



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 101765928 A

(43) 申请公布日 2010.06.30

(21) 申请号 200880100617.3

C09K 11/06 (2006.01)

(22) 申请日 2008.07.25

(30) 优先权数据

2007-196674 2007.07.27 JP

(85) PCT申请进入国家阶段日

2010.01.26

(86) PCT申请的申请数据

PCT/JP2008/063816 2008.07.25

(87) PCT申请的公布数据

W02009/017211 EN 2009.02.05

(71) 申请人 富士胶片株式会社

地址 日本东京都

(72) 发明人 木下正儿 飞世学

(74) 专利代理机构 永新专利商标代理有限公司

72002

代理人 柴丽敏 于辉

(51) Int. Cl.

H01L 51/50 (2006.01)

权利要求书 1 页 说明书 68 页

(54) 发明名称

有机电致发光装置

(57) 摘要

本发明提供一种有机 EL 装置,其至少包括提供在一对电极之间的发光层。该发光层至少包括空穴输送性主体材料和电子输送性磷光材料,并且电子输送性磷光材料在该发光层中的浓度从阴极侧朝着阳极侧减小。

1. 一种有机电致发光装置,其至少包括在一对电极之间的发光层,其中所述发光层至少包括空穴输送性主体材料和电子输送性磷光材料,并且所述电子输送性磷光材料在所述发光层中的浓度从阴极侧朝着阳极侧减小。

2. 如权利要求 1 所述的有机电致发光装置,其中相对于所述电子输送性磷光材料在所述发光层的阴极侧的界面附近区域的浓度,所述电子输送性磷光材料在所述发光层的阳极侧的界面附近区域的浓度为 0 质量%~50 质量%。

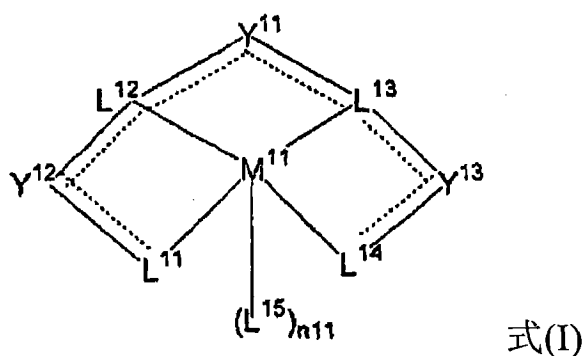
3. 如权利要求 2 所述的有机电致发光装置,其中所述发光层中的电子输送性磷光材料在阳极侧的界面附近区域的浓度为 10 质量%以下。

4. 如权利要求 2 所述的有机电致发光装置,其中所述发光层中的电子输送性磷光材料在阴极侧的界面附近区域的浓度为 12 质量%以上。

5. 如权利要求 1 所述的有机电致发光装置,其中电子输送性磷光材料是具有三齿以上的配体的金属络合物。

6. 如权利要求 5 所述的有机电致发光装置,其中所述金属络合物是铂络合物。

7. 如权利要求 1 所述的有机电致发光装置,其中所述电子输送性磷光材料是下式 (I) 代表的化合物:



其中, M^{11} 代表金属离子; $L^{11} \sim L^{15}$ 每一个独立地代表与 M^{11} 配位的配体; L^{11} 和 L^{14} 可以由原子团连接形成环状配体; L^{15} 可以与 L^{11} 和 L^{14} 同时结合形成环状配体; Y^{11} , Y^{12} 和 Y^{13} 每一个独立地代表连接基、单键或双键; 当 Y^{11} 代表连接基时, L^{12} 和 Y^{11} 之间的键和 Y^{11} 和 L^{13} 之间的键每一个独立地是单键或双键; 当 Y^{12} 代表连接基时, L^{11} 和 Y^{12} 之间的键和 Y^{12} 和 L^{12} 之间的键每一个独立地是单键或双键; 当 Y^{13} 代表连接基时, L^{13} 和 Y^{13} 之间的键和 Y^{13} 和 L^{14} 之间的键每一个独立地是单键或双键; n^{11} 代表 0 ~ 4 的整数, 连接 M^{11} 和 $L^{11} \sim L^{15}$ 中的每一个的键选自配位键、离子键或共价键。

8. 如权利要求 1 所述的有机电致发光装置,其中所述空穴输送性主体材料是咪唑衍生物或吡啶衍生物。

9. 如权利要求 8 所述的有机电致发光装置,其中所述空穴输送性主体材料是 1,3- 双(咪唑-9-基)苯或其衍生物。

10. 如权利要求 1 所述的有机电致发光装置,其中发光光谱的峰波长为 430nm 以上但小于 480nm。

有机电致发光装置

技术领域

[0001] 本发明涉及一种有机电致发光装置。具体而言,本发明涉及一种发光效率增强和耐久性优异的有机电致发光装置。

背景技术

[0002] 有机电致发光装置(有机 EL 装置)由发光层或包括发光层的多个有机官能层以及一对夹持这些层的对向电极构成。有机 EL 装置是利用通过在发光层中使从阴极注入的电子和从阳极注入的空穴复合而产生激子的发光以及从前述至少一个激子的能量转移而产生其他分子的激子的发光的发光装置。

[0003] 已经开发了通过使用实现功能分离的叠置结构而获得亮度和装置效率显著改善的有机 EL 装置。例如,通常使用具有空穴输送层和发光电子输送层的两层叠置型装置;具有空穴输送层、发光层和电子输送层的三层叠置型装置;和具有空穴输送层、发光层、空穴阻挡层和电子输送层的四层叠置型装置(参见,例如,Science Vol. 267, No. 3, 1995, 页 1332)。

[0004] 然而,在实用中有机 EL 装置仍然有许多问题。首先,需要较高的发光效率,其次,需要较高的驱动耐久性。特别地,连续驱动时的质量降低是需要克服的最大问题。

[0005] 例如,已经尝试(参见,例如,日本专利申请未审公开(JP-A)No. 2003-123984)通过提供 0.1nm ~ 5nm 的界面层作为发光层和空穴输送层之间的阻挡层,从而延迟空穴移动并调节空穴移动和电子移动之间的平衡,从而提高外部量子效率。然而,在该尝试中,存在载流子总体移动降低而导致亮度降低和驱动电压增大的可能性,以及载流子在装置中的滞留时间延长而导致驱动耐久性降低的可能性。

[0006] 此外,通过叠置多个发光单元(每一个包括发光层和功能层)而制备的多层结构(多光子结构)是已知的。例如,其构成已被公开(参见,例如,JP-A No. 6-310275),其中多个有机电致发光装置(下面也称作“有机 EL 装置”)的发光单元通过绝缘层隔开,并且每个发光单元设有一对对向电极。然而,在该构成中,由于发光单元之间的绝缘层和电极抑制发出的光的提取,因此基本上各发光单元的发光不能充分地利用。此外,这种技术不能用作改善各发光单元中固有的低外部量子效率的手段。

[0007] 当发光装置是聚合物分散型时,发光层常常具有单层结构,因而发光位点在发光层中分散;因此,难于维持空穴和电子的注入和输送的平衡,从而可以使复合效率下降。作为解决该问题的手段,已经提出(参见,例如,JP-A No. 2001-189193)使发光材料和电荷输送材料在发光层中的浓度在阳极侧较低,在阴极侧较高,因此使发光集中在阴极区域。尽管这种手段对于聚合物分散型发光装置所特有的问题是有效的,但是发光区域仅限于接近阴极侧的区域,而整个发光层不能有效地用于发光。因此,这种手段没有使总发光效率增加。

[0008] 此外,当有机 EL 装置被配置成具有叠置结构时,由于各层之间的阻挡使载流子注入性下降,驱动电压增大,并且耐久性下降。关于降低各层之间的阻挡的手段,已经提出(参见,例如,JP-A No. 2002-313583)提供各层中所含的空穴注入材料或电子注入材料的梯

度或各层中所含的空穴输送材料或电子输送材料的浓度梯度。在这种构成中,发光层中的发光材料配置在作为双极混合层的发光层的特定区域内。即使在这种构成中,发光也仅在配置发光材料的特定区域内发生。

[0009] 在设计实用的有机 EL 装置时,增强的外部量子效率和增强的驱动耐久性的兼容性是极为重要的问题,总是要求对其改善。

发明内容

[0010] 本发明的目的是提供一种发光效率增强和耐久性优异的有机 EL 装置。

[0011] 本发明的第一方面提供一种有机电致发光装置,至少包括在一对电极之间的发光层,其中所述发光层至少包括空穴输送性主体材料和电子输送性磷光材料,并且电子输送性磷光材料在所述发光层中的浓度从阴极侧朝着阳极侧减小。

[0012] 本发明的第二方面提供一种根据第一方面的有机电致发光装置,其中相对于电子输送性磷光材料在所述发光层的阴极侧的界面附近区域的浓度,电子输送性磷光材料在所述发光层的阳极侧的界面附近区域的浓度为 0 质量%~50 质量%。

[0013] 本发明的第三方面提供一种根据第二方面的有机电致发光装置,其中所述发光层中的电子输送性磷光材料在阳极侧的界面附近区域的浓度为 10 质量%以下。

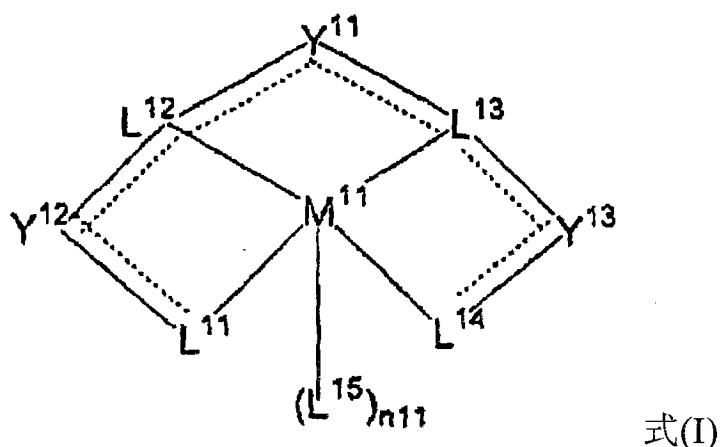
[0014] 本发明的第四方面提供一种根据第二或第三方面的有机电致发光装置,其中所述发光层中的电子输送性磷光材料在阴极侧的界面附近区域的浓度为 12 质量%以上。

[0015] 本发明的第五方面提供一种根据第一至第四方面中任一方面的有机电致发光装置,其中电子输送性磷光材料是具有三齿以上的配体的金属络合物。

[0016] 本发明的第六方面提供一种根据第五方面的有机电致发光装置,其中所述金属络合物是铂络合物。

[0017] 本发明的第七方面提供一种根据第一至第六方面中任一方面的有机电致发光装置,其中电子输送性磷光材料是下式 (I) 代表的化合物:

[0018]



[0019] 其中, M^{11} 代表金属离子; $L^{11} \sim L^{15}$ 每一个独立地代表与 M^{11} 配位的配体; L^{11} 和 L^{14} 可以由原子团连接形成环状配体; L^{15} 可以与 L^{11} 和 L^{14} 同时结合形成环状配体; Y^{11} , Y^{12} 和 Y^{13} 每一个独立地代表连接基、单键或双键; 当 Y^{11} 代表连接基时, L^{12} 和 Y^{11} 之间的键和 Y^{11} 和 L^{13} 之间的键每一个独立地是单键或双键; 当 Y^{12} 代表连接基时, L^{11} 和 Y^{12} 之间的键和 Y^{12} 和 L^{12}

之间的键每一个独立地是单键或双键；当 Y^{13} 代表连接基时， L^{13} 和 Y^{13} 之间的键和 Y^{13} 和 L^{14} 之间的键每一个独立地是单键或双键； n^{11} 代表 0 ~ 4 的整数，连接 M^{11} 和 $L^{11} \sim L^{15}$ 中的每一个的键选自配位键、离子键或共价键。

[0020] 本发明的第八方面提供一种根据第一至第七方面中任一方面的有机电致发光装置，其中空穴输送性主体材料是咪唑衍生物或吡啶衍生物。

[0021] 本发明的第九方面提供一种根据第八方面的有机电致发光装置，其中空穴输送性主体材料是 1,3- 双（咪唑-9-基）苯或其衍生物。

[0022] 本发明的第十方面提供一种根据第一至第九方面中任一方面的有机电致发光装置，其中发光光谱的峰波长为 430nm 以上但小于 480nm。

[0023] 根据本发明，提供一种高发光效率和耐久性优异的有机 EL 装置。特别地，提供一种通过使用磷光材料实现高发光效率、即使在高电流区域也可防止发光效率降低并且在低电流区域至高电流区域的整个范围内实现高发光效率和优异耐久性的有机 EL 装置。

具体实施方式

[0024] 根据本发明的有机电致发光装置至少包括夹在一对电极之间的发光层，其中所述发光层包括空穴输送性主体材料和电子输送性磷光材料，电子输送性磷光材料在所述发光层中的浓度从阴极侧朝着阳极侧减小。

[0025] 电子输送性主体材料在发光层中的浓度优选从阴极侧朝着阳极侧减小。

[0026] 相对于电子输送性主体材料在发光层的阴极侧的界面附近区域的浓度，电子输送性主体材料的浓度梯度优选使得电子输送性主体材料在发光层的阳极侧的界面附近区域的浓度为 0 质量% ~ 50 质量%，更优选为 0 质量% ~ 20 质量%。

[0027] 在本说明书中，短语“发光层的阴极侧的界面附近区域”被定义为从发光层的阴极侧的界面延伸到发光层总厚度的 10% 以内的发光层区域，短语“发光层的阳极侧的界面附近区域”被定义为从发光层的阳极侧的界面延伸到发光层总厚度的 10% 以内的发光层区域。区域中的浓度被定义为该区域内的平均浓度。各材料在“发光层的阴极侧（阳极侧）的界面附近区域”中的浓度可以根据飞行时间二次离子质谱（TOF-SIMS）或蚀刻/X 射线光电子能谱分析（XPS/ESCA）等方法测量。

[0028] 在本发明中，术语“浓度梯度”指总体上的浓度减小或增大，浓度可以连续变化、阶段式变化或波浪式变化。可选择地，例如，即使层中有浓度局部增加的区域，浓度总体上减小的减小浓度梯度也在本发明的范围内。

[0029] 结果，在本发明中，因为在整个发光层内均匀地发生发光，因此发光效率改善，发光分布接近于整个层的发光，并且耐久性也改善。假定由于本发明的梯度结构延迟了随着电子朝向阳极侧前进从阴极注入发光层的电子的移动，常规上仅在发光层的阴极面侧出现的空穴和电子的复合也在发光层的中央部发生。至今为止，尽管已经提出（参见，例如，JP-A No. 2002-313583）提供各层中所含的空穴注入材料或电子注入材料的梯度或各层中所含的空穴输送材料或电子输送材料的浓度梯度作为降低各层间的阻挡的措施，但是常规知识总体上未预见到通过提供发光材料在发光层中的梯度能够使整个发光层发光并且改善发光效率和驱动耐久性。

[0030] 优选地，电子输送性磷光材料在发光层的阳极侧的界面附近区域的浓度优选为 10

质量%以下,更优选 7 质量%以下,再更优选 5 质量%以下。

[0031] 电子输送性磷光材料在发光层的阴极侧的界面附近区域的浓度优选为 12 质量%以上,更优选 15 质量%以上,再更优选 18 质量%以上。

[0032] 当电子输送性磷光材料在发光层的阳极侧的界面附近区域的浓度超过 10 质量%时,从发光层朝向阳极侧逸出的电子量增大,并会导致发光效率不利地降低。此外,当电子输送性磷光材料在发光层的阴极侧的界面附近区域的浓度低于 12 质量%时,注入发光层中的电子量减小,并会导致发光效率不利地降低。

[0033] 电子输送性磷光材料优选是具有三齿以上配体的金属络合物,优选是铂络合物。电子输送性磷光材料更优选是上式 (I) 代表的化合物。

[0034] 本发明中的空穴输送性主体材料优选是咪唑衍生物或吡啶衍生物。

[0035] 空穴输送材料更优选是 mCP 或其衍生物。本发明中的电子输送性磷光材料优选是发蓝光的材料。

[0036] 1. 有机 EL 装置的构成

[0037] 本发明的有机化合物层的叠层的优选实施方案优选具有从阳极侧顺序配置的空穴输送层、发光层和电子输送层。空穴注入层可以设置在阳极和空穴输送层之间。电子输送性中间层可以设置在发光层和电子输送层之间。空穴输送性中间层可以设置在发光层和空穴输送层之间。电子注入层可以设置在阴极和电子输送层之间。

[0038] 本发明的有机电致发光装置中的有机化合物层的优选实施方案包括以下这些:

[0039] (1) 至少包括从阳极侧顺序配置的空穴注入层、空穴输送层(空穴注入层和空穴输送层可能是相同层)、空穴输送性中间层、发光层、电子输送层和电子注入层(电子输送层和电子注入层可能是相同层)的实施方案;

[0040] (2) 至少包括从阳极侧顺序配置的空穴注入层、空穴输送层(空穴注入层和空穴输送层可能是相同层)、发光层、电子输送性中间层、电子输送层和电子注入层(电子输送层和电子注入层可能是相同层)的实施方案;和

[0041] (3) 至少包括从阳极侧顺序配置的空穴注入层、空穴输送层(空穴注入层和空穴输送层可能是相同层)、空穴输送性中间层、发光层、电子输送性中间层、电子输送层和电子注入层(电子输送层和电子注入层可能是相同层)的实施方案。

[0042] 空穴输送性中间层优选具有促进空穴注入发光层中的功能或阻挡电子的功能中的至少一个。

[0043] 此外,电子输送性中间层优选具有促进电注入发光层中的功能或阻挡空穴的功能中的至少一个。

[0044] 此外,空穴输送性中间层或电子输送性中间层中的至少一个优选具有阻挡在发光层中产生的激子的功能。

[0045] 为了有效地实现各功能,如促进注入空穴、促进注入电子、阻挡空穴、阻挡电子和阻挡激子,优选的是,空穴输送性中间层和电子输送性中间层邻接发光层配置。

[0046] 此外,上述各层可以分成多个亚层。

[0047] 本发明的有机 EL 装置可以具有共振器结构。例如,有机 EL 装置可以具有多层膜反射镜的结构,包括在透明基板上叠置的折射率不同的多个叠置膜、透明的或半透明的电极、发光层和金属电极。在发光层中产生的光在作为反射板的多层膜反射镜和金属电极之间重

复反射,从而实现光的共振。

[0048] 在另一个优选实施方案中,在透明基板上的透明或半透明的电极和金属电极用作反射板,在发光层中产生的光重复反射,从而实现光的共振。

[0049] 为形成共振结构,两个反射板的有效折射率、由共振器之间各层的折射率和厚度确定的光路长度被调节到获得所需共振波长的最佳值。前一实施方案情况下的计算式公开在 JP-A No. 9-180883 中。后一实施方案情况下的计算式公开在 JP-A No. 2004-127795 中。

[0050] 有机化合物层中的各层可以通过干式成膜法(气相沉积法或溅射法)、转印法、印刷法、涂布法、喷墨法或喷洒法中的任一种优选形成。

[0051] 接下来,详细说明构成本发明的有机 EL 装置的各个元件。

[0052] 2. 发光层

[0053] 发光层是在施加电场时从阳极、空穴注入层、空穴输送层或空穴输送性中间层接收空穴并且从阴极、电子注入层、电子输送层或电子输送性中间层接收电子的层;发光层具有通过提供空穴和电子复合的位置而发光的功能。

[0054] 根据本发明的有机 EL 装置至少包括配置在一对电极之间的发光层。发光层至少包括空穴输送性主体材料和电子输送性磷光材料。电子输送性磷光材料在发光层中的浓度从阴极侧朝着阳极侧减小。

[0055] (电子输送性磷光材料)

[0056] 本发明中使用的电子输送性磷光材料的例子包括邻位金属化(ortho-metallated)金属络合物和卟啉金属络合物。邻位金属化金属络合物是例如在 Akio Yamamoto "YUHKI KINZOKU KA GAKU-KISO TO OUYOU(金属有机化学基础和应用)", pp. 150 和 232(Shokabo Publishing Co., Ltd., 1982) 和 H. Yersin "Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds", pp. 71 ~ 77 和 135 ~ 146(Springer-Verlag Company, 1987) 中记载的化合物群的总称。

[0057] 各种配体用于形成邻位金属化金属络合物,尽管它们记载在文献中,但优选的配体是 2-苯基吡啶衍生物、7,8-苯并喹啉衍生物、2-(2-噻吩基)吡啶衍生物、2-(1-萘基)吡啶衍生物、2-苯基喹啉衍生物等。这些衍生物在需要时可以具有取代基。此外,邻位金属化金属络合物除了上述配体之外还可以具有其他配体。

[0058] 邻位金属化金属络合物可以根据各种已知技术合成,如记载在 InorgChem., 1991, No. 30, p. 1685; Inorg Chem., 1988, No. 27, p. 3464; Inorg Chem., 1994, No. 33, p. 545; Inorg. Chim. Acta, 1991, No. 181, p. 245; J. Organomet. Chem., 1987, No. 335, p. 293; 或 J. Am. Chem. Soc. 1985, No. 107, p. 14 ~ 31 中的那些。

[0059] 在卟啉金属络合物中,卟啉铂络合物是优选的。

[0060] 在本发明中,可以仅使用一种电子输送性磷光材料,或者两种以上的电子输送性磷光材料可以组合使用。还可以同时使用荧光发光材料和磷光材料。

[0061] 在本发明中,特别优选使用的电子输送性磷光材料是具有三齿以上的配体的金属络合物。

[0062] 首先,详细说明根据本发明的具有三齿以上的配体的金属络合物。

[0063] 在金属络合物中,与金属离子配位的原子没有特别限制。氧原子、氮原子、碳原子、硫原子或磷原子是优选的,氧原子、氮原子或碳原子是更优选的,氮原子或碳原子是再更优

选的。

[0064] 金属络合物中的金属离子没有特别限制。从改善发光效率、改善耐久性和降低驱动电压的观点来看,过渡金属离子和稀土金属离子是优选的;铕离子、铂离子、金离子、铈离子、钨离子、铈离子、钕离子、钐离子、钐离子、银离子、铜离子、钴离子、锌离子、镍离子、铅离子、铝离子、镓离子和稀土金属离子(例如,铈离子、钕离子和铕离子)是更优选的;铕离子、铂离子、金离子、铈离子、钨离子、钐离子、锌离子、铝离子、镓离子、铈离子、钕离子和铕离子是再更优选的。当金属络合物用作发光材料时,铕离子、铂离子、铈离子、钨离子、铈离子、钕离子和铕离子是特别优选的。

[0065] 当金属络合物用作电荷输送材料或发光层中的主体材料时,铕离子、铂离子、钐离子、锌离子、铝离子和镓离子是特别优选的。

[0066] 作为本发明中的具有三齿以上的配体的金属络合物,从改善发光效率和改善耐久性的观点来看,具有三齿至六齿的配体的金属络合物是优选的。在容易形成六配位型络合物的金属离子的情况下,如铕离子,具有三齿、四齿或六齿配体的金属络合物是优选的。在容易形成四配位型络合物的金属离子的情况下,如铂离子,具有三齿或四齿配体的金属络合物是更优选的,具有四齿配体的金属络合物是再更优选的。

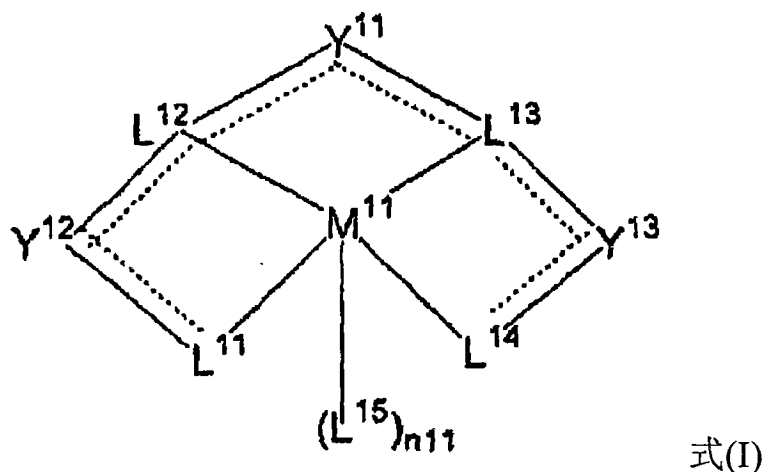
[0067] 从改善发光效率和改善耐久性的观点来看,本发明中的金属络合物的配体优选是链状或环状的,并优选具有用氮与中心金属(例如,在后述式(I)代表的化合物的情况下, M^{11})配位的至少一个含氮杂环(例如,吡啶环、喹啉环、嘧啶环、吡嗪环、吡咯环、咪唑环、吡唑环、噁唑环、噻唑环、噁二唑环、噻二唑环和三唑环)。含氮杂环优选是含氮6-元杂环或含氮5-元杂环。上述杂环可以与其他环形成一个以上的稠环。

[0068] 表述“金属络合物的配体是链状的”指的是金属络合物的配体不采用环状结构(例如,三联吡啶基配体或2,6-二苯基吡啶配体)。此外,表述“金属络合物的配体是环状的”指的是金属络合物中的多个配体相互结合形成封闭结构(例如,酞菁配体或冠醚配体)。

[0069] 本发明中的金属络合物优选是后面详细说明书的式(I)、(II)或(III)代表的化合物。

[0070] 首先说明式(I)代表的化合物。

[0071]



[0072] 在式(I)中, M^{11} 代表金属离子; $L^{11} \sim L^{15}$ 每一个独立地代表与 M^{11} 配位的配体; L^{11}

和 L^{14} 可以由额外的原子团连接形成环状配体; L^{15} 可以与 L^{11} 和 L^{14} 同时结合形成环状配体; $Y^{11} \sim Y^{13}$ 每一个独立地代表连接基、单键或双键; 当 Y^{11} 代表连接基时, L^{12} 和 Y^{11} 之间的键和 Y^{11} 和 L^{13} 之间的键每一个独立地是单键或双键; 当 Y^{12} 代表连接基时, L^{11} 和 Y^{12} 之间的键和 Y^{12} 和 L^{12} 之间的键每一个独立地是单键或双键; 当 Y^{13} 代表连接基时, L^{13} 和 Y^{13} 之间的键和 Y^{13} 和 L^{14} 之间的键每一个独立地是单键或双键; 和 n^{11} 代表 $0 \sim 4$ 的整数。连接 M^{11} 和 $L^{11} \sim L^{15}$ 中的每一个的键可以选自配位键、离子键和共价键。

[0073] 下面, 详细说明式 (I) 代表的化合物。

[0074] 在式 (I) 中, M^{11} 代表金属离子。金属离子没有特别限制, 但优选是二价或三价金属离子。二价或三价金属离子的优选例子包括铂离子、铟离子、铈离子、钪离子、铈离子、钆离子、铜离子、镱离子、钆离子和铈离子。其更优选的例子包括铂离子、铈离子和镱离子。其再更优选的例子包括铂离子和铈离子。其特别优选的例子包括铂离子。

[0075] 在式 (I) 中, L^{11}, L^{12}, L^{13} 和 L^{14} 每一个独立地代表与 M^{11} 配位的部分。与 M^{11} 配位并包含在 L^{11}, L^{12}, L^{13} 或 L^{14} 中的原子的优选例子包括优选氮原子、氧原子、硫原子、碳原子和磷原子。其更优选的例子包括氮原子、氧原子、硫原子和碳原子。其再更优选的例子包括氮原子、氧原子和碳原子。

[0076] M^{11} 和 L^{11}, M^{11} 和 L^{12}, M^{11} 和 L^{13}, M^{11} 和 L^{14} 之间的键每一个可以独立地选自共价键、离子键和配位键。在本说明书中, 为便于说明, 中心金属和配体之间的键是配位键之外的键 (离子键或共价键) 时以及当中心金属和配体之间的键是配位键时, 均使用术语 "配体"。

[0077] 整个配体, 包括 $L^{11}, Y^{12}, L^{12}, Y^{11}, L^{13}, Y^{13}$ 和 L^{14} , 优选是阴离子配体。术语 "阴离子配体" 指具有与金属结合的至少一个阴离子的配体。阴离子配体中的阴离子数优选是 $1 \sim 3$, 更优选 1 或 2, 再更优选 2。

[0078] 当 L^{11}, L^{12}, L^{13} 和 L^{14} 中任一个代表的部分通过碳原子与 M^{11} 配位时, 该部分没有特别限制, 其例子包括亚氨基配体、芳香族碳环配体 (例如, 苯配体、萘配体、蒽配体和菲配体) 和杂环配体 [例如, 呋喃配体、噻吩配体、吡啶配体、吡嗪配体、嘧啶配体、噻唑配体、噁唑配体、吡咯配体、咪唑配体和吡唑配体、其缩环体 (例如, 喹啉配体和苯并噻唑配体) 和其互变异构体]。

[0079] 当 L^{11}, L^{12}, L^{13} 和 L^{14} 中任一个代表的部分通过氮原子与 M^{11} 配位时, 该部分没有特别限制, 其例子包括含氮杂环配体, 如吡啶配体、吡嗪配体、嘧啶配体、哒嗪配体、三嗪配体、噻唑配体、噁唑配体、吡咯配体、咪唑配体、吡唑配体、三唑配体、噁二唑配体和噻二唑配体和其缩环体 (例如, 喹啉配体、苯并噻唑配体和苯并咪唑配体) 和其互变异构体 [在本发明中, 除了通常的异构体之外, 以下配体 (吡咯互变异构体) 也被认为在互变异构体的定义内: JP-A No. 2007-103493 中所示的化合物 (24) 的 5-元杂环配体、化合物 (64) 的末端 5-元杂环配体和化合物 (145) 的 5-元杂环配体]; 氨基配体如烷基氨基配体 (优选具有 $2 \sim 30$ 个碳原子, 更优选 $2 \sim 20$ 个碳原子, 特别优选 $2 \sim 10$ 个碳原子, 如甲基氨基)、芳基氨基配体 (例如, 苯基氨基)、酰氨基配体 (优选具有 $2 \sim 30$ 个碳原子, 更优选 $2 \sim 20$ 个碳原子, 特别优选 $2 \sim 10$ 个碳原子, 如乙酰氨基和苯甲酰氨基)、烷氧基羰基氨基配体 (优选具有 $2 \sim 30$ 个碳原子, 更优选 $2 \sim 20$ 个碳原子, 特别优选 $2 \sim 12$ 个碳原子, 如甲氧基羰基氨基)、芳氧基羰基氨基配体 (优选具有 $7 \sim 30$ 个碳原子, 更优选 $7 \sim 20$ 个碳原子, 特别优选 $7 \sim 12$ 个碳原子, 如苯氧基羰基氨基)、磺酰氨基配体 (优选具有 $1 \sim 30$ 个碳原子, 更优

选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,如甲烷磺酰氨基和苯磺酰氨基)和亚氨基配体。这些配体可以被进一步取代。

[0080] 当 L^{11} , L^{12} , L^{13} 和 L^{14} 中任一个代表的部分通过氧原子与 M^{11} 配位时,该部分没有特别限制,其例子包括烷氧基配体(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 10 个碳原子,如甲氧基、乙氧基、丁氧基和 2-乙基己氧基)、芳氧基配体(优选具有 6 ~ 30 个碳原子,更优选 6 ~ 20 个碳原子,特别优选 6 ~ 12 个碳原子,如苯氧基、1-萘氧基和 2-萘氧基)、杂环氧基配体(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,如吡啶氧基、吡唑氧基、嘧啶氧基和喹啉氧基)、酰氧基配体(优选具有 2 ~ 30 个碳原子,更优选 2 ~ 20 个碳原子,特别优选 2 ~ 10 个碳原子,如乙酰氧基和苯甲酰氧基)、甲硅烷氧基配体(优选具有 3 ~ 40 个碳原子,更优选 3 ~ 30 个碳原子,特别优选 3 ~ 24 个碳原子,如三甲基甲硅烷氧基和三苯基甲硅烷氧基)、羰基配体(例如,酮配体、酯配体和酰氨基配体)和醚配体(例如,二烷基醚配体、二芳基醚配体和呋喃基配体)。这些取代基可以被进一步取代。

