

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 3 部門第 3 区分

【発行日】平成25年11月21日(2013.11.21)

【公表番号】特表2010-532400(P2010-532400A)

【公表日】平成22年10月7日(2010.10.7)

【年通号数】公開・登録公報2010-040

【出願番号】特願2010-513911(P2010-513911)

【国際特許分類】

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

C 0 7 F 7/10 (2006.01)

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

【F I】

C 0 9 K 11/06 6 6 0

C 0 9 K 11/06 6 9 0

C 0 7 F 7/10 C S P S

H 0 5 B 33/22 B

H 0 5 B 33/22 D

H 0 5 B 33/14 B

【誤訳訂正書】

【提出日】平成25年10月1日(2013.10.1)

【誤訳訂正 1】

【訂正対象書類名】特許請求の範囲

【訂正対象項目名】全文

【訂正方法】変更

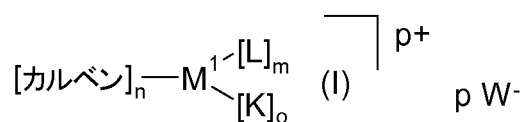
【訂正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

アノード A n およびカソード K a、ならびにアノード A n とカソード K a の間に配置され、一般式 I

【化 1】



[式中、

記号は、それぞれ以下のように定義される：

M¹は、特定の金属原子に対して可能な任意の酸化状態の元素周期律表（C A S バージョン）の I B 族、I I B 族、I I I B 族、I V B 族、V B 族、V I B 族、V I I B 族、ランタニドおよび I I I A 族の金属からなる群から選択される金属原子であり；

カルベンは、無電荷または一価アニオン性で、一座、二座または三座であってよいカルベンリガンドであり；カルベンリガンドはビスまたはトリスカルベンリガンドであってもよく；

L は、一価または二価アニオン性リガンドであり；

K は、無電荷の一座または二座リガンドであり；

n は、カルベンリガンドの数であり、n は少なくとも 1 であり、式 I の錯体におけるカルベンリガンドは、n > 1 であるときは、同一または異なってもよく；

m は、リガンド L の数であり、m は 0 または 1 であってよく、リガンド L は、m > 1 で

あるときは、同一または異なっているよく；

o は、リガンド K の数であり、 o は 0 または 1 であってよく、リガンド K は、 $o > 1$ であるときは、同一または異なっているよく；

p は、錯体の電荷であり；0、1、2、3 または 4 であり；

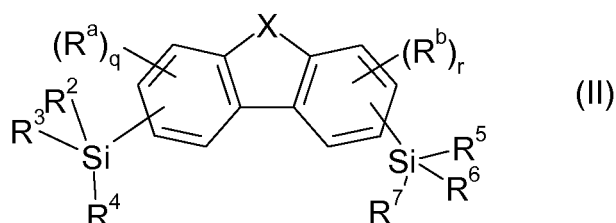
W は、一価アニオン性対イオンであり；

$n + m + o$ の合計および電荷 p は、使用される金属原子の酸化状態および配位数、錯体の電荷、ならびにカルベン、 L および K リガンドのデンティシティ、ならびにカルベンおよび L リガンドの電荷に依存し、ただし n が少なくとも 1 であることを条件とする。] の少なくとも 1 つのカルベン錯体を含む発光層 E 、

ならびに少なくとも 1 つのさらなる層を含む有機発光ダイオードであって、

該有機発光ダイオードは、発光層 E および / または少なくとも 1 つのさらなる層に存在する一般式 I

【化 2】



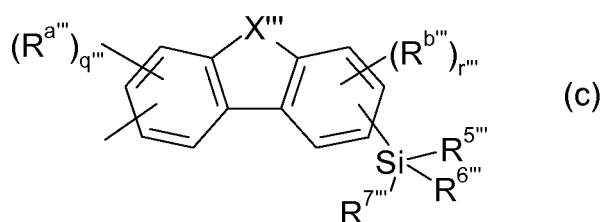
[式中、

X は、 $N R^1$ または O であり；

R^1 は、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ - アルキル、あるいは置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ - アリール、あるいは 5 ~ 30 個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリールであり；

R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 は、それぞれ独立して、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ - アルキル、あるいは置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ - アリール、あるいは一般式 (c)

【化 3】



の構造体であり；

R^a 、 R^b は、それぞれ独立して、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ - アルキル、あるいは置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ - アリール、あるいは 5 ~ 30 個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリール；あるいは $C_1 \sim C_{20}$ - アルコキシ、 $C_6 \sim C_{30}$ - アリールオキシ、 $C_1 \sim C_{20}$ - アルキルチオ、 $C_6 \sim C_{30}$ - アリールチオ、 $Si R^{14} R^{15} R^{16}$ 、ハロゲン基、ハロゲン化 $C_1 \sim C_{20}$ アルキル基、カルボニル ($-CO(R^{14})$)、カルボニルチオ ($-C(=O)(SR^{14})$)、カルボニルオキシ ($-C(=O)(OR^{14})$)、オキシカルボニル ($-OC(=O)(R^{14})$)、チオカルボニル ($-SC(=O)(R^{14})$)、アミノ ($-NR^{14}R^{15}$)、 OH 、擬ハロゲン基、アミド ($-C(=O)(NR^{14})$)、 $-NR^{14}C(=O)(R^{15})$ 、ホスホネート ($-P(O)(OR^{14})_2$)、ホスフェート ($-OP(O)(OR^{14})_2$)、ホスフィン ($-PR^{14}R^{15}$)、ホスフィンオキシド ($-P(O)R^{14}_2$)、スルフェート ($-OS(O)_2OR^{14}$)、スルホキシド ($-S(O)R^{14}$)、スルホネート ($-S(O)_2OR^{14}$)、スルホニル ($-S(O)_2R^{14}$)、スルホンアミド ($-S(O)_2NR^{14}R^{15}$)、 NO_2 、ボロン酸エステル ($-OB(OR^{14})_2$)、イミノ ($-C(=NR^{14}R^{15})$)、ボラン基、スタナン基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、オキシム基、ニトロソ基、ジ

アゾ基、ビニル基、スルホキシミン、アラン、ゲルマン、ボロキシムおよびボラジンからなる群から選択される、供与体または受容体作用を有する置換基であり；

R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} は、それぞれ独立して、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、あるいは置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -アリールであり；

q 、 r は、それぞれ独立して、0、1、2または3であり； q または r が0である場合には、そのアリール基のすべての置換可能位置が水素で置換されており、

式(c)の基における基および添字 $X^{''}$ 、 $R^{5''}$ 、 $R^{6''}$ 、 $R^{7''}$ 、 $R^{a''}$ 、 $R^{b''}$ 、 $q^{''}$ および $r^{''}$ は、それぞれ独立して、一般式(II)の化合物の基および添字 X 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^a 、 R^b 、 q および r について定義されている通りであり、

