

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2014-221807

(P2014-221807A)

(43) 公開日 平成26年11月27日(2014.11.27)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
<b>C07F 15/00 (2006.01)</b>	C07F 15/00 C S P F	3 K 1 0 7
<b>C09K 11/06 (2006.01)</b>	C09K 11/06 6 6 0	4 H 0 5 0
<b>H01L 51/50 (2006.01)</b>	H05B 33/14 B	5 F 1 5 1
<b>H01L 51/46 (2006.01)</b>	H01L 31/04 1 5 4 B	
	H01L 31/04 1 5 4 C	

審査請求 有 請求項の数 1 〇 L 外国語出願 (全 43 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2014-144570 (P2014-144570)  
 (22) 出願日 平成26年7月14日 (2014. 7. 14)  
 (62) 分割の表示 特願2012-504779 (P2012-504779) の分割  
 原出願日 平成22年4月6日 (2010. 4. 6)  
 (31) 優先権主張番号 61/166, 901  
 (32) 優先日 平成21年4月6日 (2009. 4. 6)  
 (33) 優先権主張国 米国 (US)

(71) 出願人 511241608  
 アリゾナ ボード オブ リージェンツ  
 アクティング フォー アンド オン ビ  
 ハーフ オブ アリゾナ ステイト ユニ  
 バーシティ  
 アメリカ合衆国 アリゾナ 85257-  
 3538, スコッツデール, ノース  
 スコッツデール ロード 1475, ス  
 カイ ソングースイート 200  
 (74) 代理人 100078282  
 弁理士 山本 秀策  
 (74) 代理人 100113413  
 弁理士 森下 夏樹

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 四配位白金錯体の合成およびそれらの発光デバイスへの応用

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】 処理能力の低さ、発光又は吸収の非効率性、及び理想的とは言い難い安定性等、いくつかの欠点を解消する光吸収及び光放出を示す新規 4 配位白金錯体、該錯体を作製する方法、及び該錯体を含む光学デバイス等その用途の提供。

【解決手段】 例えば、下式で表わされる化合物群や図 1 記載で表わされる、化合物。

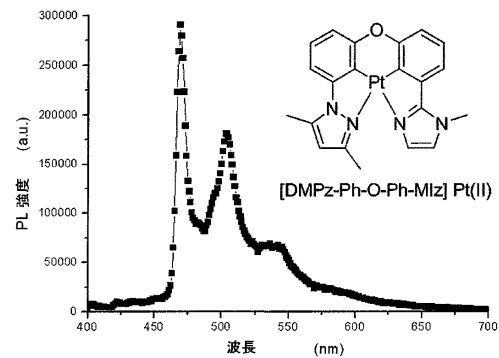
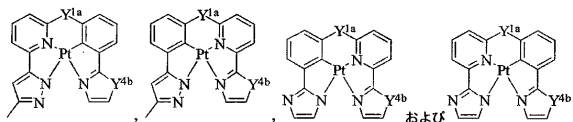


FIG. 1

( $Y^{1a}$  は O、S、 $R^{4a}$  が任意に置換された  $C_{1-4}$  アルキルを表す  $NR^{4a}$ 、 $R^{4c}$  が各々 H もしくは任意に置換された  $C_{1-4}$  アルキルを表す  $C(R^{4c})_2$  等； $Y^{4b}$  は O、S 等)

【選択図】 図 1

## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

明細書または図面に記載の発明。

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0001】

本開示は白金錯体に関し、具体的には光を吸収および/または発光することができ、したがって発光または吸収材料として有用である白金錯体に関する。

## 【背景技術】

10

## 【0002】

光を吸収および/または発光することができる化合物は、太陽光および感光装置などの光吸収装置、有機発光ダイオード(OLED: organic light emitting diode)などの光放出デバイス、または光吸収および放出のどちらも可能なデバイスなど多岐にわたる光学および電気光学デバイスに使用するのに理想的に適している。光学および電気光学デバイスに使用される有機材料および有機金属材料の発見および最適化には多くの研究がなされてきた。一般に、この分野の研究は、中でも吸収および発光効率の改善のほか、処理能力の向上などいくつかの目標を達成することが狙いである。

## 【0003】

光学および電気光学材料について行われた研究は大きく進歩したが、有機材料または有機金属材料を含む現在のデバイスの多くは、いまだ最適化されていない。光学および電気光学デバイスに現在使用される多くの材料には、とりわけ処理能力の低さ、発光または吸収の非効率性、および理想的とは言い難い安定性など、いくつかの欠点がある。このため、光学および電気光学デバイスにおいて性能の向上を示す新規な材料が求められている。本発明は、こうした必要性および他の必要性を満たすものである。

20

## 【発明の概要】

## 【課題を解決するための手段】

## 【0004】

本発明は、光吸収(photoabsorption)および光放出を示す白金錯体と、そうした化合物を製造する方法と、その化合物を含む光学デバイスなどその用途とに関する。

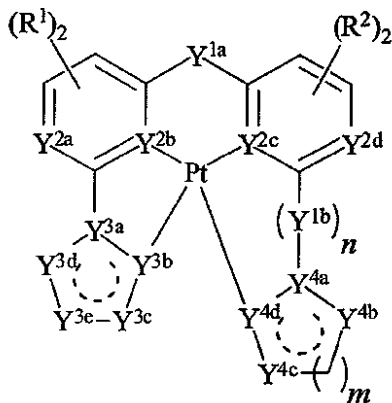
30

## 【0005】

一態様では、本化合物は下記式により表される。

## 【0006】

## 【化1】



40

式中、 $(R^1)_2$  および  $(R^2)_2$  における  $R^1$  および  $R^2$  は各々独立に水素、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキル、ハロゲン、ヒドロキシル、アミノ、ニトロまたはチオールを表し；

50

$R^3$  はメチル、エチル、プロピルまたはブチルを表し；

$Y^{1a}$  は O、S、 $R^{4a}$  が任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{4a}$ ； $(R^{4b})_2$  における  $R^{4b}$  が各々独立に、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Si(R^{4b})_2$ ；または  $(R^{4c})_2$  における  $R^{4c}$  が各々水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $C(R^{4c})_2$  を表し；

$n$  は整数 0 または 1 であり；

$Y^{1b}$  は、存在する場合、O、S、 $R^{5a}$  が任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{5a}$ ； $(R^{5b})_2$  における  $R^{5b}$  が各々独立に、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Si(R^{5b})_2$ ；または  $(R^{5c})_2$  における  $R^{5c}$  が各々水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $C(R^{5c})_2$  を表し；

$Y^{2a}$ 、 $Y^{2b}$ 、 $Y^{2c}$  および  $Y^{2d}$  は各々独立に N、 $NR^{6a}$  または  $CR^{6b}$  を表し、 $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  は各々独立に水素、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキル、ハロゲン、ヒドロキシル、アミノ、ニトロまたはチオールを表し；

$Y^{3a}$ 、 $Y^{3b}$ 、 $Y^{3c}$ 、 $Y^{3d}$ 、 $Y^{3e}$ 、 $Y^{4a}$ 、 $Y^{4b}$ 、 $Y^{4c}$  および  $Y^{4d}$  は各々独立に N、O、S、 $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が各々独立に水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{6a}$ 、 $CR^{6b}$ ；または Z が C もしくは Si であり、かつ  $(R^{6c})_2$  における  $R^{6c}$  が各々独立に水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Z(R^{6c})_2$  を表し；

$m$  は整数 1 または 2 であり；

開いた点線の環

【0007】

【化1-2】



はそれが付随する環が部分不飽和または完全不飽和であることを示し；

ただし、 $m$  が 1 であり、 $Y^{2a}$  および  $Y^{2d}$  が各々 CH であり、 $Y^{2b}$  および  $Y^{2c}$  が各々 N である場合、 $Y^{4a}$ 、 $Y^{4b}$ 、 $Y^{3a}$  または  $Y^{3d}$  の少なくとも 1 つは N ではなく；かつ

$n$  が 0 であり、 $m$  が 2 であり、 $Y^{2a}$  および  $Y^{2d}$  が各々 CH であり、 $Y^{2b}$  および  $Y^{2c}$  が各々 N である場合、 $Y^{3b}$  または  $Y^{3c}$  の少なくとも 1 つは N ではない。

【0008】

さらに、本発明の 1 種または複数種を発光体 (light-emitter) もしくは吸収体またはその両方など機能材料として含む有機発光デバイス、光起電デバイス (たとえば、太陽電池) およびルミネッセンス表示デバイスといった光学デバイスも開示される。

【0009】

本明細書に援用され、本明細書の一部を構成する添付の図は、いくつかの態様を例示するもので、本説明と共に本発明の原理の説明に役立つものである。

【図面の簡単な説明】

【0010】

【図1】図1は、77Kでジクロロメタンに溶解した具体的な態様、[DMPz-Ph-O-Ph-MIz]Pt(II)から得られたフォトルミネッセンススペクトルである。

【図2】図2は、例示的な有機発光ダイオード(OLED)の断面図である。

【図3】図3は、室温でジクロロメタンに溶解した具体的な態様、[MPz-Py-O-Ph-O-Py]Pt(II)から得られたフォトルミネッセンススペクトルである。

【図4】図4は、77Kおよび300Kでの具体的な態様、[dMPz-Ph-O-Ph-O-Py]Ptから得られたフォトルミネッセンススペクトルである。

【図5】図5は、77Kおよび300Kでの具体的な態様、[MIz-Ph-O-Ph-O-Py]Ptから得られたフォトルミネッセンススペクトルである。

10

20

30

40

50

【図6】図6は、 $Ir(ppy)_3$  および Pt002 デバイスにおける時間と電圧（上）および輝度（下）との関係を示す図である。

【図7】図7は、77K および 300K での具体的な態様、 $[Py - Py - O - Ph - O - Py]Pt$  から得られたフォトルミネッセンススペクトルである。

【図8】図8は、77K および 300K での具体的な態様、 $[MPz - Py - O - Ph - O - Py]Pt$  から得られたフォトルミネッセンススペクトルである。

【0011】

本発明の他の態様については、後述される説明において一部記載され、その説明からある程度明らかになるか、あるいは本発明の実施によって知ることができる。本発明の利点は、添付の特許請求の範囲で具体的に指摘された要素および組み合わせにより実現し達成される。上記の概要および以下の詳細な説明はどちらも例示的および説明的なものにとどまり、特許請求の範囲に記載される本発明を限定するものではないことを理解すべきである。

【発明を実施するための形態】

【0012】

本発明は、以下の発明の詳細な説明およびそこに含まれる実施例を参照することにより、より容易に理解することができる。

【0013】

本化合物、デバイス、および/または方法を開示し、記載する前に、本化合物、デバイス、および/または方法は、他に記載がない限り、特定の合成方法、または他に記載がない限り、特定の試薬に限定されるものではなく、したがって、言うまでもなく、異なってもよいことを理解されたい。さらに、本明細書に使用する用語は、個々の態様を説明することのみを目的としたものであり、限定的であることを意図するものではないことも理解されたい。本発明の実施または試験においては、本明細書に記載のものと類似または同等の任意の方法および材料を使用してもよいが、ここで方法および材料の例を記載する。

【0014】

本明細書および添付の特許請求の範囲に使用する場合、単数形「a」、「an」および「the」は、文脈上明らかに他の意味に解すべき場合を除き、複数の意味を含む。したがって、たとえば、「成分(a component)」という場合、2つ以上の成分の混合物を含む。

【0015】

本明細書では範囲について、「約」を前に付けたある特定の値から、および/または、「約」を前に付けたもう1つの特定の値までと表す場合がある。このように範囲を表す場合、ある特定の値から、および/または、もう1つの特定の値までは別の態様である。同様に、先行詞「約」を用いて値を近似値として表す場合、特定の値は別の態様を形成することが理解されよう。さらに、各範囲の端点はもう一方の端点との関連でも、もう一方の端点と切り離してもどちらでも意味があることも理解されよう。さらに、本明細書には多くの値が開示されるが、各値は、その値自体だけでなく、その個々の値に「約」を前に付けた値としても本明細書に開示されることも理解されよう。たとえば、「10」という値が開示される場合、「約10」も開示されている。さらに、2つの特定の単位の間各単位も開示されていることが理解されよう。たとえば、10および15が開示されている場合、11、12、13および14も開示されている。

【0016】

本明細書で使用する場合、「任意の(optional)」または「任意に(optionally)」とは、その後に記載した事象または状況が起こっても、あるいは起こらなくてもよく、そう記載することで、前記事象または状況が起こる場合と、前記事象または状況が起こらない場合とが含まれることを意味する。

【0017】

「アルキル」という用語は、本明細書で使用する場合、メチル、エチル、n-プロピル、イソプロピル、n-ブチル、イソブチル、s-ブチル、t-ブチル、n-ペンチル、イ

10

20

30

40

50

ソペンチル、s-ペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシル、ドデシル(dodecyl)、テトラデシル、ヘキサデシル、エイコシル、テトラコシルおよび同種のものなど炭素原子数1~24の分枝または非分枝の飽和炭化水素基である。アルキル基は環式でも、または非環式でもよい。アルキル基は分枝でも、または非分枝でもよい。アルキル基はさらに置換されていても、または置換されていなくてもよい。たとえば、アルキル基は、以下に限定されるものではないが、本明細書に記載するような、任意に置換されたアルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アミノ、エーテル、ハライド、ヒドロキシ、ニトロ、シリル、スルホ-オキシまたはチオールなど1つまたは複数の基で置換されていてもよい。「低級アルキル」基は、1~6(たとえば、1~4)個の炭素原子を含むアルキル基である。

10

## 【0018】

「アミン」または「アミノ」という用語は、本明細書で使用する場合、式 $NA^1A^2A^3$ により表され、式中、 $A^1$ 、 $A^2$ および $A^3$ は独立に水素でも、または本明細書に記載するような、任意に置換されたアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基、シクロアルキニル基、アリール基もしくはヘテロアリール基でもよい。

## 【0019】

「ハライド」という用語は、本明細書で使用する場合、ハロゲンであるフッ素、塩素、臭素およびヨウ素をいう。

## 【0020】

「ヒドロキシル」という用語は、本明細書で使用する場合、式-OHによって表される。

20

## 【0021】

「ニトロ」という用語は、本明細書で使用する場合、式-NO<sub>2</sub>によって表される。

## 【0022】

「ニトリル」という用語は、本明細書で使用する場合、式-CNによって表される。

## 【0023】

「チオール」という用語は、本明細書で使用する場合、式-SHによって表される。

## 【0024】

本発明の組成物の調製に使用される成分と共に、本明細書に開示される方法に使用される組成物自体も開示される。本明細書にはこれらおよび他の材料が開示される。これらの材料の組み合わせ、サブセット、相互作用、群等が開示されるとき、これらの化合物の様々な個々の組み合わせおよび順列と、全体的な組み合わせおよび順列とに関する具体的な言及が明示的に開示できない場合も、それぞれが本明細書に具体的に意図され、記載されていることが理解される。たとえば、特定の化合物が開示および検討され、その化合物などのいくつかの分子になし得る数々の修飾が検討される場合、特に異なる指定がない限り、化合物のありとあらゆる組み合わせおよび順列、ならびに可能な修飾を具体的に意図している。このため、分子A、BおよびCのクラスと共に分子D、EおよびFのクラスが開示され、さらに分子の組み合わせA-Dの例が開示される場合、それぞれが個々に記載されていなくても、それぞれが個々に、および全体として意図されており、組み合わせA-E、A-F、B-D、B-E、B-F、C-D、C-EおよびC-Fが開示されていると見なされることを意味する。同様に、これらの任意のサブセットまたは組み合わせも開示されている。したがって、たとえば、A-E、B-FおよびC-Eという亜群が開示されていると見なされる。この考え方は、以下に限定されるものではないが、本発明の組成物の製造および使用方法における工程など本出願の全態様に適用される。このため、実施することができる様々な工程が他に存在する場合、そうした他の各工程は、本発明の方法の態様の任意の具体的な態様または組み合わせを用いて実施できることが理解される。