[0081] 当 L^{11} , L^{12} , L^{13} 和 L^{14} 中任一个代表的部分通过硫原子与 M^{11} 配位时,该部分没有特别限制,其例子包括烷硫基配体(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,如甲硫基和乙硫基)、芳硫基配体(优选具有 6 ~ 30 个碳原子,更优选 6 ~ 20 个碳原子,特别优选 6 ~ 12 个碳原子,如苯硫基)、杂环硫基配体(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,如吡啶硫基、2-苯并咪唑硫基、2-苯并噁唑硫基和 2-苯并噻唑硫基)、硫代羰基配体(例如,硫代酮配体和硫代酯配体)和硫代醚配体(例如,二烷基硫基醚配体、二芳基硫基醚配体和硫代呋喃基配体)。这些取代配体可以被进一步取代。

[0082] 当 L^{11} , L^{12} , L^{13} 和 L^{14} 中任一个代表的部分通过磷原子与 M^{11} 配位时,该部分没有特别限制,其例子包括二烷基膦配体、二芳基膦配体、三烷基膦配体、三芳基膦配体和膦配体。这些配体可以被进一步取代。

[0083] 在一个优选实施方案中, L^{11} 和 L^{14} 每一个独立地代表选自以下的部分:芳香族碳环配体、烷氧基配体、芳氧基配体、醚配体、烷硫基配体、芳硫基配体、烷基氨基配体、芳基氨基配体、酰氨基配体或含氮杂环配体[例如,吡啶配体、吡嗪配体、嘧啶配体、哒嗪配体、三嗪配体、噻唑配体、噁唑配体、吡咯配体、咪唑配体、吡唑配体、三唑配体、噁二唑配体、噻二唑配体或含有一个以上的上述配体的稠环配体(例如,喹啉配体、喹喔啉配体、酞嗪配体、苯并噁唑配体或苯并咪唑配体)或上述任一配体的互变异构体];更优选地,芳香族碳环配体、芳氧基配体、芳硫基配体、芳基氨基配体、吡啶配体、吡嗪配体、咪唑配体、含有一个以上的上述配体的稠环配体(例如,喹啉配体、喹喔啉配体、酞嗪配体或苯并咪唑配体)或上述任一配体的互变异构体;再更优选地,芳香族碳环配体、芳氧基配体、芳硫基配体、芳基氨基配体、吡啶配体、吡嗪配体、吡唑配体、咪唑配体或含有一个以上的上述配体的稠环配体;特别优选地,芳香族碳环配体、芳氧基配体、吡啶配体、吡嗪配体、吡唑配体、咪唑配体或含有一个以上的上述配体的稠环配体。

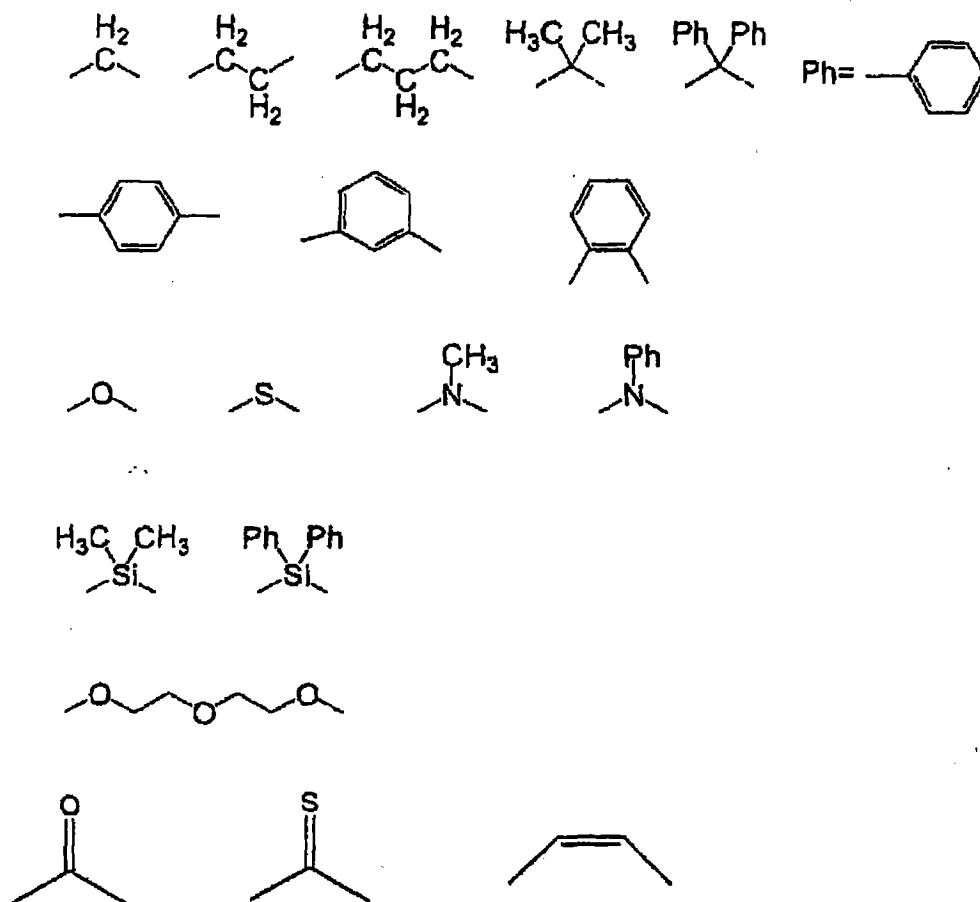
[0084] 在一个优选实施方案中, L^{12} 和 L^{13} 每一个独立地代表与 M^{11} 形成配位键的部分。与 M^{11} 形成配位键的部分优选是吡啶、吡嗪、嘧啶、三嗪、噻唑、噁唑、吡咯或三唑环、含有一个以上的上述环的稠环(例如,喹啉环、喹喔啉、酞嗪、苯并噁唑环、苯并咪唑环、吡啶环)或上

述任一配体的互变异构体；更优选吡啶、吡嗪、嘧啶、吡咯环、含有一个以上的上述环的稠环（例如，喹啉环、喹喔啉环、酞嗪环、吲哚环）或任一上述环的互变异构体；再更优选吡啶、吡嗪或嘧啶环或含有一个以上的上述环的稠环（例如，喹啉环）；特别优选吡啶环或含有吡啶环的稠环（例如，喹啉环）。

[0085] 在式 (I) 中， L^{15} 代表与 M^{11} 配位的配体。 L^{15} 优选是单齿至四齿配体，更优选单齿至四齿阴离子配体。单齿至四齿阴离子配体没有特别限制，但优选是卤素配体、1,3-二酮配体（例如，乙酰丙酮配体）、含有吡啶配体的单阴离子二齿配体 [例如，吡啶羧酸配体或 2-(2-羟基苯基)-吡啶配体] 或者 L^{11} , Y^{12} , L^{12} , Y^{11} , L^{13} , Y^{13} 和 L^{14} 可以形成的四齿配体；更优选地，1,3-二酮配体（例如，乙酰丙酮配体）、含有吡啶配体的单阴离子二齿配体 [例如，吡啶羧酸配体或 2-(2-羟基苯基)-吡啶配体] 或者 L^{11} , Y^{12} , L^{12} , Y^{11} , L^{13} , Y^{13} 和 L^{14} 可以形成的四齿配体；再更优选地，1,3-二酮配体（例如，乙酰丙酮配体）或含有吡啶配体的单阴离子二齿配体 [例如，吡啶羧酸配体或 2-(2-羟基苯基)-吡啶配体]；特别优选地，1,3-二酮配体（例如，乙酰丙酮配体）。配位位置的数量和配体的数量不会超出金属的价态。 L^{15} 不会与 L^{11} 和 L^{14} 同时结合而形成环状配体。

[0086] 在式 (I) 中， Y^{11} , Y^{12} 和 Y^{13} 每一个独立地代表连接基或单键或双键。连接基没有特别限制，其优选例子包括含有选自碳原子、氮原子、氧原子、硫原子、硅原子和磷原子的原子的连接基。连接基的具体例子包括以下基团：

[0087]



[0088] 当 Y^{11} 是连接基时， L^{12} 和 Y^{11} 之间的键和 Y^{11} 和 L^{13} 之间的键每一个独立地是单键

或双键。当 Y^{12} 是连接基时, L^{11} 和 Y^{12} 之间的键和 Y^{12} 和 L^{12} 之间的键每一个独立地是单键或双键。当 Y^{13} 是连接基时, L^{13} 和 Y^{13} 之间的键和 Y^{13} 和 L^{14} 之间的键每一个独立地是单键或双键。

[0089] Y^{11} , Y^{12} 和 Y^{13} 每一个独立地优选代表单键、双键、羰基连接基、亚烷基连接基、亚烯基或氨基连接基。 Y^{11} 更优选是单键、亚烷基或氨基连接基,再更优选亚烷基。每一个 Y^{12} 和 Y^{13} 更优选是单键或亚烯基,再更优选单键。

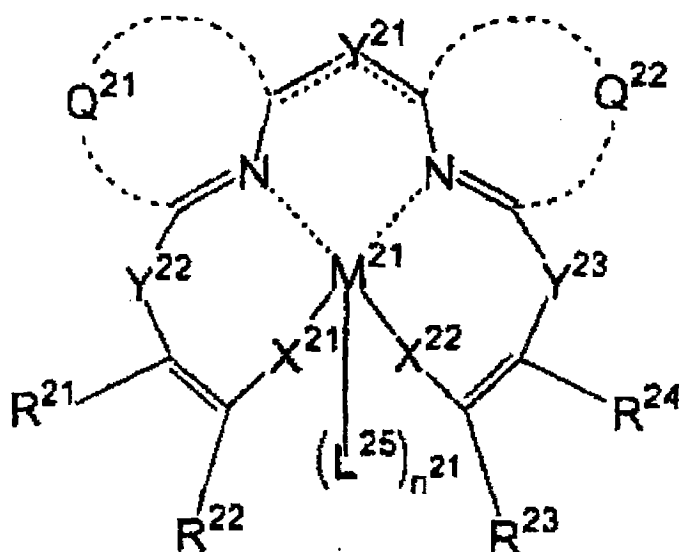
[0090] 由 Y^{12} , L^{11} , L^{12} 和 M^{11} 形成的环、由 Y^{11} , L^{12} , L^{13} 和 M^{11} 形成的环以及由 Y^{13} , L^{13} , L^{14} 和 M^{11} 形成的环每一个优选是 4 ~ 10- 元环, 更优选 5 ~ 7- 元环, 再更优选 5 ~ 6- 元环。

[0091] 在式(I)中, n^{11} 代表0~4的整数。当 M^{11} 是四价金属时, n^{11} 是0。当 M^{11} 是六价金属时, n^{11} 优选是1或2,更优选1。当 M^{11} 是六价金属和 n^{11} 是1时, L^{15} 代表二齿配体。当 M^{11} 是六价金属和 n^{11} 是2时, L^{15} 代表单齿配体。当 M^{11} 是八价金属时, n^{11} 优选是1~4,更优选1或2,再更优选1。当 M^{11} 是八价金属和 n^{11} 是1时, L^{15} 代表四齿配体。当 M^{11} 是八价金属和 n^{11} 是2时, L^{15} 代表二齿配体。当 n^{11} 是2以上时,存在多个 L^{15} ,并且 L^{15} 可以彼此相同或不同。

[0092] 式(I)代表的化合物的优选实施方案包括下式(1)、(2)、(3)、(4)和(5)代表的化合物。

[0093] 首先,说明式(1)代表的化合物。

[0094]



式(1)

[0095] 在式(1)中, M^{21} 代表金属离子;和 Y^{21} 代表连接基或单键或双键。 Y^{23} 和 Y^{23} 每一个代表单键或连接基。 Q^{21} 和 Q^{22} 每一个代表形成含氮杂环的原子团, Y^{21} 和含 Q^{21} 的环之间的键和 Y^{21} 和含 Q^{22} 的环之间的键每一个是单键或双键。 X^{21} 和 X^{22} 每一个独立地代表氧原子、硫原子或者取代或未取代的氮原子。 R^{21} , R^{22} , R^{23} 和 R^{24} 每一个独立地代表氢原子或取代基。 R^{21} 和 R^{22} 可以彼此结合形成环, R^{23} 和 R^{24} 可以彼此结合形成环。 L^{25} 代表与 M^{21} 配位的配体, n^{21} 代表0~4的整数。

[0096] 下面详细说明式(1)代表的化合物。

[0097] 在式 (1) 中, M^{21} 的定义与式 (I) 中的 M^{11} 的定义相同, 其优选范围也相同。

[0098] Q^{21} 和 Q^{22} 每一个独立地代表形成含氮杂环（含有与 M^{21} 配位的氮原子的环）的原子团。由 Q^{21} 和 Q^{22} 形成的含氮杂环没有特别限制，可以选自例如吡啶环、吡嗪环、嘧啶环、哒嗪环、三嗪环、吡唑环、咪唑环、噻唑环、噁唑环、吡咯环、三唑环和含有一个以上的上述环的稠环（例如，喹啉环、喹喔啉环、酞嗪环和吲哚环、苯并噁唑环、苯并咪唑环和吲哚环）和其互变异构体。

[0099] 由 Q^{21} 或 Q^{22} 形成的含氮杂环优选选自吡啶环、吡嗪环、嘧啶环、哒嗪环、三嗪环、吡唑环、咪唑环、噻唑环、噁唑环、吡咯环和含有一个以上的上述环的稠环（例如，喹啉环、喹喔啉环、酞嗪环、吲哚环、苯并噁唑环和苯并咪唑环）和其互变异构体，更优选选自吡啶环、吡嗪环、嘧啶环、咪唑环、吡咯环和含有一个以上的上述环的稠环（例如，喹啉环）和其互变异构体，再更优选吡啶环或含有吡啶环的稠环（例如，喹啉环），特别优选吡啶环。

[0100] X^{21} 和 X^{22} 每一个独立地代表氧原子、硫原子或者取代或未取代的氮原子。 X^{21} 和 X^{22} 每一个优选是氧原子、硫原子或者取代的氮原子，更优选氧原子或硫原子，特别优选氧原子。

[0101] Y^{21} 的定义与式 (I) 中的 Y^{11} 的定义相同，其优选范围也相同。

[0102] Y^{22} 和 Y^{23} 每一个独立地代表单键或连接基，优选单键。连接基没有特别限制，其例子包括羰基连接基、硫代羰基连接基、亚烷基、亚烯基、亚芳基、杂亚芳基、氧原子连接基、氮原子连接基、硫原子连接基和包括上述连接基组合的连接基。

[0103] Y^{22} 或 Y^{23} 代表的连接基优选是羰基连接基、亚烷基连接基或亚烯基连接基，更优选羰基连接基或亚烯基连接基，再更优选羰基连接基。

[0104] R^{21} , R^{22} , R^{23} 和 R^{24} 每一个独立地代表氢原子或取代基。取代基没有特别限制，其例子包括烷基（优选具有 1 ~ 30 个碳原子，更优选 1 ~ 20 个碳原子，特别优选 1 ~ 10 个碳原子，其例子包括甲基、乙基、异丙基、叔丁基、正辛基、正癸基、正十六烷基、环丙基、环戊基和环己基）、烯基（优选具有 2 ~ 30 个碳原子，更优选 2 ~ 20 个碳原子，特别优选 2 ~ 10 个碳原子，其例子包括乙烯基、烯丙基、2-丁烯基和 3-戊烯基）、炔基（优选具有 2 ~ 30 个碳原子，更优选 2 ~ 20 个碳原子，特别优选 2 ~ 10 个碳原子，其例子包括炔丙基和 3-戊炔基）、芳基（优选具有 6 ~ 30 个碳原子，更优选 6 ~ 20 个碳原子，特别优选 6 ~ 12 个碳原子，其例子包括苯基、p-甲基苯基、萘基和蒽基）、氨基（优选具有 0 ~ 30 个碳原子，更优选 0 ~ 20 个碳原子，特别优选 0 ~ 10 个碳原子，其例子包括氨基、甲基氨基、二甲基氨基、二乙基氨基、二苄基氨基、二苯基氨基和二甲苯基氨基）、

[0105] 烷氧基（优选具有 1 ~ 30 个碳原子，更优选 1 ~ 20 个碳原子，特别优选 1 ~ 10 个碳原子，其例子包括甲氧基、乙氧基、丁氧基和 2-乙基己氧基）、芳氧基（优选具有 6 ~ 30 个碳原子，更优选 6 ~ 20 个碳原子，特别优选 6 ~ 12 个碳原子，其例子包括苯氧基、1-萘氧基和 2-萘氧基）、杂环氧基（优选具有 1 ~ 30 个碳原子，更优选 1 ~ 20 个碳原子，特别优选 1 ~ 12 个碳原子，其例子包括吡啶氧基、吡唑氧基、嘧啶氧基和喹啉氧基）、酰基（优选具有 1 ~ 30 个碳原子，更优选 1 ~ 20 个碳原子，特别优选 1 ~ 12 个碳原子，其例子包括乙酰基、苯甲酰基、甲酰基和戊酰基）、烷氧基羰基（优选具有 2 ~ 30 个碳原子，更优选 2 ~ 20 个碳原子，特别优选 2 ~ 12 个碳原子，其例子包括甲氧基羰基和乙氧基羰基）、芳氧基羰基（优选具有 7 ~ 30 个碳原子，更优选 7 ~ 20 个碳原子，特别优选 7 ~ 12 个碳原子，其例子包括苯氧基羰基）、

[0106] 酰氧基（优选具有 2 ~ 30 个碳原子，更优选 2 ~ 20 个碳原子，特别优选 2 ~ 10 个碳原子，其例子包括乙酰氧基和苯甲酰氧基）、酰氨基（优选具有 2 ~ 30 个碳原子，更优选 2 ~ 20 个碳原子，特别优选 2 ~ 10 个碳原子，其例子包括乙酰氨基和苯甲酰氨基）、烷氧基羰基氨基（优选具有 2 ~ 30 个碳原子，更优选 2 ~ 20 个碳原子，特别优选 2 ~ 12 个碳原子，其例子包括甲氧基羰基氨基）、芳氧基羰基氨基（优选具有 7 ~ 30 个碳原子，更优选 7 ~ 20 个碳原子，特别优选 7 ~ 12 个碳原子，其例子包括苯氧基羰基氨基等）、磺酰氨基（优选具有 1 ~ 30 个碳原子，更优选 1 ~ 20 个碳原子，特别优选 1 ~ 12 个碳原子，其例子包括甲烷磺酰氨基和苯磺酰氨基）、氨磺酰基（优选具有 0 ~ 30 个碳原子，更优选 0 ~ 20 个碳原子，特别优选 0 ~ 12 个碳原子，其例子包括氨磺酰基、甲基氨磺酰基、二甲基氨磺酰基和苯基氨磺酰基）、

[0107] 氨基甲酰基（优选具有 1 ~ 30 个碳原子，更优选 1 ~ 20 个碳原子，特别优选 1 ~ 12 个碳原子，其例子包括氨基甲酰基、甲基氨基甲酰基、二乙基氨基甲酰基和苯基氨基甲酰基）、烷硫基（优选具有 1 ~ 30 个碳原子，更优选 1 ~ 20 个碳原子，特别优选 1 ~ 12 个碳原子，其例子包括甲硫基和乙硫基）、芳硫基（优选具有 6 ~ 30 个碳原子，更优选 6 ~ 20 个碳原子，特别优选 6 ~ 12 个碳原子，其例子包括苯硫基）、杂环硫基（优选具有 1 ~ 30 个碳原子，更优选 1 ~ 20 个碳原子，特别优选 1 ~ 12 个碳原子，其例子包括吡啶硫基、2- 苯并咪唑硫基、2- 苯并噁唑硫基和 2- 苯并噻唑硫基）、磺酰基（优选具有 1 ~ 30 个碳原子，更优选 1 ~ 20 个碳原子，特别优选 1 ~ 12 个碳原子，其例子包括甲磺酰基和甲苯磺酰基）、亚磺酰基（优选具有 1 ~ 30 个碳原子，更优选 1 ~ 20 个碳原子，特别优选 1 ~ 12 个碳原子，其例子包括甲烷亚磺酰基和苯亚磺酰基）、脲基（优选具有 1 ~ 30 个碳原子，更优选 1 ~ 20 个碳原子，特别优选 1 ~ 12 个碳原子，其例子包括脲基、甲基脲基和苯基脲基）、

[0108] 磷酸酰氨基（优选具有 1 ~ 30 个碳原子，更优选 1 ~ 20 个碳原子，特别优选 1 ~ 12 个碳原子，其例子包括二乙基磷酸酰氨基和苯基磷酸酰氨基）、羟基、巯基、卤原子（如氟、氯、溴或碘）、氰基、磺基、羧基、硝基、氧肟酸基团、亚磺酸基、胼基、亚氨基、杂环基（优选具有 1 ~ 30 个碳原子，更优选 1 ~ 12 个碳原子；杂原子可以选自例如氮、氧和硫原子，其例子包括咪唑基、吡啶基、喹啉基、呋喃基、噻吩基、哌啶基、吗啉基、苯并噁唑基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、呋唑基和 azepinyl 基团）、甲硅烷基（优选具有 3 ~ 40 个碳原子，更优选 3 ~ 30 个碳原子，特别优选 3 ~ 24 个碳原子，其例子包括三甲基甲硅烷基和三苯基甲硅烷基）和甲硅烷氧基（优选具有 3 ~ 40 个碳原子，更优选 3 ~ 30 个碳原子，特别优选 3 ~ 24 个碳原子，其例子包括三甲基甲硅烷氧基和三苯基甲硅烷氧基）。这些取代基可以具有取代基。

[0109] 在一个优选实施方案中， R^{21} ， R^{22} ， R^{23} 和 R^{24} 每一个独立地选自烷基或芳基。在另一个优选实施方案中， R^{21} 和 R^{22} 是彼此结合形成环结构（例如，苯并 - 稠环或吡啶 - 稠环）的基团，和 / 或 R^{23} 和 R^{24} 是彼此结合形成环结构（例如，苯并 - 稠环或吡啶 - 稠环）的基团。

[0110] L^{25} 的定义与式 (I) 中的 L^{15} 的定义相同，其优选范围也相同。

[0111] n^{21} 的定义与式 (I) 中的 n^{11} 的定义相同，其优选范围也相同。

[0112] 在式 (I) 中，下面说明优选实施方案的例子：

[0113] (1) 由 Q^{21} 和 Q^{22} 形成的环是吡啶环，和 Y^{21} 是连接基；

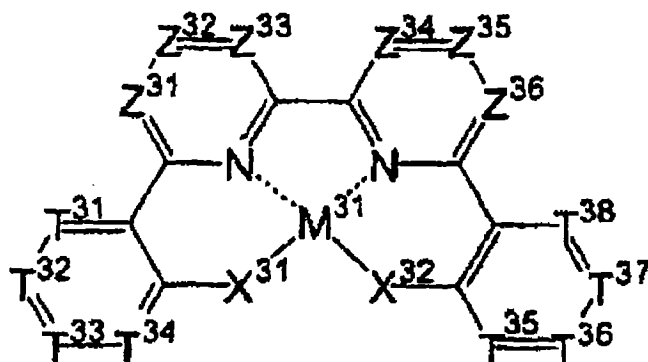
[0114] (2) 由 Q^{21} 和 Q^{22} 形成的环是吡啶环， Y^{21} 是单键或双键，和 X^{21} 和 X^{22} 每一个选自硫

原子、取代的氮原子和未取代的氮原子；

[0115] (3) 由 Q^{21} 和 Q^{22} 形成的环每一个是 5-元含氮杂环,或含有两个以上氮原子的含氮 6-元环。

[0116] 式 (1) 代表的化合物的优选例子是下式 (1-A) 代表的化合物。

[0117]



式(1-A)

[0118] 下面说明式 (1-A) 代表的化合物。

[0119] 在式 (1-A) 中, M^{31} 的定义与式 (I) 中 M^{11} 的定义相同,其优选范围也相同。

[0120] $Z^{31}, Z^{32}, Z^{33}, Z^{34}, Z^{35}$ 和 Z^{36} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子或氮原子,优选取代或未取代的碳原子。碳上的取代基可以选自在式 (1) 中作为 R^{21} 的例子的取代基。 Z^{31} 和 Z^{32} 可以通过连接基彼此结合形成稠环 (例如, 苯并-稠环或吡啶-稠环)。 Z^{32} 和 Z^{33} 可以通过连接基彼此结合形成稠环 (例如, 苯并-稠环或吡啶-稠环)。 Z^{33} 和 Z^{34} 可以通过连接基彼此结合形成稠环 (例如, 苯并-稠环或吡啶-稠环)。 Z^{34} 和 Z^{35} 可以通过连接基彼此结合形成稠环 (例如, 苯并-稠环或吡啶-稠环)。 Z^{35} 和 Z^{36} 可以通过连接基彼此结合形成稠环 (例如, 苯并-稠环或吡啶-稠环)。 Z^{31} 和 T^{31} 可以通过连接基彼此结合形成稠环 (例如, 苯并-稠环或吡啶-稠环)。 Z^{36} 和 T^{38} 可以通过连接基彼此结合形成稠环 (例如, 苯并-稠环或吡啶-稠环)。

[0121] 碳上的取代基优选是烷基、烷氧基、烷基氨基、芳基、能够形成稠环 (例如, 苯并-稠环或吡啶-稠环) 的基团、或卤原子,更优选烷基氨基、芳基或能够形成稠环 (例如, 苯并-稠环或吡啶-稠环) 的基团,再更优选芳基或能够形成稠环 (例如, 苯并-稠环或吡啶-稠环) 的基团,特别优选能够形成稠环 (例如, 苯并-稠环或吡啶-稠环) 的基团。

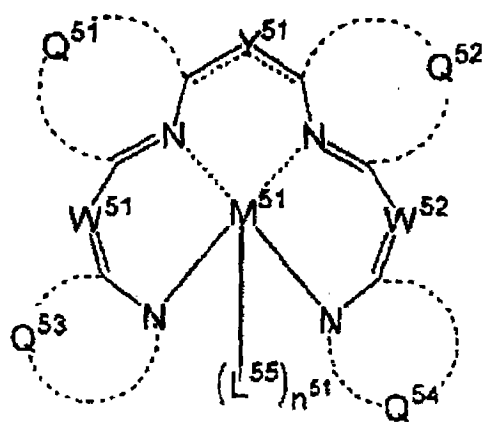
[0122] $T^{31}, T^{32}, T^{33}, T^{34}, T^{35}, T^{36}, T^{37}$ 和 T^{38} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子或氮原子,更优选取代或未取代的碳原子。碳上的取代基的例子包括在式 (1) 中作为 R^{21} 的例子的基团; T^{31} 和 T^{32} 可以通过连接基彼此结合形成稠环 (例如, 苯并-稠环)。 T^{32} 和 T^{33} 可以通过连接基彼此结合形成稠环 (例如, 苯并-稠环)。 T^{33} 和 T^{34} 可以通过连接基彼此结合形成稠环 (例如, 苯并-稠环)。 T^{35} 和 T^{36} 可以通过连接基彼此结合形成稠环 (例如, 苯并-稠环)。 T^{36} 和 T^{37} 可以通过连接基彼此结合形成稠环 (例如, 苯并-稠环)。 T^{37} 和 T^{38} 可以通过连接基彼此结合形成稠环 (例如, 苯并-稠环)。

[0123] 碳上的取代基优选是烷基、烷氧基、烷基氨基、芳基、能够形成稠环 (例如, 苯并-稠环或吡啶-稠环) 的基团、或卤原子;更优选芳基、能够形成稠环 (例如, 苯并-稠环或吡啶-稠环) 的基团、或卤原子;再更优选芳基或卤原子,特别优选芳基。

[0124] X^{31} 和 X^{32} 独立地选择, X^{31} 和 X^{32} 的定义和优选范围分别与式 (1) 中的 X^{21} 和 X^{22} 的定义和优选范围相同。

[0125] 下面说明式 (2) 代表的化合物。

[0126]



式(2)

[0127] 在式 (2) 中, M^{51} 的定义与式 (I) 中的 M^{11} 的定义相同, 其优选范围也相同。

[0128] Q^{51} 和 Q^{52} 独立地选择, Q^{51} 和 Q^{52} 的定义分别与式 (1) 中的 Q^{21} 和 Q^{22} 的定义相同, 其优选的范围也分别相同。

[0129] Q^{53} 和 Q^{54} 每一个独立地代表形成含氮杂环 (含有与 M^{51} 配位的氮原子的环) 的基团。由 Q^{53} 和 Q^{54} 形成的含氮杂环没有特别限制, 优选选自吡咯衍生物的互变异构体 (例如, JP-A No. 2007-103493 中所示的化合物 (24) 所含的 5- 元杂环配体、化合物 (64) 所含的末端 5- 元杂环配体和化合物 (145) 所含的 5- 元杂环配体)、咪唑衍生物的互变异构体 (例如, JP-A No. 2007-103493 中所示的化合物 (29) 所含的 5- 元杂环配体)、噻唑衍生物的互变异构体 (例如, JP-A No. 2007-103493 中所示的化合物 (30) 所含的 5- 元杂环配体) 和噁唑衍生物的互变异构体 (例如, JP-A No. 2007-103493 中所示的化合物 (31) 所含的 5- 元杂环配体), 更优选选自吡咯、咪唑和噻唑衍生物的互变异构体; 再更优选选自吡咯和咪唑衍生物的互变异构体; 特别优选选自吡咯衍生物的互变异构体。

[0130] Y^{51} 的定义与式 (I) 中的 Y^{11} 的定义相同, 其优选范围也相同。

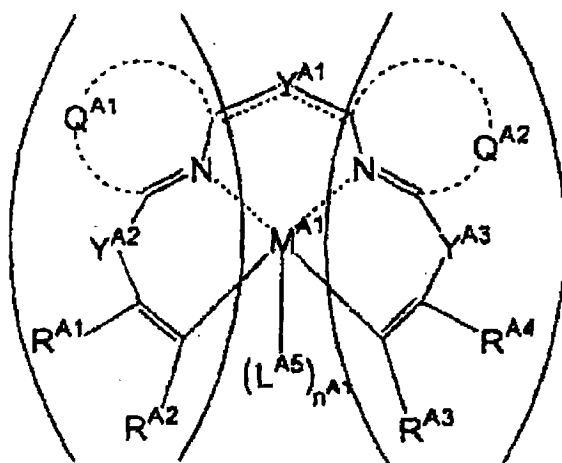
[0131] L^{55} 的定义与式 (I) 中的 L^{15} 的定义相同, 其优选范围也相同。

[0132] n^{51} 的定义与上述 n^{11} 的定义相同, 其优选范围也相同。

[0133] W^{51} 和 W^{52} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子或氮原子, 更优选未取代的碳原子或氮原子, 再更优选未取代的碳原子。

[0134] 下面说明式 (3) 代表的化合物。

[0135]



