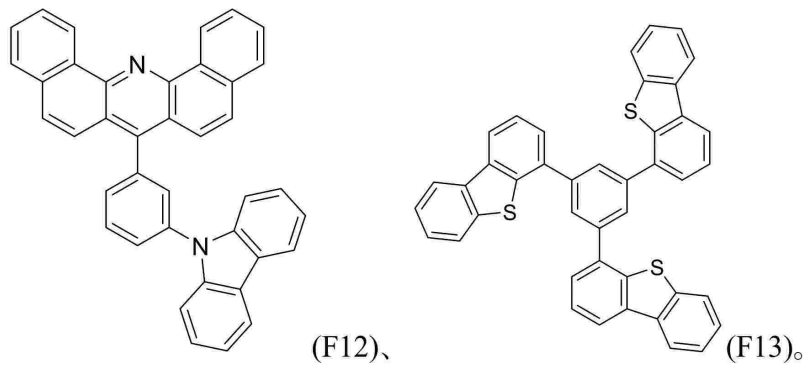
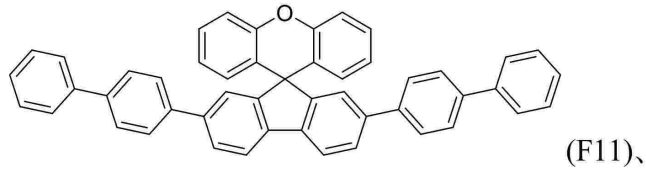
30

40

50



10



20

【 0 1 5 7 】

好ましくは、正孔輸送化合物は、金属および/またはイオン結合を含まない。

【 0 1 5 8 】

正孔注入層および/または正孔輸送化合物は、HTM014、HTM081、HTM163、HTM222、EL-301、HTM226、HTM355、HTM133、HTM334、HTM604およびEL-22Tを含まなくてもよい。略語は、製造業者の名称（例えば、Merck or Lumtec）を示す。

30

【 0 1 5 9 】

正孔注入層および/または正孔輸送化合物は、N, N' - ビス(ナフタレン - 1 - イル) - N, N' - ビス(フェニル) - 9, 9 - ジメチル - フルオレン, N, N' - ビス(3 - メチルフェニル) - N, N' - ビス(フェニル) - 9, 9 - ジメチル - フルオレン, N, N' - ビス(ナフタレン - 1 - イル) - N, N' - ビス(フェニル) - 9, 9 - ジメチルフルオレン, N, N' - ビス(ナフタレン - 1 - イル) - N, N' - ビス(フェニル) - 2, 2 - ジメチルベンジジン, N, N' - ビス(3 - メチルフェニル) - N, N' - ビス(フェニル) - 9, 9 - スピロピフルオレン, 2, 2', 7, 7' - テトラキス(N, N - ジフェニルアミノ) - 9, 9' - スピロピフルオレン, N, N' - ビス(ナフタレン - 1 - イル) - N, N' - ビス(フェニル) - ベンジジン, N, N' - ビス(ナフタレン - 2 - イル) - N, N' - ビス(フェニル) - ベンジジン, N, N' - ビス(3 - メチルフェニル) - N, N' - ビス(フェニル) - ベンジジン, N, N' - ビス(3 - メチルフェニル) - N, N' - ビス(フェニル) - 9, 9 - ジメチル - フルオレン, N, N' - ビス(ナフタレン - 1 - イル) - N, N' - ビス(フェニル) - 9, 9 - スピロピフルオレン, ジ - [4 - (N, N - ジトリル - アミノ) - フェニル] - シクロヘキサン, 2, 2', 7, 7' - テトラ(N, N - ジトリル)アミノ - スピロ - ビフルオレン, 9, 9 - ビス[4 - (N, N - ビス - ビフェニル - 4 - イル - アミノ)フェニル] - 9H - フルオレン, 2, 2', 7, 7' - テトラキス(N, N - ナフタレニル(フェニル) - アミノ] - 9, 9' - スピロピフルオレン, 2,

40

50

7 - ビス (N , N - ビス (9 , 9 - スピロ - ビフルオレン - 2 - イル) - アミノ] - 9 , 9 ' - スピロビフルオレン、 2 , 2 ' - ビス (N , N - ビス (ビフェニル - 4 - イル) アミノ] - 9 , 9 ' - スピロビフルオレン、 N , N ' - ビス (フェナントレン - 9 - イル) - N , N ' - ビス (フェニル) - ベンジジン、 N , N , N ' , N ' - テトラ - ナフタレン - 2 - イル) - ベンジジン、 2 , 2 ' - ビス (N , N - ジ - フェニル - アミノ) - 9 , 9 - スピロビフルオレン、 9 , 9 - ビス [4 - (N , N - ビス - ナフタレン - 2 - イル - アミノ) フェニル] - 9 H - フルオレン、 9 , 9 - ビス [4 - (N , N ' - ビス - ナフタレン - 2 - イル - N , N ' - ビス - フェニル - アミノ) - フェニル] - 9 H - フルオレン、酸化チタンフタロシアニン、銅フタロシアニン、 2 , 3 , 5 , 6 テトラフルオロ 7 , 7 , 8 , 8、テトラシアノ - キノジメタン、 4 , 4 ' 4 ' ' - トリス (N - 3 - メチルフェニル - N - フェニル - アミノ) トリフェニルアミン、 4 , 4 ' 4 ' ' - トリス (N - (2 - ナフチル) - N - フェニル - アミノ) トリフェニルアミン、 4 , 4 ' , 4 ' ' - トリス (N - (1 - ナフチル) - N - フェニル - アミノ) トリフェニルアミン、 4 , 4 ' , 4 ' ' - トリス (N , N - ジフェニル - アミノ) トリフェニルアミン、ピラジノ [2 , 3 - f] [1 , 1 0] フェナントロリン - 2 , 3 - ジカルボニトリル、 N , N , N ' , N ' - テトラキス (4 - メトキシフェニル) ベンジジン、 HTM 0 1 4、 HTM 0 8 1、 HTM 1 6 3、 HTM 2 2 2、 EL - 3 0 1、 HTM 2 2 6、 HTM 3 5 5、 HTM 1 3 3、 HTM 3 3 4、 HTM 6 0 4、および、 EL - 2 2 T、を含まなくてもよい。略語は、製造業者の名称 (例えば、Merck or Lumtec) を示す。

【 0 1 6 0 】

式 (I I) の金属錯体

式 (I I) の金属錯体は、非発光性である。本明細書との関連において、用語「本質的に非発光性」または「非発光性」は、有機電子デバイス (例えば、OLED または表示デバイス) に由来する可視発光スペクトルに対する式 (I I) の金属錯体の寄与が、可視発光スペクトルに対して 1 0 % 未満、好ましくは 5 % 未満であることを意味する。可視発光スペクトルは、約 3 8 0 n m ~ 約 7 8 0 n m の波長を有する発光スペクトルである。

【 0 1 6 1 】

一実施形態では、式 (I I) の金属イオン M は、金属イオンより選択され得、ここで、対応する金属は、 2 . 4 未満のアレンの電気陰性度を有し、好ましくは、M は、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属または遷移金属より選択され得、さらに好ましくは、M は、原子質量 2 4 D a の金属より選択され得、特に好ましくは、M は、原子質量 2 4 D a の金属より選択され、かつ、M は酸化数 2 であり得る。

【 0 1 6 2 】

用語「アレンの電気陰性度」は、特に、Allen、Leland C (1 9 8 9) を指す。「電気陰性度とは、基底状態の自由原子における価電子殻電子の平均 1 電子エネルギーである。」 (Journal of American Chemical Society 1 1 1 (2 5) : 9 0 0 3 - 9 0 1 4 参照)

本発明の一実施形態では、M の原子価 n は、 1 または 2 である。

【 0 1 6 3 】

本発明の一実施形態では、M は、対応する金属が 2 . 4 未満、好ましくは 2 未満、より好ましくは 1 . 9 未満のアレンの電気陰性度を有する金属イオンより選択され得、M の原子価 n は、 1 または 2 である。

【 0 1 6 4 】

本発明の一実施形態では、M は、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属または遷移金属より選択され、あるいは、M は、アルカリ金属、アルカリ土類金属、遷移金属または第 4 周期の典型金属 (main group metal) または第 5 周期の典型金属より選択される。

【 0 1 6 5 】

本発明の一実施形態では、M は、Li、Na、K、Cs、Mg、Mn、Cu、Zn、Ag、Bi および Mo より選択され；好ましくは、M は、Na、K、Cs、Mg、Mn、Cu、Zn および Ag より選択され；さらに好ましくは、M は、Na、K、Mg、Mn、C

u、ZnおよびAgより選択される。ここで、MがCuの場合は、nは2である。

【0166】

本発明の一実施形態では、Mは、Liではない。

【0167】

本発明の一実施形態では、Mは、LiまたはKではない。

【0168】

本発明の一実施形態では、Mは、Agではない。

【0169】

本発明の一実施形態では、Mは、Cuではない。

【0170】

本発明の一実施形態では、Mは、Moではない。

【0171】

本発明の一実施形態では、Mは、Irおよび/またはPtではない。

【0172】

別の一実施形態では、式(II)の金属錯体は、 287 g/mol および 2000 g/mol の分子量Mw、好ましくは 400 g/mol および 1500 g/mol の分子量Mw、さらに好ましくは 580 g/mol および 1500 g/mol の分子量Mw、特に好ましくは 580 g/mol および 1400 g/mol の分子量Mwを有し得る。

【0173】

別の一実施形態では、式(II)の金属錯体は、 400 g/mol および 2000 g/mol の分子量Mw、好ましくは 400 g/mol および 1500 g/mol の分子量Mw、さらに好ましくは 580 g/mol および 1500 g/mol の分子量Mw、特に好ましくは 580 g/mol および 1400 g/mol の分子量Mwを有し得る。

【0174】

別の一実施形態では、Lとも称される式(II)のリガンドLは、下記を含む群より選択され得る：

- 少なくとも3個の炭素原子、または、少なくとも4個の炭素原子、および/または、
- 少なくとも2個の酸素原子もしくは1個の酸素原子および1個の窒素原子、2個~4個の酸素原子、2個~4個の酸素原子および0個~2個の窒素原子、および/または、
- ハロゲン、F、CN、置換もしくは非置換の $C_1 - C_6$ アルキル、置換もしくは非置換の $C_1 - C_6$ アルコキシより選択される少なくとも1個以上の基、あるいは、ハロゲン、F、CN、置換もしくは非置換の $C_1 - C_6$ アルキル、置換もしくは非置換の $C_1 - C_6$ アルコキシより選択される2個以上の基、ハロゲン、F、CN、置換の $C_1 - C_6$ アルキル、置換の $C_1 - C_6$ アルコキシより選択される少なくとも1個以上の基、あるいは、ハロゲン、F、CN、全フッ素化 $C_1 - C_6$ アルキル、全フッ素化 $C_1 - C_6$ アルコキシより選択される2個以上の基、置換もしくは非置換の $C_1 - C_6$ アルキル、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{12}$ アリーール、および/または、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{12}$ ヘテロアリーールより選択される1個以上の基、

ここで、前記置換基は、D、 C_6 アリーール、 $C_3 - C_9$ ヘテロアリーール、 $C_1 - C_6$ アルキル、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 $C_3 - C_6$ 分枝アルキル、 $C_3 - C_6$ 環状アルキル、 $C_3 - C_6$ 分枝アルコキシ、 $C_3 - C_6$ 環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化 $C_1 - C_{16}$ アルキル、部分的もしくは全フッ素化 $C_1 - C_{16}$ アルコキシ、部分的もしくは全重水素化 $C_1 - C_6$ アルキル、部分的もしくは全重水素化 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 COR^6 、 $COOR^6$ 、ハロゲン、FまたはCNより選択され；

ここで、 R^6 は、 C_6 アリーール、 $C_3 - C_9$ ヘテロアリーール、 $C_1 - C_6$ アルキル、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 $C_3 - C_6$ 分枝アルキル、 $C_3 - C_6$ 環状アルキル、 $C_3 - C_6$ 分枝アルコキシ、 $C_3 - C_6$ 環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化 $C_1 - C_{16}$ アルキル、部分的もしくは全フッ素化 $C_1 - C_{16}$ アルコキシ、部分的もしくは全重水素化 $C_1 -$

10

20

30

40

50

C₆アルキル、部分的もしくは全重水素化C₁-C₆アルコキシより選択され得る。

【0175】

別の一実施形態では、式(II)のリガンドLは、少なくとも2個の炭素原子、あるいは少なくとも3個の炭素原子、少なくとも1個の酸素原子、少なくとも2個の酸素原子、少なくとも1個の酸素原子および/または窒素原子、1個の窒素原子および少なくとも2個の酸素原子、少なくとも2個の炭素原子および少なくとも1個の酸素原子、少なくとも2個の炭素原子および2個の酸素原子または1個の酸素原子および1個の窒素原子；ハロゲン、F、CN、置換もしくは非置換のC₁-C₆アルキル、置換もしくは非置換のC₁-C₆アルコキシより選択される少なくとも1個以上の基；あるいは、ハロゲン、F、CN、置換もしくは非置換のC₁-C₆アルキル、置換もしくは非置換のC₁-C₆アルコキシより選択される2個以上の基；ハロゲン、F、CN、置換のC₁-C₆アルキル、置換のC₁-C₆アルコキシより選択される少なくとも1個以上の基；あるいは、ハロゲン、F、CN、全フッ素化C₁-C₆アルキル、全フッ素化C₁-C₆アルコキシより選択される2個以上の基；置換もしくは非置換のC₁-C₆アルキル、置換もしくは非置換のC₆-C₁₂アリールおよび/または置換もしくは非置換のC₃-C₁₂ヘテロアリールより選択される1個以上の基、を含む群より選択され得、

10

ここで、前記置換基は、D、C₆アリール、C₃-C₉ヘテロアリール、C₁-C₆アルキル、C₁-C₆アルコキシ、C₃-C₆分枝アルキル、C₃-C₆環状アルキル、C₃-C₆分枝アルコキシ、C₃-C₆環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルキル、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルコキシ、部分的もしくは全重水素化C₁-C₆アルキル、部分的もしくは全重水素化C₁-C₆アルコキシ、COR⁶、COOR⁶、ハロゲン、FまたはCNより選択され；

20

ここで、R⁶は、C₆アリール、C₃-C₉ヘテロアリール、C₁-C₆アルキル、C₁-C₆アルコキシ、C₃-C₆分枝アルキル、C₃-C₆環状アルキル、C₃-C₆分枝アルコキシ、C₃-C₆環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルキル、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルコキシ、部分的もしくは全重水素化C₁-C₆アルキル、部分的もしくは全重水素化C₁-C₆アルコキシより選択され得る。

【0176】

別の一実施形態では、式(II)のリガンドLは、F、CN、全フッ素化C₁-C₆アルキル、置換もしくは非置換のC₁-C₆アルキル、置換もしくは非置換のC₁-C₆アルコキシを含む群より選択され得る。

30

【0177】

前記置換基は、D、C₆アリール、C₃-C₉ヘテロアリール、C₁-C₆アルキル、C₁-C₆アルコキシ、C₃-C₆分枝アルキル、C₃-C₆環状アルキル、C₃-C₆分枝アルコキシ、C₃-C₆環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルキル、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルコキシ、部分的もしくは全重水素化C₁-C₆アルキル、部分的もしくは全重水素化C₁-C₆アルコキシ、COR⁶、COOR⁶、ハロゲン、FまたはCNより選択され得；

ここで、R⁶は、C₆アリール、C₃-C₉ヘテロアリール、C₁-C₆アルキル、C₁-C₆アルコキシ、C₃-C₆分枝アルキル、C₃-C₆環状アルキル、C₃-C₆分枝アルコキシ、C₃-C₆環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルキル、部分的もしくは全フッ素化C₁-C₁₆アルコキシ、部分的もしくは全重水素化C₁-C₆アルキル、部分的もしくは全重水素化C₁-C₆アルコキシより選択され得る。

40

【0178】

別の一実施形態では、リガンドLは、硫黄原子を含まない。

【0179】

別の一実施形態では、リガンドLは、硫黄原子またはフタロシアニン基を含まない。

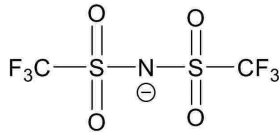
【0180】

別の一実施形態では、式(II)のリガンドLは、独立して、G₁~G₆₄、好ましくはG₁~G₆₂より選択され得る；

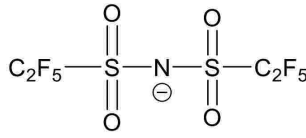
50

【 0 1 8 1 】

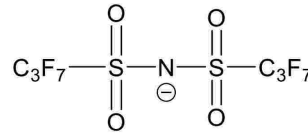
【 化 2 3 】



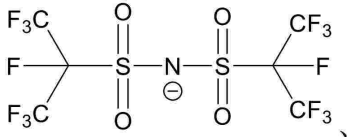
(G1)



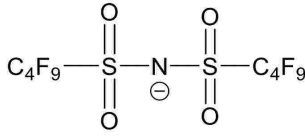
(G2)



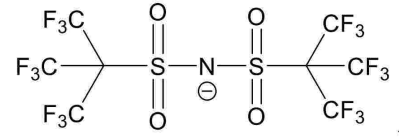
(G3)



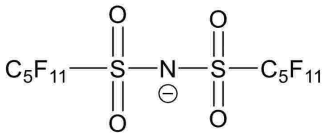
(G4)