X 基が NR^1 である場合に、式(II)の化合物における $R^1 \sim R^7$ 、 R^a または R^b 基の少なくとも1つが少なくとも1つのヘテロ原子を含む。]の少なくとも1つの化合物を含む有機発光ダイオード。

【請求項2】

電子/励起子に対する少なくとも1つの遮断層、正孔/励起子に対する少なくとも1つの遮断層、少なくとも1つの正孔注入層、少なくとも1つの正孔伝導体層、少なくとも1つの電子注入層および少なくとも1つの電子伝導体層からなる群から選択される少なくとも1つのさらなる層を含む、請求項1に記載の有機発光ダイオード。

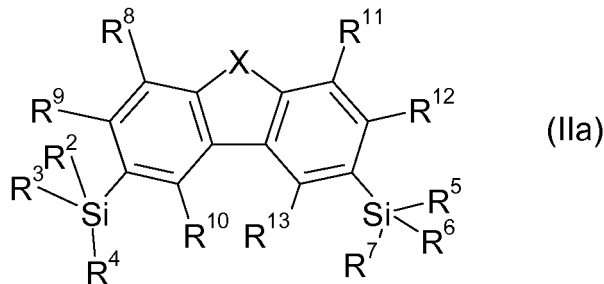
【請求項3】

R^2 、 R^3 および R^4 基の少なくとも1つおよび/または R^5 、 R^6 および R^7 基の少なくとも1つが置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -アリールである、請求項1または2に記載の有機発光ダイオード。

【請求項4】

一般式(II)の化合物が、一般式(IIa)：

【化4】



[式中、

X は、 NR^1 またはOであり、

R^1 は、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、あるいは置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、あるいは5～30個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリールであり；

R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 は、それぞれ独立して、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、あるいは置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、あるいは一般式(c)の構造体であり；

R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} は、それぞれ独立して水素であり、または R^a および R^b について定義されている通りであり、すなわちそれぞれ独立して、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、5～30個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリール、あるいは供与体または受容体作用を有する置換基である。]の3，6-ジシリル置換化合物である、請求項1から3までのいずれか一項に記載の有機発光ダイオード。

【請求項5】

$R^1 \sim R^7$ 、 R^a および R^b 基および X 基がそれぞれ以下：

X は、 NR^1 であり；

R^1 は、置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ - アリール、あるいは 5 ～ 30 個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリールであり；

R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 は、それぞれ独立して、置換または非置換の $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ - アルキル、あるいは置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ - アリール、あるいは一般式 (c) の構造体であり；

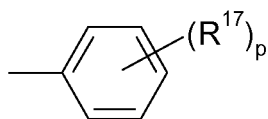
R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} は、それぞれ独立して水素であり、またはそれぞれ R^a および R^b について定義されている通りであり、すなわちそれぞれ独立して、置換または非置換の $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ - アルキル、置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ - アリール、5 ～ 30 個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリール、あるいは供与体または受容体作用を有する置換基である、

請求項 1 から 4 までのいずれか一項に記載の有機発光ダイオード。

【請求項 6】

R^1 基および / または R^2 、 R^3 および R^4 の群からの基の少なくとも 1 つおよび / または R^5 、 R^6 および R^7 の群からの基の少なくとも 1 つが、独立して、以下の式：

【化 5】

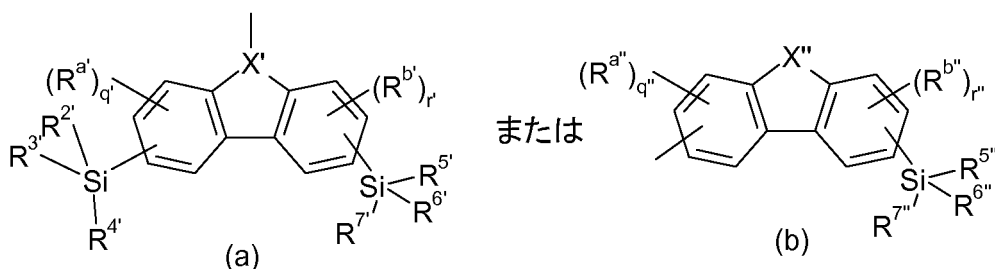


[式中、

p は、0、1、2、3、4 または 5 であり；

R^{17} は、水素、置換または非置換の $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ - アルキル、置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ - アリール、5 ～ 30 個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリール、供与体または受容体作用を有する置換基、あるいは一般式 a または b

【化 6】



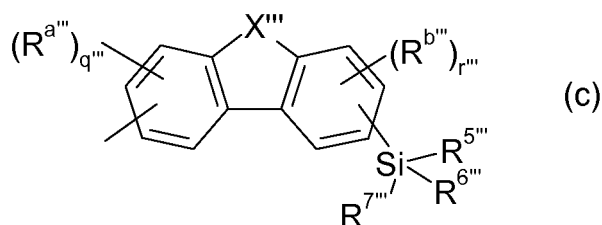
の基であり、

X' は、N または P であり、

基および添字 X'' 、 $\text{R}^{2'}$ 、 $\text{R}^{3'}$ 、 $\text{R}^{4'}$ 、 $\text{R}^{5'}$ 、 $\text{R}^{5''}$ 、 $\text{R}^{6'}$ 、 $\text{R}^{6''}$ 、 $\text{R}^{7'}$ 、 $\text{R}^{7''}$ 、 $\text{R}^{a'}$ 、 $\text{R}^{a''}$ 、 $\text{R}^{b'}$ 、 $\text{R}^{b''}$ 、 q' 、 q'' 、 r' および r'' は、それぞれ独立して、基および添字 X 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^a 、 R^b 、 q および r について定義されている通りである。】の置換または非置換の C_6 - アリールであり；あるいは

R^2 、 R^3 および R^4 基の 1 つおよび / または R^5 、 R^6 および R^7 基の 1 つが一般式 c

【化 7】



[式中、

基および添字 X'' 、 $R^{5''}$ 、 $R^{6''}$ 、 $R^{7''}$ 、 $R^{a''}$ 、 $R^{b''}$ 、 q'' および r'' は、それぞれ独立して、基および添字 X 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^a 、 R^b 、 q および r について定義されている通りである。] の基である、請求項 1 から 5 までのいずれか一項に記載の有機発光ダイオード。