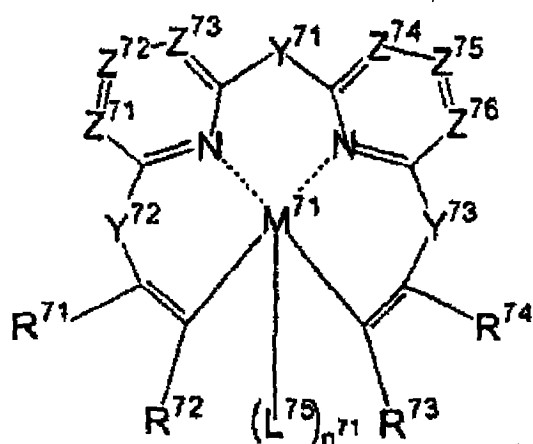
式(3)

[0136] 在式(3)中, M^{A1} , Q^{A1} , Q^{A2} , Y^{A1} , Y^{A2} , Y^{A3} , R^{A1} , R^{A2} , R^{A3} , R^{A4} , L^{A5} 和 n^{A1} 的定义和优选范围分别与式(1)中的 M^{21} , Q^{21} , Q^{22} , Y^{21} , Y^{22} , Y^{23} , R^{21} , R^{22} , R^{23} , R^{24} , L^{25} 和 n^{21} 的定义和优选范围相同。

[0137] 式(3)代表的化合物的优选例子是下式(3-B)代表的化合物。

[0138] 下面说明式(3-B)代表的化合物。

[0139]



式(3-B)

[0140] 在式(3-B)中, M^{71} 的定义与式(1)中 M^{11} 的定义相同, 其优选范围也相同。

[0141] Y^{71} , Y^{72} 和 Y^{73} 的定义和优选范围分别与式(1)中的 Y^{21} , Y^{22} 和 Y^{23} 的定义和优选范围相同。

[0142] L^{75} 的定义与式(1)中的 L^{15} 的定义相同, 其优选范围也相同。

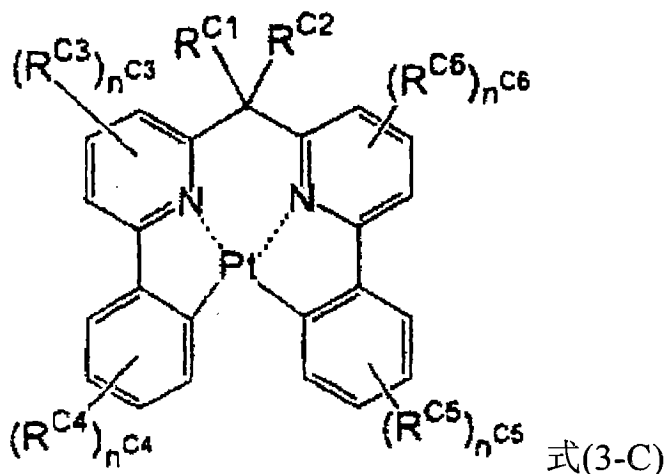
[0143] n^{71} 的定义与式(1)中的 n^{11} 的定义相同, 其优选范围也相同。

[0144] Z^{71} , Z^{72} , Z^{73} , Z^{74} , Z^{75} 和 Z^{76} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子或氮原子, 更优选取代或未取代的碳原子。碳上的取代基的例子包括在式(1)中作为 R^{21} 的例子的基团。此外, R^{71} 和 R^{72} 可以通过连接基彼此结合形成环(例如, 苯环或吡啶环)。 R^{73} 和 R^{74} 可以通过连接基彼此结合形成环(例如, 苯环或吡啶环)。 $R^{71} \sim R^{74}$ 的定义和优选范围分别与式(1)中的 $R^{21} \sim R^{24}$ 的定义和优选范围相同。

[0145] 式(3-B)代表的化合物的优选例子包括下式(3-C)代表的化合物。

[0146] 下面说明式(3-C)代表的化合物。

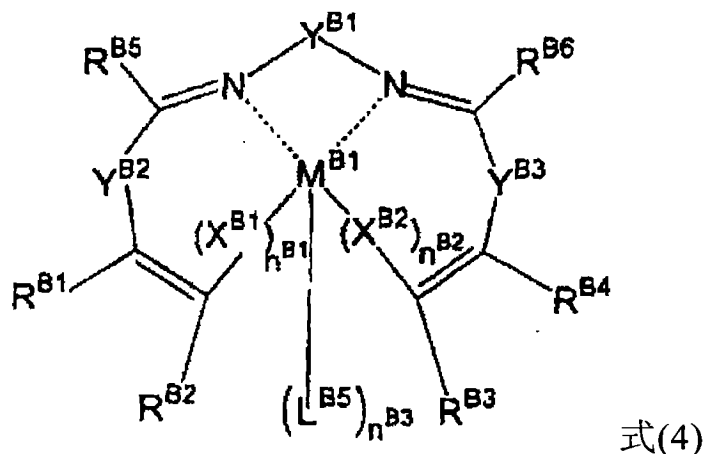
[0147]



[0148] 在式 (3-C) 中, R^{C1} 和 R^{C2} 每一个独立地代表氢原子或取代基, 并且取代基可以选自烷基、芳基和杂环基 (这些基团可以被进一步取代, 其中进一步的取代基可以选自上面在式 (1) 中作为 R^{21} 代表的取代基的例子所述的那些以及卤原子。 R^{C3} , R^{C4} , R^{C5} 和 R^{C6} 每一个独立地代表氢原子或取代基, 并且取代基可以选自在式 (1) 中作为 $R^{21} \sim R^{24}$ 的例子的取代基。每个 n^{C3} 和 n^{C6} 代表 $0 \sim 3$ 的整数; 每个 n^{C4} 和 n^{C5} 代表 $0 \sim 4$ 的整数; 当存在多个 R^{C3} , R^{C4} , R^{C5} 或 R^{C6} 时, 多个 R^{C3} , R^{C4} , R^{C5} 或 R^{C6} 可以彼此相同或彼此不同, 并且可以通过连接基彼此结合形成环。 R^{C3} , R^{C4} , R^{C5} 或 R^{C6} 每一个优选代表烷基、芳基、杂芳基、氰基或卤原子。

[0149] 下面说明式 (4) 代表的化合物。

[0150]



[0151] 在式 (4) 中, M^{B1} , Y^{B2} , Y^{B3} , R^{B1} , R^{B2} , R^{B3} , R^{B4} , L^{B5} , n^{B3} , X^{B1} 和 X^{B2} 的定义和优选范围分别与式 (1) 中的 M^{21} , Y^{22} , Y^{23} , R^{21} , R^{22} , R^{23} , R^{24} , L^{25} , n^{21} , X^{21} 和 X^{22} 的定义和优选范围相同。

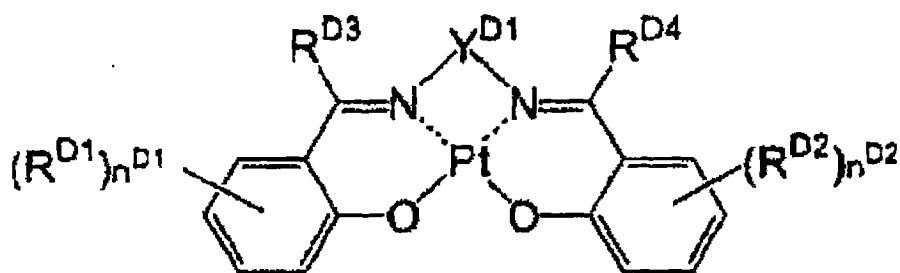
[0152] Y^{B1} 代表定义与式 (1) 中的 Y^{21} 相同的连接基。 Y^{B1} 优选是在 1- 和 / 或 2- 位取代的乙烯基、亚苯基环、吡啶环、吡嗪环、嘧啶环或具有 $2 \sim 8$ 个碳原子的亚烷基。

[0153] R^{B5} 和 R^{B6} 每一个独立地代表氢原子或取代基, 并且取代基可以选自在式 (1) 中作为 $R^{21} \sim R^{24}$ 的例子所述的烷基、芳基和杂环基。然而, Y^{B1} 不与 R^{B5} 或 R^{B6} 结合。 n^{B1} 和 n^{B2} 每一个独立地代表 0 或 1 的整数。

[0154] 式 (4) 代表的化合物的优选例子包括下式 (4-A) 代表的化合物。

[0155] 下面说明式 (4-A) 代表的化合物。

[0156]

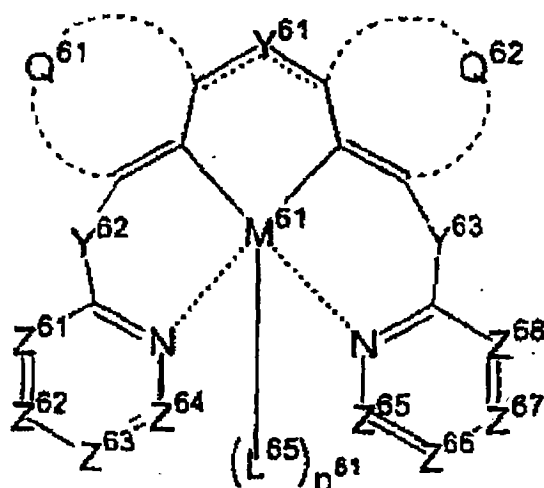


式(4-A)

[0157] 在式 (4-A) 中, R^{D3} 和 R^{D4} 每一个独立地代表氢原子或取代基, 和 R^{D1} 和 R^{D2} 每一个代表取代基。 R^{D1} , R^{D2} , R^{D3} 和 R^{D4} 代表的取代基可以选自在式 (4) 中作为 R^{B5} 和 R^{B6} 的例子的取代基, 并且与式 (4) 中的 R^{B5} 和 R^{B6} 具有相同的优选范围。 n^{D1} 和 n^{D2} 每一个代表 0 ~ 4 的整数。当存在多个 R^{D1} 时, 多个 R^{D1} 可以彼此相同或不同或可以彼此结合形成环。当存在多个 R^{D2} 时, 多个 R^{D2} 可以彼此相同或不同或可以彼此结合形成环。 Y^{D1} 代表在 1- 和 / 或 2- 位取代的乙烯基、亚苯基环、吡啶环、吡嗪环、嘧啶环或具有 1 ~ 8 个碳原子的亚烷基。

[0158] 下面说明式 (5) 代表的化合物。

[0159]



式(5)

[0160] 在式 (5) 中, M^{61} 的定义与式 (I) 中的 M^{11} 的定义相同, 其优选范围也相同。

[0161] Q^{61} 和 Q^{62} 每一个独立地代表环形成基团。由 Q^{61} 和 Q^{62} 形成的环没有特别限制, 其例子包括苯环、吡啶环、吡嗪环、嘧啶环、噻吩环、异噻唑环、呋喃环、异噻唑环和其稠环。

[0162] 每个由 Q^{61} 和 Q^{62} 形成的环优选是苯环、吡啶环、噻吩环、噻唑环或含有一个以上的上述环的稠环; 更优选苯环、吡啶环或含有一个以上的上述环的稠环; 再更优选苯环或含有苯环的稠环。

[0163] Y^{61} 的定义与式 (I) 中的 Y^{11} 的定义相同, 其优选范围也相同。

[0164] Y^{62} 和 Y^{63} 每一个独立地代表连接基或单键。连接基没有特别限制, 其例子包括羰基连接基、硫代羰基连接基、亚烷基、亚烯基、亚芳基、亚杂芳基、氧原子连接基、氮原子连接基和包括上述连接基组合的连接基。

[0165] Y^{62} 和 Y^{63} 每一个独立地选自, 优选单键、羰基连接基、亚烷基连接基和亚烯基, 更优选单键和亚烯基, 再更优选单键。

[0166] L^{65} 的定义与式 (I) 中的 L^{15} 的定义相同,其优选范围也相同。

[0167] n^{61} 的定义与式 (I) 中的 n^{11} 的定义相同,其优选范围也相同。

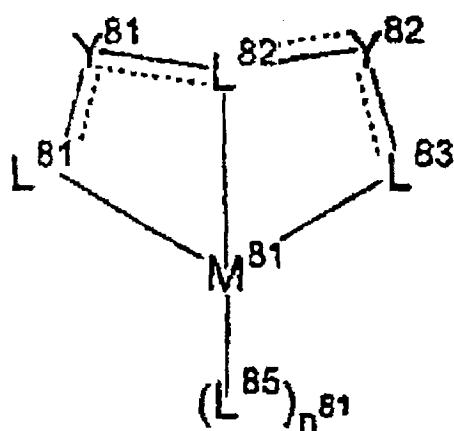
[0168] $[0125]Z^{61}, Z^{62}, Z^{63}, Z^{64}, Z^{65}, Z^{66}, Z^{67}$ 和 Z^{68} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子或氮原子,优选取代或未取代的碳原子。碳上的取代基的例子包括在式 (I) 中作为 R^{21} 的例子的基团。 Z^{61} 和 Z^{62} 可以通过连接基彼此结合形成稠环(例如,苯并-稠环或吡啶-稠环)。 Z^{62} 和 Z^{63} 可以通过连接基彼此结合形成稠环(例如,苯并-稠环或吡啶-稠环)。 Z^{63} 和 Z^{64} 可以通过连接基彼此结合形成稠环(例如,苯并-稠环或吡啶-稠环)。 Z^{65} 和 Z^{66} 可以通过连接基彼此结合形成稠环(例如,苯并-稠环或吡啶-稠环)。 Z^{66} 和 Z^{67} 可以通过连接基彼此结合形成稠环(例如,苯并-稠环或吡啶-稠环)。 Z^{67} 和 Z^{68} 可以通过连接基彼此结合形成稠环(例如,苯并-稠环或吡啶-稠环)。由 Q^{61} 形成的环可以通过连接基与 Z^{61} 结合形成环。由 Q^{62} 形成的环可以通过连接基与 Z^{68} 结合形成环。

[0169] 碳上的取代基优选是烷基、烷氧基、烷基氨基、芳基、能够形成稠环(例如,苯并-稠环或吡啶-稠环)的基团、或卤原子,更优选烷基氨基、芳基或能够形成稠环(例如,苯并-稠环或吡啶-稠环)的基团,再更优选芳基或能够形成稠环(例如,苯并-稠环或吡啶-稠环)的基团,特别优选能够形成稠环(例如,苯并-稠环或吡啶-稠环)的基团。

[0170] 根据本发明的具有三齿配体的金属络合物的优选例子包括下式 (II) 代表的化合物。

[0171] 下面说明式 (II) 代表的化合物。

[0172]



式(II)

[0173] 在式 (II) 中, M^{81} 的定义与式 (I) 中的 M^{11} 的定义相同,其优选范围也相同。

[0174] L^{81}, L^{82} 和 L^{83} 独立地选择, L^{81}, L^{82} 和 L^{83} 的定义和优选范围分别与式 (I) 中的 L^{11}, L^{12} 和 L^{13} 的定义和优选范围相同。

[0175] Y^{81} 和 Y^{82} 独立地选择, Y^{81} 和 Y^{82} 的定义和优选范围分别与式 (I) 中的 Y^{12} 和 Y^{13} 的定义和优选范围相同。

[0176] L^{85} 代表与 M^{81} 配位的配体。 L^{85} 优选是单至三-齿配体,更优选单齿至三齿阴离子配体。单至三-齿阴离子配体没有特别限制,但优选是卤素配体或 $L^{81}, Y^{81}, L^{82}, Y^{82}$ 和 L^{83} 可以形成的三齿配体,更优选 $L^{81}, Y^{81}, L^{82}, Y^{82}$ 和 L^{83} 可以形成的三齿配体。 L^{85} 不与 L^{81} 或 L^{83} 直接结合。配位位置的数量和配体的数量不超出金属的价态。

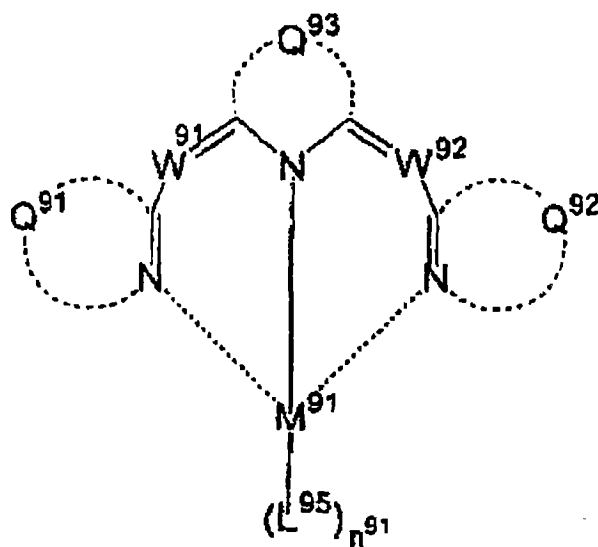
[0177] n^{81} 代表 0 ~ 5 的整数。当 M^{81} 是四价金属时, n^{81} 是 1, 和 L^{85} 代表单齿配体。当 M^{81} 是六价金属时, n^{81} 优选是 1 ~ 3, 更优选 1 或 3, 再更优选 1。当 M^{81} 是六价和 n^{81} 是 1 时, L^{85} 代表三齿配体。当 M^{81} 是六价和 n^{81} 是 2 时, L^{85} 代表单齿配体和二齿配体。当 M^{81} 是六价和 n^{81} 是 3 时, L^{85} 代表单齿配体。当 M^{81} 是八价金属时, n^{81} 优选是 1 ~ 5, 更优选 1 或 2, 再更优选 1。当 M^{81} 是八价和 n^{81} 是 1 时, L^{85} 代表五齿配体。当 M^{81} 是八价和 n^{81} 是 2 时, L^{85} 代表三齿配体和二齿配体。当 M^{81} 是八价和 n^{81} 是 3 时, L^{85} 代表三齿配体和两个单齿配体, 或代表两个二齿配体和一个单齿配体。当 M^{81} 是八价和 n^{81} 是 4 时, L^{85} 代表一个二齿配体和三个单齿配体。当 M^{81} 是八价和 n^{81} 是 5 时, L^{85} 代表五个单齿配体。当 n^{81} 是 2 或更大时, 存在多个 L^{85} , 并且多个 L^{85} 可以彼此相同或不同。

[0178] 在式 (II) 代表的化合物的优选例子中, L^{81} , L^{82} 或 L^{83} 每一个代表含有与 M^{81} 配位的碳原子的芳香族碳环、含有与 M^{81} 配位的碳原子的杂环或含有与 M^{81} 配位的氮原子的含氮杂环, 其中 L^{81} , L^{82} 和 L^{83} 中的至少一个是含氮杂环。含有与 M^{81} 配位的碳原子的芳香族碳环、含有与 M^{81} 配位的碳原子的杂环或含有与 M^{81} 配位的氮原子的含氮杂环的例子包括在说明式 (I) 时所述的式 (I) 中的含有与 M^{11} 配位的氮或碳原子的配体 (部分) 的例子。其优选例子与式 (I) 中的含有与 M^{11} 配位的氮或碳原子的配体 (部分) 的说明中相同。 Y^{81} 和 Y^{82} 每一个优选代表单键或亚甲基。

[0179] 式 (II) 代表的化合物的其他优选例子包括下式 (II-A) 代表的化合物和下式 (II-B) 代表的化合物。

[0180] 下面说明式 (II-A) 代表的化合物。

[0181]



式(II-A)

[0182] 在式 (II-A) 中, M^{91} 的定义与式 (II) 中 M^{81} 的定义相同, 其优选范围也相同。

[0183] Q^{91} 和 Q^{92} 每一个代表形成含氮杂环 (含有与 M^{91} 配位的氮原子的环) 的基团。由 Q^{91} 和 Q^{92} 形成的含氮杂环没有特别限制, 其例子包括吡啶环、吡嗪环、嘧啶环、哒嗪环、三嗪环、噻唑环、噁唑环、吡咯环、吡唑环、咪唑、三唑环和含有一个以上的上述环的稠环 (例如, 喹啉环、苯并噁唑环、苯并咪唑环和吲哚环) 和其互变异构体。

[0184] 每个由 Q^{91} 和 Q^{92} 形成的含氮杂环优选是吡啶环、吡唑环、噻唑环、咪唑环、吡咯环、

含有一个以上的上述环的稠环（例如，喹啉环、苯并噻唑环、苯并咪唑环，或吲哚环）或任一上述环的互变异构体；更优选吡啶环、吡咯环、含有一个以上的上述环的稠环（例如，喹啉环）或任一上述环的互变异构体；再更优选吡啶环或含有吡啶环的稠环（例如，喹啉环）；特别优选吡啶环。

[0185] Q^{93} 代表形成含氮杂环（含有与 M^{91} 配位的氮原子的环）的基团。由 Q^{93} 形成的含氮杂环没有特别限制，但优选是吡咯环、咪唑环、三唑环的互变异构体或含有一个以上的上述环的稠环（例如，苯并吡咯），更优选吡咯环的互变异构体或含有吡咯环的稠环的互变异构体（例如，苯并吡咯）。

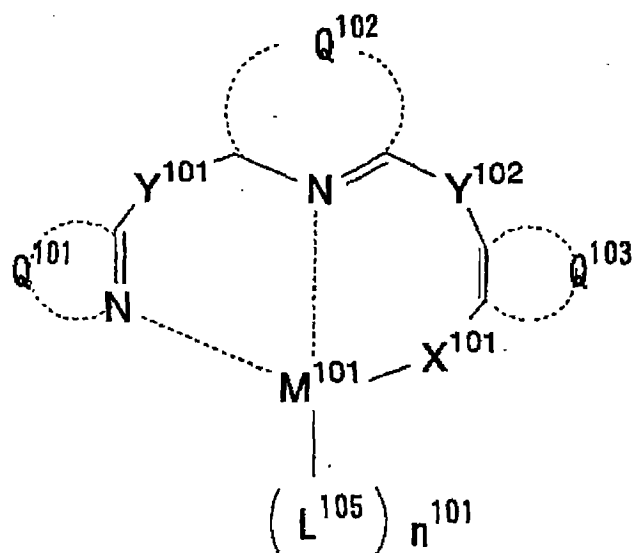
[0186] W^{91} 和 W^{92} 独立地选择， W^{91} 和 W^{92} 的定义和优选范围分别与式 (2) 中的 W^{51} 和 W^{52} 的定义和优选范围相同。

[0187] L^{95} 的定义与式 (II) 中的 L^{85} 的定义相同，其优选范围也相同。

[0188] n^{91} 的定义与式 (II) 中的 n^{81} 的定义相同，其优选范围也相同。

[0189] 下面说明式 (II-B) 代表的化合物。

[0190]



式(II-B)

[0191] 在式 (II-B) 中， M^{101} 的定义与式 (II) 中的 M^{81} 的定义相同，其优选范围也相同。

[0192] Q^{102} 的定义与式 (1) 中的 Q^{21} 的定义相同，其优选范围也相同。

[0193] Q^{101} 的定义与式 (II-A) 中的 Q^{91} 的定义相同，其优选范围也相同。

[0194] Q^{103} 代表形成芳香族环的基团。由 Q^{103} 形成的芳香族环没有特别限制，但优选是苯环、呋喃环、噻吩环、吡咯环或含有一个以上的上述环的稠环（例如，萘环、苯并呋喃环、苯并噻吩环或吲哚环），更优选苯环或含有苯环的稠环（例如，萘环），特别优选苯环。

[0195] Y^{101} 和 Y^{102} 独立地选择， Y^{101} 和 Y^{102} 的定义和优选范围与式 (1) 中的 Y^{22} 的定义和优选范围相同。

[0196] L^{105} 的定义与式 (II) 中的 L^{85} 的定义相同，其优选范围也相同。

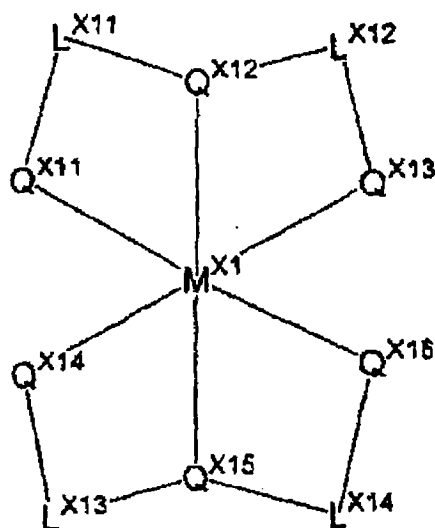
[0197] n^{101} 的定义与式 (II) 中的 n^{81} 的定义相同，其优选范围也相同。

[0198] X^{101} 的定义与式 (1) 中的 X^{21} 的定义相同，其优选范围也相同。

[0199] 根据本发明的含有三齿配体的金属络合物的另一个优选实施方案是下式

(II-C) 代表的化合物。

[0200]



式(II-C)

[0201] 在式 (II-C) 中, M^{X1} 代表金属离子。 $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ 每一个独立地代表与 M^{X1} 配位的原子或含有与 M^{X1} 配位的原子的原子团。 $L^{X11} \sim L^{X14}$ 每一个独立地代表单键、双键或连接基。

[0202] 即, 在式 (II-C) 中, 包括 $Q^{X11}-L^{X11}-Q^{X12}-L^{X12}-Q^{X13}$ 的原子团和包括 $Q^{X14}-L^{X13}-Q^{X15}-L^{X14}-Q^{X16}$ 的原子团均形成三齿配体。

[0203] 此外, M^{X1} 和每个 $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ 之间的键可以是配位键、离子键或共价键之一。

[0204] 下面详细说明式 (II-C) 代表的化合物。

[0205] 在式 (II-C) 中, M^{X1} 代表金属离子。金属离子没有特别限制, 但优选是单价至三价金属离子, 更优选二价或三价金属离子, 再更优选三价金属离子。具体而言, 铂离子、铱离子、铈离子、钪离子、钇离子、镧离子、铈离子、钕离子、铜离子、镧离子、钐离子和铕离子是优选的。其中, 铈离子和镧离子是更优选的, 铈离子是再更优选的。

[0206] $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ 每一个代表与 M^{X1} 配位的原子或含有与 M^{X1} 配位的原子的原子团。

[0207] 当 $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ 任一是与 M^{X1} 配位的原子时, 原子的具体例子包括碳原子、氮原子、氧原子、硅原子、磷原子和硫原子。原子的优选具体例子包括氮原子、氧原子、硫原子和磷原子。原子的更优选具体例子包括氮原子和氧原子。

[0208] 当 $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ 任一是含有与 M^{X1} 配位的碳原子的原子团时, 通过碳原子与 M^{X1} 配位的原子团的例子包括亚氨基、芳香族烃环基团 (如苯环基团或萘环基团)、杂环基 (如噻吩基团、吡啶基团、吡嗪基团、嘧啶基团、哒嗪基团、三嗪基团、噻唑基团、噁唑基团、吡咯基团、咪唑基团、吡唑基团或三唑基团), 含有一个以上的上述环的稠环和其互变异构体。

[0209] 当 $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ 任一是含有与 M^{X1} 配位的氮原子的原子团时, 通过氮原子与 M^{X1} 配位的原子团的例子包括含氮杂环基、氨基和亚氨基。含氮杂环基的例子包括吡啶、吡嗪、嘧啶、哒嗪、三嗪、噻唑、噁唑、吡咯、咪唑、吡唑或三唑基团。氨基的例子包括烷基氨基 [优选具有 2 ~ 30 个碳原子, 更优选 2 ~ 20 个碳原子, 特别优选 2 ~ 10 个碳原子, 其例子包括甲基氨基)、芳基氨基 (例如, 苯基氨基)]、酰氨基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子, 更优选 2 ~ 20 个碳原子, 特别优选 2 ~ 10 个碳原子, 其例子包括乙酰氨基和苯甲酰氨基)、烷氧基羰基氨基

(优选具有 2 ~ 30 个碳原子,更优选 2 ~ 20 个碳原子,特别优选 2 ~ 12 个碳原子,其例子包括甲氧基羰基氨基)、芳氧基羰基氨基(优选具有 7 ~ 30 个碳原子,更优选 7 ~ 20 个碳原子,特别优选 7 ~ 12 个碳原子,其例子包括苯氧基羰基氨基)和磺酰氨基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,其例子包括甲烷磺酰氨基和苯磺酰氨基)。这些基团可具有取代基。

[0210] 当 $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ 任一是含有与 M^{X1} 配位的氧原子的原子团时,通过氧原子与 M^{X1} 配位的原子团的例子包括烷氧基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 10 个碳原子,其例子包括甲氧基、乙氧基、丁氧基和 2-乙基己氧基)、芳氧基(优选具有 6 ~ 30 个碳原子,更优选 6 ~ 20 个碳原子,特别优选 6 ~ 12 个碳原子,其例子包括苯氧基、1-萘氧基和 2-萘氧基)、杂环氧基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,其例子包括吡啶氧基、吡唑氧基、嘧啶氧基和喹啉氧基)、酰氧基(优选具有 2 ~ 30 个碳原子,更优选 2 ~ 20 个碳原子,特别优选 2 ~ 10 个碳原子,其例子包括乙酰氧基和苯甲酰氧基)、甲硅烷氧基(优选具有 3 ~ 40 个碳原子,更优选 3 ~ 30 个碳原子,特别优选 3 ~ 24 个碳原子,其例子包括三甲基甲硅烷氧基和三苯基甲硅烷氧基)、羰基(例如,酮基团、酯基团和酰氨基)和醚基团(例如,二烷基醚基团、二芳基醚基团和呋喃基)。

[0211] 当 $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ 任一是含有与 M^{X1} 配位的硅原子的原子团时,通过硅原子与 M^{X1} 配位的原子团的例子包括烷基甲硅烷基(优选具有 3 ~ 30 个碳原子,其例子包括三甲基甲硅烷基)和芳基甲硅烷基(优选地,具有 18 ~ 30 个碳原子,其例子包括三苯基甲硅烷基)。这些基团可以具有取代基。

[0212] 当 $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ 任一是含有与 M^{X1} 配位的硫原子的原子团时,通过硫原子与 M^{X1} 配位的原子团的例子包括烷硫基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,其例子包括甲硫基和乙硫基)、芳硫基(优选具有 6 ~ 30 个碳原子,更优选 6 ~ 20 个碳原子,特别优选 6 ~ 12 个碳原子,其例子包括苯硫基)、杂环硫基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,其例子包括吡啶硫基、2-苯并咪唑硫基、2-苯并噁唑硫基和 2-苯并噻唑硫基)、硫代羰基(例如,硫代酮基和硫代酯基)和硫醚基团(例如,二烷基硫基醚基团、二芳基硫基醚基团和硫代呋喃基)。

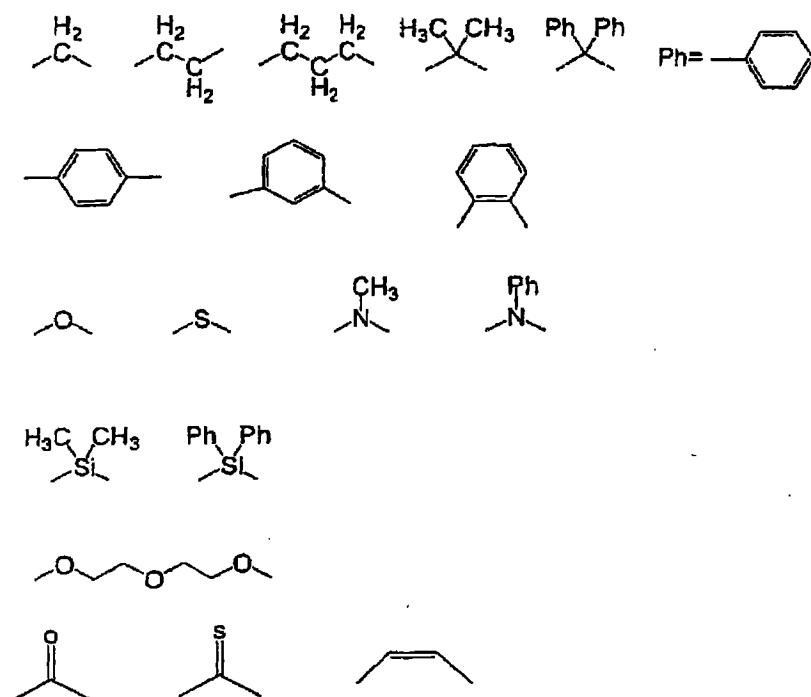
[0213] 当 $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ 任一是含有与 M^{X1} 配位的磷原子的原子团时,通过磷原子与 M^{X1} 配位的原子团的例子包括二烷基膦基团、二芳基膦基团、三烷基膦基团、三芳基膦基团和膦基团。这些基团可以具有取代基。

