

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 3 部門第 2 区分

【発行日】平成22年7月29日(2010.7.29)

【公表番号】特表2009-541431(P2009-541431A)

【公表日】平成21年11月26日(2009.11.26)

【年通号数】公開・登録公報2009-047

【出願番号】特願2009-517159(P2009-517159)

【国際特許分類】

C 0 7 F 15/00 (2006.01)

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 F 15/00 A

H 0 5 B 33/14 B

H 0 5 B 33/22 B

H 0 5 B 33/22 D

C 0 7 F 15/00 D

C 0 7 F 15/00 E

C 0 7 F 15/00 F

C 0 9 K 11/06

【手続補正書】

【提出日】平成22年6月11日(2010.6.11)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

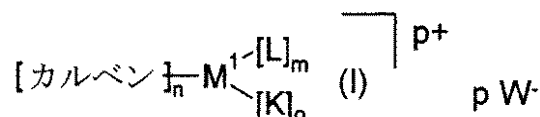
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

少なくとも一種の一般式 ( I ) の遷移金属 - カルベン錯体を含むことを特徴とする有機  
発光ダイオード：

【化 1】



式中、記号は、それぞれ以下の通りである：

M<sup>1</sup> は、元素周期律表 ( C A S 版 ) の I I B、I I I B、I V B、V B、V I B、V I I B、V I I I 族の遷移金属と C u からなる群から選ばれる金属原子であり、特定の金属原子の酸化状態はいずれでもよく；

K は、無電荷の一座または二座配位子であり；

L は、一座または二座の、モノアニオン性またはジアニオン性配位子であり；

m は、0 ~ 5 であり；

o は、0 ~ 5 であり；

n は、1 ~ 6 であり；

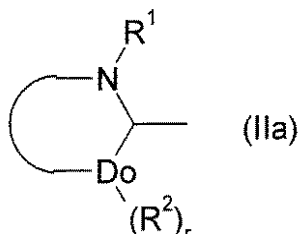
p は、錯体の荷電数で、0、1、2、3、または 4 であり；

$W^-$  は、モノアニオン性の対イオンであり；

$m$ と $o$ と $n$ と $p$ は、用いる金属原子の酸化状態と配位数に、また配位子の電荷と錯体の全体として電荷に依存し、

カルベンは、一般式 ( I I a ) のカルベン配位子であり；

【化 2】



式中、記号は、それぞれ以下の通りである；

$Do$ は、 $N$ 、 $C$ 、 $P$ 、 $O$ 、および $Si$ からなる群から選ばれるドナー原子であり；

$r$ は、 $Do$ が $C$ または $Si$ の時2、 $Do$ が $N$ または $P$ の時1、また $Do$ が $O$ または $S$ の時0であり；

式中、曲線は、

ドナー原子 $Do$ と窒素原子との間に形成された少なくとも2個の原子を有する飽和又は不飽和の架橋であり、

この架橋の一個以上の原子は必要に応じてアルキルまたはアリール基で置換されていてもよく（これらの置換基はさらに置換されていても又は無置換であってもよく）、及び/又はドナーまたはアクセプター作用を持つ基で置換されていてもよく、またこの架橋はさらに、必要に応じて縮合して一個以上の環を形成していてもよく；

$R^1$ と $R^2$ は、

各々独立して、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アラルキル、アルケニル、アルキニル、（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、 $BR^3_2$ 、 $NR^{22}_2$ 、 $PR^{23}_2$ 、 $OR^{24}$ 、 $SR^{25}$ または $SiR^4_3$ であり；

または

$R^1$ 及び/又は $R^2$ は、各々独立して、一個または二個の他のカルベン配位子の $R^1$ 及び/又は $R^2$ 基の一つと共に、以下に定義する架橋を形成し；

アルキレン、アリーレン、ヘテロアリーレン、アルキニレン、アルケニレン、（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、 $NR^5$ 、 $PR^6$ 、 $BR^7$ 、 $BR^8_2$ 、 $CR^9(O^-)$ 、 $SO_2$ 、 $SiR^{10}R^{11}$ 、 $CO$ 、 $CO-O$ 、 $O-CO$ 、および $(CR^{12}R^{13})_X$  [ 式中、一個以上の非隣接 $(CR^{12}R^{13})$ 基が、アリーレン、ヘテロアリーレン、アルキニレン、またはアルケニレン（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、 $NR^5$ 、 $PR^6$ 、 $BR^7$ 、 $BR^8_2$ 、 $CR^9(O^-)$ 、 $O$ 、 $S$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $SiR^{10}R^{11}$ 、 $CO$ 、 $CO-O$ 、 $O-CO$ で置換されていてもよい]；

