

(19)日本国特許庁(JP)

## (12)特許公報(B2)

(11)特許番号  
特許第7336865号  
(P7336865)

(45)発行日 令和5年9月1日(2023.9.1)

(24)登録日 令和5年8月24日(2023.8.24)

(51)国際特許分類

C 0 7 F	15/00 (2006.01)	F I	C 0 7 F	15/00	E C S P
C 0 9 K	11/06 (2006.01)		C 0 9 K	11/06	6 6 0
H 1 0 K	50/10 (2023.01)		C 0 9 K	11/06	6 9 0
H 1 0 K	50/16 (2023.01)		H 0 5 B	33/14	B
H 1 0 K	50/15 (2023.01)		H 0 5 B	33/22	B

請求項の数 19 (全58頁) 最終頁に続く

(21)出願番号	特願2019-69169(P2019-69169)
(22)出願日	平成31年3月29日(2019.3.29)
(65)公開番号	特開2019-182850(P2019-182850)
	A)
(43)公開日	令和1年10月24日(2019.10.24)
審査請求日	令和4年2月15日(2022.2.15)
(31)優先権主張番号	10-2018-0038354
(32)優先日	平成30年4月2日(2018.4.2)
(33)優先権主張国・地域又は機関	韓国(KR)
(31)優先権主張番号	10-2019-0036865
(32)優先日	平成31年3月29日(2019.3.29)
(33)優先権主張国・地域又は機関	韓国(KR)

(73)特許権者	390019839
	三星電子株式会社
	S a m s u n g E l e c t r o n i c s
	C o . , L t d .
	大韓民国京畿道水原市靈通区三星路 1 2
	9
	1 2 9 , S a m s u n g - r o , Y e o
	n g t o n g - g u , Suw o n - s i
	, Gyeonggi - d o , Repub
	l i c o f K o r e a
(74)代理人	110000051
	弁理士法人共生国際特許事務所
	郭允鉉
	大韓民国 京畿道 水原市 灵通区 三星路
	1 3 0 三星綜合技術院内

最終頁に続く

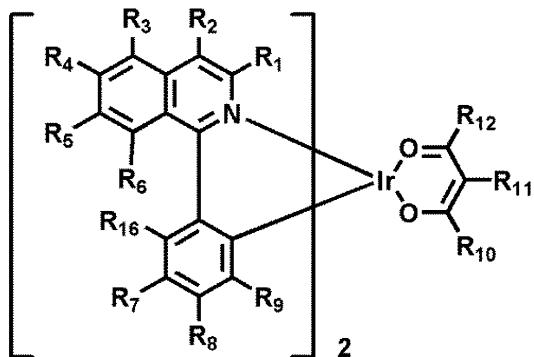
(54)【発明の名称】 有機金属化合物とそれを含む有機発光素子及び診断用組成物

## (57)【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

下記化学式 1 で表されることを特徴とする有機金属化合物。

## 【化 1】

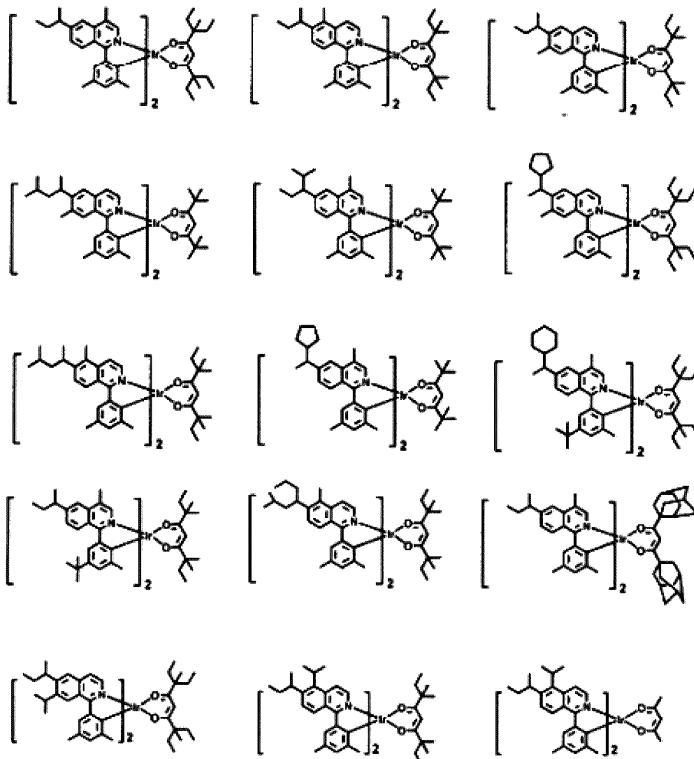


前記化学式 1 で、R<sub>1</sub>ないしR<sub>12</sub>、及びR<sub>16</sub>は、それぞれ独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-SF<sub>5</sub>、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル基、置換若しくは非置換のC<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルケニル基、置換若しくは非置換のC<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルキニル

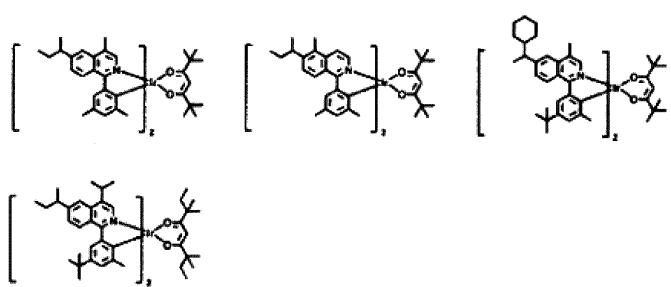
基、置換若しくは非置換の C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub> アルコキシ基、置換若しくは非置換の C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub> シクロアルキル基、置換若しくは非置換の C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換の C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub> シクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub> アリール基、置換若しくは非置換の C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub> アリールオキシ基、置換若しくは非置換の C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub> アリールチオ基、置換若しくは非置換の C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub> ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)、-Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>)、-Ge(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>)、-B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>)、-P(=O)(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>)、又は-P(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>)であり、

ただし、前記有機金属化合物は、下記化合物ではなく、

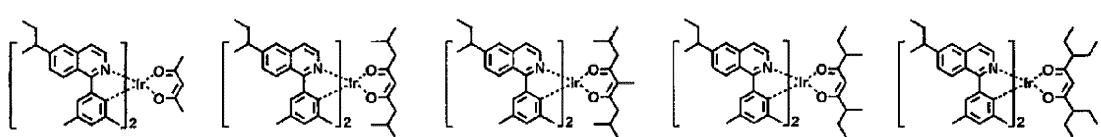
10



20



30

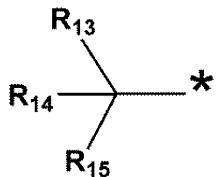


40

前記 R<sub>1</sub>ないし R<sub>6</sub>のうちの少なくとも一つは、それぞれ独立して、下記化学式 2 で表される基のうちから選択され、

50

## 【化2】



前記化学式2に含まれる炭素の個数は、4以上であり、

前記化学式2で、R<sub>13</sub>は、水素、重水素、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、重水素含有C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又は重水素含有C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基であり、

前記化学式2で、R<sub>14</sub>は、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、重水素含有C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又は重水素含有C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基であり、

前記化学式2において、R<sub>15</sub>は、C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、重水素含有C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又は重水素含有C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基であり、

前記\*は、隣接原子との結合サイトであり、

前記置換されたC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルキル基、置換されたC<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルケニル基、置換されたC<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルキニル基、置換されたC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルコキシ基、置換されたC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、置換されたC<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、置換されたC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、置換されたC<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、置換されたC<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、置換されたC<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールオキシ基、置換されたC<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールチオ基、置換されたC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基は、

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CDH<sub>2</sub>、-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、-CFH<sub>2</sub>、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルキル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルケニル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルキニル基、又はC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルコキシ基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CDH<sub>2</sub>、-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、-CFH<sub>2</sub>、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)、-Si(Q<sub>13</sub>)(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>)、-Ge(Q<sub>13</sub>)(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>)、-B(Q<sub>16</sub>)(Q<sub>17</sub>)、-P(=O)(Q<sub>18</sub>)(Q<sub>19</sub>)、及び-P(Q<sub>18</sub>)(Q<sub>19</sub>)のうちの少なくとも一つで置換された、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルキル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルケニル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルキニル基、又はC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルコキシ基；

C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、又は一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CDH<sub>2</sub>、-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、-CFH<sub>2</sub>、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルキル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルケニル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルキニル基、又はC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルコキシ基；

10

20

30

40

50

ルキニル基、C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>アルコキシ基、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)、-Si(Q<sub>23</sub>)(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>)、-Ge(Q<sub>23</sub>)(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>)、-B(Q<sub>26</sub>)(Q<sub>27</sub>)、-P(=O)(Q<sub>28</sub>)(Q<sub>29</sub>)、及び-P(Q<sub>28</sub>)(Q<sub>29</sub>)のうちの少なくとも一つで置換された、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、又は一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；或いは

-N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)、-Si(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>)、-Ge(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>)、-B(Q<sub>36</sub>)(Q<sub>37</sub>)、-P(=O)(Q<sub>38</sub>)(Q<sub>39</sub>)、又は-P(Q<sub>38</sub>)(Q<sub>39</sub>)；であり、

前記Q<sub>1</sub>ないしQ<sub>9</sub>及びQ<sub>33</sub>ないしQ<sub>35</sub>は、それぞれ独立して、

-CH<sub>3</sub>、-CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CDH<sub>2</sub>、-CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>、-CH<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>、-CH<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H、-CH<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>、-CH<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>、-CH<sub>2</sub>CDCH<sub>3</sub>、-CHDCD<sub>2</sub>H、-CHDCDH<sub>2</sub>、-CHDCD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>CD<sub>2</sub>H、又は-CD<sub>2</sub>CDH<sub>2</sub>；

n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、イソブチル基、sec-ブチル基、tert-ブチル基、n-ペンチル基、イソペンチル基、sec-ペンチル基、tert-ペンチル基、フェニル基、又はナフチル基；或いは

重水素、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub>アルキル基及びフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、イソブチル基、sec-ブチル基、tert-ブチル基、n-ペンチル基、イソペンチル基、sec-ペンチル基、tert-ペンチル基、フェニル基、又はナフチル基；であり、

前記Q<sub>11</sub>ないしQ<sub>19</sub>、Q<sub>21</sub>ないしQ<sub>29</sub>、Q<sub>31</sub>、Q<sub>32</sub>、及びQ<sub>36</sub>ないしQ<sub>39</sub>は、それぞれ独立して、水素、重水素、C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>アルキル基、或いはC<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリール基である。

## 【請求項2】

前記R<sub>1</sub>ないしR<sub>12</sub>、及びR<sub>16</sub>は、それぞれ独立して、

水素、重水素、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、sec-ブチル基、イソブチル基、tert-ブチル基、n-ペンチル基、tert-ペンチル基、ネオペンチル基、イソペンチル基、sec-ペンチル基、3-ペンチル基、sec-イソペンチル基、n-ヘキシル基、イソヘキシル基、sec-ヘキシル基、tert-ヘキシル基、n-ヘプチル基、イソヘプチル基、sec-ヘプチル基、tert-ヘプチル基、n-オクチル基、イソオクチル基、sec-オクチル基、tert-オクチル基、n-ノニル基、イソノニル基、sec-ノニル基、tert-ノニル基、n-デシル基、イソデシル基、sec-デシル基、tert-デシル基、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペントキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシル基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、ビシクロ[2.2.2]オクチル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、カルバゾリル基、フルオレニル基、ジベンゾシロリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、又は-Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>)；

少なくとも1つの重水素で置換された、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、sec-ブチル基、イソブチル基、tert-ブチル基、n-ペンチル基、tert-ペンチル基、ネオペンチル基、イソペンチル基、sec-ペンチル基、3-ペンチル基、sec-イソペンチル基、n-ヘキシル基、イソヘキシル基、sec-ヘキシル基、s

10

20

30

40

50

e c - ヘキシル基、tert - ヘキシル基、n - ヘプチル基、イソヘプチル基、sec - ヘプチル基、tert - ヘプチル基、n - オクチル基、イソオクチル基、sec - オクチル基、tert - オクチル基、n - ノニル基、イソノニル基、sec - ノニル基、tert - ノニル基、n - デシル基、イソデシル基、sec - デシル基、又はtert - デシル基；或いは

重水素及びC<sub>1</sub> - C<sub>10</sub>アルキル基のうちの少なくとも一つで置換された、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペントキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシル基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、ビシクロ[2.2.2]オクチル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、カルバゾリル基、フルオレニル基、ジベンゾシロリル基、ジベンゾフラニル基、又はジベンゾチオフェニル基；であることを特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。 10

#### 【請求項3】

前記化学式1のR<sub>2</sub>ないしR<sub>5</sub>のうちの一つは、前記化学式2で表される基であることを持つ特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。

#### 【請求項4】

前記化学式1のR<sub>7</sub>及びR<sub>9</sub>は、水素ではなく、R<sub>7</sub>及びR<sub>9</sub>は、互いに同一であることを特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。 20

#### 【請求項5】

前記化学式1のR<sub>7</sub>及びR<sub>9</sub>は、水素ではなく、R<sub>7</sub>及びR<sub>9</sub>は、互いに異なることを特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。

#### 【請求項6】

前記化学式2で、R<sub>13</sub>は、水素又は重水素であることを特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。

#### 【請求項7】

前記化学式2で、R<sub>13</sub>は、C<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基、重水素含有C<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又は重水素含有C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基であることを特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。 30

#### 【請求項8】

前記化学式2で、R<sub>14</sub>とR<sub>15</sub>とは、互いに異なることを特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。

#### 【請求項9】

前記化学式2で、

R<sub>13</sub>は、水素、重水素、-CH<sub>3</sub>、-CDH<sub>2</sub>、-CD<sub>2</sub>H又は-CD<sub>3</sub>であり、R<sub>14</sub>は、

メチル基、エチル基、n - プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、sec - ブチル基、イソブチル基、tert - ブチル基、n - ペンチル基、tert - ペンチル基、ネオペンチル基、イソペンチル基、sec - ペンチル基、3 - ペンチル基、sec - イソペンチル基、n - ヘキシル基、イソヘキシル基、sec - ヘキシル基、tert - ヘキシル基、n - ヘプチル基、イソヘプチル基、sec - ヘプチル基、tert - ヘプチル基、n - オクチル基、イソオクチル基、sec - オクチル基、tert - オクチル基、n - ノニル基、イソノニル基、sec - ノニル基、tert - ノニル基、n - デシル基、イソデシル基、sec - デシル基、tert - デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシル基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、又はビシクロ[2.2.2]オクチル基；或いは

少なくとも1つの重水素で置換された、メチル基、エチル基、n - プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、sec - ブチル基、イソブチル基、tert - ブチル基、n -

10

20

30

40

50

ペンチル基、tert-ペンチル基、ネオペンチル基、イソペンチル基、sec-ペンチル基、3-ペンチル基、sec-イソペンチル基、n-ヘキシル基、イソヘキシル基、sec-ヘキシル基、tert-ヘキシル基、n-ヘプチル基、イソヘプチル基、sec-ヘプチル基、tert-ヘプチル基、n-オクチル基、イソオクチル基、sec-オクチル基、tert-オクチル基、n-ノニル基、イソノニル基、sec-ノニル基、tert-ノニル基、n-デシル基、イソデシル基、sec-デシル基、tert-デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシル基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、又はビシクロ[2.2.2]オクチル基；であり、

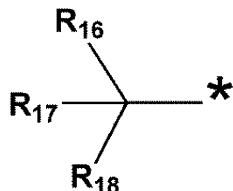
R<sub>15</sub>は、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、sec-ブチル基、イソブチル基、tert-ブチル基、n-ペンチル基、tert-ペンチル基、ネオペンチル基、イソペンチル基、sec-ペンチル基、3-ペンチル基、sec-イソペンチル基、n-ヘキシル基、イソヘキシル基、sec-ヘキシル基、tert-ヘキシル基、n-ヘプチル基、イソヘプチル基、sec-ヘプチル基、tert-ヘプチル基、n-オクチル基、イソオクチル基、sec-オクチル基、tert-オクチル基、n-ノニル基、イソノニル基、sec-ノニル基、tert-ノニル基、n-デシル基、イソデシル基、sec-デシル基、tert-デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシル基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、又はビシクロ[2.2.2]オクチル基；或いは

少なくとも1つの重水素で置換された、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、sec-ブチル基、イソブチル基、tert-ブチル基、n-ペンチル基、tert-ペンチル基、ネオペンチル基、イソペンチル基、sec-ペンチル基、3-ペンチル基、sec-イソペンチル基、n-ヘキシル基、イソヘキシル基、sec-ヘキシル基、tert-ヘキシル基、n-ヘプチル基、イソヘプチル基、sec-ヘプチル基、tert-ヘプチル基、n-オクチル基、イソオクチル基、sec-オクチル基、tert-オクチル基、n-ノニル基、イソノニル基、sec-ノニル基、tert-ノニル基、n-デシル基、イソデシル基、sec-デシル基、tert-デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシル基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、又はビシクロ[2.2.2]オクチル基；であることを特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。

#### 【請求項10】

前記化学式1のR<sub>10</sub>とR<sub>12</sub>とのうちの少なくとも一つは、互いに独立して、下記化学式3で表される基であることを特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。

#### 【化3】



前記化学式3で、

R<sub>16</sub>ないしR<sub>18</sub>は、それぞれ独立して、

水素、重水素、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、又はC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基；或いは

重水素及びC<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基のうちの少なくとも一つで置換された、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、又はC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基；あり

、

\*は、隣接原子との結合サイトである。

10

20

30

40

50

## 【請求項 1 1】

前記化学式 1 の R<sub>10</sub> と R<sub>12</sub> とは、互いに同一であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機金属化合物。

## 【請求項 1 2】

前記化学式 1 の R<sub>10</sub> と R<sub>12</sub> とは、互いに異なることを特徴とする請求項 1 に記載の有機金属化合物。

## 【請求項 1 3】

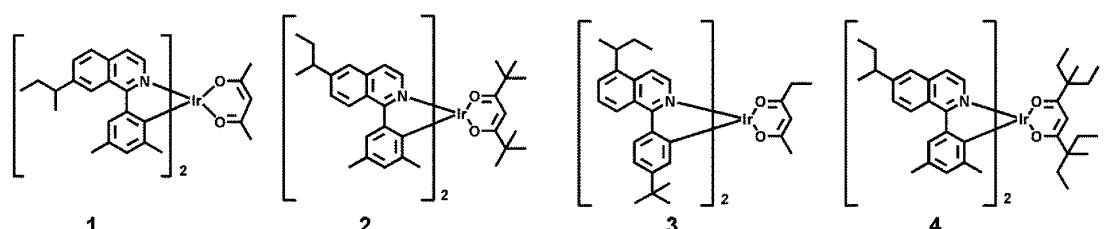
R<sub>10</sub>、R<sub>12</sub>、及び R<sub>14</sub> のうちの少なくとも一つは、それぞれ独立して、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub> シクロアルキル基又は重水素含有 C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub> シクロアルキル基であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機金属化合物。

10

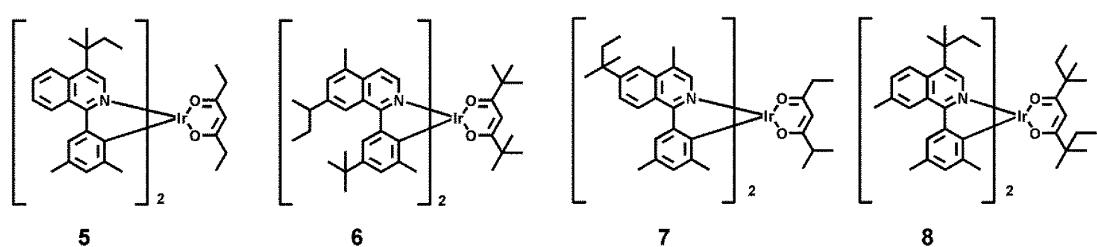
## 【請求項 1 4】

下記化合物 1 ~ 20 のうちの一つであることを特徴とする請求項 1 に記載の有機金属化合物。

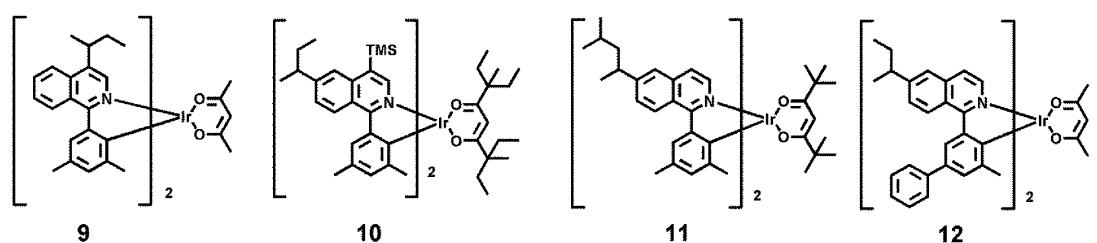
## 【化 1 - 2 0】



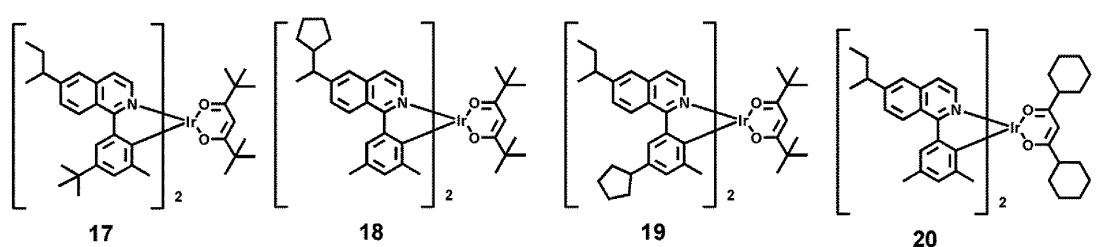
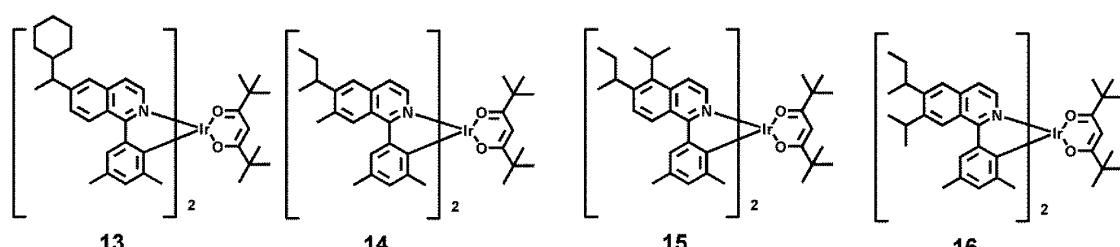
20



30



40



50

## 【請求項 1 5】

第1電極と、

第2電極と、

前記第1電極と前記第2電極との間に配置されて発光層を含む有機層と、を有し、

前記有機層は、請求項1乃至14のいずれか1項に記載の有機金属化合物を1種以上含むことを特徴とする有機発光素子。

**【請求項16】**

前記第1電極は、アノードであり、

前記第2電極は、カソードであり、

前記有機層は、前記第1電極と前記発光層との間に配置された正孔輸送領域、及び前記発光層と前記第2電極との間に配置された電子輸送領域を更に含み、

前記正孔輸送領域は、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、バッファ層、又はその任意の組み合わせを含み、

