

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2009-76509  
(P2009-76509A)

(43) 公開日 平成21年4月9日(2009.4.9)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
<b>H01L 51/50 (2006.01)</b>	H05B 33/14 B	3K107
<b>C09K 11/06 (2006.01)</b>	H05B 33/22 D	
	C09K 11/06 690	
	C09K 11/06 660	

審査請求 未請求 請求項の数 9 O L (全 124 頁)

(21) 出願番号	特願2007-241625 (P2007-241625)	(71) 出願人	306037311 富士フイルム株式会社 東京都港区西麻布2丁目26番30号
(22) 出願日	平成19年9月18日 (2007.9.18)	(74) 代理人	100079049 弁理士 中島 淳
		(74) 代理人	100084995 弁理士 加藤 和詳
		(74) 代理人	100085279 弁理士 西元 勝一
		(74) 代理人	100099025 弁理士 福田 浩志
		(72) 発明者	佐藤 祐 神奈川県足柄上郡開成町牛島577番地 富士フイルム株式会社内

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機電界発光素子

(57) 【要約】

【課題】本発明の課題は、発光効率が高く耐久性に優れた有機EL素子を提供することである。

【解決手段】一対の電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、前記発光層と陽極との間にカルベン化合物を含有する層を有し、前記発光層が少なくとも一種の電子輸送性材料と少なくとも一種の正孔輸送性材料とを含み、前記電子輸送性材料と前記正孔輸送性材料の少なくとも一方が発光材料であり、前記発光層における前記電子輸送性材料の濃度が陰極側から前記陽極側に向かって濃度が減少していることを特徴とする。

【選択図】なし

## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

一対の電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、前記発光層と陽極との間にカルベン化合物を含有する層を有し、前記発光層が少なくとも一種の電子輸送性材料と少なくとも一種の正孔輸送性材料とを含み、前記電子輸送性材料と前記正孔輸送性材料の少なくとも一方が発光材料であり、前記発光層における前記電子輸送性材料の濃度が陰極側から前記陽極側に向かって減少していることを特徴とする有機電界発光素子。

## 【請求項 2】

前記電子輸送性材料が発光材料であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機電界発光素子。 10

## 【請求項 3】

前記正孔輸送性材料が発光材料であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機電界発光素子。

## 【請求項 4】

前記カルベン化合物を含有する層が前記発光層に接していることを特徴とする請求項 1 ~ 請求項 3 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

## 【請求項 5】

前記発光層の前記陽極側界面付近の領域における前記電子輸送性材料の濃度が、前記発光層の前記陰極側界面付近の領域における前記電子輸送性材料の濃度に対して 0 % 以上 50 % 以下であることを特徴とする請求項 1 ~ 請求項 4 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。 20

## 【請求項 6】

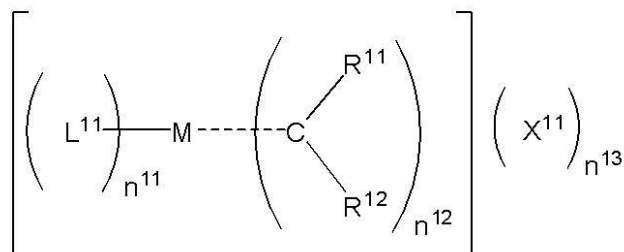
前記発光層中における前記電子輸送性材料の濃度が、前記陽極側界面付近の領域で 0 % 以上 30 % 以下であることを特徴とする請求項 1 ~ 請求項 5 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

## 【請求項 7】

前記カルベン化合物が下記一般式 (C1) で表される化合物であることを特徴とする請求項 1 ~ 請求項 6 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子：

## 【化 1】

一般式 (C1)



(式中、Mは遷移金属原子又は遷移金属イオンを表す。R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>は、水素原子または置換基を表し、R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>は、独立にMに結合してもよい。R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>は、それぞれ結合して環構造を形成しても良い。L<sup>11</sup>は配位子を表し、R<sup>11</sup>及びR<sup>12</sup>の少なくとも一つと結合してもよい。X<sup>11</sup>は対イオンを表す。n<sup>11</sup>は0~5の整数を表し、n<sup>12</sup>は1~6の整数を表し、n<sup>13</sup>は0~3の整数を表す。Cはカルベン炭素を表し、該カルベン炭素はR<sup>11</sup>及びR<sup>12</sup>と結合し、Mに配位する。)

## 【請求項 8】

前記一般式 (C1) で表されるカルベン化合物が、下記一般式 (C2) で表される化合物であることを特徴とする請求項 7 に記載の有機電界発光素子：

10

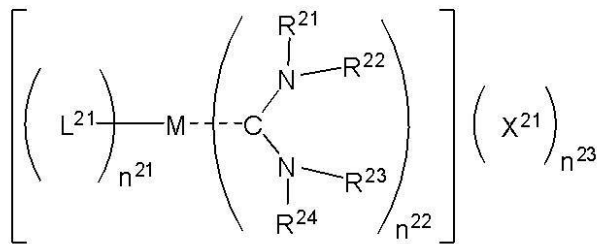
20

30

40

## 【化 2】

## 一般式 (C2)



10

(式中、Mは遷移金属原子または遷移金属イオンを表す。R<sup>21</sup>、R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、及びR<sup>24</sup>は、水素原子または置換基を表し、R<sup>21</sup>、R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、及びR<sup>24</sup>は独立にMに結合してもよい。R<sup>21</sup>、R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、及びR<sup>24</sup>は、それぞれ結合して環構造を形成してもよい。L<sup>21</sup>は配位子を表し、R<sup>21</sup>、R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、及びR<sup>24</sup>の少なくとも一つと結合してもよい。X<sup>21</sup>は対イオンを表す。n<sup>21</sup>は0～5の整数を表し、n<sup>22</sup>は1～6の整数を表し、n<sup>23</sup>は0～3の整数を表す。Cはカルベン炭素を表し、該カルベン炭素は2つの窒素原子と結合し、Mに配位する。)

## 【請求項 9】

前記発光層が燐光発光材料を含有することを特徴とする請求項1～請求項8のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

20

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0001】

本発明は有機電界発光素子(以後、有機EL素子と略記する。)に関する。特に、発光効率が高く耐久性に優れた有機電界発光素子に関する。

## 【背景技術】

## 【0002】

有機EL素子は、発光層もしくは発光層を含む複数の有機層と、有機層を挟んだ対向電極とから構成されている。有機EL素子は、陰極から注入された電子と陽極から注入された正孔とが有機層において再結合し、生成した励起子からの発光、及び前記励起子からエネルギー移動して生成した他の分子の励起子からの発光の少なくとも一方を利用した発光を得るための素子である。

30

## 【0003】

これまで有機EL素子は、機能を分離した積層構造を用いることにより、輝度及び素子効率が大きく改善され発展してきた。例えば、サイエンス(Science), 267巻, 3号, 1995年, 1332頁(非特許文献1)に記載されているが、正孔輸送層と発光兼電子輸送層を積層した二層積層型素子や正孔輸送層、発光層および電子輸送層とを積層した三層積層型素子や、正孔輸送層、発光層、正孔阻止層および電子輸送層とを積層した四層積層型素子がよく用いられる。

40

## 【0004】

しかしながら、有機EL素子の実用化には、発光効率を高めることおよび駆動耐久性を高めることなど未だ多くの課題が残されている。特に発光効率を高めることは、消費電力が低減でき、さらに駆動耐久性の点でも有利となるので、これまで多くの改良手段が開示されている。しかしながら、一般に電荷ブロック層を設ける等により発光効率を高めた素子は駆動耐久性が短い欠点を有し、また、駆動耐久性に優れた素子は発光効率が低い欠点を有することが多く、発光効率を高めることと駆動耐久性を高めることを両立させることは容易ではなかった。

## 【0005】

素子の発光効率を高める方法としては様々な方法が知られているが、駆動電圧を低下さ

50

せることも消費電力の低下に効果が高い。駆動電圧を低下させる手法としては、例えば、電荷移動度が高い輸送材料を用いる方法が知られており、正孔輸送性に優れる材料としてカルベン化合物が知られている（特許文献1）。カルベン化合物は一般的に正孔輸送性に富み、これを正孔輸送層に用いることで発光効率向上と駆動電圧低下の効果が得られる。しかしながら、カルベン化合物は一般的に電子に対する安定性が悪い場合が多く、発光層に近接させて用いると発光効率の向上、駆動電圧低下と同時に駆動耐久性の悪化を引き起こしてしまうことが分かってきた。カルベン化合物を正孔輸送層に用いる場合には電子が流れて来ない層に用いる必要があり、カルベン化合物の利用方法は限られているのが現状である。

【0006】

発光効率向上手段として、発光層を構成する材料の膜厚方向の濃度に勾配を設ける手法が提案されている（例えば、特許文献2参照。）。電子輸送性化合物と正孔輸送性化合物が発光層を構成する素子において、電子輸送性の化合物が陰極から陽極方向へ減少し、正孔輸送性の化合物が陰極から陽極方向へ増加する構成が記載されている。陰極から注入された電荷は電子輸送性化合物上をホッピングで進んで行くが、電子輸送性化合物の濃度が減少しているために、陽極に近づくほど電子の移動が制限される。同じく陽極から注入された正孔は正孔輸送性化合物上をホッピングで進んで行くが、正孔輸送性化合物の濃度が陰極方向へ行くほど減少しているために、陰極に近づくほど正孔の移動が制限される。

【非特許文献1】サイエンス (Science), 267巻, 3号, 1995年, 1332頁

【特許文献1】特開2007-96259

【特許文献2】特開2001-155862

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0007】

本発明は、発光効率が高く耐久性に優れた有機EL素子を提供することを目的とする。

【課題を解決するための手段】

【0008】

本発明の上記課題は、下記的手段によって解決する事を見出された。

< 1 > 一对の電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、前記発光層と陽極との間にカルベン化合物を含有する層を有し、前記発光層が少なくとも一種の電子輸送性材料と少なくとも一種の正孔輸送性材料とを含み、前記電子輸送性材料と前記正孔輸送性材料の少なくとも一方が発光材料であり、前記発光層における前記電子輸送性材料の濃度が陰極側から前記陽極側に向かって濃度が減少していることを特徴とする有機電界発光素子。

< 2 > 前記電子輸送性材料が発光材料であることを特徴とする< 1 >に記載の有機電界発光素子。

< 3 > 前記正孔輸送性材料が発光材料であることを特徴とする< 1 >に記載の有機電界発光素子。

< 4 > 前記カルベン化合物を含有する層が前記発光層に接していることを特徴とする< 1 > ~ < 3 > のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

< 5 > 前記発光層の前記陽極側界面付近の領域における前記電子輸送性材料の濃度が、前記発光層の前記陰極側界面付近の領域における前記電子輸送性材料の濃度に対して0%以上50%以下であることを特徴とする< 1 > ~ < 4 > のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

< 6 > 前記発光層中における前記電子輸送性材料の濃度が、前記陽極側界面付近の領域で0質量%以上30質量%以下であることを特徴とする< 1 > ~ < 5 > のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

< 7 > 前記カルベン化合物が下記一般式(C1)で表される化合物であることを特徴とする< 1 > ~ < 6 > のいずれか1項に記載の有機電界発光素子：

10

20

30

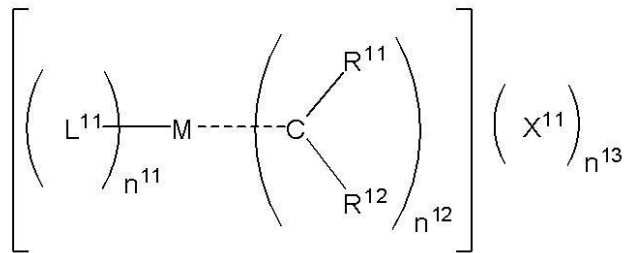
40

50

【0009】

【化1】

一般式(C1)



10

【0010】

(式中、Mは遷移金属原子又は遷移金属イオンを表す。R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>は、水素原子または置換基を表し、R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>は、独立にMに結合してもよい。R<sup>11</sup>、R<sup>12</sup>は、それぞれ結合して環構造を形成しても良い。L<sup>11</sup>は配位子を表し、R<sup>11</sup>及びR<sup>12</sup>の少なくとも一つと結合してもよい。X<sup>11</sup>は対イオンを表す。n<sup>11</sup>は0～5の整数を表し、n<sup>12</sup>は1～6の整数を表し、n<sup>13</sup>は0～3の整数を表す。Cはカルベン炭素を表し、該カルベン炭素はR<sup>11</sup>及びR<sup>12</sup>と結合し、Mに配位する。)

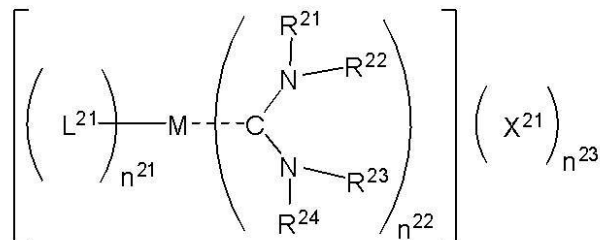
<8> 前記一般式(C1)で表されるカルベン化合物が、下記一般式(C2)で表される化合物であることを特徴とする<7>に記載の有機電界発光素子：

20

【0011】

【化2】

一般式(C2)



30

【0012】

(式中、Mは遷移金属原子または遷移金属イオンを表す。R<sup>21</sup>、R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、及びR<sup>24</sup>は、水素原子または置換基を表し、R<sup>21</sup>、R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、及びR<sup>24</sup>は独立にMに結合してもよい。R<sup>21</sup>、R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、及びR<sup>24</sup>は、それぞれ結合して環構造を形成しても良い。L<sup>21</sup>は配位子を表し、R<sup>21</sup>、R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、及びR<sup>24</sup>の少なくとも一つと結合してもよい。X<sup>21</sup>は対イオンを表す。n<sup>21</sup>は0～5の整数を表し、n<sup>22</sup>は1～6の整数を表し、n<sup>23</sup>は0～3の整数を表す。Cはカルベン炭素を表し、該カルベン炭素は2つの窒素原子と結合し、Mに配位する。)

<9> 前記発光層が燐光発光材料を含有することを特徴とする<1>～<8>のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

40

【0013】

著者らは、高い正孔輸送性を持つカルベン化合物は電子に対する安定性が不十分な場合が多いことを見出し、解決方法を鋭意検討した結果、発光層の構成材料に濃度勾配を持たせることで、カルベン化合物層への電子の漏れが抑制され、素子の耐久性を悪化させることなく、カルベン化合物の優れた輸送性を発揮させることが可能であることを見出し、本発明に至ったものである。

【発明の効果】

【0014】

本発明により、発光効率が高く耐久性に優れた有機EL素子が提供される。

50

特に、燐光発光材料を用いて高い発光効率で優れた駆動耐久性を有する有機EL素子が提供される。

【発明を実施するための最良の形態】

【0015】

本発明の有機EL素子は、一对の電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、前記発光層と陽極との間にカルベン化合物を含有する層を有し、前記発光層が少なくとも一種の電子輸送性材料と少なくとも一種の正孔輸送性材料とを含み、前記電子輸送性材料と前記正孔輸送性材料の少なくとも一方が発光材料であり、前記発光層における前記電子輸送性材料の濃度が陰極側から前記陽極側に向かって濃度が減少していることを特徴とする。本発明においては、「陰極側から前記陽極側に向かって濃度が減少している」ことが意味するところは、総体的に、陰極側から陽極側に向かって減少していることが本発明の主旨であって、連続的に変化しても、階段状に変化しても良い。あるいは、一部で増加または減少している領域があっても総体的に減少していれば本願の意図する範囲内である。本願においては、連続的に濃度が変化するパターンが好ましい。

10

【0016】

好ましくは、前記発光層における前記電子輸送性材料の濃度が陰極側から前記陽極側に向かって漸減し、前記発光層の前記陽極側界面付近の領域における前記電子輸送性材料の濃度が、前記発光層の前記陰極側界面付近の領域における前記電子輸送性材料の濃度に対して0%以上50%以下である。より好ましくは0%以上20%以下である。

20

【0017】

好ましくは、前記カルベン化合物を含有する層が前記発光層に接している。

好ましくは、前記発光層が燐光発光材料を含有する。

【0018】

本発明におけるカルベン化合物含有層は発光層の陽極側に配されており、その優れた正孔輸送性により駆動電圧の低下が実現される。本発明における発光層が上記のように発光層内における電子輸送性材料の濃度が傾斜していて、陰極側より陽極側に向かって漸減する構成を有する。本発明に於ける傾斜構造を有する発光層においては、電子および正孔の発光層内における移動バランスが好ましく調整され、発光層全域に涉って電子および正孔効率が再結合できるため、発光効率が向上し駆動電圧が低下する。さらに、陰極より注入された電子が発光層内で効率よく再結合するので、電子が発光層から陽極側に漏れ出すことがなくなる。従ってカルベン化合物を含有する層に対する電子によるダメージがなくなり、駆動耐久性が飛躍的に向上する。特にカルベン化合物が発光層に隣接している場合、本発明の効果は顕著に現れる。

30

【0019】

1. 有機EL素子構造

本発明における有機化合物層の積層の形態としては、陽極側から、正孔輸送層、発光層、電子輸送層の順に積層されている態様が好ましい。更に、正孔輸送層と陽極との間に正孔注入層、および電子輸送層と陰極との間に電子注入層を有しても良い。発光層と電子輸送層との間に発光層より漏れ出す正孔をブロックする電子輸送性中間層を設けても良い。

40

本発明におけるカルベン化合物含有層は、陽極と発光層との間、好ましくは正孔注入層もしくは正孔輸送層と発光層との間に配される。

【0020】

本発明に係る有機EL素子は、例えば以下のような層構成を採用することができるが、これらに限定されず、目的等に応じて適宜決めればよい。

【0021】

- ・陽極 / 発光層 / 陰極
- ・陽極 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 陰極
- ・陽極 / 正孔輸送層 / 発光層 / ブロック層 / 電子輸送層 / 陰極
- ・陽極 / 正孔輸送層 / 発光層 / ブロック層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極

50

- ・陽極 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / ブロック層 / 電子輸送層 / 陰極
- ・陽極 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / ブロック層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極

本発明の有機電界発光素子における有機化合物層の好適な態様は、陽極側から順に、少なくとも、(1)正孔注入層、正孔輸送層(正孔注入層と正孔輸送層は兼ねても良い)、カルベン化合物含有層、発光層、電子輸送層、及び電子注入層(電子輸送層と電子注入層は兼ねても良い)、を有する態様、(2)正孔注入層、正孔輸送層(正孔注入層と正孔輸送層は兼ねても良い)、カルベン化合物含有層、発光層、電子輸送性中間層、電子輸送層、及び電子注入層(電子輸送層と電子注入層は兼ねても良い)を有する態様である。

#### 【0022】

また、上記電子輸送性中間層は、発光層への電子注入を促進する機能及び正孔をブロックする機能の少なくとも一方を有することが好ましい。

上記の正孔注入促進、電子注入促進、正孔ブロック、電子ブロック、励起子ブロックといった機能を有効に発現させるためには、カルベン化合物含有層および電子輸送性中間層は、発光層に隣接していることが好ましい。

尚、各層は複数の二次層に分かれていてもよい。

#### 【0023】

本発明における有機EL素子は、共振器構造を有しても良い。例えば、透明基板上に、屈折率の異なる複数の積層膜よりなる多層膜ミラー、透明または半透明電極、発光層、および金属電極を重ね合わせて有する。発光層で生じた光は多層膜ミラーと金属電極を反射板としてその間で反射を繰り返し共振する。

別の好ましい態様では、透明基板上に、透明または半透明電極と金属電極がそれぞれ反射板として機能して、発光層で生じた光はその間で反射を繰り返し共振する。

共振構造を形成するためには、2つの反射板の有効屈折率、反射板間の各層の屈折率と厚みから決定される光路長を所望の共振波長の得るのに最適な値となるよう調整される。第一の態様の場合の計算式は特開平9-180883号明細書に記載されている。第二の態様の場合の計算式は特開2004-127795号明細書に記載されている。

#### 【0024】

有機化合物層を構成する各層は、蒸着法やスパッタ法等の乾式製膜法、転写法、印刷法、塗布法、インクジェット法、およびスプレー法等いずれによっても好適に形成することができる。

#### 【0025】

次に、本発明の有機EL素子を構成する要素について詳細に説明する。

#### 【0026】

##### 2. 発光層

発光層は、電界印加時に、陽極、正孔注入層、正孔輸送層から正孔を受け取り、陰極、電子注入層、電子輸送層から電子を受け取り、正孔と電子の再結合の場を提供して発光させる機能を有する層である。

本発明に於ける発光層は、少なくとも一種の電子輸送性材料と少なくとも一種の正孔輸送性材料とを含み、前記電子輸送性材料と前記正孔輸送性材料の少なくとも一方が発光材料であり、前記発光層における前記電子輸送性材料の濃度が陰極側から前記陽極側に向かって濃度が減少していることを特徴とする。

電子輸送性材料としては電子輸送性発光材料および/あるいは電子輸送性ホスト材料が用いられる。正孔輸送性材料としては正孔輸送性発光材料および/あるいは正孔輸送性ホスト材料が用いられる。本発明においては、好ましくは、電子輸送性発光材料が上記前記濃度傾斜する電子輸送性材料である。

#### 【0027】

発光層中における前記電子輸送性材料の濃度は、前記陽極側界面付近の領域で0質量%以上30質量%以下が好ましく、より好ましくは0質量%以上10質量%以下である。

なお、本願明細書において、「発光層の陰極側界面付近の領域」とは、発光層の陰極側

10

20

30

40

50

界面から発光層全体の厚みの10%の厚みの領域を指すものと定義され、「発光層の陽極側界面付近の領域」とは、発光層の陽極側界面から発光層全体の厚みの10%の厚みの領域を指すものと定義される。また、その領域における濃度とは、その領域における平均濃度を指すものとして定義される。さらに、「発光層の陰極側（陽極側）界面付近の領域」における各材料の濃度は、飛行時間型二次イオン質量分析（TOF-SIMS）、エッチングX線光電子分光分析（XPS/ESCA）などの方法によって測定することができる。

陽極側界面付近の領域における前記電子輸送性材料の濃度が、陰極側界面付近の領域における前記電子輸送性材料の濃度に対して50%以上だと、濃度傾斜が不十分で再結合せずに発光層を通過する電子量が増えてしまい、カルベン化合物層に悪影響があるため好ましく無い。また、陽極側界面付近の領域における前記電子輸送性材料の濃度が前発光層組成の30%以上だと、陽極側でも電子輸送性が十分に制限されず、電子輸送性材料に濃度勾配をつけた効果が得られにくくなるため好ましく無い。

【0028】

本発明に於ける発光材料は、電子輸送性発光材料もしくは正孔輸送性発光材料である。

【0029】

（電子輸送性発光材料）

本発明に用いられる電子輸送性発光材料は、好ましくは燐光発光材料である。

電子輸送性燐光発光材料としては、オルトメタル化金属錯体、又はポルフィリン金属錯体が挙げられる。

オルトメタル化金属錯体とは、例えば山本明夫著「有機金属化学 - 基礎と応用 -」、150頁、232頁、裳華房社（1982年発行）やH. Yersin著「Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds」、71頁～77頁、135頁～146頁、Springer-Verlag社（1987年発行）等に記載されている化合物群の総称である。

【0030】

上記オルトメタル化金属錯体を形成する配位子としては、種々のものがあり、上記文献にも記載されているが、その中でも好ましい配位子としては、2-フェニルピリジン誘導体、7,8-ベンゾキノリン誘導体、2-(2-チエニル)ピリジン誘導体、2-(1-ナフチル)ピリジン誘導体、および2-フェニルキノリン誘導体等が挙げられる。これらの誘導体は必要に応じて置換基を有してもよい。また、上記オルトメタル化金属錯体は、上記配位子のほかに、他の配位子を有していてもよい。

オルトメタル化金属錯体は、Inorg Chem., 1991年, 30号, 1685頁、同1988年, 27号, 3464頁、同1994年, 33号, 545頁、Inorg. Chim. Acta, 1991年, 181号, 245頁、J. Organomet. Chem., 1987年, 335号, 293頁、J. Am. Chem. Soc. 1985年, 107号, 14頁-31頁等、種々の公知の手法で合成することができる。

【0031】

また、ポルフィリン金属錯体の中ではポルフィリン白金錯体が好ましい。

本発明に用いられる電子輸送性燐光発光材料は1種単独で使用してもよいし、2種以上を併用してもよい。また、蛍光発光材料と燐光発光材料を同時に用いてもよい。

【0032】

本発明に用いられる電子輸送性燐光発光材料として特に好ましくは、3座以上の配位子を有する金属錯体である。

【0033】

本発明中の前記3座以上の配位子を有する金属錯体について説明する。

該金属錯体において金属イオンに配位する原子は特に限定されないが、酸素原子、窒素原子、炭素原子、硫黄原子又はリン原子が好ましく、酸素原子、窒素原子又は炭素原子がより好ましく、窒素原子又は炭素原子が更に好ましい。

【0034】

10

20

30

40

50



金属錯体中の金属イオンは、特に限定されないが、発光効率向上、耐久性向上、駆動電圧低下の観点から、遷移金属イオン、希土類金属イオンであることが好ましく、より好ましくは、イリジウムイオン、白金イオン、金イオン、レニウムイオン、タングステンイオン、ロジウムイオン、ルテニウムイオン、オスミウムイオン、パラジウムイオン、銀イオン、銅イオン、コバルトイオン、亜鉛イオン、ニッケルイオン、鉛イオン、アルミニウムイオン、ガリウムイオン、希土類金属イオン（例えば、ユーロピウムイオン、ガドリニウムイオン、またはテルビウムイオンなど）が好ましく、更に好ましくは、イリジウムイオン、白金イオン、金イオン、レニウムイオン、タングステンイオン、パラジウムイオン、亜鉛イオン、アルミニウムイオン、ガリウムイオン、ユーロピウムイオン、カドリニウムイオン、またはテルビウムイオンであり、該金属錯体を発光材料として用いる場合には、イリジウムイオン、白金イオン、レニウムイオン、タングステンイオン、ユーロピウムイオン、ガドリニウムイオン、またはテルビウムイオンが特に好ましく、該金属錯体を電荷輸送材料や発光層中のホスト材料として用いる場合には、イリジウムイオン、白金イオン、パラジウムイオン、亜鉛イオン、アルミニウムイオン、またはガリウムイオンが特に好ましい。

10

20

30

40

**【0035】**

本発明における3座以上の配位子を有する金属錯体としては、発光効率向上、耐久性向上の観点から、3座以上6座以下の配位子を有する金属錯体が好ましく、イリジウムイオンに代表される6配位型錯体を形成しやすい金属イオンの場合には、3座、4座、または6座の配位子を有する金属錯体がより好ましく、白金イオンに代表される4配位型錯体を形成しやすい金属イオンの場合には、3座または4座の配位子を有する金属錯体がより好ましく、4座の配位子を有する金属錯体が更に好ましい。

**【0036】**

本発明における金属錯体の配位子は発光効率向上、耐久性向上の観点から、鎖状、又は環状であることが好ましく、中心金属（例えば、後述する一般式（I）で表される化合物の場合であれば $M^{1+}$ を表す。）に窒素で配位する含窒素ヘテロ環（例えば、ピリジン環、キノリン環、ピリミジン環、ピラジン環、ピロール環、イミダゾール環、ピラゾール環、オキサゾール環、チアゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、またはトリアゾール環など）を少なくとも一つ有することが好ましい。該含窒素ヘテロ環としては、含窒素6員ヘテロ環、含窒素5員ヘテロ環であることがより好ましい。これらのヘテロ環は他の環と縮合環を形成してもよい。

**【0037】**

金属錯体の配位子が鎖状であるとは、金属錯体の配位子が環状構造をとらないことを意味する（例えば、ターピリジル配位子、2,6-ジフェニルピリジン配位子など。）。また、金属錯体の配位子が環状であるとは、金属錯体中の複数の配位子が互いに結合して、閉じた構造形成することを意味する（例えば、フタロシアニン配位子、クラウンエーテル配位子など。）。

**【0038】**

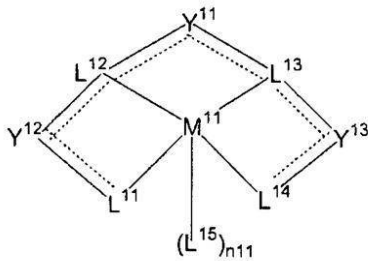
本発明における金属錯体としては、以下に詳述する一般式（I）、一般式（II）または一般式（III）で表される化合物であることが好ましい。

**【0039】**

先ず、一般式（I）で表される化合物について説明する。

**【0040】**

## 【化 3】



一般式(I)

10

## 【0041】

一般式(I)中、 $M^{11}$ は金属イオンを表し、 $L^{11} \sim L^{15}$ はそれぞれ $M^{11}$ に配位する配位子を表す。 $L^{11}$ と $L^{14}$ との間に原子群がさらに存在して環状配位子を形成してもよい。 $L^{15}$ は $L^{11}$ 及び $L^{14}$ の両方と結合して環状配位子を形成してもよい。 $Y^{11}$ 、 $Y^{12}$ 、 $Y^{13}$ はそれぞれ連結基、単結合、または二重結合を表す。また、 $Y^{11}$ 、 $Y^{12}$ 、又は $Y^{13}$ が連結基である場合、 $L^{11}$ と $Y^{12}$ 、 $Y^{12}$ と $L^{12}$ 、 $L^{12}$ と $Y^{11}$ 、 $Y^{11}$ と $L^{13}$ 、 $L^{13}$ と $Y^{13}$ 、 $Y^{13}$ と $L^{14}$ の間の結合は、それぞれ独立に、単結合又は二重結合を表す。 $n^{11}$ は0~4を表す。 $M^{11}$ と $L^{11} \sim L^{15}$ との結合は、それぞれ配位結合、イオン結合、共有結合のいずれでもよい。

20

## 【0042】

一般式(I)で表される化合物について詳細に説明する。

一般式(I)中、 $M^{11}$ は金属イオンを表す。金属イオンとしては特に限定されないが、2価または3価の金属イオンが好ましい。2価または3価の金属イオンとしては、白金イオン、イリジウムイオン、レニウムイオン、パラジウムイオン、ロジウムイオン、ルテニウムイオン、銅イオン、ユーロピウムイオン、ガドリニウムイオン、またはテルビウムイオンが好ましく、白金イオン、イリジウムイオン、またはユーロピウムイオンがより好ましく、白金イオン、イリジウムイオンがさらに好ましく、白金イオンが特に好ましい。

## 【0043】

一般式(I)中、 $L^{11}$ 、 $L^{12}$ 、 $L^{13}$ 、及び $L^{14}$ は、それぞれ独立に、 $M^{11}$ に配位する配位子を表す。 $L^{11}$ 、 $L^{12}$ 、 $L^{13}$ 、及び $L^{14}$ に含まれ、かつ、 $M^{11}$ に配位する原子としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、炭素原子、又はリン原子が好ましく、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、又は炭素原子がより好ましく、窒素原子、酸素原子、又は炭素原子が更に好ましい。

30

## 【0044】

$M^{11}$ と $L^{11}$ 、 $L^{12}$ 、 $L^{13}$ 、及び $L^{14}$ でそれぞれ形成される結合は、それぞれ独立に、共有結合であってもイオン結合であっても配位結合であってもよい。本発明における配位子とは、説明の便宜上、配位結合のみならず他のイオン結合、共有結合により形成された場合においても用いるものとする。

$L^{11}$ 、 $Y^{12}$ 、 $L^{12}$ 、 $Y^{11}$ 、 $L^{13}$ 、 $Y^{13}$ 、及び $L^{14}$ から成る配位子は、アニオン性配位子(少なくとも一つのアニオンが金属と結合する配位子)であることが好ましい。アニオン性配位子中のアニオンの数は、1~3が好ましく、1、2がより好ましく、2がさらに好ましい。

40

## 【0045】

$M^{11}$ に炭素原子で配位する $L^{11}$ 、 $L^{12}$ 、 $L^{13}$ 、及び $L^{14}$ としては、特に限定されないが、それぞれ独立にイミノ配位子、芳香族炭素環配位子(例えばベンゼン配位子、ナフタレン配位子、アントラセン配位子、フェントラセン配位子など)、ヘテロ環配位子(例えばフラン配位子、チオフェン配位子、ピリジン配位子、ピラジン配位子、ピリミジン配位子、チアゾール配位子、オキサゾール配位子、ピロール配位子、イミダゾール配位子、ピラゾール配位子、及び、それらを含む縮環体(例えばキノリン配位子、ベンゾ

50

チアゾール配位子など)およびこれらの互変異性体)が挙げられる。

【0046】

M<sup>1 1</sup>に窒素原子で配位するL<sup>1 1</sup>、L<sup>1 2</sup>、L<sup>1 3</sup>、及びL<sup>1 4</sup>としては特に限定されないが、それぞれ独立に、含窒素ヘテロ環配位子(例えば、ピリジン配位子、ピラジン配位子、ピリミジン配位子、ピリダジン配位子、トリアジン配位子、チアゾール配位子、オキサゾール配位子、ピロール配位子、イミダゾール配位子、ピラゾール配位子、トリアゾール配位子、オキサジアゾール配位子、チアジアゾール配位子、及び、それらを含む縮環体(例えば、キノリン配位子、ベンズオキサゾール配位子、ベンズイミダゾール配位子など)、及び、これらの互変異性体(なお、本発明では通常の異性体以外に次のような例も互変異性体と定義する。例えば、特開2007-103493化合物番号「化24」に記載の例示化合物(24)の5員ヘテロ環配位子、化合物番号「化28」に記載の例示化合物(64)の末端5員ヘテロ環配位子、化合物番号「化37」に記載の例示化合物(145)の5員ヘテロ環配位子もピロール互変異性体と定義する。)など、アミノ配位子(アルキルアミノ配位子(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~10であり、例えばメチルアミノなどが挙げられる。)、アリールアミノ配位子(例えばフェニルアミノなどが挙げられる。)、アシルアミノ配位子(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~10であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニルアミノ配位子(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~12であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、アリールオキシカルボニルアミノ配位子(好ましくは炭素数7~30、より好ましくは炭素数7~20、特に好ましくは炭素数7~12であり、例えばフェニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、スルホニルアミノ配位子(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。)、イミノ配位子など)が挙げられる。これらの配位子はさらに置換されていてもよい。

10

20

【0047】

M<sup>1 1</sup>に酸素原子で配位するL<sup>1 1</sup>、L<sup>1 2</sup>、L<sup>1 3</sup>、及びL<sup>1 4</sup>としては特に限定されないが、それぞれ独立に、アルコキシ配位子(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~10であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2-エチルヘキシロキシなどが挙げられる。)、アリールオキシ配位子(好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニルオキシ、1-ナフチルオキシ、2-ナフチルオキシなどが挙げられる。)、ヘテロ環オキシ配位子(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばピリジルオキシ、ピラジルオキシ、ピリミジルオキシ、キノリルオキシなどが挙げられる。)、アシルオキシ配位子(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~10であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。)、シリルオキシ配位子(好ましくは炭素数3~40、より好ましくは炭素数3~30、特に好ましくは炭素数3~24であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。)、カルボニル配位子(例えばケトン配位子、エステル配位子、アミド配位子など)、エーテル配位子(例えばジアルキルエーテル配位子、ジアリールエーテル配位子、フリル配位子など)などが挙げられる。これらの配位子は更に置換されていてもよい。

30

40

【0048】

M<sup>1 1</sup>に硫黄原子で配位するL<sup>1 1</sup>、L<sup>1 2</sup>、L<sup>1 3</sup>、及びL<sup>1 4</sup>としては特に限定されないが、それぞれ独立に、アルキルチオ配位子(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。)、アリールチオ配位子(好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロ環チオ配位子(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは

50

炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジルチオ、2 - ベンズイミダゾリルチオ、2 - ベンズオキサゾリルチオ、2 - ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、チオカルボニル配位子(例えばチオケトン配位子、チオエステル配位子など)、又はチオエーテル配位子(例えばジアルキルチオエーテル配位子、ジアリールチオエーテル配位子、チオフリル配位子など)などが挙げられる。これらの置換配位子は更に置換されてもよい。

【0049】

$M^{11}$  にリン原子で配位する  $L^{11}$ 、 $L^{12}$ 、 $L^{13}$ 、及び  $L^{14}$  としては特に限定されないが、それぞれ独立に、ジアルキルホスフィノ配位子、ジアリールホスフィノ配位子、トリアルキルホスフィン配位子、トリアリールホスフィン配位子、ホスフィニン配位子等があげられる。これらの配位子は更に置換されてもよい。

10

【0050】

$L^{11}$  及び  $L^{14}$  は、それぞれ独立に、芳香族炭素環配位子、アルキルオキシ配位子、アリールオキシ配位子、エーテル配位子、アルキルチオ配位子、アリールチオ配位子、アルキルアミノ配位子、アリールアミノ配位子、アシルアミノ配位子、含窒素ヘテロ環配位子(例えばピリジン配位子、ピラジン配位子、ピリミジン配位子、ピリダジン配位子、トリアジン配位子、チアゾール配位子、オキサゾール配位子、ピロール配位子、イミダゾール配位子、ピラゾール配位子、トリアゾール配位子、オキサジアゾール配位子、チアジアゾール配位子、又は、それらを含む縮環配位子体(例えば、キノリン配位子、キノキサリン配位子、フタラジン配位子、ベンズオキサゾール配位子、ベンズイミダゾール配位子など)、又は、これらの互変異性体など)が好ましく、芳香族炭素環配位子、アリールオキシ配位子、アリールチオ配位子、アリールアミノ配位子、並びにピリジン配位子、ピラジン配位子、ピラゾール配位子、イミダゾール配位子、又は、それらを含む縮環配位子体(例えば、キノリン配位子、キノキサリン配位子、フタラジン配位子、ベンズイミダゾール配位子など)、又は、これらの互変異性体がより好ましく、芳香族炭素環配位子、アリールオキシ配位子、アリールチオ配位子、アリールアミノ配位子、並びにピリジン配位子、ピラジン配位子、ピラゾール配位子、イミダゾール配位子、又は、それらを含む縮環配位子体がさらに好ましく、芳香族炭素環配位子、アリールオキシ配位子、並びにピリジン配位子、ピラジン配位子、ピラゾール配位子、イミダゾール配位子、又は、それらを含む縮環配位子体が特に好ましい。

20

30

【0051】

$L^{12}$  及び  $L^{13}$  は、それぞれ独立に、 $M^{11}$  と配位結合を形成する配位子が好ましく、 $M^{11}$  と配位結合を形成する配位子としては、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、トリアジン環、チアゾール環、オキサゾール環、ピロール環、トリアゾール環、及び、それらを含む縮環体(例えば、キノリン環、キノキサリン配位子、フタラジン配位子、ベンズオキサゾール環、ベンズイミダゾール環、インドレニン環など)及び、これらの互変異性体が好ましく、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピロール環、及び、それらを含む縮環体(例えば、キノリン環、キノキサリン環、フタラジン環、インドール環など)、及び、これらの互変異性体がより好ましく、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、及び、それらを含む縮環体(例えば、キノリン環など)がさらに好ましく、ピリジン環、及び、ピリジン環を含む縮環体(例えば、キノリン環など)が特に好ましい。

40

【0052】

一般式(I)中、 $L^{15}$  は  $M^{11}$  に配位する配位子を表す。 $L^{15}$  は 1 ~ 4 座の配位子が好ましく、1 ~ 4 座のアニオン性配位子がより好ましい。1 ~ 4 座のアニオン性配位子としては特に限定されないが、ハロゲン配位子、1,3 - ジケトン配位子(例えば、アセチルアセトン配位子など)、ピリジン配位子を含有するモノアニオン性 2 座配位子(例えば、ピコリン酸配位子、2 - (2 - ヒドロキシフェニル) - ピリジン配位子など)、 $L^{11}$ 、 $Y^{12}$ 、 $L^{12}$ 、 $Y^{11}$ 、 $L^{13}$ 、 $Y^{13}$ 、 $L^{14}$  で形成される 4 座配位子が好ましく、1,3 - ジケトン配位子(例えば、アセチルアセトン配位子など)、ピリジン配位子を含有するモノアニオン性 2 座配位子(例えばピコリン酸配位子、2 - (2 - ヒドロキシ

50

フェニル) - ピリジン配位子など)、 $L^{11}$ 、 $Y^{12}$ 、 $L^{12}$ 、 $Y^{11}$ 、 $L^{13}$ 、 $Y^{13}$ 、 $L^{14}$ で形成される4座配位子がより好ましく、1,3-ジケトン配位子(例えば、アセチルアセトン配位子など)、ピリジン配位子を含有するモノアニオン性2座配位子(例えば、ピコリン酸配位子、2-(2-ヒドロキシフェニル)-ピリジン配位子など)がさらに好ましく、1,3-ジケトン配位子(例えば、アセチルアセトン配位子など)が特に好ましい。配位座の数、及び配位子の数が、金属の配位数を上回ることはない。但し、 $L^{15}$ は $L^{11}$ 及び $L^{14}$ の両方と結合して環状配位子を形成することはない。

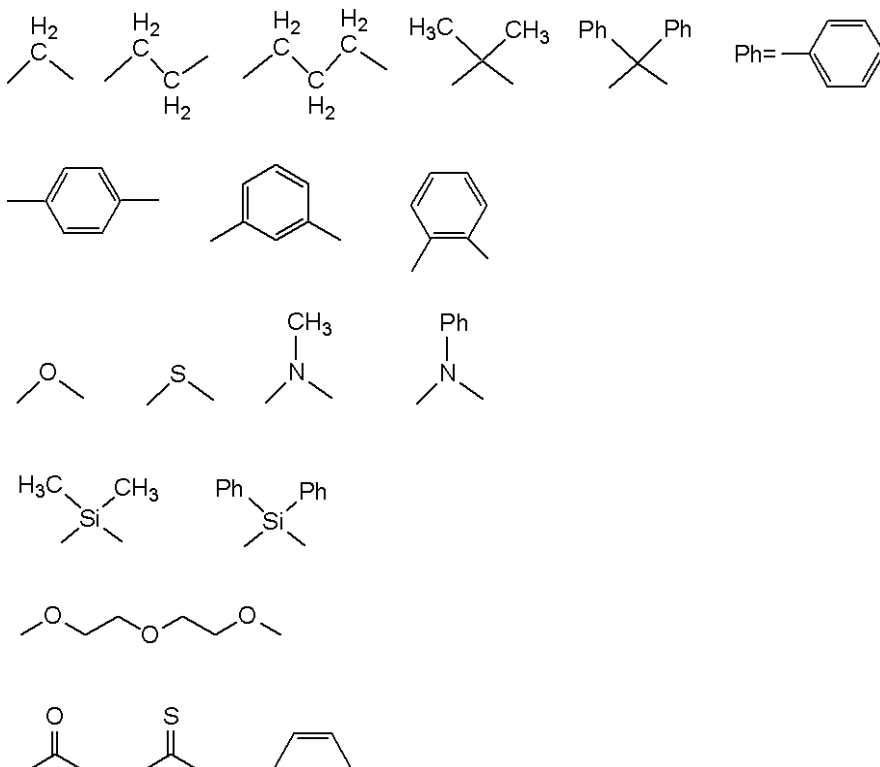
【0053】

一般式(I)中、 $Y^{11}$ 、 $Y^{12}$ 、及び $Y^{13}$ は、それぞれ独立に、連結基、単結合、または二重結合を表す。連結基としては、特に限定されないが、例えば、炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子から選択される原子を含んで構成される連結基が好ましい。このような連結基の具体例としては、例えば下記のもの挙げられる。

10

【0054】

【化4】



20

30

【0055】

また、 $Y^{11}$ 、 $Y^{12}$ 、又は $Y^{13}$ が連結基である場合、 $L^{11}$ と $Y^{12}$ 、 $Y^{12}$ と $L^{12}$ 、 $L^{12}$ と $Y^{11}$ 、 $Y^{11}$ と $L^{13}$ 、 $L^{13}$ と $Y^{13}$ 、 $Y^{13}$ と $L^{14}$ の間の結合は、それぞれ独立に、単結合又は二重結合を表す。

40

【0056】

$Y^{11}$ 、 $Y^{12}$ 、及び $Y^{13}$ は、それぞれ独立に、単結合、二重結合、カルボニル連結基、アルキレン連結基、アルケニレン基、またはアミノ連結基が好ましい。 $Y^{11}$ は、単結合、アルキレン基、またはアミノ連結基がより好ましく、アルキレン基がさらに好ましい。 $Y^{12}$ 及び $Y^{13}$ は、単結合、アルケニレン基がより好ましく、単結合がさらに好ましい。