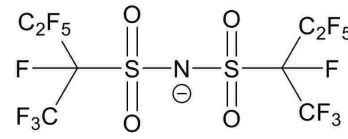
(G5)



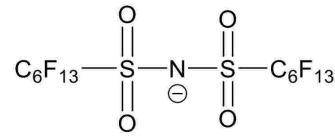
(G6)



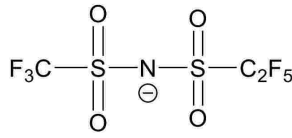
(G7)



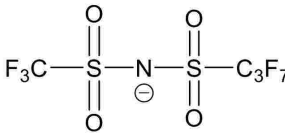
(G8)



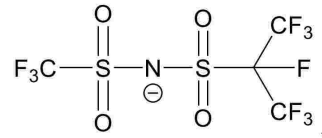
(G9)



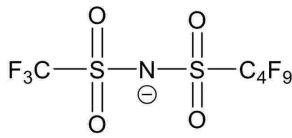
(G10)



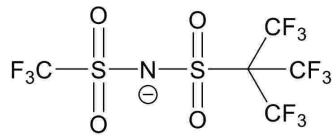
(G11)



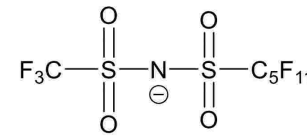
(G12)



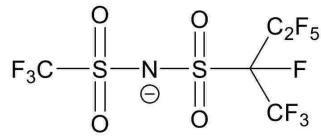
(G13)



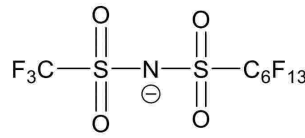
(G14)



(G15)



(G16)



(G17)

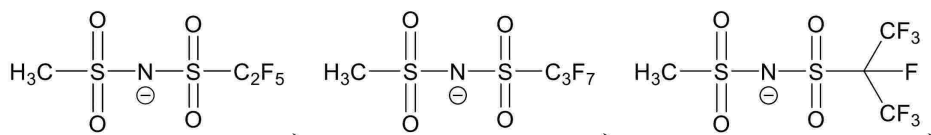
10

20

30

40

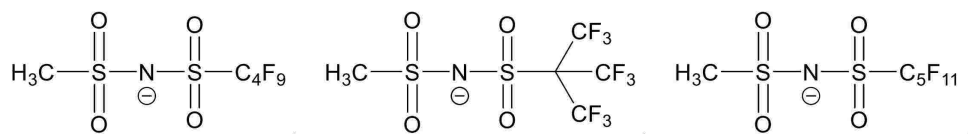
50



(G18)

(G19)

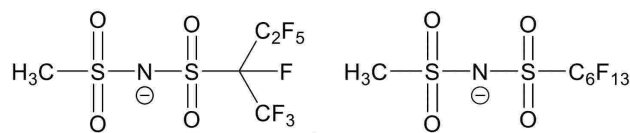
(G20)



(G21)

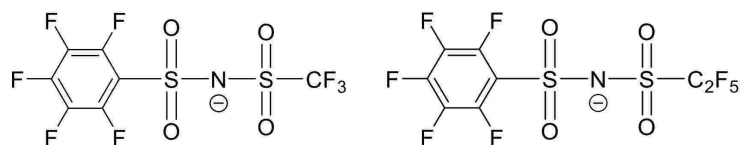
(G22)

(G23)



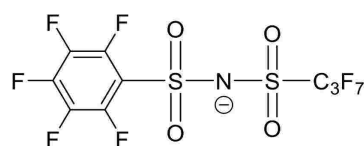
(G24)

(G25)

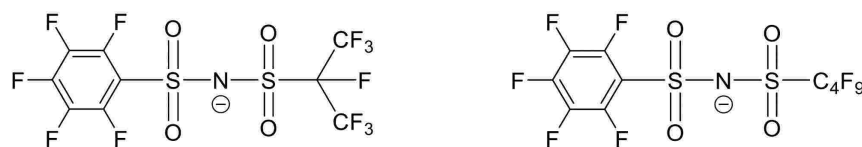


(G26)

(G27)



(G28)



(G29)

(G30)

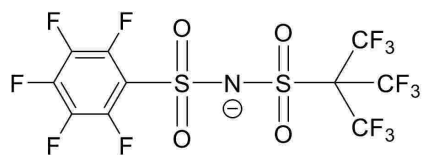
10

20

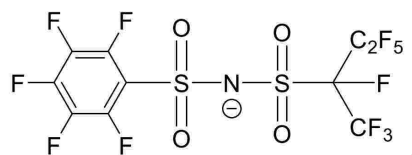
30

40

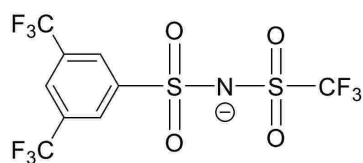
50



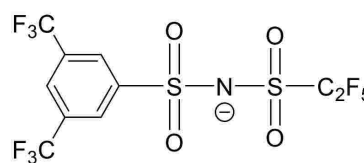
(G31)



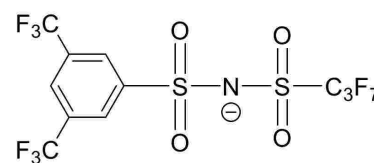
(G32)



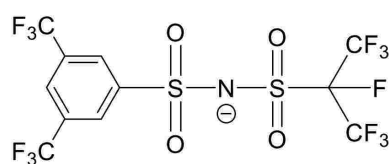
(G33)



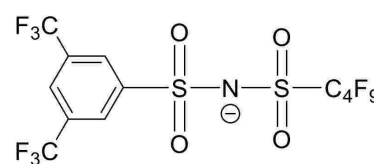
(G34)



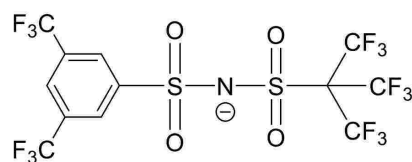
(G35)



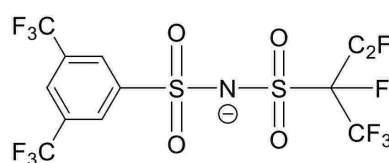
(G36)



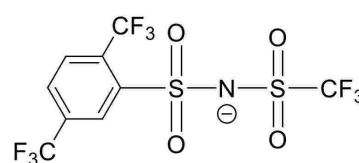
(G37)



(G38)



(G39)



(G40)

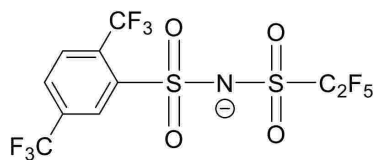
10

20

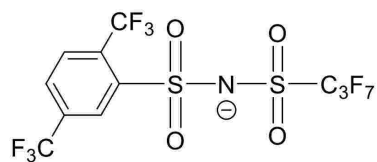
30

40

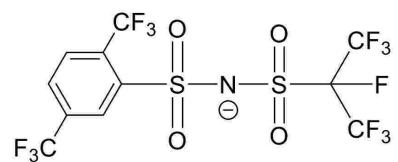
50



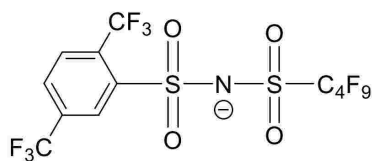
(G41)



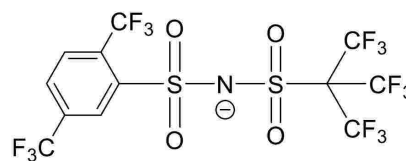
(G42)



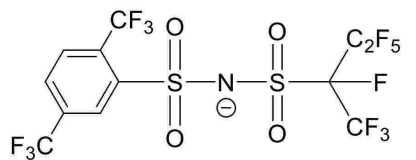
(G43)



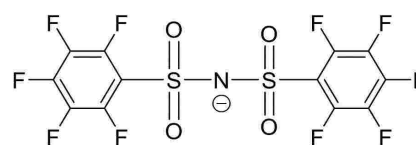
(G44)



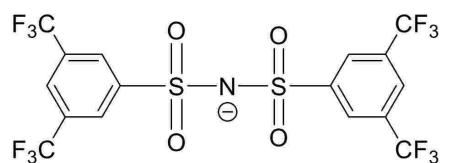
(G45)



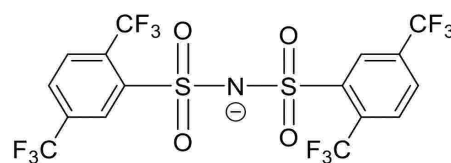
(G46)



(G47)



(G48)



(G49)

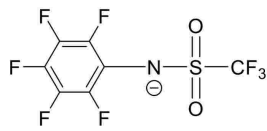
10

20

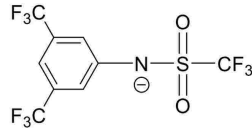
30

40

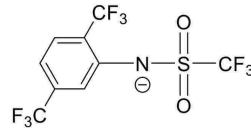
50



(G50)

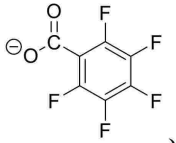


(G51)

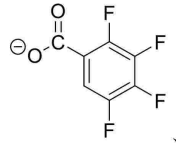


(G52)

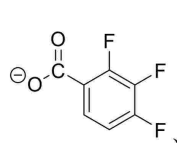
10



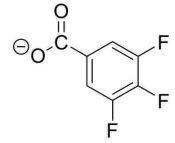
(G53)



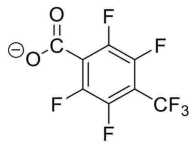
(G54)



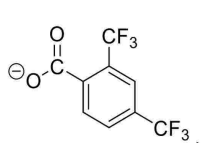
(G55)



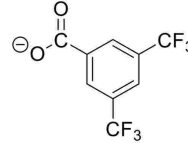
(G56)



(G57)

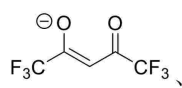


(G58)

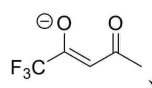


(G59)

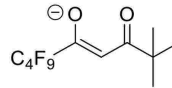
20



(G60)

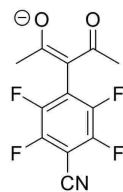


(G61)

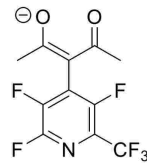


(G62)

30



(G63)



(G64)

40

【 0 1 8 2 】

好ましくは、Lは、(G2) ~ (G59)より選択され、あるいは、Lは、(G2) ~ (G52)より選択される。

【 0 1 8 3 】

別の一実施形態では、Lは、(G1) ~ (G52)および(G60) ~ (G64)より選択される。

【 0 1 8 4 】

別の一実施形態では、Lは、(G1) ~ (G52)および(G60) ~ (G62)より選択される。

50

【 0 1 8 5 】

式 (I I) の金属錯体中の負電荷は、リガンド L 上に、部分的にまたは完全に非局在化され得る。

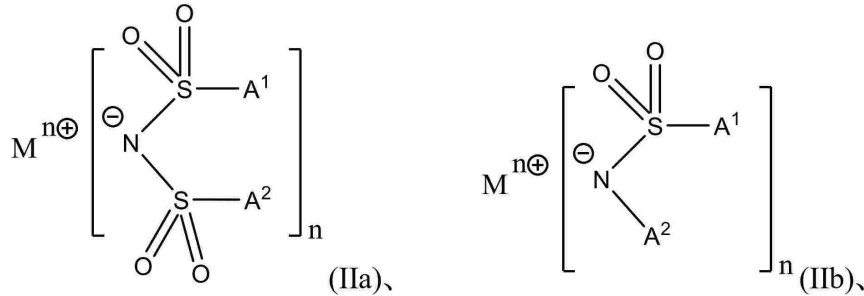
【 0 1 8 6 】

式 (I I a) ~ (I I e) の金属錯体

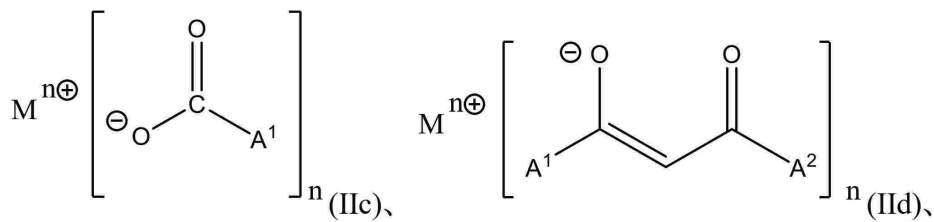
一実施形態では、金属錯体は、下記式 (I I a) ~ (I I e) より選択され得、式 (I I a) ~ (I I d) が好ましい：

【 0 1 8 7 】

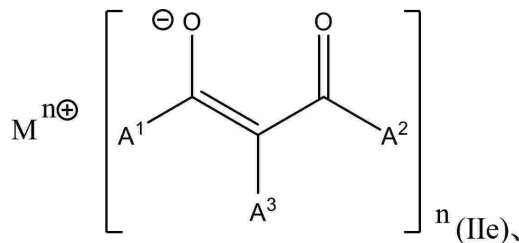
【 化 2 4 】



10



20



30

【 0 1 8 8 】

ここで、

M は、金属イオンであり；

n は、M の原子価であり；

A¹ および A² は、独立して、置換もしくは非置換の C₁ - C₁₂ アルキル、置換もしくは非置換の C₆ - C₁₂ アリール、置換もしくは非置換の C₃ - C₁₂ ヘテロアリールより選択され得；

A³ は、H、D、置換もしくは非置換の C₁ - C₁₂ アルキル、置換もしくは非置換の C₆ - C₁₂ アリール、置換もしくは非置換の C₃ - C₁₂ ヘテロアリールより選択され；

ここで、A¹ および A² および / または A³ の置換基は、独立して、D、C₆ アリール、C₃ - C₉ ヘテロアリール、C₁ - C₆ アルキル、C₁ - C₆ アルコキシ、C₃ - C₆ 分枝アルキル、C₃ - C₆ 環状アルキル、C₃ - C₆ 分枝アルコキシ、C₃ - C₆ 環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化 C₁ - C₁₆ アルキル、部分的もしくは全フッ素化 C₁ - C₁₆ アルコキシ、部分的もしくは全重水素化 C₁ - C₆ アルキル、部分的もしくは全重水素化 C₁ - C₆ アルコキシ、COR¹、COOR¹、ハロゲン、F または CN より選択され得、

40

R¹ は、C₆ アリール、C₃ - C₉ ヘテロアリール、C₁ - C₆ アルキル、C₁ - C₆ アルコキシ、C₃ - C₆ 分枝アルキル、C₃ - C₆ 環状アルキル、C₃ - C₆ 分枝アルコキシ、C₃ - C₆ 環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化 C₁ - C₁₆ アルキル、部分的もしくは全フッ素化 C₁ - C₁₆ アルコキシ、部分的もしくは全重水素化 C₁ - C₆ アルキ

50

ル、部分的もしくは全重水素化 $C_1 - C_{16}$ アルコキシより選択され得る。

【0189】

式 (I I a)、式 (I I b)、式 (I I c) および / または式 (I I d) の金属錯体中の負電荷は、炭素原子およびヘテロ原子ならびに A^1 および / または A^2 および / または A^3 上に、部分的にまたは完全に非局在化され得る。

【0190】

一実施形態では、 A^1 および A^2 および / または A^3 の少なくとも1つは、置換基を含み、 A^1 および A^2 および / または A^3 の置換基の少なくとも1つは、独立して、 $C_3 - C_9$ ヘテロアリール、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 $C_3 - C_6$ 分枝アルコキシ、 $C_3 - C_6$ 環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化 $C_1 - C_{16}$ アルキル、部分的もしくは全フッ素化 $C_1 - C_{16}$ アルコキシ、部分的もしくは全重水素化 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 COR^1 、 $COOR^1$ 、ハロゲン、F または CN より選択され得；好ましくは、 A^1 および A^2 および / または A^3 の少なくとも1個は、少なくとも2個の置換基を含み、

ここで、 A^1 および A^2 および / または A^3 の置換基は、独立して、 $C_3 - C_9$ ヘテロアリール、 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 $C_3 - C_6$ 分枝アルコキシ、 $C_3 - C_6$ 環状アルコキシ、部分的もしくは全フッ素化 $C_1 - C_{16}$ アルキル、部分的もしくは全フッ素化 $C_1 - C_{16}$ アルコキシ、部分的もしくは全重水素化 $C_1 - C_6$ アルコキシ、 COR^1 、 $COOR^1$ 、ハロゲン、F または CN より選択され得；さらに好ましくは、 A^1 および A^2 および / または A^3 は、独立して、ハロゲン、F、 CF_3 、 C_2F_5 、 C_3F_7 、 C_4F_9 、 OCF_3 、 OC_2F_5 または CN より選択される少なくとも1個の置換基を含み得；特に好ましくは、 A^1 および A^2 は、独立して、ハロゲン、F、 CF_3 、 C_2F_5 、 C_3F_7 、 C_4F_9 、 OCF_3 、 OC_2F_5 または CN より選択される少なくとも2個の置換基を含み得る。

【0191】

本発明の一実施形態では、 A^1 および A^2 および / または A^3 は、独立して、 CF_3 、 C_2F_5 、 C_3F_7 、 C_4F_9 、 C_5F_{11} 、 C_6F_{13} 、および / または、F もしくは CF_3 より独立して選択される2個～5個の基によって置換されたフェニル；あるいは、 C_2F_5 、 C_3F_7 、 C_4F_9 、 C_5F_{11} 、 C_6F_{13} 、および / または、F もしくは CF_3 より独立して選択される2個～5個の基によって置換されたフェニル；あるいは、 CF_3 、 C_2F_5 、 C_3F_7 、 C_4F_9 、 C_5F_{11} 、 C_6F_{13} 、または、0個～2個の CF_3 基および / または0個～5個のF原子によって置換されたフェニル、より選択され得る。