30

40

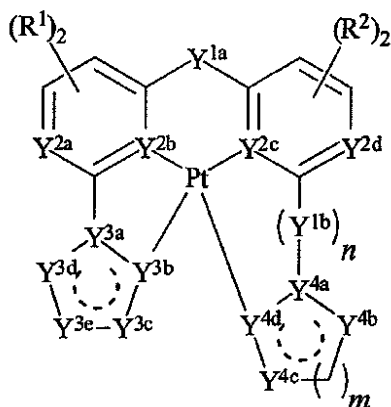
## 【0025】

一態様では、本発明の化合物は下記式により表すことができる。

## 【0026】

50

## 【化 2】



10

こうした態様では、 $(R^1)_2$  および  $(R^2)_2$  における  $R^1$  および  $R^2$  は各々独立に水素、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキル、ハロゲン、ヒドロキシル、アミノ、ニトロまたはチオールを表し； $R^3$  はメチル、エチル、プロピルまたはブチルを表し； $Y^{1a}$  は O、S、 $R^{4a}$  が任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{4a}$ ； $(R^{4b})_2$  における  $R^{4b}$  が各々独立に、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Si(R^{4b})_2$ ；または  $(R^{4c})_2$  における  $R^{4c}$  が各々水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $C(R^{4c})_2$  を表し； $n$  は整数 0 または 1 であり； $Y^{1b}$  は、存在する場合、O、S、 $R^{5a}$  が任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{5a}$ ； $(R^{5b})_2$  における  $R^{5b}$  が各々独立に、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Si(R^{5b})_2$ ；または  $(R^{5c})_2$  における  $R^{5c}$  が各々水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $C(R^{5c})_2$  を表し； $Y^{2a}$ 、 $Y^{2b}$ 、 $Y^{2c}$  および  $Y^{2d}$  は各々独立に N、 $NR^{6a}$  または  $CR^{6b}$  を表し、 $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  は各々独立に水素、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキル、ハロゲン、ヒドロキシル、アミノ、ニトロまたはチオールを表し； $Y^{3a}$ 、 $Y^{3b}$ 、 $Y^{3c}$ 、 $Y^{3d}$ 、 $Y^{3e}$ 、 $Y^{4a}$ 、 $Y^{4b}$ 、 $Y^{4c}$  および  $Y^{4d}$  は各々独立に N、O、S、 $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が各々独立に水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{6a}$ 、 $CR^{6b}$ ；または Z が C もしくは Si であり、かつ  $(R^{6c})_2$  における  $R^{6c}$  が各々独立に水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Z(R^{6c})_2$  を表し； $m$  は整数 1 または 2 であり；開いた点線の環

20

30

【0027】

【化 2 - 2】



はそれが付随する環が部分不飽和または完全不飽和であることを示す。

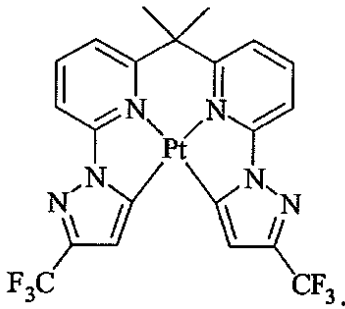
【0028】

上記式の一態様では、 $m$  が 1 であり、 $Y^{2a}$  および  $Y^{2d}$  が各々 CH であり、 $Y^{2b}$  および  $Y^{2c}$  が各々 N である場合、 $Y^{4a}$ 、 $Y^{4b}$ 、 $Y^{3a}$  または  $Y^{3d}$  の少なくとも 1 つは N ではない。たとえば、この態様によれば、以下の化合物は上記の式に含まれない。

40

【0029】

## 【化3】



10

上記前述の例に見られるように、 $m$ は1であり、 $Y^{2a}$ および $Y^{2d}$ は各々CHであり、 $Y^{2b}$ および $Y^{2c}$ は各々Nである。しかしながら、 $Y^{4a}$ 、 $Y^{4b}$ 、 $Y^{3a}$ または $Y^{3d}$ は各々Nである。したがって、前述の例は、この態様によれば、上記一般式には含まれないということになる。この態様を実施する際には、同様の解析を用いて、化合物が上記一般式に含まれるか否か、あるいは含まれないか否かを判定してもよい。

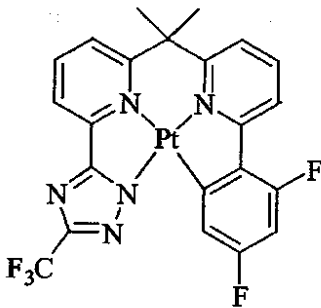
## 【0030】

上記一般式のさらなる態様では、 $n$ が0であり、 $m$ が2であり、 $Y^{2a}$ および $Y^{2d}$ が各々CHであり、 $Y^{2b}$ および $Y^{2c}$ が各々Nである場合、 $Y^{3b}$ または $Y^{3c}$ の少なくとも1つは、Nではない。たとえば、この態様によれば、以下の化合物は上記の式に含まれない。

20

## 【0031】

## 【化4】



30

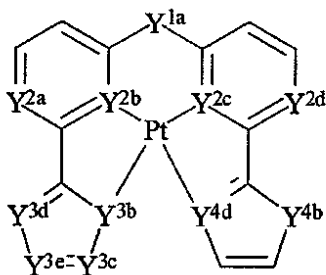
上記前述の例に見られるように、 $n$ は0であり、 $m$ は2であり、 $Y^{2a}$ および $Y^{2d}$ は各々CHであり、 $Y^{2b}$ および $Y^{2c}$ は各々Nである。しかしながら、 $Y^{3b}$ および $Y^{3c}$ はNである。したがって、前述の例は、この態様によれば、上記一般式には含まれないということになる。この場合も、この態様を実施する際には、同様の解析を用いて、化合物が上記一般式に含まれるか否か、あるいは含まれないか否かを判定してもよい。

## 【0032】

上記一般式の一態様では、本化合物は下記式によって表される。

## 【0033】

## 【化5】



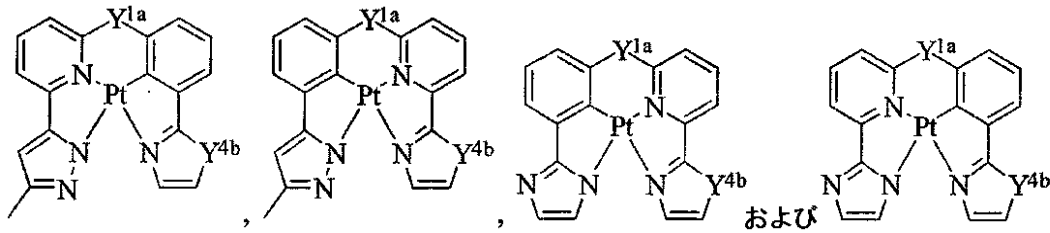
40

他の非限定的な態様では、この式における具体的な態様の例として、以下の1つまたは複数を挙げることができる。

50

【0034】

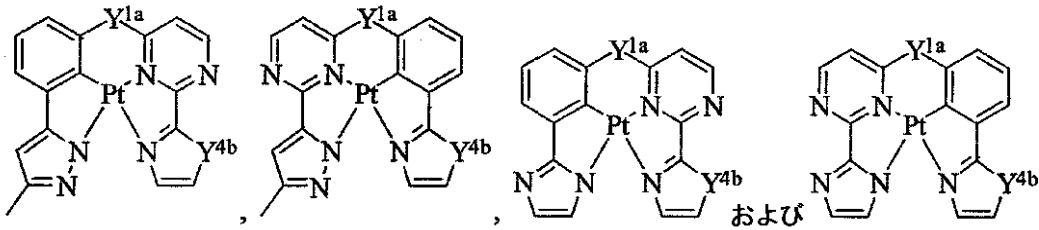
【化6】



他の非限定的な態様では、この式における具体的な態様の例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。 10

【0035】

【化7】

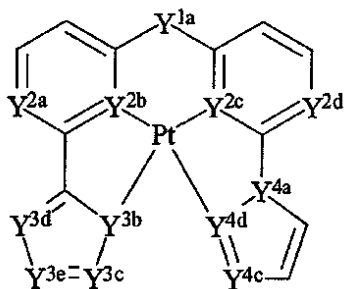


20

上記一般式の別の態様では、本化合物は下記式によって表される：

【0036】

【化8】

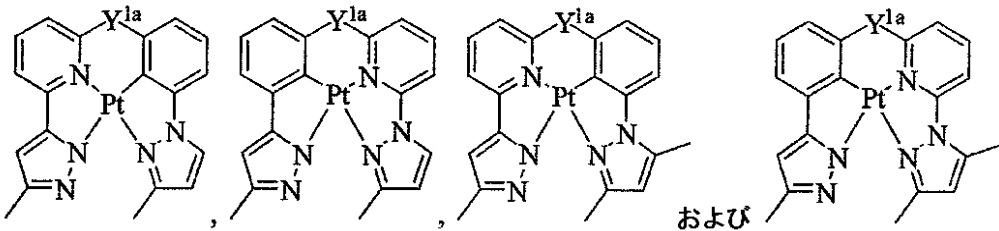


30

他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。

【0037】

【化9】



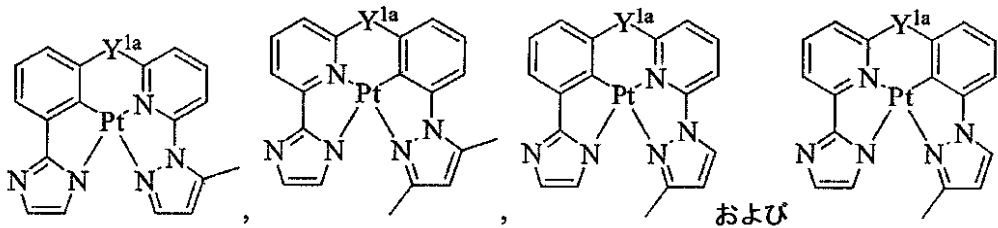
40

他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げることができる。

【0038】



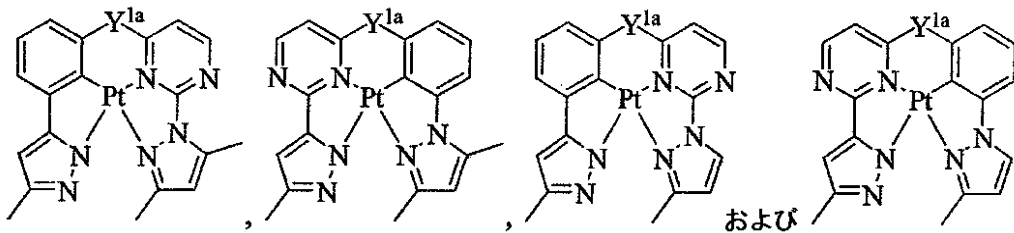
## 【化10】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。 10

## 【0039】

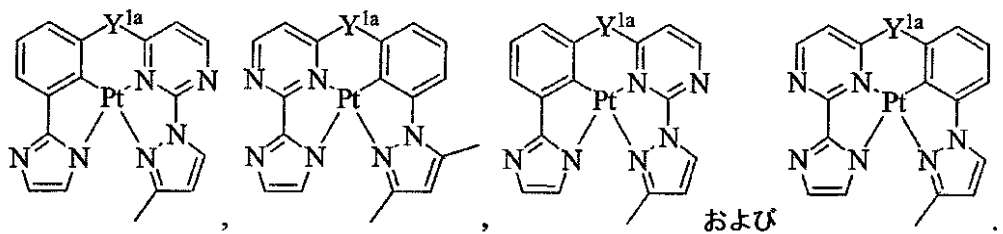
## 【化11】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。 20

## 【0040】

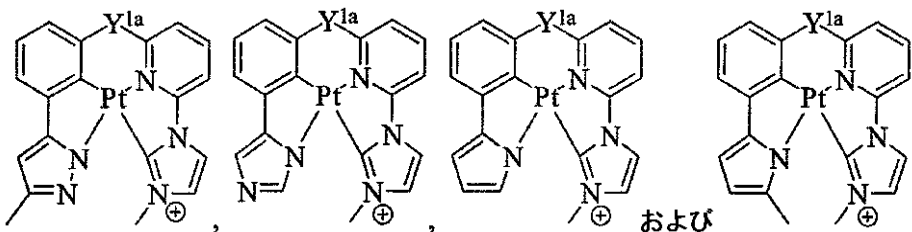
## 【化12】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。 30

## 【0041】

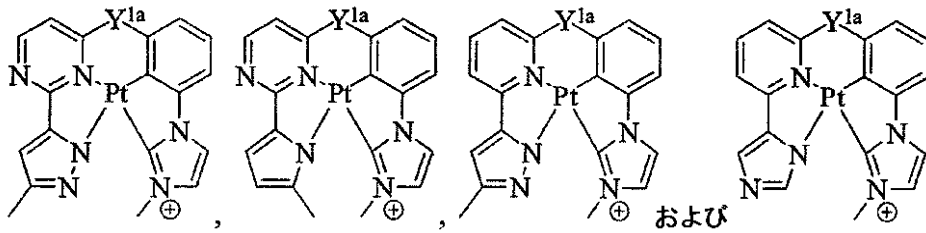
## 【化13】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。 40

## 【0042】

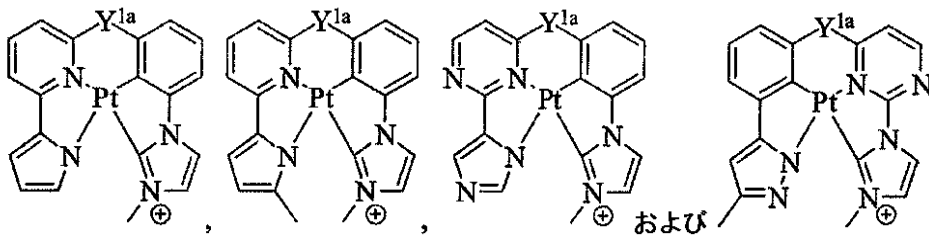
## 【化14】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。

## 【0043】

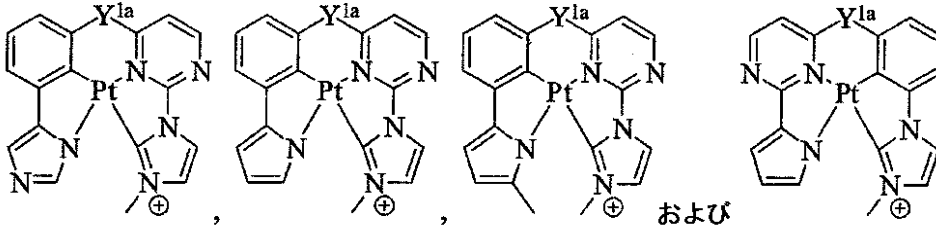
## 【化15】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。