【請求項 7】

少なくとも 1 つのさらなる層が、電子に対する遮断層、正孔注入層および正孔伝導体層からなる群から選択され、式 (II) の少なくとも 1 つの化合物が、さらなる層および / または発光層の少なくとも 1 つに存在し、式 (II) の化合物は、置換または非置換の $C_{1} \sim C_{20}$ -アルキル、5 ~ 30 個の環原子を有するヘテロアリール、非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、アルキル置換 $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、供与体作用を有する少なくとも 1 つの置換基で置換された $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、5 ~ 30 個の環原子を有するヘテロアリールで置換された $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、供与体作用を有する置換基からなる群から選択される少なくとも 1 つの R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 または R^7 基を有する、請求項 1 から 6 までのいずれか一項に記載の有機発光ダイオード。

【請求項 8】

少なくとも 1 つのさらなる層は、正孔に対する遮断層、電子注入層および電子伝導体層からなる群から選択され、式 (II) の少なくとも 1 つの化合物が、さらなる層および / または発光層の少なくとも 1 つに存在し、式 (II) の化合物は、受容体作用を有する少なくとも 1 つの置換基で置換された $C_{1} \sim C_{20}$ -アルキル、受容体作用を有する少なくとも 1 つの置換基で置換された $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、5 ~ 30 個の環原子を有する少なくとも 1 つのヘテロアリールで置換された $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、および受容体作用を有する置換基からなる群から選択される少なくとも 1 つの R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 または R^7 基を有する、請求項 1 から 6 までのいずれか一項に記載の有機発光ダイオード。

【請求項 9】

請求項 1 から 8 までのいずれか一項に記載の式 (II) の少なくとも 1 つの化合物、および請求項 1 に記載の一般式 (I) の少なくとも 1 つのカルベン錯体を含む発光層。

【請求項 10】

請求項 1 に記載の一般式 I の少なくとも 1 つのカルベン錯体を含む有機発光ダイオードにおけるマトリックス材料、正孔 / 励起子遮断材料および / または電子 / 励起子遮断材料および / または正孔注入材料および / または電子注入材料および / または正孔伝導体材料および / または電子伝導体材料としての、請求項 1 から 8 までのいずれか一項に記載の一般式 (II) の化合物を使用する方法。

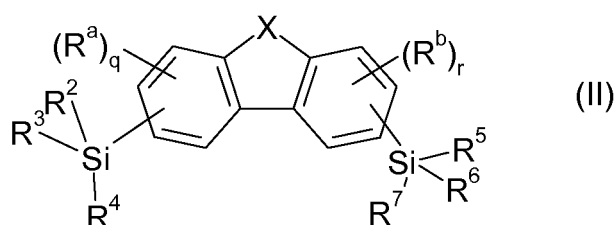
【請求項 11】

請求項 1 から 8 までのいずれか一項に記載の少なくとも 1 つの有機発光ダイオードを含むコンピュータの視覚ディスプレイ装置、テレビ、プリンタおよび台所器具における視覚ディスプレイ装置などの固定視覚ディスプレイ装置ならびに広告板、照明、情報板ならびに携帯電話、ラップトップ、デジタルカメラおよび車両における視覚ディスプレイ装置などの移動視覚ディスプレイ装置ならびにバスおよび電車の行先表示ならびに照明装置からなる群から選択されるデバイス。

【請求項 12】

一般式 II

【化 8】



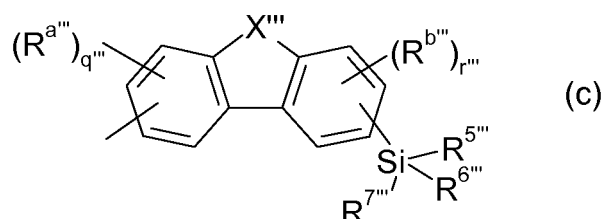
[式中、

X は、 NR^1 または O であり；

R^1 は、置換または非置換の $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ - アルキル、あるいは置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ - アリール、あるいは 5 ～ 30 個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリールであり；

R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 は、それぞれ独立して、置換または非置換の $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ - アルキル、あるいは置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ - アリール、あるいは一般式 (c)

【化 9】



の構造体であり；

R^a 、 R^b は、それぞれ独立して、置換または非置換の $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ - アルキル、あるいは置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ - アリール、あるいは 5 ～ 30 個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリール；あるいは $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ - アルコキシ、 $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ - アリールオキシ、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ - アルキルチオ、 $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ - アリールチオ、 $\text{SiR}^{14}\text{R}^{15}\text{R}^{16}$ 、ハロゲン基、ハロゲン化 $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ アルキル基、カルボニル ($-\text{CO}(\text{R}^{14})$)、カルボニルチオ ($-\text{C}=\text{O}(\text{SR}^{14})$)、カルボニルオキシ ($-\text{C}=\text{O}(\text{OR}^{14})$)、オキシカルボニル ($-\text{OC}=\text{O}(\text{R}^{14})$)、チオカルボニル ($-\text{SC}=\text{O}(\text{R}^{14})$)、アミノ ($-\text{NR}^{14}\text{R}^{15}$)、OH、擬ハロゲン基、アミド ($-\text{C}=\text{O}(\text{NR}^{14})$)、 $-\text{NR}^{14}\text{C}=\text{O}(\text{R}^{15})$ 、ホスホネート ($-\text{P}(\text{O})(\text{OR}^{14})_2$)、ホスフェート ($-\text{OP}(\text{O})(\text{OR}^{14})_2$)、ホスフィン ($-\text{PR}^{14}\text{R}^{15}$)、ホスフィンオキシド ($-\text{P}(\text{O})\text{R}^{14}_2$)、スルフェート ($-\text{OS}(\text{O})_2\text{OR}^{14}$)、スルホキシド ($-\text{S}(\text{O})\text{R}^{14}$)、スルホネート ($-\text{S}(\text{O})_2\text{OR}^{14}$)、スルホニル ($-\text{S}(\text{O})_2\text{R}^{14}$)、スルホンアミド ($-\text{S}(\text{O})_2\text{NR}^{14}\text{R}^{15}$)、 NO_2 、ボロン酸エステル ($-\text{OB}(\text{OR}^{14})_2$)、イミノ ($-\text{C}=\text{NR}^{14}\text{R}^{15}$)、ボラン基、スタンナン基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、オキシム基、ニトロソ基、ジアゾ基、ビニル基、スルホキシミン、アラン、ゲルマン、ボロキシムおよびボラジンからなる群から選択される、供与体または受容体作用を有する置換基であり；