式中、

$X$ は、2～10であり；

$R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{24}$ 、および $R^{25}$ は、各々独立して、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、アラルキル、ヘテロアリール、アルケニル、アルキニル、またはアルコキシであり、これらの基は置換されていても無置換であってもよく；

また、

$R^{12}$ と $R^{13}$ は、

各々独立して、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アラルキル、アルキニル、またはアルケニル（これらの基は置換されて

いても無置換であってもよい)、またはドナーまたはアクセプター作用を持つ基であり;

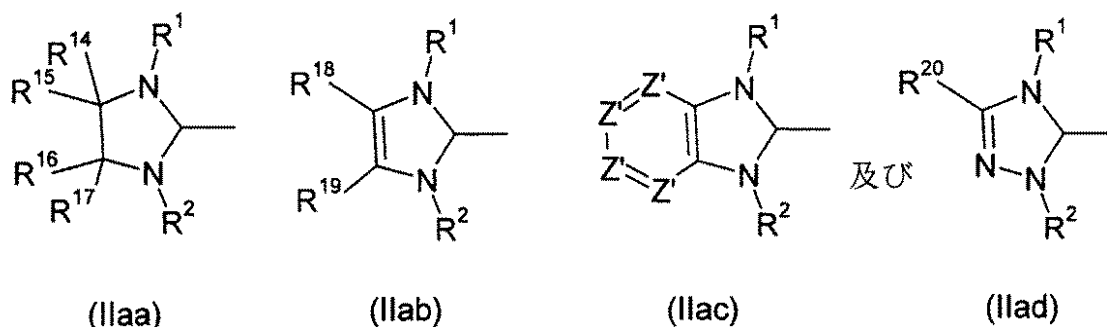
式 I の遷移金属錯体が、架橋カルベン配位子を有し、その際に、 $R^1$  基及び / 又は  $R^2$  基を経由した他のカルベン配位子への架橋、具体的には  $R^1$  と  $R^2$  の定義の際に述べた意味での架橋が、この他のカルベン配位子の  $R^1$  基及び / 又は  $R^2$  基を経由した架橋と同様に存在し、

式 I の遷移金属錯体中の一個以上のカルベン配位子は、カルベン炭素原子のみを経由して遷移金属に結合している。

【請求項 2】

一般式 I I a のカルベン配位子が次式の配位子からなる群から選ばれる請求項 1 に記載の有機発光ダイオード:

【化 3】



式中、記号は、それぞれ以下の通りである:

$Z'$  は、各々独立して、 $CR^{21}$  または  $N$  であり;

$R^{14}$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、 $R^{18}$ 、 $R^{19}$ 、および  $R^{20}$  は、

各々、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、アラルキル、ヘテロアリール、アルキニル、アルケニル (これらの基は置換していても無置換であってもよい)、またはドナーまたはアクセプター作用を持つ基であり;

$R^{21}$  は、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アラルキル、アルキニル、アルケニル (これらの基は置換していても無置換であってもよい)、またはドナーまたはアクセプター作用を持つ基であり、またはいずれの場合も、二個の  $R^{21}$  基が共に、必要に応じて少なくとも一種のヘテロ原子を有する縮合環を形成し;

また、基 I I a a 中の  $R^{14}$  または  $R^{15}$ 、基 I I a b 中の  $R^{18}$ 、基 I I a c 中の  $R^{21}$  基の一つ、及び基 I I a d 中の  $R^{20}$  は、架橋を経由して  $R^1$  に結合してもよく、及び / 又は基 I I a a 中の  $R^{16}$  または  $R^{17}$ 、基 I I a b 中の  $R^{19}$  e、基 I I a c 中の  $R^{21}$  基の一つは、架橋を経由して  $R^2$  に結合してもよく、なおこの架橋は、次のように定義され:

アルキレン、アリーレン、ヘテロアリーレン、アルキニレン、アルケニレン、 $NR^5$ 、 $PR^6$ 、 $BR^7$ 、 $BR^8_{2-}$ 、 $CR^9(O^-)$ 、 $O$ 、 $S$ 、 $SO_2$ 、 $SiR^{10}R^{11}$ 、 $CO$ 、 $CO-O$ 、 $O-CO$  及び  $(CR^{12}R^{13})_x$ 、[ 式中、一個以上の非隣接 ( $CR^{12}R^{13}$ ) 基が、アリーレン、ヘテロアリーレン、アルキニレン、アルケニレン (これらの基は置換していても無置換であってもよい)、 $NR^5$ 、 $PR^6$ 、 $BR^7$ 、 $BR^8_{2-}$ 、 $CR^9(O^-)$ 、 $O$ 、 $S$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $SiR^{10}R^{11}$ 、 $CO$ 、 $CO-O$ 、または  $O-CO$  で置換されていてもよい ] ;

式中、

$x$  は 2 ~ 10 であり、

また、

$R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、および  $R^{11}$  は、

それぞれ、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、アラルキル、ヘテロアリール、アルケニル、アルキニル、アルコキシであり (これらの基は置

換されていても無置換であってもよい) ;

また、

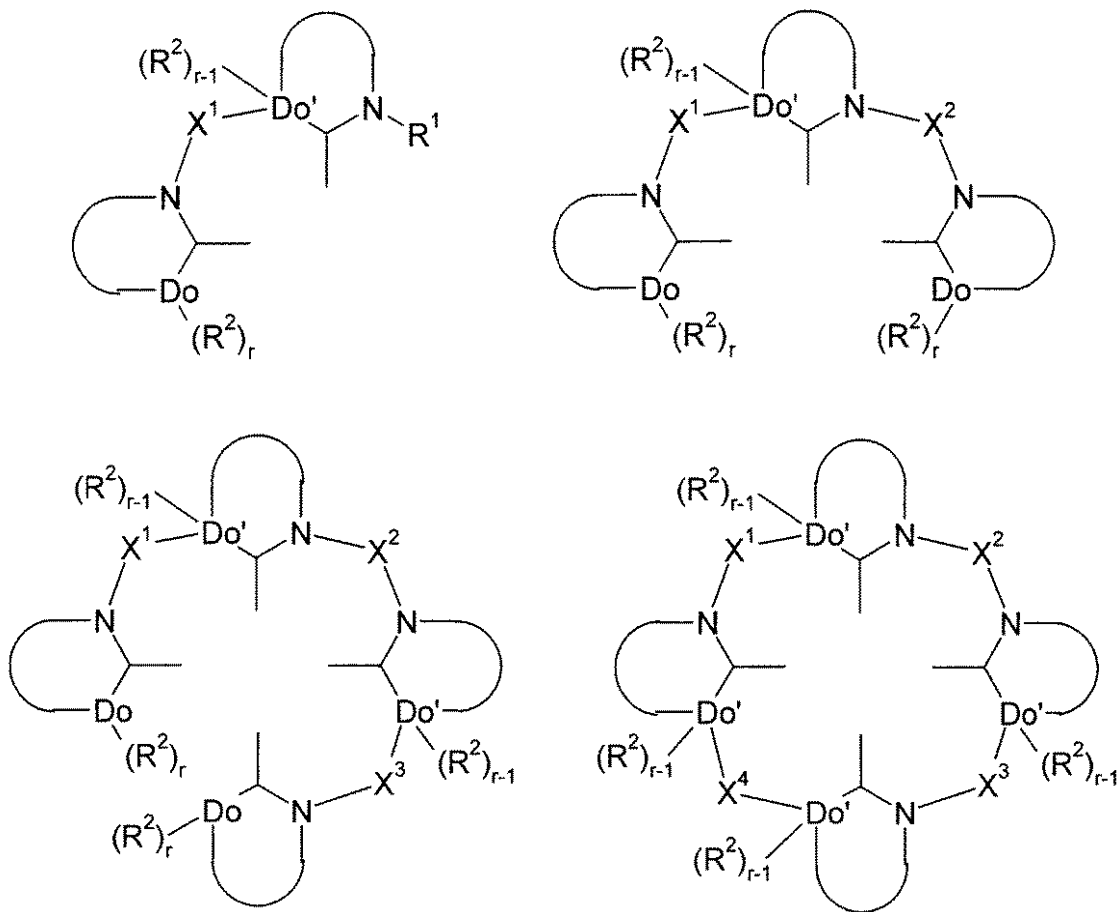
$R^{12}$  と  $R^{13}$  は、

それぞれ、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アラルキル、アルキニル、アルケニル（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、またはドナーまたはアクセプター作用を持つ基、例えばアミノまたはアルコキシである。

