

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6073220号
(P6073220)

(45) 発行日 平成29年2月1日 (2017.2.1)

(24) 登録日 平成29年1月13日 (2017.1.13)

(51) Int.Cl.		F I		
C O 7 F	15/00	(2006.01)	C O 7 F	15/00
C O 9 K	11/06	(2006.01)	C O 9 K	11/06
H O 1 L	51/50	(2006.01)	H O 5 B	33/14
				C S P E
				6 6 O
				B

請求項の数 12 (全 99 頁)

(21) 出願番号	特願2013-518970 (P2013-518970)	(73) 特許権者	597035528
(86) (22) 出願日	平成23年6月28日 (2011.6.28)		メルク パテント ゲーエムペーハー
(65) 公表番号	特表2013-537519 (P2013-537519A)		ドイツ国, D-64293 ダルムスタット
(43) 公表日	平成25年10月3日 (2013.10.3)		ド フランクフルター ストラッセ 25
(86) 国際出願番号	PCT/EP2011/003168		O
(87) 国際公開番号	W02012/007103	(74) 代理人	100108855
(87) 国際公開日	平成24年1月19日 (2012.1.19)		弁理士 蔵田 昌俊
審査請求日	平成26年6月27日 (2014.6.27)	(74) 代理人	100103034
(31) 優先権主張番号	102010027218.3		弁理士 野河 信久
(32) 優先日	平成22年7月15日 (2010.7.15)	(74) 代理人	100153051
(33) 優先権主張国	ドイツ (DE)		弁理士 河野 直樹
前置審査		(74) 代理人	100179062
			弁理士 井上 正
		(74) 代理人	100189913
			弁理士 鵜飼 健

最終頁に続く

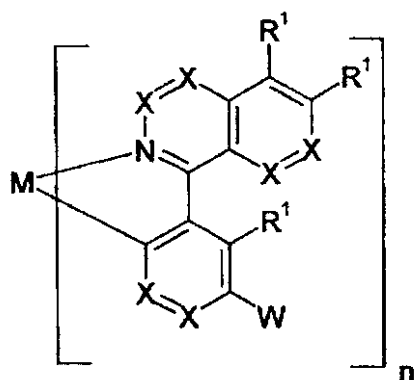
(54) 【発明の名称】 有機配位子を有する金属錯体およびO L E Dにおけるそれらの使用

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

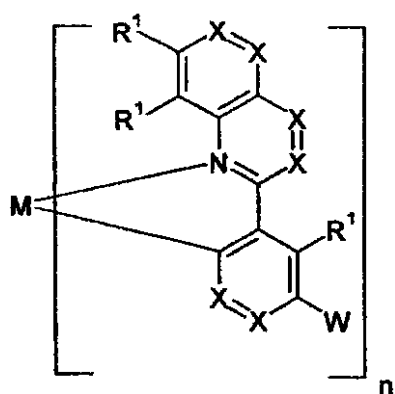
式M (L)_n の化合物であって、以下の式 (29) および (31)

【化 1】



10

式(29)



20

式(31)

から選択される化合物

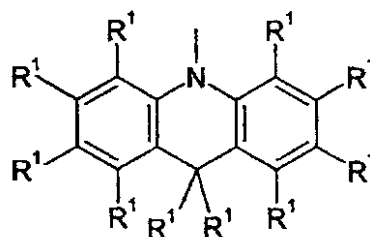
(ここで、式中、使用された記号および添え字には以下が適用される：

30

Mは、イリジウム、ロジウム、白金およびパラジウムからなる群から選択される金属であり；

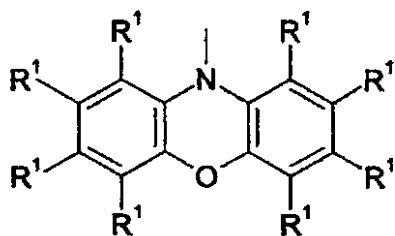
Wは、以下の式(48)～(50)のいずれかに等しく、

【化 2】

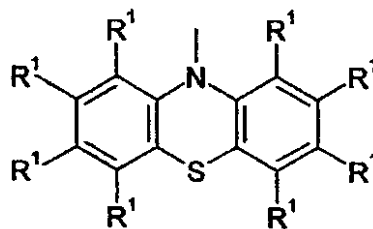


式(48)

10



式(49)



式(50)

ここで、

20

Xは、 CR^1 であり；

R^1 は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、N(R^2)₂、CN、NO₂、Si(R^2)₃、B(OR²)₂、C(=O)R²、P(=O)(R^2)₂、S(=O)R²、S(=O)₂R²、OSO₂R²、1～40個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシまたはチオアルコキシ基または2～40個のC原子を有する直鎖アルケニルまたはアルキニル基または3～40個のC原子を有する分枝または環状アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシまたはチオアルコキシ基（これらのそれぞれは、1個以上のラジカルR²で置換されていてもよく、ここで、1個以上の隣接しないCH₂基は、R²C=CR²、C≡C、Si(R^2)₂、Ge(R^2)₂、Sn(R^2)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR²、P(=O)(R^2)、SO、SO₂、NR²、O、SまたはCONR²によって置きかえられていてもよく、1個以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNまたはNO₂によって置きかえられていてもよい）、または5～60個の芳香族環原子を有する芳香族またはヘテロ芳香族環系（これは、それぞれの場合において、1個以上のラジカルR²で置換されていてもよい）、または5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシまたはヘテロアリールオキシ基（これは、1個以上のラジカルR²で置換されていてもよい）、または10～40個の芳香族環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基またはアリールヘテロアリールアミノ基（これは、1個以上のラジカルR²で置換されていてもよい）であり；2個以上のラジカルR¹は、互いに単環式または多環式、脂肪族、芳香族および／または、ベンゾ縮合環系を形成してもよく；

30

40

R²は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、N(R^3)₂、CN、NO₂、Si(R^3)₃、B(OR³)₂、C(=O)R³、P(=O)(R^3)₂、S(=O)R³、S(=O)₂R³、OSO₂R³、1～40個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシまたはチオアルコキシ基または2～40個のC原子を有する直鎖アルケニルまたはアルキニル基または3～40個のC原子を有する分枝または環状アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシまたはチオアルコキシ基（これらのそれぞれは、1個以上のラジカルR³で置換されていてもよく、ここで、1個以上の隣接しないCH₂基は、R³C=CR³、C≡C、Si(R^3)₂、Ge(R^3)₂、Sn(R^3)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR³、P(=O)(R^3)、SO、SO₂、NR³、O、SまたはCONR³によって置きかえられていてもよく、1個以上のH原

50

子は、D、F、Cl、Br、I、CNまたはNO₂によって置きかえられていてもよい）、または5～60個の芳香族環原子を有する芳香族またはヘテロ芳香族環系（これは、それぞれの場合において、1個以上のラジカルR³で置換されていてもよい）、または5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシまたはヘテロアリールオキシ基（これは、1個以上のラジカルR³で置換されていてもよい）、または10～40個の芳香族環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基またはアリールヘテロアリールアミノ基（これは、1個以上のラジカルR³で置換されていてもよい）であり；2個以上の隣接したラジカルR²は、互いに単環式または多環式、脂肪族または芳香族環系を形成してもよく；

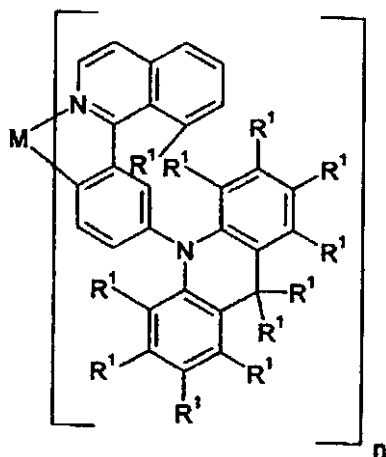
R³は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、H、D、Fまたは1～20個のC原子を有する脂肪族、芳香族および／またはヘテロ芳香族環炭化水素ラジカル（ここで、さらに、1個以上のH原子は、Fで置きかえられていてもよい）であり；2個以上の置換基R³は、互いに、単環式または多環式、脂肪族または芳香族環系を形成してもよく；

添え字nは、金属の配位数が、イリジウムまたはロジウムに等しいMについては3に一致し、白金またはパラジウムに等しいMについては2に一致するように選択され；

複数個の配位子Lは、互いに結合し、三座、四座、五座または六座配位子系を形成してもよい）。

【請求項2】

M(L)_nが、式(74)、(76)、(77)、(79)、(80)および(82)
【化3】



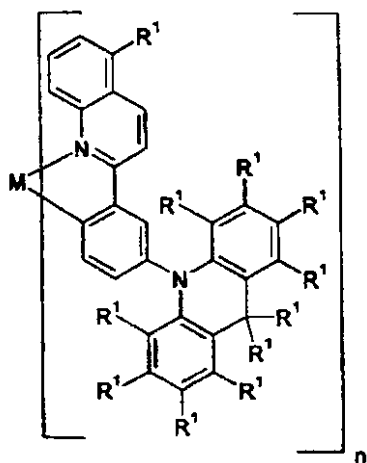
式(74)

10

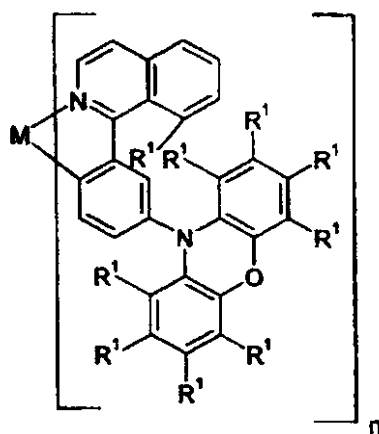
20

30

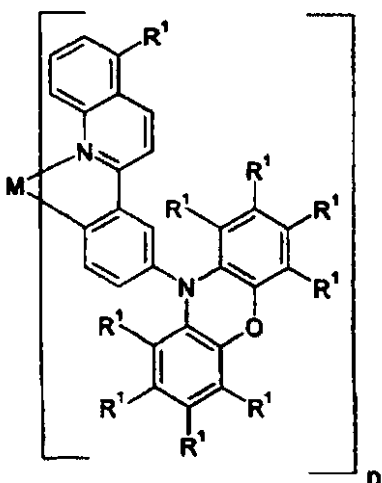
【化 4】



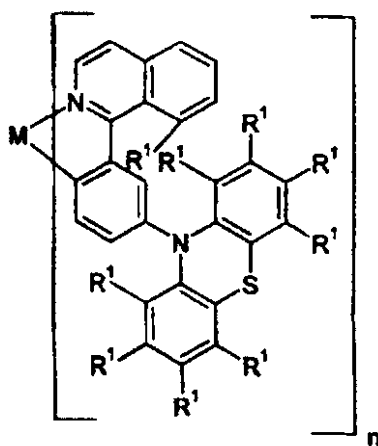
式(76)



式(77)

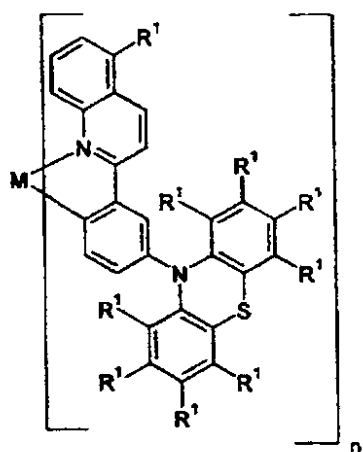


式(79)



式(80)

【化 5】



式(82)

から選択されることを特徴とする、請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

10

20

30

40

50

R¹ が、出現する毎に同一であるかまたは異なり、-H、-NH₂ または式(86)～(224)

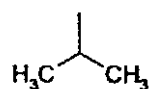
【化6】



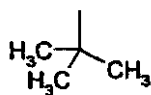
式(86)



式(87)



式(88)



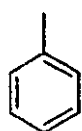
式(89)



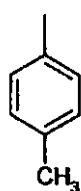
式(90)



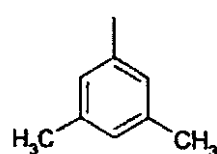
式(91)



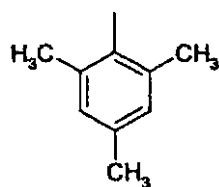
式(92)



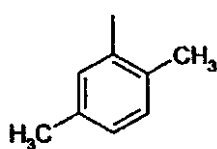
式(93)



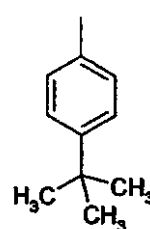
式(94)



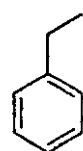
式(95)



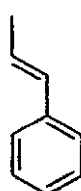
式(96)



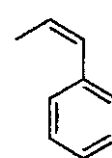
式(97)



式(98)



式(99)



式(100)

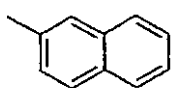
10

20

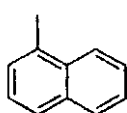
30

40

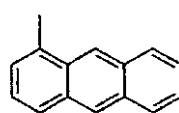
【化 7】



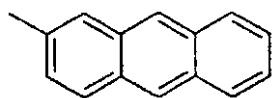
式(101)



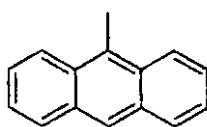
式(102)



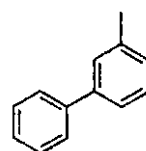
式(103)



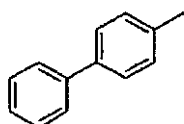
式(104)



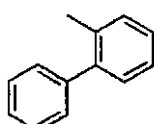
式(105)