## 【0044】

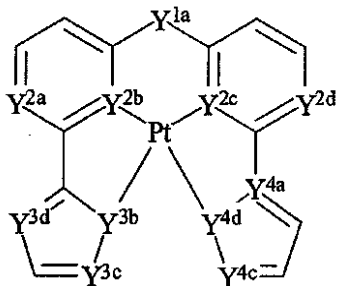
## 【化16】



上記一般式の別の態様では、本化合物は下記式によって表される：

## 【0045】

## 【化17】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。

## 【0046】

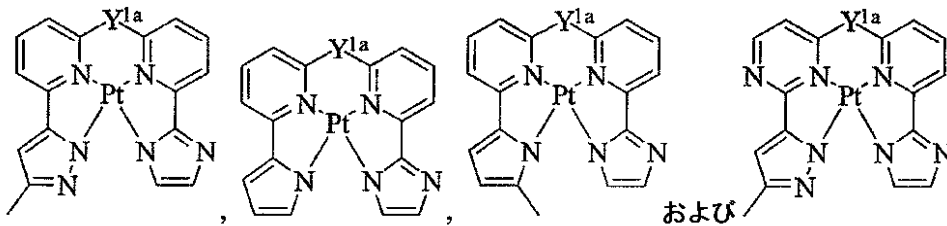
10

20

30

40

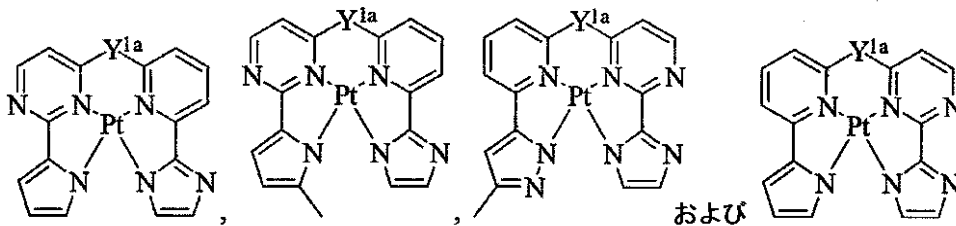
【化 18】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げることができる。

【0047】

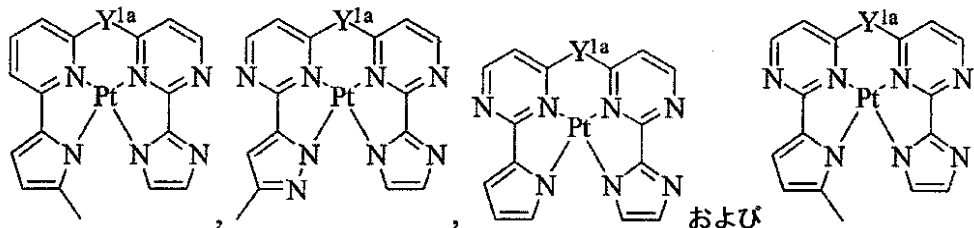
【化 19】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げることができる。

【0048】

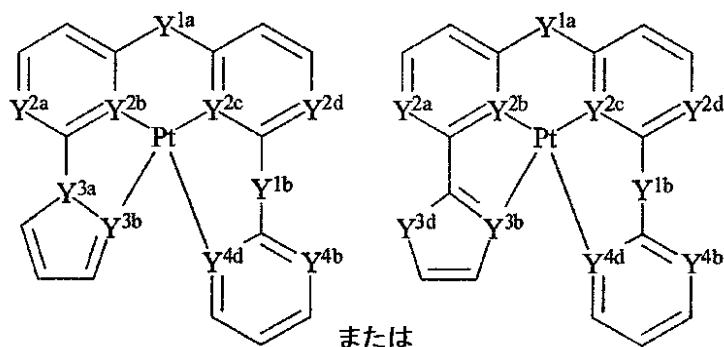
【化 20】



上記一般式の別の態様では、本化合物は下記式によって表される：

【0049】

【化 21】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げることができる。

【0050】

10

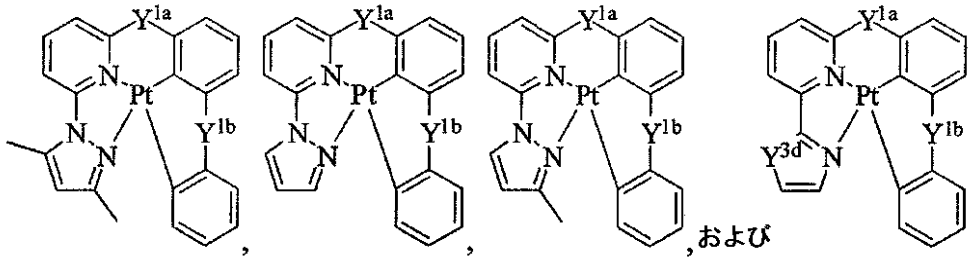
20

30

40

50

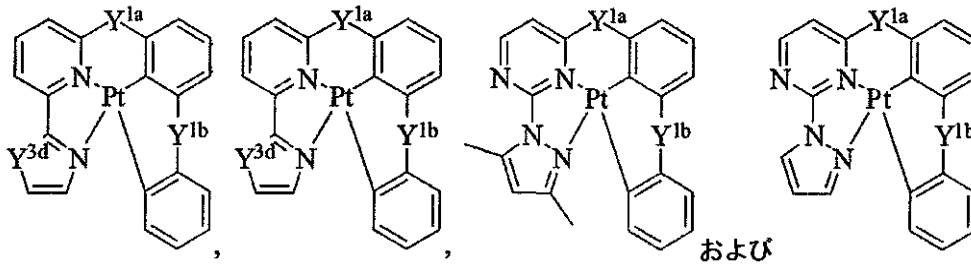
## 【化 2 2】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げることができる。

## 【0051】

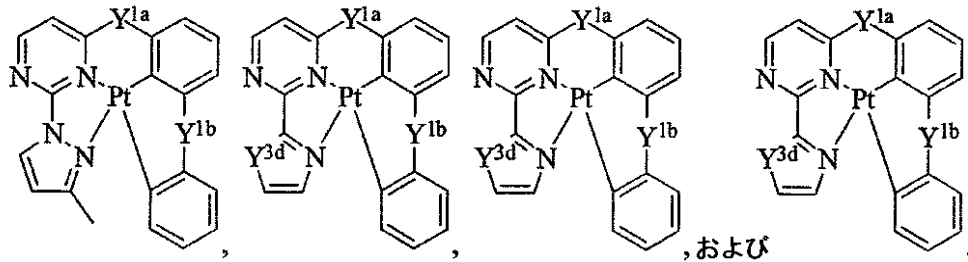
## 【化 2 3】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げることができる。

## 【0052】

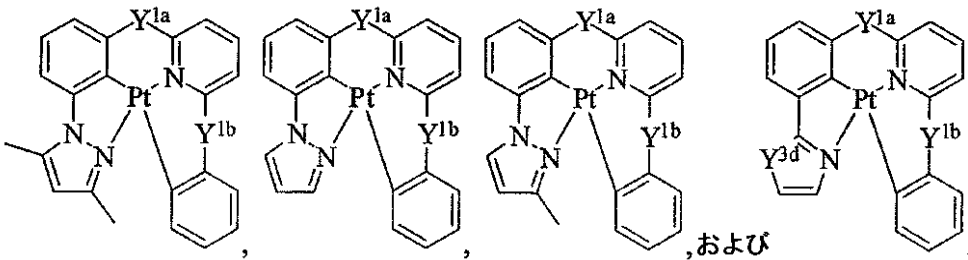
## 【化 2 4】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げることができる。