【0192】

本発明の一実施形態では、金属錯体は、下記より選択されてもよい；

- 式 (I I a)、式中、Mは、アルカリ金属、アルカリ土類金属、遷移金属または希土類金属より選択され；および / または、

- 式 (I I b)、式中、Mは、アルカリ金属、アルカリ土類金属、遷移金属または希土類金属より選択され；および / または、

- 式 (I I c)、式中、Mは、アルカリ金属、アルカリ土類金属または典型金属 (main group metal) より選択される。

【0193】

本発明の一実施形態では、金属錯体は、下記より選択されてもよい；

- 式 (I I a)、式中、Mは、アルカリ金属、アルカリ土類金属、遷移金属または希土類金属より選択され；および / または、

- 式 (I I b)、式中、Mは、アルカリ金属、アルカリ土類金属、遷移金属または希土類金属より選択され；および / または、

- 式 (I I d)、式中、Mは、アルカリ金属、アルカリ土類金属、遷移金属または希土類金属より選択され；および / または、

- 式 (I I e)、式中、Mは、アルカリ金属、アルカリ土類金属、遷移金属または希土類金属より選択される。

【0194】

本発明の一実施形態では、金属錯体は、式 (I I a) または式 (I I b) より選択され

得、

ここで、Mは、金属イオンより選択され、対応する金属は、2・4未満のアレンの電気陰性度を有し、好ましくは、Mは、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属または遷移金属より選択され、さらに好ましくは、Mは、原子質量 24 Daの金属より選択され、特に好ましくは、Mは、原子質量 24 Daの金属より選択され、かつ、Mは、酸化数 2を有し；および/または、式 (I I c)、式中、Mは B i から選択される。

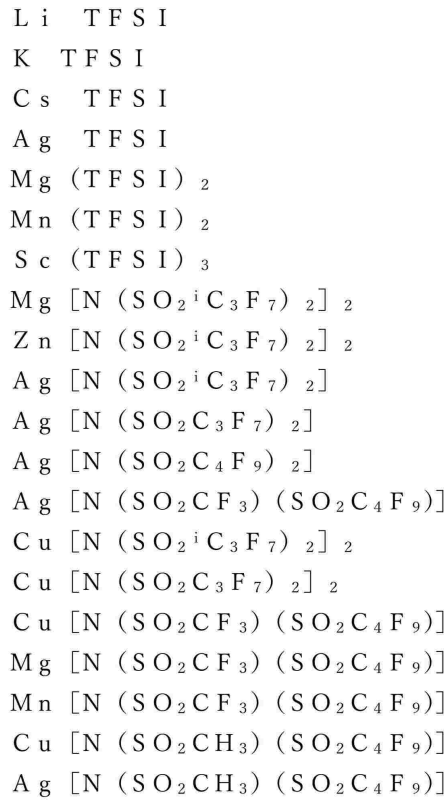
【 0 1 9 5 】

下記式の金属錯体が特に好ましい：

【 0 1 9 6 】

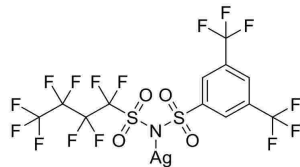
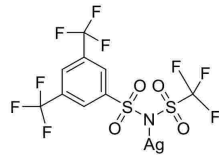
【 化 2 5 】

10

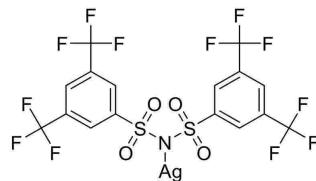


20

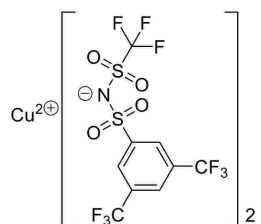
30



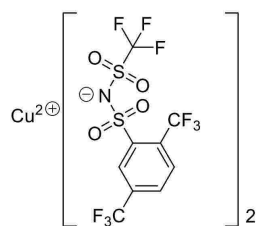
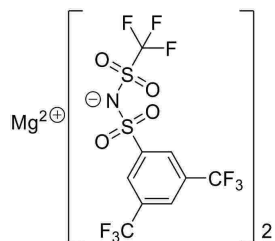
40



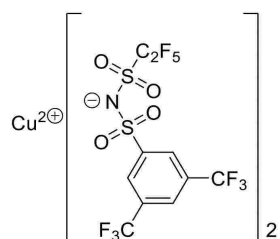
50



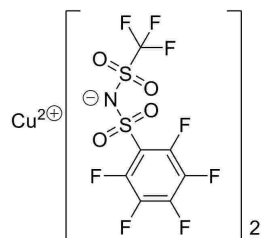
10



20

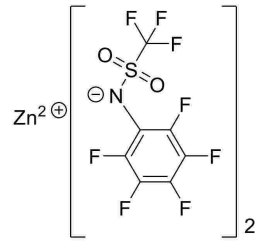


30

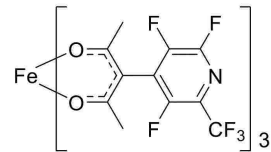
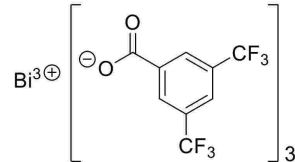


40

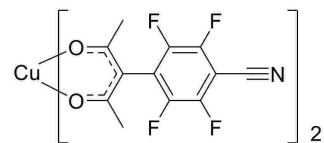
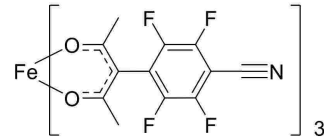
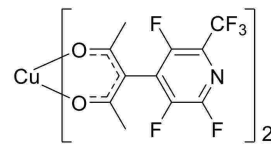
50



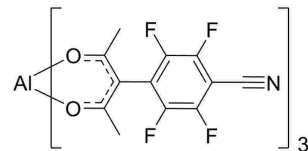
10



20



30



40

【0197】

一実施形態では、金属錯体は、ビス(トリフルオロメタン)スルホンイミド(TFSI)を含まなくてもよい。これにより、金属錯体は、有機電子デバイスの大量生産に特に適し得る。

【0198】

正孔注入層

別の一実施形態では、正孔注入層は、正孔輸送化合物および金属錯体を含み得る：

- ここで、前記正孔輸送化合物は、式(I)を有する：

【0199】

50

【化 2 6】



【 0 2 0 0】

式中、

k、m、q、r は、互いに独立して、0、1または2より選択され得、

p は、1、2または3であり、

ここで、 $2 \leq k + m + q + r + p \leq 11$ であり、

$Ar^1 \sim Ar^6$ は、独立して、置換もしくは非置換の不飽和5～7員環複素環、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{30}$ アリアル、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{30}$ ヘテロアリアル、置換もしくは非置換のフルオレン、または、2個～6個の置換もしくは非置換の5～7員環を含む縮合環系であって、当該環は、(i)不飽和5～7員環複素環、(ii)5～6員芳香族複素環、(iii)不飽和5～7員環非複素環、(iv)6員環芳香族非複素環を含む群より選択される縮合環系、より選択され得；

10

k = 1である場合の Ar^2 、 Ar^3 、q = 1である場合の Ar^4 、r = 1である場合の Ar^5 は、独立して、置換もしくは非置換の不飽和5～7員環複素環、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{30}$ アリーレン、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{30}$ ヘテロアリーレン、置換もしくは非置換のピフェニレン、置換もしくは非置換のフルオレン、置換もしくは非置換のナフタレン、置換もしくは非置換のアントラセン、置換もしくは非置換のフェナントレン、置換もしくは非置換のピレン、置換もしくは非置換のペリレン、置換もしくは非置換のトリフェニレン、置換もしくは非置換のテトラセン、置換もしくは非置換のテトラフェン、置換もしくは非置換のジベンゾフラン、置換もしくは非置換のジベンゾチオフェン、置換もしくは非置換のキサnten、置換もしくは非置換のカルバゾール、置換もしくは非置換のアゼピン、置換もしくは非置換のジベンゾ[b, f]アゼピン、9, 9'-スピロビ[フルオレン]、置換もしくは非置換のスピロ[フルオレン-9, 9'-キサnten]、置換もしくは非置換の9, 14-ジヒドロジベンゾ[2, 3:6, 7]アゼピノ[4, 5-b]インドール、または、置換もしくは非置換の芳香族縮合環系であって、置換もしくは非置換の非ヘテロ5員環、置換もしくは非置換のヘテロ5員環、置換もしくは非置換の6員環、および/または、置換もしくは非置換の7員環を含む群より選択される少なくとも3個、好ましくは3個～6個の置換もしくは非置換の芳香環を含む、芳香族縮合環系、より選択され得；

20

30

k = 0である場合の Ar^2 、m = 0およびk = 0である場合の Ar^3 、q = 0およびr = 0である場合の Ar^4 、r = 0である場合の Ar^5 は、独立して、置換もしくは非置換の不飽和5～7員環複素環、置換もしくは非置換の $C_6 - C_{30}$ アリアル、置換もしくは非置換の $C_3 - C_{30}$ ヘテロアリアル、置換もしくは非置換のピフェニル、置換もしくは非置換のフルオレニル、置換もしくは非置換のナフタレニル、置換もしくは非置換のアントラセニル、置換もしくは非置換のフェナントレニル、置換もしくは非置換のピレニル、置換もしくは非置換のペリレニル、置換もしくは非置換のトリフェニレニル、置換もしくは非置換のテトラセニル、置換もしくは非置換のテトラフェニル、置換もしくは非置換のジベンゾフラニル、置換もしくは非置換のジベンゾチオフェニル、置換もしくは非置換のキサntenニル、置換もしくは非置換のカルバゾール、置換もしくは非置換のアゼピン、置換もしくは非置換のジベンゾ[b, f]アゼピン、9, 9'-スピロビ[フルオレニル]、置換もしくは非置換のスピロ[フルオレニル-9, 9'-キサnten]、置換もしくは非置換の9, 14-ジヒドロジベンゾ[2, 3:6, 7]アゼピノ[4, 5-b]インドール、または、置換もしくは非置換の芳香族縮合環系であって、置換もしくは非置換の非ヘテロ5員環、置換もしくは非置換のヘテロ5員環、置換もしくは非置換の6員環、および/または、置換もしくは非置換の7員環を含む群より選択される少なくとも3個、好ましくは3個～6個の置換もしくは非置換の芳香環を含む、芳香族縮合環系、より選択され得；

40

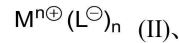
ここで、前記置換基は、H、D、 $C_1 - C_{12}$ アルキル、非置換の $C_6 - C_{18}$ アリアル、または、非置換の $C_3 - C_{18}$ ヘテロアリアル群より選択され；

50

- 金属錯体は、式 (I I) を有する :

【 0 2 0 1 】

【 化 2 7 】



【 0 2 0 2 】

ここで、

M は、金属イオンであり、

n は、M の原子価であり、n は、1 ~ 4 の整数であり、

L は、少なくとも 2 個の炭素原子を含むリガンドである。

10

【 0 2 0 3 】

好ましくは、正孔注入層は、イオン性液体、金属フタロシアニン、CuPc、HAT-CN、ピラジノ [2 , 3 - f] [1 , 1 0] フェナントロリン - 2 , 3 - ジカルボニトリル、F₄T CNQ、金属フッ素化物および / または金属酸化物を含まず、前記金属酸化物中の金属は、Re および / または Mo より選択される。これにより、大量生産に適した条件下で正孔注入層を蒸着させることができる。

【 0 2 0 4 】

有機電子デバイス

一実施形態では、正孔注入層は、陽極層と直接接触して配置される。

【 0 2 0 5 】

一実施形態では、有機電子デバイスは、少なくとも 1 個の光活性層をさらに含んでもよく、当該光活性層は、正孔注入層と、陰極層と、の間に配置される。

20

【 0 2 0 6 】

一実施形態では、有機電子デバイスは、少なくとも 1 個の光活性層をさらに含んでもよく、当該光活性層は、正孔注入層と、陰極層と、の間に配置され、前記正孔注入層は、陽極層と直接接触して配置される。

【 0 2 0 7 】

一実施形態では、有機電子デバイスは、少なくとも 1 個の光活性層を含んでもよく、当該光活性層は、発光層であってもよい。

【 0 2 0 8 】

一実施形態では、有機電子デバイスは、正孔注入層を含んでもよく、ここで、当該正孔注入層は、式 (I I) の金属錯体を含む第 1 の副層と、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物を含む第 2 の副層とを含み、前記第 1 の副層は、陽極層のより近くに配置され得、前記第 2 の副層は、陰極層のより近くに配置され得る。

30

【 0 2 0 9 】

一実施形態では、有機電子デバイスは、式 (I I) の金属錯体からなる第 1 の副層と、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物を含む第 2 の副層と、を含む正孔注入層を含み、前記第 1 の副層は、陽極層のより近くに配置され、前記第 2 の副層は、陰極層のより近くに配置される。

【 0 2 1 0 】

本明細書との関連において、用語「本質的に ~ からなる (consisting essentially of)」は、90% (体積 / 体積)、より好ましくは 95% (体積 / 体積)、最も好ましくは 99% (体積 / 体積) の割合を特に意味する、および / または、含む。

40

【 0 2 1 1 】

本発明の一実施形態では、有機電子デバイスは、式 (I I) の金属錯体からなる第 1 の副層と、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物を含む第 2 の副層と、を含む正孔注入層を含んでもよく、前記第 1 の副層は、陽極層のより近くに配置され、前記第 2 の副層は、陰極層のより近くに配置される。式 (I I) において、M は、Li、Na、K、Cs、Mg、Mn、Cu、Zn、Ag、Bi および Mo より選択され、あるいは、Mg、Mn、Cu、Zn、Ag、Bi および Mo より選択され、あるいは、Cu、Zn、Ag ま

50

たはB iより選択される。

【0212】

一実施形態では、有機電子デバイスは、式(II)の金属錯体を含む第1の副層と、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物および金属錯体を含む第2の副層と、を含む正孔注入層を含んでもよく、前記第1の副層は、陽極層のより近くに配置され、前記第2の副層は、陰極層のより近くに配置される。

【0213】

一実施形態では、有機電子デバイスは、式(II)の金属錯体を含む第1の副層と、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物および式(II)の金属錯体を含む第2の副層と、を含む正孔注入層を含んでもよく、前記第1の副層は、陽極層のより近くに配置され、前記第2の副層は、陰極層のより近くに配置される。

10

【0214】

別の一実施形態では、有機電子デバイスは、発光デバイス、薄膜トランジスタ、電池、表示デバイスまたは光電池であり得、好ましくは、発光デバイスおよび/または表示デバイスであり得る。

【0215】

正孔注入層(HIL)は、真空蒸着、スピンコーティング、印刷、キャストリング、スロット-ダイコーティング、Langmuir-Blodgett(LB)蒸着などによって、陽極層上に形成され得る。真空蒸着を使用してHILを形成する場合、蒸着条件は、HILを形成するために使用される正孔輸送化合物、ならびに、HILの所望の構造および熱性能に応じて、変化し得る。しかし、通常、真空蒸着の条件は、100 ~ 350の蒸着温度、 10^{-8} ~ 10^{-3} トール(1トールは133.322 Paに等しい)の圧力、および、0.1 ~ 10 nm/秒の蒸着速度、を含み得る。

20

【0216】

HILをスピンコーティングまたは印刷を使用して形成する場合、コーティング条件は、HILを形成するために使用される正孔輸送化合物、ならびに、HILの所望の構造および熱性能に応じて、変化し得る。例えば、コーティング条件は、コーティング速度約2000 rpm ~ 約5000 rpm、および、熱処理温度約80 ~ 約200を含み得る。コーティングが行われた後、熱処理によって溶媒は除去される。

【0217】

HILは、式(I)の任意の正孔輸送化合物、ならびに、式(II)、式(IIa)、式(IIb)、式(IIc)、式(II d)および式(II e)、好ましくは式(II)、式(IIa) ~ 式(II d)の金属錯体、によって形成され得る。

30

【0218】

HILの厚さは、約1 nm ~ 約15 nm、例えば、約2 nm ~ 約12 nm、あるいは約3 nm ~ 約10 nmの範囲であり得る。

【0219】

HILの厚さが当該範囲内にある場合、HILは、動作電圧に実質的なペナルティを与えることなく、優れた正孔注入性能を有し得る。

【0220】

本発明の一実施形態では、正孔注入層は、下記を含み得る：

- 少なくとも約5重量% ~ 約90重量%、好ましくは約30重量% ~ 約80重量%、より好ましくは約40重量% ~ 約80重量%、さらに好ましくは約50重量% ~ 約80重量%の正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物、および、

- 少なくとも約10重量% ~ 約95重量%、好ましくは約20重量% ~ 約70重量%、より好ましくは約20重量% ~ 約60重量%、さらに好ましくは約20重量% ~ 約50重量%の式(II)、式(IIa)、式(IIb)、式(IIc)、式(II d)および式(II e)、好ましくは式(II)、式(IIa) ~ 式(II d)の金属錯体；好ましくは式(II)、式(IIa)、式(IIb)、式(IIc)、式(II d)および式(II e)、好ましくは式(II)、式(IIa) ~ 式(II d)の金属錯

