

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2020-158491

(P2020-158491A)

(43) 公開日 令和2年10月1日(2020.10.1)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
C07F 15/00 (2006.01)	C07F 15/00	CSPF 3K107
C09K 11/06 (2006.01)	C09K 11/06	660 4H050
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/14	B

審査請求 未請求 請求項の数 15 O L 外国語出願 (全 324 頁)

(21) 出願番号	特願2020-38897 (P2020-38897)	(71) 出願人	503055897
(22) 出願日	令和2年3月6日 (2020.3.6)		ユニバーサル ディスプレイ コーポレイ ション
(31) 優先権主張番号	62/823, 922		アメリカ合衆国、ニュージャージー、ユー イング、 フィリップス プールバード
(32) 優先日	平成31年3月26日 (2019.3.26)		375
(33) 優先権主張国・地域又は機関	米国 (US)	(74) 代理人	100107515
(31) 優先権主張番号	62/834, 666		弁理士 廣田 浩一
(32) 優先日	平成31年4月16日 (2019.4.16)	(74) 代理人	100107733
(33) 優先権主張国・地域又は機関	米国 (US)		弁理士 流 良広
(31) 優先権主張番号	62/842, 230	(74) 代理人	100115347
(32) 優先日	令和1年5月2日 (2019.5.2)		弁理士 松田 奈緒子
(33) 優先権主張国・地域又は機関	米国 (US)		

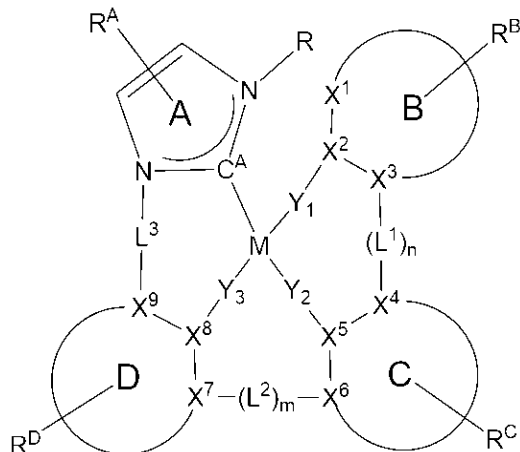
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネセンス材料及びデバイス

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】 物理的性質を調節できる新規なリン光発光化合物の提供。

【解決手段】 式 I の四座白金錯体。



(式中、Mは、Pd又はPt；環B、C、及びDは、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環； $X^1 \sim X^9$ は、C又はN； $Y_1 \sim Y_3$ は、直接結合、O等； $L^1 \sim L^3$ は、直接結合、O、アルキル等；m及びnは、0又は1)

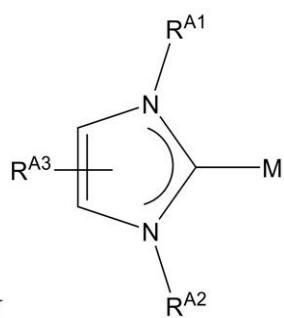
【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

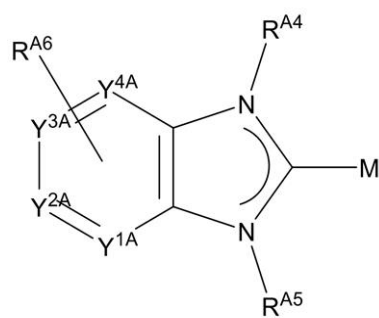
【請求項 1】

以下の式：

【化 1】



式V



、及び式V I

10

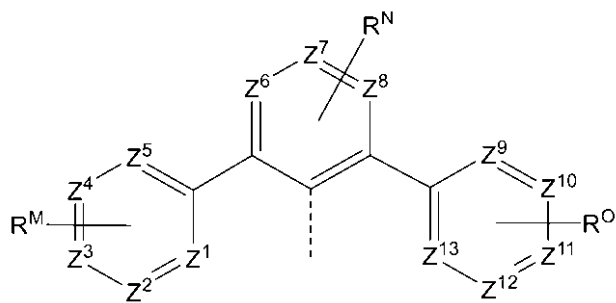
からなる群から選択される式の構造を含むことを特徴とする化合物。

(式中、

Mは、Os、Pd、Pt、Ir、Cu、及びAuからなる群から選択され；

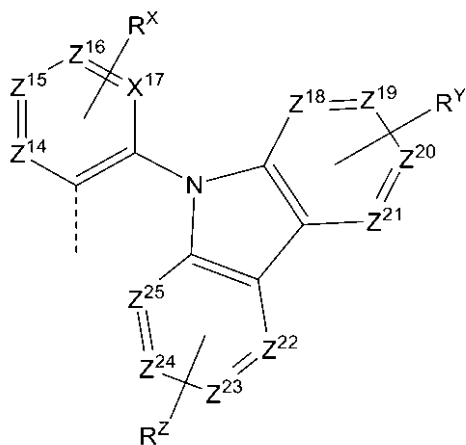
R^{A1}、R^{A2}、R^{A4}、R^{A5}、又はR^{A6}の少なくとも1つは、以下の式：

【化 2】



式VII

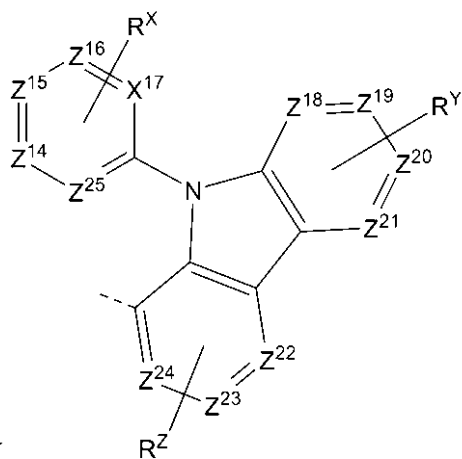
10



式VIII

、又は

20



式IX

30

の構造であり；

Y^{1A} ~ Y^{4A} は、それぞれ独立して、C又はNであり；

Y^{1A} ~ Y^{4A} の2つ以下がNであり；

Z¹ ~ Z²⁵ は、それぞれ独立して、C又はNであり；

同一環中の3つの連続するZ¹ ~ Z²⁵ は、Nであることがなく；

R^{A3}、R^{A6}、R^M、R^N、R^O、R^X、R^Y、及びR^Z は、それぞれ独立して、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；

各R^{A1}、R^{A2}、R^{A3}、R^{A4}、R^{A5}、R^{A6}、R^M、R^N、R^O、R^X、R^Y、及びR^Z は、独立して、水素である、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリーロキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこ

40

50

これらの組合せからなる群から選択される置換基であり；

Mは、他の配位子に配位することができ；

任意の2つの置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；

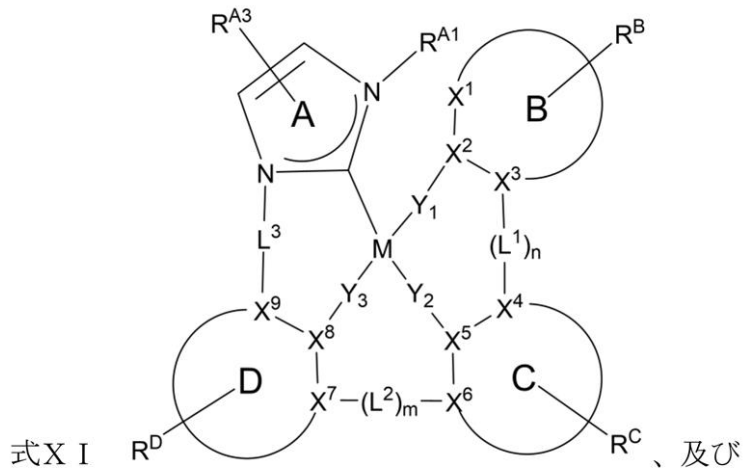
但し、前記化合物が式Vであり、 R^{A1} 及び R^{A2} の一方が式VIIであるとき、 R^M 、 R^N 、及び R^O の少なくとも1つは、重水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。）

【請求項2】

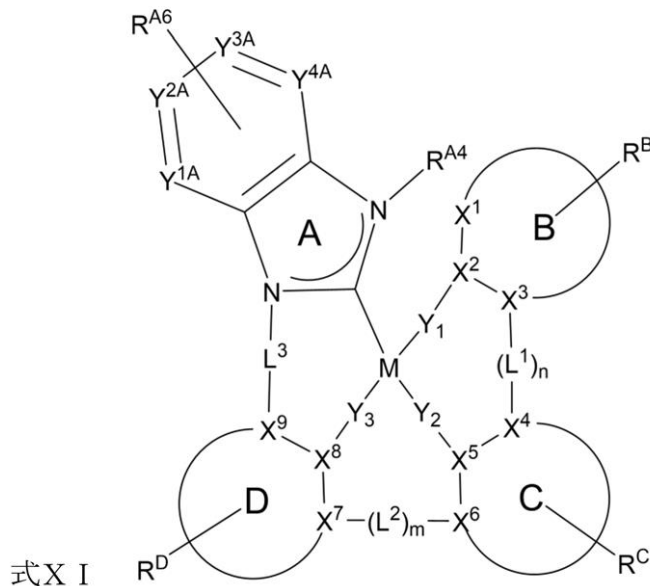
前記化合物が、下記：

【化3】

10



20



30

(式中、

40

Mは、Pd又はPt；

環B、C、及びDは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環であり；

$X^1 \sim X^9$ は、それぞれ独立して、C又はNであり；

$Y_1 \sim Y_3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、及びSからなる群から選択され；

$Y_1 \sim Y_3$ の少なくとも1つは、直接結合であり；

$Y^{1A} \sim Y^{4A}$ は、それぞれ独立して、C又はNであり；

$L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 、 BR' 、及び NR' 、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；

m及びnは、それぞれ独立して、0又は1であり；

50

m 及び n の少なくとも 1 つは、1 であり；

R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノ最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；

各 R 、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、独立して、水素である、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基であり；

任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；

R 及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができる。) からなる群から選択される請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

前記環 B、C、及び D が、それぞれ 6 員芳香環である請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

L^2 が、O、 NR' 、又は CR^2R' である請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 5】

L^1 が、直接結合又は NR' である請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 6】

Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 が、それぞれ直接結合である請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 7】

X^1 、 X^3 、及び X^4 が、それぞれ C である請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 8】

m + n が、2 である請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 9】

X^8 が、C である請求項 2 に記載の化合物。

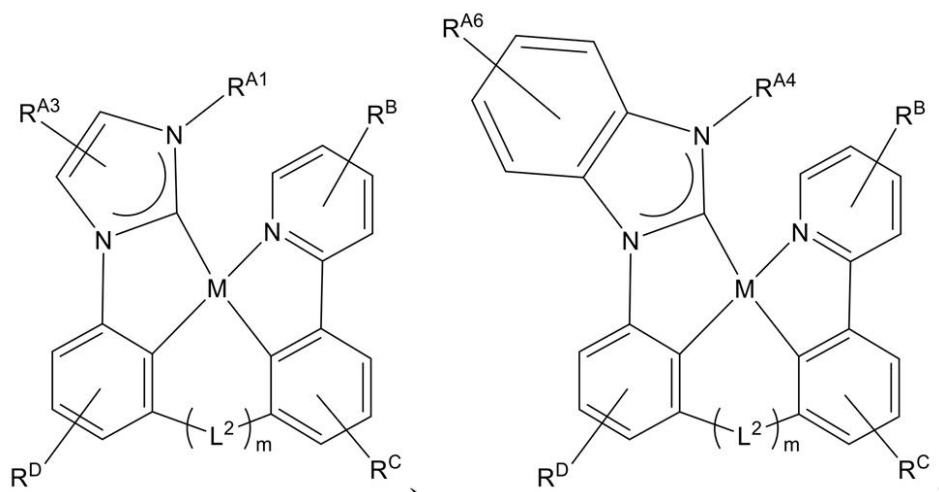
【請求項 10】

$Y^{1A} \sim Y^{4A}$ が、それぞれ C である請求項 2 に記載の化合物。

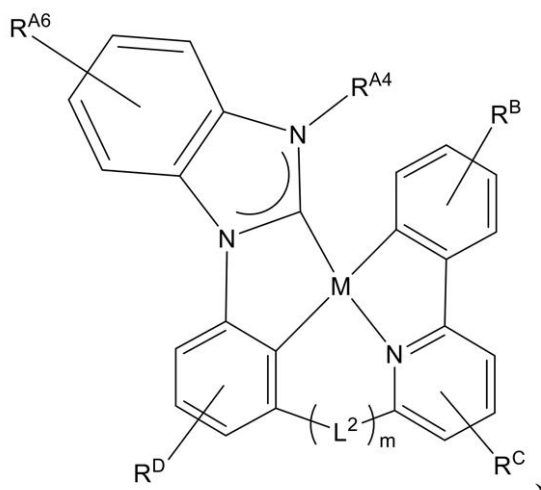
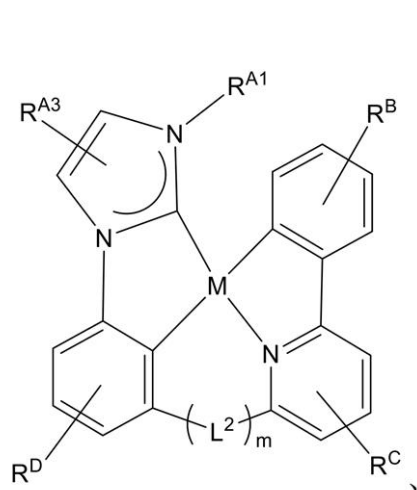
【請求項 11】

前記化合物が、下記：

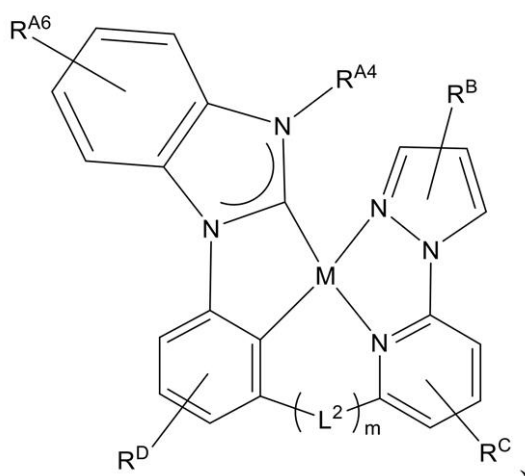
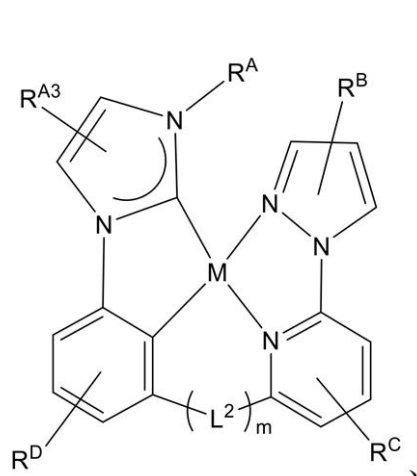
【化 4】



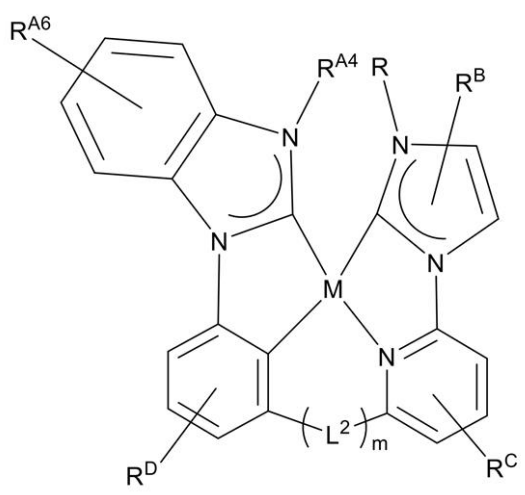
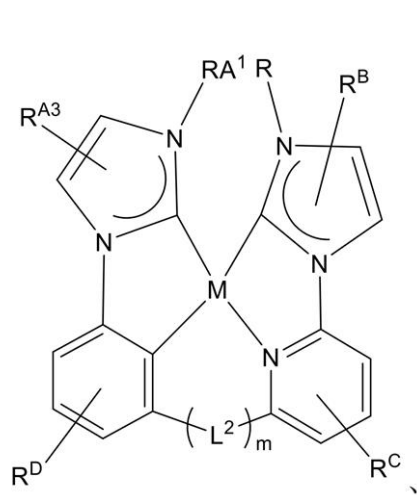
【化 5】



10



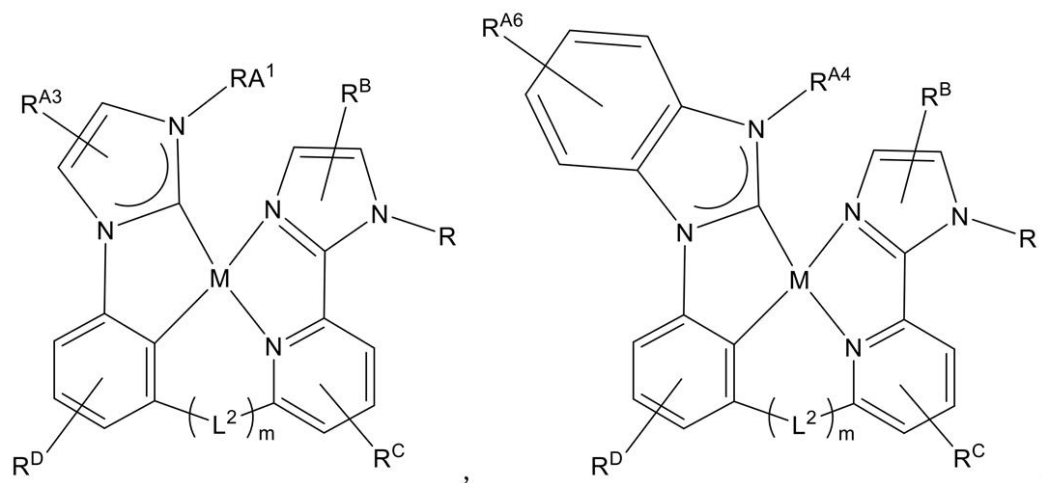
20



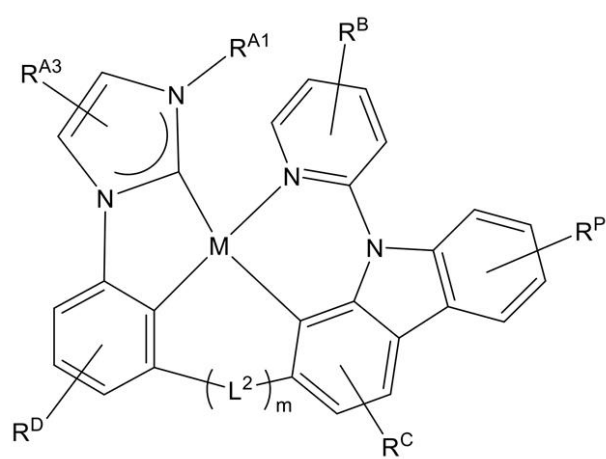
30

40

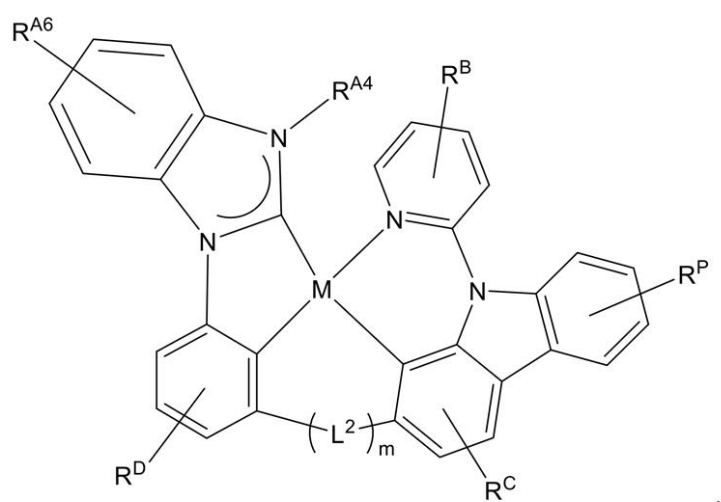
【化 6】



10



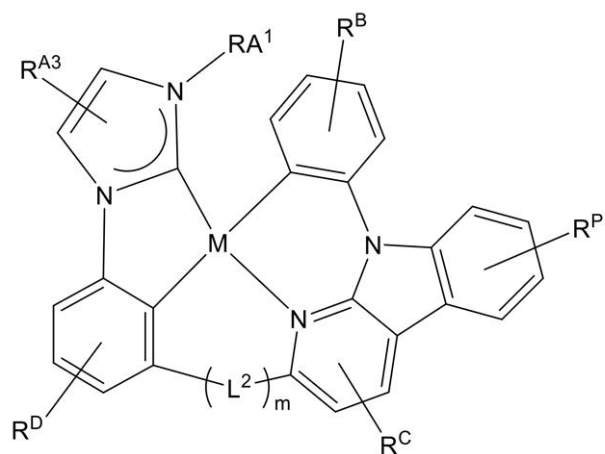
20



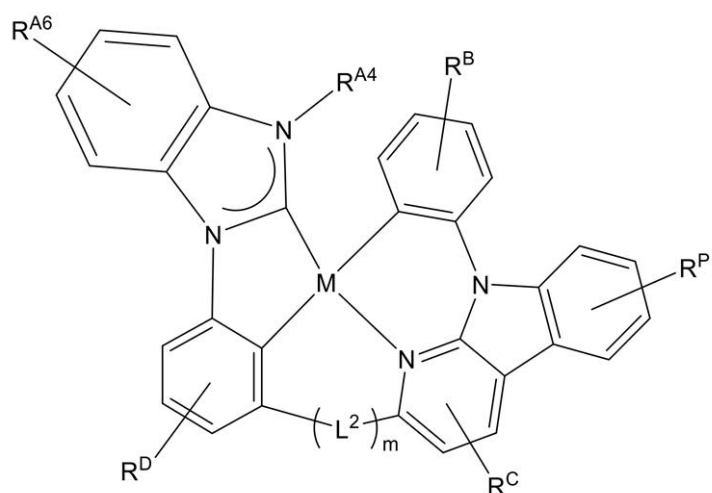
30

40

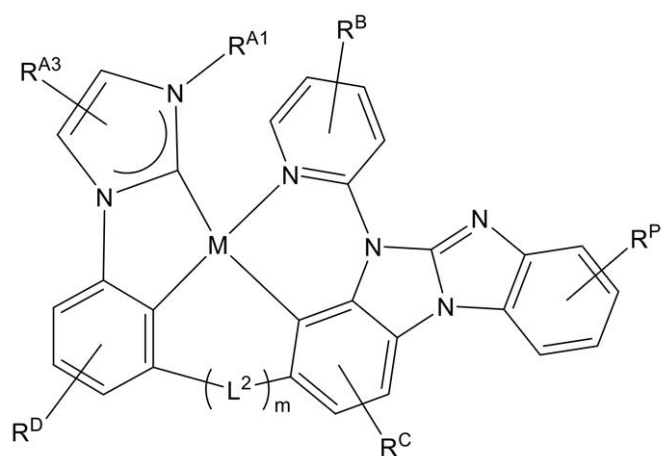
【化 7】



10



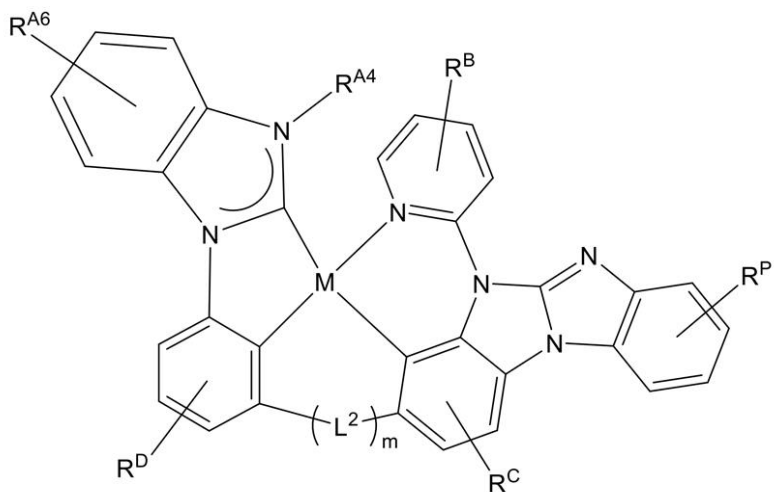
20



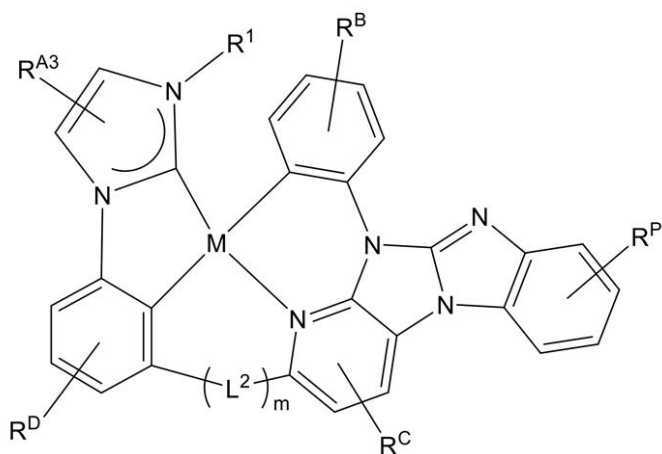
30

40

【化 8】

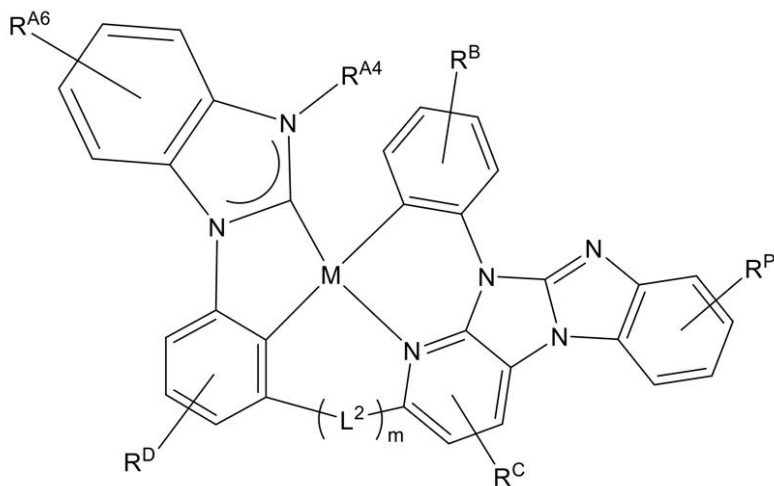


10



20

、及び



30

40

(式中、Rは、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択され；

R^P は、 R^B 及び R^C と同一の定義を有し；

任意の2つの置換基は、互いに結合又は縮合して環を形成することができる。)からなる群から選択される請求項2に記載の化合物。

【請求項12】

前記化合物が、式 $Pt(L_{Cm})(L_{Dn})$ を有する化合物yからなる群から選択され、yは、 $y = 25543(m-1) + n$ で定義される整数であり、mは、1～2438910の整数であり、nは、1～25543の整数であり、 L_{Cm} は、以下の構造を有する

50

請求項 2 に記載の化合物。

【化 9】

L_{Cm}	L_{Cm} の構造	Ar^1, R	m
$L_{C1} \sim L_{C110405}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j$
$L_{C110406} \sim L_{C220810}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j + 110405$
$L_{C220811} \sim L_{C331215}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j + 220810$
$L_{C331216} \sim L_{C441620}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j + 331215$
$L_{C441621} \sim L_{C552025}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j + 441620$
$L_{C552026} \sim L_{C662430}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j + 552025$

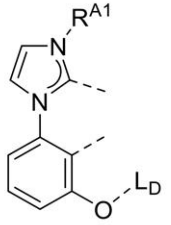
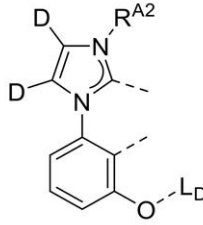
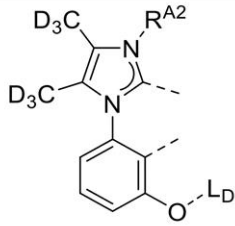
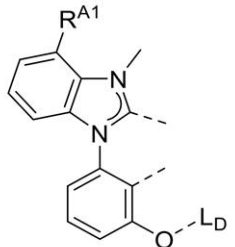
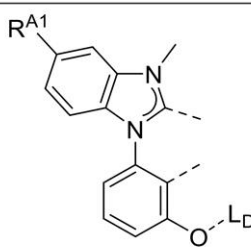
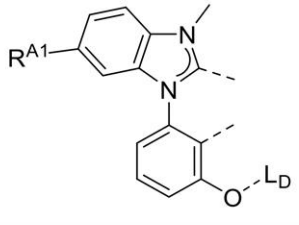
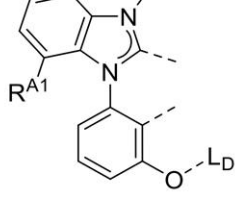
10

20

30

40

【化 1 0】

LC662431～LC772835は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+662430$
LC772836～LC883240は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+772835$
LC883241～LC993645は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+883240$
LC993646～LC1104050は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+993645$
LC1104051～LC1214455 は、右の構造を有 する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+1104050$
LC1214456～LC1324860 は、右の構造を有 する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+1214455$
LC1324861～LC1435265 は、右の構造を有 する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+1324860$

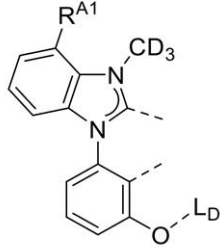
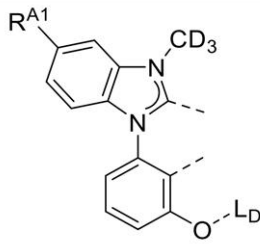
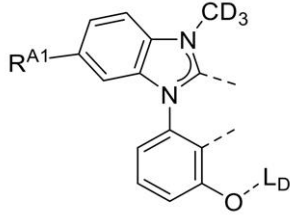
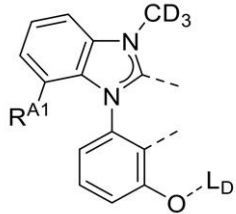
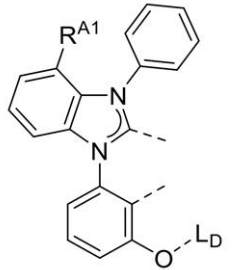
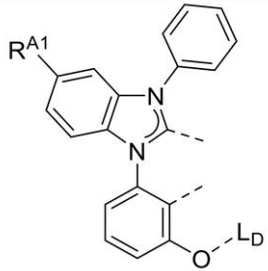
10

20

30

40

【化 1 1】

LC1435266～LC1545670 は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m=j+1435265$
LC1545671～LC1656075 は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m=j+1545670$
LC1656076～LC1766480 は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m=j+1656075$
LC1766481～LC1876885 は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m=j+1766480$
LC1876886～LC1987290 は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m=j+1876885$
LC1987291～L2097695は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m=j+1987290$

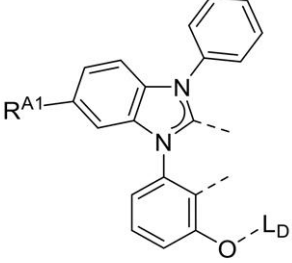
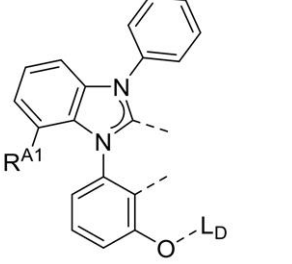
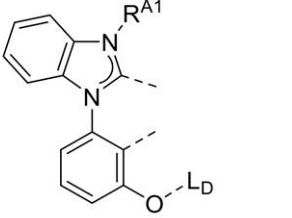
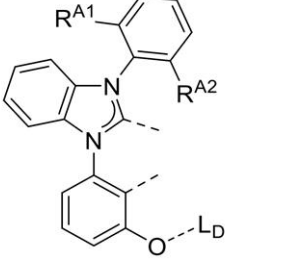
10

20

30

40

【化 1 2】

$L_{C2097696} \sim L_{C2208100}$ は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m = j + 2097695$
$L_{C2208101} \sim L_{C2318505}$ は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m = j + 2208100$
$L_{C2318506} \sim L_{C2428910}$ は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m = j + 2318505$
$L_{C2428910} \sim L_{C2438910}$ は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = B_j$ 、 $R^{A2} = B_k$ 、ここで、 j と k は、1～100の整数である	$m = 100(j-1) + k + 2428910$

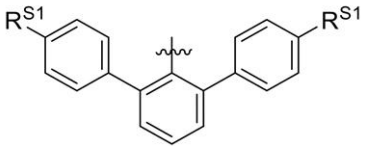
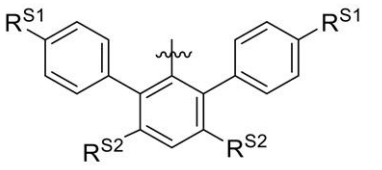
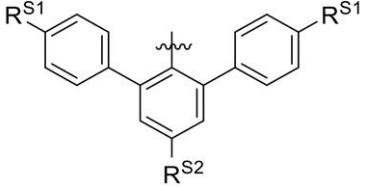
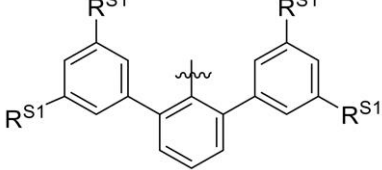
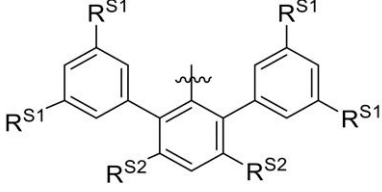
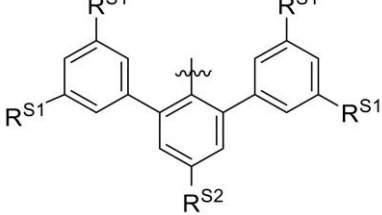
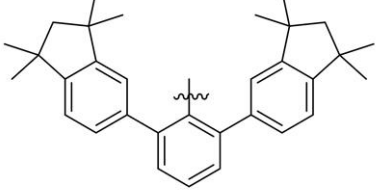
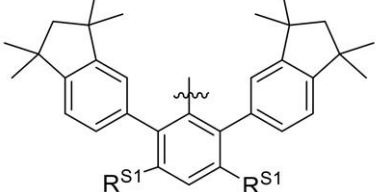
ここで、 $R_1 \sim R_{110405}$ は、以下の構造を有し、

10

20

30

【化 1 3】

R_j	R_m の構造	R^{S1}, R^{S2}, R^{S3}	j
R1~R100 は、右の構造 を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j = t$
R101~R10100 は、右の構造 を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 100$
R10101~R20100 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 10100$
R20101~R20200 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j = t + 20100$
R20201~R30200 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 20100$
R30201~R40200 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 30200$
R40201は、右の 構造を有する			$j = 40201$
R40202~R40301 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j = t + 40201$

10

20

30

40

【化 1 4】

R40302～R40401 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40301$
R40402は、右の 構造を有する			$j=40402$
R40403～R40502 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40402$
R40503～R40602 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40502$
R40603～R50602 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+40602$
R50603は、右の 構造を有する			$j=50603$
R50604～R50703 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+50603$

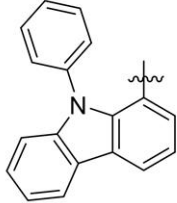
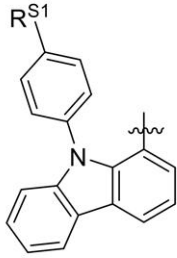
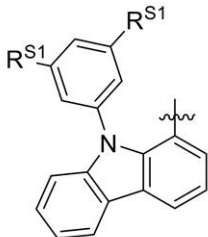
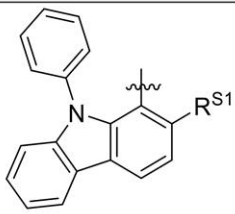
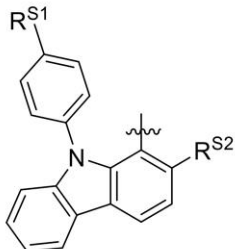
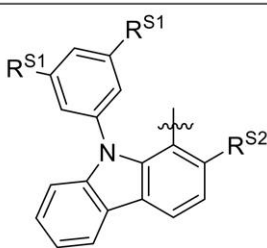
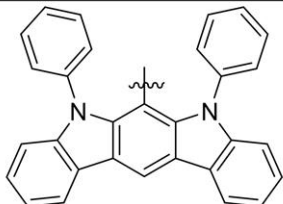
10

20

30

40

【化 1 5】

R50704 は、右の構造を有する			$j = 50704$
R50705～R50804 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j = t + 50704$
R50805～R50904 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j = t + 50804$
R50905～R51004 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$s = t + 50904$
R51005～R61004 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の整数である	$j = 30(t-1) + u + 51004$
R61005～R71004 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の整数である	$j = 30(t-1) + u + 61004$
R71005 は、右の構造を有する			$j = 71005$

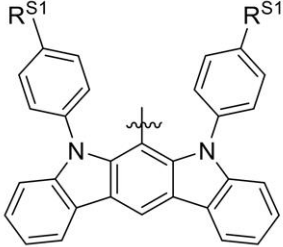

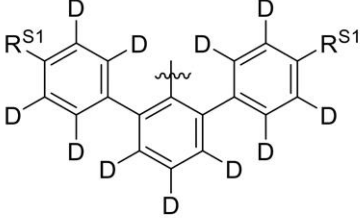
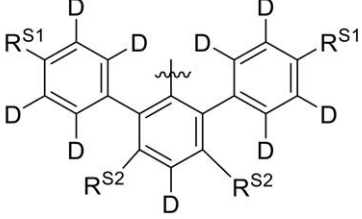
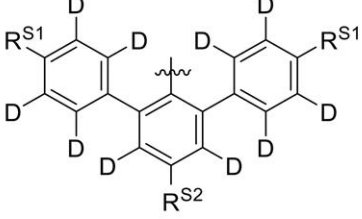
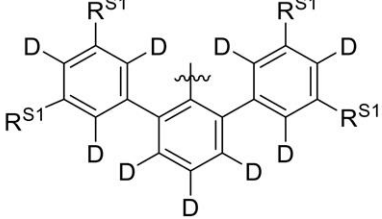
10

20

30

40

【化 1 6】

R71006~R71105 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t+71105$
R71106~R71205 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t+71105$
R71206~R71305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t+71205$
R71306~R81305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j=100(t-1)+u+71305$
R81306~R91305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j=100(t-1)+u+81305$
R91306~R91405 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t+91305$

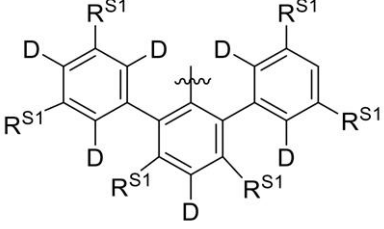
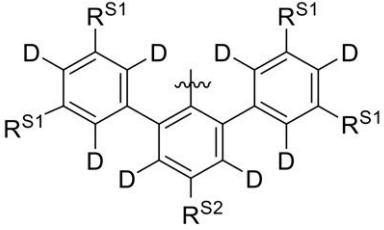
10

20

30

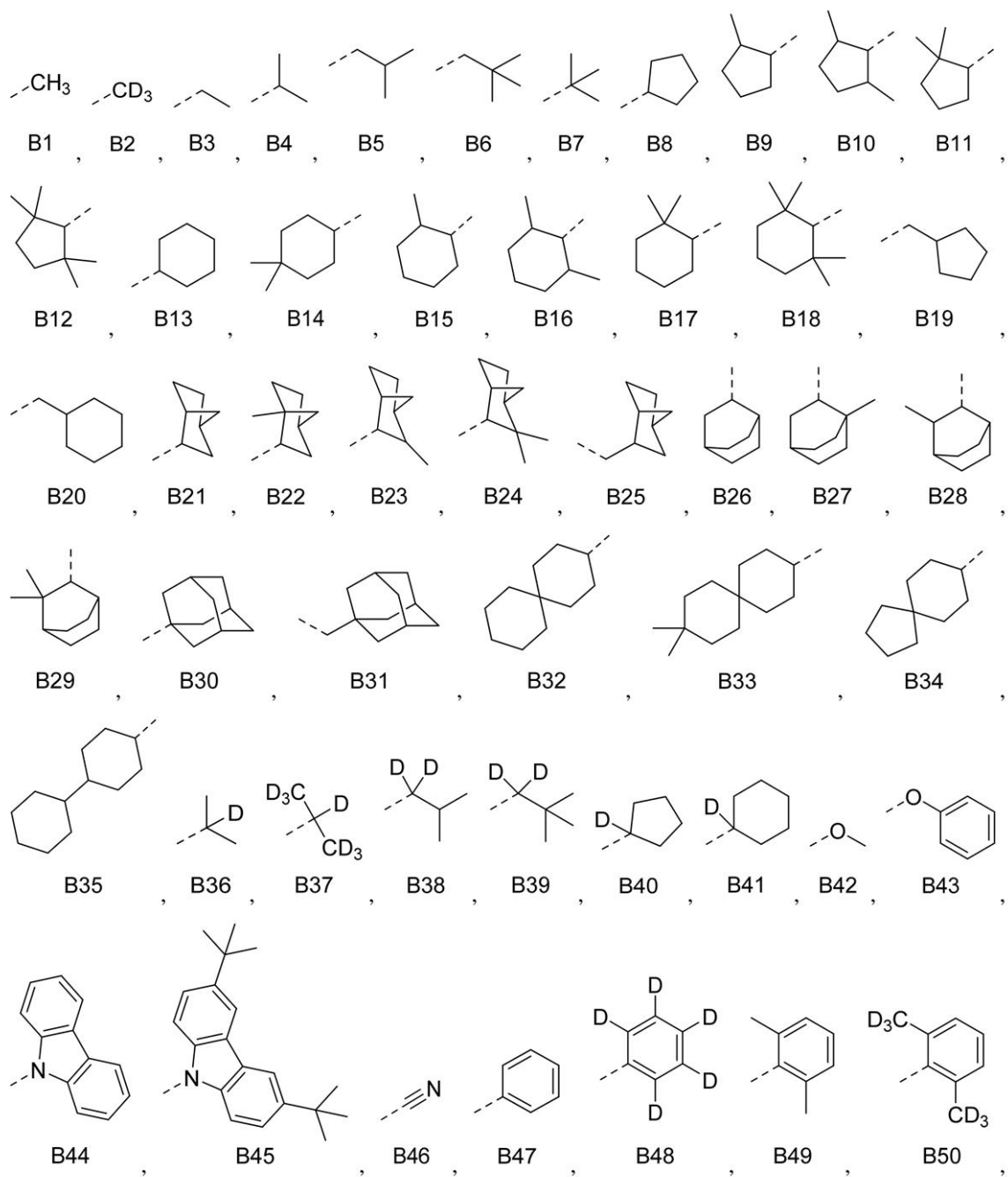
40

【化 1 7】

R91406～R101405 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の整数である	$j=100(t-1)+u+91405$
R101406～ R110405は、右 の構造を有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の整数である	$j=100(t-1)+u+101405$

ここで、B 1 ～ B 1 0 0 は、以下の構造を有し、

【化 1 8】

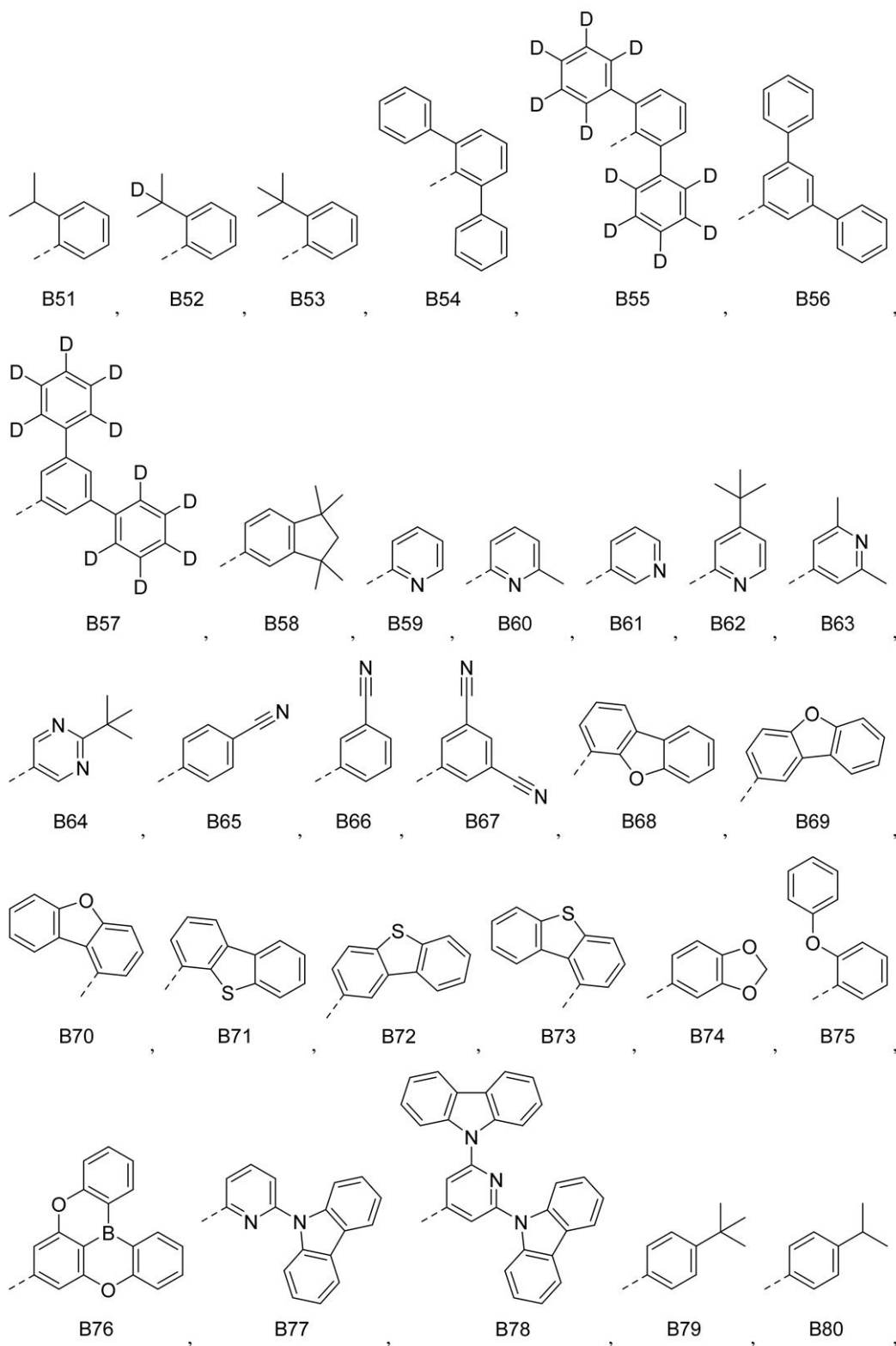


10

20

30

【化 19】



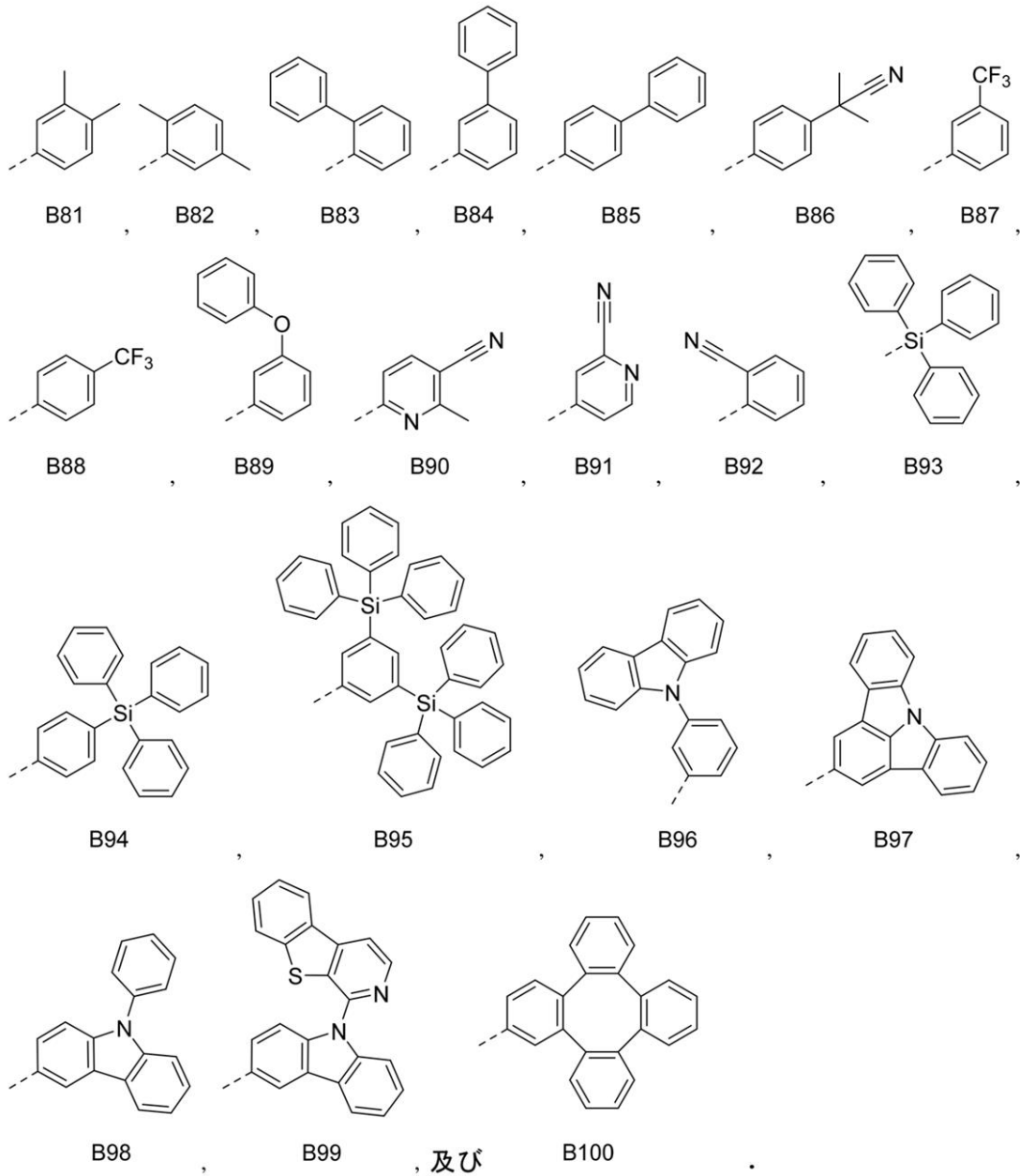
10

20

30

40

【化 20】



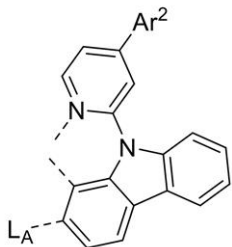
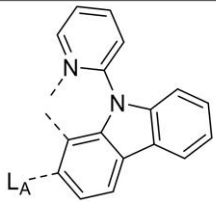
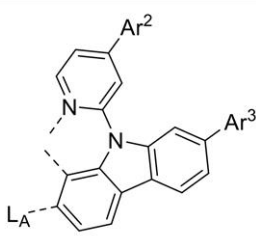
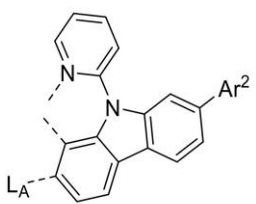
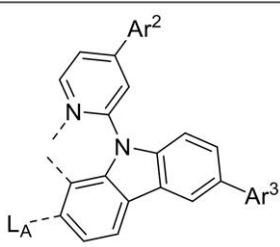
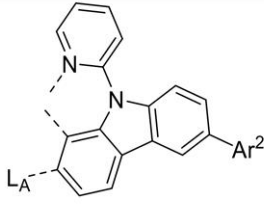
10

20

30

L_{Dn} は、以下の構造を有し、

【化 2 1】

L_{Dn}	L_{Dn} の構造	Ar^2, Ar^3, R^2	n
$L_{D1} \sim L_{D30}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30の整数である	$n = j$
L_{D31} は、右の構造を有する			$n = 31$
$L_{D32} \sim L_{D931}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数であり、 m は、1～30の整数である	$n = 30(j-1) + m + 31$
$L_{D932} \sim L_{D961}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30の整数である	$n = j + 931$
$L_{D962} \sim L_{D1861}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数であり、 m は、1～30の整数である	$n = 30(j-1) + m + 961$
$L_{D1862} \sim L_{D1891}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30の整数である	$n = j + 1861$

10

20

30

40

【化 2 2】

LD1892～LD1921 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 1891$
LD1922～LD2821 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 1921$
LD2822～LD3721 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 2821$
LD3722～LD4621 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 3721$
LD4622～LD4651 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 4621$
LD4652～LD5551 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 4651$

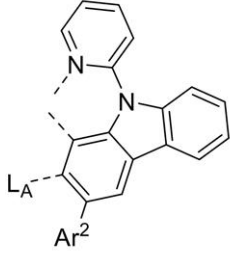
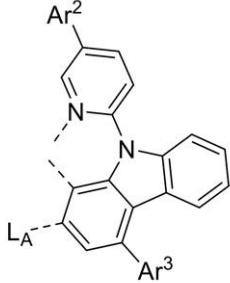
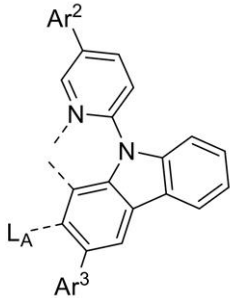
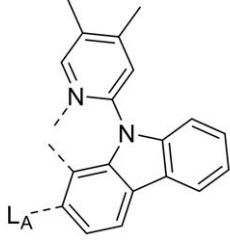
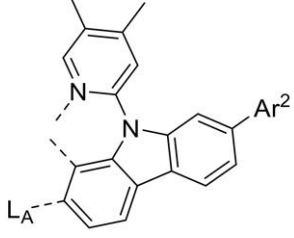
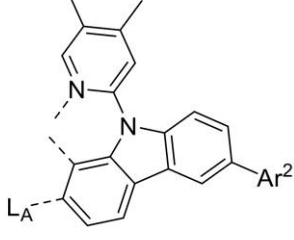
10

20

30

40

【化 2 3】

LD5552～LD5581 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 5551$
LD5582～LD6481 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 5581$
LD6482～LD7381 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 6481$
LD7382 は、右の構 造を有する			$n = 7382$
LD7383～LD7412 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7382$
LD7413～LD7442 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7412$

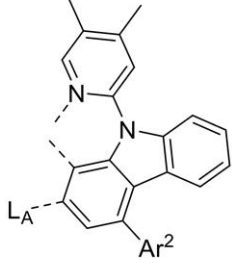
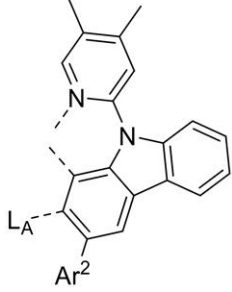
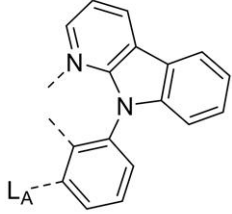
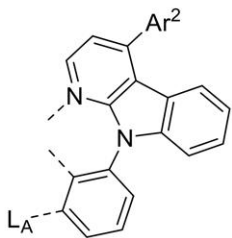
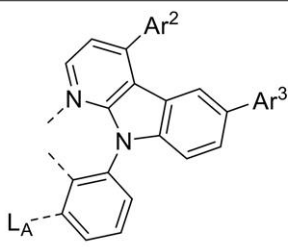
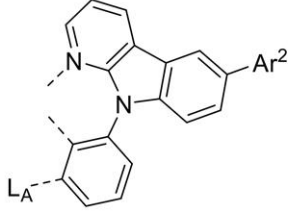
10

20

30

40

【化 2 4】

LD7443～LD7472 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7442$
LD7473～LD7502 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7472$
LD7503 は、右の構 造を有する			$n = 7503$
LD7504～LD7533 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7503$
LD7534～LD8433 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 7533$
LD8434～LD8463 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 8433$

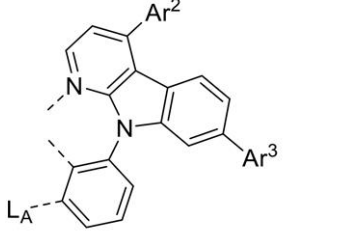
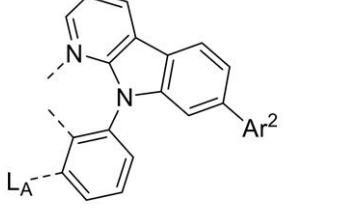
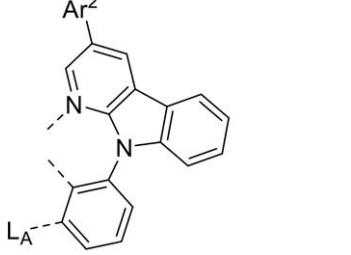
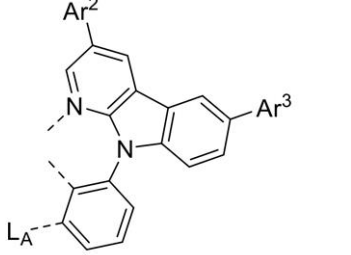
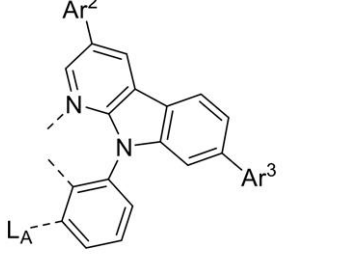
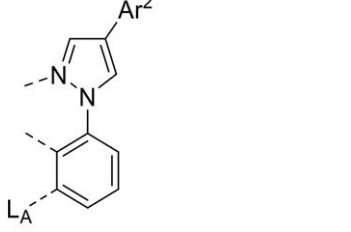
10

20

30

40

【化 2 5】

LD8464～LD9363は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 8463$
LD9364～LD9393は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 9363$
LD9394～LD9423は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 9393$
LD9424～LD10323は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 9423$
LD10324～LD11223は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 10323$
LD11224～LD11253は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 11223$

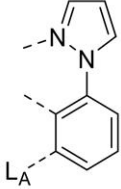
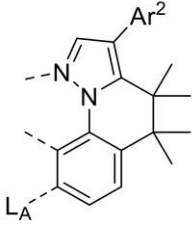
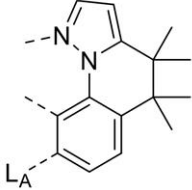
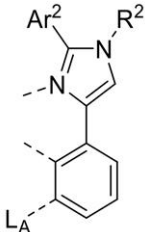
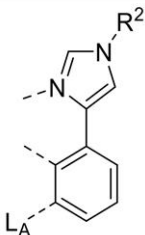
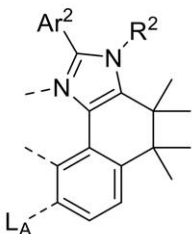
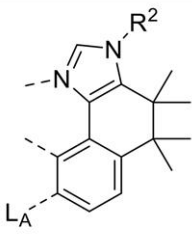
10

20

30

40

【化 2 6】

LD11254は、右の構造を有する			$n = 11254$
LD11255～LD11284は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30の整数である	$n = j + 11254$
LD11285は、右の構造を有する			$n = 11285$
LD11286～LD12185は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $R^2 = Al$ 、ここで、 j は、1～30の整数であり、 l は、1～30の整数である	$n = 30(j - 1) + l + 11285$
LD12186～LD12215は、右の構造を有する		式中、 $R^2 = Al$ 、ここで、 l は、1～30の整数である	$n = l + 12185$
LD12216～LD13115は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $R^2 = Al$ 、ここで、 j は、1～30の整数であり、 l は、1～30の整数である	$n = 30(j - 1) + l + 12215$
LD13116～LD13145は、右の構造を有する		式中、 $R^2 = Al$ 、ここで、 l は、1～30の整数である	$n = l + 13115$

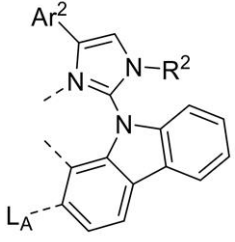
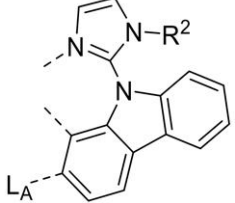
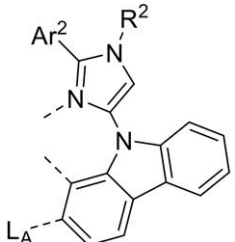
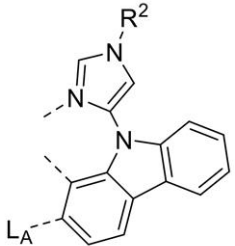
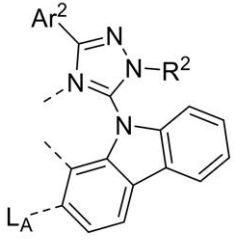
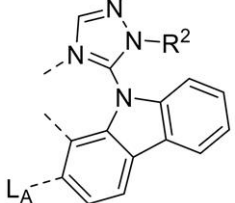
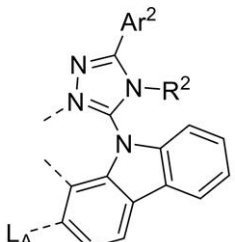
10

20

30

40

【化 2 7】

<p>L_{D13146}～L_{D14045}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=Aj 及び R²=Al、ここで、j は、1～30の整数で あり、lは、1～30の 整数である</p>	<p>$n = 30(j-1) + l + 13145$</p>
<p>L_{D14046}～L_{D14075}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、R²=Al、ここ で、lは、1～30の整 数である</p>	<p>$n = l + 14045$</p>
<p>L_{D14076}～L_{D14975}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=Aj 及び R²=Al、ここで、j は、1～30の整数で あり、lは、1～30の 整数である</p>	<p>$n = 30(j-1) + l + 14075$</p>
<p>L_{D14976}～L_{D15005}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、R²=Al、ここ で、lは、1～30の整 数である</p>	<p>$n = l + 14975$</p>
<p>L_{D15006}～L_{D15905}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=Aj 及び R²=Al、ここで、j は、1～30の整数で あり、lは、1～30の 整数である</p>	<p>$n = 30(j-1) + l + 15005$</p>
<p>L_{D15906}～L_{D15935}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、R²=Al、ここ で、lは、1～30の整 数である</p>	<p>$n = l + 15905$</p>
<p>L_{D15936}～L_{D16835}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=Aj 及び R²=Al、ここで、j は、1～30の整数で あり、lは、1～30の 整数である</p>	<p>$n = 30(j-1) + l + 15935$</p>

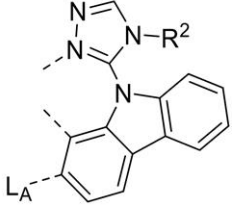
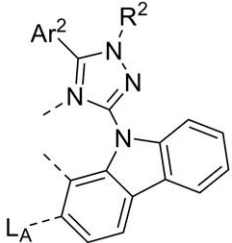
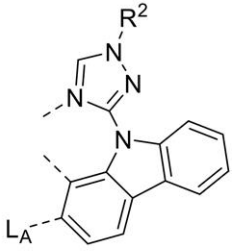
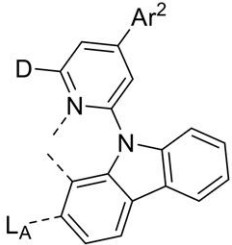
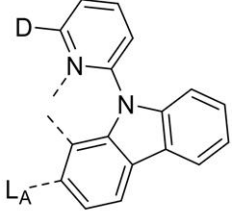
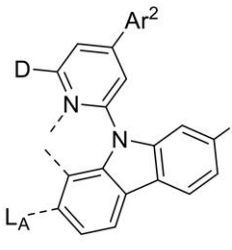
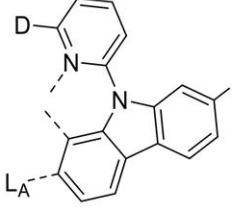
10

20

30

40

【化 2 8】

L _{D16836} ～L _{D16865} は、 右の構造を有する		式中、R ² =Al、こ こで、 <i>l</i> は、1～30の整 数である	$n = l + 16835$
L _{D16866} ～L _{D17765} は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =A _{<i>j</i>} 及び R ² =Al、ここで、 <i>j</i> は、1～30の整数で あり、 <i>l</i> は、1～30の 整数である	$n = 30(j - 1) + l + 16865$
L _{D17766} ～L _{D17795} は、 右の構造を有する		式中、R ² =Al、こ こで、 <i>l</i> は、1～30の整 数である	$n = l + 17765$
L _{D17796} ～L _{D17825} は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =A _{<i>j</i>} 、こ こで、 <i>j</i> は、1～30の整 数である	$n = j + 17795$
L _{D17826} は、右の構 造を有する			$n = 17826$
L _{D17827} ～L _{D18726} は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =A _{<i>j</i>} 及び Ar ³ =A _{<i>m</i>} 、ここで、 <i>j</i> は、1～30の整数で あり、 <i>m</i> は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 17826$
L _{D18727} ～L _{D18756} は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =A _{<i>j</i>} 、こ こで、 <i>j</i> は、1～30の整 数である	$n = j + 18726$

10

20

30

40

【化 2 9】

LD18757～LD19656は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 18756$
LD19657～LD19686は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 19656$
LD19687～LD19716は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 19686$
LD19717は、右の構 造を有する			$n = 19717$
LD19718～LD20617は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 19717$
LD20618～LD20647は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 20617$
LD20648～LD21547は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 20647$

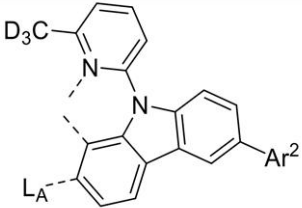
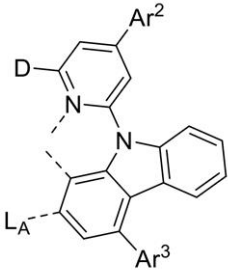
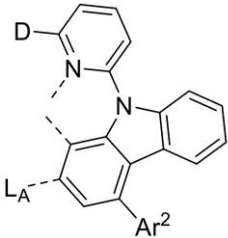
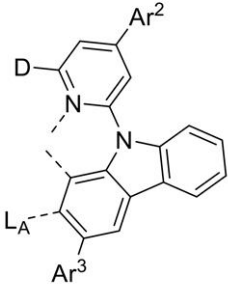
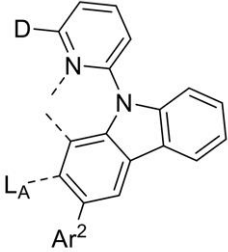
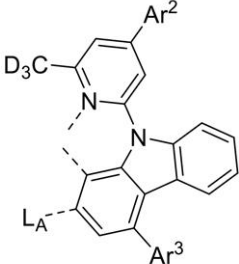
10

20

30

40

【化 3 0】

LD21548～LD21577は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 21547$
LD21578～LD22477は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 21577$
LD22478～LD22507は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 22477$
LD22508～LD23407は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 22507$
LD23408～LD23437は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 23407$
LD23438～LD24337は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 23437$

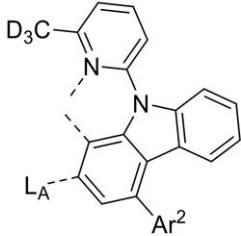
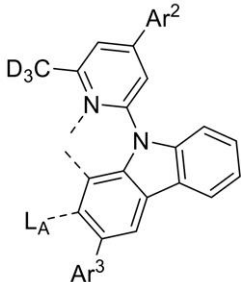
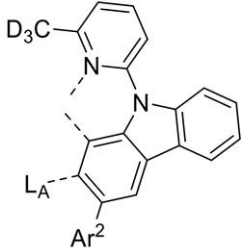
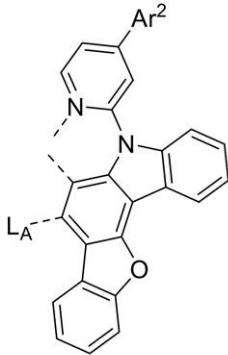
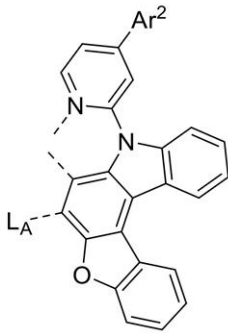
10

20

30

40

【化 3 1】

LD24338～LD24367は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 24337$
LD24368～LD25267は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 24367$
LD25268～LD25297は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25267$
LD25298～LD25327は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25297$
LD25328～LD25357は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25327$

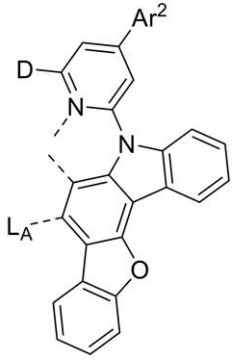
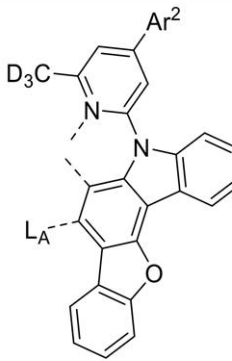
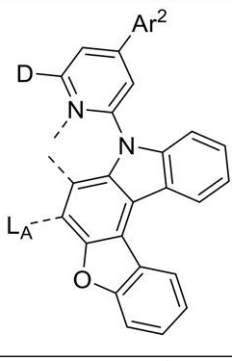
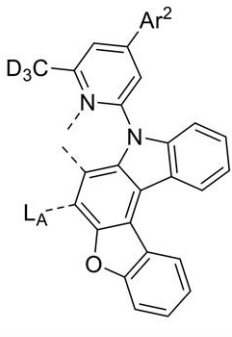
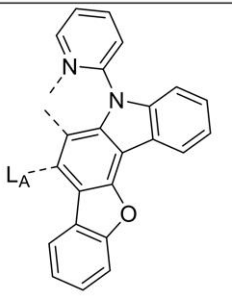
10

20

30

40

【化 3 2】

<p>L_{D25358}～L_{D25387}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=A_j、こ こで、jは、1～30の整 数である</p>	<p>$n=j+25357$</p>
<p>L_{D25388}～L_{D25417}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=A_j、こ こで、jは、1～30の整 数である</p>	<p>$n=j+25387$</p>
<p>L_{D25418}～L_{D25447}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=A_j、こ こで、jは、1～30の整 数である</p>	<p>$n=j+25417$</p>
<p>L_{D25448}～L_{B25477}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=A_j、こ こで、jは、1～30の整 数である</p>	<p>$n=j+25447$</p>
<p>L_{D25478}は、右の構 造を有する</p>			<p>$n=25478$</p>

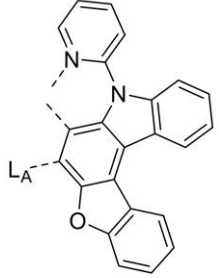
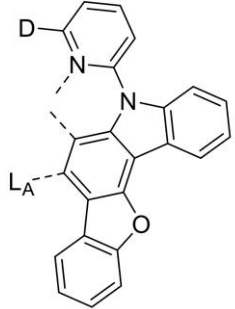
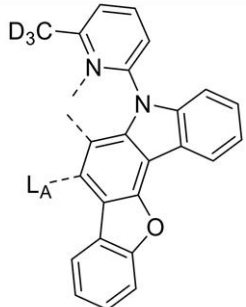
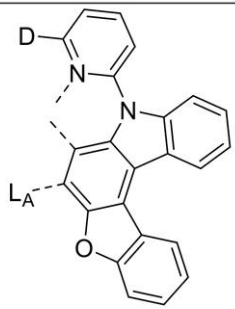
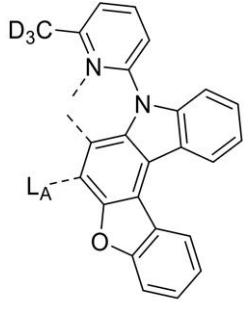
10

20

30

40

【化 3 3】

LD25479は、右の構造を有する			$n = 25479$
LD25480は、右の構造を有する			$n = 25480$
LD25481は、右の構造を有する			$n = 25481$
LD25482は、右の構造を有する			$n = 25482$
LD25483は、右の構造を有する			$n = 25483$

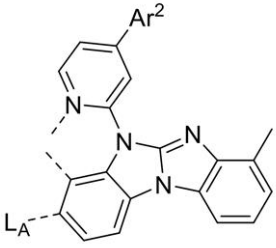
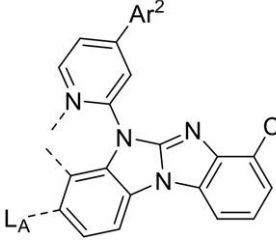
10

20

30

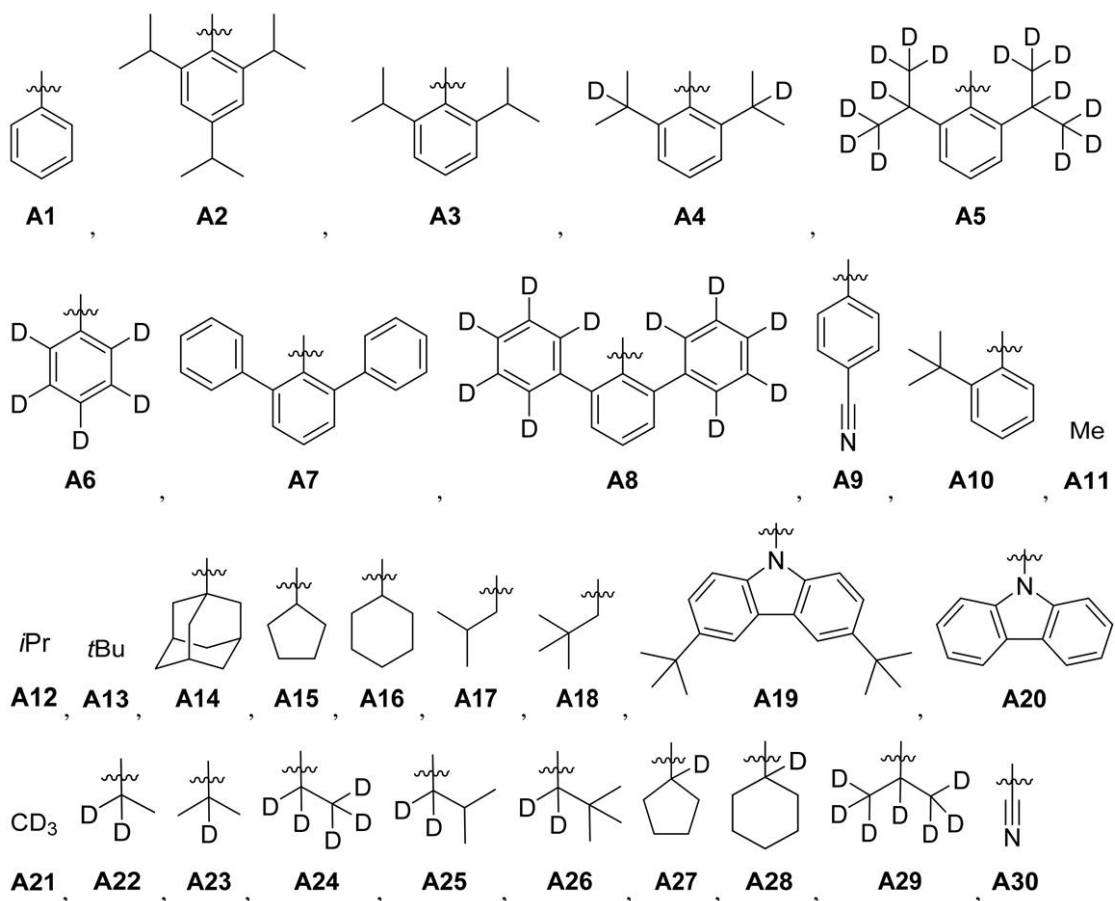
40

【化 3 4】

LD25484~LD25513 は、 右の構造を有する		式中、Ar²=A _j 、こ こで、jは、1~30の整 数である	n=j+25483
LD25514~LD25543 は、 右の構造を有する		式中、Ar²=A _j 、こ こで、jは、1~30の整 数である	n=j+25513

式中、A 1 ~ A 3 0 は、以下の構造を有する。

【化 3 5】

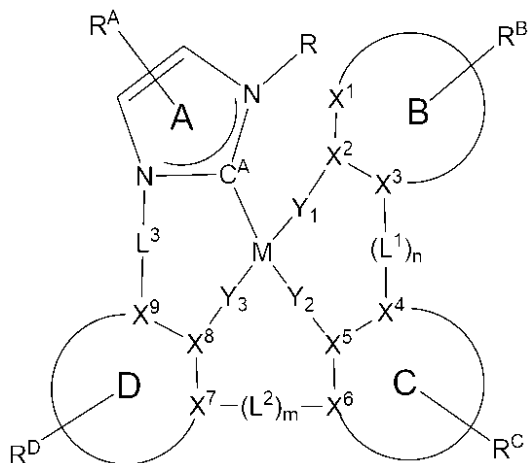


【請求項 1 3】

アノードと、
カソードと、

前記アノードと前記カソードとの間に配置された有機層とを含み、前記有機層は、以下の式 I の化合物を含むことを特徴とする有機発光デバイス (OLED)。

【化 3 6】



10

(式中、

Mは、Pd又はPt；

環B、C、及びDは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環であり；

 $X^1 \sim X^9$ は、それぞれ独立して、C又はNであり； $Y_1 \sim Y_3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、及びSからなる群から選択され； $Y_1 \sim Y_3$ の少なくとも1つは、直接結合であり； C^A は、カルベン炭素であり；

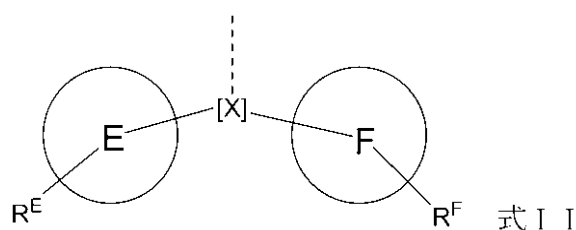
$L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 、 BR' 、及び NR' 、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；

m及びnは、それぞれ独立して、0又は1であり；

m及びnの少なくとも1つは、1であり；

R、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも1つは、以下の式I I：

【化 3 7】



30

の構造を有する基を含み、

式中、

[X]は、5員ヘテロ環、5員炭素環、6員ヘテロ環、6員炭素環、又は2つ以上の縮合環を含む縮合ヘテロ環又は炭素環系であり；

環E及びFは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環であり；

R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノ最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；

各R、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、水素である、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基であり；

50

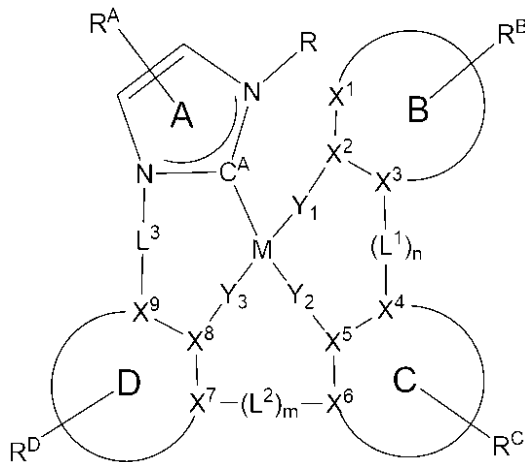
任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；
 R 及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができ；
 式 I I の構造を有する基の分子量は、395 グラム / モル以上である。)

【請求項 14】

アノードと、
 カソードと、

前記アノードと前記カソードとの間に配置された有機層とを含み、前記有機層が、以下の式 I の化合物を含む有機発光デバイス (OLED) を含むことを特徴とする消費者製品。

【化 38】



10

20

(式中、

M は、Pd 又は Pt；

環 B、C、及び D は、それぞれ独立して、5 員又は 6 員の炭素環又はヘテロ環であり；

X¹ ~ X⁹ は、それぞれ独立して、C 又は N であり；

Y₁ ~ Y₃ は、それぞれ独立して、直接結合、O、及び S からなる群から選択され；

Y₁ ~ Y₃ の少なくとも 1 つは、直接結合であり；

C^A は、カルベン炭素であり；

30

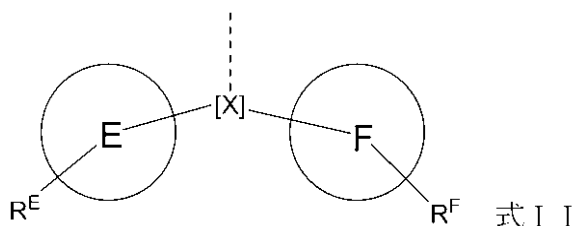
L¹ ~ L³ は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、C(R')(R''), Si(R')(R''), B(R'), 及び N(R')、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；

m 及び n は、それぞれ独立して、0 又は 1 であり；

m 及び n の少なくとも 1 つは、1 であり；

R、R^A、R^B、R^C、R^D、L¹、L²、及び L³ の少なくとも 1 つは、以下の式 I I：

【化 39】



40

の構造を有する基を含み、

式中、

[X] は、5 員ヘテロ環、5 員炭素環、6 員ヘテロ環、6 員炭素環、又は 2 つ以上の縮合環を含む縮合ヘテロ環又は炭素環系であり；

環 E 及び F は、それぞれ独立して、5 員又は 6 員の炭素環又はヘテロ環であり；

50

R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノ最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；

各 R 、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、水素である、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリーロキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基であり；

任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；

10

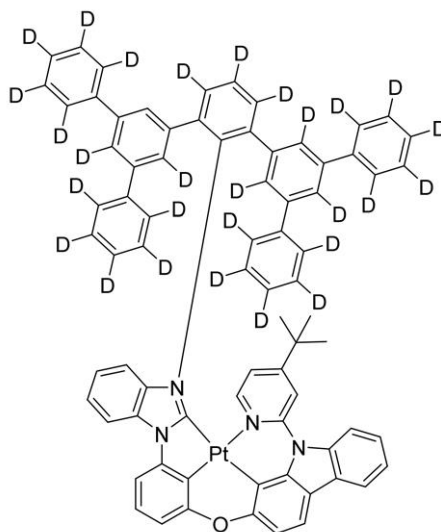
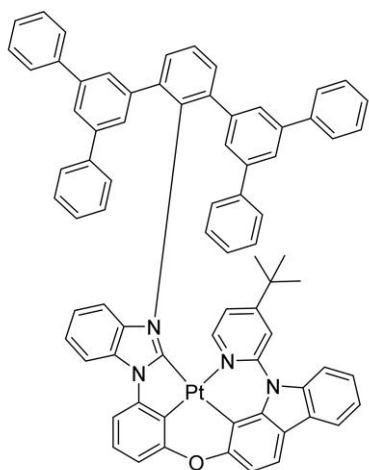
R 及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができ；

式 I I の構造を有する基の分子量は、395 グラム / モル以上である。)

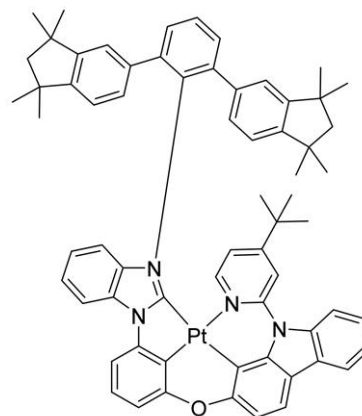
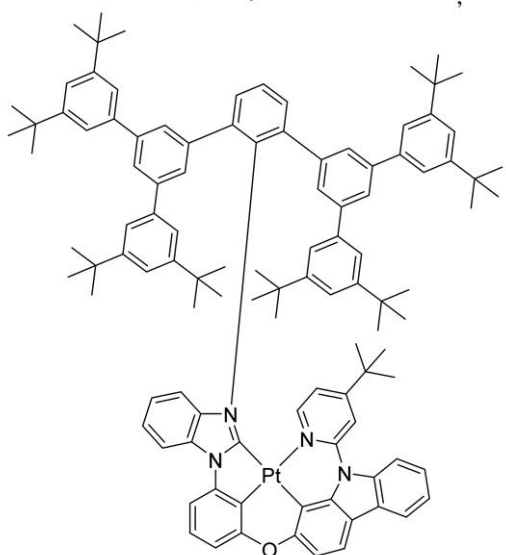
【請求項 15】

前記化合物が、下記からなる群から選択される請求項 1 に記載の化合物。

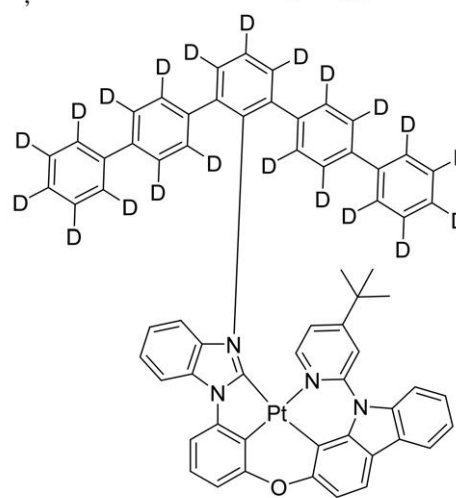
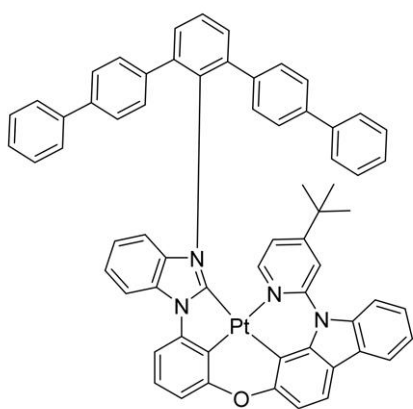
【化 4 0】



10



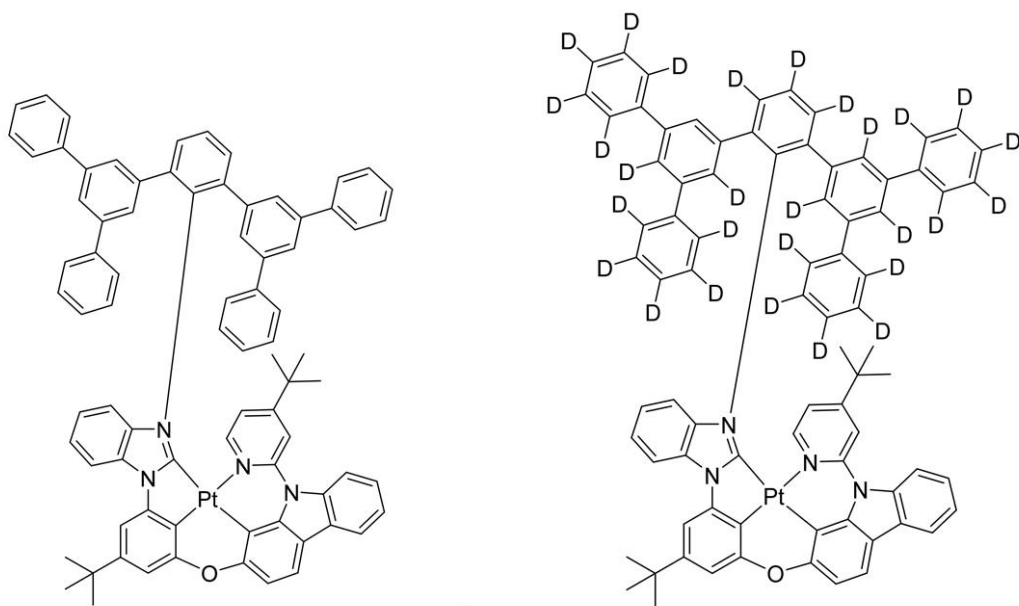
20



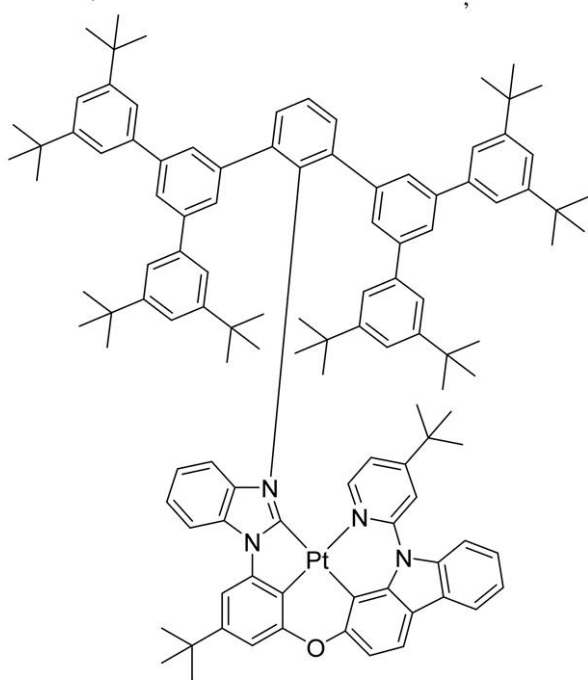
30

40

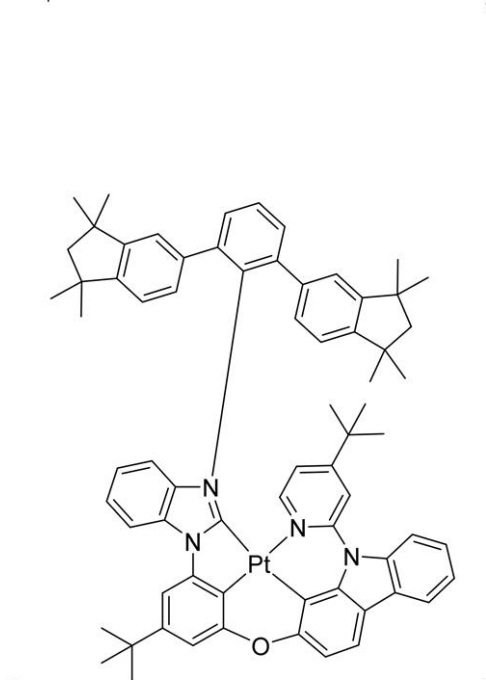
【化 4 1】



10

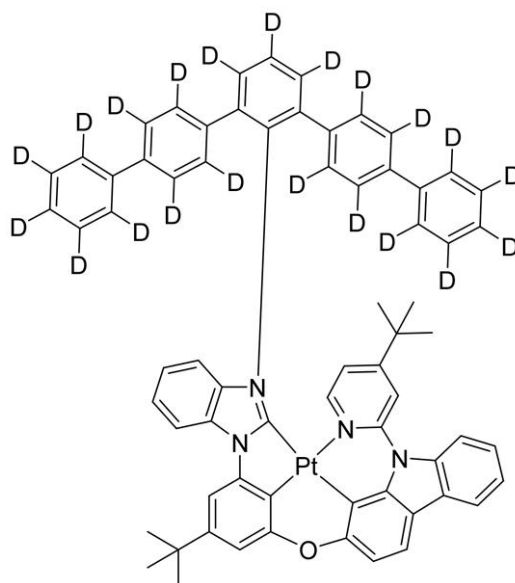
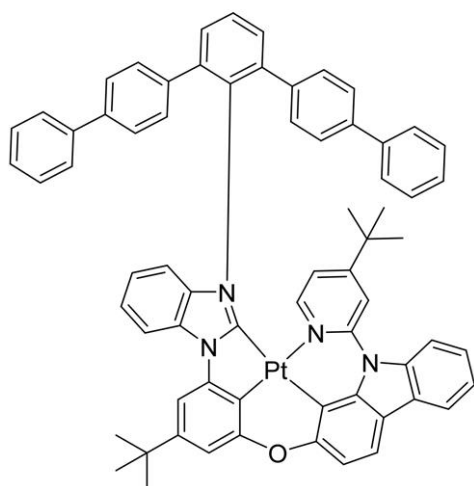


20

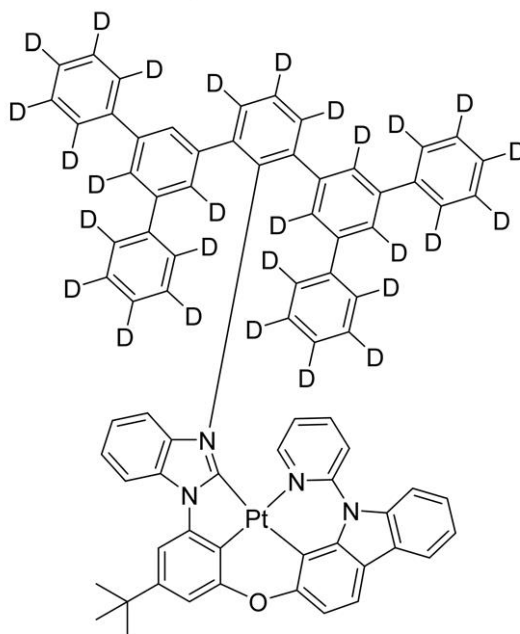
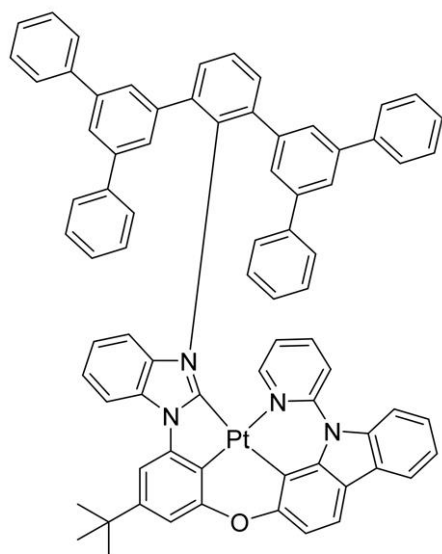


30

【化 4 2】



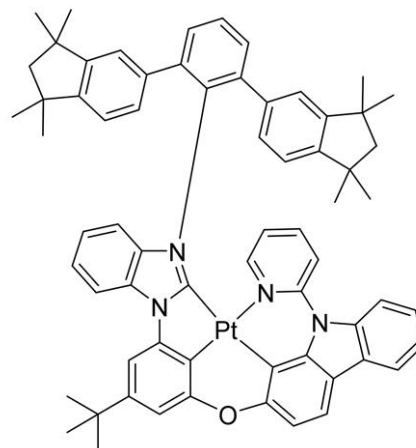
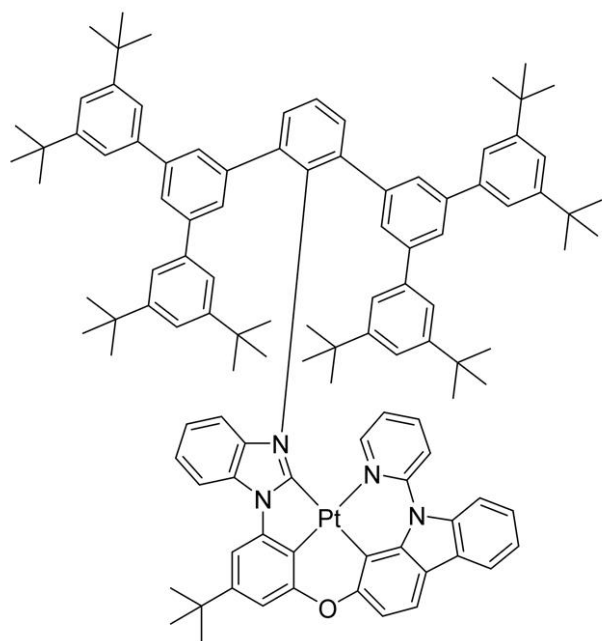
10



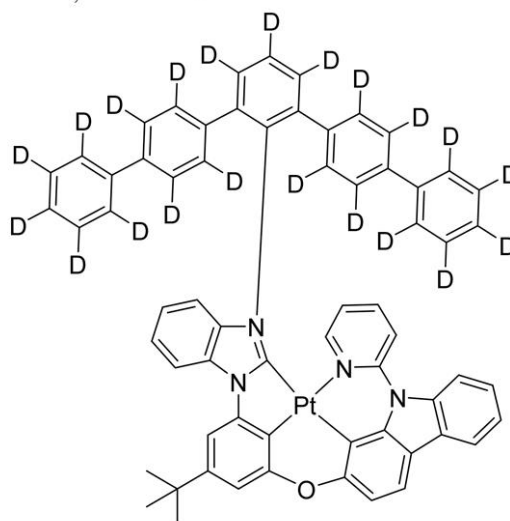
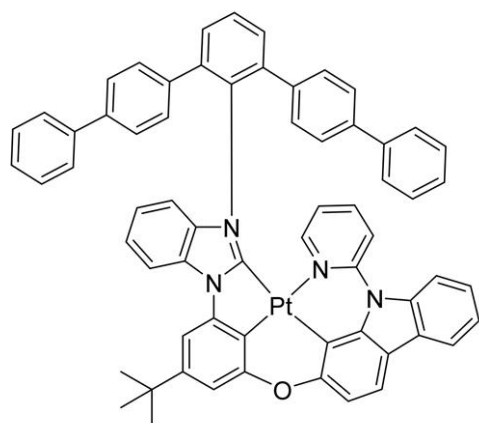
20

30

【化 4 3】



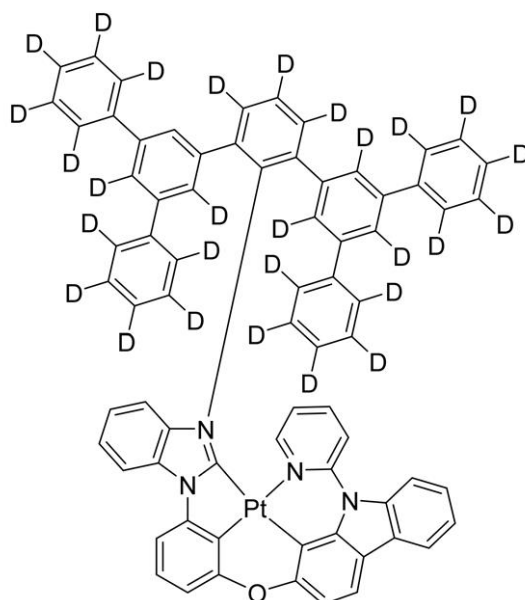
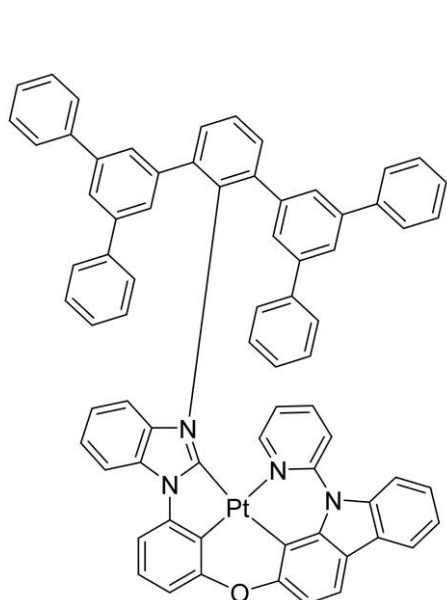
10



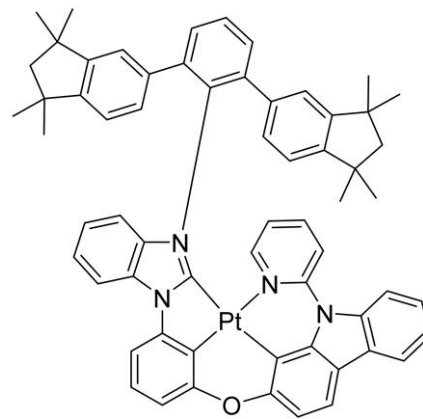
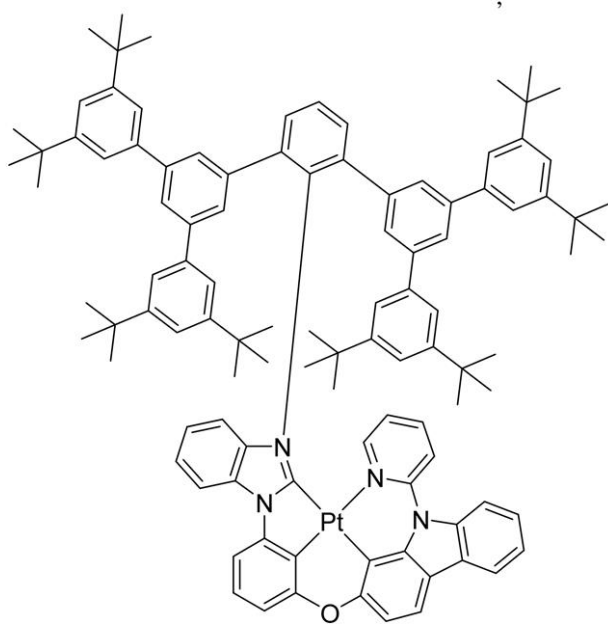
20

30

【化 4 4】

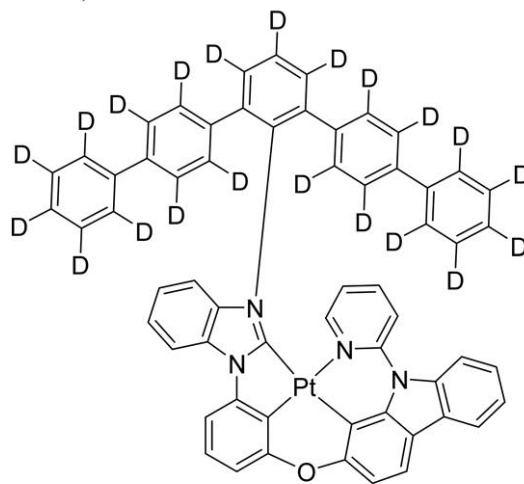
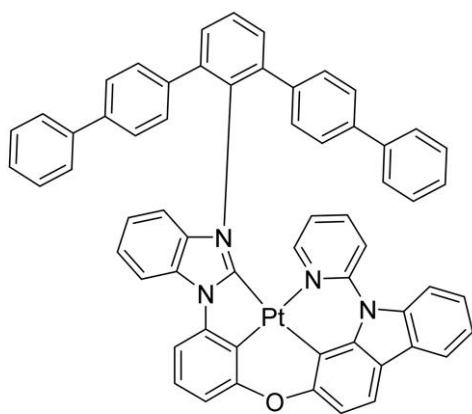


10



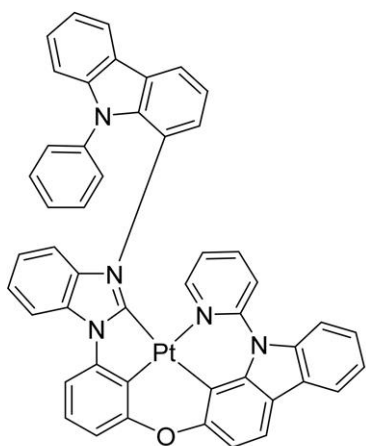
20

30

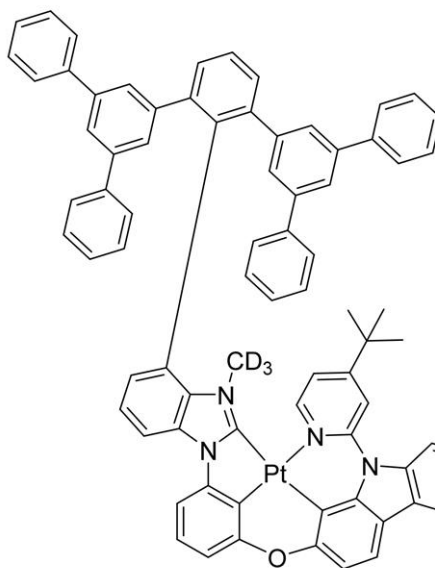


40

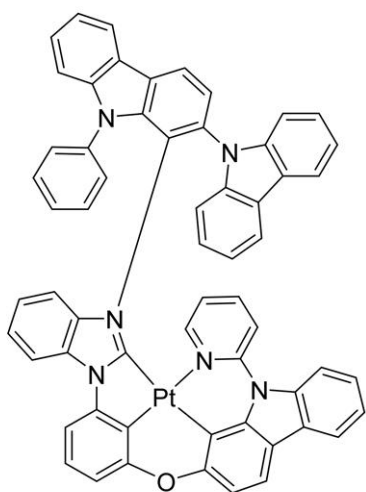
【化 4 5】



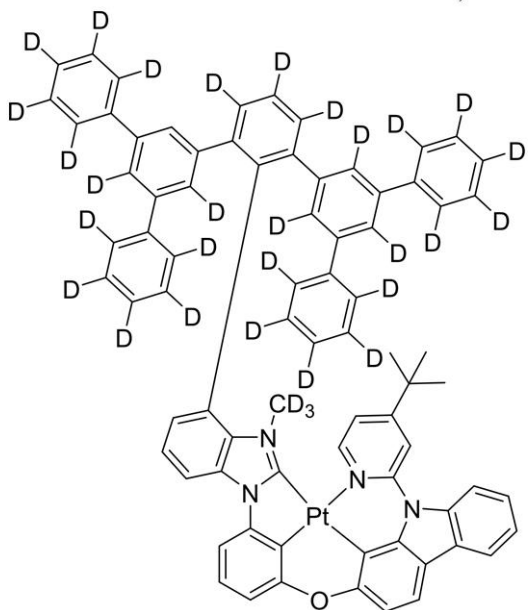
10



20

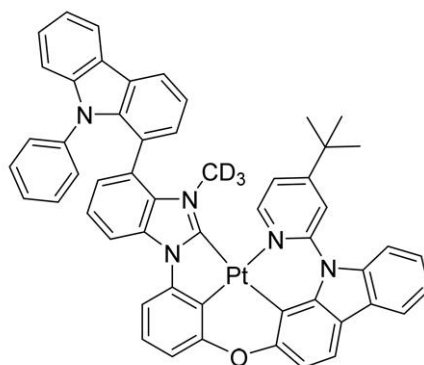
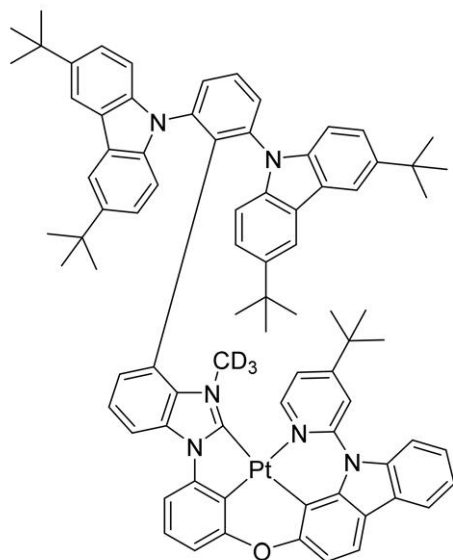


30

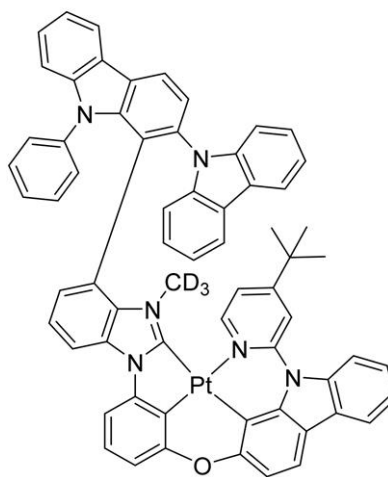
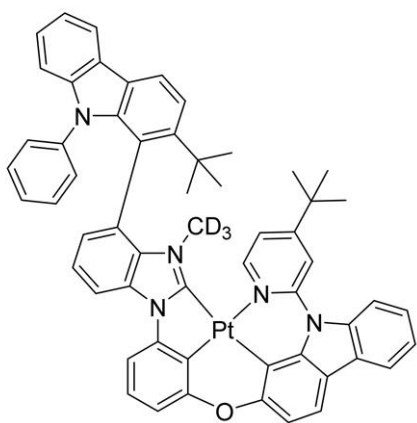


40

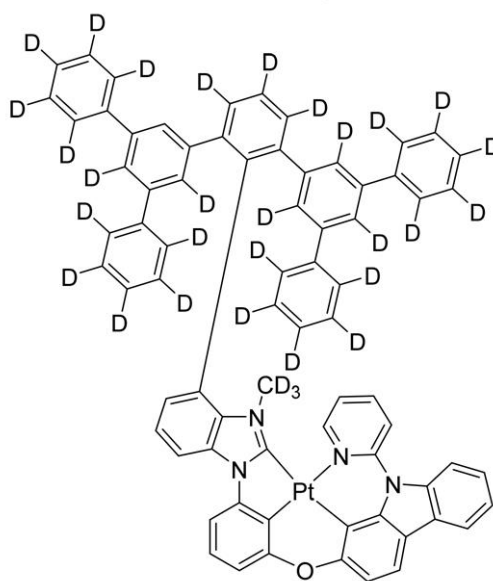
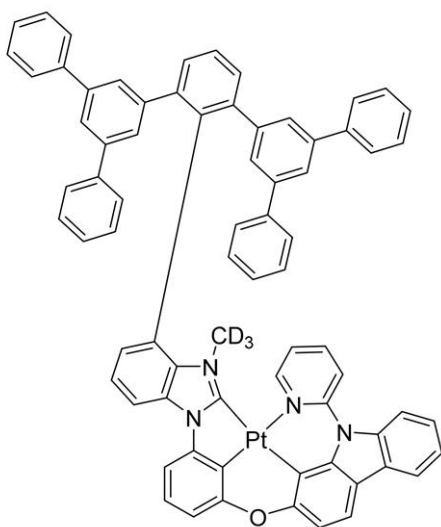
【化 4 6】



10



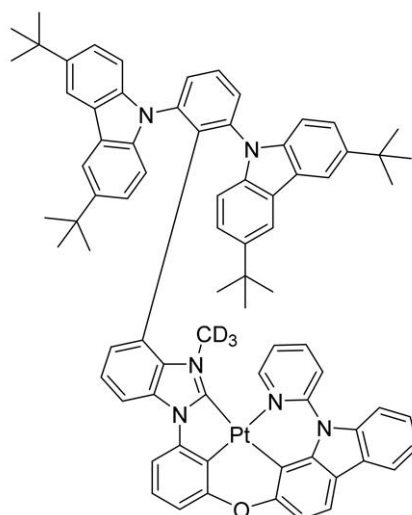
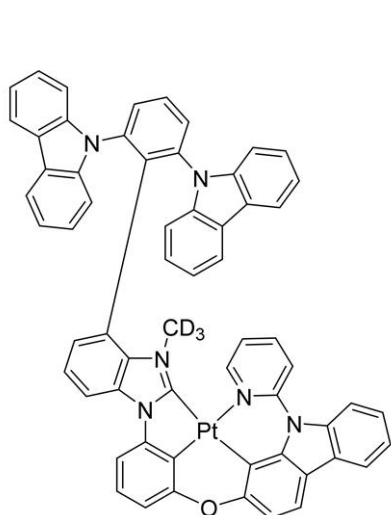
20



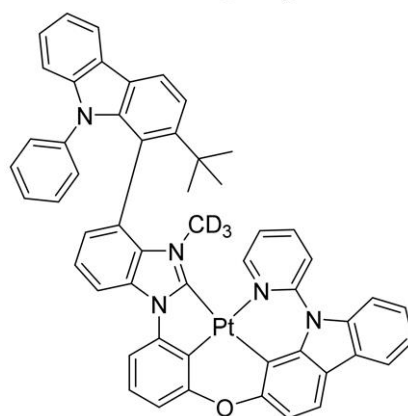
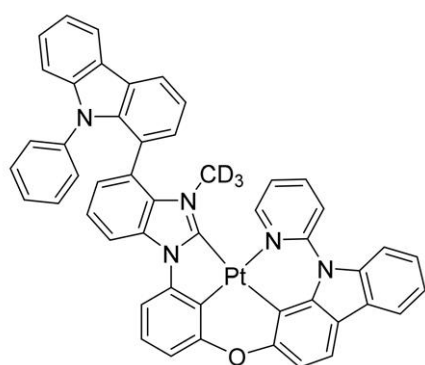
30

40

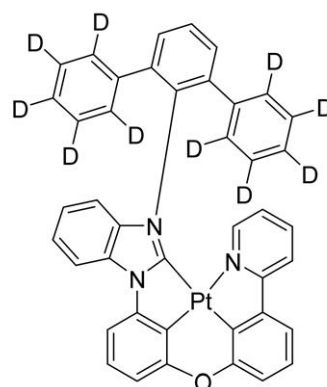
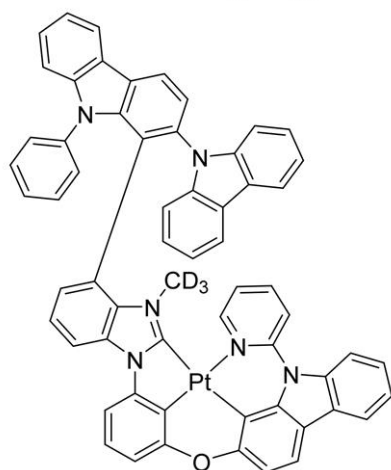
【化 4 7】



10

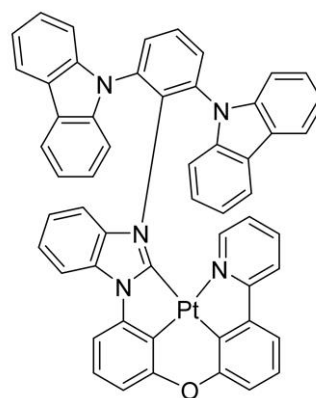
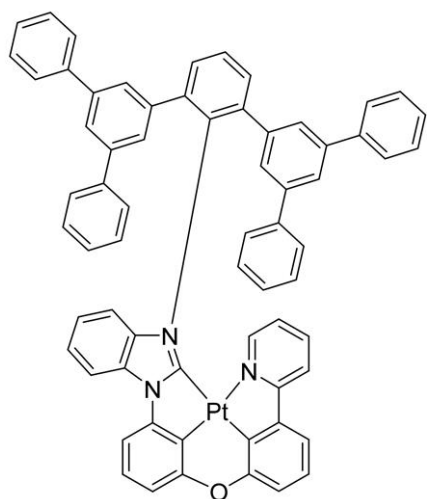


20

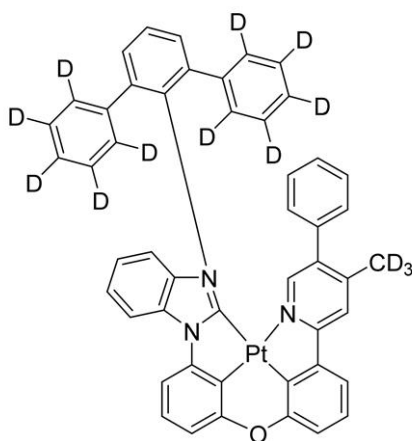
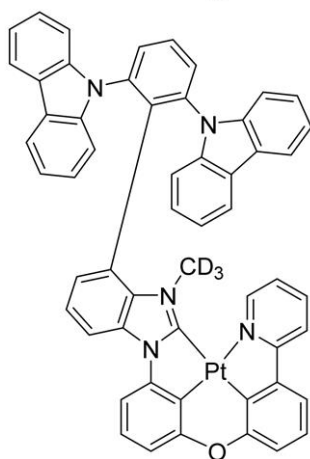


30

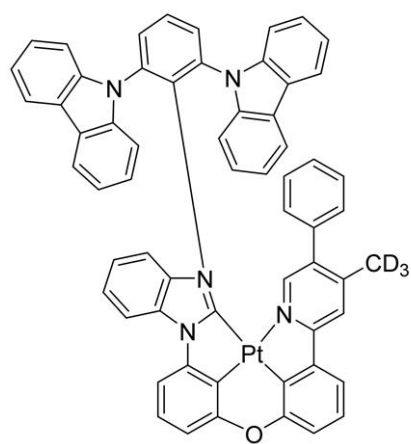
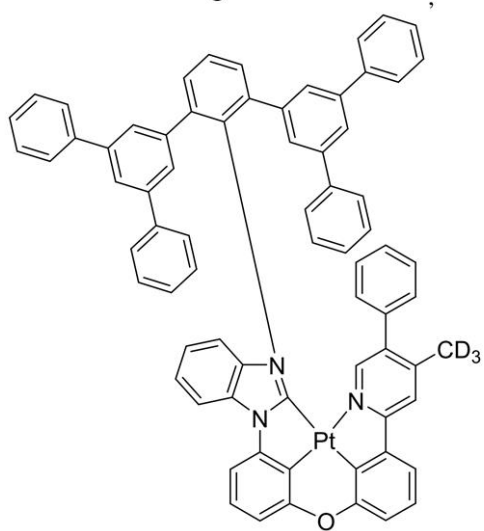
【化 4 8】



10



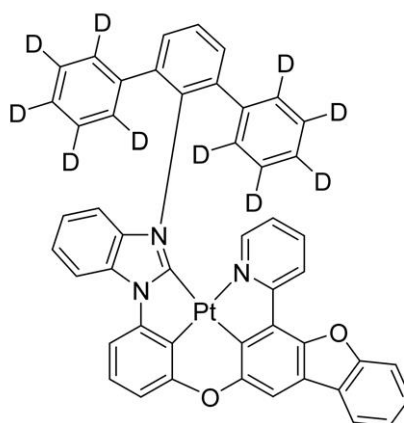
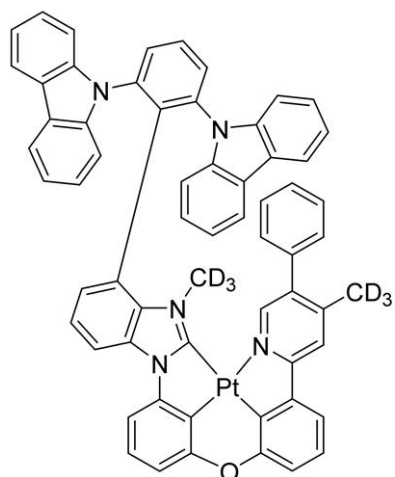
20



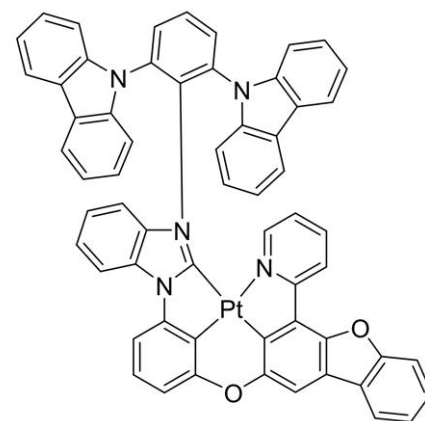
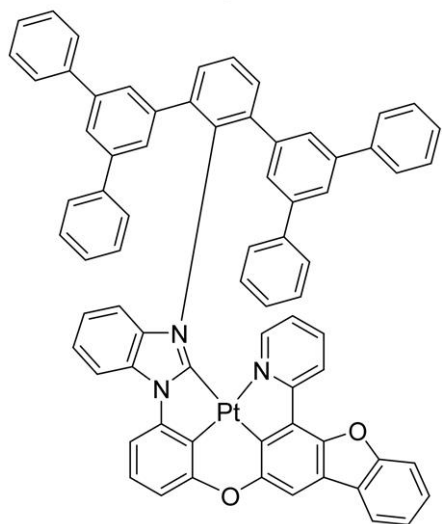
30