【0057】

$Y^{12}$ 、 $L^{11}$ 、 $L^{12}$ 、及び $M^{11}$ で形成される環、 $Y^{11}$ 、 $L^{12}$ 、 $L^{13}$ 、及び $M^{11}$ で形成される環、 $Y^{13}$ 、 $L^{13}$ 、 $L^{14}$ 、及び $M^{11}$ で形成される環は、それぞれ環員数4~10が好ましく、環員数5~7がより好ましく、環員数5又は6がさらに好ましい。

50

## 【0058】

一般式 (I) 中、 $n^{11}$  は 0 ~ 4 を表す。 $M^{11}$  が配位数 4 の金属の場合、 $n^{11}$  は 0 であり、 $M^{11}$  が配位数 6 の金属の場合、 $n^{11}$  は 1、2 が好ましく、1 がより好ましい。 $M^{11}$  が配位数 6 で  $n^{11}$  が 1 の場合  $L^{15}$  は 2 座配位子を表し、 $M^{11}$  が配位数 6 で  $n^{11}$  が 2 の場合  $L^{15}$  は単座配位子を表す。 $M^{11}$  が配位数 8 の金属の場合、 $n^{11}$  は 1 ~ 4 が好ましく、1、2 がより好ましく、1 がより好ましい。 $M^{11}$  が配位数 8 で  $n^{11}$  が 1 の場合  $L^{15}$  は 4 座配位子を表し、 $M^{11}$  が配位数 8 で  $n^{11}$  が 2 の場合  $L^{15}$  は 2 座配位子を表す。 $n^{11}$  が複数のときは、複数の  $L^{15}$  は同じであっても異なってもよい。

## 【0059】

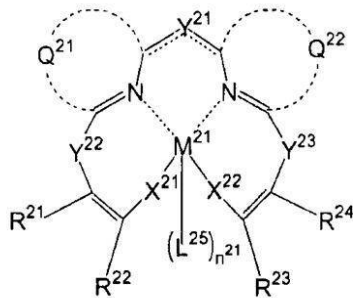
前記一般式 (I) で表される化合物の好ましい形態は、以下に挙げる、一般式 (1)、一般式 (2)、一般式 (3)、一般式 (4) 及び一般式 (5) で表される各化合物である。

一般式 (1) で表される化合物について説明する。

## 【0060】

## 【化5】

一般式 (1)



## 【0061】

一般式 (1) 中、 $M^{21}$  は金属イオンを表し、 $Y^{21}$  は連結基、単結合、または二重結合を表す。 $Y^{22}$ 、 $Y^{23}$  はそれぞれ単結合または連結基を表す。 $Q^{21}$ 、 $Q^{22}$  はそれぞれ含窒素ヘテロ環を形成する原子群を表し、 $Q^{21}$  で形成される環と  $Y^{21}$  の間の結合および  $Q^{22}$  で形成される環と  $Y^{21}$  の間の結合は、単結合または二重結合を表す。 $X^{21}$ 、 $X^{22}$  は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、置換または無置換の窒素原子を表す。 $R^{21}$ 、 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、及び  $R^{24}$  は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、 $R^{21}$  及び  $R^{22}$  並びに  $R^{23}$  及び  $R^{24}$  は各々結合して環を形成してもよい。 $L^{25}$  は  $M^{21}$  に配位する配位子を表す。 $n^{21}$  は 0 ~ 4 の整数を表す。

## 【0062】

一般式 (1) について詳細に説明する。

一般式 (1) 中、 $M^{21}$  は、前記一般式 (I) における  $M^{11}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

## 【0063】

$Q^{21}$ 、 $Q^{22}$  は、それぞれ独立に、含窒素ヘテロ環 ( $M^{21}$  に配位する窒素を含む環) を形成する原子群を表す。 $Q^{21}$ 、 $Q^{22}$  で形成される含窒素ヘテロ環としては特に限定されないが、例えば、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環、ピラゾール環、イミダゾール環、チアゾール環、オキサゾール環、ピロール環、トリアゾール環、及び、それらを含む縮環体 (例えば、キノリン環、キノキサリン環、フタラジン環、インドール環、ベンズオキサゾール環、ベンズイミダゾール環、インドレノン環など) 及び、これらの互変異性体が挙げられる。

## 【0064】

$Q^{21}$ 、 $Q^{22}$  で形成される含窒素ヘテロ環としては、好ましくは、ピリジン環、ピラ

10

20

30

40

50

ジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環、ピラゾール環、イミダゾール環、オキサゾール環、ピロール環、及び、それらを含む縮環体（例えば、キノリン環、キノキサリン環、フタラジン環、インドール環、ベンズオキサゾール環、ベンズイミダゾール環など）及び、これらの互変異性体であり、より好ましくはピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、イミダゾール環、ピロール環、及び、それらを含む縮環体（例えば、キノリン環など）及び、これらの互変異性体であり、さらに好ましくは、ピリジン環、及び、その縮環体（例えば、キノリン環など）であり、特に好ましくはピリジン環である。

【0065】

$X^{21}$ 、 $X^{22}$  は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、置換または無置換の窒素原子であり、酸素原子、硫黄原子、置換された窒素原子がより好ましく、酸素原子、硫黄原子がさらに好ましく、酸素原子が特に好ましい。

10

【0066】

$Y^{21}$  は、前記一般式 (I) における  $Y^{11}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0067】

$Y^{22}$ 、 $Y^{23}$  は、それぞれ独立に、単結合、連結基を表し、単結合が好ましい。連結基としては特に限定されないが、例えば、カルボニル連結基、チオカルボニル連結基、アルキレン基、アルケニレン基、アリーレン基、ヘテロアリーレン基、酸素原子連結基、窒素原子連結基、硫黄原子連結基、及び、これらの組み合わせからなる連結基などが挙げられる。

20

【0068】

$Y^{22}$  又は  $Y^{23}$  として表される連結基としては、カルボニル連結基、アルキレン連結基、アルケニレン連結基が好ましく、カルボニル連結基、アルケニレン連結基がより好ましく、カルボニル連結基がさらに好ましい。

【0069】

$R^{21}$ 、 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、及び  $R^{24}$  は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を表す。置換基としては特に限定されないが、例えば、アルキル基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメチル、エチル、*iso*-プロピル、*tert*-ブチル、*n*-オクチル、*n*-デシル、*n*-ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシルなどが挙げられる。）、アルケニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニルなどが挙げられる。）、アルキニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニルなどが挙げられる。）、アリール基（好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニル、*p*-メチルフェニル、ナフチル、アントラニルなどが挙げられる。）、アミノ基（好ましくは炭素数 0 ~ 30、より好ましくは炭素数 0 ~ 20、特に好ましくは炭素数 0 ~ 10 であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノなどが挙げられる。）、

30

40

【0070】

アルコキシ基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2-エチルヘキシロキシなどが挙げられる。）、アリーロキシ基（好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニロキシ、1-ナフチロキシ、2-ナフチロキシなどが挙げられる。）、ヘテロ環オキシ基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジロキシ、ピラジロキシ、ピリミジロキシ、キノリロキシなどが挙げられる。）、アシル基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、

50

ピバロイルなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニル基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~12であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。)、アリーロキシカルボニル基(好ましくは炭素数7~30、より好ましくは炭素数7~20、特に好ましくは炭素数7~12であり、例えばフェニロキシカルボニルなどが挙げられる。)、

【0071】

アシロキシ基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~10であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。)、アシルアミノ基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~10であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~12であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、アリーロキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数7~30、より好ましくは炭素数7~20、特に好ましくは炭素数7~12であり、例えばフェニロキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、スルホニルアミノ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。)、スルファモイル基(好ましくは炭素数0~30、より好ましくは炭素数0~20、特に好ましくは炭素数0~12であり、例えばスルファモイル、メチルスルファモイル、ジメチルスルファモイル、フェニルスルファモイルなどが挙げられる。)、

10

20

【0072】

カルバモイル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばカルバモイル、メチルカルバモイル、ジエチルカルバモイル、フェニルカルバモイルなどが挙げられる。)、アルキルチオ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。)、アリールチオ基(好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロ環チオ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミダゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、スルホニル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメシル、トシルなどが挙げられる。)、スルフィニル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメタンスルフィニル、ベンゼンスルフィニルなどが挙げられる。)、ウレイド基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばウレイド、メチルウレイド、フェニルウレイドなどが挙げられる。)、

30

【0073】

リン酸アミド基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばジエチルリン酸アミド、フェニルリン酸アミドなどが挙げられる。)、ヒドロキシ基、メルカプト基、ハロゲン原子(例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子)、シアノ基、スルホ基、カルボキシル基、ニトロ基、ヒドロキサム酸基、スルフィノ基、ヒドラジノ基、イミノ基、ヘテロ環基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~12であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子、具体的には例えばイミダゾリル、ピリジル、キノリル、フリル、チエニル、ペリリル、モルホリノ、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル基、アゼピニル基などが挙げられる。)、シリル基(好ましくは炭素数3~40、より好ましくは炭素数3~30、特に好ましくは炭素数3~24であり、例えばトリメチルシリル、トリフェニルシリルなどが挙げられる。)、シリロキシ基(好ましくは炭素数3~40、より好ましくは炭素数3~30、特に好ましくは炭素

40

50



数 3 ~ 24 であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。)などが挙げられる。これらの置換基は更に置換されてもよい。

【0074】

$R^{21}$ 、 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、及び $R^{24}$ は、それぞれ独立に、アルキル基、アリアル基、 $R^{21}$ と $R^{22}$ または $R^{23}$ と $R^{24}$ が結合して環構造(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基が好ましく、 $R^{21}$ と $R^{22}$ 又は $R^{23}$ と $R^{24}$ が結合して環構造(例えばベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基がより好ましい。

【0075】

$L^{25}$ は前記一般式(I)における $L^{15}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0076】

$n^{21}$ は前記一般式(I)における $n^{11}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0077】

一般式(1)において、 $Q^{21}$ 、 $Q^{22}$ が形成する環がピリジン環のとき、 $Y^{21}$ は連結基を表す金属錯体であること、 $Q^{21}$ 、 $Q^{22}$ が形成する環がピリジン環で、 $Y^{21}$ が単結合または二重結合で、 $X^{21}$ 、 $X^{22}$ が硫黄原子、置換または無置換の窒素原子を表す金属錯体であること、或いは、 $Q^{21}$ 、 $Q^{22}$ が形成する環が含窒素ヘテロ5員環、または、窒素原子を2つ以上含む含窒素6員環を表す金属錯体であることが好ましい。

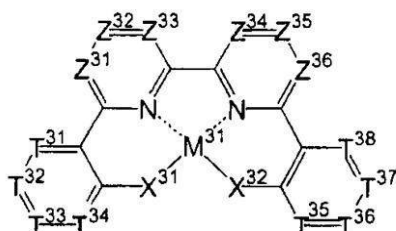
【0078】

前記一般式(1)で表される化合物の好ましい形態は、下記一般式(1-A)で表される化合物である。

【0079】

【化6】

一般式(1-A)



【0080】

一般式(1-A)について説明する。

一般式(1-A)中、 $M^{31}$ は、前記一般式(I)における $M^{11}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0081】

$Z^{31}$ 、 $Z^{32}$ 、 $Z^{33}$ 、 $Z^{34}$ 、 $Z^{35}$ 、及び $Z^{36}$ は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素原子、窒素原子を表し、置換または無置換の炭素原子がより好ましい。炭素上の置換基としては、前記一般式(1)における $R^{21}$ で説明した基が挙げられ、また、 $Z^{31}$ と $Z^{32}$ 、 $Z^{32}$ と $Z^{33}$ 、 $Z^{33}$ と $Z^{34}$ 、 $Z^{34}$ と $Z^{35}$ 、 $Z^{35}$ と $Z^{36}$ が連結基を介して結合し、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成してもよく、 $Z^{31}$ と $T^{31}$ 、 $Z^{36}$ と $T^{38}$ が連結基を介して結合し、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成してもよい。

【0082】

前記炭素上の置換基としては、アルキル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アリアル基、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基、ハロゲン原子が好ましく、アルキルアミノ基、アリアル基、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基がより好ましく、アリアル基、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基がさらに好ましく、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基が特に好ましい。

10

20

30

40

50

## 【0083】

$T^{31}$ 、 $T^{32}$ 、 $T^{33}$ 、 $T^{34}$ 、 $T^{35}$ 、 $T^{36}$ 、 $T^{37}$ 、及び $T^{38}$ は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素原子、窒素原子を表し、置換または無置換の炭素原子がより好ましい。炭素上の置換基としては、前記一般式(1)における $R^{21}$ で説明した基が挙げられ、また、 $T^{31}$ と $T^{32}$ 、 $T^{32}$ と $T^{33}$ 、 $T^{33}$ と $T^{34}$ 、 $T^{35}$ と $T^{36}$ 、 $T^{36}$ と $T^{37}$ 、 $T^{37}$ と $T^{38}$ が連結基を介して結合し、縮環(例えばベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成しても良い。

## 【0084】

前記炭素上の置換基としては、アルキル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アリール基、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基、ハロゲン原子が好ましく、アリール基、縮環(例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など)を形成する基、ハロゲン原子がより好ましく、アリール基、ハロゲン原子がさらに好ましく、アリール基が特に好ましい。

10

## 【0085】

$X^{31}$ 、 $X^{32}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(1)における $X^{21}$ 、 $X^{22}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

## 【0086】

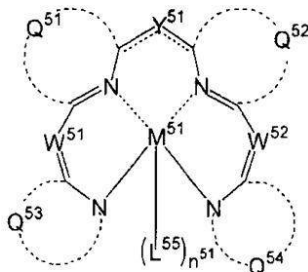
一般式(2)で表される化合物について説明する。

## 【0087】

## 【化7】

20

一般式(2)



30

## 【0088】

一般式(2)中、 $M^{51}$ は前記一般式(I)における $M^{11}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

## 【0089】

$Q^{51}$ 、 $Q^{52}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(1)における $Q^{21}$ 、 $Q^{22}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

## 【0090】

$Q^{53}$ 、 $Q^{54}$ は、それぞれ独立に、含窒素ヘテロ環( $M^{51}$ に配位する窒素を含む環)を形成する基を表す。 $Q^{53}$ 、 $Q^{54}$ で形成される含窒素ヘテロ環としては特に限定されないが、ピロール誘導体の互変異性体(例えば、特開2007-103493化合物番号「化24」に記載の例示化合物(24)の5員ヘテロ環配位子、化合物番号「化28」に記載の例示化合物(64)の末端5員ヘテロ環配位子、化合物番号「化37」に記載の例示化合物(145)の5員ヘテロ環配位子など)、イミダゾール誘導体の互変異性体(例えば、特開2007-103493化合物番号「化24」に記載の例示化合物(29)のヘテロ5員環配位子など)、チアゾール誘導体の互変異性体(例えば、特開2007-103493化合物番号「化24」に記載の例示化合物(30)のヘテロ5員環配位子など)、オキサゾール誘導体の互変異性体(例えば、特開2007-103493化合物番号「化24」に記載の例示化合物(31)のヘテロ5員環配位子など)が好ましく、ピロール誘導体の互変異性体、イミダゾール誘導体の互変異性体、チアゾール誘導体の互変異性体がより好ましく、ピロール誘導体の互変異性体、イミダゾール誘導体の互変異性体が

40

50

さらに好ましく、ピロール誘導体の互変異性体が特に好ましい。

【0091】

Y<sup>5 1</sup> は前記一般式 ( I ) における Y<sup>1 1</sup> と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0092】

L<sup>5 5</sup> は前記一般式 ( I ) における L<sup>1 5</sup> と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0093】

n<sup>5 1</sup> は前記 n<sup>1 1</sup> と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0094】

W<sup>5 1</sup>、W<sup>5 2</sup> は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素原子、窒素原子を表し、無置換の炭素原子、窒素原子が好ましく、無置換の炭素原子がより好ましい。

10

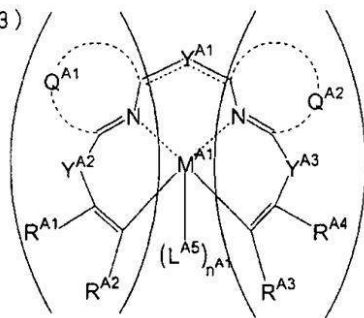
【0095】

一般式 ( 3 ) で表される化合物について説明する。

【0096】

【化 8】

一般式 ( 3 )



20

【0097】

一般式 ( 3 ) 中、M<sup>A 1</sup>、Q<sup>A 1</sup>、Q<sup>A 2</sup>、Y<sup>A 1</sup>、Y<sup>A 2</sup>、Y<sup>A 3</sup>、R<sup>A 1</sup>、R<sup>A 2</sup>、R<sup>A 3</sup>、R<sup>A 4</sup>、L<sup>A 5</sup>、及び n<sup>A 1</sup> は、前記一般式 ( 1 ) における M<sup>2 1</sup>、Q<sup>2 1</sup>、Q<sup>2 2</sup>、Y<sup>2 1</sup>、Y<sup>2 2</sup>、Y<sup>2 3</sup>、R<sup>2 1</sup>、R<sup>2 2</sup>、R<sup>2 3</sup>、R<sup>2 4</sup>、L<sup>2 5</sup>、及び n<sup>2 1</sup> とそれぞれ同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0098】

前記一般式 ( 3 ) で表される化合物の好ましい形態は、下記一般式 ( 3 - B ) で表される化合物である。

30

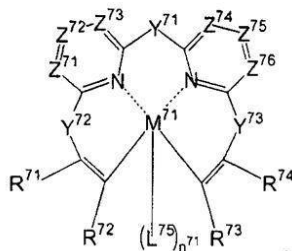
【0099】

一般式 ( 3 - B ) で表される化合物について説明する。

【0100】

【化 9】

一般式 ( 3 - B )



40

【0101】

一般式 ( 3 - B ) 中、M<sup>7 1</sup> は前記一般式 ( I ) における M<sup>1 1</sup> と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0102】

Y<sup>7 1</sup>、Y<sup>7 2</sup>、及び Y<sup>7 3</sup> は、それぞれ一般式 ( 1 ) における Y<sup>2 1</sup>、Y<sup>2 2</sup>、及び

50

$Y^{2,3}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0103】

$L^{7,5}$  は前記一般式 (I) における  $L^{1,5}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0104】

$n^{7,1}$  は前記一般式 (I) における  $n^{1,1}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0105】

$Z^{7,1}$ 、 $Z^{7,2}$ 、 $Z^{7,3}$ 、 $Z^{7,4}$ 、 $Z^{7,5}$ 、及び  $Z^{7,6}$  は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素原子、窒素原子を表し、置換または無置換の炭素原子が好ましい。炭素上の置換基としては、前記一般式 (1) における  $R^{2,1}$  で説明した基が挙げられる。また、 $R^{7,1}$  と  $R^{7,2}$ 、 $R^{7,3}$  と  $R^{7,4}$  が連結基を介して結合し、環 (例えばベンゼン環、ピリジン環) を形成してもよい。 $R^{7,1} \sim R^{7,4}$  は前記一般式 (1) における  $R^{2,1} \sim R^{2,4}$  の置換基と同義であり、好ましい範囲も同じである。

10

【0106】

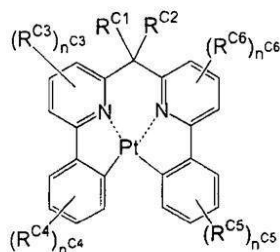
前記一般式 (3-B) で表される化合物の好ましい形態は、下記一般式 (3-C) で表される化合物である。

一般式 (3-C) で表される化合物について説明する。

【0107】

【化10】

一般式 (3-C)



20

【0108】

一般式 (3-C) 中、 $R^{C,1}$ 、 $R^{C,2}$  は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を表し、置換基としては、前記一般式 (1) における  $R^{2,1}$  ないし  $R^{2,4}$  の置換基として説明したアルキル基、アリール基、ヘテロ環基 (これら基は更に置換されても良い。その場合の置換基としては例えば前記一般式 (1) における  $R^{2,1}$  で表される置換基として挙げた基が適用できる。)、ハロゲン原子を表す。 $R^{C,3}$ 、 $R^{C,4}$ 、 $R^{C,5}$ 、及び  $R^{C,6}$  が表す置換基も前記一般式 (1) における  $R^{2,1}$  ないし  $R^{2,4}$  の置換基と同義である。 $n^{C,3}$ 、 $n^{C,6}$  は 0 ~ 3 の整数、 $n^{C,4}$ 、 $n^{C,5}$  は 0 ~ 4 の整数を表し、 $R^{C,3}$ 、 $R^{C,4}$ 、 $R^{C,5}$ 、及び  $R^{C,6}$  をそれぞれ複数個有する場合、複数個の  $R^{C,3}$ 、 $R^{C,4}$ 、 $R^{C,5}$ 、及び  $R^{C,6}$  は同じであっても異なってもよく、連結して環を形成してもよい。 $R^{C,3}$ 、 $R^{C,4}$ 、 $R^{C,5}$ 、及び  $R^{C,6}$  は、好ましくはアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、シアノ基、またはハロゲン原子である。

30

【0109】

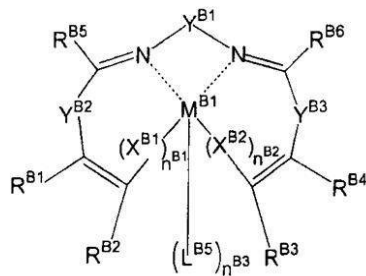
一般式 (4) で表される化合物について説明する。

40

【0110】

## 【化 1 1】

一般式 (4)



10

## 【0 1 1 1】

一般式 (4) 中、 $M^{B1}$ 、 $Y^{B2}$ 、 $Y^{B3}$ 、 $R^{B1}$ 、 $R^{B2}$ 、 $R^{B3}$ 、 $R^{B4}$ 、 $L^{B5}$ 、 $n^{B3}$ 、 $X^{B1}$ 、及び  $X^{B2}$  は、前記一般式 (1) における  $M^{21}$ 、 $Y^{22}$ 、 $Y^{23}$ 、 $R^{21}$ 、 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{24}$ 、 $L^{25}$ 、 $n^{21}$ 、 $X^{21}$ 、及び  $X^{22}$  とそれぞれ同義であり好ましい範囲も同様である。

$Y^{B1}$  は連結基を表し、前記一般式 (1) における  $Y^{21}$  と同様であり、好ましくは 1, 2 位で置換したビニル基、フェニレン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環または炭素数 2 ~ 8 のアルキレン基を表す。

$R^{B5}$ 、 $R^{B6}$  は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を表し、置換基としては前記一般式 (1) における  $R^{21}$  ないし  $R^{24}$  の置換基として説明したアルキル基、アリール基、ヘテロ環基を表す。ただし、 $Y^{B1}$  は  $R^{B5}$  または  $R^{B6}$  と連結することはない。 $n^{B1}$ 、 $n^{B2}$  は、それぞれ独立に、0 ないし 1 の整数を表す。

20

## 【0 1 1 2】

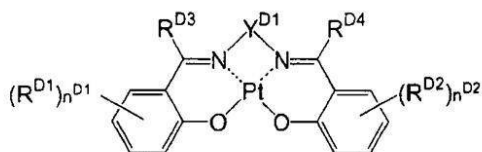
前記一般式 (4) で表される化合物の好ましい形態は、下記一般式 (4 - A) で表される化合物である。

一般式 (4 - A) で表される化合物について説明する。

## 【0 1 1 3】

## 【化 1 2】

一般式 (4 - A)



30

## 【0 1 1 4】

一般式 (4 - A) 中、 $R^{D3}$ 、 $R^{D4}$  は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を表し、 $R^{D1}$ 、 $R^{D2}$  はそれぞれ置換基を表す。 $R^{D1}$ 、 $R^{D2}$ 、 $R^{D3}$ 、及び  $R^{D4}$  が表す置換基としては、前記一般式 (4) における  $R^{B5}$ 、 $R^{B6}$  が表す置換基と同義であり、好ましい範囲も同様である。 $n^{D1}$ 、 $n^{D2}$  は 0 ~ 4 の整数を表し、 $R^{D1}$ 、 $R^{D2}$  をそれぞれ複数個有する場合、複数個の  $R^{D1}$ 、 $R^{D2}$  は同じであっても異なってもよく、連結して環を形成してもよい。 $Y^{D1}$  は 1, 2 位で置換したビニル基、フェニレン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環または炭素数 1 ~ 8 のアルキレン基を表す。

40

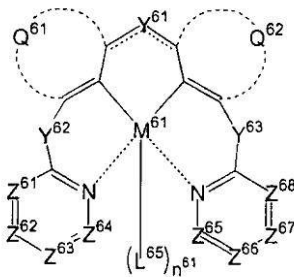
## 【0 1 1 5】

一般式 (5) で表される化合物について説明する

## 【0 1 1 6】

## 【化 1 3】

一般式 (5)



10

## 【0 1 1 7】

一般式 (5) 中、 $M^{61}$  は、前記一般式 (I) における  $M^{11}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

## 【0 1 1 8】

$Q^{61}$ 、 $Q^{62}$  は、それぞれ独立に、環を形成する基を表す。 $Q^{61}$ 、 $Q^{62}$  で形成される環としては特に限定されないが、例えば、ベンゼン環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、チオフェン環、イソチアゾール環、フラン環、イソオキサゾール環、及び、その縮環体が挙げられる。

## 【0 1 1 9】

$Q^{61}$ 、 $Q^{62}$  で形成される環は、好ましくは、ベンゼン環、ピリジン環、チオフェン環、チアゾール環、及び、その縮環体であり、ベンゼン環、ピリジン環、及び、その縮環体がより好ましく、ベンゼン環、及び、その縮環体がさらに好ましい。

20

## 【0 1 2 0】

$Y^{61}$  は前記一般式 (I) における  $Y^{11}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

## 【0 1 2 1】

$Y^{62}$ 、 $Y^{63}$  は、それぞれ独立に、連結基または単結合を表す。連結基としては特に限定されないが、例えば、カルボニル連結基、チオカルボニル連結基、アルキレン基、アルケニレン基、アリーレン基、ヘテロアリーレン基、酸素原子連結基、窒素原子連結基、及び、これらの組み合わせからなる連結基などが挙げられる。

## 【0 1 2 2】

$Y^{62}$ 、 $Y^{63}$  は、それぞれ独立に、単結合、カルボニル連結基、アルキレン連結基、アルケニレン基が好ましく、単結合、アルケニレン基がより好ましく、単結合がさらに好ましい。

30

## 【0 1 2 3】

$L^{65}$  は前記一般式 (I) における  $L^{15}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

## 【0 1 2 4】

$n^{61}$  は前記一般式 (I) における  $n^{11}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

## 【0 1 2 5】

$Z^{61}$ 、 $Z^{62}$ 、 $Z^{63}$ 、 $Z^{64}$ 、 $Z^{65}$ 、 $Z^{66}$ 、 $Z^{67}$ 、及び  $Z^{68}$  は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素原子、窒素原子を表し、置換または無置換の炭素原子が好ましい。炭素上の置換基としては、前記一般式 (1) における  $R^{21}$  で説明した基が挙げられ、また、 $Z^{61}$  と  $Z^{62}$ 、 $Z^{62}$  と  $Z^{63}$ 、 $Z^{63}$  と  $Z^{64}$ 、 $Z^{65}$  と  $Z^{66}$ 、 $Z^{66}$  と  $Z^{67}$ 、 $Z^{67}$  と  $Z^{68}$  が連結基を介して結合し、縮環 (例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など) を形成しても良い。 $Q^{61}$ 、 $Q^{62}$  で形成される環がそれぞれ  $Z^{61}$ 、 $Z^{68}$  と連結基を介して結合し、環を形成してもよい。

40

## 【0 1 2 6】

前記炭素上の置換基としては、アルキル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アリール基、縮環 (例えばベンゾ縮環、ピリジン縮環など) を形成する基、ハロゲン原子が好ましく、アルキルアミノ基、アリール基、縮環 (例えばベンゾ縮環、ピリジン縮環など) を形成する基がより好ましく、アリール基、縮環 (例えばベンゾ縮環、ピリジン縮環など)

50

を形成する基がさらに好ましく、縮環（例えばベンゾ縮環、ピリジン縮環など）を形成する基が特に好ましい。

【0127】

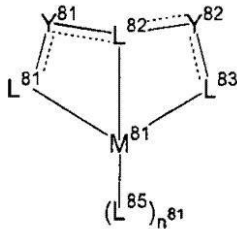
本発明における3座配位子を有する金属錯体の好ましい形態は、下記一般式(II)で表される化合物である。

一般式(II)で表される化合物について説明する。

【0128】

【化14】

一般式(II)



10

【0129】

一般式(II)中、 $M^{81}$ は前記一般式(I)における $M^{11}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

20

【0130】

$L^{81}$ 、 $L^{82}$ 、及び $L^{83}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(I)における $L^{11}$ 、 $L^{12}$ 、及び $L^{14}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0131】

$Y^{81}$ 、 $Y^{82}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(I)における $Y^{12}$ 、 $Y^{13}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0132】

$L^{85}$ は $M^{81}$ に配位する配位子を表す。 $L^{85}$ は1~3座の配位子が好ましく、1~3座のアニオン性配位子がより好ましい。1~3座のアニオン性配位子としては特に限定されないが、ハロゲン配位子、 $L^{81}$ 、 $Y^{81}$ 、 $L^{82}$ 、 $Y^{82}$ 、及び $L^{83}$ で形成される3座配位子が好ましく、 $L^{81}$ 、 $Y^{81}$ 、 $L^{82}$ 、 $Y^{82}$ 、及び $L^{83}$ で形成される3座配位子がより好ましい。 $L^{85}$ が金属を介さずに $L^{81}$ 、 $L^{83}$ と連結することはない。配位座の数、及び配位子の数が、金属の配位数を上回ることはない。

30

【0133】

$n^{81}$ は0~5を表す。 $M^{81}$ が配位数4の金属の場合、 $n^{81}$ は1であり、 $L^{85}$ は単座配位子を表す。 $M^{81}$ が配位数6の金属の場合、 $n^{81}$ は1~3が好ましく、1、3がより好ましく、1がさらに好ましい。 $M^{81}$ が配位数6で $n^{81}$ が1の場合 $L^{85}$ は3座配位子を表し、 $M^{81}$ が配位数6で $n^{81}$ が2の場合 $L^{85}$ は単座配位子1つと2座配位子1つを表し、 $M^{81}$ が配位数6で $n^{81}$ が3の場合 $L^{85}$ は単座配位子を表す。 $M^{81}$ が配位数8の金属の場合、 $n^{81}$ は1~5が好ましく、1、2がより好ましく、1がより好ましい。 $M^{81}$ が配位数8で $n^{81}$ が1の場合 $L^{85}$ は5座配位子を表し、 $n^{81}$ が2の場合 $L^{85}$ は3座配位子1つと2座配位子1つを表し、 $n^{81}$ が3の場合 $L^{85}$ は3座配位子1つと単座配位子2つ、または、2座配位子2つと単座配位子1つを表し、 $n^{81}$ が4の場合 $L^{85}$ は2座配位子1つと単座配位子3つを表し、 $n^{81}$ が5の場合 $L^{85}$ は単座配位子5つを表す。 $n^{81}$ が複数のときは、複数の $L^{85}$ は同じであっても異なってもよい。

40

【0134】

前記一般式(II)の好ましい形態は、前記一般式(II)の $L^{81}$ 、 $L^{82}$ 、及び $L^{83}$ が炭素原子で $M^{81}$ に配位する芳香族炭素環またはヘテロ環、または窒素原子で $M^{81}$ に配位する含窒素ヘテロ環を表し、 $L^{81}$ 、 $L^{82}$ 、及び $L^{83}$ のうち少なくとも一つが含

50





$n^{91}$  は前記一般式 (II) における  $n^{81}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

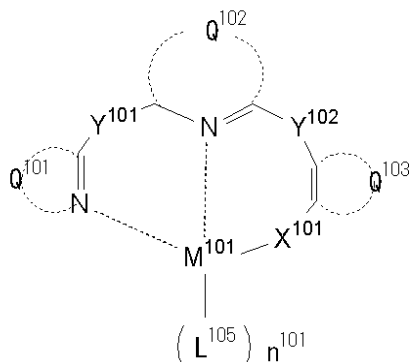
【0143】

一般式 (II-B) で表される化合物について説明する。

【0144】

【化16】

一般式 (II-B)



10

【0145】

一般式 (II-B) 中、 $M^{101}$  は、前記一般式 (II) における  $M^{81}$  と同義であり、好まし範囲も同じである。

【0146】

$Q^{102}$  は、前記一般式 (1) における  $Q^{21}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

20

【0147】

$Q^{101}$  は前記一般式 (II-A) における  $Q^{91}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0148】

$Q^{103}$  は芳香環を形成する基を表す。 $Q^{103}$  で形成される芳香環としては特に限定されないが、ベンゼン環、フラン環、チオフェン環、ピロール環、及び、それらを含む縮環体 (例えば、ナフタレン環、ベンゾフラン環、ベンゾチオフェン環、インドール環など) が好ましく、ベンゼン環及びベンゼン環を含む縮環体 (例えば、ナフタレン環など) がより好ましく、ベンゼン環が特に好ましい。

30

【0149】

$Y^{101}$ 、 $Y^{102}$  は、それぞれ独立に、前記一般式 (1) における  $Y^{22}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0150】

$L^{105}$  は前記一般式 (II) における  $L^{85}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0151】

$n^{101}$  は前記一般式 (II) における  $n^{81}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

40

【0152】

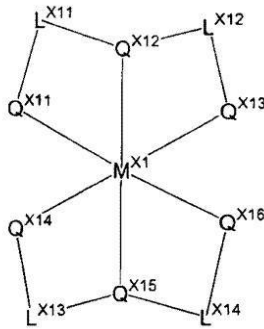
$X^{101}$  は前記一般式 (1) における  $X^{21}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0153】

本発明における三座配位子を有する金属錯体の他の好ましい態様は、下記一般式 (II-C) で表される化合物である。

【0154】

## 【化 17】



一般式 (II-C)

10

## 【0155】

一般式 (II - C) 中、 $M^{X1}$  は金属イオンを表す。 $Q^{X11} \sim Q^{X16}$  は  $M^{X1}$  に配位する原子または  $M^{X1}$  に配位する原子を含んだ原子群を表す。 $L^{X11} \sim L^{X14}$  は単結合、二重結合または連結基を表す。すなわち、 $Q^{X11} - L^{X11} - Q^{X12} - L^{X12} - Q^{X13}$  からなる原子群および  $Q^{X14} - L^{X13} - Q^{X15} - L^{X14} - Q^{X16}$  からなる原子群はそれぞれ三座の配位子である。 $M^{X1}$  と  $Q^{X11} \sim Q^{X16}$  との結合は、それぞれ配位結合、イオン結合、共有結合のいずれでもよい。

20

## 【0156】

一般式 (II - C) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (II - C) 中、 $M^{X1}$  は金属イオンを表す。金属イオンとしては特に限定されないが、1価～3価の金属イオンが好ましく、2価又は3価の金属イオンがより好ましく、3価の金属イオンがさらに好ましい。具体的には、白金イオン、イリジウムイオン、レニウムイオン、パラジウムイオン、ロジウムイオン、ルテニウムイオン、銅イオン、ユーロピウムイオン、ガドリニウムイオン、又はテルビウムイオンが好ましく、イリジウムイオン、ユーロピウムイオンがより好ましく、イリジウムイオンがさらに好ましい。

## 【0157】

$Q^{X11} \sim Q^{X16}$  は、 $M^{X1}$  に配位する原子又は  $M^{X1}$  に配位する原子を含んだ原子群を表す。

30

$Q^{X11} \sim Q^{X16}$  が  $M^{X1}$  に配位する原子を表す場合、その具体的な原子としては、炭素原子、窒素原子、酸素原子、珪素原子、リン原子、及び硫黄原子などが挙げられ、好ましくは窒素原子、酸素原子、硫黄原子、またはリン原子であり、より好ましくは窒素原子、酸素原子である。

$Q^{X11} \sim Q^{X16}$  が  $M^{X1}$  に配位する原子を含んだ原子群を表す場合、 $M^{X1}$  に炭素原子で配位するものとしては、例えば、イミノ基、芳香族炭化水素環基（ベンゼン、ナフタレンなど）、ヘテロ環基（チオフェン、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、チアゾール、オキサゾール、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、又はトリアゾールなど）およびこれらを含む縮合環、およびこれらの互変異性体が挙げられる。

40

## 【0158】

$M^{X1}$  に窒素原子で配位するものとしては、例えば、含窒素ヘテロ環基（ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、チアゾール、オキサゾール、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、又はトリアゾールなど）、アミノ基（アルキルアミノ基（好ましくは炭素数 2～30、より好ましくは炭素数 2～20、特に好ましくは炭素数 2～10 であり、例えばメチルアミノ）、アリールアミノ基（例えばフェニルアミノ）などが挙げられる。）、アシルアミノ基（好ましくは炭素数 2～30、より好ましくは炭素数 2～20、特に好ましくは炭素数 2～10 であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。）、アルコキシカルボニルアミノ基（好ましくは炭素数 2～30、よ

50

り好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。) 、アリアルオキシカルボニルアミノ基 (好ましくは炭素数 7 ~ 30、より好ましくは炭素数 7 ~ 20、特に好ましくは炭素数 7 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。) 、スルホニルアミノ基 (好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。) 、イミノ基などが挙げられる。これらの基はさらに置換されていてもよい。

#### 【0159】

$M^{X1}$  に酸素原子で配位するものとしては、アルコキシ基 (好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、及び 2 - エチルヘキシロキシなどが挙げられる。) 、アリアルオキシ基 (好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシ、1 - ナフチルオキシ、及び 2 - ナフチルオキシなどが挙げられる。) 、ヘテロ環オキシ基 (好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジルオキシ、ピラジルオキシ、ピリミジルオキシ、及びキノリルオキシなどが挙げられる。) 、アシルオキシ基 (好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。) 、シリルオキシ基 (好ましくは炭素数 3 ~ 40、より好ましくは炭素数 3 ~ 30、特に好ましくは炭素数 3 ~ 24 であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。) 、カルボニル基 (例えばケトン基、エステル基、又はアミド基など) 、エーテル基 (例えばジアルキルエーテル基、ジアリアルエーテル基、又はフリル基など) などが挙げられる。

#### 【0160】

$M^{X1}$  に珪素原子で配位するものとしては、アルキルシリル基 (好ましくは炭素数 3 ~ 30 であり、たとえば、トリメチルシリル基などが挙げられる。) 、アリアルシリル基 (好ましくは炭素数 18 ~ 30 であり、例えば、トリフェニルシリル基などが挙げられる。) 等があげられる。これらの基はさらに置換されてもよい。

#### 【0161】

$M^{X1}$  に硫黄原子で配位するものとしては、アルキルチオ基 (好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。) 、アリアルチオ基 (好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。) 、ヘテロ環チオ基 (好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジルチオ、2 - ベンズイミダゾリルチオ、2 - ベンズオキサゾリルチオ、及び 2 - ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。) 、チオカルボニル基 (例えばチオケトン基、チオエステル基など) 、チオエーテル基 (例えばジアルキルチオエーテル基、ジアリアルチオエーテル基、又はチオフリル基など) などが挙げられる。

#### 【0162】

$M^{X1}$  にリン原子で配位するものとしては、ジアルキルホスフィノ基、ジアリアルホスフィノ基、トリアルキルホスフィン基、トリアリアルホスフィン基、及びホスフィン基等が挙げられる。これらの基はさらに置換されてもよい。

#### 【0163】

$Q^{X11} \sim Q^{X16}$  で表される原子群として好ましくは、 $M^{X1}$  に、炭素原子で配位する芳香族炭化水素環基、炭素原子で配位する芳香族ヘテロ環基、窒素原子で配位する含窒素芳香族ヘテロ環基、アルキルオキシ基、アリアルオキシ基、アルキルチオ基、アリアルチオ基、又はジアルキルホスフィノ基であり、より好ましくは炭素原子で配位する芳香族炭化水素環基、炭素原子で配位する芳香族ヘテロ環基、窒素原子で配位する含窒素芳香族ヘテロ環基である。

10

20

30

40

50

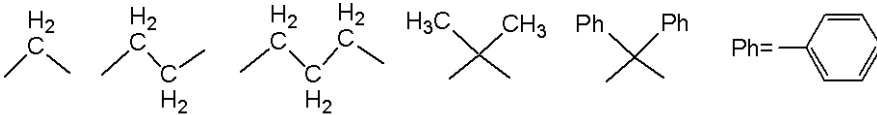
$M^{X1}$  と  $Q^{X11} \sim Q^{X16}$  との結合は、それぞれ配位結合、イオン結合、共有結合のいずれでもよい。

【0164】

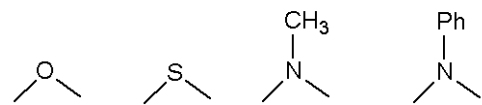
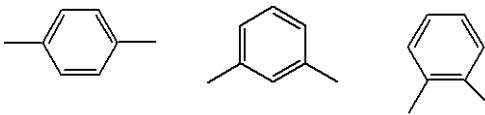
一般式(II-C)中、 $L^{X11} \sim L^{X14}$  は、単結合、二重結合、又は連結基を表す。連結基としては特に限定されないが、炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、又はケイ素原子から選択される原子を含んで構成される連結基が好ましい。該連結基の具体例を下記に示すが、これらに限定されることはない。

【0165】

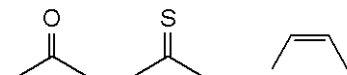
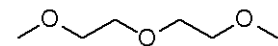
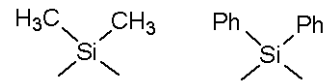
【化18】



10



20



30

【0166】

これらの連結基はさらに置換されてもよく、置換基としては前記一般式(2)における  $R^{21} \sim R^{24}$  で表される置換基として挙げたものが適用でき、好ましい範囲も同様である。 $L^{X11} \sim L^{X14}$  として好ましくは、単結合、ジメチルメチレン基、又はジメチルシリレン基である。

【0167】

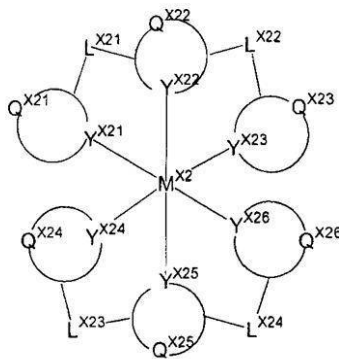
一般式(II-C)で表される化合物のうち、より好ましくは下記一般式(X2)で表される化合物であり、更に好ましくは下記一般式(X3)で表される化合物である。

まず、一般式(X2)で表される化合物について説明する。

【0168】

## 【化 1 9】

一般式 (X2)



10

## 【0169】

一般式 (X2) 中、 $M^{X2}$  は金属イオンを表す。 $Y^{X21} \sim Y^{X26}$  は  $M^{X2}$  に配位する原子を表し、 $Q^{X21} \sim Q^{X26}$  は、それぞれ  $Y^{X21} \sim Y^{X26}$  と共に芳香環もしくは芳香族ヘテロ環を形成する原子群を表す。 $L^{X21} \sim L^{X24}$  は単結合、二重結合または連結基を表す。 $M^{X2}$  と  $Y^{X21} \sim Y^{X26}$  との結合は、それぞれ配位結合でも共有結合でもよい。

## 【0170】

20

一般式 (X2) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (X2) 中、 $M^{X2}$  は、前記一般式 (II - C) における  $M^{X1}$  と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 $Y^{X21} \sim Y^{X26}$  は  $M^{X2}$  に配位する原子を表す。 $Y^{X21} \sim Y^{X26}$  と  $M^{X2}$  との結合は配位結合、イオン結合、共有結合のいずれでもよい。 $Y^{X21} \sim Y^{X26}$  としては、炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、リン原子、ケイ素原子が挙げられ、好ましくは炭素原子、窒素原子である。 $Q^{X21} \sim Q^{X26}$  は、それぞれ  $Y^{X21} \sim Y^{X26}$  を含んで芳香族炭化水素環または芳香族ヘテロ環を形成する原子群を表す。この場合に形成する芳香族炭化水素環、芳香族ヘテロ環としては、ベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、トリアゾール環、オキサゾール環、チアゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、チオフエン環、及びフラン環が挙げられ、好ましくはベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピラゾール環、イミダゾール環、又はトリアゾール環であり、さらに好ましくはベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピラゾール環、又はトリアゾール環であり、特に好ましくはベンゼン環、ピリジン環である。これらはさらに縮環を有していても置換基を有していても良い。

30

## 【0171】

$L^{X21} \sim L^{X24}$  は前記一般式 (II - C) における  $L^{X11} \sim L^{X14}$  と同義であり好ましい範囲も同様である。