前記電子輸送領域は、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、又はその任意の組み合わせを含むことを特徴とする請求項15に記載の有機発光素子。

**【請求項17】**

前記有機金属化合物は、前記発光層に含まれることを特徴とする請求項15に記載の有機発光素子。

**【請求項18】**

前記発光層は、赤色光を放出することを特徴とする請求項17に記載の有機発光素子。

**【請求項19】**

前記発光層は、ホストを更に含み、

前記発光層におけるホストの含量は、前記発光層における有機金属化合物の含量よりも多いことを特徴とする請求項17に記載の有機発光素子。

**【発明の詳細な説明】**

**【技術分野】**

**【0001】**

本発明は、有機金属化合物、それを含む有機発光素子、及びそれを含む診断用組成物に関する。

**【背景技術】**

**【0002】**

有機発光素子(organic light emitting device)は、自発光型素子であり、視野角、応答時間、輝度、駆動電圧、及び応答速度などにおいて優れ、多色化が可能である。

**【0003】**

一例によると、有機発光素子は、アノード、カソード、及びアノードとカソードとの間に配置された発光層を含む有機層を含む。アノードと発光層との間には正孔輸送領域が具備され、発光層とカソードとの間には電子輸送領域が具備される。アノードから注入された正孔は正孔輸送領域を経由して発光層に移動し、カソードから注入された電子は電子輸送領域を経由して発光層に移動する。正孔及び電子は、発光層領域で再結合されて励起子(exciton)を生成する。励起子が励起状態から基底状態に変わりながら光が生成される。

**【0004】**

なお、各種細胞、タンパク質のような生物学的物質のモニタリング、センシング、検出などにも、発光化合物、例えばリン光発光化合物が使用される。

**【先行技術文献】**

**【特許文献】**

**【0005】**

**【文献】特開2017-39713号公報**

**【発明の概要】**

**【発明が解決しようとする課題】**

10

20

30

40

50

## 【0006】

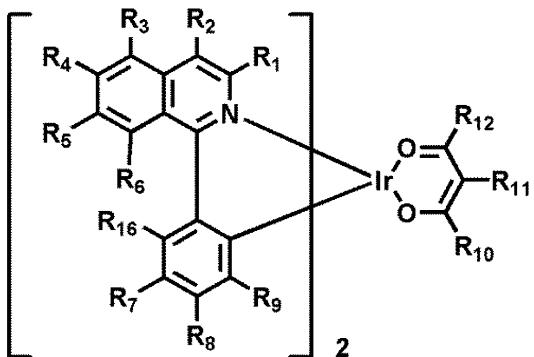
本発明は、上記従来技術に鑑みてなされたものであって、本発明の目的は、有機金属化合物、それを用いた有機発光素子、及びそれを用いた診断用組成物を提供することにある。

## 【課題を解決するための手段】

## 【0007】

上記目的を達成するためになされた本発明の一態様による有機金属(organometallic)化合物は、下記化学式1で表される。

## 【化1】



前記化学式1で、R<sub>1</sub>ないしR<sub>12</sub>、及びR<sub>16</sub>は、それぞれ独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-SF<sub>5</sub>、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル基、置換若しくは非置換のC<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルケニル基、置換若しくは非置換のC<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルキニル基、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルコキシ基、置換若しくは非置換のC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換のC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換のC<sub>6</sub>-C<sub>6</sub>アリール基、置換若しくは非置換のC<sub>6</sub>-C<sub>6</sub>アリールオキシ基、置換若しくは非置換のC<sub>6</sub>-C<sub>6</sub>アリールチオ基、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)、-Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>)、-Ge(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>)、-B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>)、-P(=O)(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>)、又は-P(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>)であり、

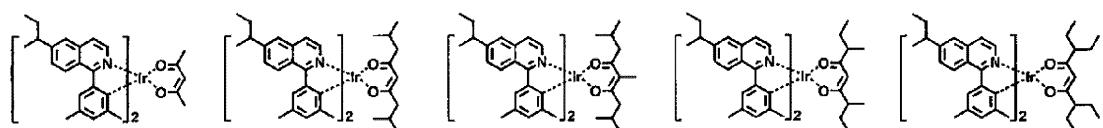
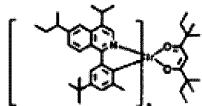
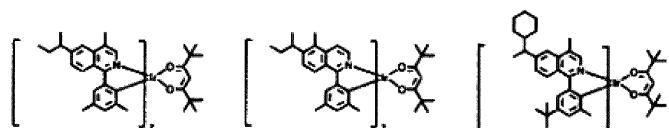
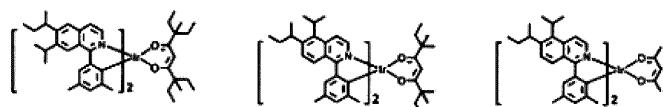
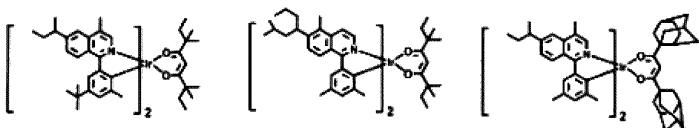
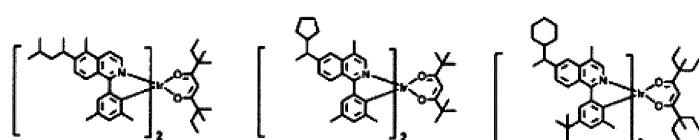
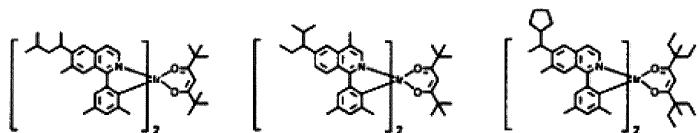
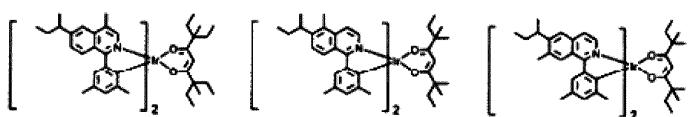
ただし、前記有機金属化合物は、下記化合物ではなく、

20

30

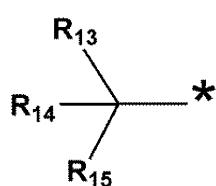
40

50



前記 R<sub>1</sub> ないし R<sub>6</sub> のうちの少なくとも一つは、それぞれ独立して、下記化学式 2 で表される基のうちから選択され、

【化 2】



前記化学式 2 に含まれる炭素の個数は、4 以上であり、

前記化学式 2 で、R<sub>13</sub> は、水素、重水素、C<sub>1</sub> - C<sub>20</sub> アルキル基、重水素含有 C<sub>1</sub> - C<sub>20</sub> アルキル基、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub> シクロアルキル基、又は重水素含有 C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub> シクロアルキル基であり、

10

20

30

40

50

前記化学式2で、R<sub>14</sub>は、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、重水素含有C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又は重水素含有C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基であり、

前記化学式2において、R<sub>15</sub>は、C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、重水素含有C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又は重水素含有C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基であり、

前記\*は、隣接原子との結合サイトであり、

前記置換されたC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルキル基、置換されたC<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルケニル基、置換されたC<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルキニル基、置換されたC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルコキシ基、置換されたC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、置換されたC<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、置換されたC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、置換されたC<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、置換されたC<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、置換されたC<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールオキシ基、置換されたC<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールチオ基、置換されたC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基は、

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CDH<sub>2</sub>、-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、-CFH<sub>2</sub>、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルキル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルケニル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルキニル基、又はC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルコキシ基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CDH<sub>2</sub>、-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、-CFH<sub>2</sub>、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)、-Si(Q<sub>13</sub>)(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>)、-Ge(Q<sub>13</sub>)(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>)、-B(Q<sub>16</sub>)(Q<sub>17</sub>)、-P(=O)(Q<sub>18</sub>)(Q<sub>19</sub>)、及び-P(Q<sub>18</sub>)(Q<sub>19</sub>)のうちの少なくとも一つで置換された、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルキル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルケニル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルキニル基、又はC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルコキシ基；

C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、又は一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CDH<sub>2</sub>、-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、-CFH<sub>2</sub>、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルキル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルケニル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルキニル基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルコキシ基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)、-Si(Q<sub>23</sub>)(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>)、-Ge(Q<sub>23</sub>)(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>)、-B(Q<sub>26</sub>)(Q<sub>27</sub>)、-P(=O)(Q<sub>28</sub>)(Q<sub>29</sub>)、及び-P(Q<sub>28</sub>)(Q<sub>29</sub>)のうちの少なくとも一つで置換された、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、又は一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；或いは

-N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)、-Si(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>)、-Ge(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>)、

10

20

30

40

50

Q<sub>34</sub> ) ( Q<sub>35</sub> ) 、 - B ( Q<sub>36</sub> ) ( Q<sub>37</sub> ) 、 - P ( = O ) ( Q<sub>38</sub> ) ( Q<sub>39</sub> ) 、 又は - P ( Q<sub>38</sub> ) ( Q<sub>39</sub> ) ; であり、

前記 Q<sub>1</sub> ないし Q<sub>9</sub> 及び Q<sub>33</sub> ないし Q<sub>35</sub> は、それぞれ独立して、

- C H<sub>3</sub> 、 - C D<sub>3</sub> 、 - C D<sub>2</sub> H 、 - C D H<sub>2</sub> 、 - C H<sub>2</sub> C H<sub>3</sub> 、 - C H<sub>2</sub> C D<sub>3</sub> 、 - C H<sub>2</sub> C D<sub>2</sub> H 、 - C H<sub>2</sub> C D H<sub>2</sub> 、 - C H D C H<sub>3</sub> 、 - C H D C D<sub>2</sub> H 、 - C H D C D H<sub>2</sub> 、 - C H D C D<sub>3</sub> 、 - C D<sub>2</sub> C D<sub>3</sub> 、 - C D<sub>2</sub> C D<sub>2</sub> H 、 又は - C D<sub>2</sub> C D H<sub>2</sub> ;

n - プロピル基、イソプロピル基、n - プチル基、イソブチル基、sec - ブチル基、tert - ブチル基、n - ペンチル基、イソペンチル基、sec - ペンチル基、tert - ペンチル基、フェニル基、又はナフチル基；或いは

重水素、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub> アルキル基及びフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、n - プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、イソブチル基、sec - ブチル基、tert - ブチル基、n - ペンチル基、イソペンチル基、sec - ペンチル基、tert - ペンチル基、フェニル基、又はナフチル基；或いは

前記 Q<sub>11</sub> ないし Q<sub>19</sub> 、 Q<sub>21</sub> ないし Q<sub>29</sub> 、 Q<sub>31</sub> 、 Q<sub>32</sub> 、 及び Q<sub>36</sub> ないし Q<sub>39</sub> は、それぞれ独立して、水素、重水素、C<sub>1</sub> - C<sub>60</sub> アルキル基、或いはC<sub>6</sub> - C<sub>60</sub> アリール基である。

#### 【0008】

上記目的を達成するためになされた本発明の一態様による有機発光素子は、第1電極と、第2電極と、前記第1電極と前記第2電極との間に配置されて発光層を含む有機層と、を備え、前記有機層は、前記有機金属化合物を1種以上含む。

#### 【0009】

前記有機金属化合物は、前記有機層の発光層に含まれ、該発光層に含まれる有機金属化合物は、ドーパントの役割を行い得る。

#### 【発明の効果】

#### 【0010】

本発明の有機金属化合物は、優秀な電気的特性及び熱的安定性を有し、有機金属化合物を用いた有機発光素子は、優秀な駆動電圧、電流密度、外部量子発光効率、ロールオフ比、及び寿命特性を有する。

#### 【図面の簡単な説明】

#### 【0011】

【図1】一具現例による有機発光素子を概略的に示した断面図である。

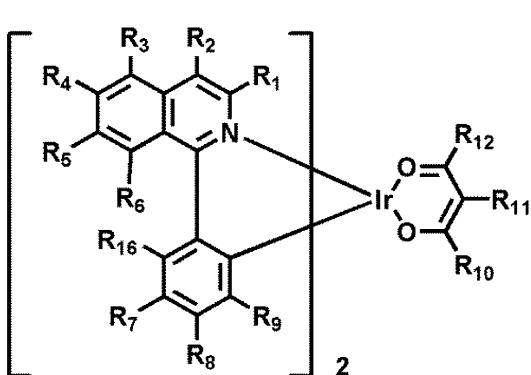
#### 【発明を実施するための形態】

#### 【0012】

本発明の有機金属化合物は、下記化学式1で表される。

#### 【0013】

#### 【化1】



#### 【0014】

上記化学式1で、R<sub>1</sub>ないしR<sub>12</sub>、及びR<sub>16</sub>は、それぞれ独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-SF<sub>5</sub>、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ

10

20

30

40

50

基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルキル基、置換若しくは非置換のC<sub>2</sub> - C<sub>6</sub>アルケニル基、置換若しくは非置換のC<sub>2</sub> - C<sub>6</sub>アルキニル基、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルコキシ基、置換若しくは非置換のC<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub> - C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換のC<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub> - C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換のC<sub>6</sub> - C<sub>6</sub>アリール基、置換若しくは非置換のC<sub>6</sub> - C<sub>6</sub>アリールオキシ基、置換若しくは非置換のC<sub>6</sub> - C<sub>6</sub>アリールチオ基、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基 (non-aromatic condensed polycyclic group)、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基 (non-aromatic condensed heteropoly cyclic group)、-N(Q<sub>1</sub>)(Q<sub>2</sub>)、-Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>)、-Ge(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>)、-B(Q<sub>6</sub>)(Q<sub>7</sub>)、-P(=O)(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>)、又は-P(Q<sub>8</sub>)(Q<sub>9</sub>)である。Q<sub>1</sub>ないしQ<sub>9</sub>についての説明は、本明細書に記載された箇所を参照する。

## 【0015】

例えば、R<sub>1</sub>ないしR<sub>12</sub>、及びR<sub>16</sub>は、それぞれ独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、-SF<sub>5</sub>、C<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基、又はC<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>アルコキシ基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CDH<sub>2</sub>、-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、-CFH<sub>2</sub>、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub>アルキル基、シクロペンチル基、シクロヘキシリル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基 (bicyclo[1.1.1]pentyl)、ビシクロ[2.1.1]ヘキシリル基 (bicyclo[2.1.1]hexyl)、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基 (bicyclo[2.2.1]heptyl)、ビシクロ[2.2.2]オクチル基 (bicyclo[2.2.2]octyl)、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、及びピリミジニル基のうちの少なくとも一つで置換された、C<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基又はC<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>アルコキシ基；

シクロペンチル基、シクロヘキシリル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシリル基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、ビシクロ[2.2.2]オクチル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、ブリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントロリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、イミダゾピリジニル基、又はイミダゾピリミジニル基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CDH<sub>2</sub>、-CF<sub>3</sub>、

10

20

30

40

50

- C F<sub>2</sub>H、- C F H<sub>2</sub>、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペニテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシル基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、ビシクロ[2.2.2]オクチル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、ブリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントロリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、及び - S i (Q<sub>33</sub>) (Q<sub>34</sub>) (Q<sub>35</sub>) のうちから選択される少なくとも一つで置換された、シクロペニチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペニテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシル基、ビシクロ[2.2.2]オクチル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、ブリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントロリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、イミダゾピリジニル基、又はイミダゾピリミジニル基；或いは

- N (Q<sub>1</sub>) (Q<sub>2</sub>)、- S i (Q<sub>3</sub>) (Q<sub>4</sub>) (Q<sub>5</sub>)、- G e (Q<sub>3</sub>) (Q<sub>4</sub>) (Q<sub>5</sub>)、- B (Q<sub>6</sub>) (Q<sub>7</sub>)、- P (= O) (Q<sub>8</sub>) (Q<sub>9</sub>)、又は - P (Q<sub>8</sub>) (Q<sub>9</sub>)；であり、

Q<sub>1</sub>ないしQ<sub>9</sub>、及びQ<sub>33</sub>ないしQ<sub>35</sub>は、それぞれ独立して、

- C H<sub>3</sub>、- C D<sub>3</sub>、- C D<sub>2</sub>H、- C D H<sub>2</sub>、- C H<sub>2</sub>C H<sub>3</sub>、- C H<sub>2</sub>C D<sub>3</sub>、- C H<sub>2</sub>C D<sub>2</sub>H、- C H<sub>2</sub>C D H<sub>2</sub>、- C H D C D<sub>3</sub>、- C D<sub>2</sub>C D<sub>3</sub>、- C D<sub>2</sub>C D<sub>2</sub>H、又は - C D<sub>2</sub>C D H<sub>2</sub>；

n - プロピル基、イソプロピル基、n - プチル基、イソブチル基、sec - ブチル基、tert - ブチル基、n - ペンチル基、イソペンチル基、sec - ペンチル基、tert - ペンチル基、フェニル基、又はナフチル基；或いは

重水素、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub>アルキル基、及びフェニル基のうちから選択される少なくとも一つで置換された、n - プロピル基、イソプロピル基、n - プチル基、イソブチル基、sec - ブチル基、tert - ブチル基、n - ペンチル基、イソペンチル基、sec - ペンチル基、tert - ペンチル基、フェニル基、又はナフチル基；である。

一具現例によると、R<sub>1</sub>ないしR<sub>9</sub>、及びR<sub>16</sub>は、それぞれ独立して、水素、重水素、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルキル基、置換若しくは非置換のC<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又は-Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>)である。Q<sub>3</sub>ないしQ<sub>5</sub>についての説明は、それぞれ本明細書に記載された箇所を参照する。

### 【0017】

他の具現例によると、R<sub>1</sub>ないしR<sub>12</sub>、及びR<sub>16</sub>は、それぞれ独立して、水素、重水素、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、sec-ブチル基、イソブチル基、tert-ブチル基、n-ペンチル基、tert-ペンチル基、ネオペンチル基、イソペンチル基、sec-ペンチル基、3-ペンチル基、sec-イソペンチル基、n-ヘキシル基、イソヘキシル基、sec-ヘキシル基、tert-ヘキシル基、n-ヘプチル基、イソヘプチル基、sec-ヘプチル基、tert-ヘプチル基、n-オクチル基、イソオクチル基、sec-オクチル基、tert-オクチル基、n-ノニル基、イソノニル基、sec-ノニル基、tert-ノニル基、n-デシル基、イソデシル基、sec-デシル基、tert-デシル基、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペントキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロベンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシル基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、ビシクロ[2.2.2]オクチル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、カルバゾリル基、フルオレニル基、ジベンゾシロリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、又は-Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>)；

少なくとも1つの重水素で置換された、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、sec-ブチル基、イソブチル基、tert-ブチル基、n-ペンチル基、tert-ペンチル基、ネオペンチル基、イソペンチル基、sec-ペンチル基、3-ペンチル基、sec-イソペンチル基、n-ヘキシル基、イソヘキシル基、sec-ヘキシル基、tert-ヘキシル基、n-ヘプチル基、イソヘプチル基、sec-ヘプチル基、tert-ヘプチル基、n-オクチル基、イソオクチル基、sec-オクチル基、tert-オクチル基、n-ノニル基、イソノニル基、sec-ノニル基、tert-ノニル基、n-デシル基、イソデシル基、sec-デシル基、tert-デシル基、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペントキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロベンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシル基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、ビシクロ[2.2.2]オクチル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、カルバゾリル基、フルオレニル基、ジベンゾシロリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、又は-Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>)；或いは

重水素及びC<sub>1</sub> - C<sub>10</sub>アルキル基のうちの少なくとも一つで置換された、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペントキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロベンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシル基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、ビシクロ[2.2.2]オクチル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、カルバゾリル基、フルオレニル基、ジベンゾシロリル基、ジベンゾフラニル基、又はジベンゾチオフェニル基；である。Q<sub>3</sub>ないしQ<sub>5</sub>についての説明は、それぞれ本明細書に記載された箇所を参照する。

### 【0018】

更に他の具現例によると、R<sub>1</sub>ないしR<sub>12</sub>、及びR<sub>16</sub>は、それぞれ独立して、水素、重水素、-F、シアノ基、ニトロ基、-SF<sub>5</sub>、-CH<sub>3</sub>、-CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CDH<sub>2</sub>、-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、-CFH<sub>2</sub>、下記化学式9-1~9-66で表される基、下記化学式9-1~9-66のうちの少なくとも1つの水素が重水素で置換された基、下記化学式10-1~10-249で表される基、下記化学式10-1~10-249のうちの少なくとも1つの水素が重水素で置換された基、又は-Si(Q<sub>3</sub>)(Q<sub>4</sub>)(Q<sub>5</sub>)（但し、Q<sub>3</sub>ないしQ<sub>5</sub>についての説明は、それぞれ本明細書に記載された箇所を参照する）であるが、それらに限定されるものではない。