40

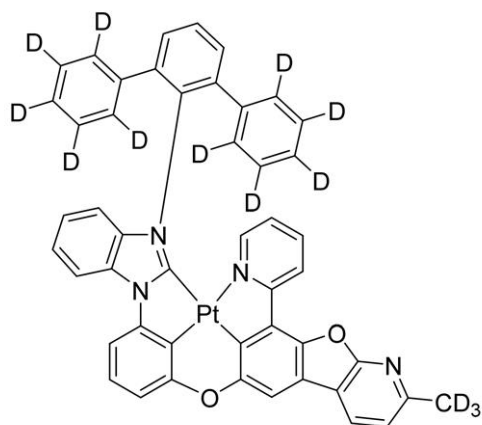
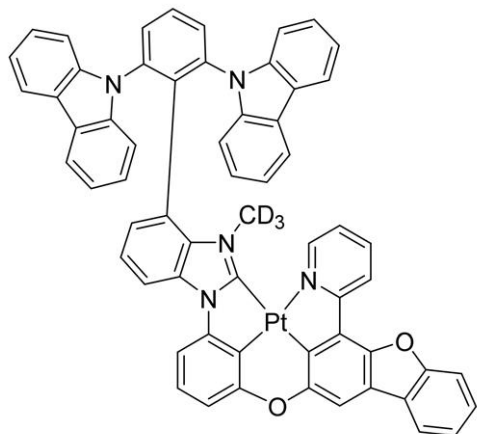
【化 4 9】



10



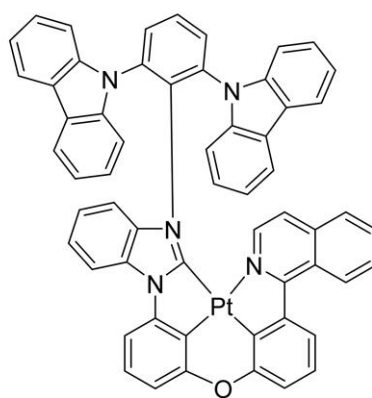
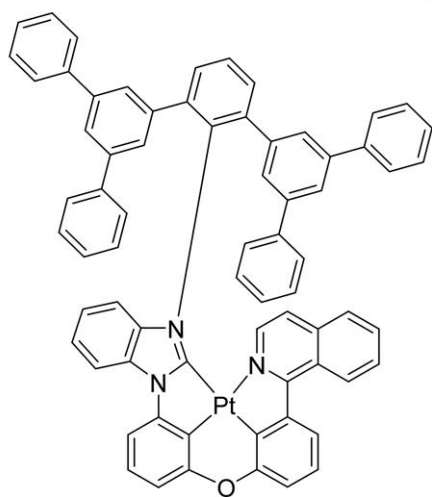
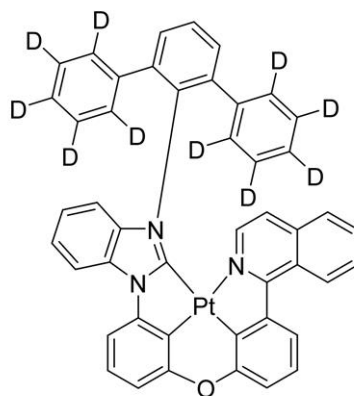
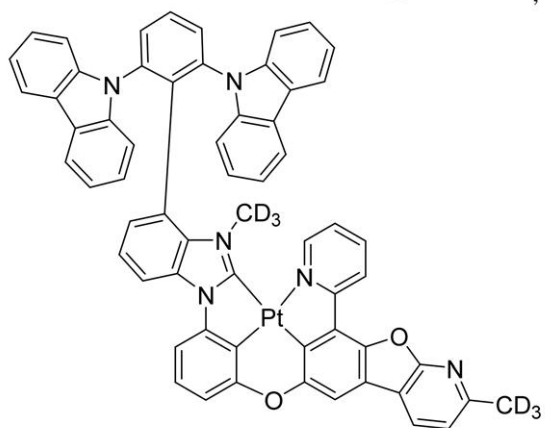
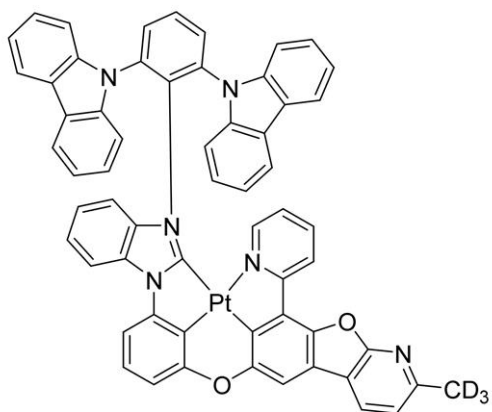
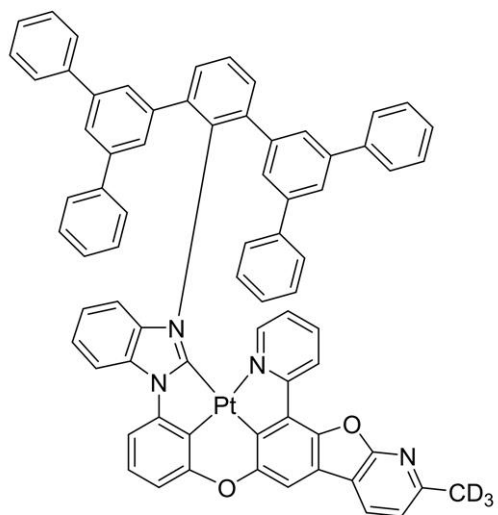
20



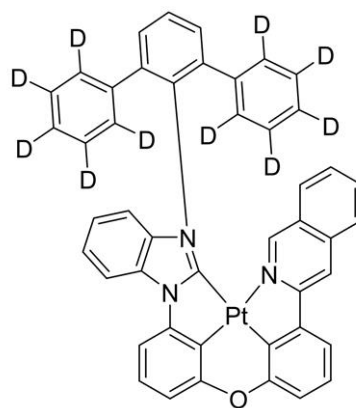
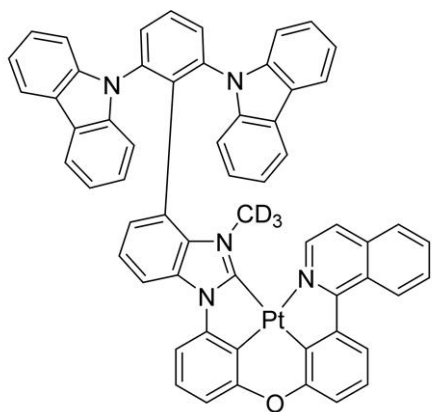
30

40

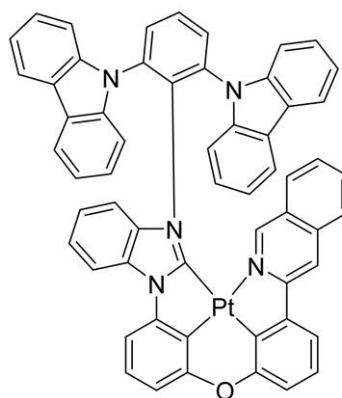
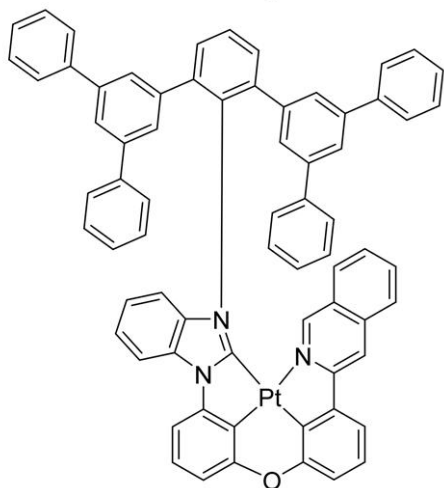
【化 5 0】



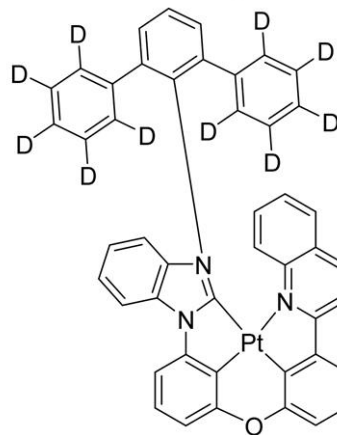
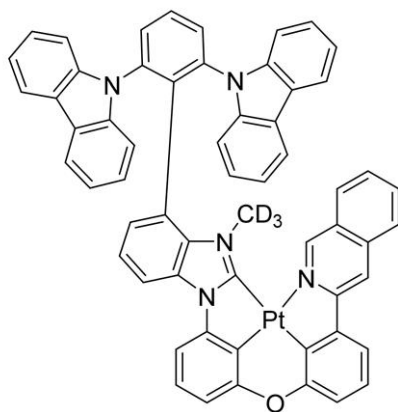
【化 5 1】



10

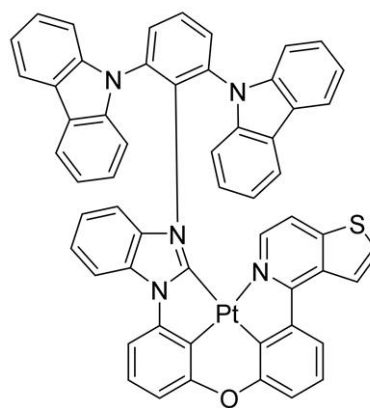
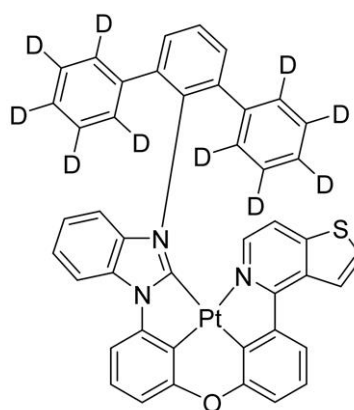
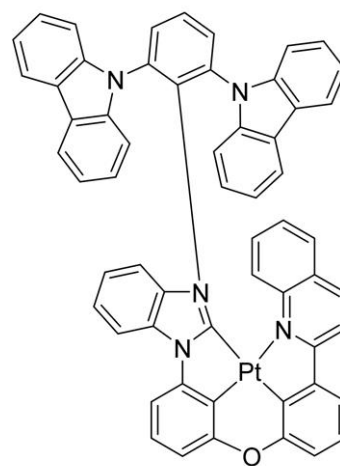
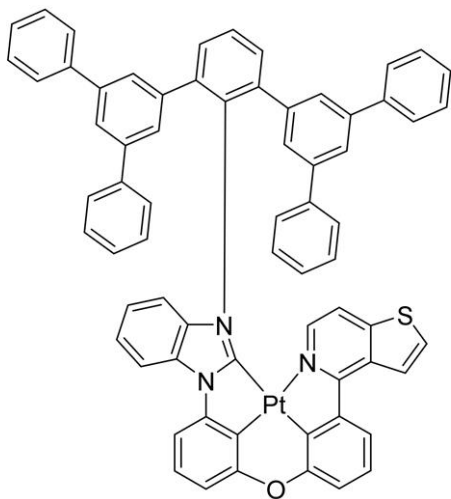
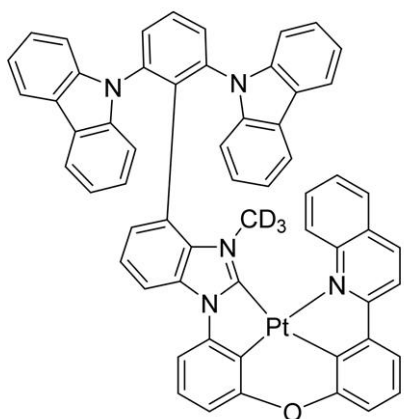
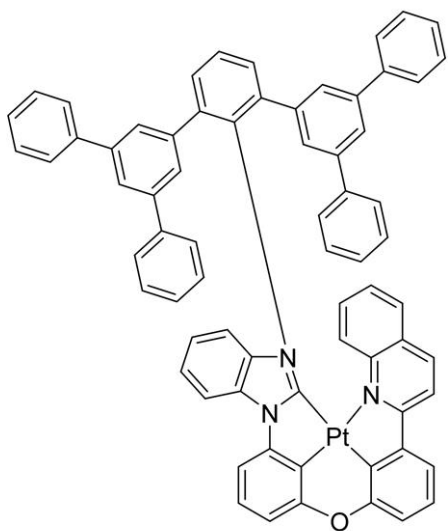


20



30

【化 5 2】



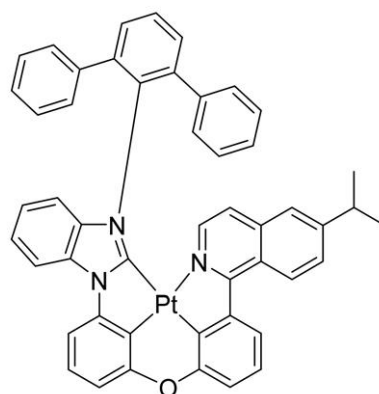
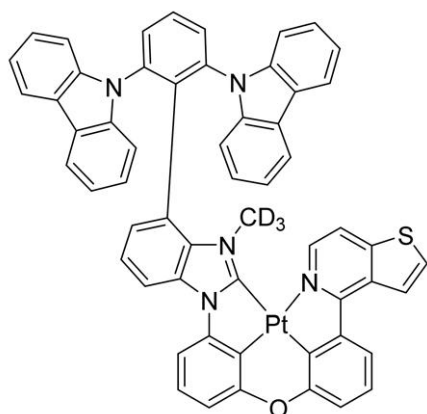
10

20

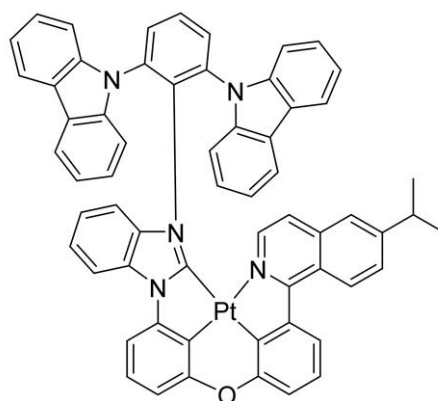
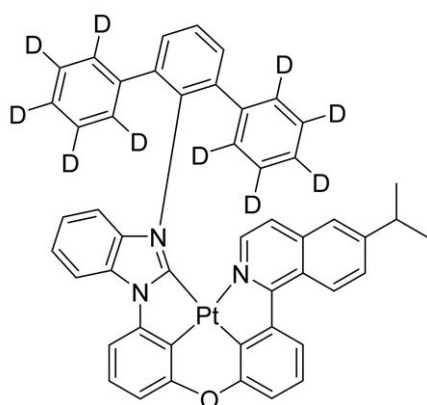
30

40

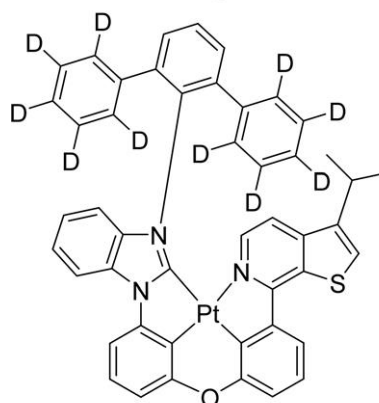
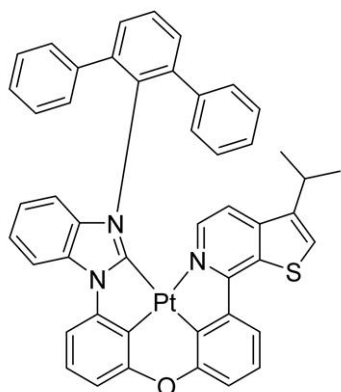
【化 5 3】



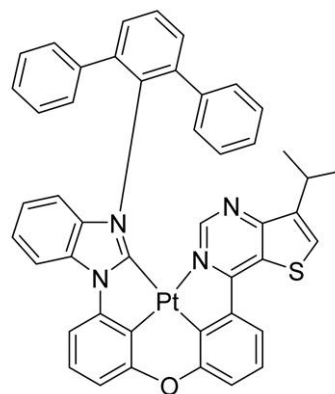
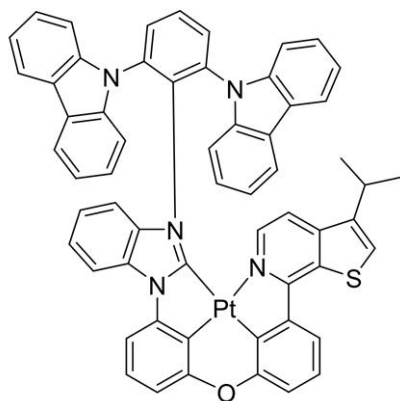
10



20

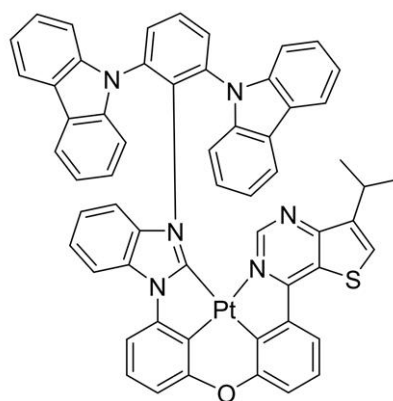
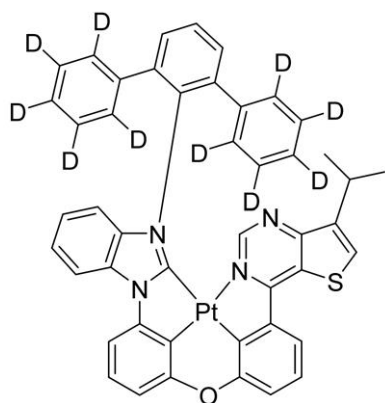


30

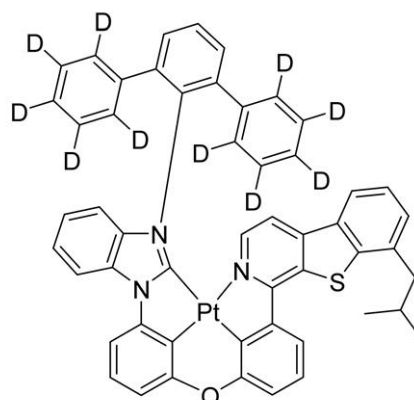
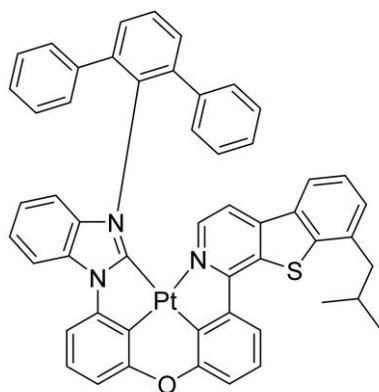


40

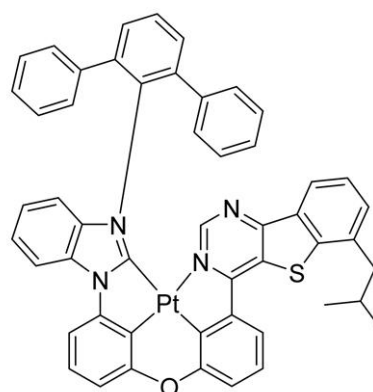
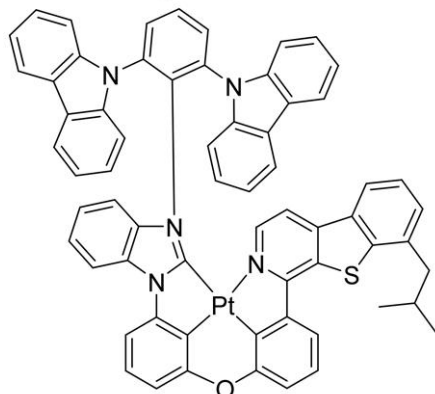
【化 5 4】



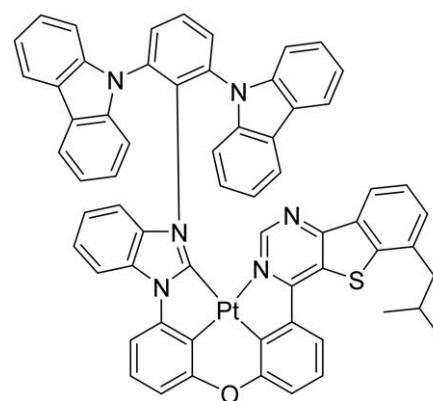
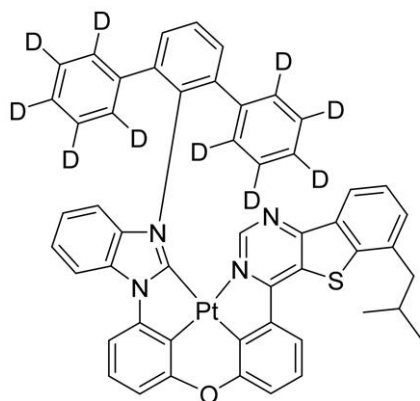
10



20

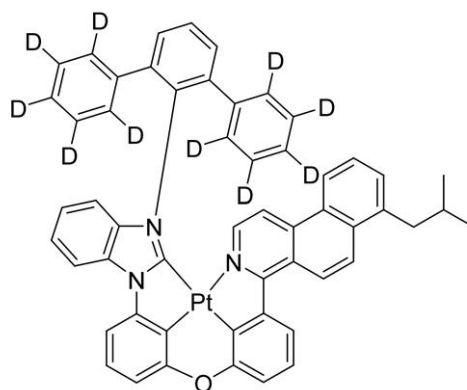
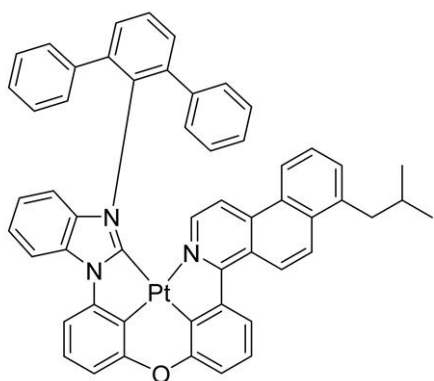


30

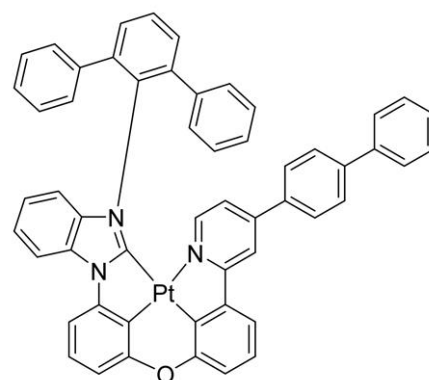
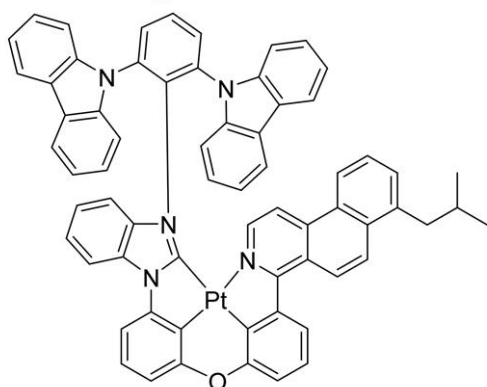


40

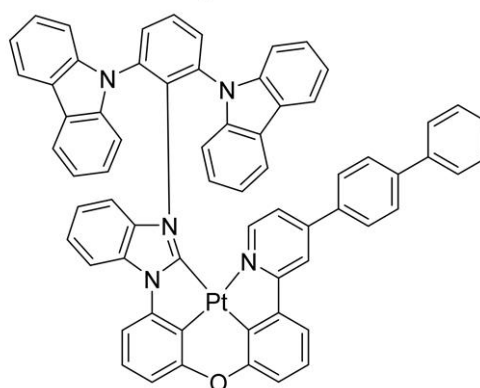
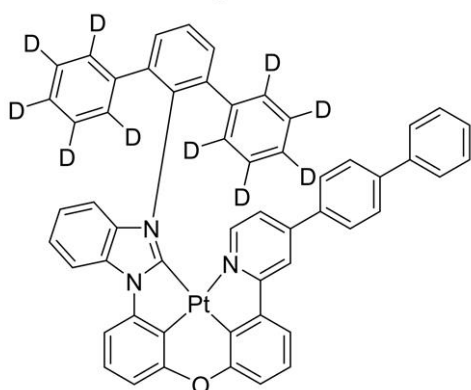
【化 5 5】



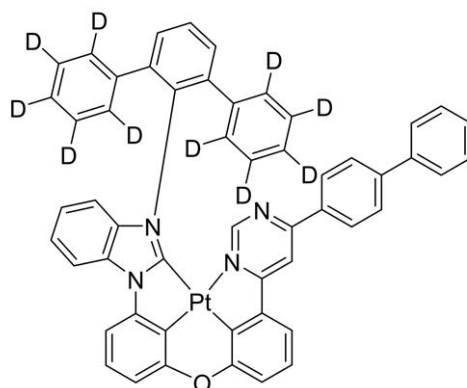
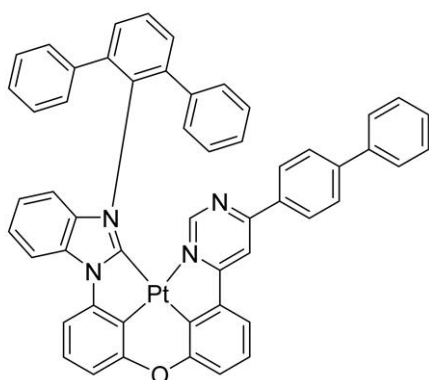
10



20

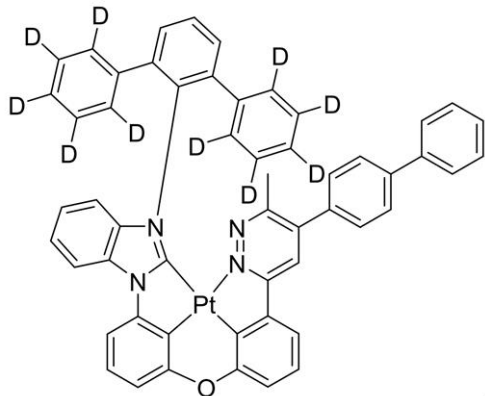
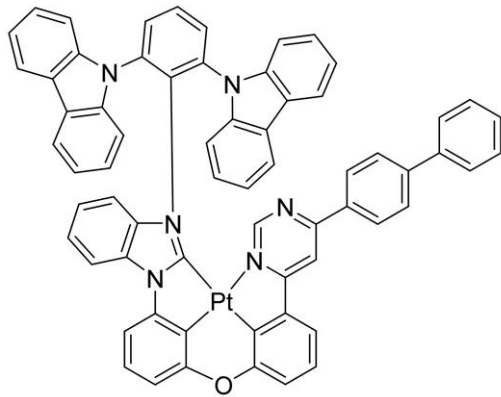


30

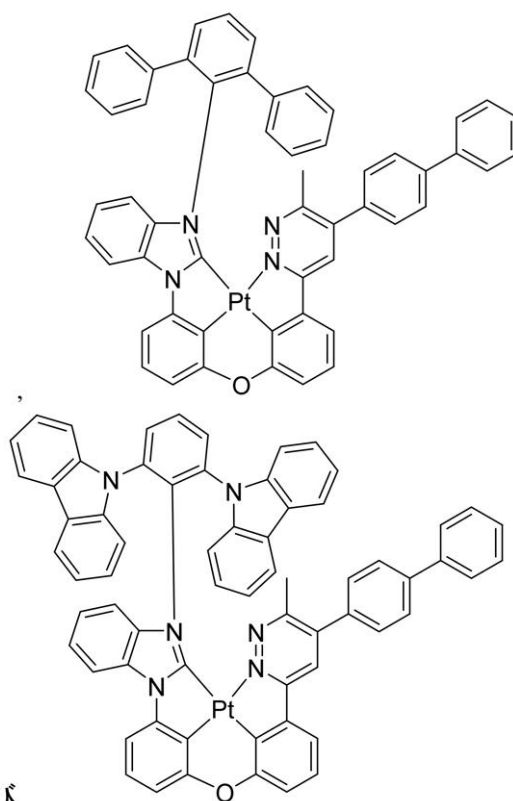


40

【化 5 6】



,及び



【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、発光体として使用するための化合物、及びそれを含む有機発光ダイオードなどのデバイスに関する。

【背景技術】

【0002】

有機材料を利用する光電子デバイスは、いくつかの理由から、次第に望ましいものとなりつつある。そのようなデバイスを作製するために使用される材料の多くは比較的安価であるため、有機光電子デバイスは無機デバイスを上回るコスト優位性の可能性を有する。加えて、柔軟性等の有機材料の固有の特性により、該材料は、フレキシブル基板上での製作等の特定用途によく適したものとなり得る。有機光電子デバイスの例は、有機発光ダイオード/デバイス(OLED)、有機光トランジスタ、有機光電池及び有機光検出器を含む。OLEDについて、有機材料は従来の材料を上回る性能の利点を有し得る。例えば、有機発光層が光を放出する波長は、概して、適切なドーパントで容易に調整され得る。

【0003】

OLEDはデバイス全体に電圧が印加されると光を放出する薄い有機膜を利用する。OLEDは、フラットパネルディスプレイ、照明及びバックライティング等の用途において使用するためのますます興味深い技術となりつつある。数種のOLED材料及び構成は、参照によりその全体が本明細書に組み込まれる、特許文献1、特許文献2及び特許文献3において記述されている。

【0004】

リン光性発光分子の1つの用途は、フルカラーディスプレイである。そのようなディスプレイの業界標準は、「飽和(saturated)」色と称される特定の色を放出するように適合された画素を必要とする。特に、これらの標準は、飽和した赤色、緑色及び青色画素を必要とする。若しくは、OLEDは、白色光を照射するように設計することができる。従来の、白色バックライトからの液晶ディスプレイ発光は、吸収フィルターを用い

10

20

30

40

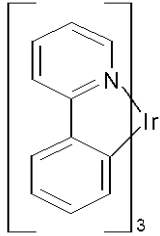
50

てフィルタリングされ、赤色、緑色、及び青色発光を生成する。同様の技術は、O L E Dでも用いられることができる。白色O L E Dは、単一のE M Lデバイス又は積層体構造のいずれかであることができる。色は、当技術分野において周知のC I E座標を使用して測定することができる。

【0005】

緑色発光分子の一例は、下記の構造：

【化1】



を有する、 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ と表示されるトリス(2-フェニル)イリジウムである。

【0006】

この図面及び本明細書における後出の図面中で、本発明者らは、窒素から金属(ここではIr)への配位結合を直線として描写する。

【0007】

本明細書において使用される場合、用語「有機」は、有機光電子デバイスを製作するために使用され得るポリマー材料及び小分子有機材料を含む。「小分子」は、ポリマーでない任意の有機材料を指し、且つ「小分子」は実際にはかなり大型であってよい。小分子は、幾つかの状況において繰り返し単位を含み得る。例えば、長鎖アルキル基を置換基として使用することは、「小分子」クラスから分子を排除しない。小分子は、例えばポリマー骨格上のペンダント基として、又は該骨格の一部として、ポリマーに組み込まれてもよい。小分子は、コア部分上に構築された一連の化学的シェルからなる dendritic のコア部分として役立つこともできる。Dendritic のコア部分は、蛍光性又はリン光性小分子発光体であってよい。Dendritic は「小分子」であってよく、O L E Dの分野において現在使用されている dendritic はすべて小分子であると考えられている。

【0008】

本明細書において使用される場合、「頂部」は基板から最遠部を意味するのに対し、「底部」は基板の最近部を意味する。第1の層が第2の層「の上に配置されている」と記述される場合、第1の層のほうが基板から遠くに配置されている。第1の層が第2の層「と接触している」ことが指定されているのでない限り、第1の層と第2の層との間に他の層があってもよい。例えば、間に種々の有機層があるとしても、カソードはアノード「の上に配置されている」と記述され得る。

【0009】

本明細書において使用される場合、「溶液プロセス可能な」は、溶液又は懸濁液形態のいずれかの液体媒質に溶解、分散若しくは輸送されることができ、且つ/又は該媒質から堆積されることができるという意味である。

【0010】

配位子は、該配位子が発光材料の光活性特性に直接寄与していると考えられる場合、「光活性」と称され得る。配位子は、該配位子が発光材料の光活性特性に寄与していないと考えられる場合には「補助」と称され得るが、補助配位子は、光活性配位子の特性を変化させることができる。

【0011】

本明細書において使用される場合、当業者には概して理解されるように、第1の「最高被占分子軌道」(H O M O)又は「最低空分子軌道」(L U M O)エネルギー準位は、第1のエネルギー準位が真空エネルギー準位に近ければ、第2のH O M O又はL U M Oエネルギー準位「よりも大きい」又は「よりも高い」。イオン化ポテンシャル(I P)は、真

10

20

30

40

50

空準位と比べて負のエネルギーとして測定されるため、より高いHOMOエネルギー準位は、より小さい絶対値を有するIP（あまり負でないIP）に相当する。同様に、より高いLUMOエネルギー準位は、より小さい絶対値を有する電子親和力（EA）（あまり負でないEA）に相当する。頂部に真空準位がある従来のエネルギー準位図において、材料のLUMOエネルギー準位は、同じ材料のHOMOエネルギー準位よりも高い。「より高い」HOMO又はLUMOエネルギー準位は、「より低い」HOMO又はLUMOエネルギー準位よりもそのような図の頂部に近いように思われる。

【0012】

本明細書において使用される場合、当業者には概して理解されるように、第1の仕事関数がより高い絶対値を有するならば、第1の仕事関数は第2の仕事関数「よりも大きい」又は「よりも高い」。仕事関数は概して真空準位と比べて負数として測定されるため、これは「より高い」仕事関数が更に負であることを意味する。頂部に真空準位がある従来のエネルギー準位図において、「より高い」仕事関数は、真空準位から下向きの方に遠く離れているものとして例証される。故に、HOMO及びLUMOエネルギー準位の定義は、仕事関数とは異なる慣例に準ずる。

10

【0013】

OLEDについての更なる詳細及び上述した定義は、参照によりその全体が本明細書に組み込まれる特許文献4において見ることができる。

【発明の概要】

【0014】

カルベン炭素は、化学的に反応性があり、隣接する基と、分子内又は分子間的にC-C結合を形成する可能性がある。このプロセスは、化合物の分解をもたらし、OLEDデバイスの寿命を短くすることがある。本発明では、嵩高い基を導入して、カルベン炭素とホスト分子との間の分子間近接を防ぐ。一方で、導入された嵩高い基は、カルベン炭素の十分近くに位置させ、分子内相互作用を避ける。これらの2つの基準を錯体設計に導入することにより、長いデバイス寿命（特に青色発光体について）の達成に良好な可能性をもたらす。

20

【0015】

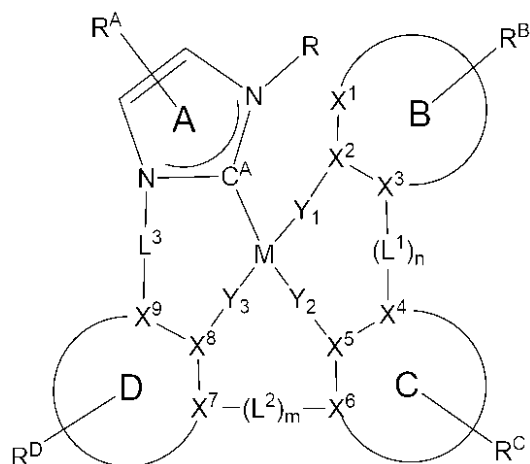
イミダゾール/ベンズイミダゾールカルベンを含む四座白金錯体が開示される。本明細書に開示されるこれらの特定の置換基を有する白金カルベンは、新規であり、且つ昇華温度、発光色、及びデバイス安定性などの物理的性質が調節できるリン光発光化合物を提供する。これらの化合物は、OLED用途に有用である。

30

【0016】

以下の式I：

【化2】



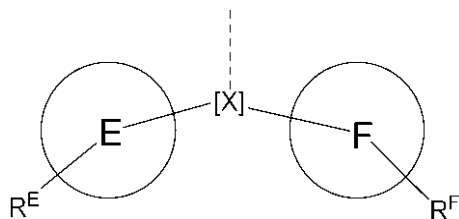
40

の化合物が開示される。式I中、Mは、Pd又はPt；環B、C、及びDは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環であり；X¹～X⁹は、それぞれ独立して、

50

C 又は N であり； $Y_1 \sim Y_3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、及び S からなる群から選択され； $Y_1 \sim Y_3$ の少なくとも 1 つは、直接結合であり； C^A は、カルベン炭素であり； $L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 、 BR' 、及び NR' 、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；m 及び n は、それぞれ独立して、0 又は 1 であり；m 及び n の少なくとも 1 つは、1 であり；R、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも 1 つは、以下の式 I I：

【化 3】



10

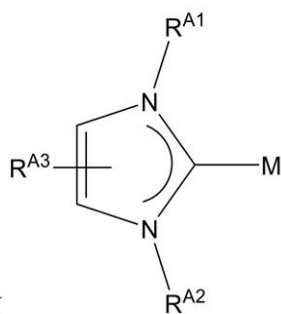
の構造を有する基を含む。式 I I 中、 $[X]$ は、5 員ヘテロ環、5 員炭素環、6 員ヘテロ環、6 員炭素環、又は 2 つ以上の縮合環を含む縮合ヘテロ環又は炭素環系であり；環 E 及び F は、それぞれ独立して、5 員又は 6 員の炭素環又はヘテロ環である。式 I 及び式 I I において、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノ最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；各 R、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；R 及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができ；式 I I の構造を有する基の分子量は、395 グラム / モル以上である。

20

【0017】

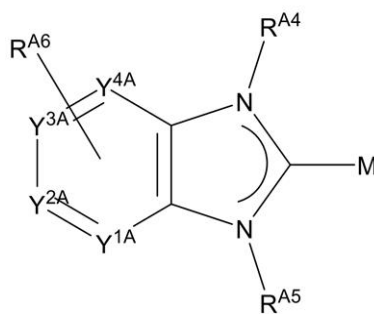
別の実施形態においては、以下の式：

【化 4】



式 V

、及び式 V I



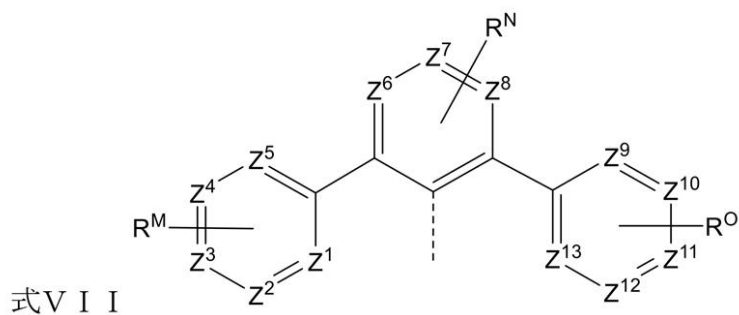
30

からなる群から選択される構造を含む化合物が開示され、式中、

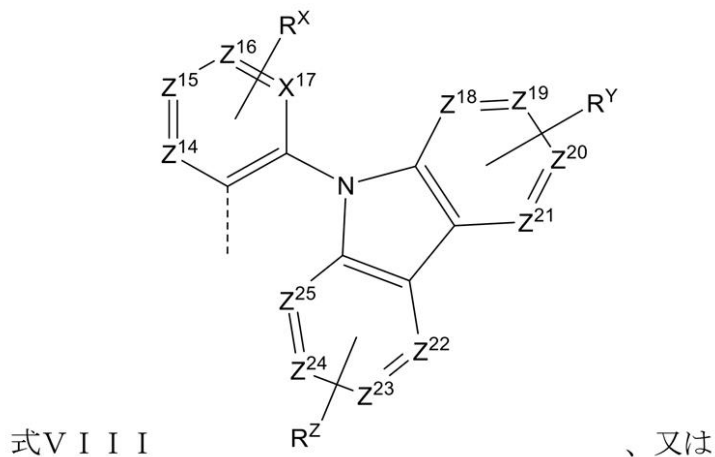
M は、Os、Pd、Pt、Ir、Cu、及び Au からなる群から選択され；

R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、又は R^{A6} の少なくとも 1 つは、以下の式：

【化 5】

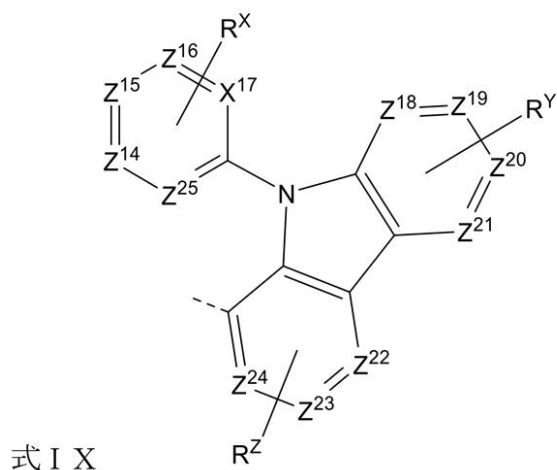


10



20

【化 6】



30

の構造であり；

$Y^{1A} \sim Y^{4A}$ は、それぞれ独立して、C又はNであり；

40

$Y^{1A} \sim Y^{4A}$ の2つ以下がNであり；

$Z^1 \sim Z^{25}$ は、それぞれ独立して、C又はNであり；

同一環中の3つの連続する $Z^1 \sim Z^{25}$ は、Nであることがなく；

R^{A3} 、 R^{A6} 、 R^M 、 R^N 、 R^O 、 R^X 、 R^Y 、及び R^Z は、それぞれ独立して、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；

各 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、 R^{A6} 、 R^M 、 R^N 、 R^O 、 R^X 、 R^Y 、及び R^Z は、独立して、水素である、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリーロキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、

50

イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基であり；

Mは、他の配位子に配位することができ；

任意の2つの置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；

但し、前記化合物が式Vであり、 R^{A1} 及び R^{A2} の一方が式VIIであるとき、 R^M 、 R^N 、及び R^O の少なくとも1つは、重水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

【0018】

本開示の化合物の少なくとも1つを、その有機層に含むOLEDも開示される。

10

【0019】

そのようなOLEDを含む消費者製品も開示される。

【図面の簡単な説明】

【0020】

【図1】図1は、有機発光デバイスを示す。

【0021】

【図2】図2は、別の電子輸送層を有さない、反転された有機発光デバイスを示す。

【発明を実施するための形態】

【0022】

概して、OLEDは、アノード及びカソードの間に配置され、それらと電気的に接続された少なくとも1つの有機層を含む。電流が印加されると、アノードが正孔を注入し、カソードが電子を有機層（複数可）に注入する。注入された正孔及び電子は、逆帯電した電極にそれぞれ移動する。電子及び正孔が同じ分子上に局在する場合、励起エネルギー状態を有する局在電子正孔対である「励起子」が形成される。光は、励起子が緩和した際に、光電子放出機構を介して放出される。幾つかの事例において、励起子はエキシマー又はエキサイプレックス上に局在し得る。熱緩和等の無輻射機構が発生する場合もあるが、概して望ましくないとみなされている。

20

【0023】

初期のOLEDは、例えば、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第4,769,292号において開示されている通り、その一重項状態から光を放出する発光分子（「蛍光」）を使用していた。蛍光発光は、概して、10ナノ秒未満の時間枠で発生する。

30

【0024】

ごく最近では、三重項状態から光を放出する発光材料（「リン光」）を有するOLEDが実証されている。参照によりその全体が組み込まれる、Baldoら、「Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices」、Nature、395巻、151~154、1998；（「Baldo-I」）及びBaldoら、「Very high-efficiency green organic light emitting devices based on electrophosphorescence」、Appl. Phys. Lett.、75巻、3号、4~6（1999）（「Baldo-II」）。リン光については、参照により組み込まれる米国特許第7,279,704号5~6段において更に詳細に記述されている。

40

【0025】

図1は、有機発光デバイス100を示す。図は必ずしも一定の縮尺ではない。デバイス100は、基板110、アノード115、正孔注入層120、正孔輸送層125、電子ブロッキング層130、発光層135、正孔ブロッキング層140、電子輸送層145、電子注入層150、保護層155、カソード160、及びバリア層170を含み得る。カソード160は、第1の導電層162及び第2の導電層164を有する複合カソードである。デバイス100は、記述されている層を順に堆積させることによって製作され得る。これらの種々の層の特性及び機能並びに材料例は、参照により組み込まれるUS7,279

50

、704、6～10段において更に詳細に記述されている。

【0026】

これらの層のそれぞれについて、更なる例が利用可能である。例えば、フレキシブル及び透明基板 - アノードの組合せは、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第5、844、363号において開示されている。p - ドープされた正孔輸送層の例は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第2003/0230980号において開示されている通りの、50:1のモル比でm - MTDATAにF₄ - TCNQをドープしたものである。発光材料及びホスト材料の例は、参照によりその全体が組み込まれるThompsonらの米国特許第6,303,238号において開示されている。n - ドープされた電子輸送層の例は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第2003/0230980号において開示されている通りの、1:1のモル比でBPhenにLiをドープしたものである。参照によりその全体が組み込まれる米国特許第5,703,436号及び同第5,707,745号は、上を覆う透明の、導電性の、スパッタリング蒸着したITO層を有するMg:Ag等の金属の薄層を有する複合カソードを含むカソードの例を開示している。ブロッキング層の理論及び使用は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第6,097,147号及び米国特許出願公開第2003/0230980号において更に詳細に記述されている。注入層の例は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第2004/0174116号において提供されている。保護層についての記述は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許出願公開第2004/0174116号において見ることができる。

10

20

【0027】

図2は、反転させたOLED200を示す。デバイスは、基板210、カソード215、発光層220、正孔輸送層225、及びアノード230を含む。デバイス200は、記述されている層を順に堆積させることによって製作され得る。最も一般的なOLED構成はアノードの上に配置されたカソードを有し、デバイス200はアノード230の下に配置されたカソード215を有するため、デバイス200は「反転させた」OLEDと称されることができる。デバイス100に関して記述されたものと同様の材料を、デバイス200の対応する層において使用してよい。図2は、幾つかの層が如何にしてデバイス100の構造から省略され得るかの一例を提供するものである。

【0028】

図1及び図2において例証されている単純な層構造は、非限定的な例として提供されるものであり、本発明の実施形態は多種多様な他の構造に関連して使用され得ることが理解される。記述されている特定の材料及び構造は、事実上例示的なものであり、他の材料及び構造を使用してよい。機能的なOLEDは、記述されている種々の層を様々な手法で組み合わせることによって実現され得るか、又は層は、設計、性能及びコスト要因に基づき、全面的に省略され得る。具体的には記述されていない他の層も含まれ得る。具体的に記述されているもの以外の材料を使用してよい。本明細書において提供されている例の多くは、単一材料を含むものとして種々の層を記述しているが、ホスト及びドープアントの混合物等の材料の組合せ、又はより一般的には混合物を使用してよいことが理解される。また、層は種々の副層を有してもよい。本明細書における種々の層に与えられている名称は、厳しく限定することを意図するものではない。例えば、デバイス200において、正孔輸送層225は正孔を輸送し、正孔を発光層220に注入し、正孔輸送層又は正孔注入層として記述され得る。一実施形態において、OLEDは、カソード及びアノードの間に配置された「有機層」を有するものとして記述され得る。有機層は単層を含んでいてよく、又は、例えば図1及び図2に関して記述されている異なる有機材料の多層を更に含んでいてよい。

30

40

【0029】

参照によりその全体が組み込まれるFriendらの米国特許第5,247,190号において開示されているもののようなポリマー材料で構成されるOLED(PLED)等、具体的には記述されていない構造及び材料を使用してよい。更なる例として、単一の

50

有機層を有するOLEDが使用され得る。OLEDは、例えば、参照によりその全体が組み込まれるForrestらの米国特許第5,707,745号において記述されている通り、積み重ねられてよい。OLED構造は、図1及び図2において例証されている単純な層構造から逸脱してよい。例えば、基板は、参照によりその全体が組み込まれる、Forrestらの米国特許第6,091,195号において記述されているメサ構造及び/又はBulovicらの米国特許第5,834,893号において記述されているくぼみ構造等、アウトカップリングを改良するための角度のついた反射面を含み得る。

【0030】

別段の規定がない限り、種々の実施形態の層のいずれも、任意の適切な方法によって堆積され得る。有機層について、好ましい方法は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第6,013,982号及び同第6,087,196号において記述されているもの等の熱蒸着、インクジェット、参照によりその全体が組み込まれるForrestらの米国特許第6,337,102号において記述されているもの等の有機気相堆積(OVPD)、並びに参照によりその全体が組み込まれる米国特許第7,431,968号において記述されているもの等の有機気相ジェットプリンティング(OVJP)による堆積を含む。他の適切な堆積法は、スピンコーティング及び他の溶液ベースのプロセスを含む。溶液ベースのプロセスは、好ましくは、窒素又は不活性雰囲気中で行われる。他の層について、好ましい方法は熱蒸着を含む。好ましいパターンニング法は、参照によりその全体が組み込まれる米国特許第6,294,398号及び同第6,468,819号において記述されているもの等のマスク、冷間圧接を経由する堆積、並びにインクジェット及び有機蒸気ジェット印刷(OVJP)等の堆積法の幾つかに関連するパターンニングを含む。他の方法を使用してもよい。堆積する材料は、特定の堆積法と適合するように修正され得る。例えば、分枝鎖状又は非分枝鎖状であり、好ましくは少なくとも3個の炭素を含有するアルキル及びアリアル基等の置換基は、溶液プロセッシングを受ける能力を増強するために、小分子において使用され得る。20個以上の炭素を有する置換基を使用してよく、3~20個の炭素が好ましい範囲である。非対称構造を有する材料は、対称構造を有するものよりも良好な溶液プロセス性を有し得、これは、非対称材料のほうが再結晶する傾向が低くなり得るからである。溶液プロセッシングを受ける小分子の能力を増強するために、デンドリマー置換基が使用され得る。

【0031】

本発明の実施形態に従って製作されたデバイスは、バリア層を更に含んでいてよい。バリア層の1つの目的は、電極及び有機層を、水分、蒸気及び/又はガス等を含む環境における有害な種への損傷性暴露から保護することである。バリア層は、基板、電極の上、下若しくは隣に、又はエッジを含むデバイスの任意の他の部分の上に堆積し得る。バリア層は、単層又は多層を含んでいてよい。バリア層は、種々の公知の化学気相堆積技術によって形成され得、単相を有する組成物及び多相を有する組成物を含み得る。任意の適切な材料又は材料の組合せをバリア層に使用してよい。バリア層は、無機若しくは有機化合物又は両方を組み込み得る。好ましいバリア層は、参照によりその全体が本明細書に組み込まれる、米国特許第7,968,146号、PCT特許出願第PCT/US2007/023098号及び同第PCT/US2009/042829号において記述されている、ポリマー材料及び非ポリマー材料の混合物を含む。「混合物」とみなされるためには、バリア層を含む前記のポリマー及び非ポリマー材料は、同じ反応条件下で及び/又は同時に堆積されるべきである。非ポリマー材料に対するポリマー材料の重量比は、95:5から5:95の範囲内となり得る。ポリマー材料及び非ポリマー材料は、同じ前駆体材料から作製され得る。一例において、ポリマー材料及び非ポリマー材料の混合物は、ポリマーケイ素及び無機ケイ素から本質的になる。

【0032】

本発明の実施形態にしたがって作製されたデバイスは、種々の電気製品又は中間部品に組み込まれることができる多種多様な電子部品モジュール(又はユニット)に組み込まれることができる。このような電気製品又は中間部品としては、エンドユーザーの製品製造

者によって利用されることができるディスプレイスクリーン、照明デバイス（離散的光源デバイス又は照明パネル等）が挙げられる。このような電子部品モジュールは、駆動エレクトロニクス及び／又は電源を任意に含むことができる。本発明の実施形態にしたがって作製されたデバイスは、組み込まれた１つ以上の電子部品モジュール（又はユニット）を有する多種多様な消費者製品に組み込まれることができる。OLEDの有機層に本開示の化合物を含むOLEDを含む消費者製品が開示される。このような消費者製品は、１つ以上の光源及び／又は１つ以上のある種の表示装置を含む任意の種類の製品を含む。このような消費者製品の幾つかの例としては、フラットパネルディスプレイ、曲がったディスプレイ、コンピュータモニター、メディカルモニター、テレビ、掲示板、屋内若しくは屋外照明及び／又は信号送信用のライト、ヘッドアップディスプレイ、完全又は部分透明ディスプレイ、フレキシブルディスプレイ、丸めることができるディスプレイ、折り畳むことができるディスプレイ、伸ばすことができるディスプレイ、レーザープリンター、電話、携帯電話、タブレット、ファブレット、パーソナルデジタルアシスタント（PDA）、ウェアラブルデバイス、ラップトップコンピュータ、デジタルカメラ、カムコーダー、ビューファインダー、マイクロディスプレイ（対角で２インチ未満のディスプレイ）、３-Dディスプレイ、バーチャルリアリティ又は拡張現実ディスプレイ、車両、共に並べた多重ディスプレイを含むビデオウォール（video walls）、劇場又はスタジアムのスクリーン、光療法デバイス、及び看板を含む。パッシブマトリックス及びアクティブマトリックスを含む種々の制御機構を使用して、本発明に従って製作されたデバイスを制御することができる。デバイスの多くは、摂氏１８度から摂氏３０度、より好ましくは室温（摂氏２０～２５度）等、ヒトに快適な温度範囲内での使用が意図されているが、この温度範囲外、例えば、摂氏－４０度～＋８０度で用いることもできる。

10

20

30

40

50

【００３３】

本明細書において記述されている材料及び構造は、OLED以外のデバイスにおける用途を有し得る。例えば、有機太陽電池及び有機光検出器等の他の光電子デバイスが、該材料及び構造を用い得る。より一般的には、有機トランジスタ等の有機デバイスが、該材料及び構造を用い得る。

【００３４】

「ハロ」、「ハロゲン」、及び「ハライド」という用語は、相互交換可能に使用され、フッ素、塩素、臭素、及びヨウ素を指す。

【００３５】

「アシル」という用語は、置換されたカルボニル基（ $C(O)-R_s$ ）を指す。

【００３６】

「エステル」という用語は、置換されたオキシカルボニル（ $-O-C(O)-R_s$ 又は $-C(O)-O-R_s$ ）基を指す。

【００３７】

「エーテル」という用語は、 $-OR_s$ 基を指す。

【００３８】

「スルファニル」又は「チオエーテル」という用語は、相互交換可能に使用され、 $-SR_s$ 基を指す。

【００３９】

「スルフィニル」という用語は、 $-S(O)-R_s$ 基を指す。

【００４０】

「スルホニル」という用語は、 $-SO_2-R_s$ 基を指す。

【００４１】

「ホスフィノ」という用語は、 $-P(R_s)_3$ 基を指し、各 R_s は、同一であっても異なってもよい。

【００４２】

「シリル」という用語は、 $-Si(R_s)_3$ 基を指し、各 R_s は、同一であっても異なってもよい。

【0043】

「ボリル」という用語は、 $-B(R_s)_2$ 基、又はそのルイス (Lewis) 付加物 $-B(R_s)_3$ 基を指し、 R_s は同一であっても異なってもよい。

【0044】

上記のそれぞれにおいて、 R_s は、水素である、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリーロキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基であることができる。好ましい R_s は、アルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

10

【0045】

「アルキル」という用語は、直鎖及び分岐鎖アルキル基の両方を指し、含む。好ましいアルキル基としては、1個から15個までの炭素原子を含むものであり、メチル、エチル、プロピル、1-メチルエチル、ブチル、1-メチルプロピル、2-メチルプロピル、ペンチル、1-メチルブチル、2-メチルブチル、3-メチルブチル、1,1-ジメチルプロピル、1,2-ジメチルプロピル、及び2,2-ジメチルプロピル等が挙げられる。更に、前記アルキル基は、任意に置換される。

【0046】

「シクロアルキル」という用語は、単環式、多環式、及びスピロアルキル基を指し、含む。好ましいシクロアルキル基は、3~12個の環炭素原子を含むものであり、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシル、ビスシクロ[3.1.1]ヘプチル、スピロ[4.5]デシル、スピロ[5.5]ウンデシル、アダマンチルなどが挙げられる。更に、前記シクロアルキル基は、任意に置換される。

20

【0047】

「ヘテロアルキル」又は「ヘテロシクロアルキル」という用語は、それぞれ、ヘテロ原子によって置換された少なくとも1つの炭素原子を有するアルキル基又はシクロアルキル基を指す。任意に、少なくとも1つのヘテロ原子は、O、S、N、P、B、Si、及びSe、好ましくはO、S、又はNから選択される。更に、前記ヘテロアルキル基又は前記ヘテロシクロアルキル基は、任意に置換される。

30

【0048】

「アルケニル」という用語は、直鎖及び分岐鎖のアルケン基の両方を指し、含む。アルケニル基は、本質的に、アルキル鎖中に少なくとも1つの炭素-炭素二重結合を含むアルキル基である。シクロアルケニル基は、本質的に、シクロアルキル環中に少なくとも1つの炭素-炭素二重結合を含むシクロアルキル基である。本明細書で使用される「ヘテロアルケニル」という用語は、ヘテロ原子によって置換された少なくとも1つの炭素原子を有するアルケニル基を指す。任意に、少なくとも1つのヘテロ原子は、O、S、N、P、B、Si、及びSe、好ましくはO、S、又はNから選択される。好ましいアルケニル、シクロアルケニル、又はヘテロアルケニル基は、2~15個の炭素原子を含むものである。更に、前記アルケニル、前記シクロアルケニル、又は前記ヘテロアルケニル基は、任意に置換される。

40

【0049】

「アルキニル」という用語は、直鎖及び分岐鎖アルキン基の両方を指し、含む。好ましいアルキニル基は、2~15個の炭素原子を含むものである。更に、前記アルキニル基は、任意に置換される。

【0050】

「アラルキル」又は「アリールアルキル」という用語は、相互交換可能に使用され、アリール基で置換されたアルキル基を指す。更に、前記アラルキル基は、任意に置換される。

【0051】

「複素環式基 (ヘテロ環基; heterocyclic group)」という用語は

50

、少なくとも1つのヘテロ原子を含む芳香族及び非芳香族の環式基を指し、含む。任意に、前記少なくとも1つのヘテロ原子は、O、S、N、P、B、Si、及びSe、好ましくはO、S、又はNから選択される。ヘテロ芳香族環式基は、ヘテロアリールと相互交換可能に使用され得る。好ましいヘテロ非芳香族環式基は、3～7個の環原子を含むものであって、少なくとも1つのヘテロ原子を含み、モルホリノ、ピペリジノ、ピロリジノなどの環式アミン、及び例えばテトラヒドロフラン、テトラヒドロピラン、テトラヒドロチオフェンなどの環式エーテル/チオエーテルを含む。更に、前記複素環式基は、任意に置換されることができる。

【0052】

「アリール」という用語は、単環式芳香族ヒドロカルビル基及び多環式芳香族環系の両方を指し、含む。多環とは、2つの隣接する環（前記環は、「縮合」している）に2つの炭素が共有されている2つ以上の環を有することができ、前記環の少なくとも1つは、芳香族ヒドロカルビル基であり、例えば、他の環は、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロ環、及び/又はヘテロアリールであることができる。好ましいアリール基は、6～30個の炭素原子を含むものであり、6～20個の炭素原子を含むものが好ましく、6～12個の炭素原子を含むものが更に好ましい。6個の炭素を有するアリール基、10個の炭素を有するアリール基、又は12個の炭素を有するアリール基が特に好ましい。好適なアリール基としては、フェニル、ビフェニル、トリフェニル、トリフェニレン、テトラフェニレン、ナフタレン、アントラセン、フェナレン、フェナンスレン、フルオレン、ピレン、クリセン、ペリレン、及びアズレン等が挙げられ、フェニル、ビフェニル、トリフェニル、トリフェニレン、フルオレン、及びナフタレンが好ましい。更に、前記アリール基は、任意に置換される。

10

20

【0053】

「ヘテロアリール」という用語は、少なくとも1つのヘテロ原子を含む単環式芳香族基及び多環式芳香族環系の両方を指し、含む。ヘテロ原子としては、O、S、N、P、B、Si、及びSeが挙げられるが、これらに限定されない。多くの例においては、O、S、又はNが好ましいヘテロ原子である。ヘテロ単環式芳香族系は、好ましくは5個又は6個の環原子を有する単環であり、前記環は1～6個のヘテロ原子を有することができる。ヘテロ多環式環系は、2つの原子が2つの隣接する環（前記環は「縮合している」）に共通している2つ以上の環を有することができ、前記環の少なくとも1つはヘテロアリールであり、例えば、他の環は、シクロアルキル、シクロアルケニル、アリール、ヘテロ環、及び/又はヘテロアリールであることができる。複素多環式芳香族環系は、多環式芳香族環系の環当たり1～6個のヘテロ原子を有することができる。好ましいヘテロアリール基は、3～30個の炭素原子を含むものであり、3～20個の炭素原子を含むものが好ましく、3～12個の炭素原子を含むものがより好ましい。好適なヘテロアリール基としては、ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、フラン、チオフェン、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、ベンゾセレノフェン、カルバゾール、インドロカルバゾール、ピリジルインドール、ピロロジピリジン、ピラゾール、イミダゾール、トリアゾール、オキサゾール、チアゾール、オキサジアゾール、オキサトリアゾール、ジオキサゾール、チアジアゾール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、オキサジン、オキサチアジン、オキサジアジン、インドール、ベンズイミダゾール、インダゾール、インドキサジン、ベンゾキサゾール、ベンズイソオキサゾール、ベンゾチアゾール、キノリン、イソキノリン、シンノリン、キナゾリン、キノキサリン、ナフチリジン、フタラジン、プテリジン、キサンテン、アクリジン、フェナジン、フェノチアジン、フェノキサジン、ベンゾフロピリジン、フロジピリジン、ベンゾチエノピリジン、チエノジピリジン、ベンゾセレノフェノピリジン、及びセレノフェノジピリジンが挙げられ、ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、カルバゾール、インドロカルバゾール、イミダゾール、ピリジン、トリアジン、ベンズイミダゾール、1,2-アザボリン、1,3-アザボリン、1,4-アザボリン、ボラジン、及びこれらのアザ類似体が好ましい。更に、前記ヘテロアリール基は、任意に置換される。

30

40

50

【 0 0 5 4 】

上記にリストされる前記アリール及び前記ヘテロアリール基のうち、トリフェニレン、ナフタレン、アントラセン、ジベンゾチオフエン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、カルバゾール、インドロカルバゾール、イミダゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、トリアジン、及びベンズイミダゾールの基、並びにそのそれぞれのアザ類似体が、特に興味深い。

【 0 0 5 5 】

本明細書において使用される用語であるアルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アラルキル、複素環基、アリール、及びヘテロアリールは、独立して非置換である、又は独立して1つ以上の一般的な置換基で置換される。

10

【 0 0 5 6 】

多くの例において、前記一般的な置換基は、重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

【 0 0 5 7 】

幾つかの例において、好ましい一般的な置換基は、重水素、フッ素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アリール、ヘテロアリール、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

20

【 0 0 5 8 】

幾つかの例においては、より好ましい一般的な置換基は、重水素、フッ素、アルキル、シクロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アリール、ヘテロアリール、スルファニル、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

【 0 0 5 9 】

更に他の例においては、最も好ましい一般的な置換基は、重水素、フッ素、アルキル、シクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

30

【 0 0 6 0 】

「置換された」及び「置換」という用語は、関連する位置（例えば炭素又は窒素）に結合されているH以外の置換基を指す。例えば、 R^1 がモノ置換を表す場合、1つの R^1 はH以外でなければならない（即ち、置換）。同様に、 R^1 がジ置換を表す場合、 R^1 の2つはH以外でなければならない。同様に、 R^1 が無置換を表す場合、 R^1 は、例えば、ベンゼンにおける炭素原子及びピロール中の窒素原子の場合のように、環原子の利用可能な原子価における水素であることができる、又は完全に満たされた原子価を有する環原子（例えば、ピリジン中の窒素）の場合には単に何も表さない。環構造において可能な置換の最大数は、環原子における利用可能な原子価の総数に依存する。

40

【 0 0 6 1 】

本明細書中で使用される場合、「これらの組合せ」は、適用されるリストから当業者が想到することができる知られた又は化学的に安定な配置を形成するために、適用されるリストの1つ以上のメンバーが組み合わされることを示す。例えば、アルキル及び重水素は、組み合わされて、部分的又は完全に重水素化されたアルキル基を形成することができる；ハロゲン及びアルキルは、組み合わされて、ハロゲン化アルキル置換基を形成することができる；ハロゲン、アルキル、及びアリールは、組み合わされて、ハロゲン化アリールアルキルを形成することができる。1つの例においては、置換という用語は、リストされた基の2～4個の組合せを含む。別の例においては、置換という用語は、2～3個の基の組合せを含む。更に別の例では、置換という用語は、2個の基の組合せを含む。置換基の

50

好ましい組合せは、水素又は重水素でない50個までの原子を含むもの、又は水素又は重水素ではない40個までの原子を含むもの、又は水素若しくは重水素ではない30個までの原子を含むものである。多くの例においては、置換基の好ましい組合せは、水素又は重水素ではない20個までの原子を含む。

【0062】

本明細書において記述されるフラグメント、例えば、アザ - ジベンゾフラン、アザ - ジベンゾチオフェン等の中の「アザ」という名称は、各芳香族環中のC - H基の1つ以上が窒素原子に置き換わることができることを意味し、例えば、何ら限定するものではないが、アザトリフェニレンは、ジベンゾ[f, h]キノキサリンとジベンゾ[f, h]キノリンのいずれをも包含する。当業者であれば、上述のアザ誘導体の他の窒素類似体を容易に想像することができ、このような類似体全てが本明細書に記載の前記用語によって包含されることが意図される。

10

【0063】

本明細書で使用される場合、「重水素」は、水素の同位体を指す。重水素化合物は、当該分野で公知の方法を用いて容易に調製されることができる。例えば、それらの内容の全体を参照によって援用する、米国特許第8,557,400号明細書、国際公開第WO2006/095951号、及び米国特許出願公開第2011/0037057号には、重水素で置換された有機金属錯体の作製が記載されている。更なる参照は、それらの内容の全体を参照によって組み込まれる、Tetrahedron 2015, 71, 1425 ~ 30 (Ming Yanら) 及びAngew. Chem. Int. Ed. (Reviews) 2007, 46, 7744 ~ 65 (Atzrodtら) によって為され、ベンジルアミン中のメチレン水素の重水素化及び芳香族環水素を重水素で置換する効率的な経路が、それぞれ記載されている。

20

【0064】

分子フラグメントが置換基であるとして記述される、又は他の部分に結合されているものとして記述される場合、その名称は、フラグメント（例えば、フェニル、フェニレン、ナフチル、ジベンゾフリル）又は分子全体（例えば、ベンゼン、ナフタレン、ジベンゾフラン）であるように記載されることがあることを理解されたい。本明細書においては、置換基又は結合フラグメントの表示の仕方が異なっても、これらは、等価であると考え

30

【0065】

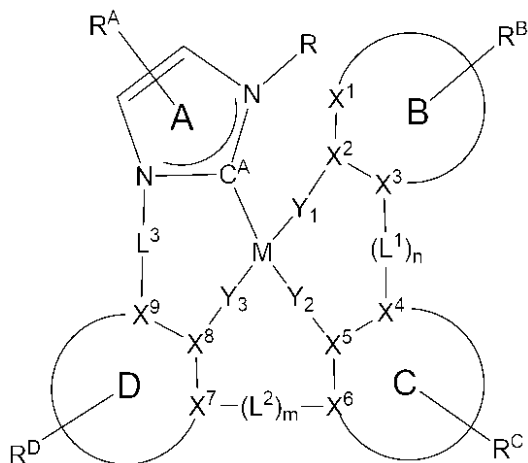
ある例においては、対の隣接する置換基は、任意に結合又は縮合し、環を形成することができる。好ましい環は、5員環、6員環、又は7員環の炭素環又は複素環であり、対の置換基によって形成される環の部分が飽和されている例及び対の置換基によって形成される環の部分が不飽和である例の両方を含む。本明細書中で使用される「隣接する」は、安定した縮合環系を形成することができる限り、関連する2つの置換基が、互いに隣り合っ

40

【0066】

以下の式I：

【化 7】

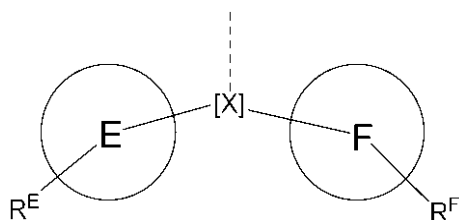


10

の化合物が開示される。式 I 中、M は、Pd 又は Pt；環 B、C、及び D は、それぞれ独立して、5 員又は 6 員の炭素環又はヘテロ環であり； $X^1 \sim X^9$ は、それぞれ独立して、C 又は N であり； $Y_1 \sim Y_3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、及び S からなる群から選択され； $Y_1 \sim Y_3$ の少なくとも 1 つは、直接結合であり； C^A は、カルベン炭素であり； $L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 、 BR' 、及び NR' 、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；m 及び n は、それぞれ独立して、0 又は 1 であり；m 及び n の少なくとも 1 つは、1 である。幾つかの実施形態においては、R、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも 1 つは、以下の式 II：

20

【化 8】



30

の構造を有する基を含む。式 II 中、 $[X]$ は、5 員ヘテロ環、5 員炭素環、6 員ヘテロ環、6 員炭素環、又は 2 つ以上の縮合環を含む縮合ヘテロ環又は炭素環系であり；環 E 及び F は、それぞれ独立して、5 員又は 6 員の炭素環又はヘテロ環である。式 I 及び式 II において、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノ最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；各 R、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；R 及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができ；式 II の構造を有する基の分子量は、395 グラム / モル以上である。幾つかの実施形態においては、R、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも 1 つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも 3 つの 6 員芳香環を含む化学基を含み、各 R、 R^A 、 R^B 、 R^C 、及び R^D が、独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；任意の隣接する置換基が、結合又は縮合して環を形成することができる。幾つかの実施形態においては、R、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも 1 つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも 4 つの 6 員芳香環を含む化学基を含む。幾つかの実施形態においては、R、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも 1 つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも 5 つの 6 員芳香環を含む化学基を含む。幾つかの実施形態においては、R、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも 1 つが、互いに隣接して縮合

40

50

しない少なくとも6つの6員芳香環を含む化学基を含む。幾つかの実施形態においては、 R 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも2つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも3つの6員芳香環を含む化学基を含む。

【0067】

化合物の幾つかの実施形態においては、各 R 、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F が、独立して、水素である、又は本明細書に定義される好ましい一般的な置換基からなる群から選択される置換基である。

【0068】

化合物の幾つかの実施形態においては、カルベン炭素 C^A と、環A上の任意の置換基のその次の最も近い最近接非水素原子位置 (the next nearest non-hydrogen atomic position) (但し、化合物中の環AのNに直接結合する任意の置換基Rの重原子を除く) との間の0 Kにおける、計算される最近接分子内接触が2.70 Å以上である。この距離を測定するために用いられる化合物の構造は、Gaussian 09、Revision D.01 (Grimme分散力補正を適用するB3LYP関数、ホスト構造には6-31G*基底関数系、発光体構造にはCEP-31G) を用いて計算される分子構造の基底状態のジオメトリから導出した。これに先立ち、Schroedinger、LLCのMaestro、Release 2019-1 (OPLS3eフォースフィールド) を用いて分子構造の立体配座空間の系統的ねじりサンプリング (systematic torsional sampling) を行った。最低エネルギー配座異性体 (conformer) を、前述の基底状態B3LYP計算のためのインプットとして用いた。

10

20

【0069】

Gaussian計算による、白金発光体の基底状態分子構造を、カルベン炭素 C^A と、環A上の任意の置換基のその次の最も近い最近接非水素原子位置 (但し、環AのNに直接結合する任意の置換基Rの重原子を除く) との間の最近接分子内接触 (単位: オングストローム) の測定に用いた。

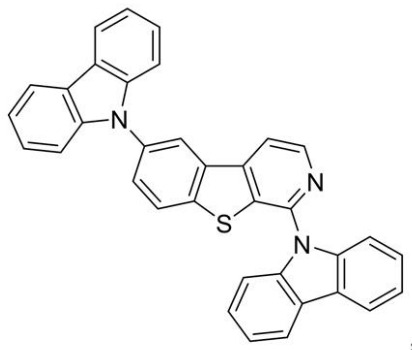
【0070】

幾つかの実施形態においては、0 Kでのアモルファス膜構造において、以下に示す式II又は式IVの化合物におけるカルベン炭素 C^A と非水素原子との間の計算される最近接分子間距離が2.70 Å以上である。等価な分子間近接接触を測定するためには、ホスト様分子、即ち、式II及び式IVの化合物と、OLEDデバイスの発光層に存在する発光体自身との間の低エネルギー二分子対を見つける必要がある。最も好ましい低エネルギー対構造のモデル化するために、以下のプロセスを用いた。BIOVIA Materials Studio, Release 18.1 (Adsorption Locatorツール付き) を用いて、基底状態B3LYP構造を、分子対のMetropolis Monte Carloシミュレーションしたアニーリングサンプリング用のインプットとして用いた。各Monte Carloシミュレーションにおいて、DNP基底関数系を用いるPBE関数での一点DMol3計算から、双極子モーメントにフィッティングさせたHirshfeld電荷を抽出することによって静電的相互作用を記述しながら、ユニバーサルフォースフィールドを用いた。各シミュレーションで合計10回の加熱サイクルを用い、各サイクルで500,000個の分子対構造を、自動化温度制御を用いてサンプリングした。各分子内対シミュレーションから、最も低い50対を戻した。これらの対のうち、最低の対の1 kcal/mol以内の対について、発光体のカルベン炭素 C^A と、その次の最も近い非水素最近接原子位置との間の最近接分子内接触 (単位: オングストローム) を調べた。式II及び式IVを以下に示す。

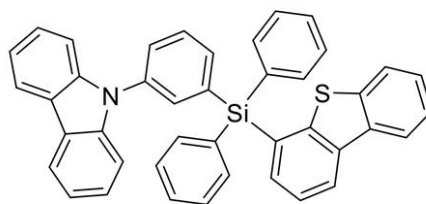
30

40

【化 9】



式IIII



式IV

10

【0071】

化合物の幾つかの実施形態においては、環 B、C、及び D は、それぞれ 6 員芳香環である。幾つかの実施形態においては、環 B は、ピリジン環である。

【0072】

化合物の幾つかの実施形態においては、 L^1 は、直接結合である。化合物の幾つかの実施形態においては、 L^3 は、直接結合である。幾つかの実施形態においては、 L^2 は、O である。

20

【0073】

化合物の幾つかの実施形態においては、 R^A は、式 II の構造を有する基を含む。幾つかの実施形態においては、 R^D は、式 II の構造を有する基を含む。

【0074】

化合物の幾つかの実施形態においては、 $[X]$ は、ベンゼン環を含む。幾つかの実施形態においては、 $[X]$ は、カルバゾールを含む。

【0075】

化合物の幾つかの実施形態においては、 $Y_1 \sim Y_3$ は、それぞれ直接結合である。幾つかの実施形態においては、 $Y_1 \sim Y_3$ の 1 つは、O であり、残りは、直接結合である。幾つかの実施形態においては、 X^2 、 X^5 、及び X^8 の 1 つは、N であり、その他は、C である。幾つかの実施形態においては、 X^2 は、N であり、 X^1 は、C であり、 $X^3 \sim X^9$ は、それぞれ C である。

30

【0076】

化合物の幾つかの実施形態においては、0 K での化合物中のカルベン炭素 C^A と、任意の他の非水素原子との間の計算される最近接分子内接触が 2.90 以上である。幾つかの実施形態においては、0 K での化合物中のカルベン炭素 C^A と、任意の他の非水素原子との間の計算される最近接分子内接触が 2.90 以上である。幾つかの実施形態においては、0 K での化合物中のカルベン炭素 C^A と、任意の他の非水素原子との間の計算される最近接分子内接触が 3.00 以上である。幾つかの実施形態においては、0 K での化合物中のカルベン炭素 C^A と、任意の他の非水素原子との間の計算される最近接分子内接触が 3.10 以上である。

40

【0077】

化合物の幾つかの実施形態においては、0 K でのアモルファス膜中の、式 III 又は式 IV の化合物におけるカルベン炭素 C^A と非水素原子との間の計算される最近接分子間距離が 2.80 以上である。幾つかの実施形態においては、0 K でのアモルファス膜中の、式 III 又は式 IV の化合物におけるカルベン炭素 C^A と非水素原子との間の計算される最近接分子間距離が 2.90 以上である。幾つかの実施形態においては、0 K でのアモルファス膜中の、式 III 又は式 IV の化合物におけるカルベン炭素 C^A と非水素原子との間の計算される最近接分子間距離が 3.00 以上である。幾つかの実施形態においては、0 K でのアモルファス膜中の、式 III 又は式 IV の化合物におけるカルベン炭素

50

C^A と非水素原子との間の計算される最近接分子間距離が 3 . 1 0 以上である。

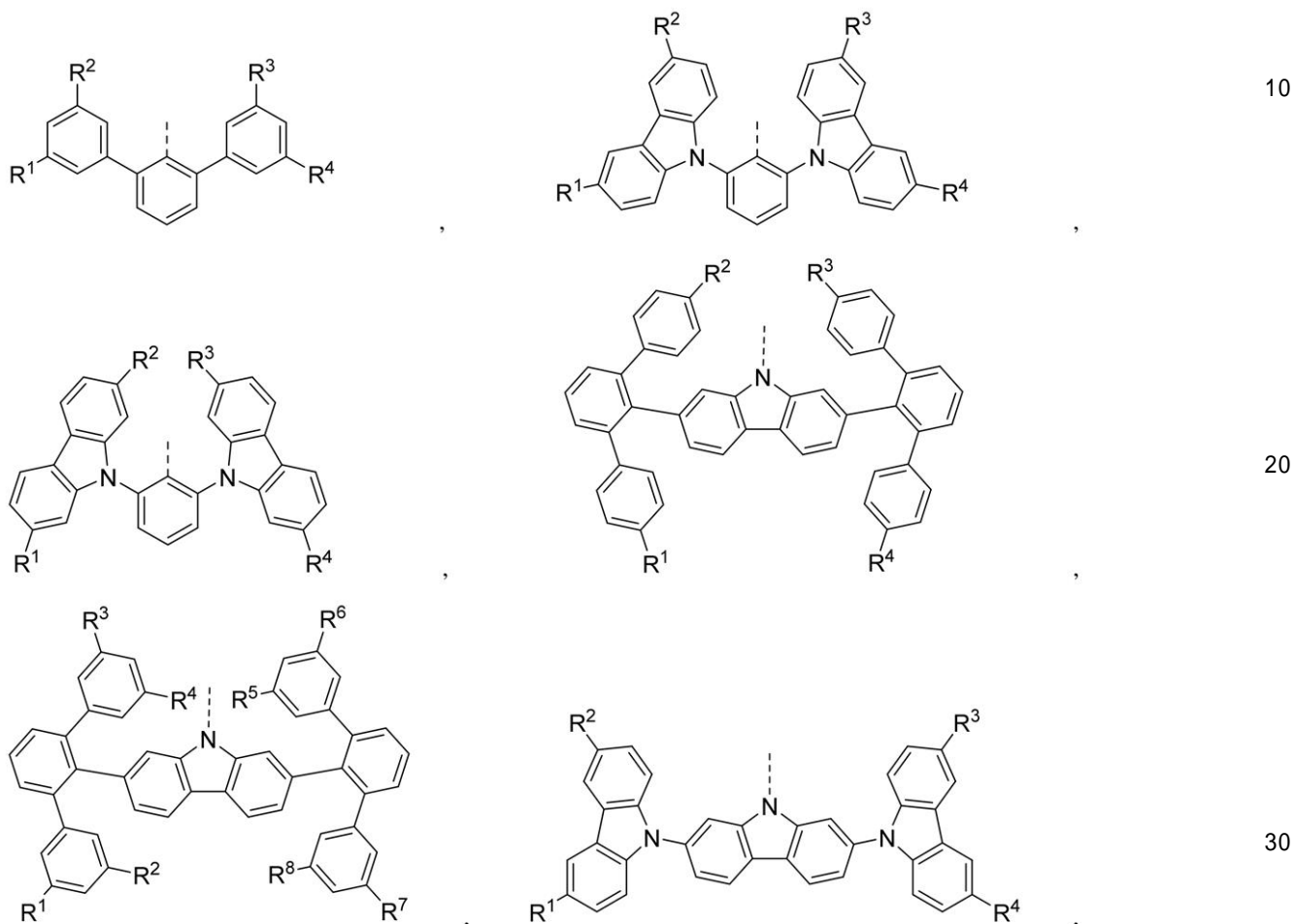
【 0 0 7 8 】

化合物の幾つかの実施形態においては、M は、P t である。

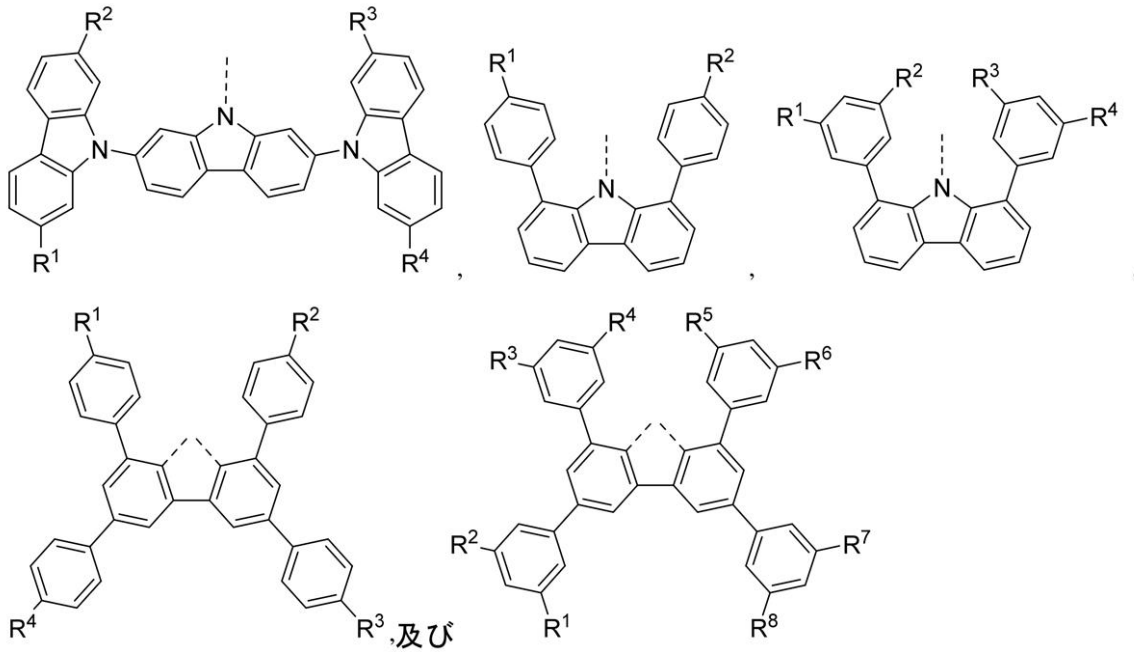
【 0 0 7 9 】

化合物の幾つかの実施形態においては、式 I I の構造を有する基は、下記からなる群から選択される。

【 化 1 0 】



【化 1 1】



10

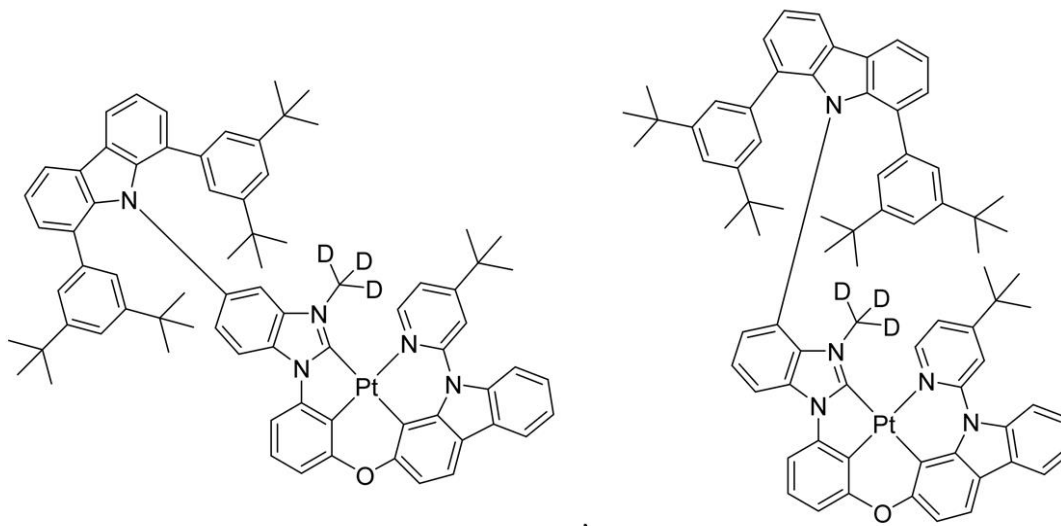
；式中、各 $R^1 \sim R^8$ は、独立して、水素、重水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

20

【0080】

化合物の幾つかの実施形態においては、式 I の化合物は、下記からなる群から選択される。

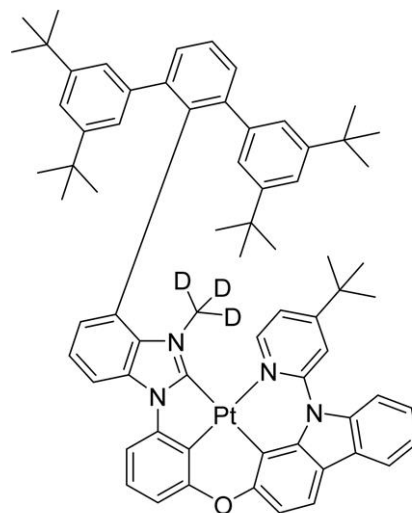
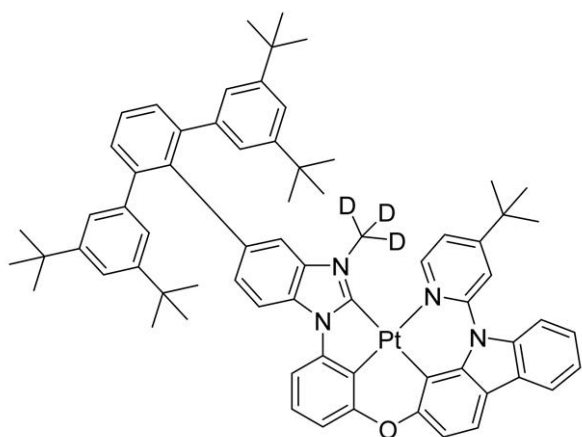
【化 1 2】



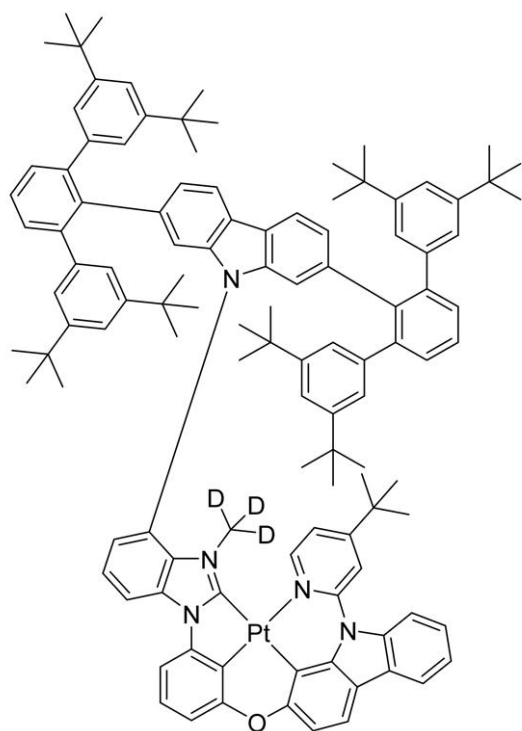
30

40

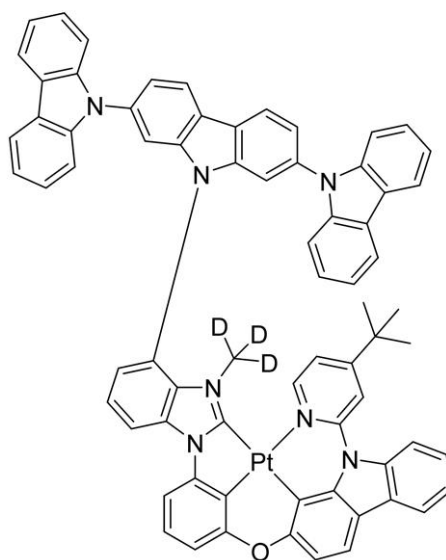
【化 1 3】



10

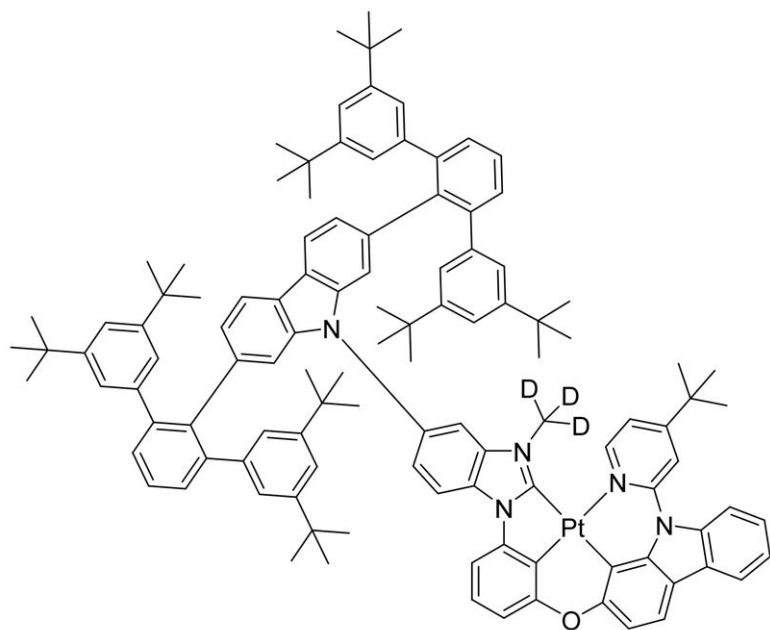


20

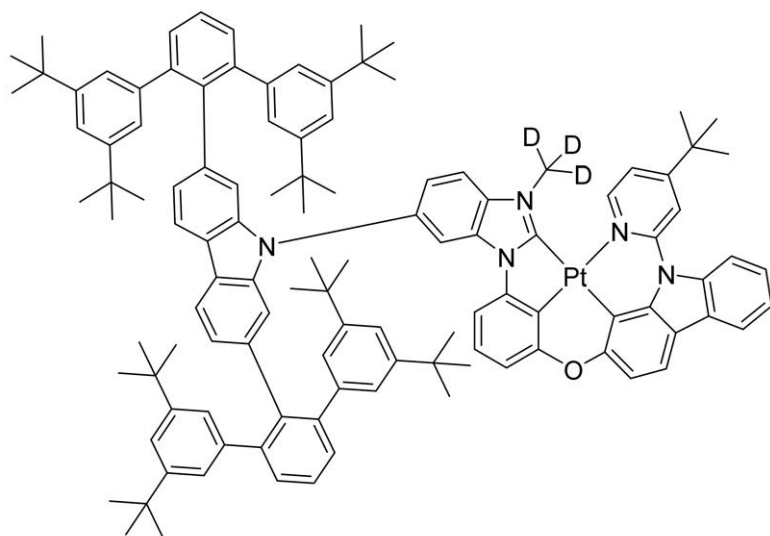


30

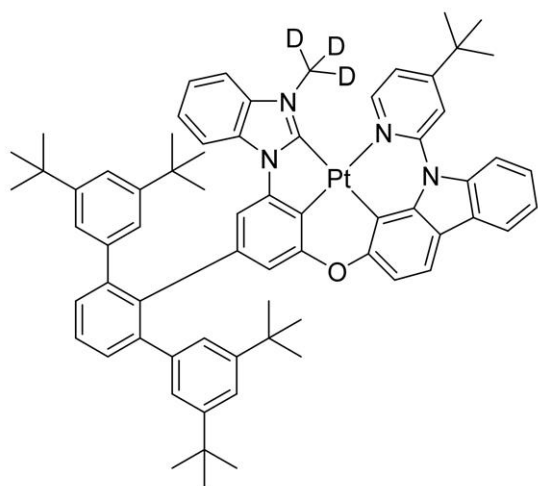
【化 1 4】



10



20



30

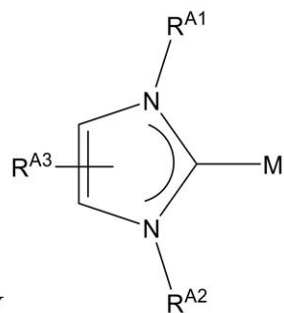
, 及び

40

【 0 0 8 1】

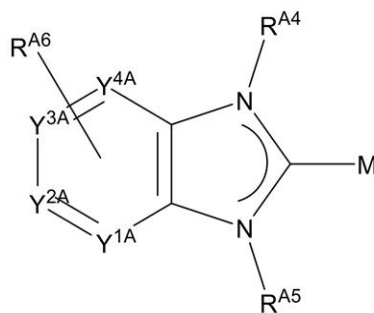
以下の式：

【化 1 5】



式V

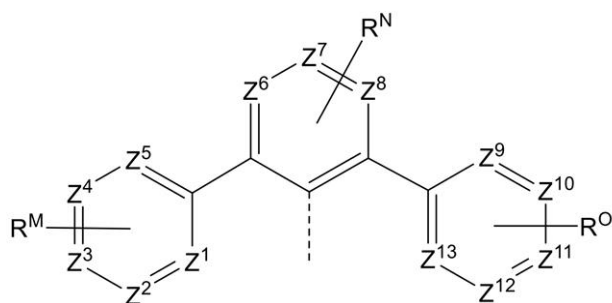
、及び式V I



10

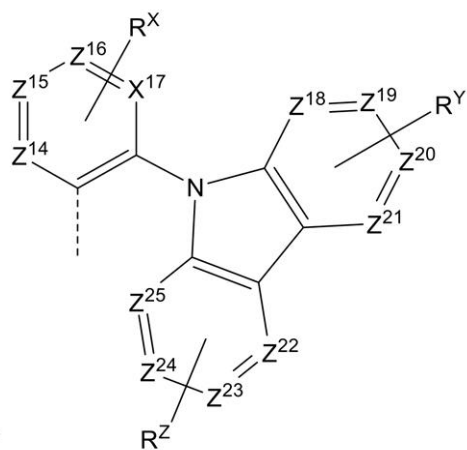
からなる群から選択される構造を含む化合物が開示され、式中、Mは、Os、Pd、Pt、Ir、Cu、及びAuからなる群から選択される。幾つかの実施形態においては、 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、又は R^{A6} の少なくとも1つは、以下の式：

【化 1 6】



式V I I

20

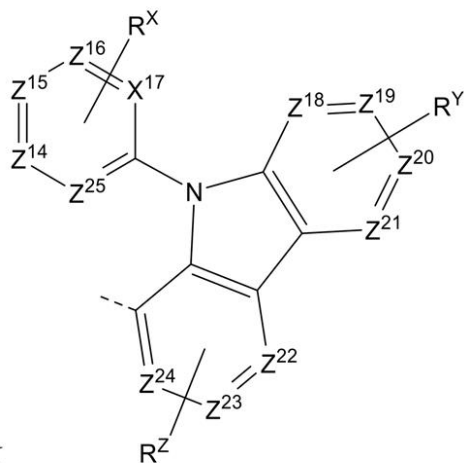


式V I I I

、又は

30

【化 17】



式IX

10

の構造であり；式中、 $Y^{1A} \sim Y^{4A}$ は、それぞれ独立して、C又はNであり； $Y^{1A} \sim Y^{4A}$ の2つ以下がNであり； $Z^1 \sim Z^{25}$ は、それぞれ独立して、C又はNであり；同一環中の3つの連続する $Z^1 \sim Z^{25}$ は、Nであることがなく； R^{A3} 、 R^{A6} 、 R^M 、 R^N 、 R^O 、 R^X 、 R^Y 、及び R^Z は、それぞれ独立して、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；各 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、 R^{A6} 、 R^M 、 R^N 、 R^O 、 R^X 、 R^Y 、及び R^Z は、独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；Mは、他の配位子に配位することができ；任意の2つの置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；但し、前記化合物が式Vであり、 R^{A1} 及び R^{A2} の一方が式VIIであるとき、 R^M 、 R^N 、及び R^O の少なくとも1つは、重水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。幾つかの実施形態においては、式V中の R^{A1} 及び R^{A2} の少なくとも一方のみが、式VII、式VIII、又は式IXの構造であることができる。幾つかの実施形態においては、式VI中の R^{A4} 及び R^{A5} の少なくとも一方のみが、式VII、式VIII、又は式IXの構造であることができる。

20

30

【0082】

上に定義される式V又は式VIからなる群から選択される構造を有する化合物の幾つかの実施形態においては、 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、又は R^{A6} の少なくとも1つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも3つの6員芳香環を含む化学基を含み、各 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、及び R^{A6} は、独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり、任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができる。幾つかの実施形態においては、 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、又は R^{A6} の少なくとも1つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも4つの6員芳香環を含む化学基を含む。幾つかの実施形態においては、 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、又は R^{A6} の少なくとも1つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも5つの6員芳香環を含む化学基を含む。幾つかの実施形態においては、 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、又は R^{A6} の少なくとも1つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも6つの6員芳香環を含む化学基を含む。幾つかの実施形態においては、 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、又は R^{A6} の少なくとも2つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも3つの6員芳香環を含む化学基を含む。

40

【0083】

上に定義される式V又は式VIの構造を有する化合物の幾つかの実施形態においては、各 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、 R^{A6} 、 R^M 、 R^N 、 R^O 、 R^X 、 R^Y 、及び R^Z は、独立して、水素である、又は重水素、フッ素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロア

50

ルケニル、ヘテロアルケニル、アリール、ヘテロアリール、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、ポリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基である。幾つかの実施形態においては、Mは、少なくとも1つのモノアニオン性二座配位に配位する。幾つかの実施形態においては、 $Y^{1A} \sim Y^{4A}$ は、それぞれCである。幾つかの実施形態においては、 $Z^1 \sim Z^{13}$ は、それぞれCである。幾つかの実施形態においては、 $Z^1 \sim Z^{13}$ の少なくとも1つは、Nである。

【0084】

上に定義される式V又は式VIの構造を有する化合物の幾つかの実施形態においては、 R^M 、 R^N 、及び R^O の少なくとも1つは、第2級又は第3級アルキル基である。幾つかの実施形態においては、 R^M 、 R^N 、及び R^O の少なくとも1つは、完全に又は部分的に重水素化されたアルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール基、及びこれらの組合せである。幾つかの実施形態においては、 $Z^{14} \sim Z^{25}$ は、それぞれCである。幾つかの実施形態においては、 $at Z^{14} \sim Z^{25}$ の少なくとも1つは、Nである。幾つかの実施形態においては、少なくとも1つの R^X は、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。幾つかの実施形態においては、Mは、四座配位である。幾つかの実施形態においては、Mは、六座配位である。

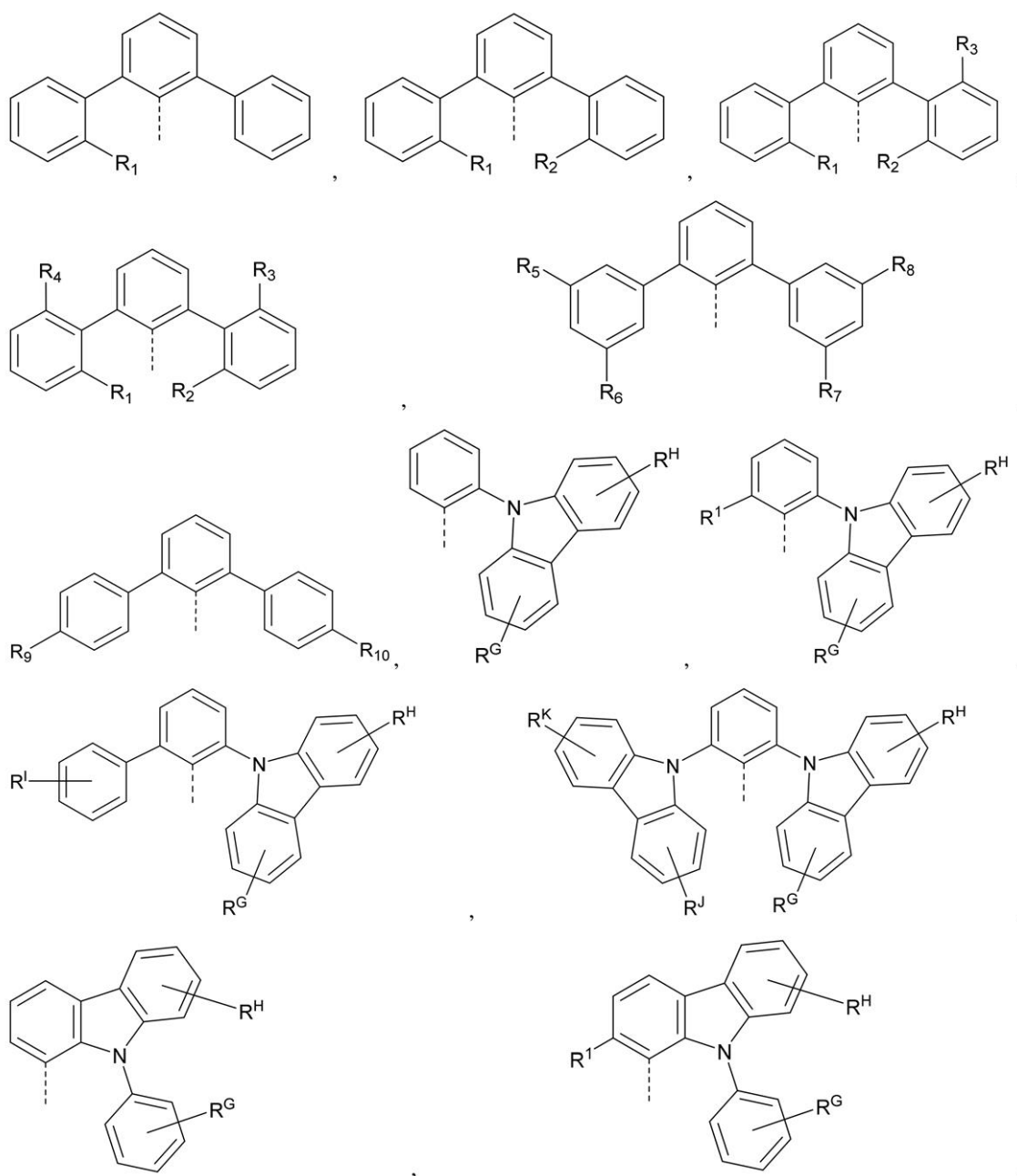
10

【0085】

上に定義される式V又は式VIの構造を有する化合物の幾つかの実施形態においては、式V中の R^{A1} 及び R^{A2} の少なくとも1つ又は式VI中の R^{A4} 及び R^{A5} の少なくとも1つは、他の配位子と結合して、二座、三座、四座、五座、又は六座配位子を含む。幾つかの実施形態においては、Mは、Pd、Pt、又はIrである。幾つかの実施形態においては、 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、又は R^{A6} の少なくとも1つは、下記からなる群から選択される。

20

【化 1 8】

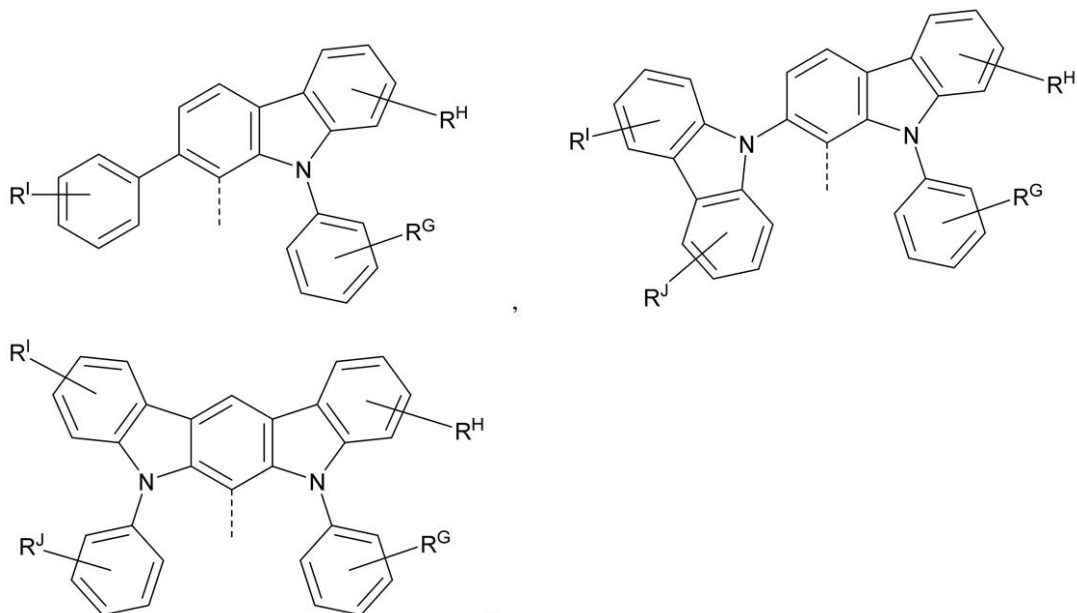


10

20

30

【化 19】



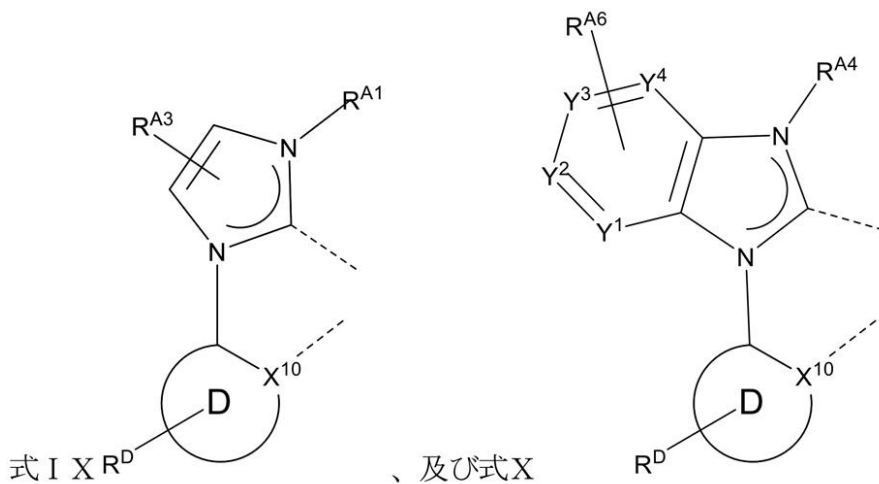
10

【0086】

上に定義される式 V 又は式 V I の構造を有する化合物の幾つかの実施形態においては、
M は、I r、P t、又は P d であり、前記化合物は、M に配位する配位子 L_A を含み、前
記配位子は、下記からなる群から選択される。

20

【化 20】



30

式中、環 D は、5 員又は 6 員の炭素環又はヘテロ環； R^D は、モノから最大の許容される
置換を表す、又は無置換を表し；各 R^D は、水素である、又は重水素、重水素、フッ素、
アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アルコキシ、アリーロキシ、アミノ、シ
リル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アリール、ヘテロアリール、
ニトリル、イソニトリル、スルファニル、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選
択される置換基であり；任意の 2 つの置換基は、結合又は縮合して環を形成することが
できる。上に定義される式 I X 及び式 X からなる群から選択される配位子 L_A を含む化合
物の幾つかの実施形態においては、環 D は、6 員芳香環である。幾つかの実施形態におい
ては、 X^8 は、C である。幾つかの実施形態においては、各 R^{A3} 及び R^{A6} は、独立して
、水素、重水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、
アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。幾つかの
実施形態においては、 R^{A1} 及び R^{A4} は、独立して、アルキル、シクロアルキル、ヘテロ
アルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せか
らなる群から選択される。幾つかの実施形態においては、 R^{A1} 及び R^{A4} は、それぞれ独

40

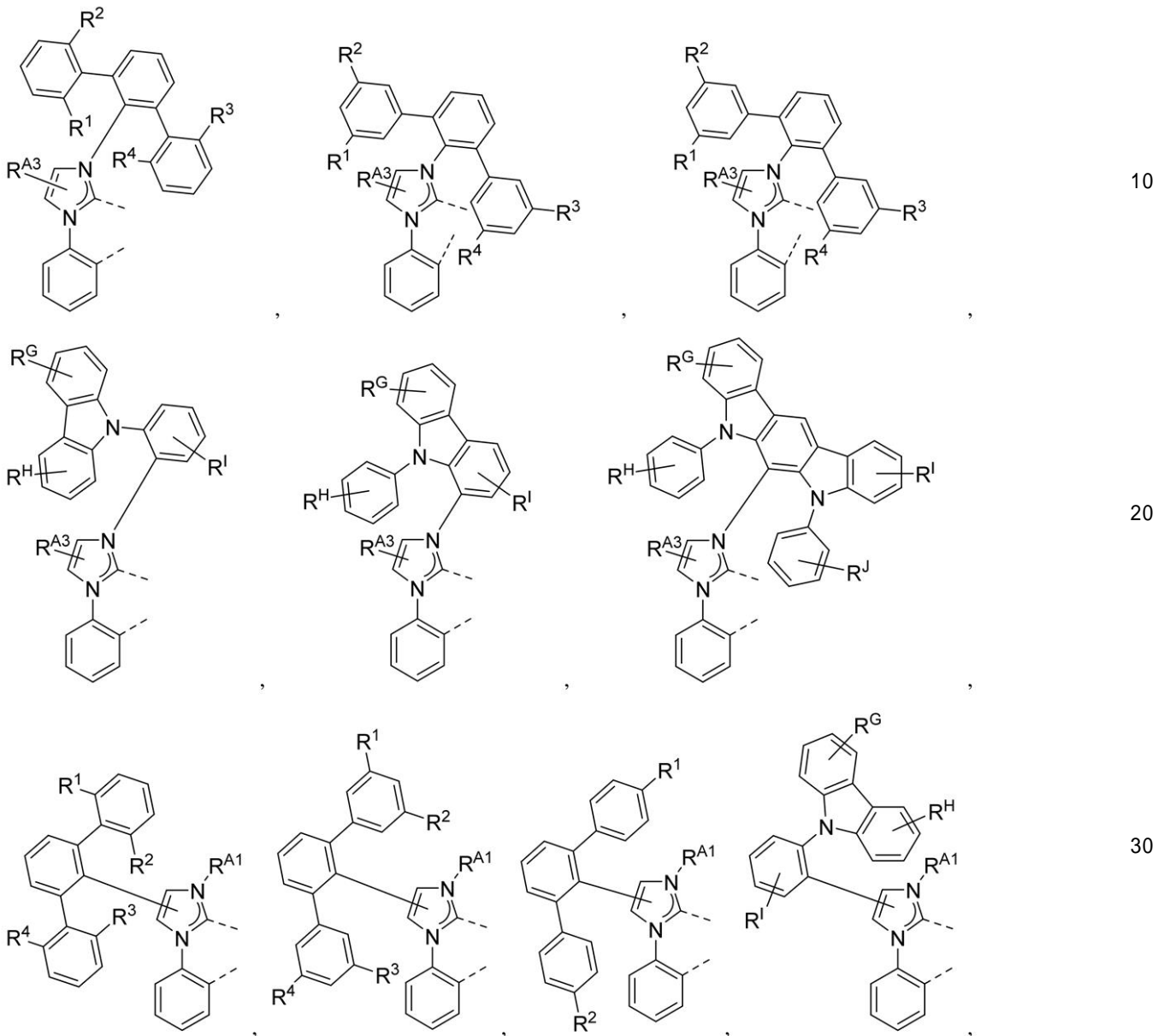
50

立して、上に定義される式ⅤⅠⅠ、式ⅤⅠⅠⅠ、及び式ⅠⅩからなる群から選択される。

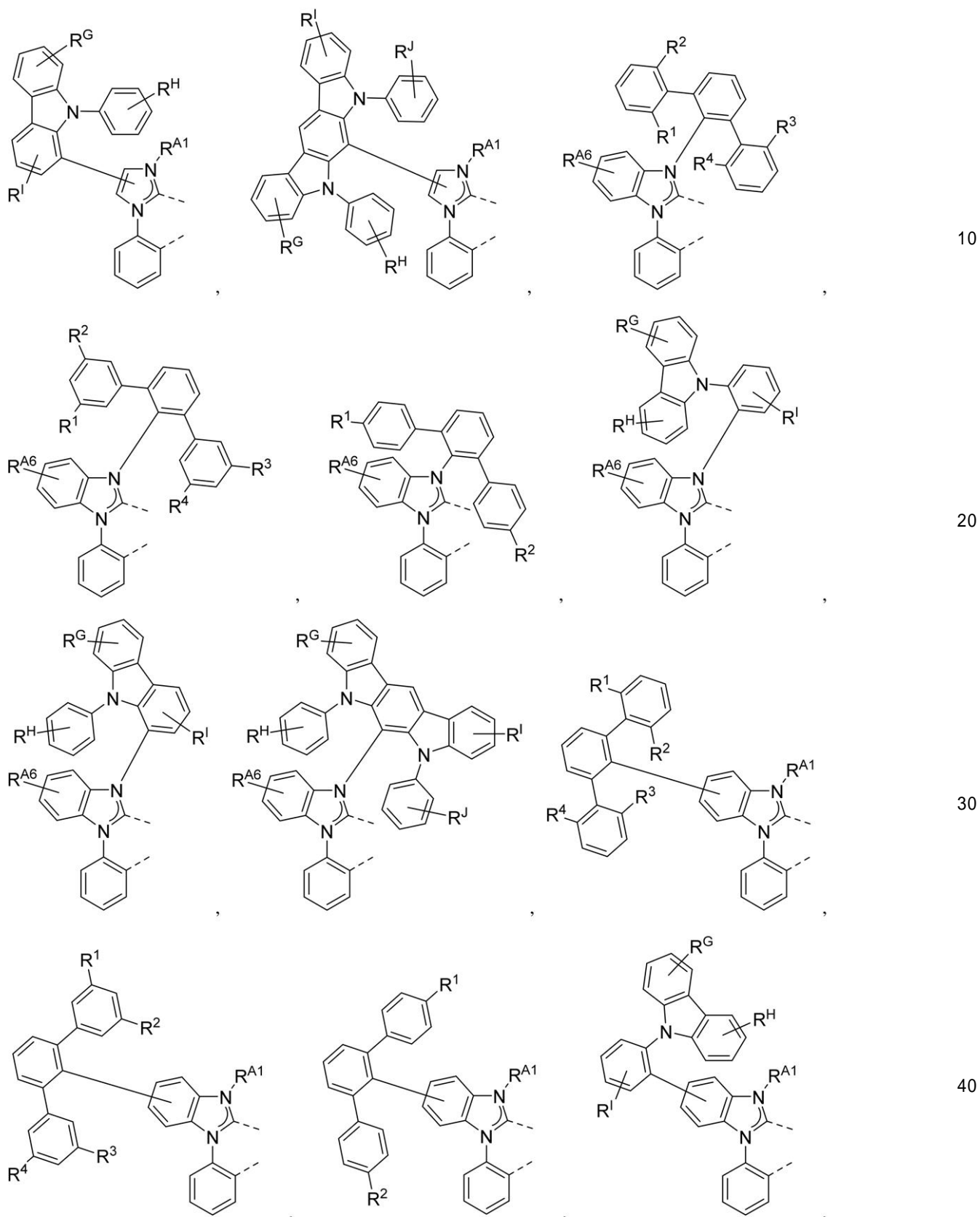
【0087】

幾つかの実施形態においては、配位子 L_A は、下記からなる群から選択される。

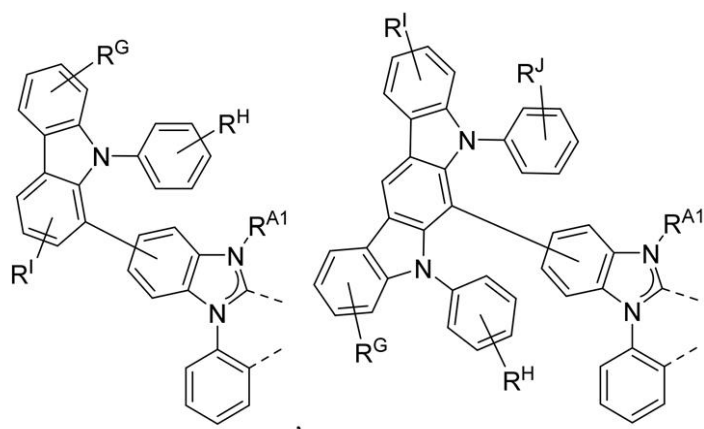
【化21】



【化 2 2】



【化 2 3】



10

【 0 0 8 8 】

上に定義される式 I X 及び式 X からなる群から選択される配位子 L_A を含む化合物の幾つかの実施形態においては、配位子 L_A は、以下に定義される $L_{A1} \sim L_{A2438910}$ からなる群から選択される。

【化 2 4】

L_{Ai}	L_{Ai} の構造	Ar^l, R	i
$L_{A1} \sim L_{A110405}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405の整数である	$i = j$
$L_{A110406} \sim L_{A220810}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405の整数である	$i = j + 110405$
$L_{A220811} \sim L_{A331215}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405の整数である	$i = j + 220810$
$L_{A331216} \sim L_{A441620}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405の整数である	$i = j + 331215$
$L_{A441621} \sim L_{A552025}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、 $R^{A2} = R_k$ 、 ここで、 j と k は、1～110405 の整数である	$i = j + 441620$
$L_{A552026} \sim L_{A662430}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405の整数である	$i = j + 552025$
$L_{A662431} \sim L_{A772835}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405の整数である	$i = j + 662430$

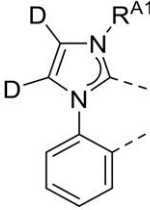
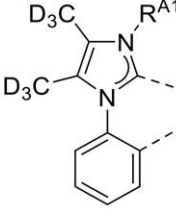
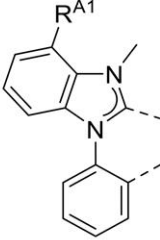
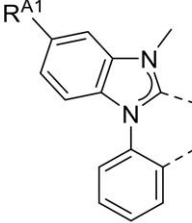
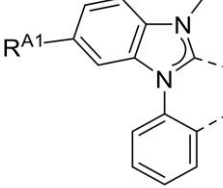
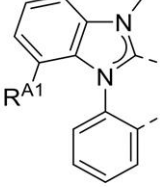
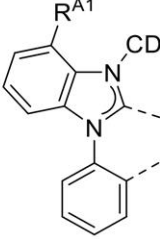
10