## 【0172】

前記一般式 (II - C) で表される化合物は、さらに好ましくは下記一般式 (X3) で表される化合物である。

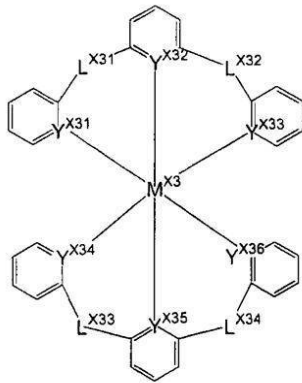
40

一般式 (X3) について説明する。

## 【0173】

## 【化 2 0】

一般式 (X3)



10

## 【 0 1 7 4】

一般式 (X3) 中、 $M^{X3}$  は金属イオンを表す。 $Y^{X31} \sim Y^{X36}$  は、炭素原子、窒素原子、リン原子を表す。 $L^{X31} \sim L^{X34}$  は単結合、二重結合または連結基を表す。 $M^{X3}$  と  $Y^{X31} \sim Y^{X36}$  との結合は、それぞれ配位結合、イオン結合共有結合のいずれでもよい。

## 【 0 1 7 5】

$M^{X3}$  は前記一般式 (II - C) における  $M^{X1}$  と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 $Y^{X31} \sim Y^{X36}$  は  $M^{X3}$  に配位する原子を表す。 $Y^{X31} \sim Y^{X36}$  としては、炭素原子、窒素原子、リン原子が挙げられ、好ましくは炭素原子、窒素原子である。 $L^{X31} \sim L^{X34}$  は前記一般式 (II - C) における  $L^{X11} \sim L^{X14}$  と同義であり好ましい範囲も同様である。

20

## 【 0 1 7 6】

前記一般式 (I)、及び一般式 (II) で表される化合物の具体例としては、例えば特開 2007 - 103493 号明細書に記載の化合物 (1) ~ 化合物 (247) が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

## 【 0 1 7 7】

上記化合物例で代表される化合物のうち、ピピリジル又はフェナントロリンを部分構造に含む 4 座配位子、シッフ塩基型 4 座配位子、フェニルピピリジル 3 座配位子、ジフェニルピリジン 3 座配位子、ターピリジン 3 座配位子から選ばれる配位子を有する化合物を除いた化合物がより好ましい。

30

## 【 0 1 7 8】

(本発明における金属錯体の合成方法)

本発明における金属錯体〔前記一般式 (I)、(1)、(1 - A)、(2)、(3)、(3 - B)、(3 - C)、(4)、(4 - A)、(5)、(II)、(II - A)、(II - B)、(II - C)、(X2)、及び (X3) で表される化合物は、種々の手法で合成できる。

40

例えば、配位子、またはその解離体と金属化合物を溶媒 (例えば、ハロゲン系溶媒、アルコール系溶媒、エーテル系溶媒、エステル系溶媒、ケトン系溶媒、ニトリル系溶媒、アミド系溶媒、スルホン系溶媒、スルホキサイド系溶媒、水などが挙げられる) の存在下、もしくは、溶媒非存在下、塩基の存在下 (無機、有機の種々の塩基、例えば、ナトリウムメトキサイド、*t*-ブトキシカリウム、トリエチルアミン、炭酸カリウムなどが挙げられる)、もしくは、塩基非存在下、室温以下、もしくは加熱し (通常の加熱以外にもマイクロウェーブで加熱する手法も有効である) 得ることができる。

## 【 0 1 7 9】

本発明の金属錯体を合成する際の反応時間は反応原料の活性により異なり、特に限定されないが、1分以上5日以下が好ましく、5分以上3日以下がより好ましく、10分以上

50

1 日以下がさらに好ましい。

【0180】

本発明の金属錯体合成の反応温度は反応の活性により異なり、特に限定されないが、0 以上 300 以下が好ましく、5 以上 250 以下がより好ましく、10 以上 200 以下がさらに好ましい。

【0181】

本発明の金属錯体は、目的とする錯体の部分構造を形成している配位子を適宜選択することで、前記一般式 (I)、(1)、(1-A)、(2)、(3)、(3-B)、(3-C)、(4)、(4-A)、(5)、(II)、(II-A)、(II-B)、(II-C)、(X2)、及び (X3) で表される化合物は合成できる。

10

例えば、一般式 (1-A) で表される化合物を合成する際は、6, 6'-ビス(2-ヒドロキシフェニル)-2, 2'-ビピリジル配位子またはその誘導体(例えば、2, 9-ビス(2-ヒドロキシフェニル)-1, 10-フェナントロリン配位子、2, 9-ビス(2-ヒドロキシフェニル)-4, 7-ジフェニル-1, 10-フェナントロリン配位子、6, 6'-ビス(2-ヒドロキシ-5-tert-ブチルフェニル)-2, 2'-ビピリジル配位子など)などを、金属化合物に対し、好ましくは0.1当量~10当量、より好ましくは0.3当量~6当量、さらに好ましくは0.5当量~4当量加えて合成できる。一般式(1-A)で表される化合物の合成方法において、反応溶媒、反応時間、反応温度の各々は、上記本発明の金属錯体の合成方法で述べた事項と同様である。

【0182】

20

6, 6'-ビス(2-ヒドロキシフェニル)-2, 2'-ビピリジル配位子の誘導体は種々の公知の方法を用いて合成することができる。

例えば、2, 2'-ビピリジル誘導体(例えば、1, 10-フェナントロリンなど)とアニソール誘導体(例えば、4-フルオロアニソールなど)を *Journal of Organic Chemistry*, 741, 11, (1946) に記載の方法で反応させることにより合成することができる。また、ハロゲン化された2, 2'-ビピリジル誘導体(例えば、2, 9-ジブromo-1, 10-フェナントロリンなど)と2-メトキシフェニルボロン酸誘導体など(例えば、2-メトキシ-5-フルオロフェニルボロン酸など)を出発物質として鈴木カップリング反応を行った後、メチル基を脱保護する(*Journal of Organic Chemistry*, 741, 11, (1946) に記載の方法、ピリジン塩酸塩中で加熱するなどの方法を用いる)ことにより合成することができる。また、2, 2'-ビピリジルボロン酸誘導体(例えば6, 6'-ビス(4, 4, 5, 5-テトラメチル-1, 3, 2-ジオキサボロリル)-2, 2'-ビピリジルなど)とハロゲン化されたアニソール誘導体(例えば2-ブromoアニソールなど)を出発物質として鈴木カップリング反応を行った後、メチル基を脱保護する(*Journal of Organic Chemistry*, 741, 11, (1946) に記載の方法、または、ピリジン塩酸塩中で加熱するなどの方法を用いる)ことによっても合成することができる。

30

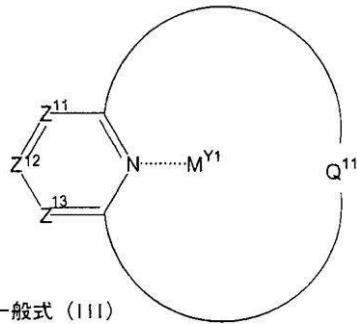
【0183】

以下、下記一般式(III)で表される化合物について説明する。

40

【0184】

## 【化 2 1】



10

## 【 0 1 8 5】

一般式 (III) 中、 $Q^{11}$  は含窒素ヘテロ環を形成する原子群を表し、 $Z^{11}$ 、 $Z^{12}$ 、及び  $Z^{13}$  はそれぞれ置換又は無置換の、炭素原子又は窒素原子を表し、 $M^{Y1}$  は更に配位子を有しても良い金属イオンを表す。

## 【 0 1 8 6】

一般式 (III) 中、 $Q^{11}$  は、 $Q^{11}$  が結合する炭素原子 2 つとこれらの炭素原子に直接結合している窒素原子とを含んで、含窒素ヘテロ環を形成する原子群を表す。 $Q^{11}$  で形成される含窒素ヘテロ環の環員数としては特に限定されないが、環員数 12 ~ 20 が好ましく、環員数 14 ~ 16 がより好ましく、環員数 16 がさらに好ましい。

20

## 【 0 1 8 7】

$Z^{11}$ 、 $Z^{12}$ 、及び  $Z^{13}$  はそれぞれ独立に、置換又は無置換の、炭素原子又は窒素原子を表す。 $Z^{11}$ 、 $Z^{12}$ 、及び  $Z^{13}$  の組合せとしては、 $Z^{11}$ 、 $Z^{12}$ 、及び  $Z^{13}$  の少なくとも 1 つが窒素原子であることが好ましい。

## 【 0 1 8 8】

炭素原子上の置換基としては、例えば、アルキル基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメチル、エチル、*iso*-プロピル、*tert*-ブチル、*n*-オクチル、*n*-デシル、*n*-ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、及びシクロヘキシルなどが挙げられる。）、アルケニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、及び 3-ペンテニルなどが挙げられる。）、アルキニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニルなどが挙げられる。）、

30

## 【 0 1 8 9】

アリール基（好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニル、*p*-メチルフェニル、ナフチル、及びアントラニルなどが挙げられる。）、アミノ基（好ましくは炭素数 0 ~ 30、より好ましくは炭素数 0 ~ 20、特に好ましくは炭素数 0 ~ 10 であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、ジフェニルアミノ、及びジトリルアミノなどが挙げられる。）、アルコキシ基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメトキシ、エトキシ、プトキシ、及び 2-エチルヘキシロキシなどが挙げられる。）、アリールオキシ基（好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシ、1-ナフチルオキシ、及び 2-ナフチルオキシなどが挙げられる。）、ヘテロ環オキシ基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジルオキシ、ピラジルオキシ、ピリミジルオキシ、及びキノリルオキシなどが挙げられる。）、

40

## 【 0 1 9 0】

アシル基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは

50



炭素数 1 ~ 12 であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、及びピバロイルなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニル基(好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。)、アリーロキシカルボニル基(好ましくは炭素数 7 ~ 30、より好ましくは炭素数 7 ~ 20、特に好ましくは炭素数 7 ~ 12 であり、例えばフェニロキシカルボニルなどが挙げられる。)、アシルオキシ基(好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。)、アシルアミノ基(好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。)、

10

## 【0191】

アルコキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、アリーロキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数 7 ~ 30、より好ましくは炭素数 7 ~ 20、特に好ましくは炭素数 7 ~ 12 であり、例えばフェニロキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、スルホニルアミノ基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。)、スルファモイル基(好ましくは炭素数 0 ~ 30、より好ましくは炭素数 0 ~ 20、特に好ましくは炭素数 0 ~ 12 であり、例えばスルファモイル、メチルスルファモイル、ジメチルスルファモイル、フェニルスルファモイルなどが挙げられる。)、

20

## 【0192】

カルバモイル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばカルバモイル、メチルカルバモイル、ジエチルカルバモイル、及びフェニルカルバモイルなどが挙げられる。)、アルキルチオ基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。)、アリールチオ基(好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロ環チオ基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミダゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、及び2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、

30

## 【0193】

スルホニル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメシル、トシルなどが挙げられる。)、スルフィニル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメタンスルフィニル、ベンゼンスルフィニルなどが挙げられる。)、ウレイド基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばウレイド、メチルウレイド、フェニルウレイドなどが挙げられる。)、リン酸アミド基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばジエチルリン酸アミド、フェニルリン酸アミドなどが挙げられる。)、ヒドロキシ基、メルカプト基、ハロゲン原子(例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子)、

40

## 【0194】

シアノ基、スルホ基、カルボキシル基、ニトロ基、ヒドロキサム酸基、スルフィノ基、ヒドラジノ基、イミノ基、ヘテロ環基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子、具体的には例えばイミダゾリル、ピリジル、キノリル、フリル、チエニル、ペペリジル、モルホリノ、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル基、アゼピニル基などが挙げられる。)、シリル基(好ましくは炭素数 3 ~ 40、より好ましく

50

は炭素数 3 ~ 30、特に好ましくは炭素数 3 ~ 24 であり、例えばトリメチルシリル、トリフェニルシリルなどが挙げられる。) 、シリルオキシ基 (好ましくは炭素数 3 ~ 40、より好ましくは炭素数 3 ~ 30、特に好ましくは炭素数 3 ~ 24 であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。) などが挙げられる。これらの置換基は更に置換されてもよい。

これらの置換基の中でも、炭素原子上の置換基としては、アルキル基、アリール基、ヘテロ環基、ハロゲン原子が好ましく、より好ましくはアリール基、ハロゲン原子であり、さらに好ましくはフェニル基、フッ素原子である。

【0195】

窒素原子上の置換基としては、前記炭素原子上の置換基として例示した置換基が挙げられ、好ましい範囲も同じである。

【0196】

一般式 (III) 中、 $M^{Y-1}$  は配位子を更に有してもよい金属イオンを表し、他に配位子を有さない金属イオンがより好ましい。

【0197】

$M^{Y-1}$  で表される金属イオンとしては特に限定されないが、2価または3価の金属イオンが好ましい。2価または3価の金属イオンとしては、コバルトイオン、マグネシウムイオン、亜鉛イオン、パラジウムイオン、ニッケルイオン、銅イオン、白金イオン、鉛イオン、アルミニウムイオン、イリジウムイオン、またはユーロピウムイオンが好ましく、コバルトイオン、マグネシウムイオン、亜鉛イオン、パラジウムイオン、ニッケルイオン、銅イオン、白金イオン、または鉛イオンがより好ましく、銅イオン、白金イオンがさらに好ましく、白金イオンが特に好ましい。 $M^{Y-1}$  は、 $Q^{1-1}$  に含まれる原子と結合していても結合していなくてもよく、結合している方が好ましい。

【0198】

$M^{Y-1}$  が、さらに有していてもよい配位子としては、特に限定されないが、単座、もしくは、2座の配位子が好ましく、2座の配位子がより好ましい。配位する原子としては、特に限定されないが、酸素原子、硫黄原子、窒素原子、炭素原子、またはリン原子が好ましく、酸素原子、窒素原子、または炭素原子がより好ましく、酸素原子、窒素原子がさらに好ましい。

【0199】

前記一般式 (III) で表される化合物の好ましい例は、下記一般式 (a) ~ (j) で表される化合物、又はそれらの互変異性体である。

一般式 (III) で表される化合物としては、一般式 (a) 及び一般式 (b) で表される化合物またはその互変異性体がより好ましく、一般式 (b) で表される化合物またはその互変異性体がより好ましい。

また、一般式 (III) で表される化合物としては、一般式 (c) または一般式 (g) で表される化合物も好ましい。

一般式 (c) で表される化合物としては、一般式 (d) で表される化合物またはその互変異性体、一般式 (e) で表される化合物またはその互変異性体、一般式 (f) で表される化合物またはその互変異性体が好ましく、一般式 (d) で表される化合物またはその互変異性体、一般式 (e) で表される化合物またはその互変異性体がより好ましく、一般式 (d) で表される化合物またはその互変異性体がさらに好ましい。

【0200】

一般式 (g) で表される化合物としては、一般式 (h) で表される化合物またはその互変異性体、一般式 (i) で表される化合物またはその互変異性体、一般式 (j) で表される化合物またはその互変異性体が好ましく、一般式 (h) で表される化合物またはその互変異性体、一般式 (i) で表される化合物またはその互変異性体がより好ましく、一般式 (h) 表される化合物またはその互変異性体がさらに好ましい。

【0201】

以下、一般式 (a) ~ (j) で表される化合物について詳細に説明する。

10

20

30

40

50



<sup>5</sup>とR<sup>4 6</sup>が結合して環構造（例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など）を形成する基がより好ましく、R<sup>4 3</sup>とR<sup>4 4</sup>またはR<sup>4 5</sup>とR<sup>4 6</sup>が結合して環構造（例えば、ベンゾ縮環、ピリジン縮環など）を形成する基がさらに好ましい。

【0210】

R<sup>4 3</sup>、R<sup>4 4</sup>、R<sup>4 5</sup>、及びR<sup>4 6</sup>はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表す。置換基としては前記一般式(III)におけるZ<sup>1 1</sup>又はZ<sup>1 2</sup>について炭素原子上の置換基で説明した基が挙げられる。

【0211】

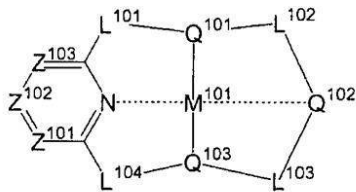
一般式(c)で表される化合物について説明する。

【0212】

10

【化24】

一般式(c)



【0213】

20

一般式(c)中、Z<sup>1 0 1</sup>、Z<sup>1 0 2</sup>、及びZ<sup>1 0 3</sup>はそれぞれ独立に置換又は無置換の、炭素原子又は窒素原子を表す。Z<sup>1 0 1</sup>、Z<sup>1 0 2</sup>、及びZ<sup>1 0 3</sup>の少なくとも一つが窒素原子であることが好ましい。

【0214】

L<sup>1 0 1</sup>、L<sup>1 0 2</sup>、L<sup>1 0 3</sup>、及びL<sup>1 0 4</sup>はそれぞれ独立に単結合または連結基を表す。連結としては特に限定されないが、例えば、カルボニル連結基、アルキレン基、アルケニレン基、アリーレン基、ヘテロアリーレン基、含窒素ヘテロ環連結基、酸素原子連結基、アミノ連結基、イミノ連結基、カルボニル連結基、及び、これらの組み合わせからなる連結基などが挙げられる。

【0215】

30

L<sup>1 0 1</sup>、L<sup>1 0 2</sup>、L<sup>1 0 3</sup>、及びL<sup>1 0 4</sup>はそれぞれ独立に単結合、アルキレン基、アルケニレン基、アミノ連結基、又はイミノ連結基が好ましく、単結合、アルキレン連結基、アルケニレン連結基、又はイミノ連結基がより好ましく、単結合、アルキレン連結基がさらに好ましい。

【0216】

Q<sup>1 0 1</sup>、Q<sup>1 0 3</sup>はそれぞれ独立にM<sup>1 0 1</sup>に炭素原子で配位する基、窒素原子で配位する基、リン原子で配位する基、酸素原子で配位する基、または、硫黄原子で配位する基を表す。

【0217】

M<sup>1 0 1</sup>に炭素原子で配位する基としては、炭素原子で配位するアリール基、炭素原子で配位する5員環ヘテロアリール基、炭素原子で配位する6員環ヘテロアリール基が好ましく、炭素原子で配位するアリール基、炭素原子で配位する含窒素5員環ヘテロアリール基、炭素原子で配位する含窒素6員環ヘテロアリール基がより好ましく、炭素原子で配位するアリール基がさらに好ましい。

40

【0218】

M<sup>1 0 1</sup>に窒素原子で配位する基としては、窒素原子で配位する含窒素5員環ヘテロアリール基、窒素原子で配位する含窒素6員環ヘテロアリール基が好ましく、窒素原子で配位する含窒素6員環ヘテロアリール基がより好ましい。

【0219】

M<sup>1 0 1</sup>にリン原子で配位する基としては、リン原子で配位するアルキルホスフィン基

50

、リン原子で配位するアリールホスフィン基、リン原子で配位するアルコキシホスフィン基、リン原子で配位するアリールオキシホスフィン基、リン原子で配位するヘテロアリールオキシホスフィン基、リン原子で配位するホスフィニン基、リン原子で配位するホスホール基が好ましく、リン原子で配位するアルキルホスフィン基、リン原子で配位するアリールホスフィン基がより好ましい。

【0220】

$M^{101}$  に酸素原子で配位する基としては、オキシ基、酸素原子で配位するカルボニル基が好ましく、オキシ基がさらに好ましい。

【0221】

$M^{101}$  に硫黄原子で配位する基としては、スルフィド基、チオフェン基、またはチアゾール基が好ましく、チオフェン基がより好ましい。

10

【0222】

$Q^{101}$ 、 $Q^{103}$  は  $M^{101}$  に炭素原子で配位する基、窒素原子で配位する基、酸素原子で配位する基が好ましく、炭素原子で配位する基、窒素原子で配位する基がより好ましく、炭素原子で配位する基がさらに好ましい。

【0223】

$Q^{102}$  は  $M^{101}$  に窒素原子で配位する基、リン原子で配位する基、酸素原子で配位する基、または、硫黄原子で配位する基を表し、窒素原子で配位する基がより好ましい。

【0224】

$M^{101}$  は前記一般式 (I) における  $M^{11}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。

20

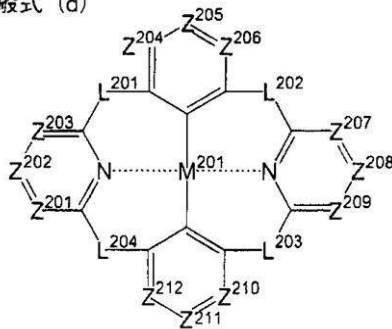
【0225】

一般式 (d) で表される化合物について説明する。

【0226】

【化25】

一般式 (d)



30

【0227】

一般式 (d) 中、 $Z^{201}$ 、 $Z^{202}$ 、 $Z^{203}$ 、 $Z^{207}$ 、 $Z^{208}$ 、 $Z^{209}$ 、 $L^{201}$ 、 $L^{202}$ 、 $L^{203}$ 、 $L^{204}$ 、及び  $M^{201}$  はそれぞれ対応する前記一般式 (c) における  $Z^{101}$ 、 $Z^{102}$ 、 $Z^{103}$ 、 $Z^{101}$ 、 $Z^{102}$ 、 $Z^{103}$ 、 $L^{101}$ 、 $L^{102}$ 、 $L^{103}$ 、 $L^{104}$ 、及び  $M^{101}$  と同義であり、好ましい範囲も同じである。 $Z^{204}$ 、 $Z^{205}$ 、 $Z^{206}$ 、 $Z^{210}$ 、 $Z^{211}$ 、及び  $Z^{212}$  はそれぞれ置換または無置換の炭素原子又は窒素原子を表し、置換または無置換の炭素原子が好ましい。

40

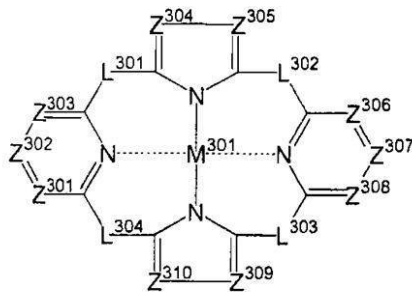
【0228】

一般式 (e) で表される化合物について説明する。

【0229】

## 【化26】

一般式(e)



10

## 【0230】

一般式(e)中、Z<sup>301</sup>、Z<sup>302</sup>、Z<sup>303</sup>、Z<sup>304</sup>、Z<sup>305</sup>、Z<sup>306</sup>、Z<sup>307</sup>、Z<sup>308</sup>、Z<sup>309</sup>、Z<sup>310</sup>、L<sup>301</sup>、L<sup>302</sup>、L<sup>303</sup>、L<sup>304</sup>、及びM<sup>301</sup>は、それぞれ対応する前記一般式(d)、(c)におけるZ<sup>201</sup>、Z<sup>202</sup>、Z<sup>203</sup>、Z<sup>204</sup>、Z<sup>206</sup>、Z<sup>207</sup>、Z<sup>208</sup>、Z<sup>209</sup>、Z<sup>210</sup>、Z<sup>212</sup>、L<sup>101</sup>、L<sup>102</sup>、L<sup>103</sup>、L<sup>104</sup>、及びM<sup>101</sup>と同義であり、好ましい範囲も同じである。

## 【0231】

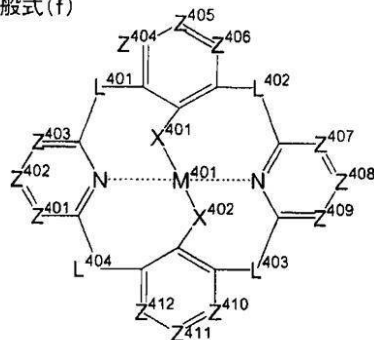
一般式(f)で表される化合物について説明する。

20

## 【0232】

## 【化27】

一般式(f)



30

## 【0233】

一般式(f)中、Z<sup>401</sup>、Z<sup>402</sup>、Z<sup>403</sup>、Z<sup>404</sup>、Z<sup>405</sup>、Z<sup>406</sup>、Z<sup>407</sup>、Z<sup>408</sup>、Z<sup>409</sup>、Z<sup>410</sup>、Z<sup>411</sup>、Z<sup>412</sup>、L<sup>401</sup>、L<sup>402</sup>、L<sup>403</sup>、L<sup>404</sup>、及びM<sup>401</sup>は、それぞれ対応する前記一般式(d)、(c)におけるZ<sup>201</sup>、Z<sup>202</sup>、Z<sup>203</sup>、Z<sup>204</sup>、Z<sup>205</sup>、Z<sup>206</sup>、Z<sup>207</sup>、Z<sup>208</sup>、Z<sup>209</sup>、Z<sup>210</sup>、Z<sup>211</sup>、Z<sup>212</sup>、L<sup>101</sup>、L<sup>102</sup>、L<sup>103</sup>、L<sup>104</sup>、及びM<sup>101</sup>と同義であり、好ましい範囲も同じである。

X<sup>401</sup>、X<sup>402</sup>はそれぞれ独立に酸素原子、置換又は無置換の窒素原子、硫黄原子を表し、酸素原子、置換窒素原子が好ましく、酸素原子がより好ましい。

40

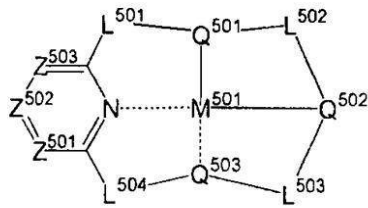
## 【0234】

一般式(g)で表される化合物について説明する

## 【0235】

## 【化 2 8】

一般式(g)



10

## 【 0 2 3 6】

一般式(g)中、Z<sup>501</sup>、Z<sup>502</sup>、Z<sup>503</sup>、L<sup>501</sup>、L<sup>502</sup>、L<sup>503</sup>、L<sup>504</sup>、Q<sup>501</sup>、Q<sup>502</sup>、Q<sup>503</sup>、及びM<sup>501</sup>は、それぞれ対応する前記一般式(c)におけるZ<sup>101</sup>、Z<sup>102</sup>、Z<sup>103</sup>、L<sup>101</sup>、L<sup>102</sup>、L<sup>103</sup>、L<sup>104</sup>、Q<sup>101</sup>、Q<sup>103</sup>、Q<sup>102</sup>、及びM<sup>101</sup>と同義であり、好ましい範囲も同じである。

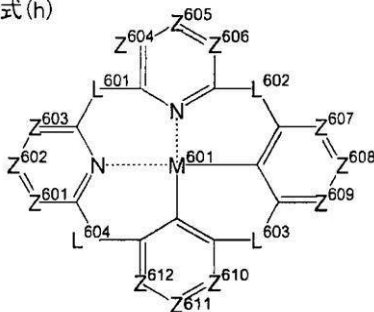
## 【 0 2 3 7】

一般式(h)で表される化合物について説明する。

## 【 0 2 3 8】

## 【化 2 9】

一般式(h)



20

30

## 【 0 2 3 9】

一般式(h)中、Z<sup>601</sup>、Z<sup>602</sup>、Z<sup>603</sup>、Z<sup>604</sup>、Z<sup>605</sup>、Z<sup>606</sup>、Z<sup>607</sup>、Z<sup>608</sup>、Z<sup>609</sup>、Z<sup>610</sup>、Z<sup>611</sup>、Z<sup>612</sup>、L<sup>601</sup>、L<sup>602</sup>、L<sup>603</sup>、L<sup>604</sup>、及びM<sup>601</sup>は、それぞれ対応する前記一般式(d)、(c)におけるZ<sup>201</sup>、Z<sup>202</sup>、Z<sup>203</sup>、Z<sup>207</sup>、Z<sup>208</sup>、Z<sup>209</sup>、Z<sup>204</sup>、Z<sup>205</sup>、Z<sup>206</sup>、Z<sup>210</sup>、Z<sup>211</sup>、Z<sup>212</sup>、L<sup>101</sup>、L<sup>102</sup>、L<sup>103</sup>、L<sup>104</sup>、及びM<sup>101</sup>と同義であり、好ましい範囲も同じである。

## 【 0 2 4 0】

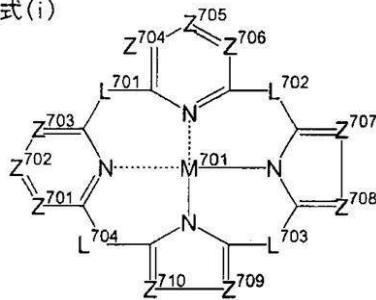
一般式(i)で表される化合物について説明する。

## 【 0 2 4 1】

40

## 【化30】

一般式(i)



10

## 【0242】

一般式(i)中、Z<sup>701</sup>、Z<sup>702</sup>、Z<sup>703</sup>、Z<sup>704</sup>、Z<sup>705</sup>、Z<sup>706</sup>、Z<sup>707</sup>、Z<sup>708</sup>、Z<sup>709</sup>、Z<sup>710</sup>、L<sup>701</sup>、L<sup>702</sup>、L<sup>703</sup>、L<sup>704</sup>、及びM<sup>701</sup>はそれぞれ対応する前記一般式(d)、(c)におけるZ<sup>201</sup>、Z<sup>202</sup>、Z<sup>203</sup>、Z<sup>207</sup>、Z<sup>208</sup>、Z<sup>209</sup>、Z<sup>204</sup>、Z<sup>206</sup>、Z<sup>210</sup>、Z<sup>212</sup>、L<sup>101</sup>、L<sup>102</sup>、L<sup>103</sup>、L<sup>104</sup>、及びM<sup>101</sup>と同義であり、好ましい範囲も同じである。

## 【0243】

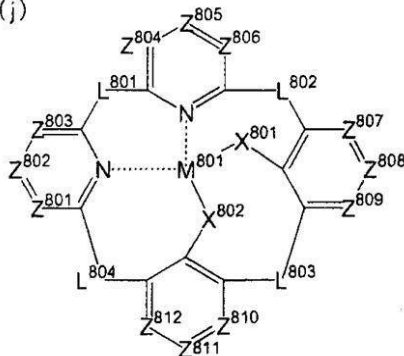
一般式(j)で表される化合物について説明する。

20

## 【0244】

## 【化31】

一般式(j)



30

## 【0245】

一般式(j)中、Z<sup>801</sup>、Z<sup>802</sup>、Z<sup>803</sup>、Z<sup>804</sup>、Z<sup>805</sup>、Z<sup>806</sup>、Z<sup>807</sup>、Z<sup>808</sup>、Z<sup>809</sup>、Z<sup>810</sup>、Z<sup>811</sup>、Z<sup>812</sup>、L<sup>801</sup>、L<sup>802</sup>、L<sup>803</sup>、L<sup>804</sup>、M<sup>801</sup>、X<sup>801</sup>、及びX<sup>802</sup>は、それぞれ対応する前記一般式(d)、(c)、(f)におけるZ<sup>201</sup>、Z<sup>202</sup>、Z<sup>203</sup>、Z<sup>207</sup>、Z<sup>208</sup>、Z<sup>209</sup>、Z<sup>204</sup>、Z<sup>205</sup>、Z<sup>206</sup>、Z<sup>210</sup>、Z<sup>211</sup>、Z<sup>212</sup>、L<sup>101</sup>、L<sup>102</sup>、L<sup>103</sup>、L<sup>104</sup>、M<sup>101</sup>、X<sup>401</sup>、及びX<sup>402</sup>と同義であり、好ましい範囲も同じである。

40

## 【0246】

一般式(III)で表される化合物の具体例としては、特表2006-526278号公報に記載の化合物(2)~化合物(8)、化合物(15)~化合物(20)、化合物(27)~化合物(32)、化合物(36)~化合物(38)、化合物(42)~化合物(44)、化合物(50)~化合物(52)、及び、化合物(57)~化合物(154)が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

## 【0247】

さらに、本発明における金属錯体の好ましい例としては、下記一般式(A-1)、下記一般式(B-1)、下記一般式(C-1)、下記一般式(D-1)、下記一般式(E-1

50



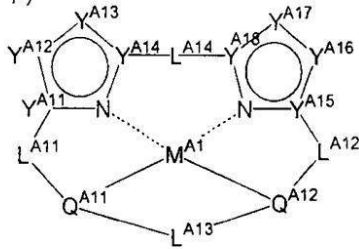
)、及び下記一般式(F-1)で表される各化合物が挙げられる。

一般式(A-1)について説明する。

【0248】

【化32】

一般式(A-1)



10

【0249】

一般式(A-1)中、 $M^{A1}$ は金属イオンを表す。 $Y^{A11}$ 、 $Y^{A14}$ 、 $Y^{A15}$ および $Y^{A18}$ は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 $Y^{A12}$ 、 $Y^{A13}$ 、 $Y^{A16}$ および $Y^{A17}$ はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 $L^{A11}$ 、 $L^{A12}$ 、 $L^{A13}$ 、及び $L^{A14}$ は連結基を表し、これらの連結基は、同一構造であっても異なる構造であっても良い。 $Q^{A11}$ 、 $Q^{A12}$ は $M^{A1}$ に配位結合、イオン結合、又は共有結合で結合する原子を含有する部分構造を表す。

20

【0250】

一般式(A-1)で表される化合物について、詳細に説明する。

$M^{A1}$ は金属イオンを表す。金属イオンとしては特に限定されることはないが、2価の金属イオンが好ましく、 $Pt^{2+}$ 、 $Pd^{2+}$ 、 $Cu^{2+}$ 、 $Ni^{2+}$ 、 $Co^{2+}$ 、 $Zn^{2+}$ 、 $Mg^{2+}$ 、又は $Pb^{2+}$ が好ましく、 $Pt^{2+}$ 、 $Cu^{2+}$ がより好ましく、 $Pt^{2+}$ が特に好ましい。

$Y^{A11}$ 、 $Y^{A14}$ 、 $Y^{A15}$ および $Y^{A18}$ は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 $Y^{A11}$ 、 $Y^{A14}$ 、 $Y^{A15}$ および $Y^{A18}$ として好ましくは、炭素原子である。

30

$Y^{A12}$ 、 $Y^{A13}$ 、 $Y^{A16}$ および $Y^{A17}$ はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 $Y^{A12}$ 、 $Y^{A13}$ 、 $Y^{A16}$ および $Y^{A17}$ として好ましくは、置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子である。

$L^{A11}$ 、 $L^{A12}$ 、 $L^{A13}$ 、及び $L^{A14}$ は二価の連結基を表す。 $L^{A11}$ 、 $L^{A12}$ 、 $L^{A13}$ 、及び $L^{A14}$ で表される二価の連結基としては、それぞれ独立に単結合のほか、炭素、窒素、珪素、硫黄、酸素、ゲルマニウム、リン等で構成される連結基であり、より好ましくは、単結合、置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、置換珪素原子、酸素原子、硫黄原子、二価の芳香族炭化水素環基、二価の芳香族ヘテロ環基であり、さらに好ましくは単結合、置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、置換珪素原子、二価の芳香族炭化水素環基、二価の芳香族ヘテロ環基であり、特に好ましくは、単結合、置換または無置換のメチレン基である。 $L^{A11}$ 、 $L^{A12}$ 、 $L^{A13}$ 、及び $L^{A14}$ で表される二価の連結基としては、例えば以下のものが挙げられる。

40

【0251】



ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジルオキシ、ピラジルオキシ、ピリミジルオキシ、及びキノリルオキシなどが挙げられる。)、アシル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、及びピパロイルなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニル基(好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。)、アリーロキシカルボニル基(好ましくは炭素数 7 ~ 30、より好ましくは炭素数 7 ~ 20、特に好ましくは炭素数 7 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシカルボニルなどが挙げられる。)、

【0255】

アシルオキシ基(好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。)、アシルアミノ基(好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、アリーロキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数 7 ~ 30、より好ましくは炭素数 7 ~ 20、特に好ましくは炭素数 7 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、

【0256】

スルホニルアミノ基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。)、スルファモイル基(好ましくは炭素数 0 ~ 30、より好ましくは炭素数 0 ~ 20、特に好ましくは炭素数 0 ~ 12 であり、例えばスルファモイル、メチルスルファモイル、ジメチルスルファモイル、フェニルスルファモイルなどが挙げられる。)、カルバモイル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばカルバモイル、メチルカルバモイル、ジエチルカルバモイル、フェニルカルバモイルなどが挙げられる。)、

【0257】

アルキルチオ基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。)、アリールチオ基(好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロ環チオ基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、及び2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、スルホニル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメシル、トシルなどが挙げられる。)、スルフィニル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメタンスルフィニル、ベンゼンスルフィニルなどが挙げられる。)、

【0258】

ウレイド基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばウレイド、メチルウレイド、フェニルウレイドなどが挙げられる。)、リン酸アミド基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばジエチルリン酸アミド、フェニルリン酸アミドなどが挙げられる。)、ヒドロキシ基、メルカプト基、ハロゲン原子(例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、又はヨウ素原子)、シアノ基、スルホ基、カルボキシル基、ニトロ基、ヒドロキサム酸基、スルフィノ基、ヒドラジノ基、イミノ基、

【0259】

ヘテロ環基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、ヘテロ

10

20

30

40

50

原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子であり、具体的にはイミダゾリル、ピリジル、キノリル、フリル、チエニル、ピペリジル、モルホリノ、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル基、及びアゼピニル基などが挙げられる。)、シリル基(好ましくは炭素数3~40、より好ましくは炭素数3~30、特に好ましくは炭素数3~24であり、例えばトリメチルシリル、トリフェニルシリルなどが挙げられる。)、シリルオキシ基(好ましくは炭素数3~40、より好ましくは炭素数3~30、特に好ましくは炭素数3~24であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。)などが挙げられる。

【0260】

これらの置換基は更に置換されてもよい。置換基として好ましくは、アルキル基、アリール基、ヘテロ環基、ハロゲン原子、又はシリル基であり、より好ましくはアルキル基、アリール基、ヘテロ環基、又はハロゲン原子であり、さらに好ましくはアルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、又はフッ素原子である。

10

【0261】

$Q^{A11}$ 、 $Q^{A12}$ は $M^{A1}$ に配位結合、イオン結合、又は共有結合で結合する原子を含有する部分構造を表す。 $Q^{A11}$ 、 $Q^{A12}$ はそれぞれ独立に $M^{A1}$ に炭素原子で結合する基、窒素原子で結合する基、珪素原子で結合する基、リン原子で結合する基、酸素原子で結合する基、硫黄原子で結合する基が好ましく、炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子で結合する基がより好ましく、炭素原子、窒素原子で結合する基がさらに好ましく、炭素原子で結合する基が特に好ましい。

20

【0262】

炭素原子で結合する基としては、炭素原子で結合するアリール基、炭素原子で結合する五員環ヘテロアリール基、炭素原子で結合する六員環ヘテロアリール基が好ましく、炭素原子で結合するアリール基、炭素原子で結合する含窒素五員環ヘテロアリール基、炭素原子で結合する含窒素六員環ヘテロアリール基がより好ましく、炭素原子で結合するアリール基が特に好ましい。

【0263】

窒素原子で結合する基としては、置換アミノ基、窒素原子で結合する含窒素ヘテロ五員環ヘテロアリール基が好ましく、窒素原子で結合する含窒素ヘテロ五員環ヘテロアリール基が特に好ましい。

30

【0264】

リン原子で結合する基としては、置換ホスフィノ基が好ましい。珪素原子で結合する基としては、置換シリル基が好ましい。酸素原子で結合する基としてはオキシ基、硫黄原子で結合する基としてはスルフィド基が好ましい。

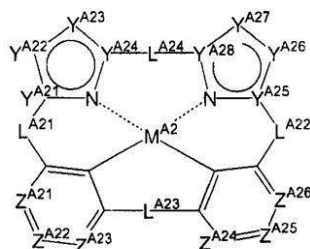
【0265】

前記一般式(A-1)で表される化合物は、より好ましくは一般式(A-2)、一般式(A-3)、又は一般式(A-4)で表される化合物である。

【0266】

【化34】

一般式(A-2)



40

【0267】

一般式(A-2)中、 $M^{A2}$ は金属イオンを表す。 $Y^{A21}$ 、 $Y^{A24}$ 、 $Y^{A25}$ および $Y^{A28}$ は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 $Y^{A22}$ 、 $Y^{A23}$ 、 $Y$

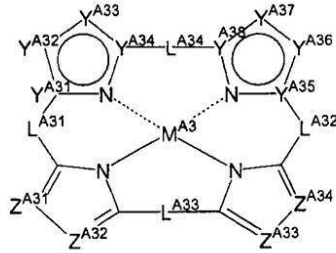
50

$A^{26}$  および  $Y^{A27}$  はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 $L^{A21}$ 、 $L^{A22}$ 、 $L^{A23}$ 、及び  $L^{A24}$  は連結基を表す。 $Z^{A21}$ 、 $Z^{A22}$ 、 $Z^{A23}$ 、 $Z^{A24}$ 、 $Z^{A25}$  および  $Z^{A26}$  はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

【0268】

【化35】

一般式 (A-3)



10

【0269】

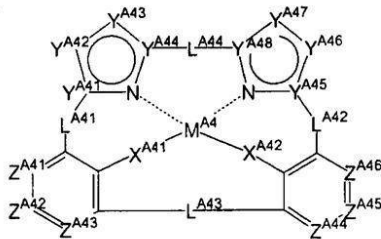
一般式 (A-3) 中、 $M^{A3}$  は金属イオンを表す。 $Y^{A31}$ 、 $Y^{A34}$ 、 $Y^{A35}$  および  $Y^{A38}$  は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 $Y^{A32}$ 、 $Y^{A33}$ 、 $Y^{A36}$  および  $Y^{A37}$  はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 $L^{A31}$ 、 $L^{A32}$ 、 $L^{A33}$ 、及び  $L^{A34}$  は連結基を表す。 $Z^{A31}$ 、 $Z^{A32}$ 、 $Z^{A33}$  および  $Z^{A34}$  はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

20

【0270】

【化36】

一般式 (A-4)



30

【0271】

一般式 (A-4) 中、 $M^{A4}$  は金属イオンを表す。 $Y^{A41}$ 、 $Y^{A44}$ 、 $Y^{A45}$  および  $Y^{A48}$  は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 $Y^{A42}$ 、 $Y^{A43}$ 、 $Y^{A46}$  および  $Y^{A47}$  はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 $L^{A41}$ 、 $L^{A42}$ 、 $L^{A43}$ 、及び  $L^{A44}$  は連結基を表す。 $Z^{A41}$ 、 $Z^{A42}$ 、 $Z^{A43}$ 、 $Z^{A44}$ 、 $Z^{A45}$  および  $Z^{A46}$  はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $X^{A41}$ 、 $X^{A42}$  はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。

【0272】

一般式 (A-2) で表される化合物について詳細に説明する。

$M^{A2}$ 、 $Y^{A21}$ 、 $Y^{A24}$ 、 $Y^{A25}$ 、 $Y^{A28}$ 、 $Y^{A22}$ 、 $Y^{A23}$ 、 $Y^{A26}$ 、 $Y^{A27}$ 、 $L^{A21}$ 、 $L^{A22}$ 、 $L^{A23}$ 、及び  $L^{A24}$  はそれぞれ対応する、一般式 (A-1) 中の  $M^{A1}$ 、 $Y^{A11}$ 、 $Y^{A14}$ 、 $Y^{A15}$ 、 $Y^{A18}$ 、 $Y^{A12}$ 、 $Y^{A13}$ 、 $Y^{A16}$ 、 $Y^{A17}$ 、 $L^{A11}$ 、 $L^{A12}$ 、 $L^{A13}$ 、及び  $L^{A14}$  と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

$Z^{A21}$ 、 $Z^{A22}$ 、 $Z^{A23}$ 、 $Z^{A24}$ 、 $Z^{A25}$  および  $Z^{A26}$  はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $Z^{A21}$ 、 $Z^{A22}$ 、 $Z^{A23}$ 、 $Z^{A24}$ 、 $Z^{A25}$  および  $Z^{A26}$  として好ましくはそれぞれ独立に置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換

40

50

基としては一般式(A-1)における $L^{A11}$ 、 $L^{A12}$ 、 $L^{A13}$ 、及び $L^{A14}$ で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

【0273】

一般式(A-3)で表される化合物について詳細に説明する。

$M^{A3}$ 、 $Y^{A31}$ 、 $Y^{A34}$ 、 $Y^{A35}$ 、 $Y^{A38}$ 、 $Y^{A32}$ 、 $Y^{A33}$ 、 $Y^{A36}$ 、 $Y^{A37}$ 、 $L^{A31}$ 、 $L^{A32}$ 、 $L^{A33}$ 、及び $L^{A34}$ はそれぞれ対応する、一般式(A-1)中の $M^{A1}$ 、 $Y^{A11}$ 、 $Y^{A14}$ 、 $Y^{A15}$ 、 $Y^{A18}$ 、 $Y^{A12}$ 、 $Y^{A13}$ 、 $Y^{A16}$ 、 $Y^{A17}$ 、 $L^{A11}$ 、 $L^{A12}$ 、 $L^{A13}$ 、及び $L^{A14}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