## 【0053】

## 【化 2 5】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げることができる。

## 【0054】

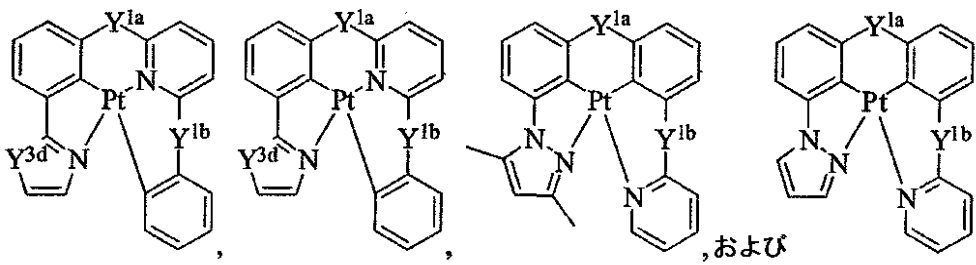
10

20

30

40

【化26】

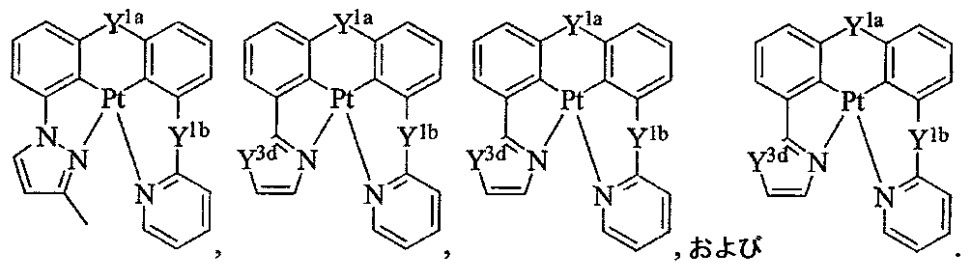


10

他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。

【0055】

【化27】

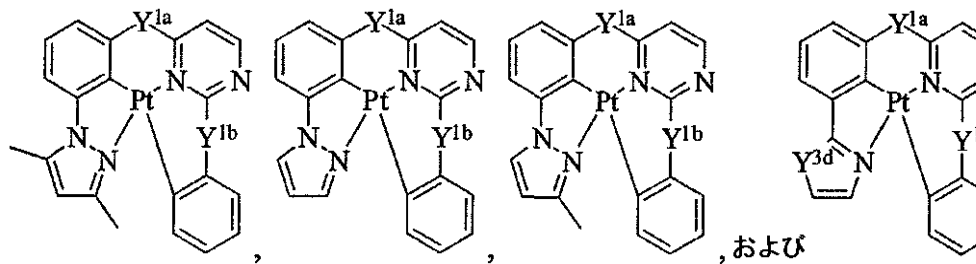


20

他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。

【0056】

【化28】

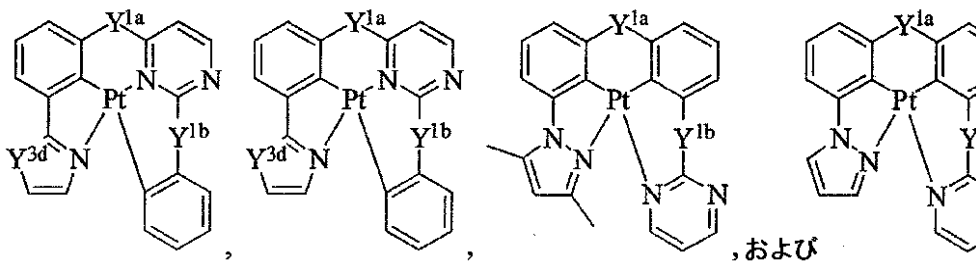


30

他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。

【0057】

【化29】

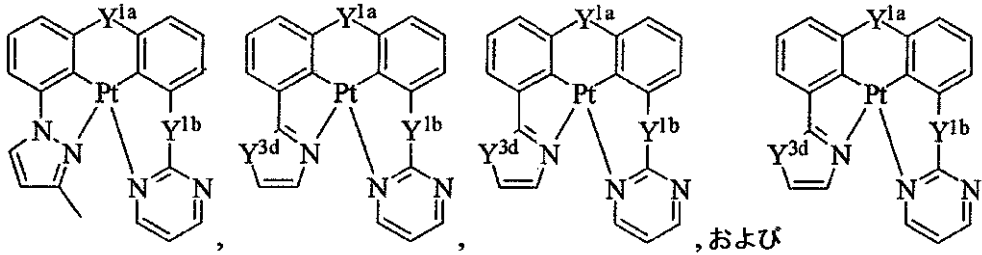


40

他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。

【0058】

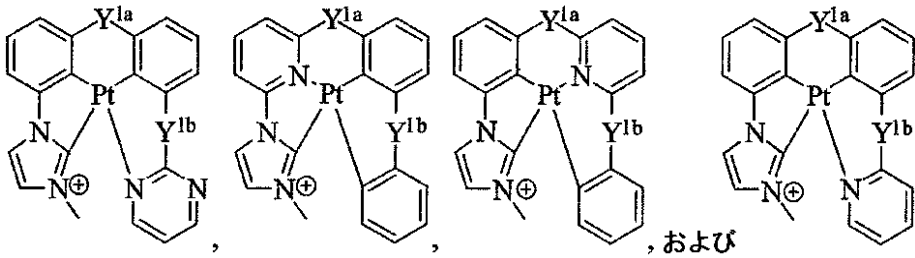
【化30】



他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。 10

【0059】

【化31】

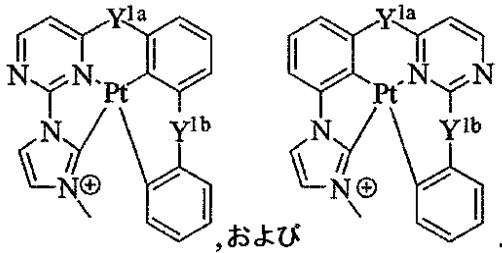


20

他の態様では、この式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げるができる。

【0060】

【化32】

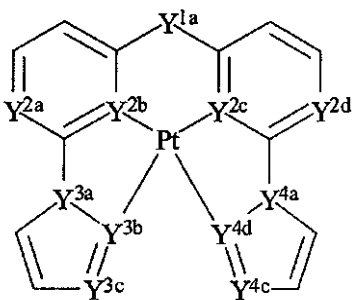


30

上記一般式の別の態様では、本化合物は下記式によって表される。

【0061】

【化33】

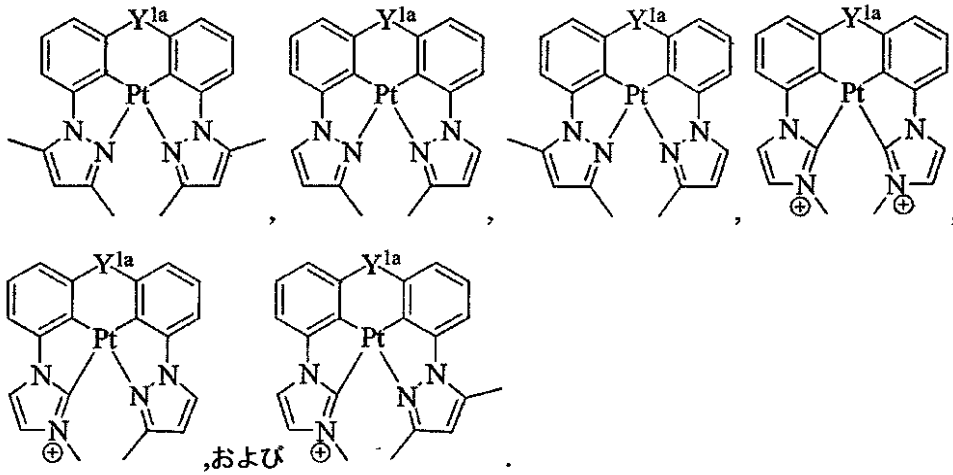


40

この式における具体的な態様の非限定的な例として、下記が挙げられる。

【0062】

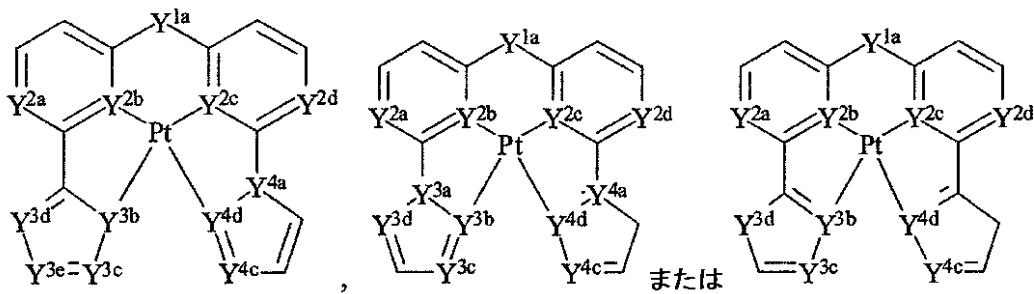
## 【化34】



上記一般式の別の態様では、本化合物は下記式によって表される。

## 【0063】

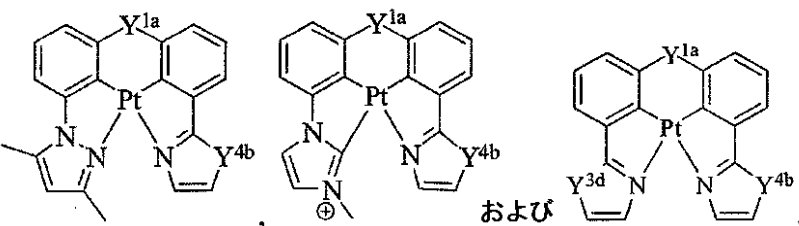
## 【化35】



他の態様では、これらの式における具体的な態様の非限定的な例として、以下の1つまたは複数を挙げることができる。

## 【0064】

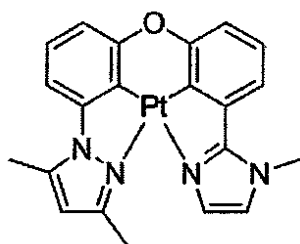
## 【化36】



一態様では、本発明の化合物は、下記を含んでもよい。

## 【0065】

## 【化37】



## [DMPz-Ph-O-Ph-Mlz] Pt(II)

別の態様では、本発明の化合物は、下記を含んでもよい。

10

20

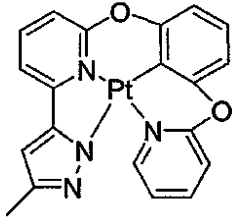
30

40

50

【 0 0 6 6 】

【 化 3 8 】



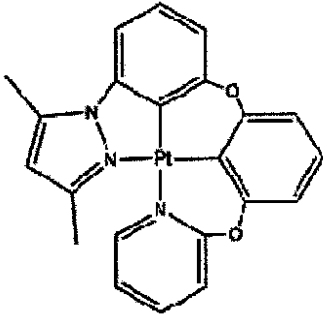
[MPz-Py-O-Ph-O-Py] Pt(II)

10

別の態様では、本発明の化合物は、下記を含んでもよい。

【 0 0 6 7 】

【 化 3 9 】

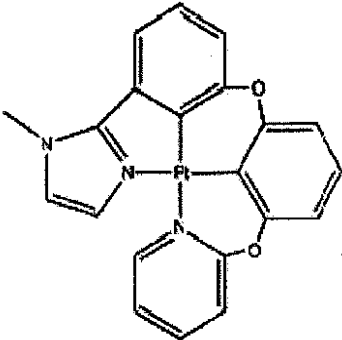


20

別の態様では、本発明の化合物は、下記を含んでもよい。

【 0 0 6 8 】

【 化 4 0 】

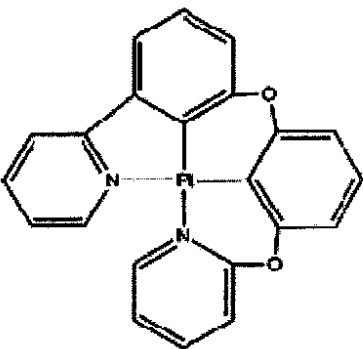


30

別の態様では、本発明の化合物は、下記を含んでもよい。

【 0 0 6 9 】

【 化 4 1 】



40

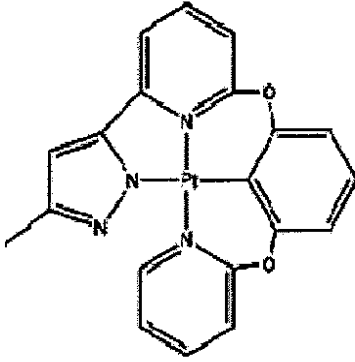
別の態様では、本発明の化合物は、下記を含んでもよい。

【 0 0 7 0 】

50



## 【化 4 2】



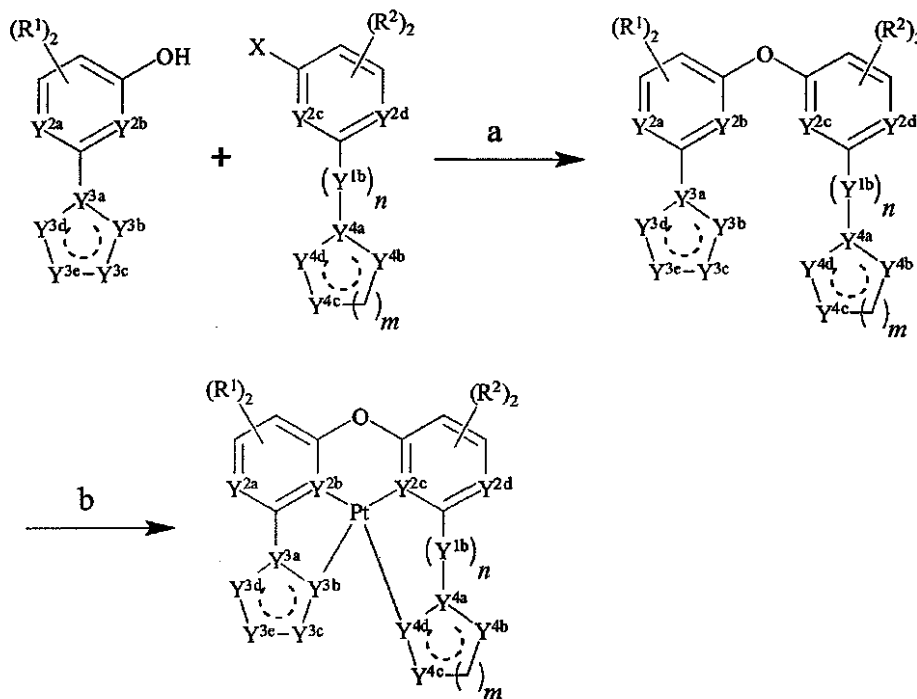
10

本発明の化合物は、様々な方法を用いて製造することができる。Y<sup>1 a</sup>がOである一態様では、スキーム1に従って本化合物を提供することができる。

スキーム1。

## 【0071】

## 【化 4 3】



20

30

スキーム1を参照しながら、たとえば、アルコール、特にフェノールをハロゲン化フェニル基に結合するCu<sub>2</sub>Oなど触媒量のカップリング試薬を使用して、工程「a」を達成することができる。一態様では、上記スキーム1における可変要素「X」はハロゲン（すなわち、Cl、F、I、Br）を表し、スキーム1と共に使用する場合、Iであってもよい。

40

## 【0072】

この金属と錯体を形成する各側の配位子は、一般にY<sup>3 a</sup>がNであるか、またはCであるかに依存して、様々な方法を用いて独立に製造してもよい。別の態様では、下記スキーム2を参照し、Y<sup>4 a</sup>がNである場合、ハロゲン化フェニル化合物をピラゾール、イミダゾール(imidazole)、1H-1,2,3-トリアゾール、1H-テトラゾールまたは2H-ペントゾールと反応させるスキーム2(A)に従い、前駆体を得てもよい。一態様では、ハロゲン化フェニル化合物は、Cl、Br、FまたはIなどの任意のハロゲン(X)を含んでもよいけれども、好ましくは、通常カップリング反応において反応性が

50

より高いIである。ハロゲン化フェニル化合物と、対応するピラゾール、イミダゾール (imidazole)、1H-1,2,3-トリアゾール、1H-テトラゾールまたは2H-ペントゾールとは、Cu<sub>2</sub>Oなどの金属または有機金属カップリング剤を用いて結合することができる。こうしたカップリング反応においては、syn-2-ピリジンアルドキシムなどの酸スカベンジャーを小さいモル比、たとえば20mol%で含ませると有利な場合がある。

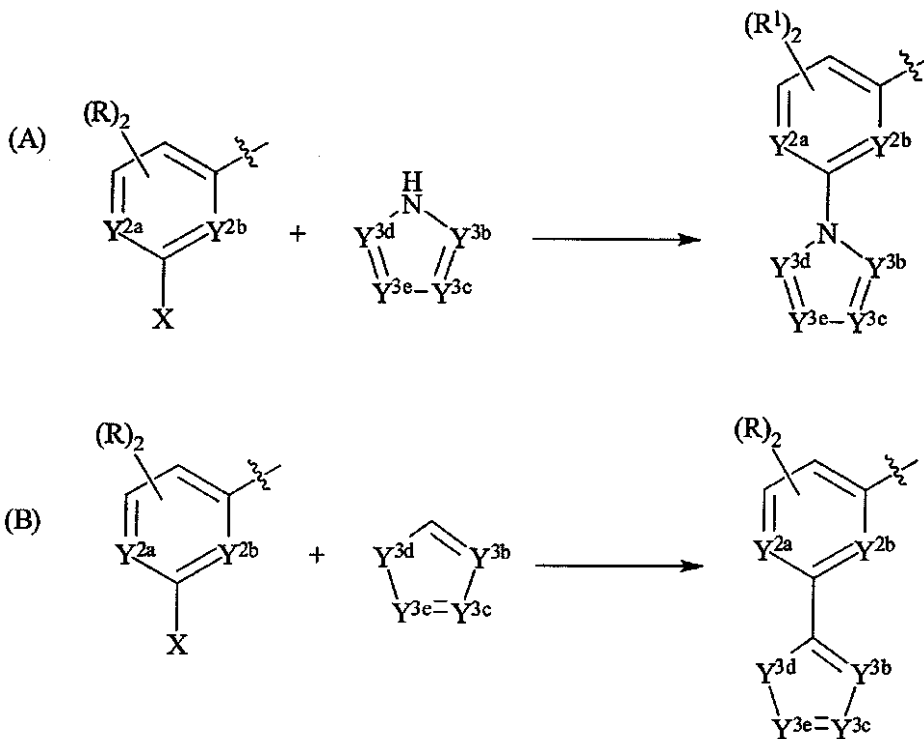
【0073】

あるいは、Y<sup>4a</sup>がCである場合、異なるプロトコルを用いて前駆体を得てもよい。別の態様では、下記スキーム2(B)を参照し、上記で論じたようにハロゲン化フェニルを、テトラゾール、1,2,3-トリアゾール、ピラゾールまたはピロールと反応させて、スキーム2(A)に示すような炭素-窒素結合カップリングではなく、炭素-炭素結合カップリングを達成する。また、炭素-炭素結合カップリングは、Pd(II)触媒(たとえば、Pd(OAc)<sub>2</sub>)などの有機金属触媒を小さいモル比で用いて達成してもよい。有機金属触媒は通常、KIおよびCuIなど過剰量の塩混合物と一緒に使用する。当業者が理解しているように、スキーム2に示す各カップリング反応を採用する場合、乾燥雰囲気、たとえばアルゴン下で、あるいはさらに水分または酸素が含まれるのを回避するためドライボックスで反応を行うと有利な場合がある。

スキーム2。

【0074】

【化44】



一態様では、1種または複数種の本発明の化合物の調製に関連する本明細書に記載の化合物、たとえば、カップリング剤などの試薬、および/または触媒は、市販されている。本開示の教示内容を把握している当業者であれば、具体的な本発明の化合物を調製するのに適切な化合物、試薬、および/または触媒を容易に選択することができる。

【0075】

別の態様では、本発明の化合物は、様々な光学的用途に有用であり得る。一態様では、任意の1種または(of)複数種の本発明の化合物を、たとえば、光発光デバイスなどの電子デバイスにおける発光体、吸収体またはこれらの組み合わせとして使用することができる。本発明の化合物はそのまま使用してもよいし、あるいはそうしたデバイスに使用さ

10

20

30

40

50

れる複合材および/または層として形成してもよい点に留意されたい。一態様では、1種または複数種の本発明の化合物から層を形成し、層をデバイスに配置する。別の態様では、1種または複数種の本発明の化合物を用いて複合材料を形成し、複合材料をデバイスに配置してもよい。組成が同一または異なる複数の化合物を同一の層または複合材に使用してもよい点に留意されたい。他の態様では、層または複合材は任意に、1種または複数種の追加成分、たとえば、ホスト材料、ポリマー、加工助剤、電荷輸送 (transport) 材料、またはこれらの組み合わせなどをさらに含んでもよい。別の態様では、所望の発光および/または吸収特性を得るため、たとえば、重ね合わせて、または実質的に重ね合わせて多層を形成してもよい。たとえば、様々な化合物の多層は、所望の発光スペクトルを得るために得てもよい。一態様では、デバイスにおける任意の1つまたは複数の層、またはその任意の一部は、個別に処理できるものであってもよい。

10

## 【0076】

別の態様では、本化合物は、有機発光ダイオード (OLED)、ルミネッセンスデバイスおよびディスプレイ、ならびに他の光発光デバイスにおいて光発光材料として有用であり得る。図1を参照すると、たとえば、具体的な態様、[DMPz-Ph-O-Ph-MIz]Pt (II) は一定の波長範囲において、青色の狭い発光と、赤色から近IR領域のスペクトルに他の発光帯とを含むフォトルミネッセンス (光の吸収に続く光の発光) を示す。

## 【0077】

本化合物の発光 (および吸収) プロファイルは、金属中心周囲の配位子構造を変えることにより調整してもよい。たとえば、理論に拘泥するわけではないが、電子求引性置換基を含む配位子を持つ化合物は一般に、発光および吸収など、電子供与置換基を含む配位子を持つ化合物と異なる光学的特性を示す。一態様では、化学構造の変化が化合物の電子構造に影響を与える場合があり、それにより化合物の吸収および発光に影響を及ぼす。したがって、種々の態様では、本発明の化合物は、特定の発光または吸収特性が要求される個々の用途に合うようにしたり、あるいは調整したりできる。

20

## 【0078】

一態様では、OLEDに1種または複数種の本発明の化合物を使用してもよい。図2は、OLED100の断面図を示し、OLED100は、通常、酸化インジウムスズ (ITO: indium tin oxide) などの透明材料であるアノード104、正孔輸送材料 (単数または複数) (HTL: hole-transporting material) 層106、発光体およびホストを含む発光材料 (EML: emissive material) などの光処理材料層108、電子輸送材料 (単数または複数) (ETL: electron-transporting material) 層110、ならびに金属カソード層112を備えた基板102を含む。

30

## 【0079】

この態様では、光処理材料層108は、任意にホスト材料と共に1種または複数種の本発明の化合物を含んでもよい。ホスト材料は、当該技術分野において公知の任意の好適なホスト材料であってもよい。OLEDの発光色は、光処理材料108の発光エネルギー (光学的エネルギーギャップ) により決定され、上記で論じたように、発光化合物および/またはホスト材料の電子構造を調整することにより調整することができる。HTL層106の正孔輸送材料、およびETL層110の電子輸送材料 (単数または複数) はどちらも、当該技術分野において公知の任意の好適な正孔輸送体を含んでもよい。光発光および/または吸収デバイスの製造のための成分およびデザインについては、市販されており、当業者は、本開示の教示内容を把握すれば、デバイスを製造するのに好適な成分およびデザインを容易に選択することができる。

