

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 3 部門第 2 区分

【発行日】平成 24 年 7 月 26 日 (2012.7.26)

【公表番号】特表 2011-524869 (P2011-524869A)

【公表日】平成 23 年 9 月 8 日 (2011.9.8)

【年通号数】公開・登録公報 2011-036

【出願番号】特願 2011-512961 (P2011-512961)

【国際特許分類】

C 0 7 F 15/00 (2006.01)

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

C 0 7 C 49/92 (2006.01)

C 0 7 F 9/50 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

C 0 7 B 59/00 (2006.01)

C 0 7 D 471/04 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 F 15/00 C S P E

H 0 5 B 33/14 B

C 0 7 C 49/92

C 0 7 F 9/50

C 0 7 F 15/00 F

C 0 7 F 15/00 D

C 0 9 K 11/06 6 6 0

C 0 7 B 59/00

C 0 7 D 471/04 1 0 8 Q

C 0 7 D 471/04 1 0 8 A

【手続補正書】

【提出日】平成 24 年 6 月 7 日 (2012.6.7)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

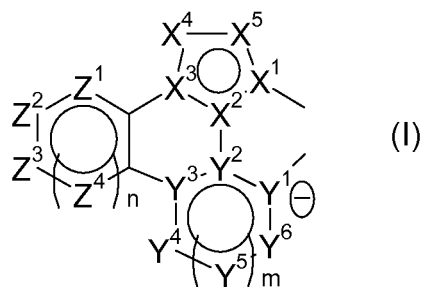
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

一般式 (I)

【化 1】



[式中、記号は、以下の意味を有する：

Y⁵、Z⁴は、互いに無関係に、C D、C R¹、C H、Nを意味する；

X^1 は、Nを意味し、 X^2 、 X^3 、 Y^1 、 Y^2 、 Y^3 は、互いに無関係に、NもしくはCを意味する；

X^5 は、CDを意味し、 X^4 は、CD、 CR^1 、CH、N、又は NR^1 、SもしくはOを意味する；

Y^4 、 Y^6 は、互いに無関係に、CD、 CR^1 、CH、Nであり、その際、 Y^4 もしくは Y^6 は、 $m = 0$ の場合に、更に、S、Oもしくは NR^1 を意味してよい；

Z^1 、 Z^2 、 Z^3 は、互いに無関係に、CD、 CR^1 、CH、Nであり、その際、 Z^1 、 Z^2 もしくは Z^3 は、 $n = 0$ の場合に、更に、S、Oもしくは NR^1 を意味してよい；

R^1 は、互いに無関係に、非置換もしくは置換のアルキル、非置換もしくは置換のシクロアルキル、非置換もしくは置換のヘテロシクロアルキル、非置換もしくは置換のアリール、非置換もしくは置換のヘテロアリール、非置換もしくは置換のアルケニル、非置換もしくは置換のシクロアルケニル、非置換もしくは置換のアルキニル、 SiR^2_3 、ハロゲン、ドナー作用もしくはアクセプター作用を有する置換基を意味し、その際、 R^1 がN原子と結合されている場合には、 R^1 は、互いに無関係に、非置換もしくは置換のアルキル又は非置換もしくは置換のアリール又は非置換もしくは置換のヘテロアリールを意味し、その際、2個の任意の基 R^1 は、更に、一緒になって、1個のアルキレン架橋もしくはアリーレン架橋を形成してよい；

R^2 は、互いに無関係に、非置換もしくは置換のアルキル又は非置換もしくは置換のアリール又は非置換もしくは置換のヘテロアリールを意味する；

m 、 n は、互いに無関係に、0もしくは1を意味し、その際、基 Z^4 もしくは Y^5 は、 n もしくは m が0である場合には、存在しない]で示される少なくとも1つの配位子を含む金属錯体であって、該金属錯体が少なくとも1個の重水素原子を含むことを特徴とする金属錯体。

【請求項2】

基 X^4 、 Y^4 、 Y^5 、 Y^6 、 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 の少なくとも1個が、CDを意味することを特徴とする、請求項1に記載の金属錯体。

【請求項3】

基 X^1 もしくは Y^1 の少なくとも1個が、Nを意味することを特徴とする、請求項1又は2に記載の金属錯体。

【請求項4】

X^1 、 X^2 、 X^3 、 X^4 、 X^5 、 Y^1 、 Y^2 、 Y^3 、 Y^4 、 Y^5 、 Y^6 、 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 は、互いに無関係に以下の意味を有する；