【請求項 3】

前記カルベン配位子が次式の配位子から選ばれる請求項 1 又は 2 に記載の有機発光ダイオード：

【化 4】



式中、記号は、それぞれ以下の通りである：

Do は、N、C、P、O、および Si からなる群から選ばれるドナー原子であり、

r は、Do が C または Si の時 2、Do が N または P の時 1、また Do が O または S の時 0 であり；

式中、曲線は、

ドナー原子 Do と窒素原子との間に形成された少なくとも 2 個の原子を有する飽和又は不飽和の架橋であり、なお、この架橋の一個以上の原子は必要に応じてアルキルまたはアリール基で置換されていてもよく（これらの置換基はさらに置換されていても又は無置換であってもよく）、及び / 又はドナーまたはアクセプター作用を持つ基で置換されていてもよく、またこの架橋はさらに、必要に応じて一個以上の環を形成していてもよく；

$R^1$  と  $R^2$  は、

各々独立して、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アラルキル、アルケニル、アルキニル、（これらの基は置換していても

無置換であってもよい)、 $BR^3_2$ 、 $NR^{22}_2$ 、 $PR^{23}_2$ 、 $OR^{24}$ 、 $SR^{25}$ または $SiR^4_3$ であり；

$Do'$ は、N、C、P、及びSiからなる群より選ばれるドナー原子であり；

$X^1$ 、 $X^2$ 、 $X^3$ 、および $X^4$ は、

各々独立して、アルキレン、アリーレン、ヘテロアリーレン、アルキニレン、アルケニレン（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、 $NR^5$ 、 $PR^6$ 、 $BR^7$ 、 $B^{82-}$ 、 $CR^9(O^-)$ 、 $SO_2$ 、 $SiR^{10}R^{11}$ 、CO、CO-O、O-CO、または $(CR^{12}R^{13})_x$  [式中、一個以上の非隣接 $(CR^{12}R^{13})$ 基が、アリーレン、ヘテロアリーレン、アルキニレン、またはアルケニレン（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、 $NR^5$ 、 $PR^6$ 、 $BR^7$ 、 $BR^{82-}$ 、 $CR^9(O^-)$ 、O、S、SO、 $SO_2$ 、 $SiR^{10}R^{11}$ 、CO、CO-O、O-COで置換されていてもよい]であり；

式中、

$X$ は2～10であり；

$R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{24}$ 、および $R^{25}$ は、それぞれ、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、アラルキル、ヘテロアリール、アルケニル、アルキニル、アルコキシ（これらの基は置換されていても非置換であってもよい）であり；