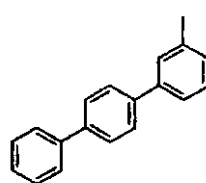
式(106)



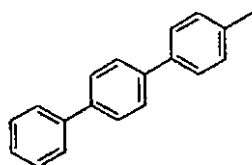
式(107)



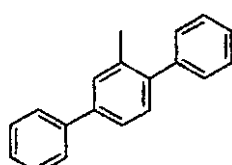
式(108)



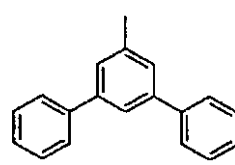
式(109)



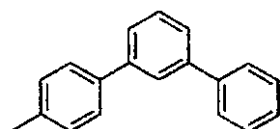
式(110)



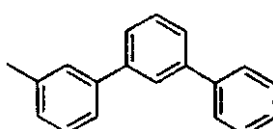
式(111)



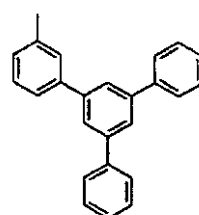
式(112)



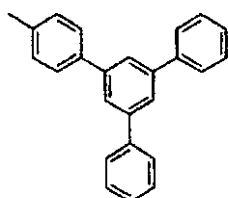
式(113)



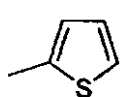
式(114)



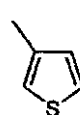
式(115)



式(116)



式(117)



式(118)

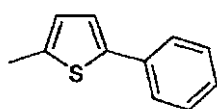
10

20

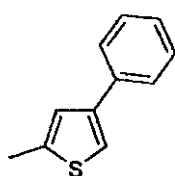
30

40

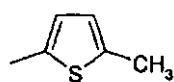
【化 8】



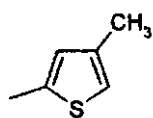
式(119)



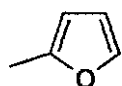
式(120)



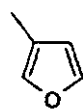
式(121)



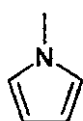
式(122)



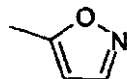
式(123)



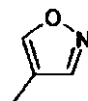
式(124)



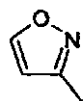
式(125)



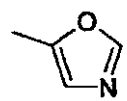
式(126)



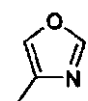
式(127)



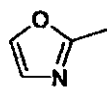
式(128)



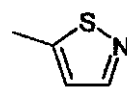
式(129)



式(130)



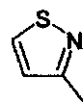
式(131)



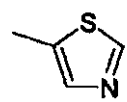
式(132)



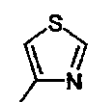
式(133)



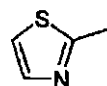
式(134)



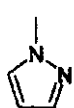
式(135)



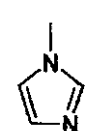
式(136)



式(137)



式(138)



式(139)

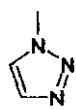
10

20

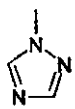
30

40

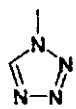
【化 9】



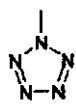
式(140)



式(141)



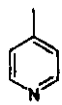
式(142)



式(143)



式(144)



式(145)



式(146)



式(147)



式(148)



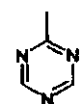
式(149)



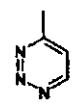
式(150)



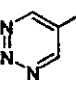
式(151)



式(152)



式(153)



式(154)



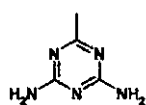
式(155)



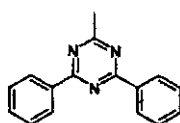
式(156)



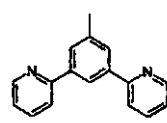
式(157)



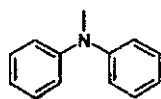
式(158)



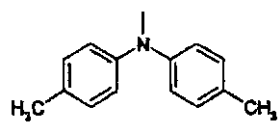
式(159)



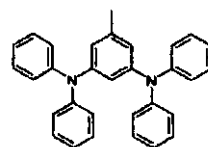
式(160)



式(161)



式(162)



式(163)

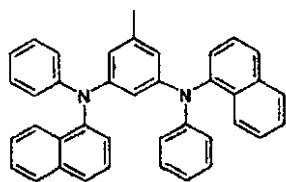
10

20

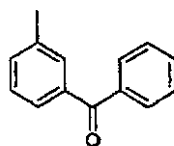
30

40

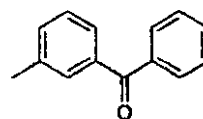
【化 10】



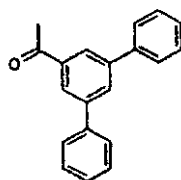
式(164)



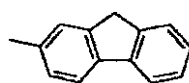
式(165)



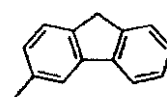
式(166)



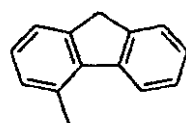
式(167)



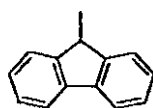
式(168)



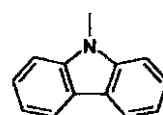
式(169)



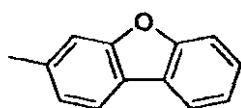
式(170)



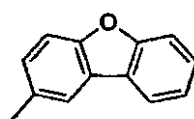
式(171)



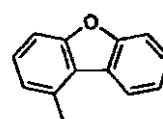
式(172)



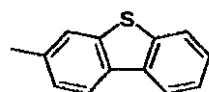
式(173)



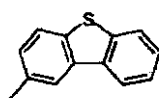
式(174)



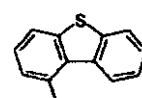
式(175)



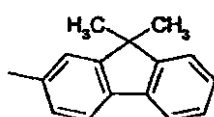
式(176)



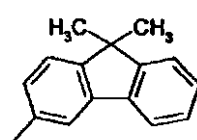
式(177)



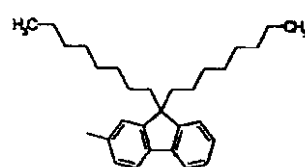
式(178)



式(179)



式(180)



式(181)

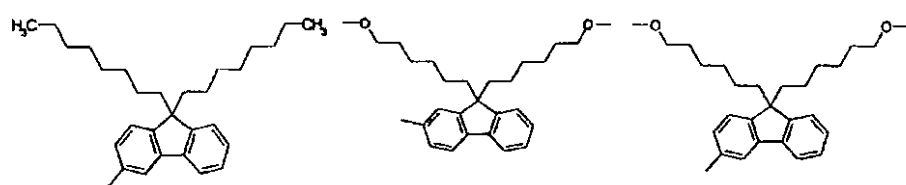
10

20

30

40

【化 1 1】

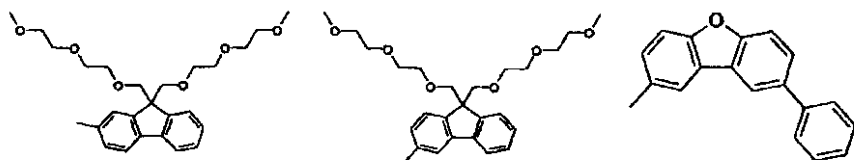


式(182)

式(183)

式(184)

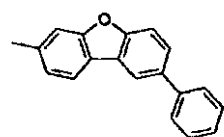
10



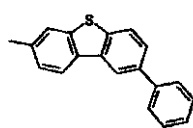
式(185)

式(186)

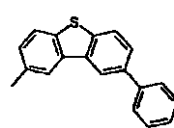
式(187)



式(188)

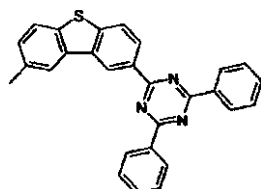


式(189)

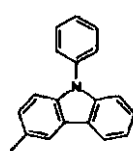


式(190)

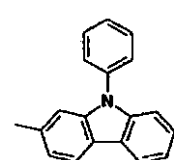
20



式(191)

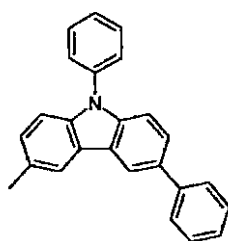


式(192)

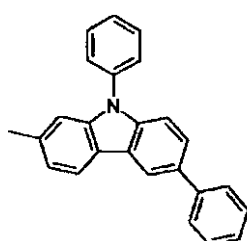


式(193)

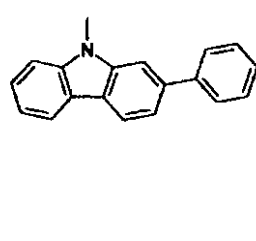
30



式(194)



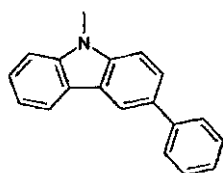
式(195)



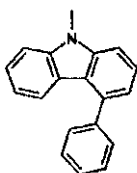
式(196)

40

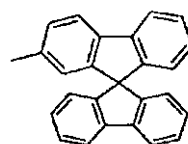
【化 1 2】



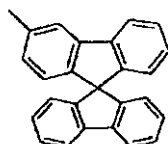
式(197)



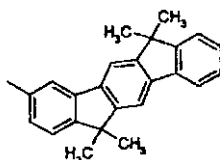
式(198)



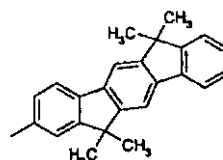
式(199)



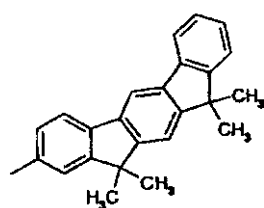
式(200)



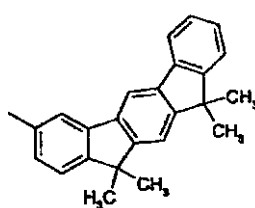
式(201)



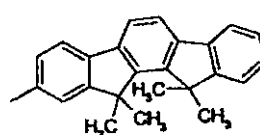
式(202)



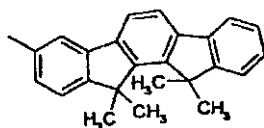
式(203)



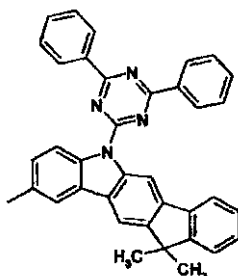
式(204)



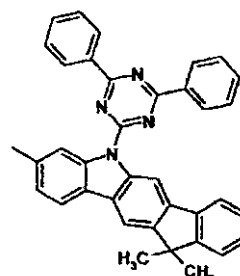
式(205)



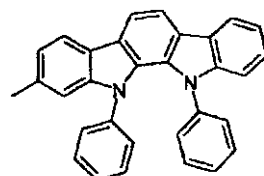
式(206)



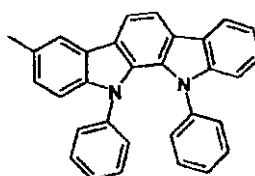
式(207)



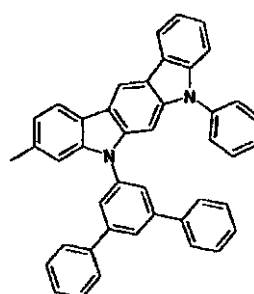
式(208)



式(209)



式(210)



式(211)

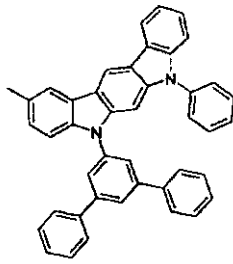
10

20

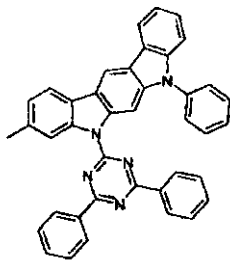
30

40

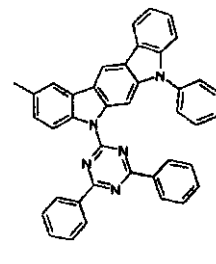
【化 1 3】



式(212)

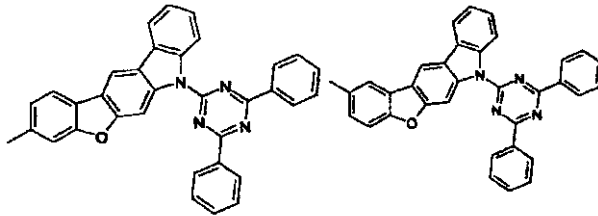


式(213)

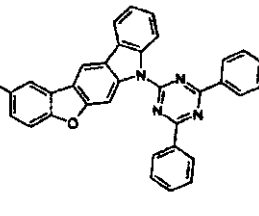


式(214)

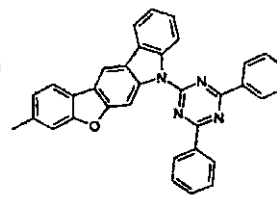
10



式(215)

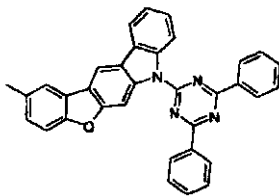


式(216)

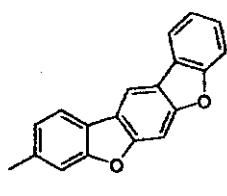


式(217)

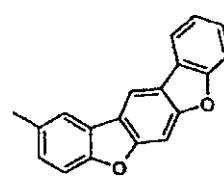
20



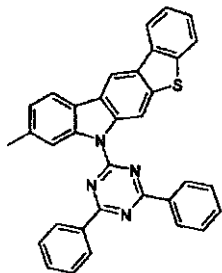
式(218)