40

50

体の重量%は、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物の重量%よりも低く；ここで、成分の重量%は、正孔注入層の総重量に基づく。

【0221】

本発明の一実施形態では、正孔注入層は、下記を含む：

- 少なくとも約 5 体積% ~ 約 90 体積%、好ましくは約 30 体積% ~ 約 80 体積%、より好ましくは約 40 体積% ~ 約 80 体積%、さらに好ましくは約 50 体積% ~ 約 80 体積%の正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物、および、

- 少なくとも約 10 体積% ~ 約 95 体積%、好ましくは約 20 体積% ~ 約 70 体積%、より好ましくは約 20 体積% ~ 約 60 体積%、さらに好ましくは 20 体積% ~ 約 50 体積%の式(I I)、式(I I a)、式(I I b)、式(I I c)、式(I I d) および式(I I e)、好ましくは式(I I)、式(I I a) ~ 式(I I d)の金属錯体；好ましくは式(I I)、式(I I a)、式(I I b)、式(I I c)、式(I I d) および式(I I e)、好ましくは式(I I)、式(I I a) ~ 式(I I d)の金属錯体の体積%は、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物の体積%よりも低く；ここで、成分の重量%は、正孔注入層の総重量に基づく。

10

【0222】

さらなる層

本発明によれば、有機電子デバイスは、上述の層に加えて、さらなる層を含んでもよい。各々の層の例示的な実施形態を下記に説明する。

【0223】

基板

基板は、電子デバイス(例えば、有機発光ダイオード)の製造に一般的に使用される任意の基板であり得る。光線が基板を通して放射される場合、基板は、透明な材料または半透明の材料(例えば、ガラス基板または透明なプラスチック基板)でなければならない。光線が上面を通して放射される場合、基板は、透明な材料および非透明の材料(例えば、ガラス基板、プラスチック基板、金属基板またはシリコン基板)の両方であり得る。

20

【0224】

陽極層

陽極層は、陽極層を形成するために使用される材料を蒸着またはスパッタリングすることによって形成され得る。陽極層を形成するために使用される材料は、高い仕事関数の材料であり得る。これにより、正孔注入が容易になる。陽極材料はまた、低い仕事関数の材料(例えば、アルミニウム)より選択してもよい。陽極層は、透明電極または反射電極であってもよい。透明導電性酸化物(例えば、インジウムスズ酸化物(I T O)、インジウム亜鉛酸化物(I Z O)、スズ二酸化物(S n O 2)、アルミニウム亜鉛酸化物(A l Z O) および亜鉛酸化物(Z n O))を使用して陽極層を形成することができる。陽極層は、金属(典型的には、銀(A g)、金(A u)または金属合金)を使用して形成され得る。

30

【0225】

正孔輸送層

一実施形態では、有機電子デバイスは、さらに正孔輸送層を含んでもよく、ここで、当該正孔輸送層は、正孔注入層と、陰極層と、の間に配置されてもよく、任意の正孔輸送層は、正孔注入層と、少なくとも1層の光活性層または少なくとも1層の発光層と、の間に配置されてもよい。

40

【0226】

一実施形態では、有機電子デバイスは、正孔輸送層を含んでもよく、ここで、当該正孔輸送層は、請求項1に記載の正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物を含み、好ましくは、正孔注入層中および正孔輸送層中の正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物は、同じものが選択され得る。

【0227】

別の一実施形態では、有機電子デバイスは、正孔輸送層を含んでもよく、ここで、当該正孔輸送層は、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物を含んでもよく；正孔注

50

入層中および正孔輸送層中の正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、同じものが選択され得る。

【 0 2 2 8 】

一実施形態では、正孔輸送層は、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物を含んでもよく；正孔注入層中および正孔輸送層中の正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、同じものが選択され、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、芳香環の一部ではないヘテロ原子、および / または、不飽和 7 員環の一部ではないヘテロ原子を含まなくてもよく、好ましくは、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、芳香環の一部である N 原子または不飽和 7 員環の一部である N 原子を除いて、N 原子を含まなくてもよい。

10

【 0 2 2 9 】

一実施形態では、正孔輸送層は、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物を含んでもよく；正孔注入層中および正孔輸送層中の正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、同じものが選択され、正孔輸送化合物は、2 個のカルバゾール基、少なくとも 1 個のジベンゾフラン基、少なくとも 1 個のジベンゾチオフェン基、および / または、少なくとも 1 個のアントラセン基を含む。

【 0 2 3 0 】

一実施形態では、正孔輸送層は、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物を含んでもよく；正孔注入層中および正孔輸送層中の正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、同じものが選択され、正孔輸送化合物は、2 個のカルバゾール基、1 個 ~ 3 個のジベンゾフラン基、1 個 ~ 3 個のジベンゾチオフェン基、および / または、1 個 ~ 2 個のアントラセン基を含む。

20

【 0 2 3 1 】

一実施形態では、正孔輸送層は、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物を含んでもよく；正孔注入層中および正孔輸送層中の正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、同じものが選択され、式 (I) の正孔輸送化合物について：

- Ar³ は、D 1 ~ D 1 5、好ましくは D 1 ~ D 6 より選択され得る：

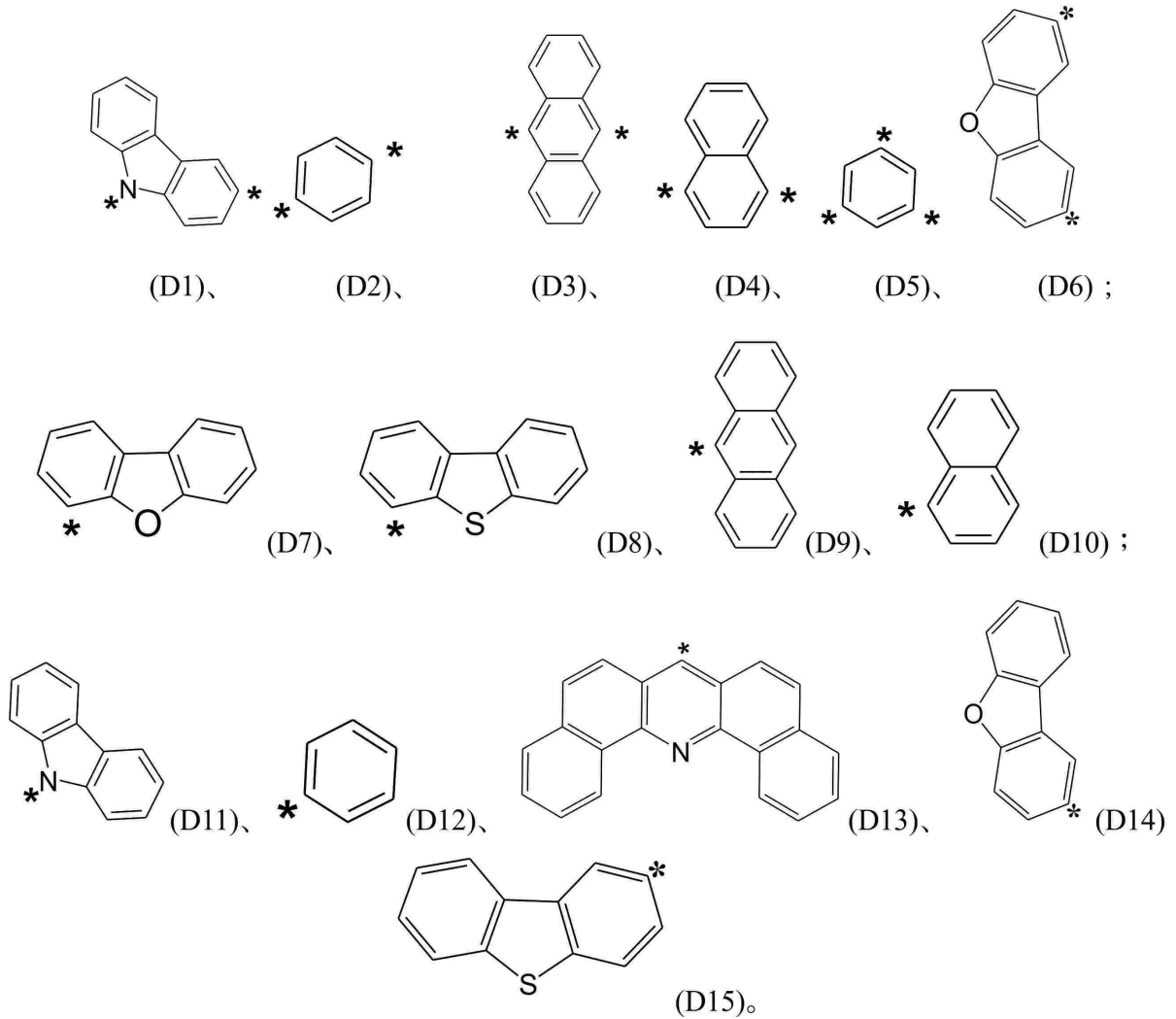
【 0 2 3 2 】

30

40

50

【化 2 8】



10

20

【 0 2 3 3】

一実施形態では、 Ar^1 は、D7～D13より選択され得る。 Ar^2 は、D1～D6またはD7～D13より選択され得る。 Ar^4 は、D1～D6またはD7～D13より選択され得る。 Ar^5 は、D1～D6またはD7～D13より選択され得る。 Ar^6 は、D7～D13より選択され得る。

30

【 0 2 3 4】

一実施形態では、正孔輸送層は、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物を含んでもよく；正孔注入層中および正孔輸送層中の正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物は、同じものが選択され、式(I)の正孔輸送化合物について：

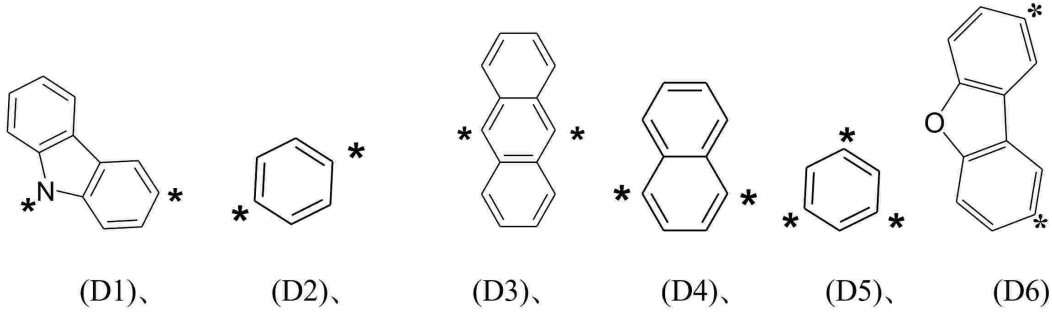
Ar^3 は、D1～D15、好ましくはD1～D6より選択され得：

【 0 2 3 5】

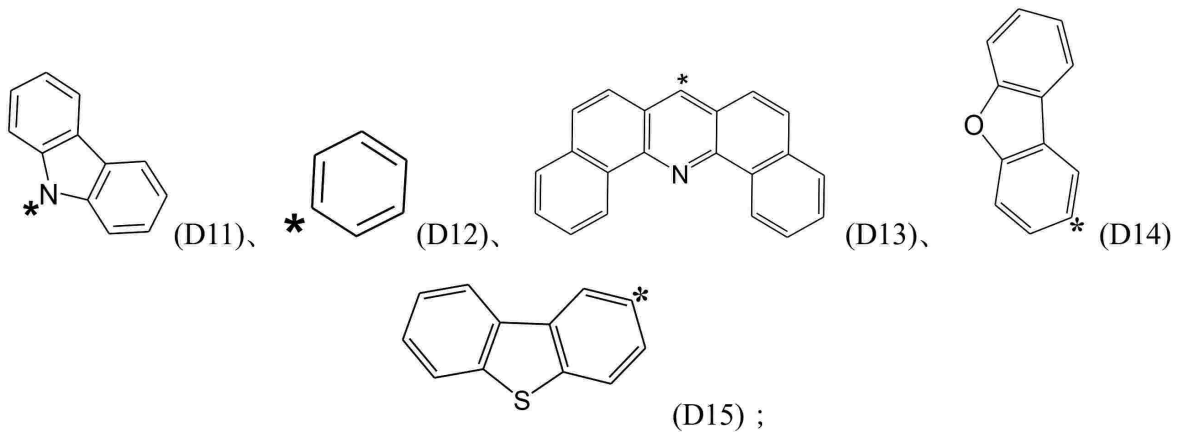
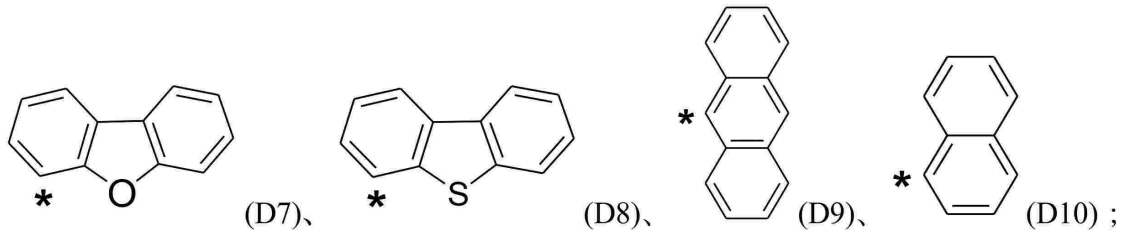
40

50

【化 2 9】



10



20

【 0 2 3 6】

30

Ar^1 は、 $m > 0$ および $k > 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 より選択され得、 $k > 0$ および $m = 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 より選択され得、 $k > 1$ である場合は、D 1 ~ D 6 より選択され得；

Ar^2 は、 $m > 0$ および $k > 0$ である場合は、D 1 ~ D 6 より選択され得、 $m > 0$ および $k = 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 より選択され得；

Ar^4 は、 $q > 0$ である場合は、D 1 ~ D 6 より選択され得、 $q = 0$ および $r > 0$ である場合は、D 1 ~ D 6 より選択され得； $q = 0$ および $r = 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 より選択され得；

Ar^5 は、 $q > 0$ および $r > 0$ である場合は、D 1 ~ D 6 より選択され得、 $q > 0$ および $r = 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 より選択され得；

40

Ar^6 は、 $r > 0$ 、 $q > 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 より選択され得、 $r > 0$ 、 $q = 0$ である場合は、D 7 ~ D 1 5 より選択され得、 $r > 1$ である場合は、D 1 ~ D 6 より選択され得る。

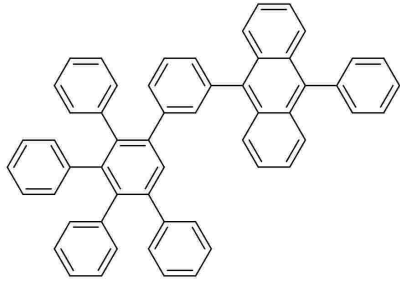
【 0 2 3 7】

一実施形態では、正孔輸送層は、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物を含んでもよく；正孔注入層中および正孔輸送層中の正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、同じものが選択され、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物は、F 1 ~ F 1 3 より選択されてもよい；