X^2 、 Y^1 、 Y^2 、 Y^3 は、Cを意味する；

X^1 は、Nを意味する；

X^3 は、CもしくはNを意味する；

X^5 は、CDを意味する；

X^4 は、 CR^1 、CD、N、 NR^1 、OもしくはSを意味する；

Y^4 、 Y^5 、 Y^6 は、互いに無関係に、CH、CDもしくは CR^1 を意味する；

Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、 Z^4 は、互いに無関係に、CH、CD、 CR^1 もしくはNを意味し、その際、 Z^1 、 Z^2 もしくは Z^3 は、 $n = 0$ の場合に、更に、S、Oもしくは NR^1 を意味してよいことを特徴とする、請求項1から3までのいずれか1項に記載の金属錯体。

【請求項5】

X^1 が、Nを意味し、 X^4 が、CDもしくは CR^1 を意味し、かつ X^5 が、CDを意味することを特徴とする、請求項3又は4に記載の金属錯体。

【請求項6】

X^3 が、Nを意味し、かつ Y^4 、 Y^5 、 Y^6 、 Z^1 、 Z^2 及び Z^4 が、CDを意味し、 X^4 、 Z^3 が、 CR^1 を意味することを特徴とする、請求項5に記載の金属錯体。

【請求項7】

R^1 が、互いに無関係に、非置換もしくは置換のアルキル、非置換もしくは置換のアリール、非置換もしくは置換のヘテロアリール、 SiR^2_3 、F、 OR^2 、 SR^2 、 NR^2_2 、C

F_3 もしくは CN を意味し、その際、 R^1 は、 R^1 が N 原子に結合されている場合に、互いに無関係に、非置換もしくは置換のアルキル、非置換もしくは置換のアリールを意味し、かつ R^2 は、互いに無関係に、非置換もしくは置換のアルキル又は非置換もしくは置換のアリールを意味することを特徴とする、請求項1から6までのいずれか1項に記載の金属錯体。

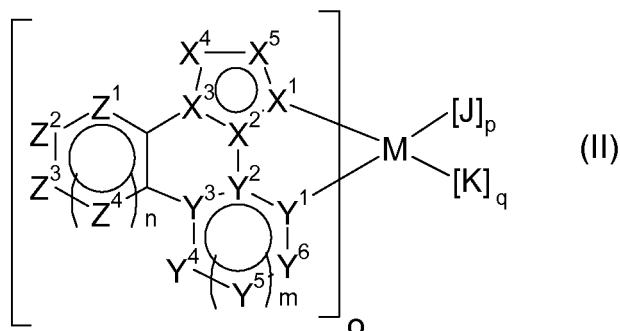
【請求項8】

m が1を意味することを特徴とする、請求項1から7までのいずれか1項に記載の金属錯体。

【請求項9】

一般式(ⅠⅠ)

【化2】



[式中、以下の意味を有する:]

M は、元素の周期律表(CAS版)の第ⅠB族、第ⅡB族、第ⅢB族、第ⅣB族、第ⅤB族、第ⅥB族、第ⅦB族、第Ⅷ族の遷移金属からなる群から選択される金属原子であって、対応する金属原子についてのそれぞれ可能な酸化段階の原子を意味する;

J は、モノアニオン性もしくはジアニオン性の配位子であって、一座もしくは二座であってよい配位子を意味する;

K は、中性の、一座もしくは二座の配位子であって、一般に光活性でない配位子を意味する;

o は、1、2、3もしくは4であり、その際、 o は、 $M = Ir$ (ⅢⅢⅢ)の場合に、1、2もしくは3を意味し、かつ $M = Pt$ (ⅡⅡ)もしくは Os (ⅡⅡ)の場合に、1もしくは2を意味する;

p は、0、1、2、3もしくは4であり、その際、 p は、 $M = Ir$ (ⅢⅢⅢ)の場合に、0、1、2、3もしくは4を意味し、かつ $M = Pt$ (ⅡⅡ)及び Os (ⅡⅡ)の場合に、0、1もしくは2を意味し、その際、 p は、金属 M に対する結合箇所数を意味し、すなわち $p = 2$ の場合に、2個の一座の配位子もしくは1個の二座の配位子であってよい;

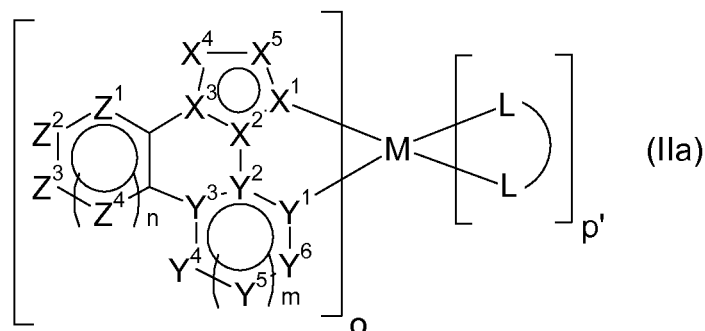
q は、0、1、2、3もしくは4であり、その際、 q は、 $M = Ir$ (ⅢⅢⅢ)の場合に、0、1もしくは2を意味し、 $M = Pt$ (ⅡⅡ)の場合に、0もしくは1を意味し、かつ $M = Os$ (ⅡⅡ)の場合に、2もしくは3を意味し、その際、 q は、金属 M に対する結合箇所数を意味し、すなわち $q = 2$ の場合に、2個の一座の配位子もしくは1個の二座の配位子であってよい;