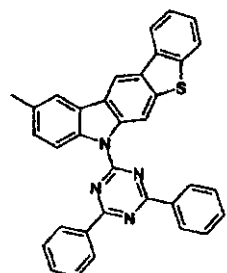
式(219)



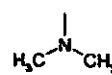
式(220)



式(221)



式(222)



式(223)

30



式(224)

40

のラジカル（ここで前記ラジカルは、さらに、ラジカル R^3 （これは、それらが2回以上出現する場合、同一であるかまたは互いに独立であってもよい）で一置換または多置換されていてもよい）であることを特徴とする、請求項1または2に記載の化合物。

【請求項4】

Mが、イリジウムに等しいことを特徴とする、請求項1～3の何れか一項に記載の化合物。

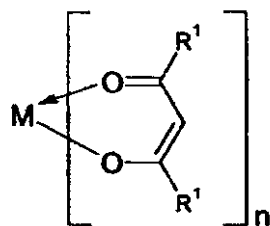
【請求項5】

対応する遊離配位子と、式(282)の金属アルコキシド、式(283)の金属ケトケ

50

トナートまたは式(284)の金属ハロゲン化物

【化14】



式(282)

式(283)

式(284)

10

(ここで、記号M、nおよびR¹は、上に示された意味を有し、Hal = F、Cl、BrまたはIである)との反応による、請求項1～4の何れか一項に記載の化合物の調製方法。

【請求項6】

請求項1～4の何れか一項に記載の少なくとも1種の化合物と少なくとも1種の溶媒とを含む配合物。

【請求項7】

電子デバイス、好ましくは有機エレクトロルミネッセンスデバイス(OLED、PLED)、有機集積回路(O-IC)、有機電界効果トランジスタ(O-FET)、有機薄膜トランジスタ(O-TFT)、有機発光トランジスタ(O-LET)、有機太陽電池(O-SC)、有機光学検出器、有機感光体、有機電場消光デバイス(O-FQD)、発光電気化学セル(LEC)または有機レーザーダイオード(O-レーザー)からなる群から選択される電子デバイスにおける請求項1～4の何れか一項に記載の化合物の使用。

【請求項8】

請求項1～4の何れか一項に記載の少なくとも1種の化合物を含む電子デバイス、好ましくは有機エレクトロルミネッセンスデバイス(OLED、PLED)、有機集積回路(O-IC)、有機電界効果トランジスタ(O-FET)、有機薄膜トランジスタ(O-TFT)、有機発光トランジスタ(O-LET)、有機太陽電池(O-SC)、有機光学検出器、有機感光体、有機電場消光デバイス(O-FQD)、発光電気化学セル(LEC)または有機レーザーダイオード(O-レーザー)からなる群から選択される電子デバイス。

【請求項9】

請求項1～4の何れか一項に記載の化合物が一つ以上の発光層において発光化合物として使用されることを特徴とする、請求項8に記載の有機エレクトロルミネッセンスデバイス。

【請求項10】

前記化合物が、マトリックス材料との組み合わせで使用される請求項9に記載の有機エレクトロルミネッセンスデバイス。

【請求項11】

前記マトリックス材料は、ケトン、ホスフィンオキシド、スルホキシド、スルホン、トリアリールアミン、カルバゾール誘導体、インドロカルバゾール誘導体、インデノカルバゾール誘導体、アザカルバゾール誘導体、双極性マトリックス材料、シラン、アザボロール、ボロン酸エステル、トリアジン誘導体、亜鉛錯体、ジアザーもしくはテトラアザシロール誘導体またはジアザホスホール誘導体あるいはこれらのマトリックス材料の混合物からなる群から選択される請求項10に記載の有機エレクトロルミネッセンスデバイス。

【請求項12】

疾患および／または美容上の状態の治療、予防および／または診断のための請求項1～

20

30

40

50

4の何れか一項に記載の化合物または請求項8～11の何れか1項に記載のデバイス。

【発明の詳細な説明】

【発明の概要】

【0001】

有機半導体が機能性材料として使用されている有機エレクトロルミネッセンスデバイス（OLED）の構造は、例えば、US 4539507、US 5151629、EP 0676461およびWO 98/27136に記載されている。本明細書で使用される発光材料は、だんだんと蛍光の代わりにリン光を示す有機金属錯体になってきている（M. A. Baldoら、Appl. Phys. Lett. 1999、75、4～6）。量子力学的理由で、リン光発光体として有機金属化合物を使用して、最大4倍のエネルギーおよび電力効率が可能である。しかし、一般に、特に効率、動作電圧および寿命に関して三重項発光を示すOLEDの改良のニーズが依然として存在する。このことは、特に、比較的短波長領域、即ち、緑色および青色において発光するOLEDに当てはまる。さらに、多くのリン光発光体は、溶液からの処理のために十分な溶解性を有さず、ここにもさらなる改良のニーズが存在することを意味する。

10

【0002】

従来技術によれば、リン光OLEDに使用される三重項発光体は、特に、イリジウムおよび白金錯体であり、これらは、通常、シクロメタル化錯体として使用される。本明細書で配位子は、しばしば、フェニルピリジンの誘導体である。しかし、このような錯体の溶解性は、しばしば、低く、このことは、溶液からの処理をより困難にし、または完全に阻

20

【0003】

従来技術は、金属への配位に対してパラ位において、フェニルピリジン配位子のフェニル環上で、置換されていてもよいアリールまたはヘテロアリール基によって置換されているイリジウム錯体を開示している（WO 2004/026886 A2）。それによって、錯体の改善された溶解性が達成された。しかし、錯体の溶解性および効率および寿命に関しての改善のさらなるニーズも依然として存在する。

【0004】

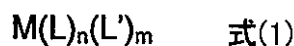
驚くべきことに、以下にさらに詳細に記載された特定の金属キレート錯体は、改善された溶解性を有し、さらに、特に効率および寿命に関して有機エレクトロルミネッセンスデバイスの改善をもたらすことが見出された。従って、本発明は、これらの金属錯体およびこれらの錯体を含む有機エレクトロルミネッセンスデバイスに関する。

30

【0005】

本発明は、式（1）の化合物に関する。

【化1】

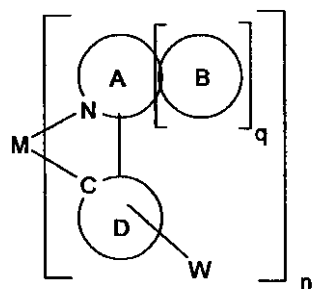


40

【0006】

（ここで、一般式（1）の化合物は、式（2）の部分 $M(L)_n$ を含み、

【化 2】



式(2)

10

【0007】

ここで、Mは、窒素原子Nおよび炭素原子Cを介して任意の所望の二座配位子Lに結合しており、

ここで、A、BおよびDは、任意の所望の芳香族またはヘテロ芳香族環を表し、第1のB環 ($q = 1$) は、任意の所望の可能な様式でA環と縮合しており、複数のB環が出現する場合 ($q > 1$)、後続のB環は、任意の所望の可能な様式で直接A環にまたはそれぞれの先行のB環に縮合しており、B環は、それらがq回出現する場合、互いに独立に、同一であるかまたは異なってもよく、

20

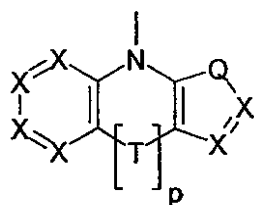
式中、使用された記号および添え字には以下が適用される：

Mは、イリジウム、ロジウム、白金およびパラジウムからなる群から選択される金属であり；

L' は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、任意の所望の共配位子であり；

Wは、式(3)に等しく、

【化 3】



式(3)

30

【0008】

ここで、Tは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 $-C(R^1)_2$ 、 $-Si(R^1)_2$ 、 N 、 $-NR^1$ 、 $-O$ 、 $-S$ 、 $-C(=O)$ 、 $-S(=O)$ 、 $-SO_2$ 、 $-CF_2$ 、 $-SF_4$ 、 $-P$ 、 $-P(=O)R^1$ 、 $-PF_2$ 、 $-P(=S)R^1$ 、 $-As$ 、 $-As(=O)$ 、 $-As(=S)$ 、 $-Sb$ 、 $-Ge$ 、 $-Si$ 、 $-Sb(=O)$ 、 $-C(R^1)_2-C(R^1)_2-$ 、および $-Sb(=S)$ からなる群から選択され；

40

Xは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 CR^1 またはNであり；

qは、1以上の整数であり、

pは、0または1であり、ここで、 $p = 0$ については、式(3)における中央の環は5員環を形成し；

nは、イリジウムまたはロジウムに等しいMについては1、2または3であり、白金またはパラジウムに等しいMについては1または2であり；

mは、0、1、2、3または4であり；

Qは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 $R^1C=CR^1$ 、 $R^1C=N$ 、 O 、 S 、 S

50

e または NR^1 であり；

R^1 は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、N (R^2)₂、CN、NO₂、Si (R^2)₃、B (OR²)₂、C (=O) R^2 、P (=O) (R^2)₂、S (=O) R^2 、S (=O)₂ R^2 、OSO₂ R^2 、1～40個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシまたはチオアルコキシ基または2～40個のC原子を有する直鎖アルケニルまたはアルキニル基または3～40個のC原子を有する分枝または環状アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシまたはチオアルコキシ基（これらのそれぞれは、1個以上のラジカル R^2 で置換されていてもよく、ここで、1個以上の隣接しないCH₂基は、 $\text{R}^2\text{C}=\text{CR}^2$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、Si (R^2)₂、Ge (R^2)₂、Sn (R^2)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR²、P (=O) (R^2)、SO、SO₂、NR²、O、S または CONR² によって置きかえられていてもよく、1個以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CN または NO₂ によって置きかえられていてもよい）、または5～60個の芳香族環原子を有する芳香族またはヘテロ芳香族環系（これは、それぞれの場合において、1個以上のラジカル R^2 で置換されていてもよい）、または5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシまたはヘテロアリールオキシ基（これは、1個以上のラジカル R^2 で置換されていてもよい）、または10～40個の芳香族環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基またはアリールヘテロアリールアミノ基（これは、1個以上のラジカル R^2 で置換されていてもよい）、またはこれらの基の2種以上の組合せであり；2個以上のラジカル R^1 は、互いに単環式または多環式、脂肪族、芳香族および／または、ベンゾ縮合環系を形成してもよく；

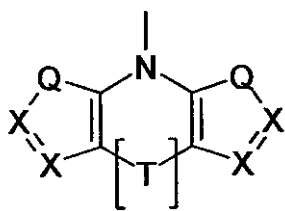
R^2 は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、H、D、F、Cl、Br、I、N (R^3)₂、CN、NO₂、Si (R^3)₃、B (OR³)₂、C (=O) R^3 、P (=O) (R^3)₂、S (=O) R^3 、S (=O)₂ R^3 、OSO₂ R^3 、1～40個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシまたはチオアルコキシ基または2～40個のC原子を有する直鎖アルケニルまたはアルキニル基または3～40個のC原子を有する分枝または環状アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシまたはチオアルコキシ基（これらのそれぞれは、1個以上のラジカル R^3 で置換されていてもよく、ここで、1個以上の隣接しないCH₂基は、 $\text{R}^3\text{C}=\text{CR}^3$ 、 $\text{C}\equiv\text{C}$ 、Si (R^3)₂、Ge (R^3)₂、Sn (R^3)₂、C=O、C=S、C=Se、C=NR³、P (=O) (R^3)、SO、SO₂、NR³、O、S または CONR³ によって置きかえられていてもよく、1個以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CN または NO₂ によって置きかえられていてもよい）、または5～60個の芳香族環原子を有する芳香族またはヘテロ芳香族環系（これは、それぞれの場合において、1個以上のラジカル R^3 で置換されていてもよい）、または5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシまたはヘテロアリールオキシ基（これは、1個以上のラジカル R^3 で置換されていてもよい）、または10～40個の芳香族環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基またはアリールヘテロアリールアミノ基（これは、1個以上のラジカル R^3 で置換されていてもよい）、またはこれらの基の2種以上の組合せであり；2個以上の隣接したラジカル R^2 は、互いに単環式または多環式、脂肪族または芳香族環系を形成してもよく；

R^3 は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、H、D、F または1～20個のC原子を有する脂肪族、芳香族および／またはヘテロ芳香族炭化水素ラジカル（ここで、さらに、1個以上のH原子は、Fで置きかえられていてもよい）であり；2個以上の置換基 R^3 は、互いに、単環式または多環式、脂肪族または芳香族環系を形成してもよく；添え字 n および m は、金属の配位数が、イリジウムまたはロジウムに等しいMについては6に一致し、白金またはパラジウムに等しいMについては4に一致するように選択され；複数個の配位子 L は、互いに結合し、または L は、任意の所望の架橋 Z を介して L' に結合し、三座、四座、五座または六座配位子系を形成してもよい）。

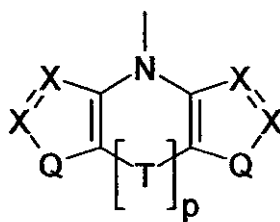
【0009】

本発明のさらなる一態様において、ラジカル W は、式 (3a) から (3d) までの次のラジカルから選択される

【化 4】

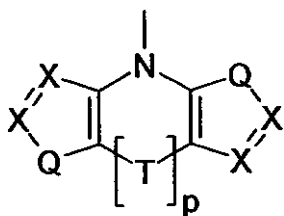


式(3a)

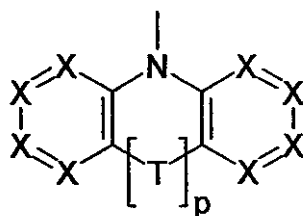


式(3b)