また、

$R^{12}$ と $R^{13}$ は、

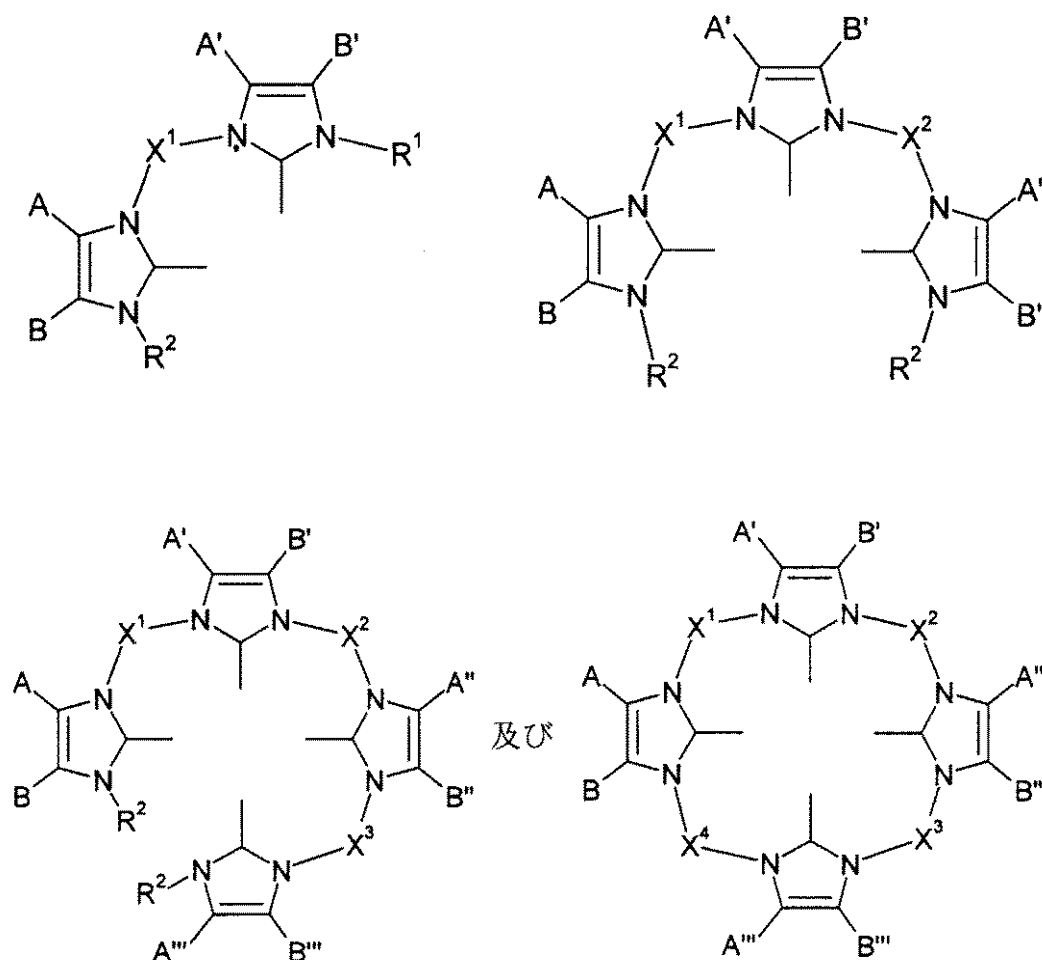
それぞれ、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アラルキル、アルキニル、アルケニル（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、またはドナーまたはアクセプター作用を持つ基である。

【請求項4】

前記カルベン配位子が次式の配位子から選ばれる請求項3に記載の有機発光ダイオード

。

## 【化 5】



式中、記号は、それぞれ以下の通りである：

$R^1$  と  $R^2$  は、

各々独立して、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アラルキル、アルケニル、アルキニル、（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、 $BR^3_2$ 、 $NR^2_2$ 、 $PR^2_3$ 、または  $OR^2_4$ 、 $SR^2_5$  または  $SiR^4_3$  であり；

$X^1$ 、 $X^2$ 、 $X^3$ 、および  $X^4$  は、

各々独立して、アルキレン、アリーレン、ヘテロアリーレン、アルキニレン、アルケニレン（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、 $NR^5$ 、 $PR^6$ 、 $BR^7$ 、 $B^8_2$ 、 $CR^9(O^-)$ 、 $SO_2$ 、 $SiR^{10}R^{11}$ 、 $CO$ 、 $CO-O$ 、 $O-CO$ 、または  $(CR^{12}R^{13})_x$  [ 式中、一個以上の非隣接  $(CR^{12}R^{13})$  基が、アリーレン、ヘテロアリーレン、アルキニレン、またはアルケニレン（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、 $NR^5$ 、 $PR^6$ 、 $BR^7$ 、 $BR^8_2$ 、 $CR^9(O^-)$ 、 $O$ 、 $S$ 、 $SO$ 、 $SO_2$ 、 $SiR^{10}R^{11}$ 、 $CO$ 、 $CO-O$ 、 $O-CO$  で置換されていてもよい ] であり；

式中、

$X$  は 2 ～ 10 であり；

また、

$R^3$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^6$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ 、 $R^9$ 、 $R^{10}$ 、 $R^{11}$ 、 $R^2_2$ 、 $R^2_3$ 、 $R^2_4$ 、および  $R^2_5$  は、それぞれ、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル

ル、アリール、アラルキル、ヘテロアリール、アルケニル、アルキニル、アルコキシ（これらの基は置換されていても非置換であってもよい）であり；

また、

$R^{12}$  と  $R^{13}$  は、

それぞれ、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アラルキル、アルキニル、アルケニル（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、またはドナーまたはアクセプター作用を持つ基、例えばアミノまたはアルコキシであり；