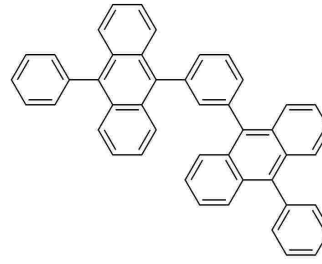
【 0 2 3 8】

50

【化 3 0】

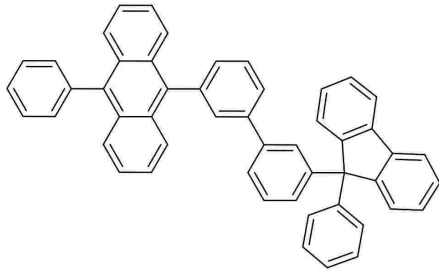


(F1)、

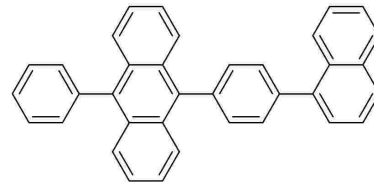


(F2)、

10

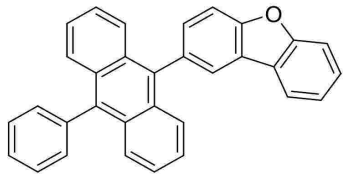


(F3)、

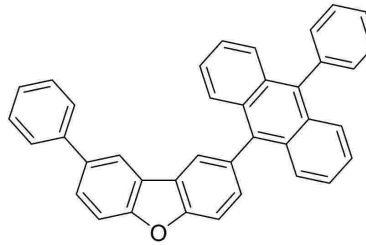


(F4)、

20

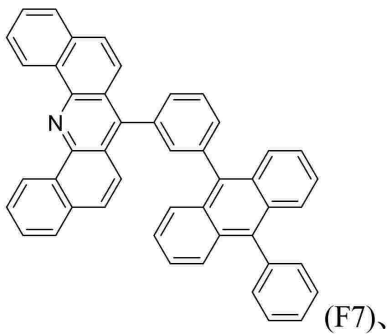


(F5)、

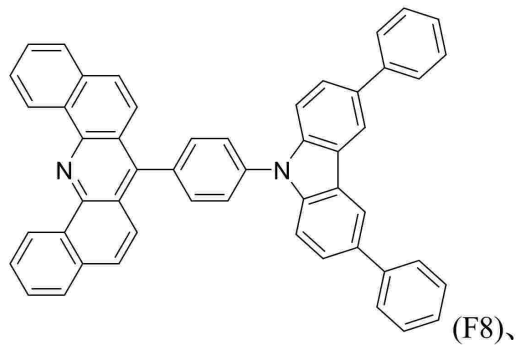


(F6)、

30



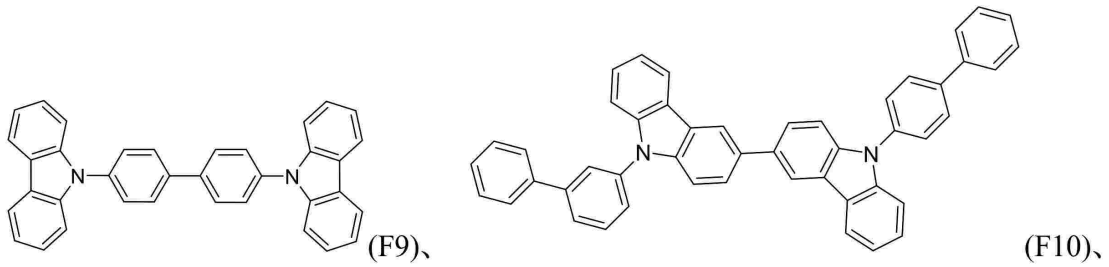
(F7)、



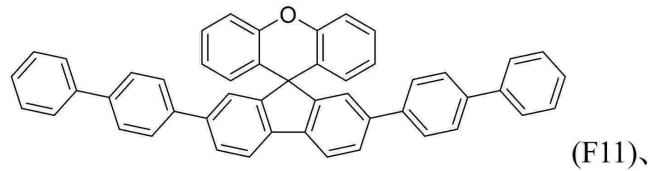
(F8)、

40

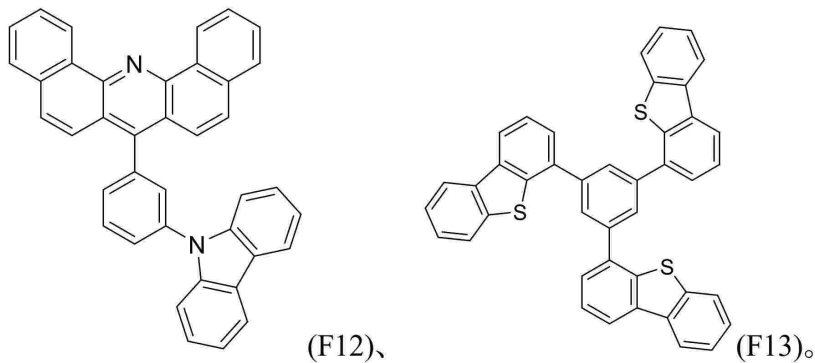
50



10



20



【0239】

正孔輸送層は、HTM014、HTM081、HTM163、HTM222、EL-301、HTM226、HTM355、HTM133、HTM334、HTM604およびEL-22Tを含まなくてもよい。略語は、製造業者の名称（例えば、Merck or Lumtec）を示す。

30

【0240】

正孔輸送層は、N,N'-ビス(ナフタレン-1-イル)-N,N'-ビス(フェニル)-9,9-ジメチル-フルオレン、N,N'-ビス(3-メチルフェニル)-N,N'-ビス(フェニル)-9,9-ジメチル-フルオレン、N,N'-ビス(ナフタレン-1-イル)-N,N'-ビス(フェニル)-9,9-ジメチル-フルオレン、N,N'-ビス(ナフタレン-1-イル)-N,N'-ビス(フェニル)-2,2-ジメチルベンジジン、N,N'-ビス(3-メチルフェニル)-N,N'-ビス(フェニル)-9,9-スピロビフルオレン、2,2',7,7'-テトラキス(N,N-ジフェニルアミノ)-9,9'-スピロビフルオレン、N,N'-ビス(ナフタレン-1-イル)-N,N'-ビス(フェニル)-ベンジジン、N,N'-ビス(ナフタレン-2-イル)-N,N'-ビス(フェニル)-ベンジジン、N,N'-ビス(3-メチルフェニル)-N,N'-ビス(フェニル)-ベンジジン、N,N'-ビス(3-メチルフェニル)-N,N'-ビス(フェニル)-9,9-ジメチル-フルオレン、N,N'-ビス(ナフタレン-1-イル)-N,N'-ビス(フェニル)-9,9-スピロビフルオレン、ジ-[4-(N,N-ジトリル-アミノ)-フェニル]-シクロヘキサン、2,2',7,7'-テトラ(N,N-ジトリル)アミノ-スピロビフルオレン、9,9-ビス[4-(N,N-ビス-ピフェニル-4-イル-アミノ)フェニル]-9H-フルオレン、2,2',7,7'-テトラキス(N,N-ナフタレニル(フェニル)-アミノ]-9,9'-スピロビフルオレン、2,7-ビス(N,N-ビス(9,9-スピロ-ビフルオレン-2-イル)-アミノ)-9,9'-スピロビフルオレン、2,2'-ビス(N,N-ビス(ピフェニル-4-イル)アミノ)-9,9'-スピロビフ

40

50

ルオレン、N, N' - ビス(フェナントレン - 9 - イル) - N, N' - ビス(フェニル) - ベンジジン、N, N, N', N' - テトラ - ナフタレン - 2 - イル) - ベンジジン、2, 2' - ビス(N, N - ジ - フェニル - アミノ) - 9, 9 - スピロビフルオレン、9, 9 - ビス[4 - (N, N - ビス - ナフタレン - 2 - イル - アミノ)フェニル] - 9H - フルオレン、9, 9 - ビス[4 - (N, N' - ビス - ナフタレン - 2 - イル - N, N' - ビス - フェニル - アミノ) - フェニル] - 9H - フルオレン、酸化チタンフタロシアニン、銅フタロシアニン、2, 3, 5, 6テトラフルオロ7, 7, 8, 8、テトラシアノ - キノジメタン、4, 4' 4'' - トリス(N - (3 - メチルフェニル - N - フェニル - アミノ)トリフェニルアミン、4, 4' 4'' - トリス(N - (2 - ナフチル) - N - フェニル - アミノ)トリフェニルアミン、4, 4', 4'' - トリス(N - (1 - ナフチル) - N - フェニル - アミノ)トリフェニルアミン、4, 4', 4'' - トリス(N, N - ジフェニル - アミノ)トリフェニルアミン、ピラジノ[2, 3 - f][1, 10]フェナントロリン - 2, 3 - ジカルボニトリル、N, N, N', N' - テトラキス(4 - メトキシフェニル)ベンジジン、HTM014、HTM081、HTM163、HTM222、EL - 301、HTM226、HTM355、HTM133、HTM334、HTM604およびEL - 22Tを含まなくてもよい。略語は、製造業者の名称(例えば、Merck or Lumtec)を示す。

【0241】

正孔輸送層(HTL)は、真空蒸着、スピンコーティング、スロット - ダイコーティング、印刷、キャストリング、Langmuir - Blodgett(LB)蒸着などによって、HIL上に形成することができる。真空蒸着またはスピンコーティングによってHTLを形成する場合、蒸着およびコーティングの条件は、HIL形成の条件と同じであってもよい。しかし、真空蒸着または溶液蒸着の条件は、HTLを形成するために使用される正孔輸送化合物に応じて変化し得る。

【0242】

HTLの厚さは、約5nm~約250nm、好ましくは約10nm~約200nm、さらに約20nm~約190nm、さらに約40nm~約180nm、さらに約60nm~約170nm、さらに約80nm~約200nm、さらに約100nm~約180nm、さらに約120nm~約170nmの範囲であり得る。

【0243】

HILの厚さが当該範囲内にある場合、HTLは、動作電圧に実質的なペナルティを与えることなく、優れた正孔輸送性能を有し得る。

【0244】

電子阻止層

電子阻止層(EBL)の機能は、電子が発光層から正孔輸送層に移行することを防止し、それによって電子を発光層に閉じ込めることである。これによって、効率、動作電圧、および/または、寿命が改善され得る。典型的には、電子阻止層は、トリアリールアミン化合物を含む。

【0245】

電子阻止層が高い三重項準位(triplet level)を有する場合、三重項制御層として記載され得る。

【0246】

三重項制御層の機能は、リン光緑色発光層またはリン光青色発光層が使用される場合に、三重項の消光を低減することである。これにより、リン光発光層からの発光効率を高めることができる。三重項制御層は、隣接する発光層中のリン光発光体の三重項準位よりも高い三重項準位を有するトリアリールアミン化合物より選択され得る。

【0247】

電子阻止層の厚さは、2nm~20nmの間で選択され得る。

【0248】

光活性層(PAL)

光活性層は、電流を光子に、または、光子を電流に変換する。

10

20

30

40

50

【0249】

PALは、真空蒸着、スピンコーティング、スロット-ダイコーティング、印刷、キャストリング、LB蒸着などによって、HTL上に形成され得る。PALを真空蒸着またはスピンコーティングを使用して形成する場合、蒸着およびコーティングの条件は、HIL形成の条件と同じであってもよい。しかし、蒸着およびコーティングの条件は、PALを形成するために使用される化合物に応じて変化し得る。

【0250】

光活性層は、式(I)の化合物を含まないことが規定され得る。

【0251】

光活性層は、発光層または光吸収層であってもよい。

10

【0252】

発光層(EML)

EMLは、真空蒸着、スピンコーティング、スロット-ダイコーティング、印刷、キャストリング、LB蒸着などによって、HTLまたはEBL上に形成され得る。EMLを真空蒸着またはスピンコーティングを使用して形成する場合、蒸着およびコーティングの条件は、HIL形成の条件と同じであってもよい。しかし、蒸着およびコーティングの条件は、EMLを形成するために使用される化合物に応じて変化し得る。

【0253】

発光層は、式(I)の化合物を含まないことが規定され得る。

【0254】

発光層(EML)は、ホストと発光ドーパントとの組み合わせによって形成され得る。ホストの例として、Alq₃、4,4'-N,N'-ジカルバゾール-ビフェニル(HTC-10)、ポリ(N-ビニルカルバゾール)(PVK)、9,10-ジ(ナフタレン-2-イル)アントラセン(ADN)、4,4',4''-トリス(カルバゾール-9-イル)-トリフェニルアミン(TCTA)、1,3,5-トリス(N-フェニルベンズイミダゾール-2-イル)ベンゼン(TPBI)、3-tert-ブチル-9,10-ジ-2-ナフチルアントラセン(TBADN)、ジスチルアアリーレン(DSA)、および、ビス(2-(2-ヒドロキシフェニル)ベンゾ-チアゾレート)亜鉛(Zn(BTZ)₂)が挙げられる。

20

【0255】

発光ドーパントは、リン光発光体または蛍光発光体であってもよい。熱活性化遅延蛍光(TADF)機構を介して光を放出するリン光発光体および発光体は、それらのより高い効率のために好ましい可能性がある。発光体は、小分子またはポリマーであってもよい。

30

【0256】

赤色発光ドーパントの例として、PtOEP、Ir(piq)₃、および、Btp2Ir(acac)が挙げられるが、これらに限定されるものではない。これらの化合物は、リン光発光体であるが、蛍光赤色発光ドーパントも使用することができる。

【0257】

リン光緑色発光ドーパントの例として、Ir(ppy)₃(ppy=フェニルピリジン)、Ir(ppy)₂(acac)、Ir(mppy)₃が挙げられる。

40

【0258】

リン光青色発光ドーパントの例として、F2Irpic、(F2ppy)₂Ir(tm d)およびIr(dfppz)₃ならびにtert-フルオレンが挙げられる。4,4'-ビス(4-ジフェニルアミオスチリル)ビフェニル(DPAVB i)、2,5,8,11-テトラ-tert-ブチルペリレン(TBPe)は、蛍光青色発光ドーパントの例である。

【0259】

発光ドーパントの量は、ホスト100重量部に対して、約0.01重量部~約50重量部の範囲であり得る。あるいは、発光層は、発光ポリマーからなるものであってもよい。EMLは、約10nm~約100nm(例えば、約20nm~約60nm)の厚さを有し得る。EMLの厚さが当該範囲内にある場合、EMLは、動作電圧に実質的なペナルティ

50

を与えることなく、優れた発光を有し得る。

【0260】

正孔阻止層(HBL)

真空蒸着、スピンコーティング、スロット-ダイコーティング、印刷、キャストリング、LB蒸着などを使用することにより、EML上に正孔阻止層(HBL)を形成することができ、これによってETL内への正孔の拡散を防止することができる。EMLがリン光発光ドーパントを含む場合、HBLはまた、三重項励起子阻止機能を有し得る。

【0261】

HBLはまた、補助ETLまたはa-ETLと称され得る。

【0262】

HBLを真空蒸着またはスピンコーティングを使用して形成する場合、蒸着およびコーティングの条件は、HIL形成の条件と同じであってもよい。しかし、蒸着およびコーティングの条件は、HBLを形成するために使用される化合物に応じて変化し得る。HBLを形成するために一般的に使用される任意の化合物を使用することができる。HBLを形成する化合物の例として、オキサジアゾール誘導体、トリアゾール誘導体、フェナントロリン誘導体、および、トリアジン誘導体が挙げられる。

【0263】

HBLは、約5nm~約100nm(例えば、約10nm~約30nm)の範囲の厚さを有し得る。HBLの厚さが当該範囲内にある場合、HBLは、動作電圧に実質的なペナルティを与えることなく、優れた正孔阻止性能を有し得る。

【0264】

電子輸送層(ETL)

本発明に係る有機電子デバイスは、電子輸送層(ETL)をさらに含んでもよい。

【0265】

本発明の別の実施形態では、電子輸送層は、アジン化合物、好ましくはトリアジン化合物をさらに含んでもよい。

【0266】

一実施形態では、電子輸送層は、アルカリ有機錯体、好ましくはLiQより選択されるドーパントをさらに含んでもよい。

【0267】

ETLの厚さは、約15nm~約50nmの範囲(例えば、約20nm~約40nmの範囲)であり得る。EILの厚さが当該範囲内にある場合、ETLは、動作電圧に実質的なペナルティを与えることなく、満足な電子注入性能を有し得る。

【0268】

本発明の別の実施形態では、有機電子デバイスは、正孔阻止層および電子輸送層をさらに含んでもよく、当該正孔阻止層および当該電子輸送層は、アジン化合物を含む。好ましくは、前記アジン化合物は、トリアジン化合物である。

【0269】

電子注入層(EIL)

陰極からの電子の注入を容易にすることができる任意のEILは、ETL上に、好ましくは電子輸送層上に直接に、形成され得る。EILを形成するための材料の例として、当該技術分野で公知の、リチウム8-ヒドロキシキノリノレート(LiQ)、LiF、NaCl、CsF、Li₂O、BaO、Ca、Ba、Yb、Mgが挙げられる。EILを形成するための蒸着およびコーティングの条件は、HIL形成の条件と同じであるが、蒸着およびコーティングの条件は、EILを形成するために使用される材料に応じて変化し得る。

【0270】

EILの厚さは、約0.1nm~約10nmの範囲(例えば、約0.5nm~約9nmの範囲)であり得る。EILの厚さが当該範囲内にある場合、EILは、動作電圧の実質的なペナルティを与えることなく、満足な電子注入性能を有し得る。

【0271】

10

20

30

40

50

陰極層

陰極層は、E T L上、または、任意のE I L上に形成される。陰極層は、金属、合金、導電性化合物、または、それらの混合物から形成され得る。陰極層は、低い仕事関数を有し得る。例えば、陰極層は、リチウム(Li)、マグネシウム(Mg)、アルミニウム(Al)、アルミニウム(Al) - リチウム(Li)、カルシウム(Ca)、バリウム(Ba)、イッテルビウム(Yb)、マグネシウム(Mg) - インジウム(In)、マグネシウム(Mg) - 銀(Ag)などで形成され得る。あるいは、陰極層は、透明導電性酸化物(例えば、ITOまたはIZO)で形成され得る。

【0272】

陰極層の厚さは、約5nm~約1000nmの範囲(例えば、約10nm~約100nmの範囲)であり得る。陰極層の厚さが、約5nm~約50nmの範囲内にある場合、陰極層は、金属または金属合金から形成されたとしても、透明または半透明であり得る。

10

【0273】

陰極層は、電子注入層または電子輸送層の一部ではないことを理解されたい。

【0274】

有機発光ダイオード(OLED)

本発明に係る有機電子デバイスは、有機発光デバイスであってもよい。

【0275】

本発明の一態様では、下記を含む有機発光ダイオード(OLED)が提供される：基板；当該基板上に形成された陽極層；正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物および式(II)の金属錯体を含む正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、および、陰極層。

20

【0276】

本発明の別の態様では、下記を含むOLEDが提供される：基板；当該基板上に形成された陽極層、第1の副層と第2の副層とを含む本発明の正孔注入、正孔輸送層、発光層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、および、陰極層、

ここで、前記第1の副層は、前記陽極層、および、前記正孔輸送層に隣接して配置される前記第2の副層、に隣接して配置され、

ここで、前記第1の副層は、式(II)の金属錯体を含むか、または、式(II)の金属錯体からなるものであり、前記第2の副層は、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物を含むか、または、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物からなるものである。

30

【0277】

本発明の別の態様では、下記を含むOLEDが提供される：基板；当該基板上に形成された陽極層；正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物および式(II)の金属錯体を含む正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、発光層、正孔阻止層、電子輸送層、および、陰極層。

【0278】

本発明の別の態様では、下記を含むOLEDが提供される：基板；当該基板上に形成された陽極層、第1の副層と第2の副層とを含む本発明の正孔注入、正孔輸送層、電子阻止層、発光層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、および、陰極層、