10



式(3c)



式(3d)

20

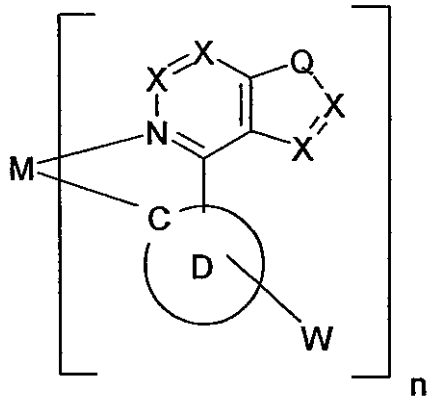
【 0 0 1 0 】

(ここで、式 (3 d) の化合物は、ラジカルWの特に好ましい態様を表す)。

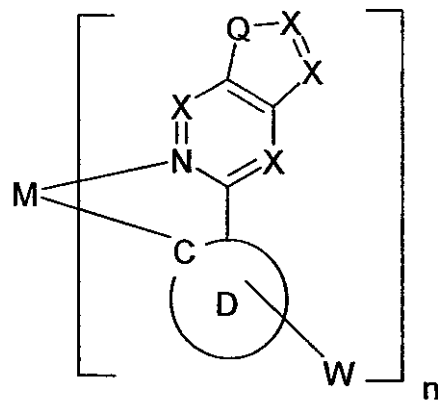
【 0 0 1 1 】

本発明の好ましい一態様において、 $M(L)_n$ は、式 (4) ~ (9) を有するラジカル
の群から選択される

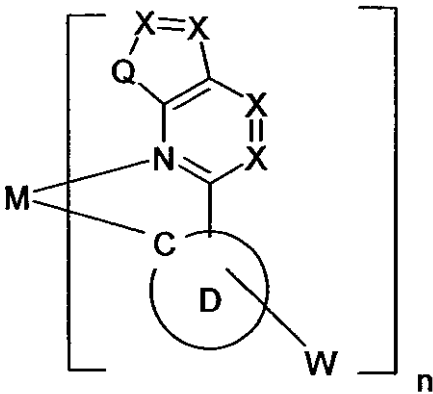
【化 5】



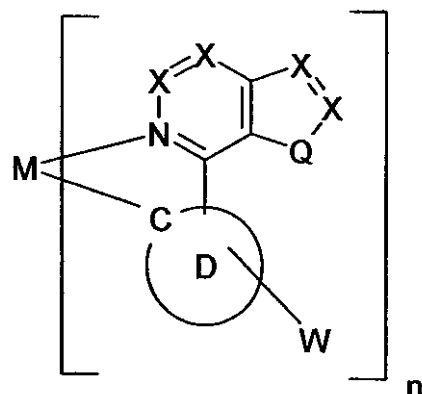
式(4)



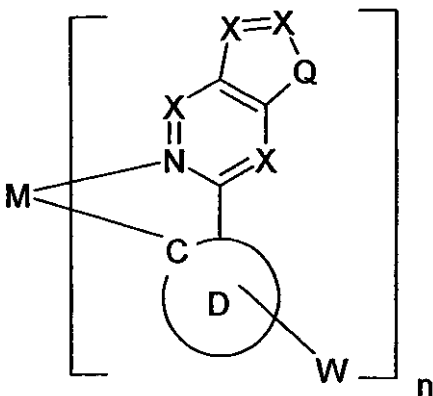
式(5)



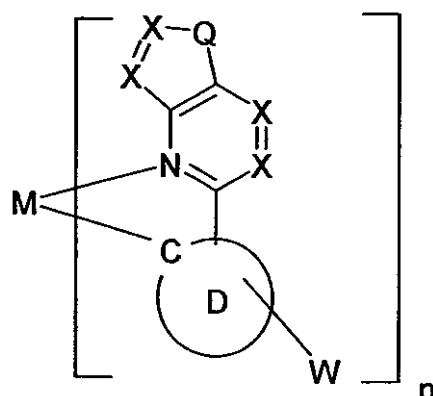
式(6)



式(7)



式(8)



式(9)

【0012】

(式中、使用された記号および添え字には以下が適用される：

Qは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 $R^1C=CR^1$ 、 $R^1C=N$ 、O、S、Seまたは NR^1 である)。

【0013】

本発明の一つのさらに好ましい態様において、一般式1の化合物は、式(10)の部分 $M(L)_n$ を含む。

10

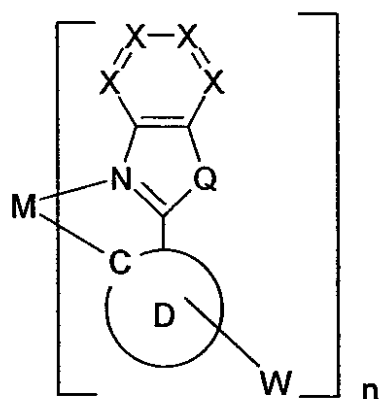
20

30

40

50

【化 6】

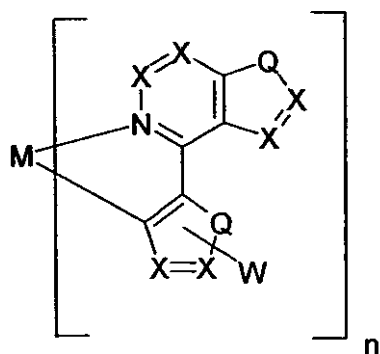


式(10)

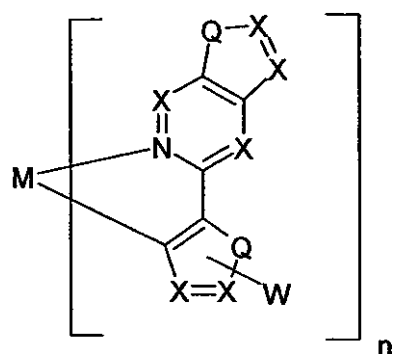
【0014】

本発明の一つの特に好ましい態様において、一般式（1）の化合物は、式（11）～（16）の部分M（L）_nを含む。

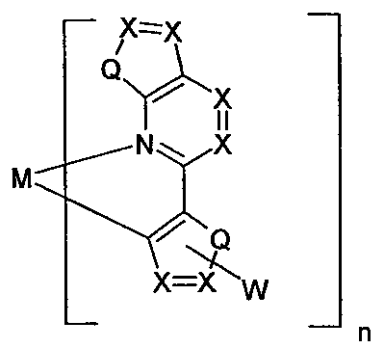
【化 7】



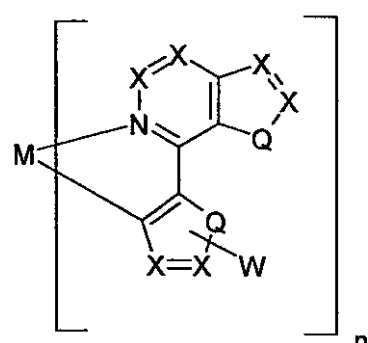
式(11)



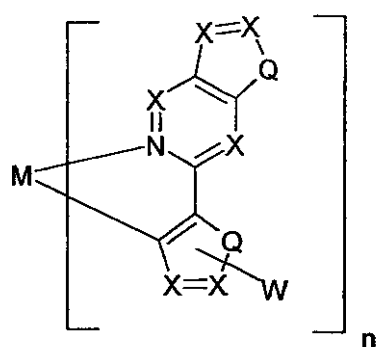
式(12)



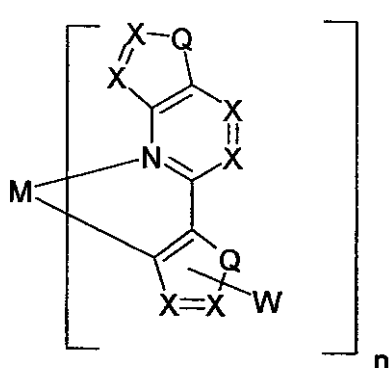
式(13)



式(14)



式(15)



式(16)

【 0 0 1 5】

本発明の一つのさらに特に好ましい態様において、一般式（１）の化合物は、式（１７）～（２２）の部分 $M(L)_n$ を含む。

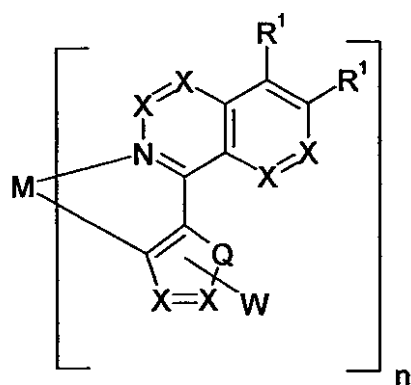
10

20

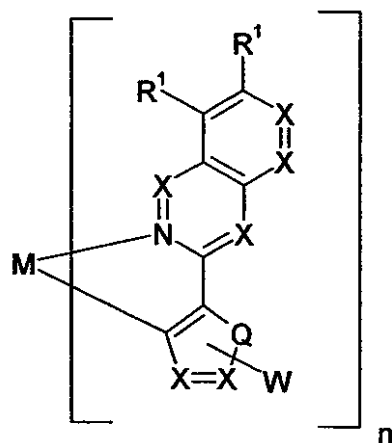
30

40

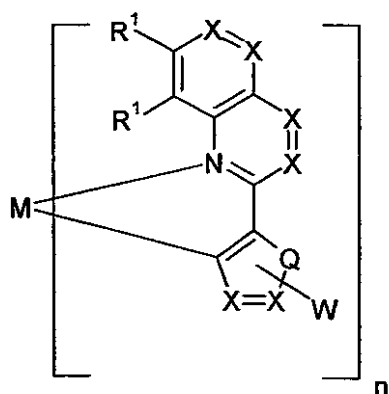
【化 8】



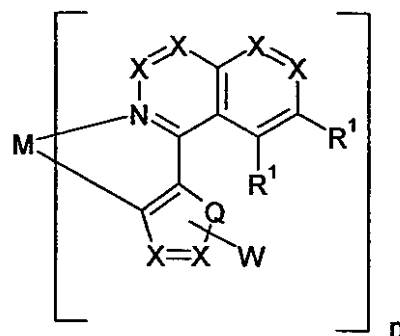
式(17)



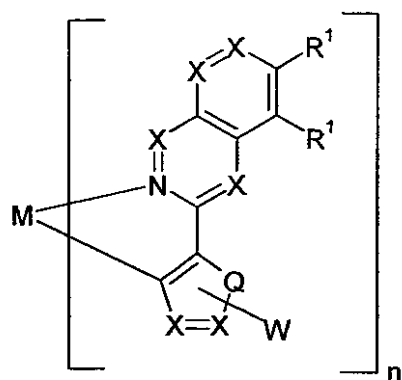
式(18)



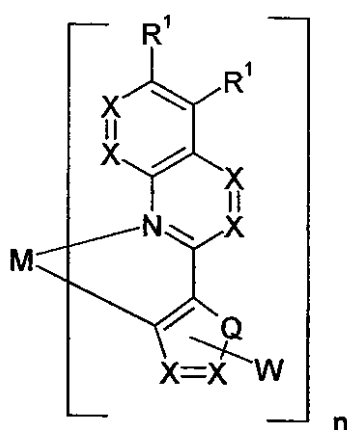
式(19)



式(20)



式(21)

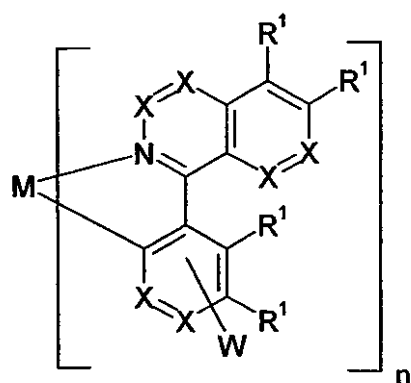


式(22)

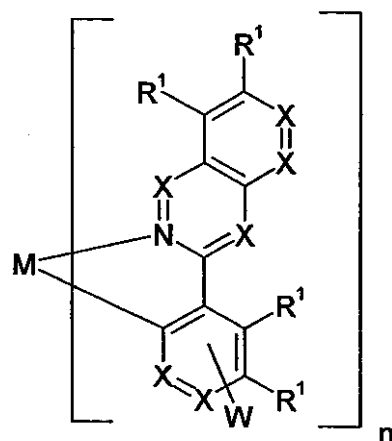
【0016】

本発明の一つの一層さらに特に好ましい態様において、一般式(1)の化合物は、式(23)～(28)の部分M(L)_nを含む

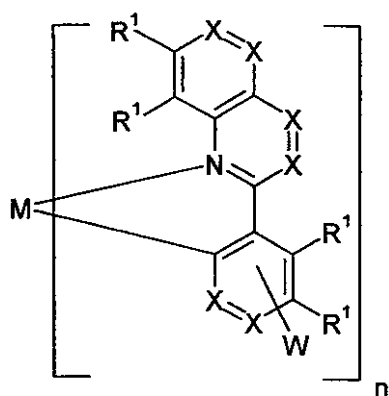
【化 9】



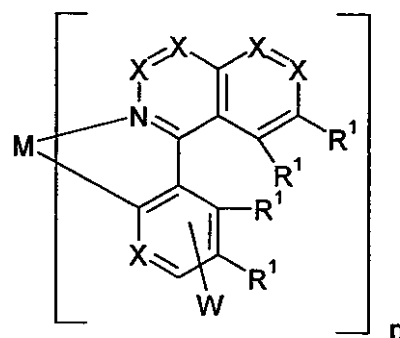
式(23)