[0214] $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ 代表的原子团每一个优选是含有与 M^{X1} 配位的碳原子的芳香族烃环基团、含有与 M^{X1} 配位的碳原子的芳香族杂环基、含有与 M^{X1} 配位的氮原子的含氮芳香族杂环基、烷氧基、芳氧基、烷硫基、芳硫基或二烷基膦基团,更优选含有与 M^{X1} 配位的碳原子的芳香族烃环基团、含有与 M^{X1} 配位的碳原子的芳香族杂环基或含有与 M^{X1} 配位的氮原子的含氮芳香族杂环基。

[0215] M^{X1} 和每个 $Q^{X11} \sim Q^{X16}$ 之间的键可以是配位键、离子键或共价键之一。

[0216] 在式 (II-C) 中, $L^{X11} \sim L^{X14}$ 每一个代表单键或双键或连接基。连接基没有特别限制,但优选含有一个以上的选自碳、氮、氧、硫和硅的原子的连接基。连接基的例子包括但不限于以下那些。

[0217]

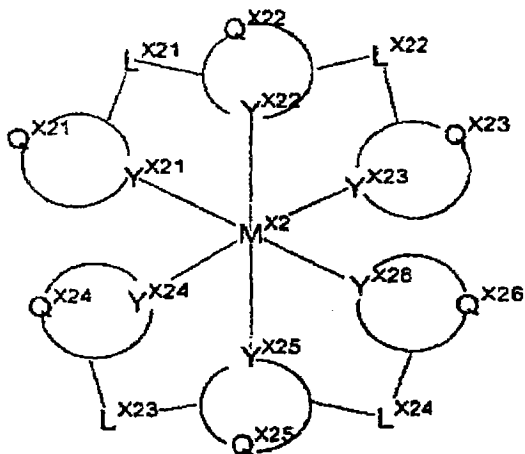


[0218] 这些连接基可以具有取代基,并且取代基可以选自式(2)中 $\text{R}^{21} \sim \text{R}^{24}$ 代表的取代基的例子,其优选范围也与式(2)中 $\text{R}^{21} \sim \text{R}^{24}$ 代表的取代基相同。 $\text{L}^{\text{X}11} \sim \text{L}^{\text{X}14}$ 每一个优选是单键、二甲基亚甲基或二甲基亚甲硅烷基。

[0219] 在式(II-C)代表的化合物中,下式(X2)代表的化合物是更优选的,下式(X3)代表的化合物是再更优选的。

[0220] 首先说明式(X2)代表的化合物。

[0221]



式(X2)

[0222] 在式(X2)中, $\text{M}^{\text{X}2}$ 代表金属离子。 $\text{Y}^{\text{X}21} \sim \text{Y}^{\text{X}26}$ 每一个代表与 $\text{M}^{\text{X}2}$ 配位的原子;和 $\text{Q}^{\text{X}21} \sim \text{Q}^{\text{X}26}$ 每一个代表分别与 $\text{Y}^{\text{X}21} \sim \text{Y}^{\text{X}26}$ 形成芳香族环或芳香族杂环的原子团。 $\text{L}^{\text{X}21} \sim \text{L}^{\text{X}24}$ 每一个代表单键或双键或连接基。 $\text{M}^{\text{X}2}$ 和每个 $\text{Y}^{\text{X}21} \sim \text{Y}^{\text{X}26}$ 之间的键可以是配位键或共价键。

[0223] 下面详细说明式(X2)代表的化合物。

[0224] 在式(X2)中, $\text{M}^{\text{X}2}$ 的定义与式(II-C)中的 $\text{M}^{\text{X}1}$ 相同,其优选范围也相同。 $\text{Y}^{\text{X}21} \sim \text{Y}^{\text{X}26}$ 每一个代表与 $\text{M}^{\text{X}2}$ 配位的原子。 $\text{M}^{\text{X}2}$ 和每个 $\text{Y}^{\text{X}21} \sim \text{Y}^{\text{X}26}$ 之间的键可以是配位键、离子键或共

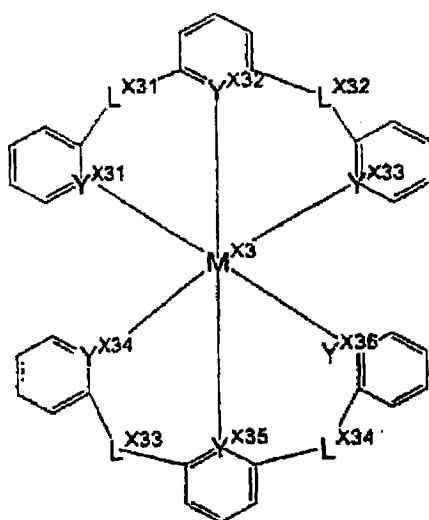
价键之一。每个 $Y^{X21} \sim Y^{X26}$ 是碳原子、氮原子、氧原子、硫原子、磷原子或硅原子, 优选碳原子或氮原子。 $Q^{X21} \sim Q^{X26}$ 代表形成分别含有 $Y^{X21} \sim Y^{X26}$ 的环的原子团, 各环每一个独立地选自芳香族烃环和芳香族杂环。芳香族烃环和芳香族杂环可以选自苯环、吡啶环、吡嗪环、嘧啶环、哒嗪环、三嗪环、吡咯环、吡唑环、咪唑环、三唑环、噁唑环、噻唑环、噁二唑环、噻二唑环、噻吩环和呋喃环; 优选选自苯环、吡啶环、吡嗪环、嘧啶环、吡唑环、咪唑环和三唑环; 更优选选自苯环、吡啶环、吡嗪环、吡唑环和三唑环; 特别优选选自苯环和吡啶环。芳香族环可以具有稠环和 / 或取代基。

[0225] $L^{X21} \sim L^{X24}$ 的定义和优选范围分别与式 (II-C) 中的 $L^{X11} \sim L^{X14}$ 的定义和优选范围相同。

[0226] 下式 (X3) 代表的化合物是式 (II-C) 代表的化合物的更优选例子。

[0227] [0173] 下面说明式 (X3) 代表的化合物。

[0228]



式(X3)

[0229] 在式 (X3) 中, M^{X3} 代表金属离子。 $Y^{X31} \sim Y^{X36}$ 每一个代表碳原子、氮原子或磷原子。 $L^{X31} \sim L^{X34}$ 每一个代表单键、双键或连接基。 M^{X3} 和每个 $Y^{X31} \sim Y^{X36}$ 之间的键可以是配位键、离子键或共价键之一。

[0230] M^{X3} 的定义与式 (II-C) 中的 M^{X1} 的定义相同, 其优选范围也相同。 $Y^{X31} \sim Y^{X36}$ 每一个代表与 M^{X3} 配位的原子。 $Y^{X31} \sim Y^{X36}$ 每一个代表碳原子、氮原子或磷原子, 优选碳原子或氮原子。 $L^{X31} \sim L^{X34}$ 的定义和优选范围分别与式 (II-C) 中的 $L^{X11} \sim L^{X14}$ 的定义和优选范围相同。

[0231] 式 (I) 代表的化合物和式 (II) 代表的化合物的具体例子包括但不限于 JP-ANo. 2007-103493 中记载的化合物 (1) ~ (247)。

[0232] 在上述化合物例子代表的化合物中, 在具有选自含有联吡啶或菲咯啉作为其部分结构的四齿配体、Schiff 碱型四齿配体、苯基联吡啶三齿配体、二苯基吡啶三齿配体和三联吡啶三齿配体的配体的化合物之外的化合物是优选的。

[0233] (本发明中合成金属络合物的方法)

[0234] 本发明中的金属络合物 [式 (I)、(1)、(1-A)、(2)、(3)、(3-B)、(3-C)、(4)、(4-A)、(5)、(II)、(II-A)、(II-B)、(II-C)、(X2) 和 (X3) 代表的化合物] 可以通过各种技术来合

成。

[0235] 例如,在有无溶剂(例如,卤化溶剂、醇溶剂、醚溶剂、酯溶剂、酮溶剂、腈溶剂、酰胺溶剂、砜溶剂、亚砜溶剂或水)存在下,在有无碱(可以选自各种无机碱或有机碱,例如,甲醇钠、叔丁醇钾、三乙胺或碳酸钾)存在下,在室温或更低下,在加热下(除了普通加热技术之外,使用微波加热方式也是有效的),通过配体(或其解离体)和金属化合物的反应,可以获得金属络合物。

[0236] 当合成根据本发明的金属络合物时,反应时间随反应原料的活性而不同,因而没有特别限制。反应时间优选是1分钟至5天,更优选5分钟至3天,再更优选10分钟至1天。

[0237] 合成本发明的金属络合物的反应温度随反应活性变化,因而没有特别限制。反应温度优选是0℃~300℃,更优选5℃~250℃,更优选10℃~200℃。

[0238] 上式(I)、(1)、(1-A)、(2)、(3)、(3-B)、(3-C)、(4)、(4-A)、(5)、(II)、(II-A)、(II-B)、(II-C)、(X2)和(X3)代表的化合物可以通过适宜地选择配体作为所需络合物的部分结构来合成。

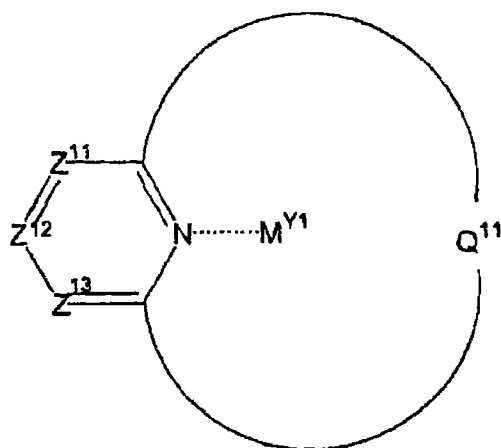
[0239] 例如,式(1-A)代表的化合物可以通过将6,6'-双(2-羟基苯基)-2,2'-联吡啶配体或其衍生物(例如,2,9-双(2-羟基苯基)-1,10-菲咯啉配体、2,9-双(2-羟基苯基)-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉配体或6,6'-双(2-羟基-5-叔丁基苯基)-2,2'-联吡啶配体)等相对于金属化合物以优选0.1~10当量、更优选0.3~6当量、再更优选0.5~4当量的量加入来合成。在合成式(1-A)代表的化合物的方法中,反应溶剂、反应时间和反应温度均与在合成根据本发明的金属络合物的方法中所述的相同。

[0240] 6,6'-双(2-羟基苯基)-2,2'-联吡啶配体的衍生物可以通过使用各种已知方法合成。

[0241] 例如,这种衍生物可以通过使2,2'-联吡啶衍生物(例如,1,10-菲咯啉)和茴香醚衍生物(例如,4-氟茴香醚)以Journal of Organic Chemistry,741,11,(1946)中记载的方法反应来合成。可以在使用卤化的2,2'-联吡啶衍生物(例如,2,9-二溴-1,10-菲咯啉)和2-甲氧基苯基硼酸酯衍生物(例如,2-甲氧基-5-氟苯基硼酸)等作为原料进行Suzuki偶联反应之后,通过使甲基脱保护(通过Journal of Organic Chemistry,741,11,(1946)中记载的方法,或者例如通过在吡啶盐酸盐中加热的方法)来进行合成。作为另一种选择,可以在使用2,2'-联吡啶硼酸衍生物(例如,6,6'-双(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂硼基)-2,2'-联吡啶)和卤化的茴香醚衍生物(例如,2-溴茴香醚)作为原料进行Suzuki偶联反应之后,通过使甲基脱保护(通过Journal of Organic Chemistry,741,11,(1946)中记载的方法,或者例如通过在吡啶盐酸盐中加热的方法)来进行合成。

[0242] 下面,说明下式(III)代表的化合物。

[0243]



式(III)

[0244] 在式 (III) 中, Q^{11} 代表形成含氮杂环的原子团; Z^{11} , Z^{12} 和 Z^{13} 每一个代表取代或未取代的碳原子或氮原子; 和 M^{Y1} 代表可以具有额外配体的金属离子。

[0245] 在式 (III) 中, Q^{11} 代表含有与 Q^{11} 结合的 2 个碳原子和与 2 个碳原子直接结合的氮原子的形成含氮杂环的原子团。构成由 Q^{11} 形成的含氮杂环的原子数量没有特别限制。含氮杂环的环优选含有 12 ~ 20 个原子, 更优选 14 ~ 16 个原子, 更优选 16 个原子。

[0246] Z^{11} , Z^{12} 和 Z^{13} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子或氮原子。关于 Z^{11} , Z^{12} 和 Z^{13} 的组合, Z^{11} , Z^{12} 和 Z^{13} 中的至少一个优选是氮。

[0247] 碳原子上的取代基的例子包括烷基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子, 更优选 1 ~ 20 个碳原子, 特别优选 1 ~ 10 个碳原子, 如甲基、乙基、异丙基、叔丁基、正辛基、正癸基、正十六烷基、环丙基、环戊基和环己基)、烯基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子, 更优选 2 ~ 20 个碳原子, 特别优选 2 ~ 10 个碳原子, 如乙烯基、烯丙基、2-丁烯基和 3-戊烯基)、炔基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子, 更优选 2 ~ 20 个碳原子, 特别优选 2 ~ 10 个碳原子, 如炔丙基和 3-戊炔基);

[0248] 芳基 (优选具有 6 ~ 30 个碳原子, 更优选 6 ~ 20 个碳原子, 特别优选 6 ~ 12 个碳原子, 如苯基、p-甲基苯基、萘基和蒽基)、氨基 (优选具有 0 ~ 30 个碳原子, 更优选 0 ~ 20 个碳原子, 特别优选 0 ~ 10 个碳原子, 如氨基、甲基氨基、二甲基氨基、二乙基氨基、二苄基氨基、二苯基氨基和二甲苯基氨基)、烷氧基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子, 更优选 1 ~ 20 个碳原子, 特别优选 1 ~ 10 个碳原子, 如甲氧基、乙氧基、丁氧基和 2-乙基己氧基)、芳氧基 (优选具有 6 ~ 30 个碳原子, 更优选 6 ~ 20 个碳原子, 特别优选 6 ~ 12 个碳原子, 如苯氧基、1-萘氧基和 2-萘氧基)、杂环氧基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子, 更优选 1 ~ 20 个碳原子, 再优选 1 ~ 12 个碳原子, 如吡啶氧基、吡唑氧基、嘧啶氧基和喹啉氧基);

[0249] 酰基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子, 更优选 1 ~ 20 个碳原子, 特别优选 1 ~ 12 个碳原子, 如乙酰基、苯甲酰基、甲酰基和戊酰基)、烷氧基羰基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子, 更优选 2 ~ 20 个碳原子, 特别优选 2 ~ 12 个碳原子, 如甲氧基羰基和乙氧基羰基)、芳氧基羰基 (优选具有 7 ~ 30 个碳原子, 更优选 7 ~ 20 个碳原子, 特别优选 7 ~ 12 个碳原子, 如苯氧基羰基)、酰氧基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子, 更优选 2 ~ 20 个碳原子, 特别优选 2 ~ 10 个碳原子, 如乙酰氧基和苯甲酰氧基)、酰氨基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子, 更优选 2 ~ 20 个碳原子, 特别优选 2 ~ 10 个碳原子, 如乙酰氨基和苯甲酰氨基);

[0250] 烷氧基羰基氨基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子, 更优选 2 ~ 20 个碳原子, 特别优选

2 ~ 12 个碳原子,如甲氧基羰基氨基)、芳氧基羰基氨基(优选具有 7 ~ 30 个碳原子,更优选 7 ~ 20 个碳原子,特别优选 7 ~ 12 个碳原子,如苯氧基羰基氨基)、磺酰氨基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,如甲烷磺酰氨基和苯磺酰氨基)、氨磺酰基(优选具有 0 ~ 30 个碳原子,更优选 0 ~ 20 个碳原子,特别优选 0 ~ 12 个碳原子,如氨磺酰基、甲基氨磺酰基、二甲基氨磺酰基和苯基氨磺酰基);

[0251] 氨基甲酰基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,如氨基甲酰基、甲基氨基甲酰基、二乙基氨基甲酰基和苯基氨基甲酰基)、烷硫基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,如甲硫基和乙硫基)、芳硫基(优选具有 6 ~ 30 个碳原子,更优选 6 ~ 20 个碳原子,特别优选 6 ~ 12 个碳原子,如苯硫基)、杂环硫基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,如吡啶硫基、2- 苯并咪唑硫基、2- 苯并噁唑硫基和 2- 苯并噻唑硫基)、

[0252] 磺酰基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,其例子包括甲磺酰基和甲苯磺酰基)、亚磺酰基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,其例子包括甲烷亚磺酰基和苯亚磺酰基)、脲基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,其例子包括脲基、甲基脲基和苯基脲基)、磷酸酰氨基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选 1 ~ 20 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子,其例子包括二乙基磷酸酰氨基和苯基磷酸酰氨基)、羟基、巯基、卤原子(例如,氟、氯、溴和碘);

[0253] 氰基、磺基、羧基、硝基、氧肟酸基团,亚磺酸基、胼基、亚氨基、杂环基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,特别优选 1 ~ 12 个碳原子;杂原子可以选自氮、氧和硫原子;杂环基的例子包括咪唑基、吡啶基、喹啉基、呋喃基、噻吩基、吡啶基、吗啉基、苯并噁唑基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、呋唑基和 azepinyl),甲硅烷基(优选具有 3 ~ 40 个碳原子,更优选 3 ~ 30 个碳原子,特别优选 3 ~ 24 个碳原子,其例子包括三甲基甲硅烷基和三苯基甲硅烷基)、甲硅烷氧基(优选具有 3 ~ 40 个碳原子,更优选 3 ~ 30 个碳原子,特别优选 3 ~ 24 个碳原子,其例子包括三甲基甲硅烷氧基和三苯基甲硅烷氧基)等。这些取代基本身可以具有取代基。

[0254] 在这些取代基中,碳原子上的取代基优选是烷基、芳基、杂环基或卤原子,更优选芳基或卤原子,再更优选苯基或氟原子。

[0255] 氮原子上的取代基可以选自作为碳原子上的取代基的例子所述的取代基,并且优选范围也与碳原子上的取代基的情况下相同。

[0256] 在式 (III) 中, M^{Y1} 代表可以具有额外配体的金属离子。 M^{Y1} 优选代表不具有额外配体的金属离子。

[0257] M^{Y1} 代表的金属离子没有特别限制。优选是二价或三价金属离子。二价或三价金属离子优选是钴离子、镁离子、锌离子、钪离子、镍离子、铜离子、铂离子、铅离子、铝离子、铍离子或镉离子,更优选钴离子、镁离子、锌离子、钪离子、镍离子、铜离子、铂离子或铅离子,再更优选铜离子或铂离子,特别优选铂离子。 M^{Y1} 可以与 Q^{11} 中所含的原子结合或不结合,优选与 Q^{11} 中所含的原子结合。

[0258] M^{Y1} 可以具有的额外配体没有特别限制,但优选单齿或二齿配体,更优选二齿配体。

配位原子没有特别限制,但优选氧原子、硫原子、氮原子、碳原子或磷原子,更优选氧原子、氮原子或碳原子,再更优选氧原子或氮原子。

[0259] 式(III)代表的化合物的优选例子包括下式(a)~(j)代表的化合物和其互变异构体。式(III)代表的化合物更优选选自式(a)或(b)代表的化合物和其互变异构体,再更优选选自式(b)代表的化合物和其互变异构体。

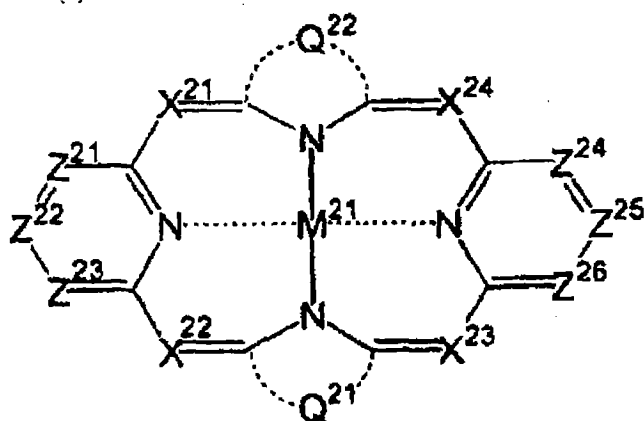
[0260] 式(c)或(g)代表的化合物也优选作为式(III)代表的化合物。

[0261] 式(c)代表的化合物优选是式(d)代表的化合物、式(d)代表的化合物的互变异构体、式(e)代表的化合物、式(e)代表的化合物的互变异构体、式(f)代表的化合物或式(f)代表的化合物的互变异构体;更优选式(d)代表的化合物、式(d)代表的化合物的互变异构体、式(e)代表的化合物或式(e)代表的化合物的互变异构体;再更优选式(d)代表的化合物或式(d)代表的化合物的互变异构体。

[0262] 式(g)代表的化合物优选是式(h)代表的化合物、式(h)代表的化合物的互变异构体、式(i)代表的化合物、式(i)代表的化合物的互变异构体、式(j)代表的化合物或式(j)代表的化合物的互变异构体;更优选式(h)代表的化合物、式(h)代表的化合物的互变异构体、式(i)代表的化合物或式(i)代表的化合物的互变异构体;再更优选式(h)代表的化合物或式(h)代表的化合物的互变异构体。

[0263] 下面,详细说明式(a)~(j)代表的化合物。

[0264]



式(a)

[0265] 下面说明式(a)代表的化合物。

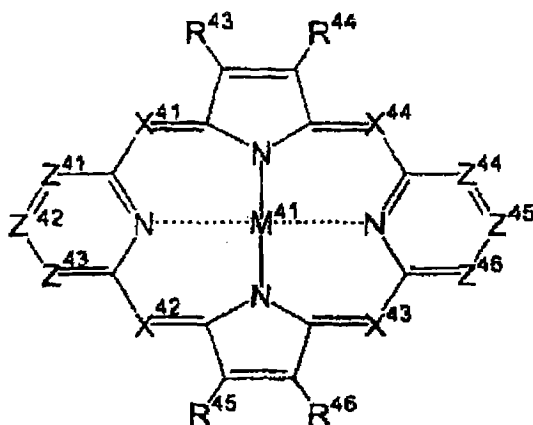
[0266] 在式(a)中, Z²¹, Z²², Z²³, Z²⁴, Z²⁵, Z²⁶和 M²¹的定义和优选范围分别与式(III)中相应 Z¹¹, Z¹², Z¹³, Z¹¹, Z¹², Z¹³和 M^{Y1}的定义和优选范围相同。

[0267] Q²¹和 Q²²每一个代表形成含氮杂环的基团。每个由 Q²¹和 Q²²形成的含氮杂环没有特别限制,但优选是吡咯环、咪唑环、三唑环、含有一个以上的上述环的稠环(例如,苯并吡咯)或任一上述环的互变异构体(例如,在下式(b)中,由 R⁴³和 R⁴⁴或由 R⁴⁵和 R⁴⁶取代的含氮5-元环被定义作为吡咯的互变异构体),更优选吡咯环或含有吡咯环的稠环(例如,苯并吡咯)。

[0268] X²¹, X²², X²³和 X²⁴每一个独立地代表取代或未取代的碳原子或氮原子,优选未取代的碳原子或氮原子,更优选氮原子。

[0269] 下面说明式(b)代表的化合物。

[0270]



式(b)

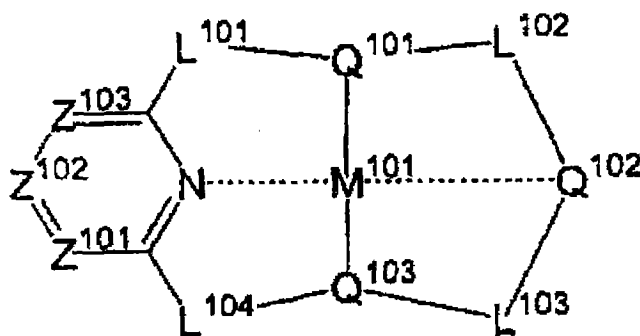
[0271] 在式 (b) 中, Z^{41} , Z^{42} , Z^{43} , Z^{44} , Z^{45} , Z^{46} , X^{41} , X^{42} , X^{43} , X^{44} 和 M^{41} 的定义和优选范围分别与式 (a) 中的 Z^{21} , Z^{22} , Z^{23} , Z^{24} , Z^{25} , Z^{26} , X^{21} , X^{22} , X^{23} , X^{24} 和 M^{21} 的定义和优选范围相同。

[0272] R^{43} , R^{44} , R^{45} 和 R^{46} 每一个优选选自氢原子、作为式 (III) 中的 Z^{11} 或 Z^{12} 上的取代基的例子所述的烷基和芳基、通过在 R^{43} 和 R^{44} 之间结合和 / 或通过在 R^{45} 和 R^{46} 之间结合形成至少一个环结构 (如苯并-稠环或吡啶稠环) 的基团; 更优选选自烷基和芳基、通过在 R^{43} 和 R^{44} 之间结合和 / 或通过在 R^{45} 和 R^{46} 之间结合形成至少一个环结构 (如苯并-稠环或吡啶稠环) 的基团; 再更优选选自通过在 R^{43} 和 R^{44} 之间结合和 / 或通过在 R^{45} 和 R^{46} 之间结合形成至少一个环结构 (如苯并-稠环或吡啶稠环) 的基团。

[0273] R^{43} , R^{44} , R^{45} 和 R^{46} 每一个独立地代表氢原子或取代基。取代基的例子包括在式 (III) 中作为 Z^{11} 或 Z^{12} 代表的碳原子上的取代基的例子基团。

[0274] 下面说明式 (c) 代表的化合物。

[0275]



式(c)

[0276] 在式 (c) 中, Z^{101} , Z^{102} 和 Z^{103} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子或氮原子。 Z^{101} , Z^{102} 和 Z^{103} 中的至少一个优选是氮原子。

[0277] L^{101} , L^{102} , L^{103} 和 L^{104} 每一个独立地代表单键或连接基。连接基没有特别限制, 其例子包括羰基连接基、亚烷基、亚烯基、亚芳基、亚杂芳基、含氮杂环连接基、氧连接基、氨基连接基、亚氨基连接基、羰基连接基和包括这些组合的连接基。

[0278] L^{101} , L^{102} , L^{103} 和 L^{104} 每一个优选是单键、亚烷基、亚烯基、氨基连接基或亚氨基连接基, 更优选单键、亚烷基连接基、亚烯基连接基或亚氨基连接基, 再更优选单键或亚烷基连接基。

[0279] Q^{101} 和 Q^{103} 每一个独立地代表含有与 M^{101} 配位的碳原子的基团、含有与 M^{101} 配位的

氮原子的基团、含有与 M^{101} 配位的磷原子的基团、含有与 M^{101} 配位的氧原子的基团或含有与 M^{101} 配位的硫原子的基团。

[0280] 含有与 M^{101} 配位的碳原子的基团优选是含有配位碳原子的芳基、含有配位碳原子的 5-元环杂芳基或含有配位碳原子的 6-元环杂芳基；更优选地，含有配位碳原子的芳基、含有配位碳原子的含氮 5-元环杂芳基或含有配位碳原子的含氮 6-元环杂芳基；再更优选地，含有配位碳原子的芳基。

[0281] 含有与 M^{101} 配位的氮原子的基团优选是含有配位氮原子的含氮 5-元环杂芳基或含有配位氮原子的含氮 6-元环杂芳基，更优选含有配位氮原子的含氮 6-元环杂芳基。

[0282] 含有与 M^{101} 配位的磷原子的基团优选是含有配位磷原子的烷基膦基团、含有配位磷原子的芳基膦基团、含有配位磷原子的烷氧基膦基团、含有配位磷原子的芳氧基膦基团、含有配位磷原子的杂芳氧基膦基团、含有配位磷原子的膦基团或含有配位磷原子的磷基团；更优选地，含有配位磷原子的烷基膦基团或含有配位磷原子的芳基膦基团。

[0283] 含有与 M^{101} 配位的氧原子的基团优选是氧基团或含有配位氧原子的羰基，更优选氧基团。

[0284] 含有与 M^{101} 配位的硫原子的基团优选是硫化物基团、噻吩基团或噻唑基团，更优选噻吩基团。

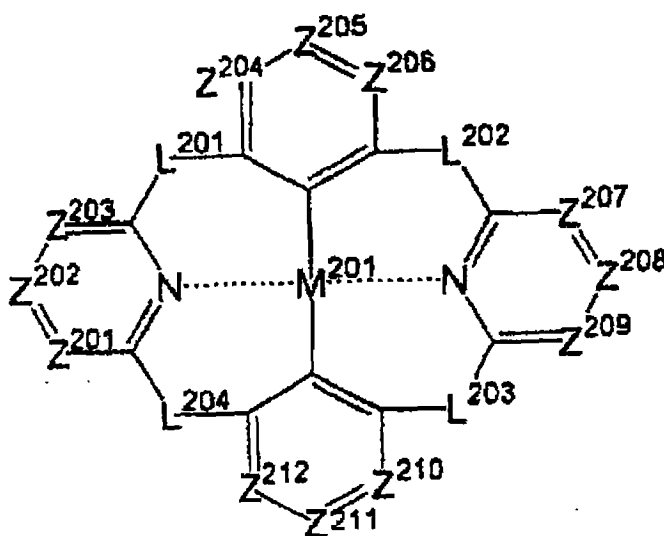
[0285] 每个 Q^{101} 和 Q^{103} 优选是含有与 M^{101} 配位的碳原子的基团、含有与 M^{101} 配位的氮原子的基团或含有与 M^{101} 配位的氧原子的基团；更优选含有与 M^{101} 配位的碳原子的基团或含有与 M^{101} 配位的氮原子的基团；再更优选含有与 M^{101} 配位的碳原子的基团。

[0286] Q^{102} 代表含有与 M^{101} 配位的氮原子的基团、含有与 M^{101} 配位的磷原子的基团、含有与 M^{101} 配位的氧原子的基团或含有与 M^{101} 配位的硫原子的基团，优选含有与 M^{101} 配位的氮原子的基团。

[0287] M^{101} 的定义与式 (I) 中的 M^{11} 的定义相同，其优选范围也相同。

[0288] 下面说明式 (d) 代表的化合物。

[0289]



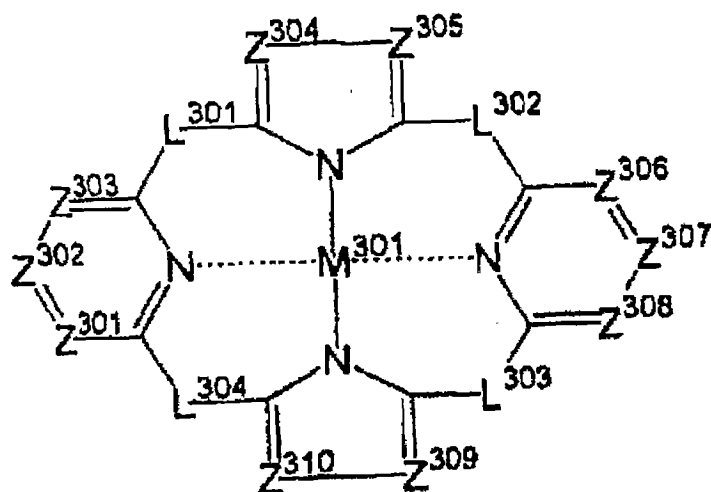
式(d)