40

## 【0080】

本発明の化合物は、リン光を示し得ることが明らかになるであろう。リン光OLED (すなわち、リン光発光体を含むOLED) は通常、蛍光OLEDなど他のOLEDより (that) デバイスの効率性が高い。電解リン光発光体に基づく光発光デバイスは、OL

50

EDおよび特にリン光OLEDの教示内容について本参照により本明細書に援用するBaldoraへの国際公開第2000/070655号により詳細に記載されている。

【0081】

一態様では、OLEDデバイスから発光される光は通常、蛍光および/またはリン光過程により生成される。種々の態様では、OLEDは、デバイスのアノードとカソードとを隔てている少なくとも2つの薄い有機層からなっているもよい。一態様では、少なくとも1つのこれらの層の材料は、正孔を輸送する材料の能力に基づき選択することができ、少なくとも1つの他の層の材料は、電子を輸送する材料の能力に基づき選択することができる。

【0082】

別の態様では、三原色の1つまたは複数に相当する所定のスペクトル領域近傍を中心とした比較的狭帯域でエレクトロルミネッセンス発光を与える、OLEDにおける着色層として使用できる材料を用いてOLEDを製造すると望ましい場合がある。別の態様では、そうした化合物は、真空蒸着した有機材料から完全に調製されるOLEDに容易に導入することができるように、真空蒸着法を用いて薄層として容易に蒸着することができると望ましい場合がある。一態様では、本明細書に記載の本発明の化合物の任意の1種または複数種を薄層として形成してもよい。別の態様では、本明細書に記載の本発明の化合物の任意の1種または複数は、たとえば、真空蒸着法、熱蒸着法、スピンコーティング法またはこれらの組み合わせにより薄層として形成してもよい。他の態様では、当該技術分野において公知の他のコーティングおよび/または膜形成技術を使用してもよいが、ただしこうした技法は、本発明の化合物の光の発光および/または光の吸収特性を破壊する、および/または悪影響を及ぼすことがないものとする。

【0083】

一態様では、例示的なOLEDデバイスの一般的な概略図を上述した。別の態様では、OLEDデバイスの層の構成は、正孔輸送(transport)層および電子輸送層を含み、その間に発光層があってもよく、各層は少なくとも一部が重ね合わさっている。別の態様では、他の層が任意に、任意に記載される他の層に隣接するか、または任意に記載される他の層の間に存在してもよい。例示的な一態様では、励起子阻止層が発光層と電子輸送層との間に配置される。

【0084】

一態様では、発光分子がゲストとして存在するホスト材料を用いて発光層を形成してもよいし、あるいは発光層は、発光分子自体で形成されていてもよい。前者の場合、ホスト材料は、たとえば、置換トリ-アリアルアミンなどの正孔輸送マトリックスであってもよい。別の態様では、ホスト材料は、4,4'-N,N'-ジカルバゾール-ピフェニル(CBP)を含んでもよい。

【0085】

なお別の態様では、発光層は、ドーパントがルミネッセンスを発する際に発光される光の波長に影響を与え得る偏光分子をさらに含んでもよい。

【0086】

なお別の態様では、発光分子および任意のホスト材料を含む発光層に電子を輸送するため、電子輸送材料で形成される層を使用してもよい。種々の態様では、電子輸送(transport)材料は、たとえば、金属キノソレート、オキシダゾールおよびトリアゾールなどの電子輸送マトリックスをさらに含んでもよい。一態様では、例示的な電子輸送(transport)材料として、トリス-(8-ヒドロキシキノリン)アルミニウム(Alq3)がある。

【0087】

別の態様では、例示的な正孔輸送材料は、4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニル-アミノ]ピフェニル(NPD)である。

【0088】

一態様では、ルミネッセンス層内に励起子を閉じ込める励起子阻止層を使用すると有利

10

20

30

40

50

な場合がある。一態様では、この阻止層は、正孔輸送ホストのためルミネッセンス層と電子輸送 (transport) 層との間に配置してもよい。一態様では、こうした遮蔽層の例示的な材料はバソクプロイン (BCP: bathocuproine) である。

【0089】

一態様では、熱蒸発により、1種または複数種の本発明の化合物の層を、たとえば、酸化インジウムスズで予めコーティングされた清浄なガラス基板などの基板に蒸着してもよい。次いで4,4'-ビス(N-(1-ナフチル)-N-フェニル-アミノ]ピフェニルの400 厚の層を使用してIr(ppy)<sub>3</sub>とBCPとからなるルミネッセンス層に正孔を輸送してもよい。

【0090】

別の態様では、本発明の組成物および方法と共に、当業者に知られた他の技法を使用してもよい。たとえば、一態様では、LiFカソードを使用してもよい。別の態様では、ある形状の基板を使用してもよい。なお別の態様では、得られるデバイスの動作電圧の低減または量子効率の上昇をもたらし得るホール輸送 (transport) 材料を使用してもよい。

【0091】

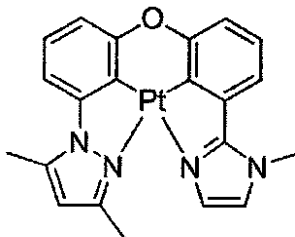
本発明のOLEDは、OLEDからなるほとんどのような種類のデバイス、たとえば、大型ディスプレイ、車両、コンピューター、テレビ、プリンター、大面積の壁、劇場もしくは競技場のスクリーン、広告掲示板、または標識に組み込まれたOLEDに使用してもよい。

【0092】

一態様では、たとえば有機発光ダイオードなどの電子デバイスは、発光体、吸収体またはこれらの組み合わせとして以下の化合物を含む。

【0093】

【化45】

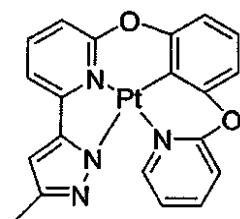


[DMPz-Ph-O-Ph-Miz] Pt(II)

一態様では、たとえば有機発光ダイオードなどの電子デバイスは、発光体、吸収体またはこれらの組み合わせとして以下の化合物を含む。

【0094】

【化46】



[MPz-Py-O-Ph-O-Py] Pt(II)

一態様では、たとえば有機発光ダイオードなどの電子デバイスは、発光体、吸収体またはこれらの組み合わせとして以下の化合物を含む。

【0095】

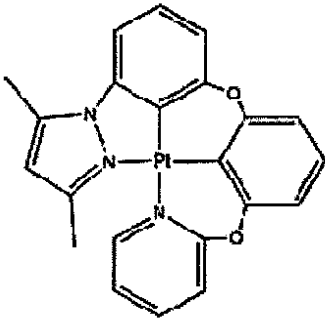
10

20

30

40

【化 4 7】

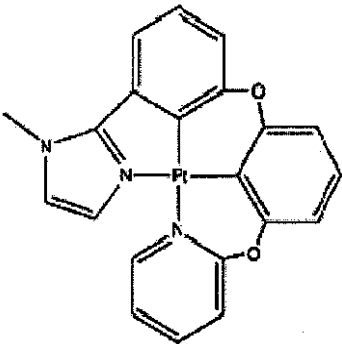


10

一態様では、たとえば有機発光ダイオードなどの電子デバイスは、発光体、吸収体またはこれらの組み合わせとして以下の化合物を含む。

【 0 0 9 6】

【化 4 8】

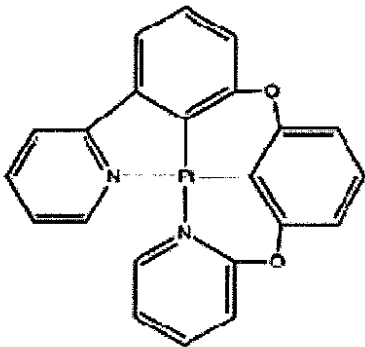


20

一態様では、たとえば有機発光ダイオードなどの電子デバイスは、発光体、吸収体またはこれらの組み合わせとして以下の化合物を含む。

【 0 0 9 7】

【化 4 9】



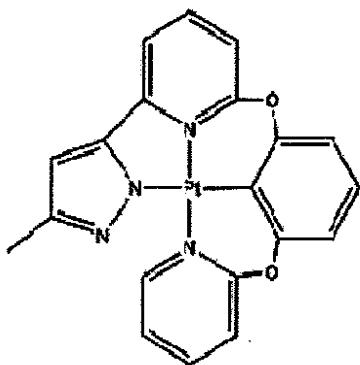
30

一態様では、たとえば有機発光ダイオードなどの電子デバイスは、発光体、吸収体またはこれらの組み合わせとして以下の化合物を含む。

40

【 0 0 9 8】

【化50】



10

【実施例】

【0099】

以下の例は、本明細書で特許請求される化合物、組成物、物品、デバイスおよび/または方法をどのように作製し、評価するかについての完全な開示および説明を当業者に提供するために提示するものであり、純粹に本発明を例示することを意図するものではない。数字（たとえば、量、温度等）について正確性を確保するように努力したが、ある程度の誤差および偏差を考慮すべきである。他に記載がない限り、部は重量部であり、温度は 単位または周囲温度であり、圧力は大気圧またはほぼ大気圧である。

20

【0100】

(実施例1)

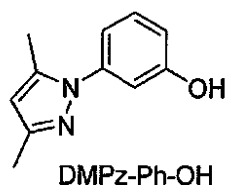
具体的な態様  $[(DMPz-Ph)_2-O]Pt(II)$  の調製。

【0101】

DMPz-Ph-OHの合成：

【0102】

【化51】



DMPz-Ph-OH

30

乾燥純窒素による排出と再充填の標準的なサイクル後、磁気攪拌子を備えた、オープン乾燥したシュレンクフラスコに  $Cu_2O$  (0.1 mmol、10 mol%)、syn-2-ピリジナルドキシム (0.4 mmol、20 mol%)、3,5-ジメチルピラゾール (1.1 mmol)、 $Cs_2CO_3$  (2.5 mmol)、3-ヨードフェノール (1.0 mmol) および脱気した無水ジメチルホルムアミド (DMF) (40 mL) を仕込んだ。このフラスコをマイクロ波照射下で2時間攪拌し、加熱した。反応混合物を室温まで放冷し、ジクロロメタンで希釈し、CELITE (商標) のプラグで濾過し、濾過ケーキをジクロロメタン (20 mL) で洗浄した。濾液を真空中で濃縮して残渣を得、これを、シリカゲルを用いたカラムクロマトグラフィーにより精製して純粋な生成物 DMPz-Ph-OH を50%収率で得た。 $^1H$  NMR ( $CDCl_3$ , 500 MHz): 2.26 (s, 1H), 2.26 (s, 3H), 2.30 (s, 3H), 5.98 (s, 1H), 6.73 - 6.78 (m, 2H), 7.11 (dd, 1H), 7.18 (dd, 1H)。

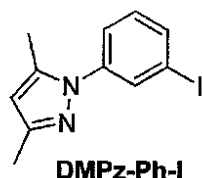
40

【0103】

DMPz-Ph-Iの合成：

【0104】

## 【化52】



乾燥純窒素による排出と再充填の標準的なサイクル後、磁気攪拌子を備えた、オープン乾燥したシュレンクフラスコに  $\text{Cu}_2\text{O}$  (0.1 mmol、10 mol%)、syn-2-ピリジナルドキシム (0.4 mmol、20 mol%)、3,5-ジメチルピラゾール (1.1 mmol)、 $\text{Cs}_2\text{CO}_3$  (2.5 mmol)、1,3-ジヨードベンゼン (1.0 mmol) および脱気した無水アセトニトリル (40 mL) を仕込んだ。このフラスコを油浴中で攪拌し、2日間還流させた。反応混合物を室温まで放冷し、ジクロロメタンで希釈し、CELITE (登録商標) のプラグで濾過し、濾過ケーキをジクロロメタン (20 mL) で洗浄した。濾液を真空中で濃縮して残渣を得、これを、シリカゲルを用いたカラムクロマトグラフィーにより精製して純粋な生成物 DMPz-Ph-I を 40% 収率で得た。 $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 500 MHz): 2.30 (s, 3H), 2.32 (s, 3H), 6.00 (s, 1H), 7.22 (dd, 1H), 7.40 (d, 1H), 7.67 (d, 1H), 7.84 (s, 1H)。

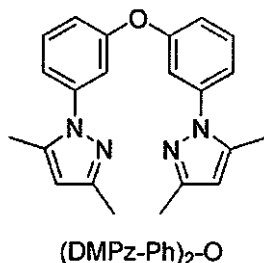
10

## 【0105】

(DMPz-Ph)<sub>2</sub>-O の合成:

## 【0106】

## 【化53】



20

30

乾燥純窒素による排出と再充填の標準的なサイクル後、磁気攪拌子を備えた、オープン乾燥したシュレンクフラスコに  $\text{Cu}_2\text{O}$  (0.1 mmol、10 mol%)、DMPz-Ph-OH (1.0 mmol)、 $\text{K}_2\text{CO}_3$  (2.5 mmol)、DMPz-Ph-I (1.0 mmol) および脱気した無水DMAc (20 mL) を仕込んだ。このフラスコを油浴中で攪拌し、2日間還流させた。反応混合物を室温まで放冷し、ジクロロメタンで希釈し、CELITE (登録商標) のプラグで濾過し、濾過ケーキをジクロロメタン (20 mL) で洗浄した。濾液を真空中で濃縮して残渣を得、これを、シリカゲルを用いたカラムクロマトグラフィーにより精製して純粋な生成物 (DMPz-Ph)<sub>2</sub>-O を 70% 収率で得た。 $^1\text{H}$  NMR ( $d_6$ -DMSO<sub>3</sub>, 400 MHz): 2.66 (s, 6H), 3.29 (s, 6H), 6.29 (s, 2H), 7.14 (dd, 2H), 7.43 (dd, 2H), 7.51 (dd, 2H), 8.16 (dd, 2H)。

40

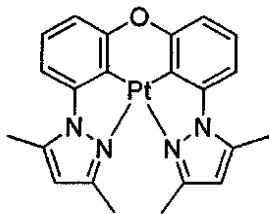
## 【0107】

[(DMPz-Ph)<sub>2</sub>-O]Pt(II) の合成:

## 【0108】



## 【化54】

[(DMPz-Ph)<sub>2</sub>-O] Pt(II)

(DMPz-Ph)<sub>2</sub>-O (1 mmol)、K<sub>2</sub>PtCl<sub>4</sub> (0.41 mg、1 mmol) および酢酸 (10 mL) の混合物を3日間還流させた。この混合物を室温まで放冷した。得られた黄色錯体を濾別し、MeOH、H<sub>2</sub>O、EtOHおよびEt<sub>2</sub>Oで洗浄し、真空下で乾燥させて[(DMPz-Ph)<sub>2</sub>-O]Pt(II)を90%収率で得た。さらに試験するためこの生成物を、ジメチルスルホキシド/メタノールから再結晶することにより精製した。

10

## 【0109】

(実施例2)

具体的な態様 [DMPz-Ph-O-Ph-MIz]Pt(II) の調製。

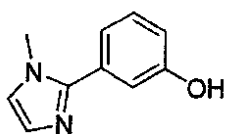
## 【0110】

MIz-Ph-OHの合成：

20

## 【0111】

## 【化55】



MIz-Ph-OH

脱気したDMF (12 mL) に溶かした3-ヨードフェノール (3.0 mmol)、1-メチルイミダゾール (4.5 mmol)、Pd(OAc)<sub>2</sub> (5 mg、0.01 mmol)、KI (1.0 g、6 mmol) およびCuI (1.2 g、6.1 mmol) の混合物をAr下、140℃で5日間加熱した。室温まで冷却後、混合物をNH<sub>3</sub>溶液 (10%、50 mL) に注ぎ、CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (40 × 3 mL) を加えた。有機相を分離し、乾燥させ (MgSO<sub>4</sub>)、溶媒を蒸発させた。この粗生成物をクロマトグラフ (シリカゲル；ヘキサン-Et<sub>2</sub>O、4:1) により精製してMIz-Ph-OHを淡黄色の固体として得た (50%)。