$Z^{A31}$ 、 $Z^{A32}$ 、 $Z^{A33}$ 、および $Z^{A34}$ はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $Z^{A31}$ 、 $Z^{A32}$ 、 $Z^{A33}$ 、および $Z^{A34}$ として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式(A-1)における $L^{A11}$ 、 $L^{A12}$ 、 $L^{A13}$ 、及び $L^{A14}$ で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

10

【0274】

一般式(A-4)で表される化合物について詳細に説明する。

$M^{A4}$ 、 $Y^{A41}$ 、 $Y^{A44}$ 、 $Y^{A45}$ 、 $Y^{A48}$ 、 $Y^{A42}$ 、 $Y^{A43}$ 、 $Y^{A46}$ 、 $Y^{A47}$ 、 $L^{A41}$ 、 $L^{A42}$ 、 $L^{A43}$ 、及び $L^{A44}$ はそれぞれ対応する、一般式(A-1)中の $M^{A1}$ 、 $Y^{A11}$ 、 $Y^{A14}$ 、 $Y^{A15}$ 、 $Y^{A18}$ 、 $Y^{A12}$ 、 $Y^{A13}$ 、 $Y^{A16}$ 、 $Y^{A17}$ 、 $L^{A11}$ 、 $L^{A12}$ 、 $L^{A13}$ 、及び $L^{A14}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

20

$Z^{A41}$ 、 $Z^{A42}$ 、 $Z^{A43}$ 、 $Z^{A44}$ 、 $Z^{A45}$ および $Z^{A46}$ はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $Z^{A41}$ 、 $Z^{A42}$ 、 $Z^{A43}$ 、 $Z^{A44}$ 、 $Z^{A45}$ および $Z^{A46}$ として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式(A-1)における $L^{A11}$ 、 $L^{A12}$ 、 $L^{A13}$ 、及び $L^{A14}$ で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

$X^{A41}$ 、 $X^{A42}$ はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。 $X^{A41}$ 、 $X^{A42}$ として好ましくはそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子であり、より好ましくは酸素原子である。

30

【0275】

一般式(A-1)で表される化合物の具体例として特開2007-103493号に記載の化合物(A1)~(A80)の化合物が挙げられるが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。

【0276】

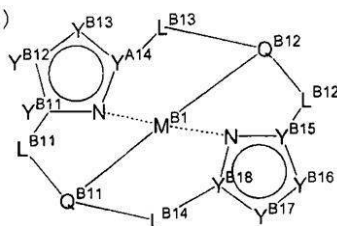
本発明における金属錯体の内、好ましい化合物の一つは、下記一般式(B-1)で表される化合物である。

【0277】

【化37】

40

一般式(B-1)



【0278】

一般式(B-1)中、 $M^{B1}$ は金属イオンを表す。 $Y^{B11}$ 、 $Y^{B14}$ 、 $Y^{B15}$ およ

50

び  $Y^{B18}$  は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 $Y^{B12}$ 、 $Y^{B13}$ 、 $Y^{B16}$  および  $Y^{B17}$  はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 $L^{B11}$ 、 $L^{B12}$ 、 $L^{B13}$ 、及び  $L^{B14}$  は連結基を表す。 $Q^{B11}$ 、 $Q^{B12}$  は  $M^{B1}$  に共有結合で結合する原子を含有する部分構造を表す。

【0279】

一般式 (B-1) について詳細に説明する。

一般式 (B-1) 中、 $M^{B1}$ 、 $Y^{B11}$ 、 $Y^{B14}$ 、 $Y^{B15}$ 、 $Y^{B18}$ 、 $Y^{B12}$ 、 $Y^{B13}$ 、 $Y^{B16}$ 、 $Y^{B17}$ 、 $L^{B11}$ 、 $L^{B12}$ 、 $L^{B13}$ 、 $L^{B14}$ 、 $Q^{B11}$ 、及び  $Q^{B12}$  は、それぞれ対応する、一般式 (A-1) 中における、 $M^{A1}$ 、 $Y^{A11}$ 、 $Y^{A14}$ 、 $Y^{A15}$ 、 $Y^{A18}$ 、 $Y^{A12}$ 、 $Y^{A13}$ 、 $Y^{A16}$ 、 $Y^{A17}$ 、 $L^{A11}$ 、 $L^{A12}$ 、 $L^{A13}$ 、 $L^{A14}$ 、 $Q^{A11}$ 、及び  $Q^{A12}$  と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

10

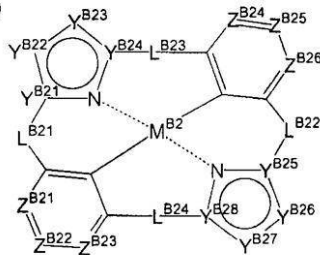
【0280】

一般式 (B-1) で表される化合物は、より好ましくは、下記一般式 (B-2)、一般式 (B-3)、又は一般式 (B-4) で表される化合物である。

【0281】

【化38】

一般式 (B-2)



20

【0282】

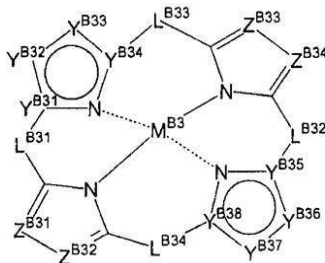
一般式 (B-2) 中、 $M^{B2}$  は金属イオンを表す。 $Y^{B21}$ 、 $Y^{B24}$ 、 $Y^{B25}$  および  $Y^{B28}$  は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 $Y^{B22}$ 、 $Y^{B23}$ 、 $Y^{B26}$  および  $Y^{B27}$  はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 $L^{B21}$ 、 $L^{B22}$ 、 $L^{B23}$ 、及び  $L^{B24}$  は連結基を表す。 $Z^{B21}$ 、 $Z^{B22}$ 、 $Z^{B23}$ 、 $Z^{B24}$ 、 $Z^{B25}$  および  $Z^{B26}$  はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

30

【0283】

【化39】

一般式 (B-3)



40

【0284】

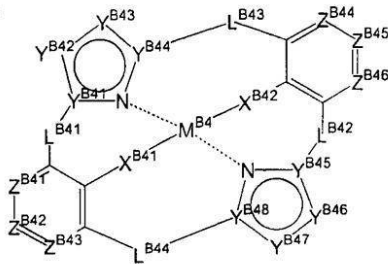
一般式 (B-3) 中、 $M^{B3}$  は金属イオンを表す。 $Y^{B31}$ 、 $Y^{B34}$ 、 $Y^{B35}$  および  $Y^{B38}$  は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 $Y^{B32}$ 、 $Y^{B33}$ 、 $Y^{B36}$  および  $Y^{B37}$  は、それぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 $L^{B31}$ 、 $L^{B32}$ 、 $L^{B33}$ 、及び  $L^{B34}$  は連結基を表す。 $Z^{B31}$ 、 $Z^{B32}$ 、 $Z^{B33}$  および  $Z^{B34}$  は、それぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

50

【 0 2 8 5 】

【 化 4 0 】

一般式 (B-4)



10

【 0 2 8 6 】

一般式 (B-4) 中、 $M^{B4}$  は金属イオンを表す。 $Y^{B41}$ 、 $Y^{B44}$ 、 $Y^{B45}$  および  $Y^{B48}$  は、それぞれ独立に炭素原子または窒素原子を表す。 $Y^{B42}$ 、 $Y^{B43}$ 、 $Y^{B46}$  および  $Y^{B47}$  はそれぞれ独立に置換または無置換の炭素原子、置換または無置換の窒素原子、酸素原子、硫黄原子を表す。 $L^{B41}$ 、 $L^{B42}$ 、 $L^{B43}$ 、及び  $L^{B44}$  は連結基を表す。 $Z^{B41}$ 、 $Z^{B42}$ 、 $Z^{B43}$ 、 $Z^{B44}$ 、 $Z^{B45}$  および  $Z^{B46}$  はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $X^{B41}$ 、 $X^{B42}$  はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。

【 0 2 8 7 】

一般式 (B-2) で表される化合物について詳細に説明する。

20

一般式 (B-2) 中、 $M^{B2}$ 、 $Y^{B21}$ 、 $Y^{B24}$ 、 $Y^{B25}$ 、 $Y^{B28}$ 、 $Y^{B22}$ 、 $Y^{B23}$ 、 $Y^{B26}$ 、 $Y^{B27}$ 、 $L^{B21}$ 、 $L^{B22}$ 、 $L^{B23}$ 、及び  $L^{B24}$  はそれぞれ対応する、一般式 (B-1) 中の  $M^{B1}$ 、 $Y^{B11}$ 、 $Y^{B14}$ 、 $Y^{B15}$ 、 $Y^{B18}$ 、 $Y^{B12}$ 、 $Y^{B13}$ 、 $Y^{B16}$ 、 $Y^{B17}$ 、 $L^{B11}$ 、 $L^{B12}$ 、 $L^{B13}$ 、及び  $L^{B14}$  と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

$Z^{B21}$ 、 $Z^{B22}$ 、 $Z^{B23}$ 、 $Z^{B24}$ 、 $Z^{B25}$  および  $Z^{B26}$  は、それぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $Z^{B21}$ 、 $Z^{B22}$ 、 $Z^{B23}$ 、 $Z^{B24}$ 、 $Z^{B25}$  および  $Z^{B26}$  として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A-1) における  $L^{A11}$ 、 $L^{A12}$ 、 $L^{A13}$ 、及び  $L^{A14}$  で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

30

【 0 2 8 8 】

一般式 (B-3) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (B-3) 中、 $M^{B3}$ 、 $Y^{B31}$ 、 $Y^{B34}$ 、 $Y^{B35}$ 、 $Y^{B38}$ 、 $Y^{B32}$ 、 $Y^{B33}$ 、 $Y^{B36}$ 、 $Y^{B37}$ 、 $L^{B31}$ 、 $L^{B32}$ 、 $L^{B33}$ 、及び  $L^{B34}$  はそれぞれ対応する、一般式 (B-1) 中の  $M^{B1}$ 、 $Y^{B11}$ 、 $Y^{B14}$ 、 $Y^{B15}$ 、 $Y^{B18}$ 、 $Y^{B12}$ 、 $Y^{B13}$ 、 $Y^{B16}$ 、 $Y^{B17}$ 、 $L^{B11}$ 、 $L^{B12}$ 、 $L^{B13}$ 、及び  $L^{B14}$  と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

$Z^{B31}$ 、 $Z^{B32}$ 、 $Z^{B33}$ 、および  $Z^{B34}$  はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $Z^{B31}$ 、 $Z^{B32}$ 、 $Z^{B33}$ 、および  $Z^{B34}$  として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A-1) における  $L^{A11}$ 、 $L^{A12}$ 、 $L^{A13}$ 、及び  $L^{A14}$  で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

40

【 0 2 8 9 】

一般式 (B-4) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (B-4) 中、 $M^{B4}$ 、 $Y^{B41}$ 、 $Y^{B44}$ 、 $Y^{B45}$ 、 $Y^{B48}$ 、 $Y^{B42}$ 、 $Y^{B43}$ 、 $Y^{B46}$ 、 $Y^{B47}$ 、 $L^{B41}$ 、 $L^{B42}$ 、 $L^{B43}$ 、及び  $L^{B44}$  はそれぞれ対応する、一般式 (B-1) 中の  $M^{B1}$ 、 $Y^{B11}$ 、 $Y^{B14}$ 、 $Y^{B15}$ 、 $Y^{B18}$ 、 $Y^{B12}$ 、 $Y^{B13}$ 、 $Y^{B16}$ 、 $Y^{B17}$ 、 $L^{B11}$ 、 $L^{B12}$ 、 $L^{B13}$ 、及び  $L^{B14}$

50



<sup>4</sup> と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

$Z^{B 4 1}$ 、 $Z^{B 4 2}$ 、 $Z^{B 4 3}$ 、 $Z^{B 4 4}$ 、 $Z^{B 4 5}$  および  $Z^{B 4 6}$  はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $Z^{B 4 1}$ 、 $Z^{B 4 2}$ 、 $Z^{B 4 3}$ 、 $Z^{B 4 4}$ 、 $Z^{B 4 5}$  および  $Z^{B 4 6}$  として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A - 1) における  $L^{A 1 1}$ 、 $L^{A 1 2}$ 、 $L^{A 1 3}$ 、及び  $L^{A 1 4}$  で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

$X^{B 4 1}$ 、 $X^{B 4 2}$  はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。 $X^{B 4 1}$ 、 $X^{B 4 2}$  として好ましくは酸素原子、硫黄原子であり、より好ましくは酸素原子である。

10

#### 【0290】

一般式 (B - 1) で表される化合物として、特開 2007 - 103493 号に記載の化合物 (B 1) ~ (B 55) の化合物が挙げられるが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。

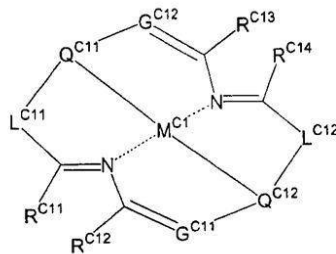
#### 【0291】

本発明における金属錯体の内、好ましい化合物の一つは、一般式 (C - 1) で表される化合物である。

#### 【0292】

#### 【化 4 1】

一般式 (C-1)



20

#### 【0293】

一般式 (C - 1) 中、 $M^{C 1}$  は金属イオンを表す。 $R^{C 1 1}$ 、 $R^{C 1 2}$  は、それぞれ独立に、水素原子、互いに連結して五員環を形成する置換基、または互いに連結することの無い置換基を表す。 $R^{C 1 3}$ 、 $R^{C 1 4}$  は、それぞれ独立に、水素原子、互いに連結して五員環を形成する置換基、または互いに連結することの無い置換基を表す。 $G^{C 1 1}$ 、 $G^{C 1 2}$  は、それぞれ独立に、窒素原子、置換または無置換の炭素原子を表す。 $L^{C 1 1}$ 、 $L^{C 1 2}$  は連結基を表す。 $Q^{C 1 1}$ 、 $Q^{C 1 2}$  は  $M^{C 1}$  に配位結合、イオン結合、又は共有結合で結合する原子を含有する部分構造を表す。

30

#### 【0294】

一般式 (C - 1) について詳細に説明する。

一般式 (C - 1) 中、 $M^{C 1}$ 、 $L^{C 1 1}$ 、 $L^{C 1 2}$ 、 $Q^{C 1 1}$ 、及び  $Q^{C 1 2}$  はそれぞれ対応する一般式 (A - 1) 中における、 $M^{A 1}$ 、 $L^{A 1 1}$ 、 $L^{A 1 2}$ 、 $Q^{A 1 1}$ 、及び  $Q^{A 1 2}$  と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

40

$G^{C 1 1}$ 、 $G^{C 1 2}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表し、好ましくは窒素原子、無置換の炭素原子であり、より好ましくは窒素原子である。

$R^{C 1 1}$ 、 $R^{C 1 2}$  はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表す。 $R^{C 1 1}$ 、 $R^{C 1 2}$  は互いに連結して五員環を形成してもよい。 $R^{C 1 3}$ 、 $R^{C 1 4}$  はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表す。 $R^{C 1 3}$ 、 $R^{C 1 4}$  は互いに連結して五員環を形成してもよい。

#### 【0295】

$R^{C 1 1}$ 、 $R^{C 1 2}$ 、 $R^{C 1 3}$  および  $R^{C 1 4}$  で表される置換基としては、例えばアルキル基 (好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメチル、エチル、i s o - プロピル、t e r t - ブチル、n

50

- オクチル、n - デシル、n - ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、及びシクロヘキシルなどが挙げられる。)、アルケニル基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~10であり、例えばビニル、アリル、2 - ブテニル、及び3 - ペンテニルなどが挙げられる。)、アルキニル基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~10であり、例えばプロパルギル、3 - ペンチニルなどが挙げられる。)、

【0296】

アリール基(好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニル、p - メチルフェニル、ナフチル、及びアントラニルなどが挙げられる。)、アミノ基(好ましくは炭素数0~30、より好ましくは炭素数0~20、特に好ましくは炭素数0~10であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、ジフェニルアミノ、及びジトリルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~10であり、例えばメトキシ、エトキシ、プロトキシ、及び2 - エチルヘキシロキシなどが挙げられる。)、アリールオキシ基(好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニルオキシ、1 - ナフチルオキシ、及び2 - ナフチルオキシなどが挙げられる。)、

10

【0297】

ヘテロ環オキシ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばピリジルオキシ、ピラジロキシ、ピリミジロキシ、及びキノリルオキシなどが挙げられる。)、アシル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、及びピパロイルなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニル基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~12であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。)、アリールオキシカルボニル基(好ましくは炭素数7~30、より好ましくは炭素数7~20、特に好ましくは炭素数7~12であり、例えばフェニルオキシカルボニルなどが挙げられる。)、

20

【0298】

アシルオキシ基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~10であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。)、アシルアミノ基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~10であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~12であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、アリールオキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数7~30、より好ましくは炭素数7~20、特に好ましくは炭素数7~12であり、例えばフェニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、

30

【0299】

アルキルチオ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。)、アリールチオ基(好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロ環チオ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばピリジルチオ、2 - ベンズイミゾリルチオ、2 - ベンズオキサゾリルチオ、及び2 - ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、ハロゲン原子(例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、又はヨウ素原子)、シアノ基、

40

【0300】

ヘテロ環基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~12であり、ヘテロ

50

原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子であり、具体的にはイミダゾリル、ピリジル、キノリル、フリル、チエニル、ピペリジル、モルホリノ、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル基、及びアゼビニル基などが挙げられる。) 、シリル基 (好ましくは炭素数 3 ~ 40、より好ましくは炭素数 3 ~ 30、特に好ましくは炭素数 3 ~ 24 であり、例えばトリメチルシリル、トリフェニルシリルなどが挙げられる。) 、シリルオキシ基 (好ましくは炭素数 3 ~ 40、より好ましくは炭素数 3 ~ 30、特に好ましくは炭素数 3 ~ 24 であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。) などが挙げられる。

## 【0301】

$R^{C11}$ 、 $R^{C12}$ 、 $R^{C13}$  および  $R^{C14}$  で表される置換基として好ましくは、アルキル基、アリール基、 $R^{C11}$  と  $R^{C12}$ 、 $R^{C13}$  と  $R^{C14}$  が互いに結合して五員環を形成する基であり、特に好ましくは  $R^{C11}$  と  $R^{C12}$ 、 $R^{C13}$  と  $R^{C14}$  が互いに結合して五員環を形成する基である。

10

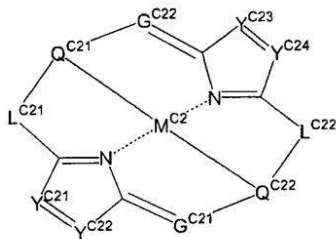
## 【0302】

一般式 (C - 1) で表される化合物は、より好ましくは一般式 (C - 2) で表される化合物である。

## 【0303】

## 【化42】

一般式 (C-2)



20

## 【0304】

一般式 (C - 2) 中、 $M^{C2}$  は金属イオンを表す。

$Y^{C21}$ 、 $Y^{C22}$ 、 $Y^{C23}$  および  $Y^{C24}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $G^{C21}$ 、 $G^{C22}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $L^{C21}$ 、 $L^{C22}$  は連結基を表す。 $Q^{C21}$ 、 $Q^{C22}$  は  $M^{C2}$  に配位結合、イオン結合、又は共有結合で結合する原子を含有する部分構造を表す。

30

## 【0305】

一般式 (C - 2) について詳細に説明する。

一般式 (C - 2) 中、 $M^{C2}$ 、 $L^{C21}$ 、 $L^{C22}$ 、 $Q^{C21}$ 、 $Q^{C22}$ 、 $G^{C21}$ 、および  $G^{C22}$  はそれぞれ対応する、一般式 (C - 1) における  $M^{C1}$ 、 $L^{C11}$ 、 $L^{C12}$ 、 $Q^{C11}$ 、 $Q^{C12}$ 、 $G^{C11}$ 、および  $G^{C12}$  と同義であり、好ましい範囲も同様である。

$Y^{C21}$ 、 $Y^{C22}$ 、 $Y^{C23}$  および  $Y^{C24}$  は、それぞれ独立に、窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表し、好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。

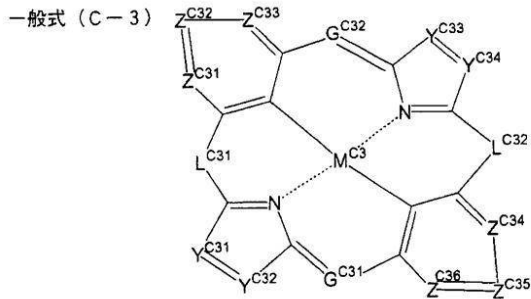
40

## 【0306】

一般式 (C - 2) で表される化合物は、より好ましくは下記一般式 (C - 3)、一般式 (C - 4) 又は一般式 (C - 5) で表される化合物である。

## 【0307】

## 【化 4 3】



10

## 【0308】

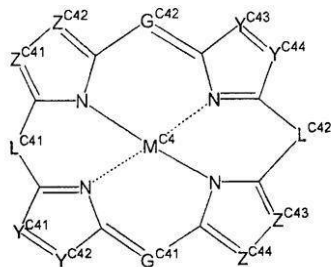
一般式 (C-3) 中、 $M^{C3}$  は金属イオンを表す。

$Y^{C31}$ 、 $Y^{C32}$ 、 $Y^{C33}$  および  $Y^{C34}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $G^{C31}$ 、 $G^{C32}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $L^{C31}$ 、 $L^{C32}$  は連結基を表す。 $Z^{C31}$ 、 $Z^{C32}$ 、 $Z^{C33}$ 、 $Z^{C34}$ 、 $Z^{C35}$  および  $Z^{C36}$  はそれぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

## 【0309】

## 【化 4 4】

一般式 (C-4)



20

## 【0310】

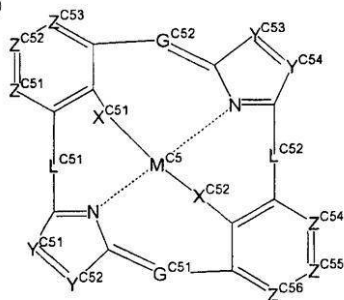
一般式 (C-4) 中、 $M^{C4}$  は金属イオンを表す。 $Y^{C41}$ 、 $Y^{C42}$ 、 $Y^{C43}$  および  $Y^{C44}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $G^{C41}$ 、 $G^{C42}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $L^{C41}$ 、 $L^{C42}$  は連結基を表す。 $Z^{C41}$ 、 $Z^{C42}$ 、 $Z^{C43}$  および  $Z^{C44}$  はそれぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

30

## 【0311】

## 【化 4 5】

一般式 (C-5)



40

## 【0312】

一般式 (C-5) 中、 $M^{C5}$  は金属イオンを表す。

$Y^{C51}$ 、 $Y^{C52}$ 、 $Y^{C53}$  および  $Y^{C54}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $G^{C51}$ 、 $G^{C52}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換も

50

しくは無置換の炭素原子を表す。L<sup>C 5 1</sup>、L<sup>C 5 2</sup>は連結基を表す。Z<sup>C 5 1</sup>、Z<sup>C 5 2</sup>、Z<sup>C 5 3</sup>、Z<sup>C 5 4</sup>、Z<sup>C 5 5</sup>およびZ<sup>C 5 6</sup>はそれぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。X<sup>C 5 1</sup>、X<sup>C 5 2</sup>はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。

【0313】

一般式(C-3)で表される化合物について詳細に説明する。

一般式(C-3)中、M<sup>C 3</sup>、L<sup>C 3 1</sup>、L<sup>C 3 2</sup>、G<sup>C 3 1</sup>、及びG<sup>C 3 2</sup>はそれぞれ対応する、一般式(C-1)における、M<sup>C 1</sup>、L<sup>C 1 1</sup>、L<sup>C 1 2</sup>、G<sup>C 1 1</sup>、及びG<sup>C 1 2</sup>と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Z<sup>C 3 1</sup>、Z<sup>C 3 2</sup>、Z<sup>C 3 3</sup>、Z<sup>C 3 4</sup>、Z<sup>C 3 5</sup>およびZ<sup>C 3 6</sup>はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。Z<sup>C 3 1</sup>、Z<sup>C 3 2</sup>、Z<sup>C 3 3</sup>、Z<sup>C 3 4</sup>、Z<sup>C 3 5</sup>およびZ<sup>C 3 6</sup>として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。

10

【0314】

一般式(C-4)で表される化合物について詳細に説明する。

一般式(C-4)中、M<sup>C 4</sup>、L<sup>C 4 1</sup>、L<sup>C 4 2</sup>、G<sup>C 4 1</sup>、及びG<sup>C 4 2</sup>は、それぞれ対応する一般式(C-1)における、M<sup>C 1</sup>、L<sup>C 1 1</sup>、L<sup>C 1 2</sup>、G<sup>C 1 1</sup>、及びG<sup>C 1 2</sup>と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Z<sup>C 4 1</sup>、Z<sup>C 4 2</sup>、Z<sup>C 4 3</sup>、およびZ<sup>C 4 4</sup>はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。Z<sup>C 4 1</sup>、Z<sup>C 4 2</sup>、Z<sup>C 4 3</sup>、およびZ<sup>C 4 4</sup>として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。

20

【0315】

一般式(C-5)で表される化合物について詳細に説明する。

M<sup>C 5</sup>、L<sup>C 5 1</sup>、L<sup>C 5 2</sup>、G<sup>C 5 1</sup>、及びG<sup>C 5 2</sup>は、それぞれ対応する一般式(C-1)における、M<sup>C 1</sup>、L<sup>C 1 1</sup>、L<sup>C 1 2</sup>、G<sup>C 1 1</sup>、及びG<sup>C 1 2</sup>と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

Z<sup>C 5 1</sup>、Z<sup>C 5 2</sup>、Z<sup>C 5 3</sup>、Z<sup>C 5 4</sup>、Z<sup>C 5 5</sup>およびZ<sup>C 5 6</sup>はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。Z<sup>C 5 1</sup>、Z<sup>C 5 2</sup>、Z<sup>C 5 3</sup>、Z<sup>C 5 4</sup>、Z<sup>C 5 5</sup>およびZ<sup>C 5 6</sup>として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。

30

X<sup>C 5 1</sup>、X<sup>C 5 2</sup>はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。X<sup>C 5 1</sup>、X<sup>C 5 2</sup>として好ましくは酸素原子、硫黄原子であり、より好ましくは酸素原子である。

【0316】

一般式(C-1)で表される化合物の具体例として、特開2007-103493号に記載の化合物(C1)~(C63)の化合物が挙げられるが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。

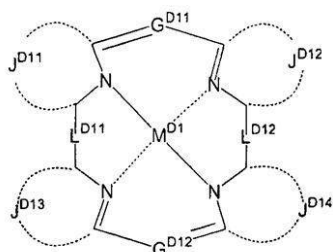
本発明における金属錯体の内、好ましい化合物の一つは、下記一般式(D-1)で表される化合物である。

40

【0317】

【化46】

一般式(D-1)



50

## 【0318】

一般式 (D - 1) 中、 $M^{D1}$  は金属イオンを表す。

$G^{D11}$ 、 $G^{D12}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換または無置換の炭素原子を表す。 $J^{D11}$ 、 $J^{D12}$ 、 $J^{D13}$  および  $J^{D14}$  は五員環を形成するのに必要な原子群を表す。 $L^{D11}$ 、 $L^{D12}$  は連結基を表す。

## 【0319】

一般式 (D - 1) について詳細に説明する。

一般式 (D - 1) 中、 $M^{D1}$ 、 $L^{D11}$ 、及び  $L^{D12}$  はそれぞれ対応する一般式 (A - 1) 中における、 $M^{A1}$ 、 $L^{A11}$ 、 $L^{A12}$  と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

$G^{D11}$ 、 $G^{D12}$  は、それぞれ対応する一般式 (C - 1) における  $G^{C11}$ 、 $G^{C12}$  と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

$J^{D11}$ 、 $J^{D12}$ 、 $J^{D13}$  および  $J^{D14}$  は、これらが結合している原子群と共に、含窒素ヘテロ五員環を形成するのに必要な原子群を表す。

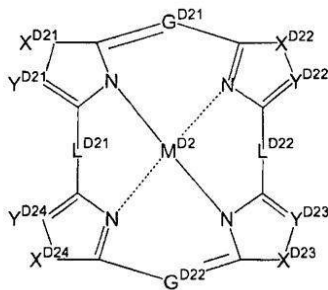
## 【0320】

一般式 (D - 1) で表される化合物は、より好ましくは下記一般式 (D - 2)、一般式 (D - 3)、又は一般式 (D - 4) で表される化合物である。

## 【0321】

## 【化47】

一般式 (D-2)



## 【0322】

一般式 (D - 2) 中、 $M^{D2}$  は金属イオンを表す。

$G^{D21}$ 、 $G^{D22}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換または無置換の炭素原子を表す。

$Y^{D21}$ 、 $Y^{D22}$ 、 $Y^{D23}$  および  $Y^{D24}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

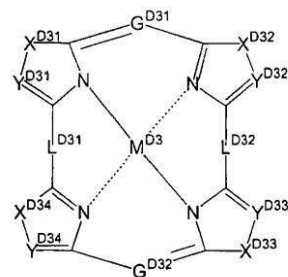
$X^{D21}$ 、 $X^{D22}$ 、 $X^{D23}$  および  $X^{D24}$  は、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、 $-NR^{D21}-$ 、 $-C(R^{D22})R^{D23}-$  を表す。

$R^{D21}$ 、 $R^{D22}$  および  $R^{D23}$  は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表す。 $L^{D21}$ 、 $L^{D22}$  は連結基を表す。

## 【0323】

## 【化48】

一般式 (D-3)



## 【0324】

一般式 (D - 3) 中、 $M^{D3}$  は金属イオンを表す。

10

20

30

40

50

$G^{D31}$ 、 $G^{D32}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換または無置換の炭素原子を表す。

$Y^{D31}$ 、 $Y^{D32}$ 、 $Y^{D33}$  および  $Y^{D34}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

$X^{D31}$ 、 $X^{D32}$ 、 $X^{D33}$  および  $X^{D34}$  は、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、 $-NR^{D31}-$ 、 $-C(R^{D32})R^{D33}-$  を表す。

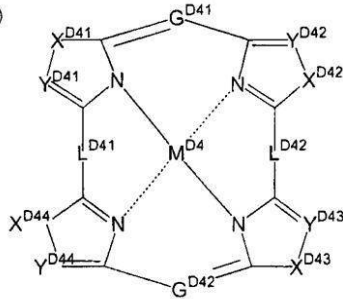
$R^{D31}$ 、 $R^{D32}$  および  $R^{D33}$  は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表す。  
 $L^{D31}$ 、 $L^{D32}$  は連結基を表す。

【0325】

【化49】

10

一般式 (D-4)



【0326】

20

一般式 (D-4) 中、 $M^{D4}$  は金属イオンを表す。

$G^{D41}$ 、 $G^{D42}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換または無置換の炭素原子を表す。

$Y^{D41}$ 、 $Y^{D42}$ 、 $Y^{D43}$  および  $Y^{D44}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

$X^{D41}$ 、 $X^{D42}$ 、 $X^{D43}$  および  $X^{D44}$  は、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、 $-NR^{D41}-$ 、 $-C(R^{D42})R^{D43}-$  を表す。 $R^{D41}$ 、 $R^{D42}$  および  $R^{D43}$  は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表す。 $L^{D41}$ 、 $L^{D42}$  は連結基を表す。

【0327】

30

一般式 (D-2) について詳細に説明する。

$M^{D2}$ 、 $L^{D21}$ 、 $L^{D22}$ 、 $G^{D21}$ 、 $G^{D22}$  は、一般式 (D-1) における  $M^{D1}$ 、 $L^{D11}$ 、 $L^{D12}$ 、 $G^{D11}$ 、 $G^{D12}$  と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

$Y^{D21}$ 、 $Y^{D22}$ 、 $Y^{D23}$  および  $Y^{D24}$  は、それぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表し、好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。

$X^{D21}$ 、 $X^{D22}$ 、 $X^{D23}$  および  $X^{D24}$  は、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、 $-NR^{D21}-$ 、 $-C(R^{D22})R^{D23}-$  を表し、好ましくは硫黄原子、 $-NR^{D21}-$ 、 $-C(R^{D22})R^{D23}-$  であり、より好ましくは  $-NR^{D21}-$ 、 $-C(R^{D22})R^{D23}-$  であり、さらに好ましくは  $-NR^{D21}-$  である。

40

$R^{D21}$ 、 $R^{D22}$  および  $R^{D23}$  は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表す。 $R^{D21}$ 、 $R^{D22}$  および  $R^{D23}$  で表される置換基としては、例えばアルキル基 (好ましくは炭素数 1 ~ 20、より好ましくは炭素数 1 ~ 12、特に好ましくは炭素数 1 ~ 8 であり、例えばメチル、エチル、*iso*-プロピル、*tert*-ブチル、*n*-オクチル、*n*-デシル、*n*-ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、及びシクロヘキシル等が挙げられる。)、アルケニル基 (好ましくは炭素数 2 ~ 20、より好ましくは炭素数 2 ~ 12、特に好ましくは炭素数 2 ~ 8 であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、及び 3-ペンテニル等が挙げられる。)、アルキニル基 (好ましくは炭素数 2 ~ 20、より好ましくは炭素数 2 ~ 12、特に好ましくは炭素数 2 ~ 8 であり、例えばプロパルギル、

50

3 - ペンチニル等が挙げられる。)、

【0328】

アリアル基(好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニル、p-メチルフェニル、及びナフチル等が挙げられる。)、置換カルボニル基(好ましくは炭素数1~20、より好ましくは炭素数1~16、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばアセチル、ベンゾイル、メトキシカルボニル、フェニルオキシカルボニル、ジメチルアミノカルボニル、及びフェニルアミノカルボニル、等が挙げられる。)、置換スルホニル基(好ましくは炭素数1~20、より好ましくは炭素数1~16、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメシル、トシル等が挙げられる。)、

10

【0329】

ヘテロ環基(脂肪族ヘテロ環基、芳香族ヘテロ環基がある。好ましくは、酸素原子、硫黄原子、窒素原子のいずれかを含み、好ましくは炭素数1~50、より好ましくは炭素数1~30、特に好ましくは炭素数2~12であり、例えばイミダゾリル、ピリジル、フリル、ピペリジル、モルホリノ、ベンゾオキサゾリル、及びトリアゾリル基等が挙げられる。)等が挙げられる。 $R^{D21}$ 、 $R^{D22}$ および $R^{D23}$ は好ましくはアルキル基、アリアル基、又は芳香族ヘテロ環基であり、より好ましくは、アルキル基、アリアル基であり、さらに好ましくはアリアル基である。

【0330】

一般式(D-3)について詳細に説明する。

20

一般式(D-3)中、 $M^{D3}$ 、 $L^{D31}$ 、 $L^{D32}$ 、 $G^{D31}$ 、及び $G^{D32}$ は、それぞれ対応する一般式(D-1)における $M^{D1}$ 、 $L^{D11}$ 、 $L^{D12}$ 、 $G^{D11}$ 、及び $G^{D12}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

$X^{D31}$ 、 $X^{D32}$ 、 $X^{D33}$ および $X^{D34}$ はそれぞれ対応する、一般式(D-2)における $X^{D21}$ 、 $X^{D22}$ 、 $X^{D23}$ および $X^{D24}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

$Y^{D31}$ 、 $Y^{D32}$ 、 $Y^{D33}$ および $Y^{D34}$ はそれぞれ対応する、一般式(D-2)における $Y^{D21}$ 、 $Y^{D22}$ 、 $Y^{D23}$ および $Y^{D24}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0331】

30

一般式(D-4)について詳細に説明する。

一般式(D-4)中、 $M^{D4}$ 、 $L^{D41}$ 、 $L^{D42}$ 、 $G^{D41}$ 、及び $G^{D42}$ は、それぞれ対応する、一般式(D-1)における $M^{D1}$ 、 $L^{D11}$ 、 $L^{D12}$ 、 $G^{D11}$ 、及び $G^{D12}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

$X^{D41}$ 、 $X^{D42}$ 、 $X^{D43}$ および $X^{D44}$ は、それぞれ対応する一般式(D-2)における $X^{D21}$ 、 $X^{D22}$ 、 $X^{D23}$ および $X^{D24}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 $Y^{D41}$ 、 $Y^{D42}$ 、 $Y^{D43}$ および $Y^{D44}$ は、それぞれ対応する、一般式(D-2)における $Y^{D21}$ 、 $Y^{D22}$ 、 $Y^{D23}$ および $Y^{D24}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0332】

40

一般式(D-1)で表される化合物の具体例として、特開2007-103493号に記載の化合物(D1)~(D24)の化合物が挙げられるが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。

【0333】

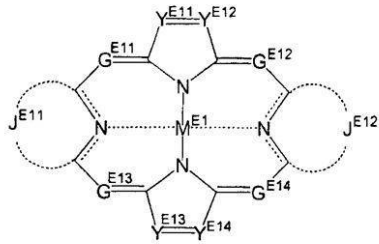
本発明における金属錯体の内、好ましい化合物の一つは、下記一般式(E-1)で表される化合物である。

【0334】



## 【化50】

一般式(E-1)



## 【0335】

10

一般式(E-1)中、 $M^{E1}$ は金属イオンを表す。 $J^{E11}$ 、 $J^{E12}$ は五員環を形成するのに必要な原子群を表す。 $G^{E11}$ 、 $G^{E12}$ 、 $G^{E13}$ および $G^{E14}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $Y^{E11}$ 、 $Y^{E12}$ 、 $Y^{E13}$ および $Y^{E14}$ はそれぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

## 【0336】

一般式(E-1)について詳細に説明する。

一般式(E-1)中、 $M^{E1}$ は一般式(A-1)における $M^{A1}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 $G^{E11}$ 、 $G^{E12}$ 、 $G^{E13}$ および $G^{E14}$ は一般式(C-1)における $G^{C11}$ 、 $G^{C12}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

$J^{E11}$ 、 $J^{E12}$ は、一般式(D-1)における $J^{D12} \sim J^{D14}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 $Y^{E11}$ 、 $Y^{E12}$ 、 $Y^{E13}$ および $Y^{E14}$ はそれぞれ対応する、一般式(C-2)における $Y^{C21} \sim Y^{C24}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

20

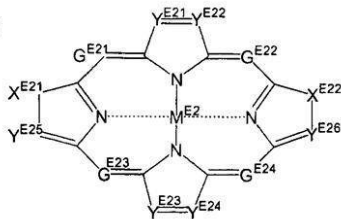
## 【0337】

一般式(E-1)で表される化合物は、より好ましくは下記一般式(E-2)、又は一般式(E-3)で表される化合物である。

## 【0338】

## 【化51】

一般式(E-2)



30

## 【0339】

一般式(E-2)中、 $M^{E2}$ は金属イオンを表す。 $G^{E21}$ 、 $G^{E22}$ 、 $G^{E23}$ および $G^{E24}$ はそれぞれ独立に、窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $Y^{E21}$ 、 $Y^{E22}$ 、 $Y^{E23}$ 、 $Y^{E24}$ 、 $Y^{E25}$ および $Y^{E26}$ はそれぞれ独立に、窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

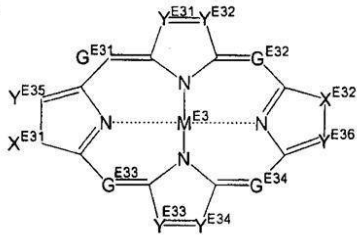
40

$X^{E21}$ および $X^{E22}$ は、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、 $-NR^{E21}-$ 、 $-C(R^{E22})R^{E23}-$ を表す。 $R^{E21}$ 、 $R^{E22}$ および $R^{E23}$ は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表す。

## 【0340】

## 【化52】

一般式(E-3)



## 【0341】

10

一般式(E-3)中、 $M^{E3}$ は金属イオンを表す。 $G^{E31}$ 、 $G^{E32}$ 、 $G^{E33}$ および $G^{E34}$ はそれぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $Y^{E31}$ 、 $Y^{E32}$ 、 $Y^{E33}$ 、 $Y^{E34}$ 、 $Y^{E35}$ および $Y^{E36}$ はそれぞれ独立に窒素原子、置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $X^{E31}$ および $X^{E32}$ は、それぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、 $-NR^{E31}-$ 、 $-C(R^{E32})R^{E33}-$ を表す。 $R^{E31}$ 、 $R^{E32}$ および $R^{E33}$ は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表す。

## 【0342】

一般式(E-2)について詳細に説明する。

一般式(E-2)中、 $M^{E2}$ 、 $G^{E21}$ 、 $G^{E22}$ 、 $G^{E23}$ 、 $G^{E24}$ 、 $Y^{E21}$ 、 $Y^{E22}$ 、 $Y^{E23}$ 、及び $Y^{E24}$ は、それぞれ対応する一般式(E-1)における $M^{E1}$ 、 $G^{E11}$ 、 $G^{E12}$ 、 $G^{E13}$ 、 $G^{E14}$ 、 $Y^{E11}$ 、 $Y^{E12}$ 、 $Y^{E13}$ 、及び $Y^{E14}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 $X^{E21}$ 、 $X^{E22}$ は一般式(D-2)における $X^{D21}$ 、 $X^{D22}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

20

## 【0343】

一般式(E-3)について詳細に説明する。

一般式(E-3)中、 $M^{E3}$ 、 $G^{E31}$ 、 $G^{E32}$ 、 $G^{E33}$ 、 $G^{E34}$ 、 $Y^{E31}$ 、 $Y^{E32}$ 、 $Y^{E33}$ 、及び $Y^{E34}$ は、それぞれ対応する、一般式(E-1)における $M^{E1}$ 、 $G^{E11}$ 、 $G^{E12}$ 、 $G^{E13}$ 、 $G^{E14}$ 、 $Y^{E11}$ 、 $Y^{E12}$ 、 $Y^{E13}$ 、及び $Y^{E14}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 $X^{E31}$ 、 $X^{E32}$ は対応する、一般式(E-2)における $X^{E21}$ 、 $X^{E22}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

30

## 【0344】

一般式(E-1)で表される化合物の具体例として、特開2007-103493号に記載の化合物(E1)~(E15)の化合物が挙げられるが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。

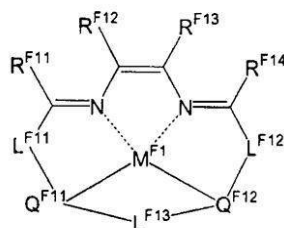
## 【0345】

本発明における金属錯体の内、好ましい化合物の一つは、下記一般式(F-1)で表される化合物である。

## 【0346】

## 【化53】

一般式(F-1)



## 【0347】

一般式(F-1)中、 $M^{F1}$ は金属イオンを表す。 $L^{F11}$ 、 $L^{F12}$ および $L^{F13}$

50

は連結基を表す。R<sup>F 1 1</sup>、R<sup>F 1 2</sup>、R<sup>F 1 3</sup>およびR<sup>F 1 4</sup>は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を表し、R<sup>F 1 1</sup>とR<sup>F 1 2</sup>、R<sup>F 1 2</sup>とR<sup>F 1 3</sup>、R<sup>F 1 3</sup>とR<sup>F 1 4</sup>は可能であれば互いに連結して環を形成してもよいが、R<sup>F 1 1</sup>とR<sup>F 1 2</sup>、R<sup>F 1 3</sup>とR<sup>F 1 4</sup>が形成する環は五員環である。Q<sup>F 1 1</sup>、Q<sup>F 1 2</sup>はM<sup>F 1</sup>に配位結合、イオン結合、又は共有結合で結合する原子を含有する部分構造を表す。

【0348】

一般式(F-1)で表される化合物について詳細に説明する。

一般式(F-1)中、M<sup>F 1</sup>、L<sup>F 1 1</sup>、L<sup>F 1 2</sup>、L<sup>F 1 3</sup>、Q<sup>F 1 1</sup>、及びQ<sup>F 1 2</sup>はそれぞれ対応する、一般式(A-1)におけるM<sup>A 1</sup>、L<sup>A 1 1</sup>、L<sup>A 1 2</sup>、L<sup>A 1 3</sup>、Q<sup>A 1 1</sup>、及びQ<sup>A 1 2</sup>と同義であり、また好ましい範囲も同様である。R<sup>F 1 1</sup>、R<sup>F 1 2</sup>、R<sup>F 1 3</sup>およびR<sup>F 1 4</sup>は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表し、R<sup>F 1 1</sup>とR<sup>F 1 2</sup>、R<sup>F 1 2</sup>とR<sup>F 1 3</sup>、R<sup>F 1 3</sup>とR<sup>F 1 4</sup>は可能であれば互いに連結して環を形成してもよいが、R<sup>F 1 1</sup>とR<sup>F 1 2</sup>、R<sup>F 1 3</sup>とR<sup>F 1 4</sup>が形成する環は五員環である。R<sup>F 1 1</sup>、R<sup>F 1 2</sup>、R<sup>F 1 3</sup>およびR<sup>F 1 4</sup>で表される置換基としては、それぞれ対応する一般式(C-1)におけるR<sup>C 1 1</sup>~R<sup>C 1 4</sup>で表される置換基として挙げたものが適用できる。R<sup>F 1 1</sup>、R<sup>F 1 2</sup>、R<sup>F 1 3</sup>およびR<sup>F 1 4</sup>として好ましくは、R<sup>F 1 1</sup>とR<sup>F 1 2</sup>、R<sup>F 1 3</sup>とR<sup>F 1 4</sup>が互いに結合して五員環を形成する基もしくは、R<sup>F 1 2</sup>とR<sup>F 1 3</sup>が互いに結合して芳香環を形成する基である。