[0290] 在式 (d) 中, Z^{201} , Z^{202} , Z^{203} , Z^{207} , Z^{208} , Z^{209} , L^{201} , L^{202} , L^{203} , L^{204} 和 M^{201} 的定义和优选范围分别与式 (c) 中的相应 Z^{101} , Z^{102} , Z^{103} , Z^{101} , Z^{102} , Z^{103} , L^{101} , L^{102} , L^{103} , L^{104} 和 M^{101} 的定义和优

选范围相同。 Z^{204} , Z^{205} , Z^{206} , Z^{210} , Z^{211} 和 Z^{212} 每一个代表取代或未取代的碳原子或取代或未取代的氮原子, 优选取代或未取代的碳原子。

[0291] 下面说明式 (e) 代表的化合物。

[0292]

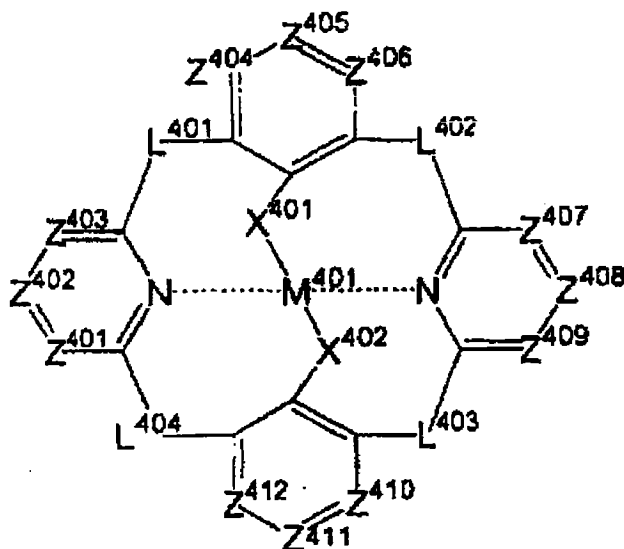


式(e)

[0293] [0230] 在式 (e) 中, Z^{301} , Z^{302} , Z^{303} , Z^{304} , Z^{305} , Z^{306} , Z^{307} , Z^{308} , Z^{309} , Z^{310} , L^{301} , L^{302} , L^{303} , L^{304} 和 M^{301} 的定义和优选范围分别与式 (d) 和 (c) 中的相应 Z^{201} , Z^{202} , Z^{203} , Z^{204} , Z^{206} , Z^{207} , Z^{208} , Z^{209} , Z^{210} , Z^{212} , L^{101} , L^{102} , L^{103} , L^{104} 和 M^{101} 的定义和优选范围相同。

[0294] 下面说明式 (f) 代表的化合物。

[0295]

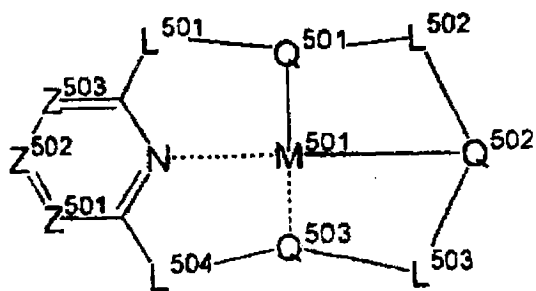


式(f)

[0296] 在式 (f) 中, Z^{401} , Z^{402} , Z^{403} , Z^{404} , Z^{405} , Z^{406} , Z^{407} , Z^{408} , Z^{409} , Z^{410} , Z^{411} , Z^{412} , L^{401} , L^{402} , L^{403} , L^{404} 和 M^{401} 的定义和优选范围分别与式 (d) 和 (c) 中的相应 Z^{201} , Z^{202} , Z^{203} , Z^{204} , Z^{205} , Z^{206} , Z^{207} , Z^{208} , Z^{209} , Z^{210} , Z^{211} , Z^{212} , L^{101} , L^{102} , L^{103} , L^{104} 和 M^{101} 的定义和优选范围相同。 X^{401} 和 X^{402} 每一个代表氧原子或取代或未取代的氮或硫原子, 优选氧原子或取代的氮原子, 更优选氧原子。

[0297] 下面说明式 (g) 代表的化合物。

[0298]

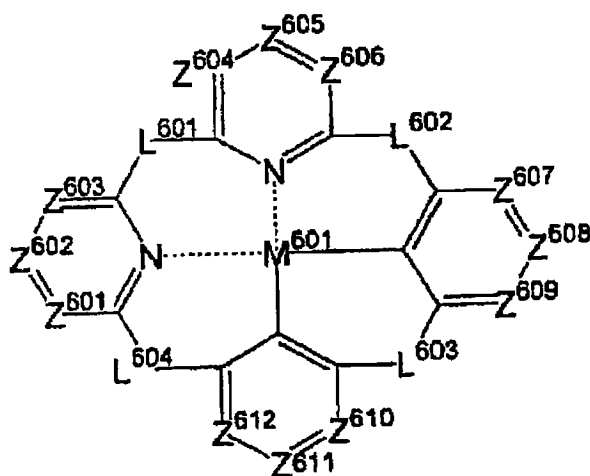


式(g)

[0299] 在式 (g) 中, Z^{501} , Z^{502} , Z^{503} , L^{501} , L^{502} , L^{503} , L^{504} , Q^{501} , Q^{502} , Q^{503} 和 M^{501} 的定义和优选范围分别与式 (c) 中的相应 Z^{101} , Z^{102} , Z^{103} , L^{101} , L^{102} , L^{103} , L^{104} , Q^{101} , Q^{103} , Q^{102} 和 M^{101} 的定义和优选范围相同。

[0300] 下面说明式 (h) 代表的化合物。

[0301]

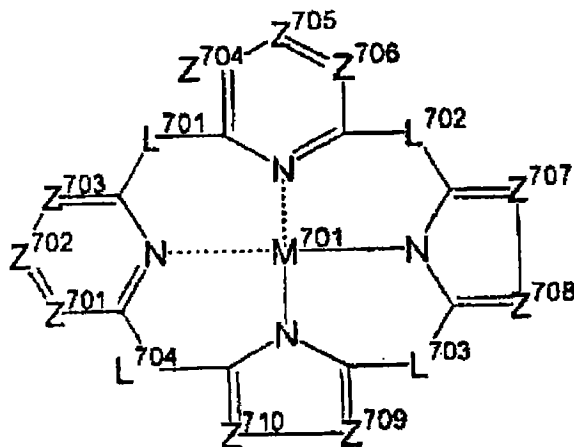


式(h)

[0302] 在式 (h) 中, Z^{601} , Z^{602} , Z^{603} , Z^{604} , Z^{605} , Z^{606} , Z^{607} , Z^{608} , Z^{609} , Z^{610} , Z^{611} , Z^{612} , L^{601} , L^{602} , L^{603} , L^{604} 和 M^{601} 的定义和优选范围分别与式 (d) 和 (c) 中的相应 Z^{201} , Z^{202} , Z^{203} , Z^{207} , Z^{208} , Z^{209} , Z^{204} , Z^{205} , Z^{206} , Z^{210} , Z^{211} , Z^{212} , L^{101} , L^{102} , L^{103} , L^{104} 和 M^{101} 的定义和优选范围相同。

[0303] 下面说明式 (i) 代表的化合物。

[0304]



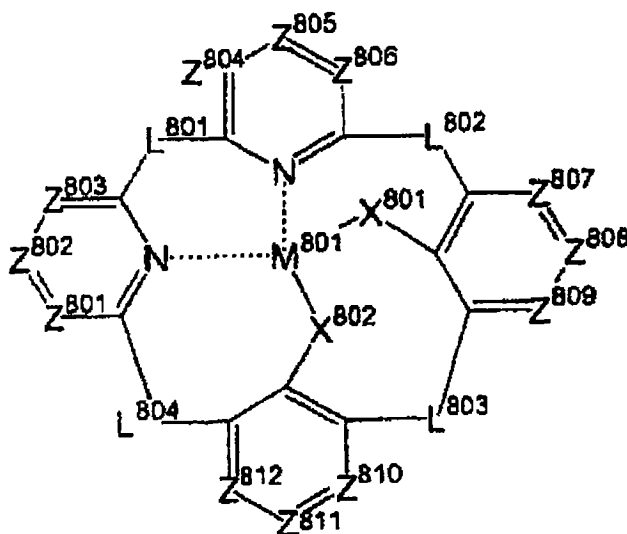
式(i)

[0305] 在式 (i) 中, Z^{701} , Z^{702} , Z^{703} , Z^{704} , Z^{705} , Z^{706} , Z^{707} , Z^{708} , Z^{709} , Z^{710} , L^{701} , L^{702} , L^{703} , L^{704} 和 M^{701} 的定义和优选范围分别与式 (d) 和 (c) 中的相应 Z^{201} , Z^{202} , Z^{203} , Z^{207} , Z^{208} , Z^{209} , Z^{204} , Z^{206} ,

Z^{210} , Z^{212} , L^{101} , L^{102} , L^{103} , L^{104} 和 M^{101} 的定义和优选范围相同。

[0306] 下面说明式 (j) 代表的化合物。

[0307]



式(j)

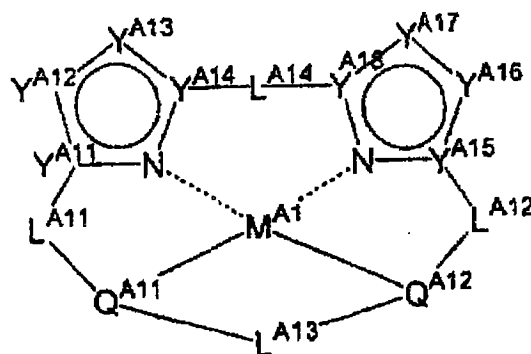
[0308] 在式 (j) 中, Z^{801} , Z^{802} , Z^{803} , Z^{804} , Z^{805} , Z^{806} , Z^{807} , Z^{808} , Z^{809} , Z^{810} , Z^{811} , Z^{812} , L^{801} , L^{802} , L^{803} , L^{804} , M^{801} , X^{801} 和 X^{802} 的定义和优选范围分别与式 (d), (c) 和 (f) 中的相应 Z^{201} , Z^{202} , Z^{203} , Z^{207} , Z^{208} , Z^{209} , Z^{204} , Z^{205} , Z^{206} , Z^{210} , Z^{211} , Z^{212} , L^{101} , L^{102} , L^{103} , L^{104} , M^{101} , X^{401} 和 X^{402} 的定义和优选范围相同。

[0309] 式 (III) 代表的化合物的具体例子包括日本专利申请国家公开 No. 2006-526278 中记载的化合物 (2) ~ (8)、化合物 (15) ~ (20)、化合物 (27) ~ (32)、化合物 (36) ~ (38)、化合物 (42) ~ (44)、化合物 (50) ~ (52) 和化合物 (57) ~ (154), 在此引入该专利文献的内容作为参考。然而, 本发明的范围不限于此。

[0310] 本发明中适用的金属络合物的优选例子还包括下面说明的式 (A-1)、(B-1)、(C-1)、(D-1)、(E-1) 或 (F-1) 代表的化合物。

[0311] 下面说明式 (A-1)。

[0312]



式(A-1)

[0313] 在式 (A-1) 中, M^{A1} 代表金属离子。 Y^{A11} , Y^{A14} , Y^{A15} 和 Y^{A18} 每一个独立地代表碳原子或氮原子。 Y^{A12} , Y^{A13} , Y^{A16} 和 Y^{A17} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子、取代或未取代的氮原子、氧原子或硫原子。 L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 和 L^{A14} 每一个代表连接基, 可以具有彼此相同的结构或彼此不同的结构。 Q^{A11} 和 Q^{A12} 每一个独立地代表含有通过配位键、离子键或共价键与 M^{A1}

结合的原子的部分结构。

[0314] 下面详细说明式 (A-1) 代表的化合物。

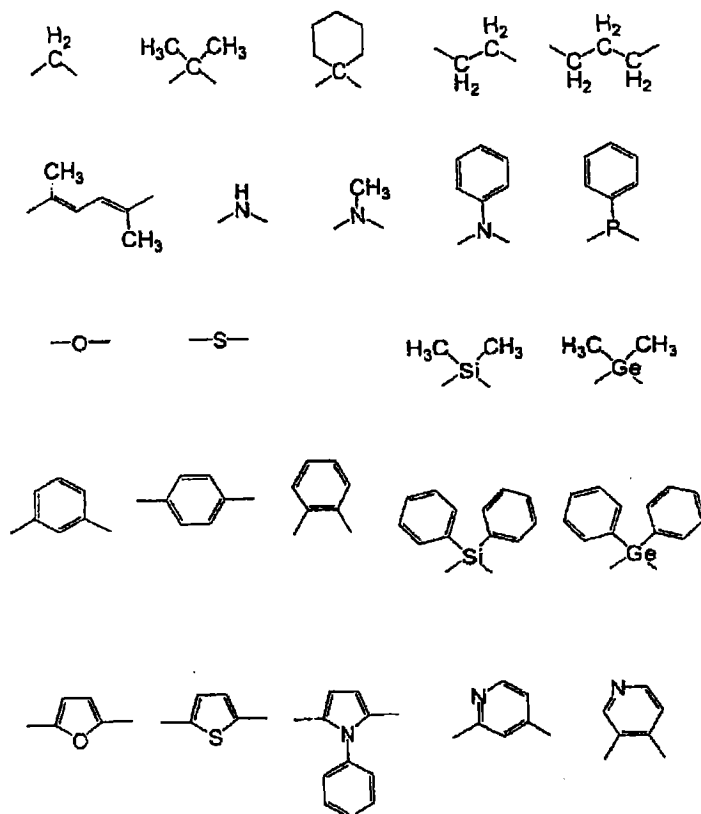
[0315] M^{A1} 代表金属离子。金属离子没有特别限制。优选是二价金属离子, 更优选 Pt^{2+} , Pd^{2+} , Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Zn^{2+} , Mg^{2+} 或 Pb^{2+} , 再更优选 Pt^{2+} 或 Cu^{2+} , 进一步更优选 Pt^{2+} 。

[0316] Y^{A11} , Y^{A14} , Y^{A15} 和 Y^{A18} 每一个独立地代表碳原子或氮原子。每个 Y^{A11} , Y^{A14} , Y^{A15} 和 Y^{A18} 优选是碳原子。

[0317] Y^{A12} , Y^{A13} , Y^{A16} 和 Y^{A17} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子、取代或未取代的氮原子、氧原子或硫原子。每个 Y^{A12} , Y^{A13} , Y^{A16} 和 Y^{A17} 优选是取代或未取代的碳原子或取代或未取代的氮原子。

[0318] L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 和 L^{A14} 每一个独立地代表二价连接基。 L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 和 L^{A14} 代表的二价连接基例如可以是单键或由选自碳、氮、硅、硫、氧、锗、磷等的原子形成的连接基, 更优选单键、取代或未取代的碳原子、取代或未取代的氮原子、取代的硅原子、氧原子、硫原子、二价芳香族烃环基团或二价芳香族杂环基, 再更优选单键、取代或未取代的碳原子、取代或未取代的氮原子、取代的硅原子、二价芳香族烃环基团或二价芳香族杂环基, 进一步更优选单键或取代或未取代的亚甲基。 L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 和 L^{A14} 代表的二价连接基的例子包括以下基团:

[0319]



[0320] L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 或 L^{A14} 代表的二价连接基还可以具有取代基。可以引入二价连接基中的取代基例如可以是烷基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子, 更优选具有 1 ~ 20 个碳原子, 特别优选具有 1 ~ 10 个碳原子, 其例子包括甲基、乙基、异丙基、叔丁基、正辛基、正癸基、正十六烷基、环丙基、环戊基和环己基)、烯基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子, 更优选具有 2 ~ 20 个碳原子, 特别优选具有 2 ~ 10 个碳原子, 其例子包括乙烯基、烯丙基、2-丁烯基和 3-戊烯基)、炔基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子, 更优选具有 2 ~ 20 个碳原子, 特别优选具有 2 ~

10 个碳原子,其例子包括炔丙基和 3-戊炔基);

[0321] 芳基(优选具有 6~30 个碳原子,更优选具有 6~20 个碳原子,特别优选具有 6~12 个碳原子,其例子包括苯基、p-甲基苯基、萘基和蒽基)、氨基优选具有 0~30 个碳原子,更优选具有 0~20 个碳原子,特别优选具有 0~10 个碳原子,其例子包括氨基、甲基氨基、二甲基氨基、二乙基氨基、二苄基氨基、二苯基氨基和二甲苯基氨基)、烷氧基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有 1~10 个碳原子,其例子包括甲氧基、乙氧基、丁氧基和 2-乙基己氧基)、芳氧基(优选具有 6~30 个碳原子,更优选具有 6~20 个碳原子,特别优选具有 6~12 个碳原子,其例子包括苯氧基、1-萘氧基和 2-萘氧基);

[0322] 杂环氧基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有 1~12 个碳原子,其例子包括吡啶氧基、吡唑氧基、噻吩氧基和喹啉氧基)、酰基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有 1~12 个碳原子,其例子包括乙酰基、苯甲酰基、甲酰基和戊酰基)、烷氧基羰基(优选具有 2~30 个碳原子,更优选具有 2~20 个碳原子,特别优选具有 2~12 个碳原子,其例子包括甲氧基羰基和乙氧基羰基)、芳氧基羰基(优选具有 7~30 个碳原子,更优选具有 7~20 个碳原子,特别优选具有 7~12 个碳原子,其例子包括苯氧基羰基);

[0323] 酰氧基(优选具有 2~30 个碳原子,更优选具有 2~20 个碳原子,特别优选具有 2~10 个碳原子,其例子包括乙酰氧基和苯甲酰氧基)、酰氨基(优选具有 2~30 个碳原子,更优选具有 2~20 个碳原子,特别优选具有 2~10 个碳原子,其例子包括乙酰氨基和苯甲酰氨基)、烷氧基羰基氨基(优选具有 2~30 个碳原子,更优选具有 2~20 个碳原子,特别优选具有 2~12 个碳原子,其例子包括甲氧基羰基氨基)、芳氧基羰基氨基(优选具有 7~30 个碳原子,更优选具有 7~20 个碳原子,特别优选具有 7~12 个碳原子,其例子包括苯氧基羰基氨基);

[0324] 磺酰氨基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有 1~12 个碳原子,其例子包括甲烷磺酰氨基和苯磺酰氨基)、氨磺酰基(优选具有 0~30 个碳原子,更优选具有 0~20 个碳原子,特别优选具有 0~12 个碳原子,其例子包括氨磺酰基、甲基氨磺酰基、二甲基氨磺酰基和苯基氨磺酰基)、氨基甲酰基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有 1~12 个碳原子,其例子包括氨基甲酰基、甲基氨基甲酰基、二乙基氨基甲酰基和苯基氨基甲酰基);

[0325] 烷硫基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有 1~12 个碳原子,其例子包括甲硫基和乙硫基)、芳硫基(优选具有 6~30 个碳原子,更优选具有 6~20 个碳原子,特别优选具有 6~12 个碳原子,其例子包括苯硫基)、杂环硫基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有 1~12 个碳原子,其例子包括吡啶硫基、2-苯并咪唑硫基、2-苯并噁唑硫基和 2-苯并噻唑硫基)、磺酰基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有 1~12 个碳原子,其例子包括甲磺酰基和甲苯磺酰基)、亚磺酰基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有 1~12 个碳原子,其例子包括甲烷亚磺酰基和苯亚磺酰基);

[0326] 脲基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有

1 ~ 12 个碳原子,其例子包括脲基、甲基脲基和苯基脲基)、磷酸酰氨基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选具有 1 ~ 20 个碳原子,特别优选具有 1 ~ 12 个碳原子,其例子包括二乙基磷酸酰氨基和苯基磷酸酰氨基)、羟基、巯基、卤原子(其例子包括氟原子、氯原子、溴原子、碘原子)、氰基、磺基、羧基、硝基、氧肟酸基团、亚磺酸基、肼基、亚氨基;

[0327] 杂环基(优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选具有 1 ~ 12 个碳原子,含有杂原子,如氮原子、氧原子或硫原子;其具体例子包括咪唑基、吡啶基、喹啉基、呋喃基、噻吩基、哌啶基、吗啉基、苯并噁唑基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、呋唑基和 azepinyl 基团)、甲硅烷基(优选具有 3 ~ 40 个碳原子,更优选具有 3 ~ 30 个碳原子,特别优选具有 3 ~ 24 个碳原子,其例子包括三甲基甲硅烷基和三苯基甲硅烷基)或甲硅烷氧基(优选具有 3 ~ 40 个碳原子,更优选具有 3 ~ 30 个碳原子,特别优选具有 3 ~ 24 个碳原子,其例子包括三甲基甲硅烷氧基和三苯基甲硅烷氧基)。

[0328] 这些取代基本身可以具有取代基。可以引入这些取代基中的取代基优选选自烷基、芳基、杂环基、卤原子和甲硅烷基,更优选选自烷基、芳基、杂环基和卤原子,再更优选选自烷基、芳基、芳香族杂环基和氟原子。

[0329] Q^{A11} 和 Q^{A12} 每一个独立地代表含有通过配位键、离子键或共价键与 M^{A1} 结合的原子的一部分结构。 Q^{A11} 和 Q^{A12} 每一个独立地优选代表具有与 M^{A1} 结合的碳原子的基团、具有与 M^{A1} 结合的氮原子的基团、具有与 M^{A1} 结合的硅原子的基团、具有与 M^{A1} 结合的磷原子的基团、具有与 M^{A1} 结合的氧原子的基团或具有与 M^{A1} 结合的硫原子的基团,更优选具有与 M^{A1} 结合的碳、氮、氧或硫原子的基团,再更优选具有与 M^{A1} 结合的碳原子或氮原子的基团,进一步更优选具有与 M^{A1} 结合的碳原子的基团。

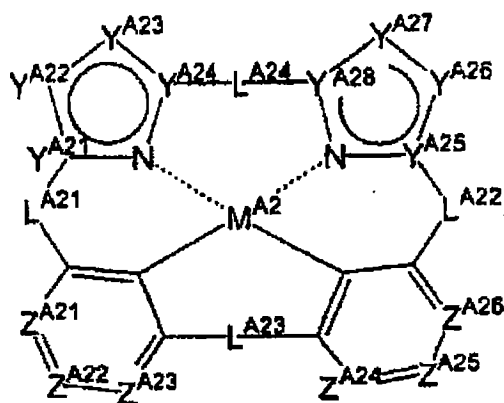
[0330] 通过碳原子与 M^{A1} 结合的基团优选是具有与 M^{A1} 结合的碳原子的芳基、具有与 M^{A1} 结合的碳原子的 5-元环杂芳基或具有与 M^{A1} 结合的碳原子的 6-元环杂芳基,更优选具有与 M^{A1} 结合的碳原子的芳基、具有与 M^{A1} 结合的碳原子的含氮 5-元环杂芳基或具有与 M^{A1} 结合的碳原子的含氮 6-元环杂芳基,再更优选具有与 M^{A1} 结合的碳原子的芳基。

[0331] 通过氮原子与 M^{A1} 结合的基团优选是取代的氨基或具有与 M^{A1} 结合的氮原子的含氮 5-元杂环杂芳基,更优选具有与 M^{A1} 结合的氮原子的含氮 5-元杂环杂芳基。

[0332] 通过磷原子与 M^{A1} 结合的基团优选是取代的膦基团。具有与 M^{A1} 结合的硅原子的基团优选是取代的甲硅烷基。具有与 M^{A1} 结合的氧原子的基团优选是氧基团,具有与 M^{A1} 结合的硫原子的基团优选是硫化物基团。

[0333] 式 (A-1) 代表的化合物更优选是下式 (A-2)、(A-3) 或 (A-4) 代表的化合物。

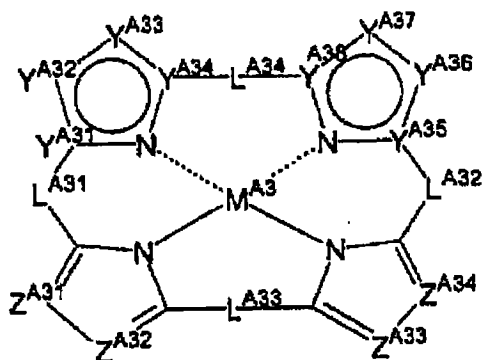
[0334]



式(A-2)

[0335] 在式 (A-2) 中, M^{A2} 代表金属离子。 Y^{A21} , Y^{A24} , Y^{A25} 和 Y^{A28} 每一个独立地代表碳原子或氮原子。 Y^{A22} , Y^{A23} , Y^{A26} 和 Y^{A27} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子、取代或未取代的氮原子、氧原子或硫原子。 L^{A21} , L^{A22} , L^{A23} 和 L^{A24} 每一个独立地代表连接基。 Z^{A21} , Z^{A22} , Z^{A23} , Z^{A24} , Z^{A25} 和 Z^{A26} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

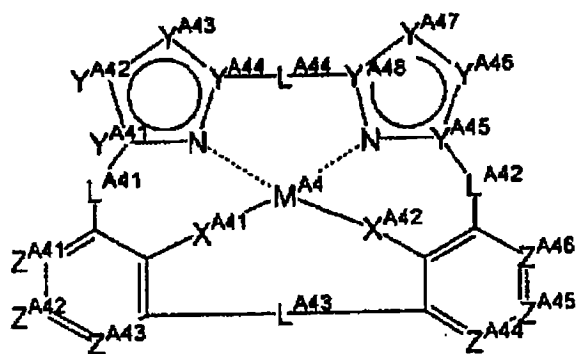
[0336]



式(A-3)

[0337] 在式 (A-3) 中, M^{A3} 代表金属离子。 Y^{A31} , Y^{A34} , Y^{A35} 和 Y^{A38} 每一个独立地代表碳原子或氮原子。 Y^{A32} , Y^{A33} , Y^{A36} 和 Y^{A37} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子、取代或未取代的氮原子、氧原子或硫原子, L^{A31} , L^{A32} , L^{A33} 和 L^{A34} 每一个独立地代表连接基。 Z^{A31} , Z^{A32} , Z^{A33} 和 Z^{A34} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

[0338]



式(A-4)

[0339] 在式 (A-4) 中, M^{A4} 代表金属离子。 Y^{A41} , Y^{A44} , Y^{A45} 和 Y^{A48} 每一个独立地代表碳原子或氮原子。 Y^{A42} , Y^{A43} , Y^{A46} 和 Y^{A47} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子、取代或未取代的氮原子、氧原子或硫原子。 L^{A41} , L^{A42} , L^{A43} 和 L^{A44} 每一个独立地代表连接基。 Z^{A41} , Z^{A42} , Z^{A43} , Z^{A44} , Z^{A45} 和 Z^{A46} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 X^{A41} 和 X^{A42} 每一个独立地代

表氧原子、硫原子或取代或未取代的氮原子。

[0340] 下面详细说明式 (A-2) 代表的化合物。

[0341] M^{A2} , Y^{A21} , Y^{A24} , Y^{A25} , Y^{A28} , Y^{A22} , Y^{A23} , Y^{A26} , Y^{A27} , L^{A21} , L^{A22} , L^{A23} 和 L^{A24} 分别与式 (A-1) 中的相应 M^{A1} , Y^{A11} , Y^{A14} , Y^{A15} , Y^{A18} , Y^{A12} , Y^{A13} , Y^{A16} , Y^{A17} , L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 和 L^{A14} 的定义和优选范围相同。

[0342] Z^{A21} , Z^{A22} , Z^{A23} , Z^{A24} , Z^{A25} 和 Z^{A26} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 Z^{A21} , Z^{A22} , Z^{A23} , Z^{A24} , Z^{A25} 和 Z^{A26} 每一个独立地优选代表取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。当碳原子被取代时, 取代基可以选自在式 (A-1) 中的 L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 或 L^{A14} 代表的二价连接基上的上述取代基的例子。

[0343] 下面详细说明式 (A-3) 代表的化合物。

[0344] M^{A3} , Y^{A31} , Y^{A34} , Y^{A35} , Y^{A38} , Y^{A32} , Y^{A33} , Y^{A36} , Y^{A37} , L^{A31} , L^{A32} , L^{A33} 和 L^{A34} 分别与式 (A-1) 中的相应 M^{A1} , Y^{A11} , Y^{A14} , Y^{A15} , Y^{A18} , Y^{A12} , Y^{A13} , Y^{A16} , Y^{A17} , L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 和 L^{A14} 的定义和优选范围相同。

[0345] Z^{A31} , Z^{A32} , Z^{A33} 和 Z^{A34} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。每个 Z^{A31} , Z^{A32} , Z^{A33} 和 Z^{A34} 优选是取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。当碳原子被取代时, 取代基可以选自在式 (A-1) 中的 L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 或 L^{A14} 代表的二价连接基上的上述取代基的例子。

[0346] 下面详细说明式 (A-4) 代表的化合物。

[0347] M^{A4} , Y^{A41} , Y^{A44} , Y^{A45} , Y^{A48} , Y^{A42} , Y^{A43} , Y^{A46} , Y^{A47} , L^{A41} , L^{A42} , L^{A43} 和 L^{A44} 分别与式 (A-1) 中的相应 M^{A1} , Y^{A11} , Y^{A14} , Y^{A15} , Y^{A18} , Y^{A12} , Y^{A13} , Y^{A16} , Y^{A17} , L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 和 L^{A14} 的定义和优选范围相同。

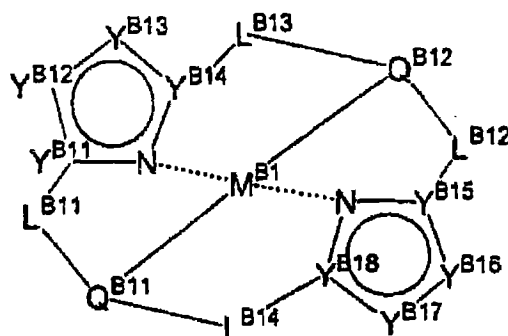
[0348] Z^{A41} , Z^{A42} , Z^{A43} , Z^{A44} , Z^{A45} 和 Z^{A46} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。每个 Z^{A41} , Z^{A42} , Z^{A43} , Z^{A44} , Z^{A45} 和 Z^{A46} 优选是取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。当碳原子被取代时, 取代基可以选自在式 (A-1) 中的 L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 或 L^{A14} 代表的二价连接基上的上述取代基的例子。

[0349] X^{A41} 和 X^{A42} 每一个独立地代表氧原子、硫原子或取代或未取代的氮原子。每个 X^{A41} 和 X^{A42} 优选是氧原子或硫原子, 更优选氧原子。

[0350] 式 (A-1) 代表的化合物的具体例子包括但不限于 JP-A No. 2007-103493 中记载的化合物 (A-1) ~ (A-80)。

[0351] 下式 (B-1) 代表的化合物也优选作为本发明中适用的金属络合物。

[0352]



式(B-1)

[0353] 在式 (B-1) 中, M^{B1} 代表金属离子。 Y^{B11} , Y^{B14} , Y^{B15} 和 Y^{B18} 每一个独立地代表碳原子或氮原子。 Y^{B12} , Y^{B13} , Y^{B16} 和 Y^{B17} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子、取代或未取代的氮原子、氧原子或硫原子。 L^{B11} , L^{B12} , L^{B13} 和 L^{B14} 每一个独立地代表连接基。 Q^{B11} 和 Q^{B12} 每一