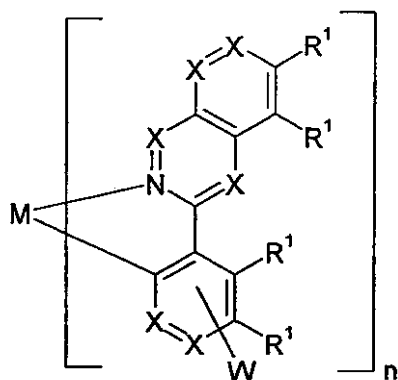
式(24)



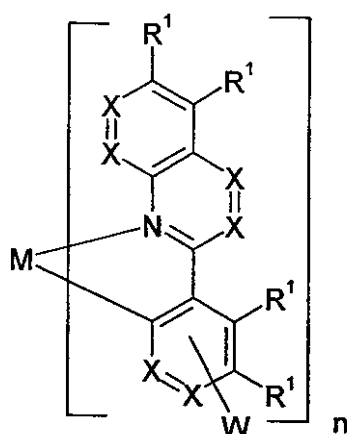
式(25)



式(26)



式(27)



式(28)

【0017】

(ここで、ラジカルWは、Xを介して環に結合してもよく、ラジカルR¹を置換してもよい)。特に、式(1)、M(L)_n(L')_mのヘテロレプティック(heteroleptic)錯体の場合、ラジカルWは、環の任意の可能な位置に出現してもよい。

【0018】

10

20

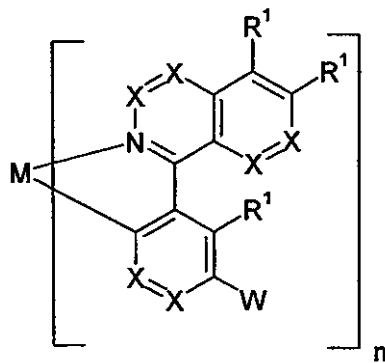
30

40

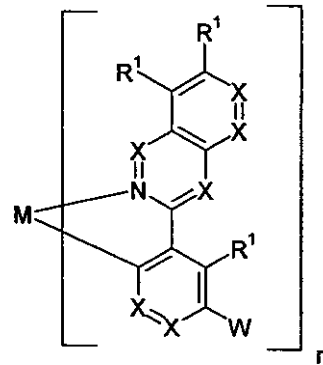
50

本発明の非常に特に好ましい態様は、式(29)～(24)を有する、 $m=0$ である一般式(1)のホモレプティック化合物である。

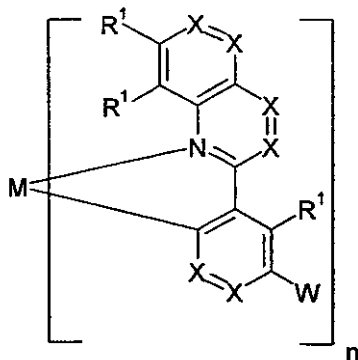
【化10】



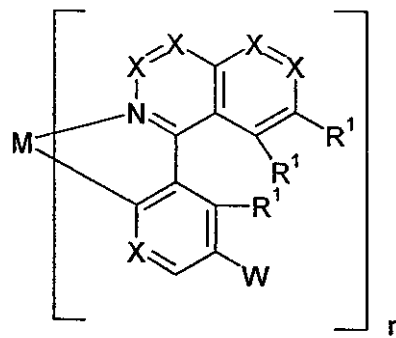
式(29)



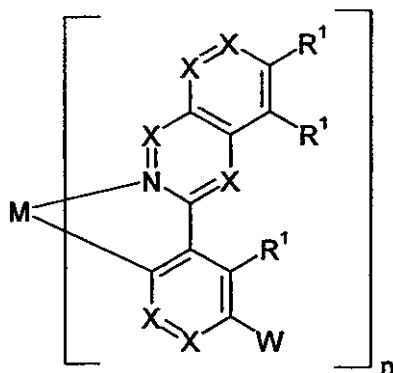
式(30)



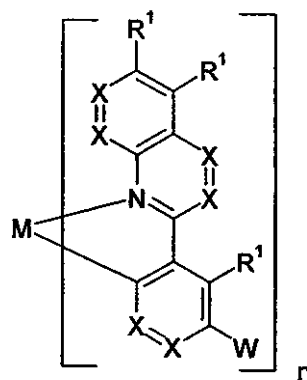
式(31)



式(32)



式(33)



式(34)

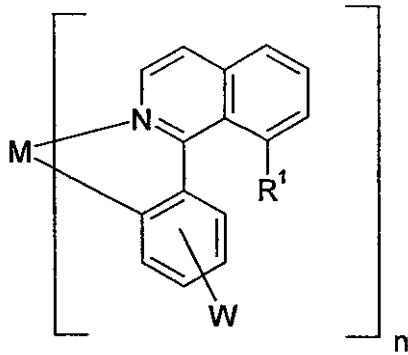
【0019】

即ち、式(23)～(34)のホモレプティック錯体の場合、置換基は、好ましくは、金属Mに対する同じ環の結合部位に対してパラ位に位置する。

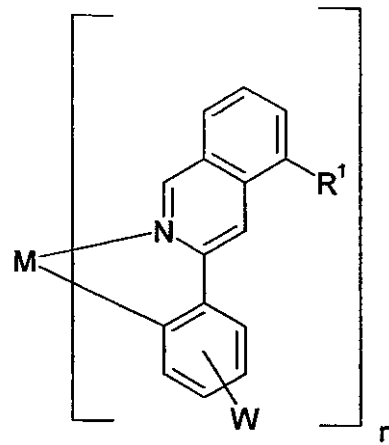
【0020】

本発明の一つの非常に特に好ましい態様において、一般式(1)の化合物は、式(35)～(37)の部分M(L)_nを含む

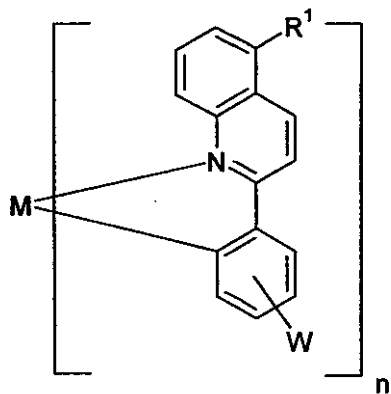
【化 1 1】



式(35)



式(36)



式(37)

【0021】

(ここで、同様に、式(35)～(37)の化合物について、ホモレプティック錯体(即ち $m=0$)の場合、ラジカルWは、環の任意の位置に出現してもよく、一方、ヘテロレプティック錯体(即ち $m>0$ および $n>0$)の場合、ラジカルWは、好ましくは、金属に対する同じ環の結合部位に対してパラ位に出現する)。

【0022】

本発明の一つのさらに特に好ましい態様において、一般式(1)の化合物は、 $Q=S$ であることを特徴とする式(17)～(22)の部分 $M(L)_n$ を含む。

【0023】

本発明の一つのさらに特に好ましい態様において、一般式(1)の化合物は、式(38)～(43)の部分 $M(L)_n$ を含む

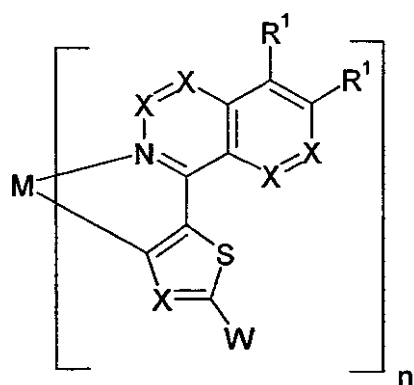
10

20

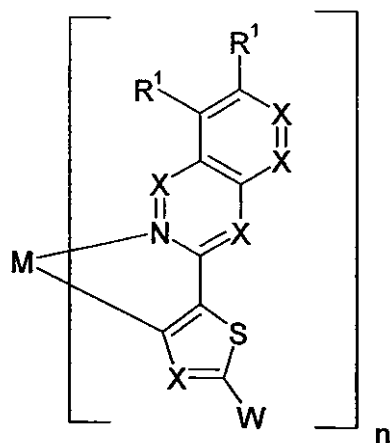
30

40

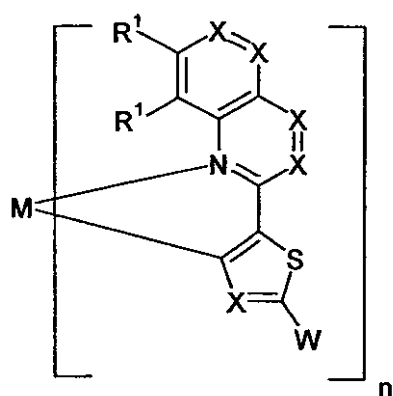
【化 1 2】



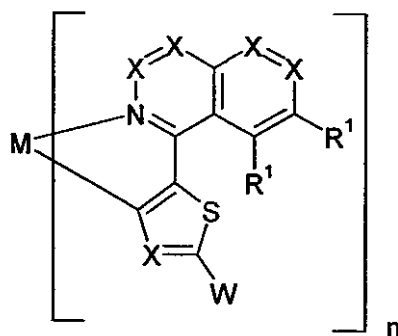
式(38)



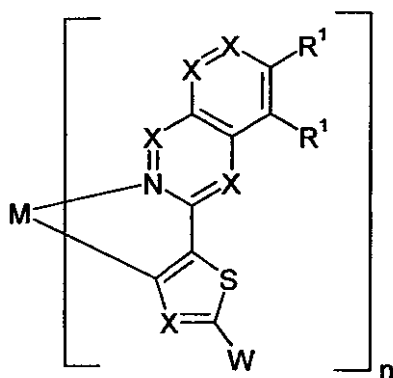
式(39)



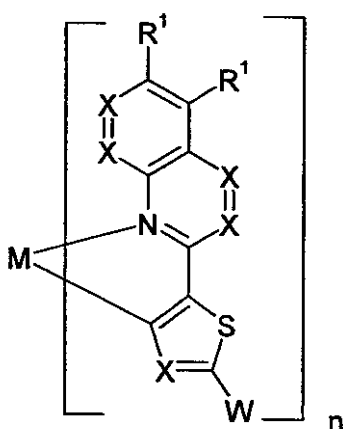
式(40)



式(41)



式(42)

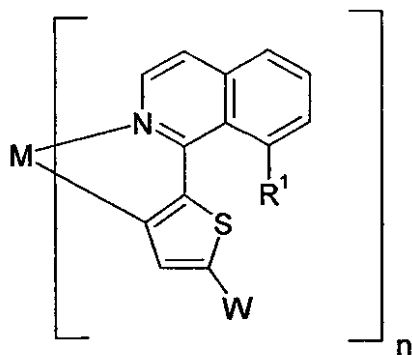


式(43)

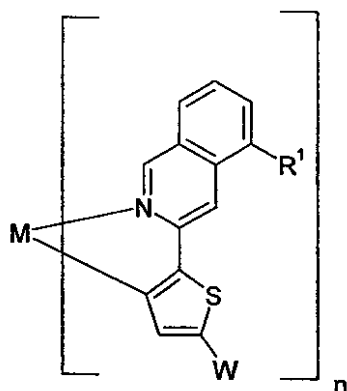
【0024】

(ここで、一般式(1)の部分M(L)_nについて、特に好ましいのは、式(44)～(46)の化合物である)。

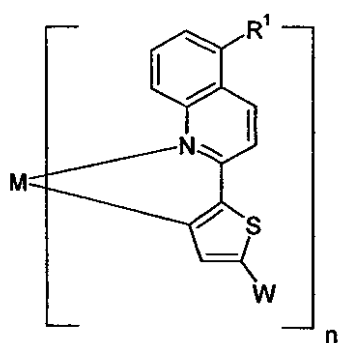
【化 1 3】



式(44)



式(45)



式(46)

【0025】

本発明の一つの好ましい態様において、 $p = 0$ である。本発明の一つのさらに好ましい態様において、 $P = 1$ であり、 T は、基 $C(R^1)_2$ 、 O 、 S および NR^1 、 Si 、 Ge および $C(R^1)_2 - C(R^1)_2$ から選択される。

【0026】

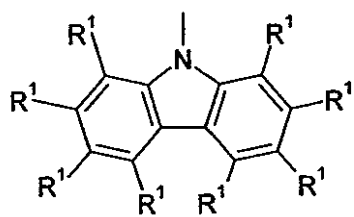
本発明の一つのさらに好ましい態様において、ラジカル W は、式(47)～(55)のラジカルの群から選択される。

10

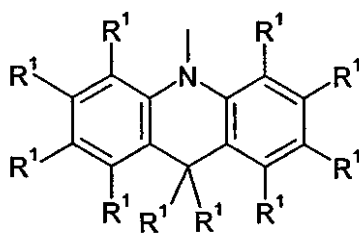
20

30

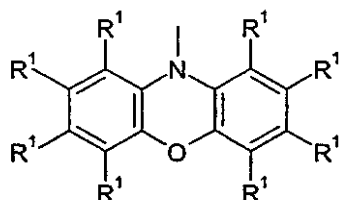
【化 1 4】



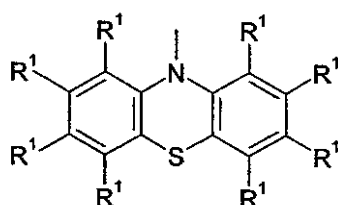
式(47)



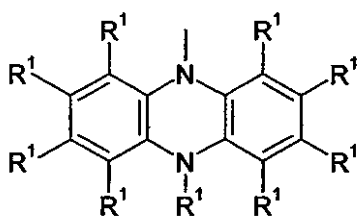
式(48)