### 【0019】

10

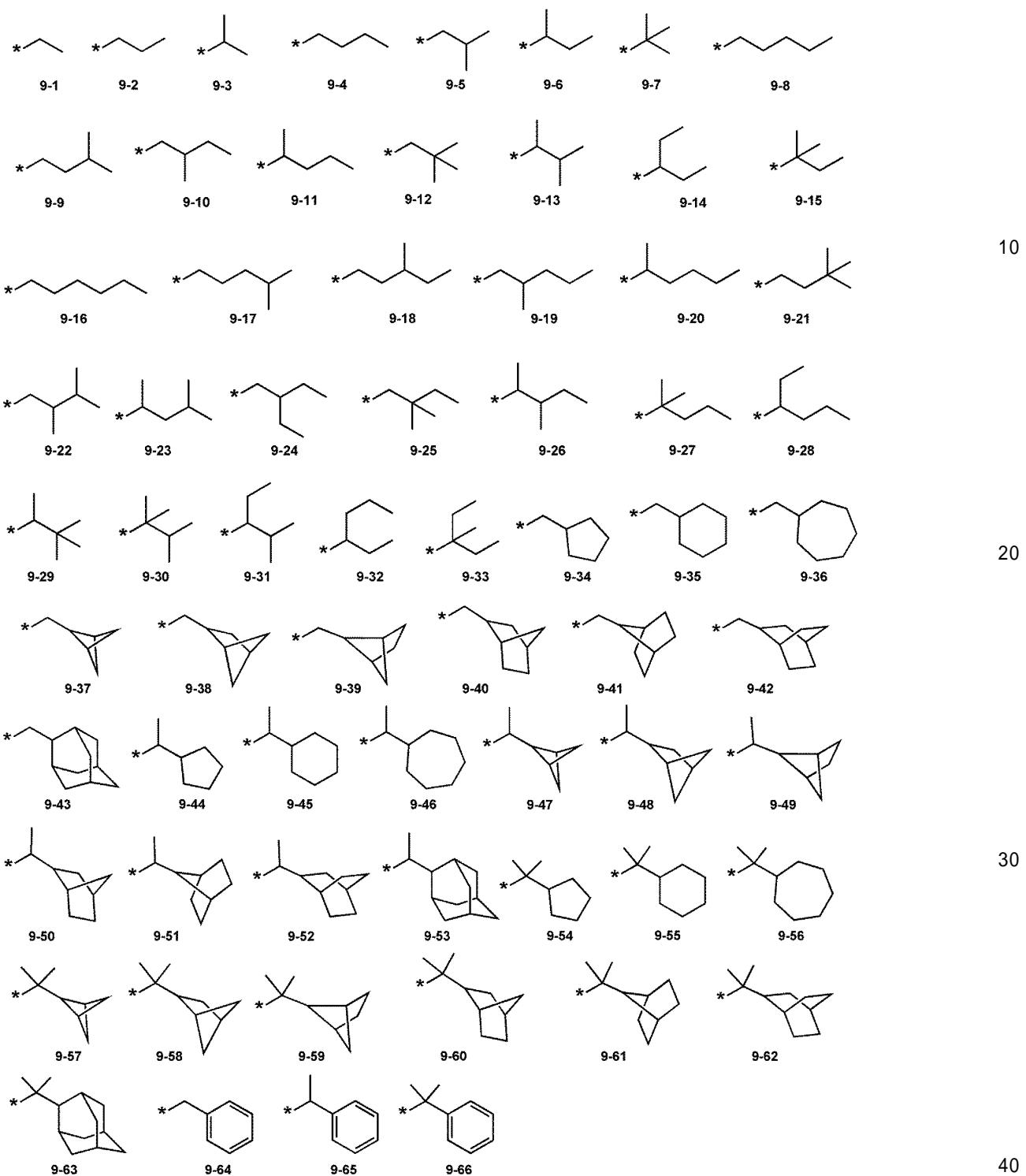
20

30

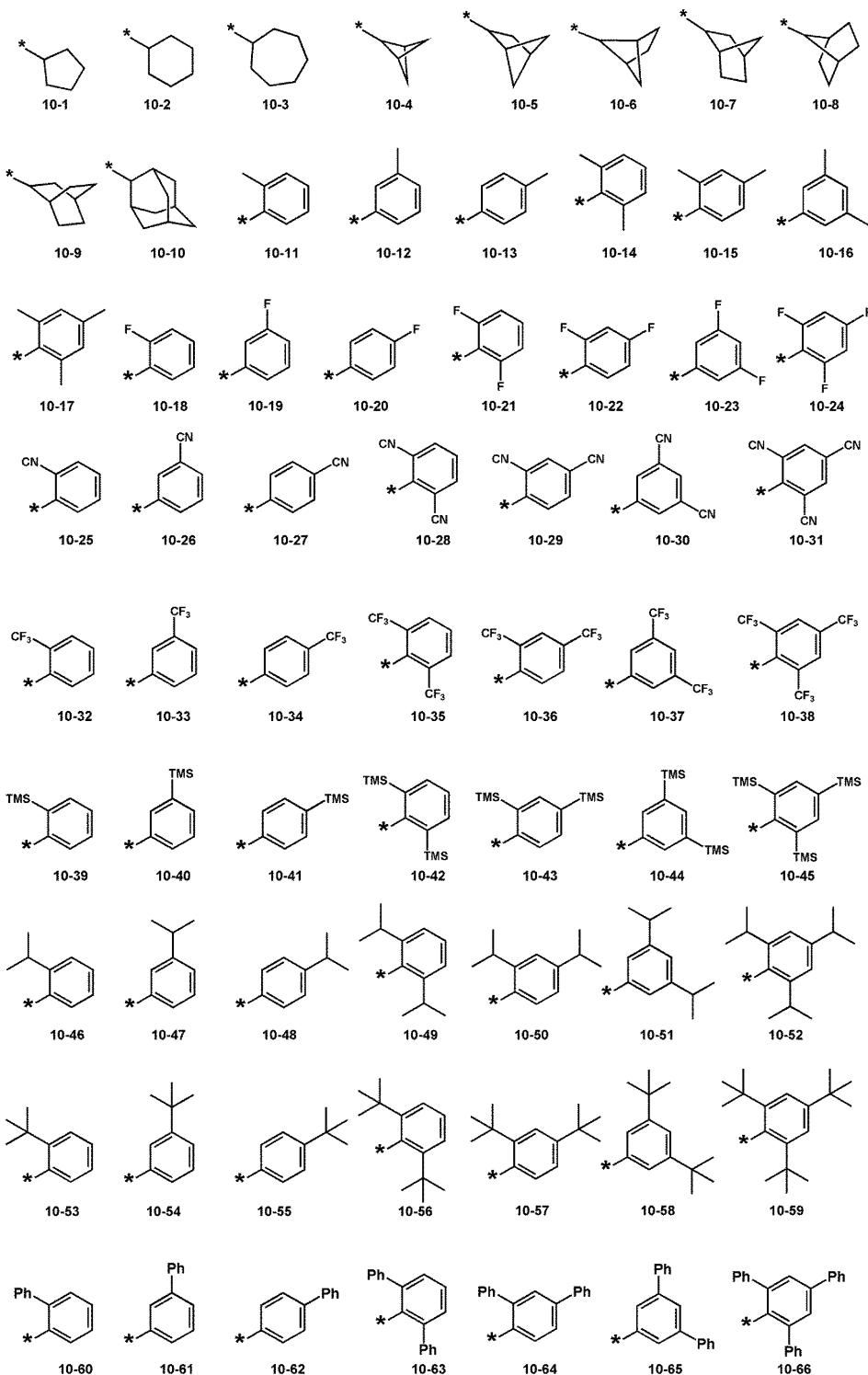
40

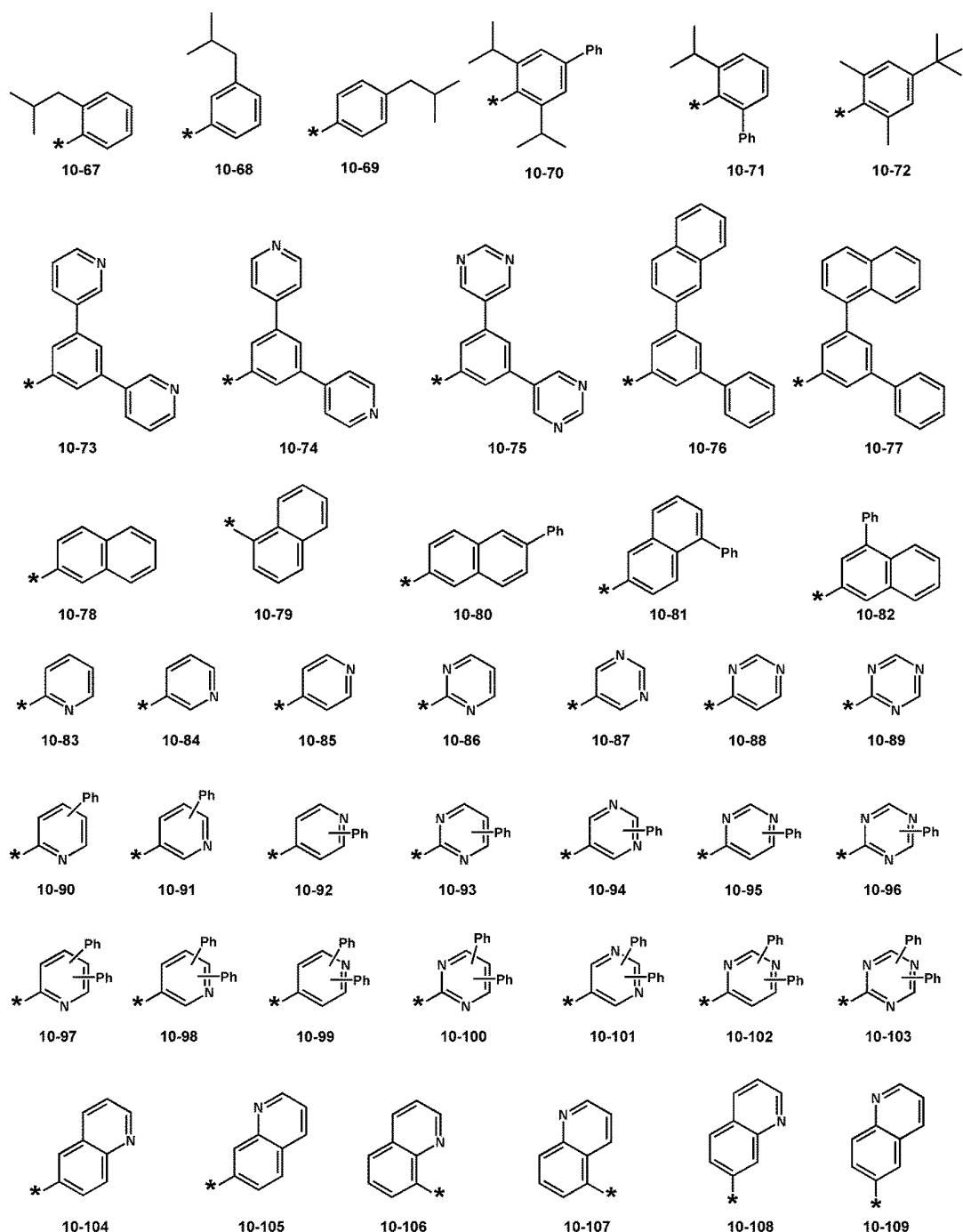
50

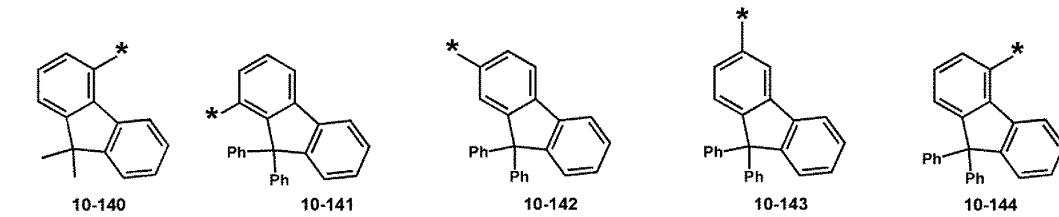
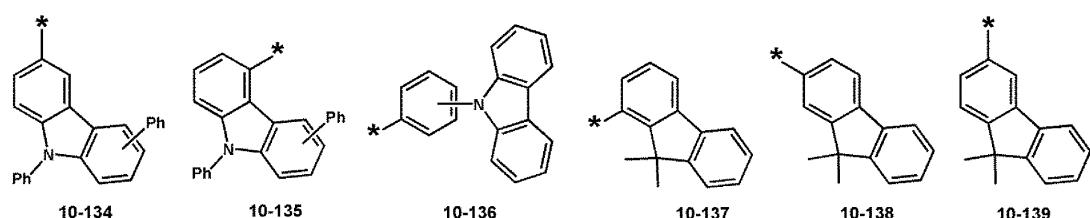
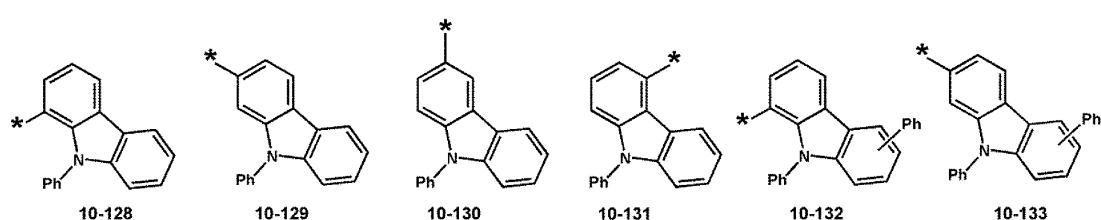
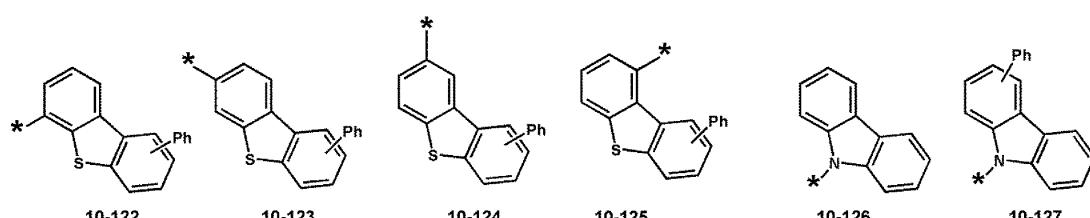
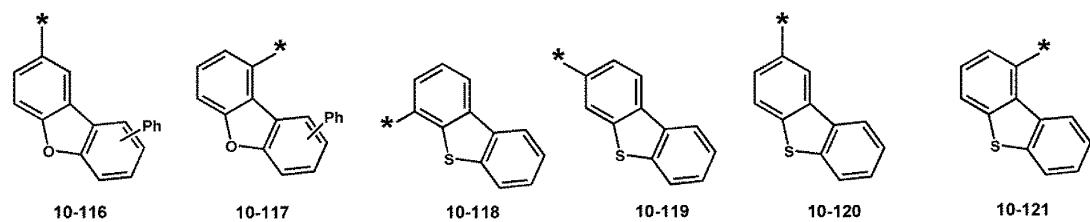
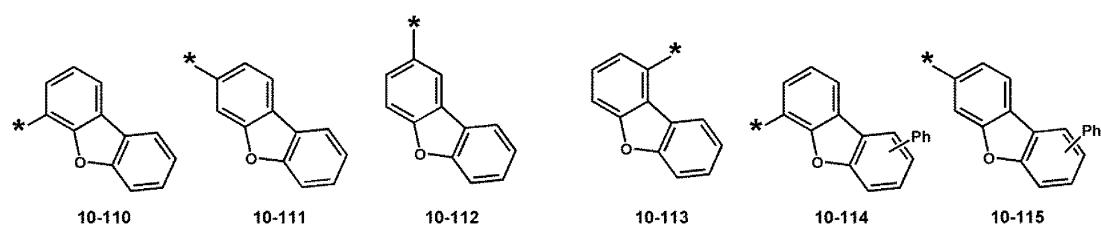
## 【化(9-1) - (9-66)】



## 【化(10-1) - (10-249)】







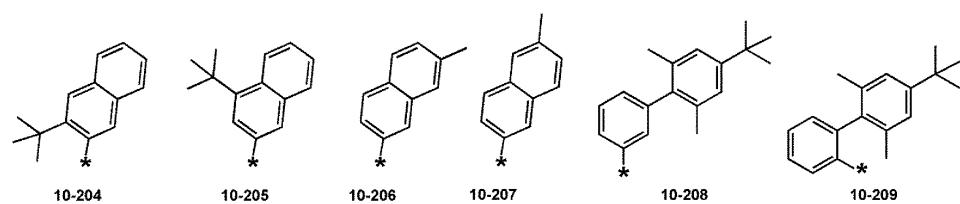
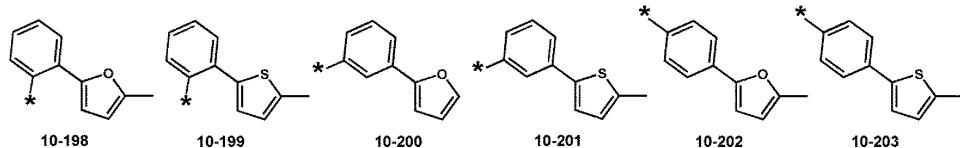
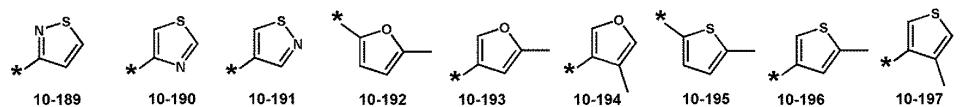
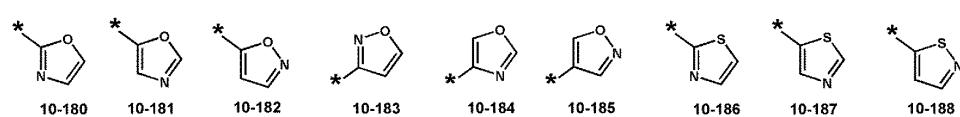
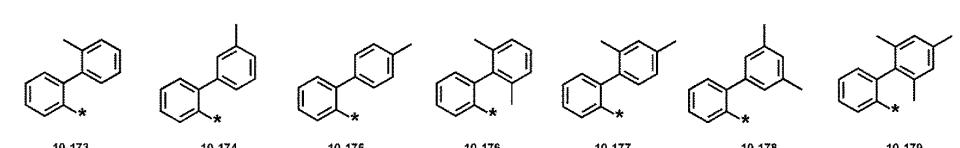
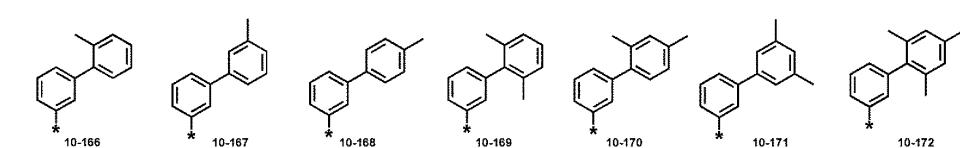
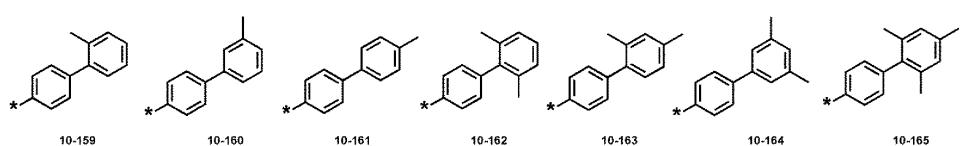
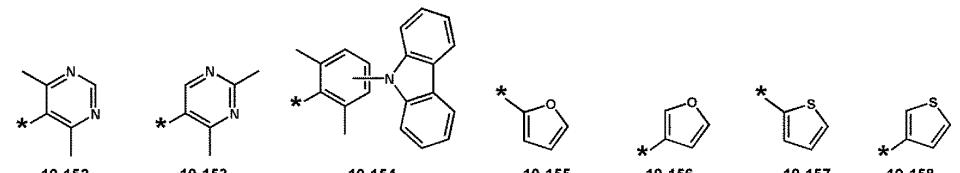
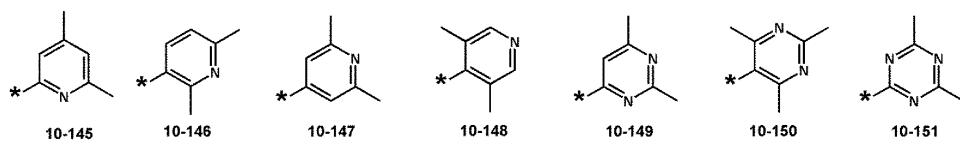
10

20

30

40

50



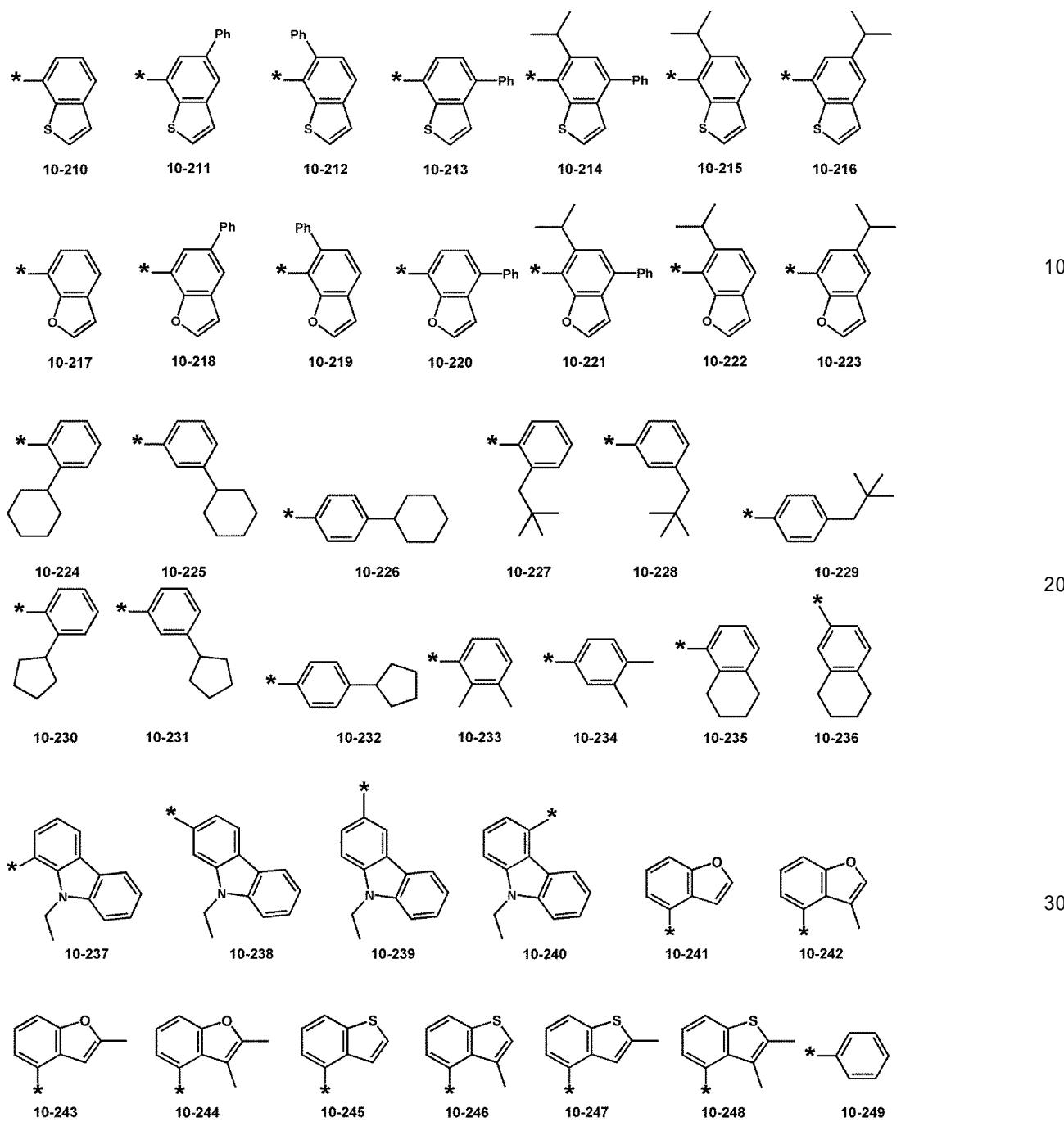
10

20

30

40

50



【 0 0 2 0 】

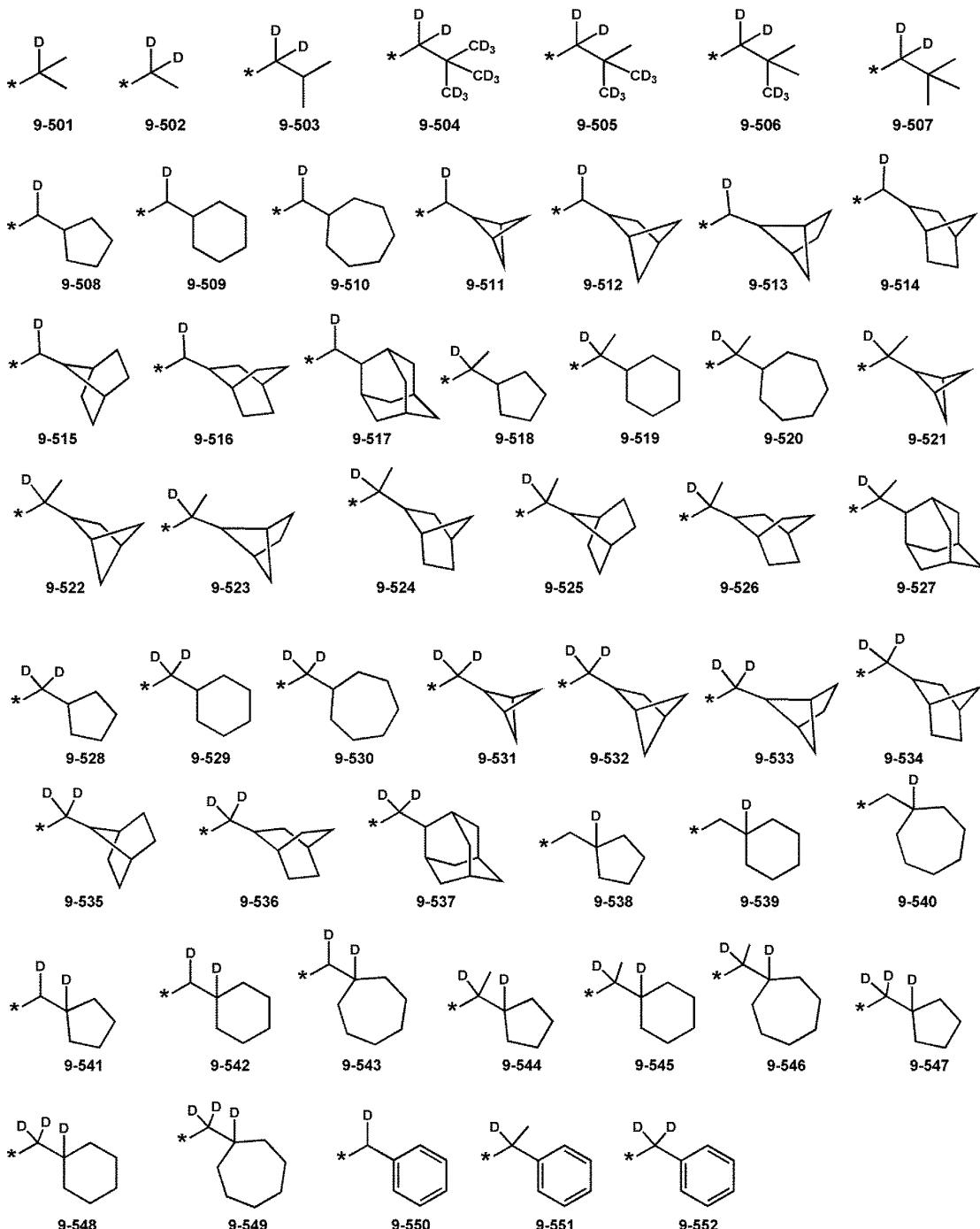
上記化学式 9 - 1 ~ 9 - 6 6、及び化学式 1 0 - 1 ~ 1 0 - 2 4 9 で、 \* は、隣接原子との結合サイトであり、 Ph は、フェニル基であり、 T M S は、トリメチルシリル基である。