10

【0349】

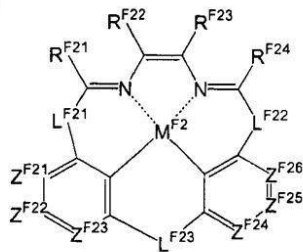
一般式(F-1)で表される化合物は、より好ましくは下記一般式(F-2)、一般式(F-3)、又は一般式(F-4)で表される化合物である。

20

【0350】

【化54】

一般式(F-2)



30

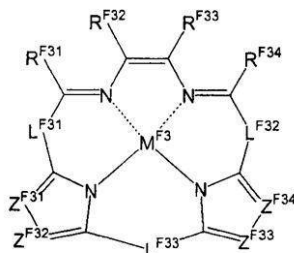
【0351】

一般式(F-2)中、M<sup>F 2</sup>は金属イオンを表す。L<sup>F 2 1</sup>、L<sup>F 2 2</sup>およびL<sup>F 2 3</sup>は連結基を表す。R<sup>F 2 1</sup>、R<sup>F 2 2</sup>、R<sup>F 2 3</sup>およびR<sup>F 2 4</sup>は置換基を表し、R<sup>F 2 1</sup>とR<sup>F 2 2</sup>、R<sup>F 2 2</sup>とR<sup>F 2 3</sup>、R<sup>F 2 3</sup>とR<sup>F 2 4</sup>は可能であれば互いに連結して環を形成してもよいが、R<sup>F 2 1</sup>とR<sup>F 2 2</sup>、R<sup>F 2 3</sup>とR<sup>F 2 4</sup>が形成する環は五員環である。Z<sup>F 2 1</sup>、Z<sup>F 2 2</sup>、Z<sup>F 2 3</sup>、Z<sup>F 2 4</sup>、Z<sup>F 2 5</sup>およびZ<sup>F 2 6</sup>はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

【0352】

【化55】

一般式(F-3)



40

【0353】

一般式(F-3)中、M<sup>F 3</sup>は金属イオンを表す。L<sup>F 3 1</sup>、L<sup>F 3 2</sup>およびL<sup>F 3 3</sup>

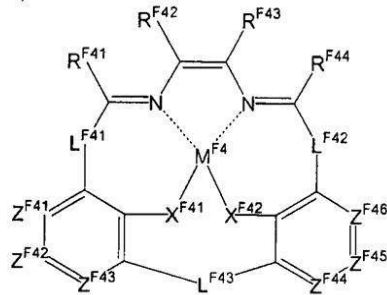
50

は連結基を表す。R<sup>F31</sup>、R<sup>F32</sup>、R<sup>F33</sup> および R<sup>F34</sup> は置換基を表し、R<sup>F31</sup> と R<sup>F32</sup>、R<sup>F32</sup> と R<sup>F33</sup>、R<sup>F33</sup> と R<sup>F34</sup> は可能であれば互いに連結して環を形成してもよいが、R<sup>F31</sup> と R<sup>F32</sup>、R<sup>F33</sup> と R<sup>F34</sup> が形成する環は五員環である。Z<sup>F31</sup>、Z<sup>F32</sup>、Z<sup>F33</sup> および Z<sup>F34</sup> はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。

【0354】

【化56】

一般式 (F-4)



10

【0355】

一般式 (F-4) 中、M<sup>F4</sup> は金属イオンを表す。L<sup>F41</sup>、L<sup>F42</sup> および L<sup>F43</sup> は連結基を表す。R<sup>F41</sup>、R<sup>F42</sup>、R<sup>F43</sup> および R<sup>F44</sup> は置換基を表し、R<sup>F41</sup> と R<sup>F42</sup>、R<sup>F42</sup> と R<sup>F43</sup>、R<sup>F43</sup> と R<sup>F44</sup> は可能であれば互いに連結して環を形成してもよいが、R<sup>F41</sup> と R<sup>F42</sup>、R<sup>F43</sup> と R<sup>F44</sup> が形成する環は五員環である。Z<sup>F41</sup>、Z<sup>F42</sup>、Z<sup>F43</sup>、Z<sup>F44</sup>、Z<sup>F45</sup>、および Z<sup>F46</sup> はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。X<sup>F41</sup>、X<sup>F42</sup> はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。

20

【0356】

一般式 (F-2) で表される化合物について詳細に説明する。

M<sup>F2</sup>、L<sup>F21</sup>、L<sup>F22</sup>、L<sup>F23</sup>、R<sup>F21</sup>、R<sup>F22</sup>、R<sup>F23</sup> および R<sup>F24</sup> はそれぞれ対応する一般式 (F-1) における M<sup>F1</sup>、L<sup>F11</sup>、L<sup>F12</sup>、L<sup>F13</sup>、R<sup>F11</sup>、R<sup>F12</sup>、R<sup>F13</sup> および R<sup>F14</sup> と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

30

Z<sup>F21</sup>、Z<sup>F22</sup>、Z<sup>F23</sup>、Z<sup>F24</sup>、Z<sup>F25</sup> および Z<sup>F26</sup> はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。Z<sup>F21</sup>、Z<sup>F22</sup>、Z<sup>F23</sup>、Z<sup>F24</sup>、Z<sup>F25</sup> および Z<sup>F26</sup> として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A-1) における L<sup>A11</sup>、L<sup>A12</sup>、L<sup>A13</sup>、及び L<sup>A14</sup> で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

【0357】

一般式 (F-3) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (F-3) 中、M<sup>F3</sup>、L<sup>F31</sup>、L<sup>F32</sup>、L<sup>F33</sup>、R<sup>F31</sup>、R<sup>F32</sup>、R<sup>F33</sup> および R<sup>F34</sup> はそれぞれ対応する、一般式 (F-1) における M<sup>F1</sup>、L<sup>F11</sup>、L<sup>F12</sup>、L<sup>F13</sup>、R<sup>F11</sup>、R<sup>F12</sup>、R<sup>F13</sup> および R<sup>F14</sup> と同義であり、また好ましい範囲も同様である。Z<sup>F31</sup>、Z<sup>F32</sup>、Z<sup>F33</sup> および Z<sup>F34</sup> はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。Z<sup>F31</sup>、Z<sup>F32</sup>、Z<sup>F33</sup> および Z<sup>F34</sup> として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A-1) における L<sup>A11</sup>、L<sup>A12</sup>、L<sup>A13</sup>、及び L<sup>A14</sup> で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

40

【0358】

一般式 (F-4) で表される化合物について詳細に説明する。

一般式 (F-4) 中、M<sup>F4</sup>、L<sup>F41</sup>、L<sup>F42</sup>、L<sup>F43</sup>、R<sup>F41</sup>、R<sup>F42</sup>、

50

$R^{F 4 3}$  および  $R^{F 4 4}$  は一般式 (F - 1) における  $M^{F 1}$ 、 $L^{F 1 1}$ 、 $L^{F 1 2}$ 、 $L^{F 1 3}$ 、 $R^{F 1 1}$ 、 $R^{F 1 2}$ 、 $R^{F 1 3}$  および  $R^{F 1 4}$  と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

$Z^{F 4 1}$ 、 $Z^{F 4 2}$ 、 $Z^{F 4 3}$ 、 $Z^{F 4 4}$ 、 $Z^{F 4 5}$  および  $Z^{F 4 6}$  はそれぞれ独立に窒素原子または置換もしくは無置換の炭素原子を表す。 $Z^{F 4 1}$ 、 $Z^{F 4 2}$ 、 $Z^{F 4 3}$ 、 $Z^{F 4 4}$ 、 $Z^{F 4 5}$  および  $Z^{F 4 6}$  として好ましくは置換もしくは無置換の炭素原子であり、より好ましくは無置換の炭素原子である。炭素原子に置換される置換基としては一般式 (A - 1) における  $L^{A 1 1}$ 、 $L^{A 1 2}$ 、 $L^{A 1 3}$ 、及び  $L^{A 1 4}$  で表される二価の連結基の置換基としてあげたものが適用できる。

$X^{F 4 1}$ 、 $X^{F 4 2}$  はそれぞれ独立に酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子を表す。 $X^{F 4 1}$ 、 $X^{F 4 2}$  として好ましくは酸素原子、硫黄原子であり、より好ましくは酸素原子である。

#### 【0359】

一般式 (F - 1) で表される化合物の具体例として、特開 2007 - 103493 号に記載の化合物 (F 1) ~ (F 52) の化合物が挙げられるが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。

#### 【0360】

前記一般式 (A - 1) ~ (F - 1) で表される化合物は公知の方法により合成することができる。

#### 【0361】

(正孔輸送性発光材料)

本発明に於ける正孔輸送性発光材料について説明する。

本発明の発光層に用いられる正孔輸送性発光材料としては、耐久性向上、駆動電圧低下の観点から、イオン化ポテンシャル (Ip) が 5.1 eV 以上 6.4 eV 以下であることが好ましく、5.4 eV 以上 6.2 eV 以下であることがより好ましく、5.6 eV 以上 6.0 eV 以下であることが更に好ましい。また、耐久性向上、駆動電圧低下の観点から、電子親和力 (Ea) が 1.2 eV 以上 3.1 eV 以下であることが好ましく、1.4 eV 以上 3.0 eV 以下であることがより好ましく、1.8 eV 以上 2.8 eV 以下であることが更に好ましい。

#### 【0362】

このような正孔輸送性発光材料としては、具体的には、例えば、以下の材料を挙げることができる。

ピロール系化合物、インドール系化合物、カルバゾール系化合物、イミダゾール系化合物、ポリアリールアルカン系化合物、アリールアミン系化合物、スチリル系化合物、スチリルアミン系化合物、チオフエン系化合物、芳香族多環縮合系化合物などのほか、金属錯体などが挙げられる。

前記金属錯体中の金属イオンは、特に限定されないが、発光効率向上、耐久性向上、駆動電圧低下の観点から、遷移金属イオン、希土類金属イオンであることが好ましく、より好ましくは、イリジウムイオン、白金イオン、金イオン、レニウムイオン、タングステンイオン、ロジウムイオン、ルテニウムイオン、オスミウムイオン、パラジウムイオン、銀イオン、銅イオン、コバルトイオン、ニッケルイオン、鉛イオン、希土類金属イオン (例えば、ユーロピウムイオン、ガドリニウムイオン、テルビウムイオンなど) が好ましく、更に好ましくは、イリジウムイオン、白金イオン、金イオン、レニウムイオン、タングステンイオン、ユーロピウムイオン、カドリニウムイオン、テルビウムイオンであり、特に好ましくは、イリジウムイオン、白金イオン、レニウムイオン、ユーロピウムイオン、ガドリニウムイオン、テルビウムイオンであり、最も好ましくは、イリジウムイオンである。イリジウムイオンを有する金属錯体の中でも特に好ましくは、炭素 - Ir 結合、窒素 - Ir 結合 (この場合の結合は、配位結合、イオン結合、共有結合のいずれであってもよい) を有する金属錯体である。

#### 【0363】

10

20

30

40

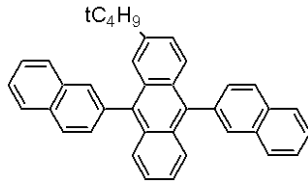
50

このような正孔輸送性発光材料の例としては、具体的には、例えば、以下の材料を挙げることができるが、これらに限定されるものではない。

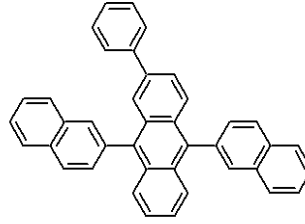
【 0 3 6 4 】

【 化 5 7 】

HE - 1

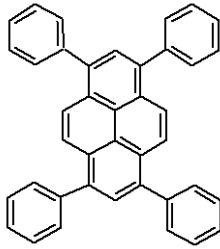


HE - 2

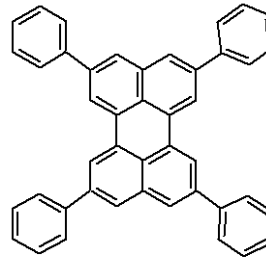


10

HE - 3

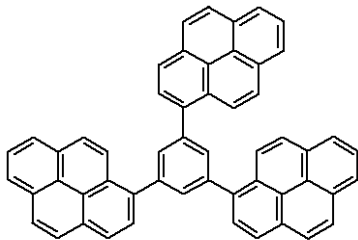


HE - 4

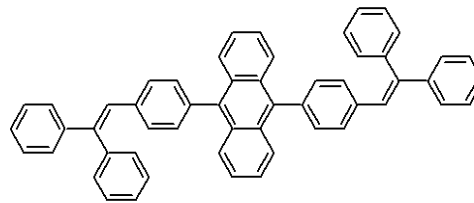


20

HE - 5

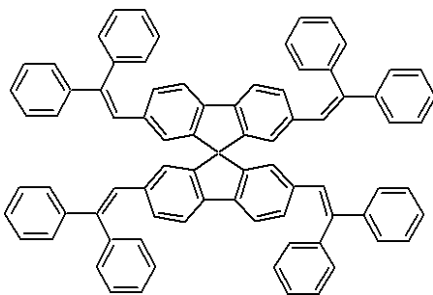


HE - 6

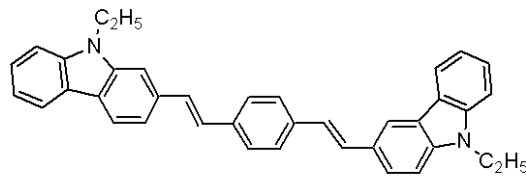


30

HE - 7



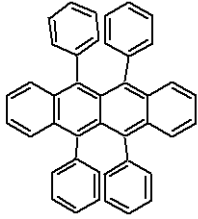
HE - 8



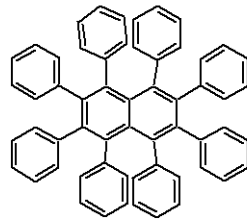
40

【 0 3 6 5 】

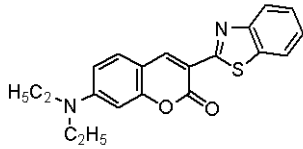
【化 5 8】  
HE-9



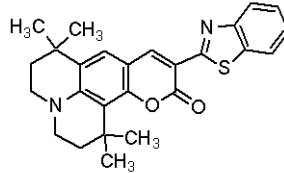
HE-10



HE-11

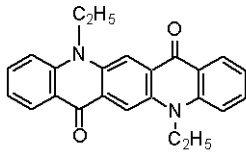


HE-12

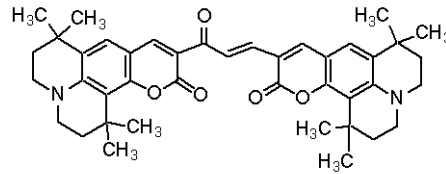


10

HE-13

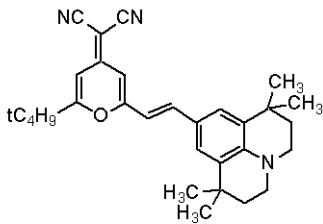


HE-14

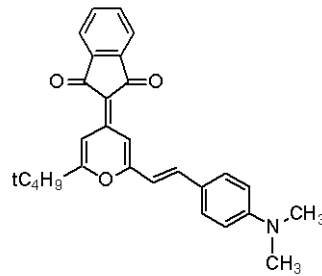


20

HE-15



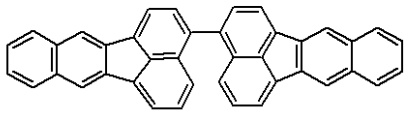
HE-16



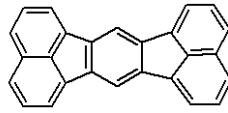
30

【 0 3 6 6 】

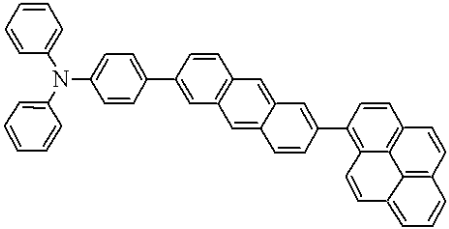
【化 5 9】  
HE-17



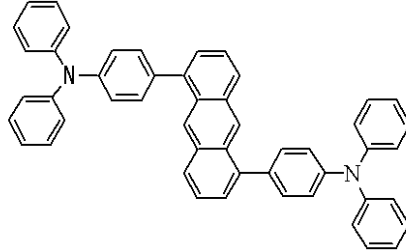
HE-18



HE-19

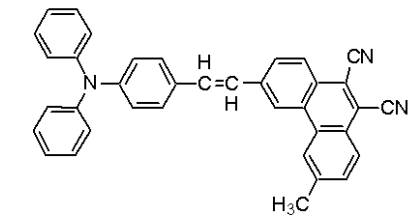


HE-20

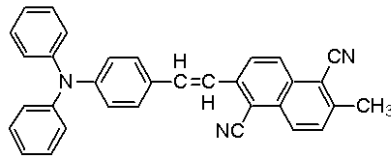


10

HE-21

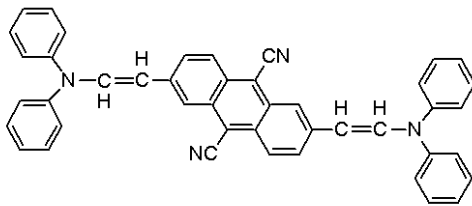


HE-22

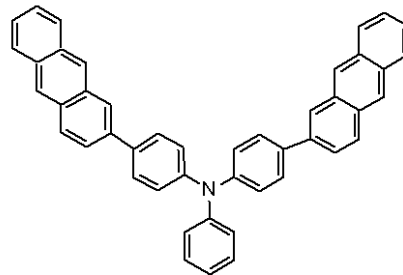


20

HE-23



HE-24



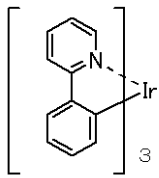
30

【 0 3 6 7 】

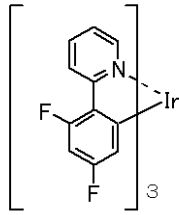


【化 6 0】

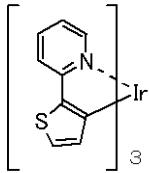
HE-25



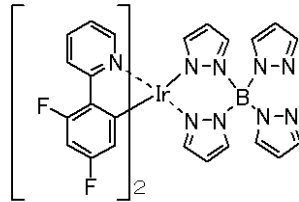
HE-26



HE-27

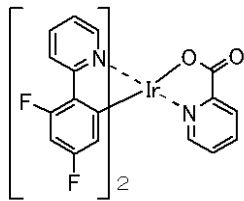


HE-28

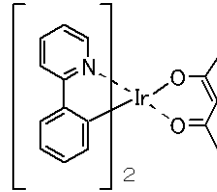


10

HE-29

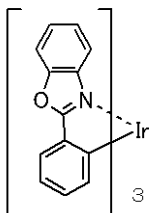


HE-30

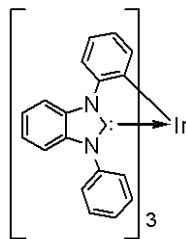


20

HE-31



HE-32

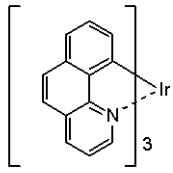


30

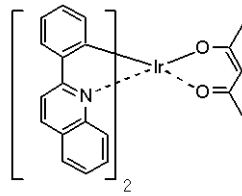
【 0 3 6 8 】

【化 6 1】

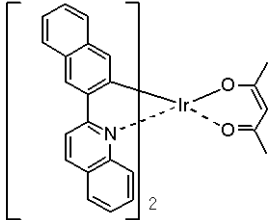
HE-33



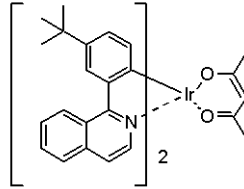
HE-34



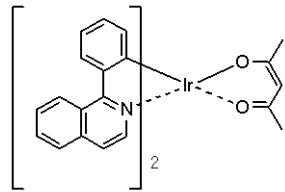
HE-35



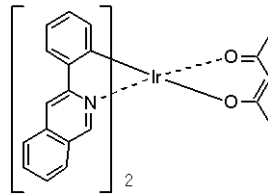
HE-36



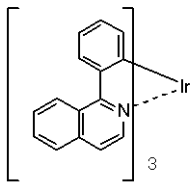
HE-37



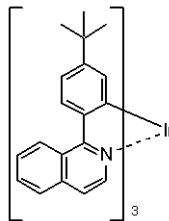
HE-38



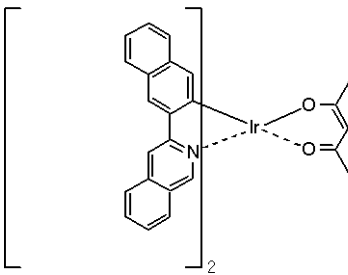
HE-39



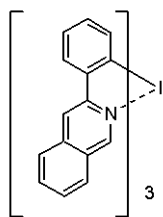
HE-40



HE-41



HE-42



【 0 3 6 9 】

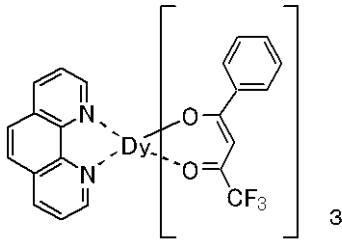
10

20

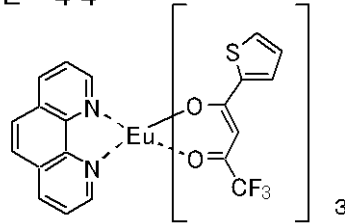
30

## 【化 6 2】

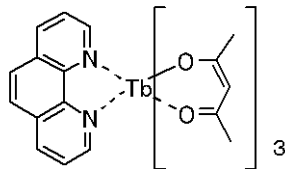
HE-43



HE-44



HE-45



10

## 【0370】

(電子輸送性ホスト材料)

本発明に用いられる電子輸送性ホスト材料としては、耐久性向上、駆動電圧低下の観点から、電子親和力  $E_a$  が  $2.5 \text{ eV}$  以上  $3.5 \text{ eV}$  以下であることが好ましく、 $2.6 \text{ eV}$  以上  $3.4 \text{ eV}$  以下であることがより好ましく、 $2.8 \text{ eV}$  以上  $3.3 \text{ eV}$  以下であることが更に好ましい。また、耐久性向上、駆動電圧低下の観点から、イオン化ポテンシャル  $I_p$  が  $5.7 \text{ eV}$  以上  $7.5 \text{ eV}$  以下であることが好ましく、 $5.8 \text{ eV}$  以上  $7.0 \text{ eV}$  以下であることがより好ましく、 $5.9 \text{ eV}$  以上  $6.5 \text{ eV}$  以下であることが更に好ましい。

20

## 【0371】

このような電子輸送性ホストとしては、具体的には、例えば、以下の材料を挙げることができる。

ピリジン、ピリミジン、トリアジン、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、オキサゾール、オキサジアゾール、フルオレノン、アントラキノジメタン、アントロン、ジフェニルキノン、チオピランジオキシド、カルボジイミド、フルオレニリデンメタン、ジスチリルピラジン、フッ素置換芳香族化合物、ナフタレンペリレン等の複素環テトラカルボン酸無水物、フタロシアニン、およびそれらの誘導体(他の環と縮合環を形成してもよい)、8-キノリノール誘導体の金属錯体やメタルフタロシアニン、ベンゾオキサゾールやベンゾチアゾールを配位子とする金属錯体に代表される各種金属錯体等を挙げることができる。

30

## 【0372】

電子輸送性ホストとして好ましくは、金属錯体、アゾール誘導体(ベンズイミダゾール誘導体、イミダゾピリジン誘導体等)、アジン誘導体(ピリジン誘導体、ピリミジン誘導体、トリアジン誘導体等)であり、中でも、本発明においては耐久性の点から金属錯体化合物が好ましい。金属錯体化合物は金属に配位する少なくとも1つの窒素原子または酸素原子または硫黄原子を有する配位子をもつ金属錯体がより好ましい。

40

金属錯体中の金属イオンは特に限定されないが、好ましくはベリリウムイオン、マグネシウムイオン、アルミニウムイオン、ガリウムイオン、亜鉛イオン、インジウムイオン、錫イオン、白金イオン、またはパラジウムイオンであり、より好ましくはベリリウムイオン、アルミニウムイオン、ガリウムイオン、亜鉛イオン、白金イオン、またはパラジウムイオンであり、更に好ましくはアルミニウムイオン、亜鉛イオン、またはパラジウムイオンである。

## 【0373】

50

前記金属錯体中に含まれる配位子としては種々の公知の配位子が有るが、例えば、「Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds」、Springer-Verlag社、H. Yersin著、1987年発行、「有機金属化学 - 基礎と応用 -」、裳華房社、山本明夫著、1982年発行等に記載の配位子が挙げられる。

#### 【0374】

前記配位子として、好ましくは含窒素ヘテロ環配位子（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数3～15であり、単座配位子であっても2座以上の配位子であっても良い。好ましくは2座以上6座以下の配位子である。また、2座以上6座以下の配位子と単座の混合配位子も好ましい。

配位子としては、例えばアジン配位子（例えば、ピリジン配位子、ビピリジル配位子、ターピリジン配位子などが挙げられる。）、ヒドロキシフェニルアゾール配位子（例えば、ヒドロキシフェニルベンズイミダゾール配位子、ヒドロキシフェニルベンズオキサゾール配位子、ヒドロキシフェニルイミダゾール配位子、ヒドロキシフェニルイミダゾピリジン配位子などが挙げられる。）、アルコキシ配位子（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～10であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2-エチルヘキシロキシなどが挙げられる。）、アリーロキシ配位子（好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、特に好ましくは炭素数6～12であり、例えばフェニロキシ、1-ナフチロキシ、2-ナフチロキシ、2,4,6-トリメチルフェニロキシ、4-ピフェニロキシなどが挙げられる。）、

#### 【0375】

ヘテロアリーロキシ配位子（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばピリジルオキシ、ピラジロキシ、ピリミジロキシ、およびキノリロキシなどが挙げられる。）、アルキルチオ配位子（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。）、アリールチオ配位子（好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、特に好ましくは炭素数6～12であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。）、ヘテロアリールチオ配位子（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、および2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。）、シロキシ配位子（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数3～25、特に好ましくは炭素数6～20であり、例えば、トリフェニルシロキシ基、トリエトキシシロキシ基、およびトリイソプロピルシロキシ基などが挙げられる。）、芳香族炭化水素アニオン配位子（好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～25、特に好ましくは炭素数6～20であり、例えばフェニルアニオン、ナフチルアニオン、およびアントラニルアニオンなどが挙げられる。）、芳香族ヘテロ環アニオン配位子（好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数2～25、特に好ましくは炭素数2～20であり、例えばピロールアニオン、ピラゾールアニオン、ピラゾールアニオン、トリアゾールアニオン、オキサゾールアニオン、ベンゾオキサゾールアニオン、チアゾールアニオン、ベンゾチアゾールアニオン、チオフエンアニオン、およびベンゾチオフエンアニオンなどが挙げられる。）、インドレニンアニオン配位子などが挙げられ、好ましくは含窒素ヘテロ環配位子、アリーロキシ配位子、ヘテロアリーロキシ基、またはシロキシ配位子であり、更に好ましくは含窒素ヘテロ環配位子、アリーロキシ配位子、シロキシ配位子、芳香族炭化水素アニオン配位子、または芳香族ヘテロ環アニオン配位子である。

#### 【0376】

金属錯体電子輸送性ホストの例としては、例えば特開2002-235076、特開2004-214179、特開2004-221062、特開2004-221065、特開2004-221068、特開2004-327313等に記載の化合物が挙げられる。

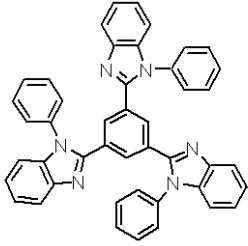
## 【 0 3 7 7 】

このような電子輸送性ホストとしては、具体的には、例えば、以下の材料を挙げることができるが、これらに限定されるものではない。

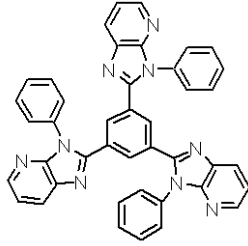
## 【 0 3 7 8 】

## 【 化 6 3 】

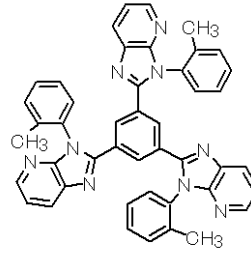
E-1



E-2

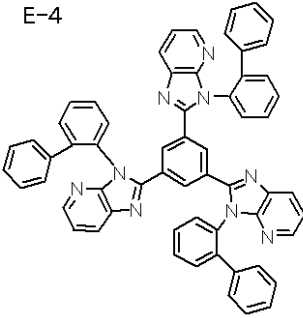


E-3

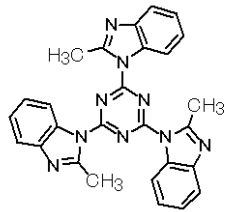


10

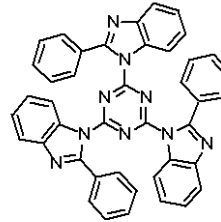
E-4



E-5

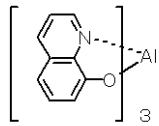


E-6

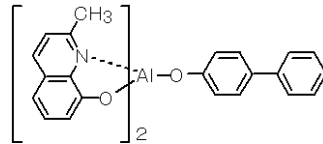


20

E-7



E-8

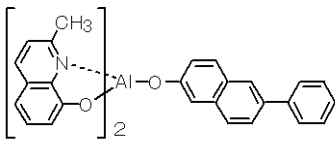


## 【 0 3 7 9 】

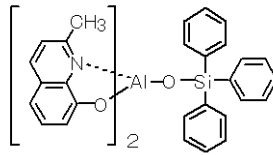
30

【化 6 4】

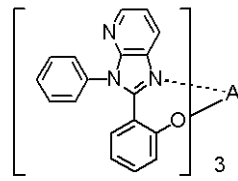
E-9



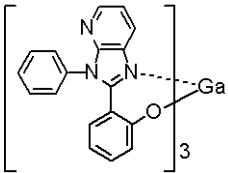
E-10



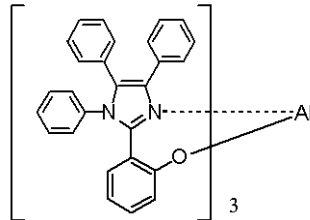
E-11



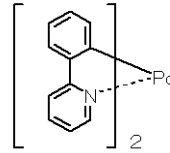
E-12



E-13

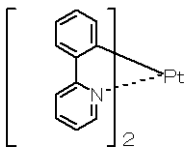


E-14

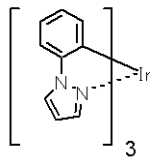


10

E-15



E-16

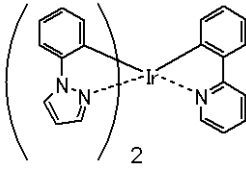


20

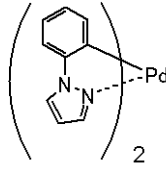
【 0 3 8 0 】

## 【化 6 5】

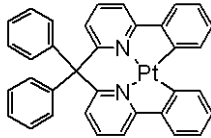
E-17



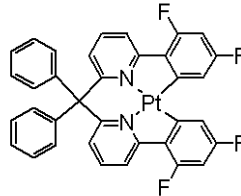
E-18



E-19

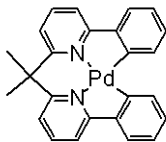


E-20

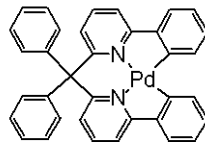


10

E-21



E-22



20

## 【 0 3 8 1】

電子輸送層ホストとしては、E - 1 ~ E - 6、E - 8、E - 9、E - 10、E - 21、またはE - 22が好ましく、E - 3、E - 4、E - 6、E - 8、E - 9、E - 10、E - 21、またはE - 22がより好ましく、E - 3、E - 4、E - 21、またはE - 22が更に好ましい。

30

## 【 0 3 8 2】

本発明における発光層において、発光性ドーパントとして燐光発光性ドーパントを用いたとき、該燐光発光性ドーパントの最低三重項励起エネルギー $T1(D)$ と前記複数のホスト化合物の最低励起三重項エネルギーのうち最小のもの前記 $T1(H)_{min}$ とが、 $T1(H)_{min} > T1(D)$ の関係を満たすことが色純度、外部量子効率、駆動耐久性の点で好ましい。

## 【 0 3 8 3】

(正孔輸送性ホスト材料)

本発明の発光層に用いられる正孔輸送性ホスト材料としては、耐久性向上、駆動電圧低下の観点から、イオン化ポテンシャル $I_p$ が $5.1\text{ eV}$ 以上 $6.4\text{ eV}$ 以下であることが好ましく、 $5.4\text{ eV}$ 以上 $6.2\text{ eV}$ 以下であることがより好ましく、 $5.6\text{ eV}$ 以上 $6.0\text{ eV}$ 以下であることが更に好ましい。また、耐久性向上、駆動電圧低下の観点から、電子親和力 $E_a$ が $1.2\text{ eV}$ 以上 $3.1\text{ eV}$ 以下であることが好ましく、 $1.4\text{ eV}$ 以上 $3.0\text{ eV}$ 以下であることがより好ましく、 $1.8\text{ eV}$ 以上 $2.8\text{ eV}$ 以下であることが更に好ましい。

40

## 【 0 3 8 4】

このような正孔輸送性ホスト材料としては、具体的には、例えば、以下の材料を挙げることができる。

ピロール、カルバゾール、インドール、ピラゾール、イミダゾール、ポリアリールアル

50

カン、ピラゾリン、ピラズロン、フェニレンジアミン、アリアルアミン、アミノ置換カルコン、スチリルアントラセン、フルオレノン、ヒドラゾン、スチルベン、シラザン、芳香族第三級アミン化合物、スチリルアミン化合物、芳香族ジメチリデン系化合物、ポルフィリン系化合物、ポリシラン系化合物、ポリ(N-ビニルカルバゾール)、アニリン系共重合体、チオフェンオリゴマチオフェンオリゴマー、ポリチオフェン等の導電性高分子オリゴマー、有機シラン、カーボン膜、及びそれらの誘導体等が挙げられる。

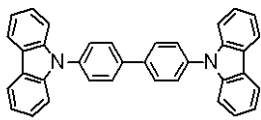
中でも、カルバゾール誘導体、インドール誘導体、芳香族第三級アミン化合物、チオフェン誘導体が好ましく、特に分子内にカルバゾール骨格、インドール骨格、および芳香族第三級アミン骨格を複数個有するものが好ましい。更には、カルバゾール骨格およびインドール骨格の少なくとも一方を有するものが好ましい。

このような正孔輸送性ホスト材料としての具体的化合物としては、例えば下記のもの

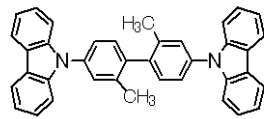
【0385】

【化66】

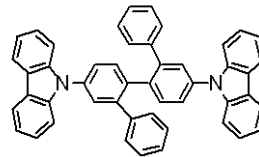
H-1



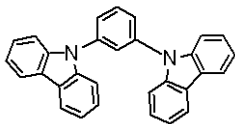
H-2



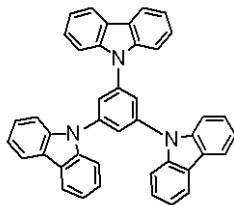
H-3



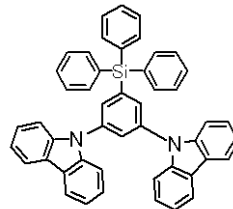
H-4



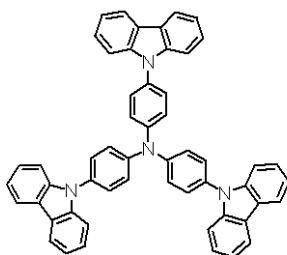
H-5



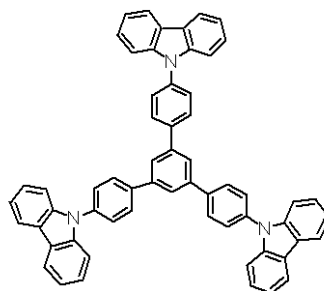
H-6



H-7



H-8



【0386】

10

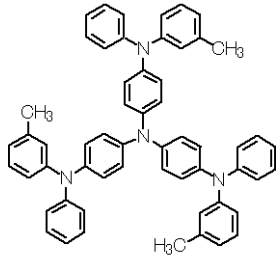
20

30

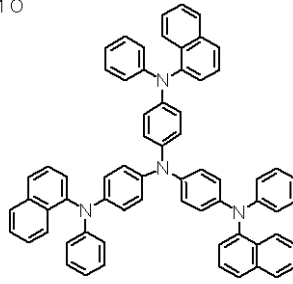


【化 6 7】

H-9

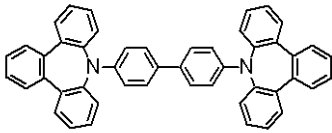


H-10

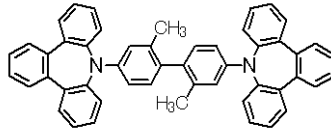


10

H-11

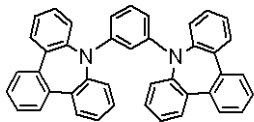


H-12

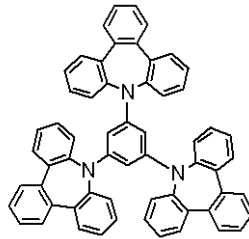


20

H-13

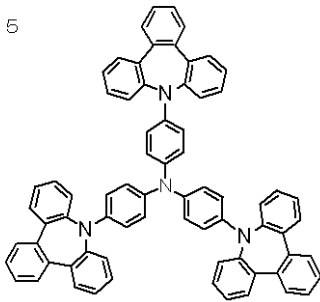


H-14

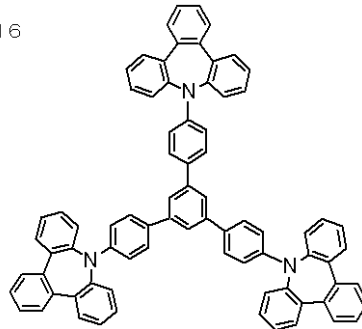


30

H-15



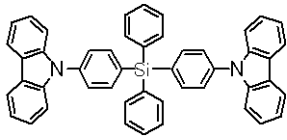
H-16



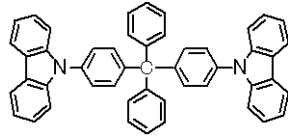
【 0 3 8 7 】

【化 6 8】

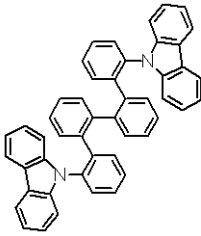
H-17



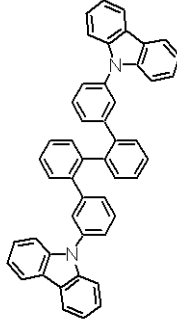
H-18



H-19

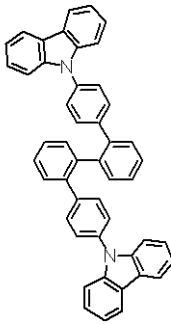


H-20

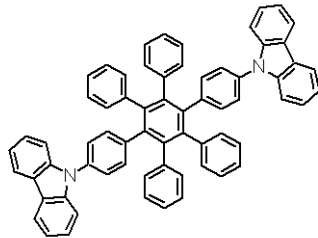


10

H-21

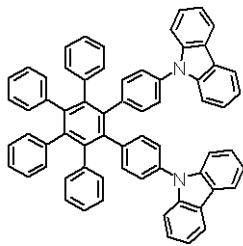


H-22



20

H-23

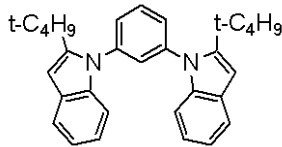


30

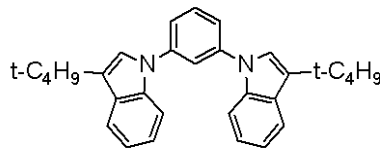
【 0 3 8 8 】

## 【化 6 9】

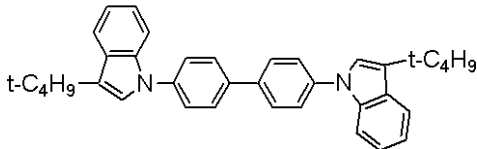
H-24



H-25



H-26



10

## 【 0 3 8 9 】

&lt; 発光材料とホスト材料の混合比 &gt;

- ホスト材料および発光材料の混合比 -

本発明に於けるホスト材料および発光材料の混合比率は、発光層の平均の質量比で 0 . 1 質量 % ~ 5 0 質量 % が好ましく、1 質量 % ~ 3 0 質量 % がより好ましい。0 . 1 質量 % 未満では素子特性の最適化が難しくなったり、製造ばらつきの影響が大きくなったりする

20

## 【 0 3 9 0 】

&lt; 膜厚 &gt;

発光層の膜厚としては、輝度ムラ、駆動電圧、輝度の観点から、1 0 n m 以上 5 0 0 n m 以下であることが好ましく、2 0 n m 以上 1 0 0 n m 以下であることが好ましい。発光層の膜厚が薄いと、電荷の漏れが生じやすくなり発光効率が低下することがあり好ましく無い。発光層の膜厚が厚いと、駆動電圧が高くなり、発光効率の低下を招き、用途を限定する原因となってしまう。

## 【 0 3 9 1 】

&lt; 層構成 &gt;

発光層は 1 層であっても 2 層以上であってもよく、それぞれの層が異なる発光色で発光してもよい。また、発光層が積層構造である場合については、積層構造を構成する各層の膜厚は特に限定されないが、各発光層の合計膜厚が前述の範囲になるようにすることが好ましい。

30

## 【 0 3 9 2 】

3 . カルベン化合物含有層

本発明におけるカルベン化合物含有層は、陽極と発光層との間、好ましくは正孔注入層もしくは正孔輸送層と発光層との間に配される。

本発明におけるカルベン含有層は、本発明における電子輸送性材料が濃度傾斜して含有される発光層と隣接して配されることによって、高い正孔輸送性を有し、駆動電圧を低下させ、発光効率を向上させるとともに高い駆動耐久性を実現することが出来る。

40

## 【 0 3 9 3 】

本発明に於けるカルベン化合物含有層は、発光層と直接接していることが好ましい。

## 【 0 3 9 4 】

カルベン化合物含有層には、好ましくはカルベン化合物を 2 0 質量 % 以上 1 0 0 質量 % 以下含有し、より好ましくは、5 0 質量 % 以上 1 0 0 質量 % 以下含有する。

カルベン化合物含有層に含有されるカルベン化合物以外の材料としては、正孔輸送性材料、例えば後に説明する正孔注入層や正孔輸送層で説明する材料、先に説明した発光層の材料などがある。

50

【0395】

(カルベン化合物)

本発明におけるカルベン化合物は、同一元素より2個以上の水素原子が取り除かれた炭素と遷移金属間の結合を有する化合物である。

【0396】

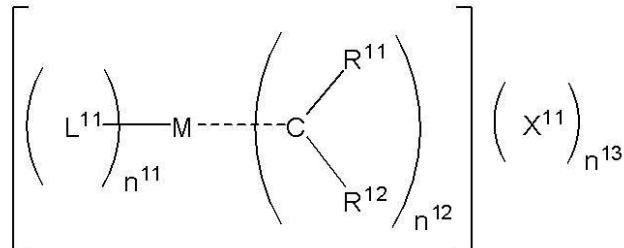
本発明におけるカルベン化合物は、好ましくは下記一般式(C1)で表される化合物である。

【0397】

【化70】

一般式(C1)