40

ここで、前記第1の副層は、前記陽極層、および、前記正孔輸送層に隣接して配置される前記第2の副層、に隣接して配置され、

ここで、前記第1の副層は、式(II)の金属錯体を含むか、または、式(II)の金属錯体からなるものであり、前記第2の副層は、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物を含むか、または、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物からなるものである。

【0279】

本発明の別の態様では、下記を含むOLEDが提供される：基板；当該基板上に形成された陽極層；正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物および式(II)の金属錯

50

体を含む正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、発光層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、および、陰極層。

【0280】

本発明の別の態様では、下記を含むOLEDが提供される：基板；当該基板上に形成された陽極層、第1の副層と第2の副層とを含む本発明の正孔注入、正孔輸送層、電子阻止層、発光層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、および、陰極層、

ここで、前記第1の副層は、前記陽極層、および、前記正孔輸送層に隣接して配置される前記第2の副層、に隣接して配置され、

ここで、前記第1の副層は、式(II)の金属錯体を含むか、または、式(II)の金属錯体からなるものであり、前記第2の副層は、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物を含むか、または、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物からなるものである。

10

【0281】

本発明の様々な実施形態では、上述の層の間、基板上または上部電極上に配置されたOLED層が提供され得る。

【0282】

例えば、図2に記載のOLEDは、基板(110)上に、陽極層(120)、正孔輸送化合物または式(I)の正孔輸送化合物および式(II)の金属錯体を含む正孔注入層(130)、正孔輸送層(140)、電子阻止層(145)、発光層(150)、正孔阻止層(155)、電子輸送層(160)、電子注入層(180)、および、陰極層(190)が、この順に連続して形成される方法によって形成され得る。

20

【0283】

製造方法

本発明の別の態様では、有機電子デバイスを製造する方法が提供される。当該方法は下記を使用する：

- 少なくとも1個の蒸着源、好ましくは2個の蒸着源、より好ましくは少なくとも3個の蒸着源。

【0284】

好適であり得る蒸着の方法は、下記を含む：

- 真空熱蒸発による蒸着；
- 溶液処理による蒸着、好ましくは、当該処理は、スピンコーティング、印刷、キャストリングより選択され得る；および/または、
- スロットダイコーティング。

30

【0285】

本発明の様々な実施形態では、下記を使用する方法が提供される：

- 本発明の式(I)の正孔輸送化合物を放出するための第1の蒸着源、および、
- 式(II)の金属錯体を放出するための第2の蒸着源。

【0286】

有機発光ダイオード(OLED)のための、正孔注入層を形成するステップを含む方法：
- 前記正孔注入層は、第1の蒸着源から、本発明の式(I)の正孔輸送化合物を放出すること、および、第2の蒸着源から、式(II)の金属錯体を放出すること、によって形成される。

40

【0287】

本発明の様々な実施形態では、前記方法は、正孔輸送層を形成する工程、正孔阻止層を形成する工程、発光層を形成する工程、正孔阻止層を形成する工程、電子輸送層を形成する工程および/または電子注入層を形成する工程および/または陰極層を形成する工程からなる群より選択される少なくとも1層を正孔注入層上に形成する工程をさらに含んでもよい。

【0288】

本発明の様々な実施形態では、当該方法は、有機発光ダイオード(OLED)を形成す

50

るステップをさらに含んでもよく、

- 基板上に陽極層が形成され、

- 前記陽極層上に、式 (I) の正孔輸送化合物および式 (I I) の金属錯体を含む正孔注入層が形成され、

- 式 (I) の正孔輸送化合物および式 (I I) の金属錯体を含む前記正孔注入層上に、正孔輸送層が形成され、

- 前記正孔輸送層上に発光層が形成され、

- 前記発光層上に電子輸送層が形成され、任意に前記発光層上に正孔阻止層が形成され、

- 最終的に、陰極層が形成され、

- 任意に、正孔阻止層が、前記正孔注入層と前記発光層との間に形成され、

- 任意に、電子注入層が、前記電子輸送層と前記陰極層との間に形成される。

10

【 0 2 8 9 】

様々な実施形態では、O L E D は、下記の層構造を有してもよく、前記層は、下記の順序を有する：

陽極層、正孔輸送化合物または式 (I) の正孔輸送化合物および式 (I I) の金属錯体を含む正孔注入層、正孔輸送層、任意の電子阻止層、発光層、任意の正孔阻止層、電子輸送層、任意の電子注入層、および、陰極層。

【 0 2 9 0 】

一実施形態では、本発明の有機電子デバイスは、正孔注入層および陰極層を真空中で蒸着することによって形成される。

20

【 0 2 9 1 】

別の態様では、本出願全体を通して記載されるいずれかの実施形態の少なくとも 1 個の有機発光デバイスを含む電子デバイスが提供され、好ましくは、当該電子デバイスは、本出願全体を通して記載される一実施形態の有機発光ダイオードを含む。より好ましくは、前記有機電子デバイスは、表示デバイスである。

【 0 2 9 2 】

下記に例を挙げて、実施形態をさらに詳細に説明する。しかし、本発明は、下記の例に限定されるものではない。ここで、例示的な態様を詳細に参照する。

【 0 2 9 3 】

〔 図面の説明 〕

前述の構成要素 (The aforementioned components) 、ならびに特許請求された構成要素 (the claimed components) および記述された実施形態において本発明に従って使用される構成要素は、それらのサイズ、形状、材料選択および技術的概念に関していかなる特別な例外も受けず、結果として、関連分野において公知の選択基準を限定することなく適用することができる。

30

【 0 2 9 4 】

物体のさらなる詳細、性能および利点は、従属請求項および本発明の好ましい実施形態を示す例示的な様式で、下記各々の図面の説明にて開示される。しかし、いかなる実施形態も必ずしも全範囲を表すものではなく、したがって、範囲を解釈するために特許請求の範囲および本明細書を参照する。前述の概要および下記の詳細な説明の両方は、例示的かつ説明的なものにすぎず、特許請求される本発明のさらなる説明を提供することが意図されることを理解されたい。

40

【 0 2 9 5 】

図 1 は、本発明の例示的な一実施形態の有機電子デバイスの概略断面図である；

図 2 は、本発明の例示的な一実施形態の有機発光ダイオード (O L E D) の概略断面図である；

図 3 は、本発明の例示的な一実施形態の O L E D の概略断面図である。

【 0 2 9 6 】

下記に、例を挙げて図面をさらに詳細に説明する。しかし、本発明は、下記の図面に限定されるものではない。

50

【0297】

本明細書中にて、第1の要素が第2の要素の「上(on)」または「上に(onto)」形成または配置されると言及される場合は、第1の要素は、第2の要素の上に直接配置されてもよく、または、1個以上の他の要素がそれらの間に配置されてもよい。第1の要素が第2の要素の「上に直接(directly on)」または「上に直接に(directly onto)」形成または配置されると言及される場合は、他の要素は、それらの間に配置されない。

【0298】

図1は、本発明の例示的な一実施形態の有機電子デバイス100の概略断面図である。有機電子デバイス100は、基板110、陽極層120、および、正孔注入層(HIL)130を含む。HIL130は、陽極層120上に配置される。HIL130上には、光活性層(PAL)170および陰極層190が配置されている。

10

【0299】

正孔注入層(HIL)130は、第1の副層と第2の副層とを含んでもよく、第1の副層は、陽極上に配置され、第2の副層は、第1の副層上に配置される。光活性層(PAL)170は、第2の副層上に配置される。

【0300】

図2は、本発明の例示的な実施形態の有機発光ダイオード(OLED)100の概略断面図である。OLED100は、基板110、陽極層120、および、正孔注入層(HIL)130を含み、HIL130は、陽極層120上に配置される。HIL130上には、正孔輸送層(HTL)140、発光層(EML)150、電子輸送層(ETL)160、電子注入層(EIL)180、および、陰極層190が配置されている。単一の電子輸送層160の代わりに、任意に電子輸送積層(ETL)を使用してもよい。

20

【0301】

正孔注入層(HIL)130は、第1の副層と第2の副層とを含んでもよく、第1の副層は、陽極上に配置され、第2の副層は、第1の副層上に配置される。正孔輸送層(HTL)140は、第二の副層上に配置されている。

【0302】

図3は、本発明の別の例示的な実施形態のOLED100の概略断面図である。図2のOLED100が電子阻止層(EBL)145および正孔阻止層(HBL)155を含む点で、図2は、図1と異なる。

30

【0303】

図3を参照すると、OLED100は、基板110、陽極層120、正孔注入層(HIL)130、正孔輸送層(HTL)140、電子阻止層(EBL)145、発光層(EML)150、正孔阻止層(HBL)155、電子輸送層(ETL)160、電子注入層(EIL)180、および、陰極層190を含む。

【0304】

図1、図2および図3には示されていないが、シール層が、陰極層190上にさらに形成されていてもよく、これにより有機電子デバイス100を封止することが可能である。さらに、他の様々な修正が適用されてもよい。

【0305】

下記に例を挙げて実施形態をさらに詳細に説明する。しかし、本発明は下記の例に限定されるものではない。

40

【0306】

〔詳細な説明〕

本発明はさらに、単なる例示であり拘束力のない下記の例によって説明される。

【0307】

正孔輸送化合物および式(I)の正孔輸送化合物ならびに式(II)の金属錯体は、文献に記載されているように調製することができる。

【0308】

速度開始温度(Rate onset temperature)

50

速度開始温度 (T_{RO}) は、100 mg の正孔輸送化合物を VTE 源に装填することによって測定される。VTE 源として、有機材料の点源 (point source) は、Kurt J. Lesker Company (www.lesker.com) または Creaphys GmbH (<http://www.creaphys.com>) によって供給されるように使用され得る。VTE 源は、 10^{-5} mbar 未満の圧力で 15 K / 分の一定速度で加熱され、熱電対を用いて源内の温度を測定する。正孔輸送化合物の蒸発は、正孔輸送化合物の検出器の水晶結晶上への蒸着を検出する QCM 検出器によって検出される。水晶上での蒸着速度は、オングストローム / 秒にて測定される。速度開始温度を決定するために、蒸着速度を VTE 源温度に対してプロットする。速度開始は、QCM 検出器への目立った蒸着が生じる温度である。正確な結果のために、VTE 源の加熱および冷却を 3 回

10

【0309】

式 (II) の金属錯体の蒸発速度の良好な制御を達成するために、速度開始温度は、110 ~ 300、好ましくは、115 ~ 290 の範囲であり得る。速度開始温度が低すぎる場合、蒸発は、急速すぎて制御することが困難な可能性がある。速度開始温度が高すぎる場合、蒸発速度は遅すぎて、その結果、低いタクトタイムをもたらし得、および / または、VTE 源における式 (II) の金属錯体の分解が高温への長期間の曝露のために生じ得る。

【0310】

本発明の正孔輸送化合物の蒸発速度の良好な制御を達成するために、速度開始温度は、120 ~ 300 の範囲であり得る。速度開始温度が低すぎる場合、蒸発は急速すぎて制御することが困難な可能性がある。速度開始温度が高すぎる場合、蒸発速度は遅すぎて、その結果、低いタクトタイムをもたらし得る。

20

【0311】

速度開始温度は、化合物の揮発性の間接的な尺度である。速度開始温度が高いほど、化合物の揮発性は低い。

【0312】

HOMO および LUMO

HOMO 準位および LUMO 準位は、プログラムパッケージ TURBOMOLE V6.5 (TURBOMOLE GmbH, Litztenhardtsstrasse 19, 76135 Karlsruhe, ドイツ) を使用して計算される。分子構造の最適化された幾何学的配置ならびに HOMO 準位および LUMO 準位は、気相中に 6-31G* 基底セットを有するハイブリッド機能 B3LYP を適用することによって測定される。1 個より多いコンフォメーションが実行可能である場合は、最低総エネルギーを有するコンフォメーションが選択され得る。HOMO 準位および LUMO 準位は、電子ボルト (eV) で記録される。

30

【0313】

正孔注入層、および、蛍光青色発光体を含む発光層を含む OLED の製造のための一般的な手順

OLED については、表 3 および表 4 の実施例 1 ~ 11 および比較例 1 ~ 3 を参照して、90 nm の ITO (コーニング社より入手可能) を有する $15 / \text{cm}^2$ のガラス基板を、50 mm x 50 mm x 0.7 mm の大きさに切断した。イソプロピルアルコールを用いて 5 分間超音波洗浄した後、純水を用いて 5 分間超音波洗浄し、再度紫外線オゾンで 30 分間洗浄して、陽極層を作製した。

40

【0314】

次いで、70 体積% の正孔輸送化合物および 30 体積% の金属錯体を真空中で陽極層上に共蒸着させることによって、10 nm の厚さを有する正孔注入層 (HIL) を形成した。正孔注入層の組成を表 3 および 4 に示す。比較例 1 ~ 3 では、70 体積% の正孔輸送化合物および 30 体積% の HAT-CN を真空中で陽極層上に共蒸着させて、10 nm の厚さを有する HIL を形成した。

50

【0315】

次に、正孔輸送化合物をHIL上に真空蒸着させて、128nmの厚さを有するHTLを形成した。HTL中の正孔輸送化合物は、HIL中の正孔輸送化合物と同じものが選択される。正孔輸送化合物を表3および4に示す。

【0316】

次いで、N,N-ビス(4-(ジベンゾ[b,d]フラン-4-イル)フェニル)-[1,1':4',1''-テルフェニル]-4-アミン(CAS 1198399-61-9)をHTL上に真空蒸着させて、5nmの厚さを有する電子阻止層(EBL)を形成した。

【0317】

次いで、EMLホストとして97体積%のHTC-6、および、蛍光青色発光ドーパントとして3体積%のBD200(Sun Fine Chemicals、韓国)をEBL上に蒸着させて、20nmの厚さを有する青色発光EMLを形成した。

10

【0318】

次に、2-(3'-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-[1,1'-ビフェニル]-3-イル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンを発光層EML上に蒸着させて、5nmの厚さの正孔阻止層を形成した。

【0319】

次いで、50重量%の4'-(4-(4-(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン-2-イル)フェニル)ナフタレン-1-イル)-[1,1'-ビフェニル]-4-カルボニトリルおよび50重量%のLiQを蒸着させて、正孔阻止層上に31nmの厚さを有する電子輸送層を形成した。

20

【0320】

次いで、 10^{-7} mbarで0.01オングストローム/s~1オングストローム/sの速度でAlを蒸着させ、電子輸送層上に100nmの厚さを有する陰極層を形成した。

【0321】

OLED積層は、ガラススライドを用いてデバイスを封入することによって、周囲条件から保護した。これにより、さらなる保護のためのゲッター材料を含むキャビティを形成する。

【0322】

正孔注入層、および、リン光緑色発光体を含む発光層を含むOLEDの製造のための一般的な手順

30

OLEDについては、表5の実施例12および13ならびに比較例4および5を参照して、90nmのITO(コーニング社より入手可能)を有する $15 / \text{cm}^2$ のガラス基板を50mm×50mm×0.7mmの大きさに切断した。イソプロピルアルコールを用いて5分間超音波洗浄した後、純水を用いて5分間超音波洗浄し、再度紫外線オゾンで30分間洗浄して、陽極層を作製した。

【0323】

次いで、70体積%の正孔輸送化合物および30体積%の金属錯体を真空中で陽極層上に共蒸着させて、10nmの厚さを有する正孔注入層(HIL)を形成した。正孔注入層の組成を表5に示す。比較例4および5では、70体積%の正孔輸送化合物および30体積%のHAT-CNを陽極層上に蒸着させて、10nmの厚さを有するHILを形成した。

40

【0324】

次に、HIL上に正孔輸送化合物を真空蒸着し、165nmの厚さを有するHTLを形成した。HTL中の正孔輸送化合物は、HIL中の正孔輸送化合物と同じものが選択される。正孔輸送化合物を表5に示す。

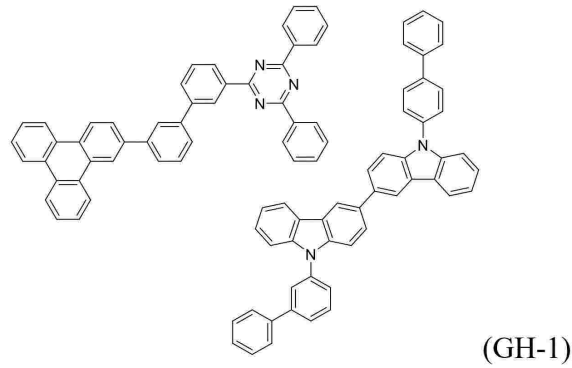
【0325】

次に、EMLホストとして90体積%のGH-1、および、リン光緑色発光体ドーパントとして10体積%のGD-1をHTL上に真空中で共蒸着させて、40nmの厚さを有する緑色発光EMLを形成した。GH-1およびGD-1の式を下記に示す：

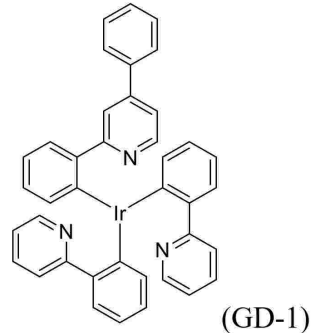
【0326】

50

【化 3 1】



10



20

【0327】

次に、2,4-ジフェニル-6-(3'-(トリフェニレン-2-イル)-[1,1'-ピフェニル]-3-イル)-1,3,5-トリアジンを発光層EML上に蒸着させて、25nmの厚さを有する正孔阻止層を形成した。