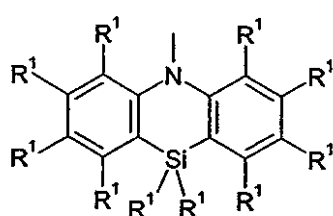
式(49)



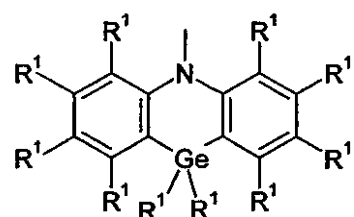
式(50)



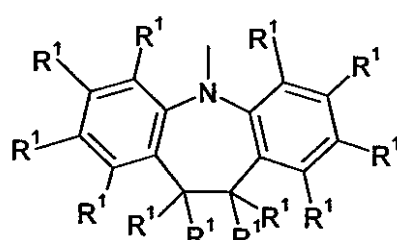
式(51)



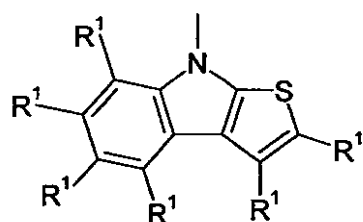
式(52)



式(53)



式(54)



式(55)

【 0 0 2 7】

本発明の一つのさらに非常に特に好ましい態様において、ラジカルWは、式(47)～(51)のラジカルから選択される。

【 0 0 2 8】

10

20

30

40

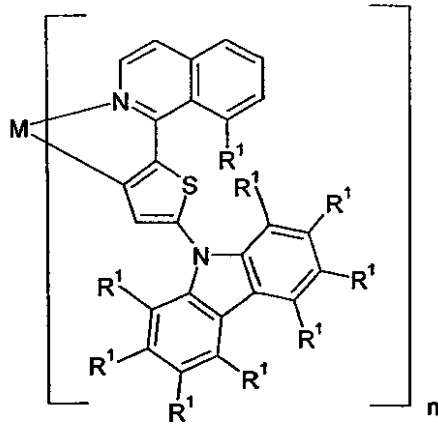
50

本発明の一つの特別に好ましい態様において、ラジカルWは、式(47)のラジカルに等しい。

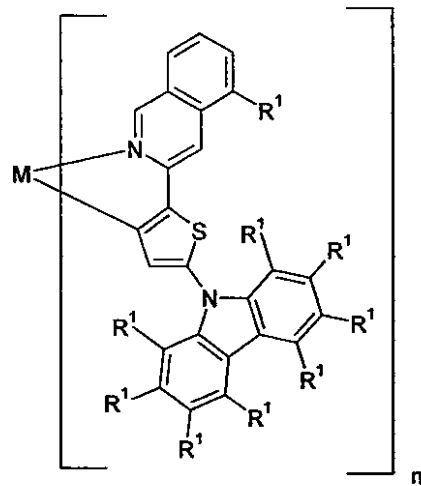
【0029】

本発明の意味において特別に好ましい式(1)の化合物は、式(56)～(70)の化合物を含む部分M(L)_nを含有する。

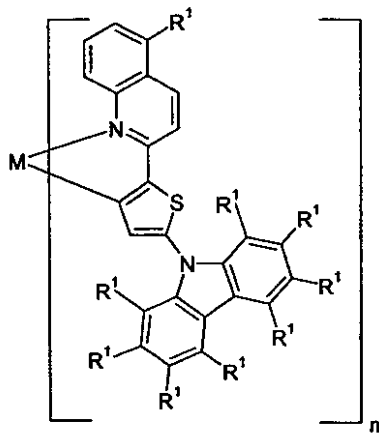
【化15】



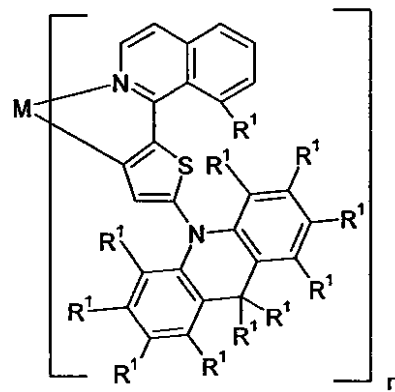
式(56)



式(57)



式(58)



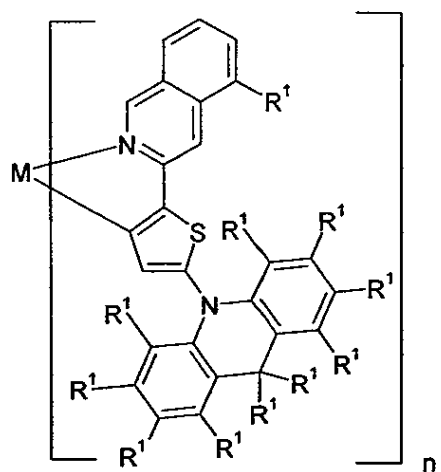
式(59)

10

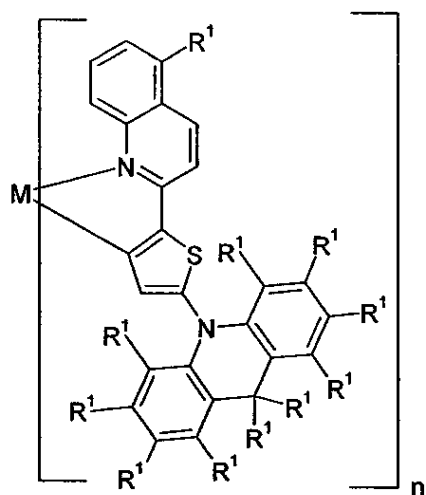
20

30

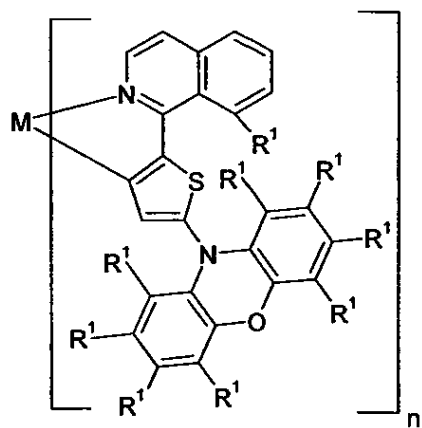
【化 1 6】



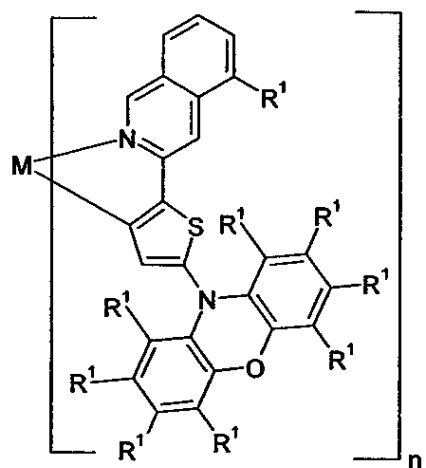
式(60)



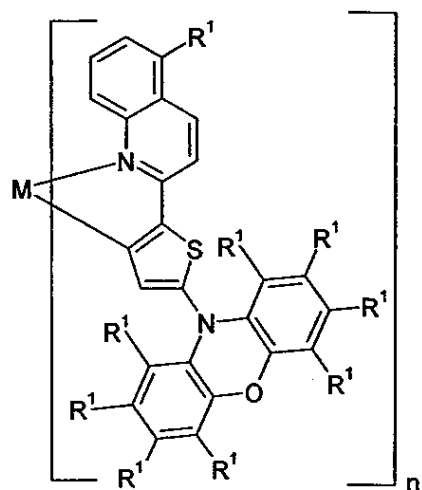
式(61)



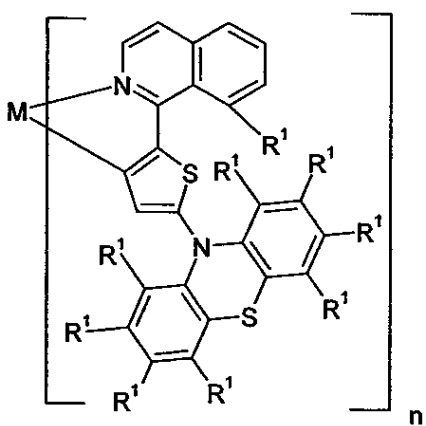
式(62)



式(63)



式(64)



式(65)

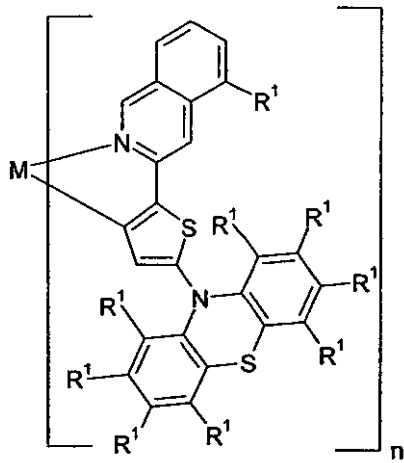
10

20

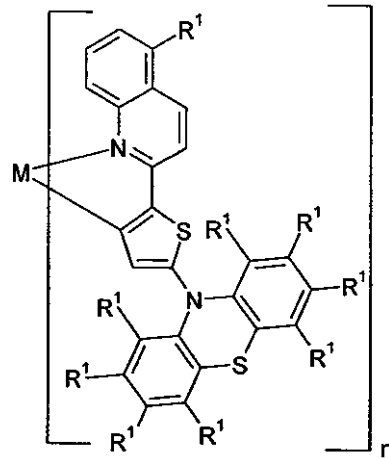
30

40

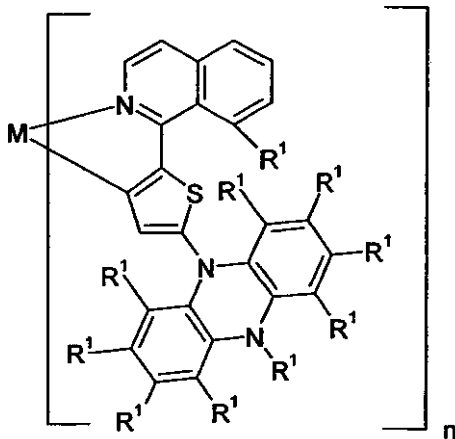
【化 1 7】



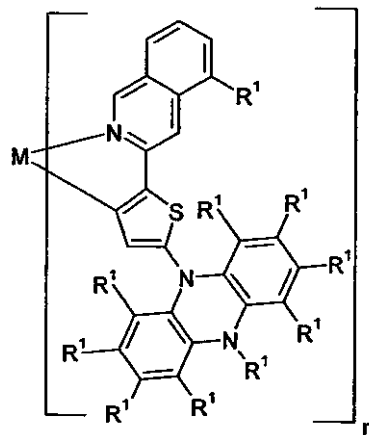
式(66)



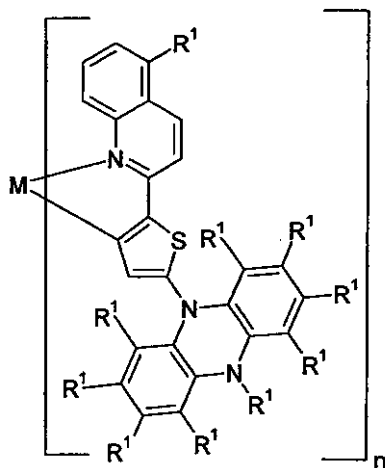
式(67)



式(68)



式(69)



式(70)

【0030】

式(56)～(58)の化合物は、本明細書で、本発明の非常に特に好ましい態様を表

10

20

30

40

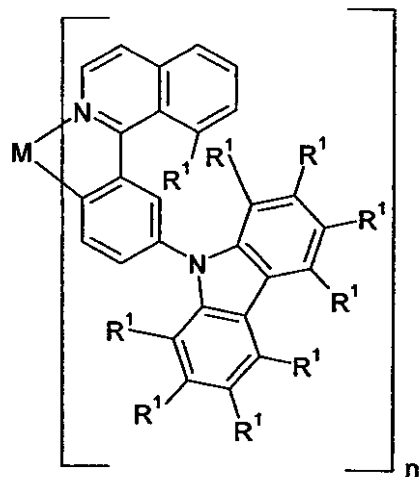
50

している。

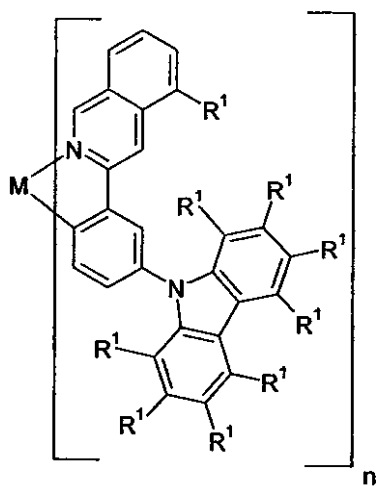
【0031】

本発明のさらに非常に特に好ましい態様は、式(71)～(85)を有する化合物の群から選択される式(1)のホモレプティック化合物(即ちM=0)である。

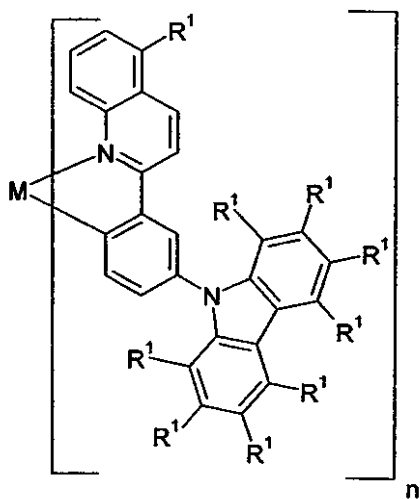
【化18】



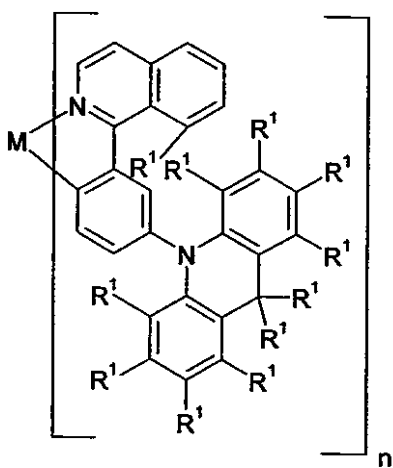
式(71)