10



【0398】

式中、Mは遷移金属原子又は遷移金属イオンを表す。R<sup>1 1</sup>、R<sup>1 2</sup>は、水素原子または置換基を表し、R<sup>1 1</sup>、R<sup>1 2</sup>は、独立にMに結合してもよい。R<sup>1 1</sup>、R<sup>1 2</sup>は、それぞれ結合して環構造を形成しても良い。L<sup>1 1</sup>は配位子を表し、R<sup>1 1</sup>及びR<sup>1 2</sup>の少なくとも一つと結合してもよい。X<sup>1 1</sup>は対イオンを表す。n<sup>1 1</sup>は0~5の整数を表し、n<sup>1 2</sup>は1~6の整数を表し、n<sup>1 3</sup>は0~3の整数を表す。Cはカルベン炭素を表し、該カルベン炭素はR<sup>1 1</sup>及びR<sup>1 2</sup>と結合し、Mに配位する。

20

【0399】

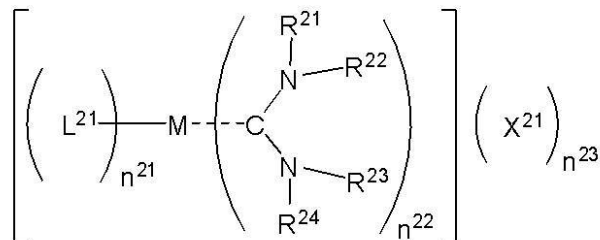
さらに好ましくは、前記一般式(C1)で表されるカルベン化合物が、下記一般式(C2)で表される化合物である。

【0400】

【化71】

一般式(C2)

30



【0401】

式中、Mは遷移金属原子または遷移金属イオンを表す。R<sup>2 1</sup>、R<sup>2 2</sup>、R<sup>2 3</sup>、及びR<sup>2 4</sup>は、水素原子または置換基を表し、R<sup>2 1</sup>、R<sup>2 2</sup>、R<sup>2 3</sup>、及びR<sup>2 4</sup>は独立にMに結合してもよい。R<sup>2 1</sup>、R<sup>2 2</sup>、R<sup>2 3</sup>、及びR<sup>2 4</sup>は、それぞれ結合して環構造を形成しても良い。L<sup>2 1</sup>は配位子を表し、R<sup>2 1</sup>、R<sup>2 2</sup>、R<sup>2 3</sup>、及びR<sup>2 4</sup>の少なくとも一つと結合してもよい。X<sup>2 1</sup>は対イオンを表す。n<sup>2 1</sup>は0~5の整数を表し、n<sup>2 2</sup>は1~6の整数を表し、n<sup>2 3</sup>は0~3の整数を表す。Cはカルベン炭素を表し、該カルベン炭素は2つの窒素原子と結合し、Mに配位する。

40

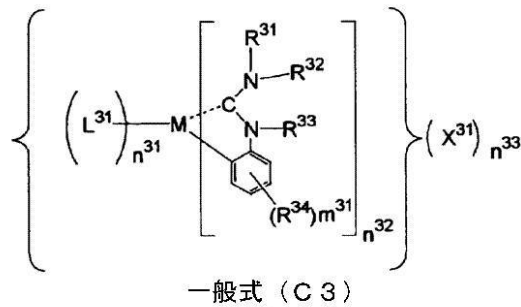
【0402】

さらに好ましくは、一般式(C2)が、一般式(C3)で表される化合物である。

【0403】

50

## 【化72】



10

## 【0404】

式中、Mは遷移金属原子または遷移金属イオンを表す。R<sup>31</sup>、R<sup>32</sup>、およびR<sup>33</sup>は、水素原子または置換基を表し、R<sup>34</sup>は置換基を表す。R<sup>31</sup>、R<sup>32</sup>、およびR<sup>33</sup>は、それぞれ結合して環構造を形成しても良く、またR<sup>31</sup>、R<sup>32</sup>、およびR<sup>33</sup>上の原子でMに配位していても良い。

## 【0405】

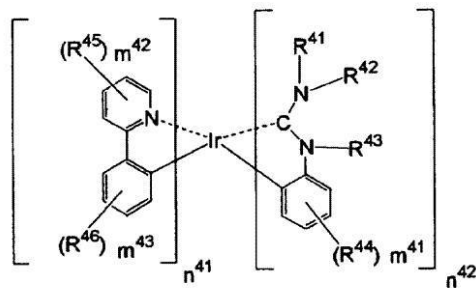
R<sup>34</sup>が複数の場合、複数のR<sup>34</sup>は同じであっても、異なってもよい。またそれぞれが結合して環構造を形成していてもよく、R<sup>34</sup>上でMに配位していても良い。L<sup>31</sup>は配位子を表し、X<sup>31</sup>は対イオンを表す。n<sup>31</sup>は0~4の整数を表し、n<sup>32</sup>は1~3の整数を表し、n<sup>33</sup>は0~2の整数を表す。m<sup>31</sup>は0~4の整数を表す。Cはカルベン炭素を表す。該カルベン炭素は2つの窒素原子と結合し、炭素上の2つの電子によってMに配位している。

20

さらに好ましくは、一般式(C3)が、一般式(C4)で表される化合物である。

## 【0406】

## 【化73】



一般式 (C4)

30

## 【0407】

式中、R<sup>41</sup>、R<sup>42</sup>、およびR<sup>43</sup>は、水素原子または置換基を表し、R<sup>44</sup>、R<sup>45</sup>、およびR<sup>46</sup>は置換基を表す。R<sup>41</sup>、R<sup>42</sup>、およびR<sup>43</sup>は、それぞれ結合して環構造を形成しても良く、またR<sup>41</sup>、R<sup>42</sup>、およびR<sup>43</sup>上の原子でMに配位していても良い。

40

## 【0408】

R<sup>44</sup>が複数の場合、複数のR<sup>44</sup>は同じであっても、異なっても良い。またそれぞれが結合して環構造を形成していてもよく、R<sup>44</sup>上でMに配位していても良い。R<sup>45</sup>が複数の場合、複数のR<sup>45</sup>は同じであっても、異なっても良い。またそれぞれが結合して環構造を形成していてもよく、R<sup>45</sup>上でMに配位していても良い。R<sup>46</sup>が複数の場合、複数のR<sup>46</sup>は同じであっても、異なっても良い。またそれぞれが結合して環構造を形成していてもよく、R<sup>46</sup>上でMに配位していても良い。n<sup>41</sup>は、0~2の整数、n<sup>42</sup>は1~3の整数を表す。m<sup>41</sup>、m<sup>42</sup>、およびm<sup>43</sup>は0~4の整数を表す。

好ましくは、カルベン炭素を含んだ配位子が、3座以上6座以下の配位子である。

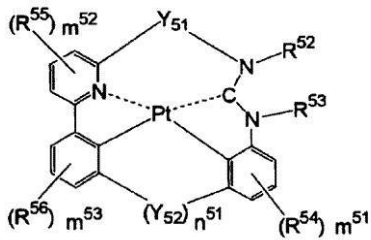
50

【0409】

さらに好ましくは、一般式(C1)が、一般式(C5)で表される化合物である。

【0410】

【化74】



一般式(C5)

10

【0411】

式中、 $R^{52}$ 、 $R^{53}$ は、水素原子または置換基を表し、 $R^{54}$ 、 $R^{55}$ 、および $R^{56}$ は置換基を表す。 $R^{52}$ 、 $R^{53}$ は、それぞれ結合して環構造を形成しても良い。 $R^{54}$ 、 $R^{55}$ 、および $R^{56}$ がそれぞれ複数の場合、複数の $R^{54}$ 同士、複数の $R^{55}$ 同士、複数の $R^{56}$ がそれぞれ結合して環構造を形成していても良い。 $Y^{51}$ 、 $Y^{52}$ は、単結合又は連結基を表す。 $n^{51}$ は0又は1を表し、 $m^{51}$ 、 $m^{52}$ 、および $m^{53}$ は0~4の整数を表す。

20

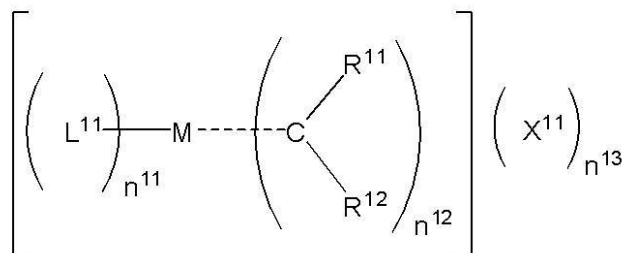
【0412】

一般式(C1)について説明する。

【0413】

【化75】

一般式(C1)



30

【0414】

Mは遷移金属原子または遷移金属イオンを表す。 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を表す。 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ の両方、もしくはいずれか一方上の原子でMに配位していても良い。 $L^{11}$ は配位子を表し、 $X^{11}$ は対イオンを表す。 $n^{11}$ は0~5の整数を表し、 $n^{12}$ は1~6の整数を表し、 $n^{13}$ は0~3の整数を表す。Cはカルベン炭素を表す。このカルベン炭素は、 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ と結合(好ましくは共有結合)し、炭素上の2つの電子によって、Mに配位結合している。

40

【0415】

本発明に使用される遷移金属原子は、特に限定されないが、好ましくはルテニウム、ロジウム、パラジウム、タングステン、レニウム、オスミウム、イリジウム、または白金であり、より好ましくは、パラジウム、レニウム、ロジウム、イリジウム、または白金であり、さらに好ましくは、パラジウム、ロジウム、イリジウム、または白金である。

【0416】

$R^{11}$ 、 $R^{12}$ で表される置換基としては、アルキル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~10であり、例えばメチル、エチル、*iso*-プロピル、*tert*-ブチル、*n*-オクチル、*n*-デシル、*n*-ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、およびシクロヘキシルなどが挙げられる。)

50

、アルケニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばビニル、アリル、2 - ブテニル、および 3 - ペンチニルなどが挙げられる。）、アルキニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばプロパルギル、3 - ペンチニルなどが挙げられる。）、

【0417】

アリール基（好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニル、p - メチルフェニル、ナフチル、およびアントラニルなどが挙げられる。）、置換または無置換のアミノ基（好ましくは炭素数 0 ~ 30、より好ましくは炭素数 0 ~ 20、特に好ましくは炭素数 0 ~ 10 であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、ジフェニルアミノ、およびジトリルアミノなどが挙げられる。）、アルコキシ基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、および 2 - エチルヘキシロキシなどが挙げられる。）、アリールオキシ基（好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシ、1 - ナフチルオキシ、および 2 - ナフチルオキシなどが挙げられる。）、ヘテロ環オキシ基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジルオキシ、ピラジロキシ、ピリミジロキシ、およびキノリルオキシなどが挙げられる。）、

10

20

【0418】

アシル基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、およびピバロイルなどが挙げられる。）、アルコキシカルボニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。）、アリールオキシカルボニル基（好ましくは炭素数 7 ~ 30、より好ましくは炭素数 7 ~ 20、特に好ましくは炭素数 7 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシカルボニルなどが挙げられる。）、アシルオキシ基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。）、アシルアミノ基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。）、

30

【0419】

アルコキシカルボニルアミノ基（好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。）、アリールオキシカルボニルアミノ基（好ましくは炭素数 7 ~ 30、より好ましくは炭素数 7 ~ 20、特に好ましくは炭素数 7 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。）、スルホニルアミノ基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。）、スルファモイル基（好ましくは炭素数 0 ~ 30、より好ましくは炭素数 0 ~ 20、特に好ましくは炭素数 0 ~ 12 であり、例えばスルファモイル、メチルスルファモイル、ジメチルスルファモイル、およびフェニルスルファモイルなどが挙げられる。）、

40

【0420】

カルバモイル基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばカルバモイル、メチルカルバモイル、ジエチルカルバモイル、およびフェニルカルバモイルなどが挙げられる。）、アルキルチオ基（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。）、アリールチオ基（好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であ

50

り、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロ環チオ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミダゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、および2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、

#### 【0421】

スルホニル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメシル、トシルなどが挙げられる。)、スルフィニル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメタンスルフィニル、ベンゼンスルフィニルなどが挙げられる。)、ウレイド基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばウレイド、メチルウレイド、フェニルウレイドなどが挙げられる。)、リン酸アミド基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばジエチルリン酸アミド、フェニルリン酸アミドなどが挙げられる。)、ヒドロキシ基、メルカプト基、ハロゲン原子(例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子)、

10

#### 【0422】

シアノ基、スルホ基、カルボキシル基、ニトロ基、ヒドロキサム酸基、スルフィノ基、ヒドラジノ基、イミノ基、ヘテロ環基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~12であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子、具体的には例えばイミダゾリル、ピリジル、キノリル、フリル、チエニル、ピペリジル、モルホリノ、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル基、およびアゼピニル基などが挙げられる。)、シリル基(好ましくは炭素数3~40、より好ましくは炭素数3~30、特に好ましくは炭素数3~24であり、例えばトリメチルシリル、トリフェニルシリルなどが挙げられる。)、シリルオキシ基(好ましくは炭素数3~40、より好ましくは炭素数3~30、特に好ましくは炭素数3~24であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。)などが挙げられる。これらの置換基は更に置換されてもよい。

20

#### 【0423】

また $R^{11}$ 、 $R^{12}$ は、それぞれ結合して環構造を形成しても良い。また $R^{11}$ 、 $R^{12}$ 上の原子でMに配位していても良い。 $R^{11}$ 及び $R^{12}$ の少なくとも一つが、 $L^{11}$ と結合して、キレート配位子を形成しても良い。 $R^{11}$ 、 $R^{12}$ は、アルコキシ基、アリーロキシ基、ヘテロアリーロキシ基、置換アミノ基が好ましく、アルコキシ基、置換アミノ基がさらに好ましい。

30

#### 【0424】

$L^{11}$ は配位子を表す。配位子としては、例えば、「Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds」Springer-Verlag社H. Yersin著1987年発行、「有機金属化学-基礎と応用-」裳華房社山本明夫著1982年発行等に記載の配位子が挙げられ、好ましくは、ハロゲン配位子(好ましくは塩素配位子、フッ素配位子)、含窒素ヘテロ環配位子(例えばピピリジル、フェナントロリン、フェニルピリジン、ピラゾリルピリジン、ベンズイミダゾリルピリジン、フェニルピラゾール、ピコリン酸、またはジピコリン酸など)、ジケトン配位子、ニトリル配位子、CO配位子、イソニトリル配位子、リン配位子(例えば、ホスフィン誘導体、亜リン酸エステル誘導体、またはホスフィニン誘導体など)、カルボン酸配位子(例えば酢酸配位子など)であり、より好ましくは、含窒素ヘテロ環配位子(例えばピピリジル、フェナントロリン、フェニルピリジン、ピラゾリルピリジン、ベンズイミダゾリルピリジン、またはフェニルピラゾール)である。

40

#### 【0425】

含窒素ヘテロ環配位子における含窒素ヘテロ環としてはピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、トリアゾール環、チアゾール環、オキサゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、またはアザ

50



ホスフィニン環が好ましく、ピリジン環、ピロール環、ピラゾール環、またはイミダゾール環がより好ましく、ピリジン環、ピラゾール環、またはイミダゾール環がさらに好ましい。

含窒素ヘテロ環配位子は、置換基を有していても良い。置換基としては前記 R<sup>1 1</sup> で説明した基が挙げられ、例えば、アルキル基、アリール基、アルコキシ基、フッ素原子、シアノ基、または置換アミノ基等が好ましい。

【0426】

X<sup>1 1</sup> は対イオンを表す。対イオンとしては、特に限定されないが、好ましくはアルカリ金属イオン、アルカリ土類金属イオン、ハロゲンイオン、パークロレートイオン、PF<sub>6</sub>イオン、アンモニウムイオン（例えばテトラメチルアンモニウムイオンなど）、ボレートイオン、ホスホニウムイオンであり、より好ましくはパークロレートイオン、PF<sub>6</sub>イオンである。

10

【0427】

n<sup>1 1</sup> は 0 ~ 5 の整数を表し、1 ~ 4 が好ましく、1, 2 がより好ましい。n<sup>1 1</sup> が複数の時は、複数の L<sup>1 1</sup> は同じであっても異なっても良い。n<sup>1 2</sup> は 1 ~ 6 の整数を表し、1 ~ 4 が好ましく、1 ~ 3 がより好ましい。n<sup>1 2</sup> が複数の時は、R<sup>1 1</sup> - C - R<sup>1 2</sup> で表される複数のカルベン配位子は、同じであっても異なっても良い。n<sup>1 3</sup> は 0 ~ 3 の整数を表し、0, 1 が好ましく、0 がより好ましい。n<sup>1 3</sup> が複数の時は、複数の X<sup>1 1</sup> は同じであっても異なっても良い。

20

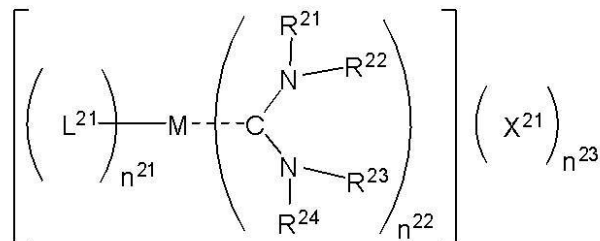
【0428】

一般式 (C2) について説明する。

【0429】

【化76】

一般式 (C2)



30

【0430】

M、L<sup>2 1</sup>、X<sup>2 1</sup>、n<sup>2 1</sup>、n<sup>2 2</sup>、及び n<sup>2 3</sup> はそれぞれ前記一般式 (C1) の M、L<sup>1 1</sup>、X<sup>1 1</sup>、n<sup>1 1</sup>、n<sup>1 2</sup>、及び n<sup>1 3</sup> と同義であり、好ましい範囲も同じである。R<sup>2 1</sup>、R<sup>2 2</sup>、R<sup>2 3</sup>、及び R<sup>2 4</sup> は、水素原子または置換基を表し、置換基としては、前記 R<sup>1 1</sup> で説明した基が挙げられる。R<sup>2 1</sup>、R<sup>2 2</sup>、R<sup>2 3</sup>、及び R<sup>2 4</sup> は、それぞれ結合して環構造を形成しても良く、また、R<sup>2 1</sup>、R<sup>2 2</sup>、R<sup>2 3</sup>、及び R<sup>2 4</sup> 上の原子で M に配位していても良い。さらに R<sup>2 1</sup>、R<sup>2 2</sup>、R<sup>2 3</sup>、及び R<sup>2 4</sup> は、L<sup>2 1</sup> と結合して、キレート配位子を形成しても良い。R<sup>2 1</sup>、R<sup>2 2</sup>、R<sup>2 3</sup>、及び R<sup>2 4</sup> は、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、アルケニル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アルキルアミノ基、アリールアミノ基、またはヘテロ環アミノ基が好ましく、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、アルコキシ基、またはアリールオキシ基がより好ましく、アルキル基、アリール基、またはヘテロアリール基がさらに好ましい。

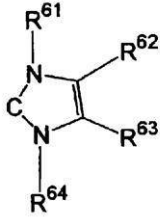
40

カルベン炭素と 2 つの窒素原子、R<sup>2 1</sup>、R<sup>2 2</sup>、R<sup>2 3</sup>、R<sup>2 4</sup> から形成されるカルベン配位子は、カルベン炭素と 2 つの窒素原子を含有した環状構造が好ましく、5 員環、6 員環構造がより好ましく、もっとも好ましくは一般式 (Z-1) に表される 5 員環構造である。

【0431】

50

【化 7 7】



一般式 (Z-1)

【 0 4 3 2】

10

式中、 $R^{61}$ 、 $R^{62}$ 、 $R^{63}$ 、及び $R^{64}$ は、水素原子または置換基を表す。Cはカルベン炭素を表す。このカルベン炭素は、2つの窒素原子と結合し、その炭素上に遷移金属に配位可能な2つの電子を有している。

【 0 4 3 3】

一般式 (Z-1) について説明する。 $R^{61}$ 、 $R^{62}$ 、 $R^{63}$ 、及び $R^{64}$ は、前記一般式 (2) の $R^{21}$ 、 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、及び $R^{24}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

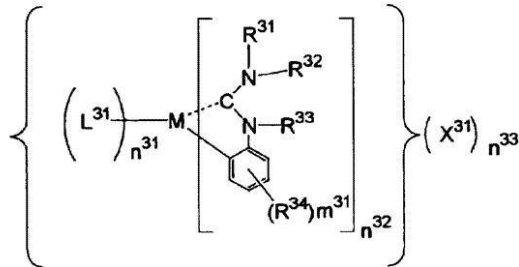
【 0 4 3 4】

一般式 (C3) について説明する。

【 0 4 3 5】

20

【化 7 8】



一般式 (C3)

30

【 0 4 3 6】

M、 $R^{31}$ 、 $R^{32}$ 、 $R^{33}$ 、 $L^{31}$ 、及び $X^{31}$ はそれぞれ前記一般式 (2) のM、 $R^{21}$ 、 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $L^{21}$ 、及び $X^{21}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。 $R^{34}$ は、置換基を表し、置換基としては、前記 $R^{11}$ で説明した基が挙げられる。複数の $R^{34}$ は、同じであっても、異なっても良い。またそれぞれが結合し、環構造を形成しても良く、 $R^{34}$ 上の原子でMに配位しても良い。 $R^{34}$ は、好ましくは、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、アルコキシ基、フッ素原子、シアノ基、または置換アミノ基であり、より好ましくは、アルキル基、アリール基、フッ素原子、シアノ基であり、フッ素原子、またはシアノ基がさらに好ましい。 $n^{31}$ は、0~4の整数を表し、1~4が好ましい。 $n^{32}$ は、1~3の整数を表し、1又は2が好ましい。 $n^{33}$ は、0~2の整数を表し、0又は1が好ましい。 $m^{31}$ は、0~4の整数を表し、0~2が好ましい。 $m^{31}$ が複数の場合は、複数の $R^{34}$ は同じであっても異なっても良い。

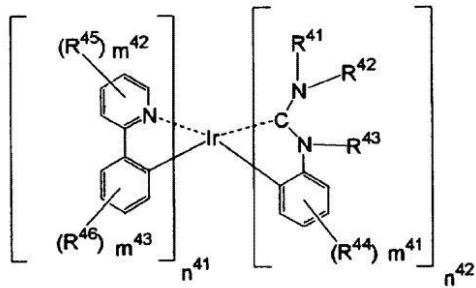
40

【 0 4 3 7】

一般式 (C4) について説明する。

【 0 4 3 8】

## 【化79】



一般式 (C4)

10

## 【0439】

$R^{41}$ 、 $R^{42}$ 、 $R^{43}$ 、 $R^{44}$ 、 $n^{42}$ 、及び $m^{41}$ はそれぞれ前記一般式(3)の $R^{31}$ 、 $R^{32}$ 、 $R^{33}$ 、 $R^{34}$ 、 $n^{32}$ 、及び $m^{31}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。 $R^{45}$ 、 $R^{46}$ は、置換基を表し、置換基としては、前記 $R^{11}$ で説明した基が挙げられる。 $m^{42}$ が複数の場合は、複数の $R^{45}$ は、同じであっても、異なっても良い。またそれぞれが結合し、環構造を形成しても良く、 $R^{45}$ 上の原子でイリジウム原子に配位しても良い。 $R^{45}$ は、好ましくは、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、アルコキシ基、フッ素原子、シアノ基、または置換アミノ基であり、より好ましくは、アルキル基、アリール基、アルコキシ基、または置換アミノ基であり、アルコキシ基、置換アミノ基がさらに好ましい。 $m^{42}$ は、0~4の整数を表し、0~2が好ましい。 $m^{43}$ が複数の場合は、複数の $R^{46}$ は、同じであっても、異なっても良い。またそれぞれが結合し、環構造を形成しても良く、 $R^{46}$ 上の原子でイリジウム原子に配位しても良い。 $R^{46}$ は、好ましくは、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、アルコキシ基、フッ素原子、シアノ基、または置換アミノ基であり、より好ましくは、アルキル基、アリール基、フッ素原子、またはシアノ基であり、フッ素原子、シアノ基がさらに好ましい。 $m^{43}$ は、0~4の整数を表し、0~2が好ましい。 $n^{41}$ は、0~2の整数を表し、1又は2が好ましい。

20

## 【0440】

一般式(C1)~(C4)で表される化合物において、カルベン炭素を含んだ配位子は、3座以上6座以下であることが好ましく、3座以上4座以下であることがより好ましい。

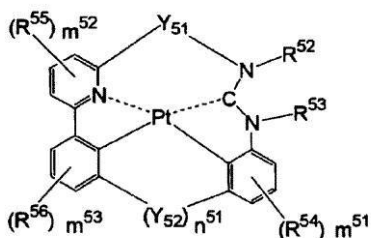
30

## 【0441】

一般式(C5)について説明する。

## 【0442】

## 【化80】



一般式 (C5)

40

## 【0443】

$R^{52}$ 、 $R^{53}$ は、水素原子または置換基を表す。置換基としては、前記 $R^{11}$ で説明した基が挙げられる。 $R^{52}$ 、 $R^{53}$ は、それぞれ結合して環構造を形成しても良く、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、アルケニル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アルキルアミノ基、アリールアミノ基、またはヘテロ環アミノ基が好ましく、アル

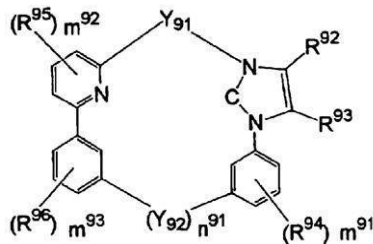
50

キル基、アリアル基、ヘテロアリアル基、アルコキシ基、またはアリアルオキシ基がより好ましく、アルキル基、アリアル基、またはヘテロアリアル基がさらに好ましい。

カルベン炭素と2つの窒素原子、 $R^{52}$ 、 $R^{53}$ から形成されるカルベン配位子は、カルベン炭素と2つの窒素原子を含有した環状構造が好ましく、5員環、6員環構造がより好ましく、もっとも好ましくは一般式(Z-2)に表される5員環構造である。

【0444】

【化81】



一般式(Z-2)

10

【0445】

式中、 $R^{92}$ 、 $R^{93}$ は、水素原子または置換基を表し、 $R^{94}$ 、 $R^{95}$ 、及び $R^{96}$ は置換基を表す。 $Y^{91}$ 、 $Y^{92}$ は単結合又は連結基を表す。 $n^{91}$ は0又は1を表し、 $m^{91}$ 、 $m^{92}$ 、 $m^{93}$ は0~4の整数を表す。Cはカルベン炭素を表す。このカルベン炭素は、2つの窒素原子と結合し、その炭素上に遷移金属に配位可能な2つの電子を有している。

20

【0446】

$R^{54}$ 、 $R^{56}$ は、置換基を表し、置換基としては、前記 $R^{11}$ で説明した基が挙げられる。 $m^{51}$ 、 $m^{53}$ が複数の場合は、複数の $R^{54}$ 、 $R^{56}$ は、同じであっても、異なっても良く、それぞれが結合し、環構造を形成しても良い。 $R^{54}$ 、 $R^{56}$ として、好ましくは、アルキル基、アリアル基、ヘテロアリアル基、アルコキシ基、フッ素原子、シアノ基、または置換アミノ基であり、より好ましくは、アルキル基、アリアル基、フッ素原子、またはシアノ基であり、フッ素原子、シアノ基がさらに好ましい。 $m^{51}$ 、 $m^{53}$ は、0~4の整数を表し、0~2が好ましい。

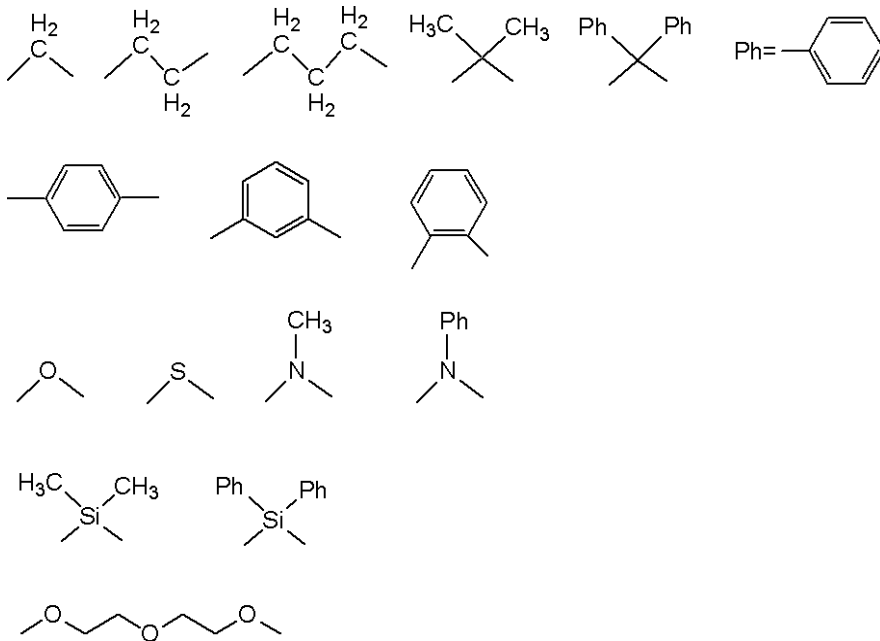
30

$R^{55}$ は、置換基を表し、置換基としては、前記 $R^{11}$ で説明した基が挙げられる。複数の $R^{55}$ は、同じであっても、異なっても良い。またそれぞれが結合し、環構造を形成しても良い。 $R^{55}$ として好ましくは、アルキル基、アリアル基、ヘテロアリアル基、アルコキシ基、フッ素原子、シアノ基、または置換アミノ基であり、より好ましくは、アルキル基、アリアル基、アルコキシ基、または置換アミノ基であり、アルコキシ基、置換アミノ基がさらに好ましい。 $m^{52}$ は、0~4の整数を表し、0~2が好ましい。 $Y^{51}$ 、 $Y^{52}$ は、単結合、または連結基を表す。連結基としては特に限定されないが、炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子からなる連結基が好ましく、下記に具体例を示すが、これらに限定されることは無い。

【0447】

40

## 【化 8 2】



10

## 【0448】

これらの連結基はさらに置換されてもよく、置換基としては前記一般式(C1)におけるR<sup>11</sup>で表される置換基として挙げたものが適用でき、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、アルケニル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アルキルアミノ基、アリールアミノ基、またはヘテロ環アミノ基が好ましく、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、アルコキシ基、またはアリールオキシ基がより好ましく、アルキル基、アリール基、またはヘテロアリール基がさらに好ましい。Y<sup>51</sup>、Y<sup>52</sup>として好ましくは、単結合、アルキル基、アリール基、またはシリル基であり、より好ましくは、単結合、ジメチルメチレン基、またはエチレン基である。n<sup>51</sup>は、0又は1を表し、0がより好ましい。

20

## 【0449】

一般式(Z-2)について説明する。R<sup>92</sup>、R<sup>93</sup>、R<sup>94</sup>、R<sup>95</sup>、R<sup>96</sup>、Y<sup>91</sup>、Y<sup>92</sup>、m<sup>91</sup>、m<sup>92</sup>、m<sup>93</sup>、及びn<sup>91</sup>は、前記一般式(5)のR<sup>52</sup>、R<sup>53</sup>、R<sup>54</sup>、R<sup>55</sup>、R<sup>56</sup>、Y<sup>51</sup>、Y<sup>52</sup>、m<sup>51</sup>、m<sup>52</sup>、m<sup>53</sup>、及びn<sup>51</sup>と同義であり、好ましい範囲も同じである。

30

## 【0450】

一般式(C1)~(C5)で表される化合物は低分子化合物であっても良く、また、オリゴマー化合物、ポリマー化合物(重量平均分子量(ポリスチレン換算)は好ましくは1000~5000000、より好ましくは2000~10000000、さらに好ましくは3000~1000000である。)であっても良い。ポリマー化合物の場合、一般式(C1)~(C5)で表される構造がポリマー主鎖中に含まれても良く、また、ポリマー側鎖に含まれていても良い。また、ポリマー化合物の場合、ホモポリマー化合物であっても良く、共重合体であっても良い。本発明の化合物は低分子化合物が好ましい。

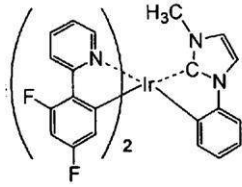
40

## 【0451】

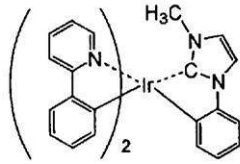
次に本発明に用いられるカルベン化合物の例を示すが、本発明はこれに限定されない。

## 【0452】

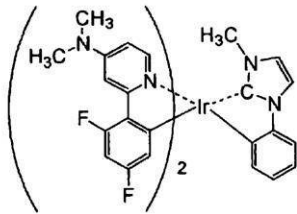
## 【化 8 3】



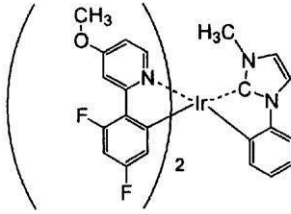
化合物 (1)



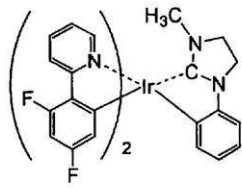
化合物 (5)



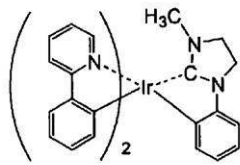
化合物 (2)



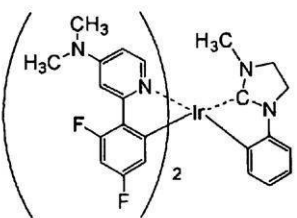
化合物 (6)



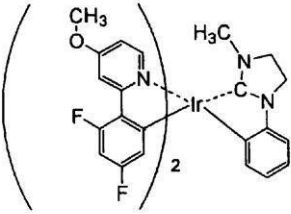
化合物 (3)



化合物 (7)



化合物 (4)



化合物 (8)

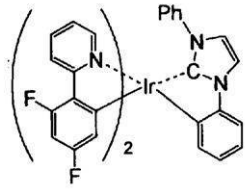
## 【 0 4 5 3 】

10

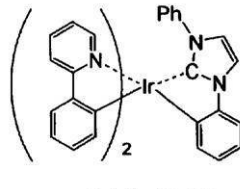
20

30

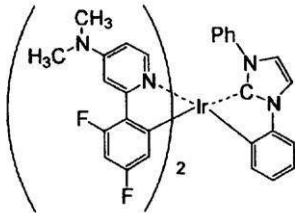
【化 8 4】



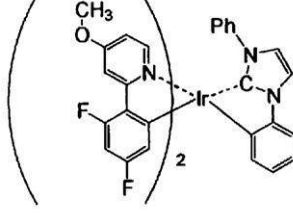
化合物 (9)



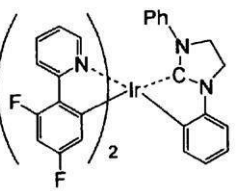
化合物 (13)



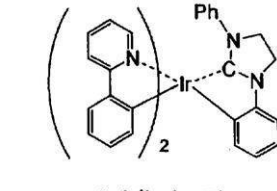
化合物 (10)



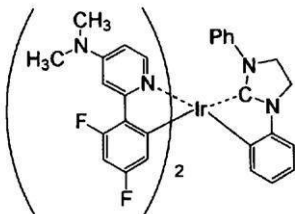
化合物 (14)



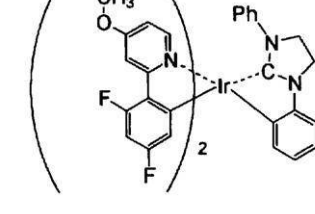
化合物 (11)



化合物 (15)



化合物 (12)



化合物 (16)

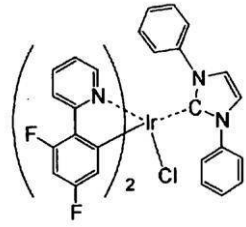
10

20

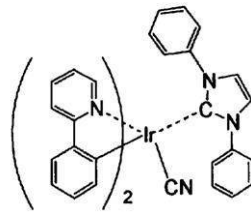
30

【 0 4 5 4 】

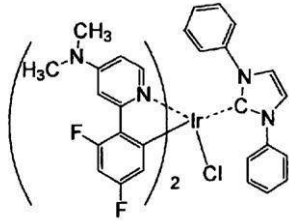
【化 8 5】



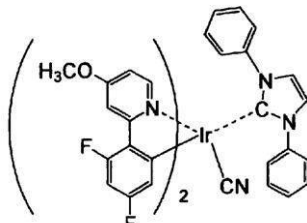
化合物 (17)



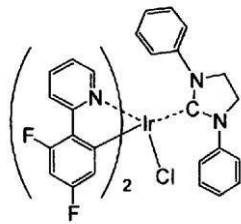
化合物 (21)



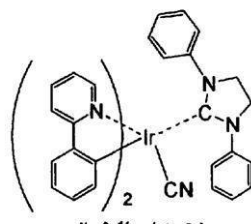
化合物 (18)



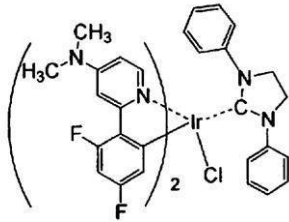
化合物 (22)



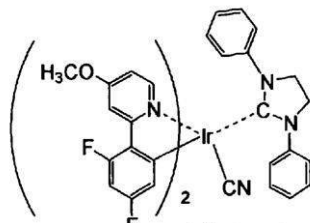
化合物 (19)



化合物 (23)



化合物 (20)



化合物 (24)

【 0 4 5 5 】

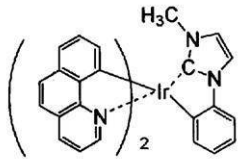
10

20

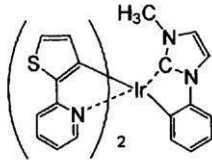
30



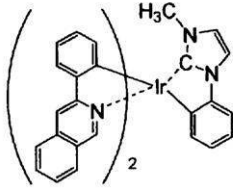
【化 8 6】



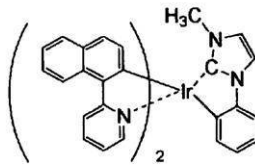
化合物 (25)



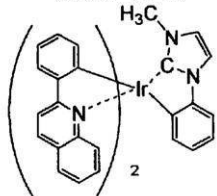
化合物 (30)



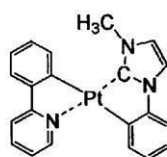
化合物 (26)



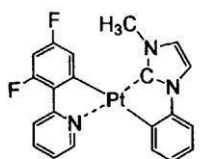
化合物 (31)



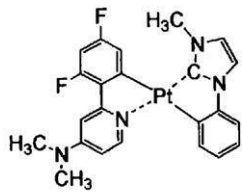
化合物 (27)



化合物 (32)



化合物 (28)



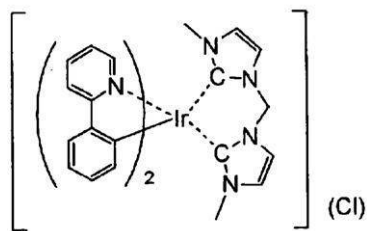
化合物 (33)



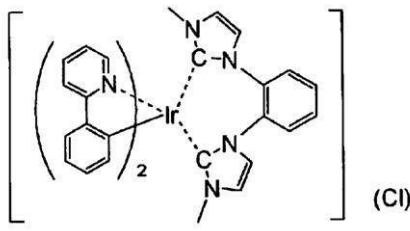
化合物 (29)

【 0 4 5 6】

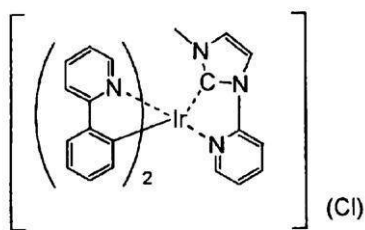
【化 8 7】



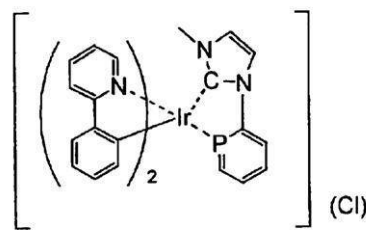
化合物 (34)



化合物 (36)



化合物 (35)



化合物 (37)

【 0 4 5 7】

10

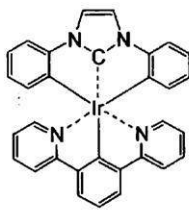
20

30

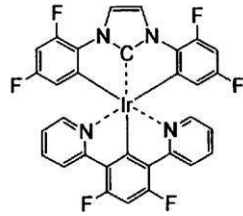
40

50

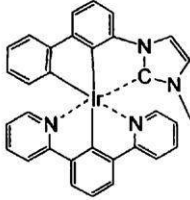
【化 8 8】



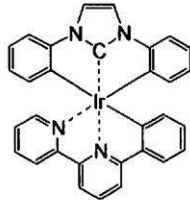
化合物 (38)



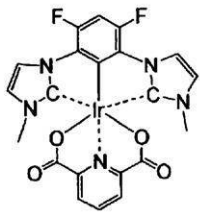
化合物 (42)



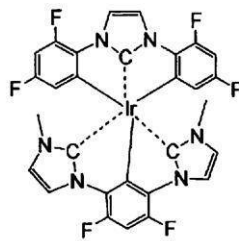
化合物 (39)



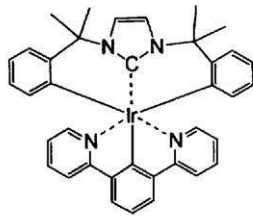
化合物 (43)



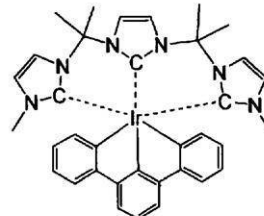
化合物 (40)



化合物 (44)



化合物 (41)



化合物 (45)

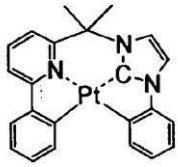
10

20

30

【 0 4 5 8】

【化 8 9】



化合物 (46)



化合物 (50)



化合物 (54)



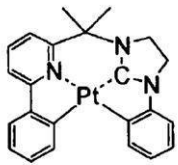
化合物 (47)



化合物 (51)



化合物 (55)



化合物 (48)



化合物 (52)



化合物 (56)



化合物 (49)



化合物 (53)



化合物 (57)

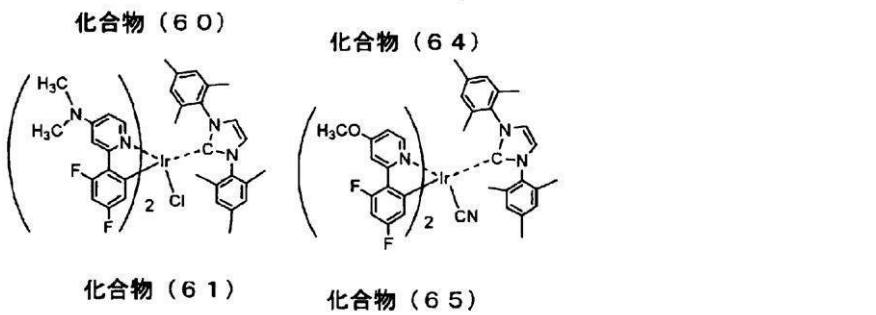
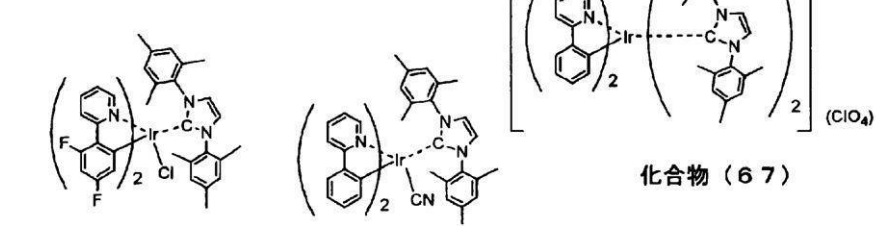
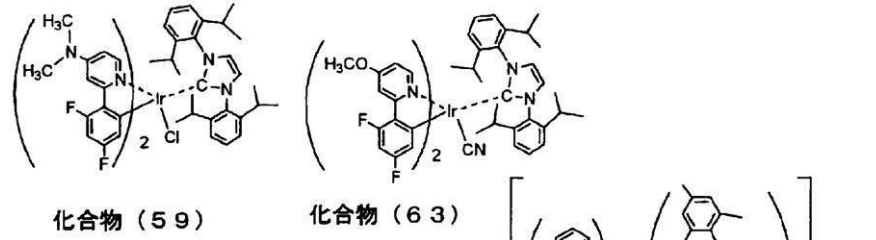
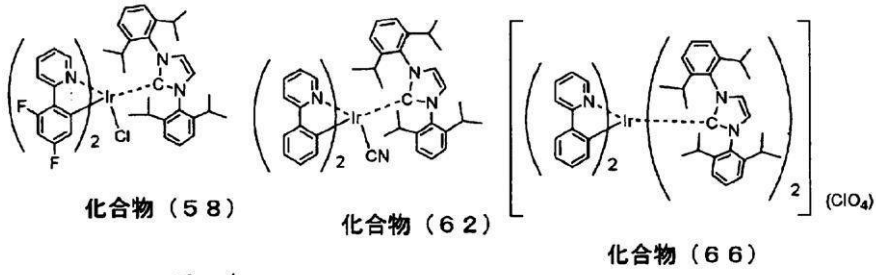
10