R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} は、それぞれ独立して、置換または非置換の $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ - アルキル、あるいは置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ - アリールであり；

q、r は、それぞれ独立して、0、1、2 または 3 であり；q または r が 0 である場合には、そのアリール基のすべての置換可能位置が水素で置換されており、

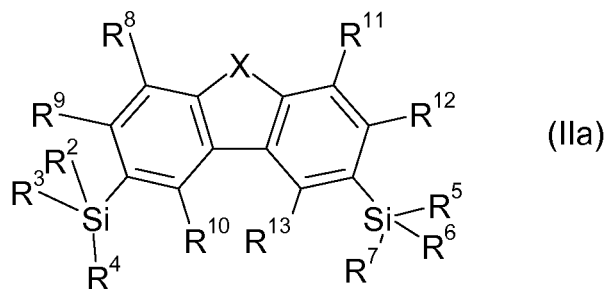
式 (c) の基における基および添字 X''' 、 $\text{R}^{5'''}$ 、 $\text{R}^{6'''}$ 、 $\text{R}^{7'''}$ 、 $\text{R}^{a'''}$ 、 $\text{R}^{b'''}$ 、 q''' および r''' は、それぞれ独立して、一般式 (I I) の化合物の基および添字 X、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^a 、 R^b 、q および r について定義されている通りであり；

X が NR^1 である場合には、式 (I I) の化合物における $\text{R}^1 \sim \text{R}^7$ 、 R^a または R^b 基の少なくとも 1 つが少なくとも 1 つのヘテロ原子を含み、 R^2 、 R^3 および R^4 基の少なくとも 1 つおよび / または R^5 、 R^6 および R^7 基の少なくとも 1 つが置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ - アリールである。] の化合物。

【請求項 13】

一般式 (I I) の化合物は、一般式 (I I a)：

【化 10】



[式中、

X は、N R¹またはOであり、

R¹は、置換または非置換のC₁～C₂₀-アルキル、あるいは置換または非置換のC₆～C₃₀-アリール、あるいは5～30個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリールであり；

R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷は、それぞれ独立して、置換または非置換のC₁～C₂₀-アルキル、あるいは置換または非置換のC₆～C₃₀-アリール、あるいは一般式(c)の構造体であり；

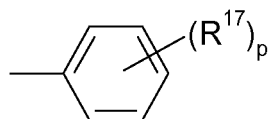
R²、R³およびR⁴基の少なくとも1つおよび/またはR⁵、R⁶およびR⁷基の少なくとも1つが置換または非置換のC₆～C₃₀-アリールであり；

R⁸、R⁹、R¹⁰、R¹¹、R¹²、R¹³は、それぞれ独立して水素であり、またはR^aおよびR^bについて定義されている通りであり、すなわちそれぞれ独立して、置換または非置換のC₁～C₂₀-アルキル、置換または非置換のC₆～C₃₀-アリール、5～30個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリール、あるいは供与体または受容体作用を有する置換基である。]の3,6-ジシリル置換化合物である、請求項12に記載の化合物。

【請求項14】

R¹基および/またはR²、R³およびR⁴の群からの基の少なくとも1つおよび/またはR⁵、R⁶およびR⁷の群からの基の少なくとも1つが、それぞれ独立して、以下の式：

【化 11】



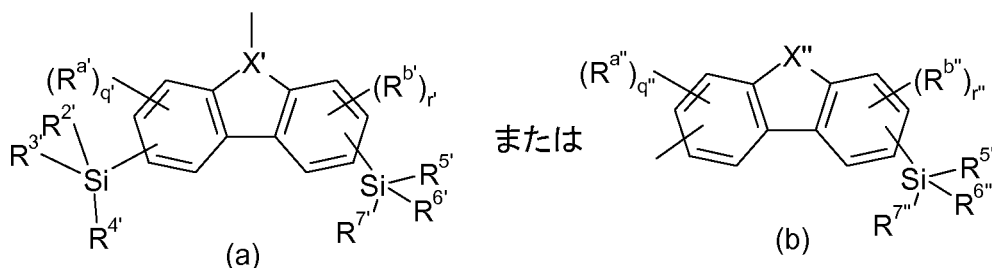
[式中、

p は、0、1、2、3、4または5であり；

R¹⁷は、水素、置換または非置換のC₁～C₂₀-アルキル、置換または非置換のC₆～C₃₀-アリール、5～30個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリール、供与体または受容体作用を有する置換基、あるいは

一般式 a または b

【化 12】



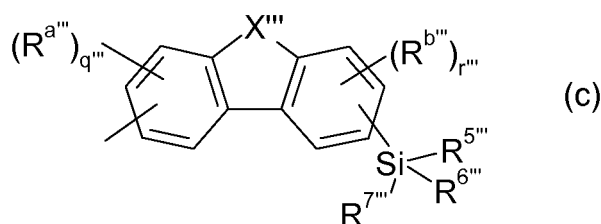
の基であり、

X' は、NまたはPであり、

基および添字 X''、R^{2'}、R^{3'}、R^{4'}、R^{5'}、R^{5''}、R^{6'}、R^{6''}、R^{7'}、R^{7''}、R^a

、 $R^{a''}$ 、 $R^{b''}$ 、 q'' 、 q''' 、 r'' および r''' は、それぞれ独立して、基および添字 X 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^a 、 R^b 、 q および r について定義されている通りである。】の置換または非置換の C_6 -アリールであり；あるいは R^2 、 R^3 および R^4 基の 1 つおよび / または R^5 、 R^6 および R^7 基の 1 つが一般式 c

【化 1 3】



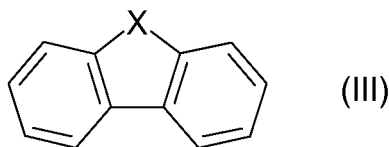
【式中、
基および添字 X''' 、 $R^{5''}$ 、 $R^{6''}$ 、 $R^{7''}$ 、 $R^{a''}$ 、 $R^{b''}$ 、 q''' および r''' は、それぞれ独立して、基および添字 X 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^a 、 R^b 、 q および r について定義されている通りである。】の基である、請求項 1 2 または 1 3 に記載の化合物。

【請求項 1 5】

請求項 1 2 から 1 4 までのいずれか一項に記載の式 (I I) の化合物を製造するための方法であって、

式 (I I I) :

【化 1 4】



【式中、
 X は、 NR^1 または O または NH である。】の基本骨格から出発して、 R^a および R^b 基が式 (I I) の化合物に存在するときに、以下の変法 a)、b)、c) または d) :