20

30

40

【化 2 5】

$L_{A772836} \sim L_{A883240}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 772835$
$L_{A883241} \sim L_{A993645}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 883240$
$L_{A993646} \sim L_{A1104050}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 993645$
$L_{A1104051} \sim L_{A1214455}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 1104050$
$L_{A1214456} \sim L_{A1324860}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 1214455$
$L_{A1324861} \sim L_{A1435265}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 1324860$
$L_{A1435266} \sim L_{A1545670}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 1435265$

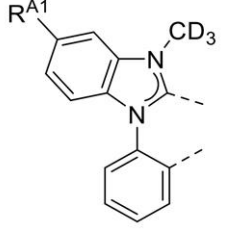
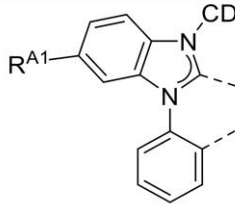
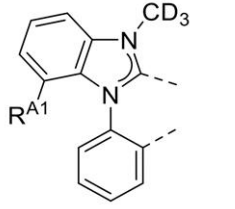
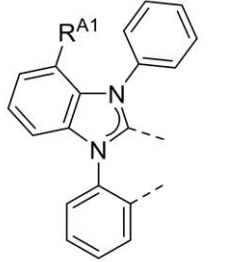
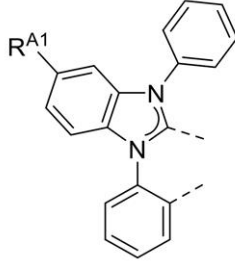
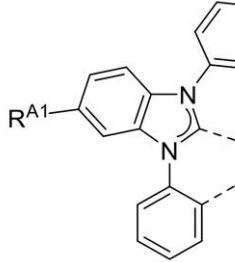
10

20

30

40

【化 2 6】

$L_{A1545671} \sim L_{A1656075}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 1545670$
$L_{A1656076} \sim L_{A1766480}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 1656075$
$L_{A1766481} \sim L_{A1876885}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 1766480$
$L_{A1876886} \sim L_{A1987290}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 1876885$
$L_{A1987291} \sim L_{2097695}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 1987290$
$L_{A2097696} \sim L_{A2208100}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 2097695$

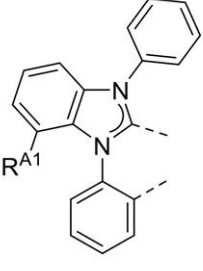
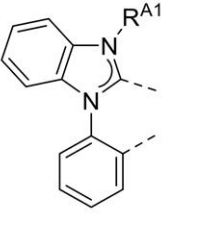
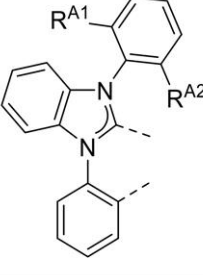
10

20

30

40

【化 2 7】

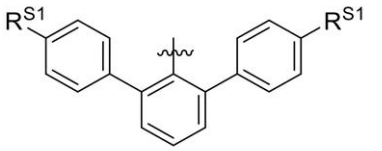
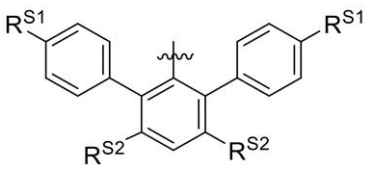
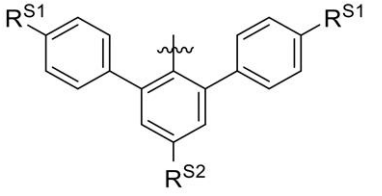
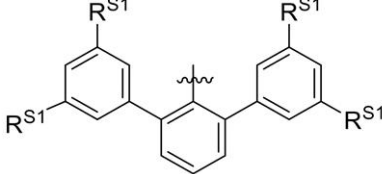
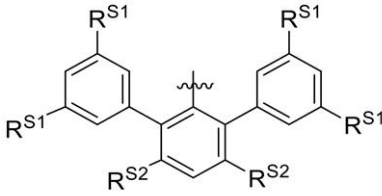
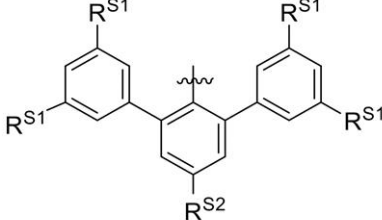
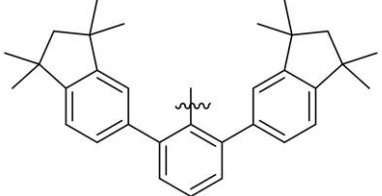
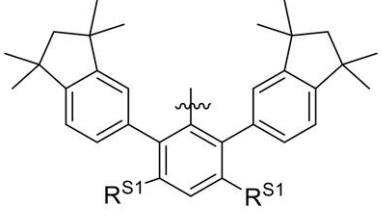
$L_{A2208101} \sim L_{A2318505}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 2208100$
$L_{A2318506} \sim L_{A2428910}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 2318505$
$L_{A2428910} \sim L_{A2438910}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = B_j$ 、 $R^{A2} = B_k$ 、 ここで、 j と k は、1～100 の整 数である	$i = 100(j-1) + k + 2428910$

10

20

ここで、 $R_1 \sim R_{110405}$ は、以下の構造を有する。

【化 2 8】

R_j	R_m の構造	R^{S1}, R^{S2}, R^{S3}	j
R1~R100 は、右の構造 を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j = t$
R101~R10100 は、右の構造 を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 100$
R10101~R20100 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 10100$
R20101~R20200 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j = t + 20100$
R20201~R30200 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 20100$
R30201~R40200 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 30200$
R40201は、右の 構造を有する			$j = 40201$
R40202~R40301 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j = t + 40201$

10

20

30

40

【化 2 9】

R40302～R40401 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40301$
R40402は、右の 構造を有する			$j=40402$
R40403～R40502 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40402$
R40503～R40602 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40502$
R40603～R50602 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+40602$
R50603は、右の 構造を有する			$j=50603$
R50604～R50703 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+50603$

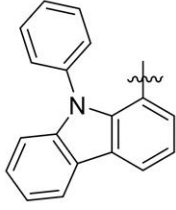
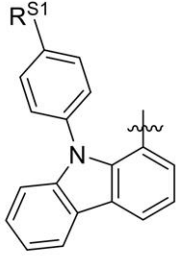
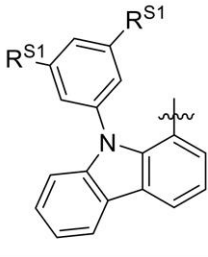
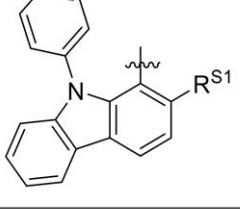
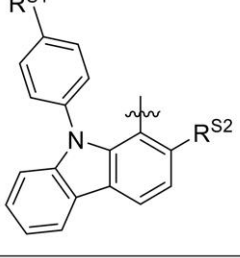
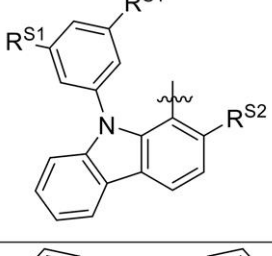
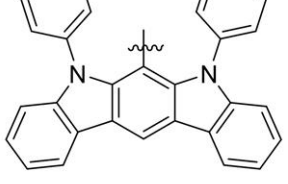
10

20

30

40

【化 3 0】

R50704 は、右の構造を有する			$j = 50704$
R50705～R50804 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100 の整数である	$j = t + 50704$
R50805～R50904 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100 の整数である	$j = t + 50804$
R50905～R51004 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100 の整数である	$s = t + 50904$
R51005～R61004 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100 の 整数である	$j = 30(t-1) + u + 51004$
R61005～R71004 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100 の 整数である	$j = 30(t-1) + u + 61004$
R71005 は、右の構造を有する			$j = 71005$

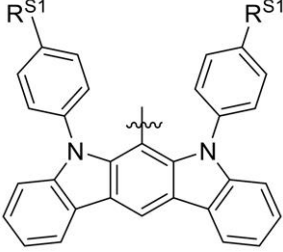
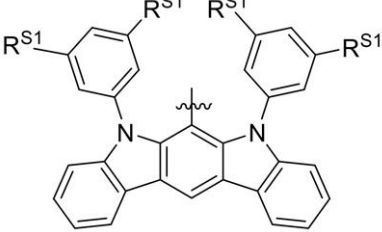
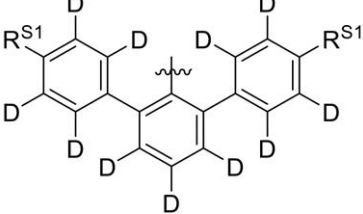
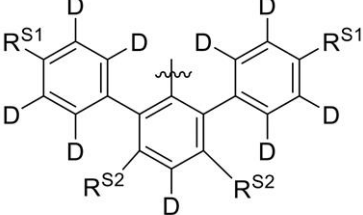
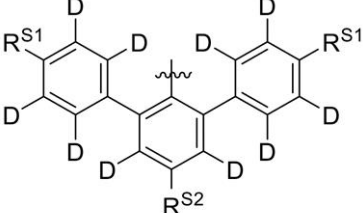
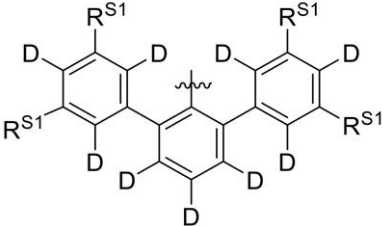
10

20

30

40

【化 3 1】

R71006～R71105 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+71105$
R71106～R71205 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+71105$
R71206～R71305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+71205$
R71306～R81305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+71305$
R81306～R91305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+81305$
R91306～R91405 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+91305$

10

20

30

40

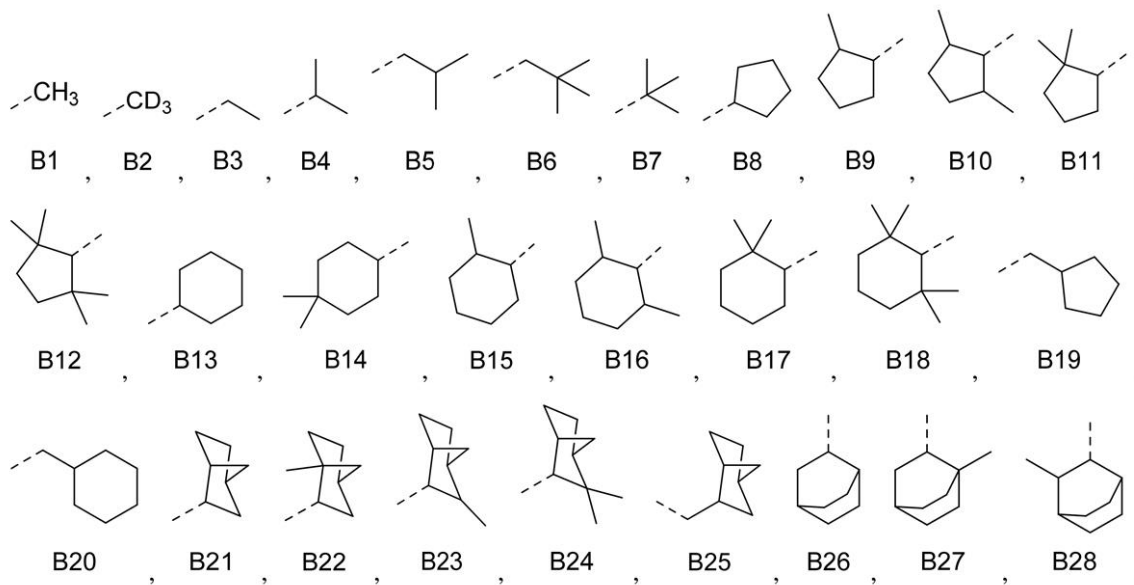
【化 3 2】

R91406～R101405 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+91405$
R101406～ R110405は、右 の構造を有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+101405$

10

式中、B 1 ～ B 6 0 は、以下の構造を有する。

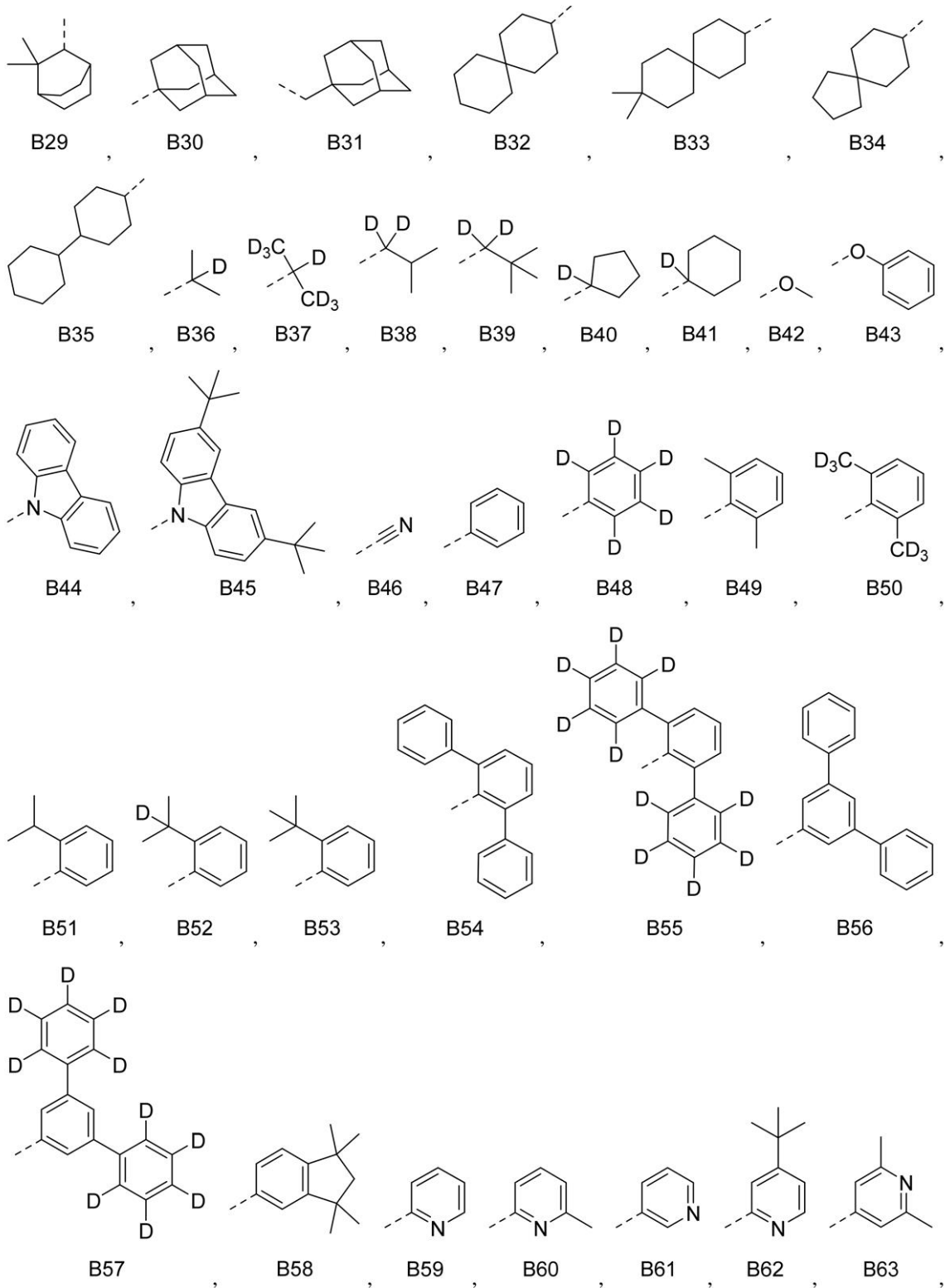
【化 3 3】



20

30

【化 3 4】



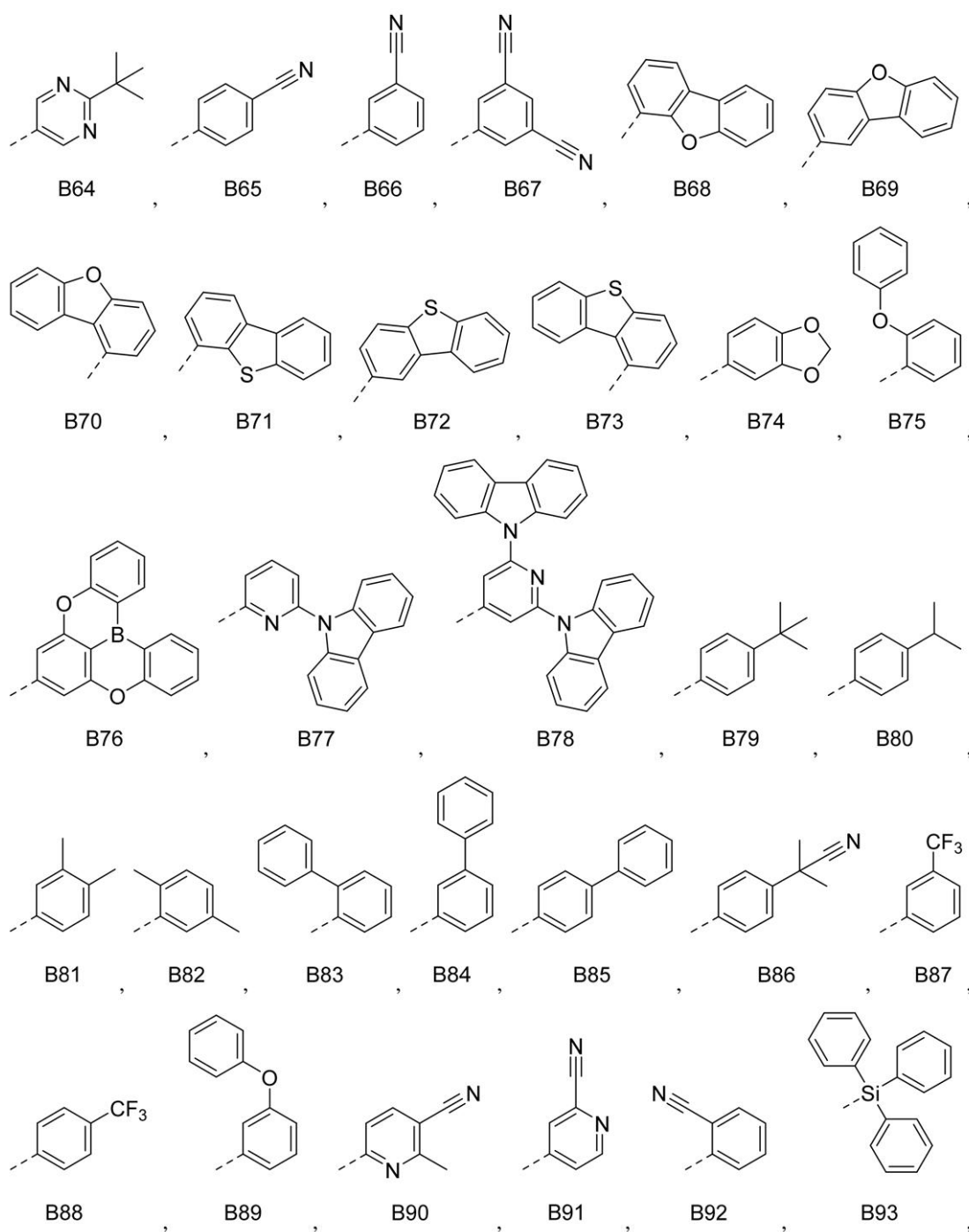
10

20

30

40

【化 3 5】

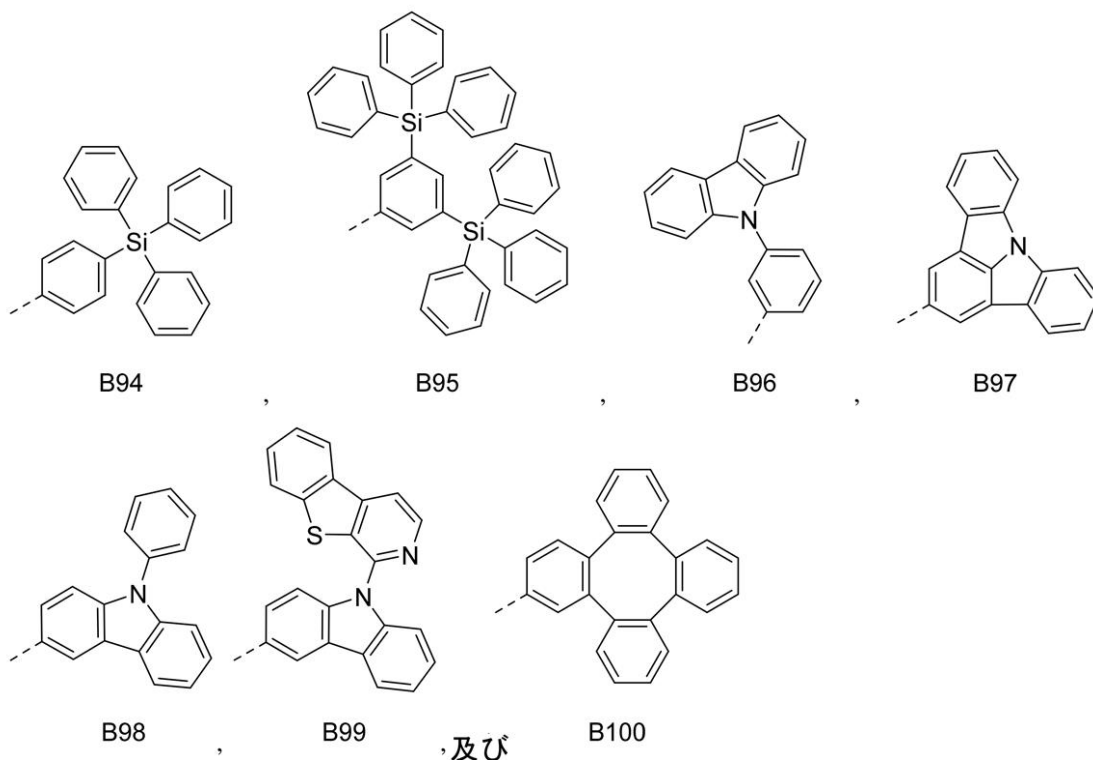


10

20

30

【化 3 6】



10

20

【0089】

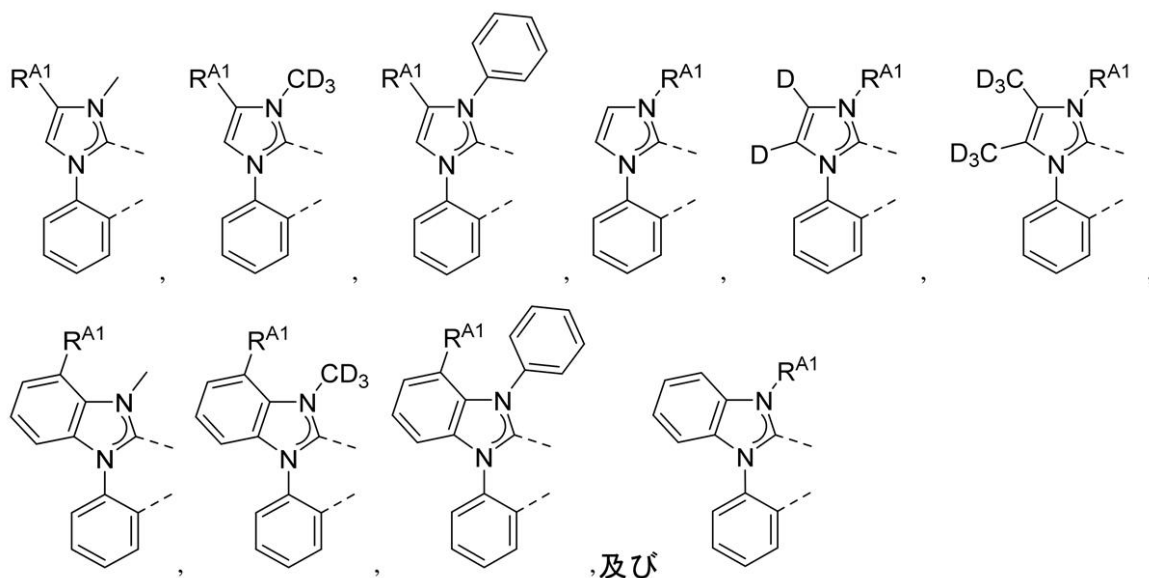
上に定義される式 I X 及び式 X からなる群から選択される配位子 L_A を含む化合物の幾つかの実施形態においては、以下の構造 B 1、B 2、B 7、B 13、B 30、B 36、B 37、B 44、B 45、B 46、B 47、B 48、B 49、B 50、B 64、B 65、B 66、B 67、B 68、B 69、B 70、B 76、B 77、B 78、B 86、B 91、B 93、B 94、B 96、B 97、B 98、B 99、又は B 100 の 1 つを置換基 R^{S1} 又は R^{S2} として含む置換基 R^{A1} を含む $L_{A1} \sim L_{A2428910}$ の配位子が好ましい。

30

【0090】

配位子 L_A が式 I X 及び式 X からなる群から選択される化合物の幾つかの実施形態においては、配位子 L_A は、下記からなる群から選択されることが好ましい。

【化 3 7】



40

【0091】

50

配位子 L_A が式 I X 及び式 X からなる群から選択される化合物の幾つかの実施形態においては、化合物は、式 $M(L_A)_x(L_B)_y(L_C)_z$ を有し、式中、 L_B 及び L_C は、それぞれ二座配位子であり； x は、1、2、又は3であり； y は、0、1、又は2； z は、0、1、又は2であり； $x+y+z$ は、金属 M の酸化状態である。幾つかの実施形態においては、化合物は、 $Ir(L_A)_3$ 、 $Ir(L_A)(L_B)_2$ 、 $Ir(L_A)_2(L_B)$ 、 $Ir(L_A)_2(L_C)$ 、及び $Ir(L_A)(L_B)(L_C)$ からなる群から選択される式を有し； L_A 、 L_B 、及び L_C は、互いに異なる。幾つかの実施形態においては、化合物は、式 $Pt(L_A)(L_B)$ を有し； L_A 及び L_B は、同一又は異なっている。

【0092】

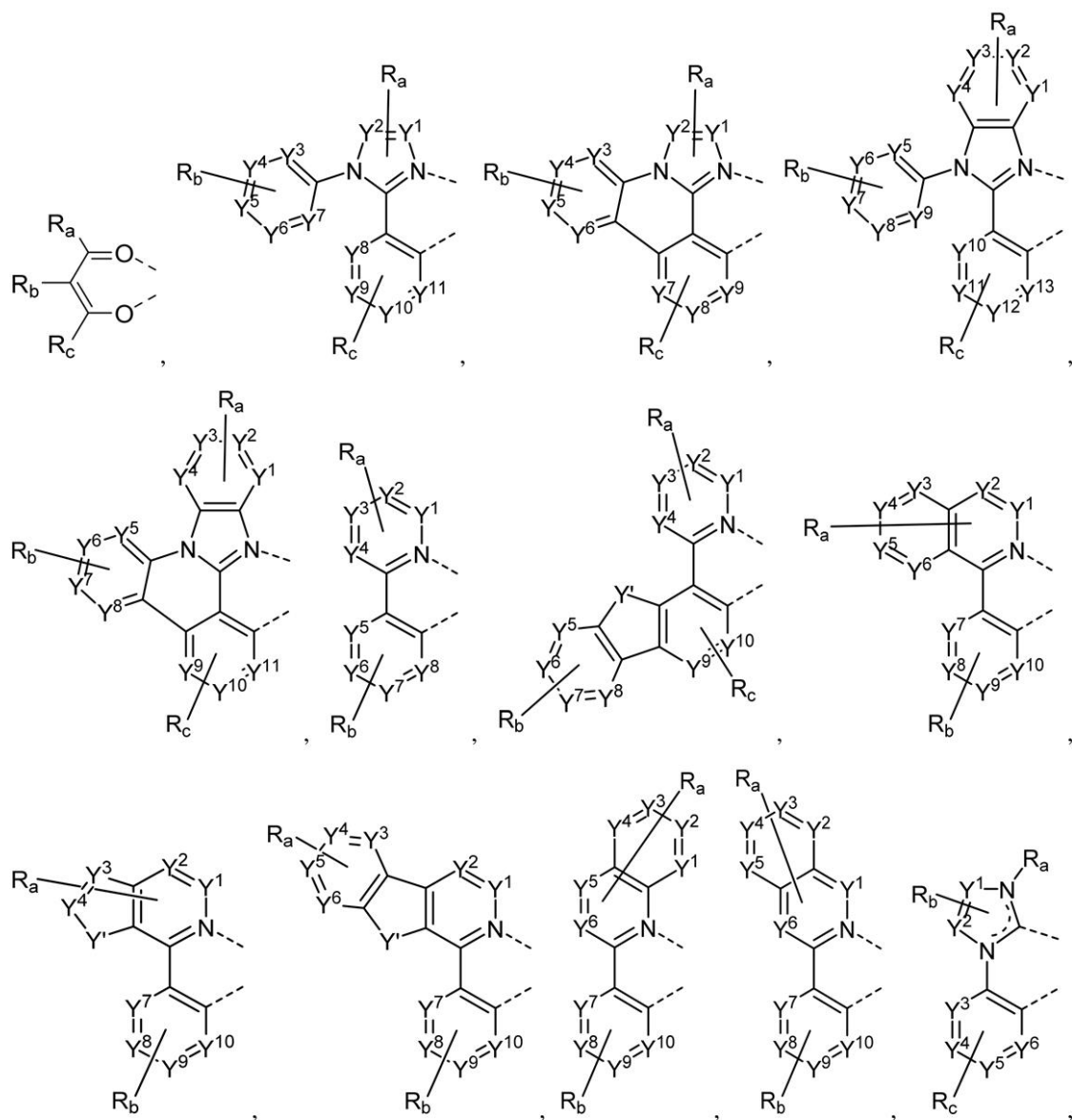
10

化合物が、上で定義される式 $Pt(L_A)(L_B)$ を有する幾つかの実施形態においては、 L_A と L_B が結合して四座配位子を形成することができる。

【0093】

上で定義される式 $M(L_A)_x(L_B)_y(L_C)_z$ を有する化合物の幾つかの実施形態においては、 L_B 及び L_C は、それぞれ独立して、下記からなる群から選択される。

【化38】

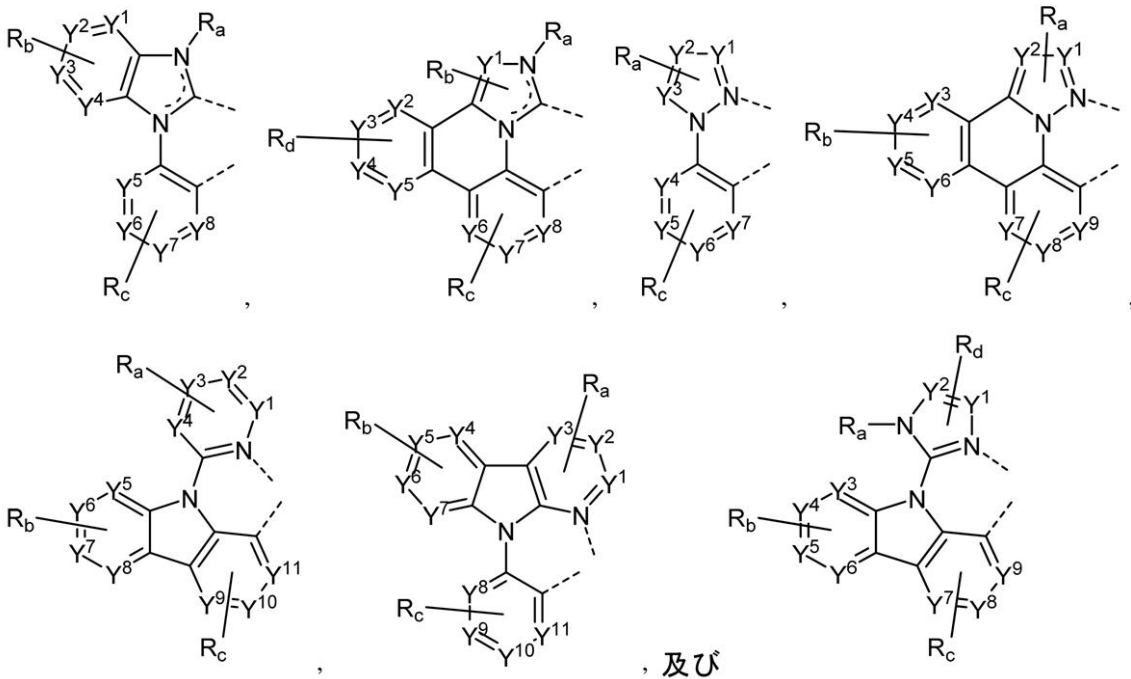


20

30

40

【化 3 9】

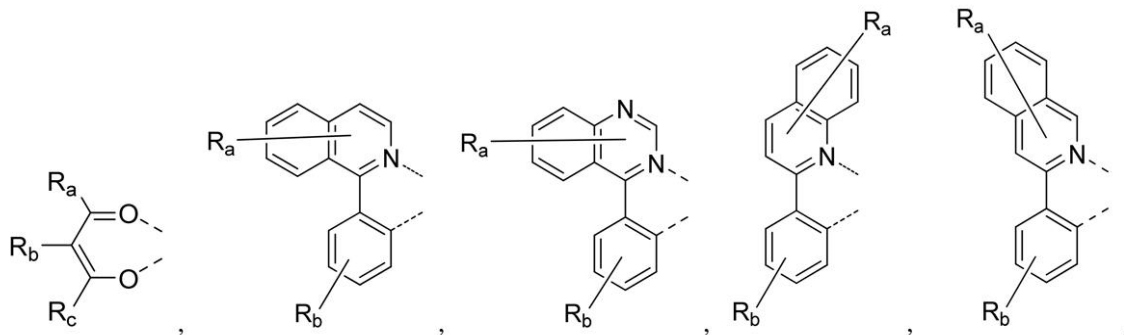


；式中、各 $Y^1 \sim Y^{13}$ は、独立して、炭素及び窒素からなる群から選択され； Y' は、 $B-R_e$ 、 $N-R_e$ 、 $P-R_e$ 、 O 、 S 、 Se 、 $C=O$ 、 $S=O$ 、 SO_2 、 CR_eR_f 、 SiR_eR_f 、及び GeR_eR_f からなる群から選択され； R_e 及び R_f は、縮合又は結合して環を形成することができ；各 R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d は、独立して、モノ置換から最大の可能な数の置換を表す、又は無置換を表すことができ；各 R_a 、 R_b 、 R_c 、 R_d 、 R_e 、及び R_f は、独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり； R_a 、 R_b 、 R_c 、及び R_d の任意の 2 つの隣接する置換基は、縮合又は結合して環を形成する又は多座配位子を形成することができる。

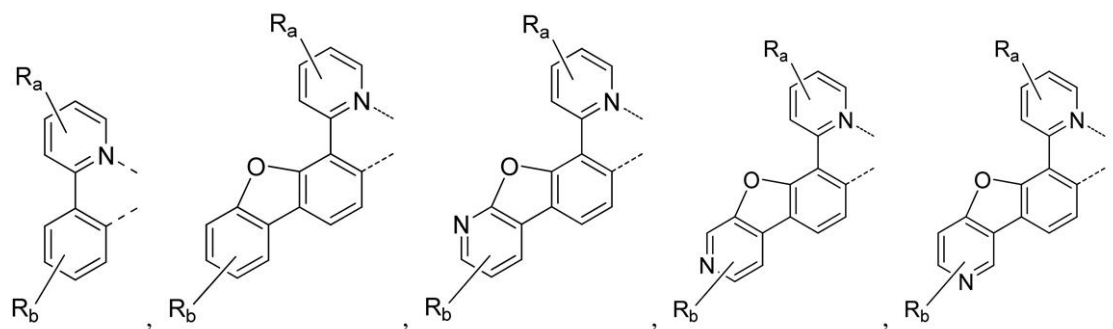
【0094】

上で定義される式 $M(L_A)_x(L_B)_y(L_C)$ を有する化合物の幾つかの実施形態においては、 L_B 及び L_C は、それぞれ独立して、下記からなる群から選択される。

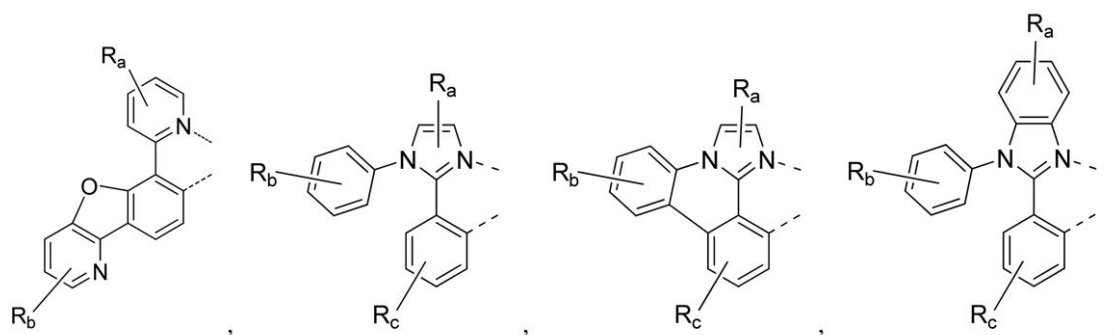
【化 4 0】



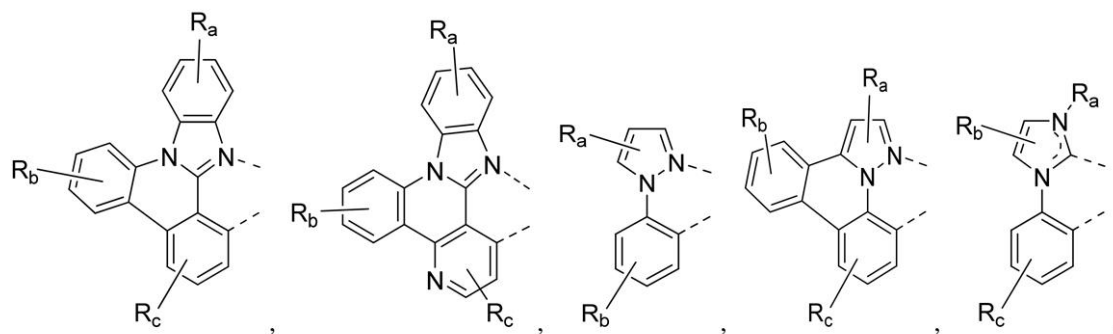
【化 4 1】



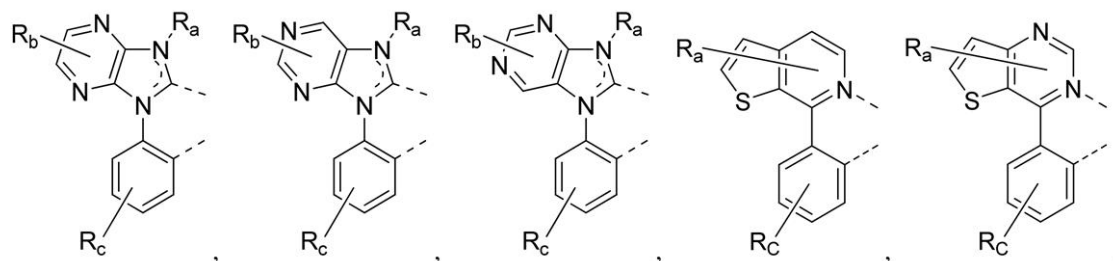
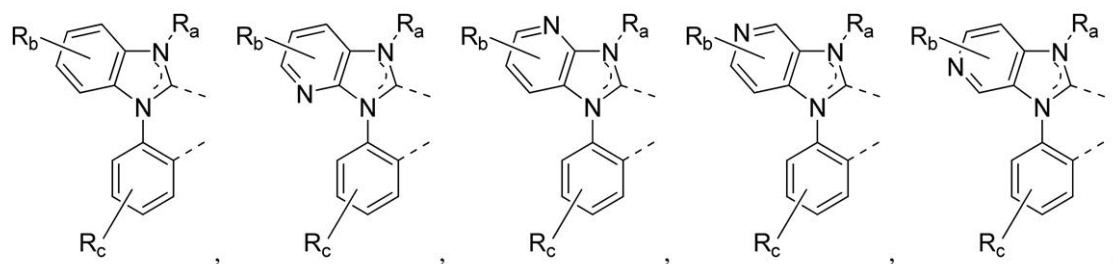
10



20

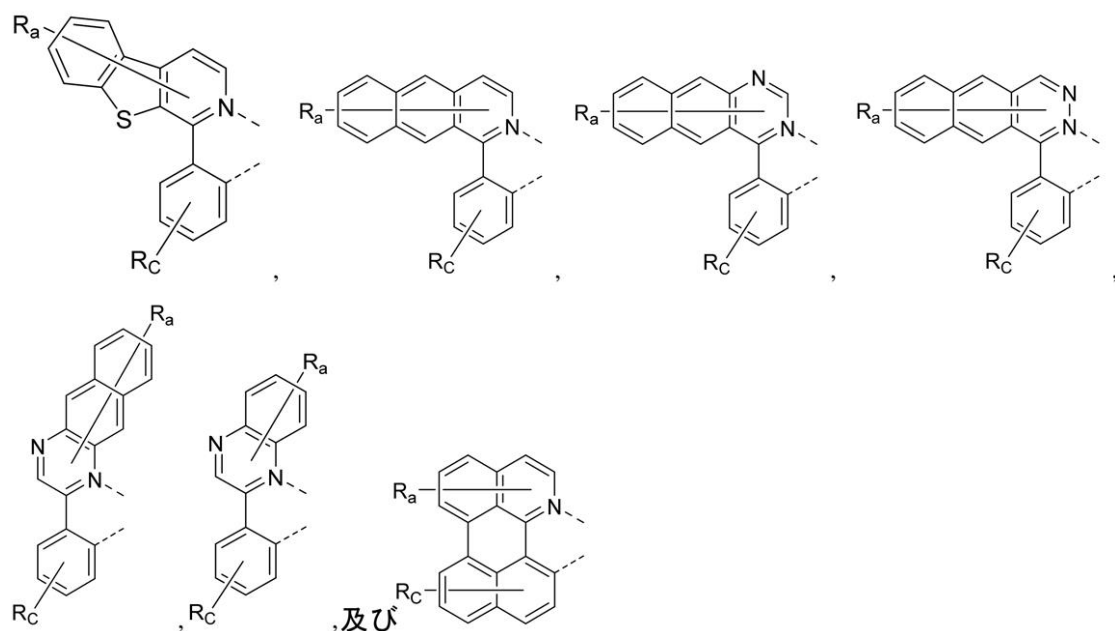


30



40

【化 4 2】



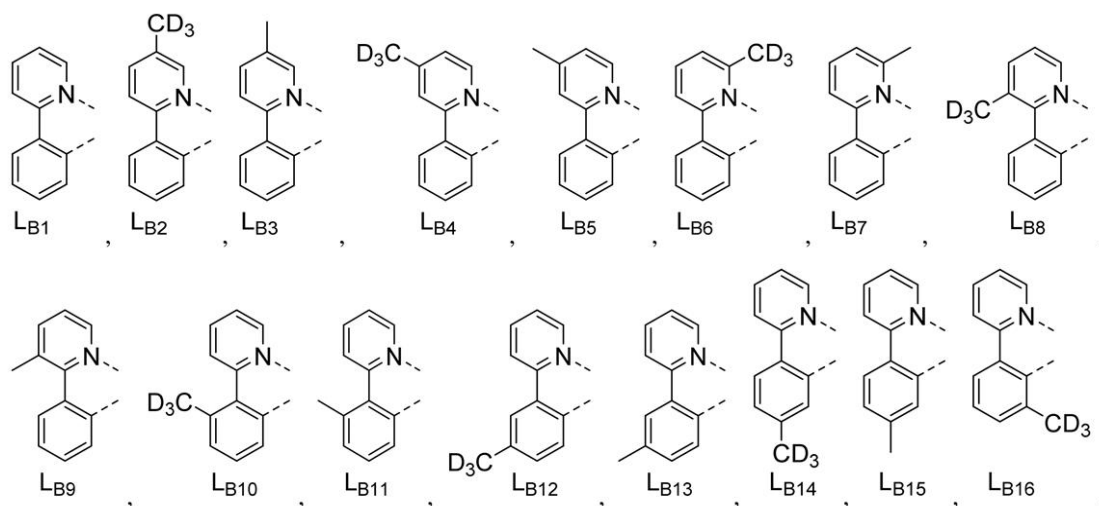
【 0 0 9 5】

20

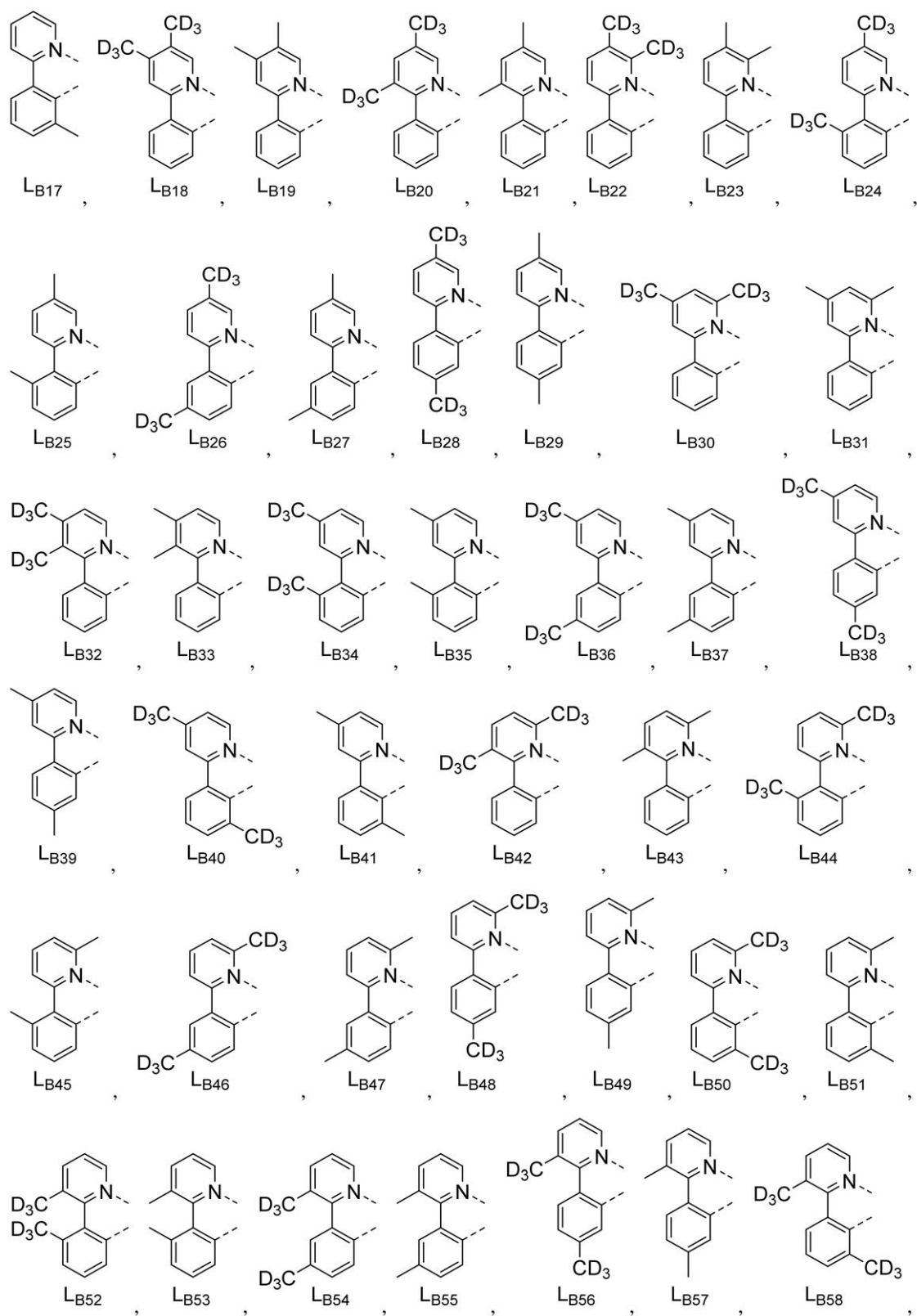
$\text{Ir}(\text{L}_A)_3$ 、 $\text{Ir}(\text{L}_A)(\text{L}_B)_2$ 、 $\text{Ir}(\text{L}_A)_2(\text{L}_B)$ 、 $\text{Ir}(\text{L}_A)_2(\text{L}_C)$ 、及び $\text{Ir}(\text{L}_A)(\text{L}_B)(\text{L}_C)$ からなる群から選択される式を有し、 L_A 、 L_B 、及び L_C が互いに異なる化合物の幾つかの実施形態においては、化合物は、式 $\text{Ir}(\text{L}_{Ai})_3$ を有する化合物 A_x 又は式 $\text{Ir}(\text{L}_{Ai})_2(\text{L}_{B1})$ を有する化合物 B_y 、又は式 $\text{Ir}(\text{L}_{Ai})(\text{L}_{B1})_2$ を有する化合物 C_z であり；式中、
 $x = i$ 、 $y = 263(i - 1) + 1$ 、及び $z = 263(i - 1) + 1$ ；
 i は、1 ~ 889790 の整数であり、及び 1 は、1 ~ 263 の整数であり；
 L_{B1} は、以下の構造を有する。

【化 4 3】

30



【化 4 4】



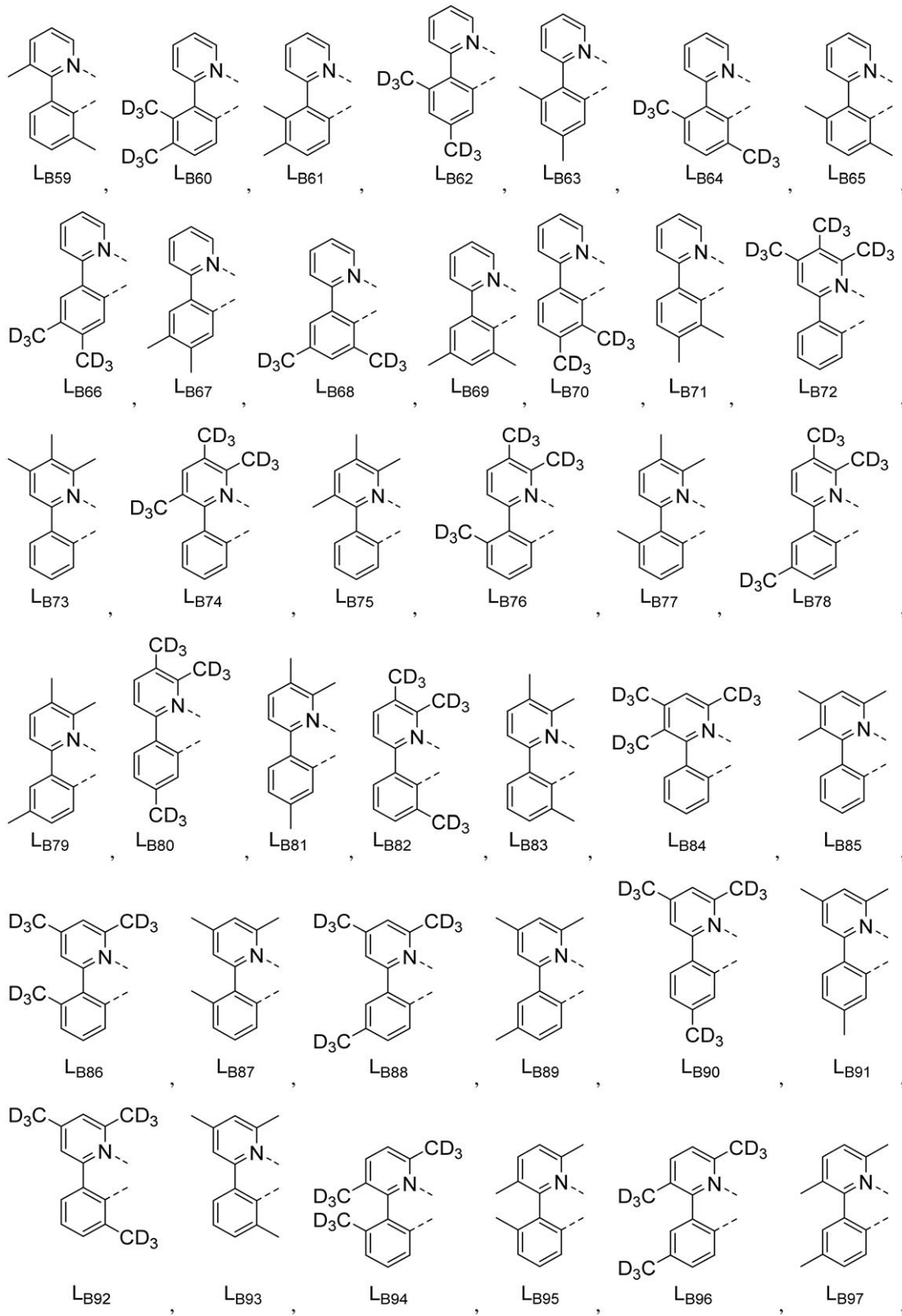
10

20

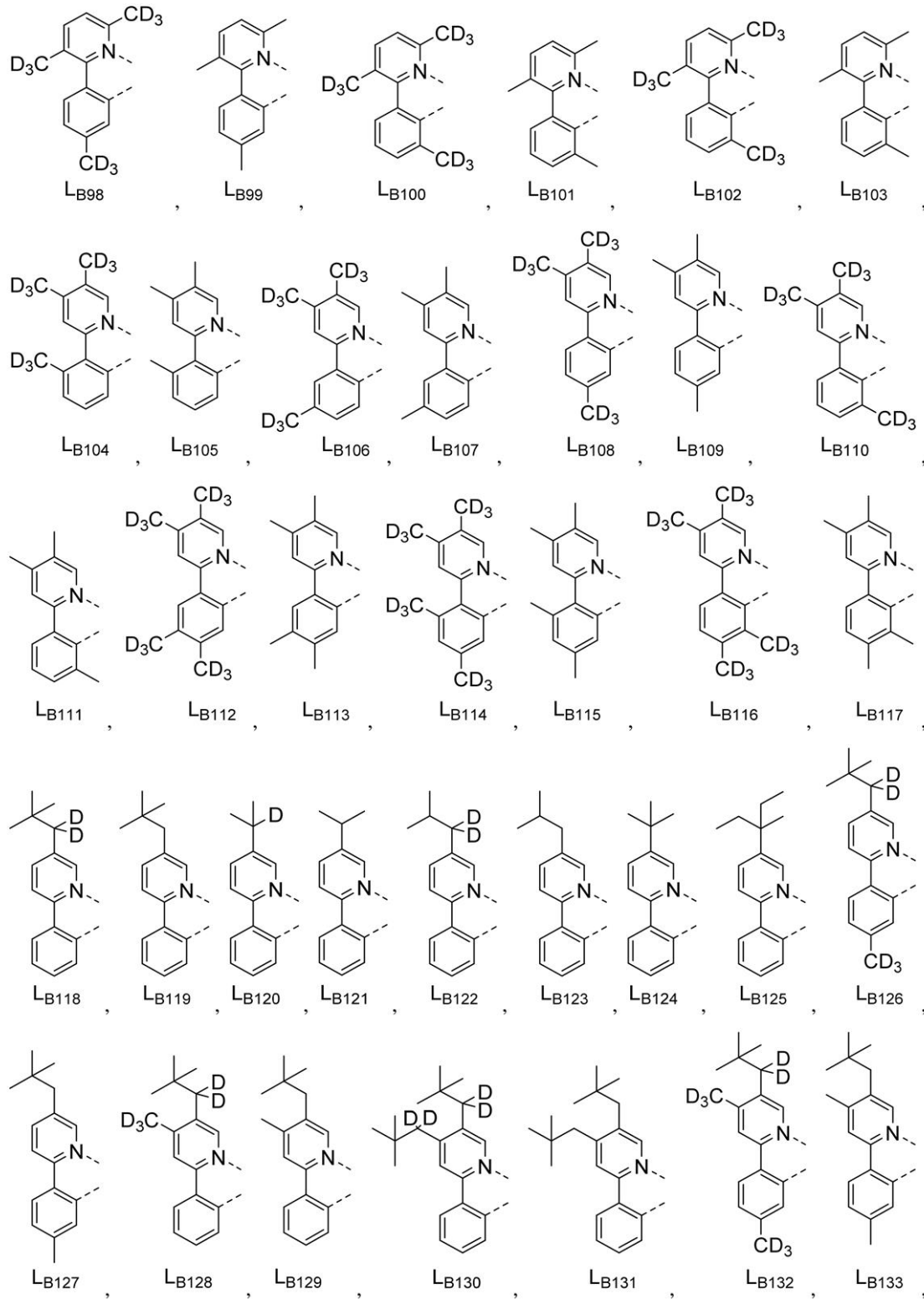
30

40

【化 4 5】



【化 4 6】



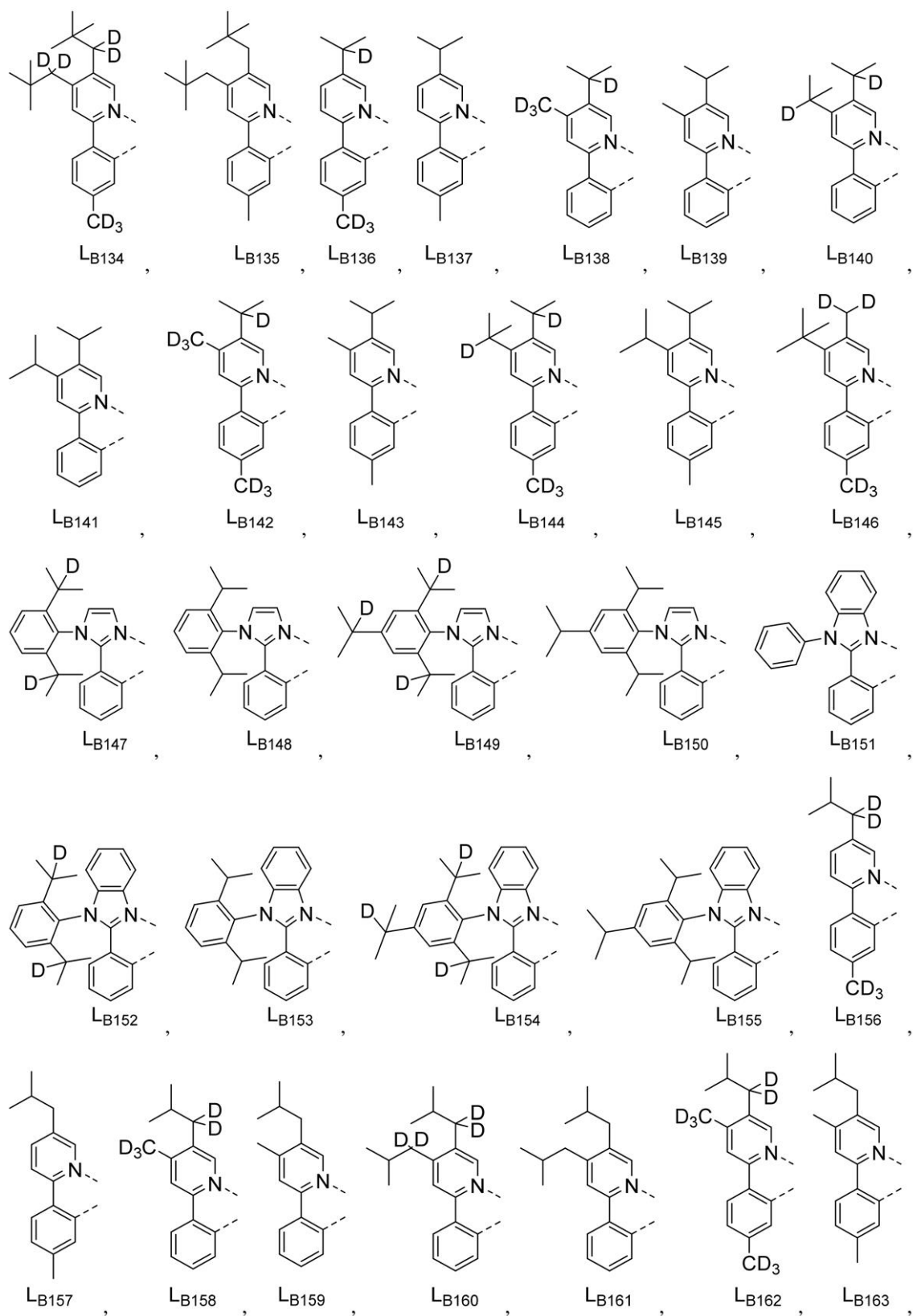
10

20

30

40

【化 4 7】



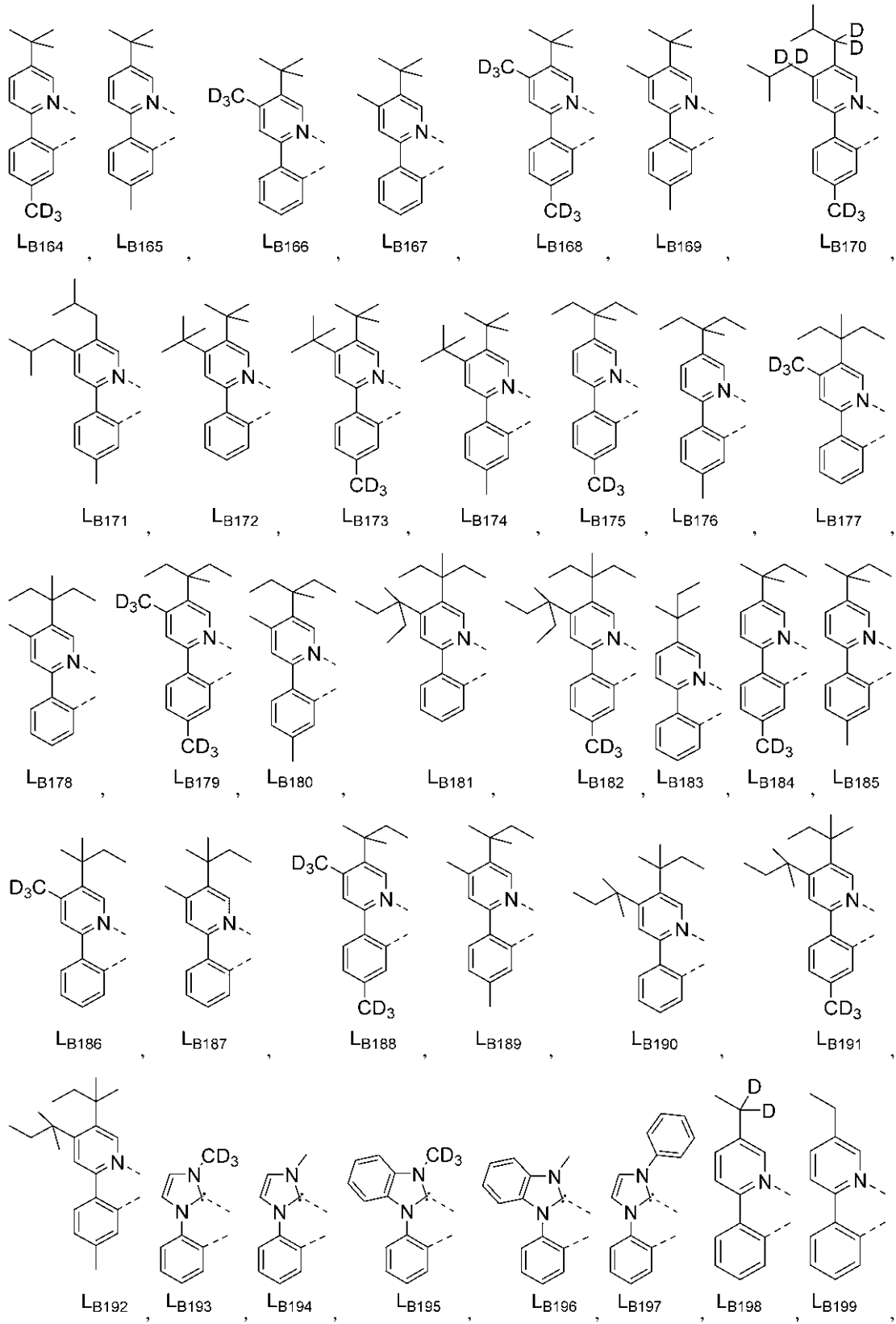
10

20

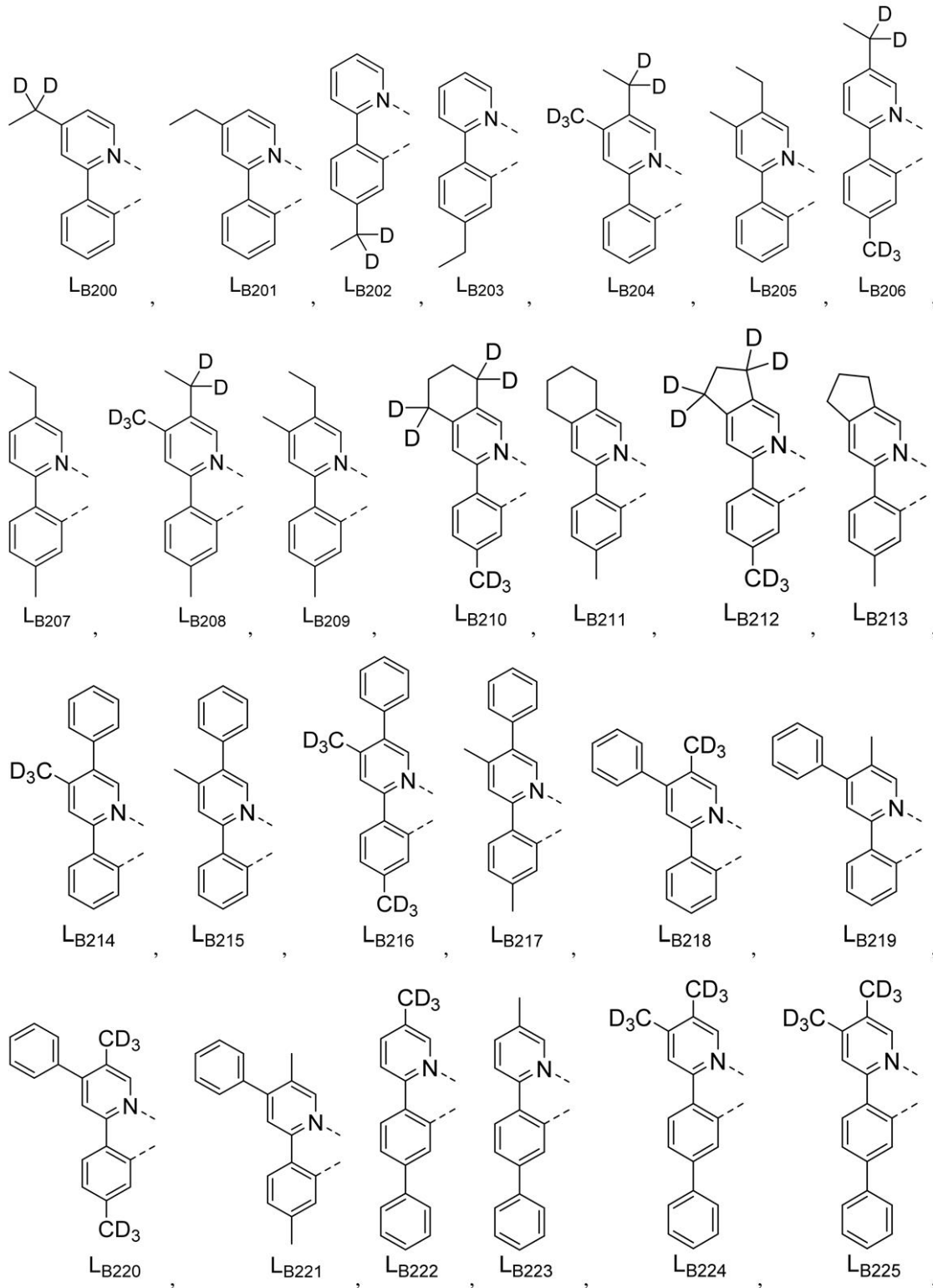
30

40

【化 4 8】



【化 4 9】



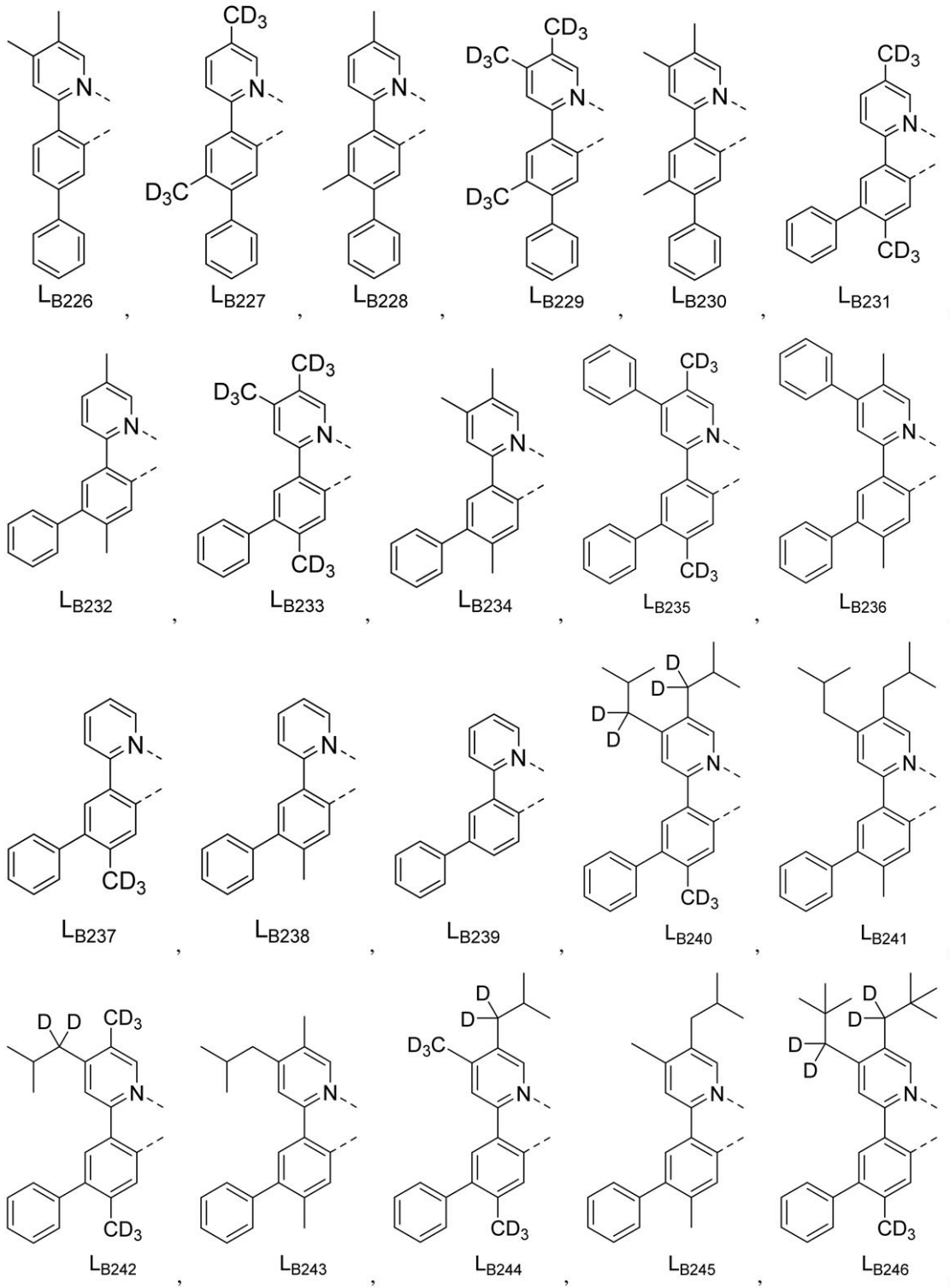
10

20

30

40

【化 5 0】



10

20

30

40

10



幾つかの実施形態においては、以下の L_{B1} の 1 つを有する化合物 B y 及び化合物 C z が好ましい： L_{B1} 、 L_{B2} 、 L_{B18} 、 L_{B28} 、 L_{B38} 、 L_{B108} 、 L_{B118} 、 L_{B122} 、 L_{B124} 、 L_{B126} 、 L_{B128} 、 L_{B130} 、 L_{B32} 、 L_{B134} 、 L_{B136} 、 L_{B138} 、 L_{B140} 、 L_{B142} 、 L_{B144} 、 L_{B156} 、 L_{B58} 、 L_{B160} 、 L_{B162} 、 L_{B164} 、 L_{B168} 、 L_{B172} 、 L_{B175} 、 L_{B204} 、 L_{B206} 、 L_{B214} 、 L_{B216} 、 L_{B218} 、 L_{B220} 、 L_{B222} 、 L_{B231} 、 L_{B233} 、 L_{B235} 、 L_{B237} 、 L_{B240} 、 L_{B242} 、 L_{B2}

4 4、 $L_{B 2 4 6}$ 、 $L_{B 2 4 8}$ 、 $L_{B 2 5 0}$ 、 $L_{B 2 5 2}$ 、 $L_{B 2 5 4}$ 、 $L_{B 2 5 6}$ 、 $L_{B 2 5 8}$ 、 $L_{B 2 6 0}$ 、 $L_{B 2 6 2}$ 、及び $L_{B 2 6 3}$ 。

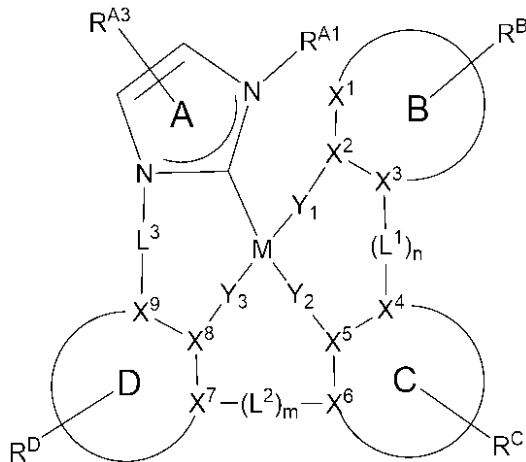
【0097】

幾つかの実施形態においては、以下の $L_{B 1}$ の1つを有する化合物 B_y 及び化合物 C_z が好ましい： $L_{B 1}$ 、 $L_{B 2}$ 、 $L_{B 1 8}$ 、 $L_{B 2 8}$ 、 $L_{B 3 8}$ 、 $L_{B 1 0 8}$ 、 $L_{B 1 1 8}$ 、 $L_{B 1 2 2}$ 、 $L_{B 1 2 4}$ 、 $L_{B 1 2 6}$ 、 $L_{B 1 2 8}$ 、 $L_{B 1 3 2}$ 、 $L_{B 1 3 6}$ 、 $L_{B 1 3 8}$ 、 $L_{B 1 4 2}$ 、 $L_{B 1 5 6}$ 、 $L_{B 1 6 2}$ 、 $L_{B 2 0 4}$ 、 $L_{B 2 0 6}$ 、 $L_{B 2 1 4}$ 、 $L_{B 2 1 6}$ 、 $L_{B 2 1 8}$ 、 $L_{B 2 2 0}$ 、 $L_{B 2 3 1}$ 、 $L_{B 2 3 3}$ 、及び $L_{B 2 3 7}$ 。

【0098】

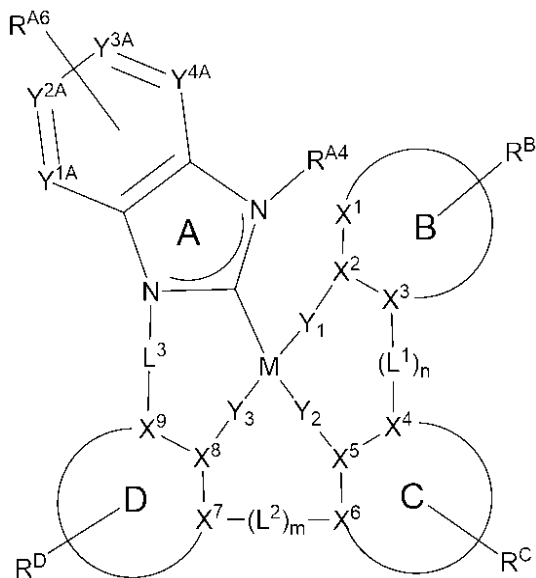
上で定義される式V及び式VIからなる群から選択される式を有する化合物の幾つかの実施形態においては、化合物は、以下の式XI：

【化52】



及び以下の式XII：

【化53】



からなる群から選択され；式中、Mは、Pd又はPtであり；環B、C、及びDは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環であり； $X^1 \sim X^9$ は、それぞれ独立して、C又はNであり； $Y_1 \sim Y_3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、及びSからなる群から選択され； $Y_1 \sim Y_3$ の少なくとも1つは、直接結合であり； $Y^{1A} \sim Y^{4A}$ は、それぞれ独立して、C又はNであり； $L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 、 BR' 、及び NR' 、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；m及びnは、それぞれ独立して、0又は1であり；m及びnの少なくとも1

つは、1であり； R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノ最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；各 R 、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ； R 及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができる。幾つかの実施形態においては、環B、C、及びDは、それぞれ6員芳香環である。幾つかの実施形態においては、環Dは、フェニルである。幾つかの実施形態においては、環Cは、フェニルである。幾つかの実施形態においては、環Bは、フェニル、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、イミダゾール、及びイミダゾール由来カルベンからなる群から選択される。幾つかの実施形態においては、 L^2 は、O、 NR' 、又は CR^2R' である。幾つかの実施形態においては、 X^2 はNであり、 X^5 はCである。幾つかの実施形態においては、 X^5 はCであり、 X^2 はNである。幾つかの実施形態においては、 L^1 は、直接結合である。幾つかの実施形態においては、 L^1 は、 NR' である。幾つかの実施形態においては、 L^3 は、直接結合である。幾つかの実施形態においては、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 は、それぞれ直接結合である。幾つかの実施形態においては、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 の1つはOであり、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 の残りはそれぞれ直接結合である。幾つかの実施形態においては、 X^1 、 X^3 、及び X^4 は、それぞれCである。幾つかの実施形態においては、 $m+n$ は、2である。幾つかの実施形態においては、 X^8 は、Cである。幾つかの実施形態においては、 $Y^{1A} \sim Y^{4A}$ は、それぞれCである。

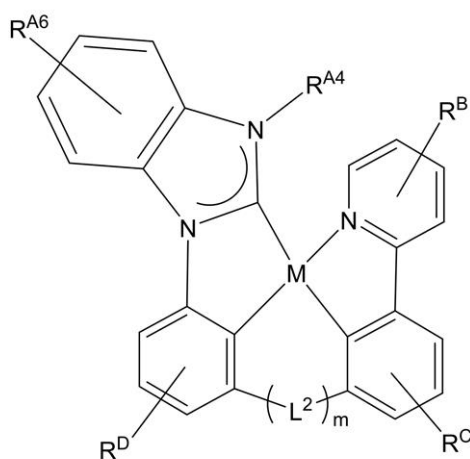
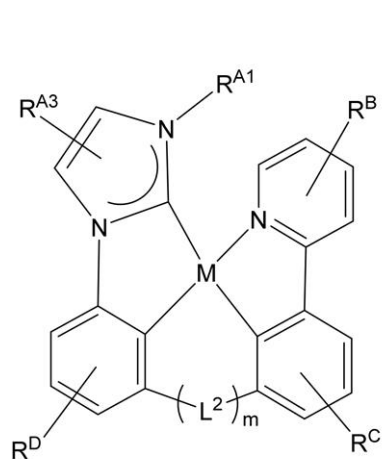
10

【0099】

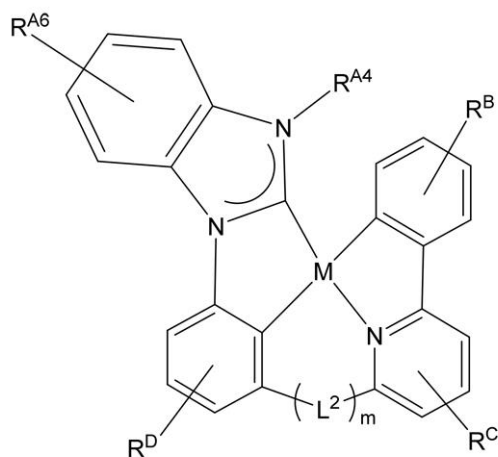
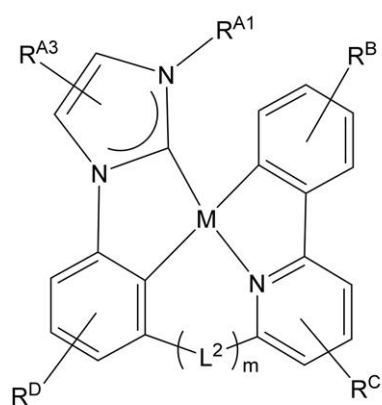
20

上で定義される式XI及び式XIIからなる群から選択される化合物の幾つかの実施形態においては、化合物は、下記からなる群から選択することができる。

【化54】

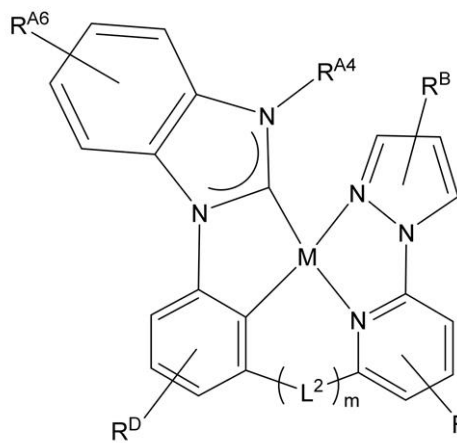
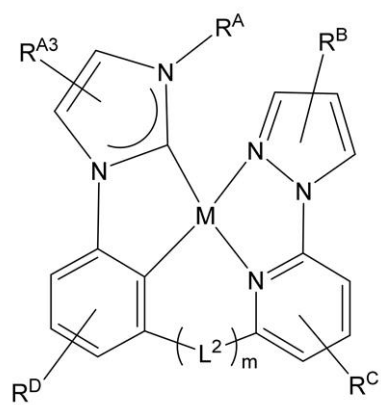


30

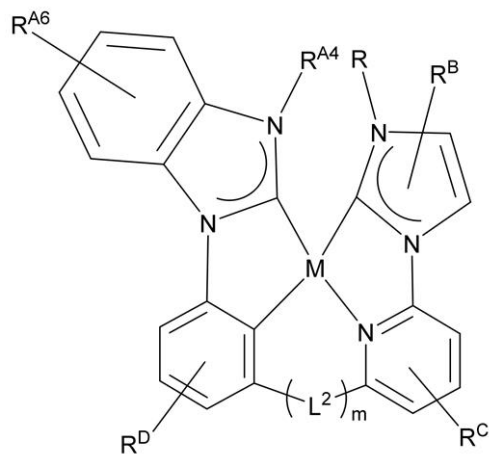
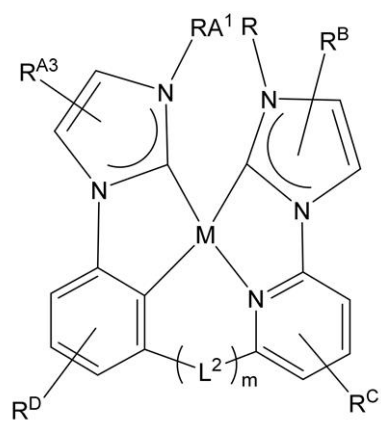


40

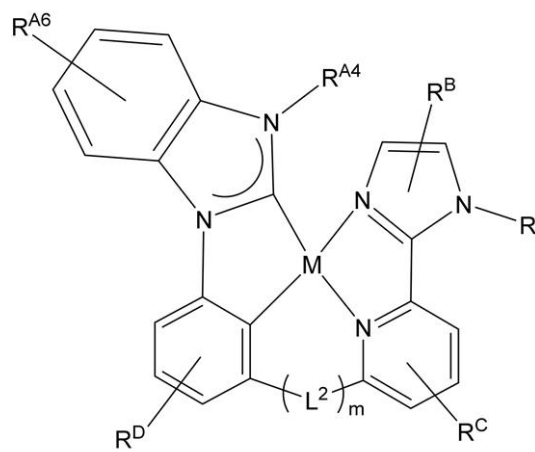
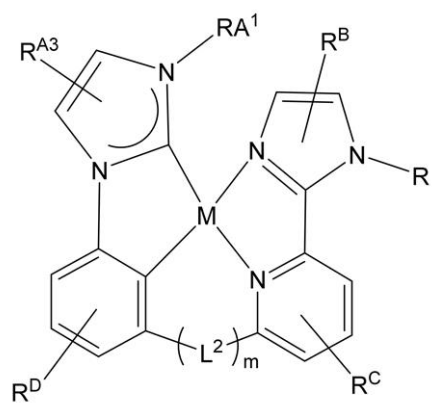
【化 5 5】



10

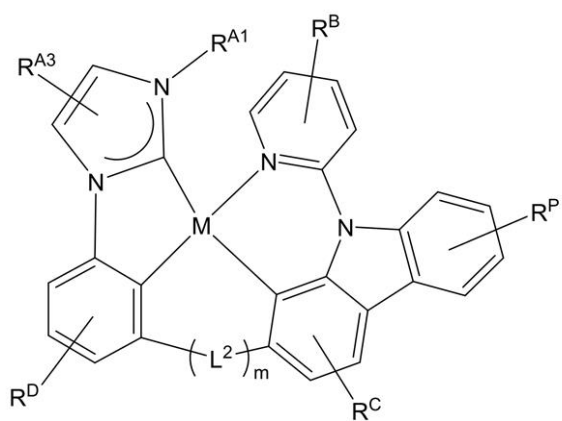


20

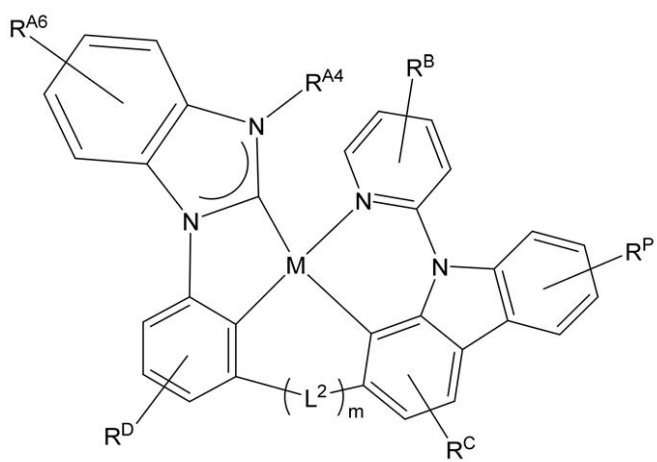


30

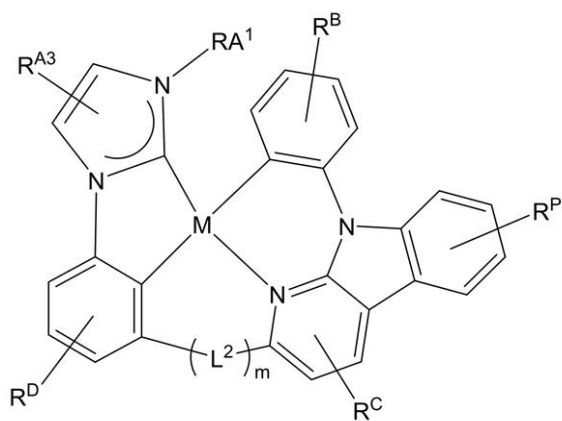
【化 5 6】



10

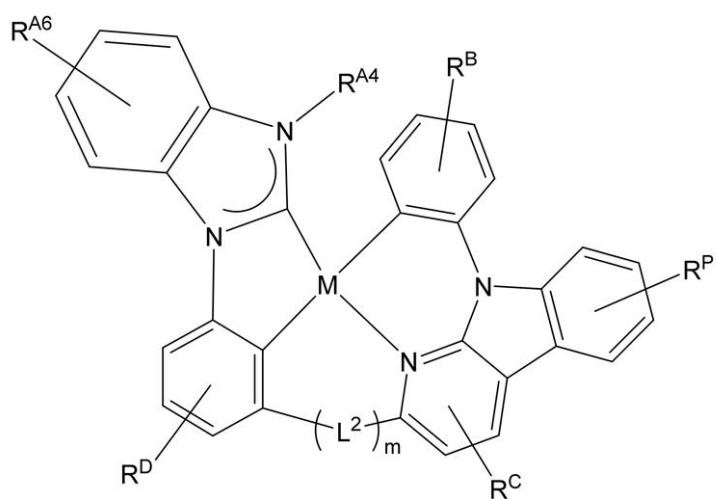


20

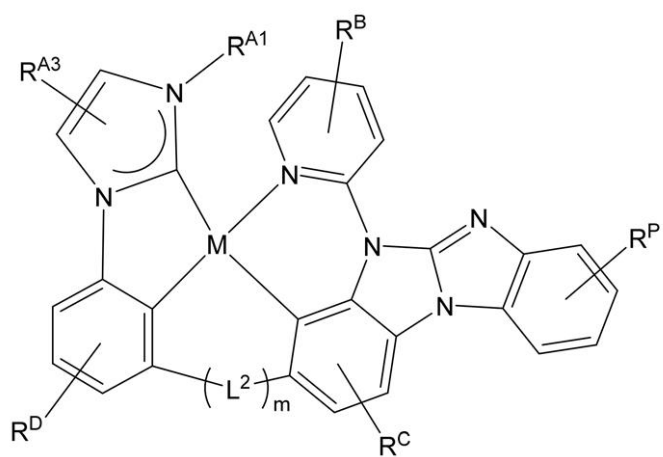


30

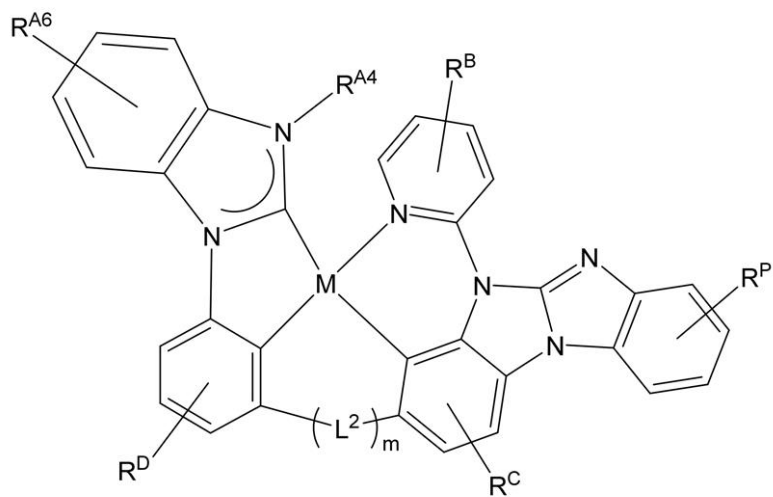
【化 5 7】



10



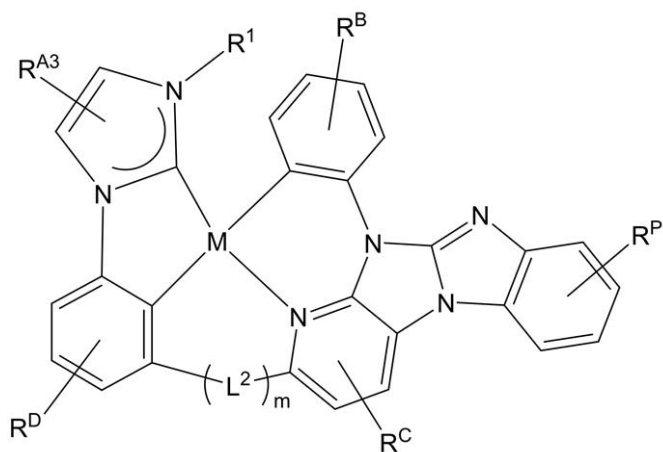
20



30

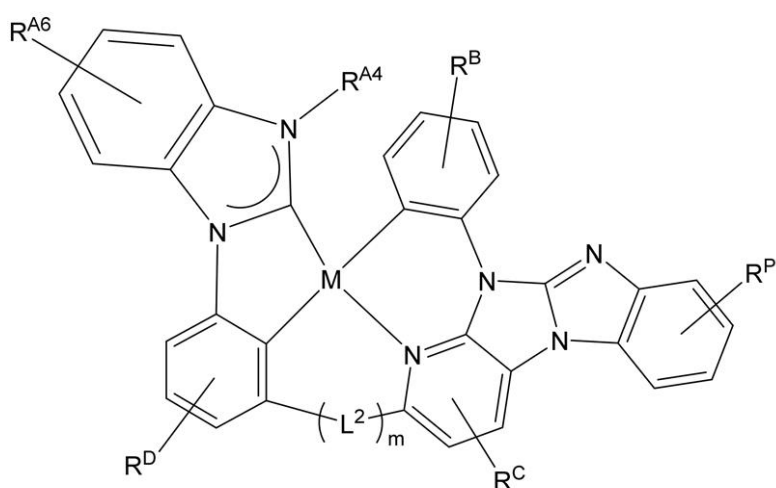
40

【化 5 8】



10

, 及び



20

；式中、Rは、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択され； R^P は、 R^B 及び R^C と同一の定義を有し；任意の2つの隣接する置換基は、共に結合又は縮合して環を形成してもよい。

30

【0100】

上で定義される式XI及び式XIIからなる群から選択される化合物の幾つかの実施形態においては、化合物は、式 $P_t(L_{cm})(L_{dn})$ を有する化合物yからなる群から選択され、yは、 $y = 25543(m-1) + n$ で定義される整数であり、mは、1～2438910の整数であり、nは、1～25543の整数であり、 L_{cm} は、以下の構造を有する。

【化 5 9】

L_{Cm}	L_{Cm} の構造	Ar^1, R	m
$L_{C1} \sim L_{C110405}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m = j$
$L_{C110406} \sim L_{C220810}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m = j + 110405$
$L_{C220811} \sim L_{C331215}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m = j + 220810$
$L_{C331216} \sim L_{C441620}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m = j + 331215$
$L_{C441621} \sim L_{C552025}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m = j + 441620$
$L_{C552026} \sim L_{C662430}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m = j + 552025$

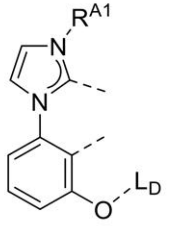
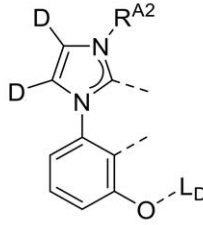
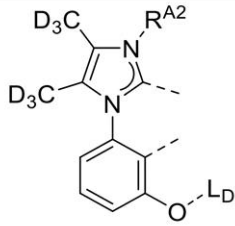
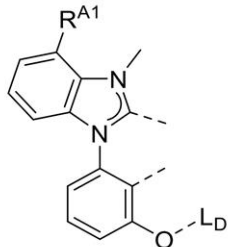
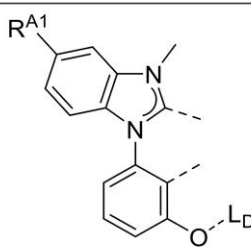
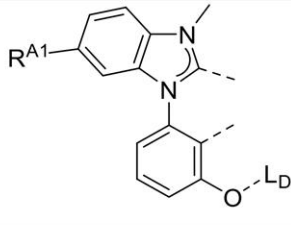
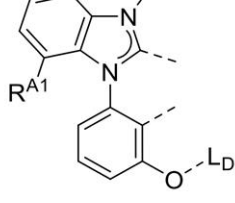
10

20

30

40

【化 6 0】

LC662431～LC772835は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+662430$
LC772836～LC883240は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+772835$
LC883241～LC993645は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+883240$
LC993646～LC1104050は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+993645$
LC1104051～LC1214455 は、右の構造を有 する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+1104050$
LC1214456～LC1324860 は、右の構造を有 する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+1214455$
LC1324861～LC1435265 は、右の構造を有 する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405の 整数である	$m=j+1324860$

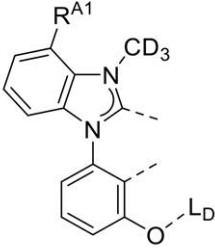
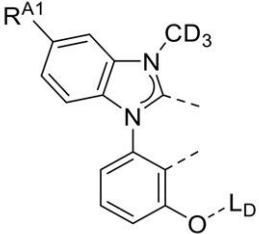
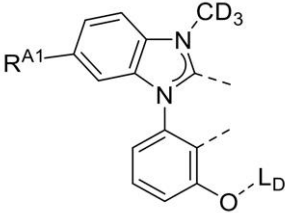
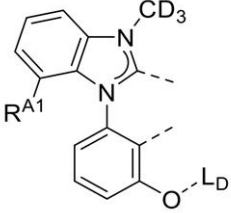
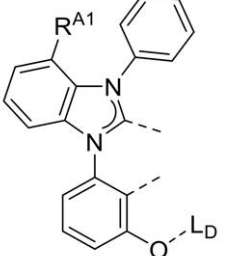
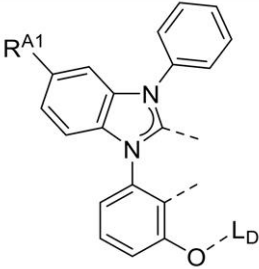
10

20

30

40

【化 6 1】

LC1435266～LC1545670 は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m=j+1435265$
LC1545671～LC1656075 は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m=j+1545670$
LC1656076～LC1766480 は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m=j+1656075$
LC1766481～LC1876885 は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m=j+1766480$
LC1876886～LC1987290 は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m=j+1876885$
LC1987291～L2097695は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m=j+1987290$

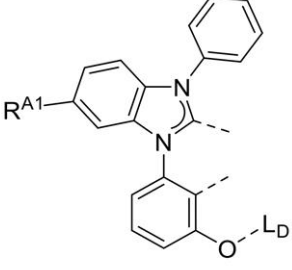
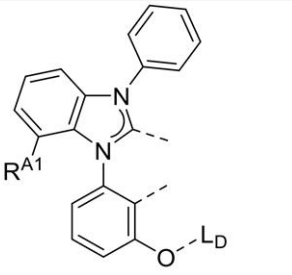
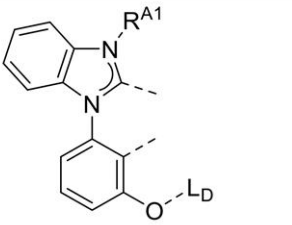
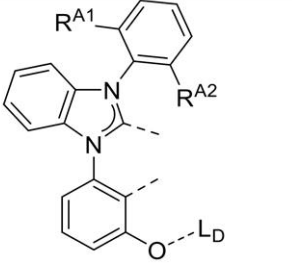
10

20

30

40

【化 6 2】

$L_{C2097696} \sim L_{C2208100}$ は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m = j + 2097695$
$L_{C2208101} \sim L_{C2318505}$ は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m = j + 2208100$
$L_{C2318506} \sim L_{C2428910}$ は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、1～110405の整数である	$m = j + 2318505$
$L_{C2428910} \sim L_{C2438910}$ は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = B_j$ 、 $R^{A2} = B_k$ 、ここで、 j と k は、1～100の整数である	$m = 100(j-1) + k + 2428910$

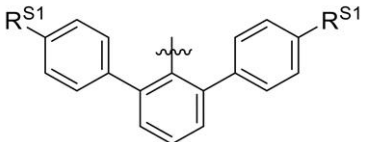
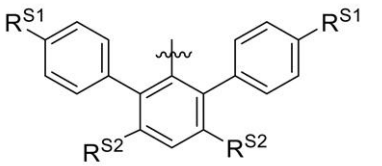
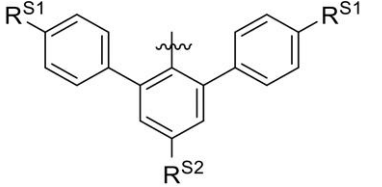
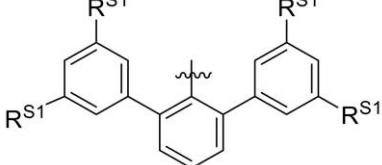
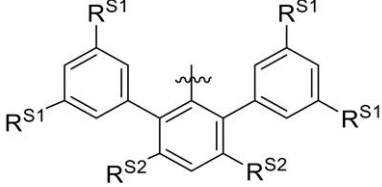
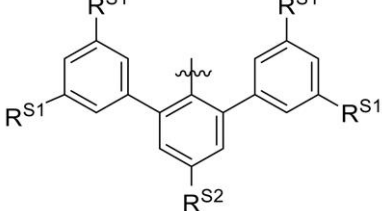
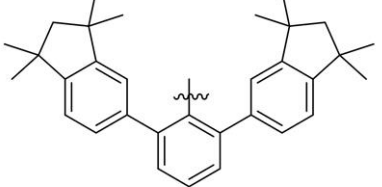
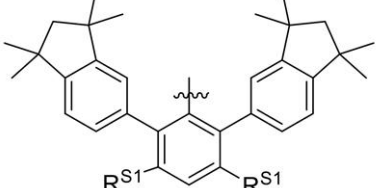
ここで、 $R_1 \sim R_{110405}$ は、以下の構造を有する。

10

20

30

【化 6 3】

R_j	R_m の構造	R^{S1}, R^{S2}, R^{S3}	j
$R1 \sim R100$ は、右の構造 を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100 の整数である	$j = t$
$R101 \sim R10100$ は、右の構造 を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100 の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 100$
$R10101 \sim R20100$ は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100 の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 10100$
$R20101 \sim R20200$ は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100 の整数である	$j = t + 20100$
$R20201 \sim R30200$ は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100 の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 20100$
$R30201 \sim R40200$ は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100 の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 30200$
$R40201$ は、右の 構造を有する			$j = 40201$
$R40202 \sim R40301$ は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100 の整数である	$j = t + 40201$

10

20

30

40

【化 6 4】

R40302～R40401 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40301$
R40402は、右の 構造を有する			$j=40402$
R40403～R40502 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40402$
R40503～R40602 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40502$
R40603～R50602 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+40602$
R50603は、右の 構造を有する			$j=50603$
R50604～R50703 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+50603$

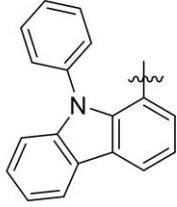
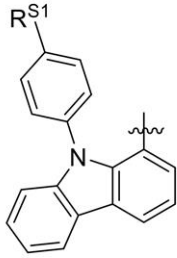
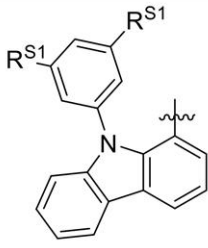
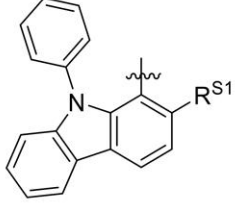
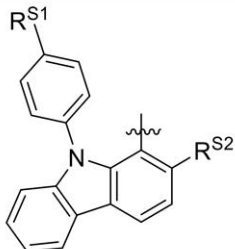
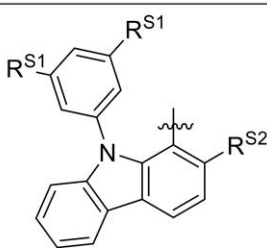
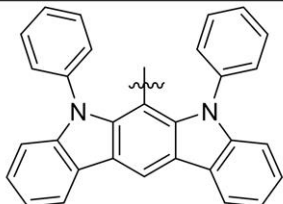
10

20

30

40

【化 6 5】

R50704 は、右の構造を有する			$j = 50704$
R50705～R50804 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j = t + 50704$
R50805～R50904 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j = t + 50804$
R50905～R51004 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$s = t + 50904$
R51005～R61004 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の整数である	$j = 30(t-1) + u + 51004$
R61005～R71004 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の整数である	$j = 30(t-1) + u + 61004$
R71005 は、右の構造を有する			$j = 71005$

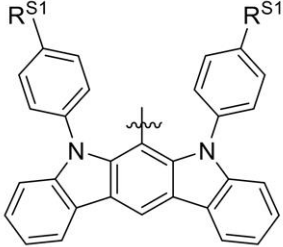

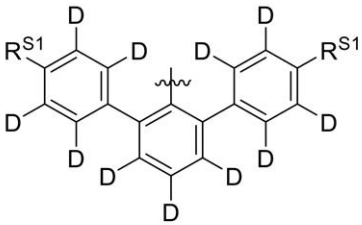
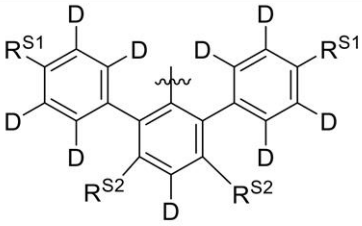
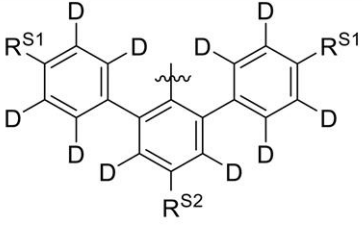
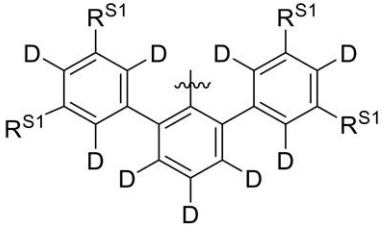
10

20

30

40

【化 6 6】

R71006~R71105 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t+71105$
R71106~R71205 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t+71105$
R71206~R71305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t+71205$
R71306~R81305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j=100(t-1)+u+71305$
R81306~R91305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j=100(t-1)+u+81305$
R91306~R91405 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t+91305$

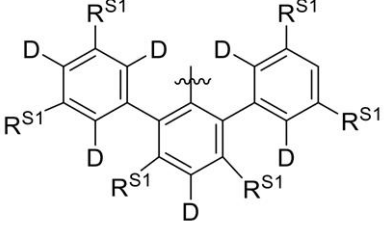
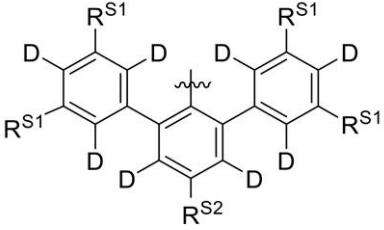
10

20

30

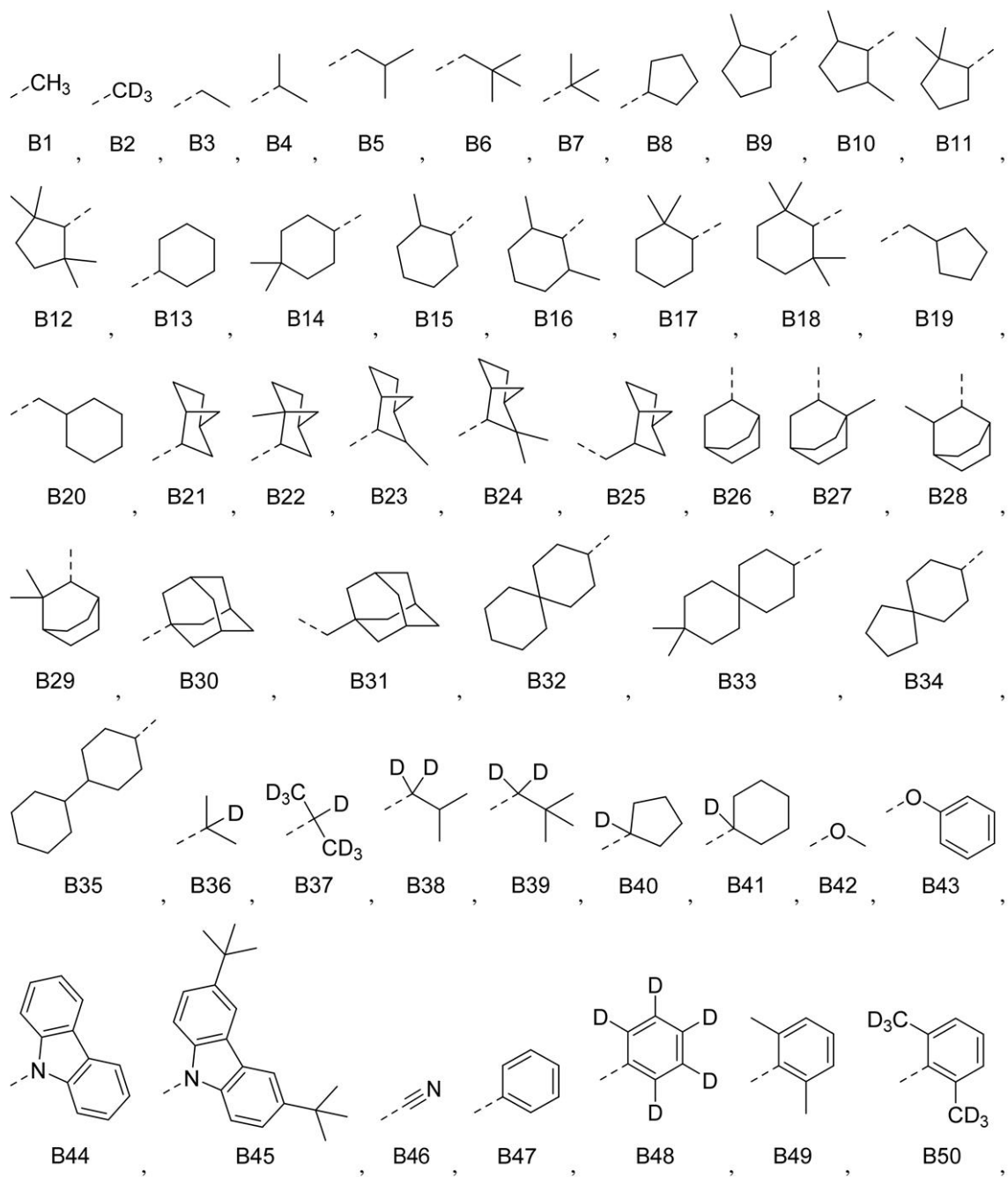
40

【化 6 7】

R91406～R101405 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の整数である	$j=100(t-1)+u+91405$
R101406～ R110405は、右 の構造を有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の整数である	$j=100(t-1)+u+101405$

式中、 $B1 \sim B100$ は、以下の構造を有する。

【化 6 8】

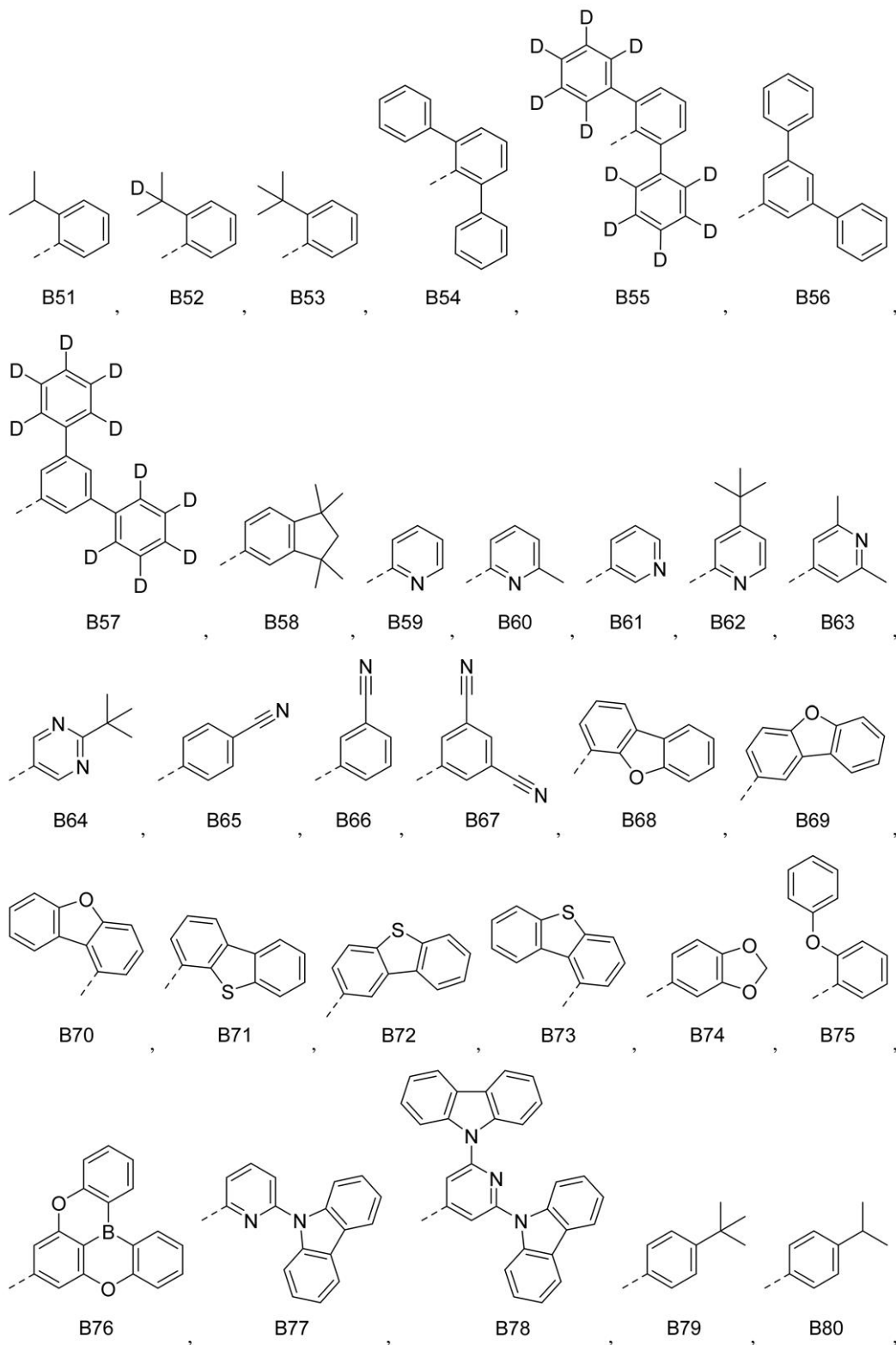


10

20

30

【化 6 9】



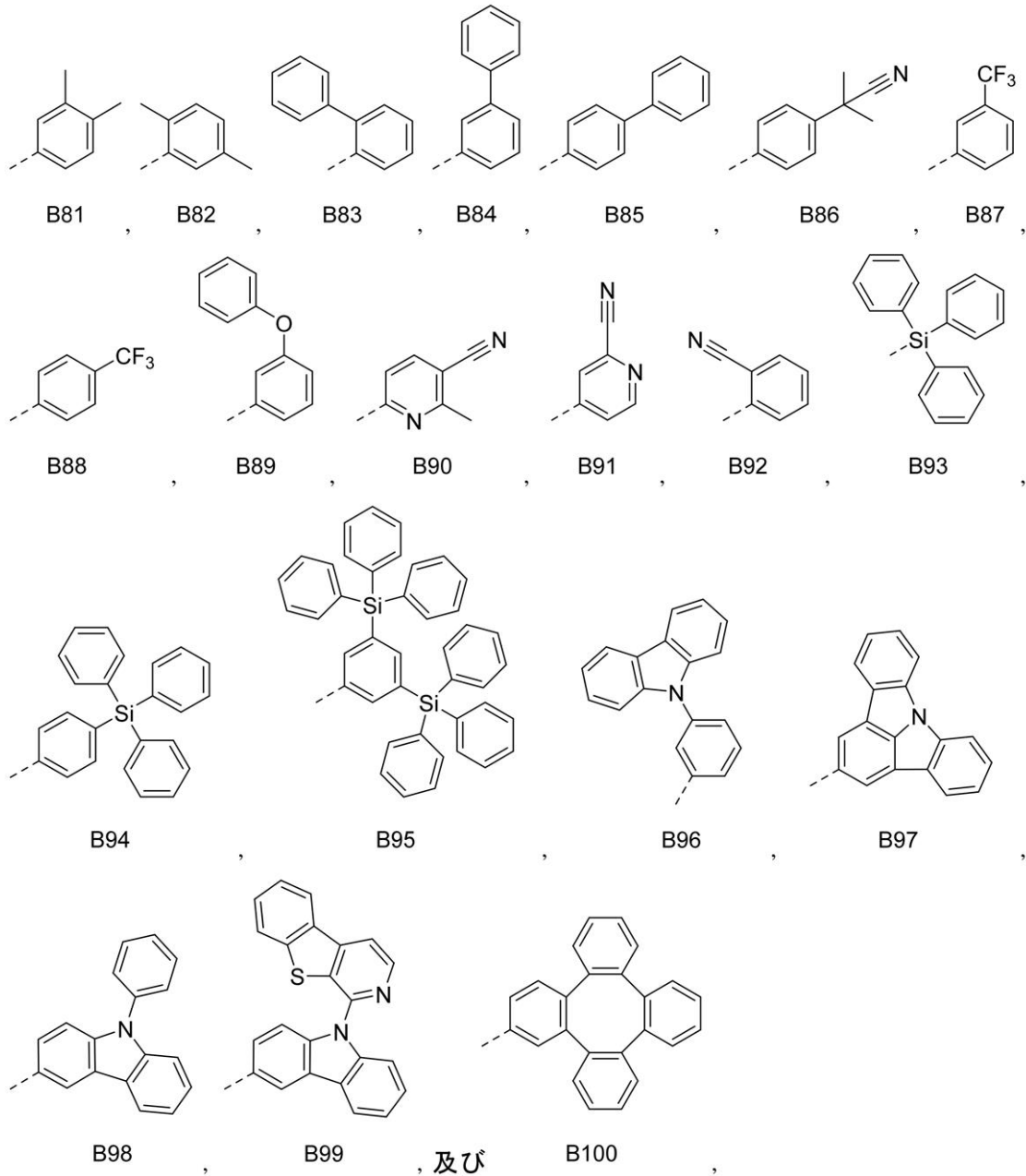
10

20

30

40

【化 7 0】



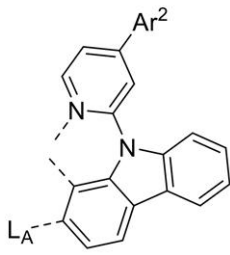
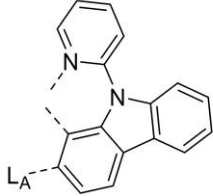
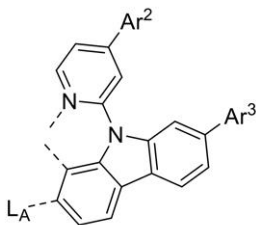
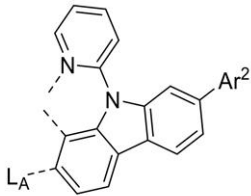
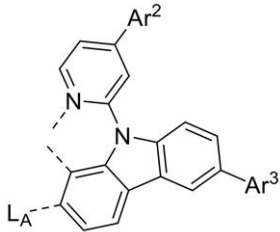
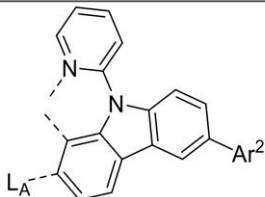
10