20

30

【 0 4 5 9】

【化90】



化合物 (66)

化合物 (67)

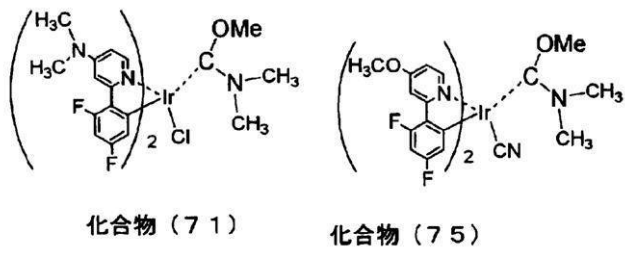
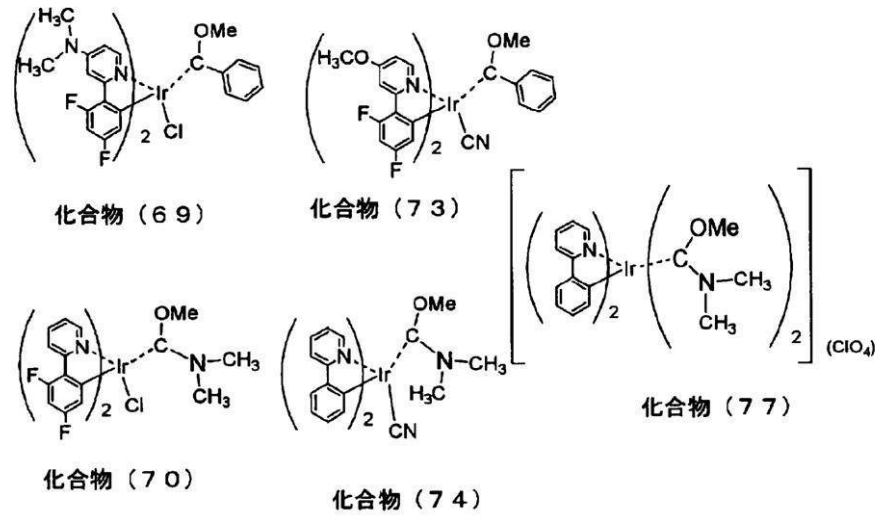
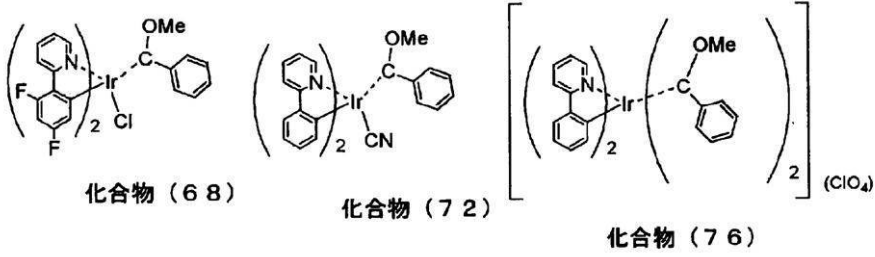
10

20

【0460】

30

【化 9 1】



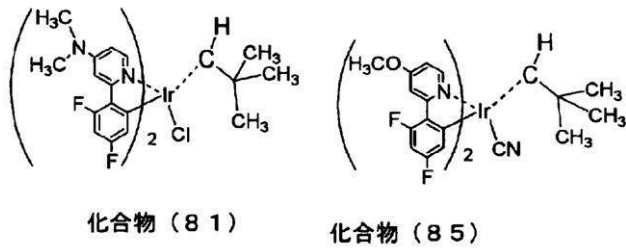
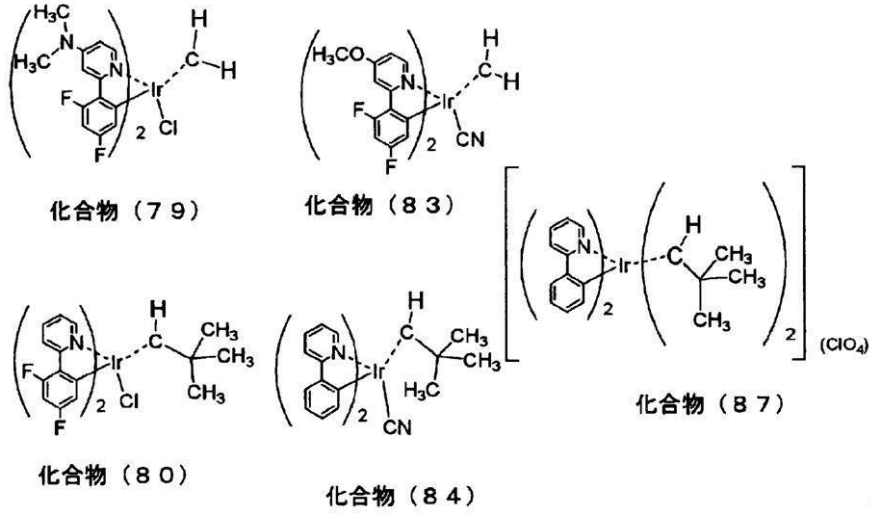
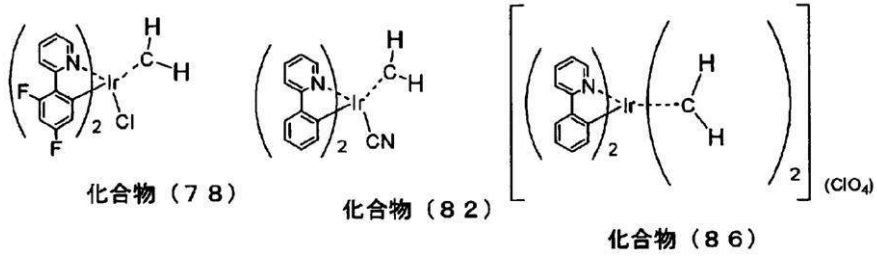
【 0 4 6 1】

10

20

30

【化 9 2】



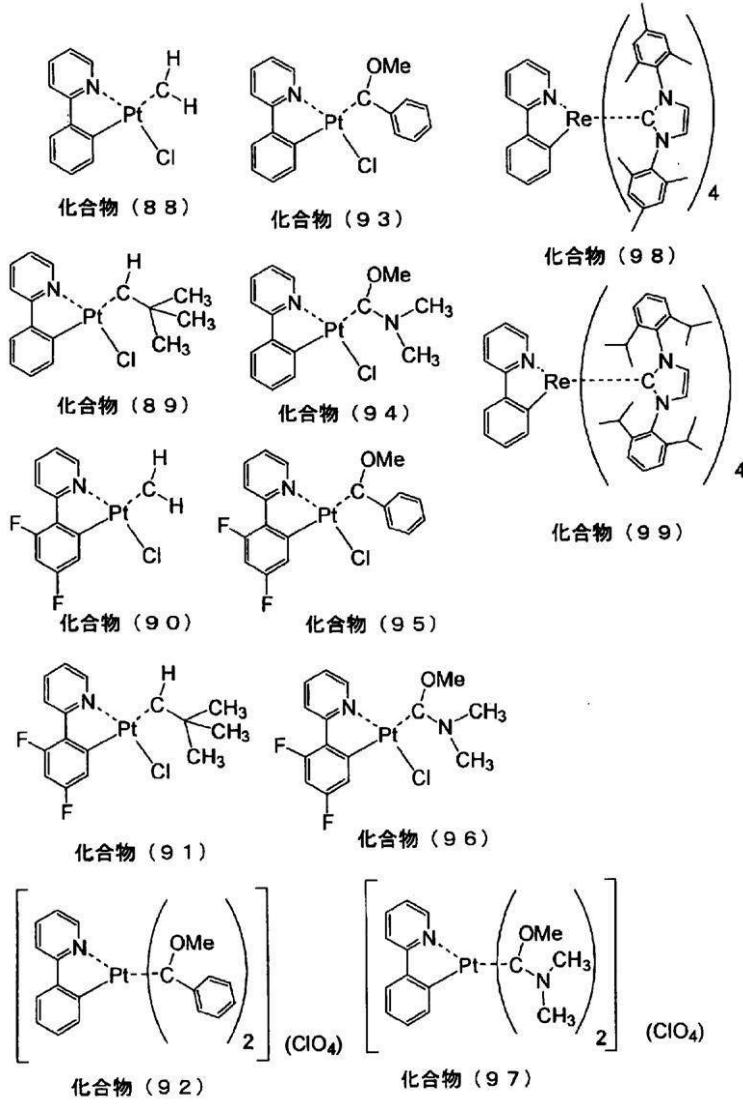
【 0 4 6 2 】

10

20

30

【化 9 3】



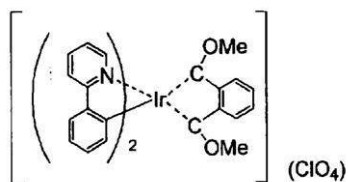
10

20

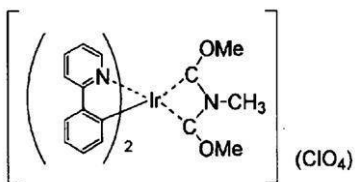
30

【 0 4 6 3】

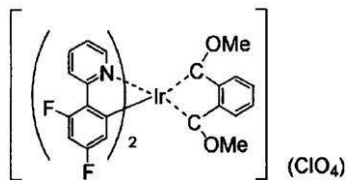
【化 9 4】



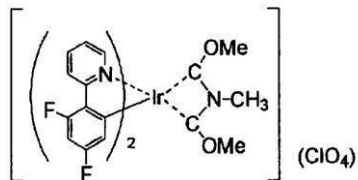
化合物 (100)



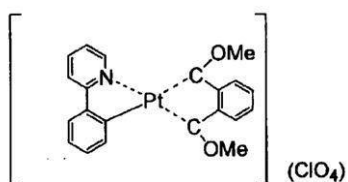
化合物 (104)



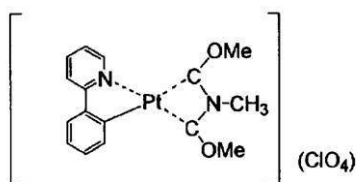
化合物 (101)



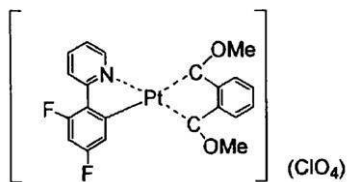
化合物 (105)



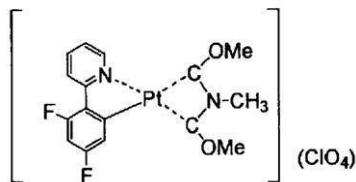
化合物 (102)



化合物 (106)



化合物 (103)



化合物 (107)

10

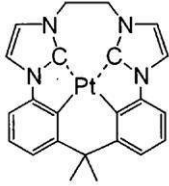
20

【 0 4 6 4 】

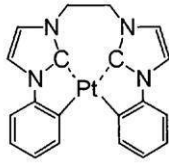
30



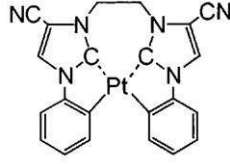
【化 9 5】



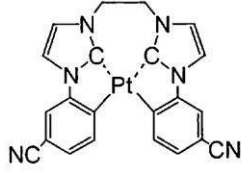
化合物 (108)



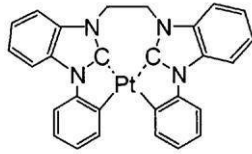
化合物 (113)



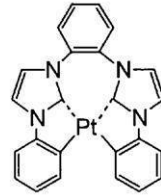
化合物 (118)



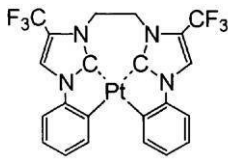
化合物 (109)



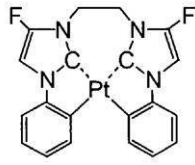
化合物 (114)



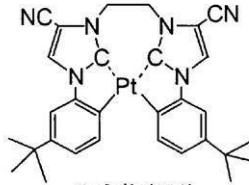
化合物 (119)



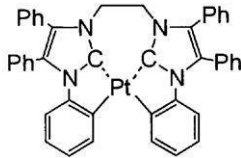
化合物 (110)



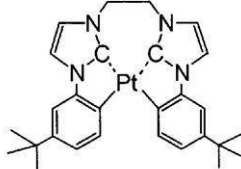
化合物 (115)



化合物 (120)



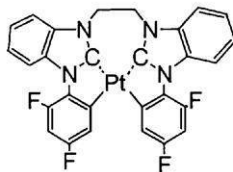
化合物 (111)



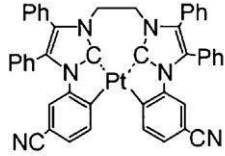
化合物 (116)



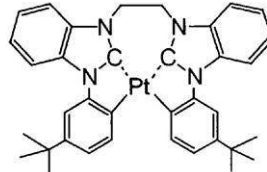
化合物 (121)



化合物 (112)



化合物 (117)



化合物 (122)

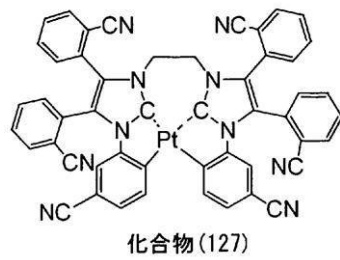
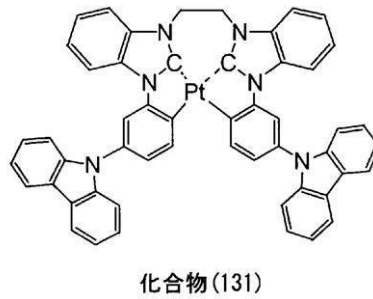
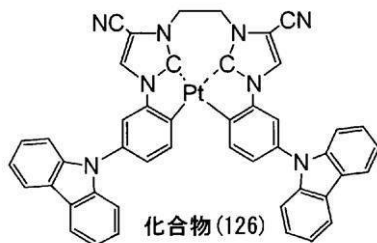
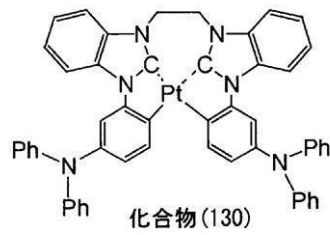
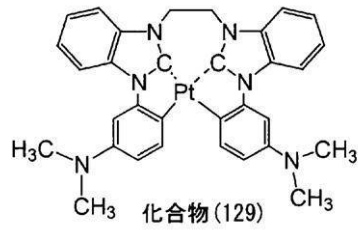
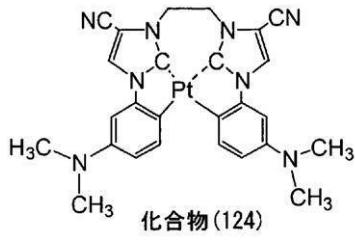
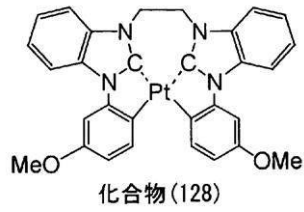
【 0 4 6 5 】

10

20

30

【化 9 6】



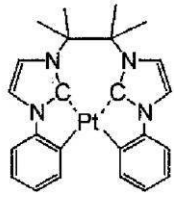
【 0 4 6 6 】

10

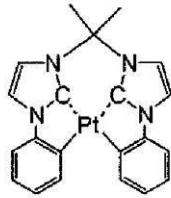
20

30

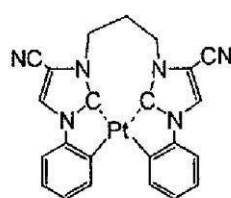
## 【化 9 7】



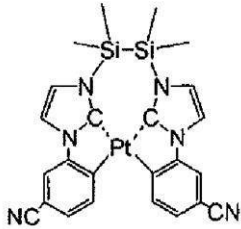
化合物 (132)



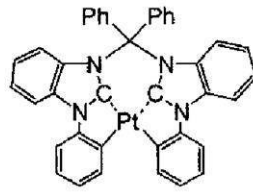
化合物 (137)



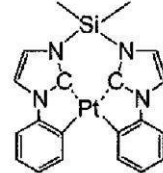
化合物 (141)



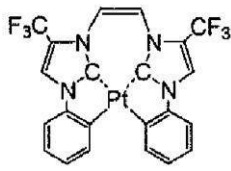
化合物 (133)



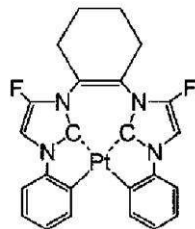
化合物 (138)



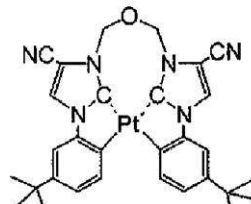
化合物 (142)



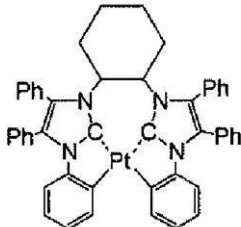
化合物 (134)



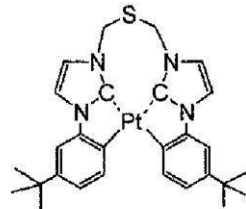
化合物 (139)



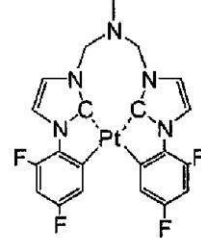
化合物 (143)



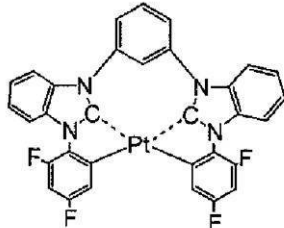
化合物 (135)



化合物 (140)



化合物 (144)



化合物 (136)

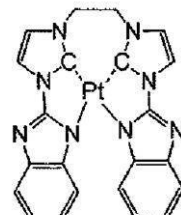
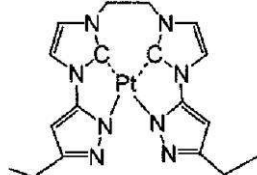
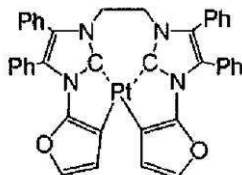
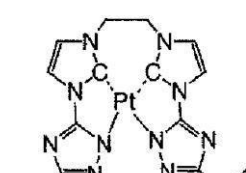
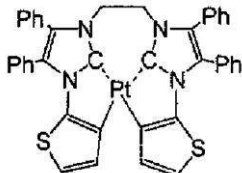
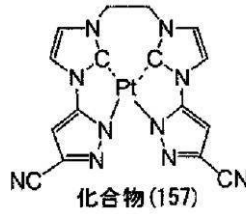
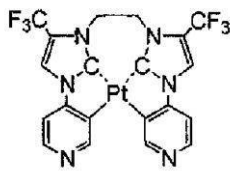
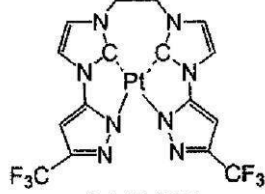
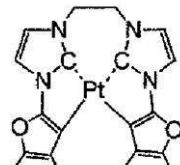
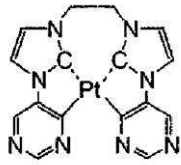
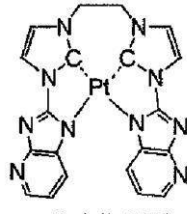
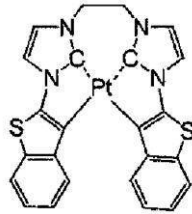
10

20

30

## 【 0 4 6 7 】

【化 9 8】



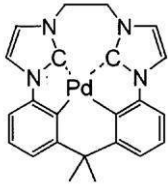
【 0 4 6 8 】

10

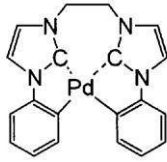
20

30

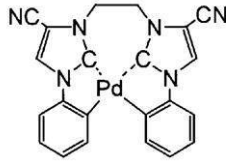
【化 9 9】



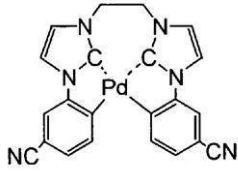
化合物(160)



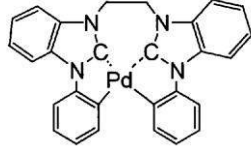
化合物(165)



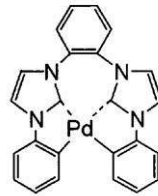
化合物(170)



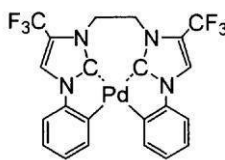
化合物(161)



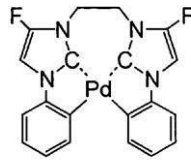
化合物(166)



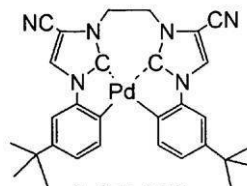
化合物(171)



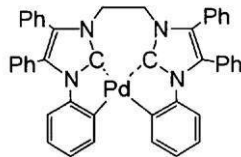
化合物(162)



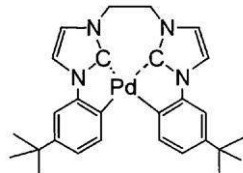
化合物(167)



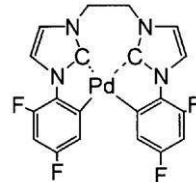
化合物(172)



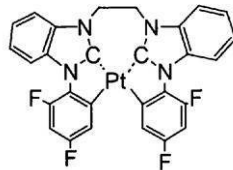
化合物(163)



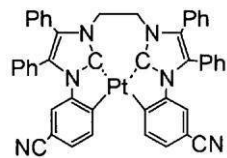
化合物(168)



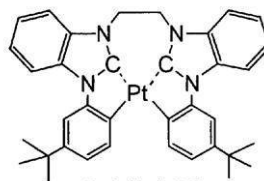
化合物(173)



化合物(164)



化合物(169)



化合物(174)

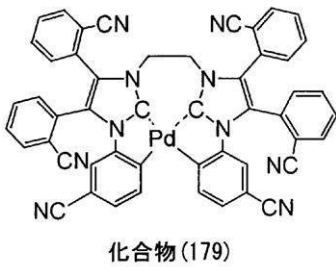
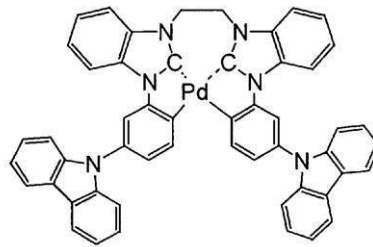
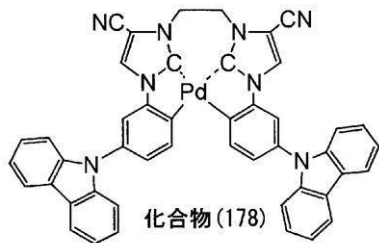
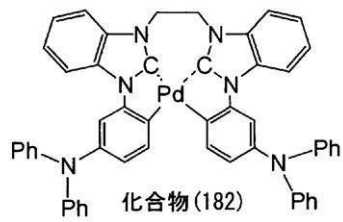
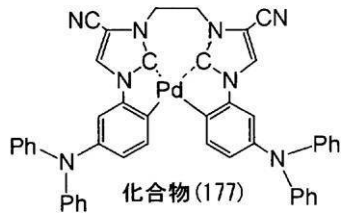
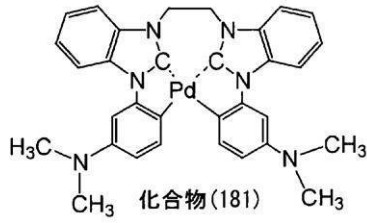
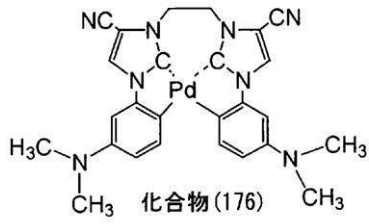
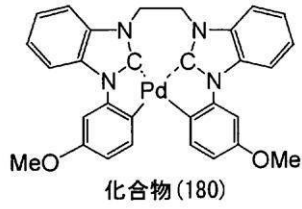
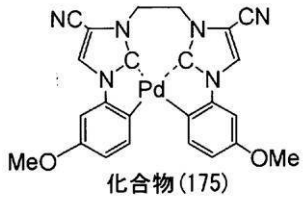
【 0 4 6 9 】

10

20

30

【化 1 0 0】



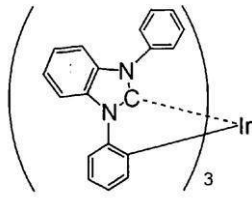
【 0 4 7 0】

10

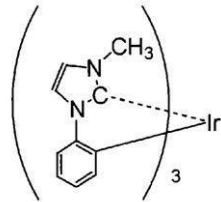
20

30

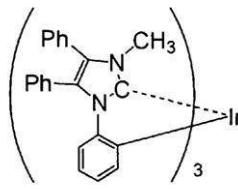
【化 1 0 1】



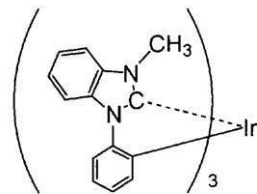
化合物(184)



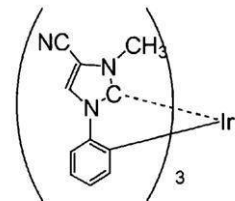
化合物(188)



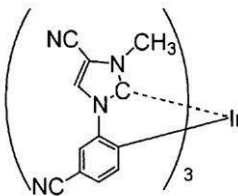
化合物(192)



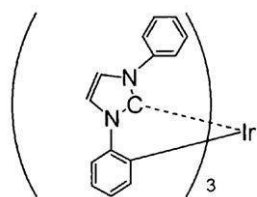
化合物(185)



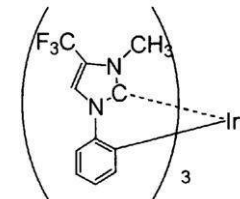
化合物(189)



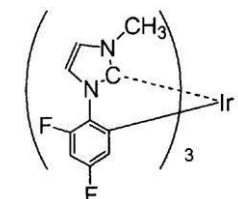
化合物(193)



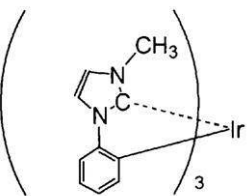
化合物(186)



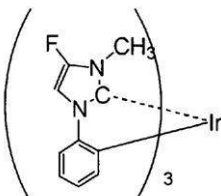
化合物(190)



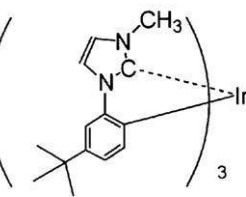
化合物(194)



化合物(187)



化合物(191)



化合物(195)

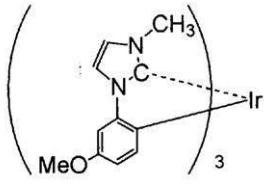
【 0 4 7 1】

10

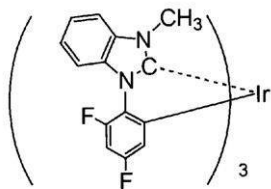
20

30

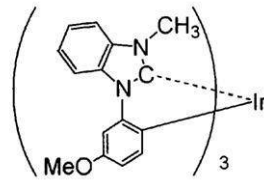
【化 1 0 2】



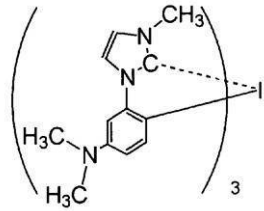
化合物 (196)



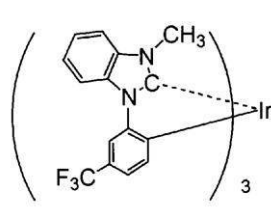
化合物 (200)



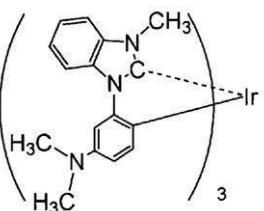
化合物 (204)



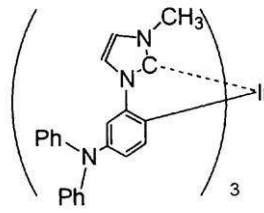
化合物 (197)



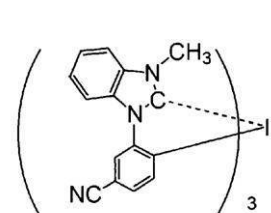
化合物 (201)



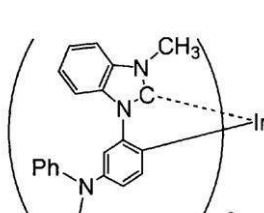
化合物 (205)



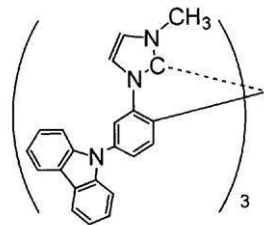
化合物 (198)



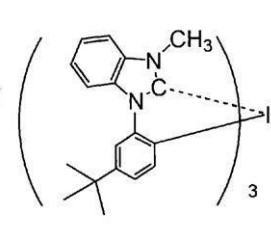
化合物 (202)



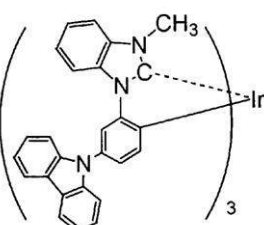
化合物 (206)



化合物 (199)



化合物 (203)



化合物 (207)

【 0 4 7 2 】

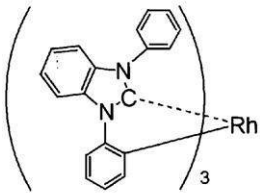
10

20

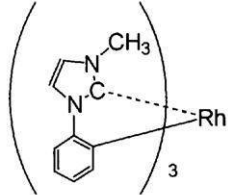
30



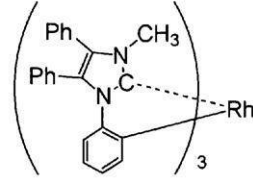
【化 1 0 3】



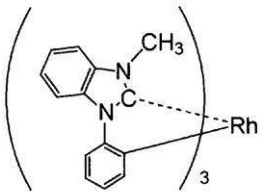
化合物(208)



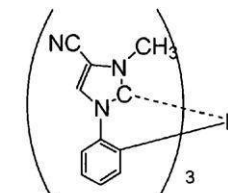
化合物(212)



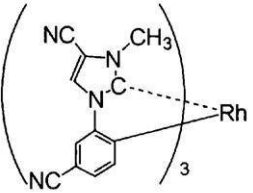
化合物(216)



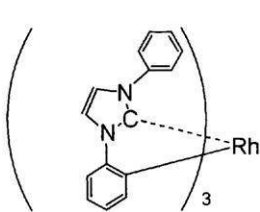
化合物(209)



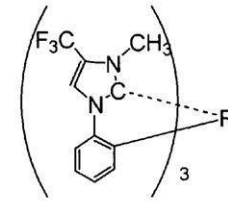
化合物(213)



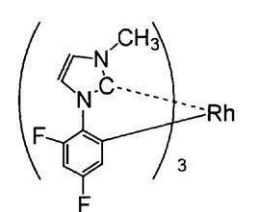
化合物(217)



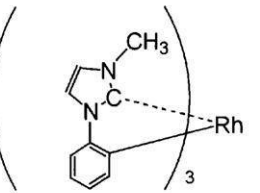
化合物(210)



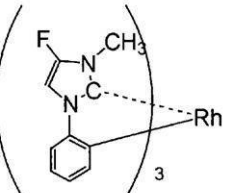
化合物(214)



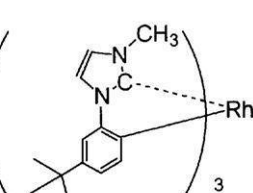
化合物(218)



化合物(211)



化合物(215)



化合物(219)

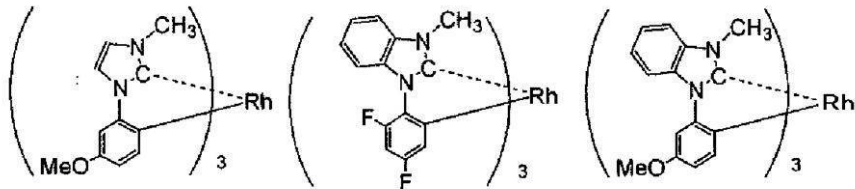
【 0 4 7 3】

10

20

30

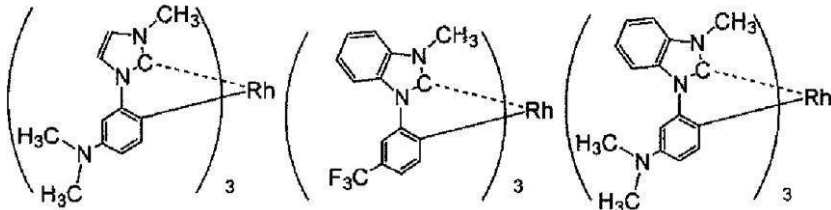
【化 1 0 4】



化合物 (220)

化合物 (224)

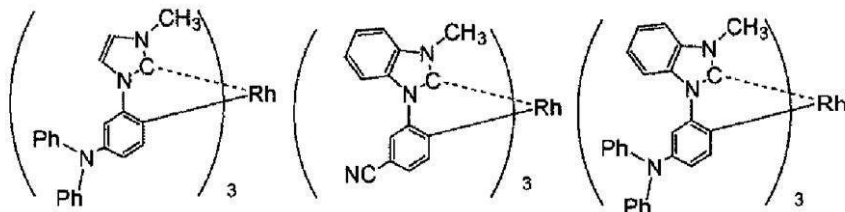
化合物 (228)



化合物 (221)

化合物 (225)

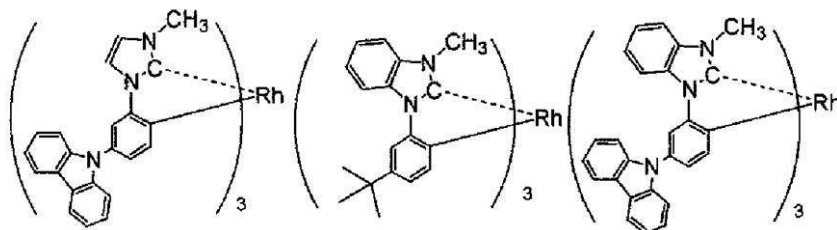
化合物 (229)



化合物 (222)

化合物 (226)

化合物 (230)



化合物 (223)

化合物 (227)

化合物 (231)

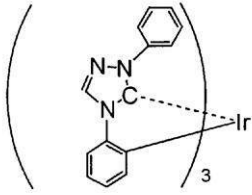
【 0 4 7 4】

10

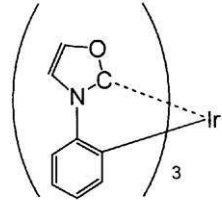
20

30

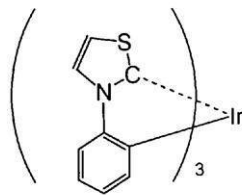
## 【化 1 0 5】



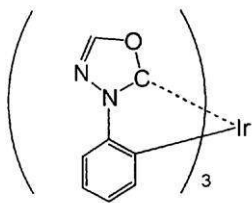
化合物 (232)



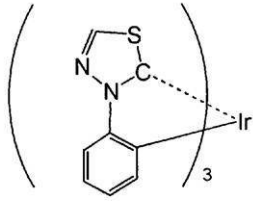
化合物 (236)



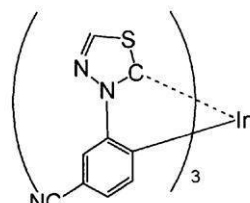
化合物 (240)



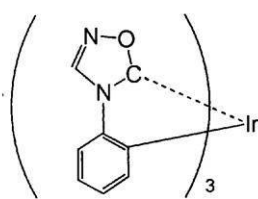
化合物 (233)



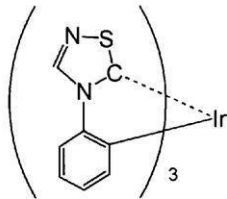
化合物 (237)



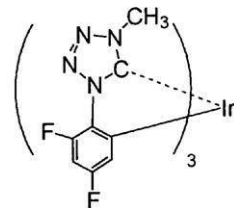
化合物 (241)



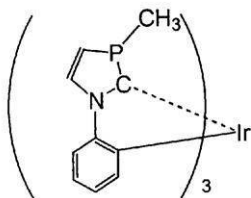
化合物 (234)



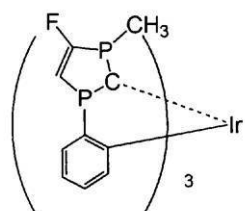
化合物 (238)



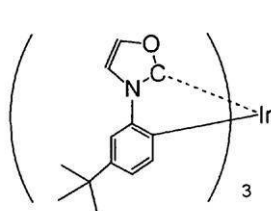
化合物 (242)



化合物 (235)



化合物 (239)



化合物 (243)

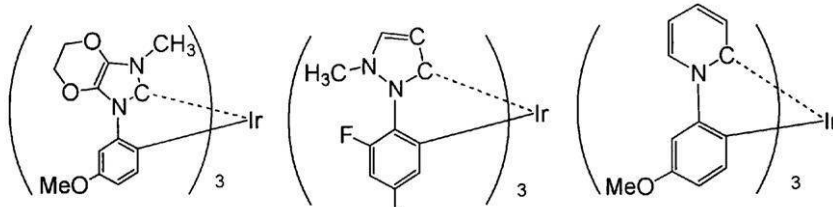
## 【 0 4 7 5】

10

20

30

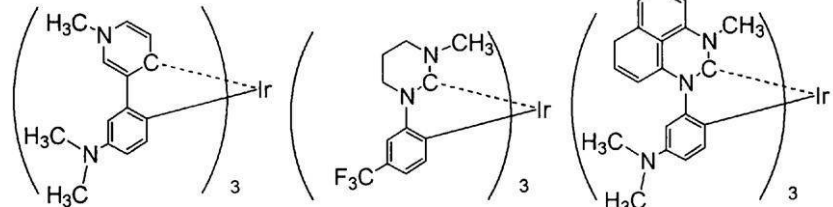
【化 1 0 6】



化合物 (244)

化合物 (248)

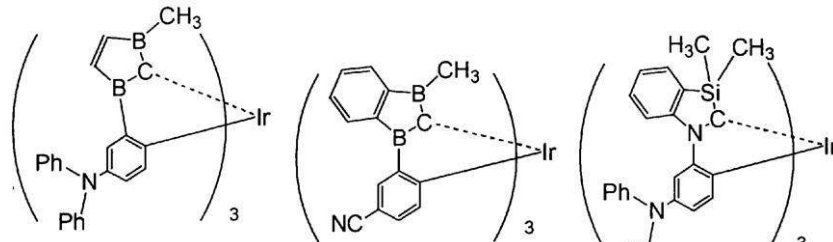
化合物 (252)



化合物 (245)

化合物 (249)

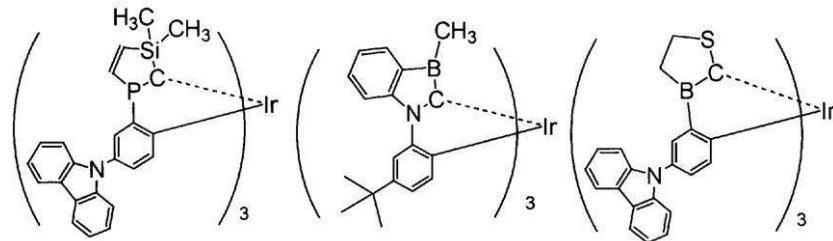
化合物 (253)



化合物 (246)

化合物 (250)

化合物 (254)



化合物 (247)

化合物 (251)

化合物 (255)

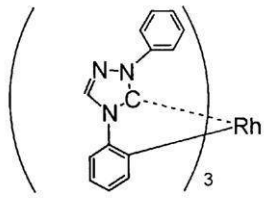
【 0 4 7 6】

10

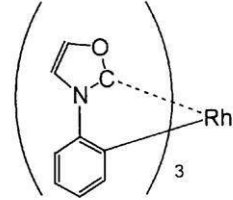
20

30

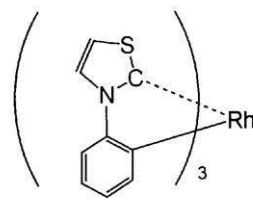
## 【化 1 0 7】



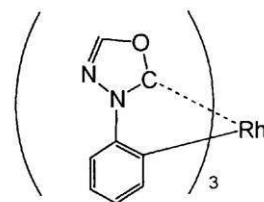
化合物 (256)



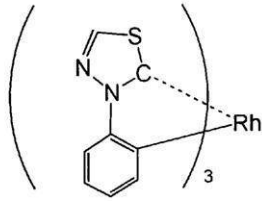
化合物 (260)



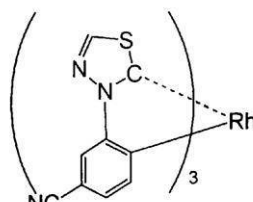
化合物 (264)



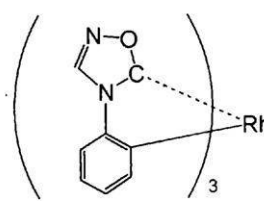
化合物 (257)



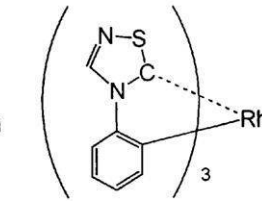
化合物 (261)



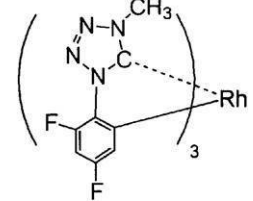
化合物 (265)



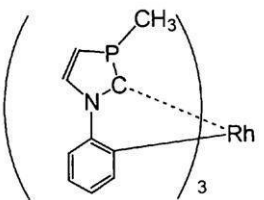
化合物 (258)



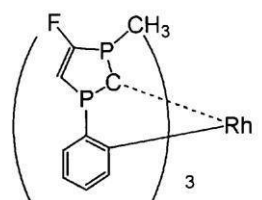
化合物 (262)



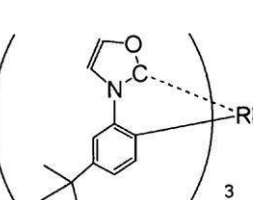
化合物 (266)



化合物 (258)



化合物 (263)



化合物 (267)

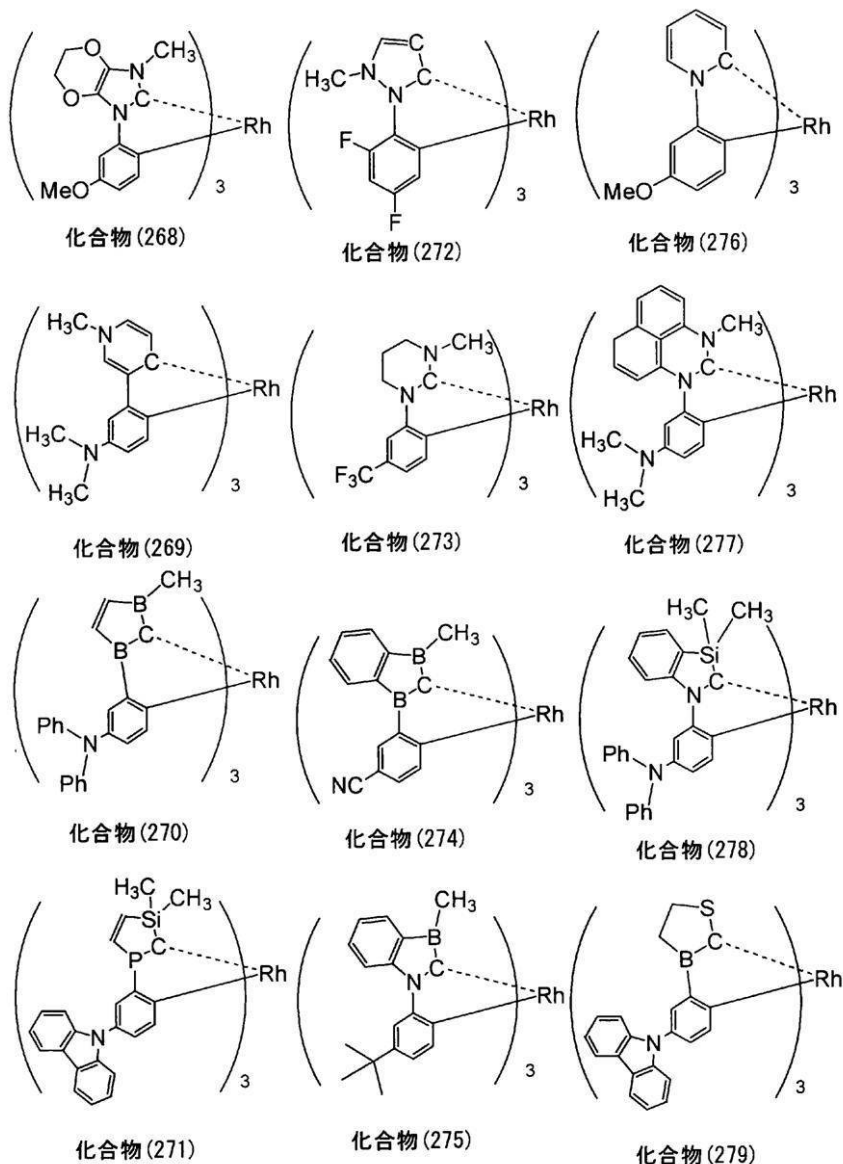
## 【 0 4 7 7 】

10

20

30

## 【化108】



10

20

30

## 【0478】

本発明で用いられる一般式 (C1) ~ (C5) で表される化合物は種々の手法で合成することができる。例えば配位子又はその解離体と遷移金属化合物とを室温以下又は加熱しながら混合して得ることができる。加熱する場合、通常の加熱以外にマイクロウェーブで過熱する手法も有効である。必要に応じて、溶媒 (ハロゲン系溶媒、アルコール系溶媒、エーテル系溶媒、水等) や、塩基 (無機塩基であっても有機塩基であってもよく、例えばナトリウムメトキシド、*t*-ブトキシカリウム、トリエチルアミン、炭酸カリウム等) を用いても良い。