A、A'、A''、A''' は、それぞれ  $R^{18}$  であり、

B、B'、B''、B''' は、それぞれ  $R^{19}$  であり、式中、

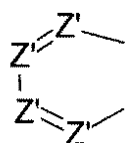
A、A'、A''、A''' グループ中の  $R^{18}$  と、B、B'、B''、B''' グループ中の  $R^{19}$  とは、いずれの場合も、同一であるか異なり；

または

A と B、A' と B'、A'' と B''、または A''' と B''' は、

各々独立して、下記式

【化 6】



の基と共に、縮合環を形成し、式中

A と B、A' と B'、A'' と B''、および A''' と B''' グループ中の Z' は、いずれの場合も、同一であっても異なってもよく；

$R^{18}$  と  $R^{19}$  は、

それぞれ、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、アラルキル、ヘテロアリール、アルキニル、アルケニル（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、またはドナーまたはアクセプター作用を持つ基であり；

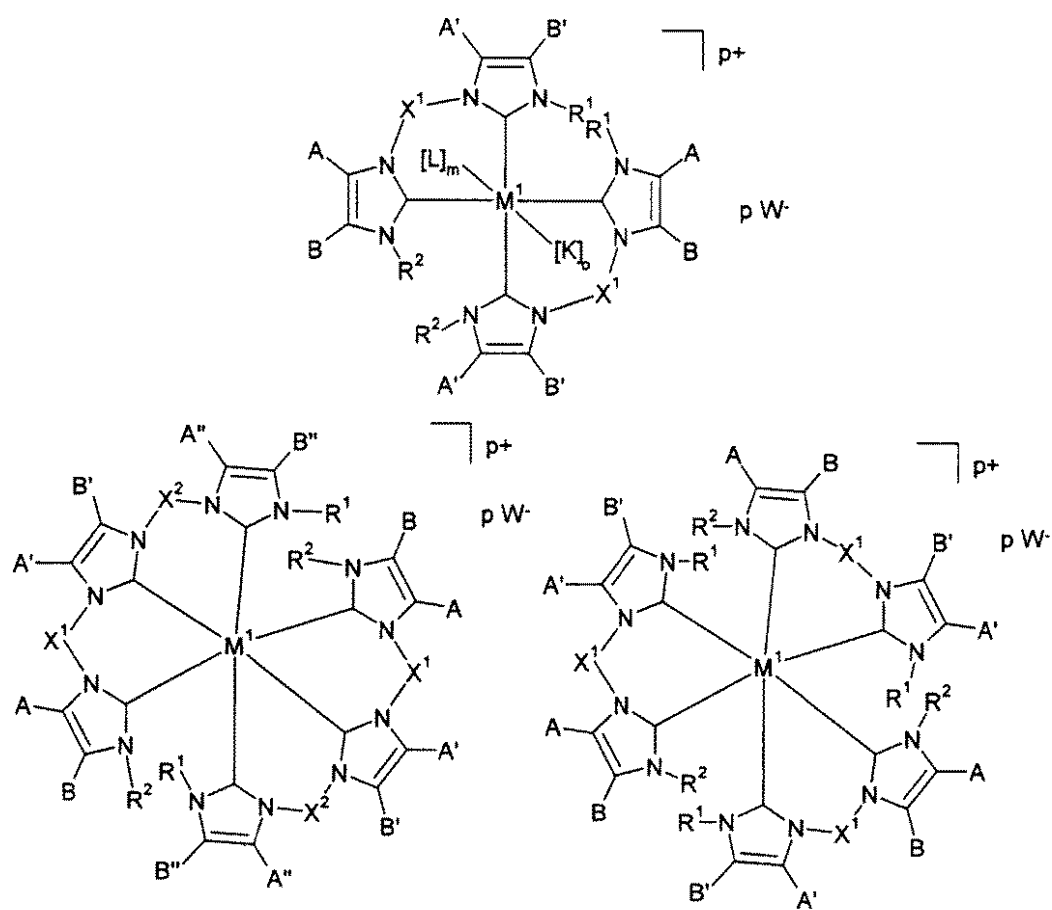
Z' は、各々独立して、 $CR^{21}$  または N であり；

$R^{21}$  は、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アラルキル、アルキニル、アルケニル（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、またはドナーまたはアクセプター作用を持つ基であるか、いずれの場合も、二個の  $R^{21}$  基が一緒になり必要に応じて少なくとも一種のヘテロ原子を含有してもよい縮合環を形成していてもよい。