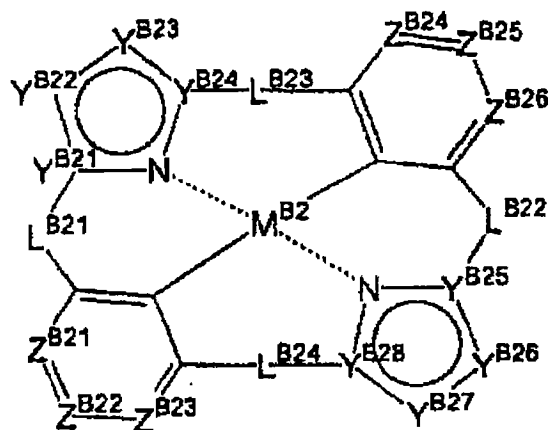
个独立地代表含有与 M^{B1} 共价结合的原子的部分结构。

[0354] 下面详细说明式 (B-1) 代表的化合物。

[0355] 在式 (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} 和 Q^{B12} 分别与式 (A-1) 中的相应 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} 和 Q^{A12} 的定义和优选范围相同。

[0356] 式 (B-1) 代表的化合物的更优选例子包括下式 (B-2)、(B-3) 或 (B-4) 代表的化合物。

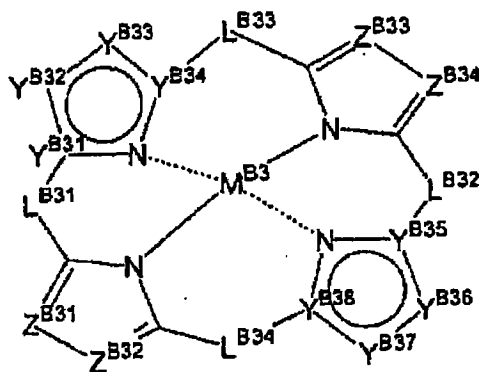
[0357]



式(B-2)

[0358] 在式 (B-2) 中, M^{B2} 代表金属离子。 Y^{B21} , Y^{B24} , Y^{B25} 和 Y^{B28} 每一个独立地代表碳原子或氮原子。 Y^{B22} , Y^{B23} , Y^{B26} 和 Y^{B27} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子、取代或未取代的氮原子、氧原子或硫原子。 L^{B21} , L^{B22} , L^{B23} 和 L^{B24} 每一个独立地代表连接基。 Z^{B21} , Z^{B22} , Z^{B23} , Z^{B24} , Z^{B25} 和 Z^{B26} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

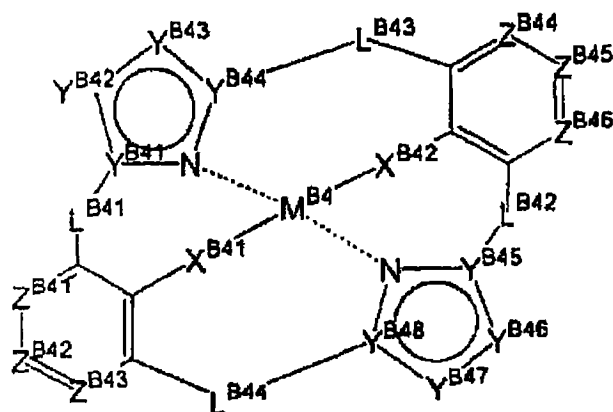
[0359]



式(B-3)

[0360] 在式 (B-3) 中, M^{B3} 代表金属离子。 Y^{B31} , Y^{B34} , Y^{B35} 和 Y^{B38} 每一个独立地代表碳原子或氮原子。 Y^{B32} , Y^{B33} , Y^{B36} 和 Y^{B37} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子、取代的或未取代的氮原子、氧原子或硫原子。 L^{B31} , L^{B32} , L^{B33} 和 L^{B34} 每一个独立地代表连接基。 Z^{B31} , Z^{B32} , Z^{B33} 和 Z^{B34} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

[0361]



式(B-4)

[0362] 在式 (B-4) 中, M^{B4} 代表金属离子。 Y^{B41} , Y^{B44} , Y^{B45} 和 Y^{B48} 每一个独立地代表碳原子或氮原子。 Y^{B42} , Y^{B43} , Y^{B46} 和 Y^{B47} 每一个独立地代表取代或未取代的碳原子、取代或未取代的氮原子、氧原子或硫原子。 L^{B41} , L^{B42} , L^{B43} 和 L^{B44} 每一个独立地代表连接基。 Z^{B41} , Z^{B42} , Z^{B43} , Z^{B44} , Z^{B45} 和 Z^{B46} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 X^{B41} 和 X^{B42} 每一个独立地代表氧原子、硫原子或取代或未取代的氮原子。

[0363] 下面详细说明式 (B-2) 代表的化合物。

[0364] 在式 (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} 和 L^{B24} 分别与式 (B-1) 中的相应 M^{B1} , Y^{B11} , Y^{B14} , Y^{B15} , Y^{B18} , Y^{B12} , Y^{B13} , Y^{B16} , Y^{B17} , L^{B11} , L^{B12} , L^{B13} 和 L^{B14} 的定义和优选范围相同。

[0365] Z^{B21} , Z^{B22} , Z^{B23} , Z^{B24} , Z^{B25} 和 Z^{B26} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。每个 Z^{B21} , Z^{B22} , Z^{B23} , Z^{B24} , Z^{B25} 和 Z^{B26} 优选是取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。当碳原子被取代时, 取代基可以选自在式 (A-1) 中的 L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 或 L^{A14} 代表的二价连接基上的上述取代基的例子。

[0366] 下面详细说明式 (B-3) 代表的化合物。

[0367] 在式 (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} 和 L^{B34} 分别与式 (B-1) 中的相应 M^{B1} , Y^{B11} , Y^{B14} , Y^{B15} , Y^{B18} , Y^{B12} , Y^{B13} , Y^{B16} , Y^{B17} , L^{B11} , L^{B12} , L^{B13} 和 L^{B14} 的定义和优选范围相同。

[0368] Z^{B31} , Z^{B32} , Z^{B33} 和 Z^{B34} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。每个 Z^{B31} , Z^{B32} , Z^{B33} 和 Z^{B34} 优选是取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。当碳原子被取代时, 取代基可以选自在式 (A-1) 中的 L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 或 L^{A14} 代表的二价连接基上的上述取代基的例子。

[0369] 下面详细说明式 (B-4) 代表的化合物。

[0370] 在式 (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} 和 L^{B44} 分别与式 (B-1) 中的相应 M^{B1} , Y^{B11} , Y^{B14} , Y^{B15} , Y^{B18} , Y^{B12} , Y^{B13} , Y^{B16} , Y^{B17} , L^{B11} , L^{B12} , L^{B13} 和 L^{B14} 的定义和优选范围相同。

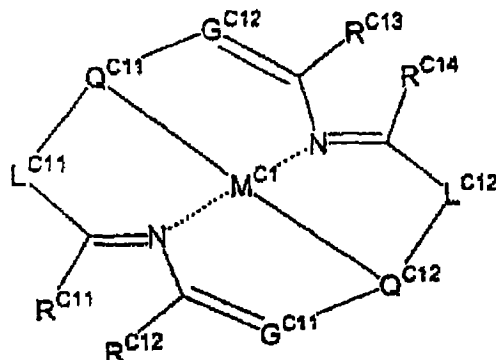
[0371] Z^{B41} , Z^{B42} , Z^{B43} , Z^{B44} , Z^{B45} 和 Z^{B46} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。每个 Z^{B41} , Z^{B42} , Z^{B43} , Z^{B44} , Z^{B45} 和 Z^{B46} 优选是取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。当碳原子被取代时, 取代基可以选自在式 (A-1) 中的 L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 或 L^{A14} 代表的二价连接基上的上述取代基的例子。

[0372] X^{B41} 和 X^{B42} 每一个独立地代表氧原子、硫原子或取代或未取代的氮原子。每个 X^{B41} 和 X^{B42} 优选是氧原子或硫原子,更优选氧原子。

[0373] 式 (B-1) 代表的化合物的具体例子包括但不限于 JP-A No. 2007-103493 中记载的化合物 (B-1) ~ (B-55)。

[0374] 本发明中适用的优选金属络合物的例子是下式 (C-1) 代表的化合物。

[0375]



式(C-1)

[0376] 在式 (C-1) 中, M^{C1} 代表金属离子。 R^{C11} 和 R^{C12} 每一个独立地代表氢原子或取代基。当 R^{C11} 和 R^{C12} 代表取代基时,取代基可以彼此结合形成 5- 元环。 R^{C13} 和 R^{C14} 每一个独立地代表氢原子或取代基。当 R^{C11} 和 R^{C12} 代表取代基时,取代基可以可选择地不结合。当 R^{C13} 和 R^{C14} 代表取代基时,取代基可以彼此结合形成 5- 元环。当 R^{C13} 和 R^{C14} 代表取代基时,取代基可以可选择地不结合。 G^{C11} 和 G^{C12} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 L^{C11} 和 L^{C12} 每一个独立地代表连接基。 Q^{C11} 和 Q^{C12} 每一个独立地代表含有通过配位键、离子键或共价键与 M^{C1} 结合的原子的一部分结构。

[0377] 下面详细说明式 (C-1)。

[0378] 在式 (C-1) 中, M^{C1} , L^{C11} , L^{C12} , Q^{C11} 和 Q^{C12} 分别与式 (A-1) 中的相应 M^{A1} , L^{A11} , L^{A12} , Q^{A11} 和 Q^{A12} 的定义和优选范围相同。

[0379] G^{C11} 和 G^{C12} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子,优选氮原子或未取代的碳原子,更优选氮原子。

[0380] R^{C11} 和 R^{C12} 每一个独立地代表氢原子或取代基。 R^{C11} 和 R^{C12} 可以彼此结合形成 5- 元环。 R^{C13} 和 R^{C14} 每一个独立地代表氢原子或取代基。 R^{C13} 和 R^{C14} 可以彼此结合形成 5- 元环。

[0381] R^{C11} , R^{C12} , R^{C13} 或 R^{C14} 代表的取代基例如可以是烷基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选具有 1 ~ 20 个碳原子,特别优选具有 1 ~ 10 个碳原子;其例子包括甲基、乙基、异丙基、叔丁基、正辛基、正癸基、正十六烷基、环丙基、环戊基、环己基等)、烯基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子,更优选具有 2 ~ 20 个碳原子,特别优选具有 2 ~ 10 个碳原子;其例子包括乙烯基、烯丙基、2- 丁烯基和 3- 戊烯基)、炔基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子,更优选具有 2 ~ 20 个碳原子,特别优选具有 2 ~ 10 个碳原子;其例子包括炔丙基和 3- 戊炔基);

[0382] 芳基 (优选具有 6 ~ 30 个碳原子,更优选具有 6 ~ 20 个碳原子,特别优选具有 6 ~ 12 个碳原子;其例子包括苯基、p- 甲基苯基、萘基和蒽基)、氨基 (优选具有 0 ~ 30 个碳原子,更优选具有 0 ~ 20 个碳原子,特别优选具有 0 ~ 10 个碳原子;其例子包括氨基、甲基氨基、二甲基氨基、二乙基氨基、二苄基氨基、二苯基氨基和二甲苯基氨基)、烷氧基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子,更优选具有 1 ~ 20 个碳原子,特别优选具有 1 ~ 10 个碳原子;其

例子包括甲氧基、乙氧基、丁氧基和 2-乙基己氧基)、芳氧基(优选具有 6~30 个碳原子,更优选具有 6~20 个碳原子,特别优选具有 6~12 个碳原子;其例子包括苯氧基、1-萘氧基和 2-萘氧基);

[0383] 杂环氧基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有 1~12 个碳原子;其例子包括吡啶氧基、吡唑氧基、嘧啶氧基和喹啉氧基)、酰基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有 1~12 个碳原子;其例子包括乙酰基、苯甲酰基、甲酰基和戊酰基)、烷氧基羰基(优选具有 2~30 个碳原子,更优选具有 2~20 个碳原子,特别优选具有 2~12 个碳原子;其例子包括甲氧基羰基和乙氧基羰基)、芳氧基羰基(优选具有 7~30 个碳原子,更优选具有 7~20 个碳原子,特别优选具有 7~12 个碳原子;其例子包括苯氧基羰基);

[0384] 酰氧基(优选具有 2~30 个碳原子,更优选具有 2~20 个碳原子,特别优选具有 2~10 个碳原子;其例子包括乙酰氧基和苯甲酰氧基)、酰氨基(优选具有 2~30 个碳原子,更优选具有 2~20 个碳原子,特别优选具有 2~10 个碳原子;其例子包括乙酰氨基和苯甲酰氨基)、烷氧基羰基氨基(优选具有 2~30 个碳原子,更优选具有 2~20 个碳原子,特别优选具有 2~12 个碳原子;其例子包括甲氧基羰基氨基)、芳氧基羰基氨基(优选具有 7~30 个碳原子,更优选具有 7~20 个碳原子,特别优选具有 7~12 个碳原子;其例子包括苯氧基羰基氨基);

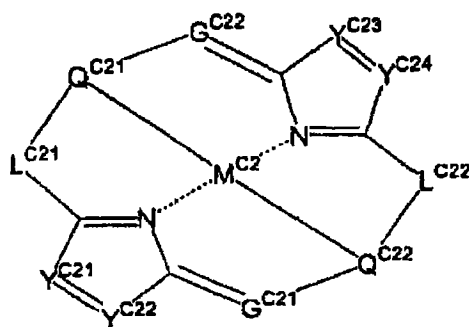
[0385] 烷硫基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有 1~12 个碳原子;其例子包括甲硫基和乙硫基)、芳硫基(优选具有 6~30 个碳原子,更优选具有 6~20 个碳原子,特别优选具有 6~12 个碳原子;其例子包括苯硫基)、杂环硫基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~20 个碳原子,特别优选具有 1~12 个碳原子;其例子包括吡啶硫基、2-苯并咪唑硫基、2-苯并噁唑硫基和 2-苯并噻唑硫基)、卤原子(如氟原子、氯原子、溴原子、碘原子)、氰基;

[0386] 杂环基(优选具有 1~30 个碳原子,更优选具有 1~12 个碳原子,和含有杂原子如氮原子、氧原子或硫原子;实例包括咪唑基、吡啶基、喹啉基、呋喃基、噻吩基、哌啶基、吗啉基、苯并噁唑基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、呋唑基和 azepinyl 基团)、甲硅烷基(优选具有 3~40 个碳原子,更优选具有 3~30 个碳原子,特别优选具有 3~24 个碳原子;其例子包括三甲基甲硅烷基和三苯基甲硅烷基)或甲硅烷氧基(优选具有 3~40 个碳原子,更优选具有 3~30 个碳原子,特别优选具有 3~24 个碳原子;其例子包括三甲基甲硅烷氧基和三苯基甲硅烷氧基)。

[0387] R^{C11} , R^{C12} , R^{C13} 或 R^{C14} 代表的取代基优选是烷基、芳基或通过 R^{C11} 和 R^{C12} 之间结合和/或在 R^{C13} 和 R^{C14} 之间结合形成至少一个 5-元环的基团。在特别优选的实施方案中, R^{C11} 和 R^{C12} 彼此结合形成 5-元环和/或 R^{C13} 和 R^{C14} 彼此结合形成 5-元环。

[0388] 式 (C-1) 代表的化合物更优选是式 (C-2) 代表的化合物。

[0389]



式(C-2)

[0390] 在式 (C-2) 中, M^{C2} 代表金属离子。

[0391] Y^{C21} , Y^{C22} , Y^{C23} 和 Y^{C24} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 G^{C21} 和 G^{C22} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 L^{C21} 和 L^{C22} 每一个独立地代表连接基。 Q^{C21} 和 Q^{C22} 每一个独立地代表含有通过配位键、离子键或共价键与 M^{C2} 结合的原子的一部分结构。

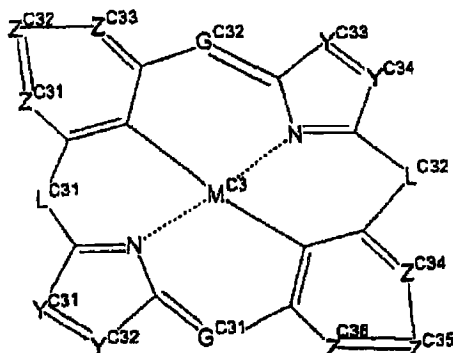
[0392] 下面详细说明式 (C-2)。

[0393] 在式 (C-2) 中, M^{C2} , L^{C21} , L^{C22} , Q^{C21} , Q^{C22} , G^{C21} 和 G^{C22} 分别与式 (C-1) 中的相应 M^{C1} , L^{C11} , L^{C12} , Q^{C11} , Q^{C12} , G^{C11} 和 G^{C12} 的定义和优选范围相同。

[0394] Y^{C21} , Y^{C22} , Y^{C23} 和 Y^{C24} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子, 优选是取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。

[0395] 式 (C-2) 代表的化合物式 (C-2) 更优选是下式 (C-3), (C-4) 或 (C-5) 代表的化合物。

[0396]

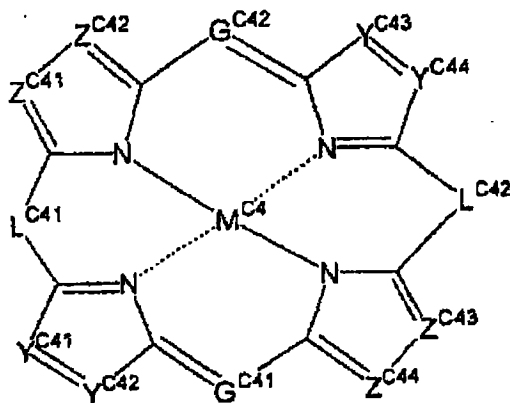


式(C-3)

[0397] 在式 (C-3) 中, M^{C3} 代表金属离子。

[0398] Y^{C31} , Y^{C32} , Y^{C33} 和 Y^{C34} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 G^{C31} 和 G^{C32} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 L^{C31} 和 L^{C32} 每一个独立地代表连接基。 Z^{C31} , Z^{C32} , Z^{C33} , Z^{C34} , Z^{C35} 和 Z^{C36} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

[0399]

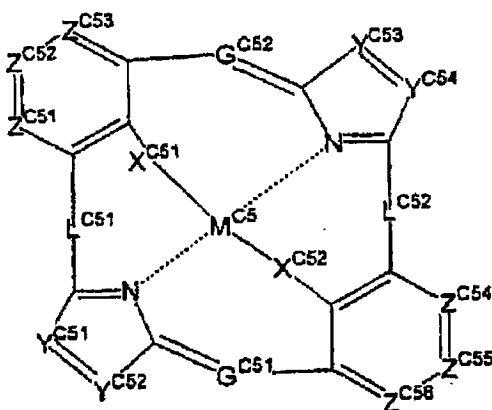


式(C-4)

[0400] 在式 (C-4) 中, M^{C4} 代表金属离子。

[0401] Y^{C41} , Y^{C42} , Y^{C43} 和 Y^{C44} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 G^{C41} 和 G^{C42} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 L^{C41} 和 L^{C42} 每一个独立地代表连接基。 Z^{C41} , Z^{C42} , Z^{C43} 和 Z^{C44} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

[0402]



式(C-5)

[0403] 在式 (C-5) 中, M^{C5} 代表金属离子。

[0404] Y^{C51} , Y^{C52} , Y^{C53} 和 Y^{C54} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 G^{C51} 和 G^{C52} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 L^{C51} 和 L^{C52} 每一个独立地代表连接基。 Z^{C51} , Z^{C52} , Z^{C53} , Z^{C54} , Z^{C55} 和 Z^{C56} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 X^{C51} 和 X^{C52} 每一个独立地代表氧原子、硫原子或取代或未取代的氮原子。

[0405] 下面详细说明式 (C-3) 代表的化合物。

[0406] 在式 (C-3) 中, M^{C3} , L^{C31} , L^{C32} , G^{C31} 和 G^{C32} 分别与式 (C-1) 中的相应 M^{C1} , L^{C11} , L^{C12} , G^{C11} 和 G^{C12} 的定义和优选范围相同。

[0407] Z^{C31} , Z^{C32} , Z^{C33} , Z^{C34} , Z^{C35} 和 Z^{C36} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。每个 Z^{C31} , Z^{C32} , Z^{C33} , Z^{C34} , Z^{C35} 和 Z^{C36} 优选是取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。

[0408] 下面更详细说明式 (C-4) 代表的化合物。

[0409] 在式 (C-4) 中, M^{C4} , L^{C41} , L^{C42} , G^{C41} 和 G^{C42} 分别与式 (C-1) 中的相应 M^{C1} , L^{C11} , L^{C12} , G^{C11} 和 G^{C12} 的定义和优选范围相同。

[0410] Z^{C41} , Z^{C42} , Z^{C43} , 和 Z^{C44} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。每个 Z^{C41} , Z^{C42} , Z^{C43} , 和 Z^{C44} 优选是取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。

[0411] 下面更详细说明式 (C-5) 代表的化合物。

[0412] M^{C5} , L^{C51} , L^{C52} , G^{C51} 和 G^{C52} 分别与式 (C-1) 中的相应 M^{C1} , L^{C11} , L^{C12} , G^{C11} 和 G^{C12} 的定义和优选范围相同。

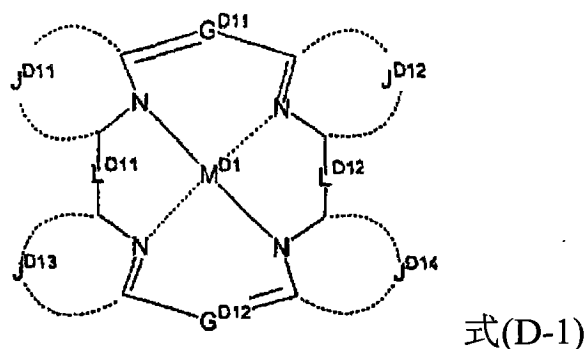
[0413] Z^{C51} , Z^{C52} , Z^{C53} , Z^{C54} , Z^{C55} 和 Z^{C56} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。每个 Z^{C51} , Z^{C52} , Z^{C53} , Z^{C54} , Z^{C55} 和 Z^{C56} 优选是取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。

[0414] X^{C51} 和 X^{C52} 每一个独立地代表氧原子、硫原子或取代或未取代的氮原子。每个 X^{C51} 和 X^{C52} 优选是氧原子或硫原子, 更优选氧原子。

[0415] 式 (C-1) 代表的化合物的具体例子包括但不限于 JP-A No. 2007-103493 中记载的化合物 (C-1) ~ (C-63)。

[0416] 本发明中适用的优选金属络合物的例子是下式 (D-1) 代表的化合物。

[0417]



[0418] 在式 (D-1) 中, M^{D1} 代表金属离子。

[0419] G^{D11} 和 G^{D12} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 J^{D11} , J^{D12} , J^{D13} 和 J^{D14} 每一个独立地代表形成 5- 元环所需的原子团。 L^{D11} 和 L^{D12} 每一个独立地代表连接基。

[0420] 下面详细说明式 (D-1)。

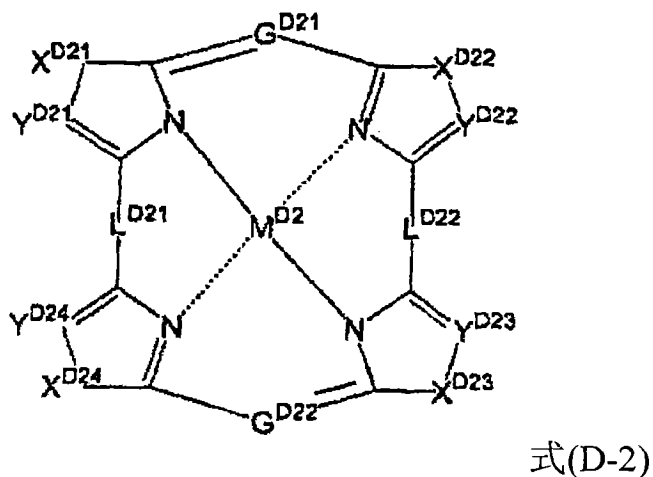
[0421] 在式 (D-1) 中, M^{D1} , L^{D11} 和 L^{D12} 分别与式 (A-1) 中的相应 M^{A1} , L^{A11} 和 L^{A12} 的定义和优选范围相同。

[0422] G^{D11} 和 G^{D12} 分别与式 (C-1) 中的相应 G^{C11} 和 G^{C12} 的定义和优选范围相同。

[0423] J^{D11} , J^{D12} , J^{D13} 和 J^{D14} 每一个独立地代表形成含有该原子团的含氮 5- 元杂环所需的原子团。

[0424] 式 (D-1) 代表的化合物更优选是下式 (D-2)、(D-3) 或 (D-4) 代表的化合物。

[0425]



[0426] 在式 (D-2) 中, M^{D2} 代表金属离子。

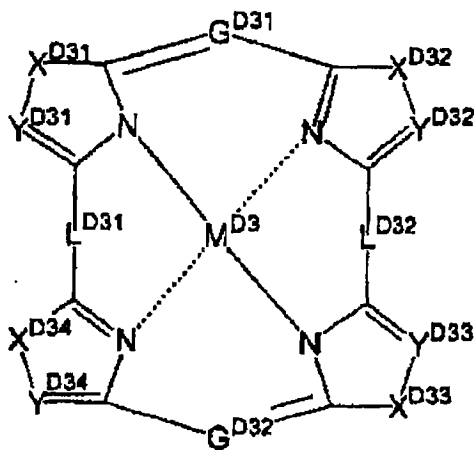
[0427] G^{D21} 和 G^{D22} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

[0428] Y^{D21} , Y^{D22} , Y^{D23} 和 Y^{D24} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

[0429] X^{D21} , X^{D22} , X^{D23} 和 X^{D24} 每一个独立地代表氧原子、硫原子、 $-NR^{D21}-$ 或 $-C(R^{D22})R^{D23}-$ 。

[0430] R^{D21} , R^{D22} 和 R^{D23} 每一个独立地代表氢原子或取代基。 L^{D21} 和 L^{D22} 每一个独立地代表连接基。

[0431]



式(D-3)

[0432] 在式 (D-3) 中, M^{D3} 代表金属离子。

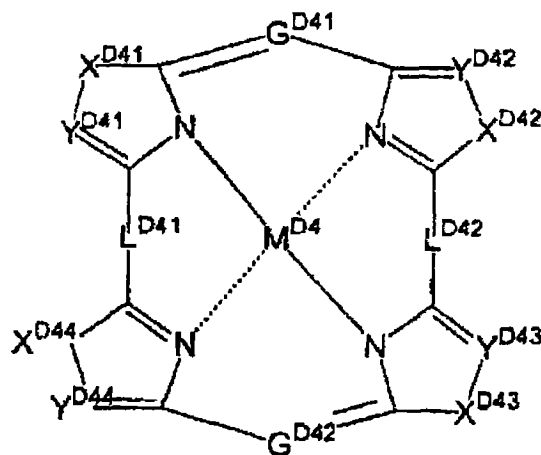
[0433] G^{D31} 和 G^{D32} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

[0434] Y^{D31} , Y^{D32} , Y^{D33} 和 Y^{D34} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

[0435] X^{D31} , X^{D32} , X^{D33} 和 X^{D34} 每一个独立地代表氧原子、硫原子、 $-NR^{D31}-$ 或 $-C(R^{D32})R^{D33}-$ 。

[0436] R^{D31} , R^{D32} 和 R^{D33} 每一个独立地代表氢原子或取代基。 L^{D31} 和 L^{D32} 每一个独立地代表连接基。

[0437]



式(D-4)

[0438] 在式 (D-4) 中, M^{D4} 代表金属离子。

[0439] G^{D41} 和 G^{D42} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

[0440] Y^{D41} , Y^{D42} , Y^{D43} 和 Y^{D44} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

[0441] X^{D41} , X^{D42} , X^{D43} 和 X^{D44} 每一个独立地代表氧原子、硫原子、 $-NR^{D41}-$ 或 $-C(R^{D42})R^{D43}-$ 。

[0442] R^{D41} , R^{D42} 和 R^{D43} 每一个独立地代表氢原子或取代基。 L^{D41} 和 L^{D42} 每一个独立地代表连接基。

[0443] 下面详细说明式 (D-2)。

[0444] 在式 (D-2) 中, M^{D2} , L^{D21} , L^{D22} , G^{D21} 和 G^{D22} 分别与式 (D-1) 中的相应 M^{D1} , L^{D11} , L^{D12} , G^{D11} 和 G^{D12} 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。

[0445] Y^{D21} , Y^{D22} , Y^{D23} 和 Y^{D24} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子, 优选是取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。

[0446] X^{D21} , X^{D22} , X^{D23} 和 X^{D24} 每一个独立地代表氧原子、硫原子、 NR^{D21} 或 $-C(R^{D22})R^{D23}-$, 优选硫原子、 $-NR^{D21}-$ 或 $-C(R^{D22})R^{D23}-$, 更优选 $-NR^{D21}-$ 或 $-C(R^{D22})R^{D23}-$, 进一步更优选 $-NR^{D21}-$ 。

[0447] R^{D21} , R^{D22} 和 R^{D23} 每一个独立地代表氢原子或取代基。 R^{D21} , R^{D22} 或 R^{D23} 代表的取代基例如可以是烷基 (优选具有 1 ~ 20 个碳原子, 更优选具有 1 ~ 12 个碳原子, 特别优选具有 1 ~ 8 个碳原子, 其例子包括甲基、乙基、异丙基、叔丁基、正辛基、正癸基、正十六烷基、环丙基、环戊基和环己基)、烯基 (优选具有 2 ~ 20 个碳原子, 更优选具有 2 ~ 12 个碳原子, 特别优选具有 2 ~ 8 个碳原子, 其例子包括乙烯基、烯丙基、2-丁烯基和 3-戊烯基)、炔基 (优选具有 2 ~ 20 个碳原子, 更优选具有 2 ~ 12 个碳原子, 特别优选具有 2 ~ 8 个碳原子, 其例子包括炔丙基和 3-戊炔基);

[0448] [0328] 芳基 (优选具有 6 ~ 30 个碳原子, 更优选具有 6 ~ 20 个碳原子, 特别优选具有 6 ~ 12 个碳原子, 其例子包括苯基、p-甲基苯基和萘基)、取代的羰基 (优选具有 1 ~ 20 个碳原子, 更优选具有 1 ~ 16 个碳原子, 特别优选具有 1 ~ 12 个碳原子, 其例子包括乙酰基、苯甲酰基、甲氧基羰基、苯氧基羰基、二甲基氨基羰基和苯基氨基羰基)、取代的磺酰基 (优选具有 1 ~ 20 个碳原子, 更优选具有 1 ~ 16 个碳原子, 特别优选具有 1 ~ 12 个碳原子, 其例子包括甲磺酰基和甲苯磺酰基);

[0449] 杂环基 (如脂肪族杂环基或芳香族杂环基, 杂环基优选具有 1 ~ 50 个碳原子, 更优选具有 1 ~ 30 个碳原子, 更优选具有 2 ~ 12 个碳原子, 优选含有氧原子、硫原子或氮原子, 其例子包括咪唑基、吡啶基、呋喃基、哌啶基、吗啉基、苯并噁唑基和三唑基)。每个 R^{D21} , R^{D22} 和 R^{D23} 优选是烷基、芳基或芳香族杂环基, 更优选烷基或芳基, 再更优选芳基。

[0450] 下面详细说明式 (D-3)。

[0451] 在式 (D-3) 中, M^{D3} , L^{D31} , L^{D32} , G^{D31} 和 G^{D32} 分别与式 (D-1) 中的相应 M^{D1} , L^{D11} , L^{D12} , G^{D11} 和 G^{D12} 的定义和优选范围相同。

[0452] X^{D31} , X^{D32} , X^{D33} 和 X^{D34} 分别与式 (D-2) 中的相应 X^{D21} , X^{D22} , X^{D23} 和 X^{D24} 的定义和优选范围相同。