【 0 0 2 1 】

上記「化学式 9 - 1 ~ 9 - 6 6 のうちの少なくとも 1 つの水素が重水素で置換された基」は、例えば下記化学式 9 - 5 0 1 ~ 9 - 5 5 2 のうちの一つで表される基である。

【 0 0 2 2 】

## 【化(9-501) - (9-552)】



## 【0023】

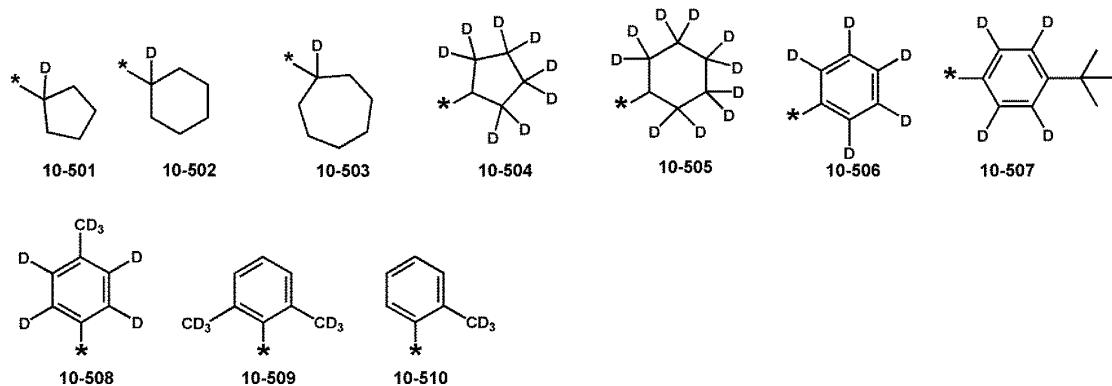
上記「化学式 10-1 ~ 10-249 のうちの少なくとも 1 つの水素が重水素で置換された基」は、例えば下記化学式 10-501 ~ 10-510 のうちの一つで表される基である。

## 【0024】

40

50

## 【化(10-501) - (10-510)】

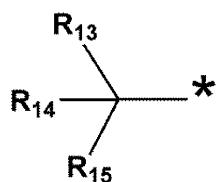


## 【0025】

上記化学式1の、R<sub>1</sub>ないしR<sub>6</sub>のうちの少なくとも一つは、それぞれ独立して、下記化学式2で表される基のうちから選択される。

## 【0026】

## 【化2】



20

## 【0027】

上記化学式2に含まれる炭素の個数は、4以上であり（例えば、4~20、4~15、又は4~10である）、

上記化学式2で、R<sub>13</sub>は、水素、重水素、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、重水素含有C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又は重水素含有C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基であり、

上記化学式2で、R<sub>14</sub>及びR<sub>15</sub>は、互いに独立して、C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、重水素含有C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又は重水素含有C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基であり、

\*は、隣接原子との結合サイトである。

## 【0028】

本明細書において、「重水素含有C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基」及び「重水素含有C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基」という用語は、少なくとも1つの重水素で置換されたC<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基及びC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基を意味する。例えば、重水素含有メチル基とは、-CDH<sub>2</sub>、-CD<sub>2</sub>H、及び-CD<sub>3</sub>を示す。

## 【0029】

本明細書において、「C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基」の例としては、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、sec-ブチル基、イソブチル基、tert-ブチル基、n-ペンチル基、tert-ペンチル基、ネオペンチル基、イソペンチル基、sec-ペンチル基、3-ペンチル基、sec-イソペンチル基、n-ヘキシル基、イソヘキシル基、sec-ヘキシル基、tert-ヘキシル基、n-ヘプチル基、イソヘプチル基、sec-ヘプチル基、tert-ヘプチル基、n-オクチル基、イソオクチル基、sec-オクチル基、tert-オクチル基、n-ノニル基、イソノニル基、sec-ノニル基、tert-ノニル基、n-デシル基、イソデシル基、sec-デシル基、tert-デシル基などが挙げられるが、それらに限定されるものではない。

## 【0030】

30

40

50

本明細書において、「C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基」の例としては、シクロペンチル基、シクロヘキシリ基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシリ基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、ビシクロ[2.2.2]オクチル基などが挙げられるが、それらに限定されるものではない。

#### 【0031】

—具現例によると、上記化学式1の、R<sub>2</sub>ないしR<sub>5</sub>のうちの一つは、上記化学式2で表される基である。

#### 【0032】

他の具現例によると、上記化学式1の、R<sub>2</sub>ないしR<sub>5</sub>のうちの一つは、上記化学式2で表される基であり、上記化学式2で表される基ではない残りのR<sub>1</sub>ないしR<sub>6</sub>は、水素である。 10

#### 【0033】

更に他の具現例によると、上記化学式1で、

1) R<sub>2</sub>は、上記化学式2で表される基であり、R<sub>1</sub>、及びR<sub>3</sub>ないしR<sub>6</sub>は、水素であるか、

2) R<sub>3</sub>は、上記化学式2で表される基であり、R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、及びR<sub>4</sub>ないしR<sub>6</sub>は、水素であるか、

3) R<sub>4</sub>は、上記化学式2で表される基であり、R<sub>1</sub>ないしR<sub>3</sub>、R<sub>5</sub>、及びR<sub>6</sub>は、水素であるか、 20

4) R<sub>5</sub>は、上記化学式2で表される基であり、R<sub>1</sub>ないしR<sub>4</sub>、及びR<sub>6</sub>は、水素であるか、

5) R<sub>5</sub>は、上記化学式2で表される基であり、R<sub>3</sub>は、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル基、又は置換若しくは非置換のC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基であり、R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>4</sub>、及びR<sub>6</sub>は、水素であるか、

6) R<sub>4</sub>は、上記化学式2で表される基であり、R<sub>2</sub>は、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル基、又は置換若しくは非置換のC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基であり、R<sub>1</sub>、R<sub>3</sub>、R<sub>5</sub>、及びR<sub>6</sub>は、水素であるか、

7) R<sub>2</sub>は、上記化学式2で表される基であり、R<sub>5</sub>は、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル基、又は置換若しくは非置換のC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基であり、R<sub>1</sub>、R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>、及びR<sub>6</sub>は、水素であるか、 30

8) R<sub>4</sub>は、上記化学式2で表される基であり、R<sub>5</sub>は、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル基、又は置換若しくは非置換のC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基であり、R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、及びR<sub>6</sub>は、水素であるか、或いは、

9) R<sub>4</sub>は、上記化学式2で表される基であり、R<sub>3</sub>は、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル基、又は置換若しくは非置換のC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基であり、R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>5</sub>、及びR<sub>6</sub>は、水素である。

#### 【0034】

更に他の具現例によると、上記化学式1のR<sub>7</sub>、及びR<sub>9</sub>は、水素ではない。

#### 【0035】

更に他の具現例によると、上記化学式1のR<sub>7</sub>、及びR<sub>9</sub>は、水素ではなく、R<sub>8</sub>及びR<sub>16</sub>は、水素である。 40

#### 【0036】

更に他の具現例によると、上記化学式1のR<sub>16</sub>は、水素である。

#### 【0037】

更に他の具現例によると、上記化学式1のR<sub>7</sub>、及びR<sub>9</sub>は、水素ではなく、R<sub>7</sub>及びR<sub>9</sub>は、互いに同一である。

#### 【0038】

更に他の具現例によると、上記化学式1のR<sub>7</sub>、及びR<sub>9</sub>は、水素ではなく、R<sub>7</sub>及びR<sub>9</sub>は、互いに異なる。

10

20

30

40

50

**【 0 0 3 9 】**

更に他の具現例によると、上記化学式1のR<sub>7</sub>、及びR<sub>9</sub>は、水素ではなく、R<sub>7</sub>及びR<sub>9</sub>は、互いに異なり、R<sub>7</sub>に含まれる炭素の個数は、R<sub>9</sub>に含まれる炭素の個数よりも多い。

**【 0 0 4 0 】**

更に他の具現例によると、上記化学式1のR<sub>7</sub>及びR<sub>9</sub>は、互いに独立して、置換若しくは非置換のC<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>アルキル基、置換若しくは非置換のC<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又は置換若しくは非置換のC<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリール基である。

**【 0 0 4 1 】**

更に他の具現例によると、上記化学式1のR<sub>7</sub>及びR<sub>9</sub>のうちの少なくとも一つは、互いに独立して、置換若しくは非置換のC<sub>2</sub> - C<sub>60</sub>アルキル基、置換若しくは非置換のC<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又は置換若しくは非置換のC<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリール基である。

**【 0 0 4 2 】**

更に他の具現例によると、上記化学式2で、R<sub>13</sub>は、水素又は重水素である。

**【 0 0 4 3 】**

更に他の具現例によると、上記化学式2で、R<sub>13</sub>は、C<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基、重水素含有C<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又は重水素含有C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基である。

**【 0 0 4 4 】**

更に他の具現例によると、上記化学式2で、R<sub>14</sub>とR<sub>15</sub>とは、互いに異なる。

**【 0 0 4 5 】**

更に他の具現例によると、上記化学式2で、

R<sub>13</sub>は、水素、重水素、-CH<sub>3</sub>、-CDH<sub>2</sub>、-CD<sub>2</sub>H又は-CD<sub>3</sub>であり、

R<sub>14</sub>及びR<sub>15</sub>は、互いに独立して、

メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、sec-ブチル基、イソブチル基、tert-ブチル基、n-ペンチル基、tert-ペンチル基、ネオペンチル基、イソペンチル基、sec-ペンチル基、3-ペンチル基、sec-イソペンチル基、n-ヘキシル基、イソヘキシル基、sec-ヘキシル基、tert-ヘキシル基、n-ヘプチル基、イソヘプチル基、sec-ヘプチル基、tert-ヘプチル基、n-オクチル基、イソオクチル基、sec-オクチル基、tert-オクチル基、n-ノニル基、イソノニル基、sec-ノニル基、tert-ノニル基、n-デシル基、イソデシル基、sec-デシル基、tert-デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシル基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、又はビシクロ[2.2.2]オクチル基；或いは

少なくとも1つの重水素で置換された、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、sec-ブチル基、イソブチル基、tert-ブチル基、n-ペンチル基、tert-ペンチル基、ネオペンチル基、イソペンチル基、sec-ペンチル基、3-ペンチル基、sec-イソペンチル基、n-ヘキシル基、イソヘキシル基、sec-ヘキシル基、tert-ヘキシル基、n-ヘプチル基、イソヘプチル基、sec-ヘプチル基、tert-ヘプチル基、n-オクチル基、イソオクチル基、sec-オクチル基、tert-オクチル基、n-ノニル基、イソノニル基、sec-ノニル基、tert-ノニル基、n-デシル基、イソデシル基、sec-デシル基、tert-デシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、ビシクロ[1.1.1]ペンチル基、ビシクロ[2.1.1]ヘキシル基、ビシクロ[2.2.1]ヘプチル基、又はビシクロ[2.2.2]オクチル基；である。

**【 0 0 4 6 】**

更に他の具現例によると、上記化学式2で、R<sub>14</sub>及びR<sub>15</sub>は、互いに独立して、-CH<sub>3</sub>、-CDH<sub>2</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CD<sub>3</sub>、上記化学式9-1~9-33で表される基、上記化学式9-1~9-33のうちの少なくとも1つの水素が重水素で置換された基、上記

10

20

30

40

50

化学式 10 - 1 ~ 10 - 10 で表される基、及び上記化学式 10 - 1 ~ 10 - 10 のうちの少なくとも 1 つの水素が重水素で置換された基のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

**【0047】**

更に他の具現例によると、上記化学式 2 で、R<sub>13</sub>ないし R<sub>15</sub>がいずれもメチル基である場合は、除かれる。

**【0048】**

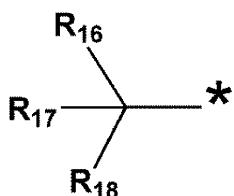
更に他の具現例によると、上記化学式 2 で、R<sub>13</sub>ないし R<sub>15</sub>がいずれも同一である場合は、除かれる。

**【0049】**

一方、上記化学式 1 の R<sub>10</sub> と R<sub>12</sub>との少なくとも一つは、互いに独立して、下記化学式 3 で表される基である。

**【0050】**

**【化3】**



10

20

**【0051】**

上記化学式 3 で、R<sub>16</sub>ないし R<sub>18</sub>は、それぞれ独立して、  
水素、重水素、C<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリール基又はC<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>ヘテロアリール基；或いは  
重水素及びC<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基の少なくとも一つで置換された、C<sub>1</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>6</sub> - C<sub>60</sub>アリール基又はC<sub>1</sub> - C<sub>60</sub>ヘテロアリール基；であり、  
\* は、隣接原子との結合サイトである。

**【0052】**

例えば、上記化学式 3 で、R<sub>16</sub>ないし R<sub>18</sub>は、それぞれ独立して、水素又は重水素である。

30

**【0053】**

他の例として、上記化学式 3 で、R<sub>16</sub>ないし R<sub>18</sub>のうちの 1 個以上は、水素及び重水素ではない。即ち、上記化学式 3 は、2 個以下のbenzylic protonを有する。

**【0054】**

更に他の例として、上記化学式 3 で、R<sub>16</sub>ないし R<sub>18</sub>のうちの 2 個以上は、水素及び重水素ではない。即ち、上記化学式 3 は、1 個以下のbenzylic protonを有する。

40

**【0055】**

一具現例によると、上記化学式 3 で、  
R<sub>16</sub>ないし R<sub>18</sub>は、それぞれ独立して、水素又は重水素であるか、  
R<sub>16</sub>ないし R<sub>18</sub>は、それぞれ独立して、メチル基又は重水素含有メチル基であるか、  
R<sub>16</sub>及び R<sub>17</sub>は、互いに独立して、水素又は重水素であり、R<sub>18</sub>は、メチル基又は重水素含有メチル基であるか、

R<sub>16</sub>は、メチル基又は重水素含有メチル基であり、R<sub>17</sub>及び R<sub>18</sub>は、互いに独立して、C<sub>2</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基又は重水素含有 C<sub>2</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基であるか、

R<sub>16</sub>及び R<sub>17</sub>は、互いに独立して、水素又は重水素であり、R<sub>18</sub>は、C<sub>2</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基又は重水素含有 C<sub>2</sub> - C<sub>20</sub>アルキル基であるか、或いは

50

R<sub>16</sub> 及び R<sub>17</sub> は、互いに独立して、メチル基又は重水素含有メチル基であり、R<sub>18</sub> は、C<sub>2</sub> - C<sub>20</sub> アルキル基又は重水素含有 C<sub>2</sub> - C<sub>20</sub> アルキル基である。

#### 【0056】

「C<sub>2</sub> - C<sub>20</sub> アルキル基又は重水素含有 C<sub>2</sub> - C<sub>20</sub> アルキル基」の例としては、エチル基、n - プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、sec - ブチル基、イソブチル基、tert - ブチル基、n - ペンチル基、tert - ペンチル基、ネオペンチル基、イソペンチル基、sec - ペンチル基、3 - ペンチル基、sec - イソペンチル基、n - ヘキシル基、イソヘキシル基、sec - ヘキシル基、tert - ヘキシル基、n - ヘプチル基、イソヘプチル基、sec - ヘプチル基、tert - ヘプチル基、n - オクチル基、イソオクチル基、sec - オクチル基、tert - オクチル基、n - ノニル基、イソノニル基、sec - ノニル基、tert - ノニル基、n - デシル基、イソデシル基、sec - デシル基、及び tert - デシル基；或いは

少なくとも 1 つの重水素で置換された、エチル基、n - プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、sec - ブチル基、イソブチル基、tert - ブチル基、n - ペンチル基、tert - ペンチル基、ネオペンチル基、イソペンチル基、sec - ペンチル基、3 - ペンチル基、sec - イソペンチル基、n - ヘキシル基、イソヘキシル基、sec - ヘキシル基、tert - ヘキシル基、n - ヘプチル基、イソヘプチル基、sec - ヘプチル基、tert - ヘプチル基、n - オクチル基、イソオクチル基、sec - オクチル基、tert - オクチル基、n - ノニル基、イソノニル基、sec - ノニル基、tert - ノニル基、n - デシル基、イソデシル基、sec - デシル基、及び tert - デシル基；が挙げられるが、それらに限定されるものではない。

#### 【0057】

他の具現例によると、上記化学式 1 の R<sub>10</sub> と R<sub>12</sub> とは、互いに同一である。

#### 【0058】

更に他の具現例によると、上記化学式 1 の R<sub>10</sub> と R<sub>12</sub> とは、互いに異なる。

#### 【0059】

例えば、上記化学式 1 の R<sub>10</sub> は、エチル基であり、R<sub>12</sub> は、メチル基、n - プロピル基、又は iso - プロピル基であるが、それらに限定されるものではない。

#### 【0060】

更に他の具現例によると、上記化学式 1 及び 2 の R<sub>10</sub>、R<sub>12</sub>、及び R<sub>14</sub> のうちの少なくとも一つは、それぞれ独立して、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub> シクロアルキル基又は重水素含有 C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub> シクロアルキル基であるが、それらに限定されるものではない。

#### 【0061】

上記化学式 1 の R<sub>1</sub> ないし R<sub>9</sub>、及び R<sub>16</sub> のうちの 2 以上は、選択的に、それぞれ結合され、少なくとも 1 つの R<sub>1a</sub> で置換されたか若しくは置換されない C<sub>5</sub> - C<sub>30</sub> 炭素環式基、或いは少なくとも 1 つの R<sub>1a</sub> で置換されたか若しくは置換されない C<sub>2</sub> - C<sub>30</sub> ヘテロ環式基を形成する。

#### 【0062】

例えば、化学式 1 の R<sub>1</sub> ないし R<sub>9</sub>、及び R<sub>16</sub> のうちの 2 以上は、選択的に、それぞれ結合され、少なくとも 1 つの R<sub>1a</sub> で置換されたか若しくは置換されない、ペンタジエン基、シクロヘキサン基、シクロヘプタン基、アダマンタン基、ビシクロ - ヘプタン (bicyclo - heptanes) 基、ビシクロ - オクタン基、ベンゼン基、ビリジン基、ピリミジン基、ピラジン基、ピリダジン基、ナフタレン基、アントラセン基、テトラセン基、フェナントレン基、ジヒドロナフタレン基、フェナレン基、ベンゾフラン基、ベンゾチオフェン基、ベンゾセレノフェン基、インドール基、インデン基、ベンゾシロール基、アザベンゾフラン基、アザベンゾチオフェン基、アザベンゾセレノフェン基、アザインドール基、アザインデン基、及びアザベンゾシロール基などが形成されるが、それらに限定されるものではない。

#### 【0063】

R<sub>1a</sub> についての説明は、本明細書において、R<sub>7</sub> についての説明を参照する。

10

20

30

40

50

**【0064】**

—具現例によると、上記化学式1で表される有機金属化合物は、下記の<条件1>～<条件6>のうちの少なくとも一つを満足する。

**【0065】**

## &lt;条件1&gt;

上記化学式1のR<sub>1</sub>ないしR<sub>3</sub>、R<sub>5</sub>及びR<sub>6</sub>のうちの少なくとも一つは、水素ではない。

## &lt;条件2&gt;

上記化学式1のR<sub>7</sub>及びR<sub>9</sub>のうちの少なくとも一つは、互いに独立して、2以上の炭素を有する基である。

## &lt;条件3&gt;

上記化学式1のR<sub>7</sub>及びR<sub>9</sub>のうちの少なくとも一つは、互いに独立して、置換若しくは非置換のC<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルキル基、置換若しくは非置換のC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又は置換若しくは非置換のC<sub>6</sub>-C<sub>6</sub>アリール基である。

## &lt;条件4&gt;

上記化学式1のR<sub>10</sub>及びR<sub>12</sub>のうちの少なくとも一つは、互いに独立して、上記化学式3で表される基であり、上記化学式3で、R<sub>16</sub>ないしR<sub>18</sub>は、いずれも水素ではない。

## &lt;条件5&gt;

上記化学式1のR<sub>10</sub>及びR<sub>12</sub>のうちの少なくとも一つは、互いに独立して、上記化学式3で表される基であり、上記化学式3のR<sub>16</sub>ないしR<sub>18</sub>のうちの少なくとも一つは、それぞれ独立して、C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又はC<sub>6</sub>-C<sub>6</sub>アリール基；或いは重水素及びC<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基のうちの少なくとも一つで置換された、C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>アルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、又はC<sub>6</sub>-C<sub>6</sub>アリール基：である。