30

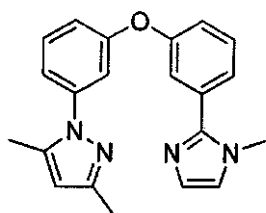
## 【0112】

DMPz-Ph-O-Ph-MIzの合成：

## 【0113】

## 【化56】

40



DMPz-Ph-O-Ph-MIz

乾燥純窒素による排出と再充填の標準的なサイクル後、磁気攪拌子を備えた、オープン乾燥したシュレンクフラスコにCu<sub>2</sub>O (0.1 mmol、10 mol%)、DMPz-

50

Ph-OH (1.0 mmol)、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.5 mmol)、DMPz-Ph-I (1.0 mmol) および脱気した無水DMAc (20 mL) を仕込んだ。このフラスコを油浴中で攪拌し、2日間還流させた。反応混合物を室温まで放冷し、ジクロロメタンで希釈し、CELITE (登録商標) のプラグで濾過し、濾過ケーキをジクロロメタン (20 mL) で洗浄した。濾液を真空中で濃縮して残渣を得、これを、シリカゲルを用いたカラムクロマトグラフィーにより精製して純粋な生成物 (DMPz-Ph)<sub>2</sub>-O を70% 収率で得た。<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 500 MHz): 2.27 (s, 3H), 2.30 (s, 3H), 3.75 (s, 3H), 5.98 (s, 1H), 6.96 (d, 1H), 7.00 (dd, 1H), 7.07-7.10 (m, 2H), 7.14 (dd, 1H), 7.18 (dd, 1H), 7.32 (d, 1H), 7.37-7.45 (m, 3H)。

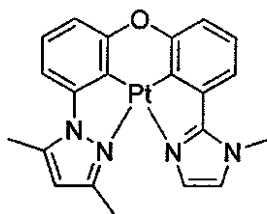
10

【0114】

[DMPz-Ph-O-Ph-MIz]Pt(II) の合成:

【0115】

【化57】



20

[DMPz-Ph-O-Ph-MIz]Pt(II)

DMPz-Ph-O-Ph-MIz (1 mmol)、K<sub>2</sub>PtCl<sub>4</sub> (0.41 mg、1 mmol) および酢酸 (10 mL) の混合物を3日間還流させた。この混合物を室温まで放冷した。得られた黄色錯体を濾別し、MeOH、H<sub>2</sub>O、EtOH および Et<sub>2</sub>O で洗浄し、真空下で乾燥させて [DMPz-Ph-O-Ph-MIz]Pt(II) を80% 収率で得た。さらに試験するため生成物を、ジメチルスルホキシド (sulfoxide) / メタノールから再結晶することにより精製した。<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 500 MHz): 2.65 (s, 3H), 2.72 (s, 3H), 4.08 (s, 3H), 6.41 (s, 1H), 6.88 (d, 1H), 6.99 (s, 1H), 7.12-7.19 (m, 2H), 7.24 (d, 1H), 7.43-7.47 (m, 3H)。

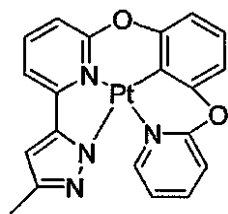
30

【0116】

[MPz-Py-O-Ph-O-Py]Pt(II) の合成:

【0117】

【化58】



40

[MPz-Py-O-Ph-O-Py]Pt(II)

MPz-Py-O-Ph-O-Py (1 mmol)、K<sub>2</sub>PtCl<sub>4</sub> (1 mmol) および酢酸 (20 mL) の混合物を3日間還流させた。この混合物を室温まで放冷した。得られた黄色錯体を濾別し、MeOH、H<sub>2</sub>O、EtOH および Et<sub>2</sub>O で洗浄し、真空下で乾燥させて [MPz-Py-O-Ph-O-Py]Pt(II) を50% 収率で得た。<sup>1</sup>H NMR (D<sub>6</sub>-DMSO, 500 MHz): 2.43 (s, 3H), 7.08 (d, 1H), 7.13-7.16 (m, 2H), 7.30 (t, 1H), 7.43 (t,

50

1 H), 7.50 (d, 1H), 7.60 (d, 1H), 8.04 (d, 1H), 8.30 (t, 1H), 8.35 (t, 1H), 9.12 (d, 1H)。

【0118】

(実施例3)

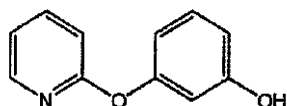
具体的な態様 [Py-O-Ph-O-Py-dMPz]Pt (Pt001) の調製。

【0119】

Py-O-Ph-OHの合成

【0120】

【化59】



10

窒素雰囲気下で、圧力容器に磁気攪拌子、レスルシノール (110 mmol)、2-ブロモピリジン (100 mmol)、1-メチルイミダゾール (5 mmol) および炭酸カリウム (200 mmol) を仕込んだ。ピリジン (80 mL) を加え、窒素で20分間バブリングしてからヨウ化銅 (I) (10 mmol) を加え、さらに10分バブリングした。この容器をシールし、攪拌しながら140 °Cまで加熱した。2日後、この溶液を放冷した。固体を濾別し、トルエンとメタノールとの50:50混合物でリンスした。濾液を回転蒸発法により濃縮し、10 mLの水酢酸を含む150 mLの水を加え、激しく振盪した。水をデカンテーションで除き、50 mLのジクロロメタンを加え、オフホワイトの沈殿物を形成させ、これを真空濾過により集め、エーテルで乾燥させ、純粋な生成物 Py-O-Ph-OH を55%収率で得た。<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>): 5.98 (s, 1H), 6.59 (s, 1H), 6.62 - 6.69 (m, 2H), 6.94 (d, 1H), 7.02 (dd, 1H), 7.23 (vt, 1H), 7.70 (dd, 1H), 8.23 (b, 1H)。

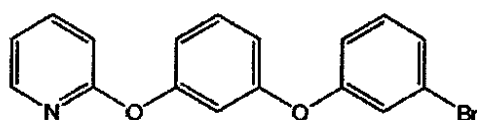
20

【0121】

Py-O-Ph-O-Ph-Brの合成

【0122】

【化60】



窒素雰囲気下で、圧力容器に磁気攪拌子、Py-O-Ph-OH (50 mmol)、2,6-ジブロモピリジン (50 mmol)、1-メチルイミダゾール (25 mmol) および炭酸カリウム (100 mmol) を仕込んだ。トルエン (80 mL) を加え、窒素で20分間バブリングしてからヨウ化銅 (I) (5 mmol) を加え、この溶液をさらに10分間バブリングした。この容器をシールし、攪拌しながら140 °Cまで加熱した。2日後、この溶液を放冷し、固体を濾別し、ジクロロメタンでリンスした。濾液を、ジクロロメタンおよび水を含む分液ロートに加えた。この水相を75 mLのジクロロメタンで3回洗浄し、合わせた有機層を純水で1回洗浄した。有機層を集め、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、濾液を回転蒸発法により濃縮した。得られた油を、ジクロロメタンを用いるシリカカラムクロマトグラフィーにより精製し、純粋な生成物 Py-O-Ph-O-Ph-Br を60%収率で得た。<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>): 6.80 - 6.85 (m, 2H), 6.91 (s, 1H), 6.94 (s, 1H), 6.97 - 7.03 (m, 2H), 7.19 (vt, 1H), 7.21 - 7.24 (m, 2H), 7.36 (vt, 1H), 7.70 (dd, 1H), 8.21 (dd, 1H)。

40

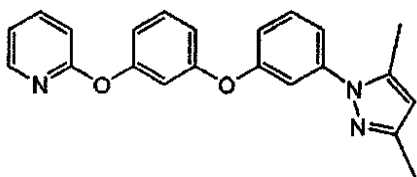
50

## 【0123】

Py - O - Ph - O - Ph - dMPz の合成

## 【0124】

## 【化61】



10

乾燥純窒素による排出と再充填の標準的なサイクル後、磁気攪拌子を備えた、オープン乾燥したシュレンクフラスコに  $\text{Cu}_2\text{O}$  (1 mmol、10 mol%)、syn-2-ピリジンアルドキシム (4 mmol、20 mol%)、3,5-ジメチルピラゾール (12 mmol)、 $\text{Cs}_2\text{CO}_3$  (25 mmol)、Py-O-Ph-O-Ph-Br (10 mmol) および脱気した無水アセトニトリル (100 mL) を仕込んだ。この溶液を2日間還流させ、室温まで放冷し、ジクロロメタンで希釈し、セライトのプラグで濾過した。濾過ケーキをジクロロメタン (100 mL) で洗浄し、濾液を真空中で濃縮して残渣を得、これを、シリカゲルを用いたカラムクロマトグラフィーにより精製して純粋な生成物 Py-O-Ph-O-Ph-dMPz を45%収率で得た。 $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ ): 2.29 (s, 3H), 2.28 (s, 3H), 5.98 (s, 1H), 6.84 (vt, 1H), 6.85 - 6.93 (m, 3H), 6.98 - 7.04 (m, 2H), 7.13 (vt, 1H), 7.19 (dd, 1H), 7.35 (vt, 1H), 7.39 (vt, 1H), 7.69 (dd, 1H), 8.19 (dd, 1H)。

20

## 【0125】

[Py-O-Ph-O-Ph-dMPz]Pt (Pt001) の合成

Py-O-Ph-O-Ph-dMPz (1 mmol)、 $\text{K}_2\text{PtCl}_4$  (0.41 mg、1 mmol) および酢酸 (35 mL) の混合物を3日間還流させた。この混合物を室温まで放冷した。得られた白色錯体を濾別し、 $\text{H}_2\text{O}$ 、MeOH および  $\text{Et}_2\text{O}$  で洗浄し、真空下で乾燥させて [Py-O-Ph-O-Ph-dMPz]Pt を60%収率で得た。 $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ ): 2.23 (s, 3H), 2.70 (s, 3H), 6.09 (s, 1H), 6.93 (dd, 1H), 7.01 (vt, 1H), 7.03 - 7.11 (m, 3H), 7.14 (d, 1H), 7.17 (vt, 1H), 7.37 (d, 1H), 7.88 (dd, 1H), 8.80 (d, 1H)。

30

## 【0126】

この化合物を、220 - 190 - 150 - 110 の4領域の勾配で真空下、昇華し、65%収率で採取した。

## 【0127】

図4に77Kおよび300Kでの [Py-O-Ph-O-Py-dMPz]Pt のフォトルミネッセンススペクトルを示す。

40

## 【0128】

(実施例4)

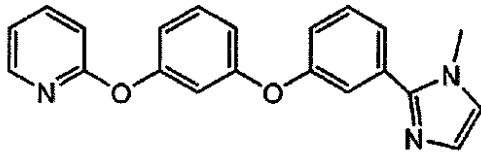
具体的な態様 [Py-O-Ph-O-Ph-MIz]Pt (Pt002) の調製。

## 【0129】

Py-O-Ph-O-Ph-MIz の合成

## 【0130】

## 【化62】



窒素雰囲気下で、35 mLのマイクロウェーブバイアルに磁気攪拌子、Py-O-Ph-O-Ph-Br (10 mmol)、ヨウ化銅(I) (20 mmol) および1-メチルイミダゾール (11 mmol) を仕込んだ。DMF (15 mL) を加え、窒素で20分間バブリングしてから酢酸パラジウム (.5 mmol) を加え、この溶液をさらに10分間バブリングした。バイアルをシールし、150 W、155 で2時間攪拌しながら照射した。この溶液を放冷し、100 mLのジクロロメタン (DCM) とNH<sub>4</sub>OHの15%水溶液150 mLとの、30分間攪拌した混合物に一気に加え、分液ロートに注いだ。有機層を分離し、水層をDCM (50 mL) でさらに2回洗浄した。有機層を合わせて、純水 (50 mL) で1回洗浄した。有機層を硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、回転蒸発法により濃縮した。得られた油を、DCMおよびメタノールを用いたシリカカラムクロマトグラフィーにより精製し、純粋な生成物Py-O-Ph-O-Ph-MIzを80%収率で得た。<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) : 3.73 (s, 3H) 6.83 (vt, 1H) , 6.84-6.93 (m, 3H) , 6.96 (d, 1H) , 7.00 (dd, 1H) , 7.08-7.13 (m, 2H) , 7.31 (d, 1H) , 7.34 (vt, 1H) , 7.41 (d, 1H) , 7.42 (vt, 1H) , 7.68 (dd, 1H) , 8.19 (dd, 1H)。

## 【0131】

[Py-O-Ph-O-Ph-MIz]Pt (Pt002) の合成

Py-O-Ph-O-Ph-MIz (1 mmol)、K<sub>2</sub>PtCl<sub>4</sub> (0.41 mg、1 mmol) および酢酸 (35 mL) の混合物を3日間還流させた。この混合物を室温まで放冷した。得られた白色錯体を濾別し、H<sub>2</sub>O、MeOHおよびEt<sub>2</sub>Oで洗浄し、真空下で乾燥させて[Py-O-Ph-O-Ph-MIz]Ptを60%収率で得た。<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) : 4.02 (s, 3H) , 6.87-6.93 (m, 2H) , 7.01 (d, 1H) , 7.05-7.13 (m, 4H) , 7.17 (vt, 1H) , 7.27 (d, 1H) , 7.32 (d, 1H) , 7.90 (dd, 1H) , 8.81 (dd, 1H)。

## 【0132】

この化合物を、220 - 190 - 160 - 130 の4領域の勾配で真空下、昇華し、60%収率で採取した。

## 【0133】

77 Kおよび300 Kでの[Py-O-Ph-O-Ph-MIz]Ptのフォトルミネッセンススペクトルを図5に示す。

## 【0134】

図6は、Ir(ppy)<sub>3</sub> およびPt002デバイスにおける時間と電圧(上)および輝度(下)との関係を示す図を示す。この一般的なデバイスの構造は、ITO/CuPc (10 nm)/NPD (30 nm)/25 nm EML (Ir(ppy)<sub>3</sub> (6%) : CBPまたはPt002 (2%) : CBP)/BALq (10 nm)/Alq (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (100 nm)である。デバイスは、2 mA/cm<sup>2</sup>の一定の電流で駆動させた。

## 【0135】

(実施例5)

具体的な態様[Py-O-Ph-O-Ph-Py]Pt (Pt003) の調製。

## 【0136】

10

20

30

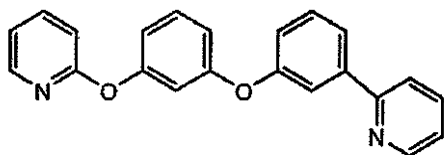
40

50

Py - O - Ph - O - Ph - Py の合成

【0137】

【化63】



窒素雰囲気下で、オープン乾燥した三口フラスコに磁気攪拌子、Py - O - Ph - O - Ph - Br (10 mmol) および 2 - (トリプロピルスタニル)ピリジン (10 mmol) を仕込んだ。乾燥トルエン (100 mL) を加え、窒素で20分間バブリングしてからテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (0.5 mmol) を加え、10分間さらにバブリングし、2日間還流させた。冷却後、フラスコの内容物を濾過し、この液体を回転蒸発法により濃縮し、得られた油を、DCMを用いたシリカカラムクロマトグラフィーにより精製して、純粋な生成物 Py - O - Ph - O - Ph - Py を65% 収率で得た。<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>): 6.84 (vt, 1H), 6.85 - 6.89 (m, 2H), 6.91 (d, 1H), 6.98 (dd, 1H), 7.11 (dd, 1H), 7.24 (dd, 1H), 7.34 (vt, 1H), 7.44 (vt, 1H), 7.66 - 7.78 (m, 5H), 8.19 (dd, 1H), 8.67 (dd, 1H)。