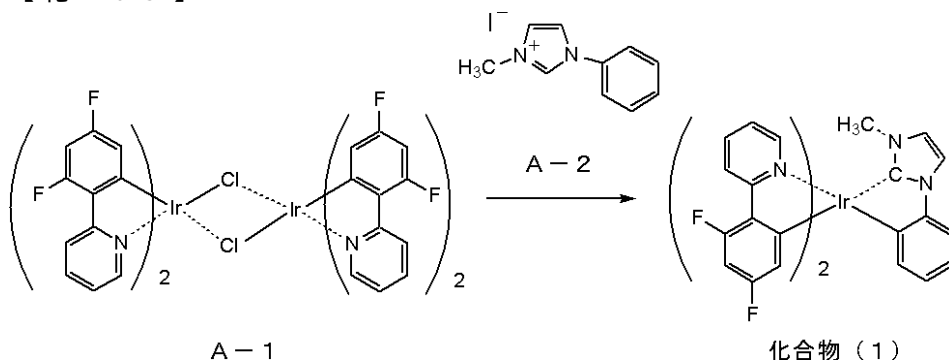
40

## 【0479】

例えば、化合物 (1) の合成は次の方法で行うことができる。イリジウムの塩素架橋錯体 A-1 は、文献 1 (J. Am. Chem. Soc. 1984, 106, 6647) 等に記載の方法で合成することができる。この錯体 A-1 とカルベン配位子の前駆体であるイミダゾリウム塩 A-2 とを文献 2 (Inorg. Chem. 2004, 43, 6896) 等に記載されている反応条件を用いて、錯体化させることにより、化合物 (1) を合成することができる。

## 【0480】

## 【化109】



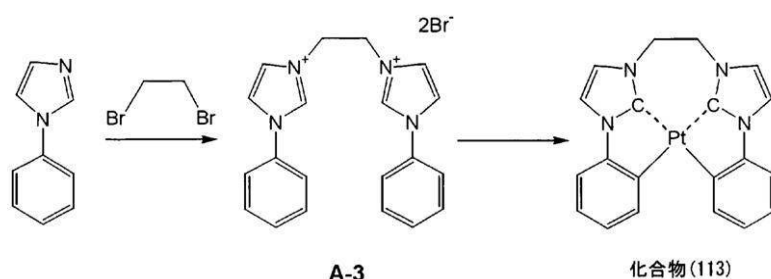
10

## 【0481】

4座型白金錯体である化合物(113)の合成は、次の方法で行うことができる。4座型カルベン配位子の前駆体であるイミダゾリウム塩A-3は、文献3(Tetrahedron, 2004, 60, 5807)に記載の方法等で合成することができる。このイミダゾリウム塩A-3と白金塩とを文献4(Coordination Chemistry Reviews, 2004, 248, 2247)等に記載のされている反応条件を用いて錯体化させることにより、化合物(113)を合成することができる。

## 【0482】

## 【化110】



20

## 【0483】

また本発明に用いられるカルベン化合物は、文献5(Angew. Chem. Int. Ed. 2002, 41, 1290)、文献6(「金属錯体化学」、廣川書店、萩野博、松林玄悦、山本芳久共著、1990年発行)に記載されている方法等を用いても合成することができる。

30

## 【0484】

本発明に用いられるカルベン化合物を含有する層は、蒸着法やスパッタ法等の乾式製膜法、転写法、印刷法、塗布法、インクジェット法、およびスプレー法等いずれによっても好適に形成することができる。

## 【0485】

## 4. 正孔注入層、正孔輸送層

正孔注入層、正孔輸送層は、陽極又は陽極側から正孔を受け取り陰極側に輸送する機能を有する層である。これらの層に用いる正孔注入材料、正孔輸送性材料は、低分子化合物であってても高分子化合物であっててもよい。

40

具体的には、ピロール誘導体、カルバゾール誘導体、アザカルバゾール誘導体、インドール誘導体、アザインドール誘導体、イミダゾール誘導体、ポリアリーラルカン誘導体、ピラゾリン誘導体、ピラズロン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、アリーラルアミン誘導体、アミノ置換カルコン誘導体、スチリルアントラセン誘導体、フルオレノン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、シラザン誘導体、芳香族第三級アミン化合物、スチリルアミン化合物、芳香族ジメチリデン系化合物、フタロシアニン系化合物、ポルフィリン系化合物、チオフェン誘導体、有機シラン誘導体、カーボン、等を含有する層であることが好ましい。

## 【0486】

50

本発明の有機EL素子の正孔注入層あるいは正孔輸送層には、電子受容性ドーパントを含有させることができる。正孔注入層、あるいは正孔輸送層に導入する電子受容性ドーパントとしては、電子受容性で有機化合物を酸化する性質を有すれば、無機化合物でも有機化合物でも使用できる。

【0487】

具体的には、無機化合物は塩化第二鉄や塩化アルミニウム、塩化ガリウム、塩化インジウム、五塩化アンチモンなどのハロゲン化金属、五酸化バナジウム、および三酸化モリブデンなどの金属酸化物などが挙げられる。

【0488】

有機化合物の場合は、置換基としてニトロ基、ハロゲン、シアノ基、トリフルオロメチル基などを有する化合物、キノン系化合物、酸無水物系化合物、フラレーンなどを好適に用いることができる。

この他にも、特開平6-212153、特開平11-111463、特開平11-251067、特開2000-196140、特開2000-286054、特開2000-315580、特開2001-102175、特開2001-160493、特開2002-252085、特開2002-56985、特開2003-157981、特開2003-217862、特開2003-229278、特開2004-342614、特開2005-72012、特開2005-166637、特開2005-209643等に記載の化合物を好適に用いることができる。

【0489】

このうちヘキサシアノブタジエン、ヘキサシアノベンゼン、テトラシアノエチレン、テトラシアノキノジメタン、テトラフルオロテトラシアノキノジメタン、p-フルオラニル、p-クロラニル、p-プロマニル、p-ベンゾキノ、2,6-ジクロロベンゾキノ、2,5-ジクロロベンゾキノ、1,2,4,5-テトラシアノベンゼン、1,4-ジシアノテトラフルオロベンゼン、2,3-ジクロロ-5,6-ジシアノベンゾキノ、p-ジニトロベンゼン、m-ジニトロベンゼン、o-ジニトロベンゼン、1,4-ナフトキノ、2,3-ジクロロナフトキノ、1,3-ジニトロナフタレン、1,5-ジニトロナフタレン、9,10-アントラキノ、1,3,6,8-テトラニトロカルバゾール、2,4,7-トリニトロ-9-フルオレノン、2,3,5,6-テトラシアノピリジン、またはフラレーンC60が好ましく、ヘキサシアノブタジエン、ヘキサシアノベンゼン、テトラシアノエチレン、テトラシアノキノジメタン、テトラフルオロテトラシアノキノジメタン、p-フルオラニル、p-クロラニル、p-プロマニル、2,6-ジクロロベンゾキノ、2,5-ジクロロベンゾキノ、2,3-ジクロロナフトキノ、1,2,4,5-テトラシアノベンゼン、2,3-ジクロロ-5,6-ジシアノベンゾキノ、または2,3,5,6-テトラシアノピリジンがより好ましく、テトラフルオロテトラシアノキノジメタンが特に好ましい。

【0490】

これらの電子受容性ドーパントは、単独で用いてもよいし、2種以上を用いてもよい。

電子受容性ドーパントの使用量は、材料の種類によって異なるが、正孔輸送層材料に対して0.01質量%~50質量%であることが好ましく、0.05質量%~20質量%であることが更に好ましく、0.1質量%~10質量%であることが特に好ましい。

【0491】

正孔注入層、正孔輸送層の厚さは、駆動電圧を下げるという観点から、各々500nm以下であることが好ましい。

正孔輸送層の厚さとしては、1nm~500nmであるのが好ましく、5nm~200nmであるのがより好ましく、10nm~100nmであるのが更に好ましい。また、正孔注入層の厚さとしては、0.1nm~500nmであるのが好ましく、0.5nm~300nmであるのがより好ましく、1nm~200nmであるのが更に好ましい。

正孔注入層、正孔輸送層は、上述した材料の1種又は2種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

10

20

30

40

50



## 【0492】

## 5. 電子注入層、電子輸送層

電子注入層、電子輸送層は、陰極又は陰極側から電子を受け取り陽極側に輸送する機能を有する層である。これらの層に用いる電子注入材料、電子輸送性材料は低分子化合物であっても高分子化合物であってもよい。

具体的には、ピリジン誘導体、キノリン誘導体、ピリミジン誘導体、ピラジン誘導体、フタラジン誘導体、フェナントロリン誘導体、トリアジン誘導体、トリアゾール誘導体、オキサゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、フルオレノン誘導体、アントラキノジメタン誘導体、アントロン誘導体、ジフェニルキノン誘導体、チオピランジオキシド誘導体、カルボジイミド誘導体、フルオレニリデンメタン誘導体、ジスチ  
10  
リルピラジン誘導体、ナフタレン、ペリレン等の芳香環テトラカルボン酸無水物、フタロシアニン誘導体、8-キノリノール誘導体の金属錯体やメタルフタロシアニン、ベンゾオキサゾールやベンゾチアゾールを配位子とする金属錯体に代表される各種金属錯体、シロールに代表される有機シラン誘導体、等を含む層であることが好ましい。

## 【0493】

本発明の有機EL素子の電子注入層あるいは電子輸送層には、電子供与性ドーパントを含むことができる。電子注入層、あるいは電子輸送層に導入される電子供与性ドーパントとしては、電子供与性で有機化合物を還元する性質を有していればよく、Liなどのアルカリ金属、Mgなどのアルカリ土類金属、希土類金属を含む遷移金属や還元性有機化合物などが好適に用いられる。金属としては、特に仕事関数が4.2 eV以下の金属が  
20  
好適に使用でき、具体的には、Li、Na、K、Be、Mg、Ca、Sr、Ba、Y、Cs、La、Sm、Gd、およびYbなどが挙げられる。また、還元性有機化合物としては、例えば、含窒素化合物、含硫黄化合物、含リン化合物などが挙げられる。

この他にも、特開平6-212153、特開2000-196140、特開2003-68468、特開2003-229278、特開2004-342614等に記載の材料を用いることができる。

## 【0494】

これらの電子供与性ドーパントは、単独で用いてもよいし、2種以上を用いてもよい。

電子供与性ドーパントの使用量は、材料の種類によって異なるが、電子輸送層材料に対して0.1質量%~99質量%であることが好ましく、1.0質量%~80質量%である  
30  
ことが更に好ましく、2.0質量%~70質量%であることが特に好ましい。

## 【0495】

電子注入層、電子輸送層の厚さは、駆動電圧を下げるという観点から、各々500nm以下であることが好ましい。

電子輸送層の厚さとしては、1nm~500nmであるのが好ましく、5nm~200nmであるのがより好ましく、10nm~100nmであるのが更に好ましい。また、電子注入層の厚さとしては、0.1nm~200nmであるのが好ましく、0.2nm~100nmであるのがより好ましく、0.5nm~50nmであるのが更に好ましい。

電子注入層、電子輸送層は、上述した材料の1種又は2種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。  
40

## 【0496】

## 6. 正孔ブロック層

正孔ブロック層は、陽極側から発光層に輸送された正孔が、陰極側に通りぬけることを防止する機能を有する層である。本発明において、発光層と陰極側で隣接する有機化合物層として、正孔ブロック層を設けることができる。

正孔ブロック層を構成する化合物の例としては、BALq等のアルミニウム錯体、トリアゾール誘導体、BCP等のフェナントロリン誘導体、等が挙げられる。

正孔ブロック層の厚さとしては、1nm~500nmであるのが好ましく、5nm~200nmであるのがより好ましく、10nm~100nmであるのが更に好ましい。

正孔ブロック層は、上述した材料の1種又は2種以上からなる単層構造であってもよい  
50

し、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

【0497】

#### 7. 基板

本発明で使用する基板としては、有機化合物層から発せられる光を散乱又は減衰させない基板であることが好ましい。その具体例としては、ジルコニア安定化イットリウム（YSZ）、ガラス等の無機材料、ポリエチレンテレフタレート、ポリブチレンフタレート、ポリエチレンナフタレート等のポリエステル、ポリスチレン、ポリカーボネート、ポリエーテルスルホン、ポリアリレート、ポリイミド、ポリシクロオレフィン、ノルボルネン樹脂、およびポリ（クロロトリフルオロエチレン）等の有機材料が挙げられる。

例えば、基板としてガラスを用いる場合、その材質については、ガラスからの溶出イオンを少なくするため、無アルカリガラスを用いることが好ましい。また、ソーダライムガラスを用いる場合には、シリカなどのバリアコートを施したものを使用することが好ましい。有機材料の場合には、耐熱性、寸法安定性、耐溶剤性、電気絶縁性、及び加工性に優れていることが好ましい。

【0498】

基板の形状、構造、大きさ等については、特に制限はなく、発光素子の用途、目的等に応じて適宜選択することができる。一般的には、基板の形状としては、板状であることが好ましい。基板の構造としては、単層構造であってもよいし、積層構造であってもよく、また、単一部材で形成されていてもよいし、2以上の部材で形成されていてもよい。

【0499】

基板は、無色透明であっても、有色透明であってもよいが、有機発光層から発せられる光を散乱又は減衰等させることがない点で、無色透明であることが好ましい。

【0500】

基板には、その表面又は裏面に透湿防止層（ガスバリア層）を設けることができる。

透湿防止層（ガスバリア層）の材料としては、窒化珪素、酸化珪素などの無機物が好適に用いられる。透湿防止層（ガスバリア層）は、例えば、高周波スパッタリング法などにより形成することができる。

熱可塑性基板を用いる場合には、更に必要に応じて、ハードコート層、アンダーコート層などを設けてもよい。

【0501】

#### 8. 電極

（陽極）

陽極は、通常、有機化合物層に正孔を供給する電極としての機能を有していればよく、その形状、構造、大きさ等については特に制限はなく、発光素子の用途、目的に応じて、公知の電極材料の中から適宜選択することができる。前述のごとく、陽極は、通常透明陽極として設けられる。

【0502】

陽極の材料としては、例えば、金属、合金、金属酸化物、導電性化合物、又はこれらの混合物が好適に挙げられ、仕事関数が4.0 eV以上の材料が好ましい。陽極材料の具体例としては、アンチモンやフッ素等をドーブした酸化錫（ATO、FTO）、酸化錫、酸化亜鉛、酸化インジウム、酸化インジウム錫（ITO）、酸化亜鉛インジウム（IZO）等の導電性金属酸化物、金、銀、クロム、ニッケル等の金属、さらにこれらの金属と導電性金属酸化物との混合物又は積層物、ヨウ化銅、硫化銅などの無機導電性物質、ポリアニリン、ポリチオフェン、ポリピロールなどの有機導電性材料、及びこれらとITOとの積層物などが挙げられる。この中で好ましいのは、導電性金属酸化物であり、特に、生産性、高導電性、透明性等の点からはITOが好ましい。

【0503】

陽極は、例えば、印刷方式、コーティング方式等の湿式方式、真空蒸着法、スパッタリング法、イオンプレーティング法等の物理的方式、CVD、プラズマCVD法等の化学的方式などの中から、陽極を構成する材料との適性を考慮して適宜選択した方法に従って、

10

20

30

40

50

前記基板上に形成することができる。例えば、陽極の材料として、ITOを選択する場合には、陽極の形成は、直流又は高周波スパッタ法、真空蒸着法、イオンプレーティング法等に従って行うことができる。

#### 【0504】

本発明の有機電界発光素子において、陽極の形成位置としては特に制限はなく、発光素子の用途、目的に応じて適宜選択することができる。が、前記基板上に形成されるのが好ましい。この場合、陽極は、基板における一方の表面の全部に形成されていてもよく、その一部に形成されていてもよい。

#### 【0505】

なお、陽極を形成する際のパターンングとしては、フォトリソグラフィなどによる化学的エッチングによって行ってもよいし、レーザーなどによる物理的エッチングによって行ってもよく、また、マスクを重ねて真空蒸着やスパッタ等をして行ってもよいし、リフトオフ法や印刷法によって行ってもよい。

10

#### 【0506】

陽極の厚みとしては、陽極を構成する材料により適宜選択することができ、一概に規定することはできないが、通常、10nm～50μm程度であり、50nm～20μmが好ましい。

#### 【0507】

陽極の抵抗値としては、 $10^3$  / 以下が好ましく、 $10^2$  / 以下がより好ましい。陽極が透明である場合は、無色透明であっても、有色透明であってもよい。透明陽極側から発光を取り出すためには、その透過率としては、60%以上が好ましく、70%以上がより好ましい。

20

#### 【0508】

なお、透明陽極については、沢田豊監修「透明電極膜の新展開」シーエムシー刊(1999)に詳述があり、ここに記載される事項を本発明に適用することができる。耐熱性の低いプラスチック基材を用いる場合は、ITO又はIZOを使用し、150以下の低温で成膜した透明陽極が好ましい。

#### 【0509】

(陰極)

陰極は、通常、有機化合物層に電子を注入する電極としての機能を有していればよく、その形状、構造、大きさ等については特に制限はなく、発光素子の用途、目的に応じて、公知の電極材料の中から適宜選択することができる。

30

#### 【0510】

陰極を構成する材料としては、例えば、金属、合金、金属酸化物、電気伝導性化合物、これらの混合物などが挙げられ、仕事関数が4.5eV以下のものが好ましい。具体例としてはアルカリ金属(たとえば、Li、Na、K、Cs等)、アルカリ土類金属(たとえばMg、Ca等)、金、銀、鉛、アルミニウム、ナトリウム-カリウム合金、リチウム-アルミニウム合金、マグネシウム-銀合金、インジウム、イッテルビウム等の希土類金属、などが挙げられる。これらは、1種単独で使用してもよいが、安定性と電子注入性とを両立させる観点からは、2種以上を好適に併用することができる。

40

#### 【0511】

これらの中でも、陰極を構成する材料としては、電子注入性の点で、アルカリ金属やアルカリ土類金属が好ましく、保存安定性に優れる点で、アルミニウムを主体とする材料が好ましい。

アルミニウムを主体とする材料とは、アルミニウム単独、アルミニウムと0.01質量%～10質量%のアルカリ金属又はアルカリ土類金属との合金若しくはこれらの混合物(例えば、リチウム-アルミニウム合金、マグネシウム-アルミニウム合金など)をいう。

#### 【0512】

なお、陰極の材料については、特開平2-15595号公報、特開平5-121172号公報に詳述されており、これらの広報に記載の材料は、本発明においても適用すること

50

ができる。

【0513】

陰極の形成方法については、特に制限はなく、公知の方法に従って行うことができる。例えば、印刷方式、コーティング方式等の湿式方式、真空蒸着法、スパッタリング法、イオンプレーティング法等の物理的方式、CVD、プラズマCVD法等の化学的方式などの中から、前記した陰極を構成する材料との適性を考慮して適宜選択した方法に従って形成することができる。例えば、陰極の材料として、金属等を選択する場合には、その1種又は2種以上を同時又は順次にスパッタ法等に従って行うことができる。

【0514】

陰極を形成するに際してのパターニングは、フォトリソグラフィなどによる化学的エッチングによって行ってもよいし、レーザーなどによる物理的エッチングによって行ってもよく、マスクを重ねて真空蒸着やスパッタ等をして行ってもよいし、リフトオフ法や印刷法によって行ってもよい。

10

【0515】

本発明において、陰極形成位置は特に制限はなく、有機化合物層上の全部に形成されていてもよく、その一部に形成されていてもよい。

また、陰極と前記有機化合物層との間に、アルカリ金属又はアルカリ土類金属のフッ化物、酸化物等による誘電体層を0.1nm~5nmの厚みで挿入してもよい。この誘電体層は、一種の電子注入層と見ることにもできる。誘電体層は、例えば、真空蒸着法、スパッタリング法、イオンプレーティング法等により形成することができる。

20

【0516】

陰極の厚みは、陰極を構成する材料により適宜選択することができ、一概に規定することはできないが、通常10nm~5μm程度であり、50nm~1μmが好ましい。

また、陰極は、透明であってもよいし、不透明であってもよい。なお、透明な陰極は、陰極の材料を1nm~10nmの厚さに薄く成膜し、更にITOやIZO等の透明な導電性材料を積層することにより形成することができる。

【0517】

9. 保護層

本発明において、有機EL素子全体は、保護層によって保護されていてもよい。

保護層に含まれる材料としては、水分や酸素等の素子劣化を促進するものが素子内に入ることを抑止する機能を有しているものであればよい。

30

その具体例としては、In、Sn、Pb、Au、Cu、Ag、Al、Ti、Ni等の金属、MgO、SiO、SiO<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、GeO、NiO、CaO、BaO、Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、TiO<sub>2</sub>等の金属酸化物、SiN<sub>x</sub>、SiN<sub>x</sub>O<sub>y</sub>等の金属窒化物、MgF<sub>2</sub>、LiF、AlF<sub>3</sub>、CaF<sub>2</sub>等の金属フッ化物、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリメチルメタクリレート、ポリイミド、ポリウレア、ポリテトラフルオロエチレン、ポリクロロトリフルオロエチレン、ポリジクロロジフルオロエチレン、クロロトリフルオロエチレンとジクロロジフルオロエチレンとの共重合体、テトラフルオロエチレンと少なくとも1種のコモノマーを含むモノマー混合物を共重合させて得られる共重合体、共重合主鎖に環状構造を有する含フッ素共重合体、吸水率1%以上の吸水性物質、吸水率0.1%以下の防湿性物質等が挙げられる。

40

【0518】

保護層の形成方法については、特に限定はなく、例えば、真空蒸着法、スパッタリング法、反応性スパッタリング法、MBE(分子線エピタキシ)法、クラスターイオンビーム法、イオンプレーティング法、プラズマ重合法(高周波励起イオンプレーティング法)、プラズマCVD法、レーザーCVD法、熱CVD法、ガスソースCVD法、コーティング法、印刷法、転写法を適用できる。

【0519】

10. 封止

さらに、本発明の有機電界発光素子は、封止容器を用いて素子全体を封止してもよい。

50

また、封止容器と発光素子の間の空間に水分吸収剤又は不活性液体を封入してもよい。水分吸収剤としては、特に限定されることはないが、例えば、酸化バリウム、酸化ナトリウム、酸化カリウム、酸化カルシウム、硫酸ナトリウム、硫酸カルシウム、硫酸マグネシウム、五酸化燐、塩化カルシウム、塩化マグネシウム、塩化銅、フッ化セシウム、フッ化ニオブ、臭化カルシウム、臭化バナジウム、モレキュラーシーブ、ゼオライト、酸化マグネシウム等を挙げることができる。不活性液体としては、特に限定されることはないが、例えば、パラフィン類、流動パラフィン類、パーフルオロアルカンやパーフルオロアミン、パーフルオロエーテル等のフッ素系溶剤、塩素系溶剤、シリコンオイル類が挙げられる。

## 【0520】

10

### 11. 駆動

本発明の有機電界発光素子は、陽極と陰極との間に直流（必要に応じて交流成分を含んでもよい）電圧（通常2ボルト～15ボルト）、又は直流電流を印加することにより、発光を得ることができる。

本発明の有機電界発光素子の駆動方法については、特開平2-148687号、同6-301355号、同5-29080号、同7-134558号、同8-234685号、同8-241047号の各公報、特許第2784615号、米国特許5828429号、同6023308号の各明細書、等に記載の駆動方法を適用することができる。

## 【0521】

20

### 12. 用途

本発明の有機EL素子の用途は特に限定されないが、携帯電話ディスプレイ、パーソナルデジタルアシスタント(PDA)、コンピュータディスプレイ、自動車の情報ディスプレイ、TVモニター、あるいは一般照明等広い分野に適用できる。

## 【実施例】

### 【0522】

以下に、本発明の有機EL素子の実施例について説明するが、本発明はこれら実施例により限定されるものではない。

### 【0523】

(Ip値、Ea値、Eg値の測定)

始めに、実施例に用いた発光材料およびホスト材料のIp値、Ea値、Eg値の測定方法および測定結果を説明する。

30

Ip値の測定方法：真空蒸着法により、ガラス基板上に各測定材料の100nmの厚みに蒸着したサンプル薄膜を作製した。得られた薄膜を大気中光電子分光装置AC-2（理研計器製）を用いて、光量20nWでIp値を測定した。

Ea値の算出方法：真空蒸着により、石英基板上に各測定材料の100nmの厚みに蒸着したサンプル薄膜を作製し、分光光度計U3310（日立（株）製）を用いて180nmから700nmまでの分光吸収スペクトルを測定した。最も長波長側の吸収端からエネルギーギャップ値(Eg(eV))を算出した。得られたEg値とIp値から下記式(1)によりEa値を算出した。

$$Ea(eV) = Ip(eV) - Eg(eV) \quad \text{式(1)}$$

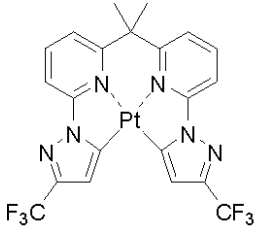
40

### 【0524】

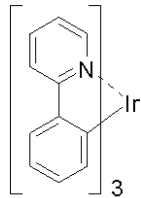
実施例に用いた化合物の構造を下記に示す。

### 【0525】

【化 1 1 1】



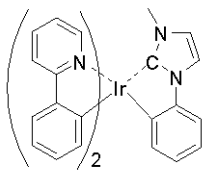
Pt-1



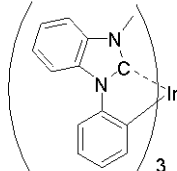
Ir(ppy)<sub>3</sub>

【 0 5 2 6】

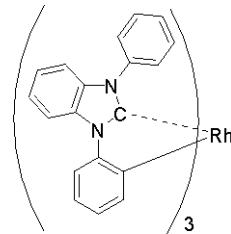
【化 1 1 2】



カルベン化合物1



カルベン化合物2



カルベン化合物3

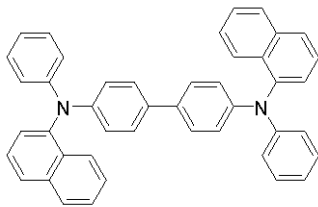
10

20

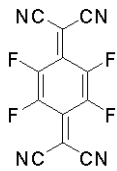
30

40

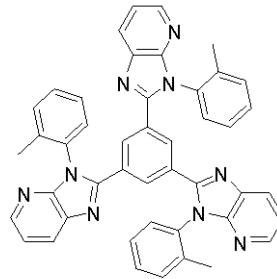
50



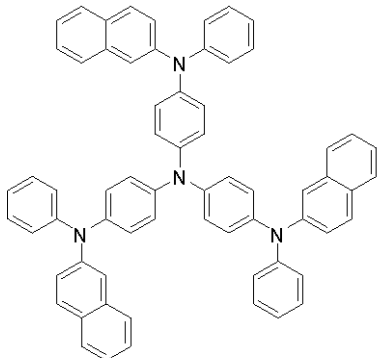
α-NPD



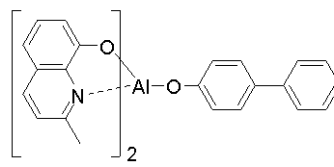
F4-TCNQ



ETH-1



2-TNATA



BAlq

【 0 5 2 7】

実施例 1

1. 有機 EL 素子の作製

(比較の有機 EL 素子 1 A の作製)

0.5 mm 厚み、2.5 cm 角の酸化インジウム錫 (ITO と略記) を蒸着したガラス基板 (ジオマテック (株) 製、表面抵抗 10 / ) を洗浄容器に入れ、2-プロパノール中で超音波洗浄した後、30 分間 UV-オゾン処理を行った。この透明陽極上に真空蒸着法にて以下の層を蒸着した。本発明の実施例における蒸着速度は特に断りのない場合は 0.2 nm / 秒である。蒸着速度は水晶振動子を用いて測定した。以下に記載の膜厚も水晶振動子を用いて測定したものである。

## 【0528】

正孔注入層：4, 4', 4'' - トリス(2 - ナフチルフェニルアミノ)トリフェニルアミン(2 - TNATAと略記する)および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(F4 - TCNQと略記する)を2 - TNATAに対してF4 - TCNQが1.0質量%となるように共蒸着した。厚み160nmであった。

正孔輸送層：N, N' - ジナフチル - N, N' - ジフェニル - [1, 1' - ビフェニル] - 4, 4' - ジアミン( - NPDと略記する)、厚み10nm。

## 【0529】

発光層：1, 3 - bis(carbazol-9-yl)benzene(mCPと略称)と電子輸送性発光材料Pt-1を共蒸着した。mCPに対してPt-1の混合比率は発光層全体に均一に13質量%となるように調整した。発光層の膜厚は60nmであった。Pt-1のEa値は3.0eVであり、mCPのEa値が2.5eVであることから、この発光層における電子輸送性材料はPt-1である。

10

## 【0530】

続いて、発光層の上に、下記の電子輸送層、および電子注入層を設けた。

電子輸送層：bis-(2-methyl-8-quinolate)-4-phenyl-phenolate aluminum(BAlqと略記する)、厚み40nm。

電子注入層：LiF、厚み1nm。

## 【0531】

さらに、シャドウマスクによりパターンニングして陰極として厚み100nmのAlを設けた。

各層はいずれも抵抗加熱真空蒸着により設けた。

20

## 【0532】

作製した積層体を、窒素ガスで置換したグロー-ボックス内に入れ、ステンレス製の封止缶および紫外線硬化型の接着剤(XNR5516HV、長瀬チバ製)を用いて封止した。

## 【0533】

(比較の有機EL素子1Bの作製)

比較の有機EL素子1Aにおいて、発光層として下記の発光層に変更し、その他は同様にして比較の有機EL素子1Bを作製した。

30

## 【0534】

発光層：mCPと電子輸送性発光材料Pt-1を共蒸着し、これらの共蒸着比を蒸着進行と共に変化させた。蒸着初期の陽極側界面ではPt-1の混合比率が0質量%、蒸着終了段階の陰極側界面ではPt-1の混合比率が26質量%となるように各成分の蒸着速度を調整した。これらの界面の間では連続的に各成分の混合比率を変化させた。発光層の膜厚は60nmであった。陽極側界面付近の領域における各材料の濃度は、Pt-1が1.3質量%、mCPが98.7質量%であり、陰極側界面付近の領域では、Pt-1が24.7質量%、mCPが75.3質量%であった。

40

## 【0535】

(比較の有機EL素子1Cの作製)

比較の有機EL素子1Aにおいて、正孔輸送層の代わりに下記のカルベン化合物(1)を含有する層を用いて、さらに発光層を下記に変更した。その他は比較の有機EL素子1Aと同様にして比較の有機EL素子1Cを作製した。

## 【0536】

カルベン化合物含有層：蒸着によりカルベン化合物(1)の厚み10nmの層を設けた。

発光層：mCPとPt-1を共蒸着した。mCPに対してPt-1の混合比率は発光層全体に均一に13質量%となるように調整した。発光層の膜厚は60nmであった。

## 【0537】

50

(比較の有機EL素子1Dの作製)

比較の有機EL素子1Cにおいて、カルベン化合物含有層として、カルベン化合物(1)の代わりにカルベン化合物(2)を用いて、その他は比較の有機EL素子1Cと同様にして比較の有機EL素子1Dを作製した。

【0538】

(比較の有機EL素子1Eの作製)

比較の有機EL素子1Cにおいて、カルベン化合物含有層として、カルベン化合物(1)の代わりにカルベン化合物(3)を用いて、その他は比較の有機EL素子1Cと同様にして比較の有機EL素子1Eを作製した。

【0539】

10

(本発明の有機EL素子1の作製)

比較の有機EL素子1Aにおいて、正孔輸送層の代わりに下記のカルベン化合物(1)を含有する層を用いて、さらに発光層を下記に変更した。その他は比較の有機EL素子1Aと同様にして本発明の有機EL素子1を作製した。

【0540】

カルベン化合物含有層：蒸着によりカルベン化合物(1)の厚み10nmの層を設けた。

発光層：mCPと電子輸送性発光材料Pt-1を共蒸着し、これらの共蒸着比を蒸着進行と共に変化させた。蒸着初期の陽極側界面ではPt-1の混合比率が0質量%、蒸着終了段階の陰極側界面ではPt-1の混合比率が26質量%となるように各成分の蒸着速度を調整した。これらの界面の間では連続的に各成分の混合比率を変化させた。発光層の膜厚は60nmであった。陽極側界面付近の領域における各材料の濃度は、Pt-1が1.3質量%、mCPが98.7質量%であり、陰極側界面付近の領域では、Pt-1が24.7質量%、mCPが75.3質量%であった。

20

【0541】

(本発明の有機EL素子2の作製)

本発明の有機EL素子1において、カルベン化合物含有層として、カルベン化合物(1)の代わりにカルベン化合物(2)を用いて、その他は本発明の有機EL素子1と同様にして本発明の有機EL素子2を作製した。

【0542】

30

(本発明の有機EL素子3の作製)

本発明の有機EL素子1において、カルベン化合物含有層として、カルベン化合物(1)の代わりにカルベン化合物(3)を用いて、その他は本発明の有機EL素子1と同様にして本発明の有機EL素子3を作製した。

【0543】

2. 性能評価結果

得られた比較有機EL素子および本発明の有機EL素子を同一条件で下記的手段によって外部量子効率および駆動耐久性を測定した。

【0544】

《駆動電圧》

40

輝度360cd/m<sup>2</sup>に達する直流電圧を駆動電圧とした。

【0545】

《外部量子効率の測定方法》

作製した発光素子をKEITHLEY製ソ-スメジャ-ユニット2400型を用いて、直流電圧を発光素子に印加し発光させた。いずれの素子も青色発光を示した。電圧を調整して、輝度360cd/m<sup>2</sup>になるように発光させ、その発光スペクトルと光量をトプコン社製輝度計SR-3を用いて測定し、発光スペクトル、光量と測定時の電流から外部量子効率を計算した。

【0546】

《駆動耐久性率の測定方法》

50



各素子を輝度  $360 \text{ cd/m}^2$  になるように直流電圧を印加し、連続駆動して輝度が  $180 \text{ cd/m}^2$  になるまでの輝度半減時間を測定した。比較の素子 1 A の輝度半減時間を 1 とした時の相対輝度半減時間を駆動耐久性の指標とした。

【0547】

得られた結果を表 1 に示した。

比較の素子 1 C、1 D、および 1 E に対して、それぞれ発光層の電子輸送性発光材料 Pt-1 の濃度を傾斜させた本発明の素子 1、2 および 3 は、いずれも駆動電圧が低下し、外部量子効率が高くなり、かつ輝度半減時間が大幅に長くなった。

一方、カルベン化合物を含有しない比較の素子 1 A または 1 B に対してカルベン化合物を含有する本発明の素子 1、2 および 3 は、駆動電圧が低く、かつ外部発光効率が高い結果を示した。

以上のように、本発明の有機 EL 素子は比較の素子に比べて本発明の有機 EL 素子は、駆動電圧の低下、外部量子効率の向上、かつ駆動耐久性に優れていた。

【0548】

【表 1】

素子No.	駆動電圧(V)	外部量子効率(%)	相対輝度半減時間
比較の素子1A	11.8	6.3	1.0
比較の素子1B	9.8	9.1	2.4
比較の素子1C	10.6	8.2	0.5
比較の素子1D	10.4	7.3	0.6
比較の素子1E	10.1	8.5	0.4
本発明素子1	9.3	10.2	2.4
本発明素子2	9.5	11.2	2.6
本発明素子3	9.0	11.1	2.2

【0549】

実施例 2

1. 有機 EL 素子の作製

(比較の有機 EL 素子 2 A の作製)

実施例 1 の比較の有機 EL 素子 1 A において、発光層を下記に変更し、その他は比較の有機 EL 素子 1 A と同様にして比較の有機 EL 素子 2 A を作製した。

【0550】

発光層：正孔輸送性ホスト材料の 4,4'-di-(N-carbazole)-biphenyl (CBP と略称する) と電子輸送性ホスト材料の ETH-1 と正孔輸送性発光材料の fac-tris(2-phenylpyridinate-N,C2')iridium(III) (Ir(ppy)<sub>3</sub> と略称する) を 3 元共蒸着した。ETH-1 の混合比率は発光層全体に均一に 20 質量% となるように調節した。また、Ir(ppy)<sub>3</sub> の混合比率は発光層全体に均一に 6 質量% となるように調整した。発光層の膜厚は 30 nm であった。CBP の E<sub>a</sub> 値は 2.8 eV であり、ETH-1 の E<sub>a</sub> 値が 3.2 eV であり、Ir(ppy)<sub>3</sub> の E<sub>a</sub> 値が 2.8 eV であることから、この発光層における電子輸送性材料は ETH-1 である。

【0551】

(比較の有機 EL 素子 2 B の作製)

比較の有機 EL 素子 2 A において、発光層を下記に変更し、その他は比較の有機 EL 素子 2 A と同様にして比較の有機 EL 素子 2 B を作製した。

【0552】

発光層：CBP と ETH-1 と Ir(ppy)<sub>3</sub> とを 3 元共蒸着し、これらの共蒸着比を蒸着進行と共に変化させた。蒸着初期の陽極側界面では ETH-1 の混合比率が 0 質量%、蒸着終了段階の陰極側界面では ETH-1 の混合比率が 40 質量% となるように蒸着

速度を調整した。また、蒸着初期の陽極側界面ではIr(ppy)<sub>3</sub>の混合比率が12質量%、蒸着終了段階の陰極側界面領域ではIr(ppy)<sub>3</sub>の混合比率が0質量%となるように各成分の蒸着速度を調整した。これらの界面の間では連続的に各成分の混合比率を変化させた。発光層の膜厚は30nmであった。陽極側界面付近の領域における各材料の濃度は、Ir(ppy)<sub>3</sub>が11.4質量%、ETH-1が2.0質量%、CBPが86.6質量%であり、陰極側界面付近の領域では、Ir(ppy)<sub>3</sub>が0.6質量%、ETH-1が38.0質量%、CBPが61.4質量%であった。

【0553】

(比較の有機EL素子2Cの作製)

比較の有機EL素子2Aにおいて、正孔輸送層の代わりに下記のカルベン化合物(1)を含有する層を用いて、さらに発光層を下記に変更した。その他は比較の有機EL素子2Aと同様にして比較の有機EL素子2Cを作製した。

【0554】

カルベン化合物含有層：蒸着によりカルベン化合物(1)の厚み10nmの層を設けた。

発光層：CBPとETH-1とIr(ppy)<sub>3</sub>を3元共蒸着した。ETH-1の混合比率は発光層全体に均一に20質量%となるように調節した。また、Ir(ppy)<sub>3</sub>の混合比率は発光層全体に均一に6質量%となるように調整した。発光層の膜厚は30nmであった。

【0555】

(比較の有機EL素子2Dの作製)

比較の有機EL素子2Cにおいて、カルベン化合物含有層として、カルベン化合物(1)の代わりにカルベン化合物(2)を用いて、その他は比較の有機EL素子2Cと同様にして比較の有機EL素子2Dを作製した。

【0556】

(比較の有機EL素子2Eの作製)

比較の有機EL素子2Cにおいて、カルベン化合物含有層として、カルベン化合物(1)の代わりにカルベン化合物(3)を用いて、その他は比較の有機EL素子2Cと同様にして比較の有機EL素子2Eを作製した。

【0557】

(本発明の有機EL素子11の作製)

比較の有機EL素子2Aにおいて、正孔輸送層の代わりに下記のカルベン化合物(1)を含有する層を用いて、さらに発光層を下記に変更した。その他は比較の有機EL素子2Aと同様にして本発明の有機EL素子11を作製した。

【0558】

カルベン化合物含有層：蒸着によりカルベン化合物(1)の厚み10nmの層を設けた。

発光層：CBPとETH-1とIr(ppy)<sub>3</sub>とを3元共蒸着し、これらの共蒸着比を蒸着進行と共に変化させた。蒸着初期の陽極側界面ではETH-1の混合比率が0質量%、蒸着終了段階の陰極側界面領域ではETH-1の混合比率が40質量%となるように蒸着速度を調整した。また、蒸着初期の陽極側界面ではIr(ppy)<sub>3</sub>の混合比率が12質量%、蒸着終了段階の陰極側界面ではIr(ppy)<sub>3</sub>の混合比率が0質量%となるように各成分の蒸着速度を調整した。これらの界面の間では連続的に各成分の混合比率を変化させた。発光層の膜厚は30nmであった。陽極側界面付近の領域における各材料の濃度は、Ir(ppy)<sub>3</sub>が11.4質量%、ETH-1が2.0質量%、CBPが86.6質量%であり、陰極側界面付近の領域では、Ir(ppy)<sub>3</sub>が0.6質量%、ETH-1が38.0質量%、CBPが61.4質量%であった。

【0559】

(本発明の有機EL素子12の作製)

本発明の有機EL素子11において、カルベン化合物含有層として、カルベン化合物(

10

20

30

40

50

1) の代わりにカルベン化合物(2)を用いて、その他は本発明の有機EL素子11と同様にして本発明の有機EL素子12を作製した。

【0560】

(本発明の有機EL素子13の作製)

本発明の有機EL素子11において、カルベン化合物含有層として、カルベン化合物(1)の代わりにカルベン化合物(3)を用いて、その他は本発明の有機EL素子11と同様にして本発明の有機EL素子3を作製した。

【0561】

2. 性能評価

いずれの素子も緑色の発光を示した。得られた素子を実施例1と同様に評価した。但し、駆動電圧は輝度 $2000\text{ cd/m}^2$ になる直流電圧であり、外部量子効率の測定、および輝度半減時間の初期輝度も輝度 $2000\text{ cd/m}^2$ で評価した。駆動耐久性は比較の有機EL素子2Aの輝度半減時間を1とした時の相対輝度半減時間を指標とした。

10

得られた結果を表2に示した。

比較の素子2C、2D、および2Eに対して、それぞれ発光層の電子輸送性材料ETH-1の濃度を傾斜させた本発明の素子11、12および13は、いずれも駆動電圧が低下し、外部量子効率が高くなり、かつ輝度半減時間が大幅に長くなった。

一方、カルベン化合物を含有しない比較の素子2Aまたは2Bに対してカルベン化合物を含有する本発明の素子11、12および13は、駆動電圧が低く、かつ外部発光効率が高い結果を示した。

20

以上のように、本発明の有機EL素子は比較の素子に比べて本発明の有機EL素子は、駆動電圧の低下、外部量子効率の向上、かつ駆動耐久性に優れていた。

【0562】

【表2】

素子No.	駆動電圧(V)	外部量子効率(%)	相対輝度半減時間
比較の素子2A	10.2	7.2	1.0
比較の素子2B	9.5	9.3	2.1
比較の素子2C	9.7	9.5	0.20
比較の素子2D	9.2	9.1	0.18
比較の素子2E	9.5	10.1	0.25
本発明素子11	8.6	11.3	2.0
本発明素子12	8.9	12.0	2.2
本発明素子13	9.2	11.9	2.3

30

---

フロントページの続き

(72)発明者 木下 正兒

神奈川県足柄上郡開成町牛島577番地 富士フイルム株式会社内

(72)発明者 飛世 学

神奈川県足柄上郡開成町牛島577番地 富士フイルム株式会社内

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 CC04 CC21 DD53 DD67 DD71 DD78 FF14