20

30

L_{Dn} は、以下の構造 $L_{D1} \sim L_{D25543}$ を有する。

【化 7 1】

L_{Dn}	L_{Dn} の構造	Ar^2, Ar^3, R^2	n
$L_{D1} \sim L_{D30}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30の整数である	$n = j$
L_{D31} は、右の構造を有する			$n = 31$
$L_{D32} \sim L_{D931}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数であり、 m は、1～30の整数である	$n = 30(j-1) + m + 31$
$L_{D932} \sim L_{D961}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30の整数である	$n = j + 931$
$L_{D962} \sim L_{D1861}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数であり、 m は、1～30の整数である	$n = 30(j-1) + m + 961$
$L_{D1862} \sim L_{D1891}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30の整数である	$n = j + 1861$

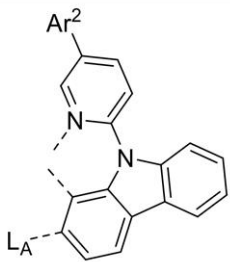
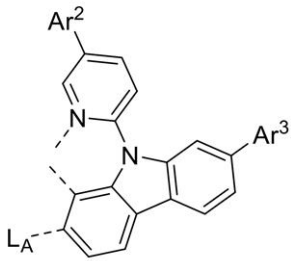
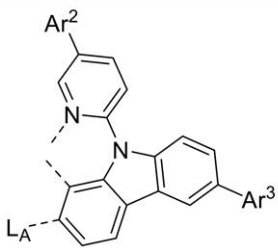
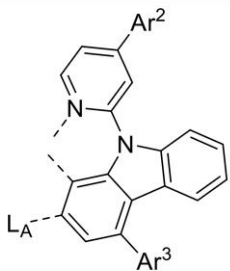
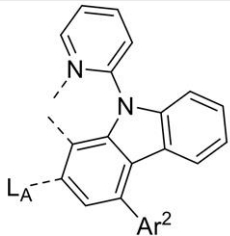
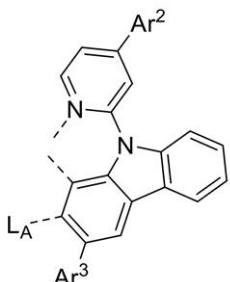
10

20

30

40

【化 7 2】

LD1892～LD1921 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 1891$
LD1922～LD2821 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 1921$
LD2822～LD3721 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 2821$
LD3722～LD4621 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 3721$
LD4622～LD4651 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 4621$
LD4652～LD5551 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 4651$

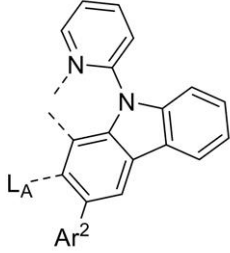
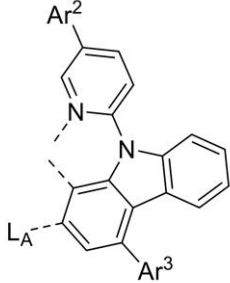
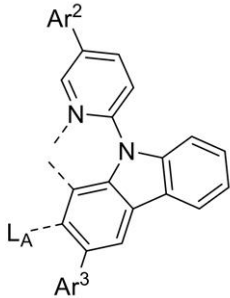
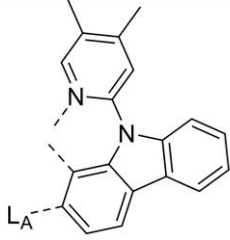
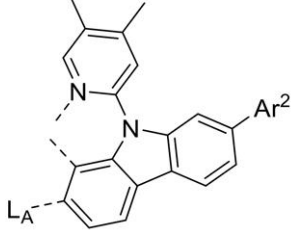
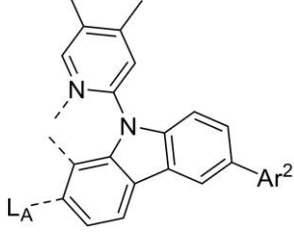
10

20

30

40

【化 7 3】

LD5552～LD5581 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 5551$
LD5582～LD6481 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 5581$
LD6482～LD7381 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 6481$
LD7382 は、右の構 造を有する			$n = 7382$
LD7383～LD7412 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7382$
LD7413～LD7442 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7412$

10

20

30

40

【化 7 4】

LD7443～LD7472 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7442$
LD7473～LD7502 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7472$
LD7503 は、右の構 造を有する			$n = 7503$
LD7504～LD7533 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7503$
LD7534～LD8433 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 7533$
LD8434～LD8463 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 8433$

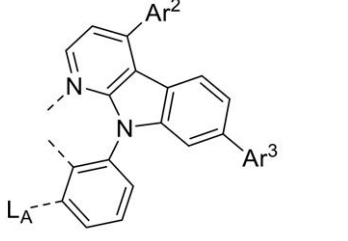
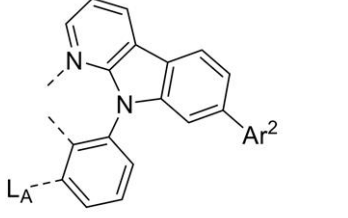
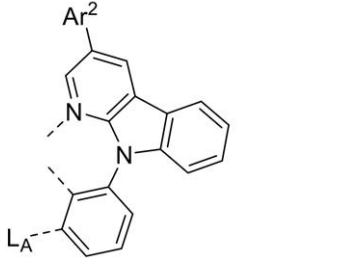
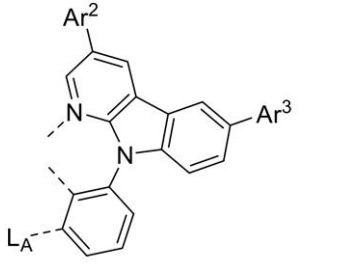
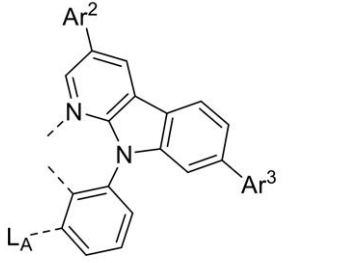
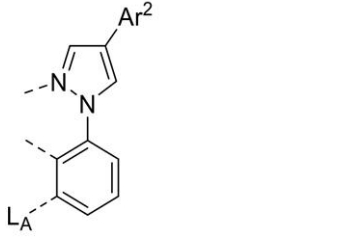
10

20

30

40

【化 7 5】

<p>L_{D8464}～L_{D9363}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$、ここで、j は、1～30の整数で あり、mは、1～30 の整数である</p>	<p>$n = 30(j-1) + m + 8463$</p>
<p>L_{D9364}～L_{D9393}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$Ar^2 = Aj$、こ こで、jは、1～30の整 数である</p>	<p>$n = j + 9363$</p>
<p>L_{D9394}～L_{D9423}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$Ar^2 = Aj$、こ こで、jは、1～30の整 数である</p>	<p>$n = j + 9393$</p>
<p>L_{D9424}～L_{D10323}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$、ここで、j は、1～30の整数で あり、mは、1～30 の整数である</p>	<p>$n = 30(j-1) + m + 9423$</p>
<p>L_{D10324}～L_{D11223}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$、ここで、j は、1～30の整数で あり、mは、1～30 の整数である</p>	<p>$n = 30(j-1) + m + 10323$</p>
<p>L_{D11224}～L_{D11253}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$Ar^2 = Aj$、こ こで、jは、1～30の整 数である</p>	<p>$n = j + 11223$</p>

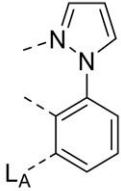
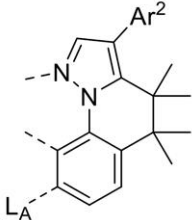
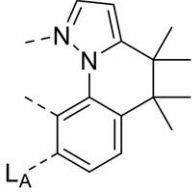
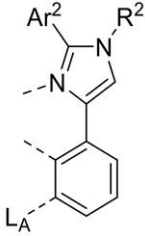
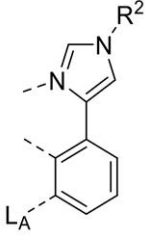
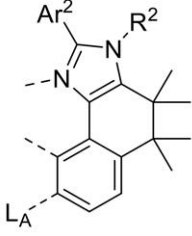
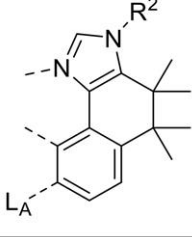
10

20

30

40

【化 7 6】

LD11254は、右の構造を有する			$n = 11254$
LD11255～LD11284は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30の整数である	$n = j + 11254$
LD11285は、右の構造を有する			$n = 11285$
LD11286～LD12185は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $R^2 = Al$ 、ここで、 j は、1～30の整数であり、 l は、1～30の整数である	$n = 30(j - 1) + l + 11285$
LD12186～LD12215は、右の構造を有する		式中、 $R^2 = Al$ 、ここで、 l は、1～30の整数である	$n = l + 12185$
LD12216～LD13115は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $R^2 = Al$ 、ここで、 j は、1～30の整数であり、 l は、1～30の整数である	$n = 30(j - 1) + l + 12215$
LD13116～LD13145は、右の構造を有する		式中、 $R^2 = Al$ 、ここで、 l は、1～30の整数である	$n = l + 13115$

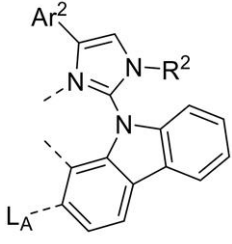
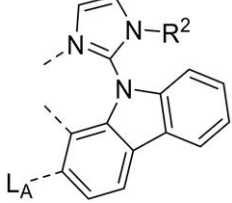
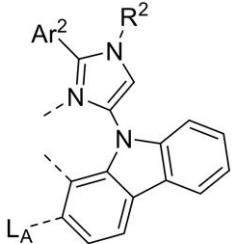
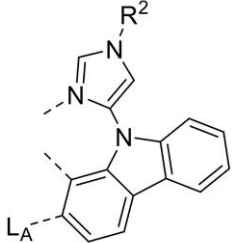
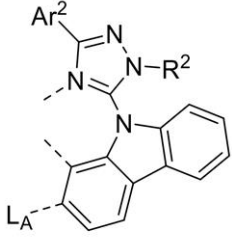
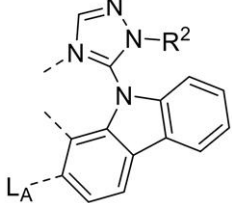
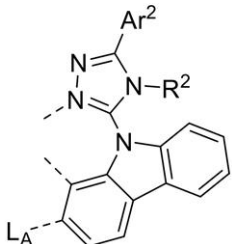
10

20

30

40

【化 7 7】

<p>L_{D13146}～L_{D14045}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=Aj 及び R²=Al、ここで、<i>j</i> は、1～30の整数で あり、<i>l</i>は、1～30の 整数である</p>	<p>$n = 30(j-1) + l + 13145$</p>
<p>L_{D14046}～L_{D14075}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、R²=Al、ここ で、<i>l</i>は、1～30の整 数である</p>	<p>$n = l + 14045$</p>
<p>L_{D14076}～L_{D14975}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=Aj 及び R²=Al、ここで、<i>j</i> は、1～30の整数で あり、<i>l</i>は、1～30の 整数である</p>	<p>$n = 30(j-1) + l + 14075$</p>
<p>L_{D14976}～L_{D15005}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、R²=Al、ここ で、<i>l</i>は、1～30の整 数である</p>	<p>$n = l + 14975$</p>
<p>L_{D15006}～L_{D15905}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=Aj 及び R²=Al、ここで、<i>j</i> は、1～30の整数で あり、<i>l</i>は、1～30の 整数である</p>	<p>$n = 30(j-1) + l + 15005$</p>
<p>L_{D15906}～L_{D15935}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、R²=Al、ここ で、<i>l</i>は、1～30の整 数である</p>	<p>$n = l + 15905$</p>
<p>L_{D15936}～L_{D16835}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=Aj 及び R²=Al、ここで、<i>j</i> は、1～30の整数で あり、<i>l</i>は、1～30の 整数である</p>	<p>$n = 30(j-1) + l + 15935$</p>

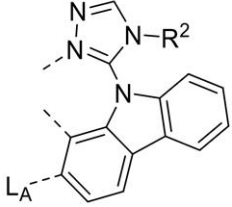
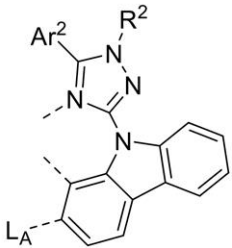
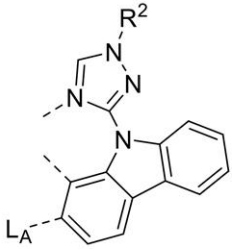
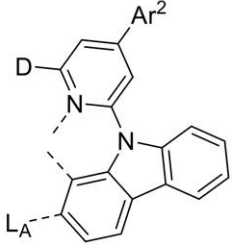
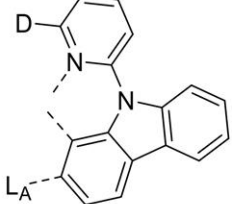
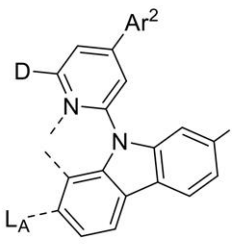
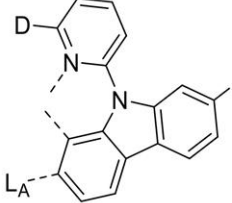
10

20

30

40

【化 7 8】

L _{D16836} ～L _{D16865} は、 右の構造を有する		式中、R ² =A _l 、こ こで、 <i>l</i> は、1～30の整 数である	$n = l + 16835$
L _{D16866} ～L _{D17765} は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =A _j 及び R ² =A _l 、ここで、 <i>j</i> は、1～30の整数で あり、 <i>l</i> は、1～30の 整数である	$n = 30(j - 1) + l + 16865$
L _{D17766} ～L _{D17795} は、 右の構造を有する		式中、R ² =A _l 、こ こで、 <i>l</i> は、1～30の整 数である	$n = l + 17765$
L _{D17796} ～L _{D17825} は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =A _j 、こ こで、 <i>j</i> は、1～30の整 数である	$n = j + 17795$
L _{D17826} は、右の構 造を有する			$n = 17826$
L _{D17827} ～L _{D18726} は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =A _j 及び Ar ³ =A _m 、ここで、 <i>j</i> は、1～30の整数で あり、 <i>m</i> は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 17826$
L _{D18727} ～L _{D18756} は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =A _j 、こ こで、 <i>j</i> は、1～30の整 数である	$n = j + 18726$

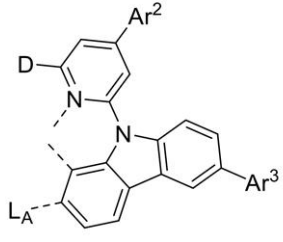
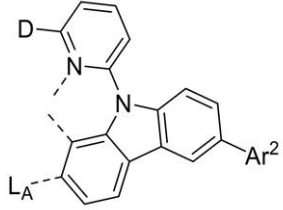
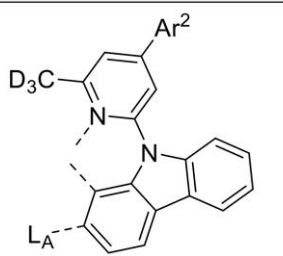
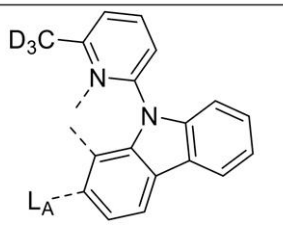
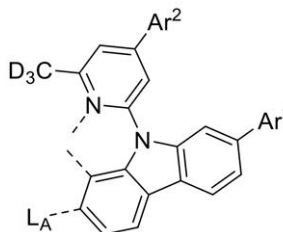
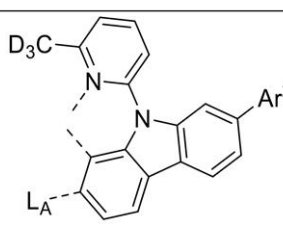
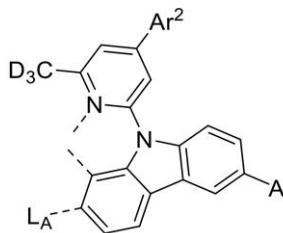
10

20

30

40

【化 7 9】

LD18757～LD19656は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 18756$
LD19657～LD19686は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 19656$
LD19687～LD19716は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 19686$
LD19717は、右の構 造を有する			$n = 19717$
LD19718～LD20617は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 19717$
LD20618～LD20647は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 20617$
LD20648～LD21547は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 20647$

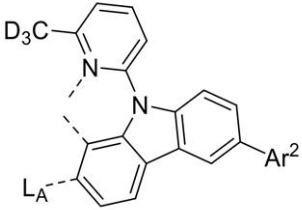
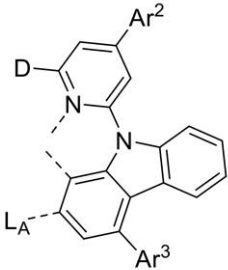
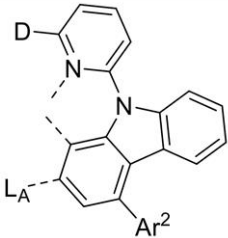
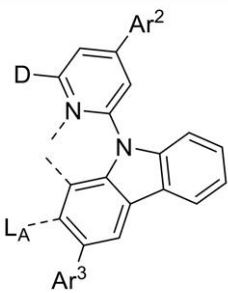
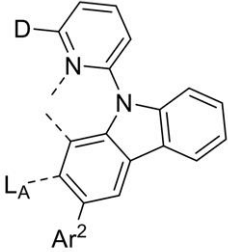
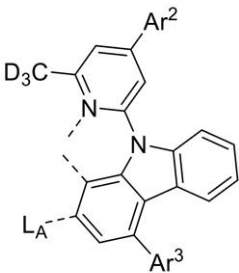
10

20

30

40

【化 8 0】

LD21548～LD21577は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 21547$
LD21578～LD22477は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 21577$
LD22478～LD22507は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 22477$
LD22508～LD23407は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 22507$
LD23408～LD23437は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 23407$
LD23438～LD24337は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 23437$

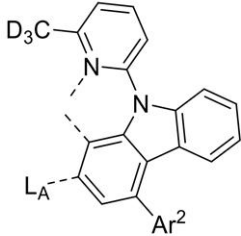
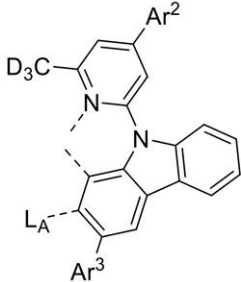
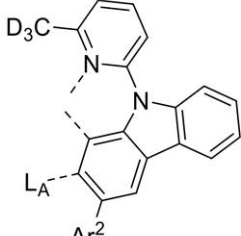
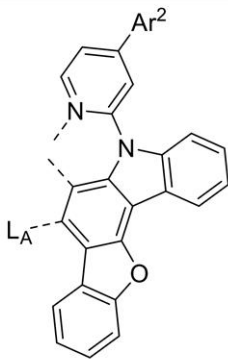
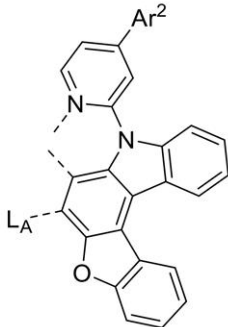
10

20

30

40

【化 8 1】

LD24338～LD24367は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 24337$
LD24368～LD25267は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 24367$
LD25268～LD25297は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25267$
LD25298～LD25327は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25297$
LD25328～LD25357は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25327$

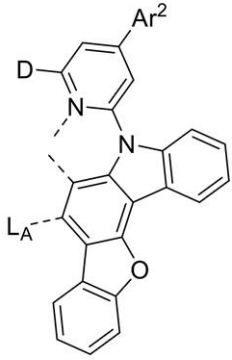
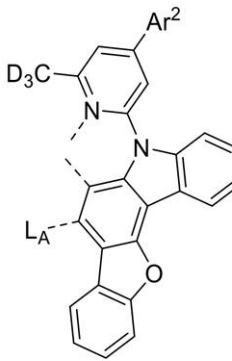
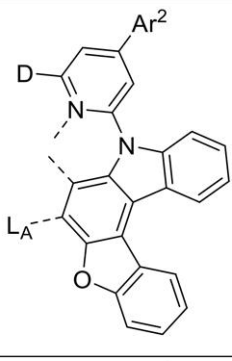
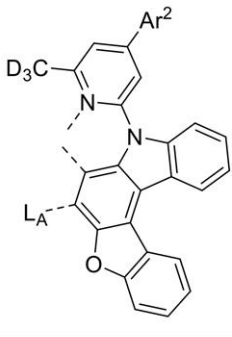
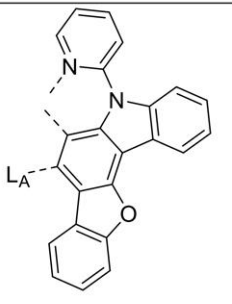
10

20

30

40

【化 8 2】

<p>L_{D25358}～L_{D25387}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=A_j、こ こで、jは、1～30の整 数である</p>	<p>$n=j+25357$</p>
<p>L_{D25388}～L_{D25417}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=A_j、こ こで、jは、1～30の整 数である</p>	<p>$n=j+25387$</p>
<p>L_{D25418}～L_{D25447}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=A_j、こ こで、jは、1～30の整 数である</p>	<p>$n=j+25417$</p>
<p>L_{D25448}～L_{B25477}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、Ar²=A_j、こ こで、jは、1～30の整 数である</p>	<p>$n=j+25447$</p>
<p>L_{D25478}は、右の構 造を有する</p>			<p>$n=25478$</p>

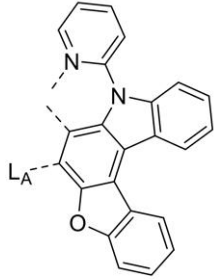
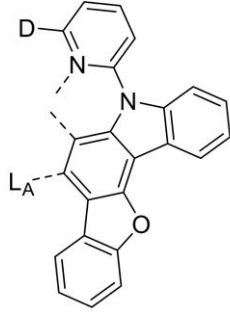
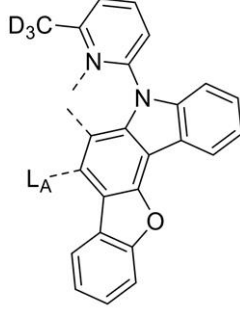
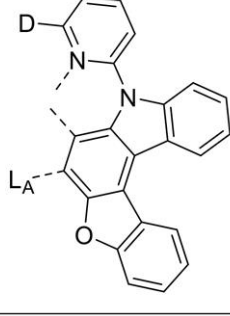
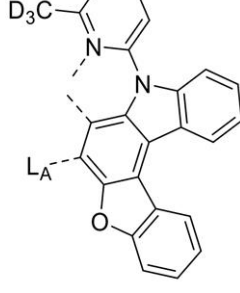
10

20

30

40

【化 8 3】

LD25479は、右の構造を有する			$n = 25479$
LD25480は、右の構造を有する			$n = 25480$
LD25481は、右の構造を有する			$n = 25481$
LD25482は、右の構造を有する			$n = 25482$
LD25483は、右の構造を有する			$n = 25483$

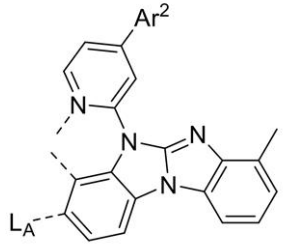
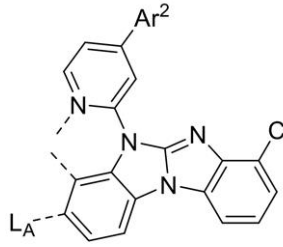
10

20

30

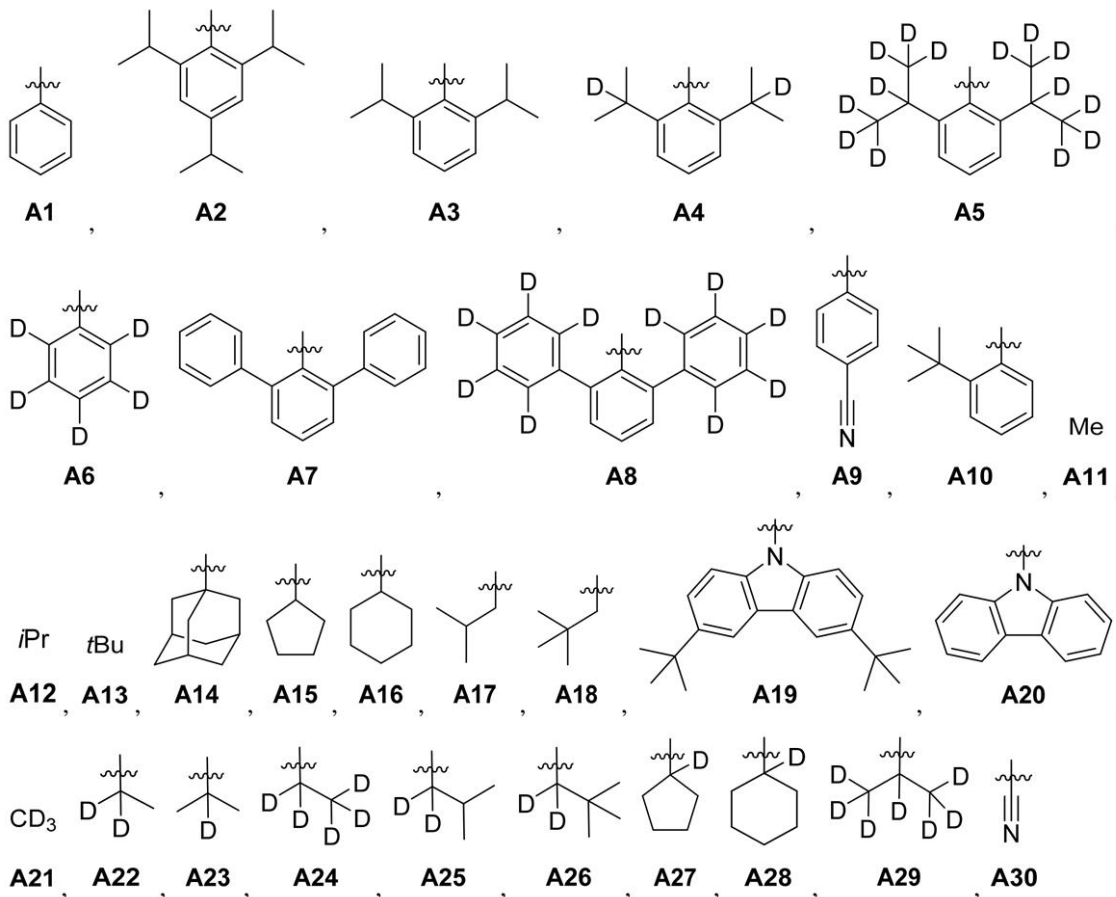
40

【化 8 4】

LD25484~LD25513は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =A _j 、こ こで、jは、1~30の整 数である	$n=j+25483$
LD25514~LD25543は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =A _j 、こ こで、jは、1~30の整 数である	$n=j+25513$

式中、A 1 ~ A 3 0 は、以下の構造を有する。

【化 8 5】



【 0 1 0 1 】

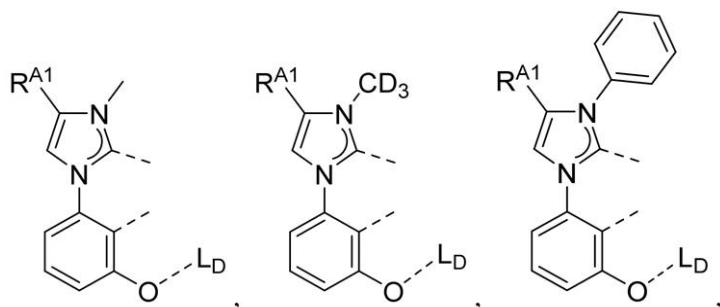
式 $Pt(L_{cm})(L_{dn})$ を有する化合物 y (式中、 y は、 $y = 25543(m-1) + n$ (式中、 m は 1 ~ 2438910 の整数であり、 n は 1 ~ 25543 の整数である) で定義される整数である) からなる群から選択される化合物の幾つかの実施形態においては、その配位子 L_{cm} が、以下の構造：B 1、B 2、B 7、B 13、B 30、B 36、B 37、B 44、B 45、B 46、B 47、B 48、B 49、B 50、B 64、B 65、B 66、B 67、B 68、B 69、B 70、B 76、B 77、B 78、B 86、B 91、B 93、B 94、B 96、B 97、B 98、B 99、又は B 100 を置換基 R^{S1} 及び R

S^2 として含む構造 R^{A1} を含む化合物 y が好ましい。

【0102】

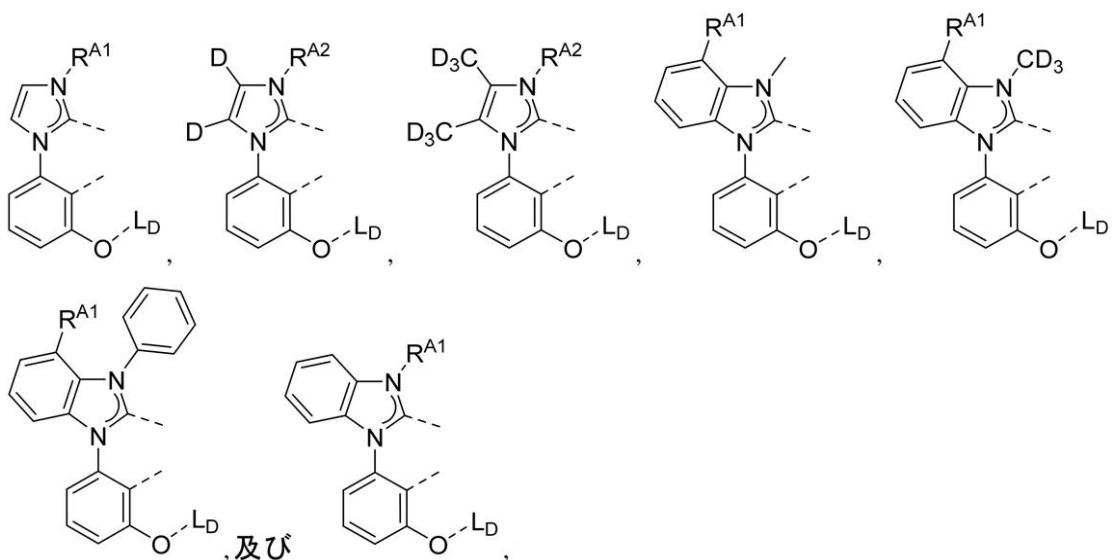
式 $Pt(L_{cm})(L_{Dn})$ を有する化合物 y (式中、 y は、 $y = 25543(m-1) + n$ (式中、 m は $1 \sim 2438910$ の整数であり、 n は $1 \sim 25543$ の整数である) で定義される整数である) からなる群から選択される化合物の幾つかの実施形態においては、その配位子 L_{cm} が、以下の構造で定義されるものである：

【化86】



10

【化87】



20

30

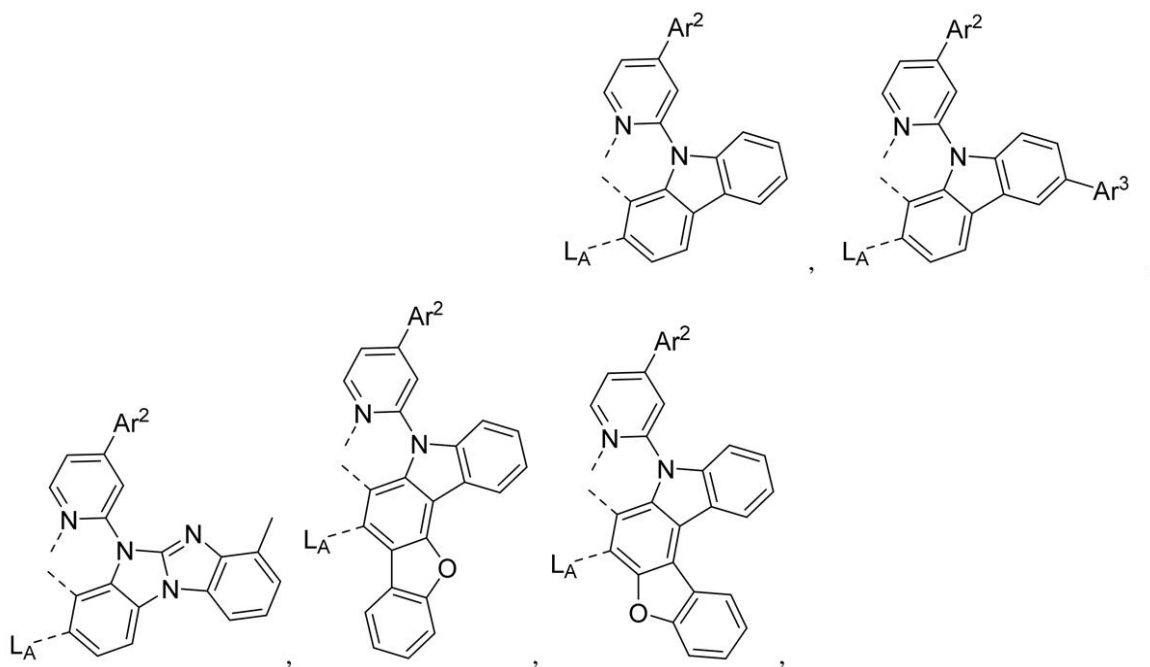
式中、 L_D は、 $L_{D1} \sim L_{D25543}$ からなる群から選択することができ、 Ar^2 又は Ar^3 として、 $A1$ 、 $A3$ 、 $A4$ 、 $A6$ 、 $A11$ 、 $A12$ 、 $A13$ 、 $A19$ 、 $A20$ 、 $A21$ 、 $A23$ 、 $A29$ 、又は $A30$ が好ましい。

【0103】

式 $Pt(L_{cm})(L_{Dn})$ を有する化合物 y (式中、 y は、 $y = 25543(m-1) + n$ (式中、 m は $1 \sim 2438910$ の整数であり、 n は $1 \sim 25543$ の整数である) で定義される整数である) からなる群から選択される化合物の幾つかの実施形態においては、その配位子 L_{cm} が、以下の構造で定義されるものである：

40

【化 8 8】



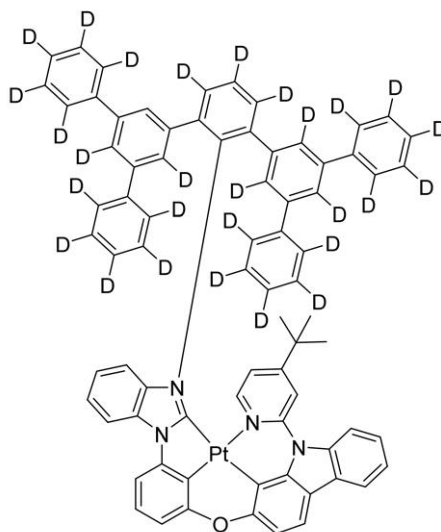
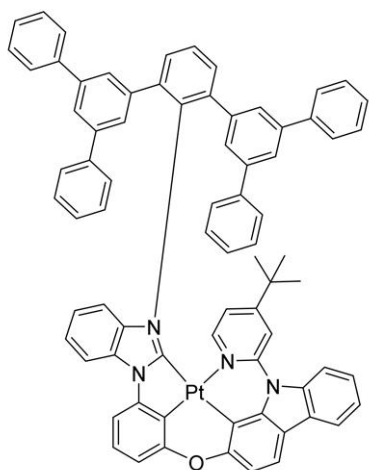
10

式中、 Ar^2 又は Ar^3 として、A 1、A 3、A 4、A 6、A 1 1、A 1 2、A 1 3、A 20
1 9、A 2 0、A 2 1、A 2 3、A 2 9、又は A 3 0 が好ましい。

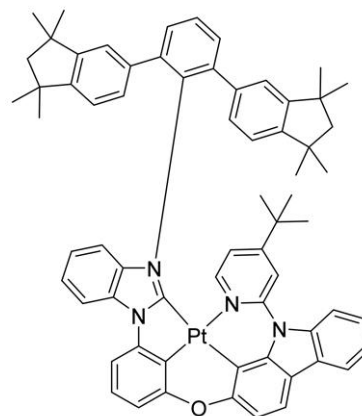
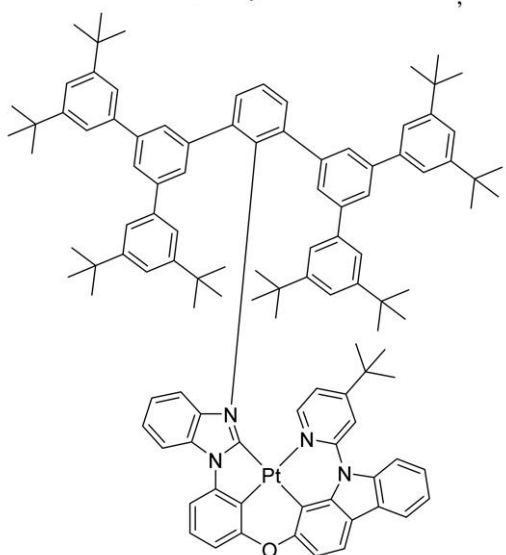
【0 1 0 4】

化合物の幾つかの実施形態においては、化合物は、下記からなる群から選択される。

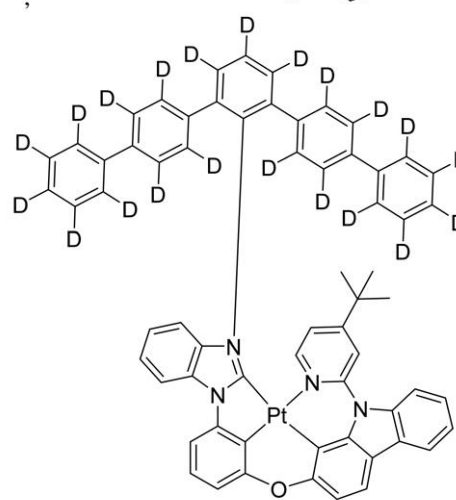
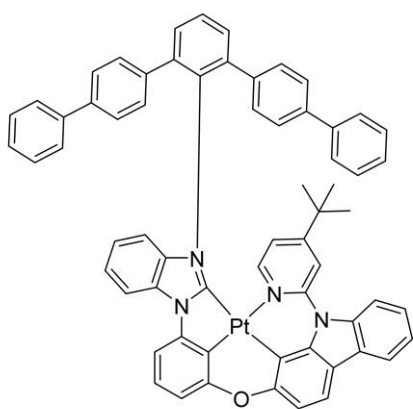
【化 8 9】



10



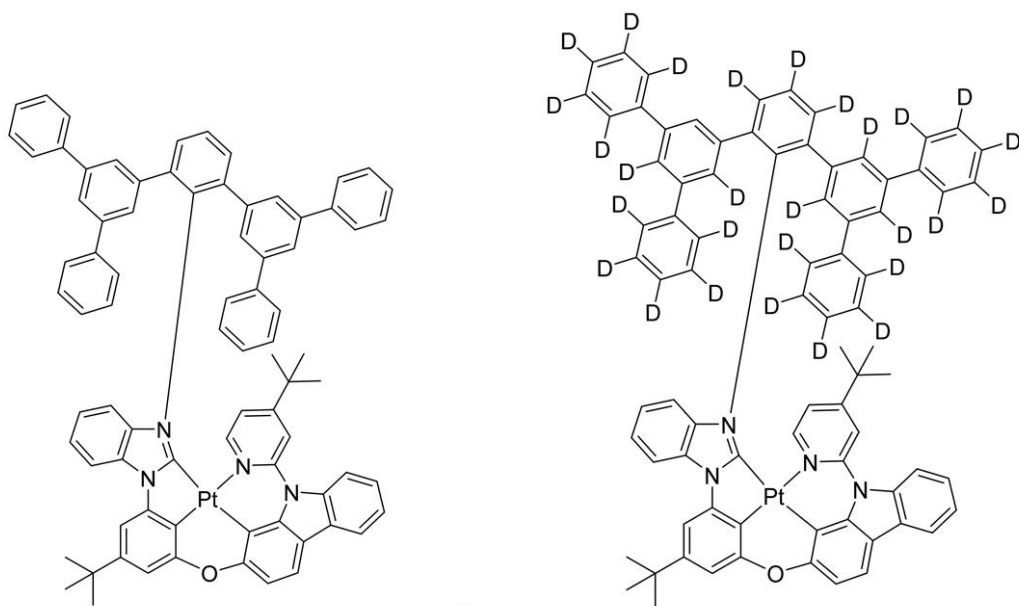
20



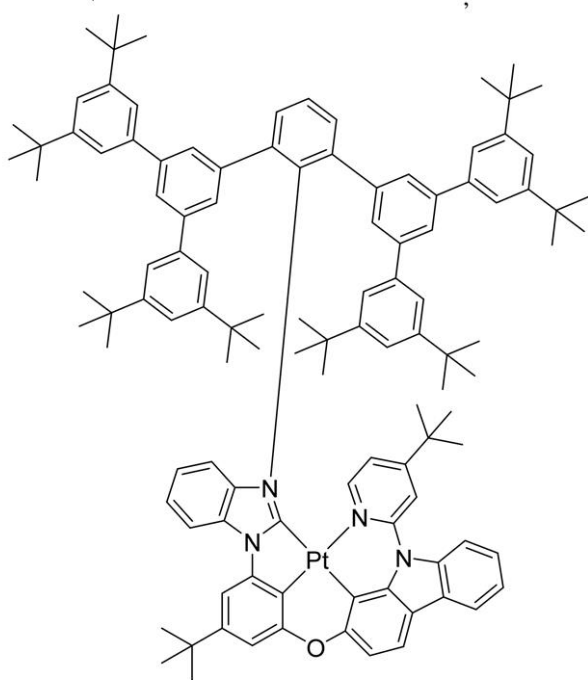
30

40

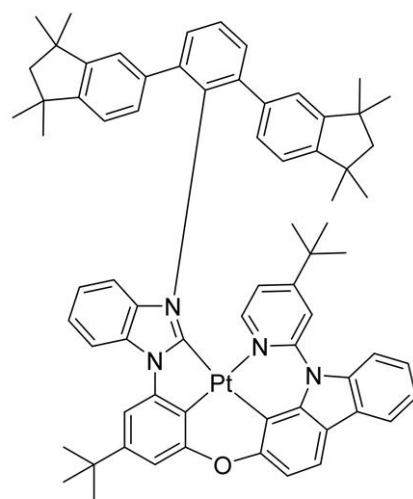
【化 9 0】



10

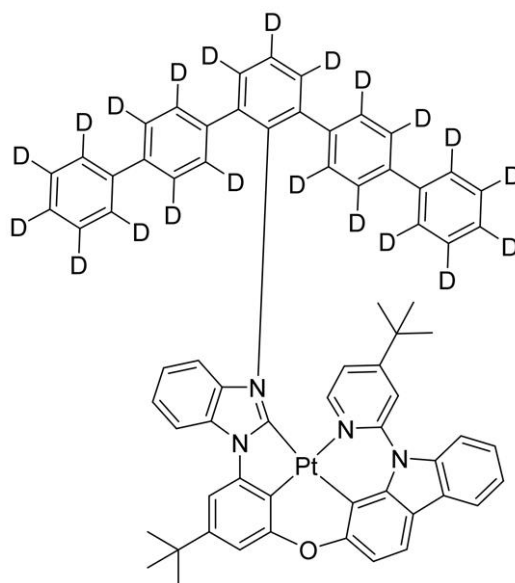
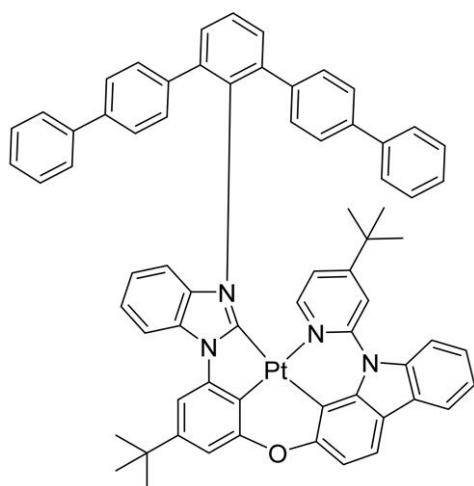


20

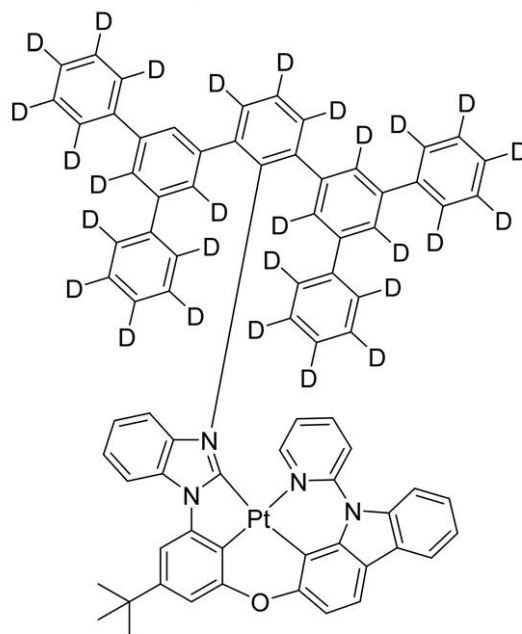
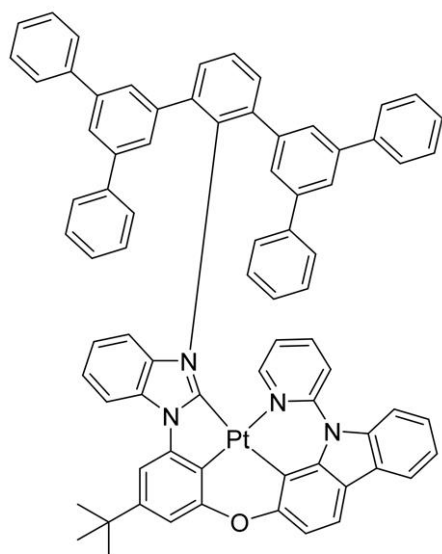


30

【化 9 1】



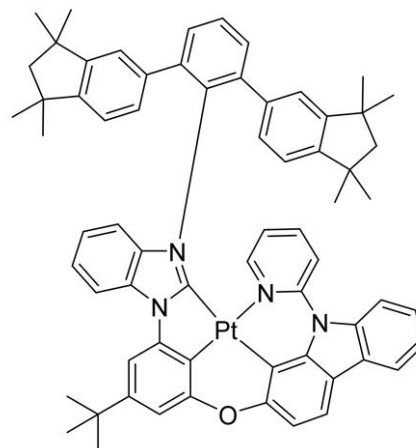
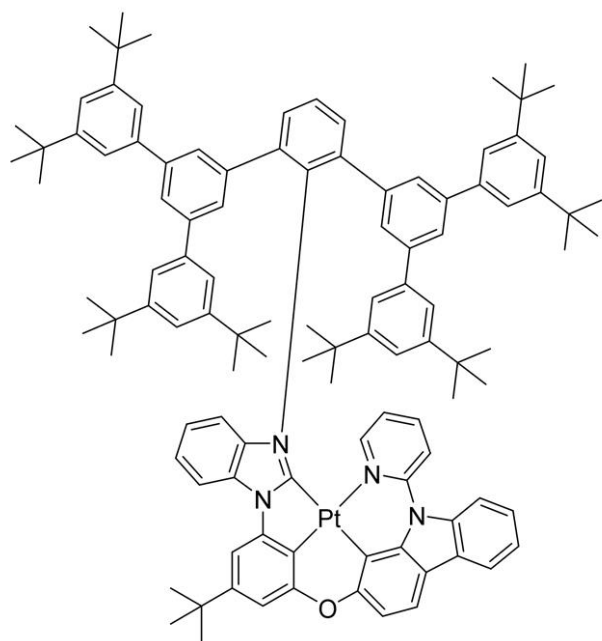
10



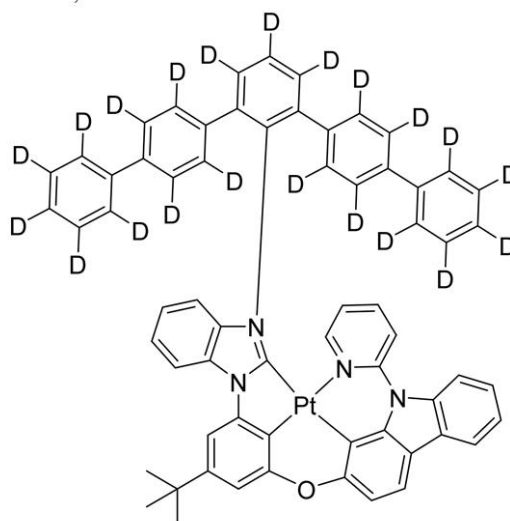
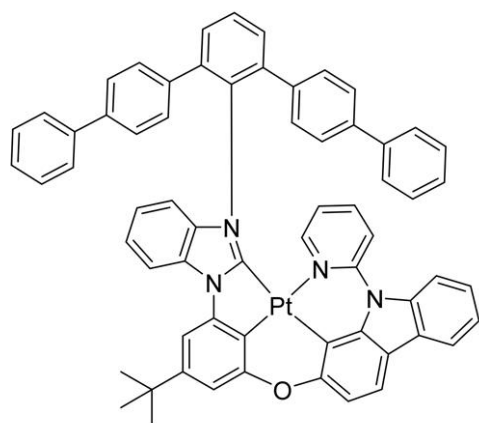
20

30

【化 9 2】



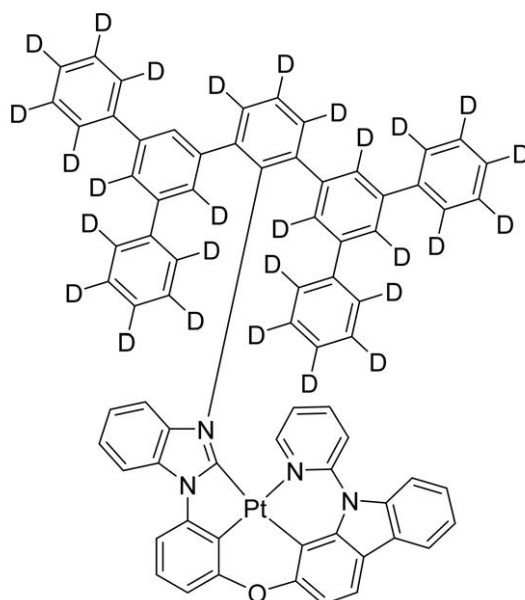
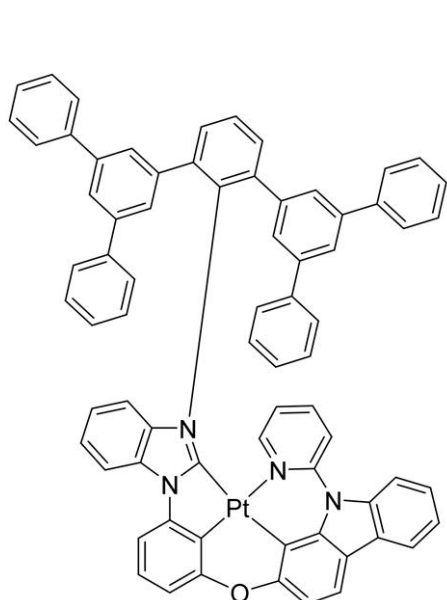
10



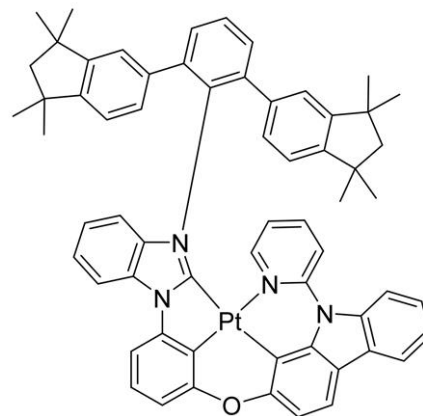
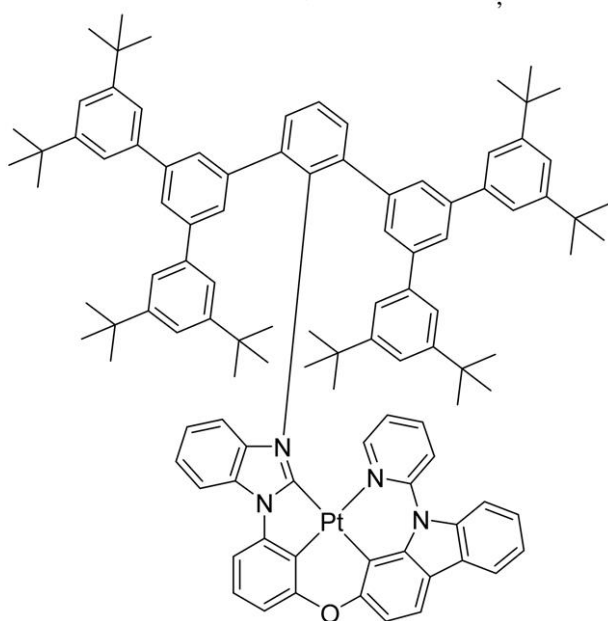
20

30

【化 9 3】

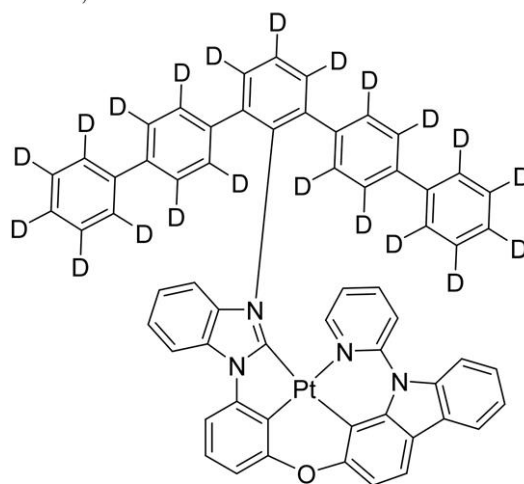
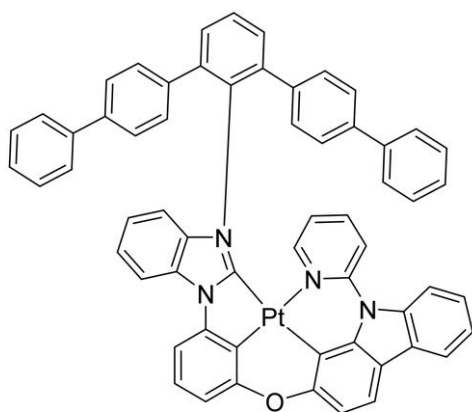


10



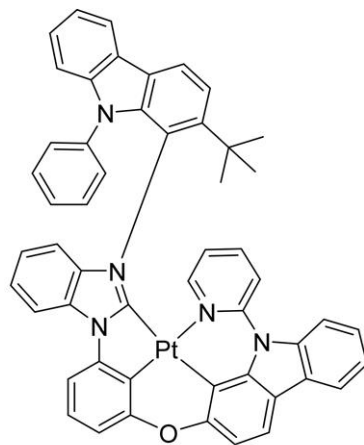
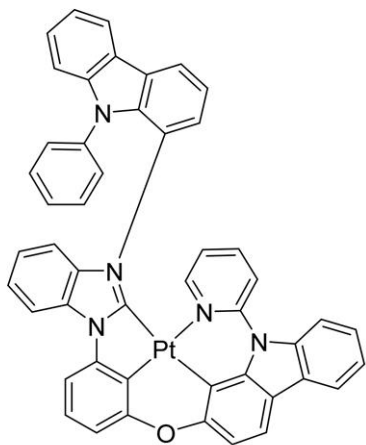
20

30

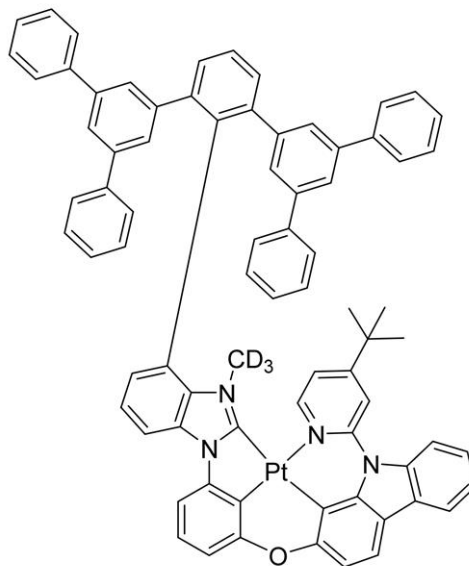
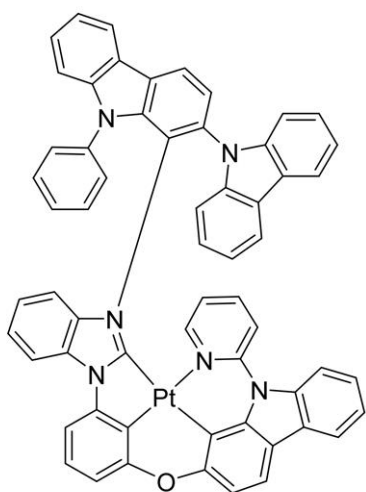


40

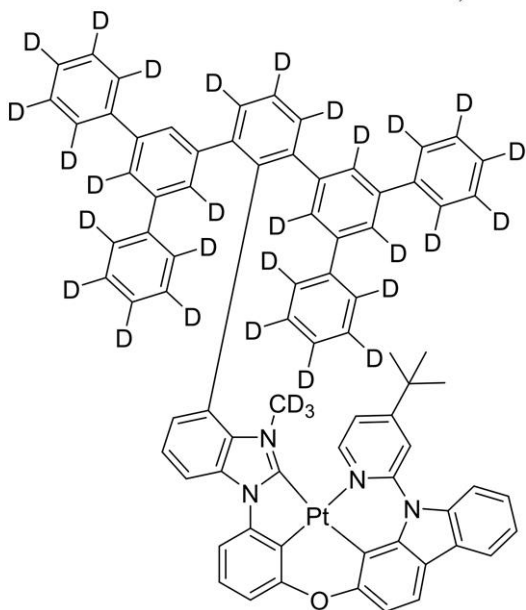
【化 9 4】



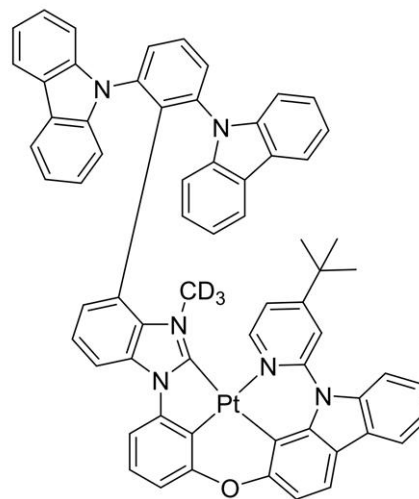
10



20

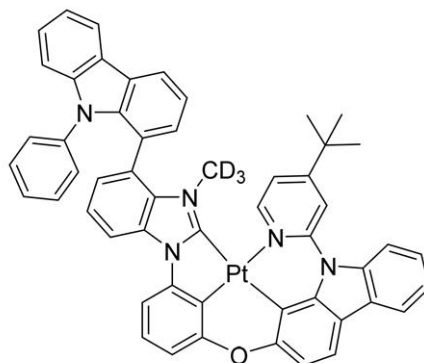
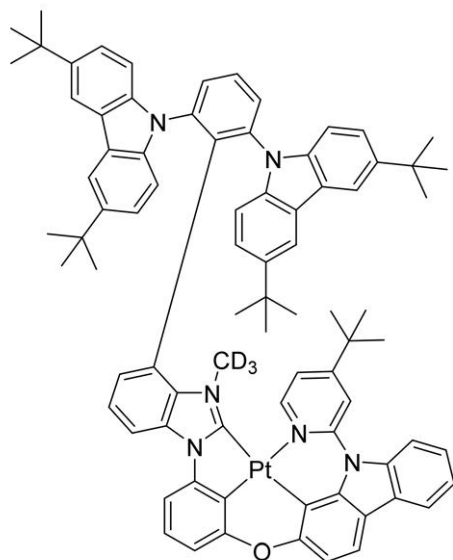


30

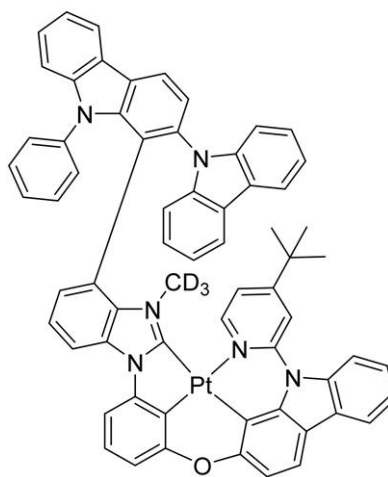
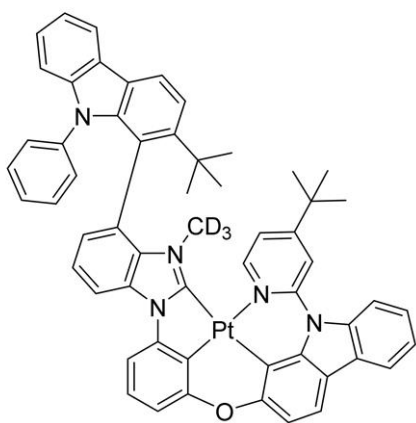


40

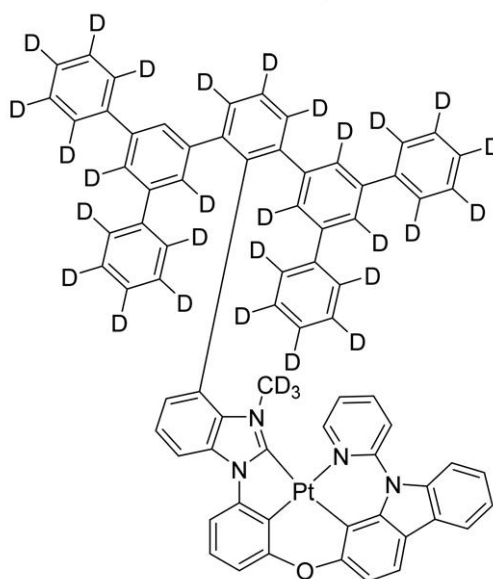
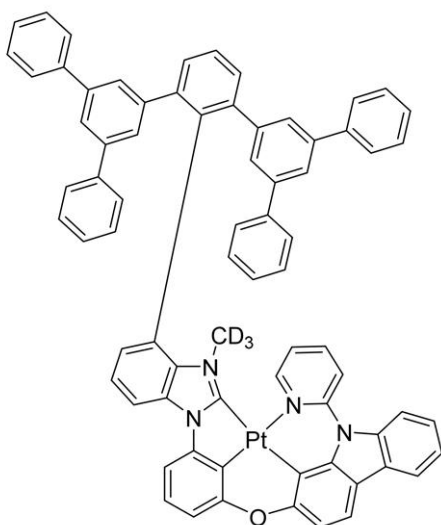
【化 9 5】



10



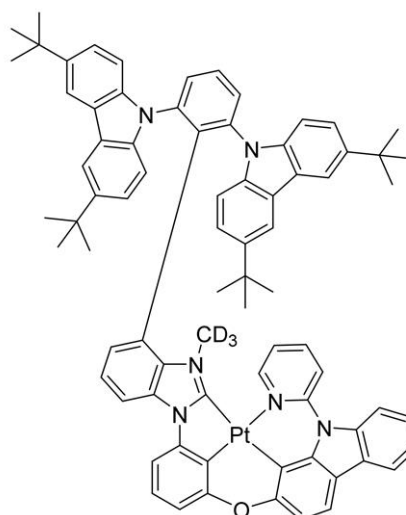
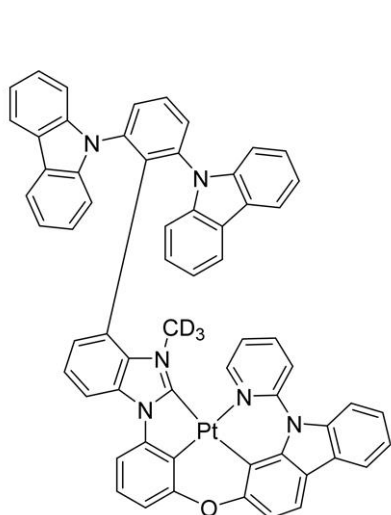
20



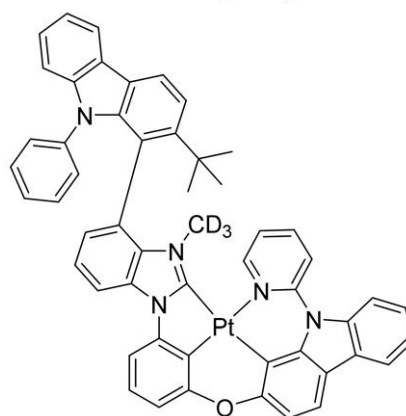
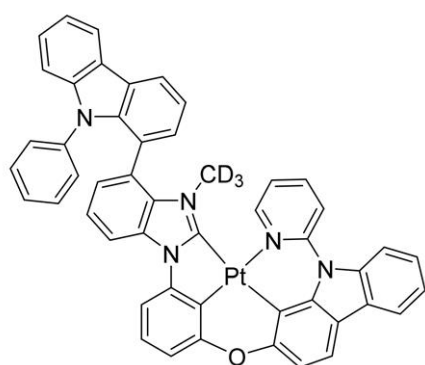
30

40

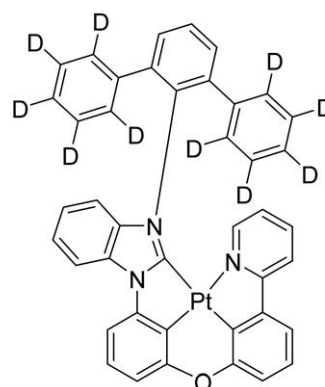
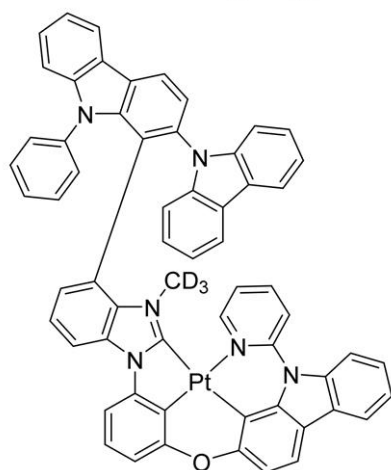
【化 9 6】



10

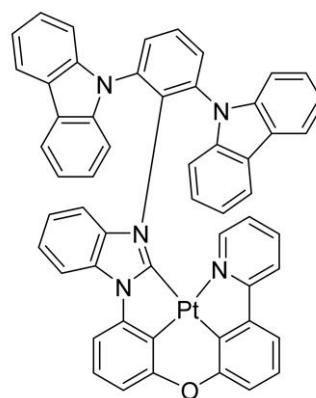
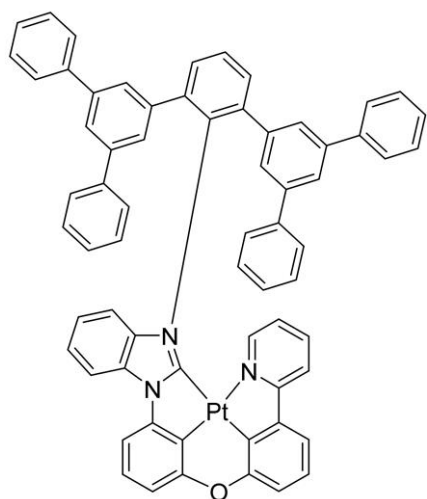


20

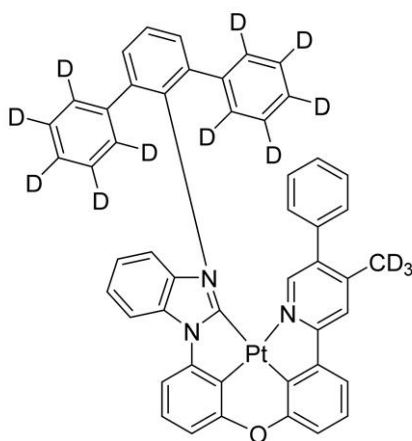
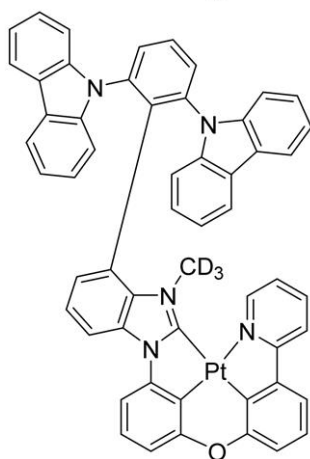


30

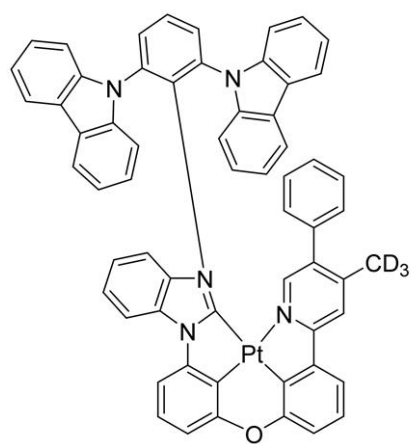
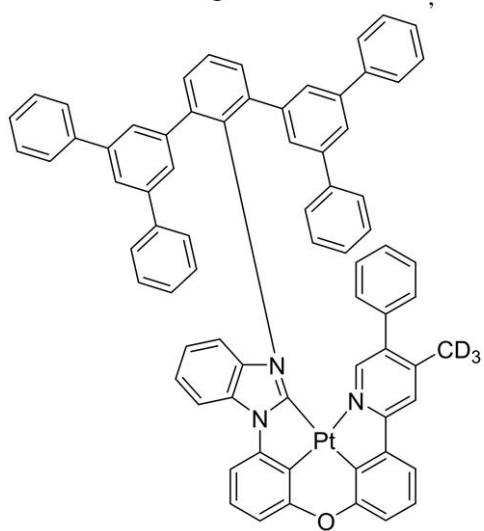
【化 9 7】



10



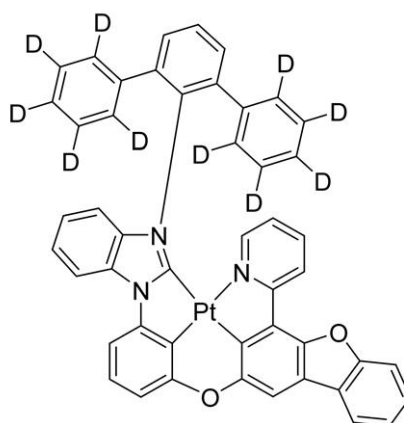
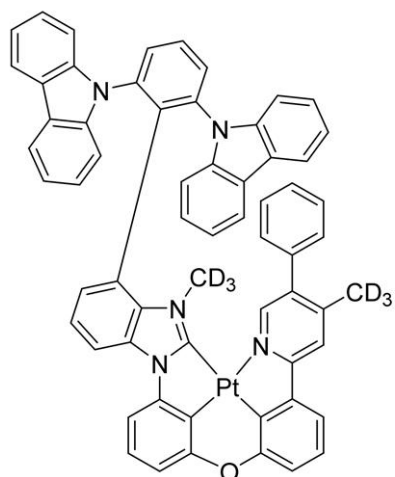
20



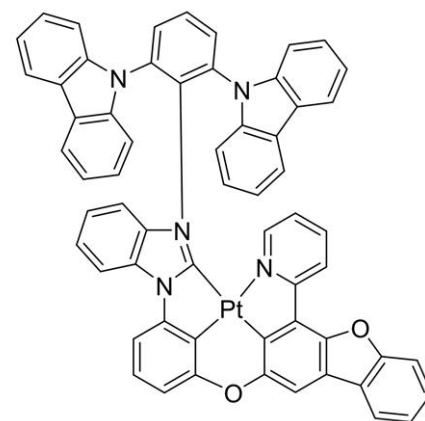
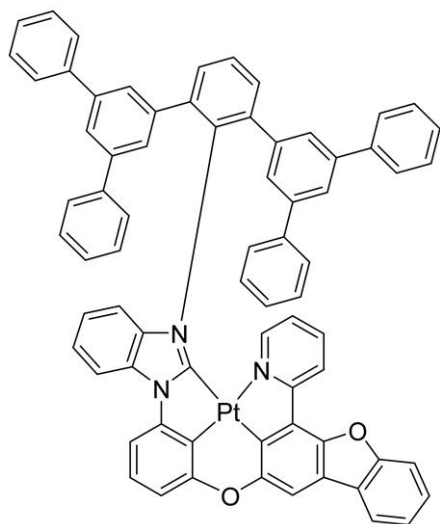
30

40

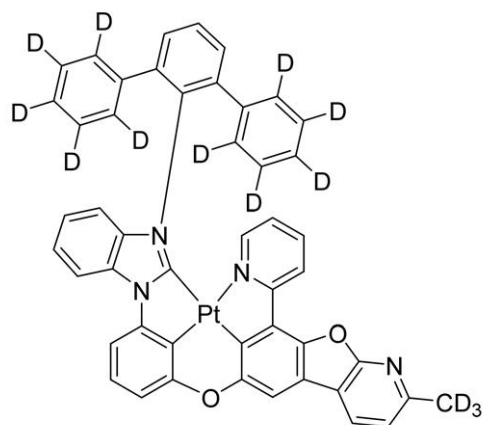
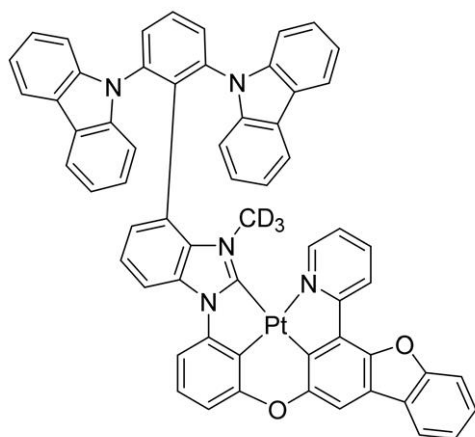
【化 9 8】



10



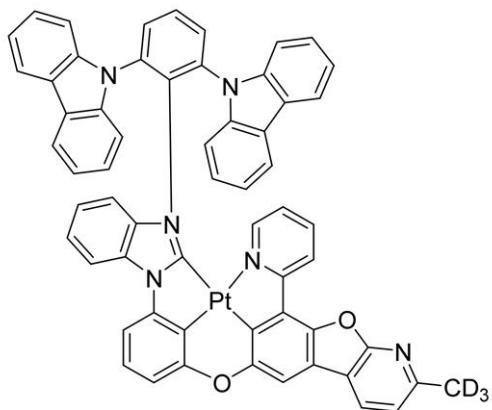
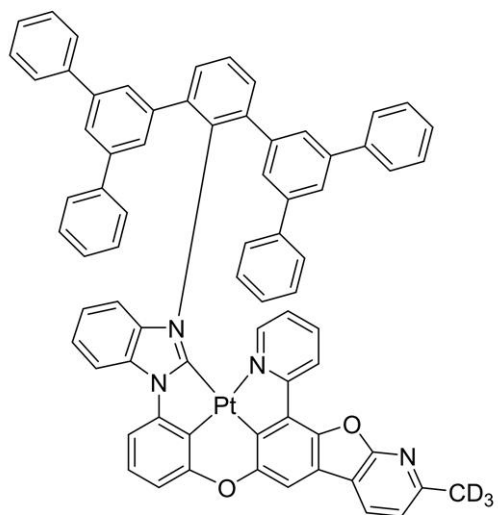
20



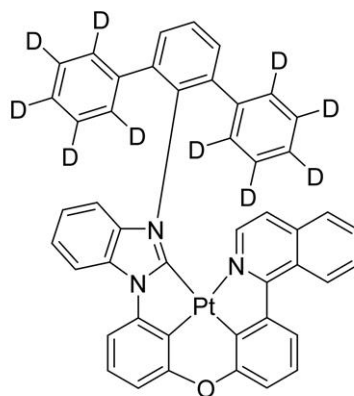
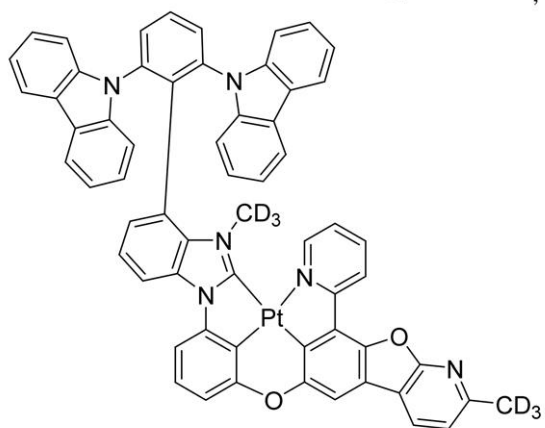
30

40

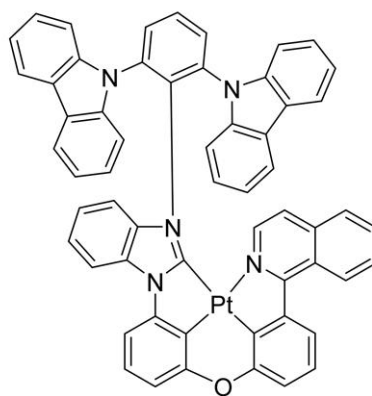
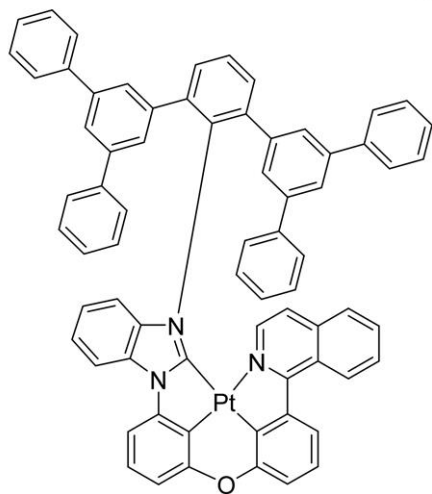
【化 9 9】



10



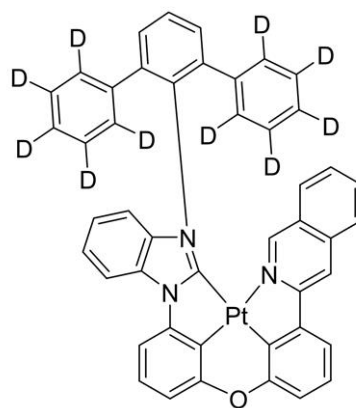
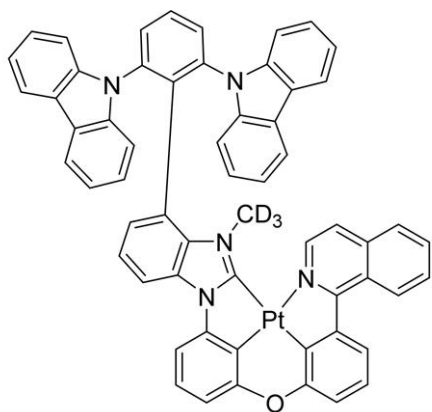
20



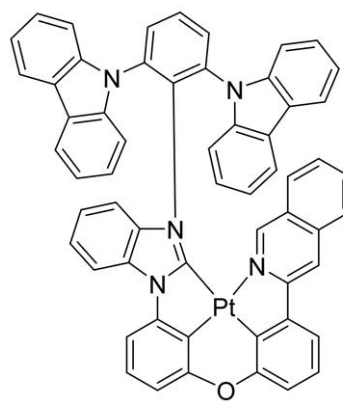
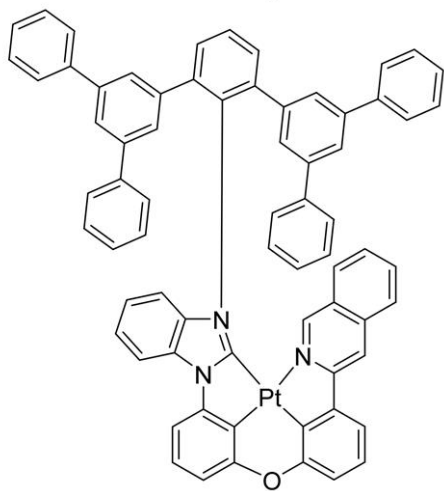
30

40

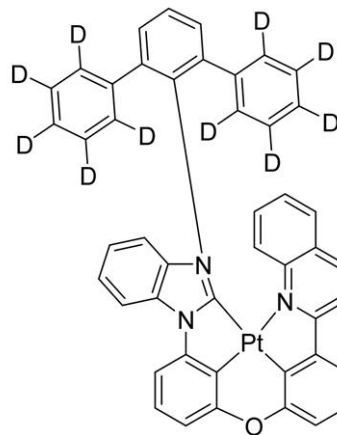
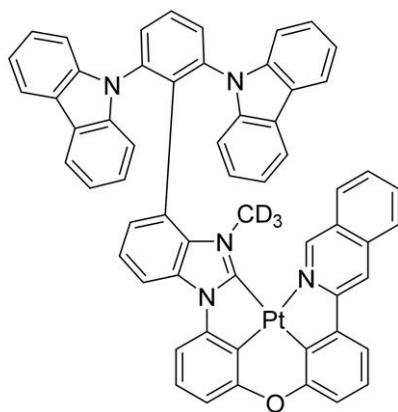
【化 1 0 0】



10

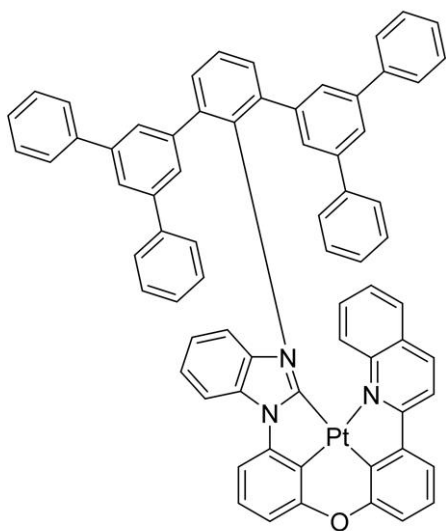


20

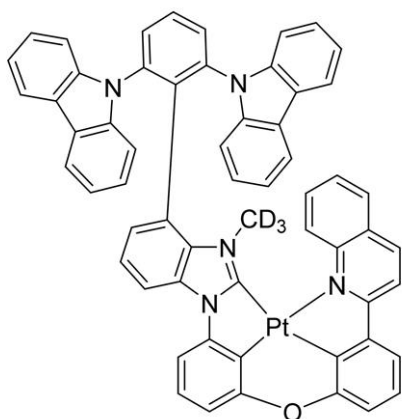


30

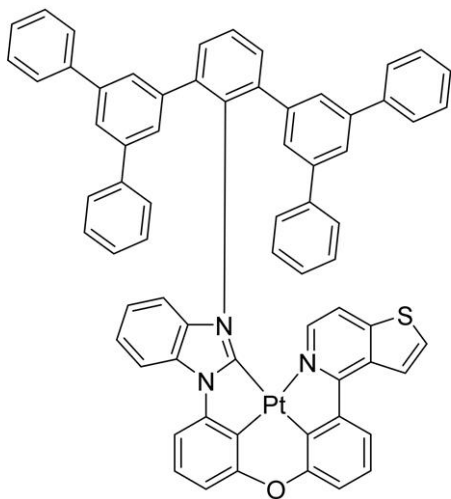
【化 1 0 1】



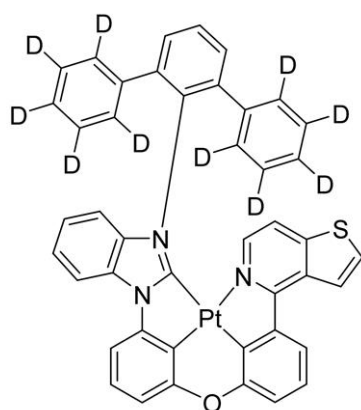
10



20

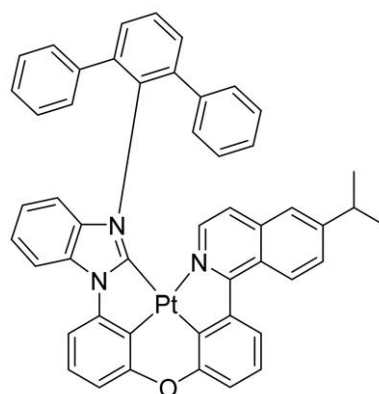
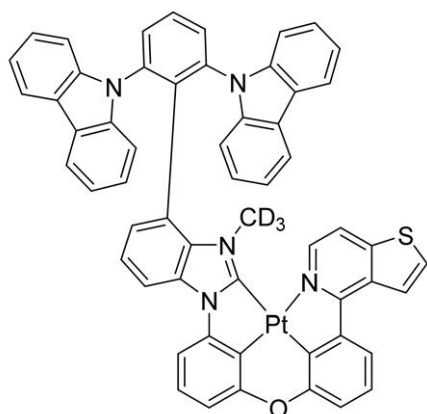


30

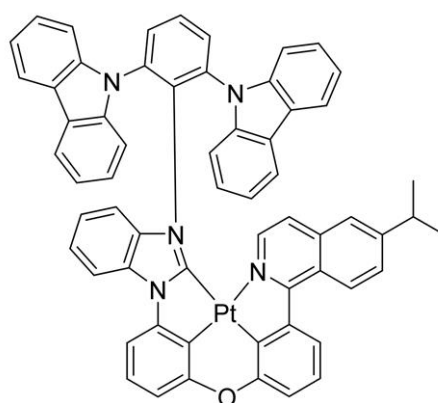
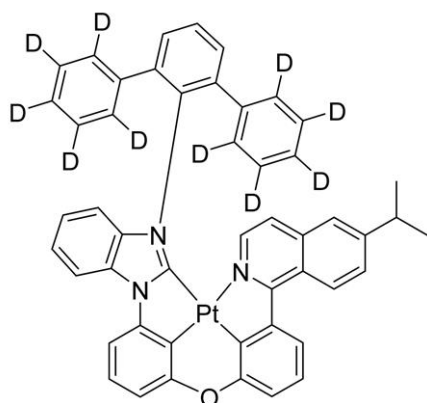


40

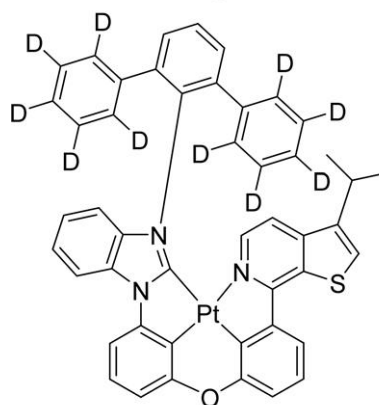
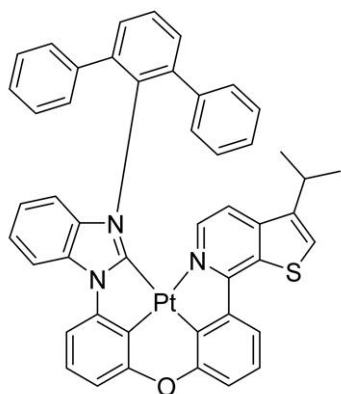
【化 1 0 2】



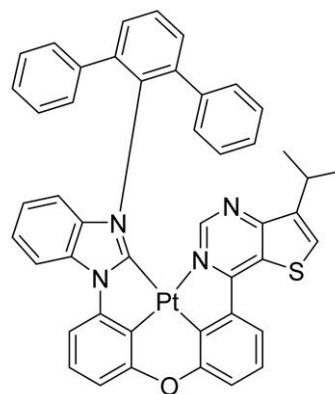
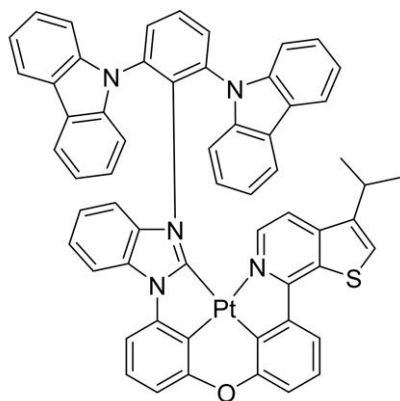
10



20

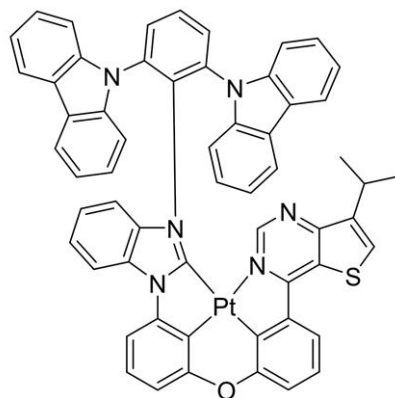
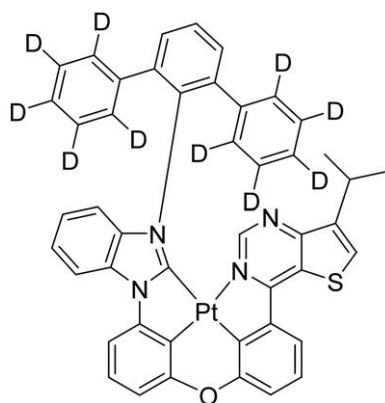


30

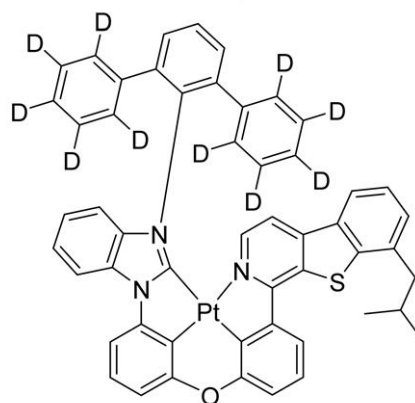
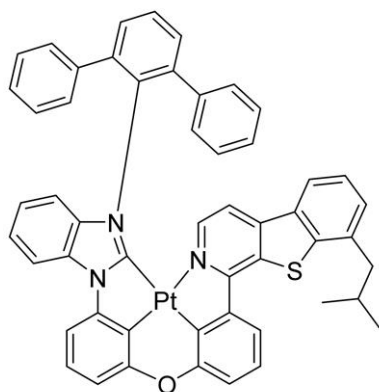


40

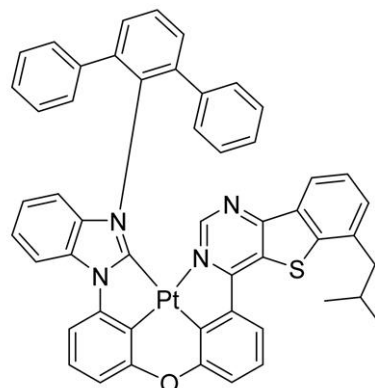
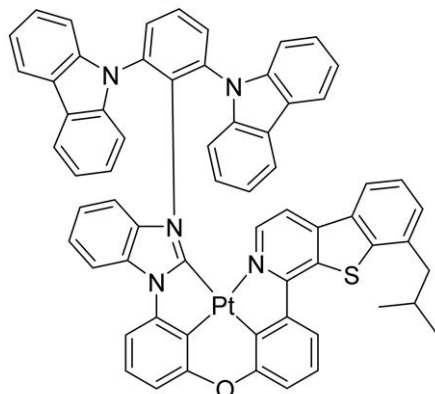
【化 1 0 3】



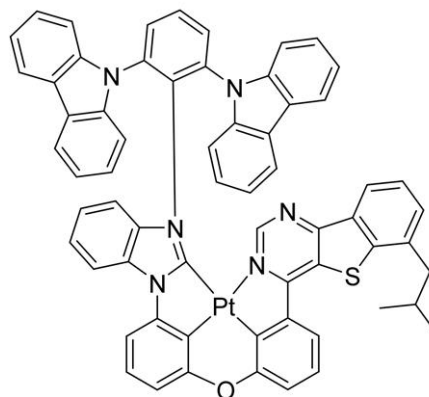
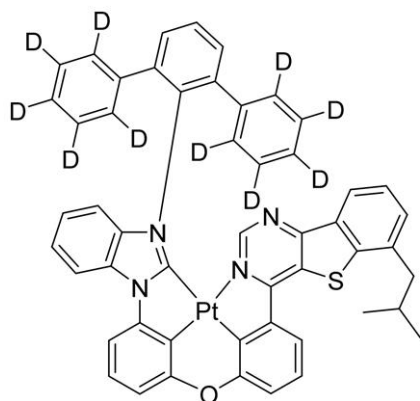
10



20

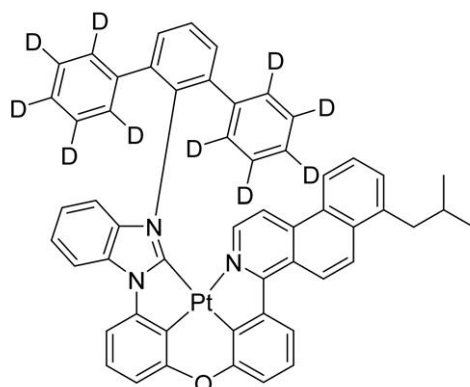
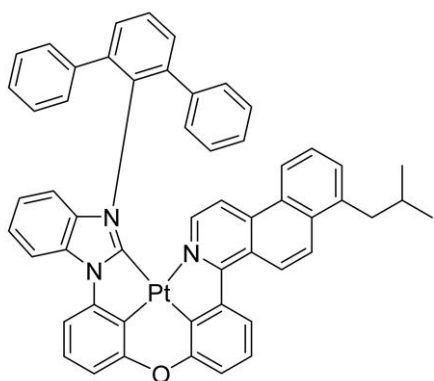


30

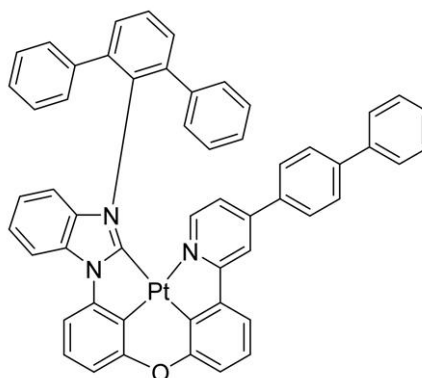
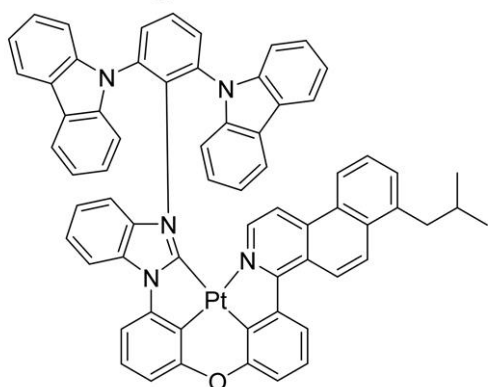


40

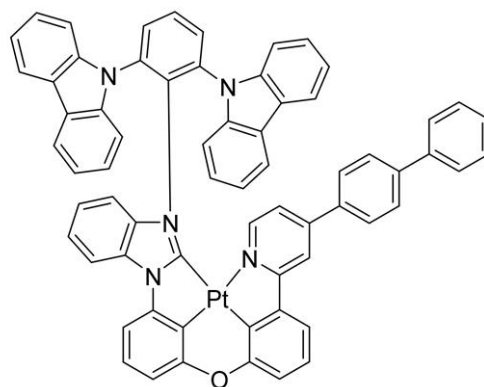
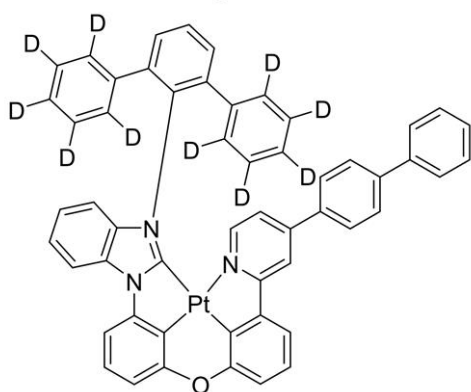
【化 1 0 4】



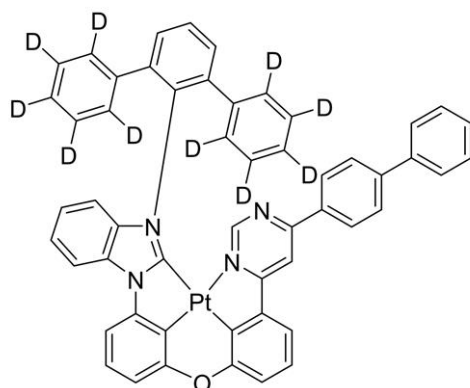
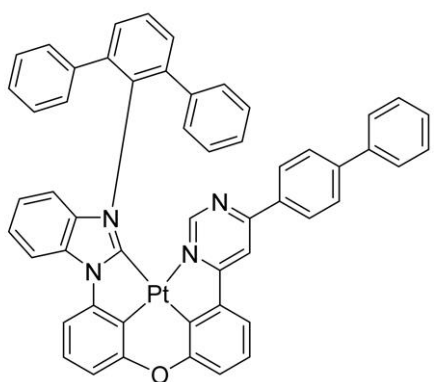
10



20

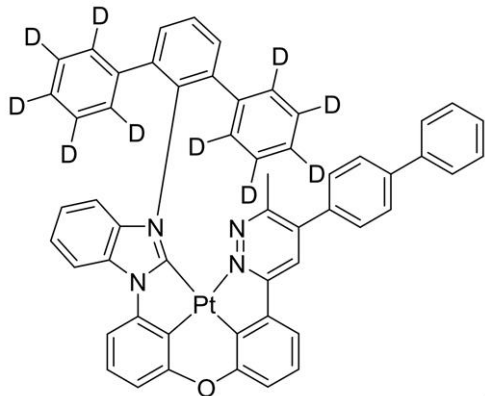
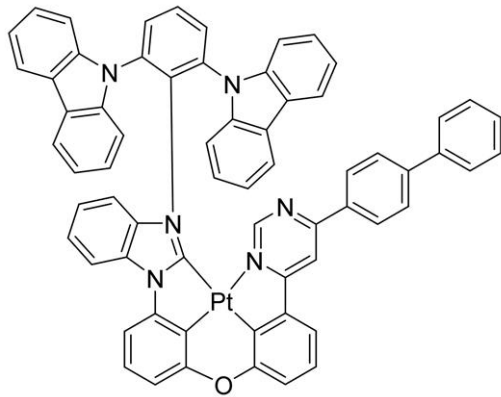


30

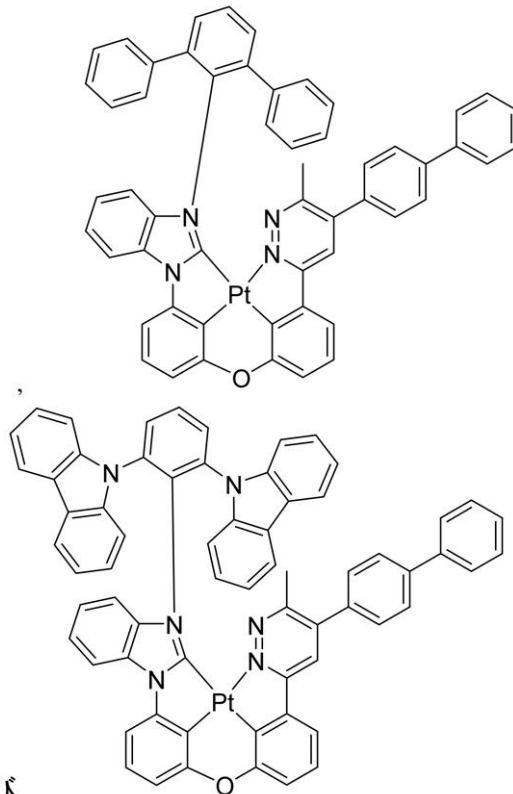


40

【化 1 0 5】



,及び



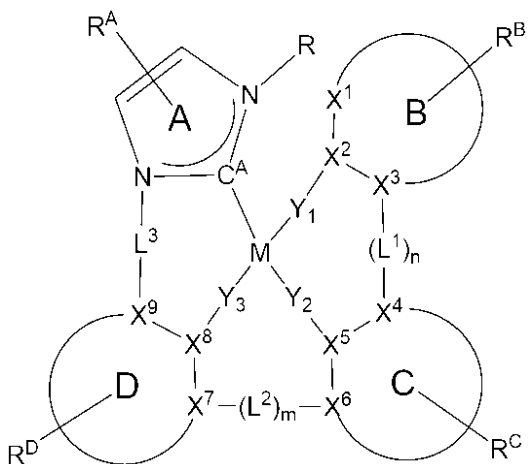
10

20

【 0 1 0 5】

本開示の化合物を含む有機発光デバイス（OLED）も開示される。前記OLEDは、アノードと、カソードと、前記アノードと前記カソードとの間に配置された有機層とを含み、前記有機層は、以下の式Iの化合物を含む：

【化 1 0 6】



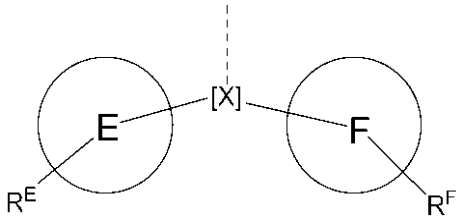
30

40

式中、Mは、Pd又はPt；環B、C、及びDは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環であり；X¹～X⁹は、それぞれ独立して、C又はNであり；Y₁～Y₃は、それぞれ独立して、直接結合、O、及びSからなる群から選択され；Y₁～Y₃の少なくとも1つは、直接結合であり；C^Aは、カルベン炭素であり；L¹～L³は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、CR'¹R'²、SiR'¹R'²、BR'、及びNR'、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；m及びnは、それぞれ独立して、0又は1であり；m及びnの少なくとも1つは、1であり；R、R^A、R^B、R^C、R^D、L¹、L²、及びL³の少なくとも1つは、以下の式II：

50

【化 1 0 7】



の構造を有する基を含み、式中、[X]は、5員ヘテロ環、5員炭素環、6員ヘテロ環、6員炭素環、又は2つ以上の縮合環を含む縮合ヘテロ環又は炭素環系であり；環E及びFは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環であり； R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノ最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；各 R 、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ； R 及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができ；式IIの構造を有する基の分子量は、395グラム/モル以上である。

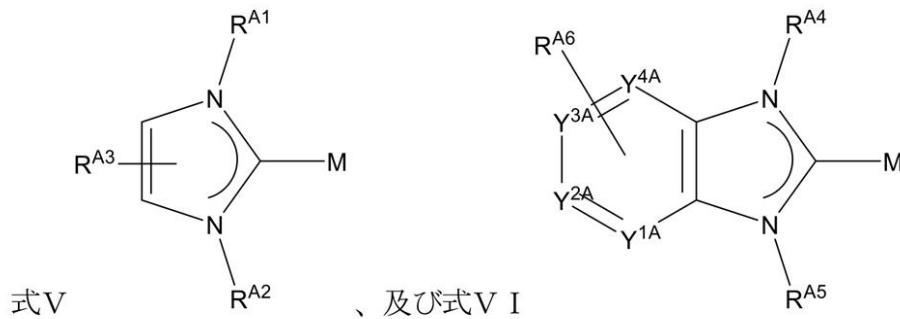
10

【0106】

前記OLEDの他の実施形態においては、前記有機層は、以下の式：

【化 1 0 8】

20

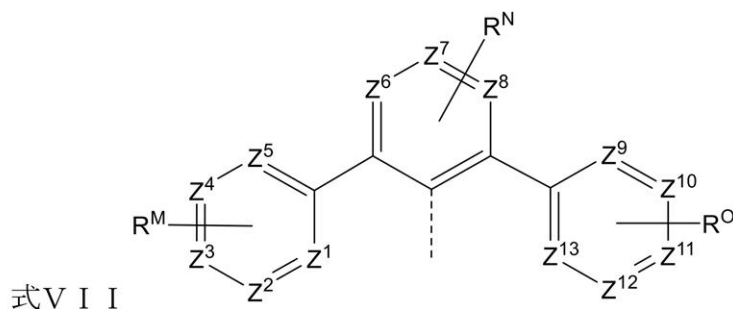


からなる群から選択される構造を含む化合物を含み、式中、

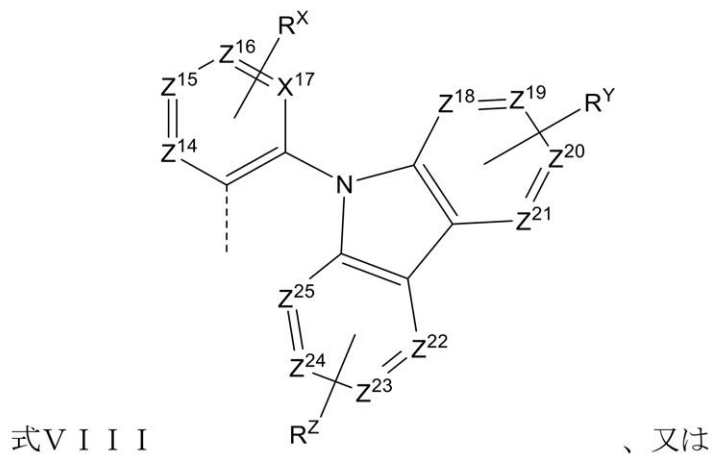
30

Mは、Os、Pd、Pt、Ir、Cu、及びAuからなる群から選択され； R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、又は R^{A6} の少なくとも1つは、以下の式：

【化 1 0 9】

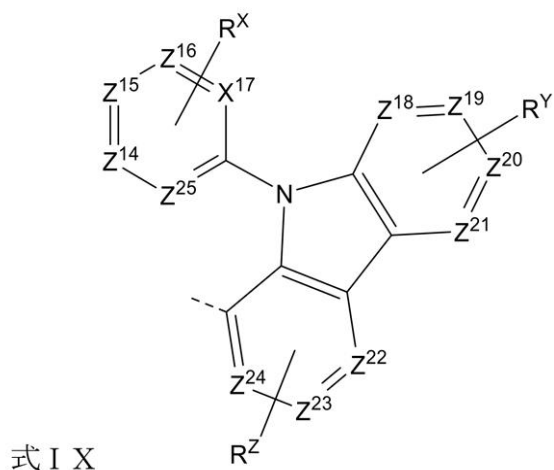


10



20

【化 1 1 0】



30

の構造であり；式中、 $Y^{1A} \sim Y^{4A}$ は、それぞれ独立して、C又はNであり； $Y^{1A} \sim Y^{4A}$ の2つ以下がNであり； $Z^1 \sim Z^{25}$ は、それぞれ独立して、C又はNであり；同一環中の3つの連続する $Z^1 \sim Z^{25}$ は、Nであることがなく； R^{A3} 、 R^{A6} 、 R^M 、 R^N 、 R^O 、 R^X 、 R^Y 、及び R^Z は、それぞれ独立して、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；各 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、 R^{A6} 、 R^M 、 R^N 、 R^O 、 R^X 、 R^Y 、及び R^Z は、独立して、水素である、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基であり；Mは

40

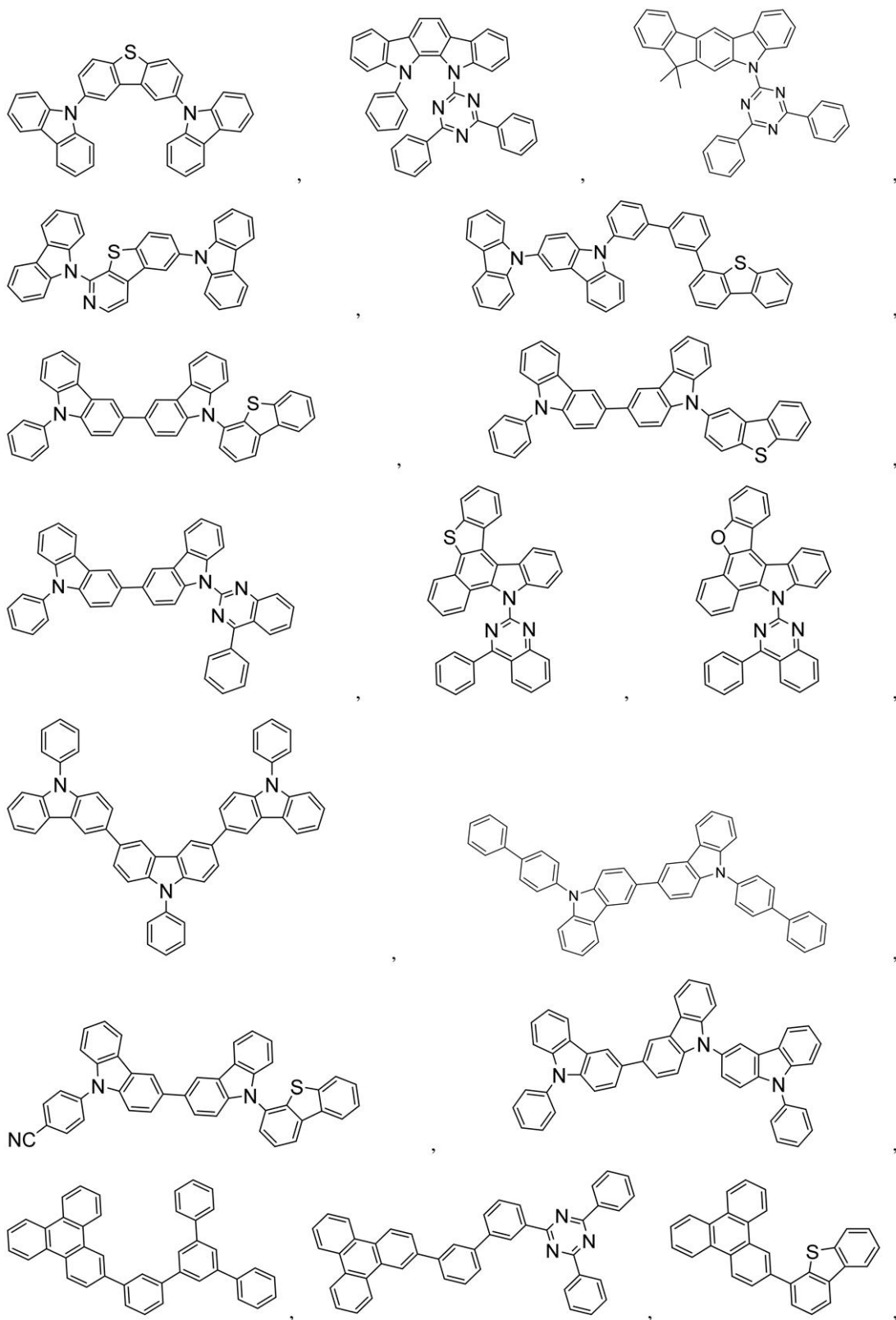
50

、他の配位子に配位することができ；任意の2つの置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；但し、前記化合物が式Vであり、 R^{A1} 及び R^{A2} の一方が式VIIであるとき、 R^M 、 R^N 、及び R^O の少なくとも1つは、重水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

【0107】

前記したOLEDの幾つかの実施形態においては、前記有機層は、発光層であることができ、前記化合物は、発光ドーパント又は非発光ドーパントであることができる。幾つかの実施形態においては、前記有機層は、更に、ホストを含み、前記ホストは、トリフェニレン、カルバゾール、ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、アザトリフェニレン、アザカルバゾール、アザ - ジベンゾチオフェン、アザ - ジベンゾフラン、及びアザ - ジベンゾセレノフェンからなる群から選択される少なくとも1つの化学基を含む。幾つかの実施形態においては、前記ホストは、下記からなる群から選択される。

【化 1 1 1】



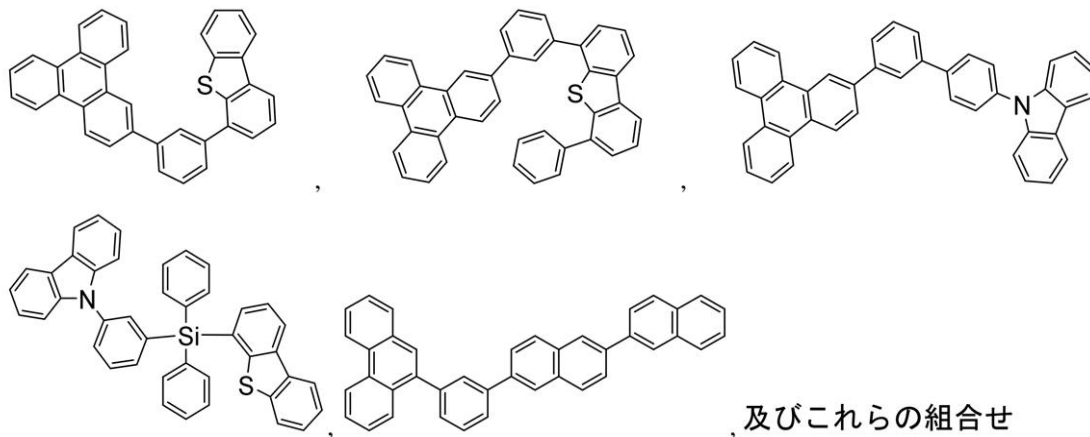
10

20

30

40

【化 1 1 2】



10

【0 1 0 8】

本開示の幾つかの実施形態によれば、本開示の前記新規化合物を含む前記 O L E D を含む消費者製品も開示される。

【0 1 0 9】

幾つかの実施形態においては、前記 O L E D は、可撓性があること、丸めることができること、折り畳むことができること、伸ばすことができること、曲げることができることからなる群から選択される 1 つ以上の特性を有する。幾つかの実施形態においては、前記 O L E D は、透明又は半透明である。幾つかの実施形態においては、前記 O L E D は、カーボンナノチューブを含む層を更に含む。

20

【0 1 1 0】

幾つかの実施形態においては、前記 O L E D は、遅延蛍光発光体を含む層を更に含む。幾つかの実施形態においては、前記 O L E D は、R G B 画素配列又は白色及びカラーフィルター画素配列を含む。幾つかの実施形態においては、前記 O L E D は、モバイルデバイス、ハンドヘルドデバイス、又はウェアラブルデバイスである。幾つかの実施形態においては、前記 O L E D は、10 インチ未満の対角線又は 50 平方インチ未満の面積を有するディスプレイパネルである。幾つかの実施形態においては、前記 O L E D は、少なくとも 10 インチの対角線又は少なくとも 50 平方インチの面積を有するディスプレイパネルである。幾つかの実施形態においては、前記 O L E D は、照明パネルである。

30

【0 1 1 1】

幾つかの実施形態においては、前記化合物は、発光ドーパントであることができる。幾つかの実施形態においては、前記化合物は、リン光、蛍光、熱活性化遅延蛍光、即ち T A D F (E 型遅延蛍光とも呼ばれる；例えば、参照によりその全体が組み込まれる、米国特許出願公開第 2 0 1 9 / 0 0 8 1 2 4 8 号として、2019 年 3 月 14 日に公開された米国特許出願公開第 1 5 / 7 0 0 , 3 5 2 号参照)、三重項 - 三重項消滅、又はこれらの過程の組合せを介して、発光を生成することができる。幾つかの実施形態においては、前記発光ドーパントは、ラセミ混合物であることができる、又は 1 つのエナンチオマーに富む (enriched) ことができる。幾つかの実施形態においては、前記化合物は、ホモレプティックであることができる (各配位子が同じである)。幾つかの実施形態においては、前記化合物は、ヘテロレプティックであることができる (少なくとも 1 つの配位子が他と異なっている)。

40

【0 1 1 2】

金属に配位する配位子が 1 超存在する場合、幾つかの実施形態においては、これらの配位子は、全て同一であることができる。幾つかの他の実施形態においては、少なくとも 1 つの配位子が、他の配位子と異なる。幾つかの実施形態においては、全ての配位子が、互いに異なることができる。このことは、金属に配位している配位子が、その金属に配位している他の配位子と結合し、三座、四座、五座、又は六座配位子を形成することができる

50

実施形態にも当てはまる。したがって、配位している配位子が互いに結合されている場合、幾つかの実施形態においては、配位子の全てが同一であることができ、幾つかの他の実施形態においては、結合している配位子の少なくとも1つが、他の配位子と異なることができる。

【0113】

幾つかの実施形態においては、前記化合物は、OLEDにおけるリン光増感剤として、用いられることができ、前記OLEDにおける1つ又は複数の層は、1つ以上の蛍光及び/又は遅延蛍光発光体の形態で、アクセプターを含む。幾つかの実施形態においては、前記化合物は、増感剤として用いられるエキシプレックス(exciple)の1つの成分として用いられることができる。リン光増感剤として、前記化合物は、前記アクセプターへのエネルギー移動が可能でなくてはならず、前記アクセプターは、エネルギーを発光する又はエネルギーを最終発光体に更に移動する。前記アクセプター濃度は、0.001%~100%の範囲であり得る。前記アクセプターは、リン光増感剤と同じ層にあることも、又は1つ以上の異なる層にあることもできる。幾つかの実施形態においては、前記アクセプターは、TADF発光体である。幾つかの実施形態においては、前記アクセプターは、蛍光発光体である。幾つかの実施形態においては、前記発光は、前記増感剤、前記アクセプター、及び前記最終発光体のいずれか又は全てから生じることができる。

10

【0114】

幾つかの実施形態においては、本開示の化合物は、中性に帯電される。

20

【0115】

他の態様によれば、本明細書に記載される化合物を含む配合物も開示される。

【0116】

本明細書中に開示される前記OLEDは、消費者製品、電子部品モジュール、及び照明パネルの1つ以上に組み込まれることができる。前記有機層は、発光層であることができ、幾つかの実施形態においては、前記化合物は、発光ドーパントであることができ、他の実施形態においては、前記化合物は、非発光ドーパントであることができる。

【0117】

前記有機層は、ホストを含むこともできる。幾つかの実施形態においては、2つ以上のホストが好ましい。幾つかの実施形態においては、使用される前記ホストは、a)双極性(bipolar)材料、b)電子輸送材料、c)正孔輸送材料、又はd)電荷輸送の役割がほとんどないワイドバンドギャップ材料であることができる。幾つかの実施形態においては、前記ホストは、金属錯体を含むことができる。前記ホストは、ベンゾ縮合チオフェン又はベンゾ縮合フランを含むトリフェニレンであることができる。前記ホスト中のいずれの置換基は、独立して、 C_nH_{2n+1} 、 OC_nH_{2n+1} 、 OAr_1 、 $N(C_nH_{2n+1})_2$ 、 $N(Ar_1)(Ar_2)$ 、 $CH=CH-C_nH_{2n+1}$ 、 $C-C-C_nH_{2n+1}$ 、 Ar_1 、 Ar_1-Ar_2 、及び $C_nH_{2n}-Ar_1$ からなる群から選択される非縮合置換基であることができる、又は前記ホストは無置換である。前述の置換基において、 n は1から10の範囲に亘ることができ、 Ar_1 及び Ar_2 は、独立して、ベンゼン、ビフェニル、ナフタレン、トリフェニレン、カルバゾール、及びこれらの複素芳香族類似体からなる群から選択されることができる。前記ホストは、無機化合物であることができる。例えば、 ZnS 等、 Zn 含有無機材料が挙げられる。