変法 a)

i a) R^a 、 R^b 、 $SiR^2R^3R^4$ および $SiR^5R^6R^7$ 基を導入するのに好適な前駆体化合物の製造、

i i a) R^1 基の導入、

i i i a) 存在する場合は R^a 、 R^b 基、ならびに $SiR^2R^3R^4$ および $SiR^5R^6R^7$ 基の導入；あるいは

変法 b)

i b) R^1 基の導入、

i i b) R^a 、 R^b 、 $SiR^2R^3R^4$ および $SiR^5R^6R^7$ 基を導入するのに好適な前駆体化合物の製造、

i i i b) 存在する場合は R^a 、 R^b 基、ならびに $SiR^2R^3R^4$ および $SiR^5R^6R^7$ 基の導入；あるいは

変法 c)

i c) R^a 、 R^b 、 $SiR^2R^3R^4$ および $SiR^5R^6R^7$ 基を導入するのに好適な前駆体化合物の製造、

i i c) 存在する場合は R^a 、 R^b 基、ならびに $SiR^2R^3R^4$ および $SiR^5R^6R^7$ 基の導入、

i i i c) R^1 基の導入；あるいは

変法 d)

i d) R^a 、 R^b 、 $SiR^2R^3R^4$ および $SiR^5R^6R^7$ 基を導入するのに好適な前駆体化合物の製造、

i i d) 存在する場合は R^a 、 R^b 基、ならびに $S i R^2 R^3 R^4$ および $S i R^5 R^6 R^7$ 基の導入の 1 つによって R^1 、 R^a 、 R^b 、 $S i R^2 R^3 R^4$ および $S i R^5 R^6 R^7$ 基を導入する前記方法。

【誤訳訂正 2】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0057

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0057】

式 (II) の化合物

式 (II) の化合物は、基および添字がそれぞれ以下のように定義されるジシリル化合物である。

X は、 NR^1 、 S 、 O 、 PR^1 、 SO_2 または SO ；好ましくは NR^1 、 S または O であり； R^1 は、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、あるいは置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、あるいは 5 ~ 30 個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリール；好ましくは置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ -アルキルあるいは置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、より好ましくは置換または非置換の $C_6 \sim C_{10}$ -アリール、あるいは非置換の $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、最も好ましくは置換または非置換のフェニルであり、好適な置換基は以上を示されており；

R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 は、それぞれ独立して、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、あるいは置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、あるいは一般式 (c) の構造体であり；

好ましくは、 R^2 、 R^3 および R^4 基の少なくとも 1 つおよび / または R^5 、 R^6 および R^7 基の少なくとも 1 つが置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、より好ましくは置換または非置換の $C_6 \sim C_{10}$ -アリール、最も好ましくは置換または非置換のフェニルであり、好適な置換基は、以上を示されており、かつ / または R^2 、 R^3 および R^4 基の 1 つおよび / または R^5 、 R^6 および R^7 基の 1 つが構造 (c) の基であり；

R^a 、 R^b は、それぞれ独立して、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、5 ~ 30 個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリール、あるいは供与体または受容体作用を有する置換基であり、供与体または受容体作用を有する適切かつ好適な置換基は、以上を示されており；

R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} は、それぞれ独立して、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、あるいは置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -アリール、好ましくは置換または非置換の $C_1 \sim C_6$ -アルキル、あるいは置換または非置換の $C_6 \sim C_{10}$ -アリールであり、 R^{14} 、 R^{15} および R^{16} は、より好ましくはそれぞれ独立して、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ -アルキルあるいは置換または非置換のフェニルであり；より好ましくは、 R^{14} 、 R^{15} および R^{16} 基の少なくとも 1 つが置換または非置換のフェニルであり；最も好ましくは、 R^{14} 、 R^{15} および R^{16} 基の少なくとも 1 つが置換フェニルであり、好適な置換基は、以上を示されており；

q 、 r は、それぞれ独立して、0、1、2 または 3 であり、 q または r が 0 であるときは、そのアリール基のすべての置換可能位置が水素原子を持っており、好ましくは 0 である。

【誤訳訂正 3】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0058

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0058】

一実施形態において、本発明は、 X 基が NR^1 であり、 R^1 基が以上に既に定義されてお

り、式 (I I) の化合物における $R^1 \sim R^7$ 、 R^a および R^b 基の少なくとも 1 つが少なくとも 1 つのヘテロ原子を含む発明の有機発光ダイオードに関する。好適なヘテロ原子は、N、Si、ハロゲン、特に F または Cl、O、S または P である。ヘテロ原子は、 $R^1 \sim R^7$ 、 R^a または R^b 基の少なくとも 1 つの上の置換基の形、または置換基の一部の形で存在してよく、あるいは $R^1 \sim R^7$ 、 R^a または R^b 基の少なくとも 1 つの基本骨格に存在してよい。好適な置換基または基本骨格は、当業者に公知であり、 $R^1 \sim R^7$ 、 R^a または R^b 基定義の下で示される。

【誤訳訂正 4】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0082

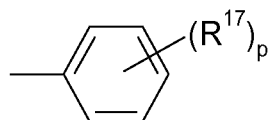
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0082】

さらなる好適な実施形態において、本発明は、式 (I I) の化合物が使用され、 R^1 基および / または R^2 、 R^3 および R^4 の群からの基の少なくとも 1 つおよび / または R^5 、 R^6 および R^7 の群からの基の少なくとも 1 つが、独立して、以下の式：

【化 25】

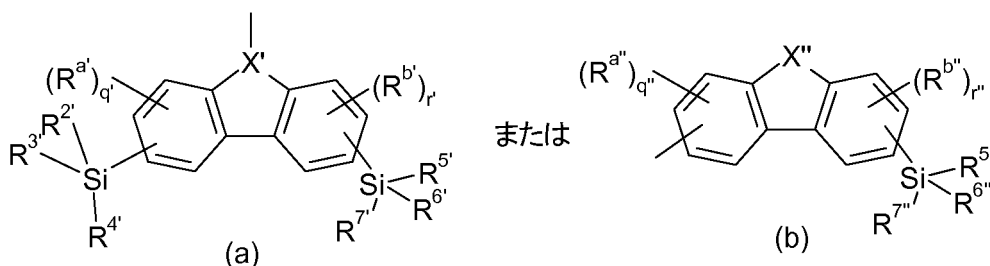


[式中、

p は、0、1、2、3、4 または 5、好ましくは 0、1、2 または 3、より好ましくは 0、1 または 2 であり；

R^{17} は、水素、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ - アルキル、置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ - アリール、5 ~ 30 個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリール、好適な供与体または受容体作用を有する置換基が以上に示されている供与体または受容体を有する置換基、あるいは一般式 a または b