## &lt;条件6&gt;

上記化学式1のR<sub>10</sub>及びR<sub>12</sub>のうちの少なくとも一つは、互いに独立して、置換若しくは非置換のC<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基であり、

他の具現例によると、上記化学式1のR<sub>4</sub>は、上記化学式2で表される基であり、上記化学式2で、R<sub>13</sub>は、水素であり、R<sub>14</sub>は、メチル基であり、R<sub>15</sub>は、エチル基である場合、上述の<条件1>～<条件6>のうちの少なくとも一つを満足する。

**【0066】**

更に他の具現例によると、有機金属化合物は、下記化合物1～20のうちの一つであるが、それらに限定されるものではない。

**【0067】**

10

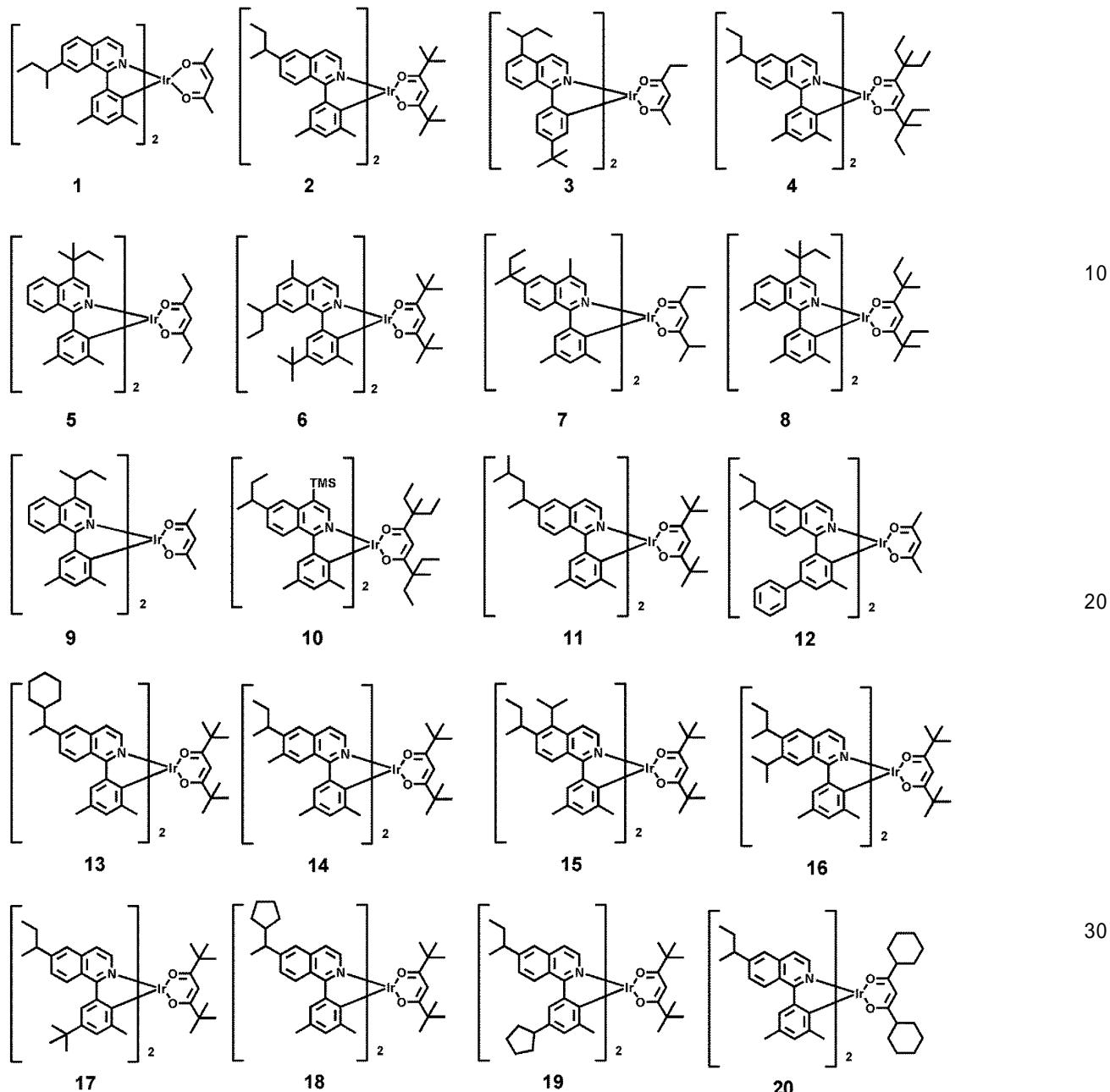
20

30

40

50

## 【化 1 - 2 0】

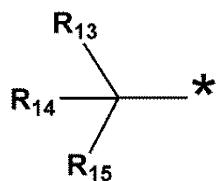


## 【0 0 6 8】

上記化学式 1 は、本明細書に記載した構造を有するが、R<sub>1</sub>ないしR<sub>6</sub>のうちの少なくとも一つは、それぞれ独立して、下記化学式 2 で表される基のうちから選択される。

## 【0 0 6 9】

## 【化 2】



## 【0 0 7 0】

上記化学式 2 に含まれる炭素の個数は、4 以上であり、 $R_{13}$  は、水素、重水素、C<sub>1</sub> -

$C_{20}$ アルキル基、重水素含有 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、又は重水素含有 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基であり、 $R_{14}$ 及び $R_{15}$ は、互いに独立して、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、重水素含有 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、又は重水素含有 $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基であり、\*は、隣接原子との結合サイトである。

#### 【0071】

即ち、上記化学式2で表される基は、benzylic proton個数が1個以下であるアルキル基又はその誘導体である。

#### 【0072】

特定理論によって限定されるものではないが、benzylic protonは、benzylic protonではないprotonに比べて、化学的反応性が高く、多様な形態の中間体生成による副反応引き起こしの原因になる。しかし、上記化学式1の $R_1$ ないし $R_6$ のうちの少なくとも一つは、それぞれ独立して、benzylic proton個数が1個以下であるアルキル基又はその誘導体である上記化学式2で表される基であるため、上記化学式1で表される有機金属化合物は、合成前後、副反応発生が最小化された安定した化学構造を有し、それを用いた電子素子（例えば、有機発光素子）の駆動中、有機金属化合物分子間の相互作用が最小化される。それにより、上記化学式1で表される有機金属化合物を用いた電子素子、例えば有機発光素子の駆動電圧、電流密度、外部量子発光効率、ロールオフ比、及び寿命特性が向上する。

#### 【0073】

上記化学式1で表される有機金属化合物の合成方法は、後述する合成例を参照して、当業者が認識することができる。

#### 【0074】

従って、上記化学式1で表される有機金属化合物は、有機発光素子の有機層、例えば有機層において、発光層(emission layer)のドーパントとしての使用に適するが、他の側面によると、第1電極と、第2電極と、第1電極と第2電極との間に配置されて発光層を含み、上記化学式1で表される有機金属化合物を少なくとも1種以上含む有機層と、を含む有機発光素子が提供される。

#### 【0075】

有機発光素子は、上述の化学式1で表される有機金属化合物を含む有機層を具備することにより、向上した駆動電圧、電流密度、外部量子発光効率、ロールオフ比、及び寿命特性を有する。

#### 【0076】

上記化学式1で表される有機金属化合物は、有機発光素子の1対の電極間に使用される。例えば、上記化学式1で表される有機金属化合物は、発光層に含まれる。このとき、有機金属化合物は、ドーパントの役割を行い、発光層は、ホストを更に含む（即ち、発光層において、上記化学式1で表される有機金属化合物の含量は、ホスト含量よりも少ない）。

#### 【0077】

一具現例によると、発光層は、赤色光を放出する。

#### 【0078】

本明細書において、「（有機層が）有機金属化合物を1種以上含む」とは、「（有機層が）上記化学式1の範疇に属する1種の有機金属化合物、又は上記化学式1の範疇に属するそれぞれ異なる2種以上の有機金属化合物を含む」と解釈される。

#### 【0079】

例えば、有機層は、有機金属化合物として、上記化合物1のみを含む。このとき、上記化合物1は、有機発光素子の発光層に存在する。或いは、有機層は、有機金属化合物として、上記化合物1と化合物2とを含む。このとき、上記化合物1と化合物2とは、同一層に存在する（例えば、上記化合物1と化合物2とは、いずれも発光層に存在する）。

#### 【0080】

第1電極は、正孔注入電極であるアノードであり、第2電極は、電子注入電極であるカ

10

20

30

40

50

ソードであるか、或いは第1電極は、電子注入電極であるカソードであり、第2電極は、正孔注入電極であるアノードである。

#### 【0081】

例えば、有機発光素子において、第1電極は、アノードであり、第2電極は、カソードであり、有機層は、第1電極と発光層との間に配置された正孔輸送領域 (hole transport region)、及び発光層と第2電極との間に配置された電子輸送領域 (electron transport region) を更に含み、正孔輸送領域は、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、バッファ層、又はその任意の組み合わせを含み、電子輸送領域は、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、又はその任意の組み合わせを含む。

10

#### 【0082】

本明細書において、「有機層」は、有機発光素子において、第1電極と第2電極との間に配置された単一及び/又は複数の層を示す用語である。「有機層」は、有機化合物のみならず、金属を含む有機金属錯体なども含む。

#### 【0083】

図1は、本発明の一具現例による有機発光素子10の断面図を概略的に示したものである。以下、図1を参照し、本発明の一具現例による有機発光素子の構造及び製造方法について説明すると、次の通りである。有機発光素子10は、第1電極11、有機層15、及び第2電極19が順に積層された構造を有する。

20

#### 【0084】

第1電極11の下部、又は第2電極19の上部には、基板が追加して配置される。基板としては、一般的な有機発光素子で使用される基板が使用されるが、機械的強度、熱安定性、透明性、表面平滑性、取り扱い容易性、及び防水性に優れるガラス基板又は透明プラスチック基板が使用される。

#### 【0085】

第1電極11は、例えば基板上部に第1電極用物質を、蒸着法又はスパッタリング法などをを利用して提供することによって形成される。第1電極11は、アノードである。第1電極用物質は、正孔注入が容易であるように、高い仕事関数を有する物質のうちから選択される。第1電極11は、反射型電極、半透過型電極、又は透過型電極である。第1電極用物質としては、酸化インジウムスズ(ITO)、酸化インジウム亜鉛(IZO)、酸化スズ(SnO<sub>2</sub>)、酸化亜鉛(ZnO)などが使用される。或いは、マグネシウム(Mg)、アルミニウム(Al)、アルミニウム-リチウム(Al-Li)、カルシウム(Ca)、マグネシウム-インジウム(Mg-In)、マグネシウム-銀(Mg-Ag)のような金属が使用される。

30

#### 【0086】

第1電極11は、単一層構造、又は2以上の層を含む多層構造を有する。例えば、第1電極11は、ITO/Ag/ITOの3層構造を有するが、それに限定されるものではない。

#### 【0087】

第1電極11の上部には、有機層15が配置される。

40

#### 【0088】

有機層15は、正孔輸送領域、発光層、及び電子輸送領域を含む。

#### 【0089】

正孔輸送領域は、第1電極11と発光層との間に配置される。

#### 【0090】

正孔輸送領域は、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、バッファ層、又はその任意の組み合わせを含む。

#### 【0091】

正孔輸送領域は、正孔注入層のみを含むか又は正孔輸送層のみを含む。或いは、正孔輸送領域は、第1電極11から順に積層された正孔注入層/正孔輸送層、又は正孔注入層/

50

正孔輸送層／電子阻止層の構造を有する。

【0092】

正孔輸送領域が正孔注入層を含む場合、正孔注入層（HIL）は、第1電極11の上部に、真空蒸着法、スピンドルコーティング法、キャスト法、LB（Langmuir-Blodgett法）のような多様な方法を利用して形成される。

【0093】

真空蒸着法によって正孔注入層を形成する場合、その蒸着条件は、正孔注入層材料として使用する化合物、目的とする正孔注入層の構造、熱的特性などによって異なるが、例えば蒸着温度約100～約500、真空度約 $10^{-8}$ ～約 $10^{-3}$  torr、蒸着速度約0.01～約100/ $\text{sec}$ の範囲で選択されるが、それらに限定されるものではない。 10

【0094】

スピンドルコーティング法によって正孔注入層を形成する場合、コーティング条件は、正孔注入層材料として使用する化合物、目的とする正孔注入層の構造、及び熱的特性によって異なるが、約2,000 rpm～約5,000 rpmのコーティング速度、コーティング後の溶媒除去のための熱処理温度は、約80～200の温度範囲で選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0095】

正孔輸送層及び電子阻止層の形成条件は、正孔注入層形成条件を参照する。

【0096】

正孔輸送領域は、例えば、m-MTDATA、T DATA、2-TNATA、NPB、-NPB、TPD、spiro-TPD、spiro-NPB、methylated-NPB、TAPC、HMTPD、4,4',4''-トリス（N-カルバゾリル）トリフェニルアミン（TCTA）、ポリアニリン／ドデシルベンゼンスルホン酸（Pani/DBSA）、ポリ（3,4-エチレンジオキシチオフェン）／ポリ（4-スチレンスルホネート）（PEDOT/PSS）、ポリアニリン／カンファースルホン酸（Pani/CSA）、ポリアニリン／ポリ（4-スチレンスルホネート）（PANI/PSS）、下記化学式201で表される化合物、及び下記化学式202で表される化合物のうちの少なくとも一つを含む。 20

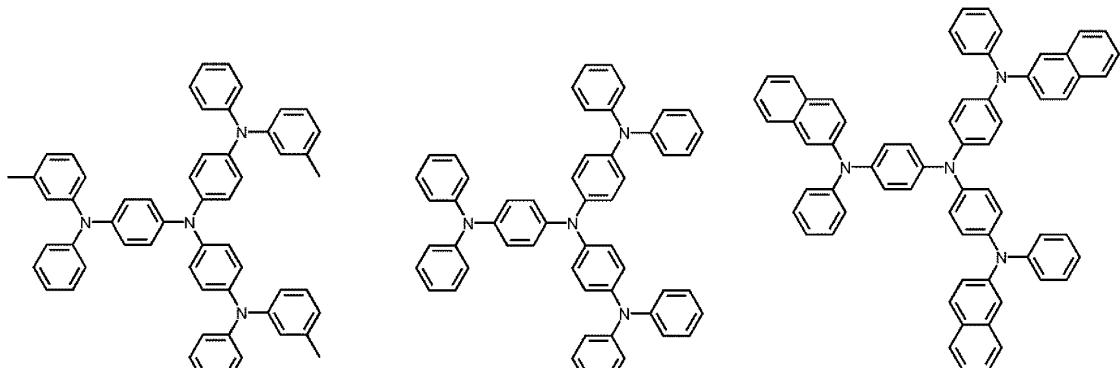
【0097】

30

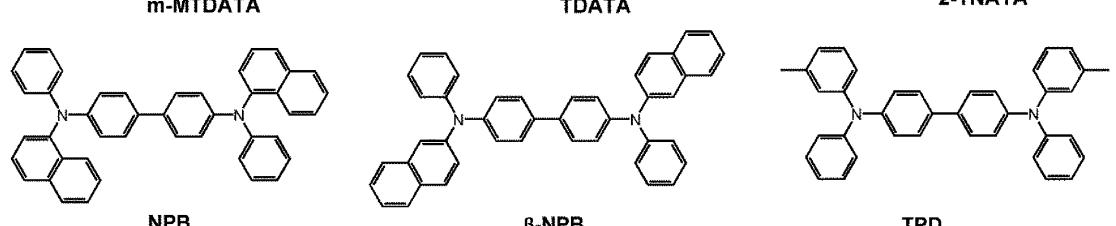
40

50

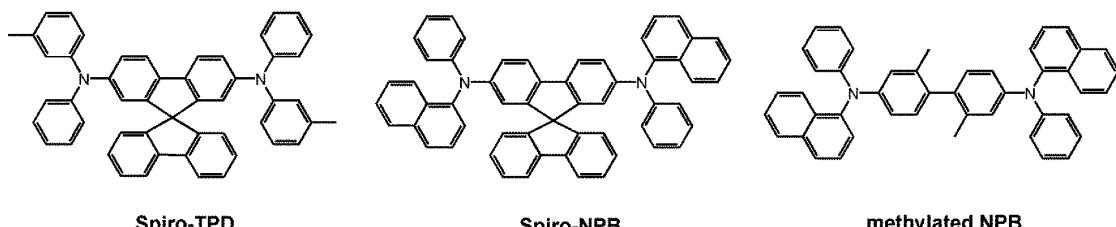
## 【化 (m M T D A T A ) - ( H M T P D )】



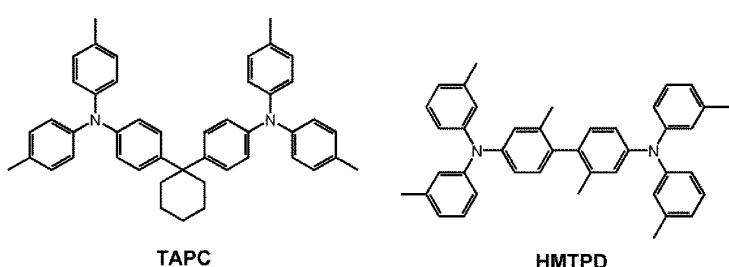
10



20



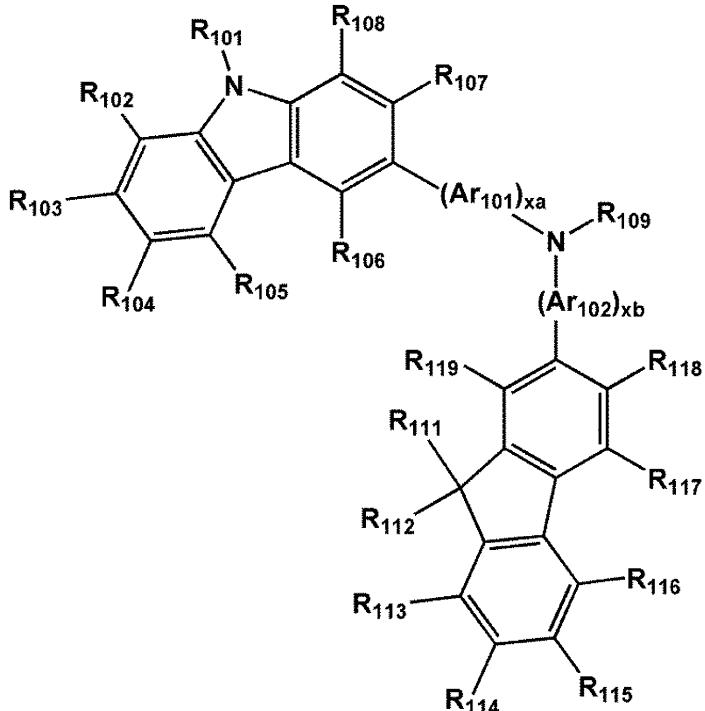
30



40

50

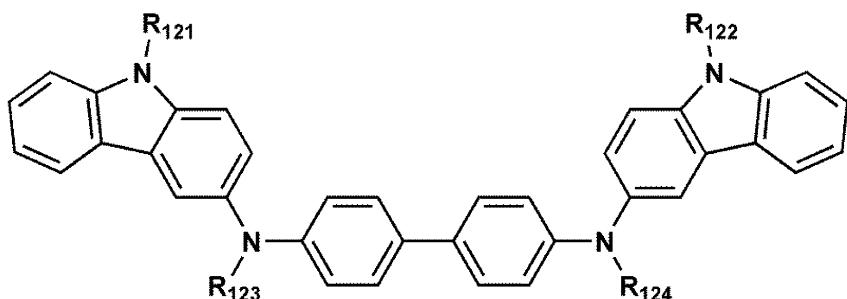
## 【化 2 0 1】



10

20

## 【化 2 0 2】



30

## 【0 0 9 8】

上記化学式 201 で、 $\text{Ar}_{101}$  及び  $\text{Ar}_{102}$  は、互いに独立して、  
フェニレン基、ペントアリレン基、インデニレン基、ナフチレン基、アズレニレン基、  
ヘプタリレン基、アセナフチレン基、フルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ナフタセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、  
及びペントセニレン基；並びに

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルキル基、C<sub>2</sub> - C<sub>6</sub>アルケニル基、C<sub>2</sub> - C<sub>6</sub>アルキニル基、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>アルコキシ基、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>3</sub> - C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>1</sub> - C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、C<sub>6</sub> - C<sub>6</sub>アリール基、C<sub>6</sub> - C<sub>6</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub> - C<sub>6</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちの少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ペントアリレン基、インデニレン基、ナフチレン基、アズレニレン基、ヘプタリレン基、アセナフチレン基、フルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ナフタセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、及びペントセニレン基

40

50

; のうちから選択される。

**【0099】**

上記化学式201で、 $x_a$ 及び $x_b$ は、互いに独立して、0～5の整数、又は0、1、若しくは2である。例えば、 $x_a$ は、1であり、 $x_b$ は、0であるが、それらに限定されるものではない。

**【0100】**

上記化学式201及び202で、 $R_{101}$ ないし $R_{108}$ 、 $R_{111}$ ないし $R_{119}$ 、及び $R_{121}$ ないし $R_{124}$ は、それぞれ独立して、

水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1$ - $C_{10}$ アルキル基（例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基など）、及び $C_1$ - $C_{10}$ アルコキシ基（例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペントキシ基など）；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、及びリン酸基又はその塩のうちの一つ以上で置換された、 $C_1$ - $C_{10}$ アルキル基及び $C_1$ - $C_{10}$ アルコキシ基；

フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フルオレニル基、及びピレニル基；並びに重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1$ - $C_{10}$ アルキル基、及び $C_1$ - $C_{10}$ アルコキシ基のうちの一つ以上で置換された、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フルオレニル基、及びピレニル基；のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

**【0101】**

上記化学式201で、 $R_{109}$ は、

フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、及びピリジニル基；並びに重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $C_1$ - $C_{20}$ アルキル基、 $C_1$ - $C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、及びピリジニル基のうちの一つ以上で置換された、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、及びピリジニル基；のうちから選択される。

**【0102】**

一具現例によると、上記化学式201で表される化合物は、下記化学式201Aで表されるが、それに限定されるものではない。

**【0103】**

10

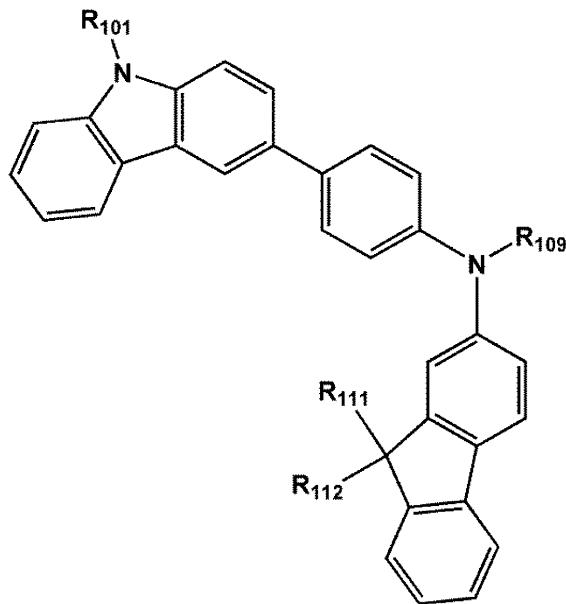
20

30

40

50

## 【化 2 0 1 A】



10

## 【0 1 0 4】

上記化学式 2 0 1 A で、R<sub>101</sub>、R<sub>111</sub>、R<sub>112</sub>、及び R<sub>109</sub>についての詳細な説明は、上述の箇所を参照する。