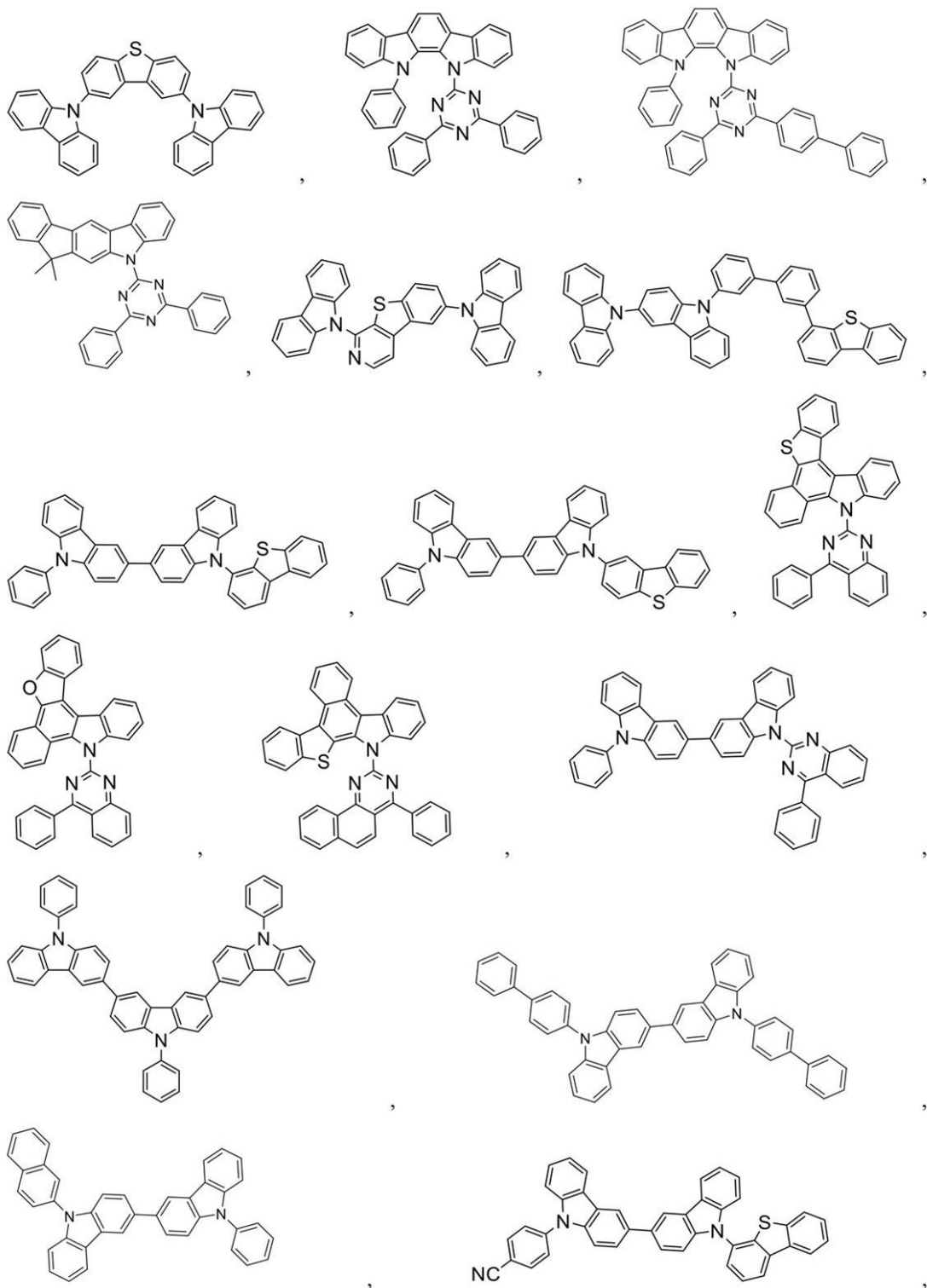
30

40

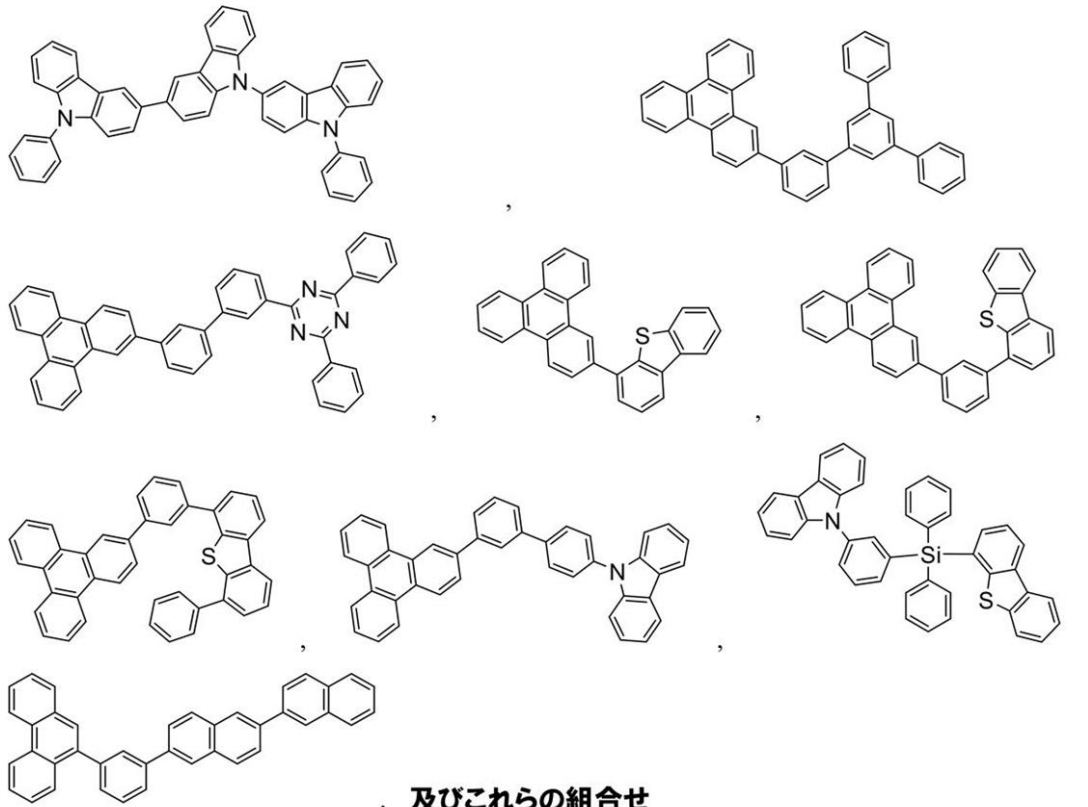
【0118】

前記ホストは、トリフェニレン、カルバゾール、ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、アザトリフェニレン、アザカルバゾール、アザ-ジベンゾチオフェン、アザ-ジベンゾフラン、及びアザ-ジベンゾセレノフェンからなる群から選択される少なくとも1つの化学基を含む化合物であることができる。前記ホストは、金属錯体を含むことができる。前記ホストは、下記からなるホスト群から選択される具体的な化合物であることができるが、これらに限定されない。

【化 1 1 3】



【化 1 1 4】



10

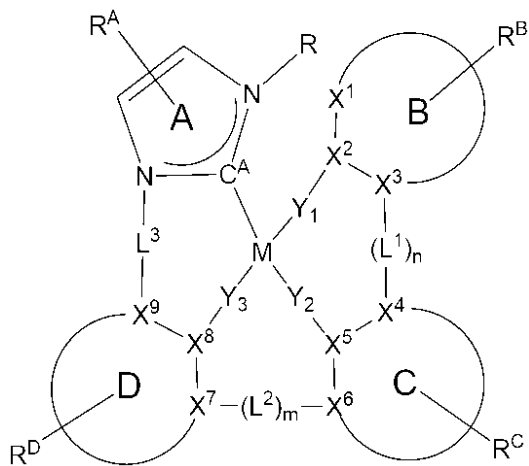
20

可能なホストに関する追加の情報は、下記に提供される。

【0 1 1 9】

OLED中の発光領域も開示される。前記発光領域は、以下の式Iの化合物を含む：

【化 1 1 5】

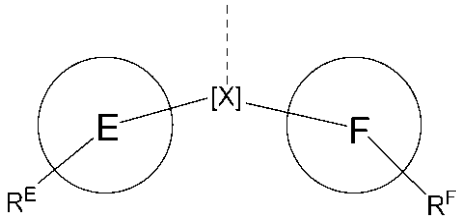


30

40

式中、Mは、Pd又はPt；環B、C、及びDは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環であり； $X^1 \sim X^9$ は、それぞれ独立して、C又はNであり； $Y^1 \sim Y^3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、及びSからなる群から選択され； $Y^1 \sim Y^3$ の少なくとも1つは、直接結合であり； C^A は、カルベン炭素であり； $L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 、 BR' 、及び NR' 、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；m及びnは、それぞれ独立して、0又は1であり；m及びnの少なくとも1つは、1であり；R、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも1つは、以下の式II：

【化 1 1 6】



の構造を有する基を含み、式中、[X]は、5員ヘテロ環、5員炭素環、6員ヘテロ環、6員炭素環、又は2つ以上の縮合環を含む縮合ヘテロ環又は炭素環系であり；環E及びFは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環であり； R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノ最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；各 R 、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ； R 及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができ；式IIの構造を有する基の分子量は、395グラム/モル以上である。

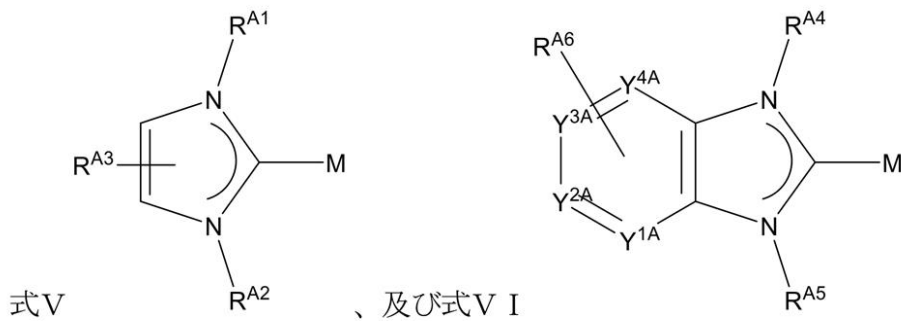
10

【0 1 2 0】

前記OLED中の発光領域の他の実施形態においては、前記発光領域は、以下の式：

【化 1 1 7】

20



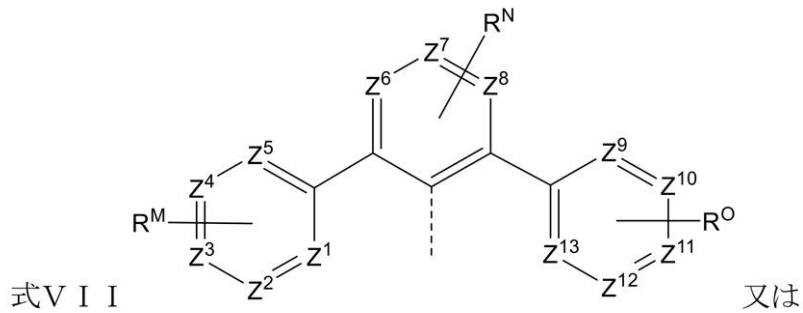
式V、及び式VI

からなる群から選択される式の構造を含む化合物を含み、式中、

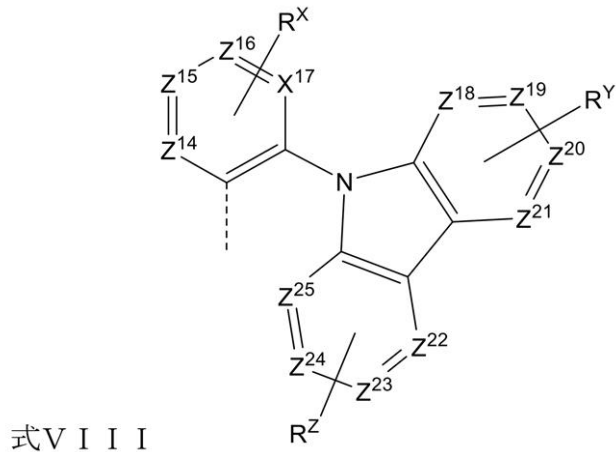
30

Mは、Os、Pd、Pt、Ir、Cu、及びAuからなる群から選択され； R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、又は R^{A6} の少なくとも1つは、以下の式：

【化 1 1 8】



10



20

の構造であり；式中、 $Y^{1A} \sim Y^{4A}$ は、それぞれ独立して、C又はNであり； $Y^{1A} \sim Y^{4A}$ の2つ以下がNであり； $Z^1 \sim Z^{25}$ は、それぞれ独立して、C又はNであり；同一環中の3つの連続する $Z^1 \sim Z^{25}$ は、Nであることがなく； R^{A3} 、 R^{A6} 、 R^M 、 R^N 、 R^O 、 R^X 、 R^Y 、及び R^Z は、それぞれ独立して、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；各 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、 R^{A6} 、 R^M 、 R^N 、 R^O 、 R^X 、 R^Y 、及び R^Z は、独立して、水素である、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基であり；Mは、他の配位子に配位することができ；任意の2つの置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；但し、前記化合物が式Vであり、 R^{A1} 及び R^{A2} の一方が式VIIであるとき、 R^M 、 R^N 、及び R^O の少なくとも1つは、重水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。

30

【0121】

40

前記した発光領域の幾つかの実施形態においては、前記化合物は、発光ドーパント又は非発光ドーパントであることができる。幾つかの実施形態においては、前記発光領域は、更に、ホストを含み、前記ホストは、金属錯体、トリフェニレン、カルバゾール、ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、アザ-トリフェニレン、アザ-カルバゾール、アザ-ジベンゾチオフェン、アザ-ジベンゾフラン、及びアザ-ジベンゾセレノフェンからなる群から選択される少なくとも1つの化学基を含む。

【0122】

前記発光領域の幾つかの実施形態においては、前記発光領域は、更に、ホストを含み、前記ホストは、本明細書に記載のホスト群から選択される。

【0123】

50

本開示の更に他の態様においては、本明細書に開示される新規化合物を含む配合物が記載される。前記配合物は、本明細書に開示される溶媒、ホスト、正孔注入材料、正孔輸送材料、電子ブロッキング材料、正孔ブロッキング材料、及び電子輸送材料からなる群から選択される１つ以上の成分を含むこともできる。

【０１２４】

本開示は、本開示の新規化合物、又はその一価又は多価のバリエーションを含む任意の化学構造を包含する。言い換えれば、本発明化合物又はその一価又は多価のバリエーションは、より大きな化学構造の一部であることができる。そのような化学構造は、モノマー、ポリマー、巨大分子、及び超分子（*supramolecule*）（超分子（*supermolecule*）としても知られている）からなる群から選択されることができる。本明細書中で使用される、「化合物の一価のバリエーション」は、１個の水素が除去され、化学構造の残りへの結合で置き換えられていることを除いては、前記化合物と同一である部分を指す。本明細書中で使用される、「化合物の多価のバリエーション」は、１個超の水素が除去され、化学構造の残りへの結合（*bond* or *bonds*）で置き換えられていることを除いては前記化合物と同一である部分を指す。超分子の例においては、発明化合物は、共有結合なしで前記超分子錯体に組み込まれることもできる。

他の材料との組合せ

【０１２５】

有機発光デバイス中の特定の層に有用として本明細書において記述されている材料は、デバイス中に存在する多種多様な他の材料と組み合わせて使用され得る。例えば、本明細書において開示されている発光性ドーパントは、多種多様なホスト、輸送層、ブロッキング層、注入層、電極、及び存在し得る他の層と併せて使用され得る。以下で記述又は参照される材料は、本明細書において開示されている化合物と組み合わせて有用となり得る材料の非限定的な例であり、当業者であれば、組み合わせて有用となり得る他の材料を特定するための文献を容易に閲覧することができる。

伝導性（導電性）ドーパント：

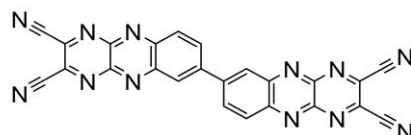
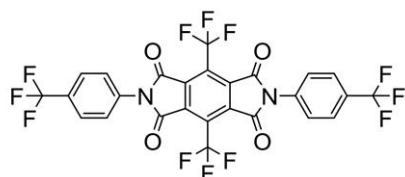
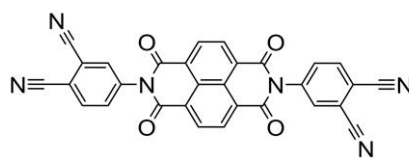
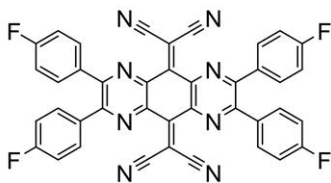
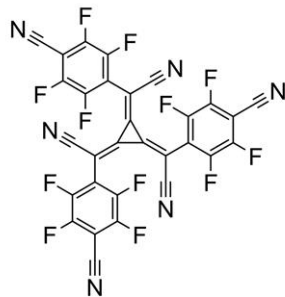
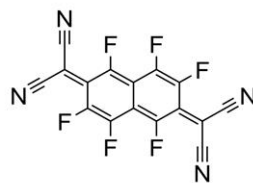
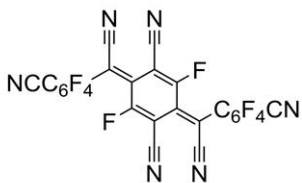
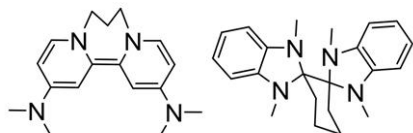
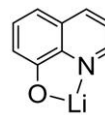
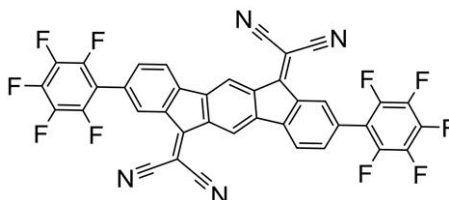
【０１２６】

電荷輸送層は、伝導性ドーパントでドーピングされ、電荷キャリアの密度を大きく変え、それによりその伝導性を変えることとなる。伝導性は、マトリックス材料中の電荷キャリアを生成することで、又はドーパントのタイプに応じて増加され、半導体のフェルミ準位における変化も達成することができる。正孔輸送層は、*p*型伝導性ドーパントでドーピングされることができ、*n*型伝導性ドーパントは、電子輸送層中に用いられる。

【０１２７】

本明細書において開示される材料と組み合わせて、OLED中に用いられることができる伝導性ドーパントの非制限的な例は、これらの材料を開示する文献と共に下記に例示される。

EP 0 1 6 1 7 4 9 3、EP 0 1 9 6 8 1 3 1、EP 2 0 2 0 6 9 4、EP 2 6 8 4 9 3 2、US 2 0 0 5 0 1 3 9 8 1 0、US 2 0 0 7 0 1 6 0 9 0 5、US 2 0 0 9 0 1 6 7 1 6 7、US 2 0 1 0 2 8 8 3 6 2、WO 0 6 0 8 1 7 8 0、WO 2 0 0 9 0 0 3 4 5 5、WO 2 0 0 9 0 0 8 2 7 7、WO 2 0 0 9 0 1 1 3 2 7、WO 2 0 1 4 0 0 9 3 1 0、US 2 0 0 7 2 5 2 1 4 0、US 2 0 1 5 0 6 0 8 0 4、US 2 0 1 5 0 1 2 3 0 4 7、及びUS 2 0 1 2 1 4 6 0 1 2

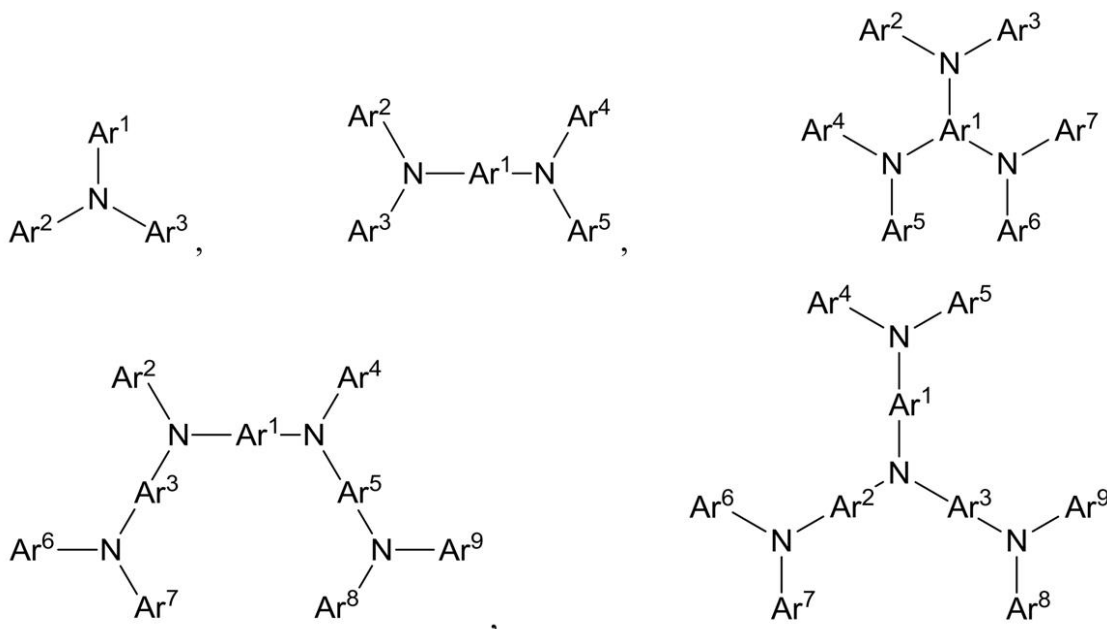
O=C1C(=O)c2cc3c(cc21)c(=O)n(c3)c4cc(F)(F)cc(F)(F)c4

【 0 1 2 8 】

40

H I L 又は H T L 中に使用される芳香族アミン誘導体の例は、下記の一般構造を含むがこれらに限定されない。

【化 1 2 1】



10

【0 1 3 0】

Ar¹ から Ar⁹ のそれぞれは、ベンゼン、ビフェニル、トリフェニル、トリフェニレン、ナフタレン、アントラセン、フェナレン、フェナントレン、フルオレン、ピレン、クリセン、ペリレン、アズレン等の芳香族炭化水素環式化合物からなる群；ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、フラン、チオフェン、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、ベンゾセレノフェン、カルバゾール、インドロカルバゾール、ビリジール、インドール、ピロロジピリジン、ピラゾール、イミダゾール、トリアゾール、オキサゾール、チアゾール、オキサジアゾール、オキサトリアゾール、ジオキサゾール、チアジアゾール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、オキサジン、オキサチアジン、オキサジアジン、インドール、ベンズイミダゾール、インダゾール、インドキサジン、ベンゾオキサゾール、ベンズイソオキサゾール、ベンゾチアゾール、キノリン、イソキノリン、シンノリン、キナゾリン、キノキサリン、ナフチリジン、フタラジン、プテリジン、キサンテン、アクリジン、フェナジン、フェノチアジン、フェノキサジン、ベンゾフロピリジン、フロジピリジン、ベンゾチエノピリジン、チエノジピリジン、ベンゾセレノフェノピリジン及びセレノフェノジピリジン等の芳香族複素環式化合物からなる群；並びに芳香族炭化水素環式基及び芳香族複素環式基から選択される同じ種類又は異なる種類の基であり、且つ、直接的に、又は酸素原子、窒素原子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子、ホウ素原子、鎖構造単位及び脂肪族環式基の少なくとも1つを介して、互いに結合している2から10個の環式構造単位からなる群から選択される。各Arは、無置換であることができる、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基によって置換されることができる。

20

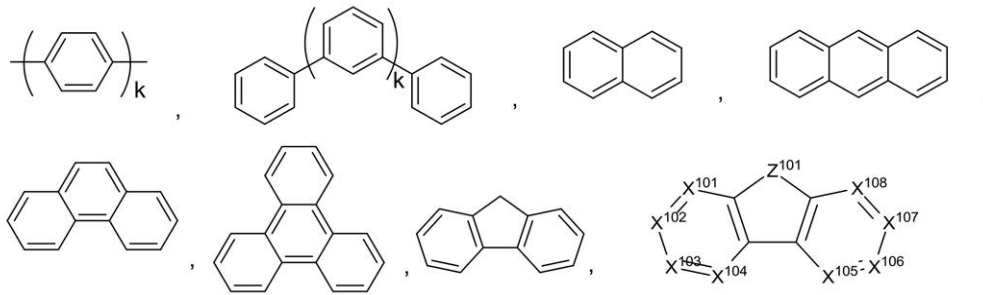
30

40

【0 1 3 1】

一態様において、Ar¹ から Ar⁹ は、

【化 1 2 2】



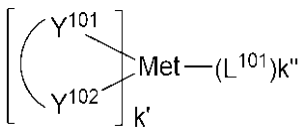
からなる群から独立に選択される。

式中、 k は 1 から 20 までの整数であり； X^{101} から X^{108} は C (C H を含む) 又は N であり； Z^{101} は N A r¹、O、又は S であり；A r¹ は、上記で定義したものと同一基を有する。

【0 1 3 2】

H I L 又は H T L 中に使用される金属錯体の例は、下記の一般式を含むがこれに限定されない。

【化 1 2 3】



式中、M e t は、40 より大きい原子量を有し得る金属であり；(Y¹⁰¹ - Y¹⁰²) は二座配位子であり、Y¹⁰¹ 及び Y¹⁰² は、C、N、O、P 及び S から独立に選択され；L¹⁰¹ は補助配位子であり； k' は、1 から金属に結合し得る配位子の最大数までの整数値であり；且つ、 $k' + k''$ は、金属に結合し得る配位子の最大数である。

【0 1 3 3】

一態様において、(Y¹⁰¹ - Y¹⁰²) は 2 - フェニルピリジン誘導体である。別の態様において、(Y¹⁰¹ - Y¹⁰²) はカルベン配位子である。別の態様において、M e t は、I r、P t、O s 及び Z n から選択される。更なる態様において、金属錯体は、F c⁺ / F c カップルに対して、溶液中で約 0.6 V 未満の最小酸化電位を有する。

【0 1 3 4】

本明細書において開示される材料と組み合わせて、O L E D 中に用いられることができる H I L 材料及び H T L 材料の非制限的な例は、これらの材料を開示する文献と共に下記に例示される。

C N 1 0 2 7 0 2 0 7 5、D E 1 0 2 0 1 2 0 0 5 2 1 5、E P 0 1 6 2 4 5 0 0、E P 0 1 6 9 8 6 1 3、E P 0 1 8 0 6 3 3 4、E P 0 1 9 3 0 9 6 4、E P 0 1 9 7 2 6 1 3、E P 0 1 9 9 7 7 9 9、E P 0 2 0 1 1 7 9 0、E P 0 2 0 5 5 7 0 0、E P 0 2 0 5 5 7 0 1、E P 1 7 2 5 0 7 9、E P 2 0 8 5 3 8 2、E P 2 6 6 0 3 0 0、E P 6 5 0 9 5 5、J P 0 7 - 0 7 3 5 2 9、J P 2 0 0 5 1 1 2 7 6 5、J P 2 0 0 7 0 9 1 7 1 9、J P 2 0 0 8 0 2 1 6 8 7、J P 2 0 1 4 - 0 0 9 1 9 6、K R 2 0 1 1 0 0 8 8 8 9 8、K R 2 0 1 3 0 0 7 7 4 7 3、T W 2 0 1 1 3 9 4 0 2、U S 0 6 5 1 7 9 5 7、U S 2 0 0 2 0 1 5 8 2 4 2、U S 2 0 0 3 0 1 6 2 0 5 3、U S 2 0 0 5 0 1 2 3 7 5 1、U S 2 0 0 6 0 1 8 2 9 9 3、U S 2 0 0 6 0 2 4 0 2 7 9、U S 2 0 0 7 0 1 4 5 8 8 8、U S 2 0 0 7 0 1 8 1 8 7 4、U S 2 0 0 7 0 2 7 8 9 3 8、U S 2 0 0 8 0 0 1 4 4 6 4、U S 2 0 0 8 0 0 9 1 0 2 5、U S 2 0 0 8 0 1 0 6 1 9 0、U S 2 0 0 8 0 1 2 4 5 7 2、U S 2 0 0 8 0 1 4 5 7 0 7、U S 2 0 0 8 0 2 2 0 2 6 5、U S 2 0 0 8 0 2 3 3 4 3 4、U S 2 0 0 8 0 3 0 3 4 1 7、U S 2 0 0 8 1 0 7 9 1 9、U S 2 0 0 9 0 1 1 5 3 2 0、U S 2 0 0 9 0 1 6 7 1 6 1、U S 2 0 0 9 0 6 6 2 3 5、U S 2 0 1 1 0 0 7 3 8 5、U S 2 0 1 1 0 1 6 3 3 0 2、U S 2 0 1 1 2 4 0 9 6 8、U S 2 0 1 1 2 7 8 5 5 1、U S 2 0 1 2 2 0 5 6 4 2、U S 2 0 1 3 2 4 1 4 0 1、U

10

20

30

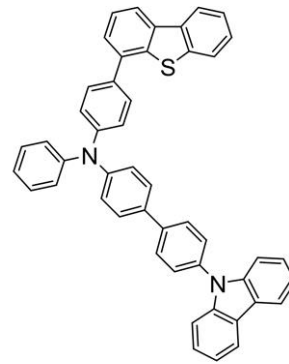
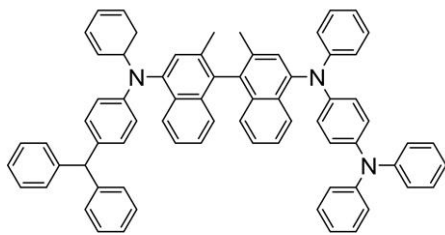
40

50

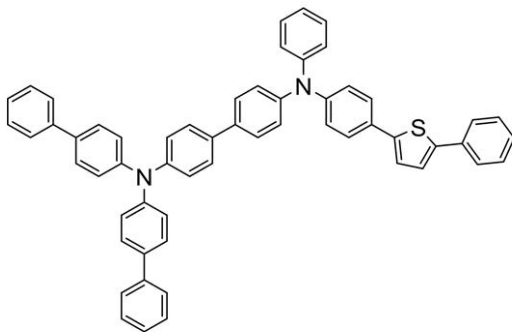
S 2 0 1 4 0 1 1 7 3 2 9、U S 2 0 1 4 1 8 3 5 1 7、U S 5 0 6 1 5 6 9、U S 5 6
3 9 9 1 4、W O 0 5 0 7 5 4 5 1、W O 0 7 1 2 5 7 1 4、W O 0 8 0 2 3 5 5 0、W
O 0 8 0 2 3 7 5 9、W O 2 0 0 9 1 4 5 0 1 6、W O 2 0 1 0 0 6 1 8 2 4、W O 2 0
1 1 0 7 5 6 4 4、W O 2 0 1 2 1 7 7 0 0 6、W O 2 0 1 3 0 1 8 5 3 0、W O 2 0 1
3 0 3 9 0 7 3、W O 2 0 1 3 0 8 7 1 4 2、W O 2 0 1 3 1 1 8 8 1 2、W O 2 0 1 3
1 2 0 5 7 7、W O 2 0 1 3 1 5 7 3 6 7、W O 2 0 1 3 1 7 5 7 4 7、W O 2 0 1 4 0
0 2 8 7 3、W O 2 0 1 4 0 1 5 9 3 5、W O 2 0 1 4 0 1 5 9 3 7、W O 2 0 1 4 0 3
0 8 7 2、W O 2 0 1 4 0 3 0 9 2 1、W O 2 0 1 4 0 3 4 7 9 1、W O 2 0 1 4 1 0 4
5 1 4、W O 2 0 1 4 1 5 7 0 1 8

10

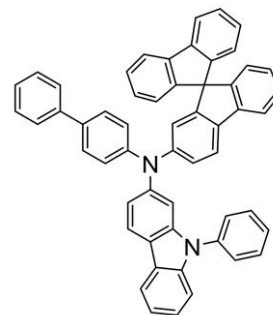
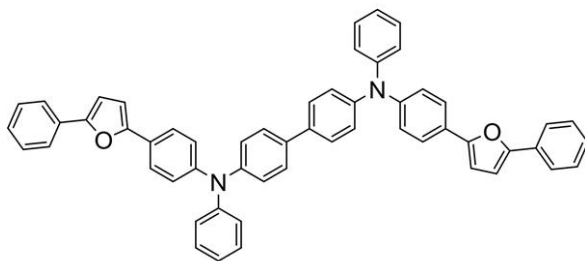
【化 1 2 4】



20

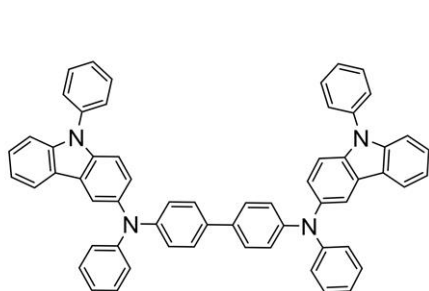


30

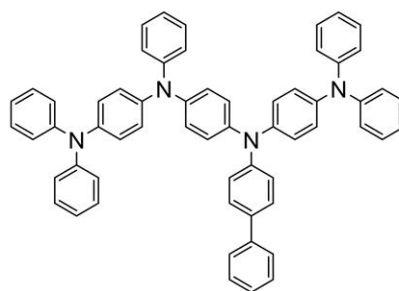


40

【化 1 2 5】

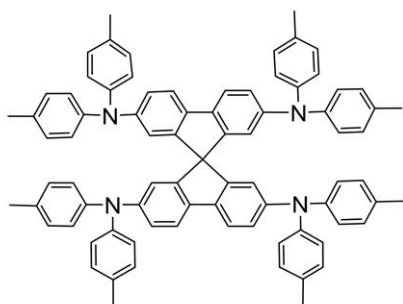


,

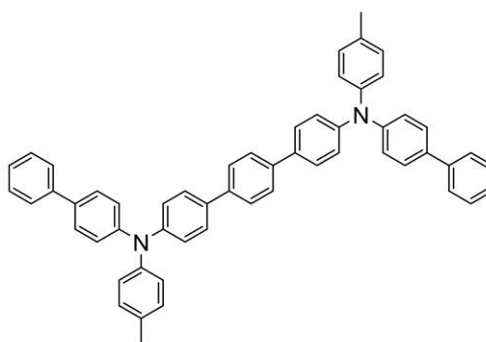


,

10

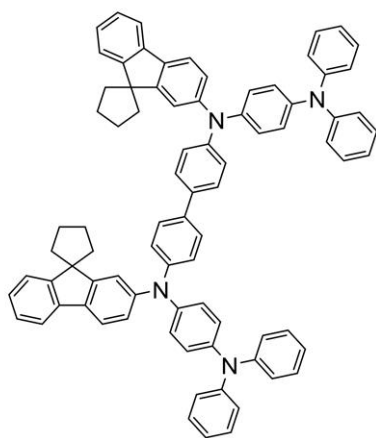


,

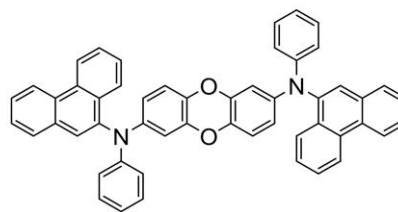


,

20

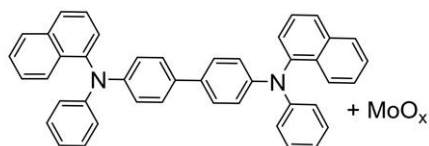


,

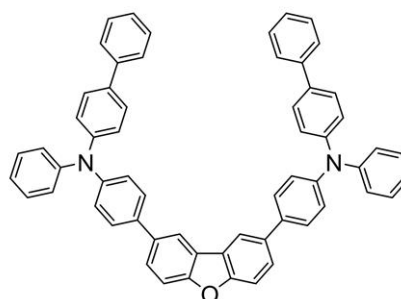


,

30

+ MoO_x

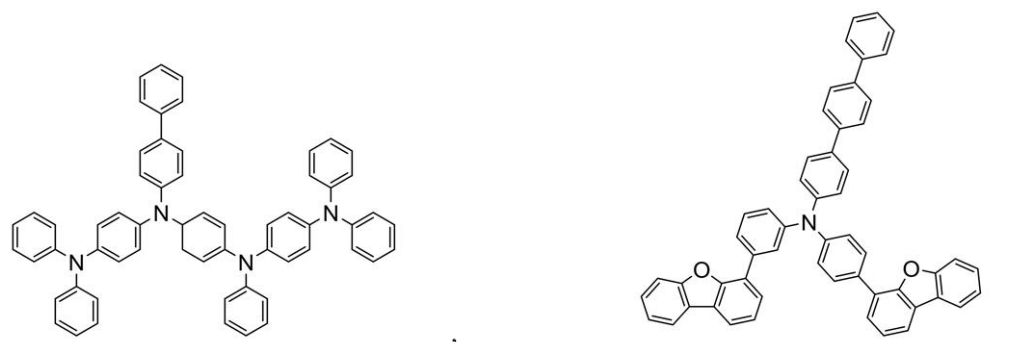
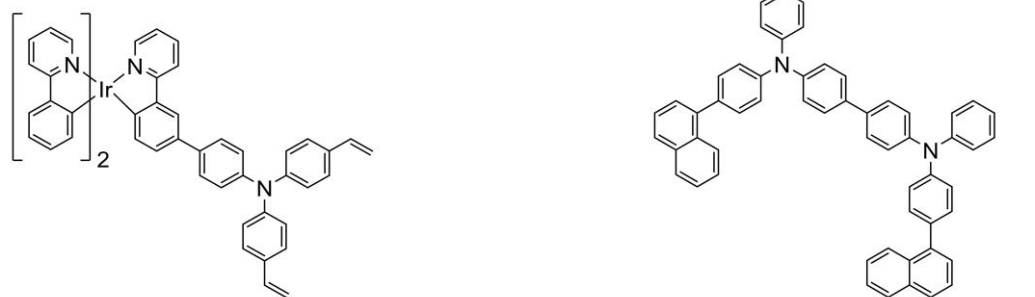
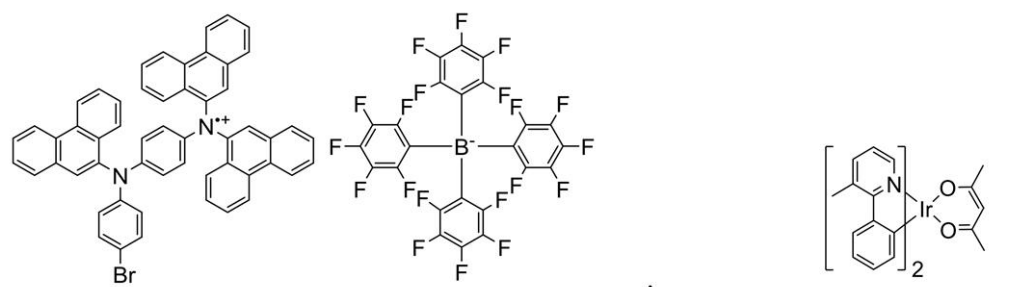
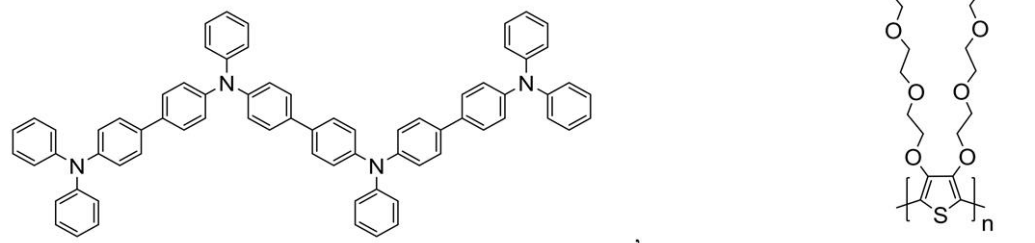
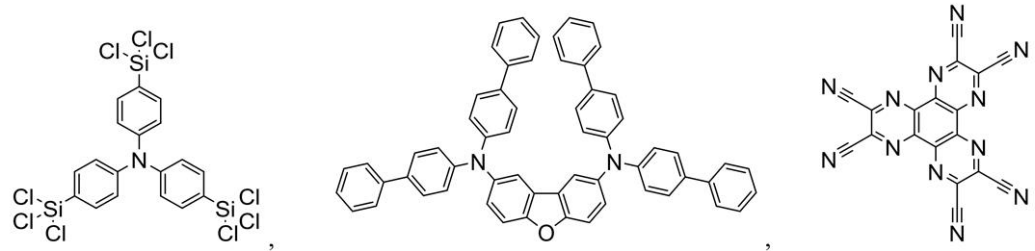
,



,

40

【化 1 2 6】



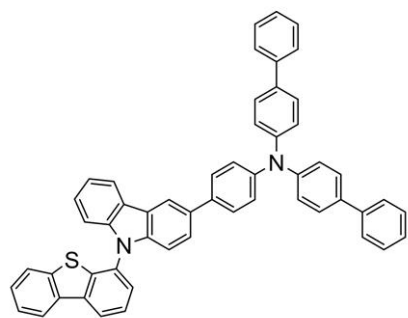
10

20

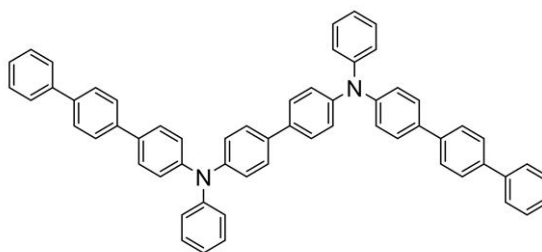
30

40

【化 1 2 7】

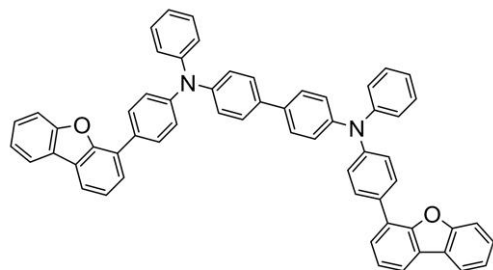


,

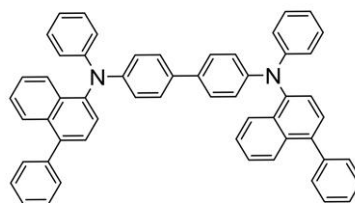


,

10

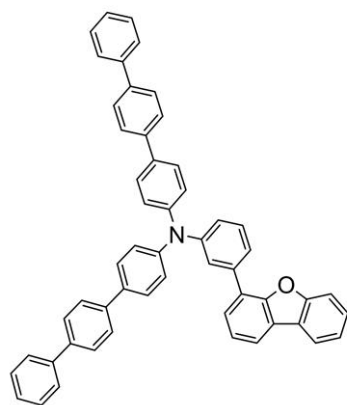


,

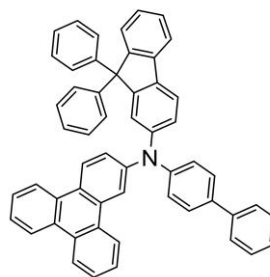


,

20

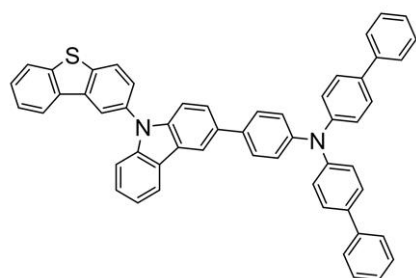


,

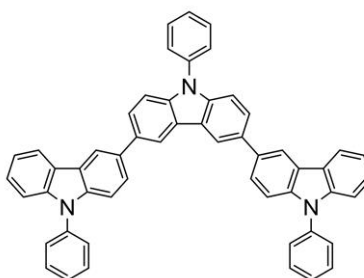


,

30

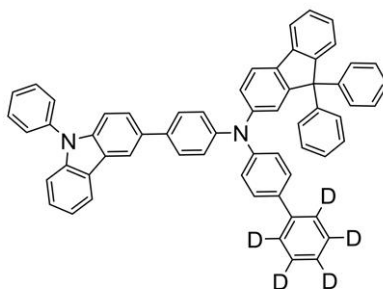
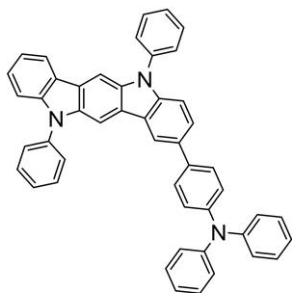


,

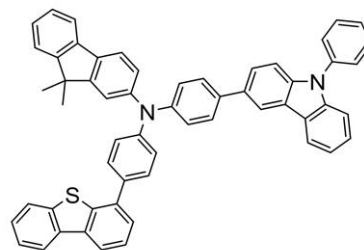
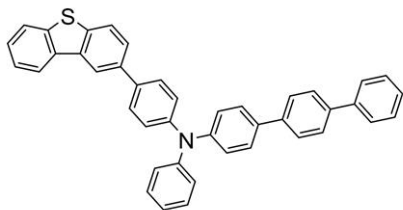


,

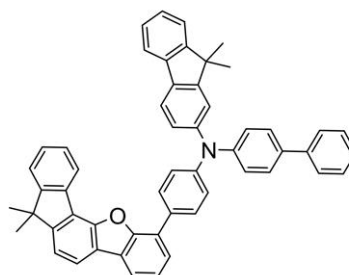
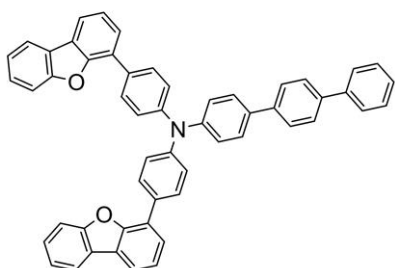
【化 1 2 8】



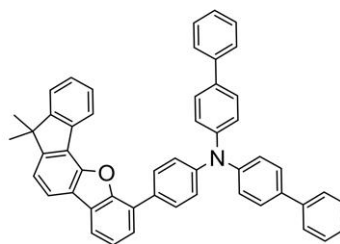
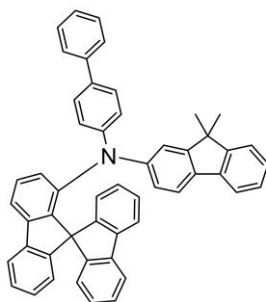
10



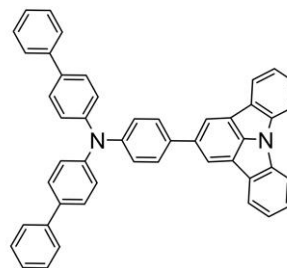
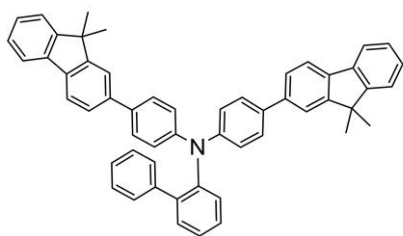
20



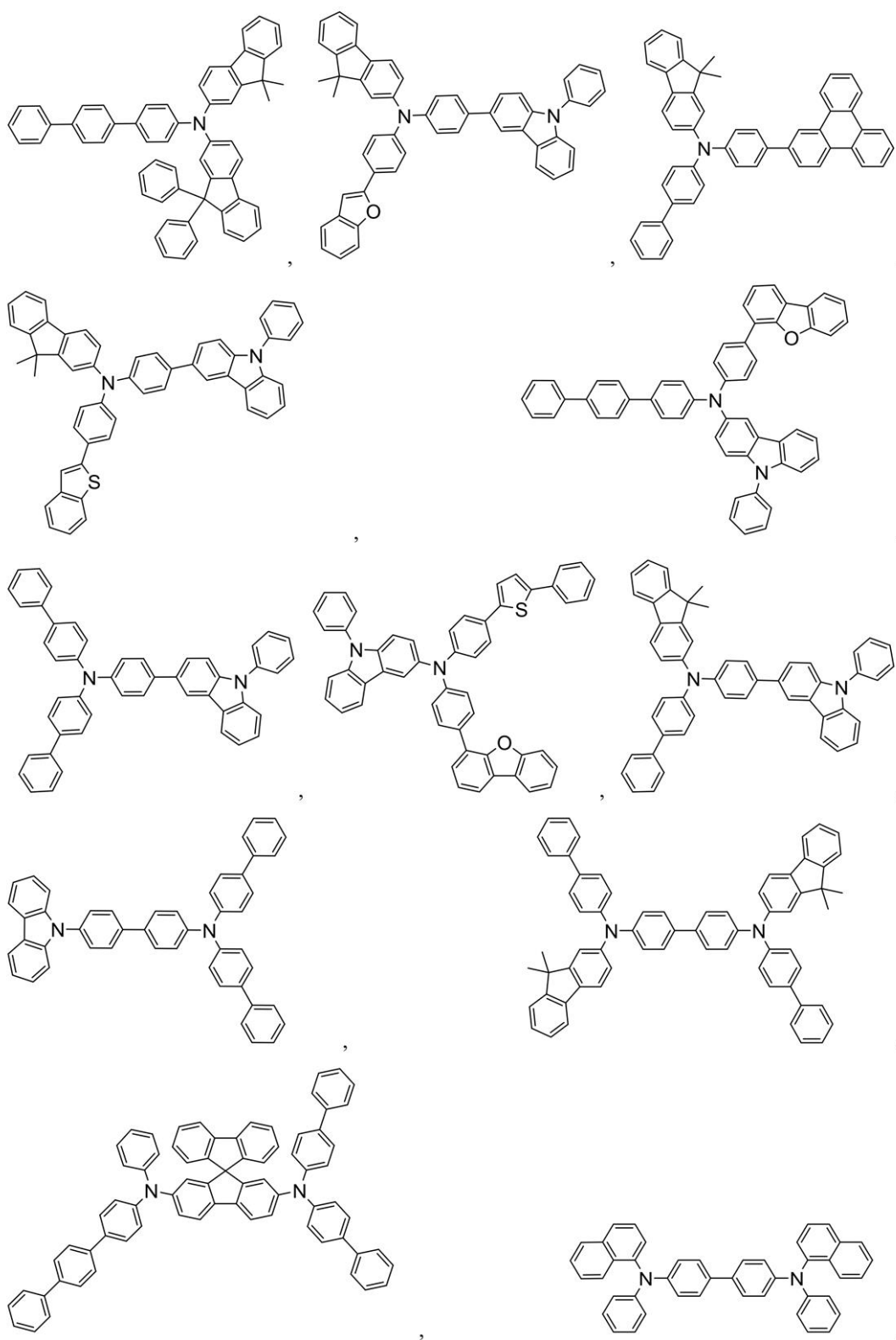
30



40



【化 1 2 9】



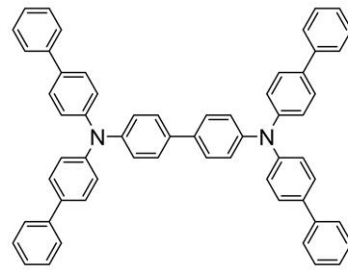
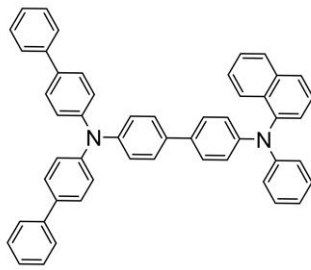
10

20

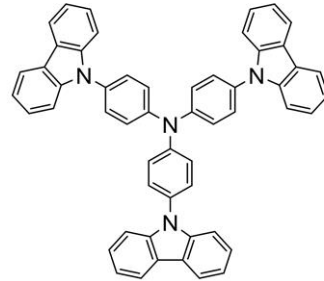
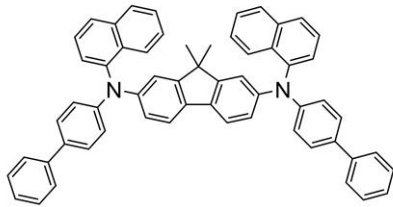
30

40

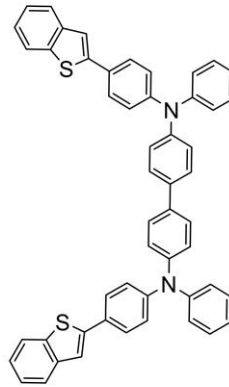
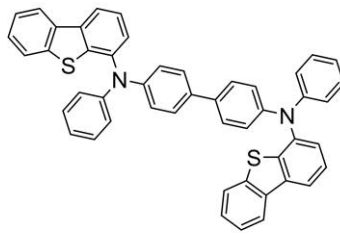
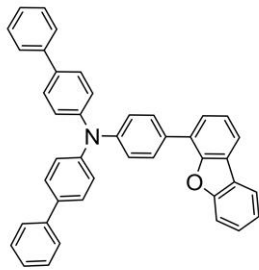
【化 1 3 0】



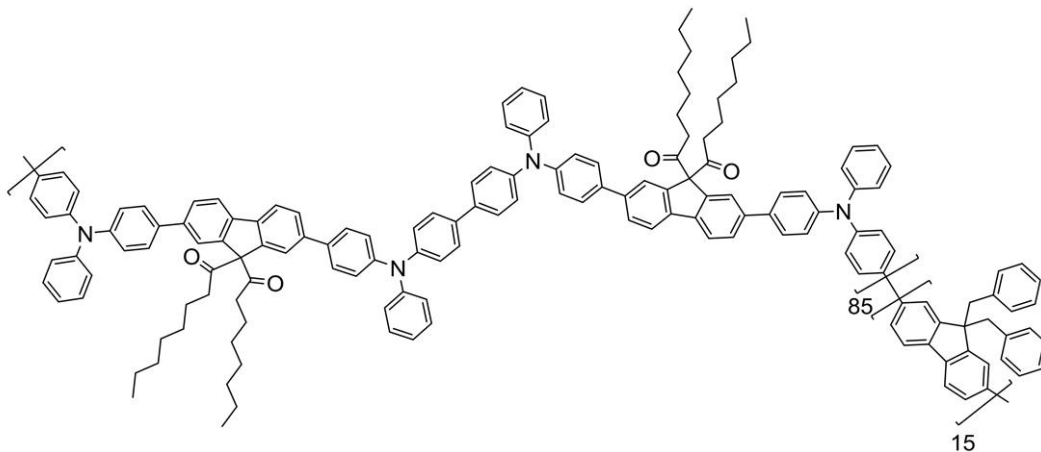
10



20



30



40

E B L :

【 0 1 3 5】

電子ブロッキング層 (E B L) は、発光層から出る電子及び / 又は励起子の数を減らすために使用されることができる。デバイス中のそのようなブロッキング層の存在は、ブロッキング層を欠く同様のデバイスと比較して、大幅に高い効率及び / 又はより長い寿命をもたらし得る。また、ブロッキング層を使用して、O L E D の所望の領域に発光を制限することもできる。幾つかの実施形態においては、E B L 材料は、E B L インターフェースに最も近接した発光体よりも高い L U M O (真空準位により近い) 及び / 又は高い三重項エネルギーを有する。幾つかの実施形態においては、E B L 材料は、E B L インターフェ

50

ースに最も近接したホストの1つ以上よりも高いLUMO（真空準位により近い）及び／又は高い三重項エネルギーを有する。1つの態様においては、EBL中に用いられる前記化合物は、下記に記載されるホストの1つとして用いられる、同じ分子又は同じ官能基を含む。

ホスト：

【0136】

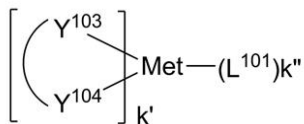
本発明の有機ELデバイスの発光層は、発光材料として少なくとも金属錯体を含むことが好ましく、前記金属錯体をドーパント材料として用いたホスト材料を含むことができる。前記ホスト材料としては特に限定されず、前記ホストの三重項エネルギーがドーパントのものよりも大きければ、任意の金属錯体又は有機化合物が用いられることができる。い

10

【0137】

ホスト材料として使用される金属錯体の例は、下記の一般式を有することが好ましい。

【化131】



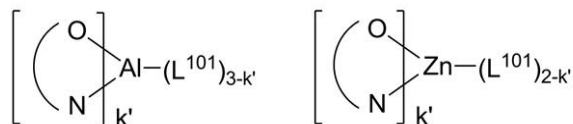
式中、Metは金属であり；(Y¹⁰³ - Y¹⁰⁴)は二座配位子であり、Y¹⁰³及びY¹⁰⁴は、C、N、O、P及びSから独立に選択され；L¹⁰¹は他の配位子であり；k'は、1から金属に結合し得る配位子の最大数までの整数値であり；且つ、k' + k''は、金属に結合し得る配位子の最大数である。

20

【0138】

一態様において、金属錯体は、下記の錯体である。

【化132】



30

式中、(O - N)は、原子O及びNに配位された金属を有する二座配位子である。

【0139】

別の態様において、Metは、Ir及びPtから選択される。更なる態様において、(Y¹⁰³ - Y¹⁰⁴)はカルベン配位子である。

【0140】

1つの態様においては、前記ホスト化合物は、ベンゼン、ビフェニル、トリフェニル、トリフェニレン、テトラフェニレン、ナフタレン、アントラセン、フェナレン、フェナントレン、フルオレン、ピレン、クリセン、ペリレン、及びアズレン等の芳香族炭化水素環式化合物からなる群；ジベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾセレノフェン、フラン、チオフェン、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、ベンゾセレノフェン、カルバゾール、インドロカルバゾール、ピリジルインドール、ピロロジピリジン、ピラゾール、イミダゾール、トリアゾール、オキサゾール、チアゾール、オキサジアゾール、オキサトリアゾール、ジオキサゾール、チアジアゾール、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、オキサジン、オキサチアジン、オキサジアジン、インドール、ベンズイミダゾール、インダゾール、インドキサジン、ベンゾオキサゾール、ベンズイソオキサゾール、ベンゾチアゾール、キノリン、イソキノリン、シンノリン、キナゾリン、キノキサリン、ナフチリジン、フタラジン、プテリジン、キサンテン、アクリジン、フェナジン、フェノチアジン、フェノキサジン、ベンゾフロピリジン、フロジピリジン、ベンゾチエノピリジン、チエノジピリジン、ベンゾセレノフェノピリジン及びセレノフェノジピリジン

40

50

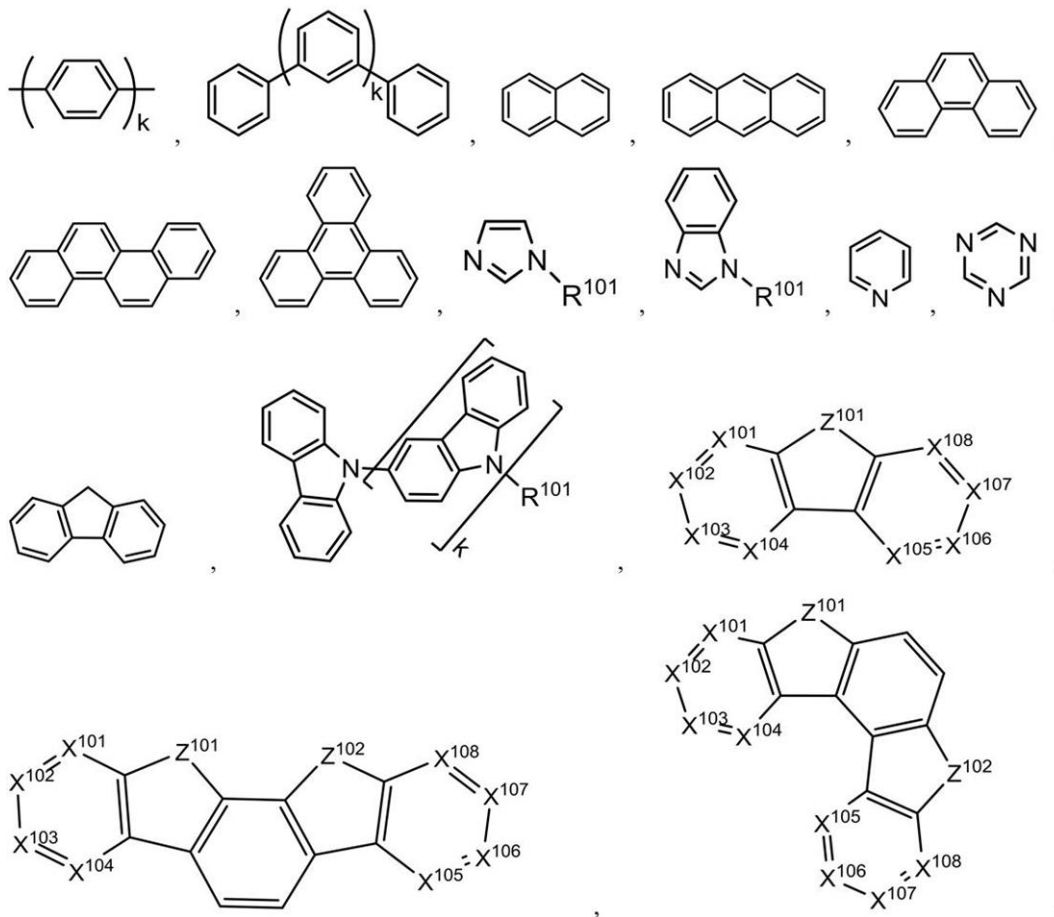
等の芳香族複素環式化合物からなる群；並びに芳香族炭化水素環式基及び芳香族複素環式基から選択される同じ種類又は異なる種類の基であり、且つ、直接的に、又は酸素原子、窒素原子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子、ホウ素原子、鎖構造単位及び脂肪族環式基の少なくとも1つを介して互いに結合している2から10個の環式構造単位からなる群から選択される群の少なくとも1つを含む。各基内の各オプションは、非置換であることができる、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基によって置換されることができる。

10

【0141】

一つの態様においては、前記ホスト化合物は、分子中に、下記基の少なくとも1つを含む。

【化133】

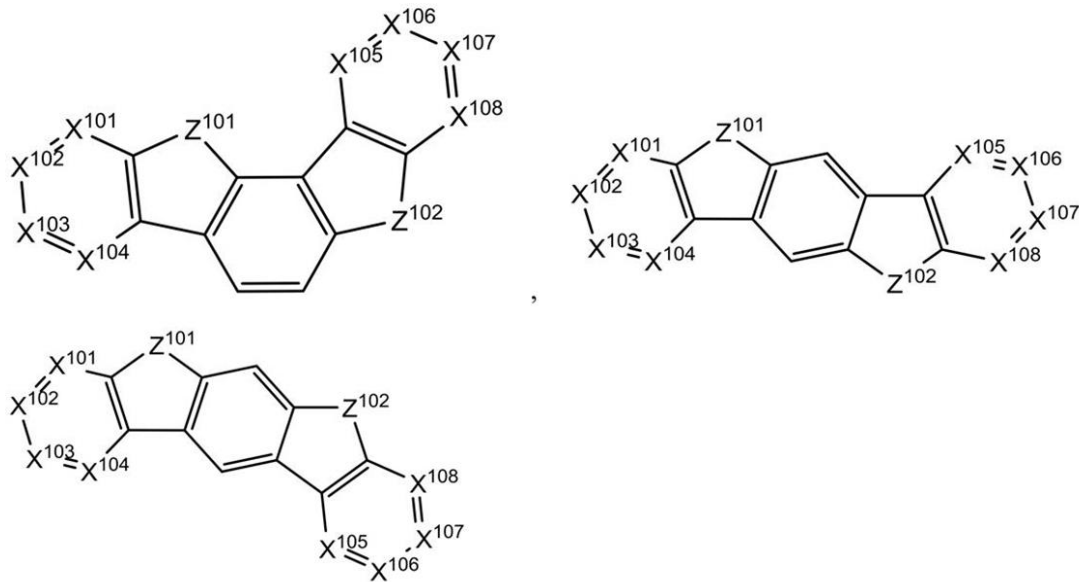


20

30

40

【化 1 3 4】



10

式中、 R^{101} は、水素、重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、及びこれらの組合せからなる群から選択され、それがアリール又はヘテロアリールである場合、上記で言及したArのものと同様の定義を有する。 k は0から20又は1から20までの整数である。 $X^{101} \sim X^{108}$ は、独立して、C(CHを含む)又はNから選択される。 Z^{101} 及び Z^{102} は、独立して、 NR^{101} 、O、又はSから選択される。

20

【0142】

本明細書において開示される材料と組み合わせて、OLED中に用いられることができるホスト材料の非制限的な例は、これらの材料を開示する文献と共に下記に例示される。

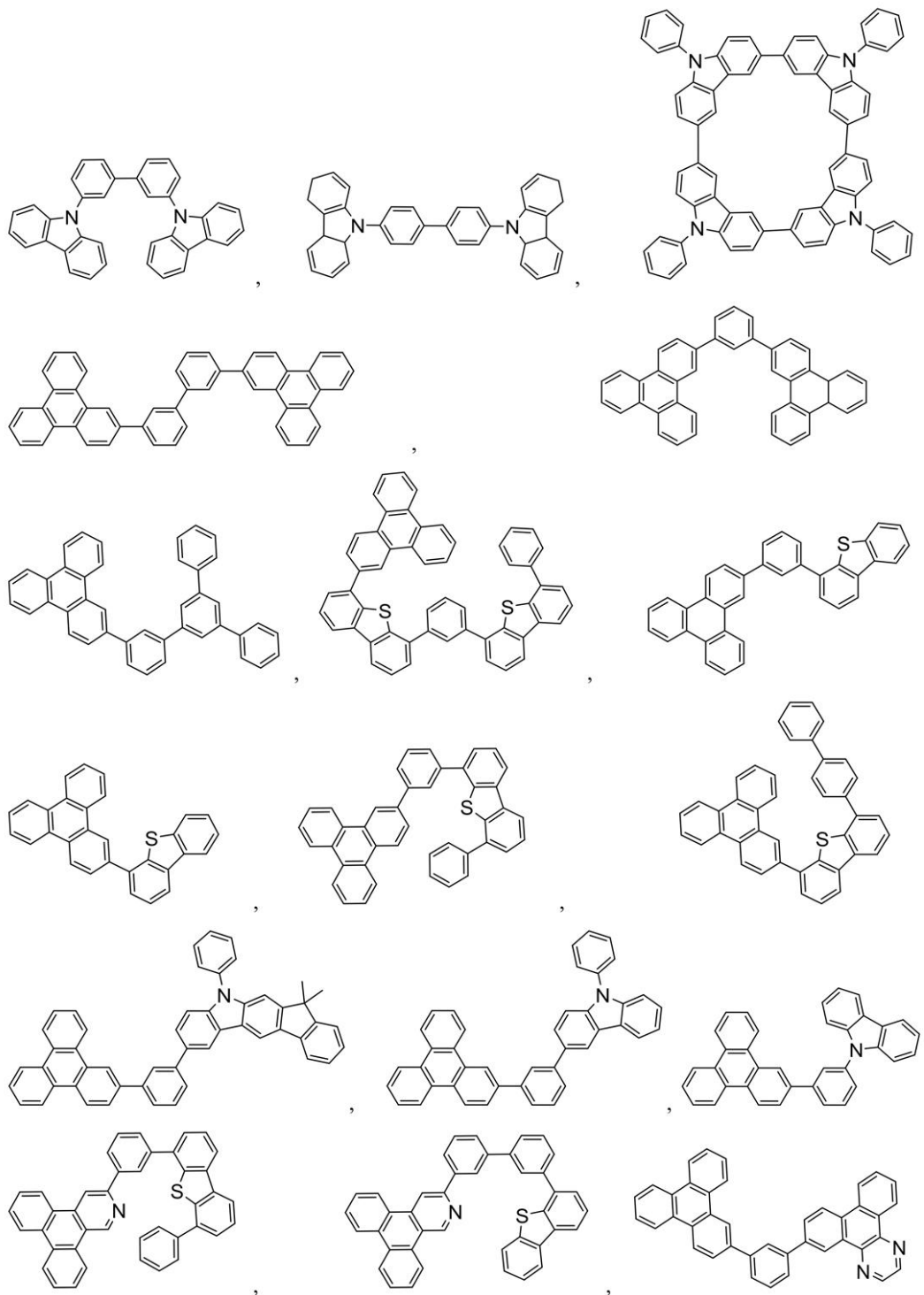
30

EP2034538、EP2034538A、EP2757608、JP2007254297、KR20100079458、KR20120088644、KR20120129733、KR20130115564、TW201329200、US20030175553、US20050238919、US20060280965、US20090017330、US20090030202、US20090167162、US20090302743、US20090309488、US20100012931、US20100084966、US20100187984、US2010187984、US2012075273、US2012126221、US2013009543、US2013105787、US2013175519、US2014001446、US20140183503、US20140225088、US2014034914、US7154114、WO2001039234、WO2004093207、WO2005014551、WO2005089025、WO2006072002、WO2006114966、WO2007063754、WO2008056746、WO2009003898、WO2009021126、WO2009063833、WO2009066778、WO2009066779、WO2009086028、WO2010056066、WO2010107244、WO2011081423、WO2011081431、WO2011086863、WO2012128298、WO2012133644、WO2012133649、WO2013024872、WO2013035275、WO2013081315、WO2013191404、WO2014142472、US20170263869、US20160163995、US9466803

40

50

【化 1 3 5】



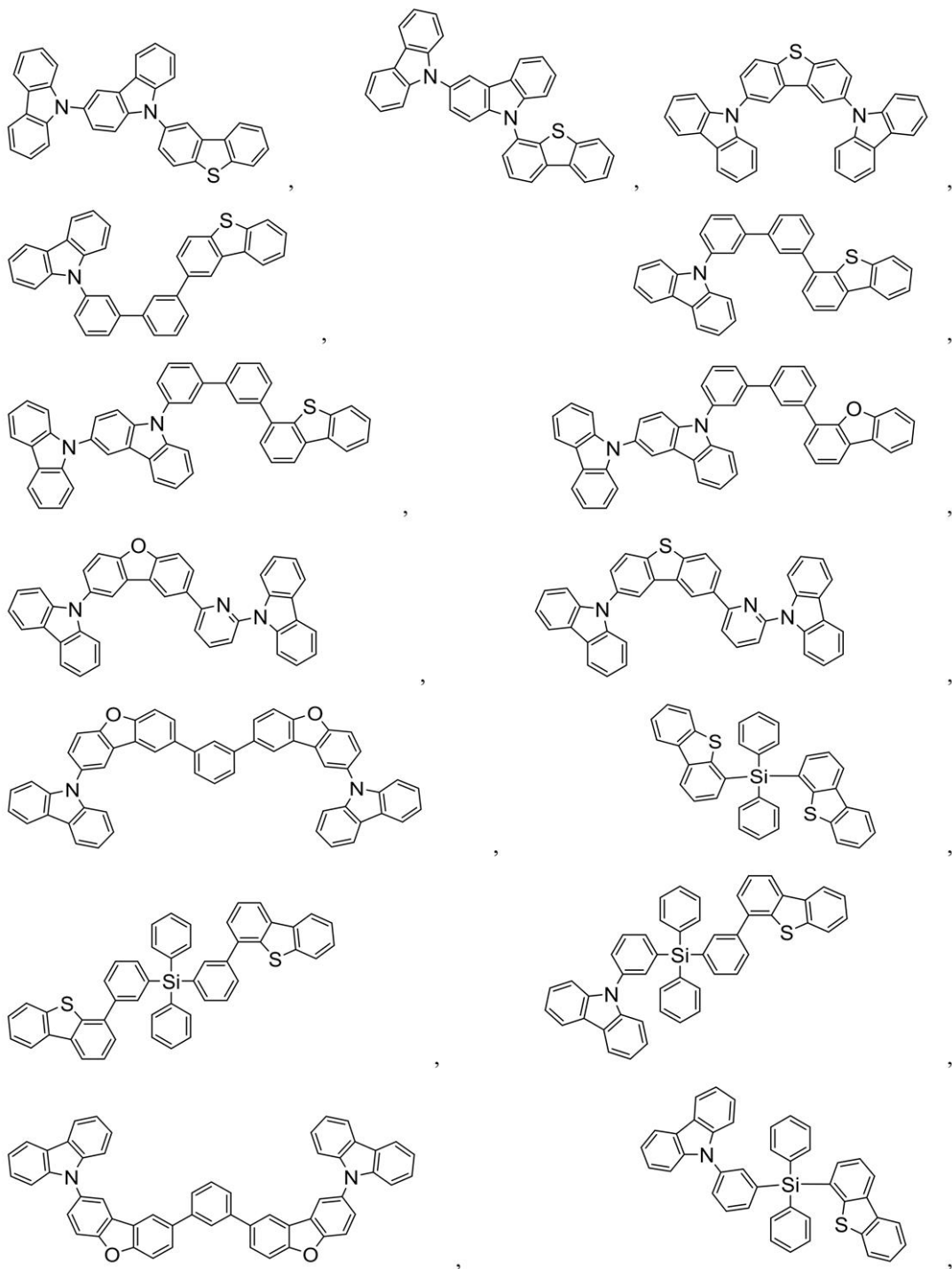
10

20

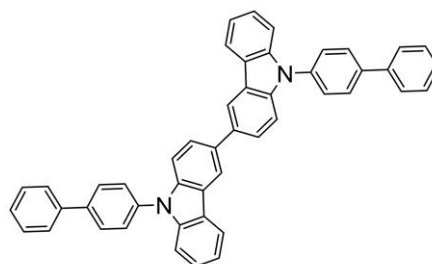
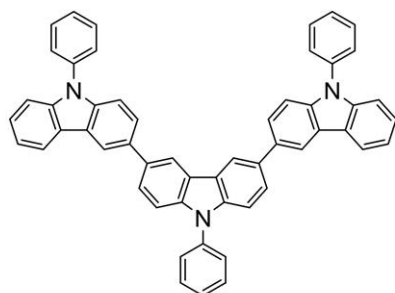
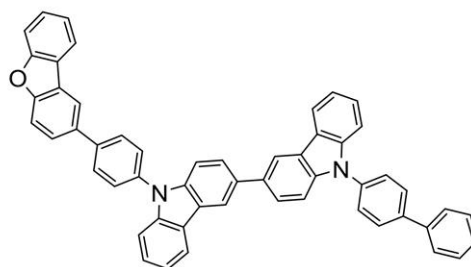
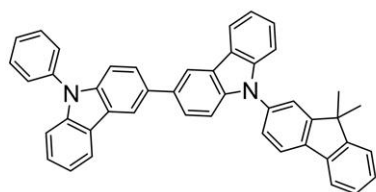
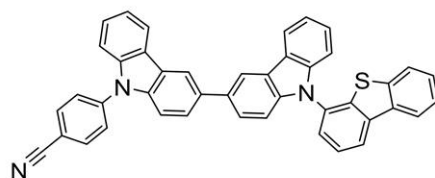
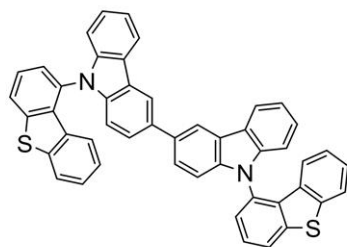
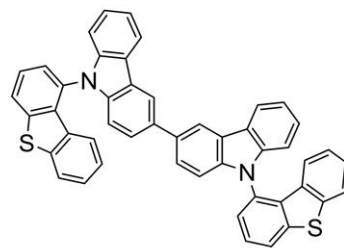
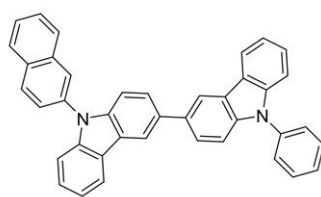
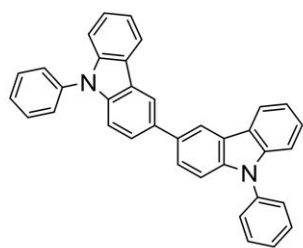
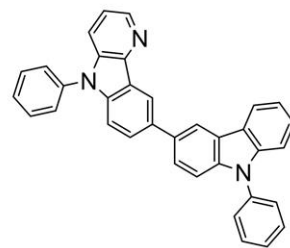
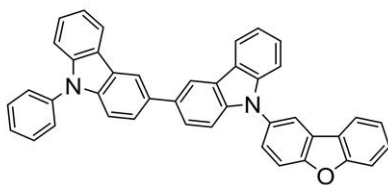
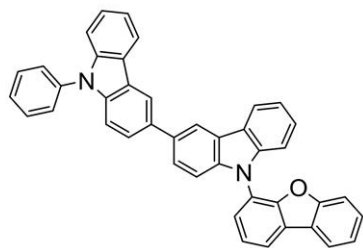
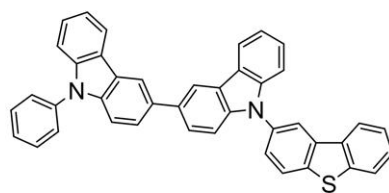
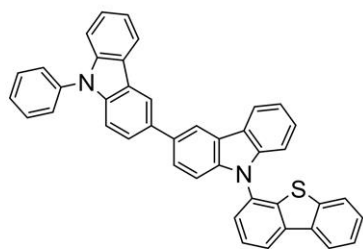
30

40

【化 1 3 6】



【化 1 3 7】



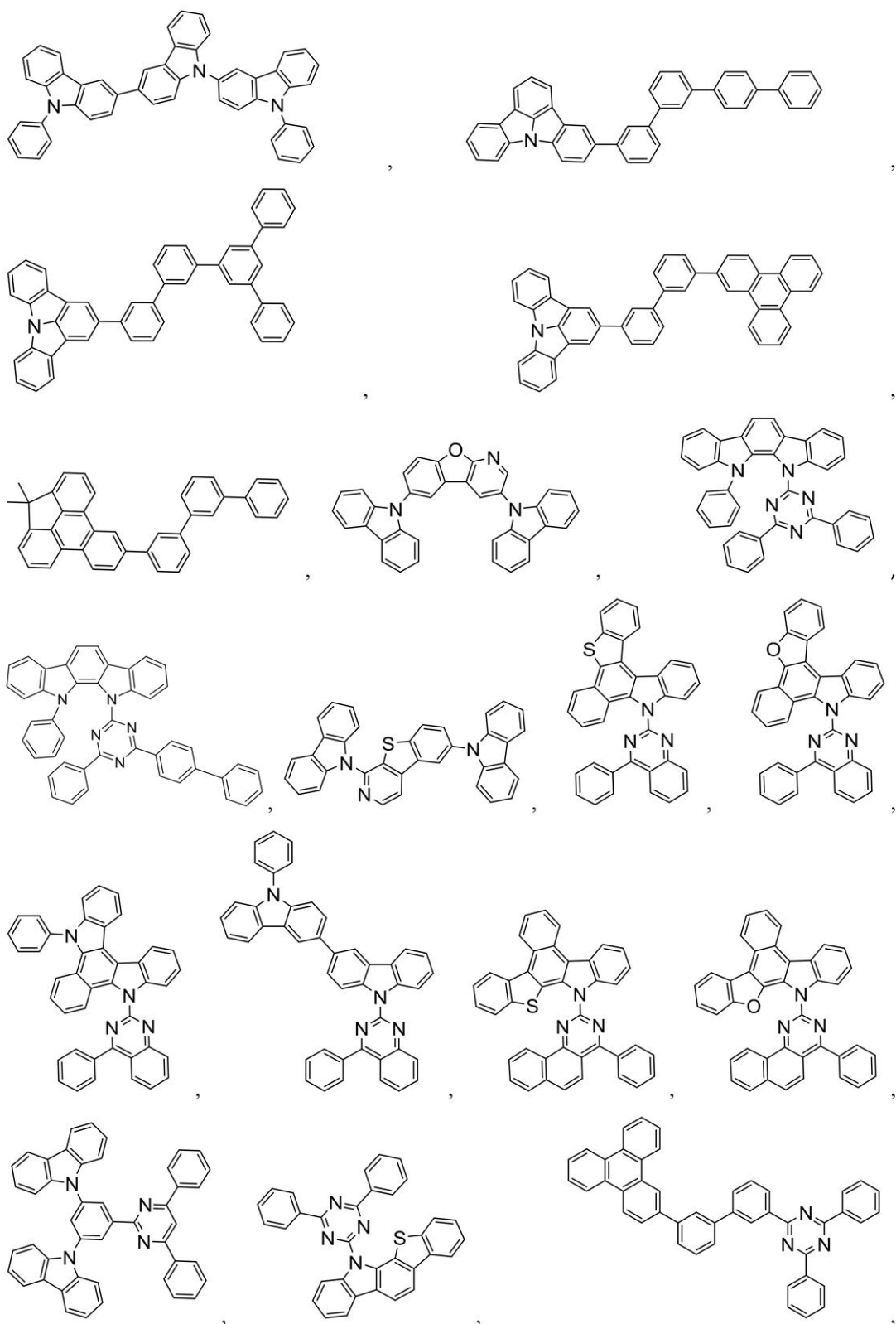
10

20

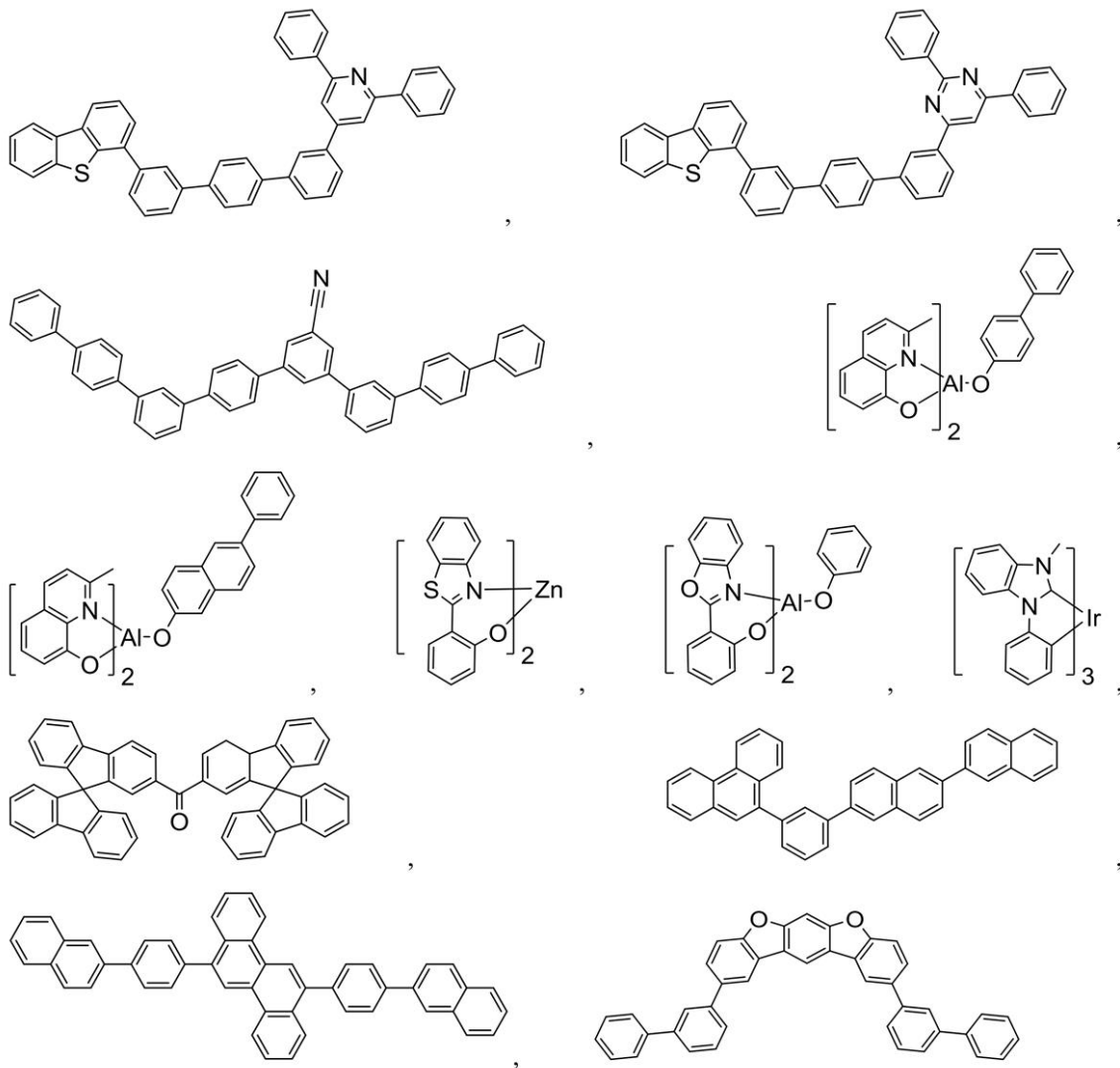
30

40

【化 1 3 8】



【化 1 3 9】



10

20

30

追加の発光体：

【0 1 4 3】

1つ以上の追加の発光体ドーパントを本開示の化合物と共に使用することができる。前記追加の発光体ドーパントの例としては、特に限定されず、前記化合物が典型的に発光体材料として用いられるものであれば、いずれの化合物も用いられることができる。好適な発光体材料の例としては、リン光、蛍光、熱活性化遅延蛍光、即ちTADF（E型遅延蛍光とも言われる）、三重項-三重項消滅、又はこれらの過程の組合せを介して、発光を生成することができる化合物が挙げられるが、これらに限定されない。

【0 1 4 4】

本明細書において開示される材料と組み合わせて、OLED中に用いられることができる発光体材料の非制限的な例は、これらの材料を開示する文献と共に下記に例示される。

CN 1 0 3 6 9 4 2 7 7、CN 1 6 9 6 1 3 7、EB 0 1 2 3 8 9 8 1、EP 0 1 2 3 9 5 2 6、EP 0 1 9 6 1 7 4 3、EP 1 2 3 9 5 2 6、EP 1 2 4 4 1 5 5、EP 1 6 4 2 9 5 1、EP 1 6 4 7 5 5 4、EP 1 8 4 1 8 3 4、EP 1 8 4 1 8 3 4 B、EP 2 0 6 2 9 0 7、EP 2 7 3 0 5 8 3、JP 2 0 1 2 0 7 4 4 4 4、JP 2 0 1 3 1 1 0 2 6 3、JP 4 4 7 8 5 5 5、KR 1 0 2 0 0 9 0 1 3 3 6 5 2、KR 2 0 1 2 0 0 3 2 0 5 4、KR 2 0 1 3 0 0 4 3 4 6 0、TW 2 0 1 3 3 2 9 8 0、US 0 6 6 9 9 5 9 9、US 0 6 9 1 6 5 5 4、US 2 0 0 1 0 0 1 9 7 8 2、US 2 0 0 2 0 0 3 4 6 5 6、US 2 0 0 3 0 0 6 8 5 2 6、US 2 0 0 3 0 0 7 2 9 6 4、US 2 0 0 3 0 1 3 8 6 5 7、US 2 0 0 5 0 1 2 3 7 8 8、US 2 0 0 5 0 2 4 4 6 7 3、US 2 0 0 5 1 2 3 7 9

40

50

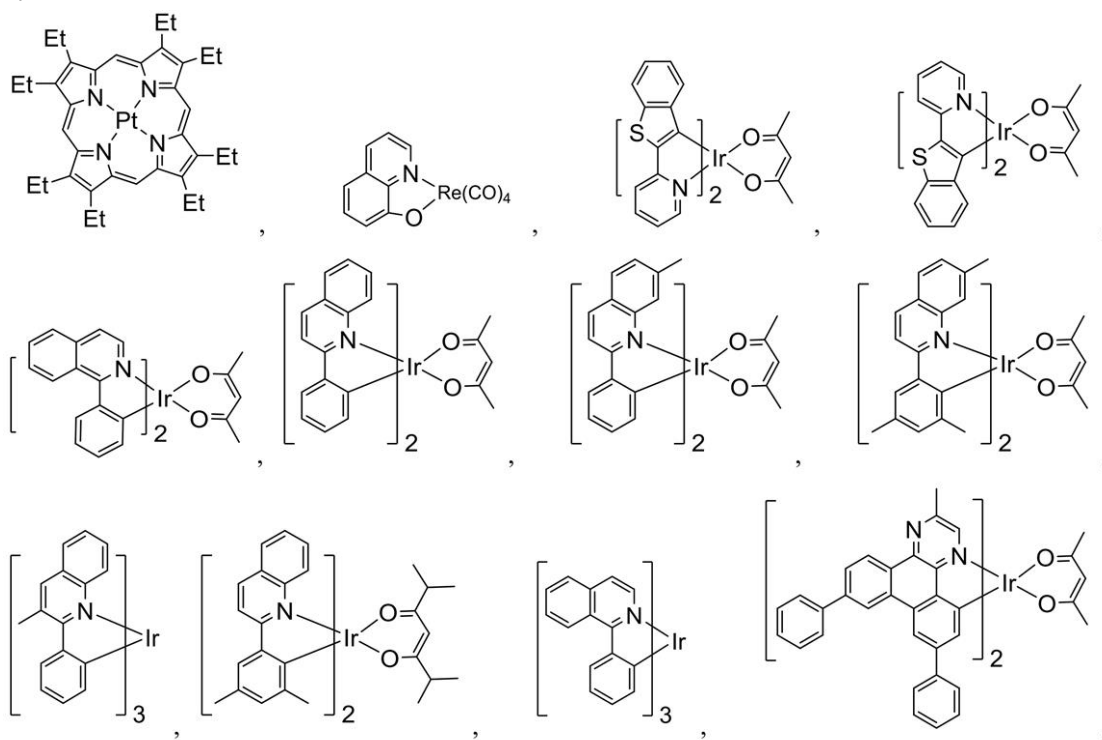
1、US 2 0 0 5 2 6 0 4 4 9、US 2 0 0 6 0 0 0 8 6 7 0、US 2 0 0 6 0 0 6 5 8
9 0、US 2 0 0 6 0 1 2 7 6 9 6、US 2 0 0 6 0 1 3 4 4 5 9、US 2 0 0 6 0 1 3
4 4 6 2、US 2 0 0 6 0 2 0 2 1 9 4、US 2 0 0 6 0 2 5 1 9 2 3、US 2 0 0 7 0
0 3 4 8 6 3、US 2 0 0 7 0 0 8 7 3 2 1、US 2 0 0 7 0 1 0 3 0 6 0、US 2 0 0
7 0 1 1 1 0 2 6、US 2 0 0 7 0 1 9 0 3 5 9、US 2 0 0 7 0 2 3 1 6 0 0、US 2
0 0 7 0 3 4 8 6 3、US 2 0 0 7 1 0 4 9 7 9、US 2 0 0 7 1 0 4 9 8 0、US 2 0
0 7 1 3 8 4 3 7、US 2 0 0 7 2 2 4 4 5 0、US 2 0 0 7 2 7 8 9 3 6、US 2 0 0
8 0 0 2 0 2 3 7、US 2 0 0 8 0 2 3 3 4 1 0、US 2 0 0 8 0 2 6 1 0 7 6、US 2
0 0 8 0 2 9 7 0 3 3、US 2 0 0 8 0 5 8 5 1、US 2 0 0 8 1 6 1 5 6 7、US 2 0
0 8 2 1 0 9 3 0、US 2 0 0 9 0 0 3 9 7 7 6、US 2 0 0 9 0 1 0 8 7 3 7、US 2
0 0 9 0 1 1 5 3 2 2、US 2 0 0 9 0 1 7 9 5 5 5、US 2 0 0 9 0 8 5 4 7 6、US
2 0 0 9 1 0 4 4 7 2、US 2 0 1 0 0 0 9 0 5 9 1、US 2 0 1 0 0 1 4 8 6 6 3、U
S 2 0 1 0 0 2 4 4 0 0 4、US 2 0 1 0 0 2 9 5 0 3 2、US 2 0 1 0 1 0 2 7 1 6、
US 2 0 1 0 1 0 5 9 0 2、US 2 0 1 0 2 4 4 0 0 4、US 2 0 1 0 2 7 0 9 1 6、U
S 2 0 1 1 0 0 5 7 5 5 9、US 2 0 1 1 0 1 0 8 8 2 2、US 2 0 1 1 0 2 0 4 3 3 3
、US 2 0 1 1 2 1 5 7 1 0、US 2 0 1 1 2 2 7 0 4 9、US 2 0 1 1 2 8 5 2 7 5、
US 2 0 1 2 2 9 2 6 0 1、US 2 0 1 3 0 1 4 6 8 4 8、US 2 0 1 3 0 3 3 1 7 2、
US 2 0 1 3 1 6 5 6 5 3、US 2 0 1 3 1 8 1 1 9 0、US 2 0 1 3 3 3 4 5 2 1、U
S 2 0 1 4 0 2 4 6 6 5 6、US 2 0 1 4 1 0 3 3 0 5、US 6 3 0 3 2 3 8、US 6 4
1 3 6 5 6、US 6 6 5 3 6 5 4、US 6 6 7 0 6 4 5、US 6 6 8 7 2 6 6、US 6 8
3 5 4 6 9、US 6 9 2 1 9 1 5、US 7 2 7 9 7 0 4、US 7 3 3 2 2 3 2、US 7 3
7 8 1 6 2、US 7 5 3 4 5 0 5、US 7 6 7 5 2 2 8、US 7 7 2 8 1 3 7、US 7 7
4 0 9 5 7、US 7 7 5 9 4 8 9、US 7 9 5 1 9 4 7、US 8 0 6 7 0 9 9、US 8 5
9 2 5 8 6、US 8 8 7 1 3 6 1、WO 0 6 0 8 1 9 7 3、WO 0 6 1 2 1 8 1 1、WO
0 7 0 1 8 0 6 7、WO 0 7 1 0 8 3 6 2、WO 0 7 1 1 5 9 7 0、WO 0 7 1 1 5 9 8
1、WO 0 8 0 3 5 5 7 1、WO 2 0 0 2 0 1 5 6 4 5、WO 2 0 0 3 0 4 0 2 5 7、W
O 2 0 0 5 0 1 9 3 7 3、WO 2 0 0 6 0 5 6 4 1 8、WO 2 0 0 8 0 5 4 5 8 4、WO
2 0 0 8 0 7 8 8 0 0、WO 2 0 0 8 0 9 6 6 0 9、WO 2 0 0 8 1 0 1 8 4 2、WO 2
0 0 9 0 0 0 6 7 3、WO 2 0 0 9 0 5 0 2 8 1、WO 2 0 0 9 1 0 0 9 9 1、WO 2 0
1 0 0 2 8 1 5 1、WO 2 0 1 0 0 5 4 7 3 1、WO 2 0 1 0 0 8 6 0 8 9、WO 2 0 1
0 1 1 8 0 2 9、WO 2 0 1 1 0 4 4 9 8 8、WO 2 0 1 1 0 5 1 4 0 4、WO 2 0 1 1
1 0 7 4 9 1、WO 2 0 1 2 0 2 0 3 2 7、WO 2 0 1 2 1 6 3 4 7 1、WO 2 0 1 3 0
9 4 6 2 0、WO 2 0 1 3 1 0 7 4 8 7、WO 2 0 1 3 1 7 4 4 7 1、WO 2 0 1 4 0 0
7 5 6 5、WO 2 0 1 4 0 0 8 9 8 2、WO 2 0 1 4 0 2 3 3 7 7、WO 2 0 1 4 0 2 4
1 3 1、WO 2 0 1 4 0 3 1 9 7 7、WO 2 0 1 4 0 3 8 4 5 6、WO 2 0 1 4 1 1 2 4
5 0

10

20

30

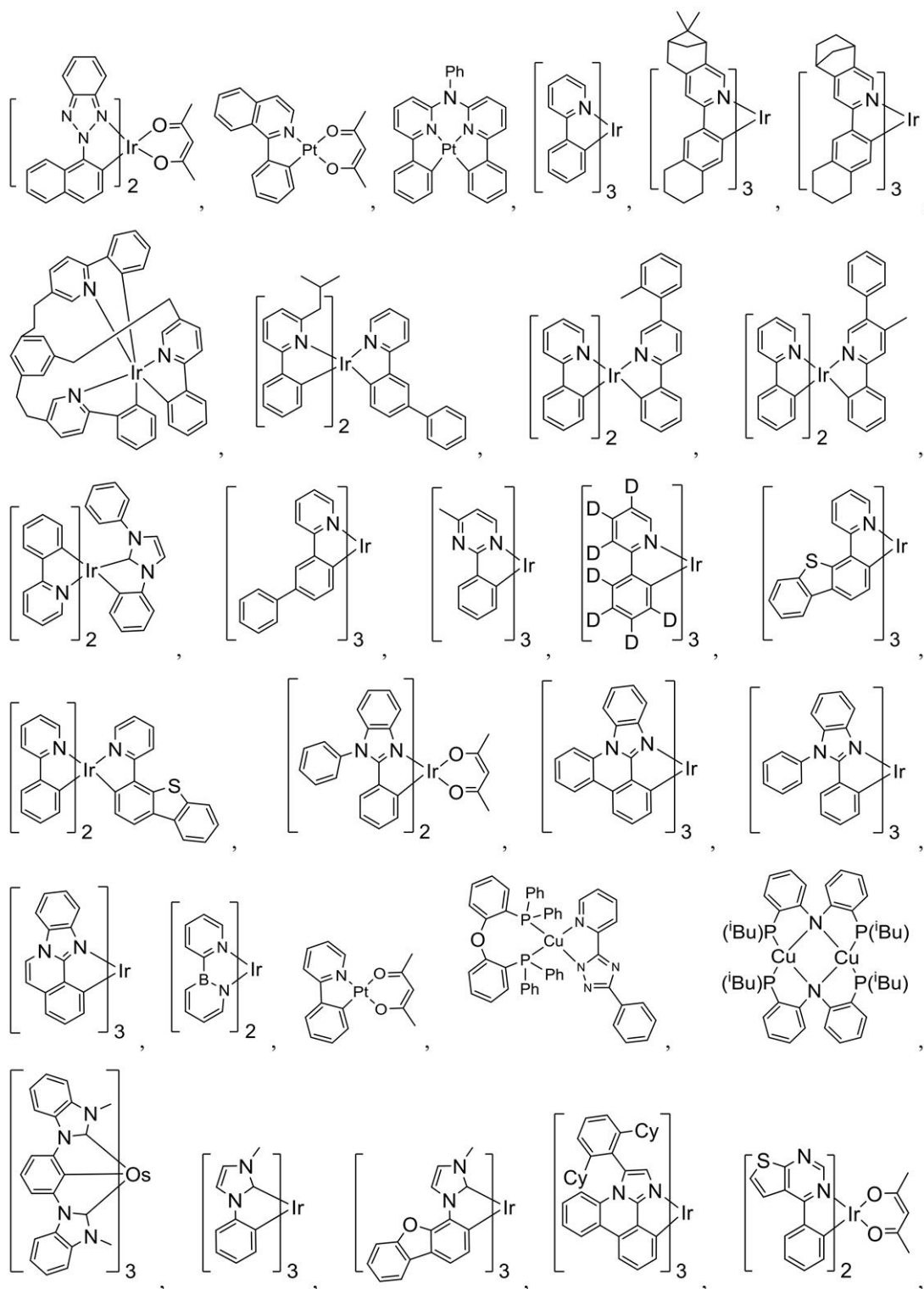
【化 1 4 0】



10

20

【化 1 4 1】



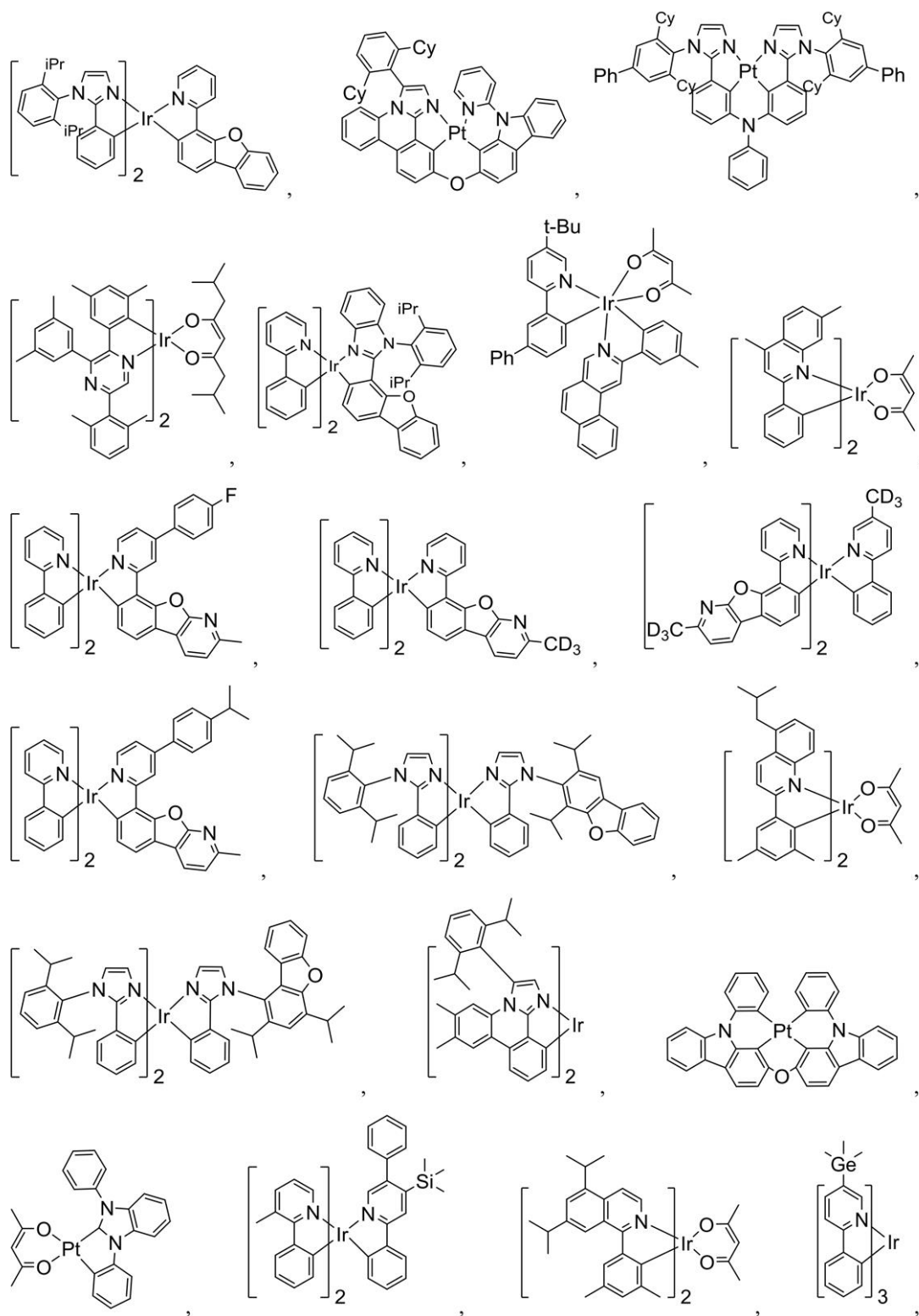
10

20

30

40

【化 1 4 2】



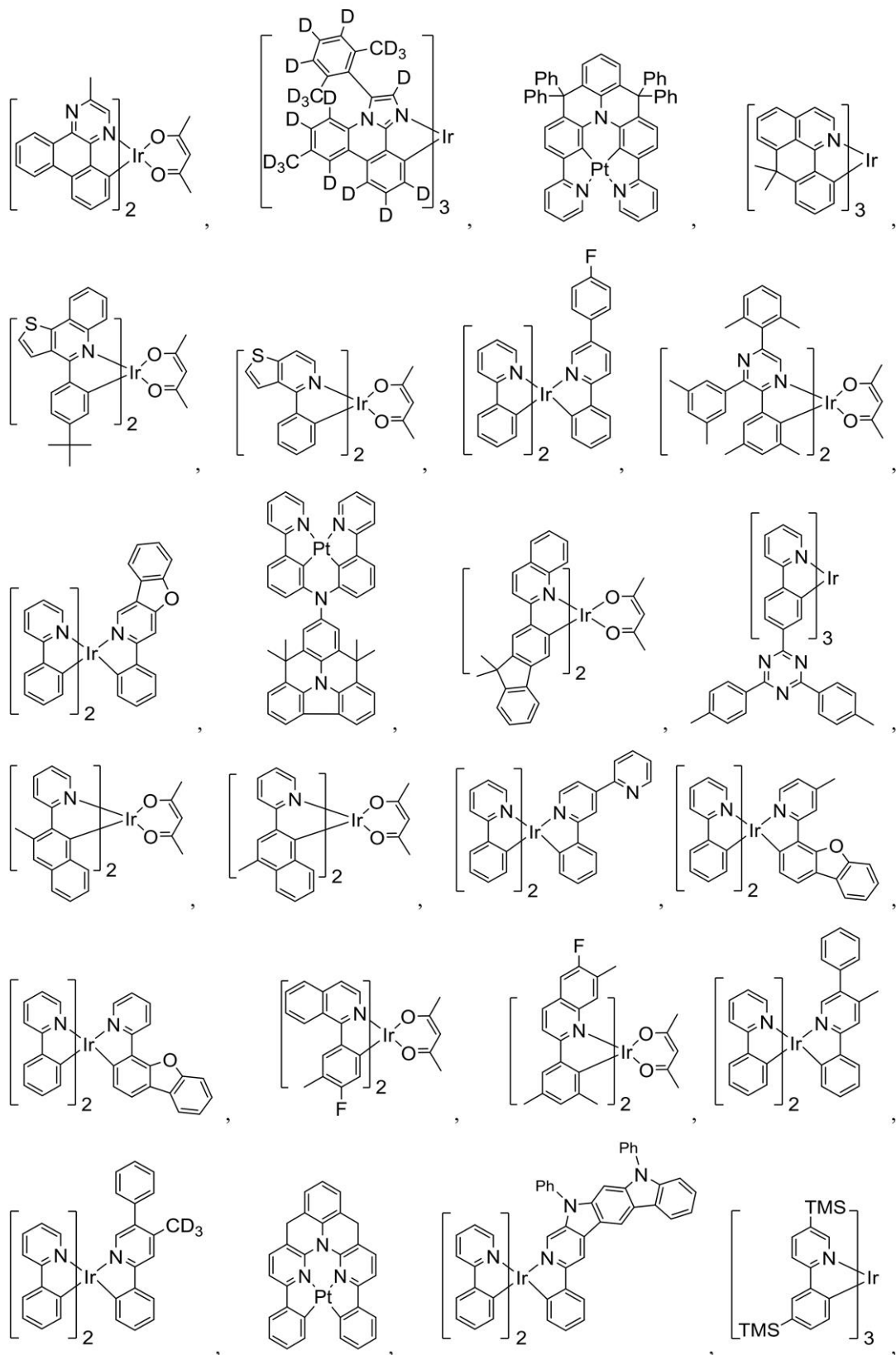
10

20

30

40

【化 1 4 3】



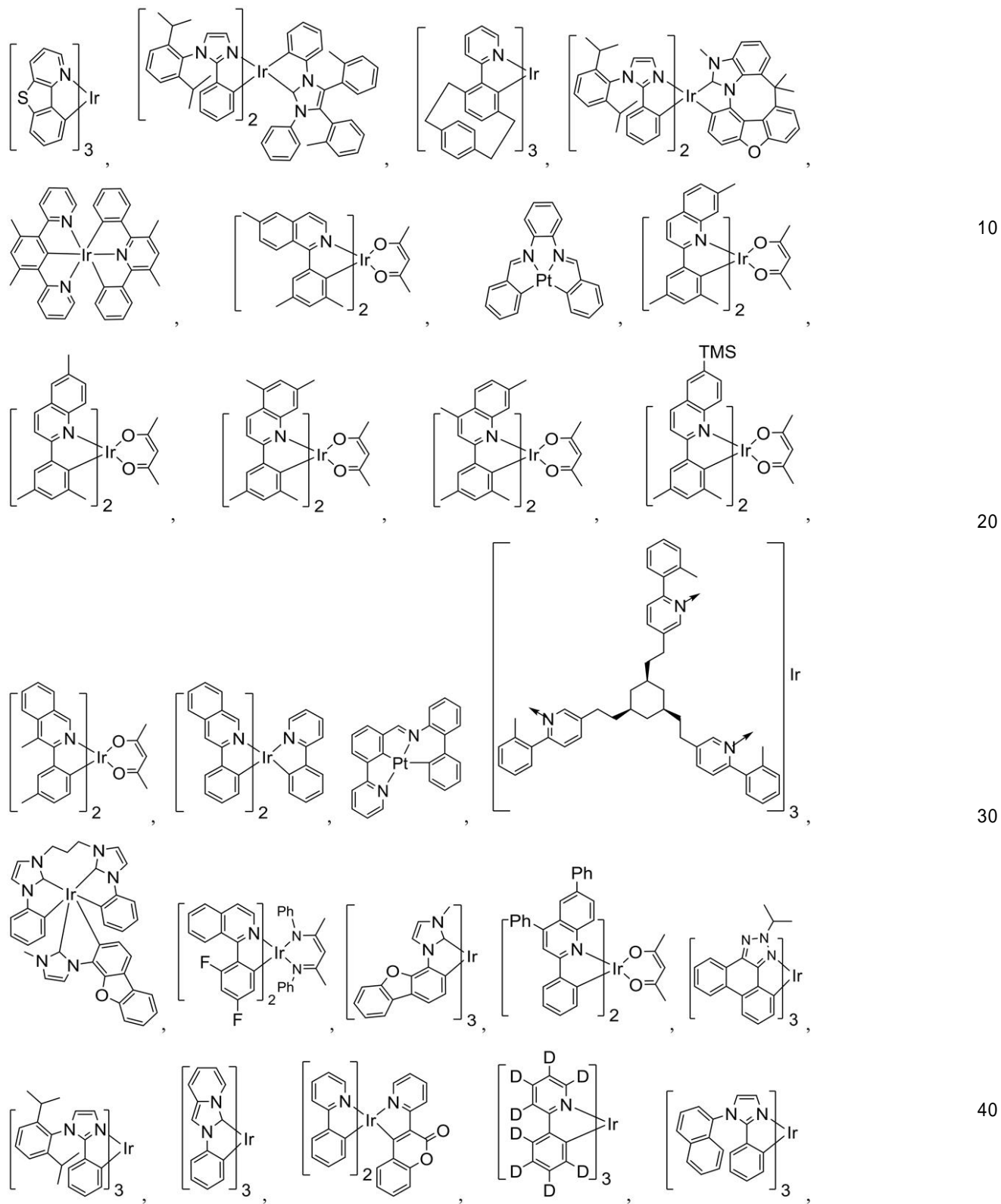
10

20

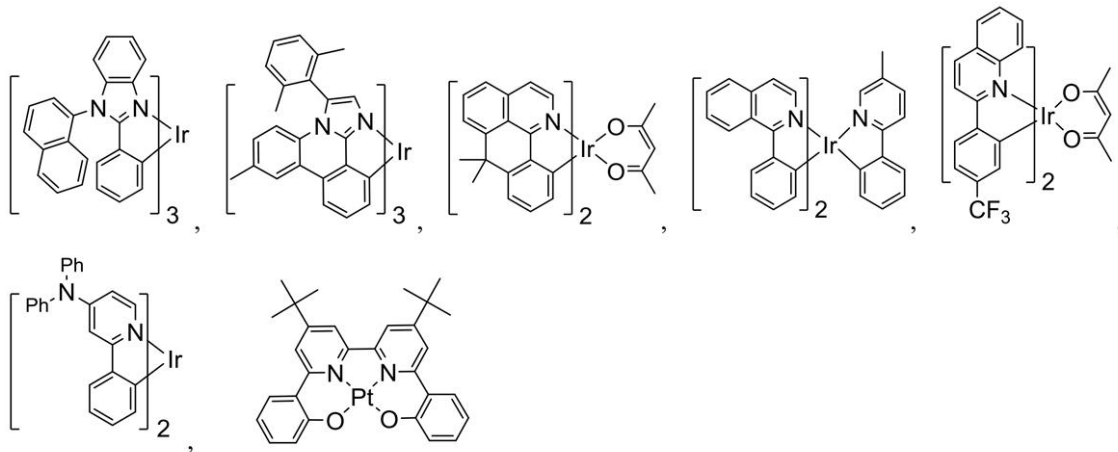
30

40

【化 1 4 4】



【化 1 4 5】



10

H B L :

【 0 1 4 5】

正孔ブロッキング層 (H B L) を使用して、発光層から出る正孔及び / 又は励起子の数を低減させることができる。デバイス中のそのようなブロッキング層の存在は、ブロッキング層を欠く同様のデバイスと比較して大幅に高い効率及び / 又はより長い寿命をもたらし得る。また、ブロッキング層を使用して、O L E D の所望の領域に発光を制限することもできる。幾つかの実施形態においては、H B L 材料は、H B L インターフェースに最も近接した発光体よりも低い H O M O (真空準位から更に離れて) 及び / 又は高い三重項エネルギーを有する。幾つかの実施形態においては、H B L 材料は、H B L インターフェースに最も近接したホストの 1 つ以上よりも低い H O M O (真空準位から更に離れて) 及び / 又は高い三重項エネルギーを有する。

20

【 0 1 4 6】

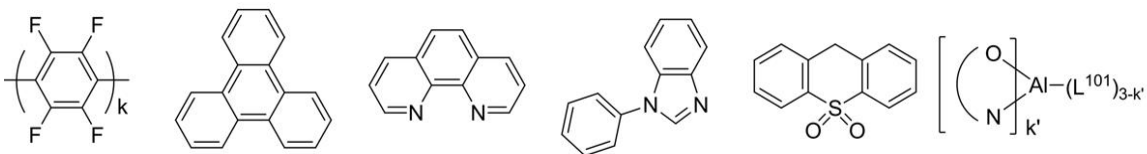
一態様において、前記 H B L 中に使用される前記化合物は、上述したホストに用いられる場合と同じ分子又は同じ官能基を含む。

【 0 1 4 7】

別の態様において、前記 H B L 中に使用される前記化合物は、分子中に下記の群の少なくとも 1 つを含む。

30

【化 1 4 6】



式中、 k は 1 から 20 までの整数であり； L^{101} は他の配位子であり、 k' は 1 から 3 までの整数である。

E T L :

40

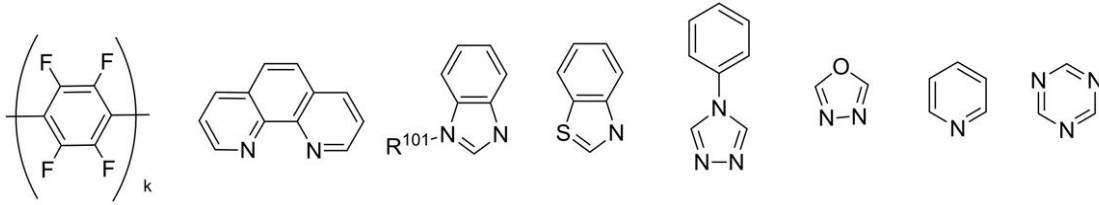
【 0 1 4 8】

電子輸送層 (E T L) は、電子を輸送することができる材料を含み得る。電子輸送層は、真性である (ドーピングされていない) か、又はドーピングされている。ドーピングを使用して、伝導性を増強することができる。E T L 材料の例は特に限定されず、電子を輸送するために典型的に使用されるものである限り、任意の金属錯体又は有機化合物を使用してよい。

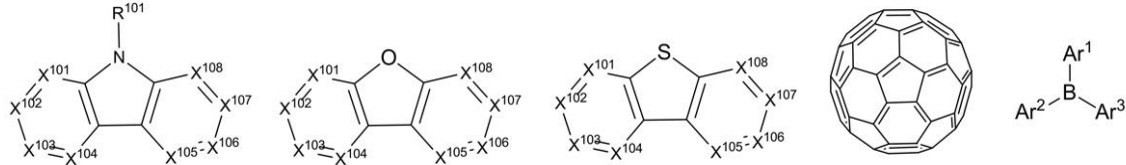
【 0 1 4 9】

一態様において、前記 E T L 中に使用される前記化合物は、分子中に下記の群の少なくとも 1 つを含有する。

【化 1 4 7】



【化 1 4 8】



10

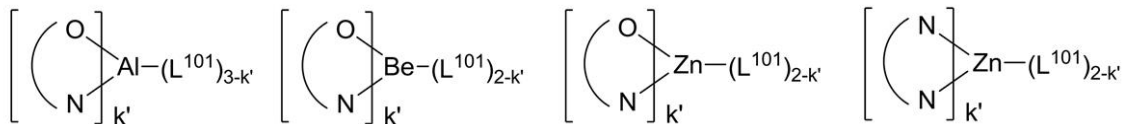
式中、 R^{101} は、水素、重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリーロキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ及びこれらの組合せからなる群から選択され、それがアリール又はヘテロアリールである場合、上記で言及したArのものと同様の定義を有する。 Ar^1 から Ar^3 は、上記で言及したArのものと同様の定義を有する。 k は1から20までの整数である。 X^{101} から X^{108} はC(CHを含む)又はNから選択される。

20

【0150】

別の態様において、前記ETL中に使用される金属錯体は、下記の一般式を含有するがこれらに限定されない。

【化 1 4 9】



30

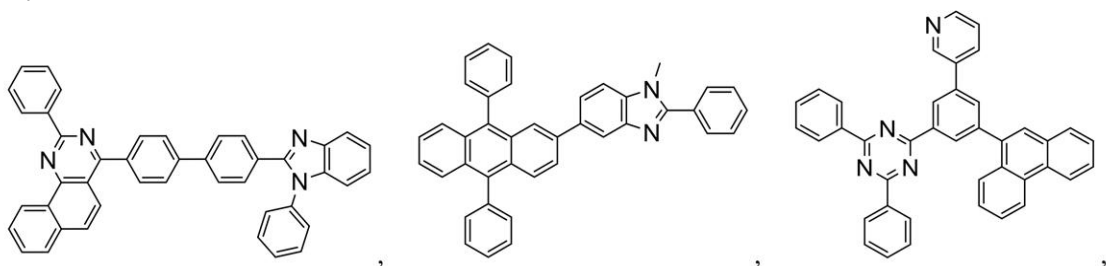
式中、(O-N)又は(N-N)は、原子O、N又はN、Nに配位された金属を有する二座配位子であり； L^{101} は他の配位子であり； k' は、1から金属に結合し得る配位子の最大数までの整数値である。