式(72)



式(73)



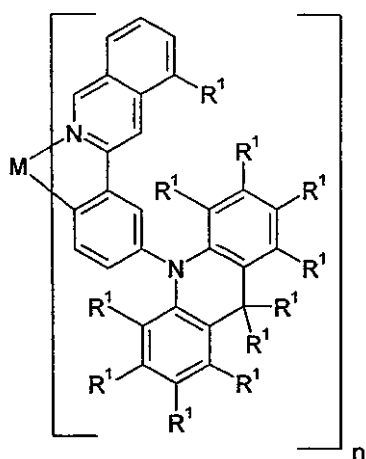
式(74)

10

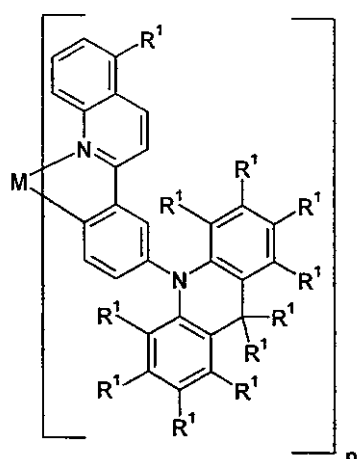
20

30

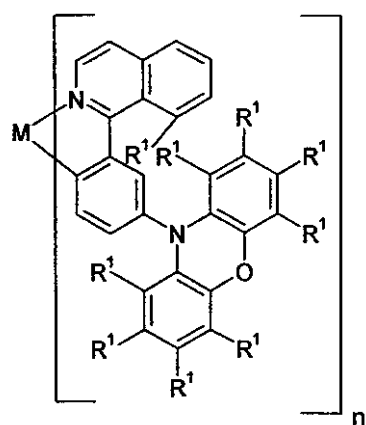
【化 1 9】



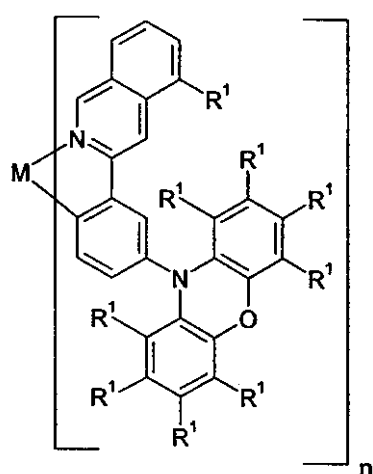
式(75)



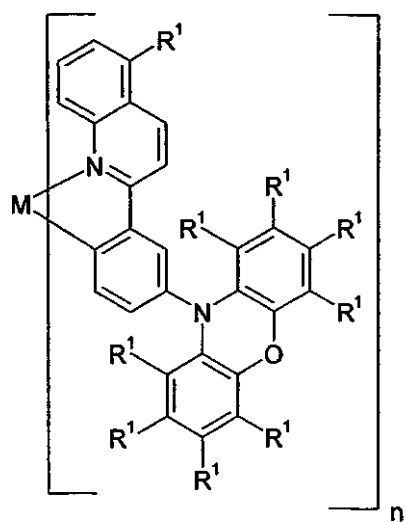
式(76)



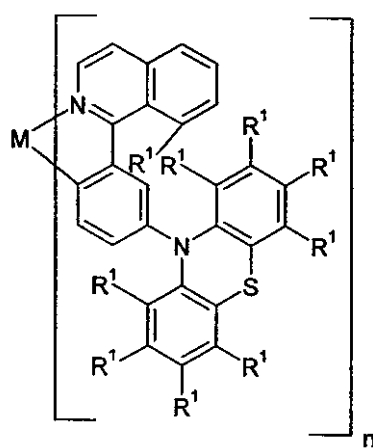
式(77)



式(78)



式(79)



式(80)

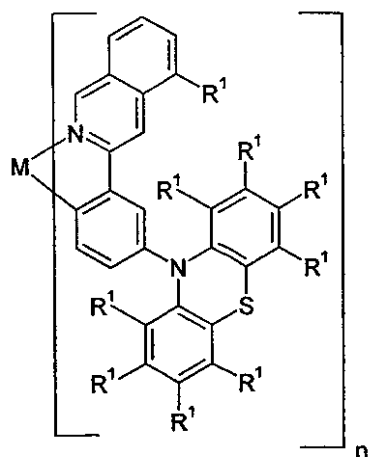
10

20

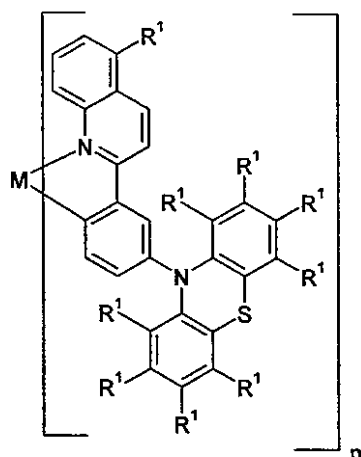
30

40

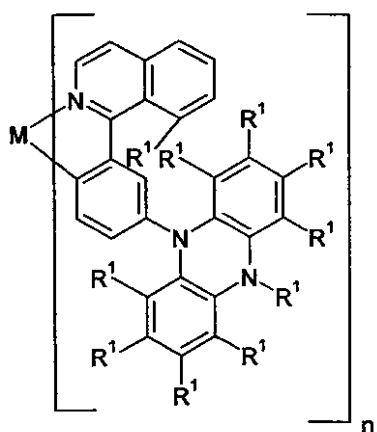
【化 2 0】



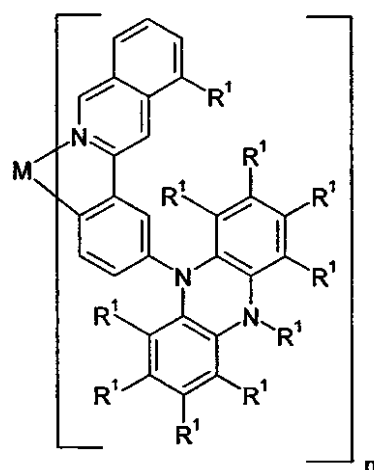
式(81)



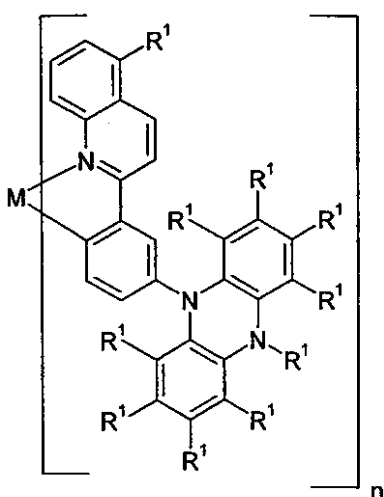
式(82)



式(83)



式(84)



式(85)

【 0 0 3 2 】

式(71)～(73)の化合物は、本明細書で、本発明の非常に特に好ましい態様を表している。

【 0 0 3 3 】

10

20

30

40

50

一つの特に好ましい態様において、 R^1 は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $N(R^2)_2$ 、 CN 、 NO_2 、1～40個のC原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基または2～40個のC原子を有する直鎖アルケニルまたはアルキニル基または3～40個のC原子を有する分枝または環状アルキル、アルケニル、アルキニルまたはアルコキシ基（これらのそれぞれは、1個以上のラジカル R^2 で置換されていてもよい）または5～60個の芳香族環原子を有する芳香族またはヘテロ芳香族環系（これは、それぞれの場合において、1個以上のラジカル R^2 で置換されていてもよい）、または5～60個の芳香族環原子を有するアリーールオキシまたはヘテロアリーールオキシ基（これは、1個以上のラジカル R^2 で置換されていてもよい）、または10～40個の芳香族環原子を有するジアアリーールアミノ基、ジヘテロアリーールアミノ基またはアリーールヘテロアリーールアミノ基（これは、1個以上のラジカル R^2 で置換されていてもよい）、またはこれらの基の2種以上の組合せであり；2個以上のラジカル R^1 は、互いに単環式または多環式、脂肪族、芳香族および／またはベンゾ縮合環系を形成してもよい。

10

【0034】

本発明の一つのさらに非常に特に好ましい態様において、ラジカル R^1 は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 H 、1～40個のC原子を有する直鎖アルキルまたはアルコキシ基または2～40個のC原子を有する直鎖アルケニルまたはアルキニル基または3～40個のC原子を有する分枝もしくは環状アルキル、アルケニル、アルキニルまたはアルコキシ基、 $-NH_2$ 、 $-SR^3$ 、 $-OR^3$ または式(86)～(224)のラジカル（ここで、示された式は、それら自体、1個以上のラジカル R^3 で置換されていてもよい）（

20

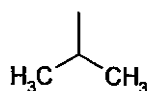
【化21】



式(86)

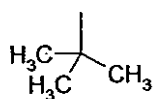


式(87)

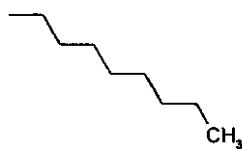


式(88)

【化 2 2】



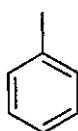
式(89)



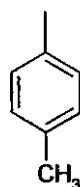
式(90)



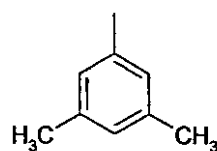
式(91)



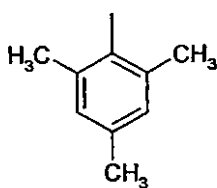
式(92)



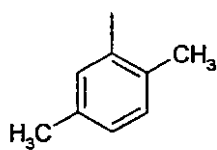
式(93)



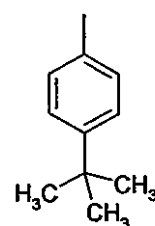
式(94)



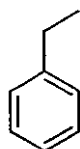
式(95)



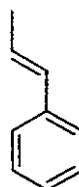
式(96)



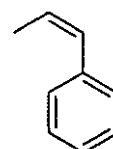
式(97)



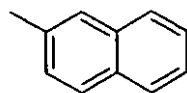
式(98)



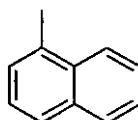
式(99)



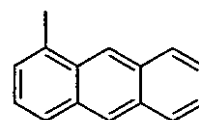
式(100)



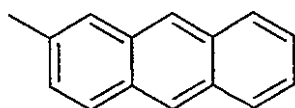
式(101)



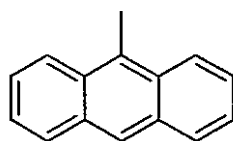
式(102)



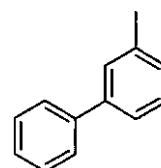
式(103)



式(104)



式(105)



式(106)

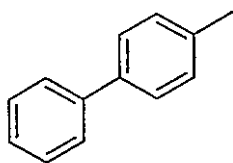
10

20

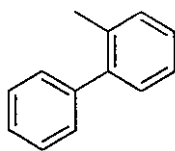
30

40

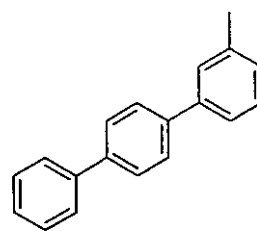
【化 2 3】



式(107)

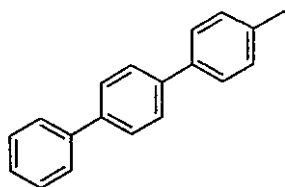


式(108)

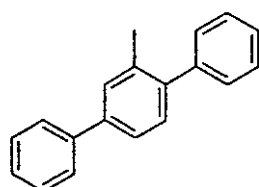


式(109)

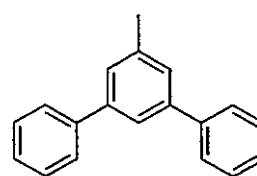
10



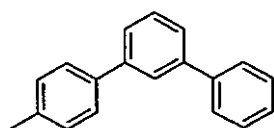
式(110)



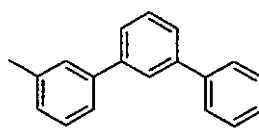
式(111)



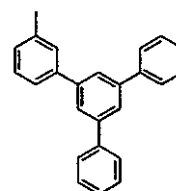
式(112)



式(113)

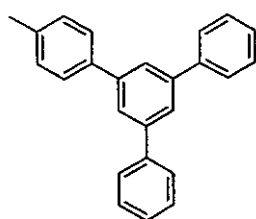


式(114)

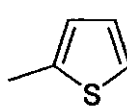


式(115)

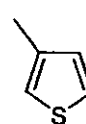
20



式(116)

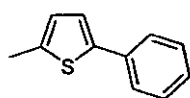


式(117)

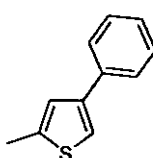


式(118)