20

## 【0 1 0 5】

例えば、上記化学式 2 0 1 で表される化合物、及び上記化学式 2 0 2 で表される化合物は、下記化合物 HT 1 ~ HT 20 を含むが、それらに限定されるものではない。

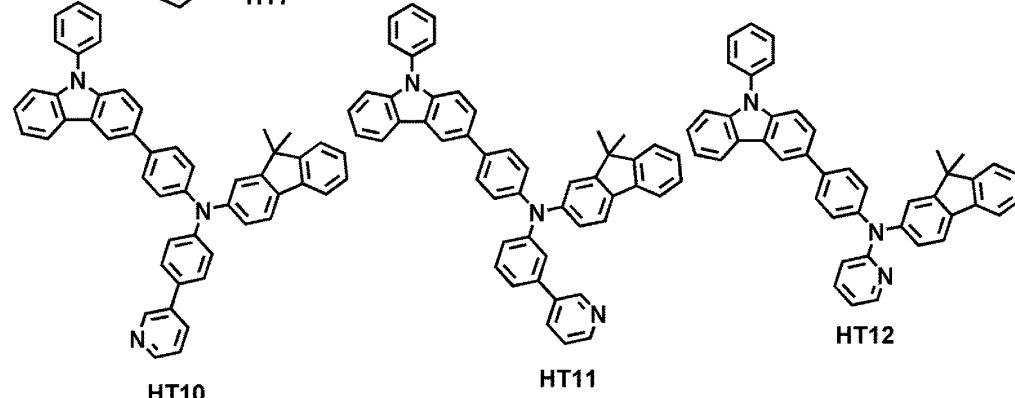
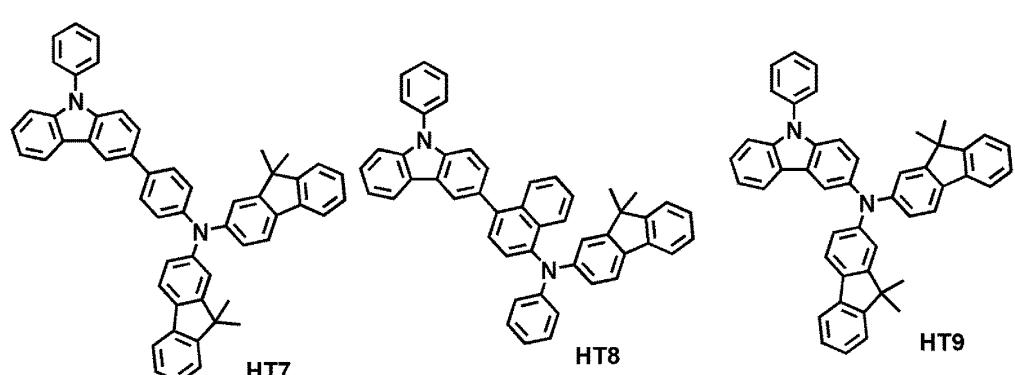
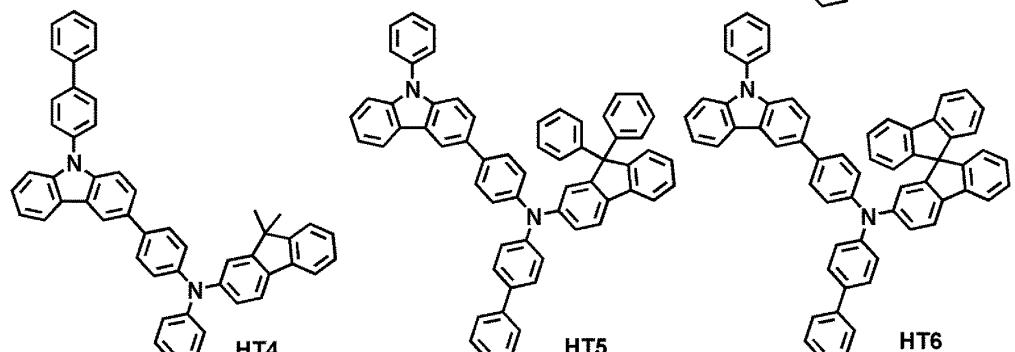
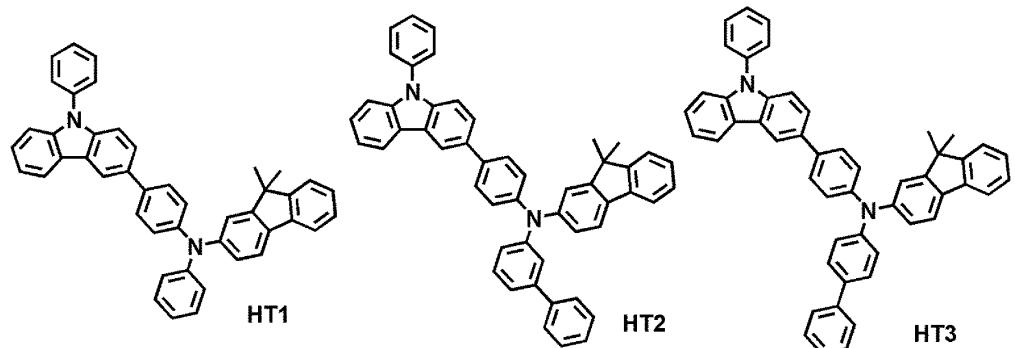
## 【0 1 0 6】

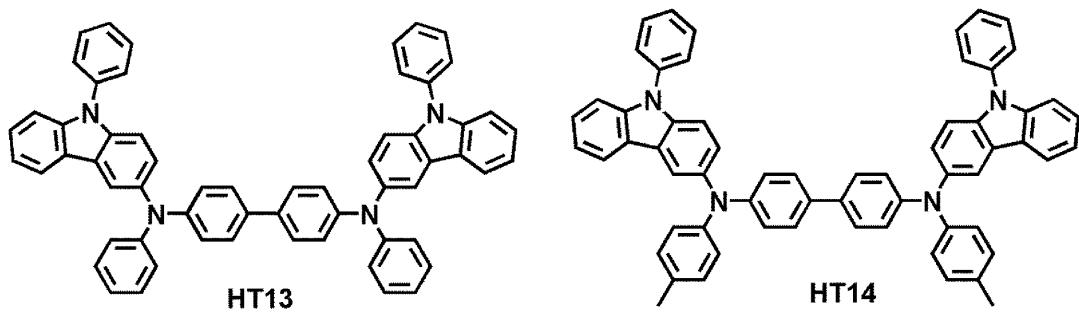
30

40

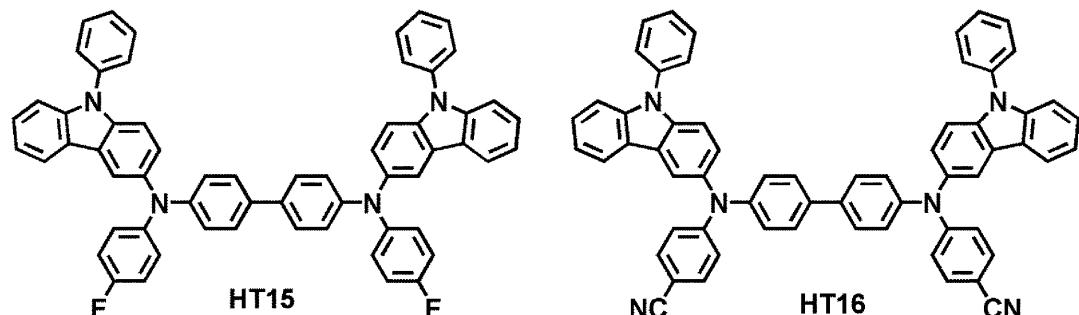
50

## 【化 H T 1 - H T 2 0】

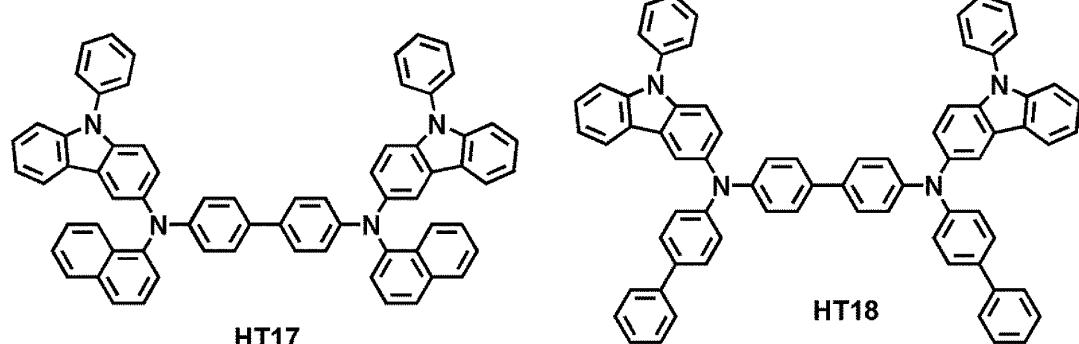




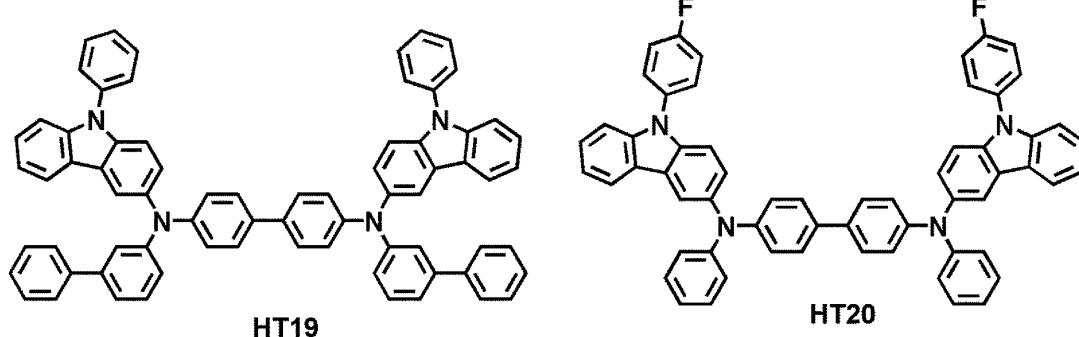
10



20



30



## 【0107】

正孔輸送領域の厚みは、約100 ~ 約10,000、例えば約100 ~ 約1,000である。正孔輸送領域が正孔注入層及び正孔輸送層のうちの少なくとも1層を含む場合、正孔注入層の厚みは、約100 ~ 約10,000、例えば約100 ~ 約1,000であり、正孔輸送層の厚みは、約50 ~ 約2,000、例えば約100 ~ 約1,500である。正孔輸送領域、正孔注入層、及び正孔輸送層の厚みが上述のような範囲を満足する場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、満足すべき正孔輸送特性が得られる。

## 【0108】

正孔輸送領域は、上述のような物質以外に、導電性向上のために電荷生成物質を更に含む。電荷生成物質は、正孔輸送領域内に均一又は不均一に分散される。

40

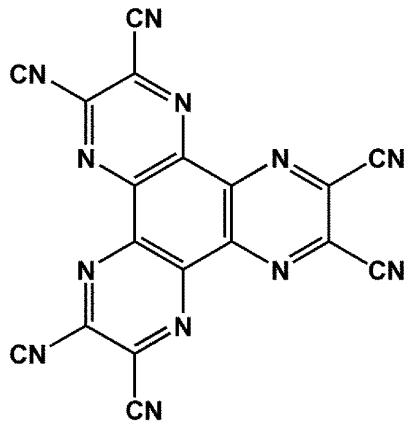
50

## 【0109】

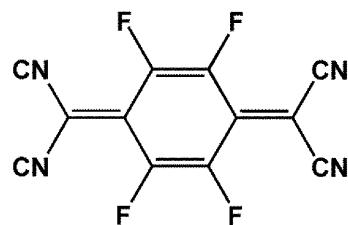
電荷生成物質は、例えばp-ドーパントである。p-ドーパントは、キノン誘導体、金属酸化物、及びシアノ基含有化合物のうちの一つであるが、それらに限定されるものではない。例えば、p-ドーパントの非制限的な例としては、テトラシアノキノジメタン(TCNQ)及び2,3,5,6-テトラフルオロ-テトラシアノ-1,4-ベンゾキノンジメタン(F4-TCNQ)のようなキノン誘導体；タングステン酸化物及びモリブデン酸化物のような金属酸化物；並びに下記化合物HT-D1のようなシアノ基含有化合物などが挙げられるが、それらに限定されるものではない。

## 【0110】

## 【化(HT-D1)-(F4-TCNQ)】



HT-D1



F4-TCNQ

10

20

## 【0111】

正孔輸送領域は、バッファ層を更に含む。

## 【0112】

バッファ層は、発光層で放出される光の波長による光学的共振距離を補償し、効率を上昇させる役割を行う。

## 【0113】

正孔輸送領域上部に、真空蒸着法、スピンドーティング法、キャスト法、LB法のような方法を利用し、発光層(EML)を形成する。真空蒸着法及びスピンドーティング法によって発光層を形成する場合、その蒸着条件及びコーティング条件は、使用する化合物によって異なるが、一般的に、正孔注入層の形成と略同一条件範囲のうちから選択される。

30

## 【0114】

一方、正孔輸送領域が電子阻止層を含む場合、電子阻止層材料は、上述のような正孔輸送領域に使用される物質及び後述するホスト物質のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。例えば、正孔輸送領域が電子阻止層を含む場合、電子阻止層材料として、後述するmCPが使用される。

## 【0115】

発光層は、ホスト及びドーパントを含み、ドーパントは、上記化学式1で表される有機金属化合物を含む。

40

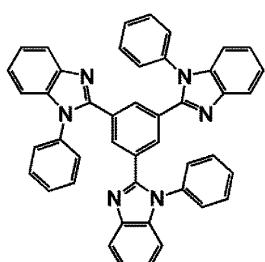
## 【0116】

ホストは、下記のTPBi、TBAcN、ADN(「DNA」ともいう)、CBP、CDBP、TCP、mCP、化合物H50、及び化合物H51のうちの少なくとも一つを含む。

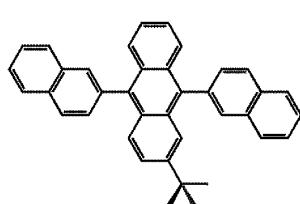
## 【0117】

50

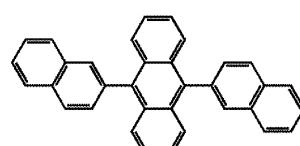
## 【化 T P B i - H 5 1】



TPBi

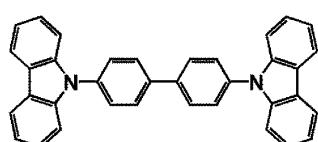


TBADN

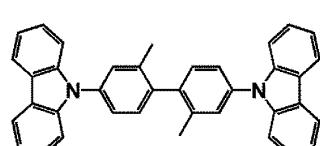


ADN

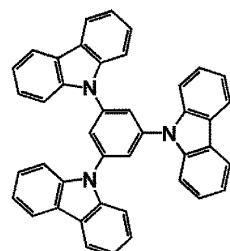
10



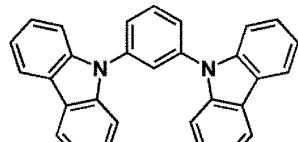
CBP



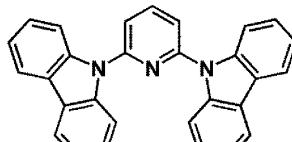
CDBP



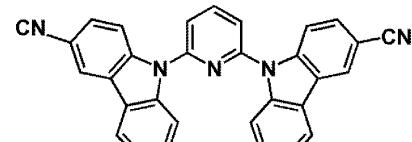
TCP



mCP



H50



H51

20

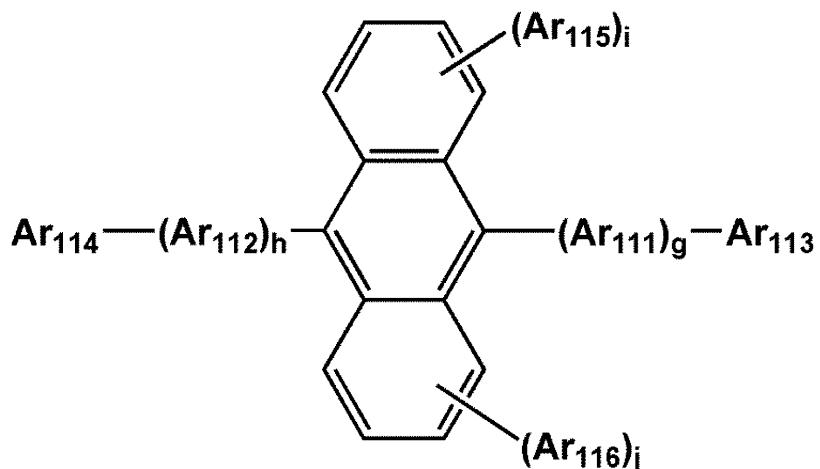
## 【0 1 1 8】

或いは、ホストは、下記化学式 301 で表される化合物を更に含む。

## 【0 1 1 9】

## 【化 301】

30



40

## 【0 1 2 0】

上記化学式 301 で、 $\text{Ar}_{111}$  及び  $\text{Ar}_{112}$  は、互いに独立して、フェニレン基、ナフチレン基、フェナントレニレン基、及びピレニレン基；並びにフェニル基、ナフチル基、及びアントラセニル基のうちの一つ以上で置換された、フェニレン基、ナフチレン基、フェナントレニレン基、及びピレニレン基；のうちから選択される。

50

## 【0121】

上記化学式301で、 $\text{Ar}_{113}$ ないし $\text{Ar}_{116}$ は、それぞれ独立して、 $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ アルキル基、フェニル基、ナフチル基、フェナントレニル基、及びピレニル基；並びに

フェニル基、ナフチル基、及びアントラセニル基のうちの一つ以上で置換された、フェニル基、ナフチル基、フェナントレニル基、及びピレニル基；のうちから選択される。

## 【0122】

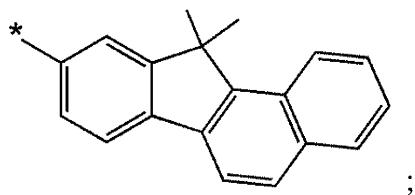
上記化学式301で、g、h、i、及びjは、それぞれ独立して、0～4の整数であり、例えは0、1、又は2である。

## 【0123】

上記化学式301で、 $\text{Ar}_{113}$ ないし $\text{Ar}_{116}$ は、それぞれ独立して、 $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ アルキル基；

フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、及びフルオレニル基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $\text{C}_1 - \text{C}_{60}$ アルキル基、 $\text{C}_2 - \text{C}_{60}$ アルケニル基、 $\text{C}_2 - \text{C}_{60}$ アルキニル基、 $\text{C}_1 - \text{C}_{60}$ アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、及びフルオレニル基のうちの一つ以上で置換された、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、及びフルオレニル基；並びに



;

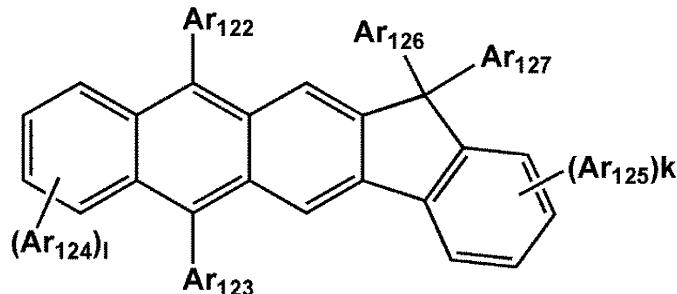
のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

## 【0124】

或いは、ホストは、下記化学式302で表される化合物を含む。

## 【0125】

## 【化302】



## 【0126】

上記化学式302で、 $\text{Ar}_{122}$ ないし $\text{Ar}_{125}$ についての詳細な説明は、上記化学式301の $\text{Ar}_{113}$ についての説明を参照する。

## 【0127】

上記化学式302で、 $\text{Ar}_{126}$ 及び $\text{Ar}_{127}$ は、互いに独立して、 $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ アルキル基（例えは、メチル基、エチル基、又はプロピル基）である。

## 【0128】

10

20

30

40

50

上記化学式 302 で、k 及び l は、互いに独立して、0 ~ 4 の整数である。例えば、k 及び l は、0、1、又は 2 である。

**【0129】**

有機発光素子がフルカラー有機発光素子である場合、発光層は、赤色発光層、緑色発光層、及び青色発光層にパターニングされる。或いは、発光層は、赤色発光層、緑色発光層、及び / 又は青色発光層が積層された構造を有することにより、白色光を放出するというように、多様な変形例が可能である。

**【0130】**

発光層がホスト及びドーパントを含む場合、ドーパントの含量は、一般的に、ホスト約 100 重量部を基準にして、約 0.01 ~ 約 15 重量部の範囲で選択されるが、それに限定されるものではない。10

**【0131】**

発光層の厚みは、約 100 ~ 約 1,000 、例えば約 200 ~ 約 600 である。発光層の厚みが上述のような範囲を満足する場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、優秀な発光特性を示す。

**【0132】**

次に、発光層上部に、電子輸送領域が配置される。

**【0133】**

電子輸送領域は、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、又はその任意の組み合わせを含む。20

**【0134】**

例えば、電子輸送領域は、正孔阻止層 / 電子輸送層 / 電子注入層、又は電子輸送層 / 電子注入層の構造を有するが、それらに限定されるものではない。電子輸送層は、単一層構造、又は 2 以上のそれぞれ異なる物質を含む多層構造を有する。

**【0135】**

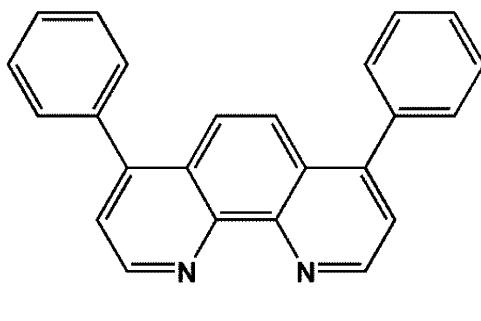
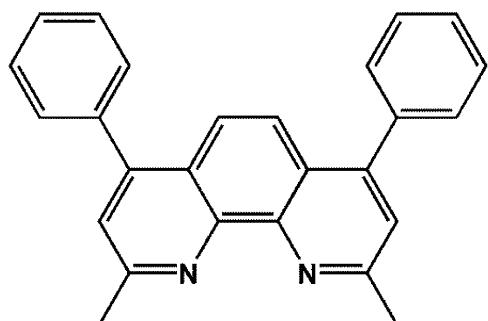
電子輸送領域の正孔阻止層、電子輸送層、及び電子注入層の形成条件は、正孔注入層の形成条件を参照する。

**【0136】**

電子輸送領域が正孔阻止層を含む場合、正孔阻止層は、例えば下記の BCP、Bphen n 及び B a l q のうちの少なくとも一つを含むが、それらに限定されるものではない。30