[0453] Y^{D31} , Y^{D32} , Y^{D33} 和 Y^{D34} 分别与式 (D-2) 中的相应 Y^{D21} , Y^{D22} , Y^{D23} 和 Y^{D24} 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。

[0454] 下面详细说明式 (D-4)。

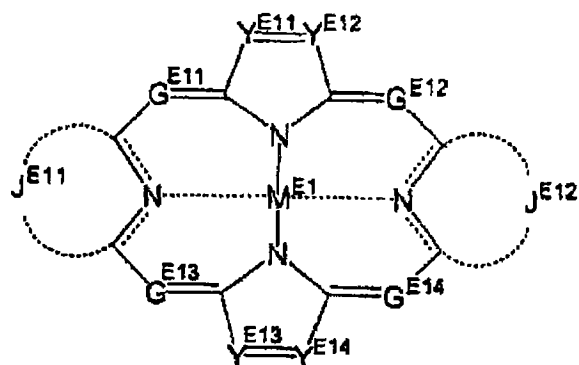
[0455] 在式 (D-4) 中, M^{D4} , L^{D41} , L^{D42} , G^{D41} 和 G^{D42} 分别与式 (D-1) 中的相应 M^{D1} , L^{D11} , L^{D12} , G^{D11} 和 G^{D12} 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。

[0456] X^{D41} , X^{D42} , X^{D43} 和 X^{D44} 分别与式 (D-2) 中的相应 X^{D21} , X^{D22} , X^{D23} 和 X^{D24} 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。 Y^{D41} , Y^{D42} , Y^{D43} 和 Y^{D44} 分别与式 (D-2) 中的相应 Y^{D21} , Y^{D22} , Y^{D23} 和 Y^{D24} 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。

[0457] 式 (D-1) 代表的化合物的具体例子包括但不限于 JP-A No. 2007-103493 中记载的化合物 (D-1) ~ (D-24)。

[0458] 本发明中适用的优选金属络合物的例子是下式 (E-1) 代表的化合物。

[0459]



式(E-1)

[0460] 在式 (E-1) 中, M^{E1} 代表金属离子。 J^{E11} 和 J^{E12} 每一个独立地代表形成 5-元环所需的原子团。 G^{E11} , G^{E12} , G^{E13} 和 G^{E14} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 Y^{E11} , Y^{E12} , Y^{E13} 和 Y^{E14} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

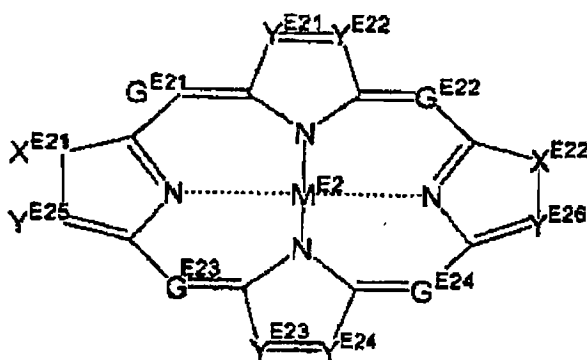
[0461] 下面详细说明式 (E-1)。

[0462] 在式 (E-1) 中, M^{E1} 与式 (A-1) 中的 M^{A1} 的定义相同, 其优选的例子也相同。 G^{E11} , G^{E12} , G^{E13} 和 G^{E14} 与式 (C-1) 中的 G^{C11} 和 G^{C12} 的定义相同, 其优选的例子也相同。

[0463] J^{E11} 和 J^{E12} 与式 (D-1) 中的 $J^{D11} \sim J^{D14}$ 的定义相同, 其优选的例子也相同。 Y^{E11} , Y^{E12} , Y^{E13} 和 Y^{E14} 分别与式 (C-2) 中的相应 $Y^{C21} \sim Y^{C24}$ 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。

[0464] 式 (E-1) 代表的化合物更优选是下式 (E-2) 或 (E-3) 代表的化合物。

[0465]

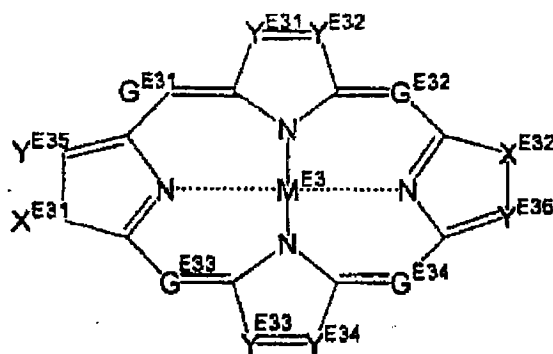


式(E-2)

[0466] 在式 (E-2) 中, M^{E2} 代表金属离子。 G^{E21} , G^{E22} , G^{E23} 和 G^{E24} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 Y^{E21} , Y^{E22} , Y^{E23} , Y^{E24} , Y^{E25} 和 Y^{E26} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

[0467] X^{E21} 和 X^{E22} 每一个独立地代表氧原子、硫原子、 $-NR^{E21}-$ 或 $-C(R^{E22})R^{E23}-$ 。 R^{E21} , R^{E22} 和 R^{E23} 每一个独立地代表氢原子或取代基。

[0468]



式(E-3)

[0469] 在式 (E-3) 中, M^{E3} 代表金属离子。 G^{E31} , G^{E32} , G^{E33} 和 G^{E34} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 Y^{E31} , Y^{E32} , Y^{E33} , Y^{E34} , Y^{E35} 和 Y^{E36} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 X^{E31} 和 X^{E32} 每一个独立地代表氧原子、硫原子、 $-NR^{E31}-$ 或 $-C(R^{E32})R^{E33}-$ 。 R^{E31} , R^{E32} 和 R^{E33} 每一个独立地代表氢原子或取代基。

[0470] 下面详细说明式 (E-2)。

[0471] 在式 (E-2) 中, M^{E2} , G^{E21} , G^{E22} , G^{E23} , G^{E24} , Y^{E21} , Y^{E22} , Y^{E23} 和 Y^{E24} 分别与式 (E-1) 中的相应 M^{E1} , G^{E11} , G^{E12} , G^{E13} , G^{E14} , Y^{E11} , Y^{E12} , Y^{E13} 和 Y^{E14} 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。 X^{E21} 和 X^{E22} 分别与式 (D-2) 中的相应 X^{D21} 和 X^{D22} 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。

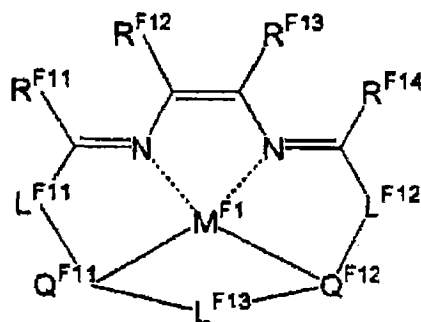
[0472] 下面详细说明式 (E-3)。

[0473] 在式 (E-3) 中, M^{E3} , G^{E31} , G^{E32} , G^{E33} , G^{E34} , Y^{E31} , Y^{E32} , Y^{E33} 和 Y^{E34} 分别与式 (E-1) 中的相应 M^{E1} , G^{E11} , G^{E12} , G^{E13} , G^{E14} , Y^{E11} , Y^{E12} , Y^{E13} 和 Y^{E14} 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。 X^{E31} 和 X^{E32} 分别与式 (D-2) 中的相应 X^{D21} 和 X^{D22} 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。

[0474] 式 (E-1) 代表的化合物的具体例子包括但不限于 JP-A No. 2007-103493 中记载的化合物 (E-1) ~ (E-15)。

[0475] 本发明中适用的优选金属络合物的例子是下式 (F-1) 代表的化合物。

[0476]



式(F-1)

[0477] 在式 (F-1) 中, M^{F1} 代表金属离子。 L^{F11} , L^{F12} 和 L^{F13} 每一个独立地代表连接基。 R^{F11} , R^{F12} , R^{F13} 和 R^{F14} 每一个独立地代表氢原子或取代基。 R^{F11} 和 R^{F12} 在可能时可以彼此结合形成 5-元环。 R^{F12} 和 R^{F13} 在可能时可以彼此结合形成环。 R^{F13} 和 R^{F14} 在可能时可以彼此结合形成 5-元环。 Q^{F11} 和 Q^{F12} 每一个独立地代表含有通过配位键、离子键或共价键与 M^{F1} 结合的原子的一部分结构。

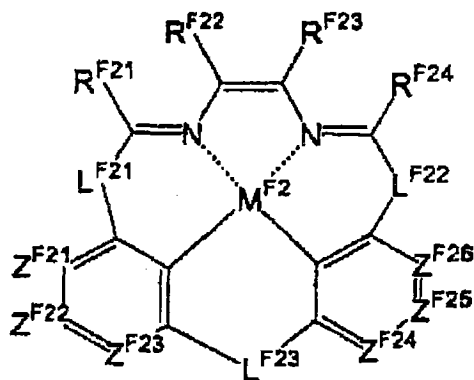
[0478] 下面详细说明式 (F-1) 代表的化合物。

[0479] 在式 (F-1) 中, M^{F1} , L^{F11} , L^{F12} , L^{F13} , Q^{F11} 和 Q^{F12} 分别与式 (A-1) 中的相应 M^{A1} , L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} , Q^{A11} 和 Q^{A12} 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。 R^{F11} , R^{F12} , R^{F13} 和 R^{F14} 每一个独立地

代表氢原子或取代基。 R^{F11} 和 R^{F12} 在可能时可以彼此结合形成 5-元环。 R^{F12} 和 R^{F13} 在可能时可以彼此结合形成环。 R^{F13} 和 R^{F14} 在可能时可以彼此结合形成 5-元环。 R^{F11} , R^{F12} , R^{F13} 和 R^{F14} 代表的取代基可以选自式 (C-1) 中的相应 $R^{C11} \sim R^{C14}$ 代表的取代基上述的例子。在一个优选实施方案中, R^{F11} 和 R^{F12} 彼此结合形成 5-元环, 并且 R^{F13} 和 R^{F14} 彼此结合形成 5-元环。在另一个优选实施方案中, R^{F12} 和 R^{F13} 彼此结合形成芳香族环。

[0480] 式 (F-1) 代表的化合物更优选是式 (F-2)、(F-3) 或 (F-4) 代表的化合物。

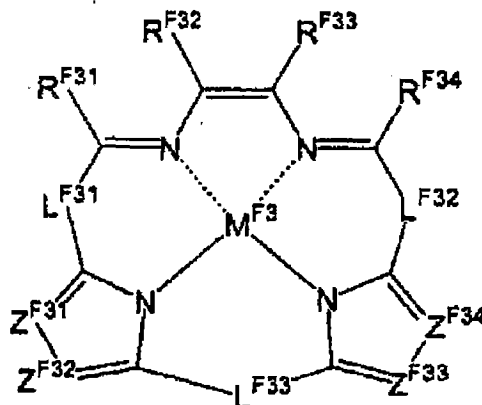
[0481]



式(F-2)

[0482] 在式 (F-2) 中, M^{F2} 代表金属离子。 L^{F21} , L^{F22} 和 L^{F23} 每一个独立地代表连接基。 R^{F21} , R^{F22} , R^{F23} 和 R^{F24} 每一个独立地代表取代基。 R^{F21} 和 R^{F22} 在可能时可以彼此结合形成 5-元环。 R^{F22} 和 R^{F23} 在可能时可以彼此结合形成环。 R^{F23} 和 R^{F24} 在可能时可以彼此结合形成 5-元环。 Z^{F21} , Z^{F22} , Z^{F23} , Z^{F24} , Z^{F25} 和 Z^{F26} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

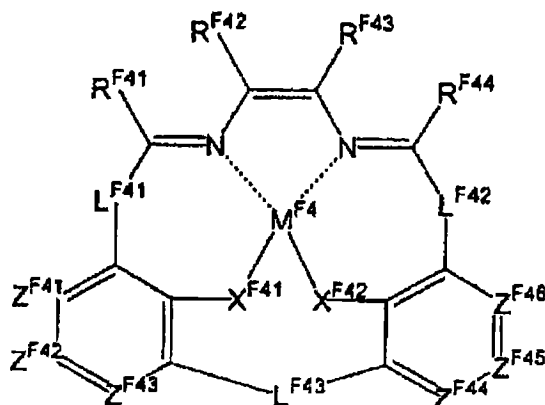
[0483]



式(F-3)

[0484] 在式 (F-3) 中, M^{F3} 代表金属离子。 L^{F31} , L^{F32} 和 L^{F33} 每一个独立地代表连接基。 R^{F31} , R^{F32} , R^{F33} 和 R^{F34} 每一个独立地代表取代基。 R^{F31} 和 R^{F32} 在可能时可以彼此结合形成 5-元环。 R^{F32} 和 R^{F33} 在可能时可以彼此结合形成环。 R^{F33} 和 R^{F34} 在可能时可以彼此结合形成 5-元环。 Z^{F31} , Z^{F32} , Z^{F33} 和 Z^{F34} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。

[0485]



式(F-4)

[0486] 在式 (F-4) 中, M^{F4} 代表金属离子。 L^{F41} , L^{F42} 和 L^{F43} 每一个独立地代表连接基。 R^{F41} , R^{F42} , R^{F43} 和 R^{F44} 每一个独立地代表取代基。 R^{F41} 和 R^{F42} 在可能时可以彼此结合形成 5- 元环。 R^{F42} 和 R^{F43} 在可能时可以彼此结合形成环。 R^{F43} 和 R^{F44} 在可能时可以彼此结合形成 5- 元环。 Z^{F41} , Z^{F42} , Z^{F43} , Z^{F44} , Z^{F45} 和 Z^{F46} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。 X^{F41} 和 X^{F42} 每一个独立地代表氧原子、硫原子或取代或未取代的氮原子。

[0487] 下面详细说明式 (F-2) 代表的化合物。

[0488] M^F , L^{F21} , L^{F22} , L^{F23} , R^{F21} , R^{F22} , R^{F23} 和 R^{F24} 分别与式 (F-1) 中的相应 M^{F1} , L^{F11} , L^{F12} , L^{F13} , R^{F11} , R^{F12} , R^{F13} 和 R^{F14} 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。

[0489] Z^{F21} , Z^{F22} , Z^{F23} , Z^{F24} , Z^{F25} 和 Z^{F26} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。每个 Z^{F21} , Z^{F22} , Z^{F23} , Z^{F24} , Z^{F25} 和 Z^{F26} 优选是取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。当碳原子被取代时, 取代基可以选自在式 (A-1) 中的 L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 或 L^{A14} 代表的二价连接基上的上述取代基的例子。

[0490] 下面详细说明式 (F-3) 代表的化合物。

[0491] 在式 (F-3) 中, M^F , L^{F31} , L^{F32} , L^{F33} , R^{F31} , R^{F32} , R^{F33} 和 R^{F34} 分别与式 (F-1) 中的相应 M^{F1} , L^{F11} , L^{F12} , L^{F13} , R^{F11} , R^{F12} , R^{F13} 和 R^{F14} 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。 Z^{F31} , Z^{F32} , Z^{F33} 和 Z^{F34} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。每个 Z^{F31} , Z^{F32} , Z^{F33} 和 Z^{F34} 优选是取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。当碳原子被取代时, 取代基可以选自在式 (A-1) 中的 L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 或 L^{A14} 代表的二价连接基上的上述取代基的例子。

[0492] 下面详细说明式 (F-4) 代表的化合物。

[0493] 在式 (F-4) 中, M^F , L^{F41} , L^{F42} , L^{F43} , R^{F41} , R^{F42} , R^{F43} 和 R^{F44} 分别与式 (F-1) 中的相应 M^{F1} , L^{F11} , L^{F12} , L^{F13} , R^{F11} , R^{F12} , R^{F13} 和 R^{F14} 的定义相同, 其优选的例子也分别相同。

[0494] Z^{F41} , Z^{F42} , Z^{F43} , Z^{F44} , Z^{F45} 和 Z^{F46} 每一个独立地代表氮原子或取代或未取代的碳原子。每个 Z^{F41} , Z^{F42} , Z^{F43} , Z^{F44} , Z^{F45} 和 Z^{F46} 优选是取代或未取代的碳原子, 更优选未取代的碳原子。当碳原子被取代时, 取代基可以选自在式 (A-1) 中的 L^{A11} , L^{A12} , L^{A13} 或 L^{A14} 代表的二价连接基上的上述取代基的例子。

[0495] X^{F41} 和 X^{F42} 每一个独立地代表氧原子、硫原子或取代或未取代的氮原子。每个 X^{F41} 和 X^{F42} 优选是氧原子或硫原子, 更优选氧原子。

[0496] 式 (F-1) 代表的化合物的具体例子包括但不限于 JP-A No. 2007-103493 中记载的化合物 (F-1) ~ (F-52)。

[0497] 式 (A-1) ~ (F-1) 中任一个代表的化合物均可以通过已知方法合成。

[0498] < 空穴输送性主体材料 >

[0499] 从改善耐久性和降低驱动电压的观点来看,本发明的发光层中使用的空穴输送性主体材料优选其离子电势 I_p 为 $5.1\text{eV} \sim 6.4\text{eV}$,更优选其离子电势为 $5.4\text{eV} \sim 6.2\text{eV}$,再更优选其离子电势为 $5.6\text{eV} \sim 6.0\text{eV}$ 。此外,从改善耐久性和降低驱动电压的观点来看,空穴输送性主体材料优选其电子亲和力 E_a 为 $1.2\text{eV} \sim 3.1\text{eV}$,更优选为 $1.4\text{eV} \sim 3.0\text{eV}$,再更优选为 $1.8\text{eV} \sim 2.8\text{eV}$ 。

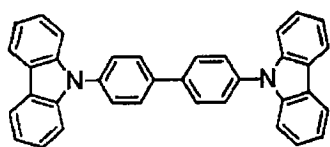
[0500] [0362] 空穴输送性主体材料的具体例子包括:吡咯、呋唑、吡唑、咪唑、多芳基烷烃、吡唑啉、吡唑啉酮、苯二胺、芳基胺、氨基取代的查尔酮、苯乙烯基蒽、茚酮、脞、二苯乙烯、硅氮烷、芳香族叔胺化合物、苯乙烯基胺化合物、芳香族 dimethylidene 化合物、卟啉化合物、聚硅烷化合物、聚(N-乙烯基呋唑)、苯胺共聚物、导电性高分子量低聚物(如噻吩低聚物或聚噻吩);有机硅烷、碳膜和其衍生物。

[0501] 其中,呋唑衍生物、吡唑衍生物、芳香族叔胺化合物和噻吩衍生物是优选的。特别地,在分子中具有多个选自呋唑骨架、吡唑骨架和芳香族叔胺骨架的骨架的化合物是优选的。此外,具有呋唑骨架和/或吡唑骨架的化合物是优选的。

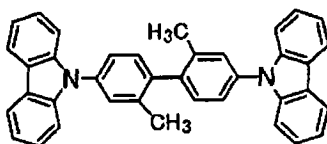
[0502] 空穴输送性主体材料的具体例子包括但不限于以下化合物。

[0503]

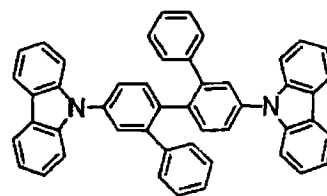
H-1



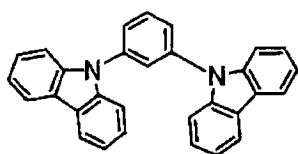
H-2



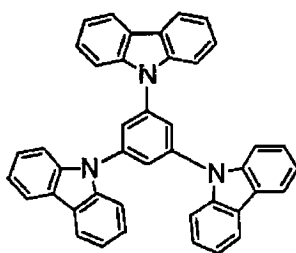
H-3



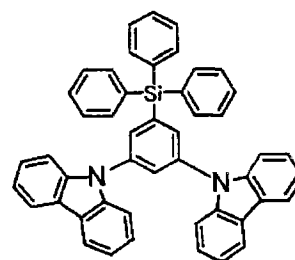
H-4



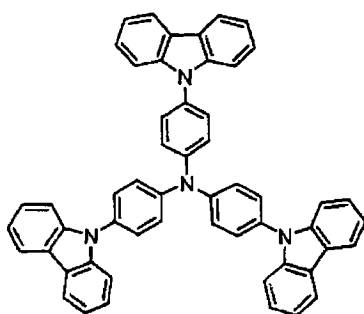
H-5



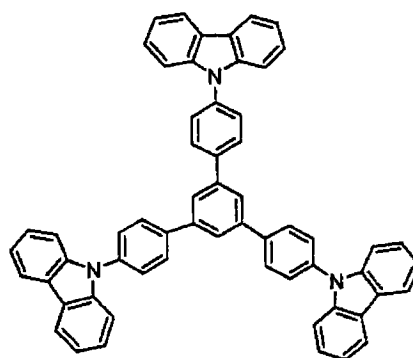
H-6



H-7

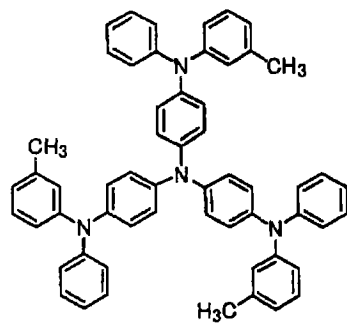


H-8

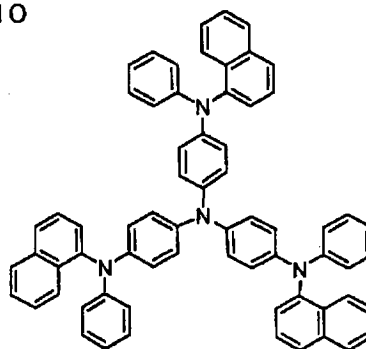


[0504]

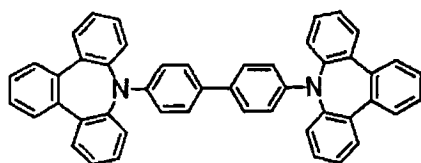
H-9



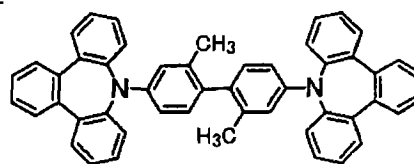
H-10



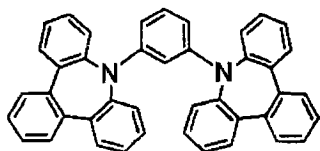
H-11



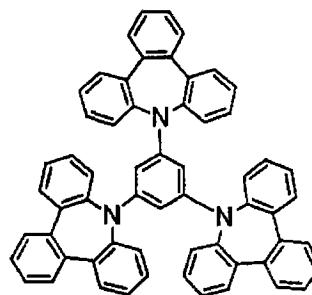
H-12



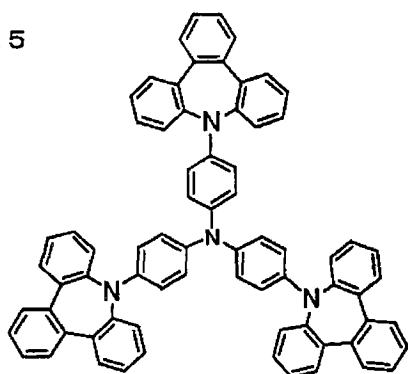
H-13



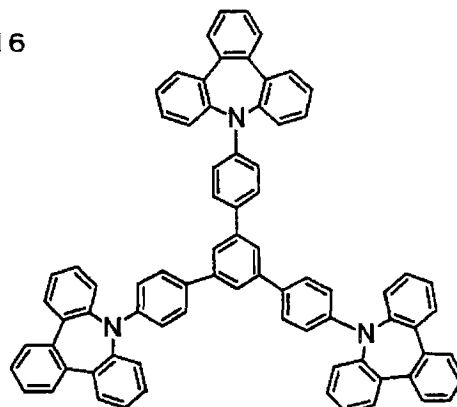
H-14



H-15

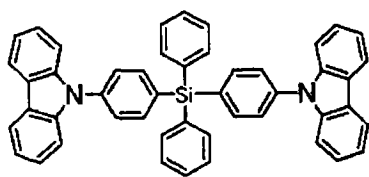


H-16

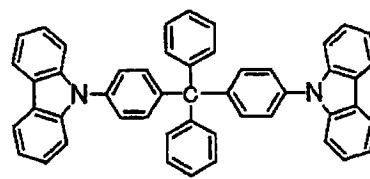


[0505]

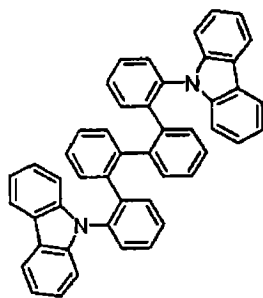
H-17



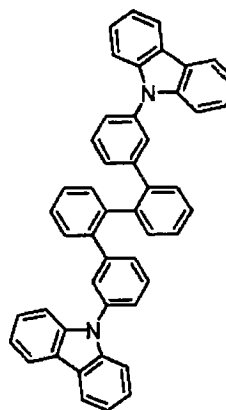
H-18



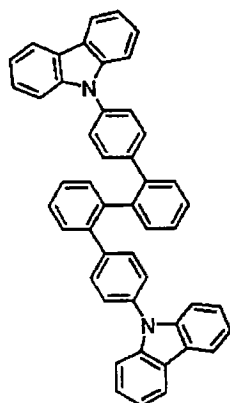
H-19



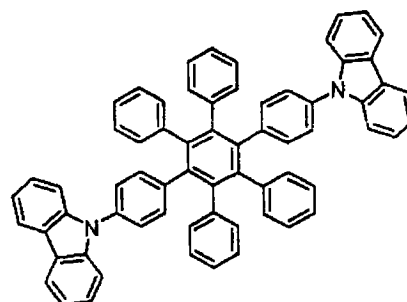
H-20



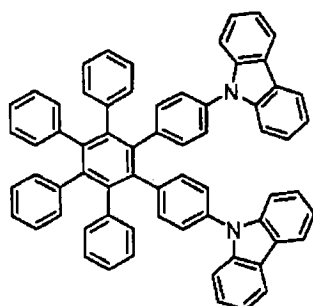
H-21



H-22

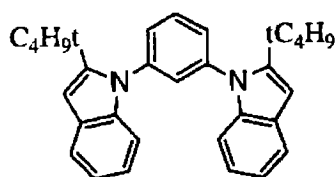


H-23

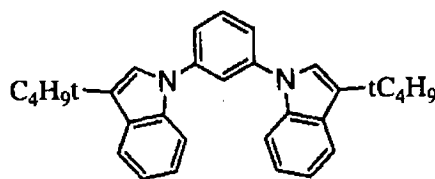


[0506]

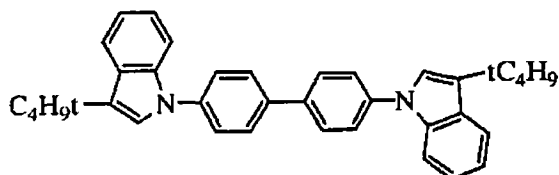
H-24



H-25



H-26



[0507] < 电子输送性磷光材料与空穴输送性主体材料的混合比 >

[0508] 从在获得充足发光强度的同时抑制会合发光和浓度消光的观点来看,按发光层总量计,本发明的发光层中电子输送性磷光材料与空穴输送性主体材料的按质量计的混合比优选为 5/95 ~ 50/50,更优选 10/90 ~ 30/70。

[0509] < 膜厚 >

[0510] 从发光效率、驱动电压和亮度的观点来看,发光层的膜厚优选为 10nm ~ 600nm,更优选 20nm ~ 300nm。当发光层的厚度很小时,尽管可以在低驱动电压下以高亮度工作,但是从发光层逸出的电荷很多,从而导致发光效率降低。当发光层的膜厚很大时,驱动电压较高,使其应用受到限制。

[0511] < 层构成 >

[0512] 发光层可以由一层、两层或两个以上的层构成。在实施方案中,多个发光层分别发出具有不同发光颜色的光。此外,当发光层具有叠层结构时,尽管叠层结构中所含的各层的厚度没有特别限制,但各发光层的总膜厚优选在上述范围内。

[0513] 3. 空穴注入层和空穴输送层

[0514] 空穴注入层和空穴输送层是具有以下功能的层:从阳极或阳极侧接收空穴并将空穴输送到阴极侧。具体而言,空穴注入层和空穴输送层优选包括选自例如吡咯衍生物、咪唑衍生物、吡啶衍生物、咪唑衍生物、多芳基烷烃衍生物、吡啶啉衍生物、吡啶啉酮衍生物、苯二胺衍生物、芳基胺衍生物、氨基取代的查尔酮衍生物、苯乙烯基蒽衍生物、茚酮衍生物、腈衍生物、二苯乙烯衍生物、硅氮烷衍生物、芳香族叔胺化合物、苯乙烯基胺化合物、芳香族 dimethyldine、卟啉化合物、有机硅烷衍生物和碳的物质。

[0515] 从驱动电压降低的和驱动耐久性改善的观点来看,本发明的有机 EL 装置中的空穴注入层和空穴输送层中的至少一个可以优选含有接收电子的掺杂剂。

[0516] 只要引入空穴注入层或空穴输送层中的接收电子的掺杂剂具有电子接收性和具有氧化有机化合物的性能,其可以是无机化合物或有机化合物。具体而言,优选的无机化合物包括卤化物,如氯化铁、氯化铝、氯化镓、氯化铟或五氯化铋,以及金属氧化物,如五氧化二钒或三氧化二钨。

[0517] 当接收电子的掺杂剂是有机化合物时,该化合物优选是具有诸如硝基、卤素、氰基或三氟甲基等取代基的化合物、苯醌化合物、酸酐化合物或富勒烯。

[0518] 其具体例子包括六氰基丁二烯、六氰基苯、四氰基乙烯、四氰基对苯二醌二甲烷、四氟四氰基对苯二醌二甲烷、四氟对苯醌、四氯对苯醌、四溴对苯醌、对苯醌、2,6-二氯苯醌、2,5-二氯苯醌、四甲基苯醌、1,2,4,5-四氰基苯、o-二氰基苯、p-二氰基苯、1,4-二氰基四氟苯、2,3-二氯-5,6-二氰基苯醌、p-二硝基苯、m-二硝基苯、o-二硝基苯、p-氰基硝基苯、m-氰基硝基苯、o-氰基硝基苯、1,4-萘醌、2,3-二氯萘醌、1-硝基萘、2-硝基萘、1,3-二硝基萘、1,5-二硝基萘、9-氰基蒽、9-硝基蒽、9,10-蒽醌、1,3,6,8-四硝基呋唑、2,4,7-三硝基-9-蒽酮、2,3,5,6-四氰基吡啶、马来酸酐、邻苯二甲酸酐、富勒烯 C60 和富勒烯 C70。

[0519] 其他具体例子包括记载在专利文献如 JP-A No. 6-212153、11-111463、11-251067、2000-196140、2000-286054、2000-315580、2001-102175、2001-160493、2002-252085、2002-56985、2003-157981、2003-217862、2003-229278、2004-342614、2005-72012、2005-166637 和 2005-209643 中的化合物。

[0520] 其中,六氰基丁二烯、六氰基苯、四氰基乙烯、四氰基对苯二醌二甲烷、四氟四氰基对苯二醌二甲烷、四氟对苯醌、四氯对苯醌、四溴对苯醌、对苯醌、2,6-二氯苯醌、2,5-二氯苯醌、1,2,4,5-四氰基苯、1,4-二氰基四氟苯、2,3-二氯-5,6-二氰基苯醌、p-二硝基苯、m-二硝基苯、o-二硝基苯、1,4-萘醌、2,3-二氯萘醌、1,3-二硝基萘、1,5-二硝基萘、9,10-蒽醌、1,3,6,8-四硝基呋唑、2,4,7-三硝基-9-蒽酮、2,3,5,6-四氰基吡啶和 C60 是优选的。六氰基丁二烯、六氰基苯、四氰基亚乙基、四氰基对苯二醌二甲烷、四氟四氰基对苯二醌二甲烷、四氟对苯醌、四氯对苯醌、四溴对苯醌、2,6-二氯苯醌、2,5-二氯苯醌、2,3-二氯萘醌、1,2,4,5-四氰基苯、2,3-二氯-5,6-二氰基苯醌和 2,3,5,6-四氰基吡啶是更优选的;四氟四氰基对苯二醌二甲烷是特别优选的。