【0328】

次いで、99体積%の3-フェニル-3H-ベンゾ[b]ジナフト[2,1-d:1',2'-f]ホスフェピン-3-酸化物および1体積%のYbを蒸着させて、10nmの厚さを有する電子輸送層を正孔阻止層上に形成した。

【0329】

次いで、 10^{-7} mbarにて0.01~1オングストローム/sの速度でAlを蒸着させ、電子輸送層上に100nmの厚さを有する陰極層を形成した。

30

【0330】

OLED積層は、ガラススライドを用いてデバイスを封入することによって、周囲条件から保護される。これにより、さらなる保護のためのゲッター材料を含むキャビティを形成する。

【0331】

第1の副層と第2の副層とを含む正孔注入層を含むOLEDの製造のための一般的な手順
 OLEDについては、表6の実施例14~28および比較例6~11を参照して、90nmのITO(コーニング社より入手可能)を有する $15 \text{ } \Omega/\text{cm}^2$ のガラス基板を50mm×50mm×0.7mmの大きさに切断した。イソプロピルアルコールを用いて5分
 間超音波洗浄した後、純水を用いて5分間洗浄し、再度紫外線オゾンで30分間洗浄して、陽極層を作製した。

40

【0332】

次いで、第1の副層と第2の副層とを含む正孔注入層を、陽極層上に真空蒸着させた。まず、陽極層上に金属錯体を真空蒸着させて、3nmまたは5nmの厚さを有する第1の副層を形成した(表6参照)。比較例6~11では、HAT-CNを陽極層上に蒸着させて、3nmまたは5nmの厚さを有する第1の副層を形成する(表6参照)。

【0333】

次いで、正孔輸送化合物を第1の副層上に真空蒸着させて、7nmまたは5nmの厚さを有する第2の副層を形成した(表6参照)。

50

【0334】

次いで、正孔輸送化合物を正孔注入層上に真空蒸着させ、HTLを形成した。HTL中の正孔輸送化合物は、HIL中の正孔輸送化合物と同じものを選択した(表6参照)。厚さは、第2の副層の厚さとHTLの厚さとが合計で128nmまで加算されるように選択される。

【0335】

次いで、N,N-ビス(4-(ジベンゾ[b,d]フラン-4-イル)フェニル)-[1,1':4',1''-テルフェニル]-4-アミン(CAS 1198399-61-9)をHTL上に真空蒸着させて、5nmの厚さを有する電子阻止層(EBL)を形成した。

【0336】

次いで、EMLホストとして97体積%のHTC-6、および、蛍光青色発光ドーパントとして3体積%のBD200(Sun Fine Chemicals、韓国)をEBL上に蒸着させて、20nmの厚さを有する青色発光EMLを形成した。

【0337】

次に、2-(3'-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-[1,1'-ビフェニル]-3-イル)-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジンを発光層EML上に蒸着させることによって、5nmの厚さを有する正孔阻止層を形成した。

【0338】

次いで、50重量%の4'-(4-(4-(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン-2-イル)フェニル)ナフタレン-1-イル)-[1,1'-ビフェニル]-4-カルボニトリルおよび50重量%のLiQを蒸着させることによって、正孔阻止層上に31nmの厚さを有する電子輸送層を形成した。

【0339】

次いで、 10^{-7} mbarにて0.01~1オングストローム/sの速度でAlを蒸着させ、電子輸送層上に100nmの厚さを有する陰極層を形成した。

【0340】

OLED積層は、ガラススライドを用いてデバイスを封入することによって、周囲条件から保護される。これにより、さらなる保護のためのゲッター材料を含み得るキャビティを形成する。

【0341】

従来技術と比較して本発明の実施例の性能を評価するために、電流効率を20で測定する。電流-電圧特性は、Keithley 2635ソース測定ユニットを使用して、動作電圧UをVでソースし、被測定デバイスを流れる電流をmAで測定することによって測定される。デバイスに印加する電圧を、0V~10Vの範囲で、0.1Vのステップで変化させる。器具を損傷から保護するために、測定は10Vで停止した。

【0342】

〔技術的効果〕

本発明の正孔注入層の有用性を調べるために、好ましい材料を、それらの物理的性能を考慮して試験した(表1および2を参照)。

【0343】

プログラムTURBOMOLE V6.5(TURBOMOLE GmbH, Litzenehardtstrasse 19, 76135 Karlsruhe、ドイツ)、および、本発明の正孔輸送化合物の速度開始温度 T_{RO} を使用して計算したHOMO準位を、表1に示す。

【0344】

10

20

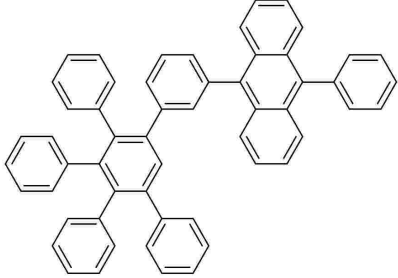
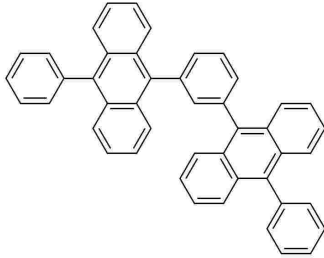
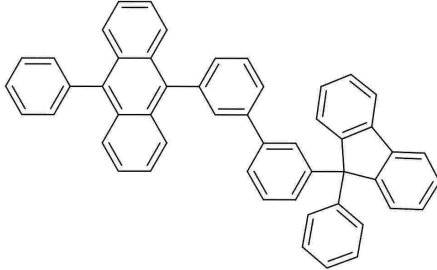
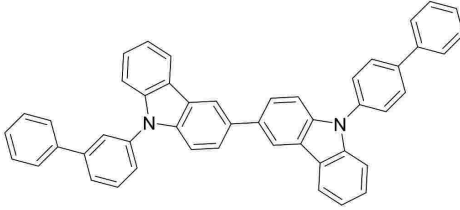
30

40

50

【表 2】

表 1：本発明の正孔輸送化合物の化学式および物性

名称	化学式	H O M O 準位 (e V)	T _{RO} (°C)
9-フェニル-10-(3', 4', 5'-トリフェニル-[1, 1':2', 1''-テルフェニル]-3-イル)アントラセン HTC-1		-5.0 4	2 1 0
1, 3-ビス(10-フェニルアントラセン-9-イル)ベンゼン HTC-2		-5.0 8	2 3 0
9-フェニル-10-(3-(9-フェニル-9H-フルオレン-9-イル)-[1, 1'-ビフェニル]-3-イル)アントラセン HTC-3		-5.0 8	2 2 6
9-([1, 1'-ビフェニル]-3-イル)-9'-([1, 1'-ビフェニル]-4-イル)-9H, 9'H-3, 3'-ビカルバゾール HTC-4		-5.0 9	2 6 5

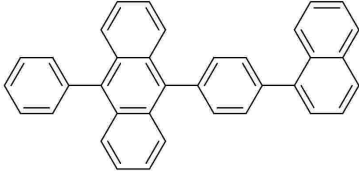
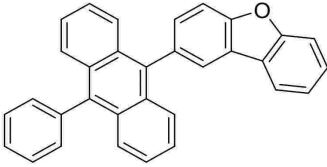
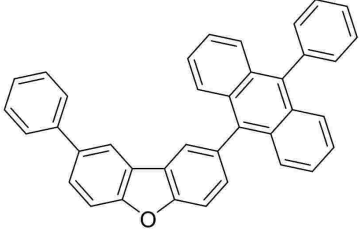
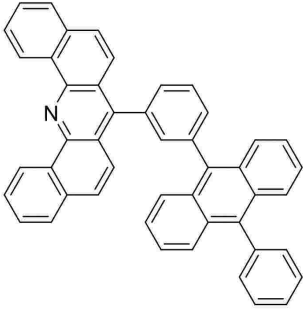
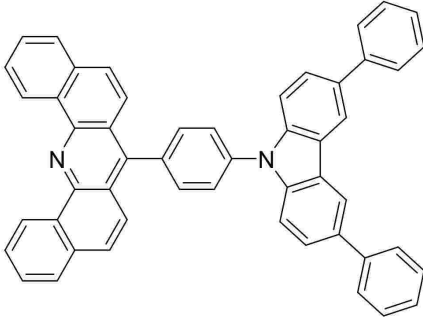
10

20

30

40

50

名称	化学式	H O M O 準位 (e V)	T _{RO} (°C)
9-(4-(ナフタレン-1-イル)フェニル)-10-フェニルアントラセン HTC-5		-5.1	約 130
2-(10-フェニルアントラセン-9-イル)ジベンゾ[b, d]フラン HTC-6		-5.1 1	-
2-フェニル-8-(10-フェニルアントラセン-9-イル)ジベンゾ[b, d]フラン HTC-7		-5.1 3	2 1 6
7-(3-(10-フェニルアントラセン-9-イル)フェニル)ジベンゾ[c, h]アクリジン HTC-8		-5.1 7	2 8 2
7-(4-(3,6-ジフェニル-9H-カルバゾール-9-イル)フェニル)ジベンゾ[c, h]アクリジン HTC-9		-5.2 8	2 9 1

10

20

30

40

50

名称	化学式	H O M O 準位 (e V)	T _{RO} (°C)
4, 4' -ビス (カルバゾール-9-イル) -ビフェニル HTC-10		-5.3	約 2 40
2, 7-ジ ([1, 1' - ビフェニル] -4-イル) スピロ [フルオレン-9, 9' -キサテン] HTC-11		-5.3 8	2 4 2
7- (3- (9H-カルバ ゾール-9-イル) フェニ ル) ジベンゾ [c, h] ア クリジン HTC-12		-5.4 2	2 1 4
4, 4', 4'' - (1, 3, 5-ベンゼントリイ ル) トリス [ジベンゾチオ フェン] HTC-13		-5.6 7	2 7 2

10

20

30

【0345】

表1から分かるように、正孔輸送化合物は、有機電子デバイスの大量生産に適した速度開始温度を有した。

【0346】

表2には、式(II)の金属錯体の速度開始温度T_{RO}が示されている。

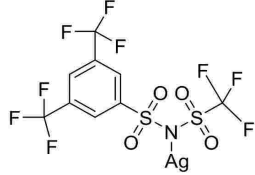
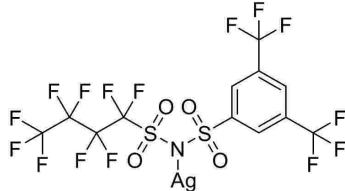
40

【0347】

50

【表 3】

表 2 : 式 (I I) の金属錯体

名称	化学式	T _{RO} (°C)
MC-1	Li TFSI	222
MC-2	K TFSI	236
MC-3	Cs TFSI	224
MC-4	Ag TFSI	258
MC-5	Mg (TFSI) ₂	243
MC-6	Mn (TFSI) ₂	229
MC-7	Sc (TFSI) ₃	258
MC-8	Mg [N (SO ₂ ⁱ C ₃ F ₇) ₂] ₂	166
MC-9	Zn [N (SO ₂ ⁱ C ₃ F ₇) ₂] ₂	118
MC-10	Ag [N (SO ₂ ⁱ C ₃ F ₇) ₂]	232
MC-11	Ag [N (SO ₂ C ₃ F ₇) ₂]	254
MC-12	Ag [N (SO ₂ C ₄ F ₉) ₂]	262
MC-13	Ag [N (SO ₂ CF ₃) (SO ₂ C ₄ F ₉)]	230
MC-14	Cu [N (SO ₂ ⁱ C ₃ F ₇) ₂] ₂	101
MC-15	Cu [N (SO ₂ C ₃ F ₇) ₂] ₂	118
MC-16	Cu [N (SO ₂ CF ₃) (SO ₂ C ₄ F ₉)] ₂	113
MC-17	Mg [N (SO ₂ CF ₃) (SO ₂ C ₄ F ₉)] ₂	124
MC-18	Mn [N (SO ₂ CF ₃) (SO ₂ C ₄ F ₉)] ₂	202
MC-19	Cu [N (SO ₂ CH ₃) (SO ₂ C ₄ F ₉)] ₂	179
MC-20	Ag [N (SO ₂ CH ₃) (SO ₂ C ₄ F ₉)]	—
MC-21		254
MC-22		238

10

20

30

40

50

名称	化学式	T _{RO} (°C)
MC-23		262
MC-24		180
MC-25		—
MC-26		167
MC-27		282

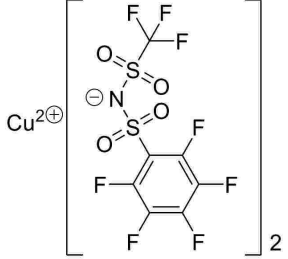
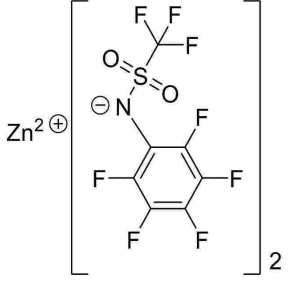
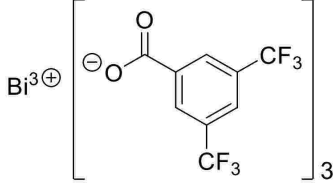
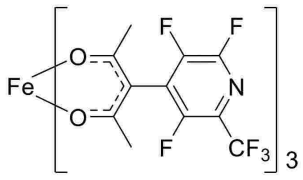
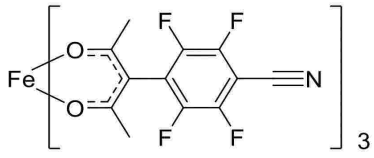
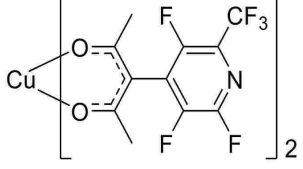
10

20

30

40

50

名称	化学式	T _{RO} (°C)
MC-28		263
MC-29		194
MC-30		190
MC-31		128
MC-32		196
MC-33		105

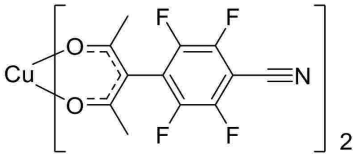
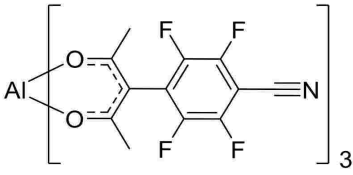
10

20

30

40

50

名称	化学式	T _{RO} (°C)
MC-34		187
MC-35		194

10

【0348】

表2から分かるように、式(I I)の金属錯体は、有機電子デバイスの大量生産に適した速度開始温度を有した。

【0349】

表3に、蛍光青色発光体と70体積%のHTC-10および30体積%の式(I I)の金属錯体を含む正孔注入層とを含むOLEDにおける、10mA/cm²での動作電圧を示す。HTC-10は、-5.30eVのHOMO準位を有する。

20

【0350】

【表4】

表3：蛍光青色発光体を含むOLEDの性能

	正孔輸送化合物	金属錯体	10mA/cm ² でのU [V]
比較例1	HTC-10	HAT-CN	>10
実施例1	HTC-10	Cu(TFSI) ₂	6.9
実施例2	HTC-10	MC-24	6.3
実施例3	HTC-10	MC-6	5.3
実施例4	HTC-10	MC-27	5.4
実施例5	HTC-10	MC-29	5.2

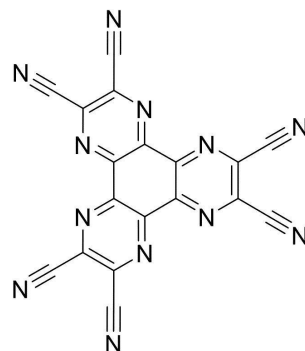
30

【0351】

比較例1では、最先端の材料であるHAT-CNを30体積%の濃度で使用した。HAT-CNは、下記に示す式を有する：

【0352】

【化32】



(HAT-CN)。

40

50

【0353】

HAT-CNは、 -8.83 eV のHOMOを有する。動作電圧は、 10 V 超である。

【0354】

実施例1では、正孔注入層は、金属錯体として Cu(TFSI)_2 を含む。動作電圧は、実質的に 6.9 V に改善される。

【0355】

実施例2では、正孔注入層は、異なる Cu(II) 錯体、すなわちMC-24を含む。実施例1と比較して、TFSIリガンドは、1個のトリフルオロメチルおよび1個の置換アリール基を含むアミドリリガンドによって置き換えられた。動作電圧は、さらに 6.3 V に改善される。

【0356】

実施例3では、正孔注入層は、MC-6を含む。実施例1と比較して、 Cu(II) カチオンは、 Mn(II) カチオンによって置き換えられた。実施例1と比較して、動作電圧は、 6.9 V から 5.3 V に改善される。

【0357】

実施例4では、正孔注入層は、 Mg 錯体を含む。実施例2と比較して、 Cu(II) カチオンは Mg(II) カチオンによって置き換えられた。動作電圧は、 6.3 V から 5.4 V に改善される。

【0358】

実施例5では、正孔注入層は、 Zn(II) 錯体を含む。実施例4と比較して、 Mg(II) カチオンは Zn(II) カチオンによって置き換えられ、アミドリリガンドはN-アリール基を含むリガンドによって置き換えられた。動作電圧は、まだ大量生産を許容できる範囲内である。

【0359】

表4では、蛍光青色発光体と、 70 体積%の正孔輸送化合物および 30 体積%の式(I)の金属錯体を含む正孔注入層と、を含むOLEDにおける、 10 mA/cm^2 での動作電圧を示す。