【化 26】



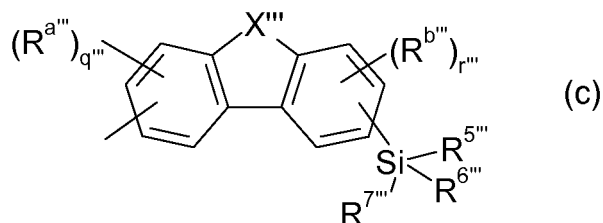
の基であり、

X' は、N または P であり、

基および添字 X'' 、 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 、 $R^{4'}$ 、 $R^{5'}$ 、 $R^{5''}$ 、 $R^{6'}$ 、 $R^{6''}$ 、 $R^{7'}$ 、 $R^{7''}$ 、 R^a 、 R^b 、 $R^{a'}$ 、 $R^{b'}$ 、 $R^{a''}$ 、 $R^{b''}$ 、 q' 、 q'' 、 r' および r'' は、それぞれ独立して、基および添字 X 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^a 、 R^b 、 q および r について定義されている通りである。] の置換または非置換の C_6 - アリールであり；あるいは

R^2 、 R^3 および R^4 基の 1 つおよび / または R^5 、 R^6 および R^7 基の 1 つが一般式 c

【化 2 7】



〔式中、

基および添字 X''' 、 $R^{5'''}$ 、 $R^{6'''}$ 、 $R^{7'''}$ 、 $R^{a'''}$ 、 $R^{b'''}$ 、 q''' および r''' は、それぞれ独立して、基および添字 X 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^a 、 R^b 、 q および r について定義されている通りである。〕の基である有機発光ダイオードに関する。

【誤訳訂正 5】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0084

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0084】

本発明のさらなる実施形態において、式 (II) の化合物における添字 r および q は、それぞれ 0 であり、すなわちそのアリール基のすべての置換可能位置が水素原子を持っている。すべての他の基および添字に対して前記定義が適用される。

【誤訳訂正 6】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0112

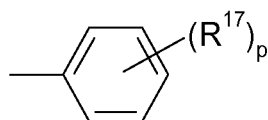
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0112】

式 (II) の化合物において、 R^1 基および / または R^2 、 R^3 および R^4 の群からの基の少なくとも 1 つおよび / または R^5 、 R^6 および R^7 の群からの基の少なくとも 1 つは、好ましくはそれぞれ独立して、以下の式：

【化 3 5】

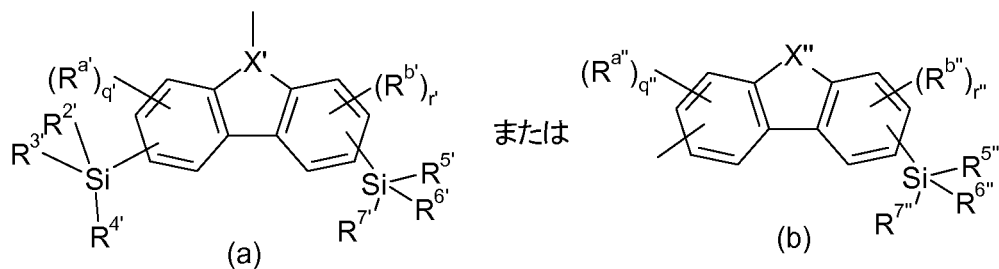


〔式中、

p は、0、1、2、3、4 または 5、好ましくは 0、1、2 または 3、より好ましくは 0、1 または 2 であり；

R^{17} は、水素、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ - アルキル、置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ - アリール、5 ~ 30 個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリール、供与体または受容体作用を有する置換基、あるいは一般式 a または b

【化 3 6】



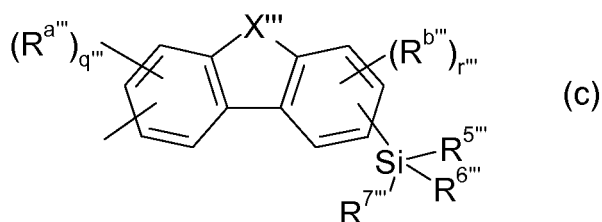
の基であり、

X' は、N または P であり、

基および添字 X'' 、 $R^{2'}$ 、 $R^{3'}$ 、 $R^{4'}$ 、 $R^{5'}$ 、 $R^{5''}$ 、 $R^{6'}$ 、 $R^{6''}$ 、 $R^{7'}$ 、 $R^{7''}$ 、 $R^{a'}$ 、 $R^{b'}$ 、 $R^{a''}$ 、 $R^{b''}$ 、 q' 、 q'' 、 r' および r'' は、それぞれ独立して、基および添字 X 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^a 、 R^b 、 q および r について定義されている通りである。] の置換または非置換の C_6 -アリールであり；あるいは

R^2 、 R^3 および R^4 基の 1 つおよび / または R^5 、 R^6 および R^7 基の 1 つが一般式 c

【化 3 7】



[式中、

基および添字 X''' 、 $R^{5'''}$ 、 $R^{6'''}$ 、 $R^{7'''}$ 、 $R^{a'''}$ 、 $R^{b'''}$ 、 q''' および r''' は、それぞれ独立して、基および添字 X 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^a 、 R^b 、 q および r について定義されている通りである。] の基である。

【誤訳訂正 7】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 1 1 5

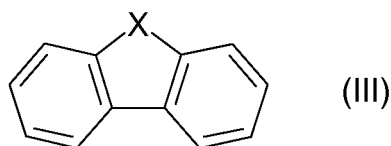
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0 1 1 5】

式 (I I) の化合物は、好ましくは、式 (I I I) :

【化 3 8】



[式中、

X は、 NR^1 、 SO 、 SO_2 、 S 、 O または PR^1 または NH または PH または PPh である。] の対応する基本骨格から製造される。式 (I I I) の好適な基本骨格は、(特に、 X が SO_2 、 S 、 O 、 NH または PPh である場合には) 商業的に入手可能であり、または ($X = PH$ または SO の場合は) 当業者に公知の方法によって製造することが可能である。