10

【0138】

20

[Py - O - Ph - O - Ph - Py]Pt (Pt003) の合成

Py - O - Ph - O - Ph - Py (1 mmol)、K<sub>2</sub>PtCl<sub>4</sub> (0.41 mg、1 mmol) および酢酸 (35 mL) の混合物を3日間還流させた。この混合物を室温まで放冷した。得られた白色錯体を濾別し、H<sub>2</sub>O、MeOH および Et<sub>2</sub>O で洗浄し、真空下で乾燥させて [Py - O - Ph - O - Ph - Py]Pt を60% 収率で得た。<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>): 6.95 (dd, 1H), 7.12 (d, 1H), 7.13 (s, 1H), 7.17 - 7.25 (m, 4H), 7.40 (d, 1H), 7.50 (d, 1H), 7.87 - 7.97 (m, 3H), 8.47 (d, 1H), 8.63 (d, 1H)。

【0139】

この化合物を、185 - 150 - 130 - 100 の4領域の勾配で真空下、昇華し、70% 収率で採取した。

30

【0140】

77 K および 300 K での [Py - O - Ph - O - Ph - Py]Pt のフォトルミネッセンススペクトルを図7に示す。

【0141】

(実施例6)

具体的な態様 [Py - O - Ph - O - Py - MPz]Pt (Pt004) の調製。

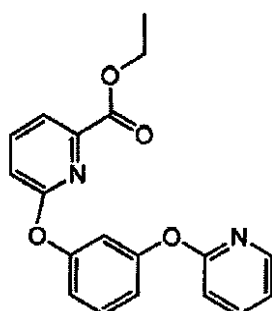
【0142】

Py - O - Ph - O - Py - EA の合成

【0143】

40

【化64】



50

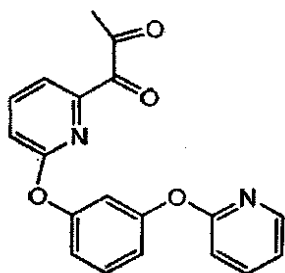
窒素雰囲気下で、圧力容器に磁気攪拌子、Py-O-Ph-OH (20 mmol)、6-ブロモ-2-ピリジンカルボン酸エチル (20 mmol)、1-メチルイミダゾール (10 mmol) および炭酸カリウム (40 mmol) を仕込んだ。乾燥トルエン (70 mL) を加え、窒素で20分間バブリングしてからヨウ化銅 (I) (2 mmol) を加え、10分間さらにバブリングした。この容器をシールし、攪拌しながら140 °Cに加熱した。2日後、この溶液を放冷し、固体を濾別し、ジクロロメタンでリンスした。濾液を、DCMおよび水を含む分液ロートに加えた。水相を75 mLのDCMで3回洗浄し、合わせた有機層を純水で1回洗浄した。有機層を集め、硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、濾液を回転蒸発法により濃縮した。得られた油を、DCMを用いたシリカカラムクロマトグラフィーにより精製し、純粋な生成物Py-O-Ph-O-Py-EAを45%収率で得た。<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>): 1.38 (s, 3H), 4.41 (q, 2H), 6.94 (d, 1H), 6.98 - 7.05 (m, 5H), 7.41 (vt, 1H), 7.69 (dd, 1H), 7.77 - 7.87 (m, 2H), 8.21 (d, 1H)。

【0144】

Py-O-Ph-O-Py-ジケイトンの合成

【0145】

【化65】



窒素雰囲気下で、オープン乾燥した三口フラスコに磁気攪拌子、ナトリウムメトキシド (13 mmol) および乾燥THF (100 mL) を仕込んだ。この溶液を窒素で20分間バブリングし、氷浴に浸した。乾燥アセトン (11 mmol) をゆっくりと加えた。10分間の攪拌後、少量の乾燥THFに溶解させたPy-O-Ph-O-Py-EA (10 mmol) を加えた。この溶液を窒素下で3時間攪拌し、室温に戻し、3時間さらに還流させた。

【0146】

冷却後、この容器に、10 mLの酢酸を含む100 mLのDCMを加えた。固体を濾別し、DCMで洗浄した。濾液を集めて、回転蒸発法により濃縮し、得られた油を、DCMを用いたシリカカラムクロマトグラフィーに付し、純粋な生成物Py-O-Ph-O-Py-ジケイトンを50%収率で得た。<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>): 2.15 (s, 3H), 6.60 (s, 1H), 6.94 (d, 1H), 7.00 - 7.05 (m, 5H), 7.43 (dd, 1H), 7.70 (dd, 1H), 7.81 (s, 1H), 7.82 (d, 1H), 8.21 (d, 1H)。

【0147】

Py-O-Ph-O-Py-MPzの合成

【0148】

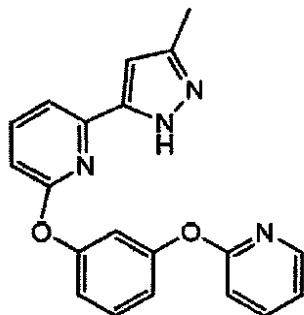
10

20

30

40

## 【化66】



10

丸底フラスコに磁気攪拌子、Py-O-Ph-O-Py-ジケイトン(10 mmol)、およびヒドラジン(12 mmol)の40%水溶液を仕込んだ。エタノール(50 mL)を加え、窒素下で攪拌しながら2時間還流させ、放冷した。冷却した溶液を150 mLのラインに一気に加え、これをDCMで3回抽出した。合わせた抽出物を硫酸マグネシウムで乾燥させ、濾過し、回転蒸発法により濃縮した。得られた油を、DCMを用いたシリカフラッシュカラムに付し、Py-O-Ph-O-Py-MPzを70%収率で得た。<sup>1</sup>H NMR(CDCl<sub>3</sub>): 2.30(s, 3H), 5.28(s, .6H), 6.45(s, 1H), 6.82(d, 1H), 6.94(d, 1H), 6.96-7.02(m, 4H), 7.33(d, 1H), 7.42(vt, 1H), 7.67(q, .4H), 7.68-7.73(m, 2H), 8.25(dd, 1H)。

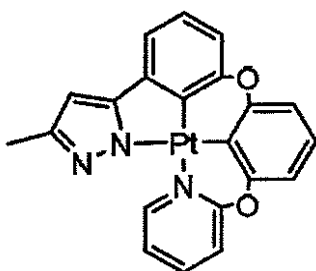
20

## 【0149】

[Py-O-Ph-O-Py-MPz]Pt(Pt004)の合成

## 【0150】

## 【化67】



30

Py-O-Ph-O-Py-MPz(1 mmol)、K<sub>2</sub>PtCl<sub>4</sub>(0.41 mg、1 mmol)および酢酸(35 mL)の混合物を3日間還流させた。この混合物を室温まで放冷した。得られた白色錯体を濾別し、H<sub>2</sub>O、MeOHおよびEt<sub>2</sub>Oで洗浄し、真空下で乾燥させて[Py-O-Ph-O-Py-MPz]Ptを80%収率で得た。

## 【0151】

77 Kおよび300 Kでの[Py-O-Ph-O-Py-MPz]Ptのフォトルミネッセンススペクトルを図8に示す。

特定の実施形態では、例えば以下が提供される：

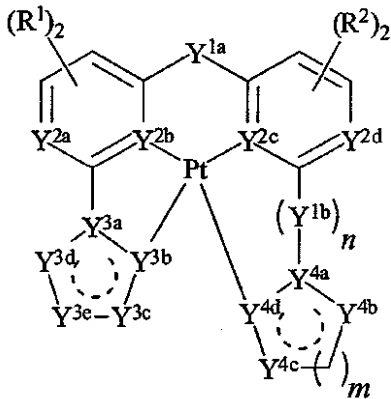
40

(項目1)

下記式で表される化合物であって：



## 【化 6 8】



10

式中、 $(R^1)_2$  および  $(R^2)_2$  における  $R^1$  および  $R^2$  は各々独立に水素、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキル、ハロゲン、ヒドロキシル、アミノ、ニトロまたはチオールを表し；

$R^3$  はメチル、エチル、プロピルまたはブチルを表し；

$Y^{1a}$  は  $O$ 、 $S$ 、 $R^{4a}$  が任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{4a}$ ； $(R^{4b})_2$  における  $R^{4b}$  が各々独立に、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Si(R^{4b})_2$ ；または  $(R^{4c})_2$  における  $R^{4c}$  が各々水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $C(R^{4c})_2$  を表し；

20

$n$  は整数 0 または 1 であり；

$Y^{1b}$  は、存在する場合、 $O$ 、 $S$ 、 $R^{5a}$  が任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{5a}$ ； $(R^{5b})_2$  における  $R^{5b}$  が各々独立に、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Si(R^{5b})_2$ ；または  $(R^{5c})_2$  における  $R^{5c}$  が各々水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $C(R^{5c})_2$  を表し；

$Y^{2a}$ 、 $Y^{2b}$ 、 $Y^{2c}$  および  $Y^{2d}$  は各々独立に  $N$ 、 $NR^{6a}$  または  $CR^{6b}$  を表し、 $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  は各々独立に水素、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキル、ハロゲン、ヒドロキシル、アミノ、ニトロまたはチオールを表し；

$Y^{3a}$ 、 $Y^{3b}$ 、 $Y^{3c}$ 、 $Y^{3d}$ 、 $Y^{3e}$ 、 $Y^{4a}$ 、 $Y^{4b}$ 、 $Y^{4c}$  および  $Y^{4d}$  は各々独立に  $N$ 、 $O$ 、 $S$ 、 $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が各々独立に水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{6a}$ 、 $CR^{6b}$ ；または  $Z$  が  $C$  もしくは  $Si$  であり、かつ  $(R^{6c})_2$  における  $R^{6c}$  が各々独立に水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Z(R^{6c})_2$  を表し；

30

$m$  は整数 1 または 2 であり；

開いた点線の環

## 【化 6 8 - 2】



はそれが付随する環が部分不飽和または完全不飽和であることを示し；

ただし、 $m$  が 1 であり、 $Y^{2a}$  および  $Y^{2d}$  が各々  $CH$  であり、 $Y^{2b}$  および  $Y^{2c}$  が各々  $N$  である場合、 $Y^{4a}$ 、 $Y^{4b}$ 、 $Y^{3a}$  または  $Y^{3d}$  の少なくとも 1 つは  $N$  ではなく；かつ

40

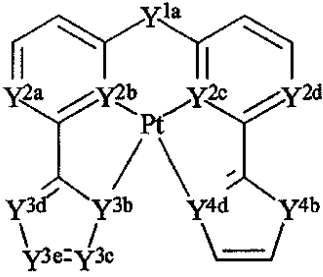
$n$  が 0 であり、 $m$  が 2 であり、 $Y^{2a}$  および  $Y^{2d}$  が各々  $CH$  であり、 $Y^{2b}$  および  $Y^{2c}$  が各々  $N$  である場合、 $Y^{3b}$  または  $Y^{3c}$  の少なくとも 1 つは  $N$  ではない

化合物。

(項目 2)

下記式により表される、項目 1 に記載の化合物：

【化 6 9】

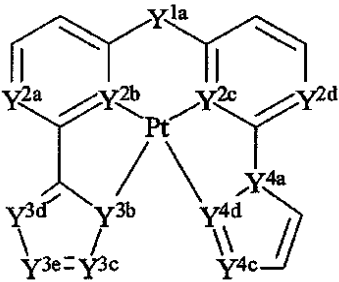


10

(項目 3)

下記式により表される、項目 1 に記載の化合物：

【化 7 0】

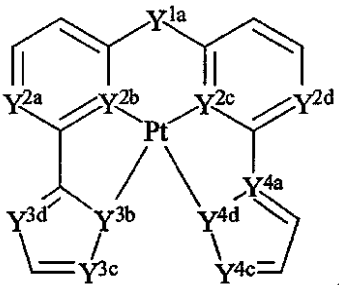


20

(項目 4)

下記式により表される、項目 1 に記載の化合物：

【化 7 1】

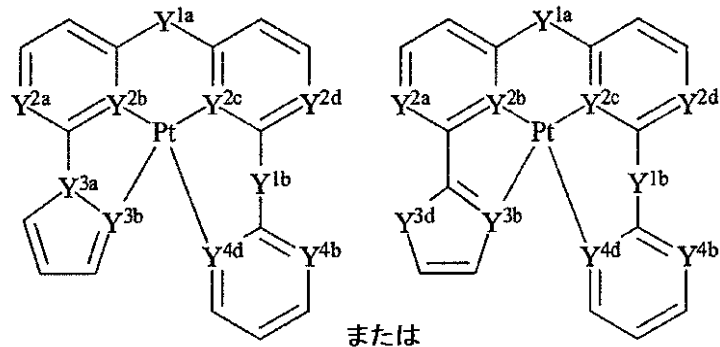


30

(項目 5)

下記式により表される、項目 1 に記載の化合物：

【化 7 2】



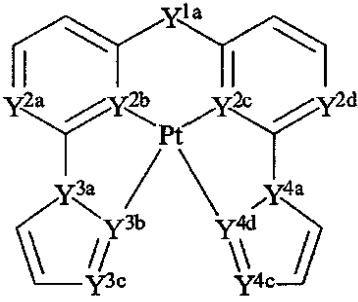
40

(項目 6)

下記式により表される、項目 1 に記載の化合物：

50

## 【化 7 3】



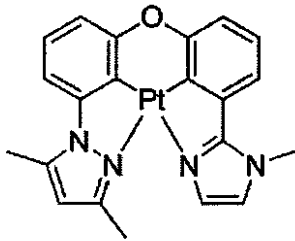
10

。

## (項目 7)

下記式で表される化合物：

## 【化 7 4】



20

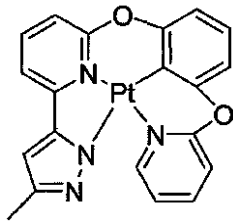
## [DMPz-Ph-O-Ph-Miz] Pt(II)

。

## (項目 8)

下記式で表される化合物：

## 【化 7 5】



30

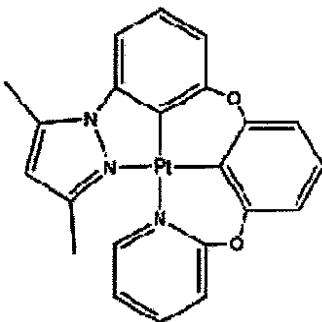
## [MPz-Py-O-Ph-O-Py] Pt(II)

。

## (項目 9)

下記式で表される化合物：

## 【化 7 6】



40

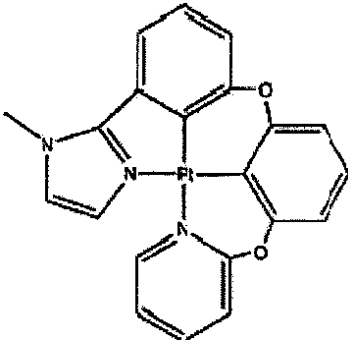
。

## (項目 10)

下記式で表される化合物：

50

【化 7 7】



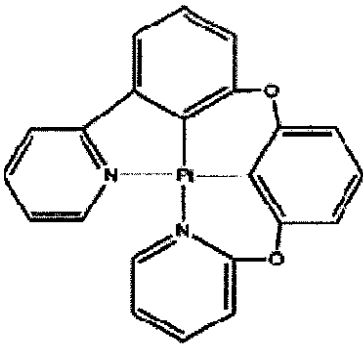
10

。

(項目 1 1)