**【0137】**

**【化 B C P - B p h e n】**



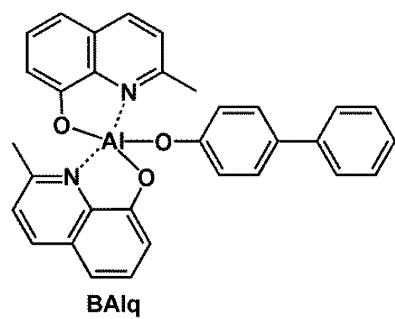
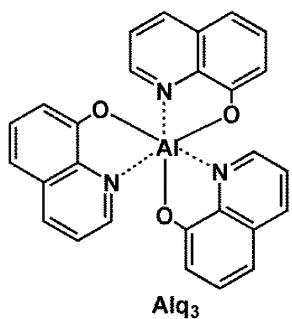
**【0138】**

正孔阻止層の厚みは、約 20 ~ 約 1,000 、例えば約 30 ~ 約 300 である。正孔阻止層の厚みが上述のような範囲を満足する場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、優秀な正孔阻止特性が得られる。

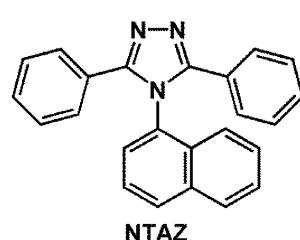
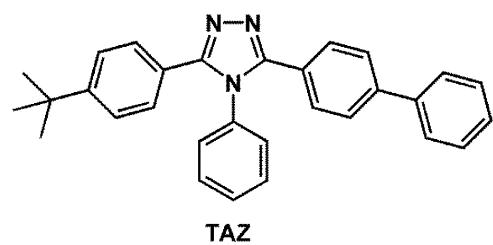
**【0139】**

電子輸送層は、上述の BCP、Bphen、及び下記の Alq3、Balq、TAZ、及び NTAZ のうちの少なくとも一つを更に含む。50

【 0 1 4 0 】  
【化 A l q 3 - N T A Z 】



10



20

【 0 1 4 1 】

或いは、電子輸送層は、下記化合物 E T 1 ~ E T 2 5 のうちの少なくとも一つを含むが、それらに限定されるものではない。

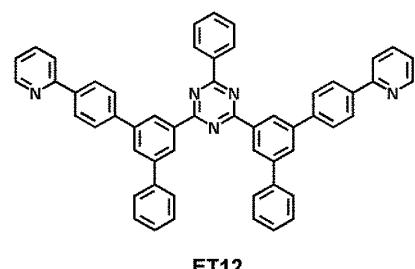
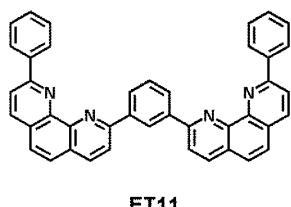
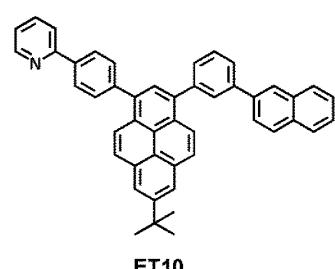
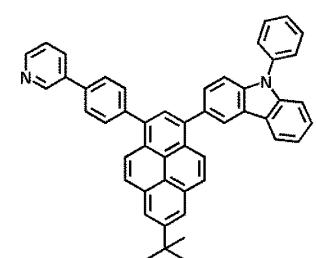
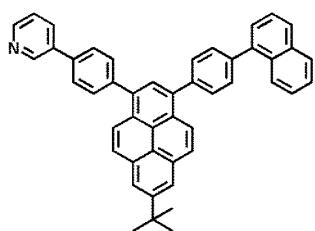
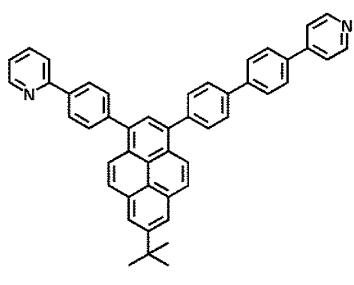
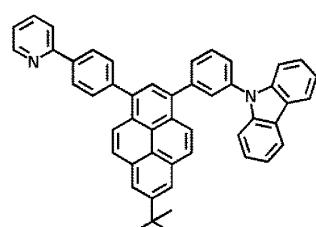
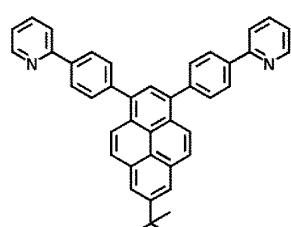
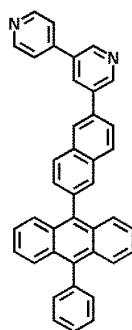
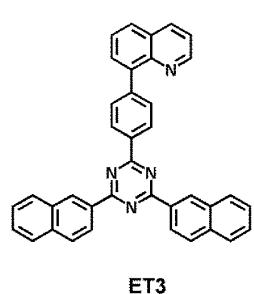
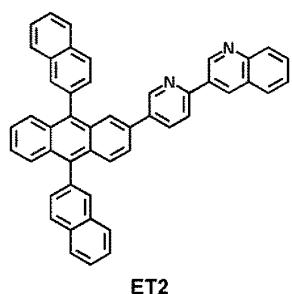
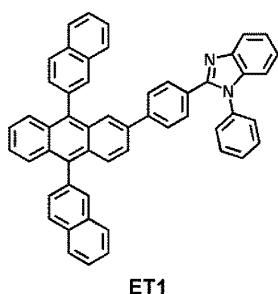
【 0 1 4 2 】

30

40

50

## 【化 E T 1 - E T 2 5】



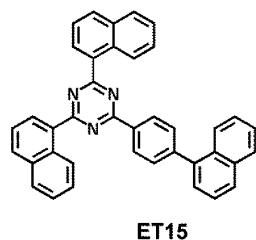
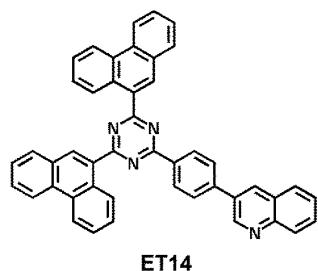
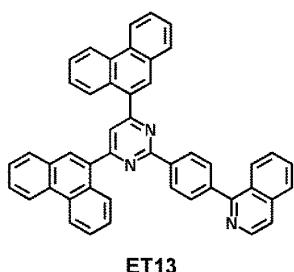
10

20

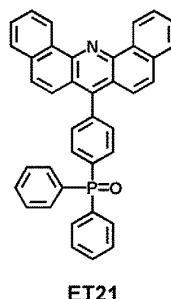
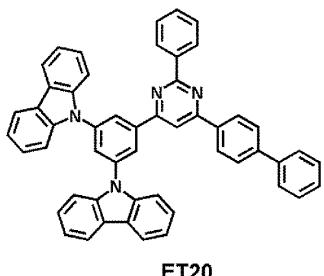
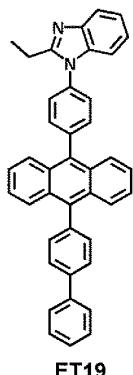
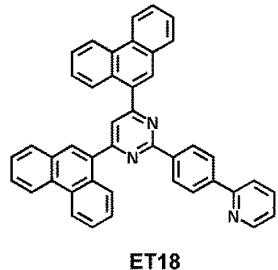
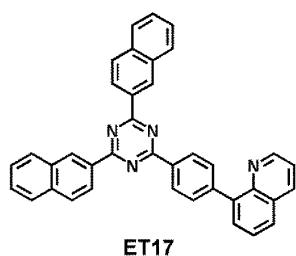
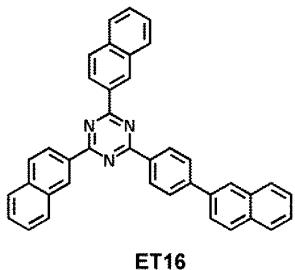
30

40

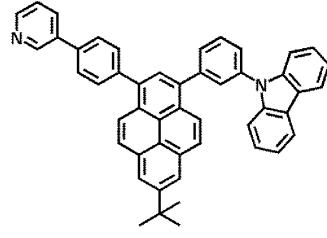
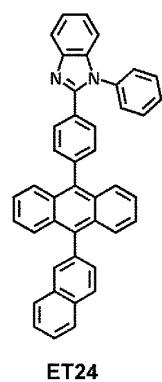
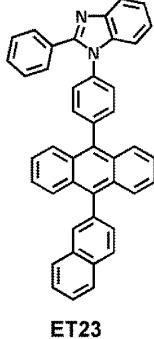
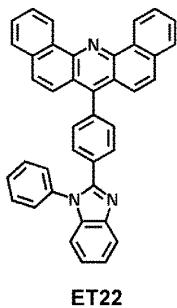
50



10



20



30

40

## 【0143】

電子輸送層の厚みは、約100 ~ 約1,000、例えば約150 ~ 約500で  
ある。電子輸送層の厚みが上述のような範囲を満足する場合、実質的な駆動電圧の上昇な  
しに、満足すべき電子輸送特性が得られる。

## 【0144】

電子輸送層は、上述のような物質以外に金属含有物質を更に含む。

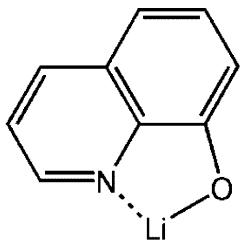
## 【0145】

金属含有物質は、Li錯体を含む。Li錯体は、例えば下記化合物ET-D1(LiQ)  
)又はET-D2を含む。

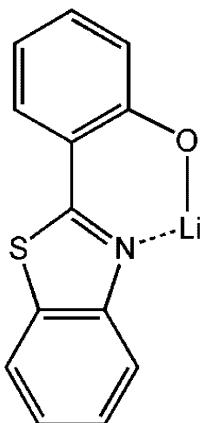
50

【0146】

【化(ET-D1) - (ET-D2)】



ET-D1



ET-D2

10

【0147】

また、電子輸送領域は、第2電極19からの電子注入を容易にする電子注入層(ETL)を含む。

【0148】

電子注入層は、LiF、NaCl、CsF、Li<sub>2</sub>O、及びBaOのうちから選択される少なくとも一つを含む。

20

【0149】

電子注入層の厚みは、約1 ~ 約100、例えば約3 ~ 約90である。電子注入層の厚みが上述のような範囲を満足する場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、満足すべき電子注入特性が得られる。

【0150】

有機層15の上部には、第2電極19が具備される。第2電極19は、カソードである。第2電極19用物質としては、相対的に低い仕事関数を有する金属、合金、電気伝導性化合物、及びそれらの組み合わせが使用される。具体的な例としては、リチウム(Li)、マグネシウム(Mg)、アルミニウム(Al)、アルミニウム-リチウム(Al-Li)、カルシウム(Ca)、マグネシウム-インジウム(Mg-In)、マグネシウム-銀(Mg-Ag)などを第2電極19形成用物質として使用する。或いは、前面発光素子を得るために、ITO、IZOを使用して、透過型第2電極19を形成するというように、多様な変形が可能である。

30

【0151】

以上、有機発光素子について、図1を参照して説明したが、それらに限定されるものではない。

【0152】

更に他の側面によると、上記化学式1で表される有機金属化合物を1種以上含む診断用組成物が提供される。

40

【0153】

上記化学式1で表される有機金属化合物は、高発光効率を提供するため、有機金属化合物を含む診断用組成物は、高い診断効率を有する。

【0154】

診断用組成物は、各種診断用キット、診断試薬、バイオセンサ、バイオマーカーなどに多様に応用される。

【0155】

本明細書において、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルキル基は、炭素数1~60の線状又は分枝状飽和脂肪族炭化水素一価基を意味し、具体的な例には、メチル基、エチル基、プロピル基、イソ

50

ブチル基、sec-ブチル基、tert-ブチル基、ペンチル基、iso-アミル基、ヘキシリル基などが含まれる。本明細書において、C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキレン基は、C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

#### 【0156】

本明細書において、C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルコキシ基は、-O A<sub>101</sub>（ここで、A<sub>101</sub>は、C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>アルキル基である）の化学式を有する一価基を意味し、その具体的な例には、メトキシ基、エトキシ基、イソプロピルオキシ基などが含まれる。

#### 【0157】

本明細書において、C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルケニル基は、C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルキル基の中間又は末端に、1以上の炭素・炭素二重結合を含む構造を有し、その具体的な例には、エテニル基、プロペニル基、ブテニル基などが含まれる。本明細書において、C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルケニレン基は、C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

10

#### 【0158】

本明細書において、C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルキニル基は、C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルキル基の中間又は末端に1以上の炭素・炭素三重結合を含む構造を有し、その具体的な例には、エチニル基、プロピニル基などが含まれる。本明細書において、C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルキニレン基は、C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>アルキニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

#### 【0159】

本明細書において、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基は、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>一価飽和炭化水素單環式基を意味し、その具体例は、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシリル基、シクロヘプチル基などを含む。本明細書において、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキレン基は、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

20

#### 【0160】

本明細書において、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基は、N、O、P、Si、及びSのうちから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含むC<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>一価单環式基を意味し、その具体例は、テトラヒドロフラニル基、テトラヒドロチオフェニル基などを含む。本明細書において、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキレン基は、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

#### 【0161】

本明細書において、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基は、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>一価单環式基であり、環内に、少なくとも1つの炭素・炭素二重結合を有するが、芳香族性（aromaticity）を有さない基を意味し、その具体例は、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基などを含む。本明細書において、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニレン基は、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

30

#### 【0162】

本明細書において、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基は、N、O、P、Si、及びSのうちから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含むC<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>一価单環式基であり、環内に少なくとも1つの二重結合を有する。C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基の具体例は、2,3-ジヒドロフラニル基、2,3-ジヒドロチオフェニル基などを含む。本明細書において、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニレン基は、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

40

#### 【0163】

本明細書において、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基は、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>炭素環式芳香族系を有する一価基を意味し、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリーレン基は、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>炭素環式芳香族系を有する二価基を意味する。C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基の具体例は、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、ピレニル基、クリセニル基などを含む。C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基及びC<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリーレン基が2以上の環を含む場合、2以上の環は、それぞれ融合される。

#### 【0164】

本明細書において、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基は、N、O、P、Si、及びSのうち

50

から選択される少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>0へテロ芳香族系を有する一価基を意味し、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>0へテロアリーレン基は、N、O、P、Si及びSのうちから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>0へテロ芳香族系を有する二価基を意味する。C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>0へテロアリール基の具体例は、ピリジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基などを含む。C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>0へテロアリール基、及びC<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>0へテロアリーレン基が2以上の環を含む場合、2以上の環は、それぞれ融合される。

#### 【0165】

本明細書において、C<sub>6</sub> - C<sub>6</sub>0アリールオキシ基は、-OA<sub>102</sub>(ここで、A<sub>102</sub>は、C<sub>6</sub> - C<sub>6</sub>0アリール基である)を示し、C<sub>6</sub> - C<sub>6</sub>0アリールチオ基は、-SA<sub>103</sub>(ここで、A<sub>103</sub>は、C<sub>6</sub> - C<sub>6</sub>0アリール基である)を示す。

#### 【0166】

本明細書において、一価非芳香族縮合多環基は、2以上の環がそれぞれ縮合されており、環形成原子として炭素のみを含み、分子全体が非芳香族性(non-aromaticity)を有する一価基(例えば、8~60の炭素数である)を意味する。一価非芳香族縮合多環基の具体例は、フルオレニル基などを含む。本明細書において、二価非芳香族縮合多環基は、一価非芳香族縮合多環基と同一構造を有する二価基を意味する。

#### 【0167】

本明細書において、一価非芳香族へテロ縮合多環基は、2以上の環がそれぞれ縮合されており、環形成原子として炭素以外に、N、O、P、Si及びSのうちから選択されるヘテロ原子を含み、分子全体が非芳香族性を有する一価基(例えば、1~60の炭素数を有する)を意味する。一価非芳香族へテロ縮合多環基は、カルバゾリル基などを含む。本明細書において、二価非芳香族へテロ縮合多環基は、一価非芳香族へテロ縮合多環基と同一構造を有する二価基を意味する。

#### 【0168】

本明細書において、C<sub>5</sub> - C<sub>3</sub>0炭素環式基は、環形成原子として、5~30の炭素のみを有する飽和環式基又は不飽和環式基を示す。C<sub>5</sub> - C<sub>3</sub>0炭素環式基は、単環式基又は多環式基である。

#### 【0169】

本明細書において、C<sub>1</sub> - C<sub>3</sub>0へテロ環式基は、環形成原子として、1~30の炭素以外に、N、O、P、Si及びSのうちから選択されるヘテロ原子を少なくとも一つ有する飽和環式基又は不飽和環式基を示す。C<sub>2</sub> - C<sub>3</sub>0へテロ環式基は、単環式基又は多環式基である。

#### 【0170】

置換されたC<sub>5</sub> - C<sub>3</sub>0炭素環式基、置換されたC<sub>2</sub> - C<sub>3</sub>0へテロ環式基、置換されたC<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>0アルキル基、置換されたC<sub>2</sub> - C<sub>6</sub>0アルケニル基、置換されたC<sub>2</sub> - C<sub>6</sub>0アルキニル基、置換されたC<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>0アルコキシ基、置換されたC<sub>3</sub> - C<sub>1</sub>0シクロアルキル基、置換されたC<sub>1</sub> - C<sub>1</sub>0へテロシクロアルキル基、置換されたC<sub>3</sub> - C<sub>1</sub>0シクロアルケニル基、置換されたC<sub>1</sub> - C<sub>1</sub>0へテロシクロアルケニル基、置換されたC<sub>6</sub> - C<sub>6</sub>0アリール基、置換されたC<sub>6</sub> - C<sub>6</sub>0アリールオキシ基、置換されたC<sub>6</sub> - C<sub>6</sub>0アリールチオ基、置換されたC<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>0へテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族へテロ縮合多環基の置換基の少なくとも一つは、

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CDH<sub>2</sub>、-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、-CFH<sub>2</sub>、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>0アルキル基、C<sub>2</sub> - C<sub>6</sub>0アルケニル基、C<sub>2</sub> - C<sub>6</sub>0アルキニル基、及びC<sub>1</sub> - C<sub>6</sub>0アルコキシ基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CDH<sub>2</sub>、-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、-CFH<sub>2</sub>、ヒドロキシリル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基

10

20

30

40

50

、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>)、-Si(Q<sub>13</sub>)(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>)、-Ge(Q<sub>13</sub>)(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>)、-B(Q<sub>16</sub>)(Q<sub>17</sub>)、-P(=O)(Q<sub>18</sub>)(Q<sub>19</sub>)、及び-P(Q<sub>18</sub>)(Q<sub>19</sub>)のうちの少なくとも一つで置換された、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルキル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルケニル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルキニル基、及びC<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルコキシ基；

C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD<sub>3</sub>、-CD<sub>2</sub>H、-CDH<sub>2</sub>、-CF<sub>3</sub>、-CF<sub>2</sub>H、-CFH<sub>2</sub>、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルキル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルケニル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルキニル基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルコキシ基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N(Q<sub>21</sub>)(Q<sub>22</sub>)、-Si(Q<sub>23</sub>)(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>)、-Ge(Q<sub>23</sub>)(Q<sub>24</sub>)(Q<sub>25</sub>)、-B(Q<sub>26</sub>)(Q<sub>27</sub>)、-P(=O)(Q<sub>28</sub>)(Q<sub>29</sub>)、及び-P(Q<sub>28</sub>)(Q<sub>29</sub>)のうちの少なくとも一つで置換された、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

-N(Q<sub>31</sub>)(Q<sub>32</sub>)、-Si(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>)、-Ge(Q<sub>33</sub>)(Q<sub>34</sub>)(Q<sub>35</sub>)、-B(Q<sub>36</sub>)(Q<sub>37</sub>)、-P(=O)(Q<sub>38</sub>)(Q<sub>39</sub>)、及び-P(Q<sub>38</sub>)(Q<sub>39</sub>)；のうちから選択され、

Q<sub>1</sub>ないしQ<sub>9</sub>、Q<sub>11</sub>ないしQ<sub>19</sub>、Q<sub>21</sub>ないしQ<sub>29</sub>、及びQ<sub>31</sub>ないしQ<sub>39</sub>は、それぞれ独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルキル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルケニル基、C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>アルキニル基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルコキシ基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルキル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルキル基、C<sub>3</sub>-C<sub>10</sub>シクロアルケニル基、C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>ヘテロシクロアルケニル基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>アルキル基、及びC<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基のうちの少なくとも一つで置換された、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリール基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールオキシ基、C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>アリールチオ基、C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択される。

### 【0171】

以下、合成例及び実施例を挙げ、本発明の一具現例による化合物及び有機発光素子について更に具体的に説明するが、本発明は、下記の合成例及び実施例に限定されるものではない。下記合成例において、「『A』の代わりに『B』を使用した」という表現において、「B」の使用量と「A」の使用量は、モル当量基準で同一である。

### 【0172】

#### 【実施例】

### 【0173】

10

20

30

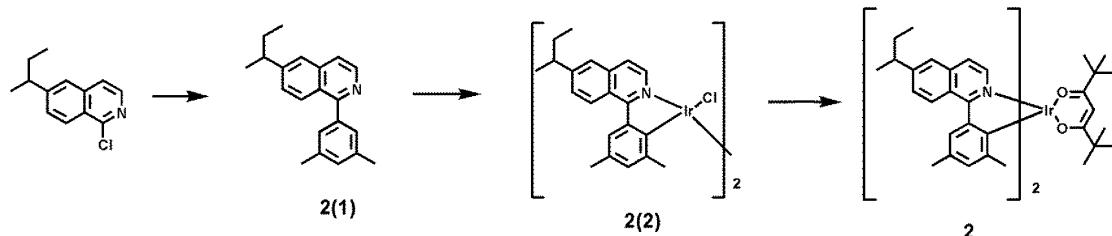
40

50

<合成例1：化合物2の合成>

【0174】

【化c2】



10

【0175】

<中間体2(1)の合成>

【0176】

1 - クロロ - 6 - ( sec - ブチル ) イソキノリン ( 1 - c h l o r o - 6 - ( sec - b u t y l ) i s o q u i n o l i n e ) ( 4 . 5 6 g 、 2 0 . 7 6 m m o l ) 、 3 , 5 - ジメチルフェニルボロン酸 ( ( 3 , 5 - d i m e t h y l p h e n y l ) b o r o n i c a c i d ) ( 4 . 6 7 g 、 3 1 . 1 4 m m o l ) 、 P d ( P P h \_ 3 ) \_ 4 ( 1 . 9 2 g 、 1 . 6 6 m m o l ) 及び K \_ 2 C O \_ 3 ( 7 . 1 7 g 、 5 1 . 9 0 m m o l ) に、 6 0 m L のテトラヒドロフラン ( T H F ) と 3 0 m L の蒸留水とを混合した後、 1 8 時間還流攪拌した。常温に温度を低くした後、 塩化メチレン ( M C ) を使用して有機層を抽出し、 無水硫酸マグネシウム ( M g S O \_ 4 ) を添加して水分を除去した後、 濾過して得られた濾過液を減圧して得られた残留物を、 E A : ヘキサン = 1 : 1 0 の条件でカラムクロマトグラフィを遂行し、 中間体2(1) ( 5 . 6 0 g 、 9 3 % )を得た。