その際、 o 、 p 及び q は、使用される金属原子の酸化段階及び配位数と、配位子の電荷に依存している]を有することを特徴とする、請求項1から8までのいずれか1項に記載の金属錯体。

【請求項10】

一般式(ⅠⅠa)

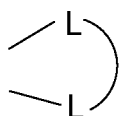
【化 3】



〔式中、以下の意味を有する；

Mは、元素の周期律表（C A S 版）の第ⅠB族、第ⅡB族、第ⅢB族、第ⅣB族、第ⅤB族、第ⅥB族、第ⅦB族、第Ⅷ族の遷移金属からなる群から選択される金属原子であって、それぞれ相応の金属原子について可能な酸化段階の原子を意味する；

【化 4】

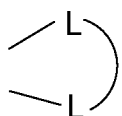


は、二座のモノアニオン性の配位子であって、1個以上の重水素原子を有してよい配位子を意味する；

oは、1、2、3、4を意味し、その際、oは、M = I r (Ⅲ)の場合に、1、2もしくは3を意味し、かつM = P t (Ⅱ)の場合に、1もしくは2を意味する；

p'は、0、1もしくは2を意味し、その際、p'は、M = I r (Ⅲ)の場合に、0、1もしくは2を意味し、かつM = P t (Ⅱ)の場合に、0もしくは1を意味し、その際、p'は、配位子

【化 5】



の数を意味する；

その際、o及びp'は、使用される金属原子の酸化段階及び配位数に依存する〕を有することを特徴とする、請求項9に記載の金属錯体。

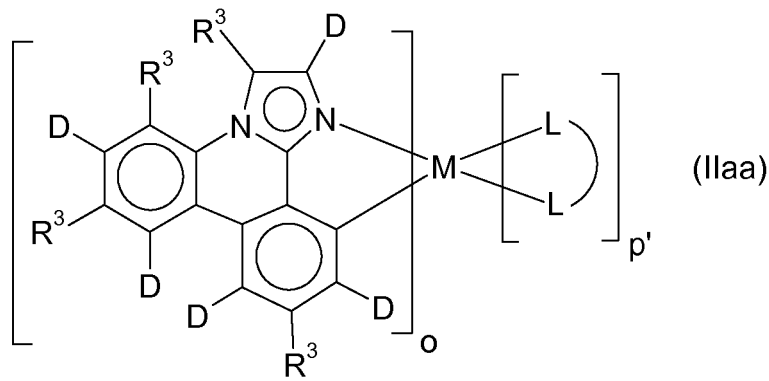
【請求項 11】

二座のモノアニオン性の配位子中のLが、それぞれ互いに無関係に、O、N及びCから選択されることを特徴とする、請求項10に記載の金属錯体。

【請求項 12】

一般式（ⅠⅠa a）

【化 6】



〔式中、Dは、重水素を意味し、かつ R^3 は、互いに無関係に重水素もしくは R^1 を意味する〕を有することを特徴とする、請求項10又は11に記載の金属錯体。

【請求項13】

Mが、Ir(III)、Pt(II)を意味し、oが、M = Ir(III)の場合に、1、2もしくは3を意味し、M = Pt(II)の場合に、1もしくは2を意味し、p'は、M = Ir(III)の場合に、0、1もしくは2を意味し、M = Pt(II)の場合に、0もしくは1を意味し、その際、合計 $o + p'$ は、M = Ir(III)の場合に3を意味し、かつM = Pt(II)の場合に2を意味し、かつoは、少なくとも1であることを特徴とする、請求項10から12までのいずれか1項に記載の金属錯体。

【請求項14】

請求項1から13までのいずれか1項に記載の少なくとも1種の金属錯体を含む有機発光ダイオード。

【請求項15】

請求項1から13までのいずれか1項に記載の少なくとも1種の金属錯体を含む発光層。

【請求項16】

請求項15に記載の少なくとも1つの発光層を含む有機発光ダイオード。

【請求項17】

請求項14又は16に記載の少なくとも1つの有機発光ダイオードを含む、定置式ディスプレイ、照明及び可動式ディスプレイからなる群から選択される装置。