[0521] 这些接收电子的掺杂剂可以单独使用,或可以混合使用两种以上的接收电子的掺杂剂。接收电子的掺杂剂的用量可以根据材料种类而不同,但相对于空穴输送层的材料,优选是 0.01 质量%~50 质量%,更优选 0.05 质量%~20 质量%,再更优选 0.1 质量%~10 质量%。如果相对于空穴输送层材料,接收电子的掺杂剂的用量小于 0.01 质量%,则本发明的效果不足。如果其用量超过 50 质量%,则空穴输送能力受损。

[0522] 从降低驱动电压的观点来看,空穴注入层和空穴输送层的厚度优选均为 500nm 以下。

[0523] 空穴输送层的厚度优选是 1nm~500nm,更优选 5nm~100nm。空穴注入层的厚度优选是 0.1nm~500nm,更优选 1nm~300nm。

[0524] 空穴注入层和空穴输送层均可以是包含一种或两种以上的上述材料的单层结构,或者空穴注入层和空穴输送层可以具有包含相同组成或不同组成的多个层的多层结构。

[0525] 4. 电子注入层和电子输送层

[0526] 电子注入层和电子输送层是具有以下功能的层:从阴极或阴极侧接收电子并将电子输送到阳极侧。具体而言,电子注入层和电子输送层优选包括选自例如三唑衍生物、噁唑衍生物、噁二唑衍生物、咪唑衍生物、茚酮衍生物、蒽醌二甲烷衍生物、蒽酮衍生物、二苯基苯醌衍生物、硫代吡喃二氧化物衍生物、碳二亚胺衍生物、亚苄基甲烷衍生物、二苯乙

烯基吡嗪衍生物、具有诸如萘环或二萘嵌苯环等芳香族环的四羧酸酐、酞菁衍生物、诸如 8-羟基喹啉衍生物的金属络合物和具有酞菁、苯并噁唑或苯并噻唑作为配体的金属络合物等各种金属络合物、和有机硅烷衍生物的物质。

[0527] 从驱动电压降低和驱动耐久性改善的观点来看,本发明的有机 EL 装置的电子注入层和电子输送层中的至少一个可以优选含有给予电子的掺杂剂。

[0528] 引入电子注入层或电子输送层中的给予电子的掺杂剂具有给予电子性并且可以还原有机化合物。给予电子的掺杂剂的例子包括碱金属(如 Li)、碱土金属(如 Mg)、包括稀土金属的过渡金属和还原性有机化合物。

[0529] 金属优选的是功函数为 4.2eV 以下的金属,具体例子包括 Li、Na、K、Be、Mg、Ca、Sr、Ba、Y、Cs、La、Sm、Gd 和 Yb。

[0530] 还原性有机化合物的例子包括含氮化合物、含硫化合物和含磷化合物等。此外,优选使用例如在 JP-A No. 6-212153、2000-196140、2003-68468、2003-229278 和 2004-342614 中记载的材料作为给予电子的掺杂剂。

[0531] 这些给予电子的掺杂剂可以单独使用或可以组合使用两种以上的给予电子的掺杂剂。给予电子的掺杂剂的用量可以根据材料种类而不同,但相对于构成电子输送层的材料,优选是 0.1 质量%~99 质量%,更优选 1.0 质量%~80 质量%,再更优选 2.0 质量%~70 质量%。如果相对于电子输送层材料,给予电子的掺杂剂用量小于 0.1 质量%,则本发明的效果不足。如果其用量超过 99 质量%,则电子输送能力受损。

[0532] 从降低驱动电压的观点来看,电子注入层和电子输送层的厚度分别优选为 500nm 以下。

[0533] 电子输送层的厚度优选是 1~500nm,更优选 10~100nm。电子注入层的厚度优选是 0.1~200nm,更优选 0.5~50nm。

[0534] 电子注入层和电子输送层均可以是包含一种或两种以上的上述材料的单层结构,或者电子注入层和电子输送层均可以具有包含相同组成或不同组成的多个层构成的多层结构。

[0535] 当电子输送层是邻接发光层的层时,从改善耐久性的观点来看,构成电子输送层的材料可以是离子电势为 6.0eV 以下的材料。

[0536] 5. 基板

[0537] 优选的是本发明中使用的基板不会使从有机化合物层发出的光散射或衰减。基板的材料的具体例子包括:氧化钇稳定的氧化锆(YSZ);诸如玻璃等无机材料;诸如聚对苯二甲酸乙二醇酯、聚苯二甲酸丁二醇酯和聚萘二甲酸乙二醇酯等聚酯;诸如聚苯乙烯、聚碳酸酯、聚醚砜、聚芳酯、聚酰亚胺、聚环烯烃、降冰片烯树脂和聚(氯三氟乙烯)等有机材料。

[0538] 例如,当玻璃用作基板时,为减小离子从玻璃溶出的量,玻璃优选是无碱玻璃。此外,当使用钠钙玻璃时,钠钙玻璃优选具有诸如氧化硅等阻挡层。另一方面,当使用有机材料时,有机材料优选具有优异的耐热性、尺寸稳定性、耐溶剂性、电绝缘性和加工性。

[0539] 基板的形状、结构和尺寸等没有特别限制,可以根据发光装置的用途和目的等适宜地选择。通常,基板的形状优选为板状。基板的结构可以是单层结构或叠层结构。此外,基板可以仅由一个元件构成或者由两个以上的元件构成。

[0540] 尽管基板可以是无色透明的或有色透明的,但从基板不会使从有机发光层发出的

光散射或衰减的观点来看,基板优选是无色透明的。

[0541] 透湿防止层(气体阻挡层)可以设置在基板的正面或背面上。

[0542] 作为透湿防止层(气体阻挡层)的材料,优选可以使用诸如氮化硅或氧化硅等无机物质。可以通过例如射频溅射法形成透湿防止层(气体阻挡层)。当使用热塑性基板时,根据需要还可以设置一个以上的硬涂层或下涂层。

[0543] 6. 电极

[0544] (阳极)

[0545] 阳极通常具有将空穴供应到有机化合物层的电极功能。阳极的形状、结构和尺寸等没有特别限制。此外,阳极材料可以根据发光装置的用途和目的适宜地选自己知的电极材料。如上所述,阳极通常设置为透明阳极。

[0546] 阳极材料优选例如是金属、合金、金属氧化物、导电性化合物和这些物质的混合物,优选功函数为 4.0eV 以上。阳极材料的具体例子包括:诸如用铟或氟等掺杂的氧化锡(ATO、FTO)等导电性金属氧化物;氧化锡、氧化锌、氧化铟、氧化铟锡(ITO)或氧化铟锌(IZO);诸如金、银、铬或镍等金属;这些金属和导电性金属氧化物的混合物和层叠物;诸如碘化铜和硫化铜等无机导电性材料;诸如聚苯胺、聚噻吩或聚吡咯等有机导电性材料;以及无机或有机导电性材料和 ITO 的层叠物。其中,导电性金属氧化物是优选的,从生产性、高电导率和透明性等的观点来看,ITO 是特别优选的。

[0547] 考虑到与构成阳极的材料的相容性,可以根据选自以下的方法在基板上形成阳极:诸如印刷法和涂布法等湿法;诸如真空沉积法、溅射法和离子镀法等物理方法;以及诸如 CVD 和等离子体 CVD 法等化学方法。例如,当选择 ITO 作为阳极的材料时,可以根据直流或射频溅射法、真空沉积法或离子镀法等形成阳极。

[0548] 在本发明的有机电致发光装置中,设置阳极的位置没有特别限制,可以根据发光装置的用途和目的地适宜地选择位置。阳极优选形成在基板上,其中阳极可以设置在基板一侧的整个表面上,或者设置在基板一侧的一部分表面上。

[0549] 关于形成阳极时的图案化,可以使用诸如光刻等化学蚀刻,诸如利用激光蚀刻等物理蚀刻,通过在叠置掩模上的真空沉积或溅射等方法,提离方法或印刷法。

[0550] 阳极的厚度可以根据构成阳极的材料适宜地选择,因此不能唯一地限定。其厚度通常为约 10nm~约 50 μm ,优选为 50nm~20 μm 。

[0551] 阳极的电阻值优选为 $10^3 \Omega/\text{sq}$ 以下,更优选 $10^2 \Omega/\text{sq}$ 以下。当阳极是透明的时,阳极可以是无色透明或有色透明的。为了提取从透明阳极侧发出的光,阳极的透光率优选为 60%以上,更优选 70%以上。

[0552] 透明阳极详细记载在 Yutaka Sawada 编的 "TOUMEI DENKYOKU-MAKUNO SHINTENKAI" (Novel Developments in Transparent Electrode Films), C.M.C. 出版, 1999 中,其内容适用于本发明。当使用耐热性差的塑料基板时,优选的是使用 ITO 或 IZO 在 150°C 以下形成透明电极层。

[0553] (阴极)

[0554] 阴极通常具有将电子注入有机化合物层的电极功能。阴极的形状、结构和尺寸等没有特别限制。此外,阴极材料可以根据发光装置的用途和目的适宜地选自己知的电极材料。

[0555] 阴极材料的例子包括金属、合金、金属氧化物、导电性化合物和这些材料的混合物,功函数为 4.5eV 以下的材料是优选的。其具体例子包括碱金属(例如, Li、Na、K 和 Cs)、碱土金属(例如, Mg 和 Ca)、金、银、铅、铝、钠-钾合金、锂-铝合金、镁-银合金、诸如铟或镱等稀土金属。这些材料可以单独使用,或从获得稳定性和电子注入性的观点来看,可以混合使用两种以上的材料。

[0556] 在这些材料中,从电子注入性的观点来看,构成阴极的材料优选是碱金属和碱土金属,并且从优异的保存稳定性的观点来看,主要成分是铝的材料是优选的。

[0557] 短语“主要成分是铝的材料”指铝本身、铝与 0.01 ~ 10 质量%的碱金属或碱土金属的合金或者它们的混合物(例如,锂-铝合金或镁-铝合金)。

[0558] 阴极的材料记载在 JP-A No. 2-15595 和 5-121172 中,这些文献中记载的材料也适用于本发明。

[0559] 形成阴极的方法没有特别限制。可以通过已知方法形成阴极。考虑到与构成阴极的材料的相容性,可以根据适宜地选自以下的方法形成阴极:诸如印刷法和涂布法等湿法;诸如真空沉积法、溅射法和离子镀法等物理方法;以及诸如 CVD 和等离子体 CVD 法等化学方法。例如,当阴极材料是金属等时,可以通过溅射一种金属或者同时或相继溅射两种以上金属形成阴极。

[0560] 关于形成阴极时的图案化,可以使用诸如光刻等化学蚀刻,诸如利用激光蚀刻等物理蚀刻,通过在叠置掩模上的真空气相沉积或溅射等方法,提高方法或印刷法。

[0561] 在本发明中,形成阴极的位置没有特别限制。阴极可以形成在有机化合物层的整个表面上,或者形成在有机化合物层的一部分表面上。

[0562] 此外,在阴极和有机化合物层之间可以插入厚度为 0.1 ~ 5nm 的含有碱金属或碱土金属的氟化物或氧化物等的介电材料层。介电材料层可以被认为是一种电子注入层。可以通过例如真空沉积法、溅射法、离子镀法等形成介电材料层。

[0563] 阴极的厚度可以根据构成阴极的材料适宜地选择,因此不能唯一地限定,阴极的厚度通常为约 10nm ~ 约 5 μ m,优选为 50nm ~ 1 μ m。

[0564] 此外,阴极可以是透明或不透明的。可以通过形成厚度为 1 ~ 10nm 的阴极材料的层并进一步提供诸如 ITO 或 IZO 等透明导电性材料形成叠层体,从而形成透明阴极。

[0565] 7. 保护层

[0566] 在本发明中,整个有机 EL 装置可以用保护层保护。

[0567] 保护层中所含的材料可以具有防止加速装置劣化的物质如水分或氧气进入装置的功能。

[0568] 保护层用的材料的具体例子包括:诸如 In、Sn、Pb、Au、Cu、Ag、Al、Ti 或 Ni 等金属;诸如 MgO、SiO₂、Al₂O₃、GeO₂、NiO、CaO、BaO、Fe₂O₃、Y₂O₃ 或 TiO₂ 等金属氧化物;诸如 SiN_x 或 SiN_xO_y 等金属氮化物;诸如 MgF₂、LiF、AlF₃ 或 CaF₂ 等金属氟化物;聚乙烯、聚丙烯、聚甲基丙烯酸甲酯、聚酰亚胺、聚脲、聚四氟乙烯、聚氯三氟乙烯、聚二氯二氟乙烯、氯三氟乙烯和二氯二氟乙烯的共聚物、通过共聚含有四氟乙烯和至少一种共聚单体的单体混合物得到的共聚物、在共聚物主链中具有环状结构的含氟共聚物、吸水率为 1% 以上的吸水物质和吸水率为 0.1% 以下的防湿材料。

[0569] [0402] 形成保护层的方法没有特别限制。例如,可以使用以下方法:真空沉积法、

溅射法、反应性溅射法、MBE(分子束外延)法、簇离子束法、离子镀膜法、等离子体聚合法(射频激励离子镀膜法)、等离子体 CVD 法、激光 CVD 法、热 CVD 法、气体源 CVD 法、涂布法、印刷法和转印法。

[0570] 8. 密封

[0571] 在本发明的有机电致发光装置中,整个装置可以通过使用密封容器密封。

[0572] 此外,密封容器和发光装置之间的空间中可以用吸水剂或不活泼液体填充。吸水剂没有特别限制,例如,其具体例子包括氧化钡、氧化钠、氧化钾、氧化钙、硫酸钠、硫酸钙、硫酸镁、五氧化二磷、氯化钙、氯化镁、氯化铜、氟化铯、氟化铟、溴化钙、溴化钒、分子筛、沸石和氧化镁。不活泼液体没有特别限制,其具体例子包括石蜡、液体石蜡、含氟溶剂(如全氟烷烃、全氟胺和全氟醚)、含氯溶剂和硅油。

[0573] 9. 驱动

[0574] 在本发明的有机电致发光装置中,通过在阳极和阴极之间施加 DC 电压(通常 2~15 伏,并在需要时可以含有交流成分)或 DC 电流,可以获得发光。

[0575] 关于本发明的有机电致发光装置的驱动方法,可以使用例如在 JP-A No. 2-148687、6-301355、5-29080、7-134558、8-234685 和 8-241047;日本专利 No. 2784615、美国专利 No. 5828429 和 6023308 中公开的驱动方法。

[0576] 10. 应用

[0577] 本发明的有机 EL 装置的应用没有特别限制。该装置可以应用于宽范围的领域,包括手机显示器、个人数字助理(PDA)、计算机显示器、安装在汽车上的信息显示器、TV 显示器和一般照明。

[0578] 在本文引入日本专利申请 No. 2007-196674 的内容作为参考。

[0579] 实施例

[0580] 下面,说明本发明的有机 EL 装置的例子。然而,实施例不应被解释为限制本发明。

[0581] 实施例 1

[0582] 1. 制作有机 EL 装置

[0583] (制作比较有机 EL 装置 1)

[0584] 将其上已经气相沉积有氧化铟锡(简写作 ITO)的厚度 0.5mm 的 2.5cm² 的玻璃基板(Geomatec Co., Ltd. 制造,表面电阻:10 Ω/sq)放入洗涤容器中,在 2-丙醇中进行超声波洗涤,然后 UV-臭氧处理 30 分钟。通过真空气相沉积法,在透明阳极上沉积以下各层。在本发明实施例中,除非另有指明,气相沉积速率为 0.2nm/秒,其中使用石英振荡器测量气相沉积速率。还使用石英振荡器测量以下各层的厚度。

[0585] 空穴注入层:

[0586] 共沉积 4,4',4''-三(2-萘基苯基氨基)三苯基胺(2-TNATA)和四氟四氰基对苯二醌二甲烷(F4-TCNQ),使得 F4-TCNQ 相对于 2-TNATA 的量为 1.0 质量%。膜厚为 160nm。

[0587] 空穴输送层:

[0588] N,N'-二萘基-N,N'-二苯基-[1,1'-联苯]-4,4'-二胺(简写作 α-NPD),厚度为 10nm;

[0589] 发光层:

[0590] 共沉积 1,3-双(咔唑-9-基)苯(简写作 mCP)和发光材料 Pt-1,使得 Pt-1 相对

于 mCP 的量为 13 质量%。发光层的膜厚为 60nm。

[0591] 随后,在发光层上设置以下的电子输送层。

[0592] 电子输送层:双(2-甲基-8-羟基喹啉)-4-联苯氧基铝(简写作 BA1q),厚度为 40nm。

[0593] 此外,在沉积厚度 1nm 的 LiF 之后,通过使用掩模进行图案化,以提供厚度为 100nm 的 Al 作为阴极。

[0594] 通过电阻加热真空气相沉积设置各层。

[0595] 将制备的叠层体放入已用氮气置换内部空气的手套箱中,并使用由不锈钢制成的密封罐和紫外线固化型粘合剂(商品名:XNR5516HV, Nagase-CibaCo., Ltd. 制造)密封。

[0596] (制作比较有机 EL 装置 2)

[0597] 按与制作比较有机 EL 装置 1 相同的方式制作比较有机 EL 装置 2,除了共沉积的发光材料 Pt-1 的量变为相对于 mCP 为 26 质量%。发光层的膜厚为 60nm。

[0598] (制作比较有机 EL 装置 3)

[0599] 按与制作比较有机 EL 装置 1 相同的方式制作比较有机 EL 装置 3,除了发光层变为以下的。

[0600] 发光层:

[0601] 共沉积的空穴输送发光材料三(2-苯基吡啶)铱($\text{Ir}(\text{ppy})_3$)的量相对于 mCP 的量随着气相沉积的进行连续增加。在气相沉积开始时 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ 在阳极侧界面的混合比相对于 mCP 为 0 质量%,而在气相沉积完成时 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ 在阴极侧界面的混合比相对于 mCP 为 26 质量%。发光材料 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ 的混合比在这些界面之间连续变化。各材料的浓度在阳极侧界面附近区域为 1 质量%(对于 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$)和 99 质量%(对于 mCP),各材料的浓度在阴极侧界面附近区域为 19.6 质量%(对于 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$)和 80.4 质量%(对于 mCP)。

[0602] (制作本发明的有机 EL 装置 1)

[0603] 按与制作比较有机 EL 装置 1 相同的方式制作本发明的有机 EL 装置 1,除了发光层变为以下。

[0604] 发光层:

[0605] 共沉积的发光材料 Pt-1 的量相对于 mCP 的量随着气相沉积的进行连续增加。在气相沉积开始时发光材料 Pt-1 在阳极侧界面的混合比相对于 mCP 为 5 质量%,而在气相沉积完成时发光材料 Pt-1 在阴极侧界面的混合比相对于 mCP 为 26 质量%。发光材料 Pt-1 的混合比在这些界面之间连续变化。各材料的浓度在阳极侧界面附近区域为 5.6 质量%(对于 Pt-1)和 94.4 质量%(对于 mCP),各材料的浓度在阴极侧界面附近区域为 19.8 质量%(对于 Pt-1)和 80.2 质量%(对于 mCP)。

[0606] (制作本发明的有机 EL 装置 2)

[0607] 按与制作有机 EL 装置 1 相同的方式制作本发明的有机 EL 装置 2,除了以下。

[0608] 控制气相沉积速率,使得共沉积的发光材料 Pt-1 的量在气相沉积开始时发光材料 Pt-1 在阳极侧界面的混合比相对于 mCP 为 0 质量%,而在气相沉积完成时发光材料 Pt-1 在阴极侧界面的混合比相对于 mCP 为 26 质量%。发光材料 Pt-1 的混合比在这些界面之间连续变化。各材料的浓度在阳极侧界面附近区域为 1 质量%(对于 Pt-1)和 99 质量%(对于 mCP),各材料的浓度在阴极侧界面附近区域为 19.6 质量%(对于 Pt-1)和 80.4 质量%

(对于 mCP)。

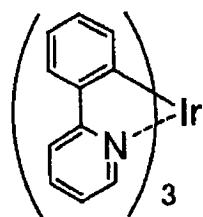
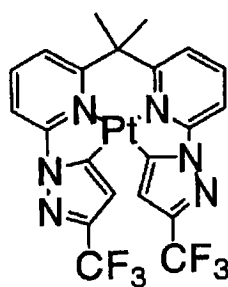
[0609] (制作本发明的有机 EL 装置 3)

[0610] 按与制作有机 EL 装置 1 相同的方式制作本发明的有机 EL 装置 3,除了以下。

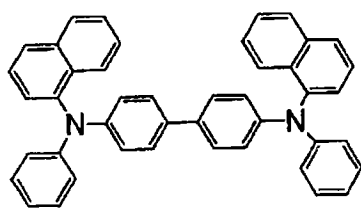
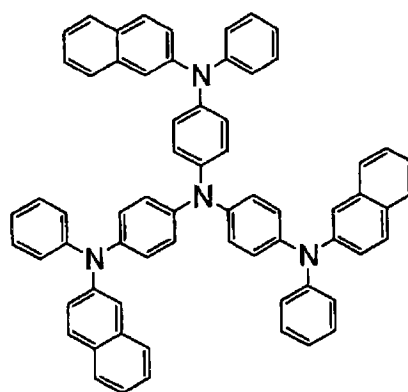
[0611] 控制气相沉积速率,使得共沉积的发光材料 Pt-1 的量在气相沉积开始时发光材料 Pt-1 在阳极侧界面的混合比相对于 mCP 为 0 质量%,而在气相沉积完成时发光材料 Pt-1 在阴极侧界面的混合比相对于 mCP 为 40 质量%。发光材料 Pt-1 的混合比在这些界面之间连续变化。各材料的浓度在阳极侧界面附近区域为 1.4 质量%(对于 Pt-1)和 98.6 质量%(对于 mCP),各材料的浓度在阴极侧界面附近区域为 27.2 质量%(对于 Pt-1)和 72.8 质量%(对于 mCP)。

[0612] 实施例中使用的化合物的结构如下所示:

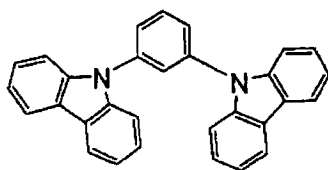
[0613]

Ir(ppy)₃

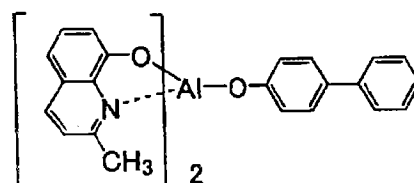
Pt-1

 α -NPD

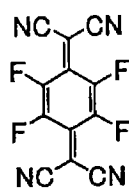
2-TNATA



mCP



BAiq



F4-TCNQ

[0614] 2. 性能的评价

[0615] 对得到的比较有机 EL 装置和本发明的有机 EL 装置在以下说明的相同条件下进行外部量子效率和驱动耐久性测试。

[0616] < 驱动电压 >

[0617] 获得 360cd/m² 亮度的 DC 驱动电压被评价作为驱动电压。

[0618] < 外部量子效率测试 >

[0619] 使用光源测量装置 MODEL 2400 (商品名, KEITHLEY 制造) 将直流电压施加到每个制作的发光装置上, 从而导致亮度为 360cd/m^2 或 10000cd/m^2 (高亮度条件) 的发光。使用亮度计 SR-3 (商品名, Topcon Corporation 制造) 测量发光光谱和亮度, 从发光光谱、亮度和测量时施加的电流测量计算外部量子效率。

[0620] < 驱动耐久性测试 >

[0621] 将直流电压施加到每个装置上, 得到 360cd/m^2 的亮度, 将装置在初始电流下连续驱动。测量亮度变为初始亮度一半 (即直到亮度变为 180cd/m^2 的) 所需的时间作为亮度半衰期。亮度半衰期被评价作为驱动耐久性的指标。

[0622] 结果示于表 1。与比较有机 EL 装置 1 ~ 3 相比, 本发明的有机 EL 装置 1 ~ 3 中的每一个具有高的外部量子效率和优异的驱动耐久性。特别地, 比较装置 1 在高亮度发光 ($10,000\text{cd/m}^2$) 下的外部量子效率为 4.6%, 大约为低亮度发光 (360cd/m^2) 下的效率的 73%。相比而言, 本发明的装置 2 在高亮度发光下的外部量子效率为 8.5%, 为低亮度发光下的效率的 93%, 表明仅略微下降。

[0623] 从比较装置 3 的结果, 可以看到, 即使作为发光材料的空穴输送 Ir(ppy)_3 的浓度在发光层中存在梯度, 也不能实现本发明的效果, 而通过提供作为电子输送发光材料的 Pt-1 的浓度梯度, 可以实现异常高的外部量子效率和特别优异的驱动耐久性。

[0624] 表 1

[0625]

装置 No.	驱动电压 (V)	外部量子效率 (%) (亮度 : 360cd/m^2)	外部量子效率 (%) (亮度 : $10,000\text{cd/m}^2$)	亮度半衰期 (h) (初始亮度 : 360cd/m^2)
比较装置 1	11.8	6.3	4.6	500
比较装置 2	10.5	5.3	4.1	520
比较装置 3	12.5	4.0	2.9	250
本发明装置 1	10.2	7.3	6.9	900
本发明装置 2	9.8	9.1	8.5	1200
本发明装置 3	8.7	8.8	8.3	1300

[0626] 实施例 2

[0627] 1. 制作有机 EL 装置

[0628] (制作比较有机 EL 装置 4)

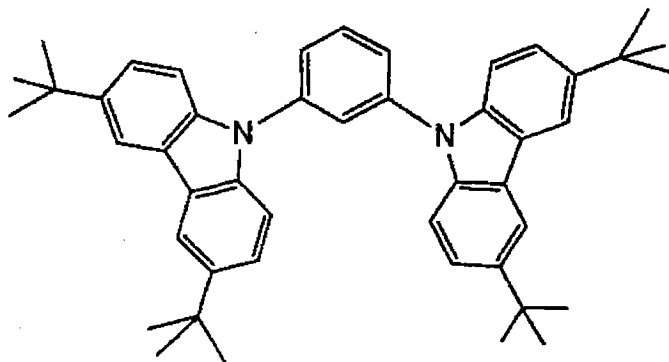
[0629] 按与制作比较有机 EL 装置 1 相同的方式制作比较有机 EL 装置 4, 除了发光层中的 mCP 用 mCP 衍生物 A 代替。

[0630] (制作本发明的有机 EL 装置 4)

[0631] 按与制作本发明的有机 EL 装置 2 相同的方式制作本发明的有机 EL 装置 4,除了发光层中的 mCP 用 mCP 衍生物 A 代替。

[0632] 实施例 3 中使用的化合物的结构如下所示：

[0633]



[0634] mCP 衍生物 A

[0635] 2. 性能的评价

[0636] 按与实施例 1 相同方式测量得到的比较有机 EL 装置和本发明的有机 EL 装置的驱动电压、外部量子效率和驱动耐久性。

[0637] 结果示于表 2。与比较有机 EL 装置 4 相比,本发明的有机 EL 装置 4 具有高的外部量子效率和优异的驱动耐久性。此外,根据本发明的装置在高亮度下的外部量子效率仅略微下降。

[0638] 表 2

[0639]

装置 No.	驱动电压	外部量子效率 (%)	外部量子效率 (%)	亮度半衰期 (h)
	(V)	(亮度 :360cd/m ²)	(亮度 :10,000cd/m ²)	(初始亮度 :360cd/m ²)
比较装置 4	14.5	7.6	5.4	400
本发明装置 4	12.8	10.3	9.2	1100

[0640] 实施例 3

[0641] 1. 制作有机 EL 装置

[0642] (制作比较有机 EL 装置 5)

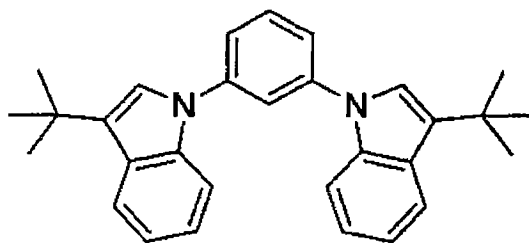
[0643] 按与制作比较有机 EL 装置 1 相同的方式制作比较有机 EL 装置 5,除了发光层中的 mCP 用主体材料 1 代替。

[0644] (制作本发明的有机 EL 装置 5)

[0645] 按与制作本发明的有机 EL 装置 2 的相同方式制作本发明的有机 EL 装置 5,除了发光层中的 mCP 用主体材料 1 代替。

[0646] 实施例 3 中使用的化合物的结构如下所示：

[0647]



[0648] 主体材料 1

[0649] 2. 性能的评价

[0650] 按与实施例 1 相同方式测量得到的比较有机 EL 装置和本发明的有机 EL 装置的驱动电压、外部量子效率和驱动耐久性。

[0651] 结果示于表 3。与比较有机 EL 装置 5 相比,本发明的有机 EL 装置 5 具有高的外部量子效率和优异的驱动耐久性。此外,根据本发明的装置在高亮度下的外部量子效率仅略微下降。

[0652] 表 3

[0653]

装置 No.	驱动电压 (V)	外部量子效率 (%) (亮度 :360cd/m ²)	外部量子效率 (%) (亮度 :10,000cd/m ²)	亮度半衰期 (h) (初始亮度 :360cd/m ²)
比较装置 5	12.6	8.4	6.5	900
本发明装置 5	10.8	12.0	10.8	2100

[0654] 实施例 4

[0655] 1. 制作有机 EL 装置

[0656] (制作本发明的有机 EL 装置 6)

[0657] 按与制作比较有机 EL 装置 1 相同的方式制作本发明的有机 EL 装置 6,除了发光层用以下的发光层代替。

[0658] 发光层 :

[0659] 通过随着气相沉积的进行阶段式增加共沉积的发光材料 Pt-1 相对于 mCP 的量来形成发光层,其中每一阶段的厚度为 6nm,进行 10 个阶段(总厚度:60nm)。在各阶段中发光材料 Pt-1 的混合比从空穴输送层侧(阳极侧)朝着电子输送层侧(阴极侧)依序分别为 1 质量%、4 质量%、7 质量%、9 质量%、12 质量%、14 质量%、17 质量%、20 质量%、22 质量%和 25 质量%。

[0660] 2. 性能的评价

[0661] 按与实施例 1 相同方式测量得到的比较有机 EL 装置和本发明的有机 EL 装置的驱动电压、外部量子效率和驱动耐久性。

[0662] 结果示于表 4。与实施例 1 中的比较有机 EL 装置 1 相比,本发明的有机 EL 装置 6 具有高的外部量子效率和优异的驱动耐久性。此外,根据本发明的装置在高亮度下的外部量子效率仅略微下降。

[0663] 表 4

[0664]

装置 No.	驱动电压 (V)	外部量子效率 (%) (亮度 :360cd/m ²)	外部量子效率 (%) (亮度 :10,000cd/m ²)	亮度半衰期 (h) (初始亮度 :360cd/m ²)
比较装置 1	11.8	6.3	4.6	500
本发明装置 6	10.1	8.9	8.2	1100

[0665] 在本说明书中提到的所有出版物、专利申请和技术标准以引用的方式加入本文，其程度就如同各个出版物、专利申请和技术标准被具体地和单独地以引用的方式加入本文中一样。