20

M A L D I - T O F M S ( m / z ) : C \_ { 2 1 } H \_ { 2 3 } N ( M + ) 2 8 9

【0177】

<中間体2(2)の合成>

【0178】

中間体2(1) ( 5 . 5 8 g 、 1 9 . 3 m m o l ) 及び塩化イリジウム水和物 ( i r i d i u m c h l o r i d e h y d r a t e ) ( 3 . 0 2 g ) に、 4 5 m L のエトキシエタノールと 1 5 m L の蒸溜水とを混合した後、 2 4 時間還流攪拌して反応を進めた後、 常温まで温度を低くした。そこから生成された固体を濾過して分離し、 水 / メタノール / ヘキサンの順序で十分に洗浄して得られた固体を真空オーブンで乾燥させ、 中間体2(2) ( 3 . 9 g 、 5 0 . 3 % )を得た。

30

【0179】

<化合物2の合成>

【0180】

中間体2(2) ( 1 . 3 0 g 、 0 . 8 1 m m o l ) 、 2 , 2 , 6 , 6 - テトラメチルヘプタン - 3 , 5 - ジオン ( 2 , 2 , 6 , 6 - t e t r a m e t h y l h e p t a n e - 3 , 5 - d i o n e ) ( 1 . 4 9 g 、 8 . 1 4 m m o l ) 及び N a \_ 2 C O \_ 3 ( 0 . 8 3 g 、 8 . 1 4 m m o l ) にエトキシエタノール 1 5 m L を混合し、 2 4 時間攪拌して反応を進めた。そこから得られた混合物を濾過して得られた固体を、 エチルアルコールとヘキサンとで十分に洗浄し、 ジクロロメタン : n - ヘキサン = 1 : 1 ( v / v ) の条件でカラムクロマトグラフィを遂行し、 化合物2 ( 0 . 7 8 g 、 5 0 . 6 % )を得た。

40

H R M S ( M A L D I ) c a l c d f o r C \_ { 5 3 } H \_ { 6 3 } I r N \_ { 2 } O \_ { 2 } : m / z 9 5 2 . 4 5 1 9 , f o u n d : 9 5 2 . 4 5 1 7

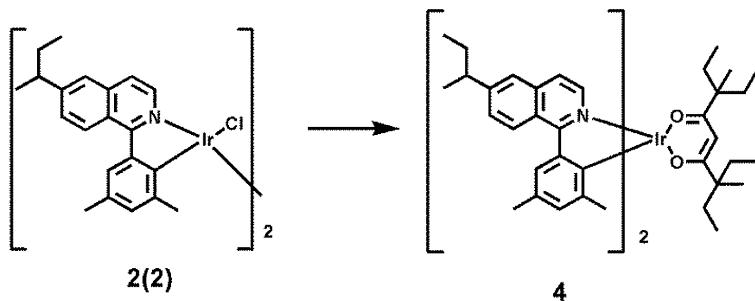
【0181】

<合成例2：化合物4の合成>

【0182】

50

## 【化 c 4】



10

## 【0183】

化合物2の合成時、2,2,6,6-テトラメチルヘプタン-3,5-ジオンの代わりに、3,7-ジエチル-3,7-ジメチルノナン-4,6-ジオン(*3,7-dieethyl-3,7-dimethylnonane-4,6-dione*)を使用したという点を除いては、合成例1と同一方法を利用し、化合物4(0.96g, 58.5%)を合成した。

HRMS (MALDI) calcd for C<sub>57</sub>H<sub>71</sub>IrN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>: m/z 1008.5145, Found: 1008.5149

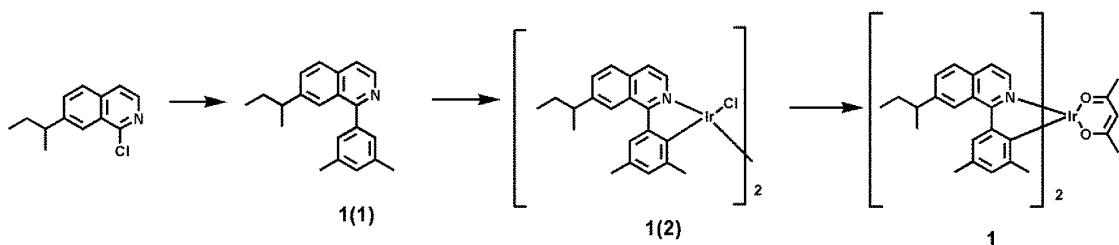
## 【0184】

<合成例3：化合物1の合成>

20

## 【0185】

## 【化 c 1】



30

## 【0186】

<中間体1(1)の合成>

## 【0187】

1-クロロ-6-(sec-ブチル)イソキノリンの代わりに、7-sec-ブチル-1-クロロイソキノリン(*7-sec-butyl-1-chloroisouoline*)を使用したという点を除いては、合成例1の中間体2(1)の合成方法と同一方法を利用し、中間体1(1)を合成した。

## 【0188】

<中間体1(2)の合成>

## 【0189】

中間体2(1)の代わりに、中間体1(1)を使用したという点を除いては、合成例1の中間体2(2)の合成方法と同一方法を利用し、中間体1(2)を合成した。

40

## 【0190】

<化合物1の合成>

## 【0191】

中間体2(2)及び2,2,6,6-テトラメチルヘプタン-3,5-ジオンの代わりに、中間体1(2)及びペンタン-2,4-ジオン(*pentane-2,4-dione*)を使用したという点を除いては、合成例1の化合物2の合成方法と同一方法を利用し、化合物1(0.99g, 70.8%)を合成した。

HRMS (MALDI) calcd for C<sub>47</sub>H<sub>51</sub>IrN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>: m/z 868

50

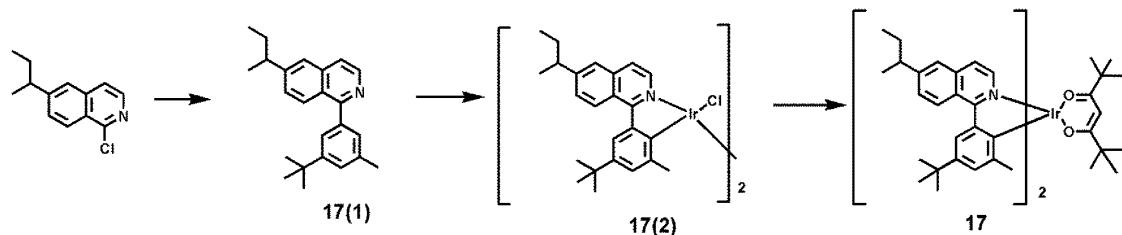
. 3580, Found : 868.3588

【0192】

<合成例4：化合物17の合成>

【0193】

【化c17】



10

【0194】

<中間体17(1)の合成>

【0195】

3,5-ジメチルフェニルボロン酸の代わりに、3-t-ブチル-5-メチルフェニルボロン酸((3-t-butyl-5-methylphenyl)boronic acid)を使用したという点を除いては、合成例1の中間体2(1)の合成方法と同一方法を利用し、中間体17(1)(5.85g、85%の収率)を合成した。

20

HRMS (MALDI) calcd for C<sub>24</sub>H<sub>29</sub>N: m/z 331.2300, found: 331.2311

【0196】

<中間体17(2)の合成>

【0197】

中間体2(1)の代わりに、中間体17(1)を使用したという点を除いては、合成例1の中間体2(2)の合成方法と同一方法を利用し、中間体17(2)を合成した。

【0198】

<化合物17の合成>

【0199】

中間体2(2)の代わりに、中間体17(1)を使用したという点を除いては、合成例1の化合物2の合成方法と同一方法を利用し、化合物17(1.06g, 63.2%)を合成した。

30

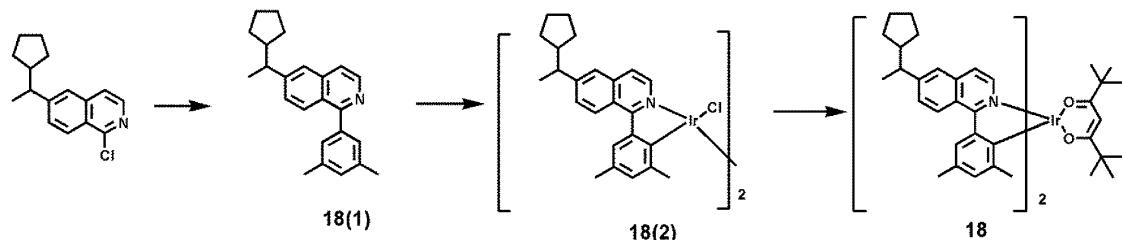
HRMS (MALDI) calcd for C<sub>59</sub>H<sub>75</sub>IrN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>: m/z 1036.5458, Found: 1036.5464

【0200】

<合成例5：化合物18の合成>

【0201】

【化c18】



40

【0202】

<中間体18(1)の合成>

【0203】

50

1 - クロロ - 6 - ( sec - プチル ) イソキノリンの代わりに、1 - クロロ - 6 - ( 1 - シクロペンチルエチル ) イソキノリン ( 1 - chloro - 6 - ( sec - butyl ) isoquinoline ) ( 5 . 39 g, 20 . 76 mmol ) を使用したという点を除いては、合成例 1 の中間体 2 ( 1 ) の合成方法と同一方法を利用し、中間体 18 ( 1 ) ( 5 . 95 g, 87 % の収率 ) を合成した。

HRMS ( MALDI ) calcd for C<sub>24</sub>H<sub>29</sub>N : m/z 331 . 2300, found : 331 . 2311

#### 【 0204 】

< 中間体 18 ( 2 ) の合成 >

#### 【 0205 】

中間体 2 ( 1 ) の代わりに、中間体 18 ( 1 ) を使用したという点を除いては、合成例 1 の中間体 2 ( 2 ) の合成方法と同一方法を利用し、中間体 18 ( 2 ) を合成した。

#### 【 0206 】

< 化合物 18 の合成 >

#### 【 0207 】

中間体 2 ( 2 ) の代わりに、中間体 18 ( 1 ) を使用したという点を除いては、合成例 1 の化合物 2 の合成方法と同一方法を利用し、化合物 18 ( 0 . 68 g, 41 % ) を合成した。

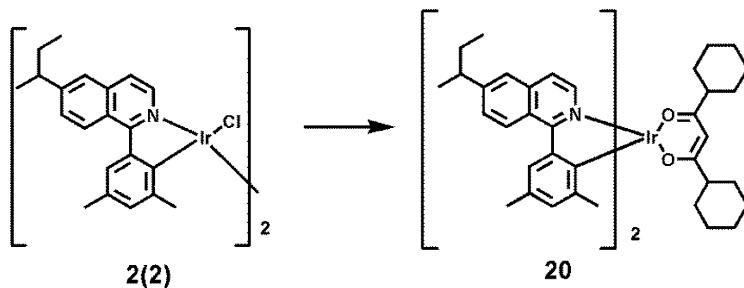
HRMS ( MALDI ) calcd for C<sub>59</sub>H<sub>71</sub>IrN<sub>2</sub>O<sub>2</sub> : m/z 1032 . 5145, found : 1032 . 5151

#### 【 0208 】

< 合成例 6 : 化合物 20 の合成 >

#### 【 0209 】

#### 【 化 c 20 】



#### 【 0210 】

2 , 2 , 6 , 6 - テトラメチルヘプタン - 3 , 5 - ジオンの代わりに、1 , 3 - ジシクロヘキシリルプロパン - 1 , 3 - ジオン ( 1 , 3 - di cyclohexylpropene - 1 , 3 - dione ) を使用したという点を除いては、合成例 1 の化合物 2 の合成方法と同一方法を利用し、化合物 20 ( 0 . 96 %, 59 . 2 % ) を合成した。

HRMS ( MALDI ) calcd for C<sub>57</sub>H<sub>67</sub>IrN<sub>2</sub>O<sub>2</sub> : m/z 1004 . 4832, found : 1004 . 4841

#### 【 0211 】

< 実施例 1 >

#### 【 0212 】

アノードとして、ITO / Ag / ITOが70 / 1 , 000 / 70 厚に蒸着されたガラス基板を、50 mm × 50 mm × 0 . 5 mm サイズに切り、イソプロピルアルコールと純水とを使用し、それぞれ 5 分間超音波洗浄した後、30 分間紫外線を照射してオゾンに露出させて洗浄し、真空蒸着装置に設けた。

#### 【 0213 】

アノード上に、2 - TNATAを真空蒸着し、600 厚の正孔注入層を形成し、正孔注入層上に、4 , 4 ' - ビス [ N - ( 1 - ナフチル ) - N - フェニルアミノ ] ピフェニル (

10

20

30

40

50

以下、N P B ) を真空蒸着し、1 , 3 5 0 厚の正孔輸送層を形成した。

**【 0 2 1 4 】**

次に、正孔輸送層上に、C B P (ホスト) 及び化合物1 (ドーパント) を、9 8 : 2 の重量比で共蒸着し、4 0 0 厚の発光層を形成した。

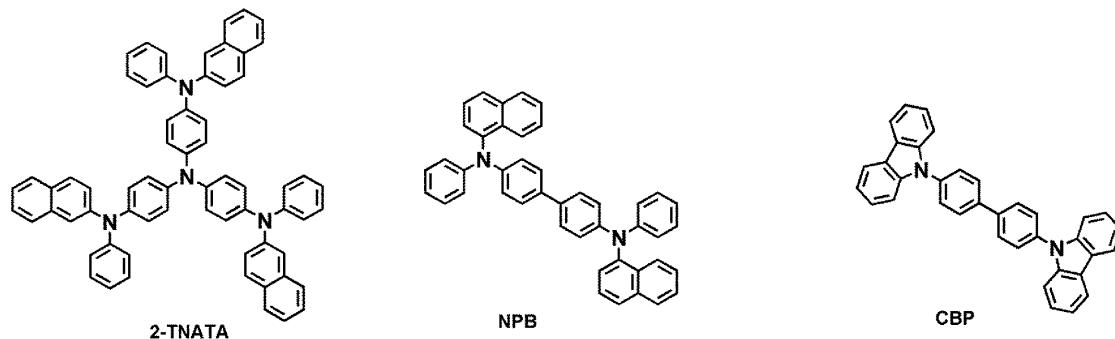
**【 0 2 1 5 】**

その後、発光層上にB C Pを真空蒸着し、5 0 厚の正孔阻止層を形成した後、正孔阻止層上にA l q 3を真空蒸着し、3 5 0 厚の電子輸送層を形成した後、電子輸送層上にL i Fを真空蒸着し、1 0 厚の電子注入層を形成し、電子注入層上に、M g及びA gを9 0 : 1 0 の重量比で共蒸着し、1 2 0 厚のカソードを形成することにより、有機発光素子(赤色光放出)を作製した。

10

**【 0 2 1 6 】**

**【化(2-TNATA)-(BCP)】**



20



**【 0 2 1 7 】**

30

<実施例2～6、及び比較例A～F>

**【 0 2 1 8 】**

発光層の形成時、ドーパントとして化合物1の代わりに、表1に記載した化合物をそれぞれ使用したという点を除いては、実施例1と同一方法を利用し、有機発光素子を作製した。

**【 0 2 1 9 】**

<評価例1：有機発光素子の特性評価>

**【 0 2 2 0 】**

実施例1～6、及び比較例A～Fで製造されたそれぞれの有機発光素子に対して、駆動電圧、電流密度、最大外部量子発光効率(E Q E)、ロールオフ比、E Lスペクトラムにおける発光ピーク値の半値幅、最大発光波長、及び寿命(T<sub>97</sub>)を評価し、その結果を表1に示した。評価装置として、電流・電圧計(Keithley 2400)及び輝度計(Minolta CS-1000A)を使用し、寿命(T<sub>97</sub>)(at 3,500 nit)は、初期輝度100%対比97%の輝度になるのにかかる時間を評価した。ロールオフ比は、下記式20によって計算した。

40

**【 0 2 2 1 】**

[数20]

R o l l - o f f   r a t i o = { 1 - ( 效率 ( a t   3 , 5 0 0 n i t ) / 最大発光効率 ) } X 1 0 0 %

**【 0 2 2 2 】**

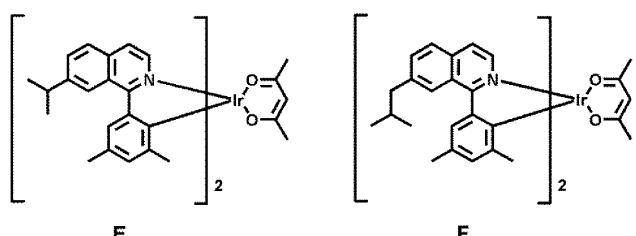
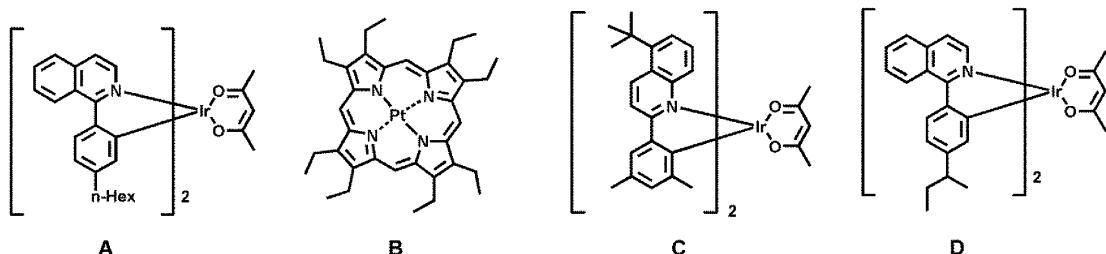
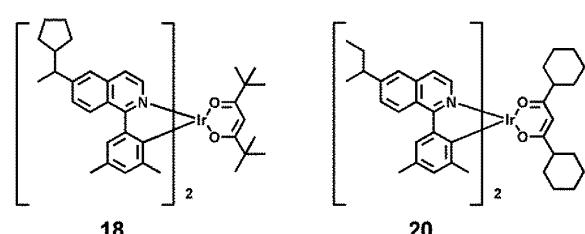
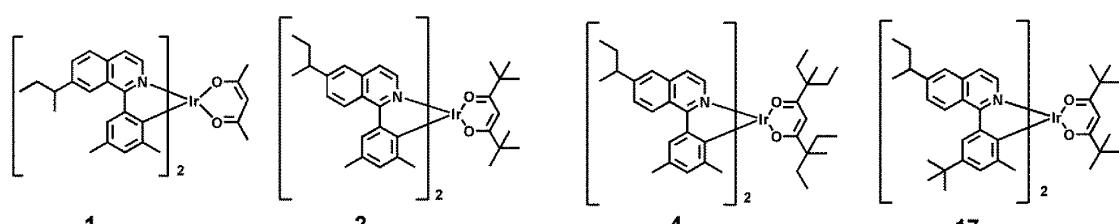
50

【表1】

	発光層中 でのドー パント	駆動 電圧 (V)	電流密度 (mA/ m <sup>2</sup> )	Max EQE (%)	Roll-Off ratio (%)	半値幅 (nm)	最大発 光波長 (nm)	LT <sub>97</sub> (hr)
実施例1	化合物1	5.52	23.7	24.2	17	61.9	629	320
実施例2	化合物2	5.40	17.5	28.6	12	54.64	626	460
実施例3	化合物4	5.03	16.2	29.3	13	48.62	624	450
実施例4	化合物17	5.12	16.8	28.6	12	52.12	622	370
実施例5	化合物18	5.40	17.2	28.9	12	53.35	626	370
実施例6	化合物20	5.34	19.3	27.5	13	54.56	625	310
比較例A	化合物A	5.49	12.2	20.4	28	82.39	623	50
比較例B	化合物B	9.82	670.2	13.7	89	23.6	652	1
比較例C	化合物C	5.80	20.0	25.9	13	59.41	616	150
比較例D	化合物D	6.01	23.5	21.7	16	67.51	630	42
比較例E	化合物E	5.48	22.3	22.8	16	62.24	629	48
比較例F	化合物F	5.40	22.7	23.4	14	59.94	629	28

## 【0223】

## 【化1-F】



## 【0224】

10

20

30

40

50

上記化合物 Aにおいて、n - H e xは、n - ヘキシリル基を意味する。

【0225】

上記表1から、実施例1～6の有機発光素子は、比較例A～Fの有機発光素子に比べて、向上した駆動電圧、電流密度、外部量子発光効率、ロールオフ比、及び寿命特性を有するということが確認される。

【0226】

以上、本発明の実施形態について詳細に説明したが、本発明は、上述の実施形態に限定されるものではなく、本発明の技術的範囲から逸脱しない範囲内で多様に変更実施することが可能である。

【産業上の利用可能性】

10

【0227】

本発明の、有機金属化合物、それを含む有機発光素子、及びそれを含む診断用組成物は、例えば生化学的診断関連の技術分野に効果的に適用可能である。

【符号の説明】

【0228】

10 有機発光素子

11 第1電極

15 有機層

19 第2電極

20

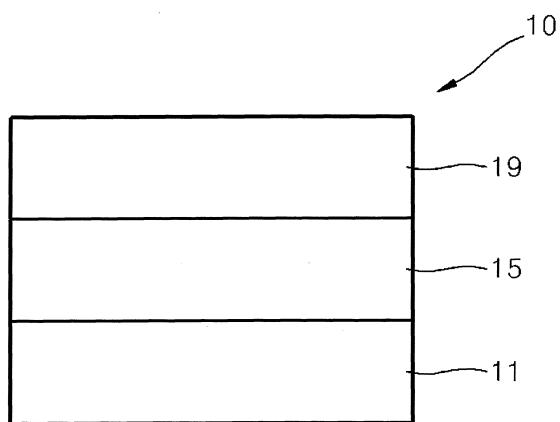
30

40

50

【図面】

【図1】



10

20

30

40

50

---

フロントページの続き

## (51)国際特許分類

G 0 1 N	33/58 (2006.01)	F I	
G 0 1 N	33/483(2006.01)	H 0 5 B	33/22
		G 0 1 N	33/58
		G 0 1 N	33/483

## (72)発明者 李錦喜

大韓民国 京畿道 水原市 靈通区 三星路 130 三星綜合技術院内

## (72)発明者 崔華逸

大韓民国 京畿道 水原市 靈通区 三星路 130 三星綜合技術院内

## (72)発明者 黄圭榮

大韓民国 京畿道 水原市 靈通区 三星路 130 三星綜合技術院内

## (72)発明者 郭丞燕

大韓民国 京畿道 水原市 靈通区 三星路 130 三星綜合技術院内

## (72)発明者 金象同

大韓民国 京畿道 水原市 靈通区 三星路 130 三星綜合技術院内

## (72)発明者 李晟熏

大韓民国 京畿道 水原市 靈通区 三星路 130 三星綜合技術院内

## (72)発明者 林圭鉉

大韓民国 京畿道 水原市 靈通区 三星路 130 三星綜合技術院内

## (72)発明者 ゾ勇碩

大韓民国 京畿道 水原市 靈通区 三星路 130 三星綜合技術院内

## (72)発明者 崔鐘元

大韓民国 京畿道 水原市 靈通区 三星路 130 三星綜合技術院内

## 審査官 早乙女智美

## (56)参考文献 中国特許出願公開第104193783(CN,A)

特表2020-503672(JP,A)

特表2020-513685(JP,A)

特開2013-121957(JP,A)

特表2012-503043(JP,A)

特表2010-520882(JP,A)

特開2010-185068(JP,A)

特開2017-039713(JP,A)

## (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)

C 07 F

C 09 K 11 / 06

C A p l u s / R E G I S T R Y ( S T N )