【0151】

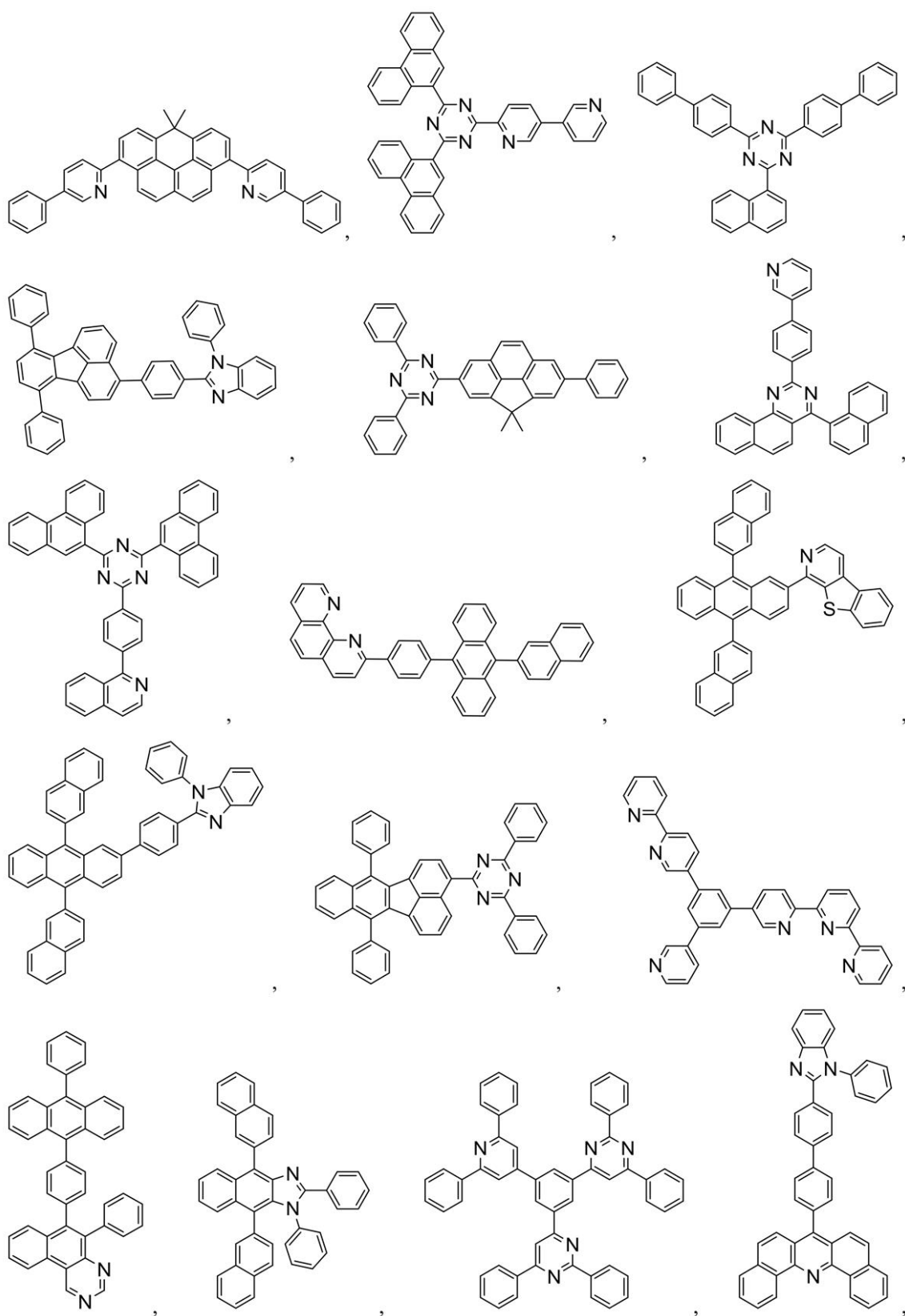
本明細書において開示される材料と組み合わせ、OLED中に用いられることができるETL材料の非制限的な例は、これらの材料を開示する文献と共に下記に例示される。CN103508940、EP01602648、EP01734038、EP01956007、JP2004-022334、JP2005149918、JP2005-268199、KR0117693、KR20130108183、US20040036077、US20070104977、US2007018155、US20090101870、US20090115316、US20090140637、US20090179554、US2009218940、US2010108990、US2011156017、US2011210320、US2012193612、US2012214993、US2014014925、US2014014927、US20140284580、US6656612、US8415031、WO2003060956、WO2007111263、WO2009148269、WO2010067894、WO2010072300、WO2011074770、WO2011105373、WO2013079217、WO2013145667、WO2013180376、WO2014104499、WO2014104535

40

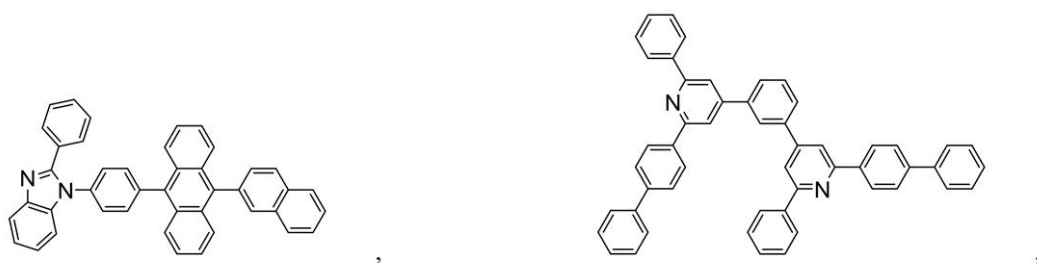
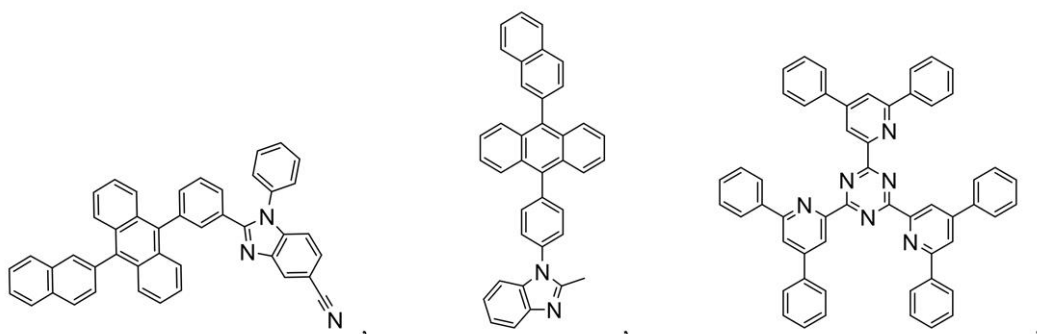
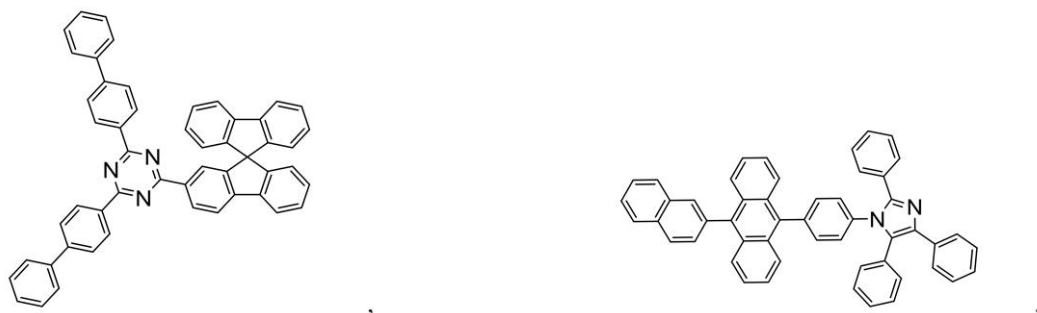
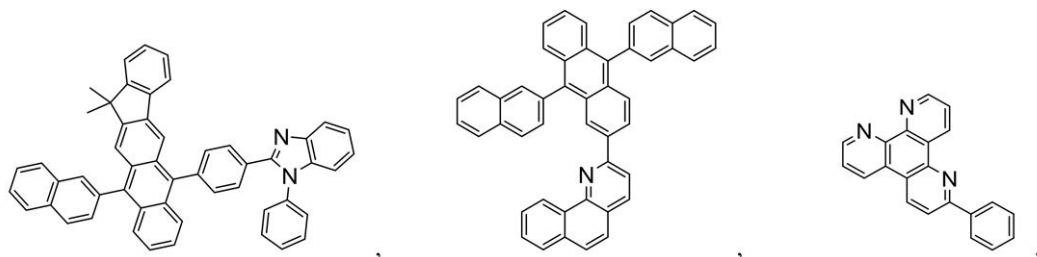
【化 1 5 0】



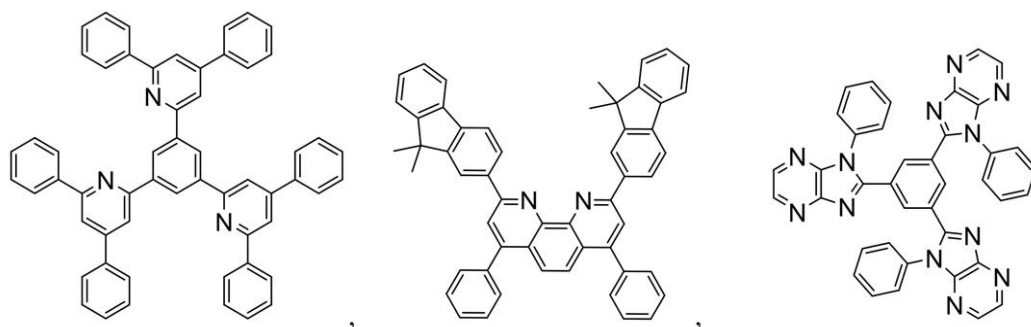
【化 1 5 1】



【化 1 5 2】



【化 1 5 3】



電荷発生層 (C G L)

【 0 1 5 2 】

10

20

30

40

50

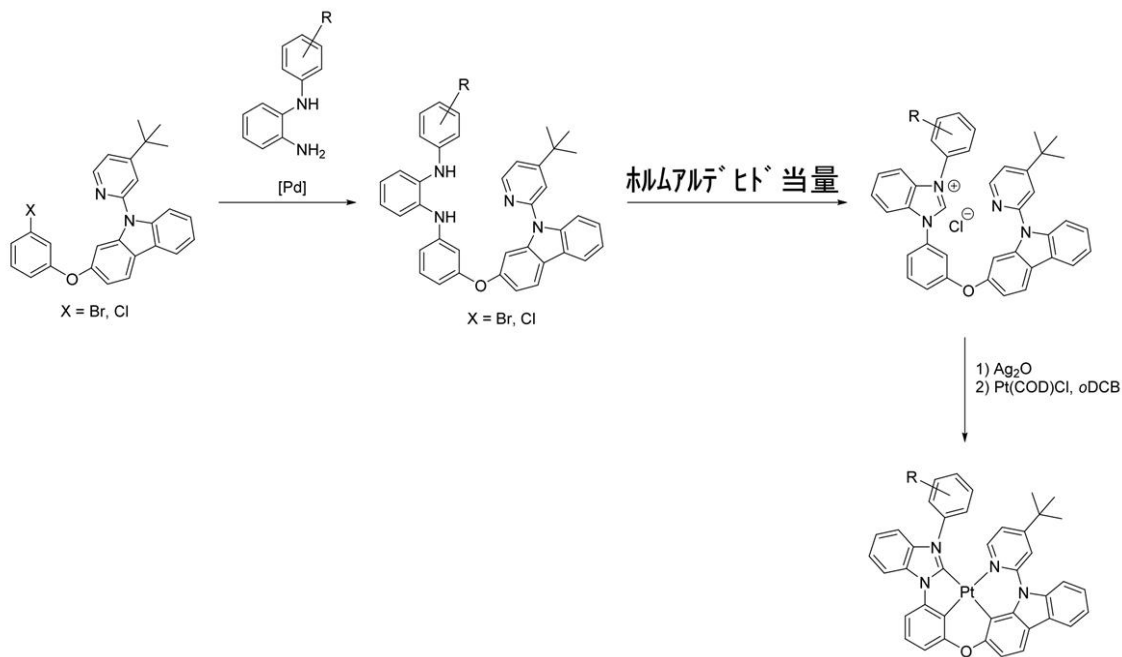
タンデム型、又は積層型のOLED中で、CGLは、性能において重要な役割を果たし、それぞれ、電子及び正孔の注入のためのn-ドープ層及びp-ドープ層からなる。電子及び正孔は、前記CGL及び電極から供給される。前記CGL中の消費された電子及び正孔は、それぞれカソード及びアノードから注入された電子及び正孔によって再び満たされ、その後バイポーラ電流が徐々に安定した状態に達する。典型的なCGL材料は、輸送層で用いられるn型及びp型伝導性ドーパントを含む。

【0153】

OLEDデバイスの各層中に使用される任意の上記で言及した化合物において、水素原子は、部分的に又は完全に重水素化されていてよい。故に、メチル、フェニル、ピリジル等であるがこれらに限定されない任意の具体的に挙げられている置換基は、これらの重水素化されていない、部分的に重水素化された、及び完全に重水素化されたバージョンであることができる。同様に、アルキル、アリアル、シクロアルキル、ヘテロアリアル等であるがこれらに限定されない置換基のクラスも、これらの重水素化されていない、部分的に重水素化された、及び完全に重水素化されたバージョンであることができる。

【0154】

実験

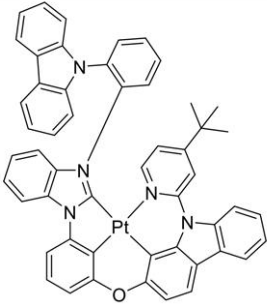
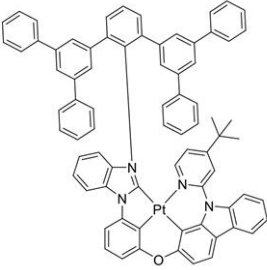


スキーム1．本発明化合物の一般的合成手順

【0155】

【表 1 - 1】

表 1

	構造	PMMA の λ_{max} (nm)	PMMA の PLQY (%)	77K での励起状態 寿命 (μs)
化合物 60253535971 [LC2358970 (R ₄₀₄₀₂), LD13]		458	70	3.0
化合物 59736162506 [LC2338652 (R ₂₀₁₄₇), LD13]		458	92	3.0

10

20

【表 1 - 2】

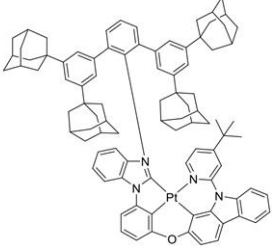
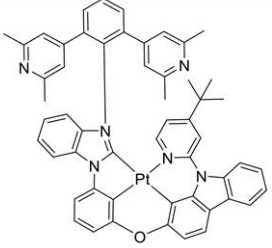
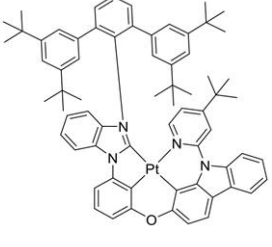
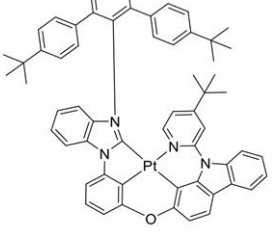
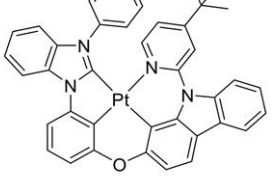
	構造	PMMA の λ_{\max} (nm)	PMMA の PLQY (%)	77Kでの励起状態 寿命 (μ s)
化合物 59735728275 [LC2338635 (R ₂₀₁₃₀), LD13]		455	100	3.2
化合物 62201598409 [LC2435173, LD13]		457	85	3.4
化合物 59735140786 [LC2338612 (R ₂₀₁₀₇), LD13]		455	81	3.1
化合物 59221752029 [LC2318513 (R ₇), LD13]		455	89	3.6
比較例		452	56	3.6

表 1 は、本発明化合物 6 0 2 5 3 5 3 5 9 7 1、5 9 7 3 6 1 6 2 5 0 6、5 9 7 3 5 7 2 8 2 7 5、6 2 2 0 1 5 9 8 4 0 9、5 9 7 3 5 1 4 0 7 8 6、及び 5 9 2 2 1 7 5 2 0 2 9 の発光ピーク、PLQY、及び励起状態寿命を示す。本発明化合物はいずれも、より高い PLQY とより短い励起状態寿命を示した。これは、金属の周りに嵩高い基が化合物の発光性を保護することを示している。PMMA 中のそれらの発光は、455 ~ 458 nm の範囲であり、これは、ディスプレイ用途のための飽和青色を生成するための優れた候補である。

10

20

30

40

50

【0156】

化合物60253535971の合成：

【0157】

9 - (2 - ニトロフェニル) - 9 H - カルバゾールの合成：2.00グラム、12.0 mmolの9 H - カルバゾール、1.69グラム、12.0 mmolの1 - フルオロ - 2 - ニトロベンゼン、及び7.79グラム、24.0 mmolのセシウムカーボネートを、250 mL丸底フラスコ中で合わせた。60 mLのDMSOを添加し、これを60 で18時間攪拌した。混合物を酢酸エチルと水で希釈し、層を分離した。有機層を水で洗浄し、乾燥させ、ヘプタン中6 ~ 20 %酢酸エチルで溶出させるシリカクロマトグラフィーを行い、黄色固体として3.14グラム(91%)の生成物を得た。

10

【0158】

2 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) アニリンの合成：3.1グラムの9 - (2 - ニトロフェニル) - 9 H - カルバゾールを、200 mLの酢酸エチルに溶解させ、2グラムのPd/C 10%を添加した。水素バルーンを設置し、これを5時間攪拌した。これを、セライトを通してろ過し、蒸発させ、2.5グラム(90%)の生成物を得た。

【0159】

N - (2 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) - 2 - ニトロアニリンの合成：2.60グラム、0.07 mmolの2 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) アニリン、2.91グラム、11.7 mmolの1 - ヨード - 2 - ニトロベンゼン、0.363グラム、0.503 mmolのSPhos - Pd - G2、及び1.94グラム、20.13 mmolのナトリウムtert - ブトキシドを、フラスコ中で合わせた。これを脱気し、窒素でバックフィルした。50 mLのトルエンを添加し、これを22時間還流した。次いで、ミックスを酢酸エチルで希釈し、セライトを通してろ過し、ヘプタン中0 ~ 15 %酢酸エチルで溶出させるシリカクロマトグラフィーを行い、2.90グラム、76%の生成物を得た。

20

【0160】

N1 - (2 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) ベンゼン - 1, 2 - ジアミンの合成：2.90グラムのN - (2 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) - 2 - ニトロアニリンと2.00グラムのPd/C 10%を添加し、反応混合物を、酢酸エチル中、バルーンで水素化して、2.56グラムの生成物を得た。

30

【0161】

N1 - (2 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) - N2 - (3 - ((9 - (4 - (tert - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) ベンゼン - 1, 2 - ジアミンの合成：0.408グラム、1.17 mmolのN1 - (2 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) ベンゼン - 1, 2 - ジアミン、0.50グラム、1.06 mmolの2 - (3 - ブロモフェノキシ) - 9 - (4 - (tert - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール、12 mg、0.032 mmolのPd(アリル)Cl - ダイマー、45 mg、0.27 mmolのcBRIDP、及び0.255グラム、2.65 mmolのナトリウムtert - ブトキシドを、7 mLのトルエン中で5時間還流した。ミックスを、ヘプタン中10%の酢酸エチルでシリカクロマトグラフィーして、0.58グラム、74%の生成物を得た。

40

【0162】

3 - (2 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) - 1 - (3 - ((9 - (4 - (tert - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - 1 H - ベンゾ[d]イミダゾール - 3 - イウムクロリドの合成：1.20グラム、1.62 mmolのN1 - (2 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) - N2 - (3 - ((9 - (4 - (tert - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) ベンゼン - 1, 2 - ジアミンを、15 mLのトリエチルオルトホルメート中で攪拌した。0.16 mL、1.95 mmolの塩酸(37%)を添加し、これを80 で24時間攪拌した。生成物を、ろ過し、ヘプタンで洗浄して、

50

1.01グラム、79%の生成物を得た。

【0163】

化合物60253535971の合成：1.0グラム、1.27mmolの3-(2-(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル)-1-(3-(9-(4-(tert-ブチル)ピリジン-2-イル)-9H-カルバゾール-2-イル)オキシ)フェニル)-1H-ベンゾ[d]イミダゾール-3-イウムクロリドと、0.162グラム、0.70mmolの酸化銀(I)を、15mLの1,2-ジクロロエタン中で2日間攪拌した。溶媒を蒸発させた後、粗生成物を15mLのo-ジクロロベンゼンに溶解させ、0.476グラム、1.27mmolのPt(COD)Cl₂を含む100mLのSchlenk管に移し、24時間、還流攪拌した。溶媒を蒸発させ、ヘプタン中60%のDCMで溶出させるシリカクロマトグラフィーにより、750mgの生成物を得た(63%)。

10

【0164】

化合物59736162506の合成：

【0165】

2,6-ジブromo-N-(2-ニトロフェニル)アニリンの合成：水素化ナトリウム(23.91g、598mmol)とNMP(1L)を、乾燥(dry)丸底フラスコに添加した。混合物を氷浴上にて冷却し、2,6-ジブromoアニリン(100g、399mmol)を添加した。混合物を、窒素下にて30分間攪拌した。1-フルオロ-2-ニトロベンゼン(84g、598mmol)を滴下した。次いで、混合物を、16時間で室温まで加温した。反応混合物を氷(~500g)上にゆっくりと注ぎ、~1時間攪拌したところ、沈殿物が形成し始めた。懸濁物をろ過し、固体を回収し乾燥した。粗生成物をメタノール中で再結晶化した(84%収率)。

20

【0166】

N1-(2,6-ジブromoフェニル)ベンゼン-1,2-ジアミンの合成：エタノール(1L)中2,6-ジブromo-N-(2-ニトロフェニル)アニリン(85g、228mmol)を、3Lの丸底フラスコに添加した。鉄(51.0g、914mmol)を添加し、次いで、塩化水素水溶液(0.019L、228mmol)を滴下した。反応混合物を攪拌し、2時間加熱還流した。GC/MS分析により、反応が完了したことが示された。次いで、飽和NaHCO₃(500mL)を添加し、反応混合物のpH値を約8に調整した。次いで、エタノールを減圧下、除去した。残渣をEtOAc(3x1L)で抽出した。合わせた有機層を硫酸ナトリウム(~100g)上で乾燥させ、濃縮した。粗生成物を、温メタノール(1L)で再結晶化し、褐色固体として得た(38.9g、114mmol、49.8%収率)。

30

【0167】

N1-(5',5''-ジフェニル-[1,1':3',1'':3'',1''':3''',1''''-キルクフェニル]-2''-イル)ベンゼン-1,2-ジアミンの合成：N1-(2,6-ジブromoフェニル)ベンゼン-1,2-ジアミン(1g、2.92mmol)、[1,1':3',1'':3'',1''':3''',1''''-ターフェニル]-5'-イルボロン酸(2.404g、8.77mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.169g、0.146mmol)、及びリン酸カリウム(1.862g、8.77mmol)の混合物を、真空処理し、窒素でバックフィルした。ジオキサン(18mL)と水(2mL)を、反応混合物に添加し、16時間還流した。EAと水との間で分配し、EAで抽出した。セライトにコートし、シリカクロマトグラフィー(DCM/Hept=3/1)を行った(85%収率)。

40

【0168】

N1-(3-(9-(4-(tert-ブチル)ピリジン-2-イル)-9H-カルバゾール-2-イル)オキシ)フェニル)-N2-(5',5''-ジフェニル-[1,1':3',1'':3'',1''':3''',1''''-キルクフェニル]-2''-イル)ベンゼン-1,2-ジアミンの合成：N1-(5',5''-ジフェニル-[1,1':3',1'':3'',1''':3''',1''''-キルクフェニル]-2''-イル)ベンゼン-1,2-ジアミン(1g、2.92mmol)、[1,1':3',1'':3'',1''':3''',1''''-ターフェニル]-5'-イルボロン酸(2.404g、8.77mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.169g、0.146mmol)、及びリン酸カリウム(1.862g、8.77mmol)の混合物を、真空処理し、窒素でバックフィルした。ジオキサン(18mL)と水(2mL)を、反応混合物に添加し、16時間還流した。EAと水との間で分配し、EAで抽出した。セライトにコートし、シリカクロマトグラフィー(DCM/Hept=3/1)を行った(85%収率)。

50

ル] - 2' - イル) ベンゼン - 1, 2 - ジアミン (1.020 g, 1.591 mmol)、2 - (3 - ブロモフェノキシ) - 9 - (4 - (tert - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール (0.75 g, 1.591 mmol)、(アリル) PdCl₂ - ダイマー (0.023 g, 0.064 mmol)、cBRIDP (0.090 g, 0.255 mmol)、及びナトリウム 2 - メチルプロパン - 2 - オレート (0.382 g, 3.98 mmol) の混合物を、数回、真空処理し、窒素でバックフィルした。トルエン (8 ml) を反応混合物に添加し、16 時間還流した。セライトにコートし、シリカクロマトグラフィー (DCM / Heptane = 3 / 1) を行った (52 % 収率)。

【0169】

1 - (3 - ((9 - (4 - (tert - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - 3 - (5', 5'' - ジフェニル - [1, 1' : 3', 1'' : 3'', 1''' : 3''', 1'''' : 3'''' - キンクフェニル] - 2' - イル) - 1H - ベンゾ[d]イミダゾール - 3 - イウムクロリドの合成: N1 - (3 - ((9 - (4 - (tert - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - N2 - (5', 5'' - ジフェニル - [1, 1' : 3', 1'' : 3'', 1''' : 3''', 1'''' : 3'''' - キンクフェニル] - 2' - イル) ベンゼン - 1, 2 - ジアミン (0.86 g, 0.834 mmol) を、アセトニトリル (20 ml) (あまり可溶性ではない、10 mL の EA と 2 mL の THF を添加) に溶解させ、N - (クロロメチレン) - N - メチルメタンアミニウムクロリド (0.192 g, 1.501 mmol) を添加し、R.T. で 10 分間攪拌し、次いで、トリエチルアミン (0.349 ml, 2.502 mmol) を添加し、反応混合物を 85 ° で 16 時間攪拌した。セライトにコートし、シリカクロマトグラフィー (DCM ~ DCM / MeOH = 9 / 1、暗色バンド) を行った。溶媒を蒸発させた後、生成物を DCM に溶解させ、MgSO₄ で乾燥し、蒸発させた (82 % 収率)。

【0170】

化合物 59736162506 の合成: 1 - (3 - ((9 - (4 - (tert - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - 3 - (5', 5'' - ジフェニル - [1, 1' : 3', 1'' : 3'', 1''' : 3''', 1'''' : 3'''' - キンクフェニル] - 2' - イル) - 1H - ベンゾ[d]イミダゾール - 3 - イウムクロリド (734 mg, 0.681 mmol) と酸化銀 (79 mg, 0.341 mmol) の混合物を、1, 2 - ジクロロエタン (15 ml) 中で、R.T. にて約 16 時間攪拌した。1, 2 - ジクロロエタンを除去した後、Pt (COD) Cl₂ (255 mg, 0.681 mmol) を添加し、反応混合物を真空処理し、窒素でバックフィルした。1, 3 - ジクロロトルエン (15 ml) を添加し、205 ° で 2 日間加熱した。溶媒を除去し、セライトにコートし、シリカクロマトグラフィー (DCM / Heptane = 2 / 1) を行った。生成物を MeOH 中で粉碎し、真空オーブンで乾燥した (34 % 収率)。

【0171】

化合物 59735728275 の合成:

【0172】

2, 6 - ジブロモ - N - (2 - ニトロフェニル) アニリンの合成: 乾燥丸底フラスコに、水素化ナトリウム (23.91 g, 598 mmol) と NMP (1 L) を添加した。混合物を氷浴上で冷却し、2, 6 - ジブロモアニリン (100 g, 399 mmol) を添加した。混合物を窒素下で 30 分間攪拌した。1 - フルオロ - 2 - ニトロベンゼン (84 g, 598 mmol) を滴下した。次いで、混合物を 16 時間で室温まで加温した。反応混合物を氷 (~ 500 g) 上にゆっくりと注ぎ、~ 1 時間攪拌したところ、沈殿物が形成し始めた。懸濁物をろ過し、固体を回収し乾燥した。粗生成物をメタノール中で再結晶化した (84 % 収率)。

【0173】

N1 - (2, 6 - ジブロモフェニル) ベンゼン - 1, 2 - ジアミンの合成: 2, 6 - ジブロモ - N - (2 - ニトロフェニル) アニリン (85 g, 228 mmol) をエタノール (

1 L) に溶解させた。鉄 (51.0 g, 914 mmol) を添加し、次いで、塩化水素水溶液 (0.019 L, 228 mmol) を滴下した。反応混合物を攪拌し、2 時間加熱還流した。GC/MS 分析により、反応が完了したことが示された。次いで、飽和 NaHCO₃ (500 mL) を添加し、反応混合物の pH 値を約 8 に調整した。次いで、エタノールを減圧下、除去した。残渣を EtOAc (3 × 1 L) で抽出した。合わせた有機層を硫酸ナトリウム (~100 g) 上で乾燥させ、濃縮した。粗生成物を、温メタノール (1 L) で再結晶化し、褐色固体として得た (38.9 g, 114 mmol, 49.8% 収率)。

【0174】

N1 - (3, 3', 5, 5' - テトラ (アダマンタン - 1 - イル) - [1, 1' : 3', 1' - ターフェニル] - 2' - イル) ベンゼン - 1, 2 - ジアミンの合成 : N1 - (2, 6 - ジブロモフェニル) ベンゼン - 1, 2 - ジアミン (400 mg, 1.169 mmol)、(3, 5 - ジ (3R, 5R, 7R) - アダマンタン - 1 - イル) フェニル) ボロン酸 (1141 mg, 2.92 mmol)、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) (67.6 mg, 0.058 mmol)、及びリン酸カリウム (745 mg, 3.51 mmol) の混合物を、真空処理し、窒素でバックフィルした。ジオキサン (9 mL) と水 (1 mL) を、反応混合物に添加し、16 時間還流した。EA と水との間で分配し、EA で抽出した。セライトにコートし、シリカクロマトグラフィー (DCM / Heptane = 1 / 1) を行った (87% 収率)。

【0175】

N1 - (3 - (9 - (4 - (tert - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - N2 - (3, 3', 5, 5' - テトラ (アダマンタン - 1 - イル) - [1, 1' : 3', 1' - ターフェニル] - 2' - イル) ベンゼン - 1, 2 - ジアミンの合成 : N1 - (3, 3', 5, 5' - テトラ (アダマンタン - 1 - イル) - [1, 1' : 3', 1' - ターフェニル] - 2' - イル) ベンゼン - 1, 2 - ジアミン (0.89 g, 1.019 mmol)、2 - (3 - ブロモフェノキシ) - 9 - (4 - (tert - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール (0.480 g, 1.019 mmol)、Pd (アリル) Cl - ダイマー (0.015 g, 0.041 mmol)、cBRIDP (0.057 g, 0.163 mmol)、及びナトリウム 2 - メチルプロパン - 2 - オレート (0.245 g, 2.55 mmol) の混合物を、数回、真空処理し、窒素でバックフィルした。トルエン (8 mL) を反応混合物に添加し、16 時間還流した。セライトにコートし、シリカクロマトグラフィー (DCM / Heptane = 2 / 1) を行った (65% 収率)。

【0176】

1 - (3 - (9 - (4 - (tert - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - 3 - (3, 3', 5, 5' - テトラ (アダマンタン - 1 - イル) - [1, 1' : 3', 1' - ターフェニル] - 2' - イル) - 1H - ベンゾ [d] イミダゾール - 3 - イウムクロリドの合成 : N1 - (3 - (9 - (4 - (tert - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - N2 - (3, 3', 5, 5' - テトラ (アダマンタン - 1 - イル) - [1, 1' : 3', 1' - ターフェニル] - 2' - イル) ベンゼン - 1, 2 - ジアミン (840 mg, 0.665 mmol) を、THF (15 mL) とアセトニトリル (15 mL) に溶解させ、N - (クロロメチレン) - N - メチルメタンアミニウムクロリド (153 mg, 1.196 mmol) を添加し、R.T. で 10 分間攪拌し、次いで、トリエチルアミン (0.278 mL, 1.994 mmol) を添加し、反応混合物を 85 °C で 16 時間攪拌した。セライトにコートし、シリカクロマトグラフィー (DCM ~ DCM / MeOH = 9 / 1) を行った。溶媒を蒸発させた後、生成物を DCM に溶解させ、MgSO₄ で乾燥させた (75% 収率)。

【0177】

化合物 59735728275 の合成 : 1 - (3 - (9 - (4 - (tert - ブチル) -

ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - 3 - (3 , 3 ' ' , 5 , 5 ' ' - テトラ (アダマンタン - 1 - イル) - [1 , 1 ' : 3 ' , 1 ' ' - ターフェニル] - 2 ' - イル) - 1 H - ベンゾ [d] イミダゾール - 3 - イウムクロリド (6 5 0 m g , 0 . 4 9 6 m m o l) と酸化銀 (5 7 . 5 m g , 0 . 2 4 8 m m o l) の混合物を、 1 , 2 - ジクロロエタン (1 5 m l) 中で、 R . T . にて約 1 6 時間攪拌した。 1 , 2 - ジクロロエタンを除去した後、 P t (C O D) C l ₂ (1 8 6 m g , 0 . 4 9 6 m m o l) を添加し、反応混合物を真空処理し、窒素でバックフィルした。 1 , 2 - ジクロロベンゼン (1 5 m l) を添加し、 2 0 3 で約 4 8 時間加熱した。溶媒を除去し、セライトにコートし、シリカクロマトグラフィー (D C M / H e p = 2 / 3) を行った。生成物を M e O H 中で粉碎し、真空オープンで乾燥した (5 1 % 収率) 。

10

【 0 1 7 8 】

化合物 6 2 2 0 1 5 9 8 4 0 9 の合成 :

【 0 1 7 9 】

9 - (4 - (t e r t - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 2 - (3 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) フェノキシ) - 9 H - カルバゾールの合成 : ジオキサン (3 9 5 m l) 中の 2 - (3 - ブロモフェノキシ) - 9 - (4 - (t e r t - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール (3 2 . 2 g , 6 8 . 3 m m o l) 、酢酸カリウム (2 0 . 1 1 g , 2 0 5 m m o l) 、 4 , 4 , 4 ' , 4 ' , 5 , 5 , 5 ' , 5 ' - オクタメチル - 2 , 2 ' - ビ (1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン) (2 0 . 8 2 g , 8 2 m m o l) を、窒素で 3 0 分間スパージした。 P d (d p p f) ₂ C l ₂ ジクロロメタン付加物 (2 . 7 9 g , 3 . 4 2 m m o l) を添加した。反応物を 1 6 時間還流した、反応混合物を室温まで冷却し、セライトパッドを通してろ過した。ろ液を濃縮し、シリカ (9 0 g) に吸着させ、ヘキサン中 2 ~ 3 0 % の酢酸エチルのグラジエントで溶出させてシリカ上で精製して、所望生成物を白色泡状物質として得た (8 8 % 収率) 。

20

【 0 1 8 0 】

(3 - ((9 - (4 - (t e r t - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) ボロン酸の合成 : 9 - (4 - (t e r t - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 2 - (3 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) フェノキシ) - 9 H - カルバゾール (1 1 g , 2 1 . 2 2 m m o l) 、酢酸アンモニウム (8 . 1 8 g , 1 0 6 m m o l) 、アセトン (7 0 . 7 m l) 、及び水 (3 5 . 4 m l) の混合物を 0 に冷却し、過ヨウ素酸ナトリウム (2 2 . 6 9 g , 1 0 6 m m o l) を、 1 0 分間かけて数回に分けて添加した。室温で 1 6 時間攪拌した後、追加の酢酸アンモニウム (8 . 1 8 g , 1 0 6 m m o l) と過ヨウ素酸ナトリウム (2 2 . 6 9 g , 1 0 6 m m o l) を添加し、反応を完了させた。反応混合物を、 R T で 1 時間 E A (2 5 0 m l) と混合し、ろ過した。ろ液を N a ₂ S O ₄ 上で乾燥させ、減圧下で濃縮した (9 7 % 収率) 。

30

【 0 1 8 1 】

9 - (4 - (t e r t - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 2 - (3 - (メシチル (テトラフルオロ - 1 5 - ボラニル) - 1 3 - ヨーダニル) フェノキシ) - 9 H - カルバゾールの合成 : (3 - ((9 - (4 - (t e r t - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) ボロン酸 (9 . 2 g , 2 1 . 0 9 m m o l) をジクロロメタン (1 0 0 m l) に溶解させ、 N ₂ 雰囲気下で 0 に冷却した。ボロントリフルオリドエーテレート (3 . 4 7 m l , 2 7 . 4 m m o l) を添加し、 0 で 3 0 分間攪拌した。メシチル - 1 3 - ヨーダネジイル (i o d a n e d i y l) ジアセテート (9 . 9 8 g , 2 7 . 4 m m o l) を、 1 回で添加し、 1 6 時間攪拌した。反応混合物を、 H ₂ O (2 0 0 m l) 中のナトリウムテトラフルオロボレート (5 7 . 9 g , 5 2 7 m m o l) の溶液で処理し、 4 5 分間攪拌し、 D C M (2 0 0 m l) で抽出した。有機物を合わせ、 N a ₂ S O ₄ 上で乾燥させ、濃縮して、褐色固体を得た (8 3 % 収率) 。

40

【 0 1 8 2 】

50

3 - (3 - ((9 - (4 - (t e r t - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - 1 - (2 , 6 - ジブプロモフェニル) - 1 - (テトラフルオロ - 1 5 - ボラニル) - 2 , 3 - ジヒドロ - 1 H - ベンゾ [d] イミダゾール - 1 - イウム - 2 - イドの合成 : 無水 D M F (2 6 . 7 m l) 中、銅 (I I) トリフルオロメタンスルホネート (0 . 2 4 1 g , 0 . 6 6 8 m m o l) 、 1 - (2 , 6 - ジブプロモフェニル) - 1 H - ベンゾ [d] イミダゾール (2 . 3 5 g , 6 . 6 8 m m o l) 、 及び 9 - (4 - (t e r t - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 2 - (3 - (メシチル (テトラフルオロ - 1 5 - ボラニル) - 1 3 - ヨーダニル) フェノキシ) - 9 H - カルバゾール (5 . 0 8 g , 7 . 0 1 m m o l) の混合物を、1 0 0 で 1 6 時間攪拌した。D M F を減圧下で除去し、残渣をセライト (1 2 g) に吸着させ、5 ~ 3 0 % の酢酸エチルのグラジエントで溶出させてシリカ上で精製した (5 7 % 収率) 。

【 0 1 8 3 】

白金化 3 - (3 - ((9 - (4 - (t e r t - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - 1 - (2 , 6 - ジブプロモフェニル) - 1 - (テトラフルオロ - 1 5 - ボラニル) - 2 , 3 - ジヒドロ - 1 H - ベンゾ [d] イミダゾール - 1 - イウム - 2 - イドの合成 : 1 , 2 - ジクロロベンゼン (1 6 3 8 m l) 中、3 - (3 - ((9 - (4 - (t e r t - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - 1 - (2 , 6 - ジブプロモフェニル) - 1 - (テトラフルオロ - 1 5 - ボラニル) - 2 , 3 - ジヒドロ - 1 H - ベンゾ [d] イミダゾール - 1 - イウム - 2 - イド (3 4 g , 4 0 . 9 m m o l) 2 , 6 - ルチジン (1 4 . 3 1 m l , 1 2 3 m m o l) 、 及びカリウムテトラクロロプラチネート (I I) (1 7 . 0 0 g , 4 0 . 9 m m o l) の混合物を、約 1 時間アルゴンでスパージした。反応物を 1 2 5 で合計 6 8 時間加熱した。混合物を、減圧下で濃縮し、D C M (2 0 0 m l) に溶解させ、セライトに吸着させ、ヘキサン中 4 0 ~ 5 5 % の D C M で溶出するシリカ上で精製した (4 6 % 収率) 。

【 0 1 8 4 】

6 2 2 0 1 5 9 8 4 0 9 の合成 : ジオキサン (0 . 9 7 2 m l) と水 (0 . 0 9 7 m l) 中の炭酸カリウム (0 . 0 9 2 g , 0 . 6 6 8 m m o l) 、白金化 3 - (3 - ((9 - (4 - (t e r t - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - 1 - (2 , 6 - ジブプロモフェニル) - 1 - (テトラフルオロ - 1 5 - ボラニル) - 2 , 3 - ジヒドロ - 1 H - ベンゾ [d] イミダゾール - 1 - イウム - 2 - イド (0 . 0 5 g , 0 . 0 5 3 m m o l) 、 S P h o s - P d - G 2 (4 . 4 3 m g , 5 . 3 4 μ m o l) 、 及び S P h o s (1 . 7 5 5 m g , 4 . 2 8 μ m o l) を、アルゴンで 2 5 分間スパージした。(2 , 6 - ジメチルピリジン - 4 - イル) ボロン酸 (0 . 0 4 0 g , 0 . 2 6 7 m m o l) を添加し、スパージを更に 1 0 分間継続した。反応温度を 8 0 に上昇させて、反応物を 1 6 時間攪拌した。反応混合物を、水 (1 0 m l) と D C M (1 5 m l) で希釈した。有機層を分離し、無水硫酸ナトリウム (1 . 5 g) 上で乾燥させ、濃縮した。残渣を、D C M 中 4 0 % の酢酸エチルで溶出するシリカ上で精製して、2 4 m g の黄色固体を得た (4 6 % 収率) 。

【 0 1 8 5 】

化合物 5 9 7 3 5 1 4 0 7 8 6 の合成 :

【 0 1 8 6 】

N 1 - (3 , 3 ' ' , 5 , 5 ' ' - テトラ - t e r t - ブチル - [1 , 1 ' : 3 ' , 1 ' ' - ターフェニル] - 2 ' - イル) ベンゼン - 1 , 2 - ジアミンの合成 : N 1 - (2 , 6 - ジブプロモフェニル) ベンゼン - 1 , 2 - ジアミン (1 . 0 2 g , 2 . 9 8 m m o l) 、 (3 , 5 - ジ - t e r t - ブチルフェニル) ボロン酸 (2 . 7 9 g , 1 1 . 9 3 m m o l) 、 テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) (0 . 3 5 g , 0 . 2 9 m m o l , 1 0 m o l %) 、 及びリン酸三カリウム (1 . 9 0 g , 8 . 9 5 m m o l) の混合物を、3 : 1 の 1 , 4 - ジオキサン : 水 (3 0 m l) に溶解させ、3 0 分間窒素で脱気し、9 5 に 1 8 時間で加熱した。混合物を冷却し、飽和重炭酸ナトリウム (1 0 0 m l

10

20

30

40

50

）と酢酸エチル（300 mL）を添加した500 mLの分液漏斗に注いだ。水層を酢酸エチルで抽出した。有機物を、無水硫酸ナトリウム上で乾燥させ、減圧下で濃縮した。粗生成物を、セライト（120 g）にコートし、5%酢酸エチル/ヘキサンを用いるシリカゲルクロマトグラフィーを用いて精製して、暗色油状物として生成物を得た（72%収率）。

【0187】

N1 - (3 - ((9 - (4 - (tert - ブチル)ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール - 2 - イル)オキシ)フェニル) - N2 - (3, 3', 5, 5' - テトラ - tert - ブチル - [1, 1' : 3', 1'' - ターフェニル] - 2' - イル)ベンゼン - 1, 2 - ジアミンの合成：N1 - (3, 3', 5, 5' - テトラ - tert - ブチル - [1, 1' : 3', 1'' - ターフェニル] - 2' - イル)ベンゼン - 1, 2 - ジアミン（8 g, 14.26 mmol）、2 - (3 - プロモフェノキシ) - 9 - (4 - (tert - ブチル)ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール（6.72 g, 14.26 mmol）、（アリル）PdCl - ダイマー（0.261 g, 0.713 mmol）、ジ - tert - ブチル（1 - メチル - 2, 2 - ジフェニルシクロプロピル）ホスファン（1.006 g, 2.85 mmol）、及びナトリウムtert - ブトキシド（4.11 g, 42.8 mmol）の混合物に、アルゴンバージしたトルエン（100 mL）を添加し、約16時間で110 に加熱した。反応混合物を室温まで冷却し、200 mLの飽和NaHCO₃に注いだ。混合物をEtOAcで抽出し、硫酸ナトリウム上で乾燥させ、濃縮した。粗生成物をセライトにコートし、40 ~ 100%のDCM/Hexで溶出するシリカクロマトグラフィーを行って、褐色固体として生成物を得た（59%収率）。

【0188】

1 - (3 - ((9 - (4 - (tert - ブチル)ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール - 2 - イル)オキシ)フェニル) - 3 - (3, 3', 5, 5' - テトラ - tert - ブチル - [1, 1' : 3', 1'' - ターフェニル] - 2' - イル) - 1H - ベンゾ[d]イミダゾール - 3 - イウムクロリドの合成：250 mLの封止管に、N1 - (3 - ((9 - (4 - (tert - ブチル)ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール - 2 - イル)オキシ)フェニル) - N2 - (3, 3', 5, 5' - テトラ - tert - ブチル - [1, 1' : 3', 1'' - ターフェニル] - 2' - イル)ベンゼン - 1, 2 - ジアミン（8.0 g, 8.41 mmol）、トリエトキシメタン（70 mL, 42.1 mmol）、及びジオキサン中の塩化水素（17 mL, 68.0 mmol）を添加した。管を封止し、反応物を140 で16時間加熱した。室温まで冷却後、粗反応混合物を濃縮し、シリカゲル（50 g）に吸着させ、ジクロロメタン中の5%メタノールのグラジエントで溶出するシリカクロマトグラフィーで精製して、淡黄色固体として生成物を得た（53%収率）。

【0189】

(1 - (3 - ((9 - (4 - (tert - ブチル)ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール - 2 - イル)オキシ)フェニル) - 3 - (3, 3', 5, 5' - テトラ - tert - ブチル - [1, 1' : 3', 1'' - ターフェニル] - 2' - イル) - 1H - ベンゾ[d]イミダゾール - 3 - イウム - 2 - イル)銀の合成：1 - (3 - ((9 - (4 - (tert - ブチル)ピリジン - 2 - イル) - 9H - カルバゾール - 2 - イル)オキシ)フェニル) - 3 - (3, 3', 5, 5' - テトラ - tert - ブチル - [1, 1' : 3', 1'' - ターフェニル] - 2' - イル) - 1H - ベンゾ[d]イミダゾール - 3 - イウムクロリド（4.5 g, 4.51 mmol）及び1, 2 - ジクロロエタン（90 mL）の混合物を、アルゴンで20分間スパージした。酸化銀（I）（520 mg, 2.25 mmol, 0.50当量）を添加した。フラスコを箔で覆い、遮光した。16時間の還流攪拌後、混合物を室温まで冷却して、セライトパッドを通してろ過し、ジクロロメタン（100 mL）で洗浄した。ろ液を減圧下で濃縮して、銀カルベンを得た（99%収率）。

【0190】

化合物59735140786の合成：(1 - (3 - ((9 - (4 - (tert - ブチル

）ピリジン - 2 - イル） - 9 H - カルバゾール - 2 - イル）オキシ）フェニル） - 3 - （
3, 3' ', 5, 5' ' - テトラ - tert - ブチル - [1, 1' : 3', 1' ' - ター
フェニル] - 2' - イル） - 1 H - ベンゾ [d] イミダゾール - 3 - イウム - 2 - イル）
銀（ 3.5 g, 3.27 mmol ）を 1, 2 - ジクロロベンゼン（ 60 mL ）に懸濁し、
混合物をアルゴンで 30 分間スパージした。Pt（COD）Cl₂（ 1.225 g, 3.
27 mmol ）を添加し、混合物を 185 で 24 時間攪拌した。室温まで冷却後、合わ
せた粗生成物をシリカゲル（ 50 g ）に吸着させ、ヘキサン中 0 ~ 80 % のジクロロメタ
ンのグラジエントで溶出するシリカクロマトグラフィーで精製して、黄色固体として生成
物を得た。生成物を最少量のジクロロメタン（ 10 mL ）に溶解させ、メタノール（ 20
0 mL ）を添加した。得られた固体をろ過により回収した（ 37 % 収率）。

10

【 0191 】

化合物 59221752029 の合成：

【 0192 】

N1 - （ 3, 3' ', 5, 5' ' - テトラ - tert - ブチル - [1, 1' : 3', 1' ' - ター
フェニル] - 2' - イル）ベンゼン - 1, 2 - ジアミンの合成：N1 - （ 2, 6 -
ジプロモフェニル）ベンゼン - 1, 2 - ジアミン（ 1.02 g, 2.98 mmol ）、
（ 3, 5 - ジ - tert - ブチルフェニル）ボロン酸（ 2.79 g, 11.93 mmol ）、
テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（ 0 ）（ 0.35 g, 0.29 m
mol, 10 mol % ）、及びリン酸三カリウム（ 1.90 g, 8.95 mmol ）の混
合物を、3:1 の 1, 4 - ジオキサン：水（ 30 mL ）に溶解させ、30 分間窒素で脱気
し、95 に 18 時間で加熱した。混合物を冷却し、飽和重炭酸ナトリウム（ 100 mL
）と酢酸エチル（ 300 mL ）を添加した 500 mL の分液漏斗に注いだ。水層を酢酸エ
チルで抽出した。有機物を、無水硫酸ナトリウム上で乾燥させ、減圧下で濃縮した。粗生
成物を、セライト（ 120 g ）にコートし、5 % 酢酸エチル / ヘキサンを用いるシリカゲ
ルクロマトグラフィーを用いて精製して、暗色油状物として生成物を得た（ 72 % 収率）
。

20

【 0193 】

N1 - （ 4, 4' ' - ジ - tert - ブチル - [1, 1' : 3', 1' ' - ターフェニル
] - 2' - イル）ベンゼン - 1, 2 - ジアミンの合成：100 mL の圧力容器に、アルゴ
ンパージしたジオキサン（ 27 mL ）：水混合物（ 9 mL ）中の N1 - （ 2, 6 - ジプロ
モフェニル）ベンゼン - 1, 2 - ジアミン（ 1 g, 2.92 mmol ）、（ 4 - （ tert -
ブチル）フェニル）ボロン酸（ 2.082 g, 11.69 mmol ）、テトラキス（
トリフェニルホスフィン）パラジウム（ 0 ）（ 0.338 g, 0.292 mmol ）を添
加し、懸濁物をアルゴンでパージしながらリン酸三カリウム（ 1.862 g, 8.77 m
mol ）を添加した。混合物を更に 5 分間アルゴンでパージした後、封止した。反応物を
95 に加熱し、16 時間攪拌した。混合物を室温まで冷却し、50 mL の NaHCO₃
溶液に注いだ。次いで、混合物を EtOAc で抽出した。有機層を硫酸ナトリウム上で乾
燥させ、真空下濃縮した。残渣を、120 g のシリカゲルに吸着させ、0 ~ 45 % の EA
/ Hex で溶出するシリカクロマトグラフィーを行って、淡灰色固体として生成物を得た
（ 69 % 収率）。

30

40

【 0194 】

N1 - （ 3 - （（ 9 - （ 4 - （ tert - ブチル）ピリジン - 2 - イル） - 9 H - カルバ
ゾール - 2 - イル）オキシ）フェニル） - N2 - （ 4, 4' ' - ジ - tert - ブチル -
[1, 1' : 3', 1' ' - ターフェニル] - 2' - イル）ベンゼン - 1, 2 - ジアミン
の合成：250 mL の圧力容器に、アルゴンパージしたトルエン（ 75 mL ）中の N1 -
（ 4, 4' ' - ジ - tert - ブチル - [1, 1' : 3', 1' ' - ターフェニル] - 2'
- イル）ベンゼン - 1, 2 - ジアミン（ 3.16 g, 7.04 mmol ）、2 - （ 3 -
プロモフェノキシ） - 9 - （ 4 - （ tert - ブチル）ピリジン - 2 - イル） - 9 H - カ
ルバゾール（ 3.32 g, 7.04 mmol ）を添加した。パラジウム（ II ）ジクロリ
ドジプロブ - 2 - エン - 1 - イド（ 0.129 g, 0.352 mmol ）、ジ - tert

50

- ブチル (1 - メチル - 2 , 2 - ジフェニルシクロプロピル) ホスファン (0 . 4 9 7 g , 1 . 4 0 9 m m o l) 、及びナトリウム *tert* - ブトキシド (2 . 0 3 1 g , 2 1 . 1 3 m m o l) を、アルゴン下にて添加した。混合物を、更に 5 分間アルゴンでバージした。管を封止し、反応物を 1 1 0 度で 1 6 時間加熱した。反応混合物を室温まで冷却し、2 5 0 m L の飽和 NaHCO_3 に注いだ。混合物を *EtOAc* で抽出し、硫酸ナトリウム上で乾燥させ、濃縮した。残渣を、シリカゲル (5 0 g) に吸着させ、0 ~ 5 5 % の *Hex* / *EA* で溶出するシリカクロマトグラフィーを行って、褐色固体として生成物を得た (3 7 . 2 % 収率) 。

【 0 1 9 5 】

1 - (3 - ((9 - (4 - (*tert* - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - 3 - (4 , 4 ' ' - ジ - *tert* - ブチル - [1 , 1 ' : 3 ' , 1 ' ' - ターフェニル] - 2 ' - イル) - 1 H - ベンゾ [d] イミダゾール - 3 - イウムクロリドの合成 : 4 0 m L の反応バイアルに、N 1 - (3 - ((9 - (4 - (*tert* - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - N 2 - (4 , 4 ' ' - ジ - *tert* - ブチル - [1 , 1 ' : 3 ' , 1 ' ' - ターフェニル] - 2 ' - イル) ベンゼン - 1 , 2 - ジアミン (2 . 2 g , 2 . 6 2 m m o l) 、トリメトキシメタン (1 3 . 9 1 g , 1 3 1 m m o l) 、ジオキサン中の塩化水素 (5 . 2 4 m l , 2 0 . 9 7 m m o l) を添加した。バイアルを封止し、8 0 度 に 1 6 時間で加熱した。トリメチルオルトホルメートとジオキサンを、減圧下で除去した。残渣を 3 0 g のシリカゲルに吸着させ、0 ~ 2 0 % の *MeOH* / *DCM* で溶出するシリカクロマトグラフィーを行って、淡灰色固体として生成物を得た (7 3 % 収率) 。

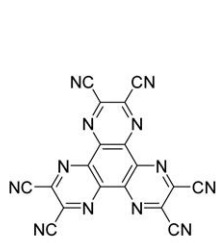
【 0 1 9 6 】

化合物 5 9 2 2 1 7 5 2 0 2 9 の合成 : 圧力容器に、1 , 2 - ジクロロベンゼン (2 5 m l) 中の 1 - (3 - ((9 - (4 - (*tert* - ブチル) ピリジン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾール - 2 - イル) オキシ) フェニル) - 3 - (4 , 4 ' ' - ジ - *tert* - ブチル - [1 , 1 ' : 3 ' , 1 ' ' - ターフェニル] - 2 ' - イル) - 1 H - ベンゾ [d] イミダゾール - 3 - イウムクロリド (1 . 4 g , 1 . 5 8 1 m m o l) を添加し、混合物をアルゴンで 2 0 分間バージし、次いで、*Pt* (*COD*) Cl_2 (0 . 5 9 2 g , 1 . 5 8 1 m m o l) とカリウム 2 - メチルプロパン - 2 - オレート (0 . 2 6 6 g , 2 . 3 7 1 m m o l) を添加した。反応混合物を 6 0 度 に 1 時間で加熱し、次いで、1 0 日間で 2 2 5 度 に加熱した。反応混合物を濃縮し、3 0 g のセライトに吸着させ、3 5 % の *DCM* / *Hex* で溶出するカラムクロマトグラフィーで精製して、生成物を得た (9 . 1 0 % 収率) 。

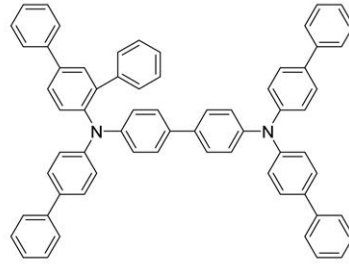
【 0 1 9 7 】

OLED デバイスの作製 : OLED を、シート抵抗 1 5 - 2 0 Ω / sq . を有する酸化インジウムスズ (*ITO*) 層でプレコートしたガラス基板上に成長させた。任意の有機層の堆積又はコーティングに先立ち、基板を溶媒で脱脂し、次いで、1 0 0 m T o r r で 5 0 W にて酸素プラズマで 1 . 5 分間、UV オゾンで 5 分間、処理した。表 2 1 のデバイスを高真空下 (< 1 0 $\times 10^{-6}$ T o r r) にて、熱蒸着で作製した。アノード電極を 7 5 0 度の酸化インジウムスズ (*ITO*) とした。デバイス例は、*ITO* 表面から順に、1 0 0 nm 厚の化合物 A (*HIL*) 、2 5 0 nm 厚の化合物 B 層 (*HTL*) 、5 0 nm 厚の化合物 C 層 (*EBL*) 、1 0 % の発光体をドーブした 3 0 0 nm 厚の化合物 D (*EML*) 、5 0 nm 厚の化合物 E (*BL*) 、3 5 % の化合物 F をドーブした 3 0 0 nm 厚の化合物 G (*ETL*) 、1 0 nm 厚の化合物 G (*EIL*) 、及び 1 , 0 0 0 nm 厚の *Al* (カソード) からなる有機層を有した。デバイスはいずれも、作製直後に、窒素グローブボックス (H_2O 及び O_2 は < 1 p p m) 中で、パッケージ内部に入れる水分ゲッターと共に、エポキシ樹脂で封止したガラス製蓋で封入した。ドーピングパーセンテージは、体積パーセントである。

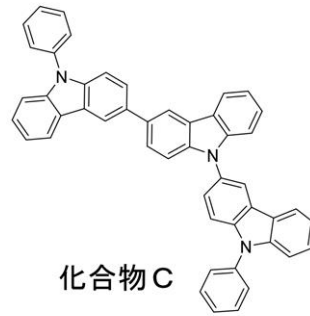
【化 1 5 4】



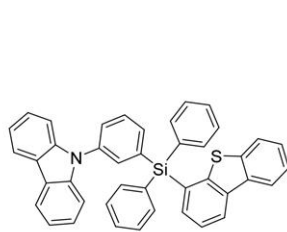
化合物 A



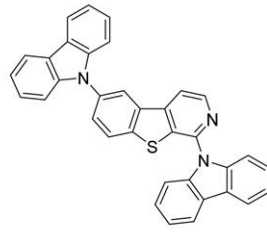
化合物 B



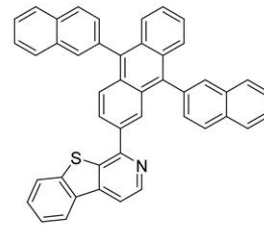
化合物 C



化合物 D



化合物 E



化合物 F



化合物 G

【表 2】

表 2 : デバイスデータ

デバイス	1931 CIE		1,000 ニト					
	x	y	λ max [nm]	FWHM [nm]	電圧 [V]	LE [cd/A]	EQE [%]	PE [lm/W]
化合物 60253535971	0.147	0.165	459	37	0.91	1.24	1.17	1.38
化合物 59736162506	0.129	0.168	465	24	0.95	2.38	2.33	2.52
化合物 59735728275	0.132	0.148	461	20	0.98	1.89	2.01	1.95
化合物 62201598409	0.130	0.188	466	40	0.82	2.17	1.98	2.68
化合物 59735140786	0.135	0.166	462	41	0.91	1.79	1.74	2.00
化合物 59221752029	0.133	0.154	462	22	0.80	1.95	2.03	2.47
比較例	0.137	0.160	461	40	1.00	1.00	1.00	1.00

【0 1 9 8】

表 2 は、本発明化合物である、化合物 6 0 2 5 3 5 3 5 9 7 1、化合物 5 9 7 3 6 1 6 2 5 0 6、化合物 5 9 7 3 5 7 2 8 2 7 5、化合物 6 2 2 0 1 5 9 8 4 0 9、化合物 5 9 7 3 5 1 4 0 7 8 6、及び化合物 5 9 2 2 1 7 5 2 0 2 9 のデバイスデータを示し、比較化合物に対して規格化されている。本発明化合物はいずれも、1 0 0 0 ニトで比較例よりも低い電圧を示している。本発明化合物の E Q E は、比較例の E Q E よりも遥かに高く、このことは、立体的な嵩高さがドーパントの発光を保護するのに有益であることを示している。化合物 5 9 7 3 5 7 2 8 2 7 5 は、0 . 1 4 8 の C I E - y を有し、これは、市販の蛍光青色に匹敵する。

【0 1 9 9】

本明細書において記述されている種々の実施形態は、単なる一例としてのものであり、本発明の範囲を限定することを意図するものではないことが理解される。例えば、本明細書において記述されている材料及び構造の多くは、本発明の趣旨から逸脱することなく他の材料及び構造に置き換えることができる。したがって、特許請求されている通りの本発明は、当業者には明らかとなるように、本明細書において記述されている特定の例及び好ましい実施形態からの変形形態を含み得る。なぜ本発明が作用するのかについての種々の

10

20

30

40

50

理論は限定を意図するものではないことが理解される。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0200】

【特許文献1】米国特許第5,844,363号明細書

【特許文献2】米国特許第6,303,238号明細書

【特許文献3】米国特許第5,707,745号明細書

【特許文献4】米国特許第7,279,704号明細書

【符号の説明】

【0201】

10

100 有機発光デバイス

110 基板

115 アノード

120 正孔注入層

125 正孔輸送層

130 電子ブロッキング層

135 発光層

140 正孔ブロッキング層

145 電子輸送層

150 電子注入層

20

155 保護層

160 カソード

162 第1の導電層

164 第2の導電層

170 バリア層

200 反転させたOLED、デバイス

210 基板

215 カソード

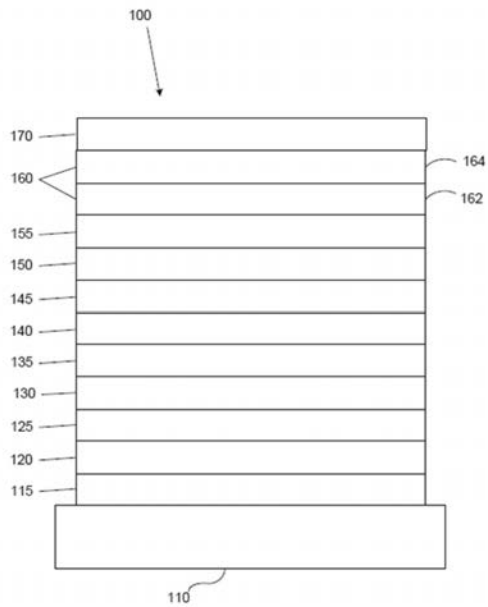
220 発光層

225 正孔輸送層

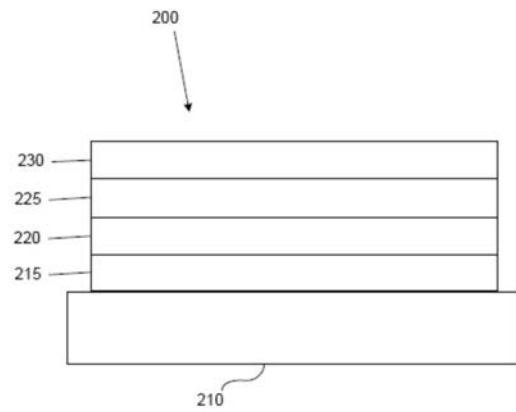
30

230 アノード

【図 1】



【図 2】



【手続補正書】

【提出日】令和2年5月27日(2020.5.27)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

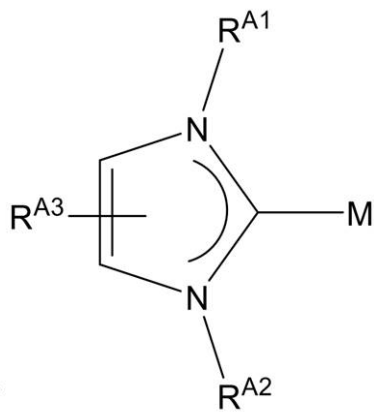
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

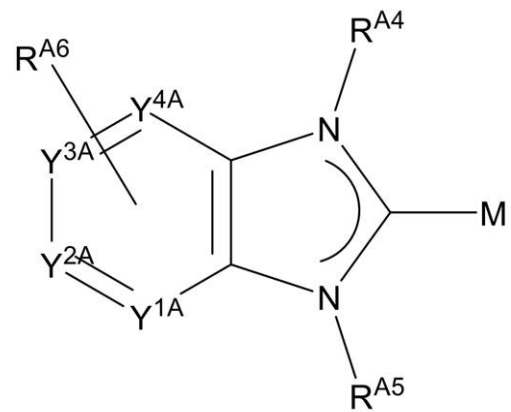
【請求項 1】

以下の式：

【化 1】

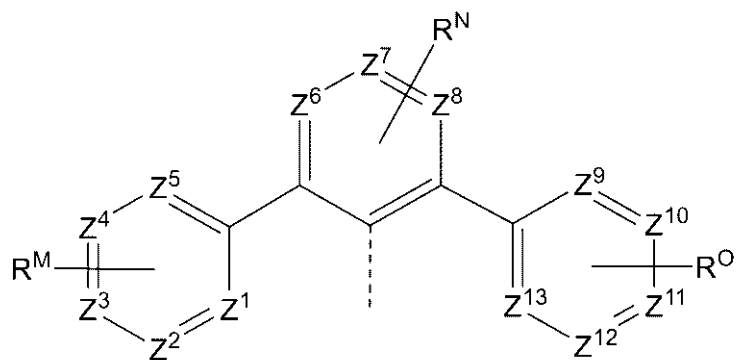


、及び式V I

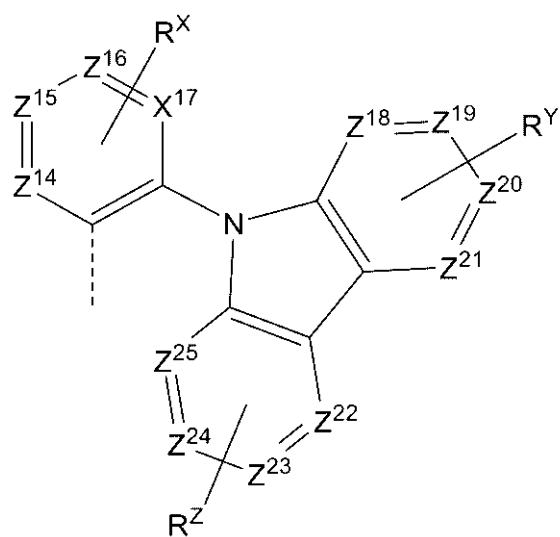


からなる群から選択される式の構造を含むことを特徴とする化合物。

【化 2】

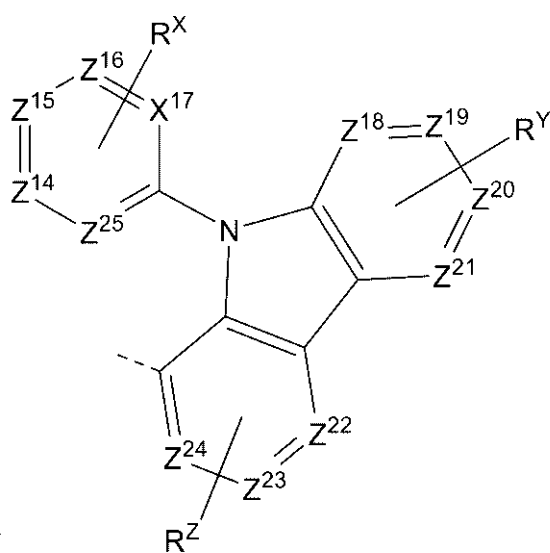


式V I I



式V I I I

、又は



式 I X

$Z^1 \sim Z^{2^5}$ は、それぞれ独立して、 C 又は N であり；

同一環中の3つの連続する $Z^1 \sim Z^{25}$ は、Nであることがなく；

R^{A3} 、 R^{A6} 、 R^M 、 R^N 、 R^O 、 R^X 、 R^Y 、及び R^Z は、それぞれ独立して、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；

各 R^{A1} 、 R^{A2} 、 R^{A3} 、 R^{A4} 、 R^{A5} 、 R^{A6} 、 R^M 、 R^N 、 R^O 、 R^X 、 R^Y 、及び R^Z は、独立して、水素である、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリーロキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基であり；

Mは、他の配位子に配位することができ；

任意の2つの置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；

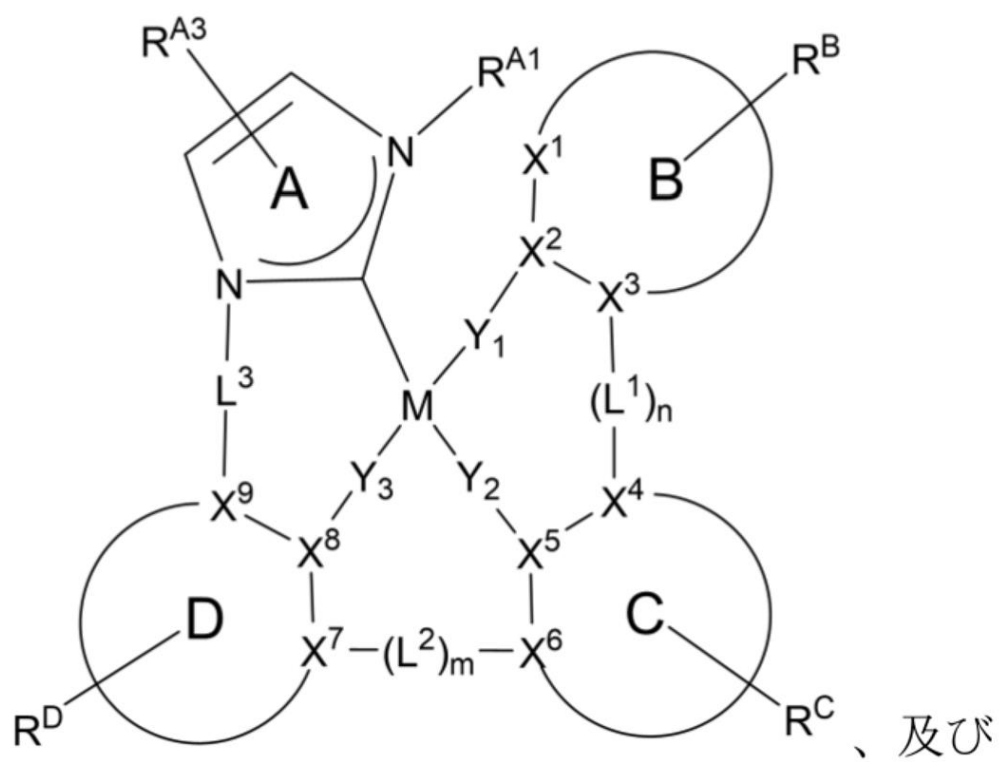
但し、前記化合物が式Vであり、 R^{A1} 及び R^{A2} の一方が式VIIであるとき、 R^M 、 R^N 、及び R^O の少なくとも1つは、重水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。))

【請求項2】

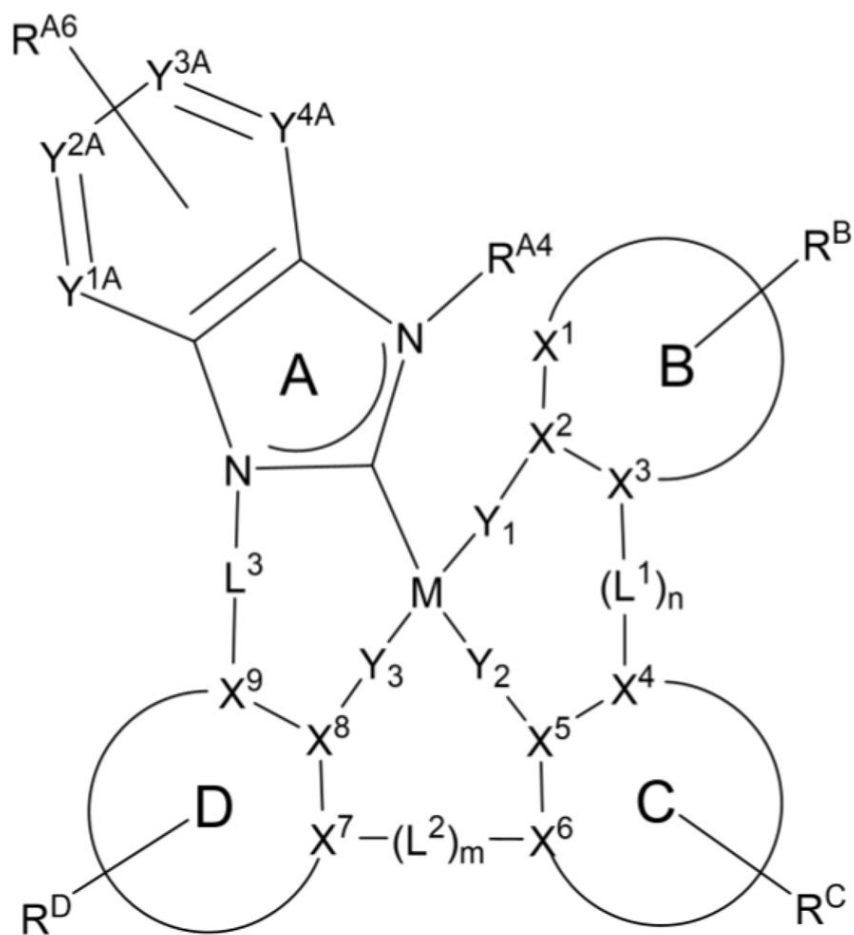
前記化合物が、下記：

【化 3】

式XII



式XIII



(式中、

M は、Pd 又は Pt ；

環 B、C、及び D は、それぞれ独立して、5 員又は 6 員の炭素環又はヘテロ環であり；

$X^1 \sim X^9$ は、それぞれ独立して、C 又は N であり；

$Y_1 \sim Y_3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、及び S からなる群から選択され；

$Y_1 \sim Y_3$ の少なくとも 1 つは、直接結合であり；

$Y^{1A} \sim Y^{4A}$ は、それぞれ独立して、C 又は N であり；

$L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 、 BR' 、及び NR' 、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；

m 及び n は、それぞれ独立して、0 又は 1 であり；

m 及び n の少なくとも 1 つは、1 であり；

R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；

各 R、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、独立して、水素である、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基であり；

任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；

R 及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができる。) からなる群から選択される請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

前記環 B、C、及び D が、それぞれ 6 員芳香環である請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 4】

L^2 が、O、 NR' 、又は $CR'R''$ である請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 5】

L^1 が、直接結合又は NR' である請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 6】

Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 が、それぞれ直接結合である請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 7】

X^1 、 X^3 、及び X^4 が、それぞれ C である請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 8】

m + n が、2 である請求項 2 に記載の化合物。

【請求項 9】

X^8 が、C である請求項 2 に記載の化合物。

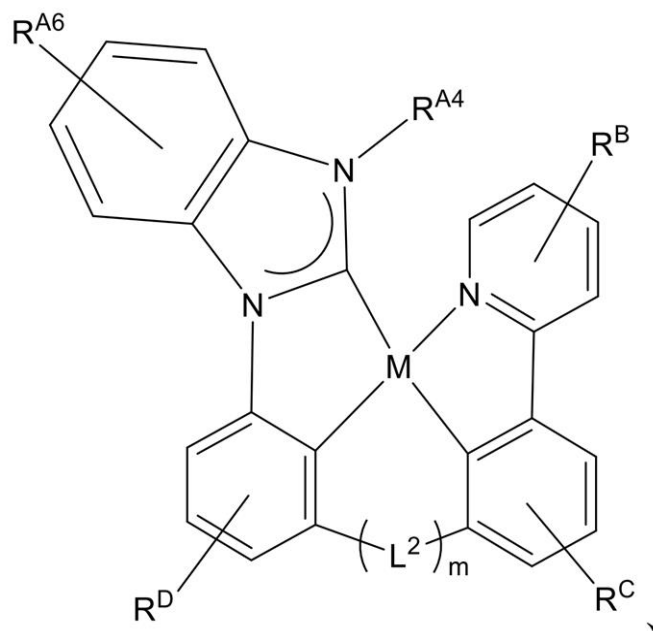
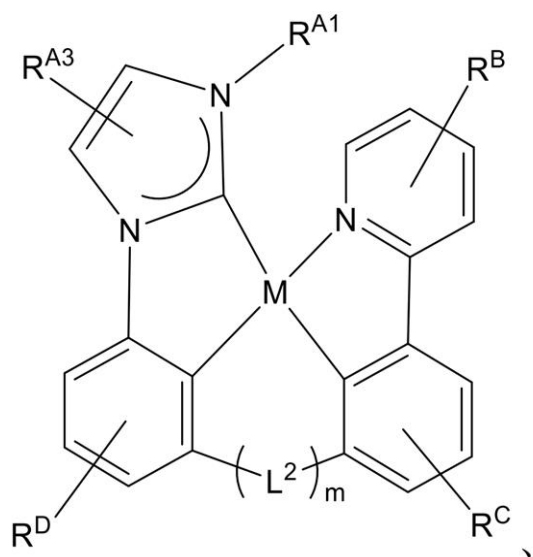
【請求項 10】

$Y^{1A} \sim Y^{4A}$ が、それぞれ C である請求項 2 に記載の化合物。

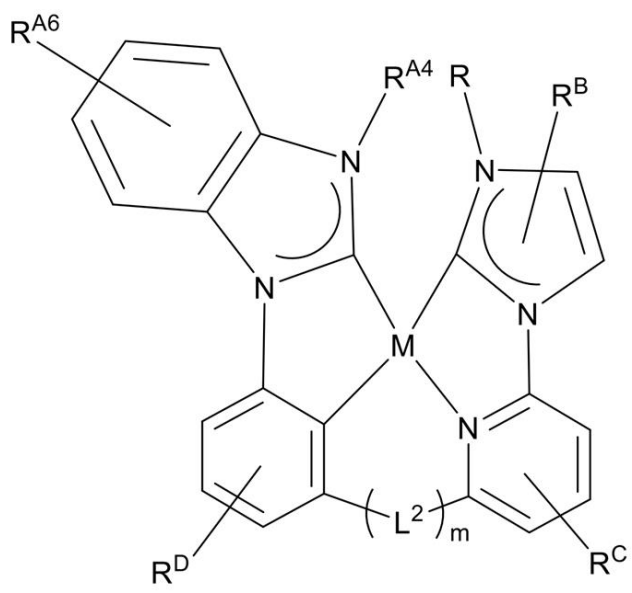
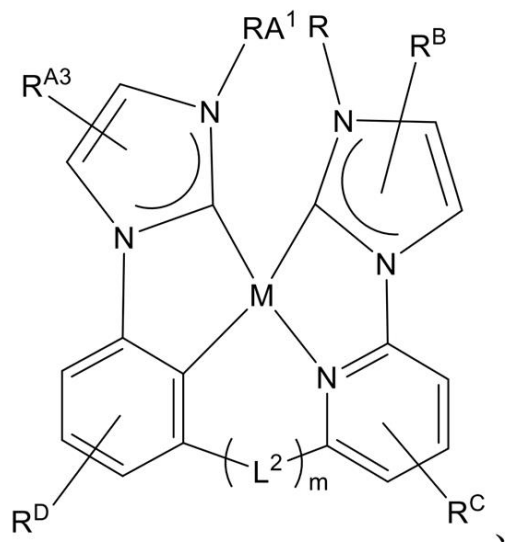
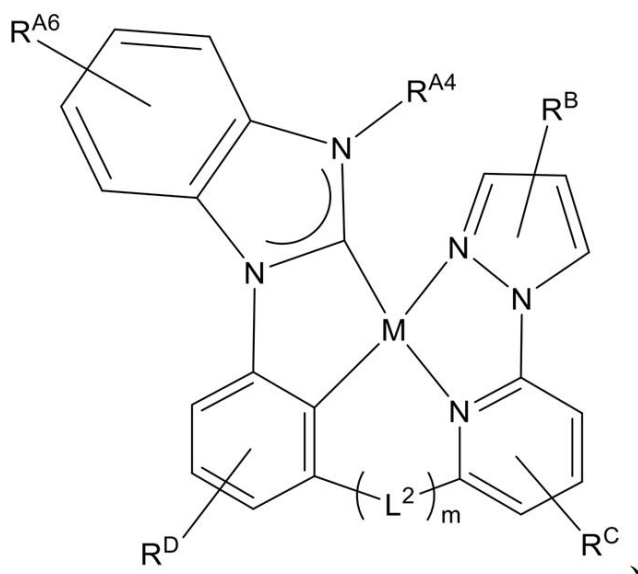
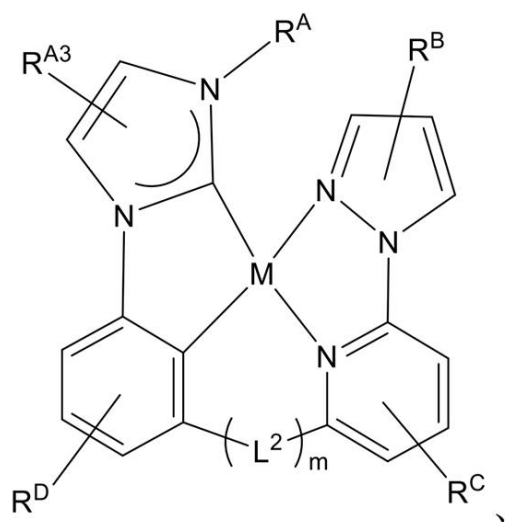
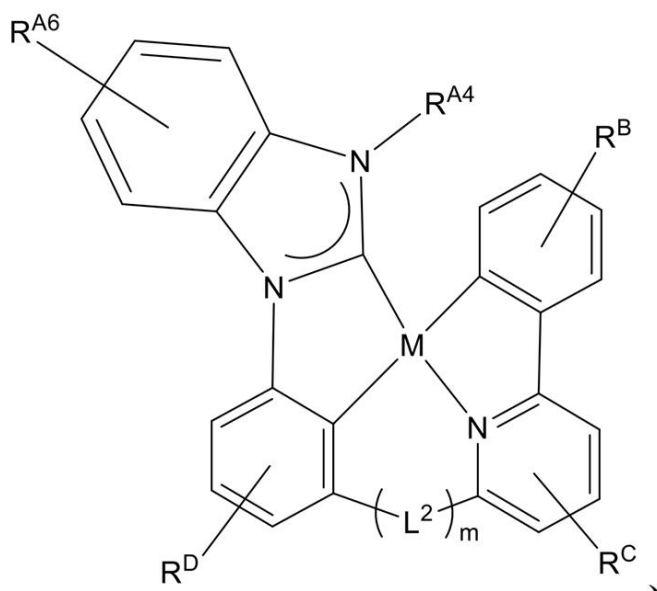
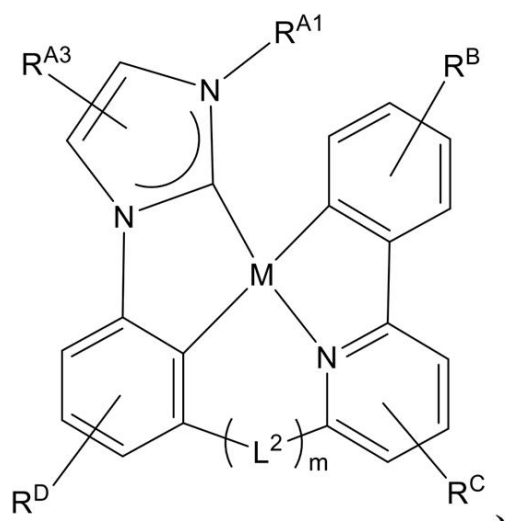
【請求項 11】

前記化合物が、下記：

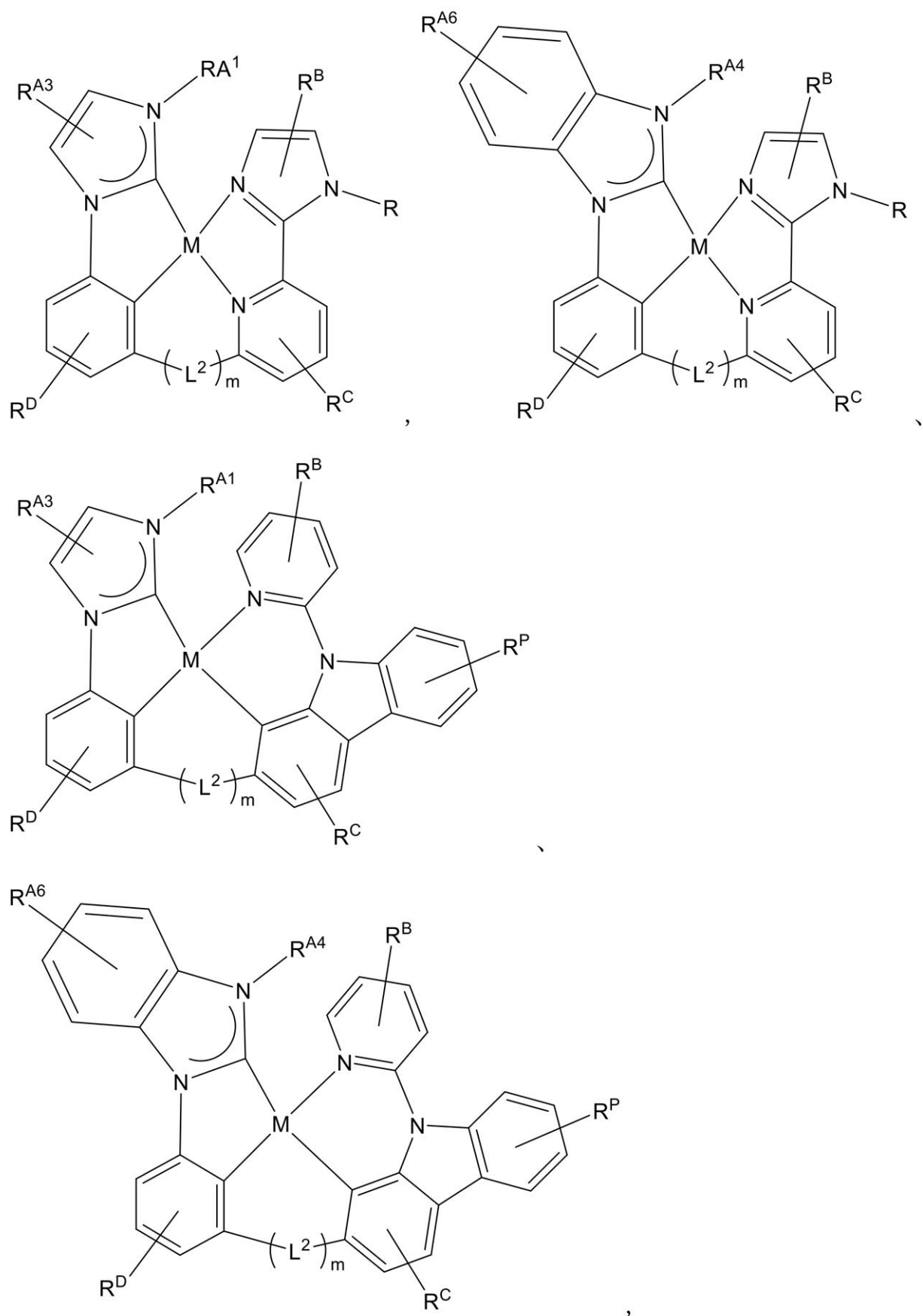
【化 4】



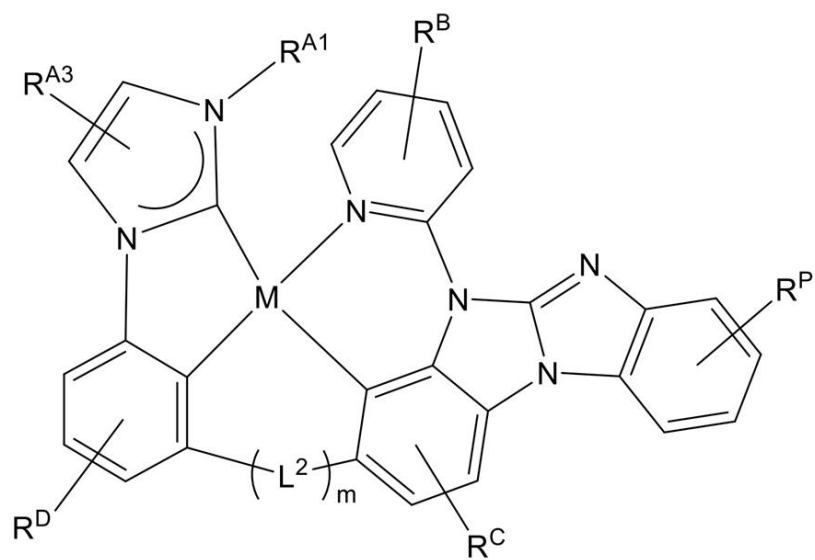
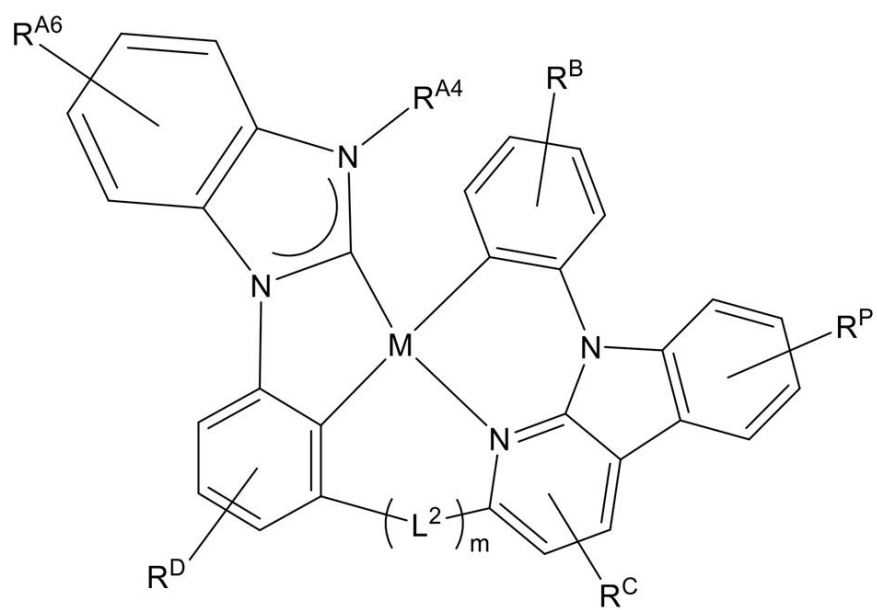
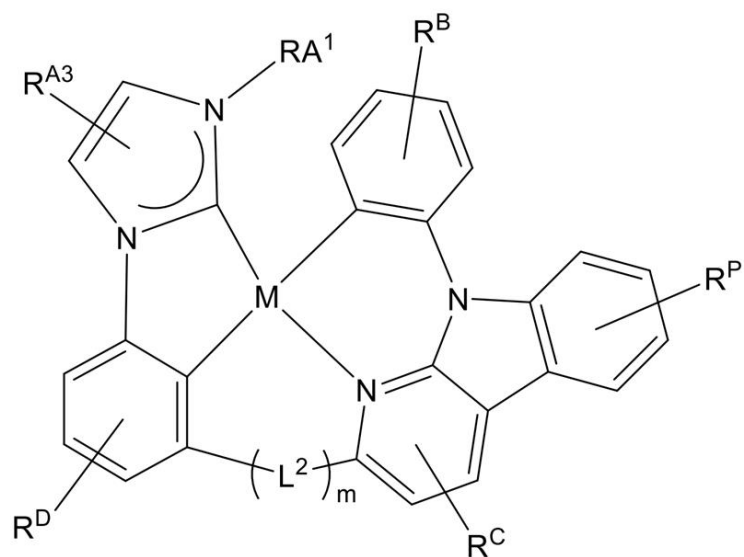
【化 5】



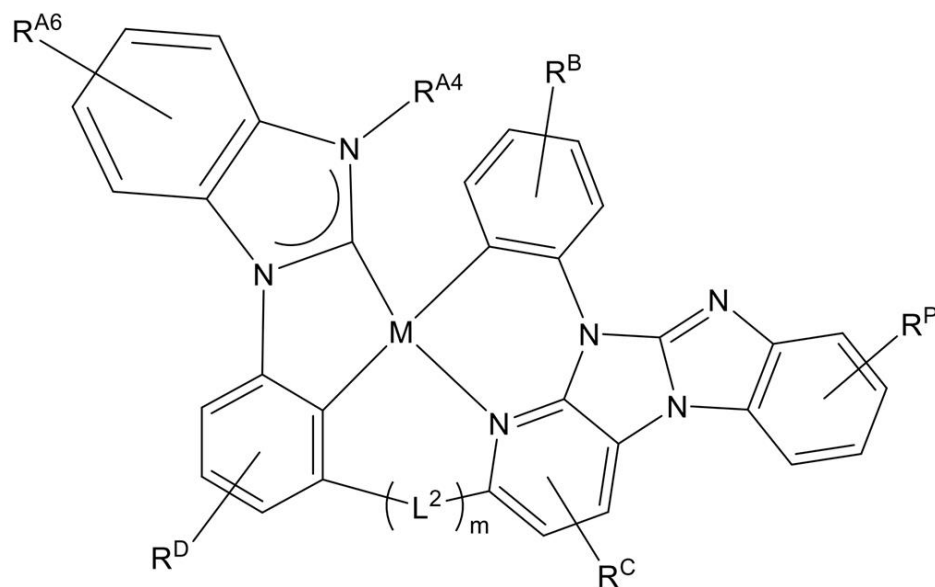
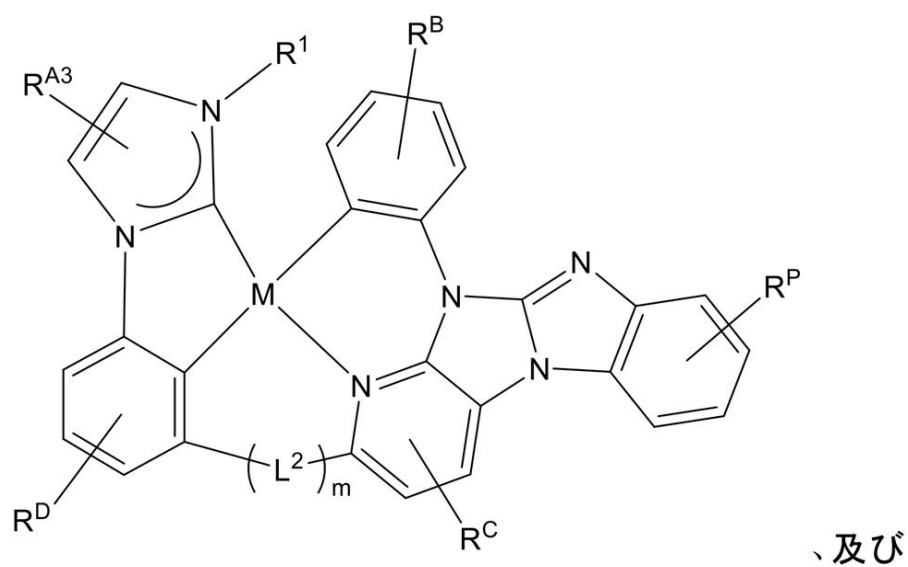
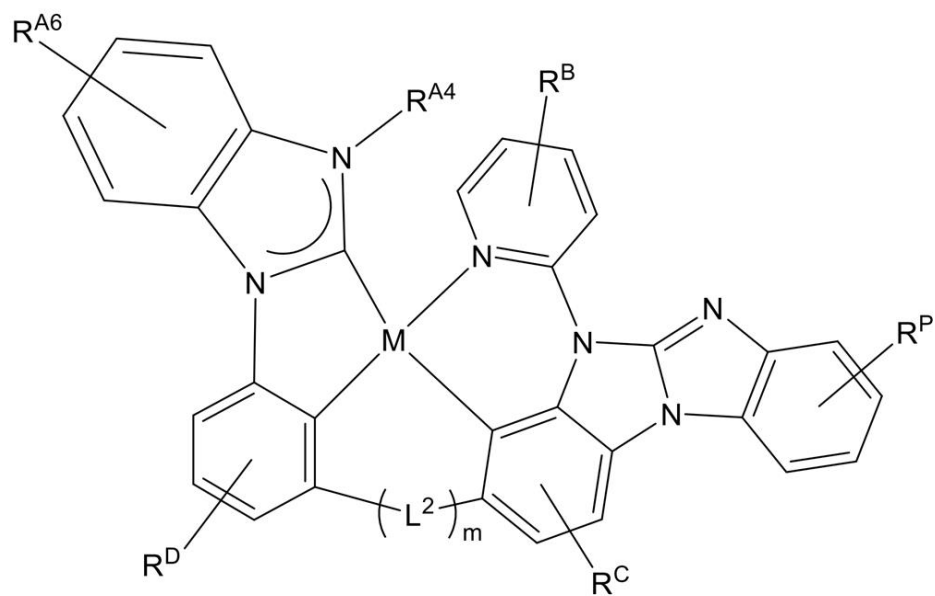
【化 6】



【化 7】



【化 8】



(式中、 R は、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、ア

リール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択され；

R^P は、 R^B 及び R^C と同一の定義を有し；

任意の 2 つの置換基は、互いに結合又は縮合して環を形成することができる。) からなる群から選択される請求項 2 に記載の化合物。

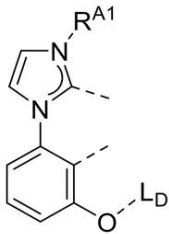
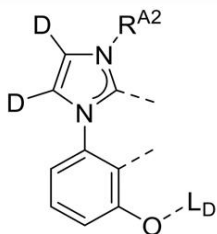
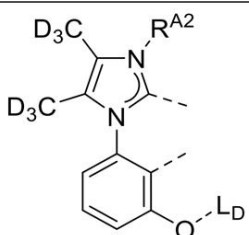
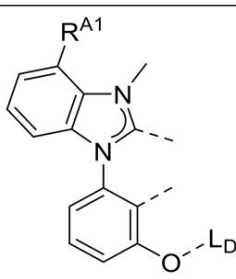
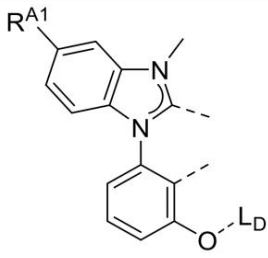
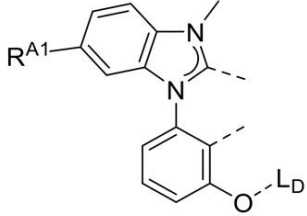
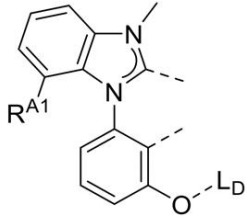
【請求項 12】

前記化合物が、式 $P_t(L_{C_m})(L_{D_n})$ を有する化合物 y からなる群から選択され、 y は、 $y = 25543(m-1) + n$ で定義される整数であり、 m は、1 ~ 2438910 の整数であり、 n は、1 ~ 25543 の整数であり、 L_{C_m} は、以下の構造を有する請求項 2 に記載の化合物。

【化 9】

L_{Cm}	L_{Cm} の構造	Ar^1, R	m
$L_{C1} \sim L_{C110405}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j$
$L_{C110406} \sim L_{C220810}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j + 110405$
$L_{C220811} \sim L_{C331215}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j + 220810$
$L_{C331216} \sim L_{C441620}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j + 331215$
$L_{C441621} \sim L_{C552025}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j + 441620$
$L_{C552026} \sim L_{C662430}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j + 552025$

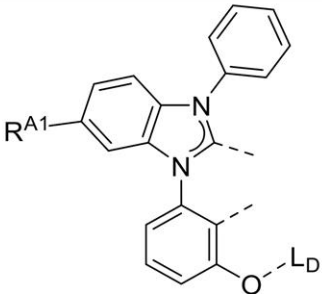
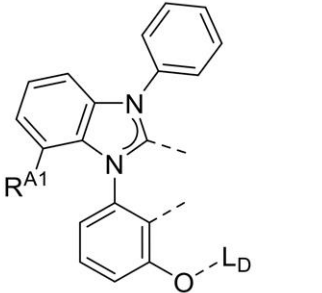
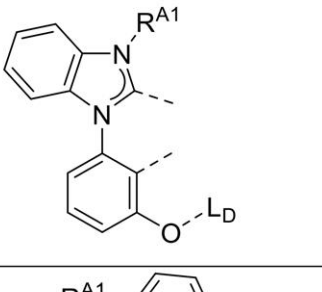
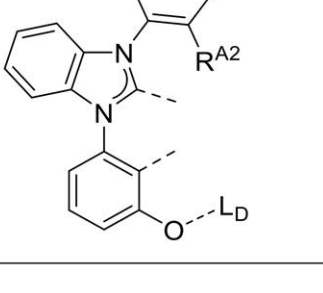
【化 10】

LC662431～LC772835 は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+662430$
LC772836～LC883240 は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+772835$
LC883241～LC993645 は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+883240$
LC993646～LC1104050 は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+993645$
LC1104051～LC1214455 は、右の構造を有 する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+1104050$
LC1214456～LC1324860 は、右の構造を有 する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+1214455$
LC1324861～LC1435265 は、右の構造を有 する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+1324860$

【化 1 1】

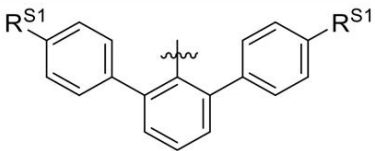
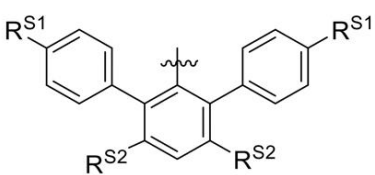
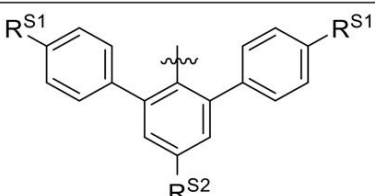
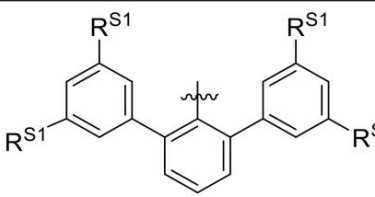
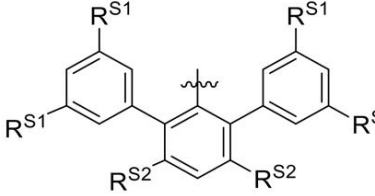
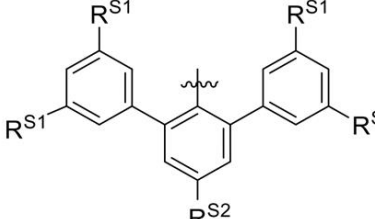
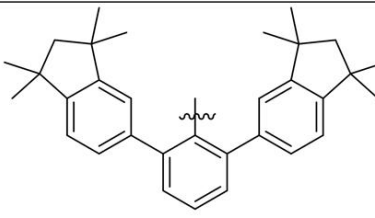
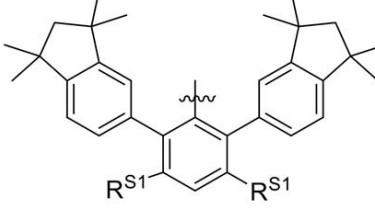
<p>Lc1435266～Lc1545670 は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m=j+1435265$</p>
<p>Lc1545671～Lc1656075 は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m=j+1545670$</p>
<p>Lc1656076～Lc1766480 は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m=j+1656075$</p>
<p>Lc1766481～Lc1876885 は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m=j+1766480$</p>
<p>Lc1876886～Lc1987290 は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m=j+1876885$</p>
<p>Lc1987291～L2097695は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m=j+1987290$</p>

【化 1 2】

$L_{C2097696} \sim L_{C2208100}$ は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j + 2097695$
$L_{C2208101} \sim L_{C2318505}$ は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j + 2208100$
$L_{C2318506} \sim L_{C2428910}$ は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m = j + 2318505$
$L_{C2428910} \sim L_{C2438910}$ は、右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = B_j$ 、 $R^{A2} = B_k$ 、こ こで、 j と k は、 1～100 の整数である	$m = 100(j - 1) + k + 2428910$

ここで、 $R_1 \sim R_{110405}$ は、以下の構造を有し、

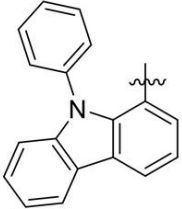
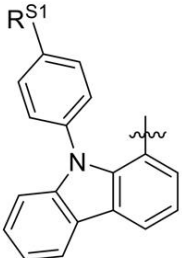
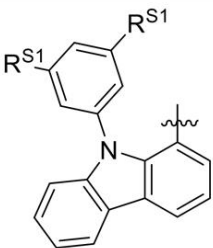
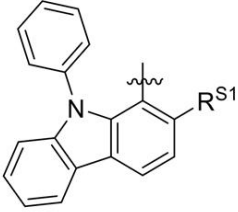
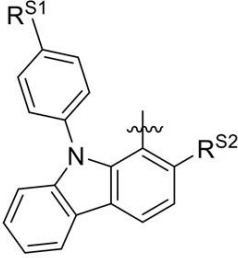
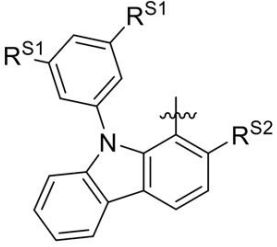
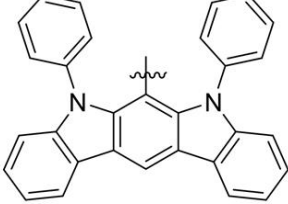
【化 1 3】

R_j	R_m の構造	R^{S1}, R^{S2}, R^{S3}	j
R1~R100 は、右の構造 を有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t$
R101~R10100 は、右の構造 を有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j=100(t-1)+u+100$
R10101~R20100 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j=100(t-1)+u+10100$
R20101~R20200 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t+20100$
R20201~R30200 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j=100(t-1)+u+20100$
R30201~R40200 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j=100(t-1)+u+30200$
R40201は、右の 構造を有する			$j=40201$
R40202~R40301 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t+40201$

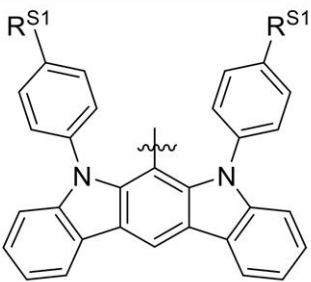
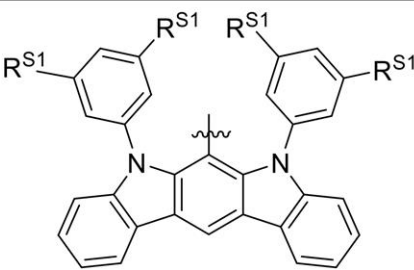
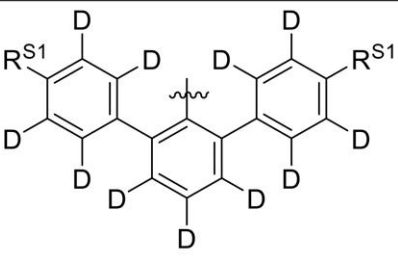
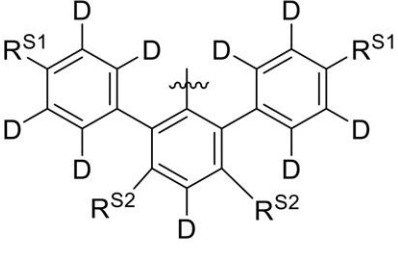
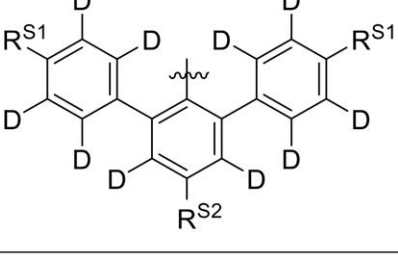
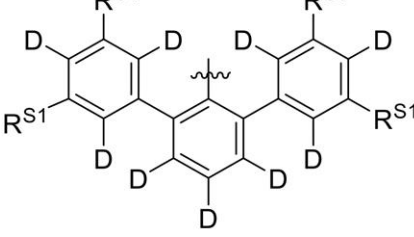
【化 1 4】

R40302～R40401 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40301$
R40402は、右の 構造を有する			$j=40402$
R40403～R40502 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40402$
R40503～R40602 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40502$
R40603～R50602 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+40602$
R50603は、右の 構造を有する			$j=50603$
R50604～R50703 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+50603$

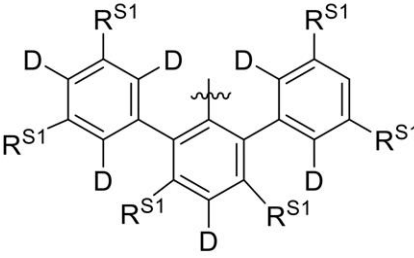
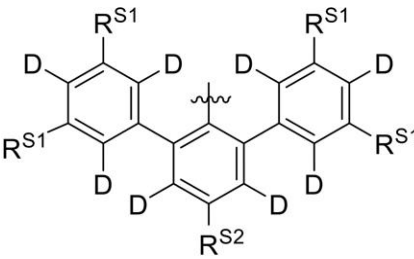
【化 1 5】

R50704は、右の構造を有する			$j = 50704$
R50705～R50804は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j = t + 50704$
R50805～R50904は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j = t + 50804$
R50905～R51004は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$s = t + 50904$
R51005～R61004は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j = 30(t-1) + u + 51004$
R61005～R71004は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j = 30(t-1) + u + 61004$
R71005は、右の構造を有する			$j = 71005$

【化 1 6】

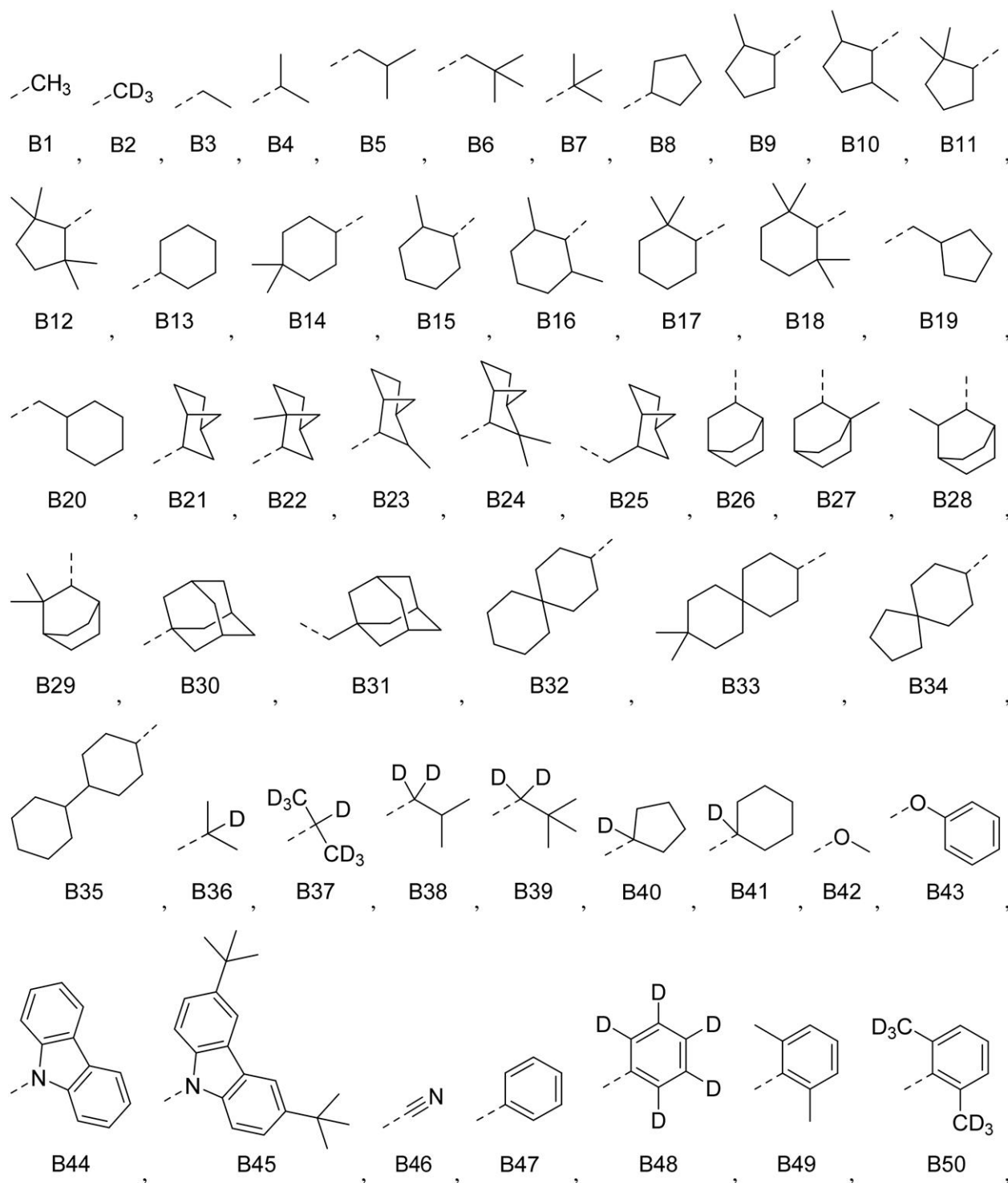
R71006～R71105 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+71105$
R71106～R71205 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+71105$
R71206～R71305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+71205$
R71306～R81305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+71305$
R81306～R91305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+81305$
R91306～R91405 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+91305$

【化 1 7】

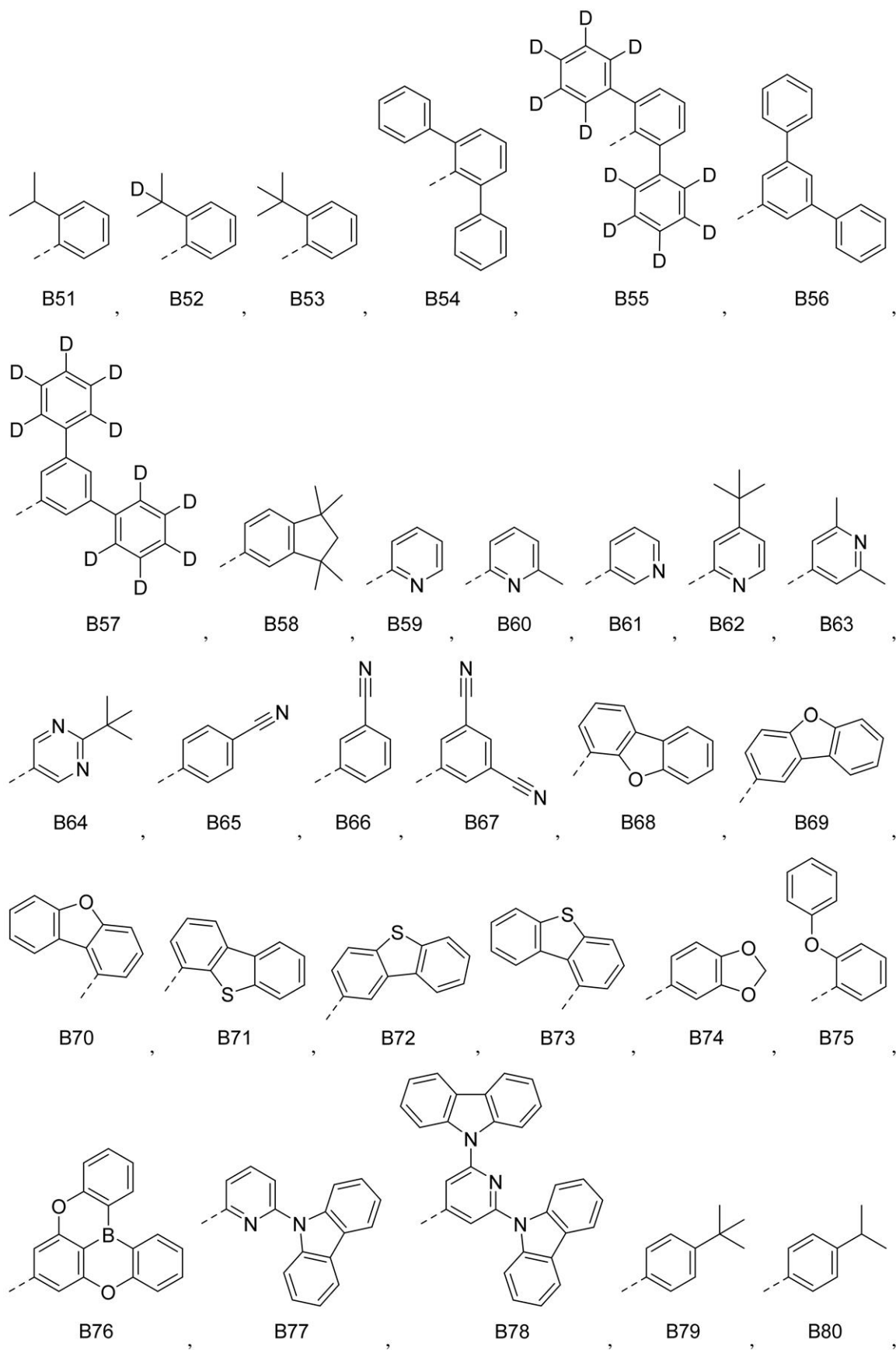
<p>R91406～R101405 は、右の構造を 有する</p>		<p>式中、$R^{S1}=Bt$、 $R^{S2}=Bu$、ここで、 t及びuは、1～100の 整数である</p>	$j=100(t-1)+u+91405$
<p>R101406～ R110405は、右 の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{S1}=Bt$、 $R^{S2}=Bu$、ここで、 t及びuは、1～100の 整数である</p>	$j=100(t-1)+u+101405$