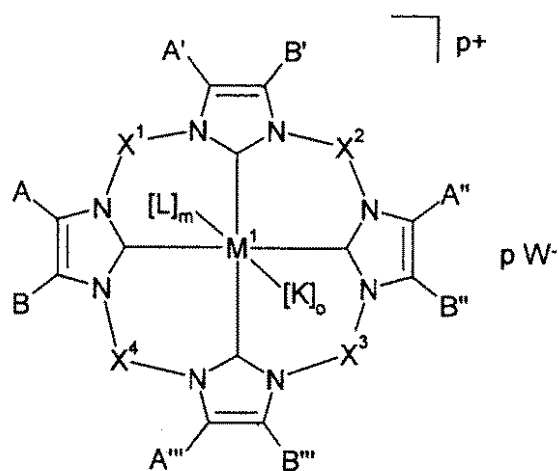
【請求項 5】

前記遷移金属 - カルベン錯体が、次式の配位子から選ばれる請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の有機発光ダイオード：

## 【化 7】



及び



式中、記号は、それぞれ以下の通りである：

$M^1$  は、Pt、Os、Ru、またはIrであり；

Kは、無電荷の一座または二座配位子であり；

Lは、 $Cl^-$ 、 $Br^-$ 、 $I^-$ 、 $CN^-$ 、 $OAc^-$ 、アルコキシド、またはチオレートであり；



m は、0 ～ 5 であり；

o は、0 ～ 5 であり；

p は、0、1、2、または 3 であり；

$W^-$  は、ハライド、擬ハライドまたは  $OAc^-$  であり；

$R^1$  と  $R^2$  は、各々独立して、置換又は非置換のアルキルであり；

A と  $A'$ 、 $A''$ 、 $A'''$  は、それぞれ  $R^{1-8}$  であり；

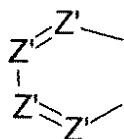
B と  $B'$ 、 $B''$ 、 $B'''$  は、それぞれ  $R^{1-9}$  であり；式中

A と  $A'$ 、 $A''$ 、 $A'''$  グループ中の  $R^{1-8}$  と、B と  $B'$ 、 $B''$ 、 $B'''$  グループ中の  $R^{1-9}$  は、各々独立して、水素またはドナーまたはアクセプター作用のある基であり；

または

A と B、 $A'$  と  $B'$ 、 $A''$  と  $B''$ 、または  $A'''$  と  $B'''$  は、各々独立して、下記式：

【化 8】



の基と共に、縮合環を形成し、式中、

A と B、 $A'$  と  $B'$ 、 $A''$  と  $B''$ 、および  $A'''$  と  $B'''$  グループ中の Z は、いずれの場合も、同一であっても異なってもよく；

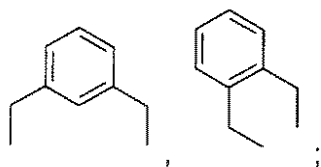
$Z'$  は、各々独立して、 $CR^{2-1}$  または N であり；

$R^{2-1}$  は、水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、アラルキル、アルキニル、アルケニル（これらの基は置換していても無置換であってもよい）、またはドナーまたはアクセプター作用を持つ基であり、またはいずれの場合も、二個の  $R^{2-1}$  基が共に、必要に応じて少なくとも一種のヘテロ原子を有する縮合環を形成し；

$X^1$ 、 $X^2$ 、 $X^3$ 、および  $X^4$  は、

各々独立して、 $CH_2$ 、 $CH=CH$ 、1,2-フェニレン、 $CH$ （アミノ）、 $CH$ （O $^-$ ）、 $BR^{8-2-}$ 、または

【化 9】



であり；

式中、 $R^8$  は、水素、アルキル、シクロアルキルまたはアリールである（これらの基は置換していても無置換であってもよい）。

【請求項 6】

請求項 1 ～ 5 のいずれか一項に記載の一般式 I の遷移金属 - カルベン錯体を少なくとも一種含むことを特徴とする発光層。

【請求項 7】

請求項 6 に記載の発光層を少なくとも一つ含むことを特徴とする有機発光ダイオード。

## 【請求項 8】

請求項 1 ～ 5 または 7 のいずれか一項に記載の有機発光ダイオードを少なくとも一種含むことを特徴とする据置型画像表示装置、照明、および携帯型画像表示装置からなる群から選ばれる装置。