【誤訳訂正 8】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0 1 2 1

【訂正方法】変更

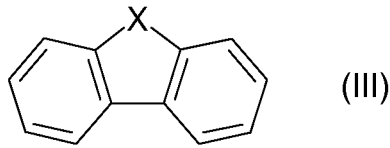
【訂正の内容】

【0121】

したがって、さらなる実施形態において、本発明は、式(II)の発明の化合物および本発明により使用される化合物を製造するための方法であって、

式(III)：

【化39】



[式中、

Xは、 NR^1 、 SO 、 SO_2 、 S 、 O または PR^1 または NH または PH または PPh である。]の基本骨格から出発して、 R^a および R^b 基が式(II)の化合物に存在するときに、以下の変法a)、b)、c)またはd)の1つによって R^1 、 R^a 、 R^b 、 $\text{SiR}^2\text{R}^3\text{R}^4$ および $\text{SiR}^5\text{R}^6\text{R}^7$ 基を導入する方法に関する。

【誤訳訂正9】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0125

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0125】

ハロゲン化を当業者に公知の方法によって実施することができる。式(III)の基本骨格の3および6位における臭素化またはヨウ素化が好ましい。

【誤訳訂正10】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0128

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0128】

基は、好ましくは、式(III)の基本骨格または式(IV)の化合物と、 R^1 が以上に既に定義されており、 Hal が F 、 Cl 、 Br または I 、好ましくは Br 、 I または F である式 R^1-Hal のハロゲン化アルキルまたはハロゲン化アリールまたはハロゲン化ヘテロアリールとを反応させることによって導入される。

【誤訳訂正11】

【訂正対象書類名】明細書

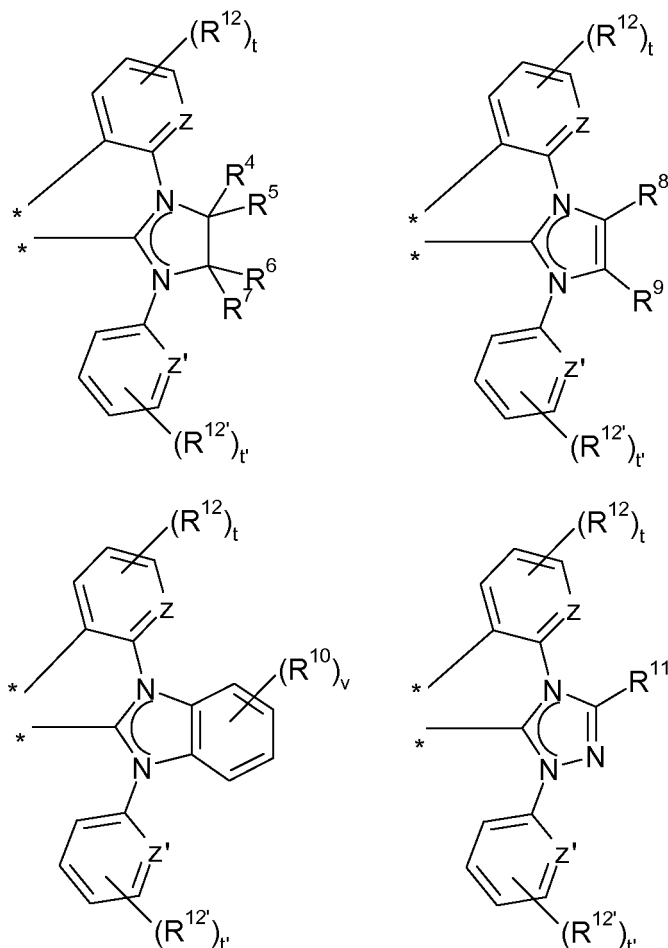
【訂正対象項目名】0151

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0151】

【化 4 5】



[式中、

* は、リガンドの金属中心への結合部位を表し；

z、z' は、同一または異っており、それぞれCHまたはNであり；

R^{12} 、 $R^{12'}$ は、同一または異っており、それぞれアルキル、アリール、ヘテロアリールまたはアルケニル基、好ましくはアルキルまたはアリール基であり、あるいはそれぞれの場合において2つの R^{12} または $R^{12'}$ 基は、一緒になって、少なくとも1つのヘテロ原子、好ましくはNを場合により含むことができる縮合環を形成し；好ましくは、それぞれの場合において、2つの R^{12} または $R^{12'}$ 基は、一緒になって、縮合芳香族 C_6 環を形成し、1つ以上のさらなる芳香族環がこの好ましくは6員芳香族環に場合により縮合されていてよく、任意の考えられる縮合が可能であり、縮合基は、さらに置換されていてよく；あるいは R^{12} または $R^{12'}$ は、好ましくは、ハロゲン基、好ましくはF、Cl、Br、より好ましくはF；アルコキシ、アリールオキシ、カルボニル、エステル、アミノ基、アミド基、 CHF_2 、 CH_2F 、 CF_3 、CN、チオ基およびSCNからなる群から選択される、供与体または受容体作用を有する基であり；

tおよびt' は、同一または異っており、好ましくは同一であり、それぞれ0～3であり、tまたはt' が>1であるときは、 R^{12} または $R^{12'}$ 基は、同一または異なっているもよく；tまたはt' は、好ましくは0または1であり； R^{12} または $R^{12'}$ 基は、tまたはt' が1であるときは、カルベン炭素原子に隣接する窒素原子に対する結合部位に対してオルト、メタまたはパラ位にあり；

R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 および R^{11} は、それぞれ水素、アルキル、アリール、ヘテロアリール、アルケニル、あるいは好ましくは、ハロゲン基、好ましくはF、Cl、Br、より好ましくはF、アルコキシ基、アリールオキシ基、カルボニル基、エステル基、アミノ基、アミド基、 CH_2F 基、 CHF_2 基、 CF_3 基、CN基、チオ基およびSCN基か

らなる群から選択される、供与体または受容体作用を有する置換基、好ましくは水素、アルキル、ヘテロアリールまたはアリールであり、

R^{10} は、アルキル、アリール、ヘテロアリールまたはアルケニル、好ましくはアルキル、ヘテロアリールまたはアリールであり、あるいはそれぞれの場合において2つの R^{10} 基は、一緒になって、少なくとも1つのヘテロ原子、好ましくは窒素を場合により含むことができる縮合環を形成し；好ましくは、それぞれの場合において、2つの R^{10} 基は、一緒になって、縮合芳香族 C_6 環を形成し、1つ以上のさらなる芳香族環がこの好ましくは6員芳香族環に場合により縮合されていてよく、任意の考えられる縮合が可能であり、縮合基は、さらに置換されていてよく；あるいは R^{10} は、好ましくは、ハロゲン基、好ましくはF、Cl、Br、より好ましくはF；アルコキシ、アリーロキシ、カルボニル、エステル、アミノ基、アミド基、 CHF_2 、 CH_2F 、 CF_3 、CN、チオ基およびSCNからなる群から選択される、供与体または受容体作用を有する基であり、
 v は、0～4、好ましくは0、1または2、最も好ましくは0であり、 v が0であるときは、 R^{10} で場合により置換された式cにおけるアリール基の4個の炭素原子は、水素原子を持っている。】。