ここで、B 1 ～ B 1 0 0 は、以下の構造を有し、

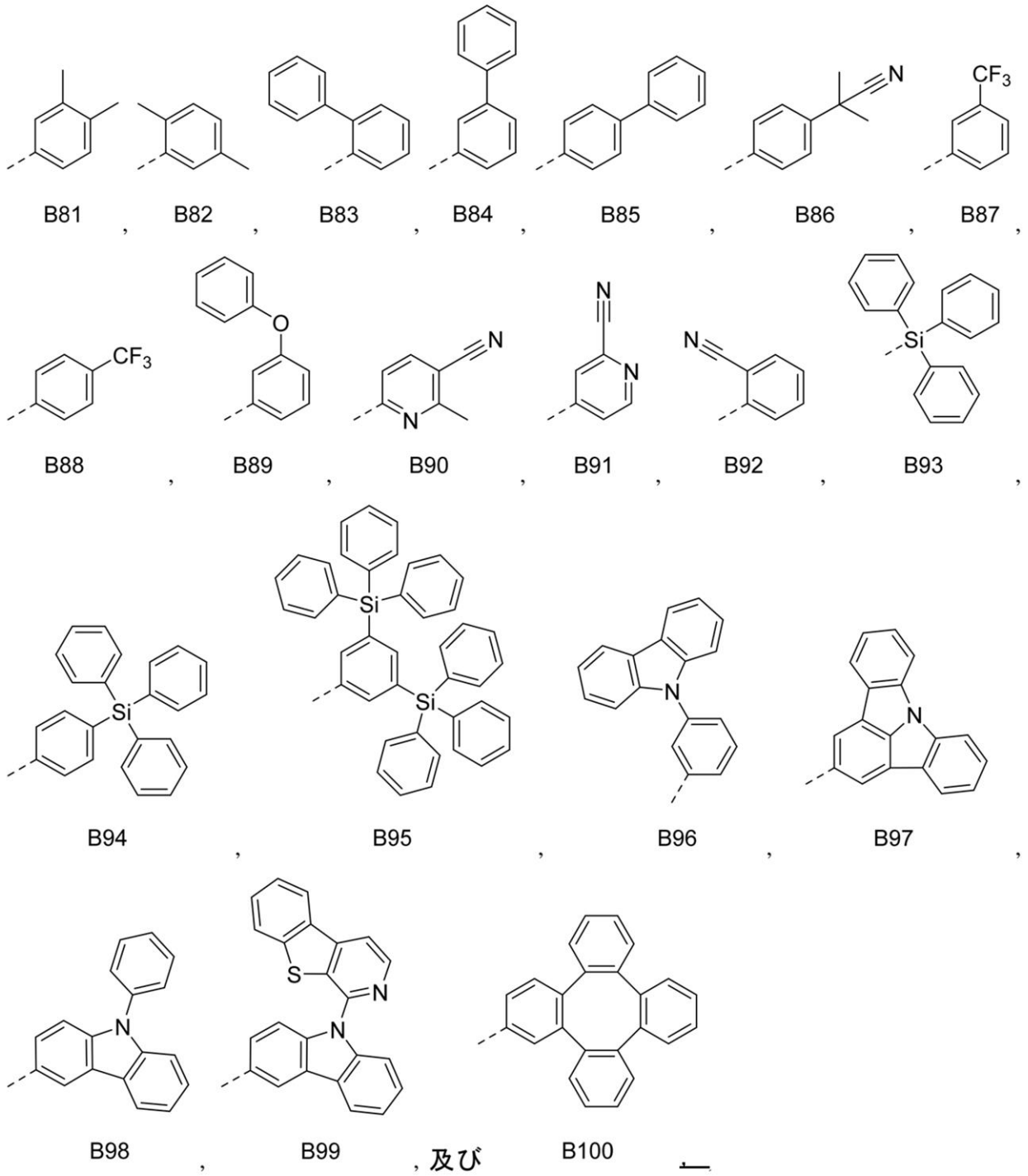
【化 1 8】



【化 19】

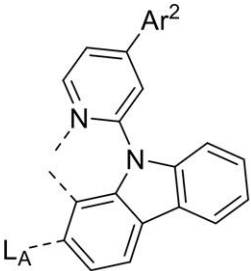
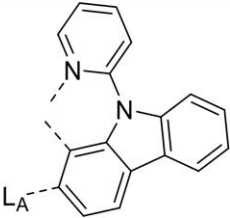
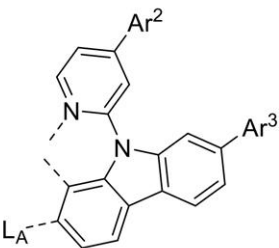
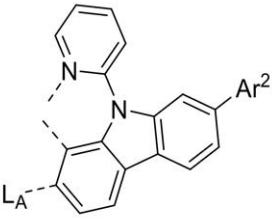
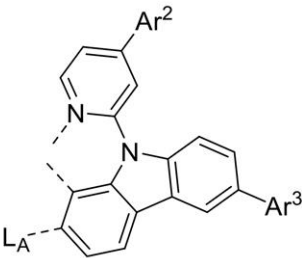
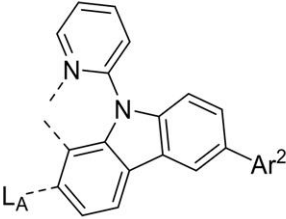


【化 2 0】



L_{Dn} は、以下の構造を有し、

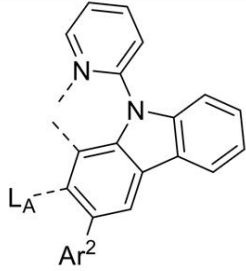
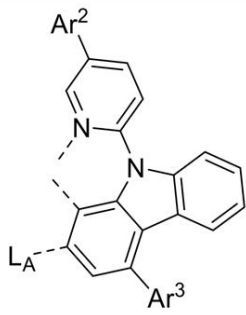
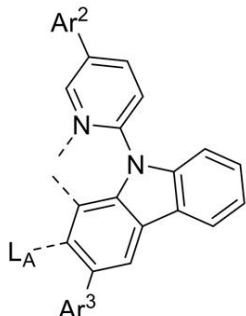
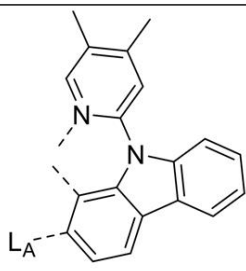
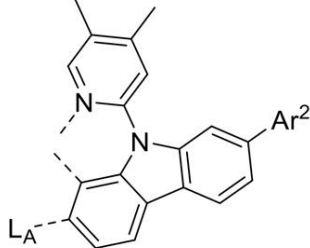
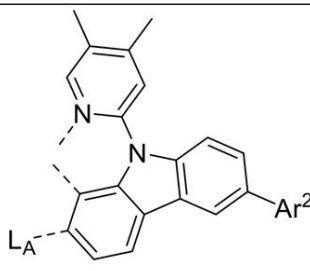
【化 2 1】

L_{Dn}	L_{Dn} の構造	Ar^2, Ar^3, R^2	n
$L_{D1} \sim L_{D30}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30 の整数である	$n = j$
L_{D31} は、右の構造を有する			$n = 31$
$L_{D32} \sim L_{D931}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30 の整数であり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 31$
$L_{D932} \sim L_{D961}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30 の整数である	$n = j + 931$
$L_{D962} \sim L_{D1861}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30 の整数であり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 961$
$L_{D1862} \sim L_{D1891}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30 の整数である	$n = j + 1861$

【化 2 2】

LD1892～LD1921 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 1891$
LD1922～LD2821 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 1921$
LD2822～LD3721 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 2821$
LD3722～LD4621 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 3721$
LD4622～LD4651 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 4621$
LD4652～LD5551 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 4651$

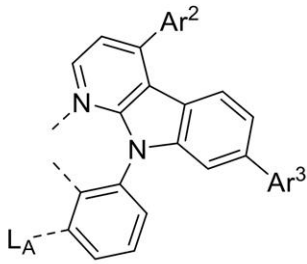
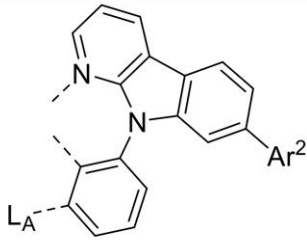
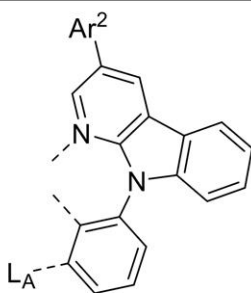
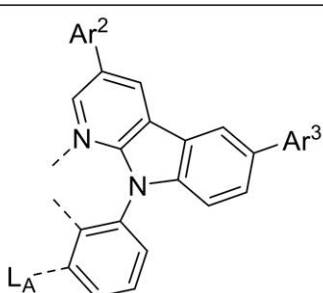
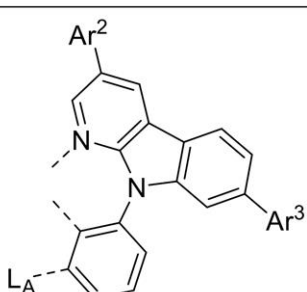
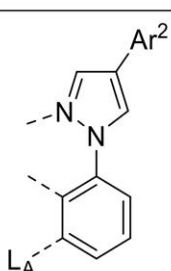
【化 2 3】

LD5552～LD5581は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 5551$
LD5582～LD6481は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 5581$
LD6482～LD7381は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 6481$
LD7382は、右の構 造を有する			$n = 7382$
LD7383～LD7412は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7382$
LD7413～LD7442は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7412$

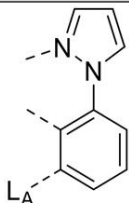
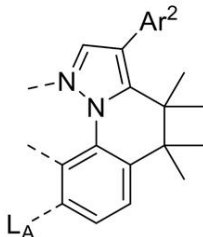
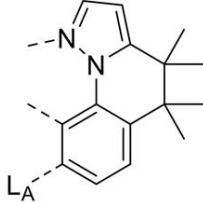
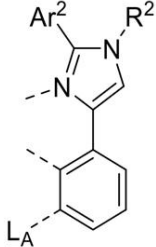
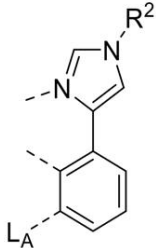
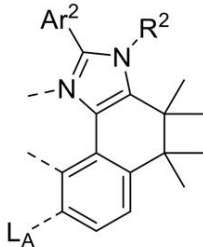
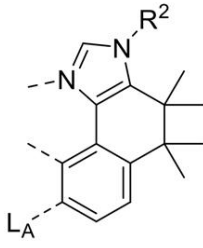
【化 2 4】

LD7443～LD7472 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7442$
LD7473～LD7502 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7472$
LD7503 は、右の構 造を有する			$n = 7503$
LD7504～LD7533 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7503$
LD7534～LD8433 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 7533$
LD8434～LD8463 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 8433$

【化 2 5】

LD8464～LD9363 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 8463$
LD9364～LD9393 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 9363$
LD9394～LD9423 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 9393$
LD9424～LD10323 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 9423$
LD10324～LD11223 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 10323$
LD11224～LD11253 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 11223$

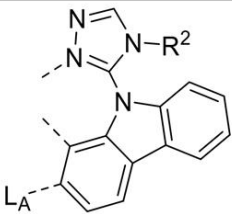
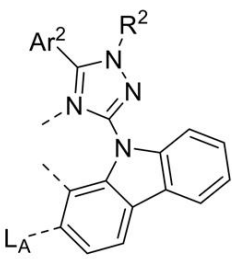
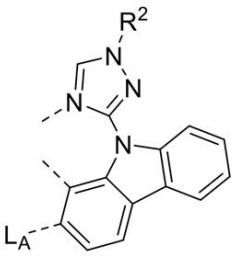
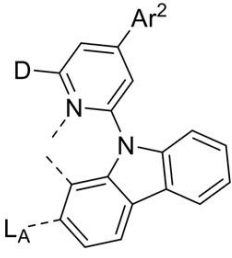
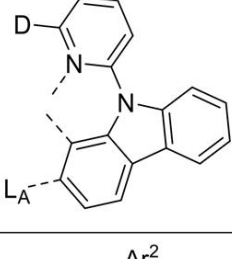
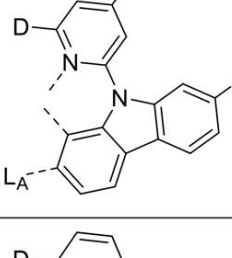
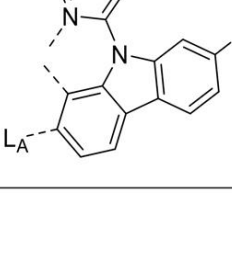
【化 2 6】

LD11254は、右の構造を有する			$n = 11254$
LD11255～LD11284は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30の整数である	$n = j + 11254$
LD11285は、右の構造を有する			$n = 11285$
LD11286～LD12185は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $R^2 = Al$ 、ここで、 j は、1～30の整数であり、 l は、1～30の整数である	$n = 30(j-1) + l + 11285$
LD12186～LD12215は、右の構造を有する		式中、 $R^2 = Al$ 、ここで、 l は、1～30の整数である	$n = l + 12185$
LD12216～LD13115は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $R^2 = Al$ 、ここで、 j は、1～30の整数であり、 l は、1～30の整数である	$n = 30(j-1) + l + 12215$
LD13116～LD13145は、右の構造を有する		式中、 $R^2 = Al$ 、ここで、 l は、1～30の整数である	$n = l + 13115$

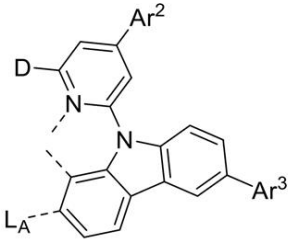
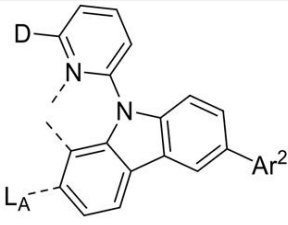
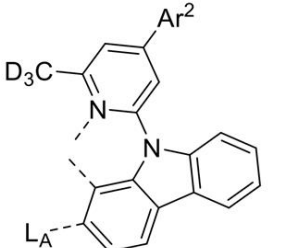
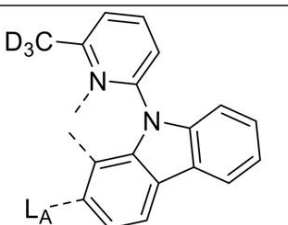
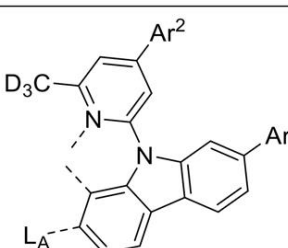
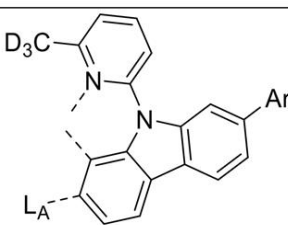
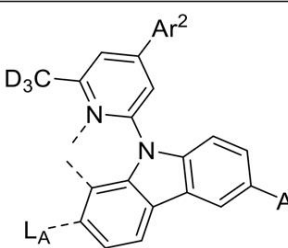
【化 2 7】

L _{D13146} ～L _{D14045} は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =Aj 及び R ² =Al、ここで、 <i>j</i> は、1～30 の整数で あり、 <i>l</i> は、1～30 の 整数である	$n = 30(j-1) + l + 13145$
L _{D14046} ～L _{D14075} は、 右の構造を有する		式中、R ² =Al、ここ で、 <i>l</i> は、1～30 の整 数である	$n = l + 14045$
L _{D14076} ～L _{D14975} は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =Aj 及び R ² =Al、ここで、 <i>j</i> は、1～30 の整数で あり、 <i>l</i> は、1～30 の 整数である	$n = 30(j-1) + l + 14075$
L _{D14976} ～L _{D15005} は、 右の構造を有する		式中、R ² =Al、ここ で、 <i>l</i> は、1～30 の整 数である	$n = l + 14975$
L _{D15006} ～L _{D15905} は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =Aj 及び R ² =Al、ここで、 <i>j</i> は、1～30 の整数で あり、 <i>l</i> は、1～30 の 整数である	$n = 30(j-1) + l + 15005$
L _{D15906} ～L _{D15935} は、 右の構造を有する		式中、R ² =Al、ここ で、 <i>l</i> は、1～30 の整 数である	$n = l + 15905$
L _{D15936} ～L _{D16835} は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =Aj 及び R ² =Al、ここで、 <i>j</i> は、1～30 の整数で あり、 <i>l</i> は、1～30 の 整数である	$n = 30(j-1) + l + 15935$

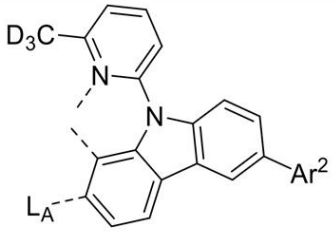
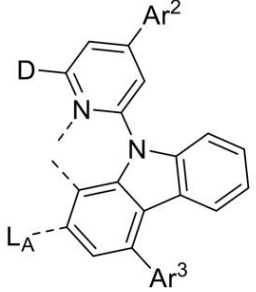
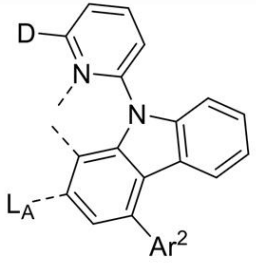
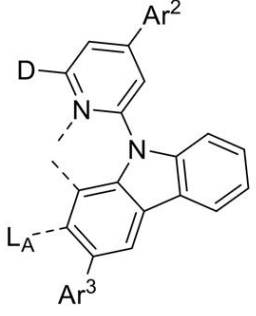
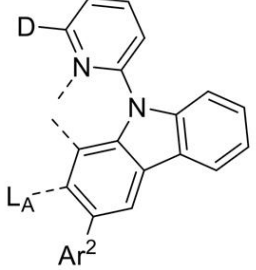
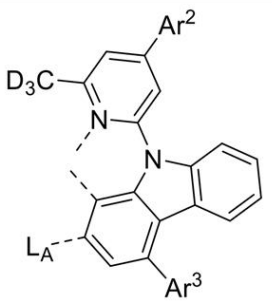
【化 2 8】

LD16836～LD16865は、 右の構造を有する		式中、 $R^2=Al$ 、こ こで、 l は、1～30の整 数である	$n=l+16835$
LD16866～LD17765は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2=Aj$ 及び $R^2=Al$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 l は、1～30の 整数である	$n=30(j-1)+l+16865$
LD17766～LD17795は、 右の構造を有する		式中、 $R^2=Al$ 、こ こで、 l は、1～30の整 数である	$n=l+17765$
LD17796～LD17825は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2=Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n=j+17795$
LD17826は、右の構 造を有する			$n=17826$
LD17827～LD18726は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2=Aj$ 及び $Ar^3=Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n=30(j-1)+m+17826$
LD18727～LD18756は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2=Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n=j+18726$

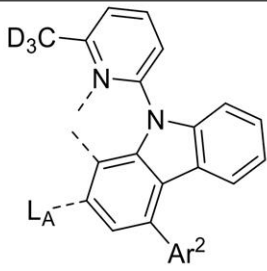
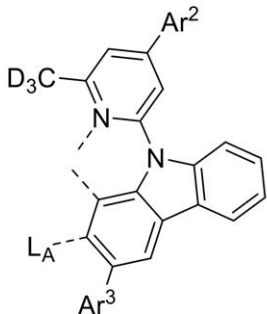
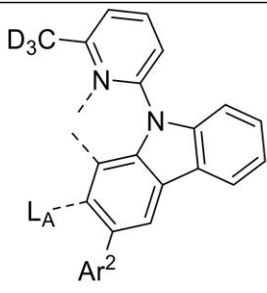
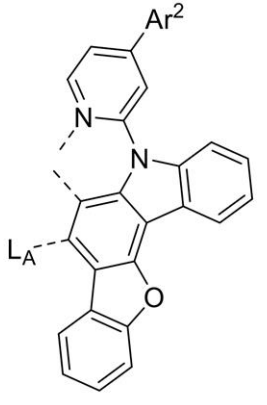
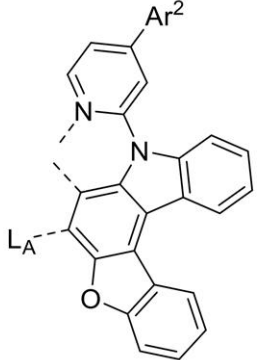
【化 2 9】

LD18757～LD19656は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 18756$
LD19657～LD19686は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 19656$
LD19687～LD19716は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 19686$
LD19717は、右の構 造を有する			$n = 19717$
LD19718～LD20617は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 19717$
LD20618～LD20647は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 20617$
LD20648～LD21547は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 20647$

【化 3 0】

LD21548～LD21577は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 21547$
LD21578～LD22477は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 21577$
LD22478～LD22507は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 22477$
LD22508～LD23407は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 22507$
LD23408～LD23437は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 23407$
LD23438～LD24337は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 23437$

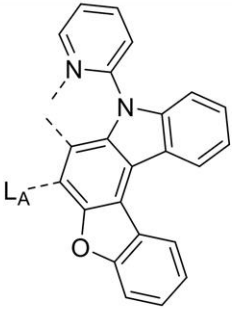
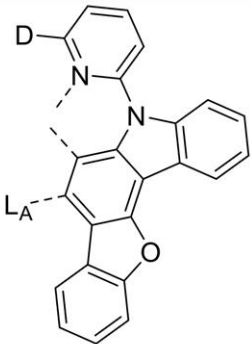
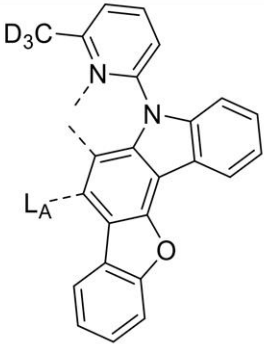
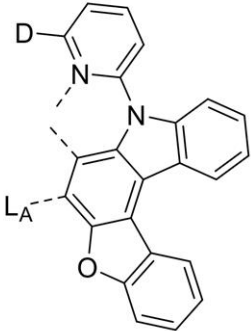
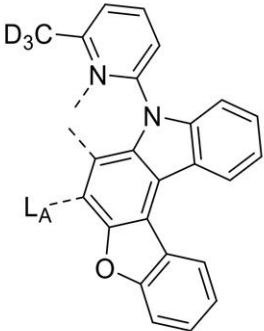
【化 3 1】

LD24338～LD24367は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 24337$
LD24368～LD25267は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 24367$
LD25268～LD25297は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25267$
LD25298～LD25327は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25297$
LD25328～LD25357は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25327$

【化 3 2】

LD25358～LD25387は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25357$
LD25388～LD25417は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25387$
LD25418～LD25447は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25417$
LD25448～LB25477は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25447$
LD25478は、右の構 造を有する			$n = 25478$

【化 3 3】

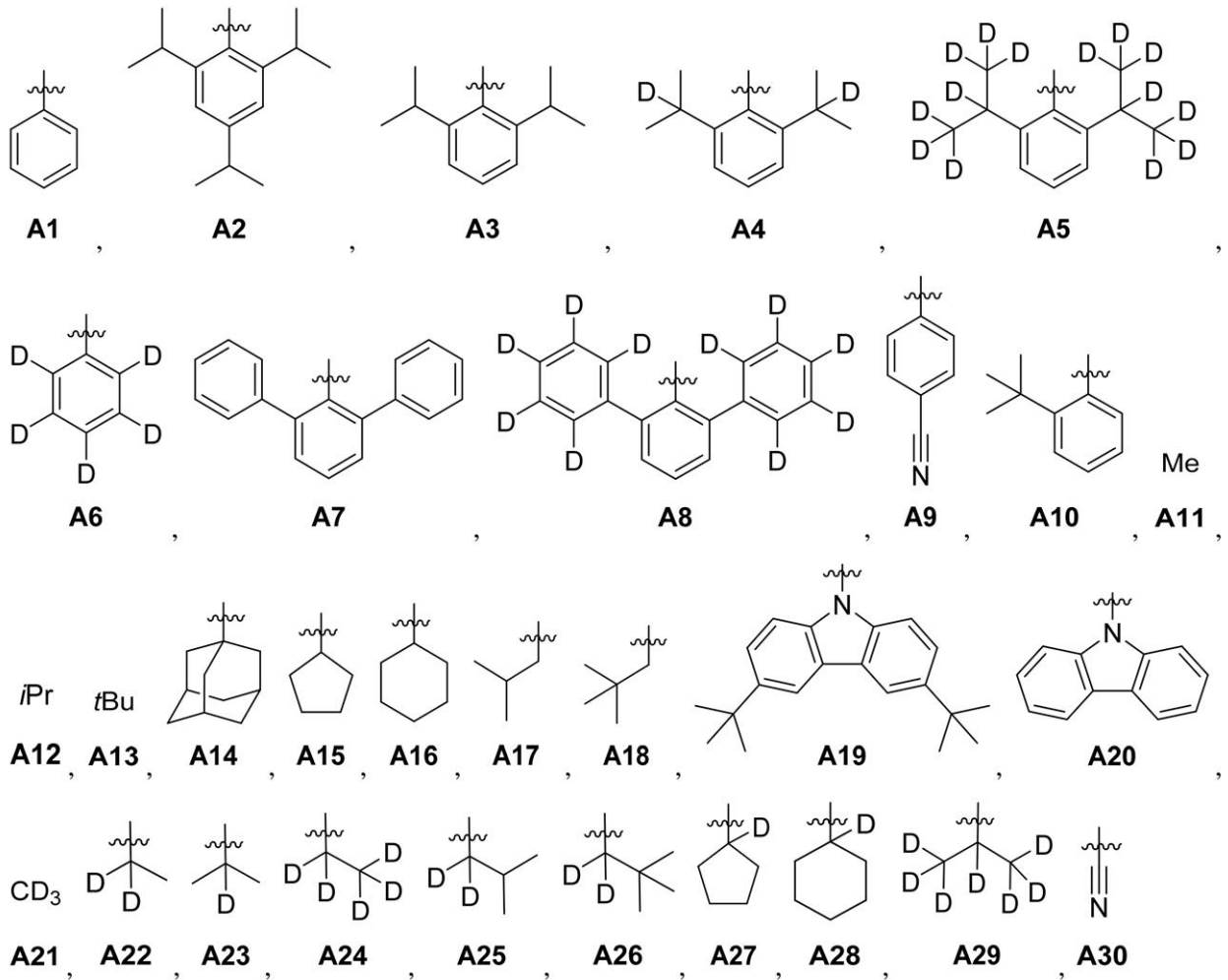
LD25479 は、右の構造を有する			$n = 25479$
LD25480 は、右の構造を有する			$n = 25480$
LD25481 は、右の構造を有する			$n = 25481$
LD25482 は、右の構造を有する			$n = 25482$
LD25483 は、右の構造を有する			$n = 25483$

【化 3 4】

LD25484~LD25513 は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =A _j 、こ こで、jは、1~30の整 数である	$n=j+25483$
LD25514~LD25543 は、 右の構造を有する		式中、Ar ² =A _j 、こ こで、jは、1~30の整 数である	$n=j+25513$

式中、A 1 ~ A 3 0 は、以下の構造を有する。

【化 3 5】

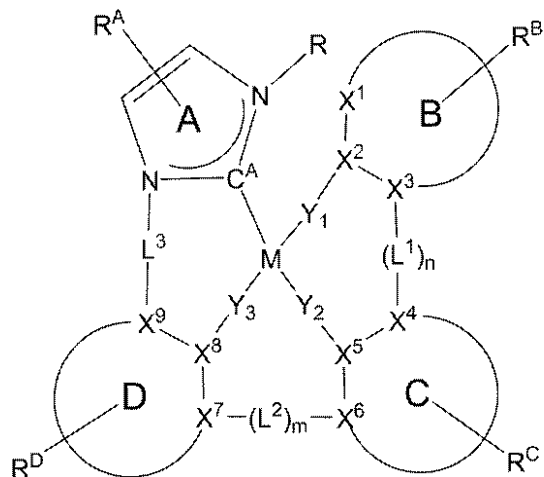


【請求項 1 3】

アノードと、
カソードと、

前記アノードと前記カソードとの間に配置された有機層とを含み、前記有機層は、以下の式 I の化合物を含むことを特徴とする有機発光デバイス (OLED)。

【化 3 6】



式 I

(式中、

M は、Pd 又は Pt ;

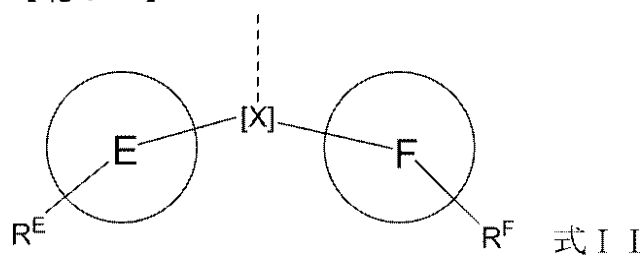
環 B、C、及び D は、それぞれ独立して、5 員又は 6 員の炭素環又はヘテロ環であり ;

 $X^1 \sim X^9$ は、それぞれ独立して、C 又は N であり ; $Y_1 \sim Y_3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、及び S からなる群から選択され ; $Y_1 \sim Y_3$ の少なくとも 1 つは、直接結合であり ; C^A は、カルベン炭素であり ; $L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 、 BR' 、及び NR' 、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され ;

m 及び n は、それぞれ独立して、0 又は 1 であり ;

m 及び n の少なくとも 1 つは、1 であり ; R、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも 1 つは、以下の式 II :

【化 3 7】



式 II

の構造を有する基を含み、

式中、

[X] は、5 員ヘテロ環、5 員炭素環、6 員ヘテロ環、6 員炭素環、又は 2 つ以上の縮合環を含む縮合ヘテロ環又は炭素環系であり ;

環 E 及び F は、それぞれ独立して、5 員又は 6 員の炭素環又はヘテロ環であり ;

 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し ;各 R、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、水素である、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリールオキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基であり ;

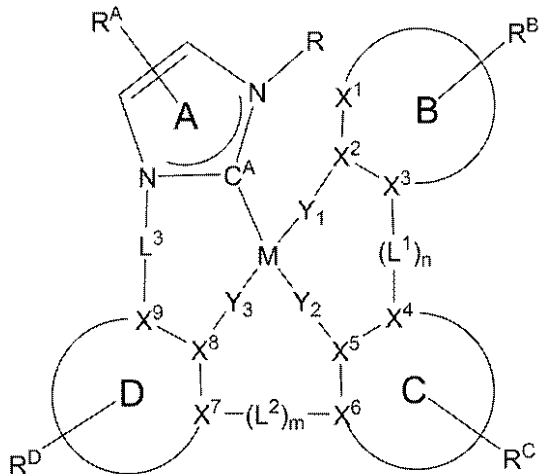
任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；
 R 及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができ；
 式 I I の構造を有する基の分子量は、395 グラム / モル以上である。)

【請求項 14】

アノードと、
 カソードと、

前記アノードと前記カソードとの間に配置された有機層とを含み、前記有機層が、以下の式 I の化合物を含む有機発光デバイス (OLED) を含むことを特徴とする消費者製品。

【化 38】



式 I

(式中、

M は、Pd 又は Pt；

環 B、C、及び D は、それぞれ独立して、5 員又は 6 員の炭素環又はヘテロ環であり；

X¹ ~ X⁹ は、それぞれ独立して、C 又は N であり；

Y₁ ~ Y₃ は、それぞれ独立して、直接結合、O、及び S からなる群から選択され；

Y₁ ~ Y₃ の少なくとも 1 つは、直接結合であり；

C^A は、カルベン炭素であり；

L¹ ~ L³ は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、CR'¹R'²、SiR'¹R'²、BR'、及び NR'、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；

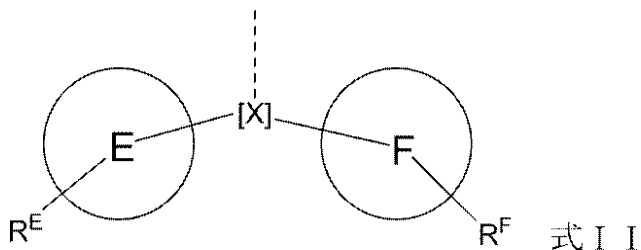
m 及び n は、それぞれ独立して、0 又は 1 であり；

m 及び n の少なくとも 1 つは、1 であり；

R、R^A、R^B、R^C、R^D、L¹、L²、及び L³ の少なくとも 1 つは、以下の式 I

I：

【化 39】



式 II

の構造を有する基を含み、

式中、

[X] は、5 員ヘテロ環、5 員炭素環、6 員ヘテロ環、6 員炭素環、又は 2 つ以上の縮合環を含む縮合ヘテロ環又は炭素環系であり；

環 E 及び F は、それぞれ独立して、5 員又は 6 員の炭素環又はヘテロ環であり；

R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；

各 R 、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、水素である、又は重水素、ハロゲン、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリールアルキル、アルコキシ、アリーロキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アルキニル、アリール、ヘテロアリール、アシル、カルボン酸、エーテル、エステル、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、スルフィニル、スルホニル、ホスフィノ、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基であり；

任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；

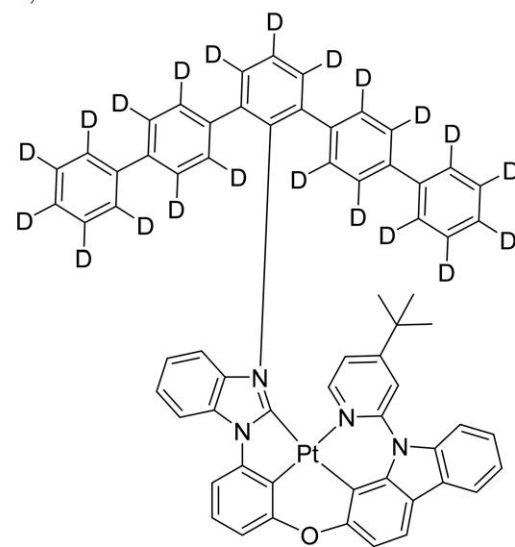
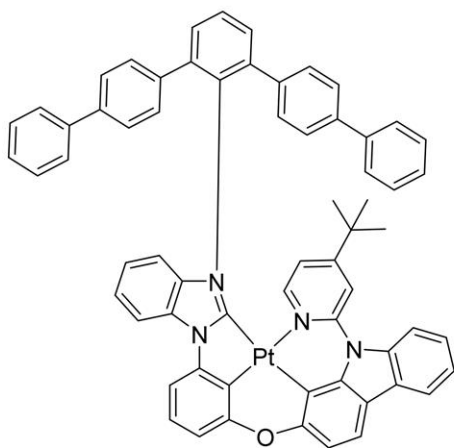
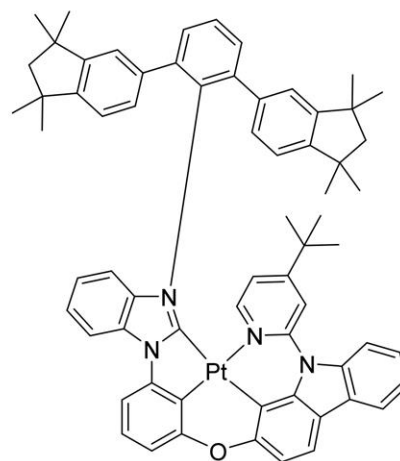
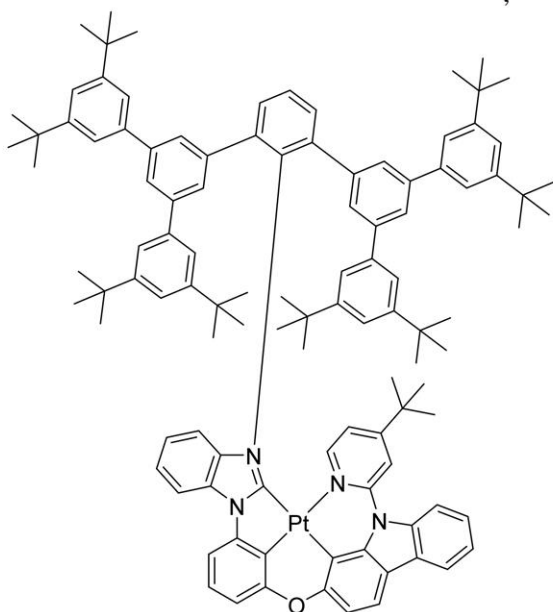
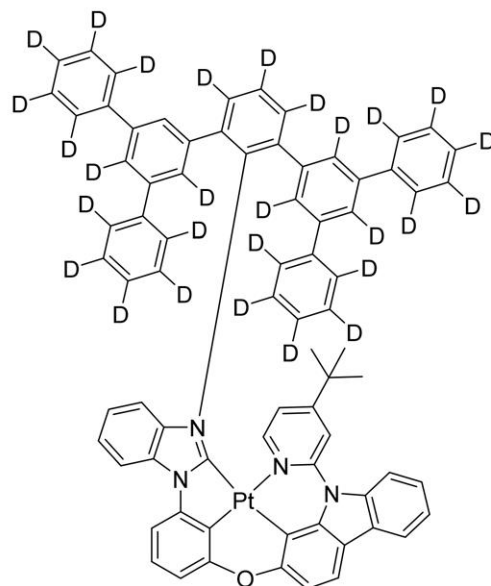
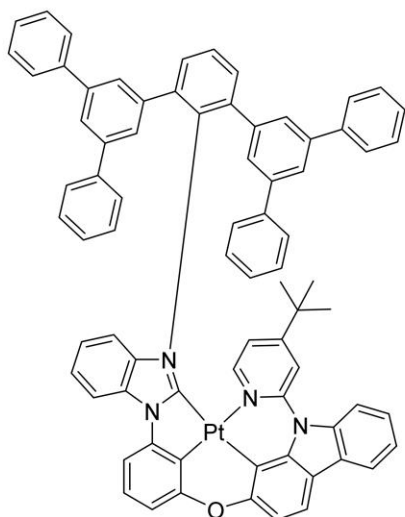
R 及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができ；

式 I I の構造を有する基の分子量は、395 グラム / モル以上である。)

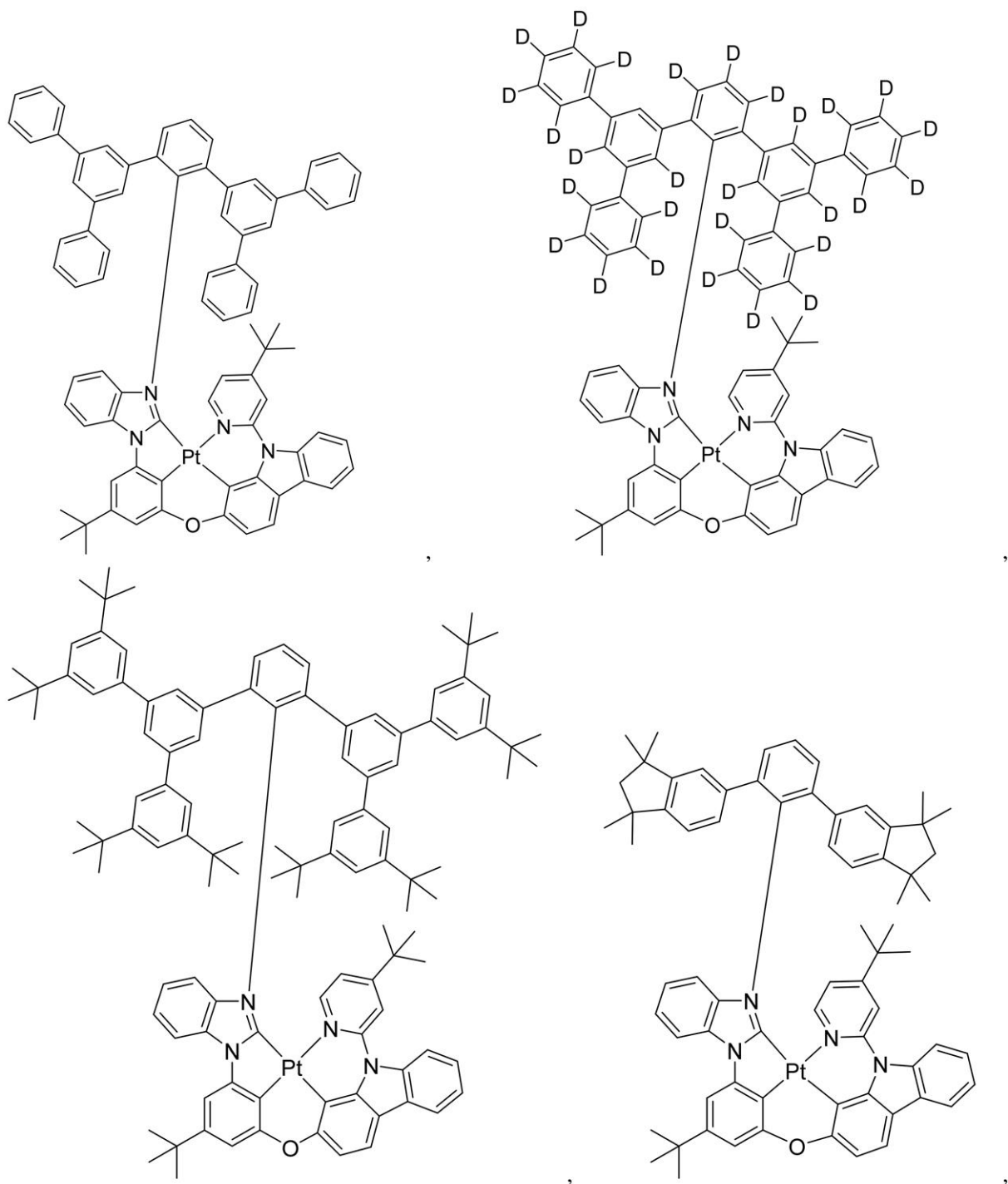
【請求項 15】

前記化合物が、下記からなる群から選択される請求項 1 に記載の化合物。

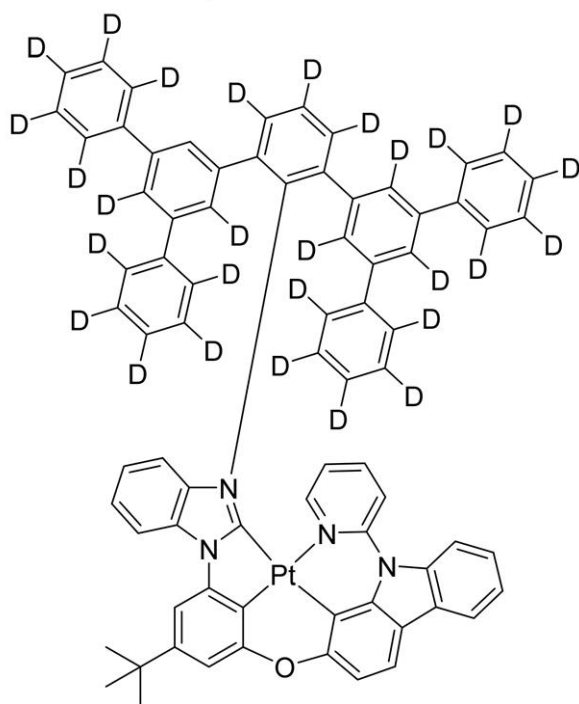
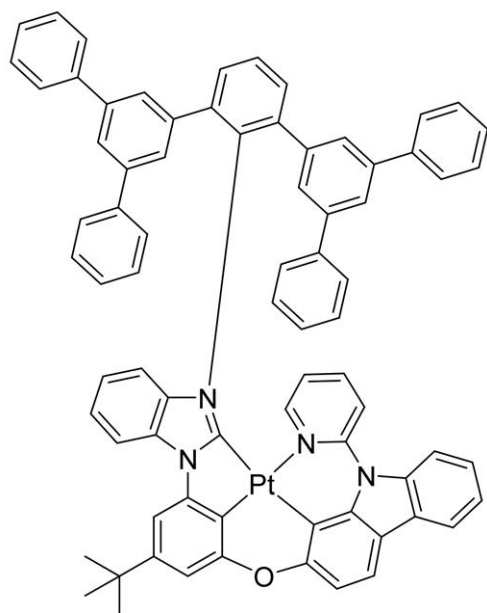
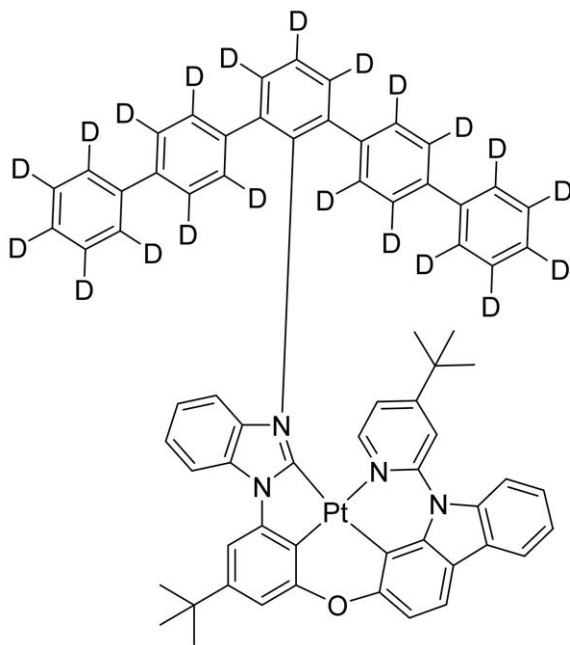
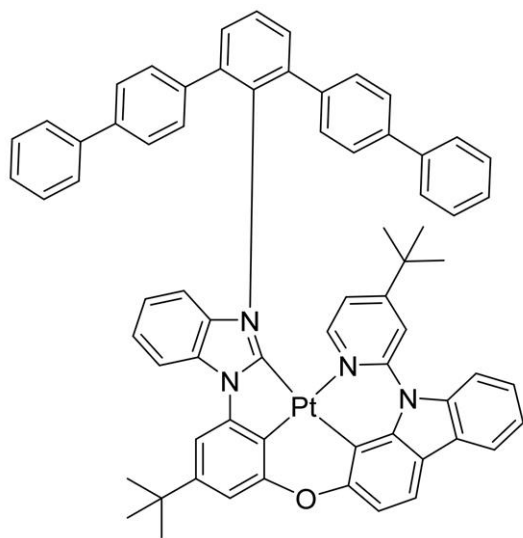
【化 4 0】



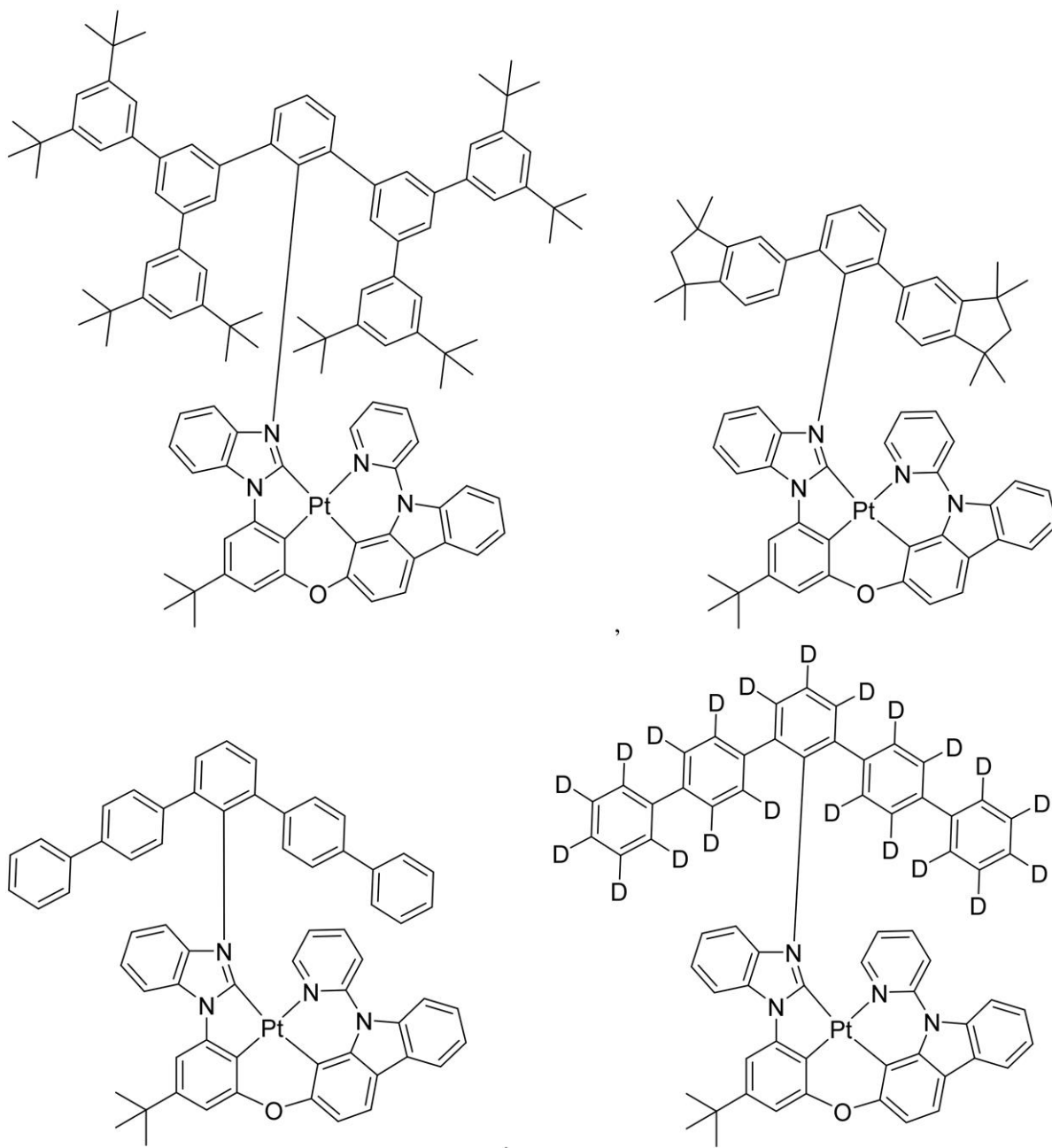
【化 4 1】



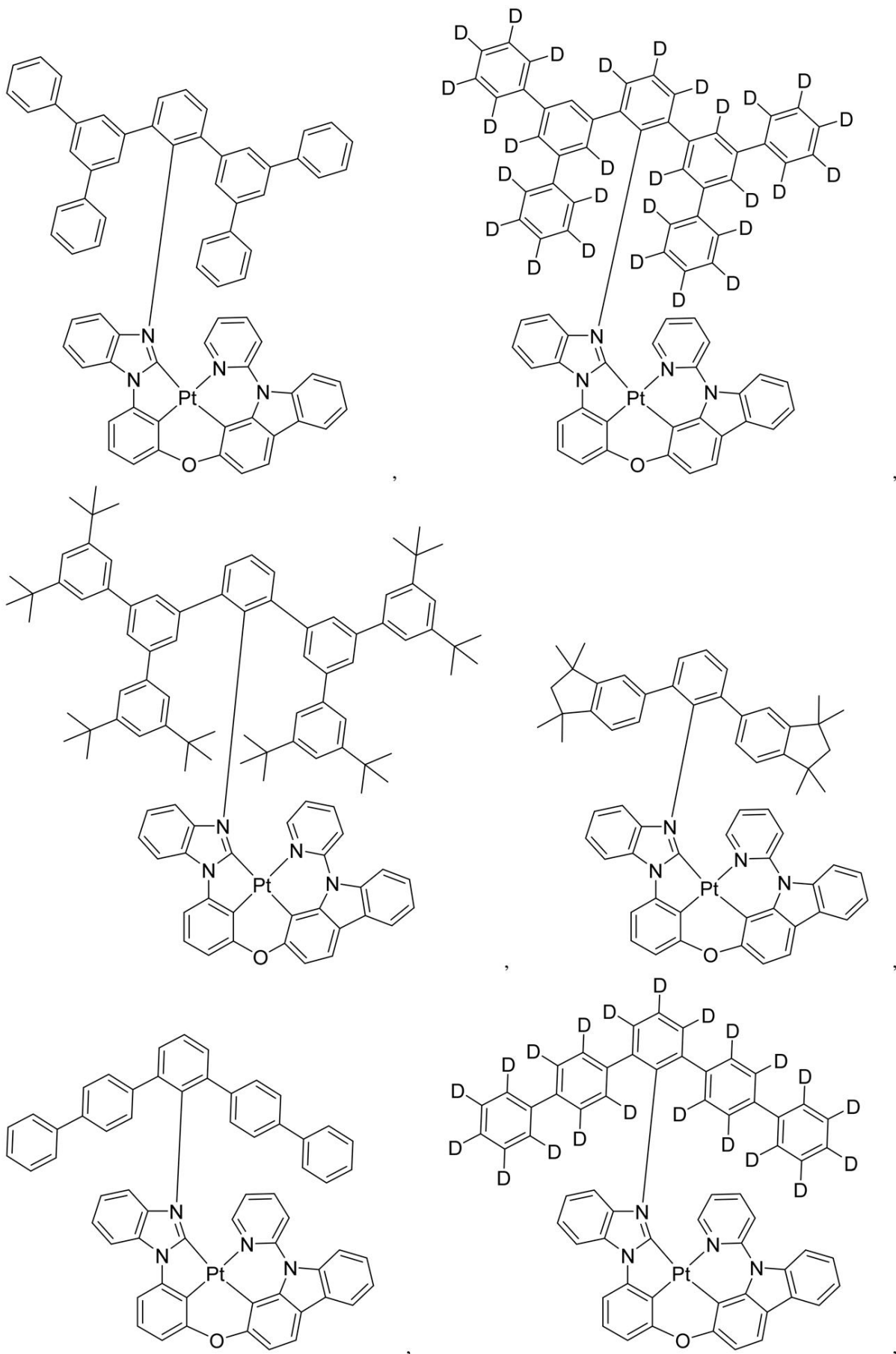
【化 4 2】



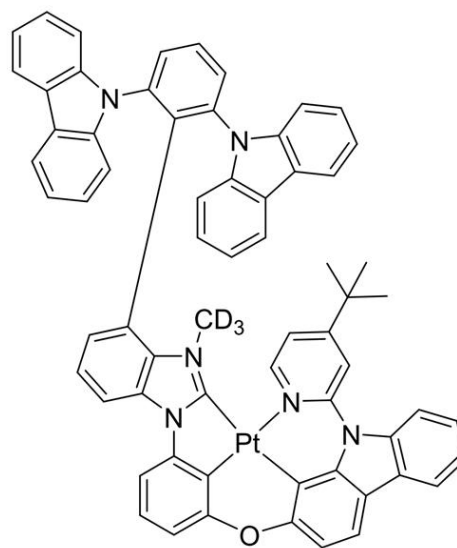
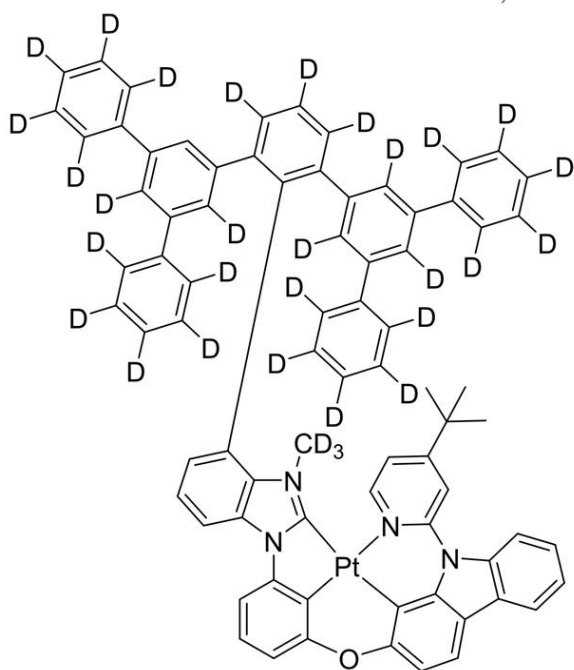
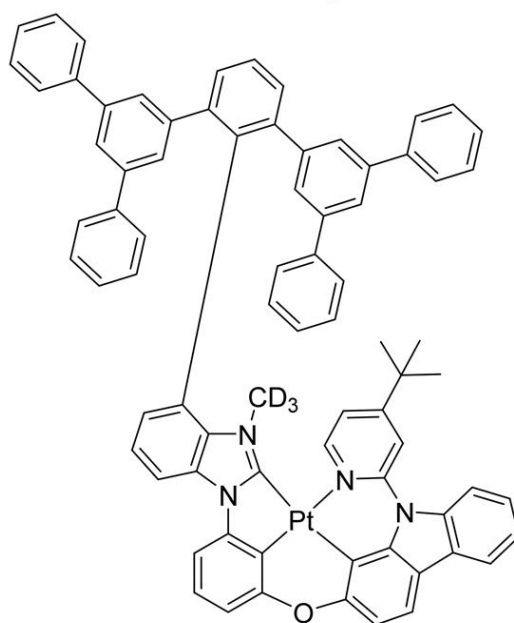
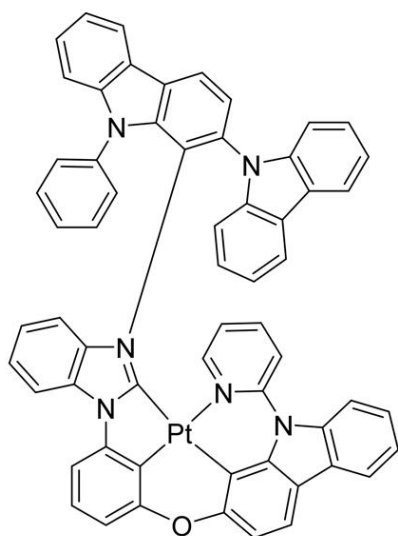
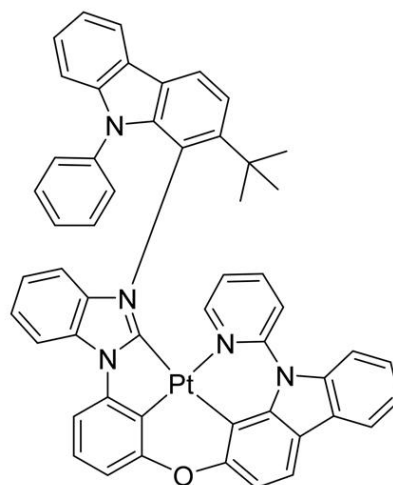
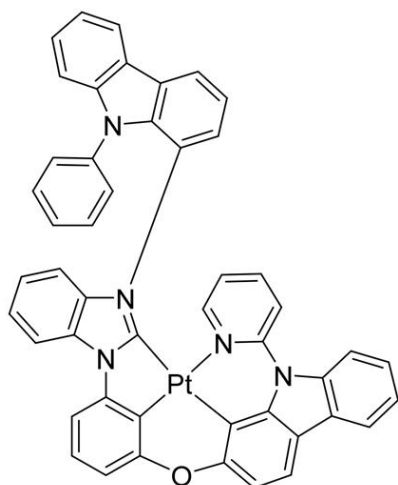
【化 4 3】



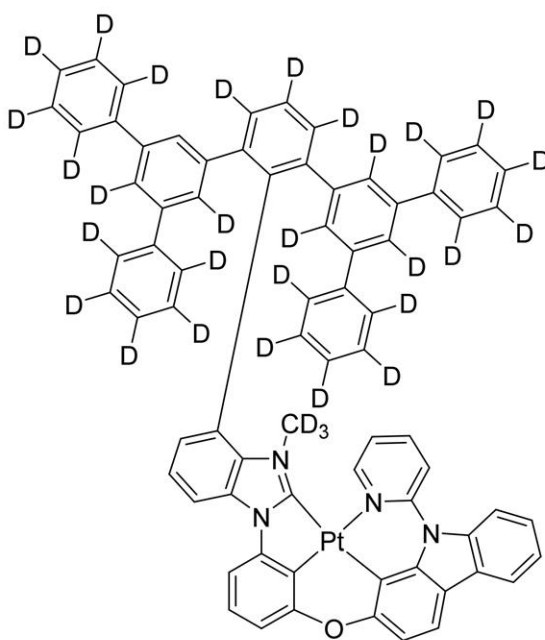
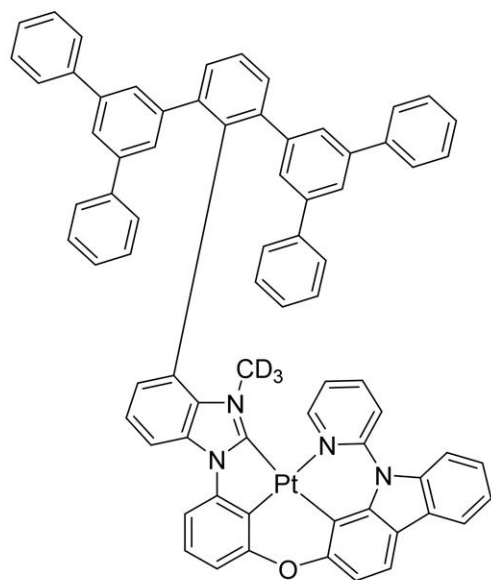
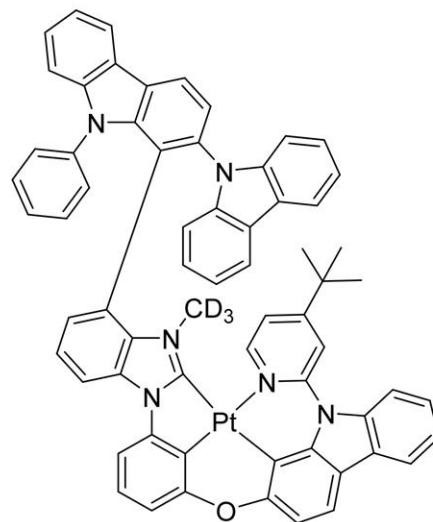
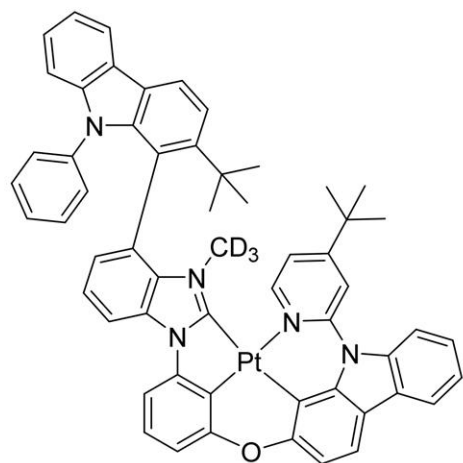
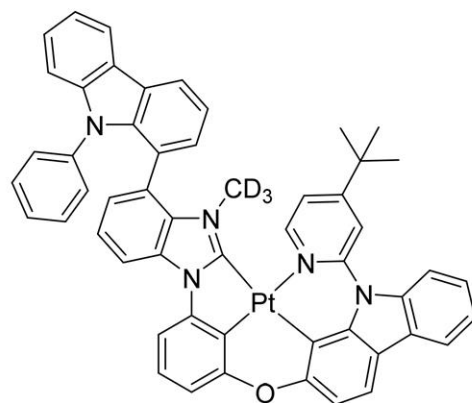
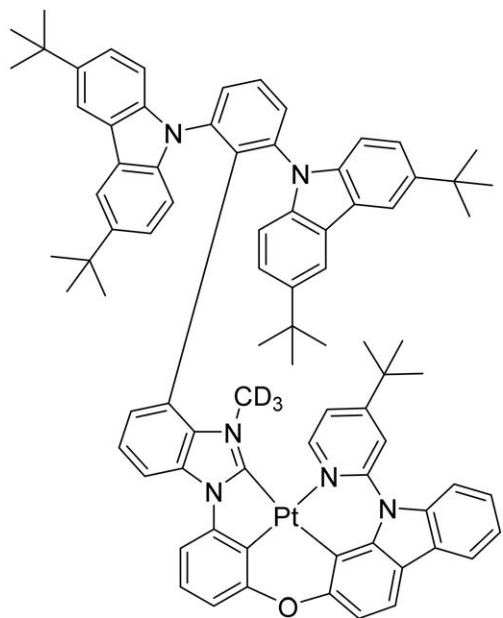
【化 4 4】



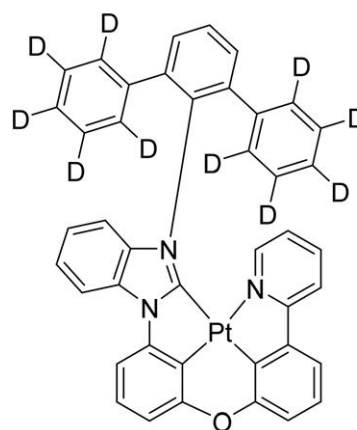
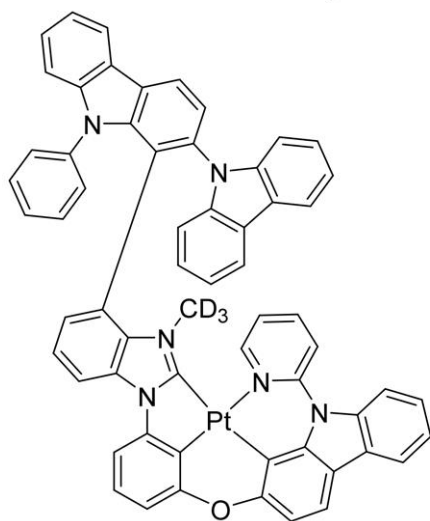
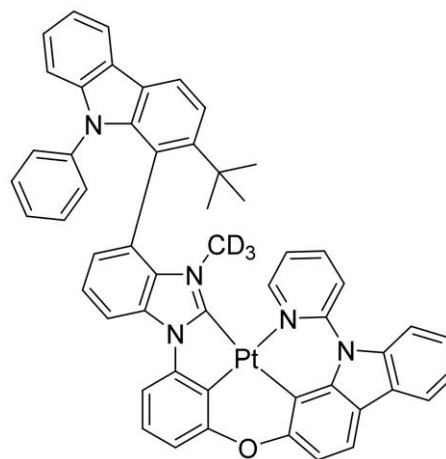
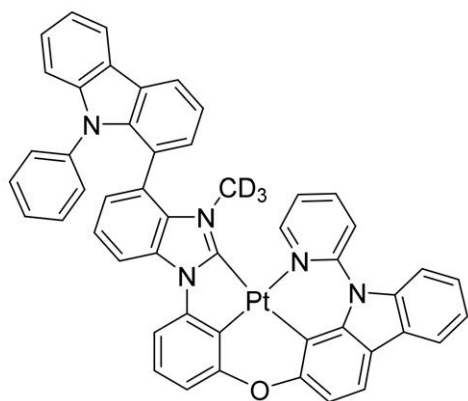
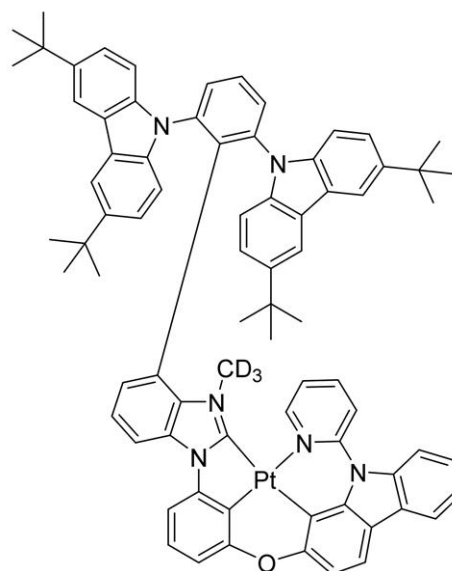
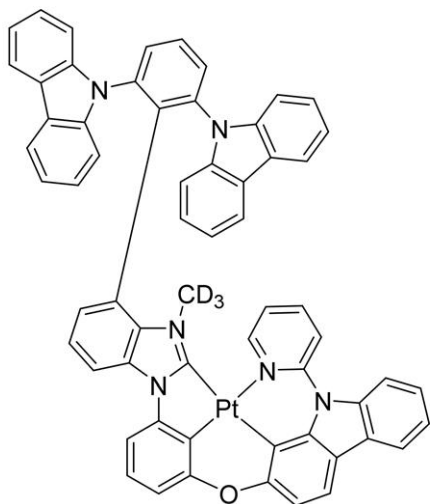
【化 4 5】



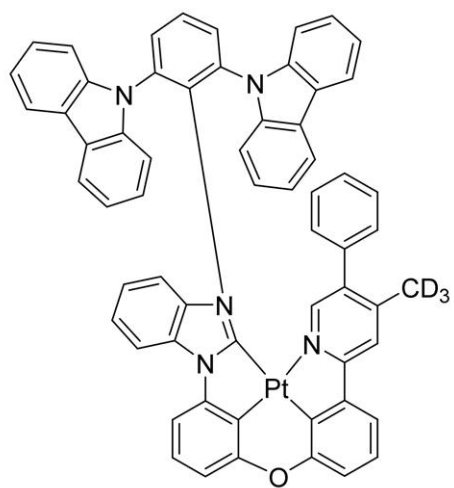
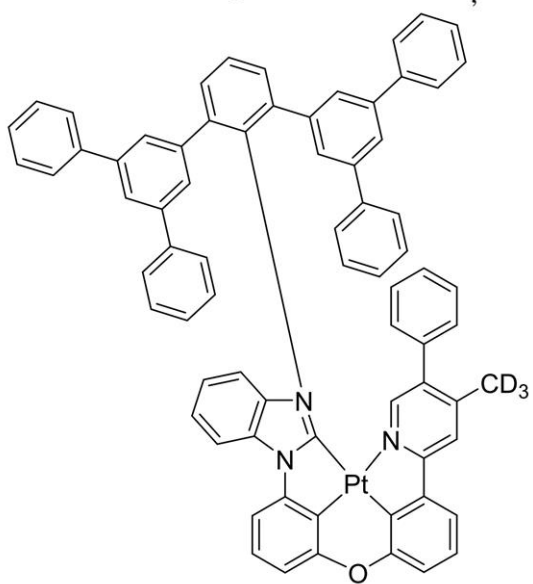
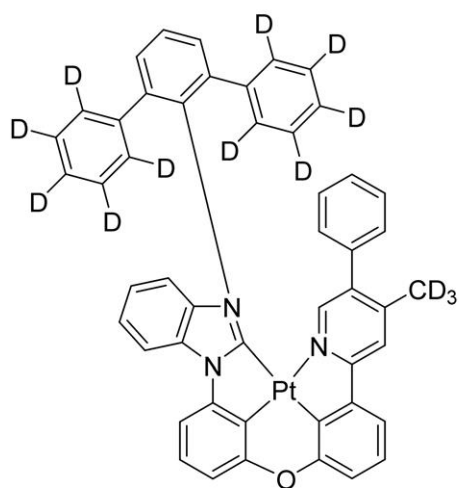
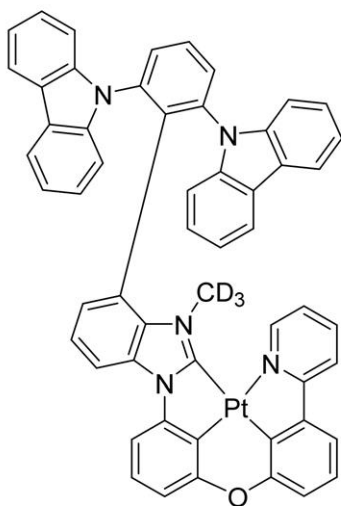
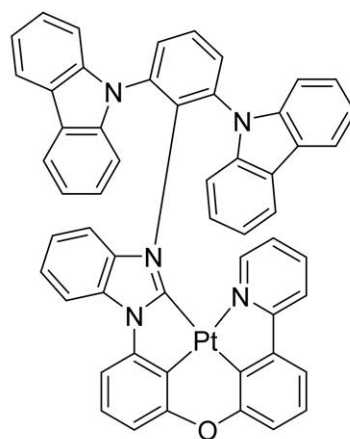
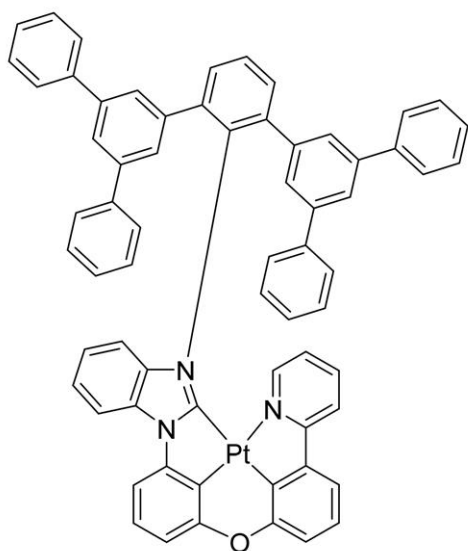
【化 4 6】



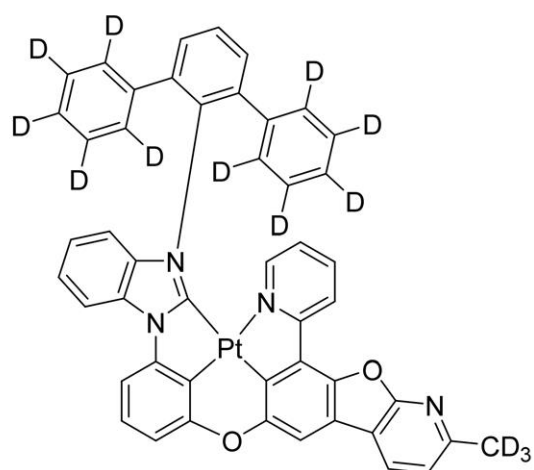
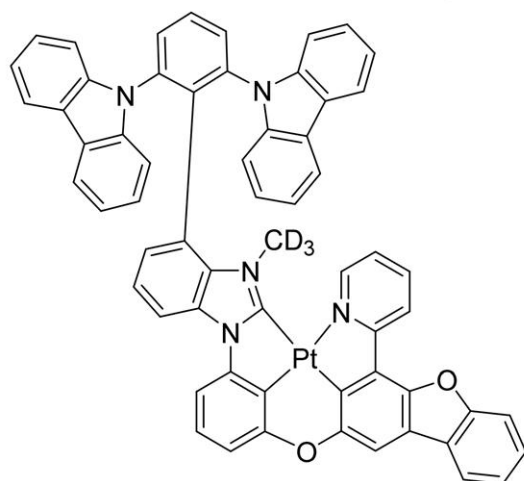
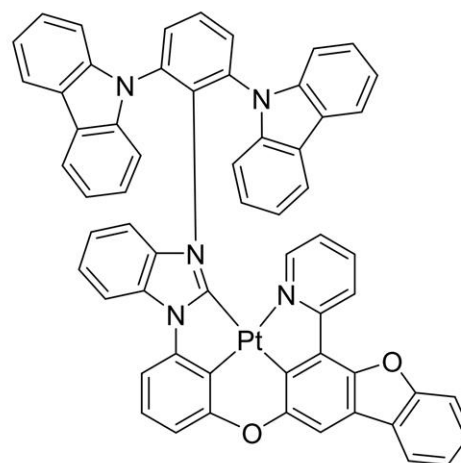
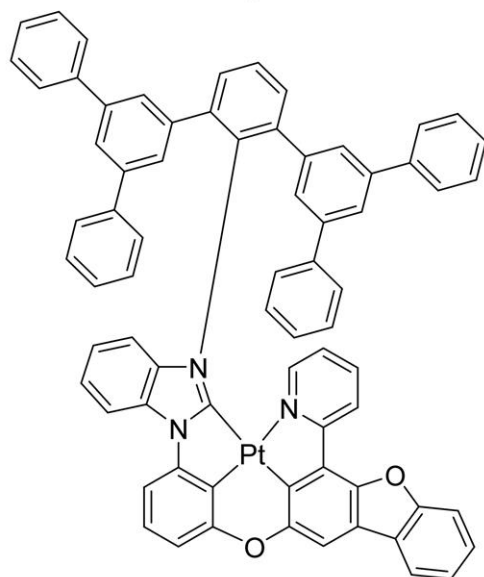
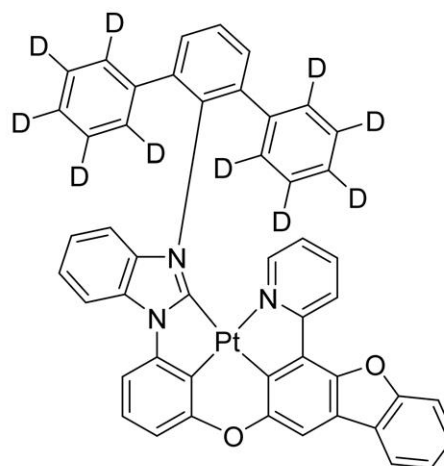
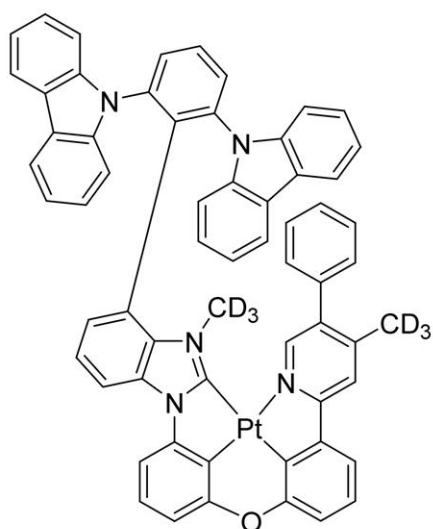
【化 4 7】



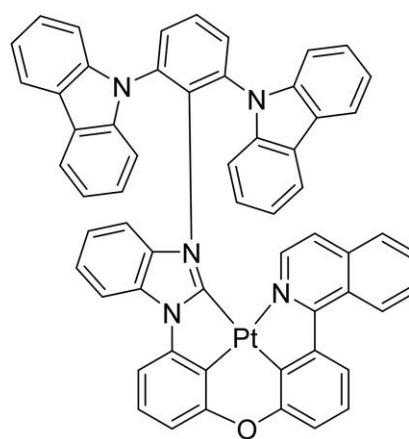
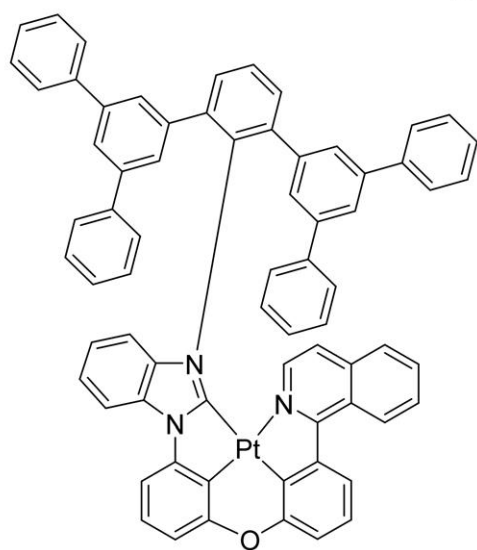
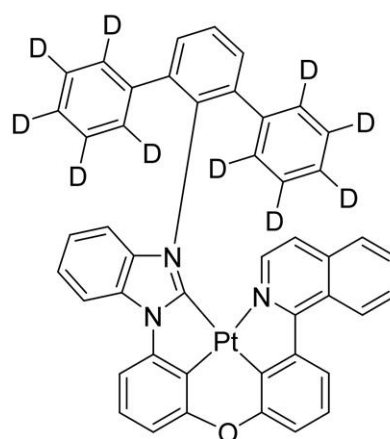
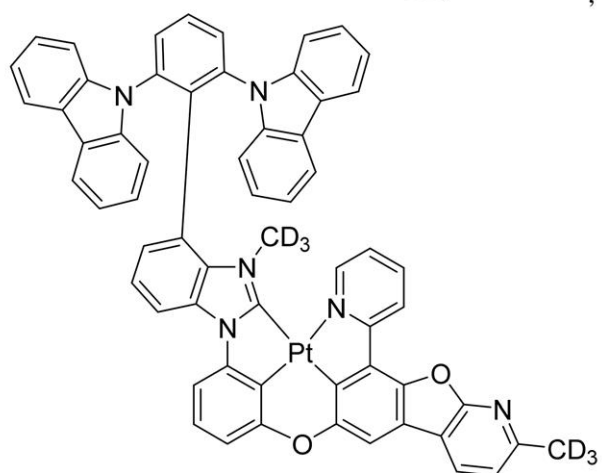
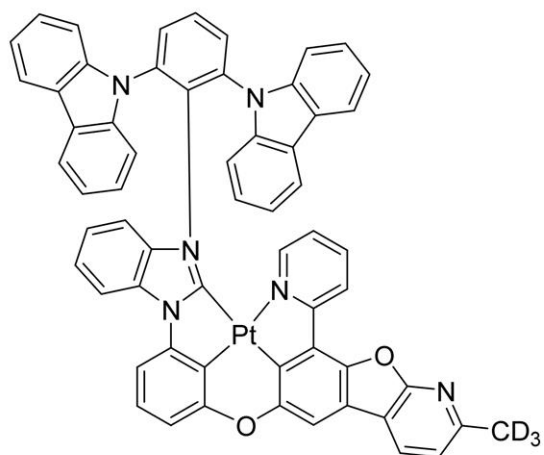
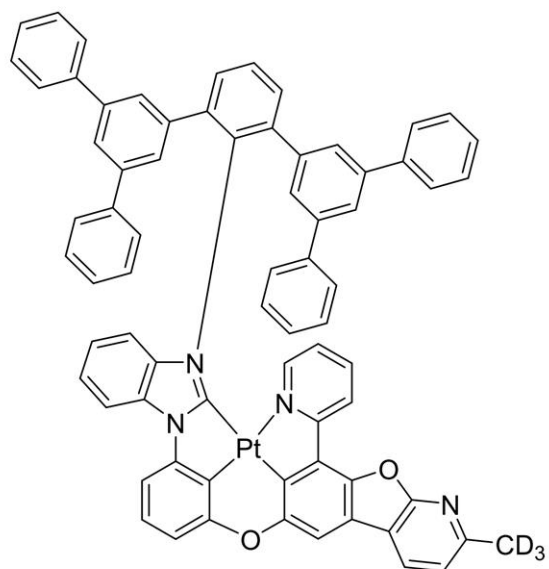
【化 4 8】



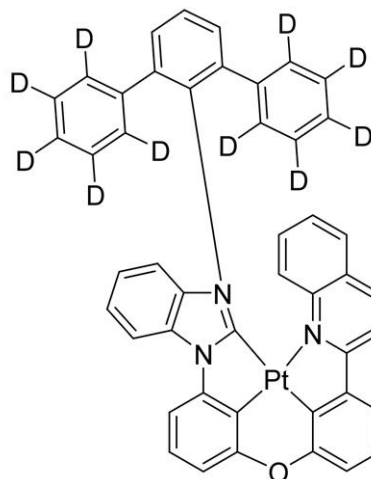
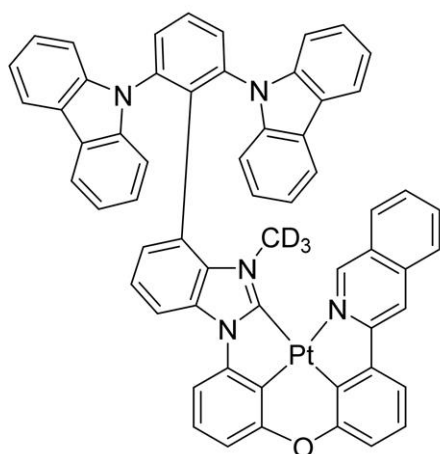
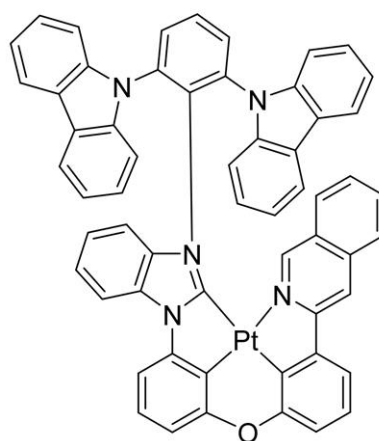
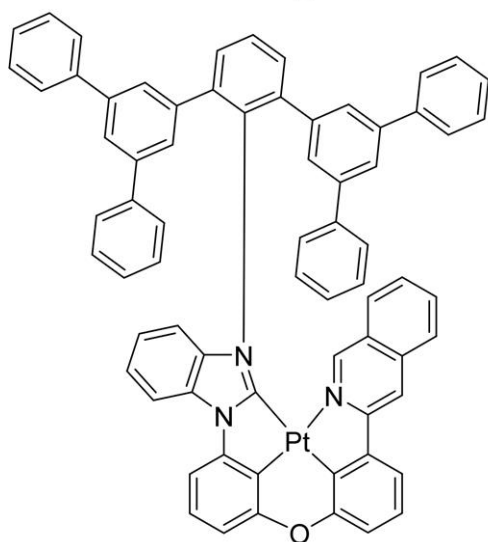
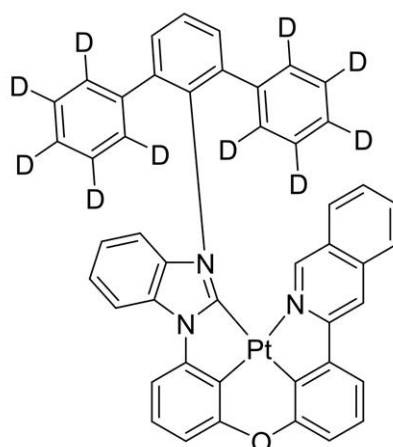
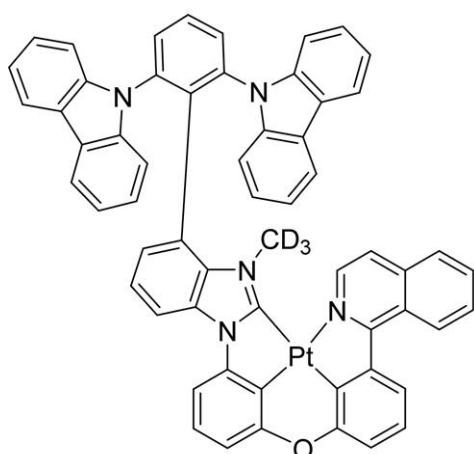
【化 4 9】



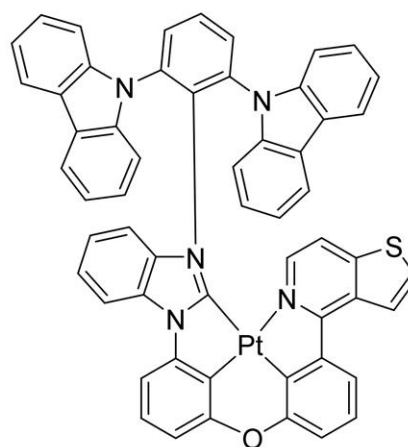
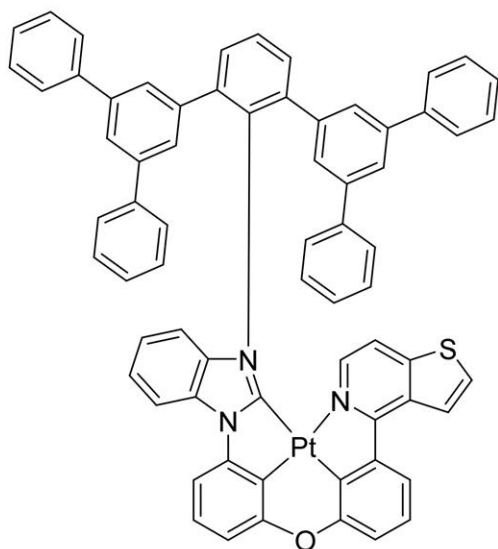
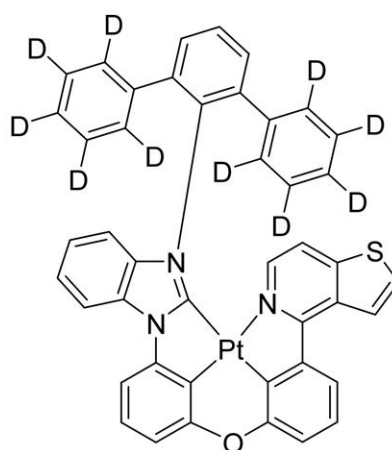
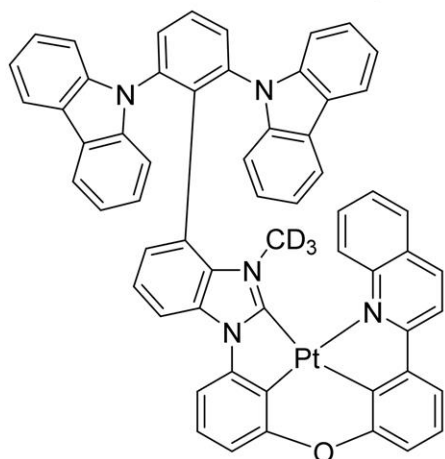
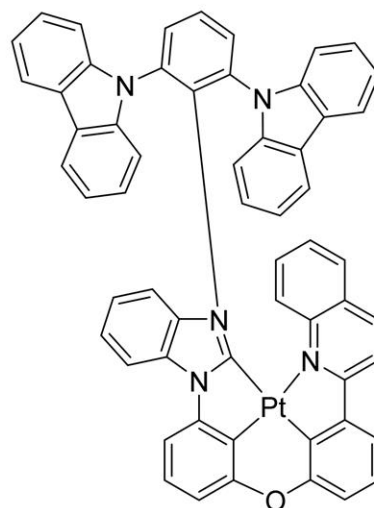
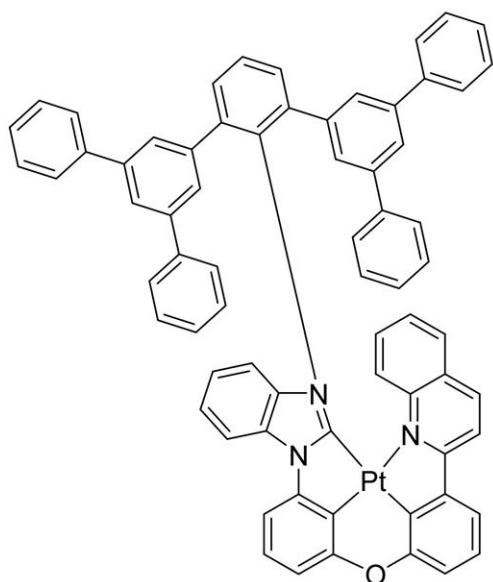
【化 5 0】



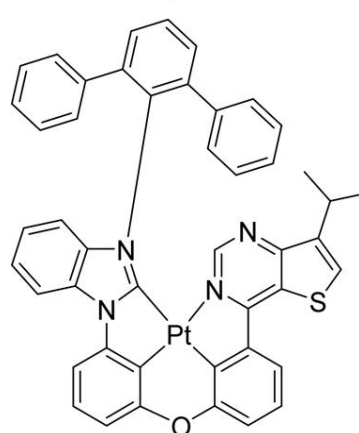
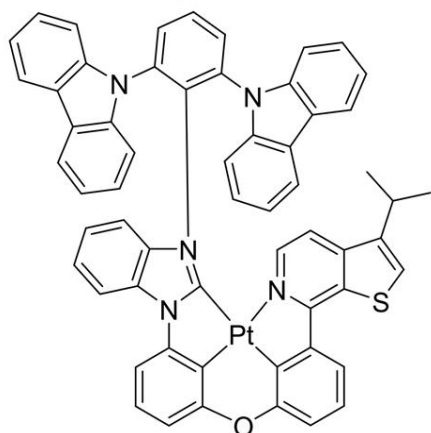
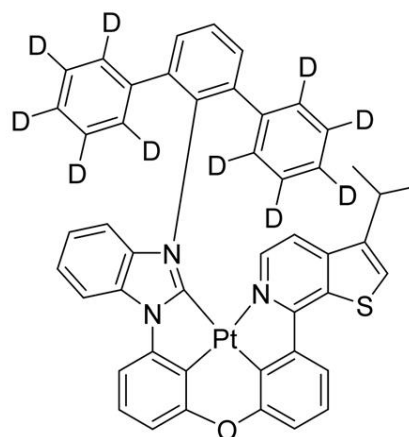
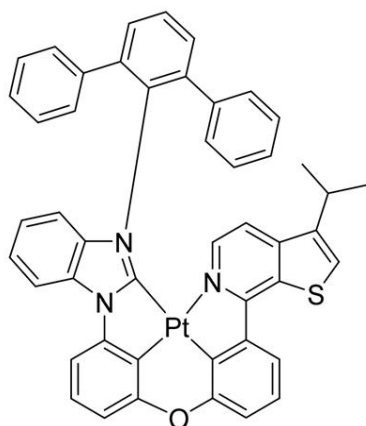
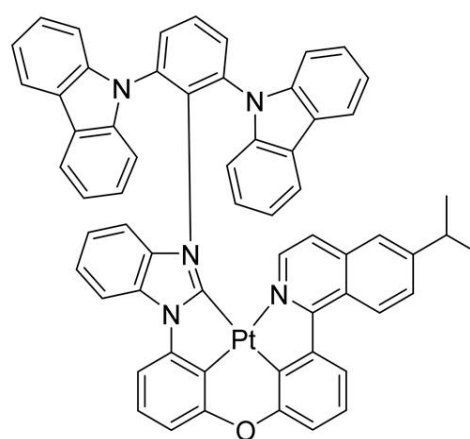
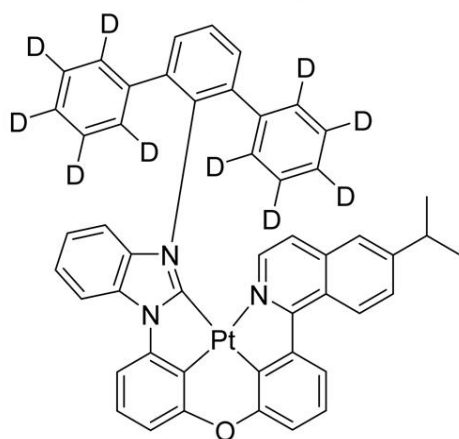
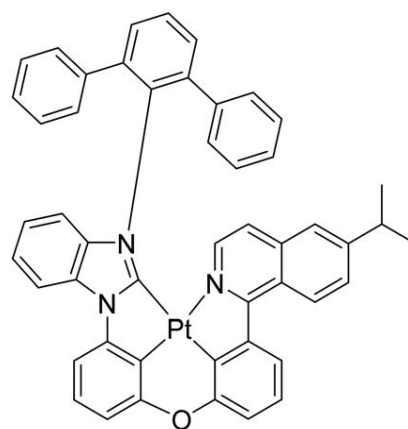
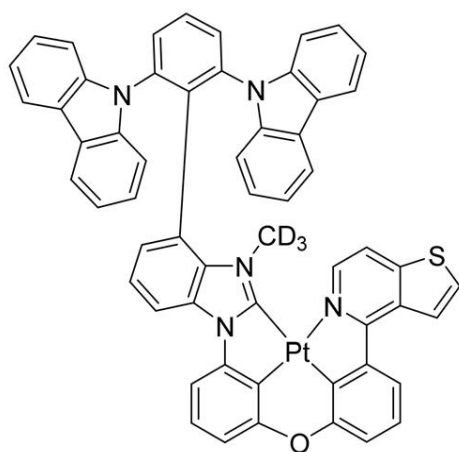
【化 5 1】



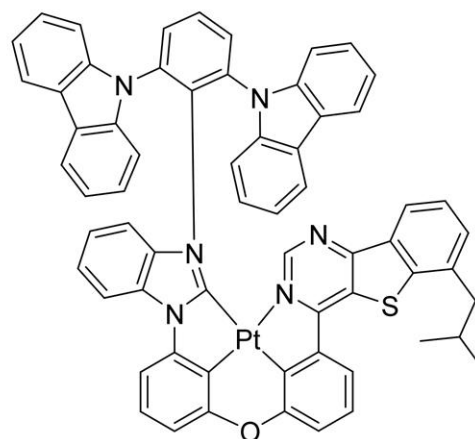
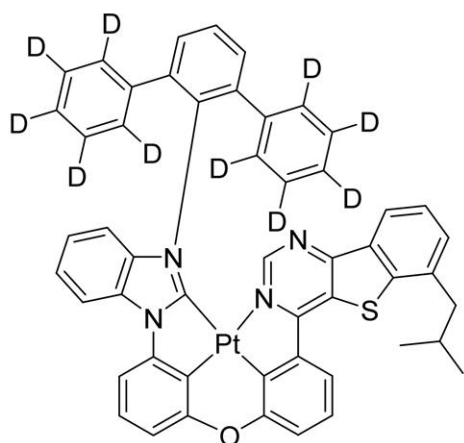
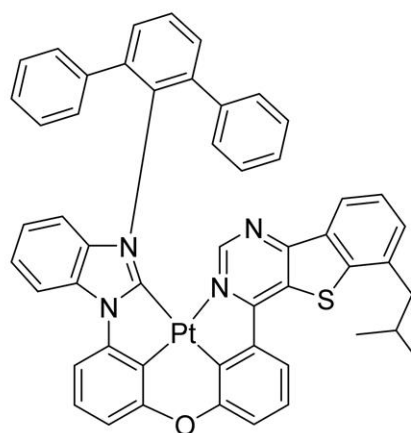
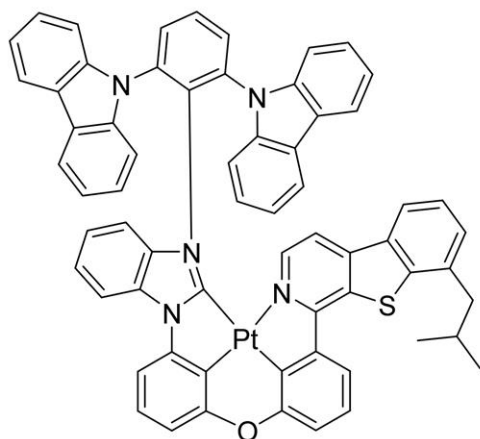
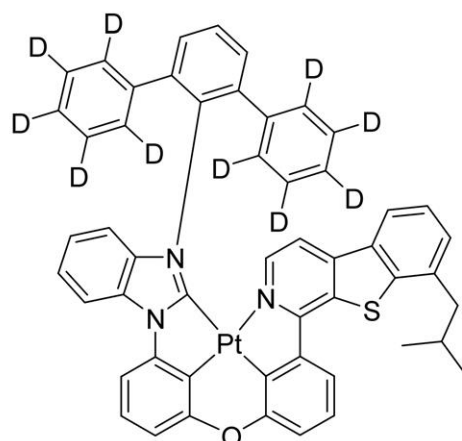
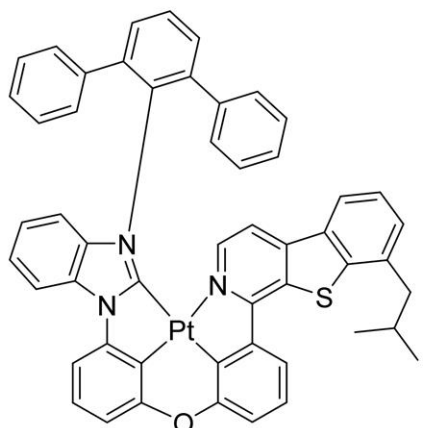
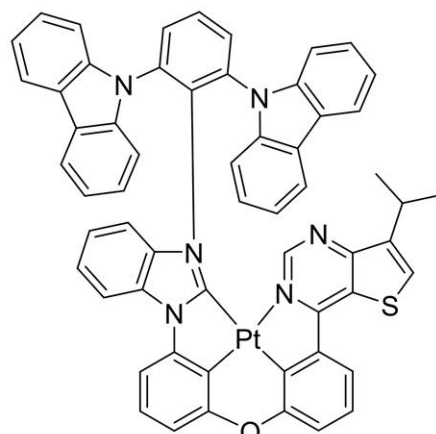
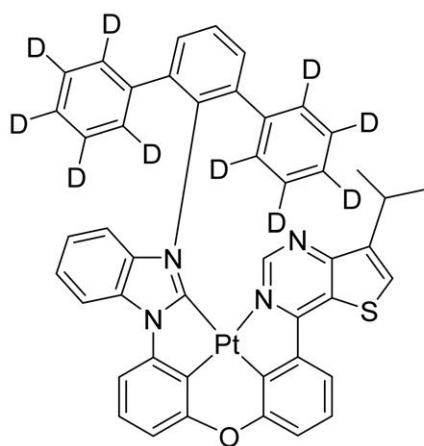
【化 5 2】



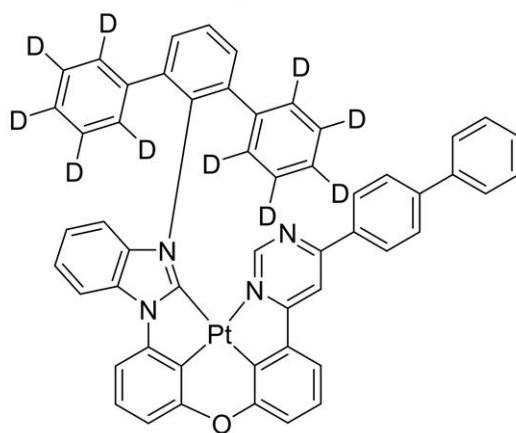
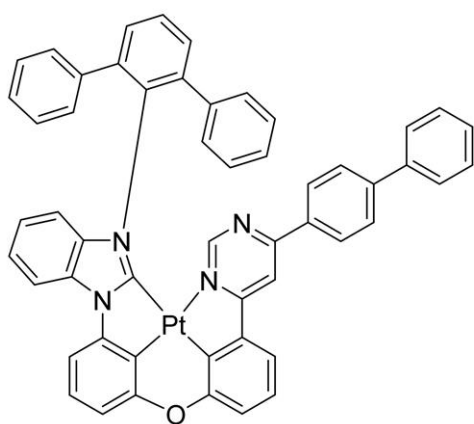
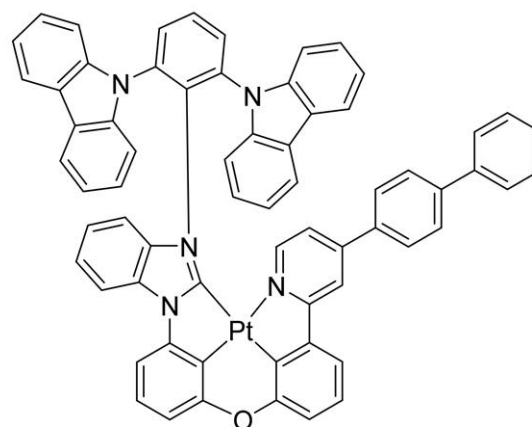
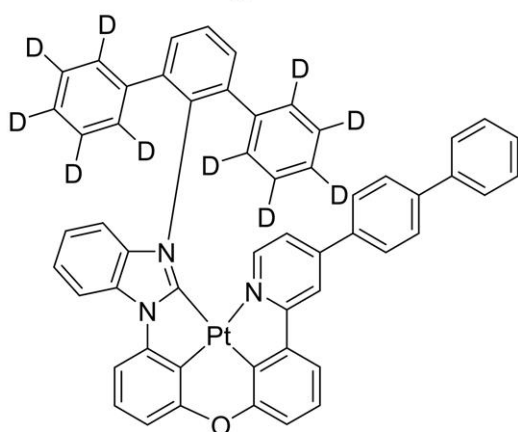
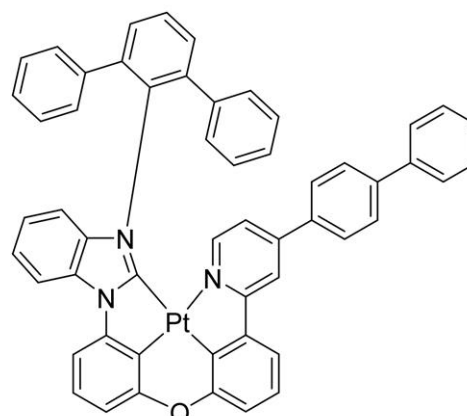
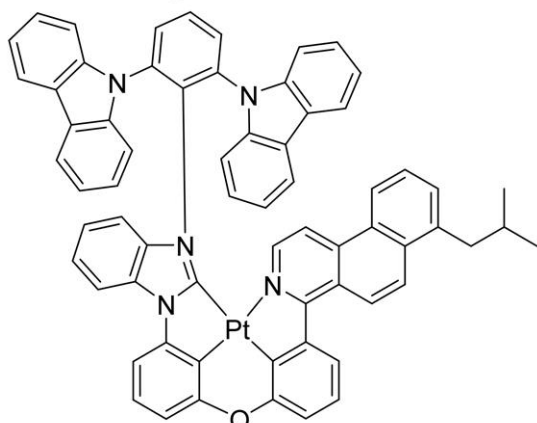
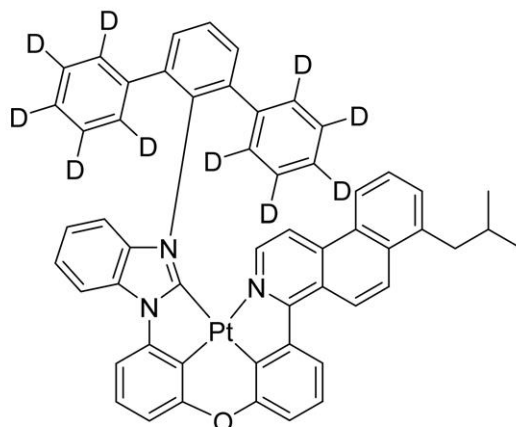
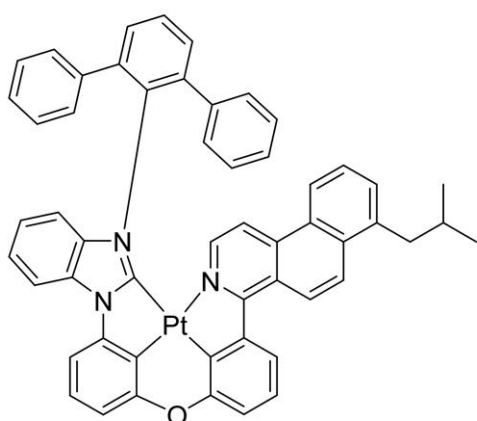
【化 5 3】



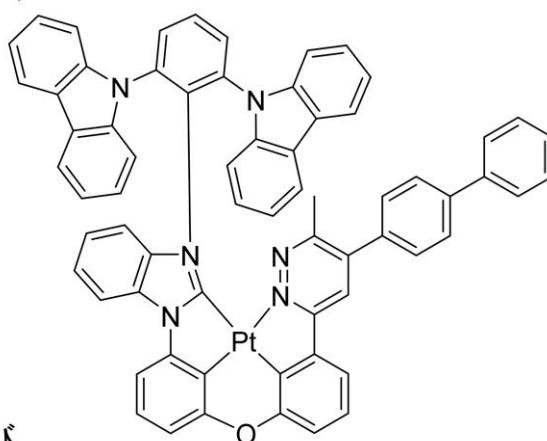
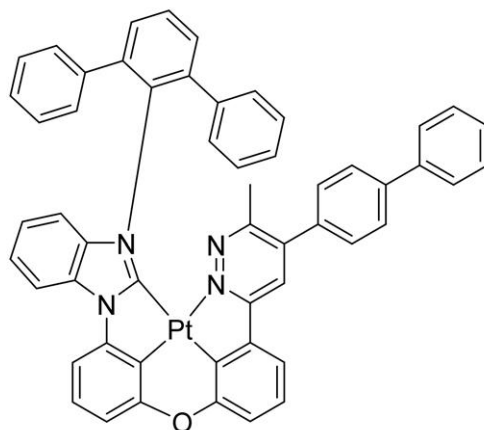
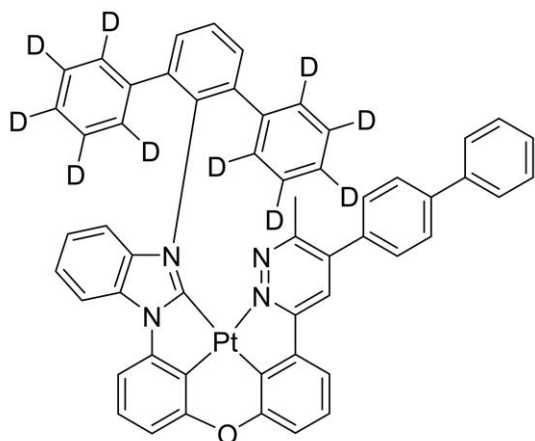
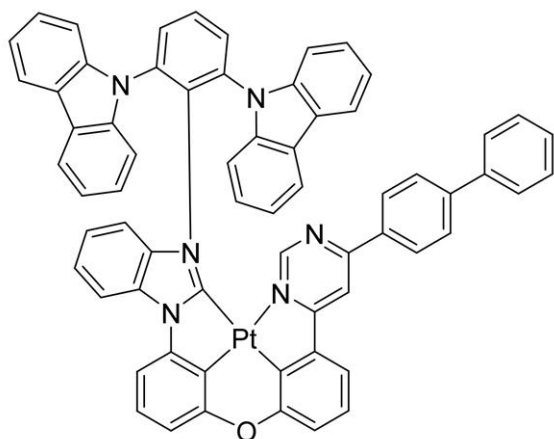
【化 5 4】



【化 5 5】



【化 5 6】



, 及び

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0016

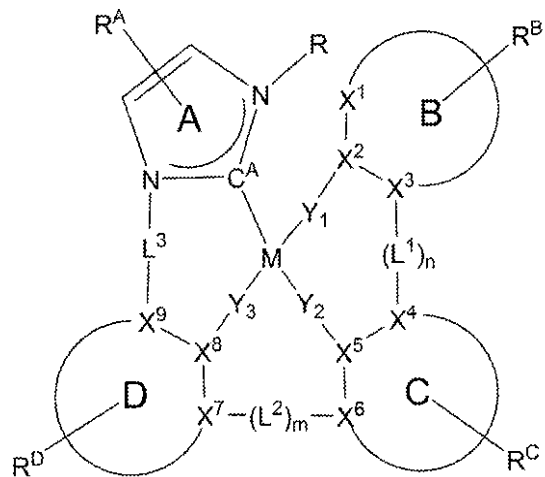
【補正方法】変更

【補正の内容】

【0016】

以下の式 I :

【化 2】

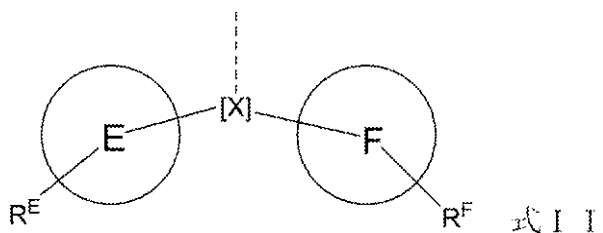


式 I

の化合物が開示される。式 I 中、M は、Pd 又は Pt ; 環 B、C、及び D は、それぞれ独立して、5 員又は 6 員の炭素環又はヘテロ環であり ; $X^1 \sim X^9$ は、それぞれ独立して、C 又は N であり ; $Y_1 \sim Y_3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、及び S からなる群か

ら選択され； $Y_1 \sim Y_3$ の少なくとも1つは、直接結合であり； C^A は、カルベン炭素であり； $L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 、 BR' 、及び NR' 、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され； m 及び n は、それぞれ独立して、0又は1であり； m 及び n の少なくとも1つは、1であり； R 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも1つは、以下の式I I：

【化3】



の構造を有する基を含む。式I I中、 $[X]$ は、5員ヘテロ環、5員炭素環、6員ヘテロ環、6員炭素環、又は2つ以上の縮合環を含む縮合ヘテロ環又は炭素環系であり；環E及びFは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環である。式I及び式I Iにおいて、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；各 R 、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ； R 及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができ；式I Iの構造を有する基の分子量は、395グラム/モル以上である。

【手続補正3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0066

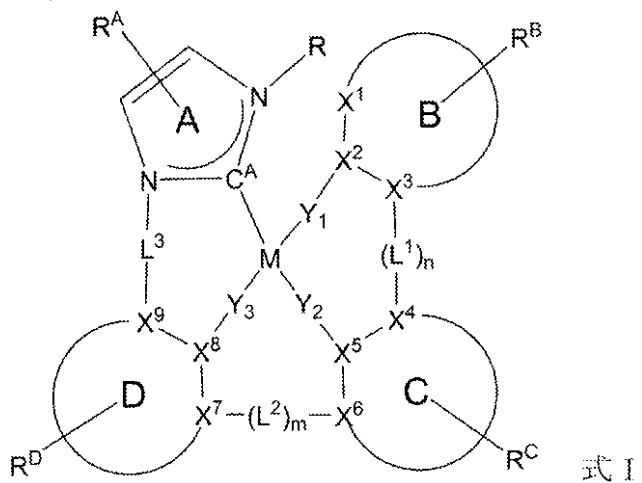
【補正方法】変更

【補正の内容】

【0066】

以下の式I：

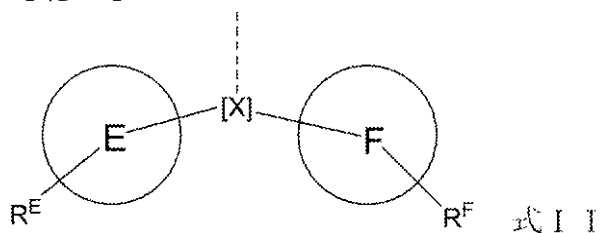
【化7】



の化合物が開示される。式I中、 M は、 Pd 又は Pt ；環B、C、及びDは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環であり； $X^1 \sim X^9$ は、それぞれ独立して、C又はNであり； $Y_1 \sim Y_3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、及びSからなる群から選択され； $Y_1 \sim Y_3$ の少なくとも1つは、直接結合であり； C^A は、カルベン炭素であり； $L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 、 BR' 、及び NR' 、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され； m 及び n は、それぞ

れ独立して、0又は1であり；m及びnの少なくとも1つは、1である。幾つかの実施形態においては、 R 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも1つは、以下の式ⅠⅠ：

【化8】



の構造を有する基を含む。式ⅠⅠ中、 $[X]$ は、5員ヘテロ環、5員炭素環、6員ヘテロ環、6員炭素環、又は2つ以上の縮合環を含む縮合ヘテロ環又は炭素環系であり；環E及びFは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環である。式Ⅰ及び式ⅠⅠにおいて、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；各 R 、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ； R 及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができ；式ⅠⅠの構造を有する基の分子量は、395グラム/モル以上である。幾つかの実施形態においては、 R 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも1つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも3つの6員芳香環を含む化学基を含み、各 R 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、及び R^D が、独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；任意の隣接する置換基が、結合又は縮合して環を形成することができる。幾つかの実施形態においては、 R 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも1つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも4つの6員芳香環を含む化学基を含む。幾つかの実施形態においては、 R 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも1つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも5つの6員芳香環を含む化学基を含む。幾つかの実施形態においては、 R 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも1つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも6つの6員芳香環を含む化学基を含む。幾つかの実施形態においては、 R 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 L^1 、 L^2 、及び L^3 の少なくとも2つが、互いに隣接して縮合しない少なくとも3つの6員芳香環を含む化学基を含む。

【手続補正4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0084

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0084】

上に定義される式Ⅴ又は式ⅤⅠの構造を有する化合物の幾つかの実施形態においては、 R^M 、 R^N 、及び R^O の少なくとも1つは、第2級又は第3級アルキル基である。幾つかの実施形態においては、 R^M 、 R^N 、及び R^O の少なくとも1つは、完全に又は部分的に重水素化されたアルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール基、及びこれらの組合せである。幾つかの実施形態においては、 $Z^{14} \sim Z^{25}$ は、それぞれCである。幾つかの実施形態においては、 $Z^{14} \sim Z^{25}$ の少なくとも1つは、Nである。幾つかの実施形態においては、少なくとも1つの R^X は、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。幾つかの実施形態においては、Mは、四座配位である。幾つかの実施形態においては、Mは、六座配位である。

【手続補正5】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】 0 0 8 6

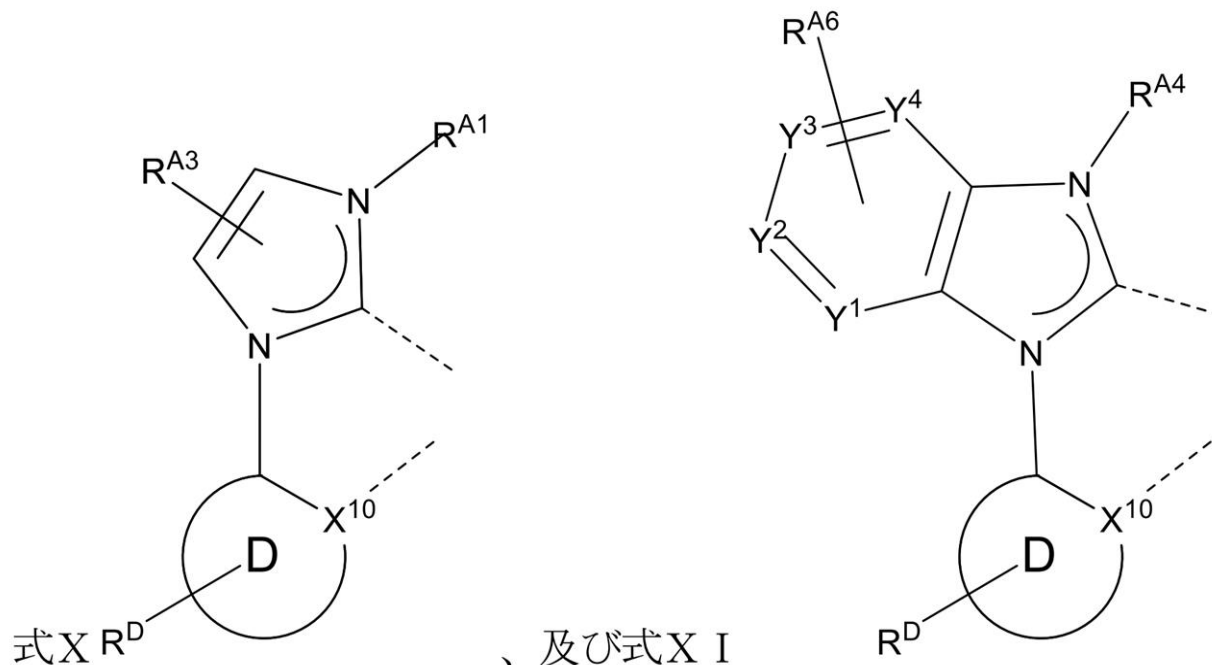
【補正方法】 変更

【補正の内容】

【 0 0 8 6 】

上に定義される式 V 又は式 V I の構造を有する化合物の幾つかの実施形態においては、M は、I r、P t、又は P d であり、前記化合物は、M に配位する配位子 L_A を含み、前記配位子は、下記からなる群から選択される。

【化 2 0】



式中、環 D は、5 員又は 6 員の炭素環又はヘテロ環； R^D は、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；各 R^D は、水素である、又は重水素、重水素、フッ素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、アルコキシ、アリーロキシ、アミノ、シリル、アルケニル、シクロアルケニル、ヘテロアルケニル、アリール、ヘテロアリール、ニトリル、イソニトリル、スルファニル、ボリル、及びこれらの組合せからなる群から選択される置換基であり；任意の 2 つの置換基は、結合又は縮合して環を形成することができる。上に定義される式 X 及び式 X I からなる群から選択される配位子 L_A を含む化合物の幾つかの実施形態においては、環 D は、6 員芳香環である。幾つかの実施形態においては、 X^8 は、C である。幾つかの実施形態においては、各 R^{A3} 及び R^{A6} は、独立して、水素、重水素、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。幾つかの実施形態においては、 R^{A1} 及び R^{A4} は、独立して、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択される。幾つかの実施形態においては、 R^{A1} 及び R^{A4} は、それぞれ独立して、上に定義される式 V I I、式 V I I I、及び式 I X からなる群から選択される。

【手続補正 6】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0 0 8 8

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【 0 0 8 8 】

上に定義される式 X 及び式 X I からなる群から選択される配位子 L_A を含む化合物の幾つかの実施形態においては、配位子 L_A は、以下に定義される $L_{A1} \sim L_{A243891}$

からなる群から選択される。

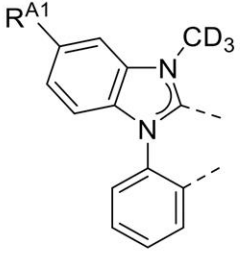
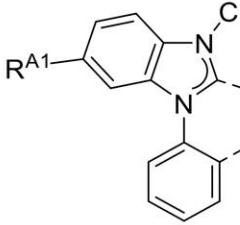
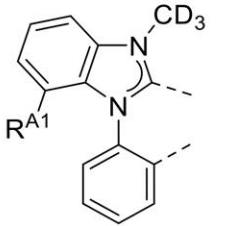
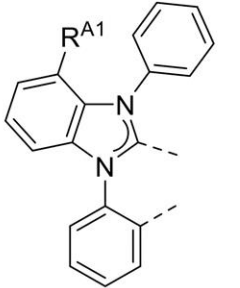
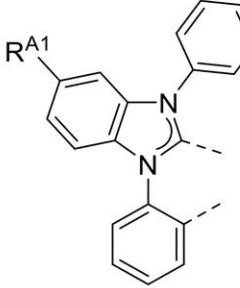
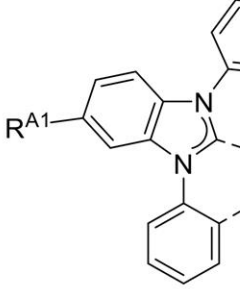
【化 2 4】