【0360】

【表5】

表4：蛍光青色発光体を含むOLEDの性能

	正孔輸送化合物	HOMO準位 [eV]	金属錯体	10 mA/cm^2 でのU [V]
比較例2	HTC-5	-5.10	HAT-CN	>10
比較例3	HTC-13	-5.67	HAT-CN	>10
実施例6	HTC-5	-5.10	MC-29	4.1
実施例7	HTC-6	-5.13	MC-29	4.1
実施例8	HTC-7	-5.13	MC-29	5.1
実施例9	HTC-9	-5.28	MC-29	5.7
実施例10	HTC-10	-5.30	MC-29	5.9
実施例11	HTC-13	-5.67	MC-29	7.0

【0361】

比較例2では、正孔注入層は、正孔輸送化合物HTC-5、および、 30 体積%のHAT-CNを含む。HAT-CNは、金属錯体を含まない。HTC-5は、アントラセン基を含む。HTC-5のHOMO準位は、 -5.10 eV である。動作電圧は、 10 V 超である。

【0362】

比較例 3 では、正孔注入層は、正孔輸送化合物 HTC - 13、および、30 体積%の HAT - CN を含む。HTC - 13 は、3 個のジベンゾフラニル基を含む。HOMO 準位は、 -5.67 eV であり、したがって比較例 2 に比べて真空準位からさらに離れていた。動作電圧は、 1.0 V 超である。

【0363】

実施例 6 では、正孔注入層は、HTC - 5 および金属錯体 MC - 29 を含む。動作電圧は、実質的に 4.1 V に低下する。

【0364】

実施例 7 では、正孔注入層は、HTC - 6 および金属錯体 MC - 29 を含む。HTC - 6 は、アントラセン基およびジベンゾフラニル基を含む。HOMO 準位は、 -5.13 eV であり、したがって比較例 2 に比べて真空準位からさらに離れている。動作電圧は、 4.1 V で変化しない。

10

【0365】

実施例 8 では、正孔注入層は、HTC - 7 および金属錯体 MC - 29 を含む。HTC - 7 は、アントラセン基およびジベンゾフラン基を含む。HOMO 準位は、 -5.13 eV であり、したがって実施例 6 に比べて真空準位からさらに離れている。動作電圧は、実施例 7 よりも少し高い。しかし、動作電圧は、比較例 2 に比べて実質的に低下する。

【0366】

実施例 9 では、正孔注入層は、HTC - 9 および金属錯体 MC - 29 を含む。HTC - 9 は、ジベンゾアクリジン基およびカルバゾール基を含む。HOMO 準位は、 -5.28 eV であり、したがって実施例 6 に比べて真空準位からさらに離れている。動作電圧は、実施例 8 よりも少し高い。しかし、動作電圧は、比較例 2 に比べて実質的に低下する。

20

【0367】

実施例 10 では、正孔注入層は、HTC - 10 および金属錯体 MC - 29 を含む。HTC - 10 は、2 個のカルバゾール基を含む。HOMO 準位は、 -5.30 eV であり、したがって実施例 9 に比べて真空準位からさらに離れている。しかし、動作電圧は、比較例 2 に比べて実質的に低下する。

【0368】

実施例 11 では、正孔注入層は、HTC - 13 および金属錯体 MC - 29 を含む。HTC - 13 は、3 個のジベンゾフラニル基を含む。HOMO 準位は、 -5.67 eV であり、したがって実施例 6 に比べて真空準位からさらに離れている。動作電圧は、実施例 10 よりも少し高い。しかし、動作電圧は、比較例 2 に比べて実質的に低下する。

30

【0369】

表 5 には、リン光緑色発光体と、正孔輸送化合物および 30 体積%の式 (II) の金属錯体を含む正孔注入層と、を含む OLED における、 10 mA/cm^2 での動作電圧が示されている。

【0370】

【表 6】

表 5 : リン光緑色発光体を含む OLED の性能

	正孔輸送化合物	HOMO 準位 [eV]	金属錯体	10 mA/cm^2 での U [V]
比較例 4	HTC - 5	-5.10	HAT - CN	> 1.0
実施例 12	HTC - 5	-5.10	MC - 29	4.5
比較例 5	HTC - 10	-5.30	HAT - CN	> 1.0
実施例 13	HTC - 10	-5.30	MC - 29	6.3

40

【0371】

比較例 4 では、正孔注入層は、正孔輸送化合物 HTC - 5 および 30 体積%の HAT -

50

CNを含む。HTC-5は、アントラセン基を含む。HTC-5のHOMO準位は、 -5.10 eV である。動作電圧は、 10 V 超である。

【0372】

実施例12では、正孔注入層は、HTC-5および金属錯体MC-29を含む。動作電圧は、実質的に 4.1 V に低下する。

【0373】

比較例5では、正孔注入層は、正孔輸送化合物HTC-10、および、30体積%のHAT-CNを含む。HTC-10は、2個のカルバゾール基を含む。HTC-10のHOMO準位は、 -5.30 eV である。動作電圧は、 10 V 超である。

【0374】

実施例13では、正孔注入層は、HTC-10および金属錯体MC-29を含む。動作電圧は、実質的に 6.3 V に低下する。

【0375】

表6には、蛍光青色発光体および正孔注入層を含むOLEDにおける、 10 mA/cm^2 での動作電圧が示されており、正孔注入層は、式(II)の金属錯体からなる第1の副層と、正孔輸送化合物からなる第2の副層と、を含む。

【0376】

比較例6では、第1の副層は、 3 nm の厚さを有する、最新技術の正孔注入材料としてHAT-CNを含む。第2の副層は、正孔輸送化合物HTC-6を含む。動作電圧は 10 V 超である。

【0377】

比較例7では、第1の副層は、HAT-CNを含み、第2の副層は、正孔輸送化合物HTC-7を含む。動作電圧は、 10 V 超である。

【0378】

比較例8では、第1の副層は、HAT-CNを含み、第2の副層は、正孔輸送化合物HTC-10を含む。動作電圧は、 10 V 超である。

【0379】

実施例14では、第1の副層は、 3 nm の厚さを有する金属錯体MC-29を含む。第2の副層は、正孔輸送化合物HTC-6を含む。動作電圧は、 4.0 V であり、これにより比較例6よりも実質的に改善される。

【0380】

実施例15~17では、第1の副層は、実施例14と同じである。第2の副層は、HTC-6よりも真空準位からさらに離れたHOMO準位を有する一連の正孔輸送化合物を含む。全ての実施例では、動作電圧は、比較例6、7および8よりも実質的に改善される。

【0381】

実施例18~20では、第1の副層は、金属錯体MC-27を含む。金属カチオンおよびリガンドについて、MC-27はMC-29と異なる(表2参照)。第2の副層は、ある範囲の正孔輸送化合物を含む。全ての実施例では、動作電圧は、比較例6、7および8よりも実質的に改善される。

【0382】

実施例21では、第1の副層は、金属錯体MC-30を含む。金属カチオンおよびリガンドについて、MC-30はMC-29と異なる(表2参照)。第2の副層は、HTC-7を含む。動作電圧は、 6.6 V であり、これにより比較例7よりも改善される。

【0383】

比較例9~11では、第1の副層は、 5 nm の厚さを有する、最新技術の正孔注入材料としてHAT-CNを含む。第2の副層は、ある範囲の正孔輸送化合物を含む。動作電圧は、 10 V 超である。

【0384】

実施例22では、第1の副層は、 5 nm の厚さを有する金属錯体MC-29を含む。第2の副層は、正孔輸送化合物HTC-6を含む。動作電圧は、 4.0 V であり、これによ

10

20

30

40

50

り比較例 9 よりも実質的に改善される。性能は、実施例 1 4 に匹敵する。

【 0 3 8 5 】

実施例 2 3 ~ 2 5 では、第 1 の副層は、実施例 2 2 と同じである。第 2 の副層は、H T C - 6 よりも真空準位からさらに離れた H O M O 準位を有する様々な正孔輸送化合物を含む。全ての実施例では、動作電圧は、比較例 9、1 0 および 1 1 よりも実質的に改善される。

【 0 3 8 6 】

実施例 2 6 および 2 7 では、第 1 の副層は、金属錯体 M C - 2 7 を含む。金属カチオンおよびリガンドについて、M C - 2 7 は M C - 2 9 と異なる（表 2 参照）。第 2 の副層は、様々な正孔輸送化合物を含む。全ての実施例では、動作電圧は、比較例 9、1 0 および 1 1 よりも実質的に改善される。

10

【 0 3 8 7 】

実施例 2 8 では、第 1 の副層は、金属錯体 M C - 3 0 を含む。金属カチオンおよびリガンドについて、M C - 3 0 は M C - 2 9 と異なる（表 2 参照）。第 2 の副層は、H T C - 7 を含む。動作電圧は、5 . 4 V であり、これにより比較例 1 0 よりも改善される。

【 0 3 8 8 】

要約すると、本発明の正孔注入層を含む O L E D について、動作電圧の実質的な改善が達成された。

【 0 3 8 9 】

動作電圧の低下は、特にモバイルデバイスにおいて、電力消費の低減およびバッテリー寿命の改善に有益であり得る。

20

【 0 3 9 0 】

30

40

50

【表 7】

表 6 : 正孔注入層 (HIL) を含む OLED の性能、ここで前記正孔注入層は第 1 の副層および第 2 の副層を含む

	第 1 の副層の組成	第 1 の副層の厚さ [nm]	第 2 の副層の組成	第 2 の副層の正孔輸送化合物の HOMO 準位 [eV]	第 2 の副層の厚さ [nm]	H T L の組成	1 0 m A / c m ² での U [V]
比較例 6	HAT-CN	3	HTC-6	-5.10	7	H T C - 6	> 1 0
比較例 7	HAT-CN	3	HTC-7	-5.28	7	H T C - 7	> 1 0
比較例 8	HAT-CN	3	HTC-10	-5.30	7	H T C - 10	> 1 0
実施例 14	MC-29	3	HTC-6	-5.10	7	H T C - 6	4 . 0
実施例 15	MC-29	3	HTC-5	-5.13	7	H T C - 5	4 . 4

10

20

30

40

50

	第1の副層の組成	第1の副層の厚さ [nm]	第2の副層の組成	第2の副層の正孔輸送化合物のHOMO準位 [eV]	第2の副層の厚さ [nm]	HTLの組成	10 mA/cm ² でのU [V]
						5	
実施例 16	MC-29	3	HTC-7	-5.28	7	HTC-7	4.5
実施例 17	MC-29	3	HTC-10	-5.30	7	HTC-10	4.6
実施例 18	MC-27	3	HTC-6	-5.10	7	HTC-6	4.1
実施例 19	MC-27	3	HTC-5	-5.13	7	HTC-5	4.7
実施例 20	MC-27	3	HTC-7	-5.28	7	HTC-7	4.4
実施例 21	MC-30	3	HTC-7	-5.28	7	HTC-7	6.6
比較例 9	HAT-CN	5	HTC-6	-5.10	5	HTC-6	> 10
比較例 10	HAT-CN	5	HTC-7	-5.28	5	HTC-7	> 10
比較例 11	HAT-CN	5	HTC-10	-5.30	5	HTC-10	> 10
実施例 22	MC-29	5	HTC-6	-5.10	5	HTC-6	4.0

10

20

30

40

50

	第1の副層の組成	第1の副層の厚さ [nm]	第2の副層の組成	第2の副層の正孔輸送化合物のHOMO準位 [eV]	第2の副層の厚さ [nm]	HTLの組成	10 mA/cm ² でのU [V]
						6	
実施例 23	MC-29	5	HTC-5	-5.13	5	HTC-5	4.2
実施例 24	MC-29	5	HTC-7	-5.28	5	HTC-7	4.4
実施例 25	MC-29	5	HTC-10	-5.30	5	HTC-10	4.4
実施例 26	MC-27	5	HTC-5	-5.13	5	HTC-5	4.9
実施例 27	MC-27	5	HTC-7	-5.28	5	HTC-7	4.6
実施例 28	MC-30	5	HTC-7	-5.28	5	HTC-7	5.4

10

20

30

【0391】

上記の詳細な実施形態における要素および特徴の特定の組み合わせは例示的なものに過ぎず；これらの教示を、当該教示および参照により組み込まれる特許/出願における他の教示と交換し、置き換えることも明示的に企図される。当業者が認識するように、本明細書中に記載されるものの変形、修正および他の実施形態は、特許請求される本発明の趣旨および範囲から逸脱することなく、当業者に想起され得る。したがって、前述の説明は単なる例示であり、限定を意図するものではない。特許請求の範囲において、用語「有する (comprising)」は、他の要素またはステップを除外せず、不定冠詞「a」または「an」は、複数状態を除外しない。特定の手段が相互に異なる従属請求項に記載されているという単なる事実は、これらの手段の組み合わせが有利に使用され得ないことを示すものではない。本発明の範囲は、下記の特許請求の範囲およびその同等物において定義される。さらに、説明および特許請求の範囲で使用される参照符号は、主張される本発明の範囲

40

50

を限定しない。

【図面の簡単な説明】

【0392】

【図1】本発明の例示的な一実施形態の有機電子デバイスの概略断面図である。

【図2】本発明の例示的な一実施形態の有機発光ダイオード（OLED）の概略断面図である。

【図3】本発明の例示的な一実施形態のOLEDの概略断面図である。

10

20

30

40

50

【図面】

【図 1】

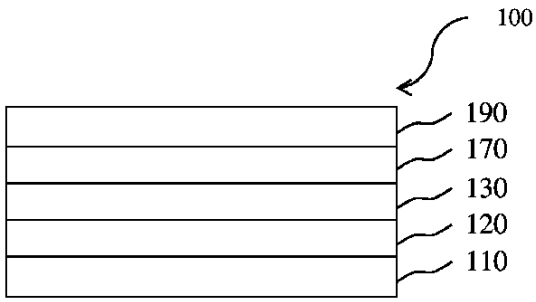


Fig.1

【図 2】

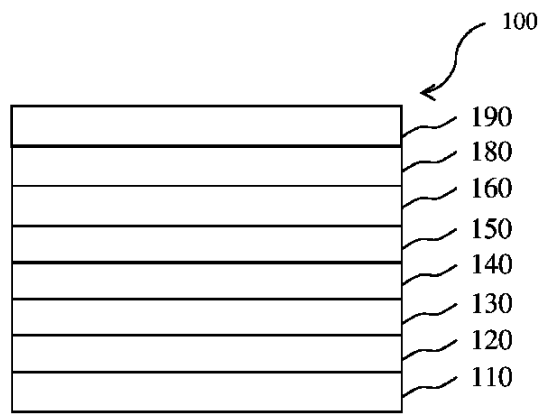


Fig.2

【図 3】

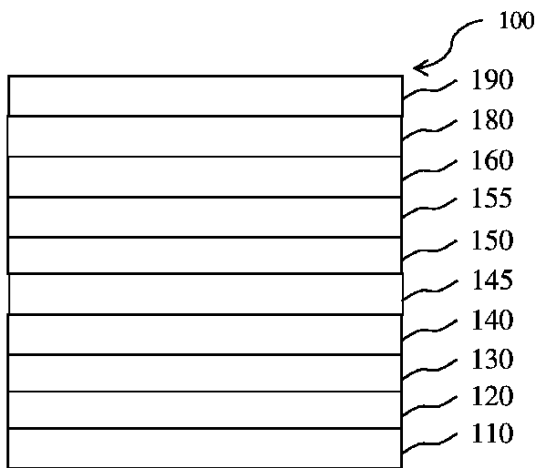


Fig.3

10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

H 1 0 K	50/15	(2023.01)	H 1 0 K	50/15
H 1 0 K	50/17	(2023.01)	H 1 0 K	50/17
H 1 0 K	59/10	(2023.01)	H 1 0 K	59/10
H 1 0 K	101/30	(2023.01)	H 1 0 K	101:30
H 1 0 K	101/40	(2023.01)	H 1 0 K	101:40

ドイツ連邦共和国, 0 1 0 9 9 ドレスデン, エリーザベト - ベル - シュトラーセ 9, ツェー / オ
ー ノヴァレッド ゲーエムベーハー

(72)発明者

フンメルト, マルクス

ドイツ連邦共和国, 0 1 0 9 9 ドレスデン, エリーザベト - ベル - シュトラーセ 9, ツェー / オ
ー ノヴァレッド ゲーエムベーハー

(72)発明者

バク, ムー ジン

ドイツ連邦共和国, 0 1 0 9 9 ドレスデン, エリーザベト - ベル - シュトラーセ 9, ツェー / オ
ー ノヴァレッド ゲーエムベーハー

(72)発明者

ウヴァロフ, ヴラディーミル

ドイツ連邦共和国, 0 1 0 9 9 ドレスデン, エリーザベト - ベル - シュトラーセ 9, ツェー / オ
ー ノヴァレッド ゲーエムベーハー

(72)発明者

シュトイデル, アネッテ

ドイツ連邦共和国, 0 1 0 9 9 ドレスデン, エリーザベト - ベル - シュトラーセ 9, ツェー / オ
ー ノヴァレッド ゲーエムベーハー

審査官 横川 美穂

(56)参考文献

特表 2 0 1 8 - 5 3 0 9 1 0 (J P , A)

特表 2 0 1 8 - 5 2 5 8 3 5 (J P , A)

国際公開第 2 0 1 8 / 1 2 2 0 7 1 (W O , A 1)

国際公開第 2 0 1 9 / 0 3 5 2 6 8 (W O , A 1)

(58)調査した分野

(Int.Cl., D B 名)

H 1 0 K 1 0 / 0 0 - 1 0 2 / 2 0

C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)