【誤訳訂正12】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0186

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0186】

本発明は、さらに、少なくとも1つの発明の有機発光ダイオードまたは少なくとも1つの発明の発光層を含む、コンピュータの視覚ディスプレイ装置、テレビ、プリンタおよび台所器具における視覚ディスプレイ装置などの固定視覚ディスプレイ装置および広告板、照明および情報板ならびに携帯電話、ラップトップ、デジタルカメラおよび車両における視覚ディスプレイ装置などの移動視覚ディスプレイ装置ならびにバスおよび電車の行先表示ならびに照明装置からなる群から選択されるデバイスに関する。

【誤訳訂正13】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0254

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0254】

3.00g (7.6 mmol) のイミダゾリウム塩および0.89g (3.8 mmol) の酸化銀を100mlのアセトニトリルに懸濁させ、40℃で終夜撹拌する。続いて、該懸濁液を濃縮して乾固させ、100mlの無水o-キシレンで処理し、0.51g (0.76 mmol) の $[(\mu\text{-Cl})^4\text{-1,5-cod})\text{Ir}]_2$ および75mlのo-キシレンの溶液中に30分以内で計り入れる。その後、該混合物を室温で1時間、70℃で2時間、還流下で48時間撹拌する。冷却後、反応混合物を濾過する。減圧下で濾液から溶媒を除去する。残渣をジクロロメタンで抽出する。減圧下で抽出物から溶媒を除去し、次いでカラムクロマトグラフィー精製（溶離剤：トルエン）を施す。約150mg (10%) の mer-異性体および70mg (5%) の fac-異性体をそれぞれの場合において淡黄色粉末として得る。

【誤訳訂正14】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0256

【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0256】

meridional 異性体：

質量 (MALDI) : $m/e = 980 (M^+)$

光学分光法 : $\lambda = 453 \text{ nm}$ 、 481 nm (4b中5%、蒸着による塗布)

CIE : $X = 0.15$ 、 $Y = 0.21$ (4b中5%、蒸着による塗布)

facial 異性体 :

質量 (MALDI) : $m/e = 980 (M^+)$

光学分光法 : $\lambda = 476 \text{ nm}$ 、 504 nm (PMMA中2%、低温)

CIE : $X = 0.21$ 、 $Y = 0.41$ (PMMA中2%、低温)

B 使用例

実施例 1

マトリックス材料 (65質量%) および正孔/励起子ブロッカーとして9-フェニル-3,6-ビス(トリフェニルシリル)カルバゾール (実施例4b) を含むOLEDの製造アノードとして使用されるITO基板を最初に市販のLCD製造用洗剤 (Deconex (登録商標) 20NS および中和剤 25ORGAN-ACID (登録商標)) で洗浄し、次いで超音波浴内にてアセトン/イソプロパノール混合物で洗浄する。存在し得る有機残留物を除去するために、基板をオゾンオーブン内で連続的なオゾン流にさらに25分間曝す。この処理は、また、ITOの正孔注入特性を向上させる。

【誤訳訂正15】

【訂正対象書類名】明細書

【訂正対象項目名】0111

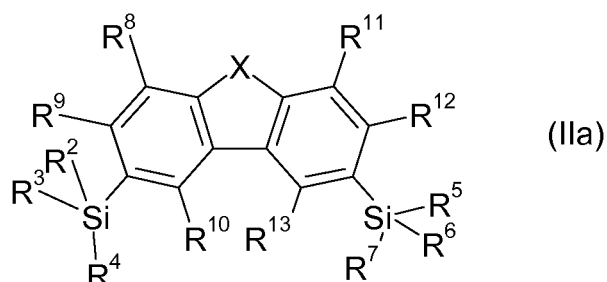
【訂正方法】変更

【訂正の内容】

【0111】

一般式 (II) の化合物は、より好ましくは、一般式 (IIa) :

【化34】



[式中、

Xは、 NR^1 、S、O、 PR^1 、 SO_2 またはSO ; 好ましくは NR^1 、SまたはOであり ; より好ましくは NR^1 であり、

R^1 は、置換または非置換の $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ -アルキル、あるいは置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ -アリール、あるいは5~30個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリール ; 好ましくは置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ -アリールあるいは置換または非置換の $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ -アルキル、より好ましくは置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{10}$ -アリール、あるいは非置換の $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ -アルキル、最も好ましくは置換または非置換のフェニルであり ;

R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 は、それぞれ独立して、置換または非置換の $\text{C}_1 \sim \text{C}_{20}$ -アルキル、あるいは置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ -アリール、あるいは一般式 (c) の構造体であり ;

好ましくは、 R^2 、 R^3 および R^4 基の少なくとも1つおよび/または R^5 、 R^6 および R^7 基の少なくとも1つが置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{30}$ -アリール、より好ましくは置換または非置換の $\text{C}_6 \sim \text{C}_{10}$ -アリール、最も好ましくは置換または非置換のフェニルであり、かつ/または R^2 、 R^3 および R^4 基の1つおよび/または R^5 、 R^6 および R^7 基の1つが構造 (c) の基であり ;

R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{13} は、それぞれ独立して水素であり、または R^a および R^b について定義されている通りであり、すなわちそれぞれ独立して、置換または非置換

の $C_1 \sim C_{20}$ - アルキル、置換または非置換の $C_6 \sim C_{20}$ - アリール、5 ~ 30 個の環原子を有する置換または非置換のヘテロアリール、あるいは供与体または受容体作用を有する好適な置換基が以上に示されている供与体または受容体作用を有する置換基；好ましくは水素、置換または非置換の $C_1 \sim C_6$ - アルキル、置換または非置換の $C_6 \sim C_{10}$ - アリールまたは $SiR^{14}R^{15}R^{16}$ ；より好ましくは、水素、メチル、エチル、フェニル、 CF_3 または $SiR^{14}R^{15}R^{16}$ であり、 R^{14} 、 R^{15} および R^{16} は、好ましくはそれぞれ独立して、置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ - アルキルあるいは置換または非置換のフェニルであり；より好ましくは、 R^{14} 、 R^{15} および R^{16} 基の少なくとも 1 つが置換または非置換のフェニルであり；最も好ましくは、 R^{14} 、 R^{15} および R^{16} 基の少なくとも 1 つが置換フェニルである。] の 3, 6 - ジシリル置換化合物である。