L_{Ai}	L_{Ai} の構造	Ar^l, R	i
$L_{A1} \sim L_{A110405}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j$
$L_{A110406} \sim L_{A220810}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 110405$
$L_{A220811} \sim L_{A331215}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 220810$
$L_{A331216} \sim L_{A441620}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 331215$
$L_{A441621} \sim L_{A552025}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、 $R^{A2} = R_k$ 、 ここで、 j と k は、1～110405 の整数である	$i = j + 441620$
$L_{A552026} \sim L_{A662430}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 552025$
$L_{A662431} \sim L_{A772835}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 662430$

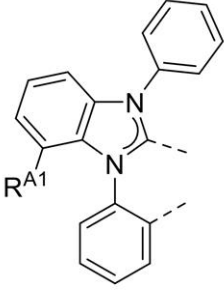
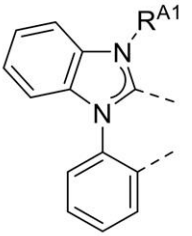
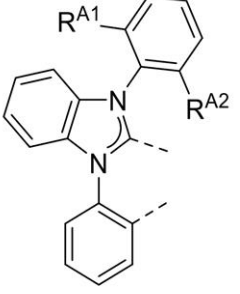
【化 2 5】

L _A 772836～L _A 883240 は 右の構造を有する		式中、R ^{A1} =R _j 、ここで、jは、 1～110405 の整数である	$i=j+772835$
L _A 883241～L _A 993645 は 右の構造を有する		式中、R ^{A1} =R _j 、ここで、jは、 1～110405 の整数である	$i=j+883240$
L _A 993646～L _A 1104050 は 右の構造を有する		式中、R ^{A1} =R _j 、ここで、jは、 1～110405 の整数である	$i=j+993645$
L _A 1104051～L _A 1214455 は 右の構造を有する		式中、R ^{A1} =R _j 、ここで、jは、 1～110405 の整数である	$i=j+1104050$
L _A 1214456～L _A 1324860 は 右の構造を有する		式中、R ^{A1} =R _j 、ここで、jは、 1～110405 の整数である	$i=j+1214455$
L _A 1324861～L _A 1435265 は 右の構造を有する		式中、R ^{A1} =R _j 、ここで、jは、 1～110405 の整数である	$i=j+1324860$
L _A 1435266～L _A 1545670 は 右の構造を有する		式中、R ^{A1} =R _j 、ここで、jは、 1～110405 の整数である	$i=j+1435265$

【化 2 6】

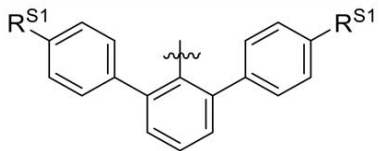
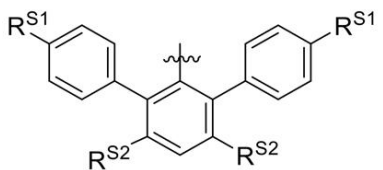
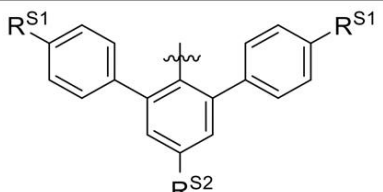
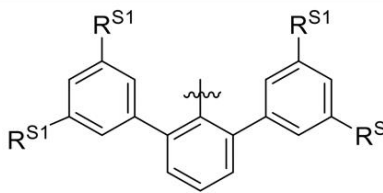
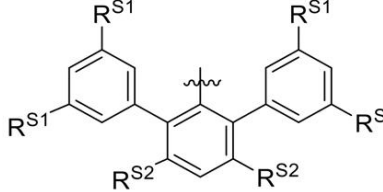
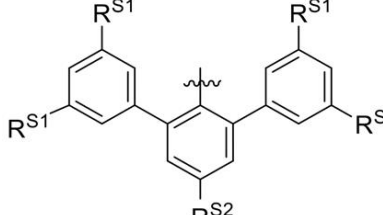
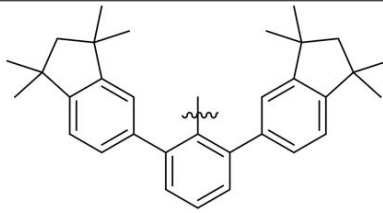
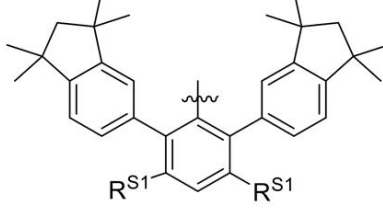
<p>L_{A1545671}～L_{A1656075}は 右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、 1～110405の整数である</p>	<p>$i=j+1545670$</p>
<p>L_{A1656076}～L_{A1766480}は 右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、 1～110405の整数である</p>	<p>$i=j+1656075$</p>
<p>L_{A1766481}～L_{A1876885}は 右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、 1～110405の整数である</p>	<p>$i=j+1766480$</p>
<p>L_{A1876886}～L_{A1987290}は 右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、 1～110405の整数である</p>	<p>$i=j+1876885$</p>
<p>L_{A1987291}～L₂₀₉₇₆₉₅は 右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、 1～110405の整数である</p>	<p>$i=j+1987290$</p>
<p>L_{A2097696}～L_{A2208100}は 右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、 1～110405の整数である</p>	<p>$i=j+2097695$</p>

【化 2 7】

$L_{A2208101} \sim L_{A2318505}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 2208100$
$L_{A2318506} \sim L_{A2428910}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、ここで、 j は、 1～110405 の整数である	$i = j + 2318505$
$L_{A2428910} \sim L_{A2438910}$ は 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = B_j$ 、 $R^{A2} = B_k$ 、 ここで、 j と k は、1～100 の整 数である	$i = 100(j-1) + k + 2428910$

ここで、 $R_1 \sim R_{110405}$ は、以下の構造を有する。

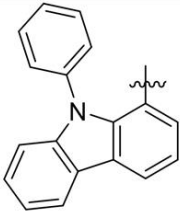
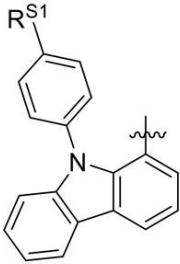
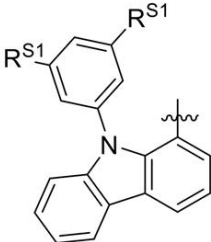
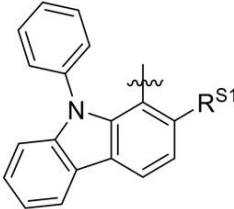
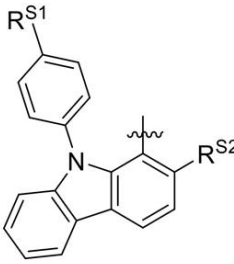
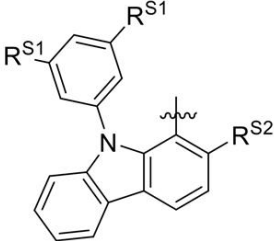
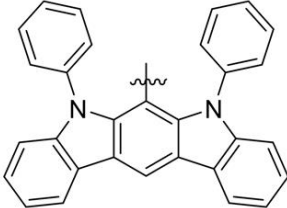
【化 2 8】

R_j	R_m の構造	R^{S1}, R^{S2}, R^{S3}	j
$R1 \sim R100$ は、右の構造 を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j = t$
$R101 \sim R10100$ は、右の構造 を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 100$
$R10101 \sim R20100$ は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 10100$
$R20101 \sim R20200$ は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j = t + 20100$
$R20201 \sim R30200$ は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 20100$
$R30201 \sim R40200$ は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j = 100(t-1) + u + 30200$
$R40201$ は、右の 構造を有する			$j = 40201$
$R40202 \sim R40301$ は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j = t + 40201$

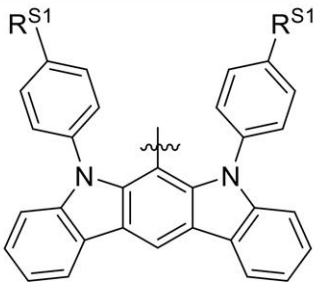

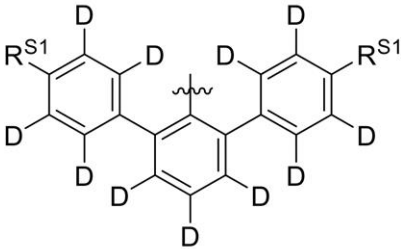
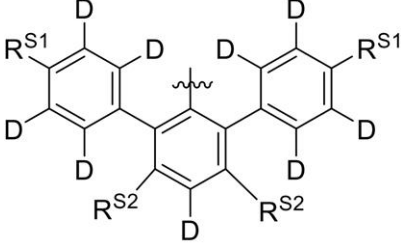
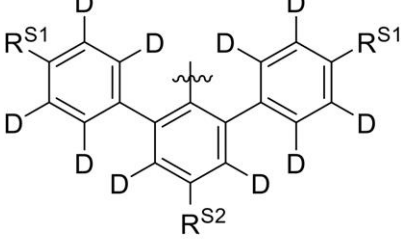
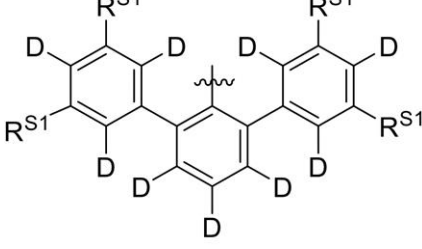
【化 2 9】

R40302～R40401 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40301$
R40402は、右の 構造を有する			$j=40402$
R40403～R40502 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40402$
R40503～R40602 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40502$
R40603～R50602 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+40602$
R50603は、右の 構造を有する			$j=50603$
R50604～R50703 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+50603$

【化 3 0】

R50704 は、右の構造を有する			$j = 50704$
R50705～R50804 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j = t + 50704$
R50805～R50904 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j = t + 50804$
R50905～R51004 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$s = t + 50904$
R51005～R61004 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の整数である	$j = 30(t-1) + u + 51004$
R61005～R71004 は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の整数である	$j = 30(t-1) + u + 61004$
R71005 は、右の構造を有する			$j = 71005$

【化 3 1】

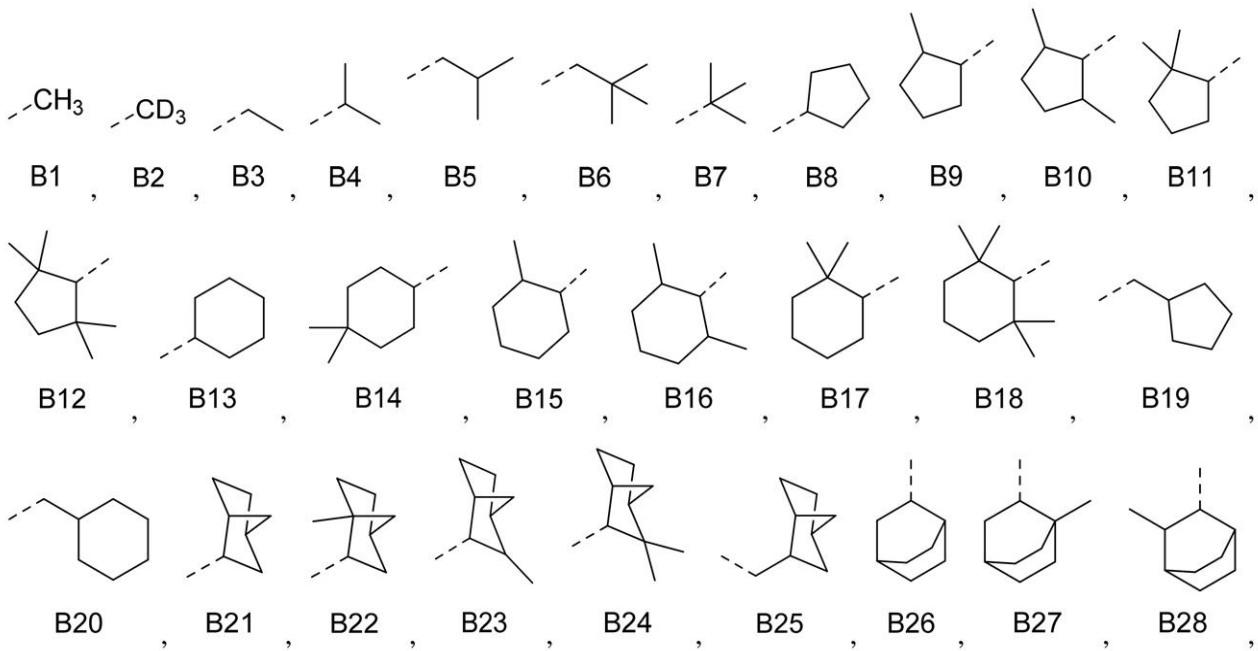
R71006～R71105 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+71105$
R71106～R71205 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+71105$
R71206～R71305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+71205$
R71306～R81305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+71305$
R81306～R91305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+81305$
R91306～R91405 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+91305$

【化 3 2】

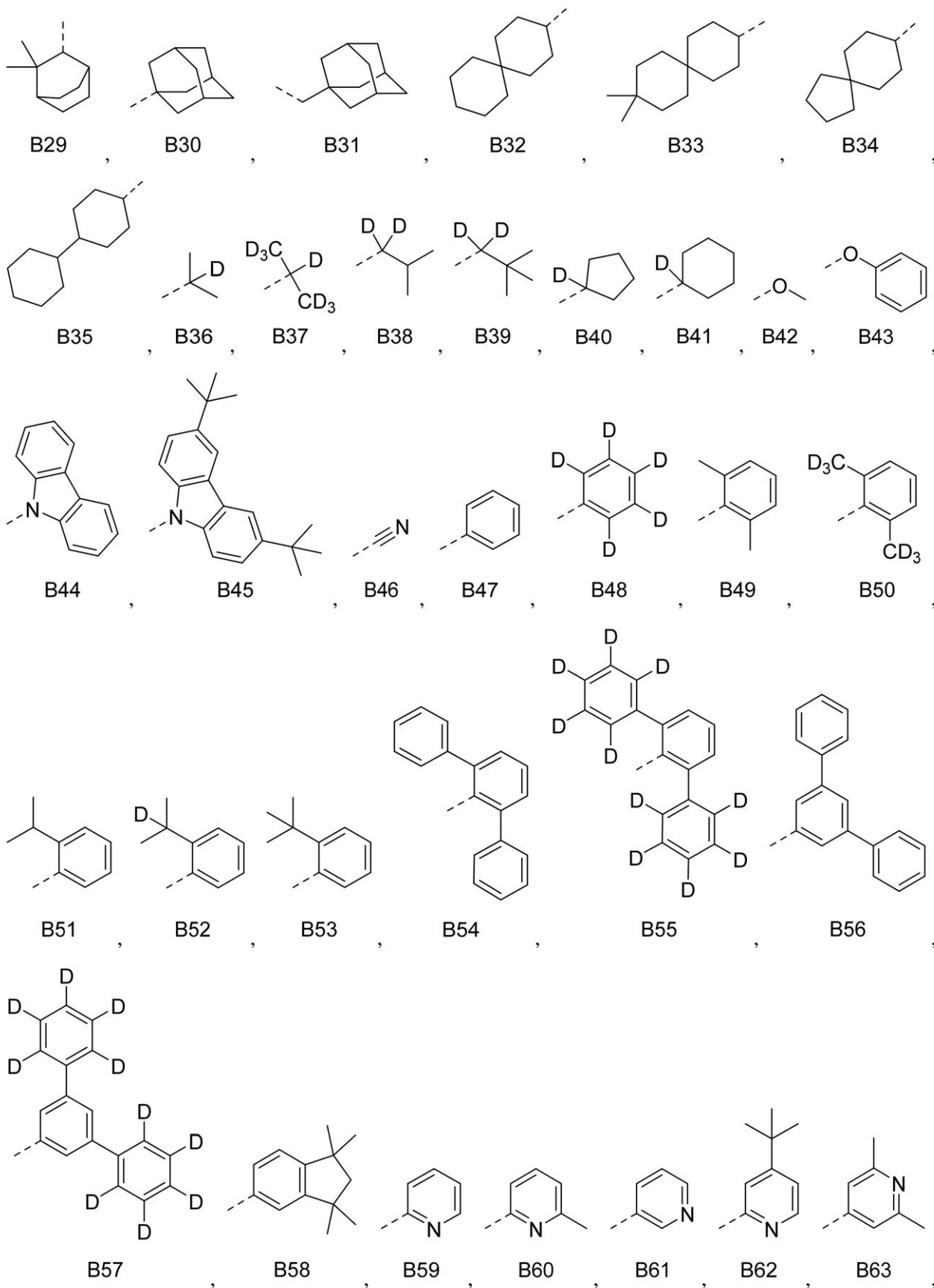
R91406~R101405 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100 の 整数である	$j=100(t-1)+u+91405$
R101406~ R110405 は、右 の構造を有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100 の 整数である	$j=100(t-1)+u+101405$

式中、B 1 ~ B 6 0 は、以下の構造を有する。

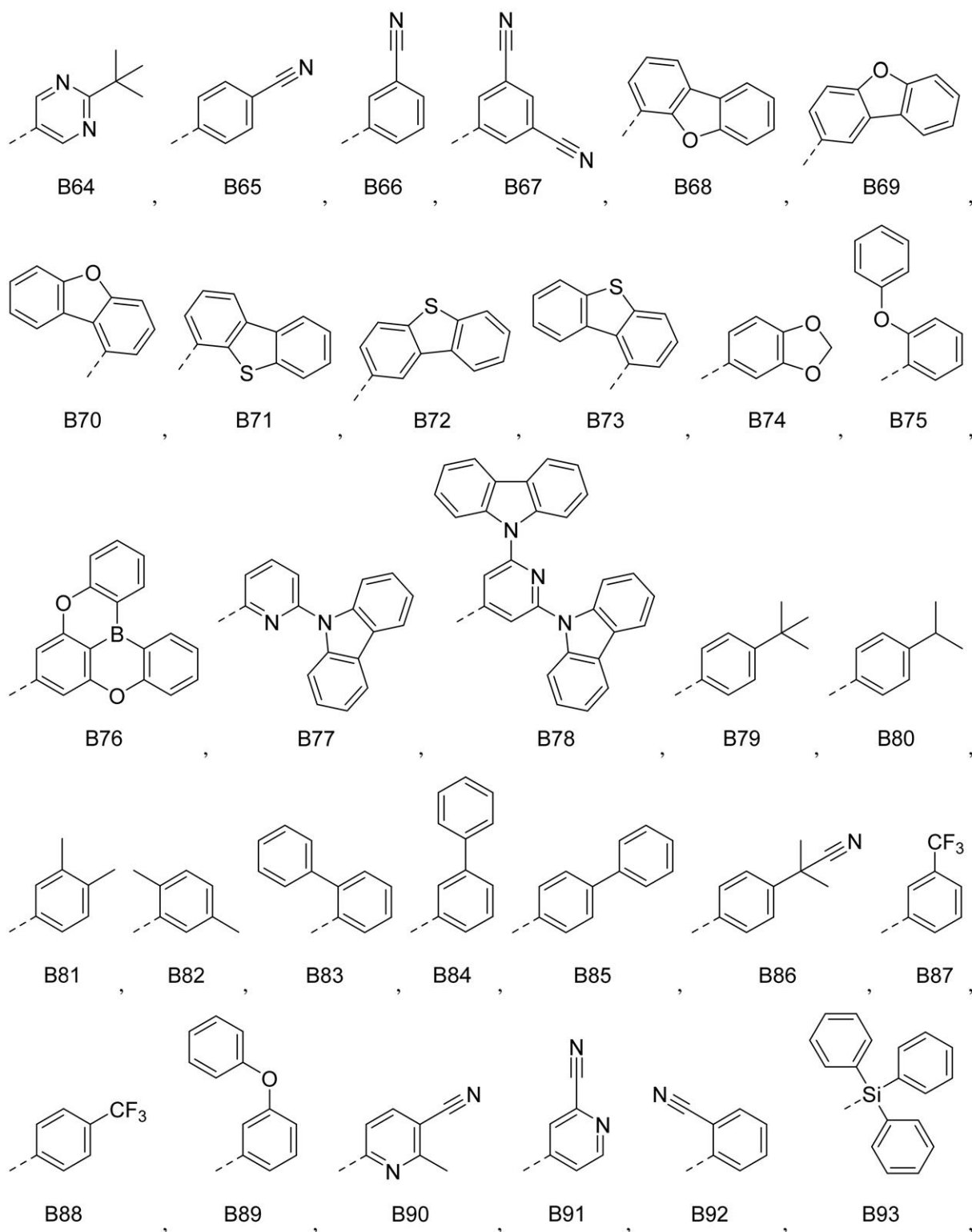
【化 3 3】



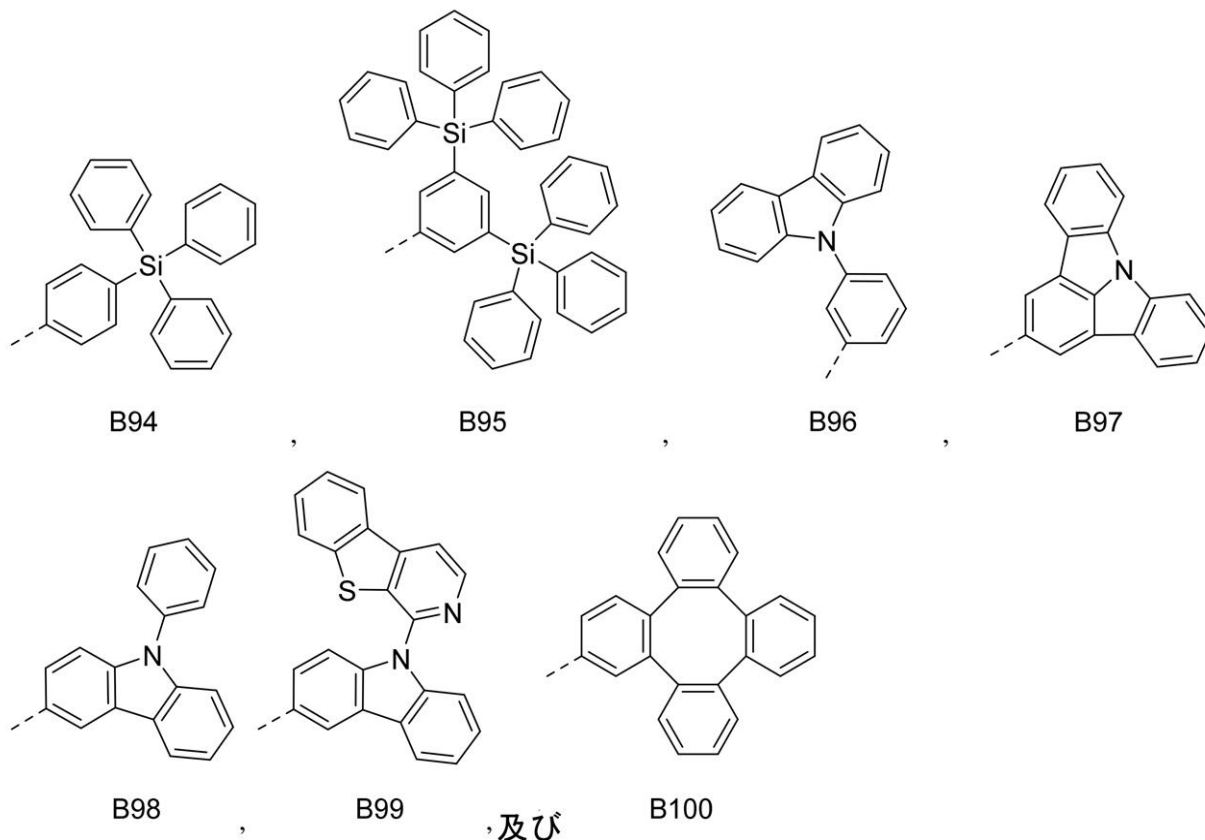
【化 3 4】



【化 3 5】



【化 3 6】



【手続補正 7】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0089

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0089】

上に定義される式 X 及び式 X I からなる群から選択される配位子 L_A を含む化合物の幾つかの実施形態においては、以下の構造 B 1、B 2、B 7、B 13、B 30、B 36、B 37、B 44、B 45、B 46、B 47、B 48、B 49、B 50、B 64、B 65、B 66、B 67、B 68、B 69、B 70、B 76、B 77、B 78、B 86、B 91、B 93、B 94、B 96、B 97、B 98、B 99、又は B 100 の 1 つを置換基 R^{S1} 又は R^{S2} として含む置換基 R^{A1} を含む $L_{A1} \sim L_{A2428910}$ の配位子が好ましい。

【手続補正 8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0090

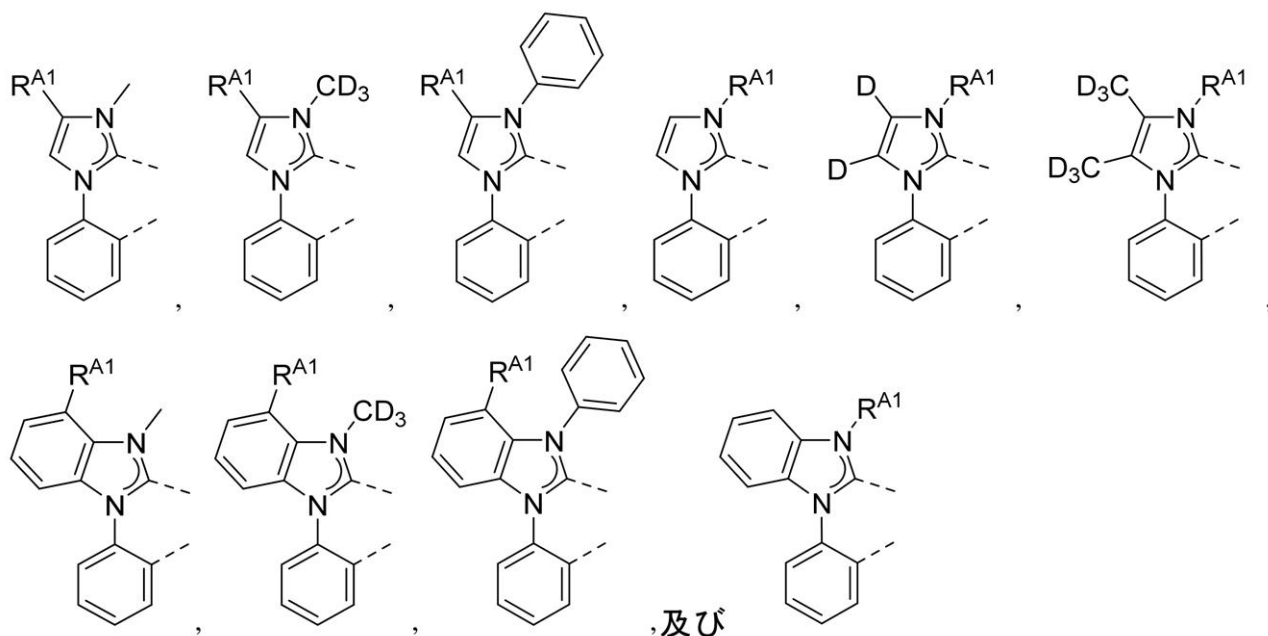
【補正方法】変更

【補正の内容】

【0090】

配位子 L_A が式 X 及び式 X I からなる群から選択される化合物の幾つかの実施形態においては、配位子 L_A は、下記からなる群から選択されることが好ましい。

【化 3 7】



【手続補正 9】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0091

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0091】

配位子 L_A が式 X 及び式 X I からなる群から選択される化合物の幾つかの実施形態においては、化合物は、式 $M(L_A)_x(L_B)_y(L_C)_z$ を有し、式中、 L_B 及び L_C は、それぞれ二座配位子であり； x は、1、2、又は3であり； y は、0、1、又は2； z は、0、1、又は2であり； $x + y + z$ は、金属 M の酸化状態である。幾つかの実施形態においては、化合物は、 $Ir(L_A)_3$ 、 $Ir(L_A)(L_B)_2$ 、 $Ir(L_A)_2(L_B)$ 、 $Ir(L_A)_2(L_C)$ 、及び $Ir(L_A)(L_B)(L_C)$ からなる群から選択される式を有し； L_A 、 L_B 、及び L_C は、互いに異なる。幾つかの実施形態においては、化合物は、式 $Pt(L_A)(L_B)$ を有し； L_A 及び L_B は、同一又は異なっている。

【手続補正 10】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0098

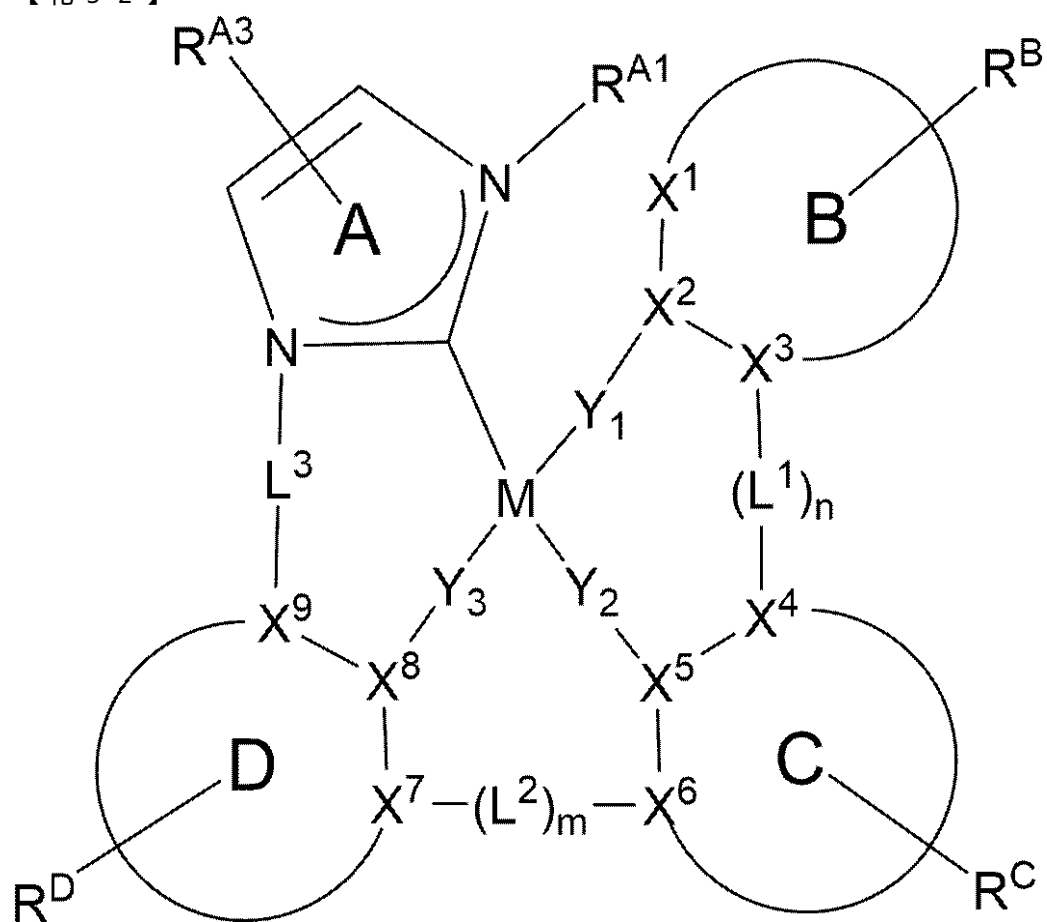
【補正方法】変更

【補正の内容】

【0098】

上で定義される式 V 及び式 V I からなる群から選択される式を有する化合物の幾つかの実施形態においては、化合物は、以下の式 X I I：

【化 5 2】

及び以下の式 X I I I :

The diagram illustrates a metal complex with a central metal atom M . A five-membered ring A is formed by two nitrogen atoms (N) and three carbon atoms. The ring is substituted with a Y^1A group, a Y^2A group, a Y^3A group, and a Y^4A group. A substituent R^{A6} is attached to the Y^3A group. The metal atom M is coordinated to the two nitrogen atoms of ring A via ligands L^3 and L^4 . Additionally, M is coordinated to three other ligands: Y_1 , Y_2 , and Y_3 . These ligands are part of three peripheral groups: B , C , and D . Group B contains atoms X^1 , X^2 , and X^3 , with a substituent R^B . Group C contains atoms X^4 , X^5 , and X^6 , with a substituent R^C . Group D contains atoms X^7 , X^8 , and X^9 , with a substituent R^D . The groups B , C , and D are connected to the metal atom M via ligands $(L^1)_n$ and $(L^2)_m$.

からなる群から選択され；式中、Mは、Pd又はPtであり；環B、C、及びDは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環であり； $X^1 \sim X^9$ は、それぞれ独立して、C又はNであり； $Y_1 \sim Y_3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、及びSからなる群から選択され； $Y_1 \sim Y_3$ の少なくとも1つは、直接結合であり； $Y^{1A} \sim Y^{4A}$ は、それぞれ独立して、C又はNであり； $L^1 \sim L^3$ は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、 $CR'R''$ 、 $SiR'R''$ 、 BR' 、及び NR' 、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；m及びnは、それぞれ独立して、0又は1であり；m及びnの少なくとも1つは、1であり； R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、それぞれ独立して、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；各R、 R' 、 R'' 、 R^A 、 R^B 、 R^C 、 R^D 、 R^E 、及び R^F は、独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；R及び R^B 置換基は、結合して環を形成することができる。幾つかの実施形態においては、環B、C、及びDは、それぞれ6員芳香環である。幾つかの実施形態においては、環Dは、フェニルである。幾つかの実施形態においては、環Cは、フェニルである。幾つかの実施形態においては、環Bは、フェニル、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、イミダゾール、及びイミダゾール由来カルベンからなる群から選択される。幾つかの実施形態においては、 L^2 は、O、 NR' 、又は $CR'R''$ である。幾つかの実施形態においては、 X^2 はNであり、 X^5 はCであ

る。幾つかの実施形態においては、 X^5 はCであり、 X^2 はNである。幾つかの実施形態においては、 L^1 は、直接結合である。幾つかの実施形態においては、 L^1 は、 NR' である。幾つかの実施形態においては、 L^3 は、直接結合である。幾つかの実施形態においては、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 は、それぞれ直接結合である。幾つかの実施形態においては、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 の1つはOであり、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 の残りはそれぞれ直接結合である。幾つかの実施形態においては、 X^1 、 X^3 、及び X^4 は、それぞれCである。幾つかの実施形態においては、 $m+n$ は、2である。幾つかの実施形態においては、 X^8 は、Cである。幾つかの実施形態においては、 $Y^{1A} \sim Y^{4A}$ は、それぞれCである。

【手続補正11】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0099

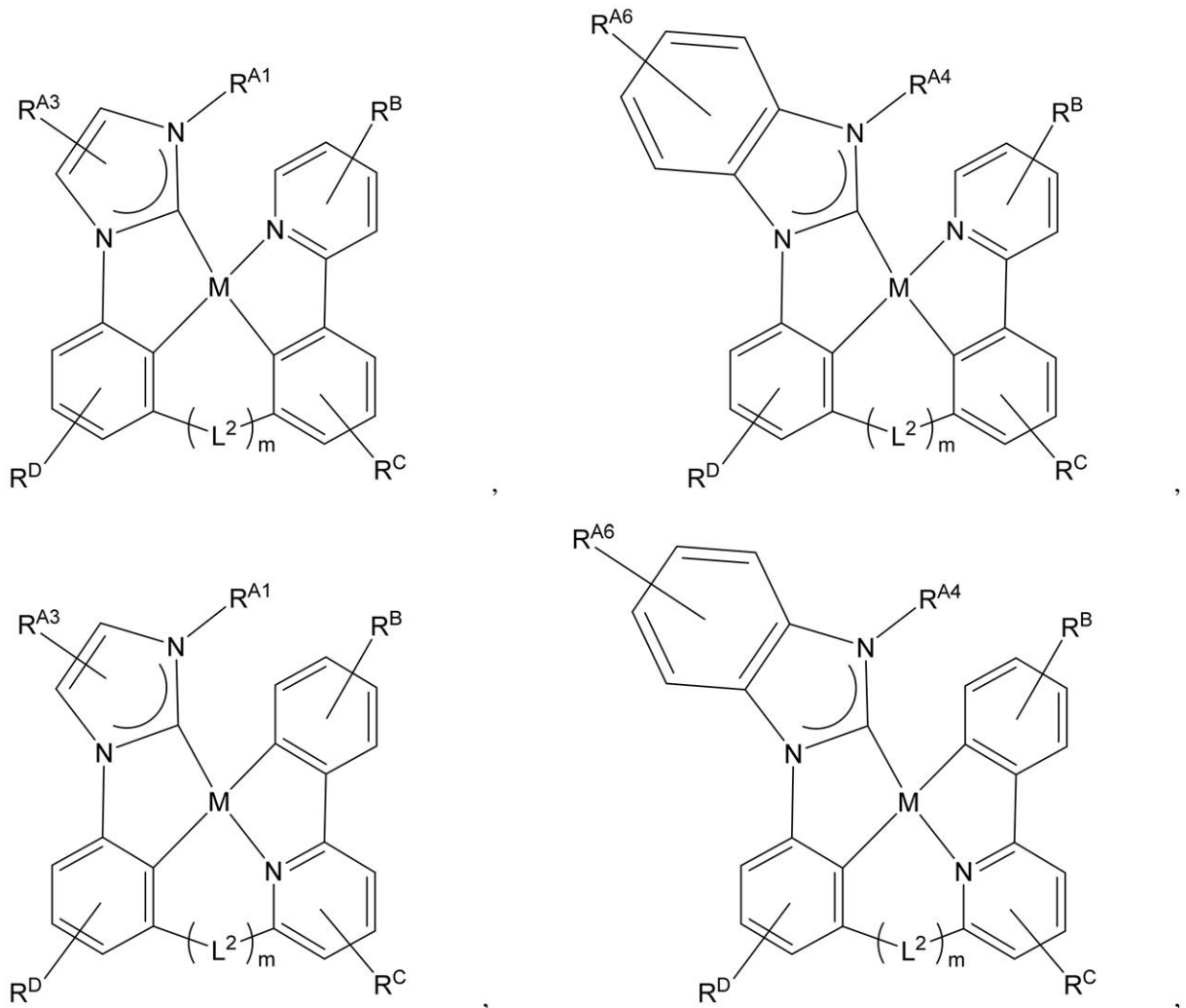
【補正方法】変更

【補正の内容】

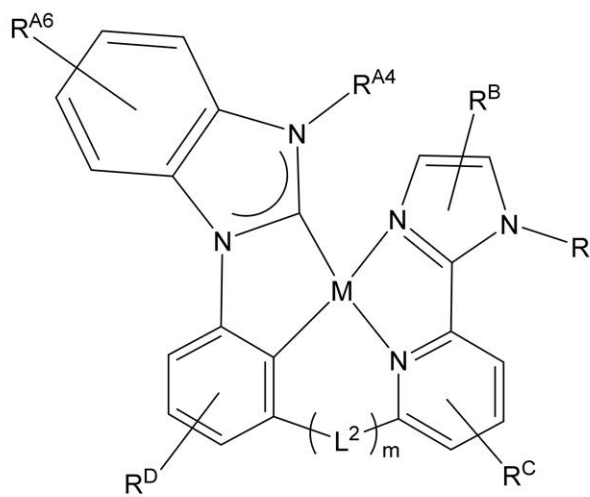
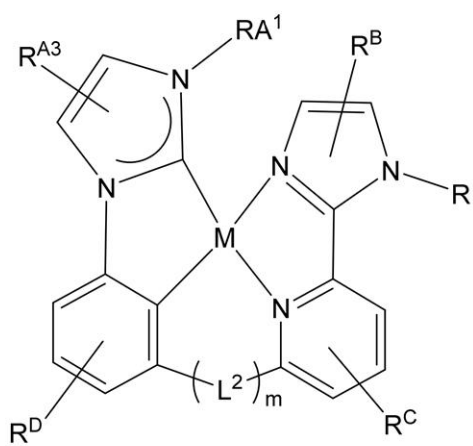
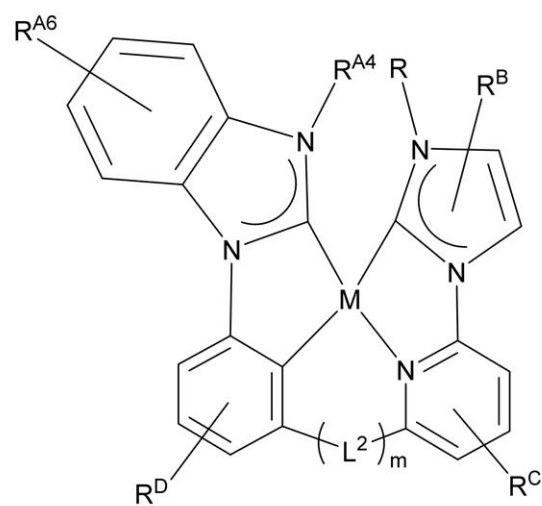
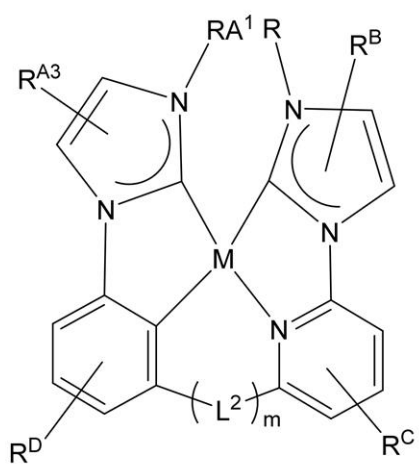
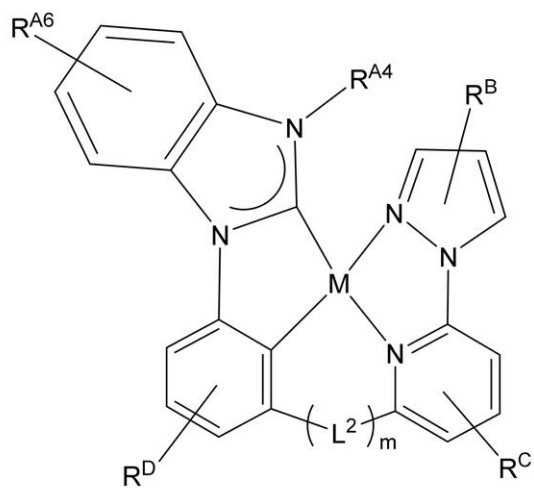
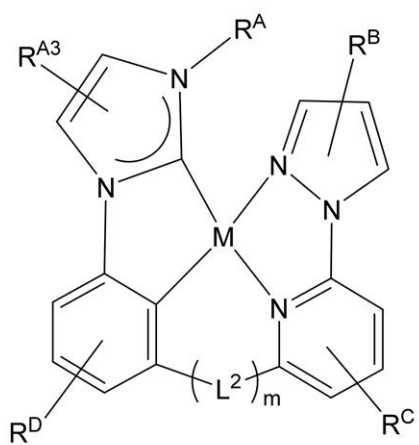
【0099】

上で定義される式XII及び式XIIIからなる群から選択される化合物の幾つかの実施形態においては、化合物は、下記からなる群から選択することができる。

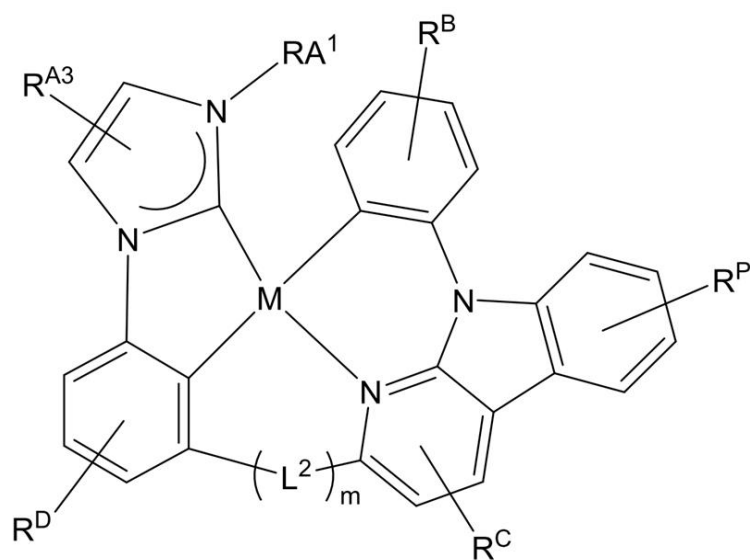
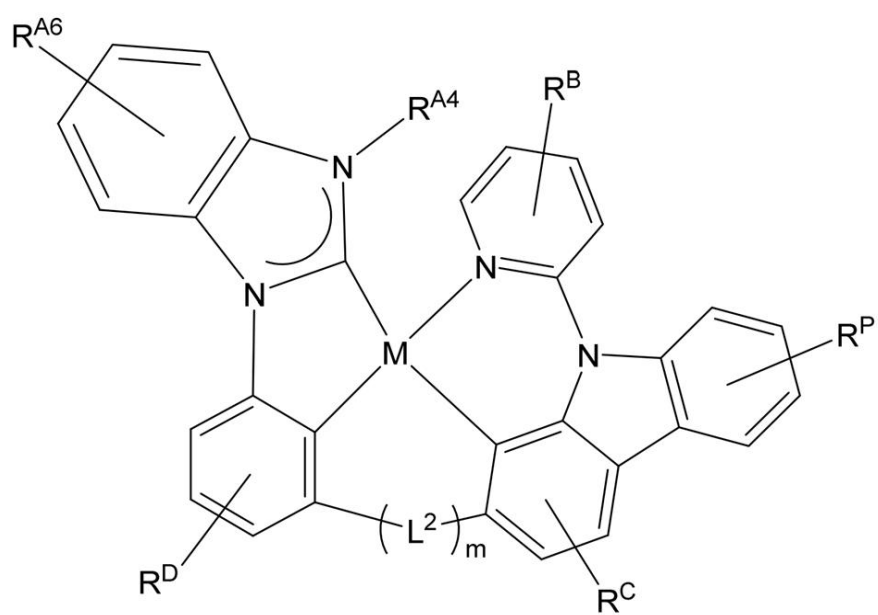
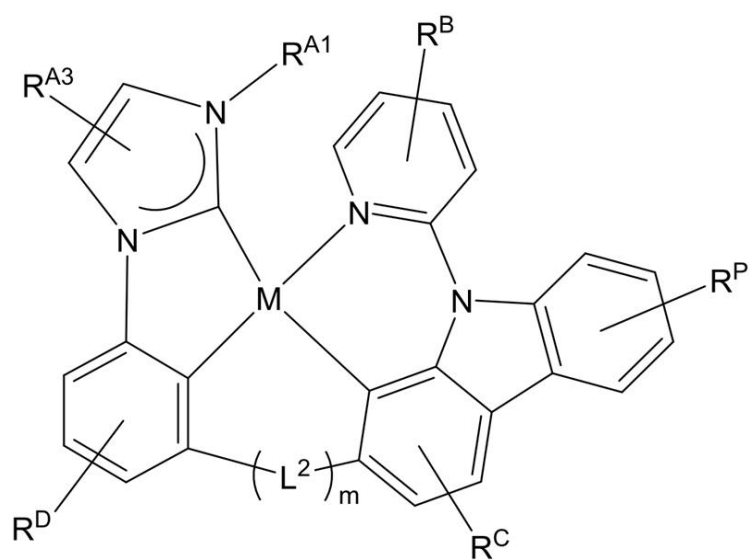
【化54】



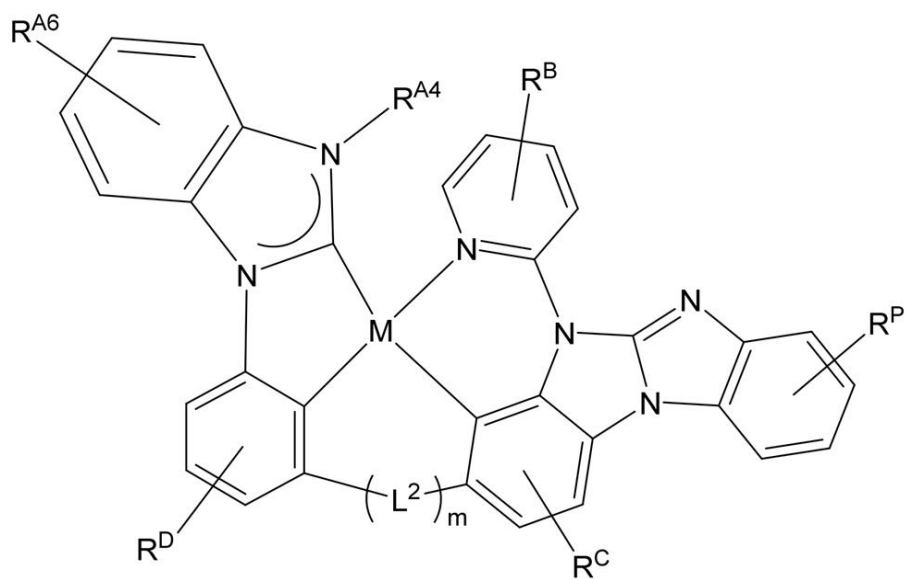
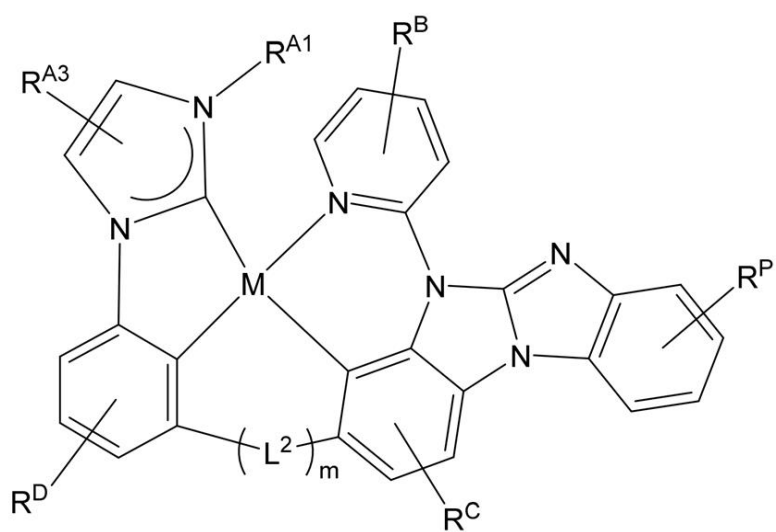
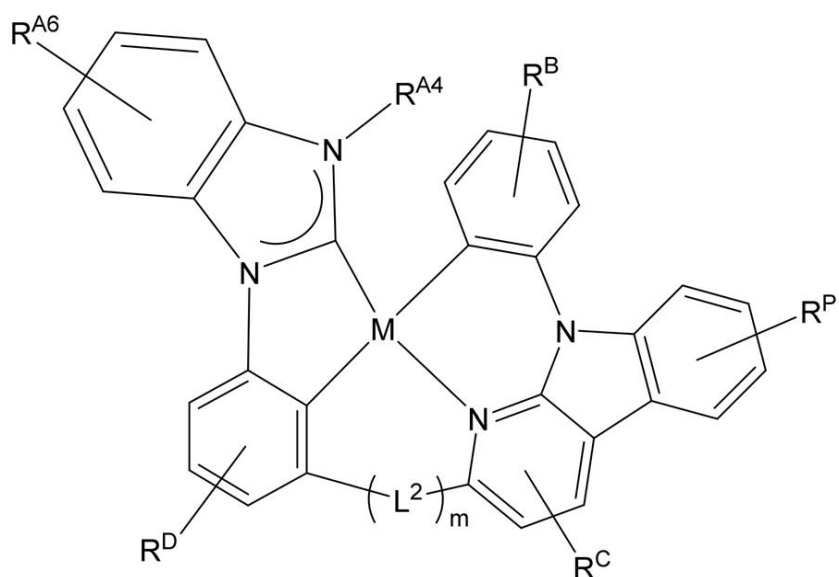
【化 5 5】



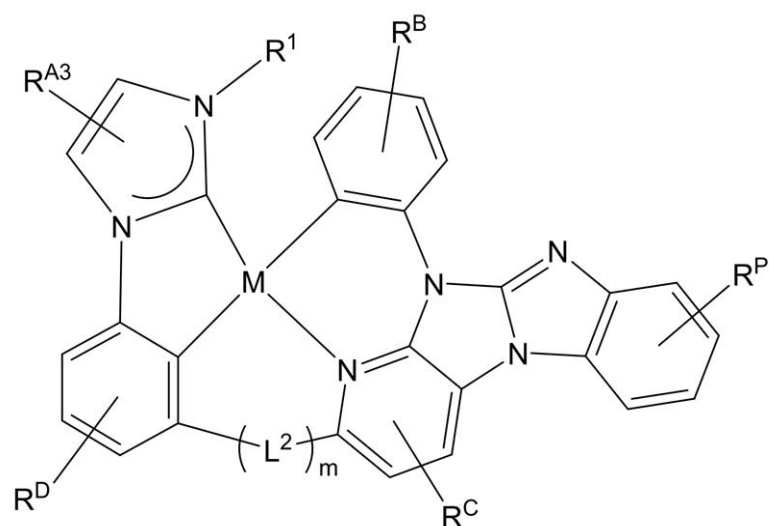
【化 5 6】



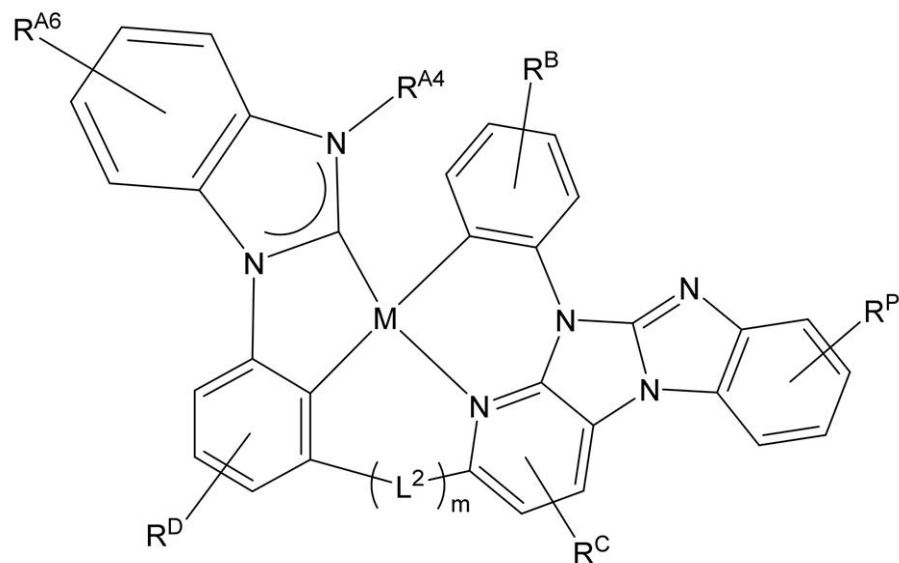
【化 5 7】



【化 5 8】



, 及び



；式中、Rは、アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、及びこれらの組合せからなる群から選択され； R^P は、 R^B 及び R^C と同一の定義を有し；任意の2つの隣接する置換基は、共に結合又は縮合して環を形成してもよい。

【手続補正12】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0100

【補正方法】変更

【補正の内容】

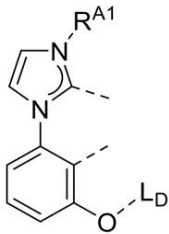
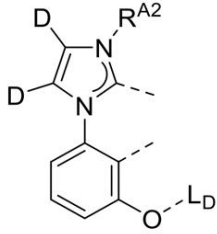
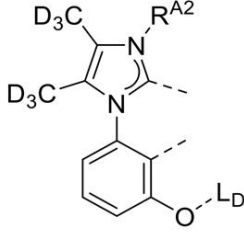
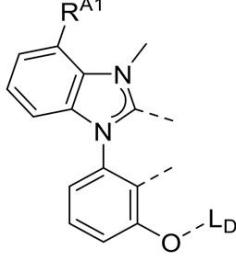
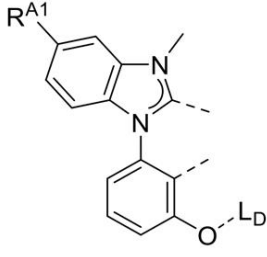
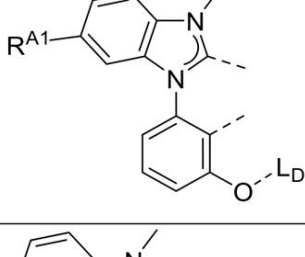
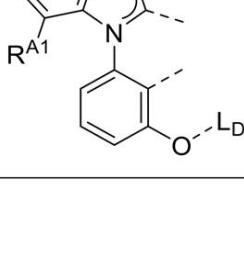
【0100】

上で定義される式X I I及び式X I I Iからなる群から選択される化合物の幾つかの実施形態においては、化合物は、式 $P t(L_{C m})(L_{D n})$ を有する化合物 y からなる群から選択され、 y は、 $y = 25543(m-1) + n$ で定義される整数であり、 m は、 $1 \sim 2438910$ の整数であり、 n は、 $1 \sim 25543$ の整数であり、 $L_{C m}$ は、以下の構造を有する。

【化 5 9】

L_{Cm}	L_{Cm} の構造	Ar^1, R	m
$L_{C1} \sim L_{C110405}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405の 整数である	$m = j$
$L_{C110406} \sim L_{C220810}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405の 整数である	$m = j + 110405$
$L_{C220811} \sim L_{C331215}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405の 整数である	$m = j + 220810$
$L_{C331216} \sim L_{C441620}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405の 整数である	$m = j + 331215$
$L_{C441621} \sim L_{C552025}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405の 整数である	$m = j + 441620$
$L_{C552026} \sim L_{C662430}$ は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1} = R_j$ 、こ こ で、 j は、1～110405の 整数である	$m = j + 552025$

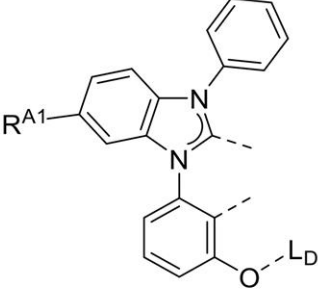
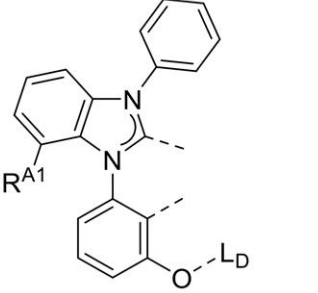
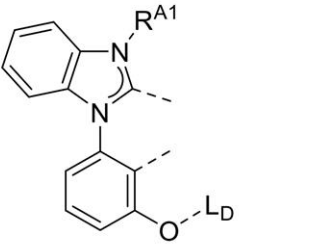
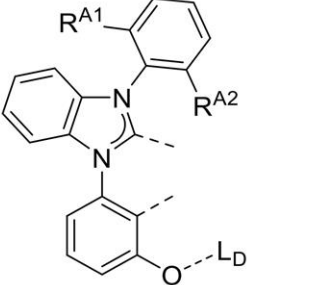
【化 6 0】

LC662431～LC772835 は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+662430$
LC772836～LC883240 は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+772835$
LC883241～LC993645 は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+883240$
LC993646～LC1104050 は、 右の構造を有する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+993645$
LC1104051～LC1214455 は、右の構造を有 する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+1104050$
LC1214456～LC1324860 は、右の構造を有 する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+1214455$
LC1324861～LC1435265 は、右の構造を有 する		式中、 $R^{A1}=R_j$ 、こ こで、 j は、1～110405 の 整数である	$m=j+1324860$

【化 6 1】

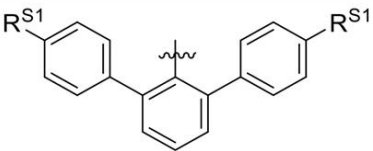
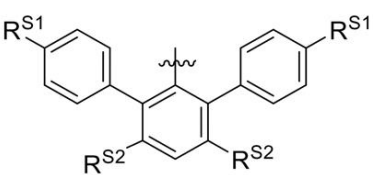
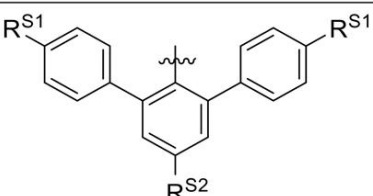
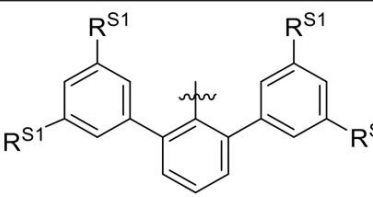
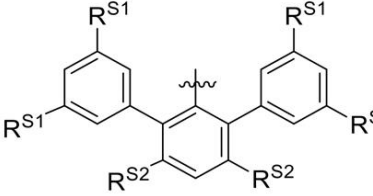
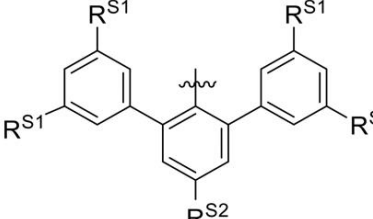
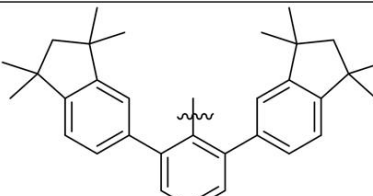
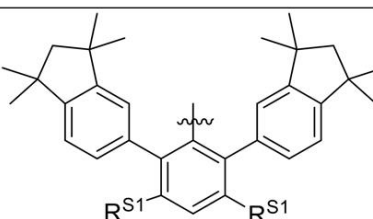
<p>L_{C1435266}～L_{C1545670} は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m=j+1435265$</p>
<p>L_{C1545671}～L_{C1656075} は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m=j+1545670$</p>
<p>L_{C1656076}～L_{C1766480} は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m=j+1656075$</p>
<p>L_{C1766481}～L_{C1876885} は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m=j+1766480$</p>
<p>L_{C1876886}～L_{C1987290} は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m=j+1876885$</p>
<p>L_{C1987291}～L₂₀₉₇₆₉₅は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1}=R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m=j+1987290$</p>

【化 6 2】

<p>$L_{C2097696} \sim L_{C2208100}$ は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1} = R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m = j + 2097695$</p>
<p>$L_{C2208101} \sim L_{C2318505}$ は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1} = R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m = j + 2208100$</p>
<p>$L_{C2318506} \sim L_{C2428910}$ は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1} = R_j$、ここで、jは、1～110405の整数である</p>	<p>$m = j + 2318505$</p>
<p>$L_{C2428910} \sim L_{C2438910}$ は、右の構造を有する</p>		<p>式中、$R^{A1} = B_j$、$R^{A2} = B_k$、ここで、jとkは、1～100の整数である</p>	<p>$m = 100(j - 1) + k + 2428910$</p>

ここで、 $R_1 \sim R_{110405}$ は、以下の構造を有する。

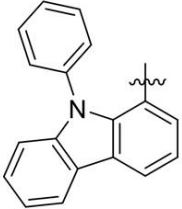
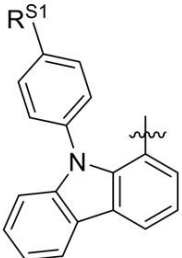
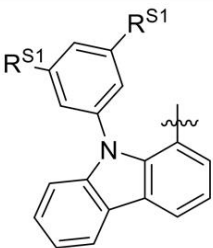
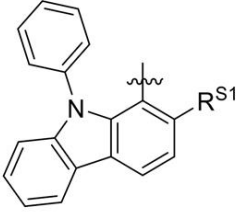
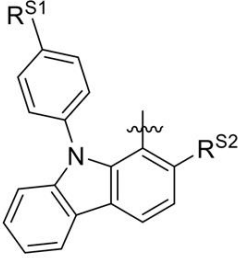
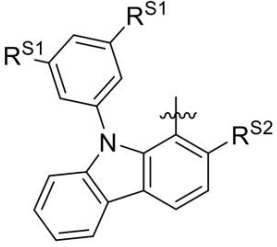
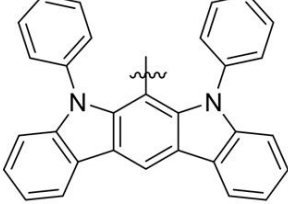
【化 6 3】

R_j	R_m の構造	R^{S1}, R^{S2}, R^{S3}	j
R1~R100 は、右の構造 を有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t$
R101~R10100 は、右の構造 を有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j=100(t-1)+u+100$
R10101~R20100 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j=100(t-1)+u+10100$
R20101~R20200 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t+20100$
R20201~R30200 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j=100(t-1)+u+20100$
R30201~R40200 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1~100の 整数である	$j=100(t-1)+u+30200$
R40201は、右の 構造を有する			$j=40201$
R40202~R40301 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1~100の整数である	$j=t+40201$

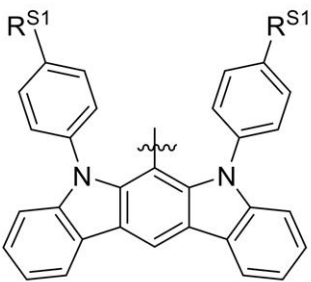
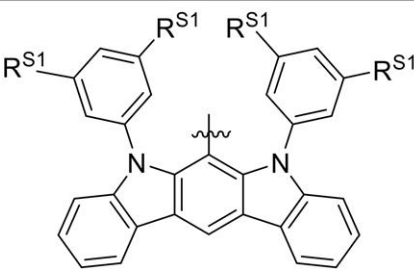
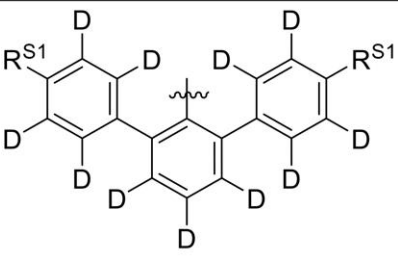
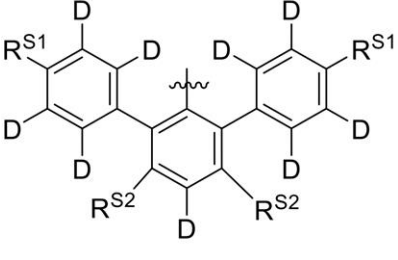
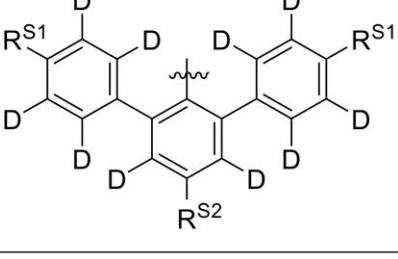
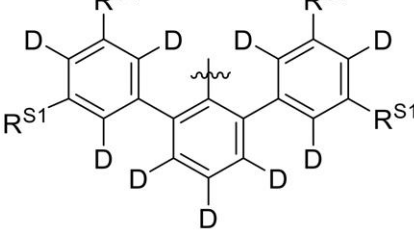
【化 6 4】

R40302～R40401 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40301$
R40402は、右の 構造を有する			$j=40402$
R40403～R40502 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40402$
R40503～R40602 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+40502$
R40603～R50602 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+40602$
R50603は、右の 構造を有する			$j=50603$
R50604～R50703 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+50603$

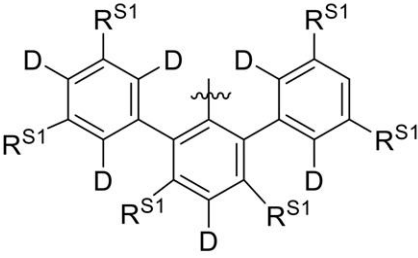
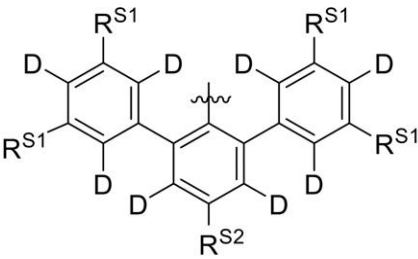
【化 6 5】

R50704は、右の構造を有する			$j = 50704$
R50705～R50804は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j = t + 50704$
R50805～R50904は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j = t + 50804$
R50905～R51004は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$s = t + 50904$
R51005～R61004は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の整数である	$j = 30(t-1) + u + 51004$
R61005～R71004は、右の構造を有する		式中、 $R^{S1} = Bt$ 、 $R^{S2} = Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の整数である	$j = 30(t-1) + u + 61004$
R71005は、右の構造を有する			$j = 71005$

【化 6 6】

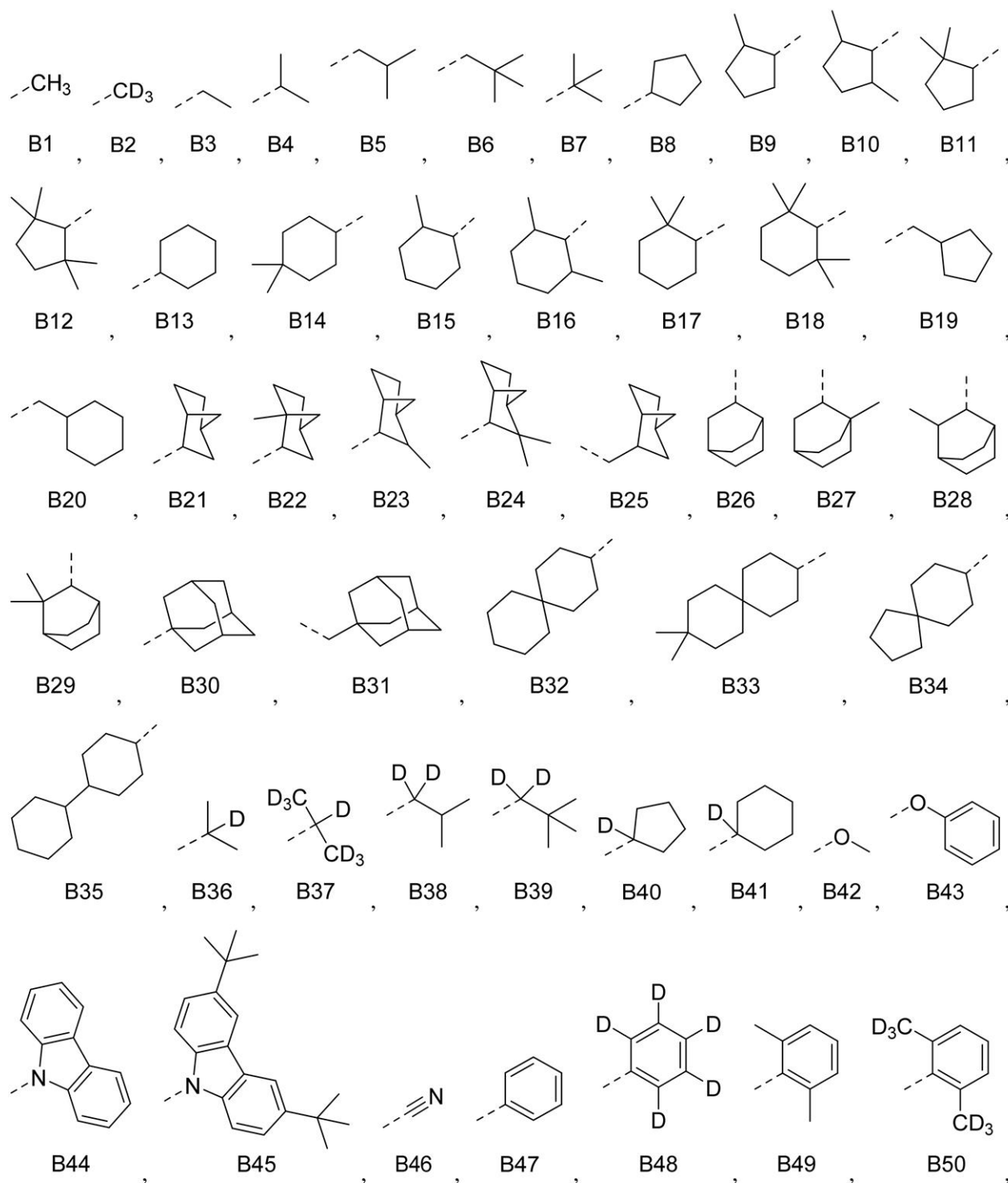
R71006～R71105 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+71105$
R71106～R71205 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+71105$
R71206～R71305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+71205$
R71306～R81305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+71305$
R81306～R91305 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+81305$
R91306～R91405 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 ここで、 t は、 1～100の整数である	$j=t+91305$

【化 6 7】

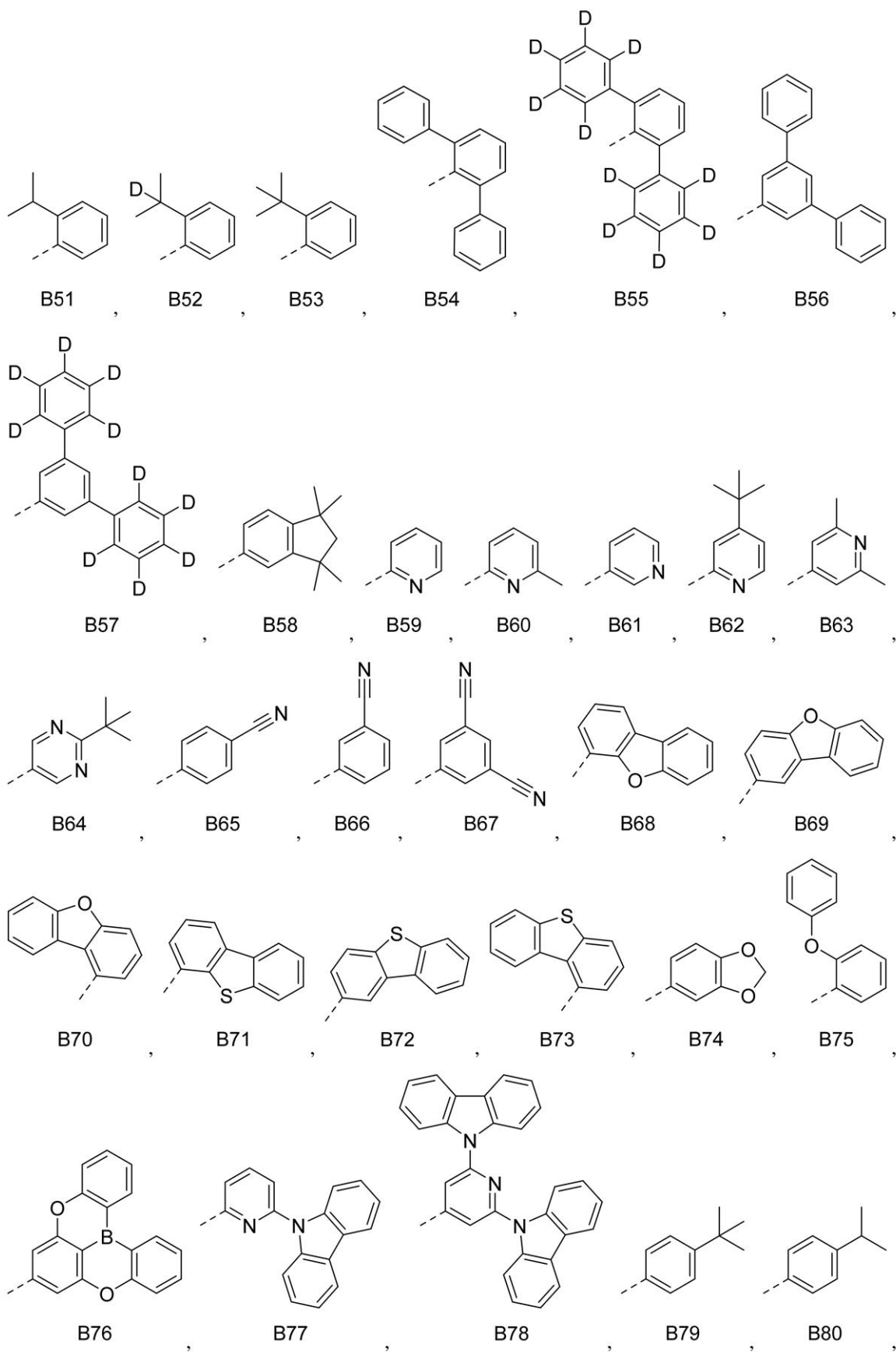
R91406～R101405 は、右の構造を 有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+91405$
R101406～ R110405は、右 の構造を有する		式中、 $R^{S1}=Bt$ 、 $R^{S2}=Bu$ 、ここで、 t 及び u は、1～100の 整数である	$j=100(t-1)+u+101405$

式中、 $B1 \sim B100$ は、以下の構造を有する。

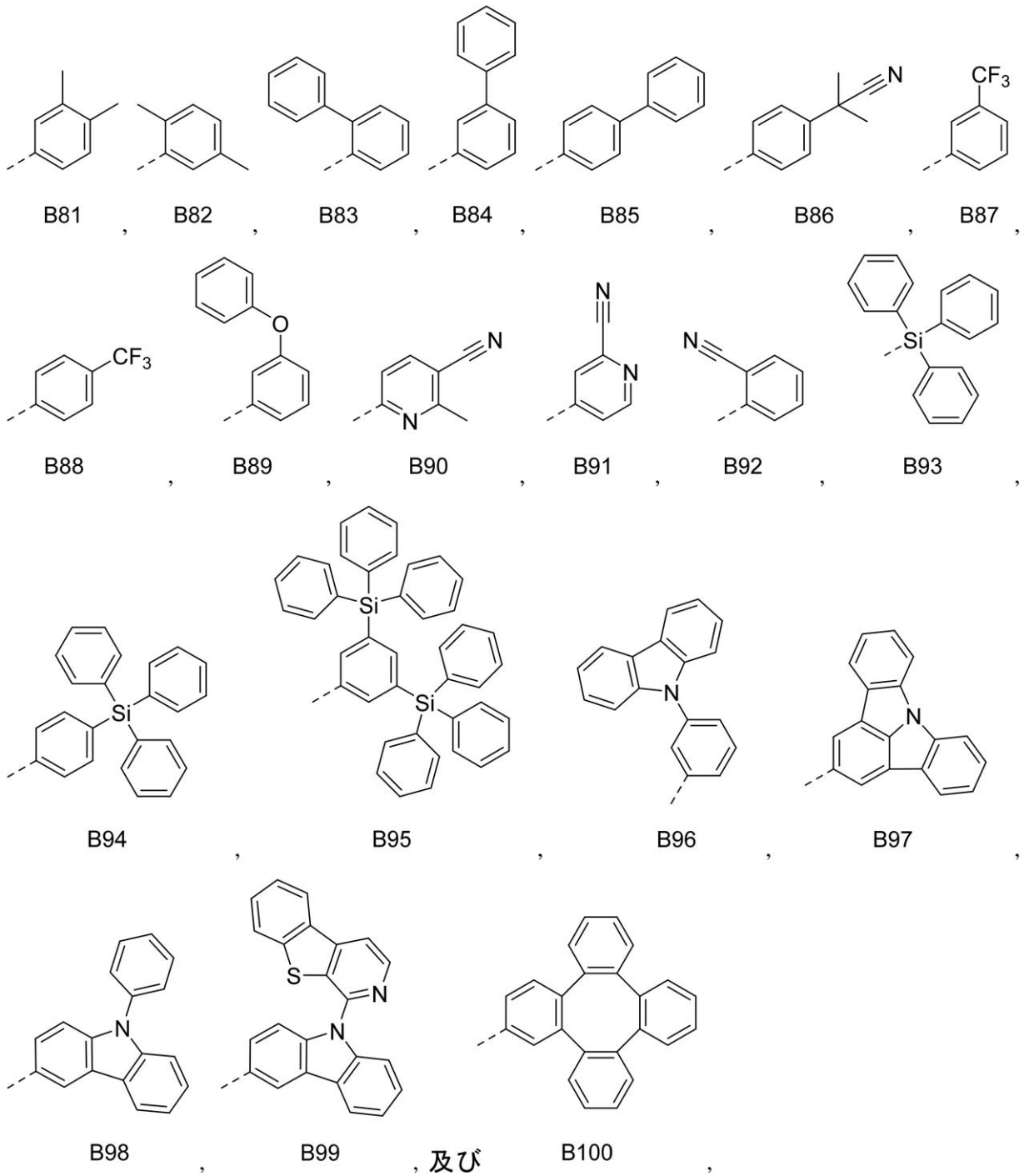
【化 6 8】



【化 6 9】



【化 7 0】

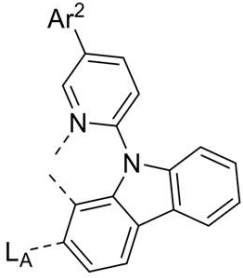
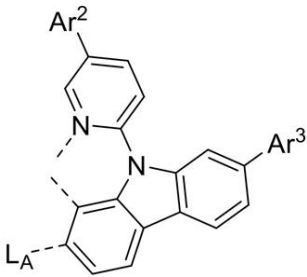
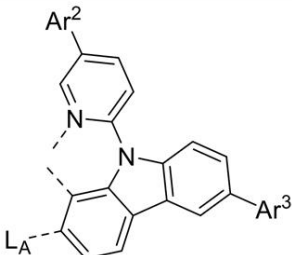
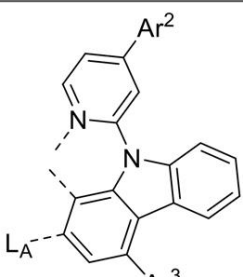
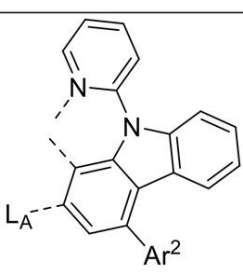
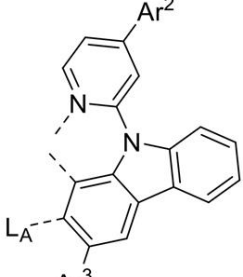


L_{Dn} は、以下の構造 $L_{D1} \sim L_{D25543}$ を有する。

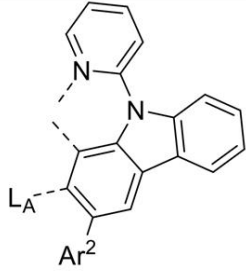
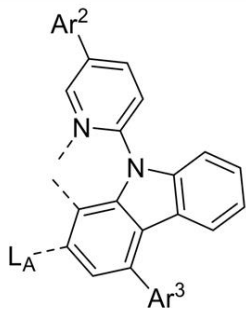
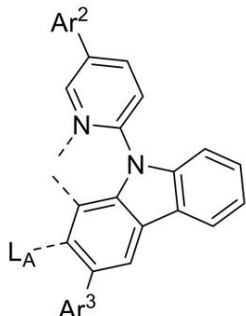
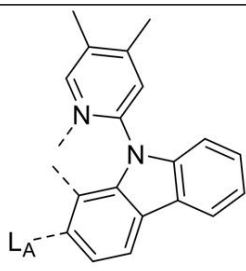
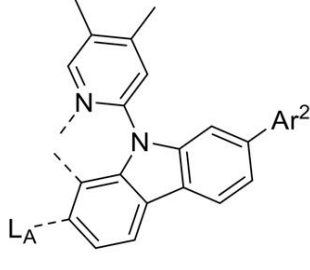
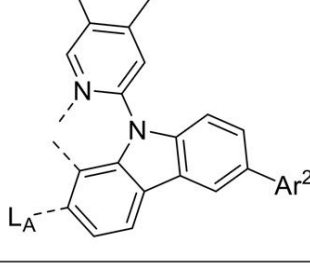
【化 7 1】

L_{Dn}	L_{Dn} の構造	Ar^2, Ar^3, R^2	n
$L_{D1} \sim L_{D30}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30 の整数である	$n = j$
L_{D31} は、右の構造を有する			$n = 31$
$L_{D32} \sim L_{D931}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30 の整数であり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 31$
$L_{D932} \sim L_{D961}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30 の整数である	$n = j + 931$
$L_{D962} \sim L_{D1861}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30 の整数であり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 961$
$L_{D1862} \sim L_{D1891}$ は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30 の整数である	$n = j + 1861$

【化 7 2】

LD1892～LD1921 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 1891$
LD1922～LD2821 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 1921$
LD2822～LD3721 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 2821$
LD3722～LD4621 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 3721$
LD4622～LD4651 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 4621$
LD4652～LD5551 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 4651$

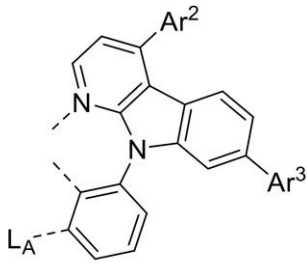
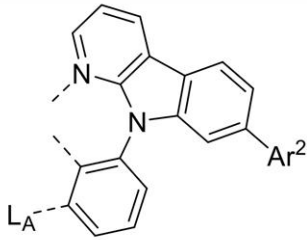
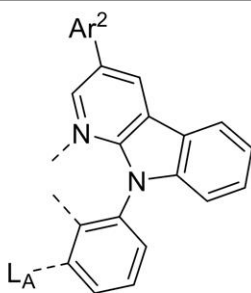
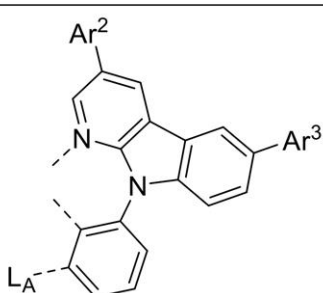
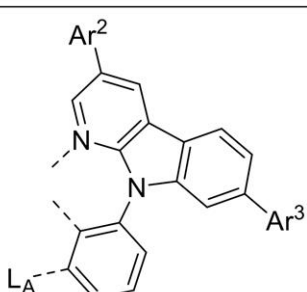
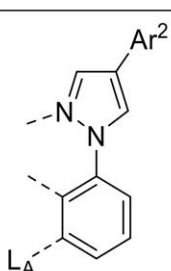
【化 7 3】

LD5552～LD5581は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 5551$
LD5582～LD6481は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 5581$
LD6482～LD7381は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 6481$
LD7382は、右の構 造を有する			$n = 7382$
LD7383～LD7412は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7382$
LD7413～LD7442は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7412$

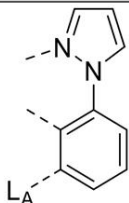
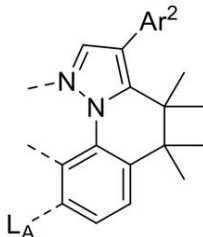
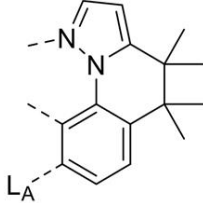
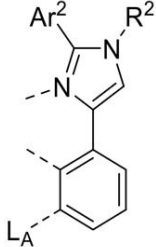
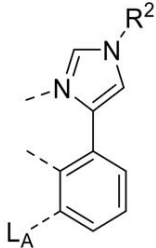
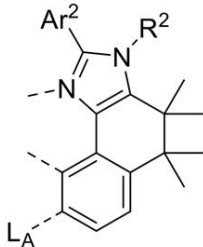
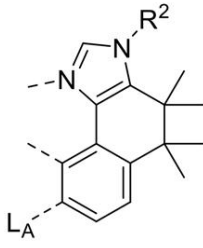
【化 7 4】

LD7443～LD7472 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7442$
LD7473～LD7502 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7472$
LD7503 は、右の構 造を有する			$n = 7503$
LD7504～LD7533 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 7503$
LD7534～LD8433 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 7533$
LD8434～LD8463 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 8433$

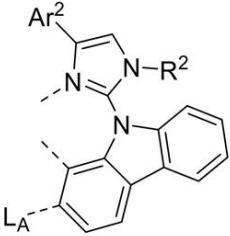
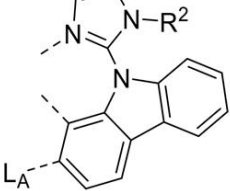
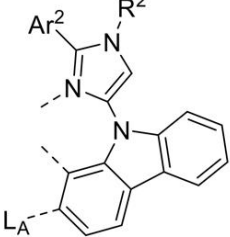
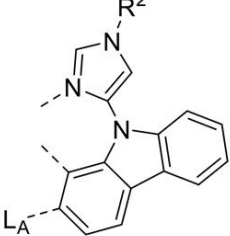
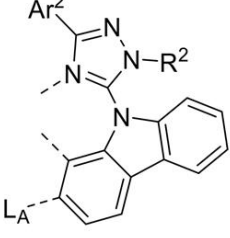
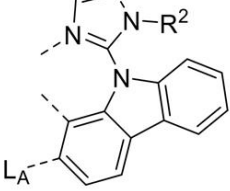
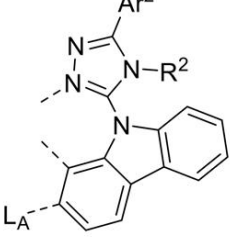
【化 7 5】

LD8464～LD9363 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 8463$
LD9364～LD9393 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 9363$
LD9394～LD9423 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 9393$
LD9424～LD10323 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 9423$
LD10324～LD11223 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 10323$
LD11224～LD11253 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 11223$

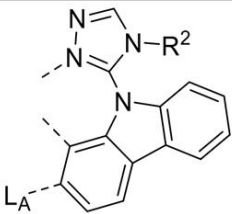
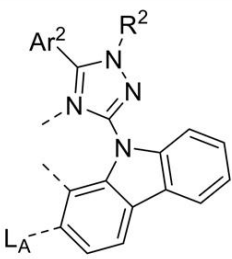
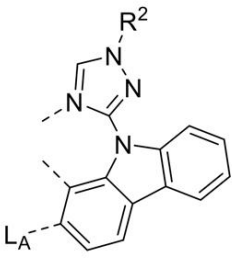
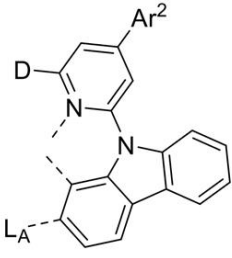
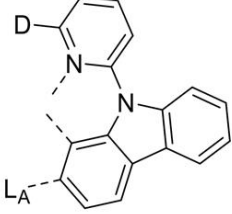
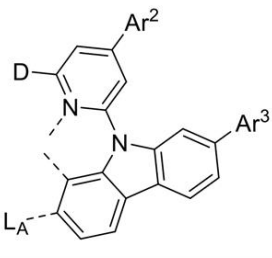
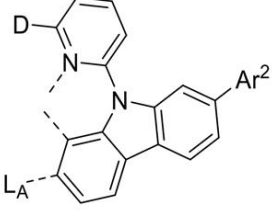
【化 7 6】

LD11254は、右の構造を有する			$n = 11254$
LD11255～LD11284は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここで、 j は、1～30の整数である	$n = j + 11254$
LD11285は、右の構造を有する			$n = 11285$
LD11286～LD12185は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $R^2 = Al$ 、ここで、 j は、1～30の整数であり、 l は、1～30の整数である	$n = 30(j-1) + l + 11285$
LD12186～LD12215は、右の構造を有する		式中、 $R^2 = Al$ 、ここで、 l は、1～30の整数である	$n = l + 12185$
LD12216～LD13115は、右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $R^2 = Al$ 、ここで、 j は、1～30の整数であり、 l は、1～30の整数である	$n = 30(j-1) + l + 12215$
LD13116～LD13145は、右の構造を有する		式中、 $R^2 = Al$ 、ここで、 l は、1～30の整数である	$n = l + 13115$

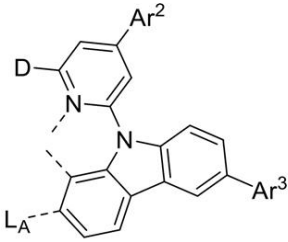
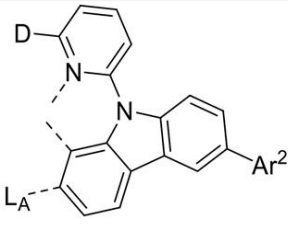
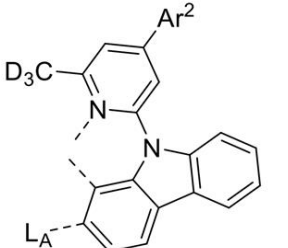
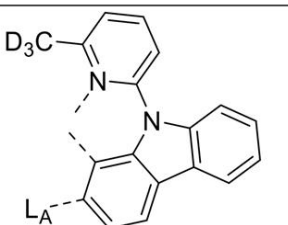
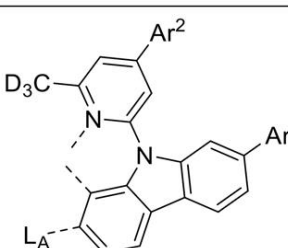
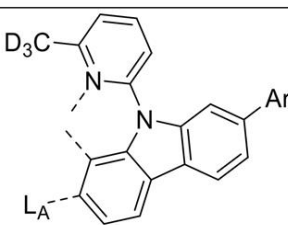
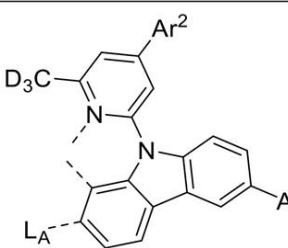
【化 7 7】

<p>L_{D13146}～L_{D14045}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$\text{Ar}^2 = \text{A}_j$ 及び $\text{R}^2 = \text{Al}$、ここで、j は、1～30の整数で あり、lは、1～30の 整数である</p>	$n = 30(j-1) + l + 13145$
<p>L_{D14046}～L_{D14075}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$\text{R}^2 = \text{Al}$、ここ で、lは、1～30の整 数である</p>	$n = l + 14045$
<p>L_{D14076}～L_{D14975}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$\text{Ar}^2 = \text{A}_j$ 及び $\text{R}^2 = \text{Al}$、ここで、j は、1～30の整数で あり、lは、1～30の 整数である</p>	$n = 30(j-1) + l + 14075$
<p>L_{D14976}～L_{D15005}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$\text{R}^2 = \text{Al}$、ここ で、lは、1～30の整 数である</p>	$n = l + 14975$
<p>L_{D15006}～L_{D15905}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$\text{Ar}^2 = \text{A}_j$ 及び $\text{R}^2 = \text{Al}$、ここで、j は、1～30の整数で あり、lは、1～30の 整数である</p>	$n = 30(j-1) + l + 15005$
<p>L_{D15906}～L_{D15935}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$\text{R}^2 = \text{Al}$、ここ で、lは、1～30の整 数である</p>	$n = l + 15905$
<p>L_{D15936}～L_{D16835}は、 右の構造を有する</p>		<p>式中、$\text{Ar}^2 = \text{A}_j$ 及び $\text{R}^2 = \text{Al}$、ここで、j は、1～30の整数で あり、lは、1～30の 整数である</p>	$n = 30(j-1) + l + 15935$

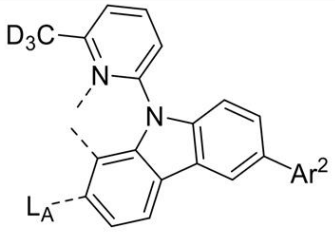
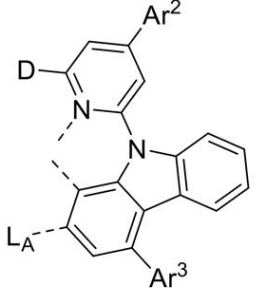
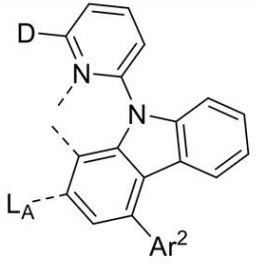
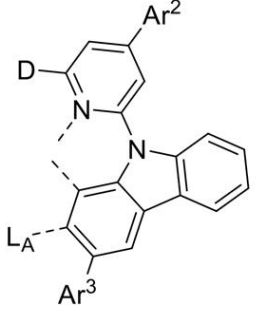
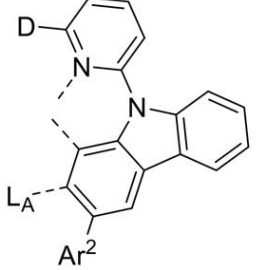
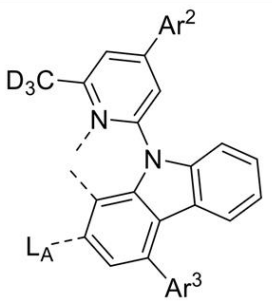
【化 7 8】

LD16836～LD16865は、 右の構造を有する		式中、 $R^2=Al$ 、こ こで、 l は、1～30の整 数である	$n=l+16835$
LD16866～LD17765は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2=Aj$ 及び $R^2=Al$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 l は、1～30の 整数である	$n=30(j-1)+l+16865$
LD17766～LD17795は、 右の構造を有する		式中、 $R^2=Al$ 、こ こで、 l は、1～30の整 数である	$n=l+17765$
LD17796～LD17825は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2=Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n=j+17795$
LD17826は、右の構 造を有する			$n=17826$
LD17827～LD18726は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2=Aj$ 及び $Ar^3=Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n=30(j-1)+m+17826$
LD18727～LD18756は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2=Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n=j+18726$

【化 7 9】

LD18757～LD19656は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 18756$
LD19657～LD19686は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 19656$
LD19687～LD19716は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 19686$
LD19717は、右の構 造を有する			$n = 19717$
LD19718～LD20617は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 19717$
LD20618～LD20647は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、ここ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 20617$
LD20648～LD21547は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j-1) + m + 20647$

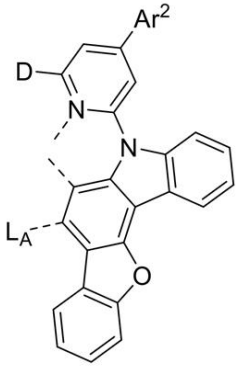
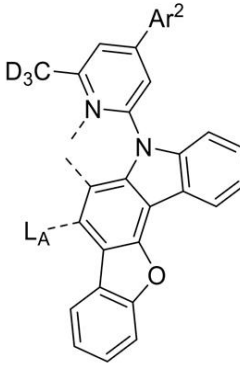
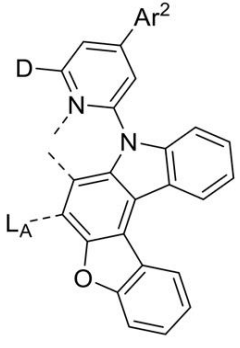
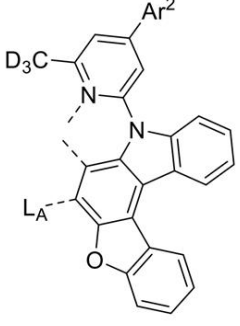
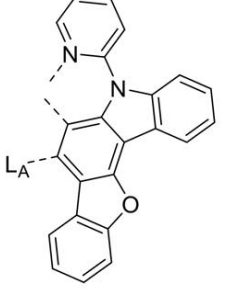
【化 8 0】

LD21548～LD21577は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 21547$
LD21578～LD22477は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m +$ 21577
LD22478～LD22507は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 22477$
LD22508～LD23407は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m +$ 22507
LD23408～LD23437は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 23407$
LD23438～LD24337は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m +$ 23437

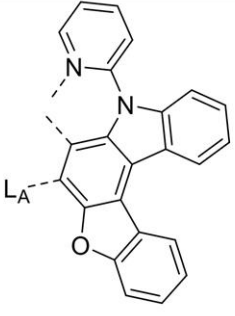
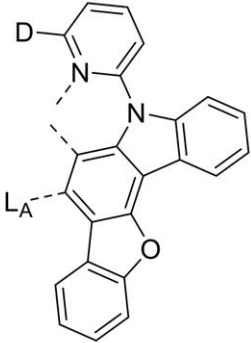
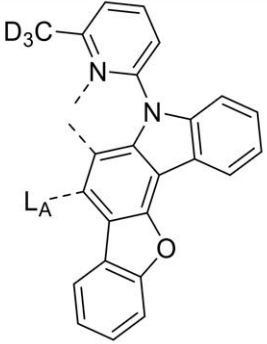
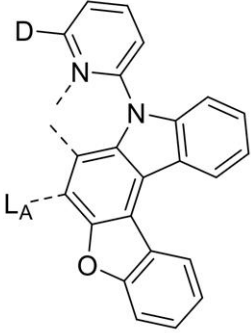
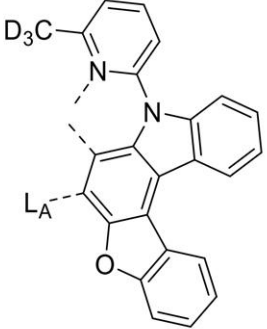
【化 8 1】

LD24338～LD24367は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 24337$
LD24368～LD25267は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 及び $Ar^3 = Am$ 、ここで、 j は、1～30の整数で あり、 m は、1～30 の整数である	$n = 30(j - 1) + m + 24367$
LD25268～LD25297は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25267$
LD25298～LD25327は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25297$
LD25328～LD25357は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = Aj$ 、こ こで、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25327$

【化 8 2】

LD25358～LD25387は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = A_j$ 、こ こ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25357$
LD25388～LD25417は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = A_j$ 、こ こ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25387$
LD25418～LD25447は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = A_j$ 、こ こ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25417$
LD25448～LB25477は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2 = A_j$ 、こ こ で、 j は、1～30の整 数である	$n = j + 25447$
LD25478は、右の構 造を有する			$n = 25478$

【化 8 3】

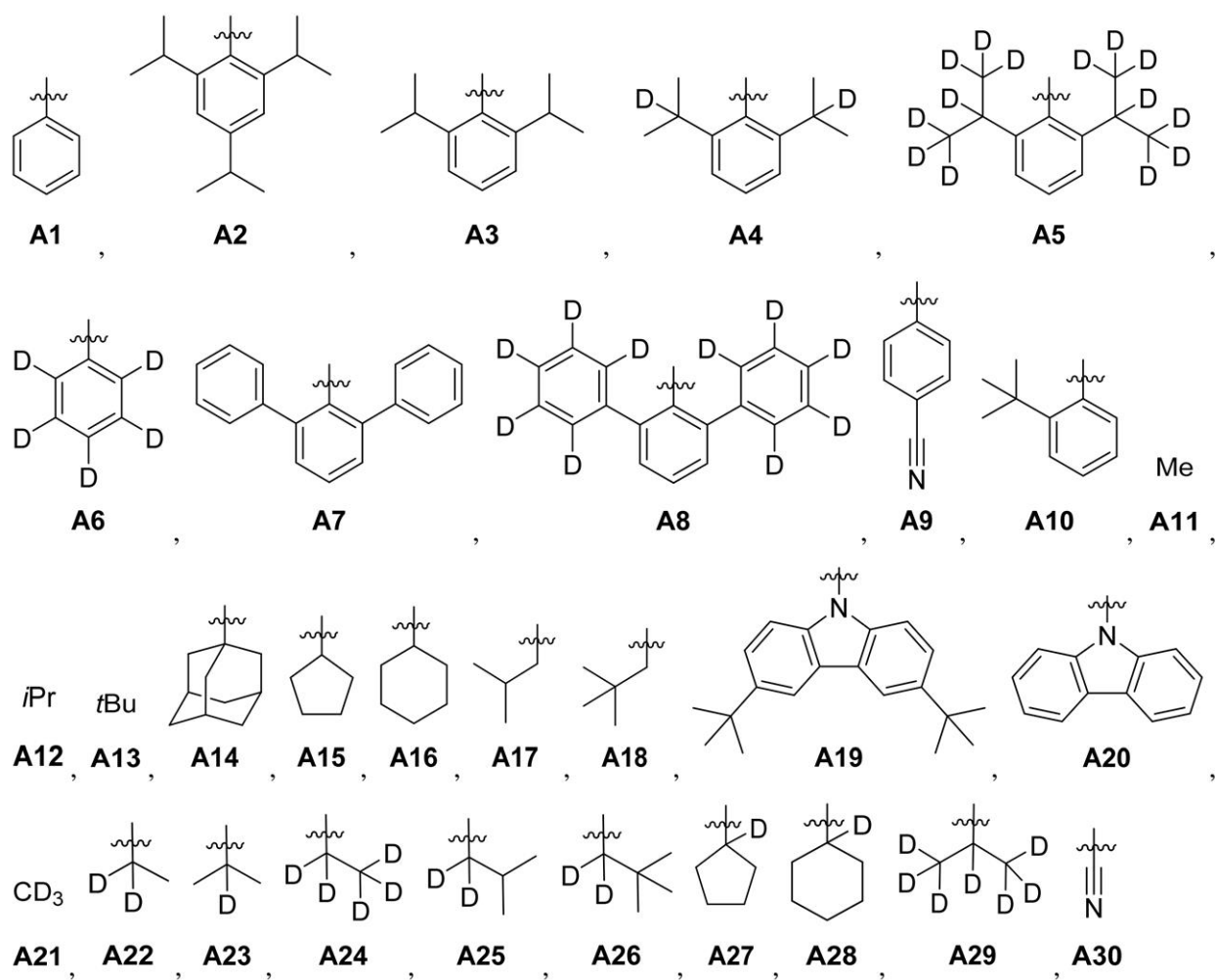
<p>L_{D25479} は、右の構造を有する</p>			<p>$n = 25479$</p>
<p>L_{D25480} は、右の構造を有する</p>			<p>$n = 25480$</p>
<p>L_{D25481} は、右の構造を有する</p>			<p>$n = 25481$</p>
<p>L_{D25482} は、右の構造を有する</p>			<p>$n = 25482$</p>
<p>L_{D25483} は、右の構造を有する</p>			<p>$n = 25483$</p>

【化 8 4】

LD25484~LD25513 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2=A_j$ 、こ こで、 j は、1~30の整 数である	$n=j+25483$
LD25514~LD25543 は、 右の構造を有する		式中、 $Ar^2=A_j$ 、こ こで、 j は、1~30の整 数である	$n=j+25513$

式中、A 1 ~ A 3 0 は、以下の構造を有する。

【化 8 5】



【手続補正 1 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 1 0 5

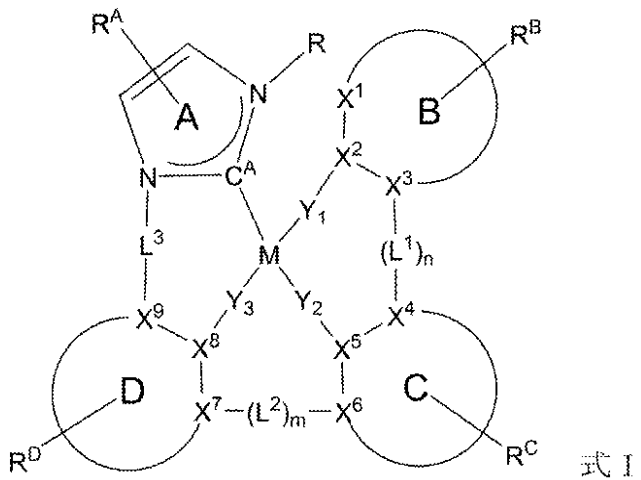
【補正方法】変更

【補正の内容】

【 0 1 0 5 】

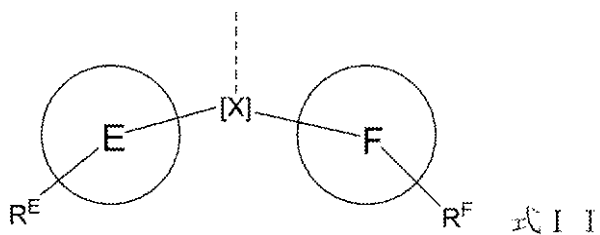
本開示の化合物を含む有機発光デバイス（O L E D）も開示される。前記O L E Dは、アノードと、カソードと、前記アノードと前記カソードとの間に配置された有機層とを含み、前記有機層は、以下の式 I の化合物を含む：

【化 1 0 6】



式中、Mは、P d又はP t；環B、C、及びDは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環であり；X¹～X⁹は、それぞれ独立して、C又はNであり；Y₁～Y₃は、それぞれ独立して、直接結合、O、及びSからなる群から選択され；Y₁～Y₃の少なくとも1つは、直接結合であり；C^Aは、カルベン炭素であり；L¹～L³は、それぞれ独立して、直接結合、O、S、C R' R'', S i R' R'', B R', 及びN R', アルキル、シクロアルキル、ヘテロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、及びヘテロアリールからなる群から選択され；m及びnは、それぞれ独立して、0又は1であり；m及びnの少なくとも1つは、1であり；R、R^A、R^B、R^C、R^D、L¹、L²、及びL³の少なくとも1つは、以下の式 I I：

【化 1 0 7】



の構造を有する基を含み、式中、[X]は、5員ヘテロ環、5員炭素環、6員ヘテロ環、6員炭素環、又は2つ以上の縮合環を含む縮合ヘテロ環又は炭素環系であり；環E及びFは、それぞれ独立して、5員又は6員の炭素環又はヘテロ環であり；R^A、R^B、R^C、R^D、R^E、及びR^Fは、それぞれ独立して、モノから最大の許容される置換を表す、又は無置換を表し；各R、R', R'', R^A、R^B、R^C、R^D、R^E、及びR^Fは、それぞれ独立して、水素である、又は本明細書に定義される一般的な置換基からなる群から選択される置換基であり；任意の隣接する置換基は、結合又は縮合して環を形成することができ；R及びR^B置換基は、結合して環を形成することができ；式 I Iの構造を有する基の分子量は、395グラム/モル以上である。

【手続補正 1 4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 1 1 9

【補正方法】変更

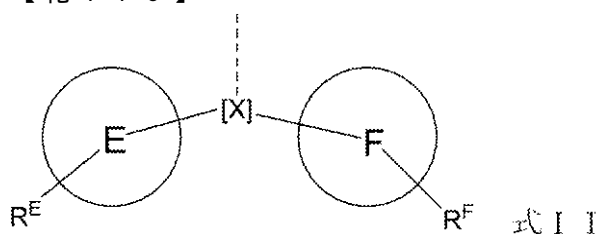
【補正の内容】

【 0 1 1 9 】

O L E D中の発光領域も開示される。前記発光領域は、以下の式 I の化合物を含む：

式 I

【化 1 1 6】



【手續補正 1 5】

【補正の内容】

2, 6 - ジブロモ - N - (2 - ニトロフェニル) アニリンの合成：水素化ナトリウム (23.91 g、598 mmol) と NMP (1 L) を、乾燥丸底フラスコに添加した。混合物を氷浴上にて冷却し、2, 6 - ジブロモアニリン (100 g、399 mmol) を添加した。混合物を、窒素下にて30分間攪拌した。1 - フルオロ - 2 - ニトロベンゼン (84 g、598 mmol) を滴下した。次いで、混合物を、16時間で室温まで加温した。

反応混合物を氷（～500g）上にゆっくりと注ぎ、～1時間攪拌したところ、沈殿物が形成し始めた。懸濁物をろ過し、固体を回収し乾燥した。粗生成物をメタノール中で再結晶化した（84%収率）。

【手続補正16】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0184

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0184】

化合物62201598409の合成：ジオキサン（0.972ml）と水（0.097ml）中の炭酸カリウム（0.092g, 0.668mmol）、白金化3-（3-（（9-（4-（tert-ブチル）ピリジン-2-イル）-9H-カルバゾール-2-イル）オキシ）フェニル）-1-（2,6-ジプロモフェニル）-1-（テトラフルオロ-1,5-ボラニル）-2,3-ジヒドロ-1H-ベンゾ[d]イミダゾール-1-イウム-2-イド（0.05g, 0.053mmol）、SPhos-Pd-G2（4.43mg, 5.34μmol）、及びSPhos（1.755mg, 4.28μmol）を、アルゴンで25分間スパージした。（2,6-ジメチルピリジン-4-イル）ボロン酸（0.040g, 0.267mmol）を添加し、スパージを更に10分間継続した。反応温度を80℃に上昇させて、反応物を16時間攪拌した。反応混合物を、水（10mL）とDCM（15mL）で希釈した。有機層を分離し、無水硫酸ナトリウム（1.5g）上で乾燥させ、濃縮した。残渣を、DCM中40%の酢酸エチルで溶出するシリカ上で精製して、24mgの黄色固体を得た（46%収率）。

【手続補正17】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0197

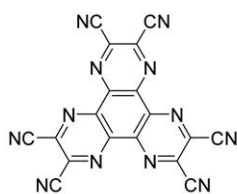
【補正方法】変更

【補正の内容】

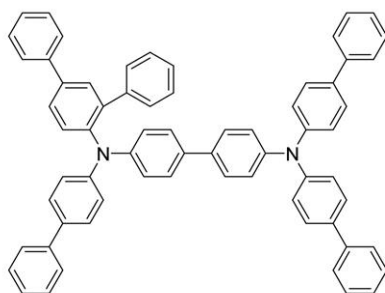
【0197】

OLEDデバイスの作製：OLEDを、シート抵抗15-20Ω/sq.を有する酸化インジウムスズ（ITO）層でプレコートしたガラス基板上に成長させた。任意の有機層の堆積又はコーティングに先立ち、基板を溶媒で脱脂し、次いで、100mTorrで50Wにて酸素プラズマで1.5分間、UVオゾンで5分間、処理した。表2のデバイスを高真空下（<10⁻⁶Torr）にて、熱蒸着で作製した。アノード電極を750Åの酸化インジウムスズ（ITO）とした。デバイス例は、ITO表面から順に、100Å厚の化合物A（HIL）、250Åの化合物B層（HTL）、50Åの化合物C層（EBL）、10%の発光体をドーブした300Åの化合物D（EML）、50Åの化合物E（BL）、35%の化合物Fをドーブした300Åの化合物G（ETL）、10Åの化合物G（EIL）、及び1,000ÅのAl（カソード）からなる有機層を有した。デバイスはいずれも、作製直後に、窒素グローブボックス（H₂O及びO₂は<1ppm）中で、パッケージ内部に入れる水分ゲッターと共に、エポキシ樹脂で封止したガラス製蓋で封入した。ドーピングパーセンテージは、体積パーセントである。

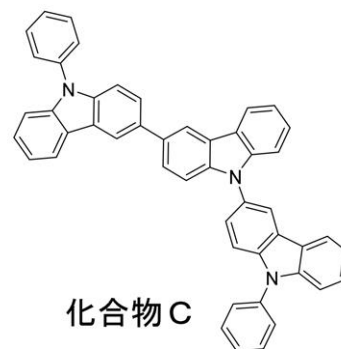
【化 1 5 4】



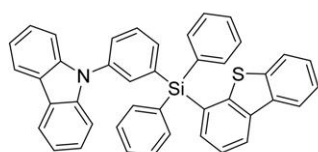
化合物 A



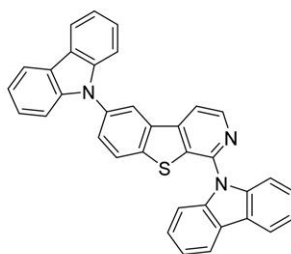
化合物 B



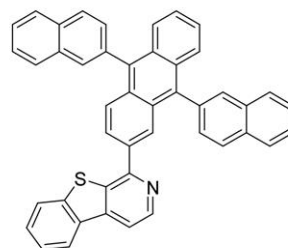
化合物 C



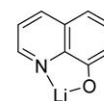
化合物 D



化合物 E



化合物 F



化合物 G

【表 2】

表 2 : デバイスデータ

デバイス	1931 CIE		1,000 ニト					
	x	y	λ_{\max}	FWHM	電圧	LE	EQE	PE
			[nm]	[nm]	[V]	[cd/A]	[%]	[lm/W]
化合物 60253535971	0.147	0.165	459	37	0.91	1.24	1.17	1.38
化合物 59736162506	0.129	0.168	465	24	0.95	2.38	2.33	2.52
化合物 59735728275	0.132	0.148	461	20	0.98	1.89	2.01	1.95
化合物 62201598409	0.130	0.188	466	40	0.82	2.17	1.98	2.68
化合物 59735140786	0.135	0.166	462	41	0.91	1.79	1.74	2.00
化合物 59221752029	0.133	0.154	462	22	0.80	1.95	2.03	2.47
比較例	0.137	0.160	461	40	1.00	1.00	1.00	1.00

フロントページの続き

- (31)優先権主張番号 62/859,919
 (32)優先日 令和1年6月11日(2019.6.11)
 (33)優先権主張国・地域又は機関
 米国(US)
- (31)優先権主張番号 62/897,667
 (32)優先日 令和1年9月9日(2019.9.9)
 (33)優先権主張国・地域又は機関
 米国(US)
- (31)優先権主張番号 62/898,219
 (32)優先日 令和1年9月10日(2019.9.10)
 (33)優先権主張国・地域又は機関
 米国(US)
- (31)優先権主張番号 62/945,273
 (32)優先日 令和1年12月9日(2019.12.9)
 (33)優先権主張国・地域又は機関
 米国(US)
- (31)優先権主張番号 16/718,355
 (32)優先日 令和1年12月18日(2019.12.18)
 (33)優先権主張国・地域又は機関
 米国(US)
- (31)優先権主張番号 16/807,877
 (32)優先日 令和2年3月3日(2020.3.3)
 (33)優先権主張国・地域又は機関
 米国(US)

- (72)発明者 シャオ・ファン・チェン
 アメリカ合衆国 ニュージャージー 0 8 6 1 8 ユーイング フィリップス ブールバード 3
 7 5
- (72)発明者 タイラー・フリータム
 アメリカ合衆国 ニュージャージー 0 8 6 1 8 ユーイング フィリップス ブールバード 3
 7 5
- (72)発明者 ピーター・ウォロハン
 アメリカ合衆国 ニュージャージー 0 8 6 1 8 ユーイング フィリップス ブールバード 3
 7 5
- (72)発明者 ジェイソン・ブルックス
 アメリカ合衆国 ニュージャージー 0 8 6 1 8 ユーイング フィリップス ブールバード 3
 7 5
- (72)発明者 ピエール・ルク・ティー・ブードロー
 アメリカ合衆国 ニュージャージー 0 8 6 1 8 ユーイング フィリップス ブールバード 3
 7 5
- (72)発明者 チャールズ・ジェイ・スタントン・3世
 アメリカ合衆国 1 9 7 2 0 デラウェア州 ニュー キャッスル マックロウ ドライブ 2 7
- (72)発明者 オレクサンドル・トレチャック
 アメリカ合衆国 1 9 7 2 0 デラウェア州 ニュー キャッスル マックロウ ドライブ 2 7
- (72)発明者 ラグパティ・ニーララブ
 アメリカ合衆国 1 9 7 2 0 デラウェア州 ニュー キャッスル マックロウ ドライブ 2 7
- (72)発明者 カタリナ・ロールフィング
 アメリカ合衆国 1 9 7 2 0 デラウェア州 ニュー キャッスル マックロウ ドライブ 2 7

(72)発明者 ダグラス・ウィリアムズ

アメリカ合衆国 1 9 7 2 0 デラウェア州 ニュー キャッスル マックロウ ドライブ 2 7

F ターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 CC04 CC07 CC12 CC22 DD64 DD67 FF18

4H050 AA01 AA03 AB92 WB11 WB14 WB21

【 外国語明細書 】

2020158491000001.pdf

2020158491000002.pdf

2020158491000003.pdf

2020158491000004.pdf