下記式で表される化合物：

【化 7 8】



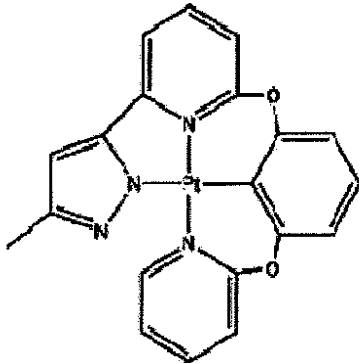
20

。

(項目 1 2)

下記式で表される化合物

【化 7 9】



30

。

(項目 1 3)

項目 1 ~ 1 2 のいずれか 1 項に記載の化合物を含む、有機発光ダイオード (O L E D)

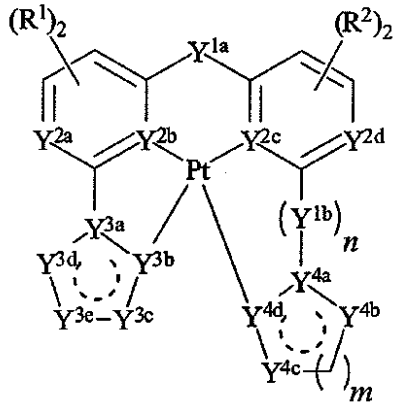
40

。

(項目 1 4)

下記式で表される化合物を発光材料として含む有機発光ダイオード (O L E D) であって：

## 【化 8 0】



10

式中、 $(R^1)_2$  および  $(R^2)_2$  における  $R^1$  および  $R^2$  は各々独立に水素、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキル、ハロゲン、ヒドロキシル、アミノ、ニトロまたはチオールを表し；

$R^3$  はメチル、エチル、プロピルまたはブチルを表し；

$Y^{1a}$  は O、S、 $R^{4a}$  が任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{4a}$ ； $(R^{4b})_2$  における  $R^{4b}$  が各々独立に、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Si(R^{4b})_2$ ；または  $(R^{4c})_2$  における  $R^{4c}$  が各々水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $C(R^{4c})_2$  を表し；

20

$n$  は整数 0 または 1 であり；

$Y^{1b}$  は、存在する場合、O、S、 $R^{5a}$  が任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{5a}$ ； $(R^{5b})_2$  における  $R^{5b}$  が各々独立に、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Si(R^{5b})_2$ ；または  $(R^{5c})_2$  における  $R^{5c}$  が各々水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $C(R^{5c})_2$  を表し；

$Y^{2a}$ 、 $Y^{2b}$ 、 $Y^{2c}$  および  $Y^{2d}$  は各々独立に N、 $NR^{6a}$  または  $CR^{6b}$  を表し、 $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  は各々独立に水素、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキル、ハロゲン、ヒドロキシル、アミノ、ニトロまたはチオールを表し；

$Y^{3a}$ 、 $Y^{3b}$ 、 $Y^{3c}$ 、 $Y^{3d}$ 、 $Y^{3e}$ 、 $Y^{4a}$ 、 $Y^{4b}$ 、 $Y^{4c}$  および  $Y^{4d}$  は各々独立に N、O、S、 $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が各々独立に水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{6a}$ 、 $CR^{6b}$ ；または Z が C もしくは Si であり、かつ  $(R^{6c})_2$  における  $R^{6c}$  が各々独立に水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Z(R^{6c})_2$  を表し；

30

$m$  は整数 1 または 2 であり；

開いた点線の環

## 【化 8 0 - 2】



はそれが付随する環が部分不飽和または完全不飽和であることを示し；

40

ただし、 $m$  が 1 であり、 $Y^{2a}$  および  $Y^{2d}$  が各々 CH であり、 $Y^{2b}$  および  $Y^{2c}$  が各々 N である場合、 $Y^{4a}$ 、 $Y^{4b}$ 、 $Y^{3a}$  または  $Y^{3d}$  の少なくとも 1 つは N ではなく；かつ

$n$  が 0 であり、 $m$  が 2 であり、 $Y^{2a}$  および  $Y^{2d}$  が各々 CH であり、 $Y^{2b}$  および  $Y^{2c}$  が各々 N である場合、 $Y^{3b}$  または  $Y^{3c}$  の少なくとも 1 つは N ではない

有機発光ダイオード (OLED)。

(項目 15)

項目 1 ~ 12 のいずれか 1 項に記載の化合物を含む、有機光起電デバイス。

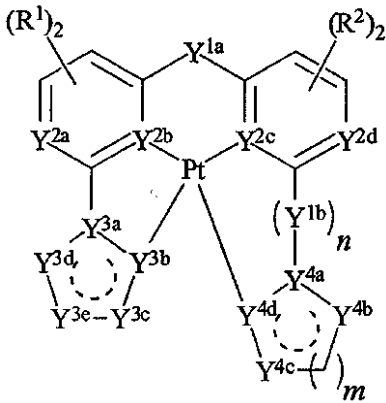
(項目 16)

下記式で表される化合物をドナーまたはアクセプター材料として含む有機光起電デバイ

50

スであって：

【化 8 1】



10

式中、 $(R^1)_2$  および  $(R^2)_2$  における  $R^1$  および  $R^2$  は各々独立に水素、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキル、ハロゲン、ヒドロキシル、アミノ、ニトロまたはチオールを表し；

$R^3$  はメチル、エチル、プロピルまたはブチルを表し；

$Y^{1a}$  は O、S、 $R^{4a}$  が任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{4a}$ ； $(R^{4b})_2$  における  $R^{4b}$  が各々独立に、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Si(R^{4b})_2$ ；または  $(R^{4c})_2$  における  $R^{4c}$  が各々水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $C(R^{4c})_2$  を表し；

20

$n$  は整数 0 または 1 であり；

$Y^{1b}$  は、存在する場合、O、S、 $R^{5a}$  が任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{5a}$ ； $(R^{5b})_2$  における  $R^{5b}$  が各々独立に、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Si(R^{5b})_2$ ；または  $(R^{5c})_2$  における  $R^{5c}$  が各々水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $C(R^{5c})_2$  を表し；

$Y^{2a}$ 、 $Y^{2b}$ 、 $Y^{2c}$  および  $Y^{2d}$  は各々独立に N、 $NR^{6a}$  または  $CR^{6b}$  を表し、 $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  は各々独立に水素、任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキル、ハロゲン、ヒドロキシル、アミノ、ニトロまたはチオールを表し；

$Y^{3a}$ 、 $Y^{3b}$ 、 $Y^{3c}$ 、 $Y^{3d}$ 、 $Y^{3e}$ 、 $Y^{4a}$ 、 $Y^{4b}$ 、 $Y^{4c}$  および  $Y^{4d}$  は各々独立に N、O、S、 $R^{6a}$  および  $R^{6b}$  が各々独立に水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $NR^{6a}$ 、 $CR^{6b}$ ；または Z が C もしくは Si であり、かつ  $(R^{6c})_2$  における  $R^{6c}$  が各々独立に水素もしくは任意に置換された  $C_1 \sim C_4$  アルキルを表す  $Z(R^{6c})_2$  を表し；

30

$m$  は整数 1 または 2 であり；

開いた点線の環

【化 8 1 - 2】



はそれが付随する環が部分不飽和または完全不飽和であることを示し；

40

ただし、 $m$  が 1 であり、 $Y^{2a}$  および  $Y^{2d}$  が各々 CH であり、 $Y^{2b}$  および  $Y^{2c}$  が各々 N である場合、 $Y^{4a}$ 、 $Y^{4b}$ 、 $Y^{3a}$  または  $Y^{3d}$  の少なくとも 1 つは N ではなく；かつ

$n$  が 0 であり、 $m$  が 2 であり、 $Y^{2a}$  および  $Y^{2d}$  が各々 CH であり、 $Y^{2b}$  および  $Y^{2c}$  が各々 N である場合、 $Y^{3b}$  または  $Y^{3c}$  の少なくとも 1 つは N ではない

有機光起電デバイス。

(項目 17)

電子デバイスを製造する方法であって、項目 1 ~ 12 のいずれか 1 項に記載の本発明の化合物を含む層を得て、次いで該デバイスに該層を配置する、方法。

(項目 18)

50

前記層は発光層である、項目 17 に記載の方法。

(項目 19)

前記層は吸収層である、項目 17 に記載の方法。

(項目 20)

前記電子デバイスは発光デバイスを含む、項目 17 に記載の方法。

(項目 21)

前記電子デバイスは有機発光ダイオードを含む、項目 17 に記載の方法。

(項目 22)

前記電子デバイスは光起電デバイスを含む、項目 17 に記載の方法。

【 図 1 】

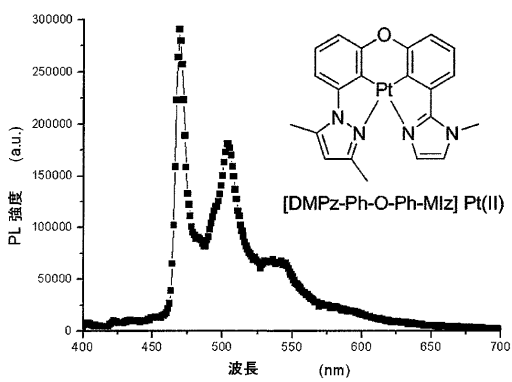


FIG. 1

【 図 3 】

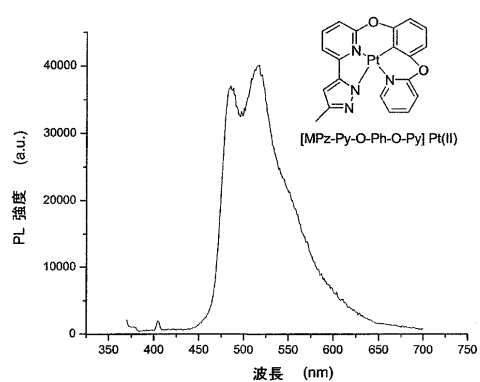


FIG. 3

【 図 2 】

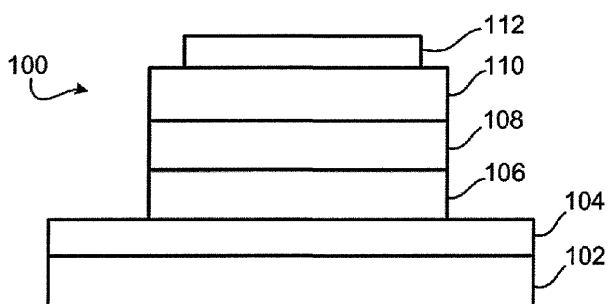


FIG. 2

【 図 4 】

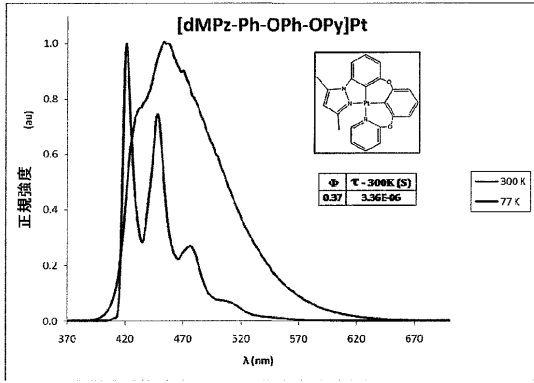


FIG. 4

【 図 5 】

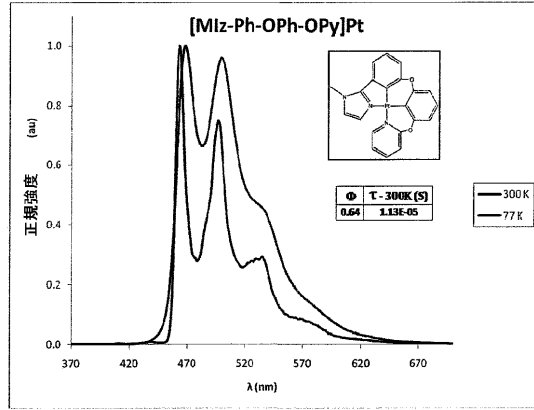


FIG. 5

【 図 6 】

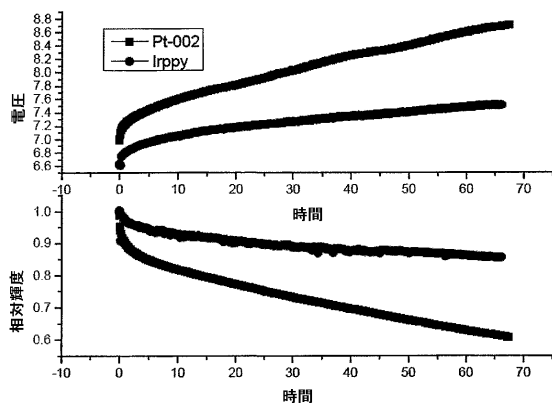


FIG. 6

【 図 7 】

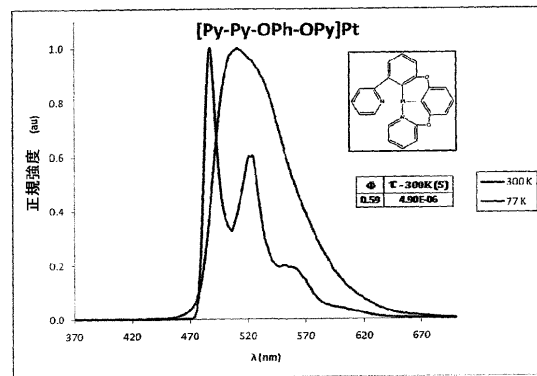


FIG. 7



【 図 8 】

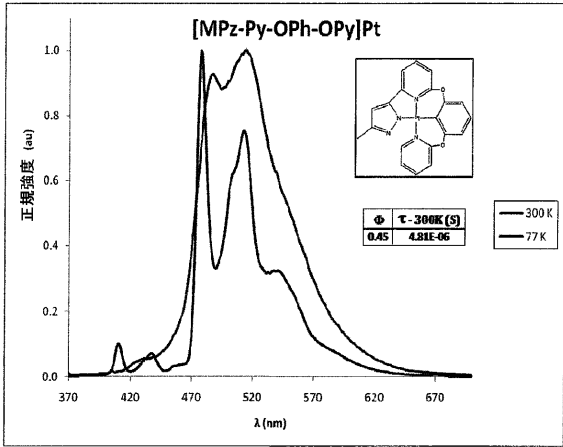


FIG. 8

## フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I テーマコード(参考)  
H 0 1 L 31/04 1 5 4 D

(72)発明者 チアン リー  
アメリカ合衆国 アリゾナ 8 5 0 4 4 , フェニックス , イースト ラベンダー レーン 4  
6 0 2

(72)発明者 ツィーシン ワン  
アメリカ合衆国 アリゾナ 8 5 2 8 4 , テンピ , エス . リバー パークウェイ 7 7 0 0

(72)発明者 エリック ターナー  
アメリカ合衆国 アリゾナ 8 5 0 5 1 , フェニックス , ダブリュー . ノース レーン 4  
1 1 7

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 BB06 BB08 CC04 CC22 DD64 DD67  
4H050 AA01 AA02 AA03 AB92  
5F151 AA11

【外国語明細書】

2014221807000001.pdf