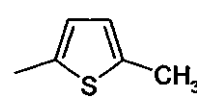
30



式(119)

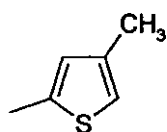


式(120)

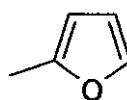


式(121)

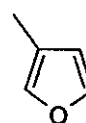
40



式(122)



式(123)

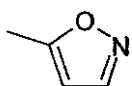


式(124)

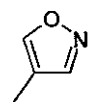
【化 2 4】



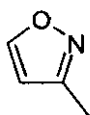
式(125)



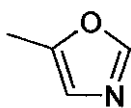
式(126)



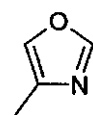
式(127)



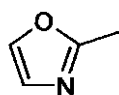
式(128)



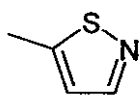
式(129)



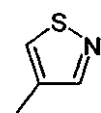
式(130)



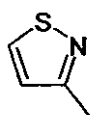
式(131)



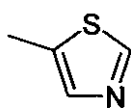
式(132)



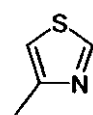
式(133)



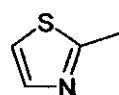
式(134)



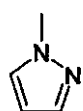
式(135)



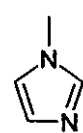
式(136)



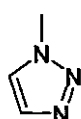
式(137)



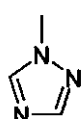
式(138)



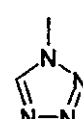
式(139)



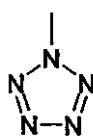
式(140)



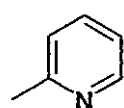
式(141)



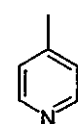
式(142)



式(143)



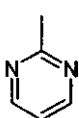
式(144)



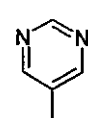
式(145)



式(146)



式(147)



式(148)

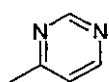
10

20

30

40

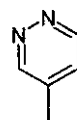
【化 2 5】



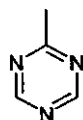
式(149)



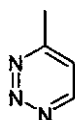
式(150)



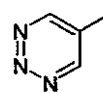
式(151)



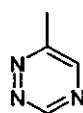
式(152)



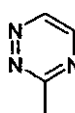
式(153)



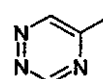
式(154)



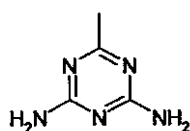
式(155)



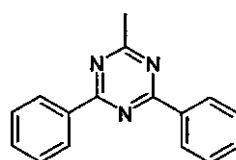
式(156)



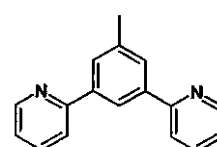
式(157)



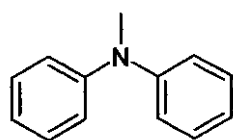
式(158)



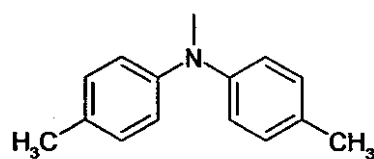
式(159)



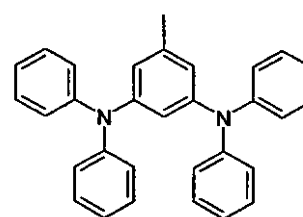
式(160)



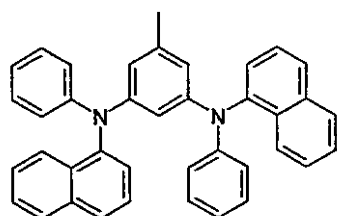
式(161)



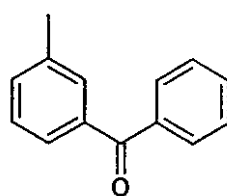
式(162)



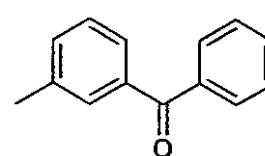
式(163)



式(164)



式(165)



式(166)

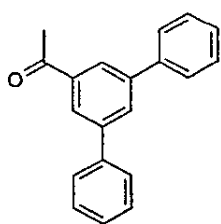
10

20

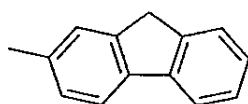
30

40

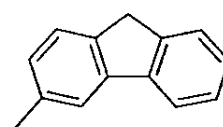
【化 2 6】



式(167)

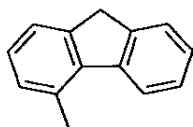


式(168)

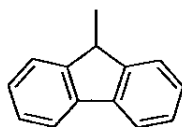


式(169)

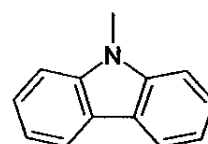
10



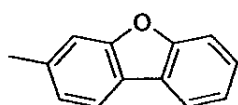
式(170)



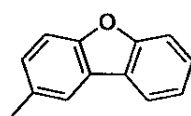
式(171)



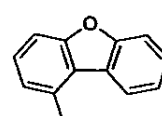
式(172)



式(173)

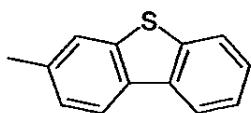


式(174)

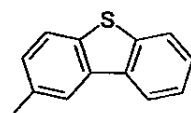


式(175)

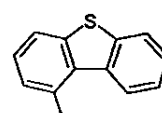
20



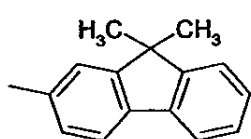
式(176)



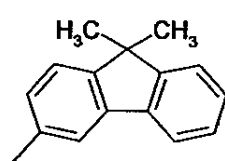
式(177)



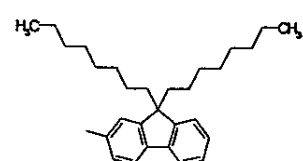
式(178)



式(179)

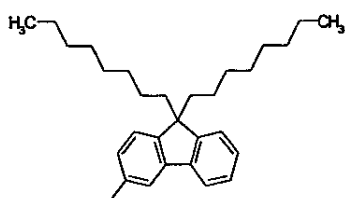


式(180)

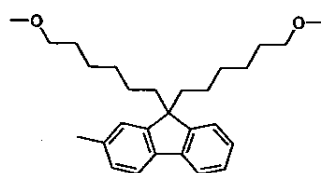


式(181)

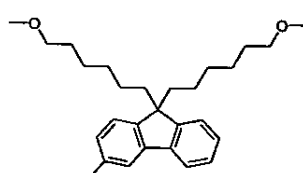
30



式(182)



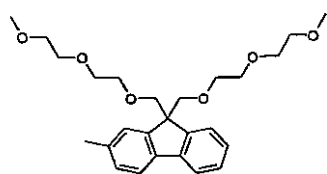
式(183)



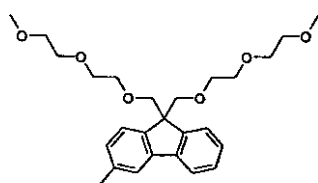
式(184)

40

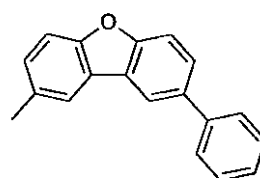
【化 2 7】



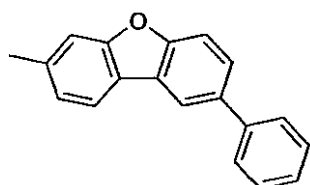
式(185)



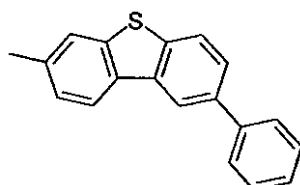
式(186)



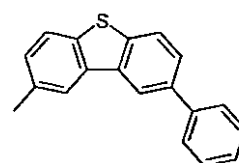
式(187)



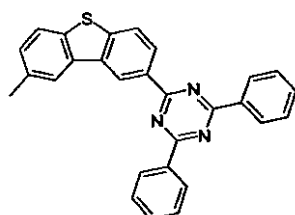
式(188)



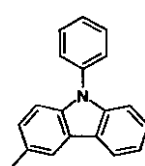
式(189)



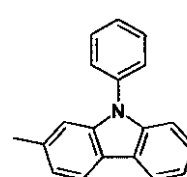
式(190)



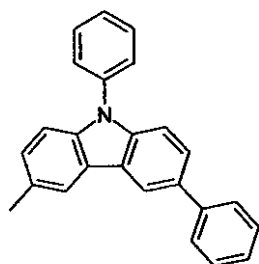
式(191)



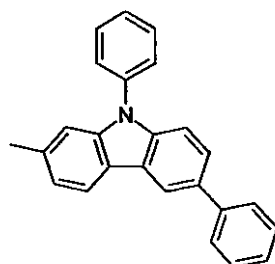
式(192)



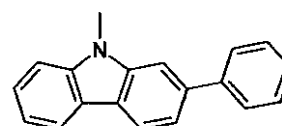
式(193)



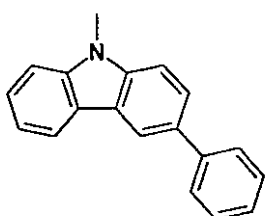
式(194)



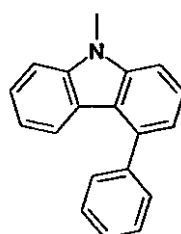
式(195)



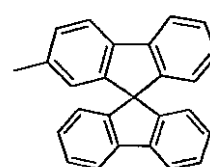
式(196)



式(197)



式(198)



式(199)

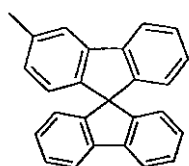
10

20

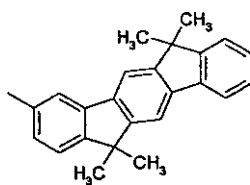
30

40

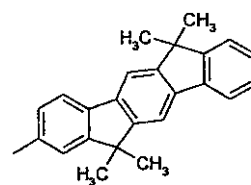
【化 2 8】



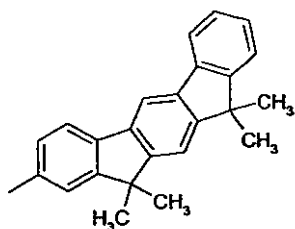
式(200)



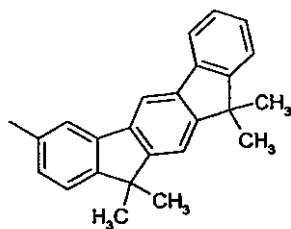
式(201)



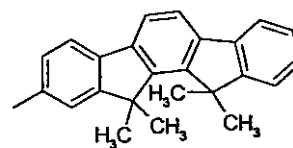
式(202)



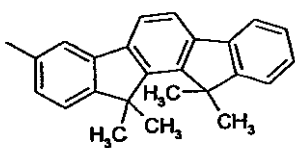
式(203)



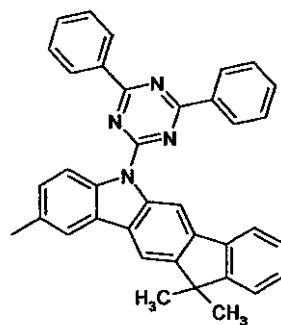
式(204)



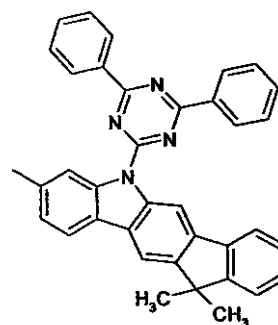
式(205)



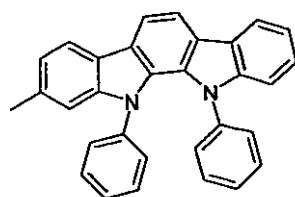
式(206)



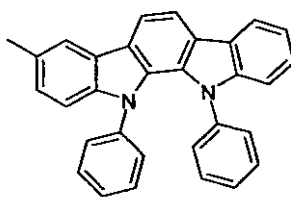
式(207)



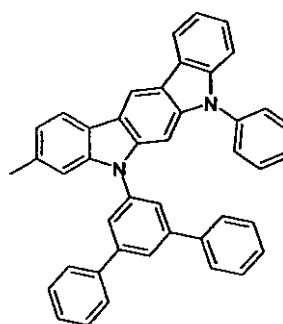
式(208)



式(209)



式(210)



式(211)

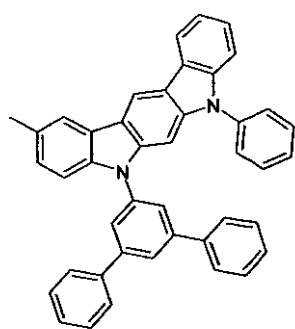
10

20

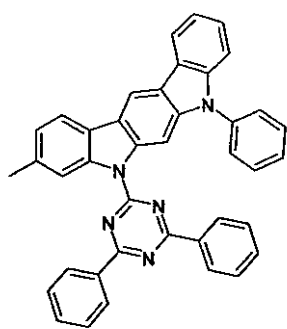
30

40

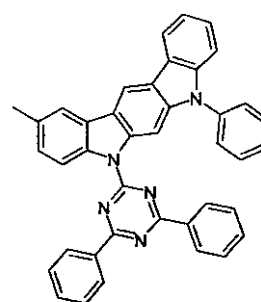
【化 2 9】



式(212)

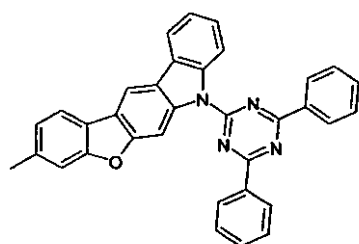


式(213)

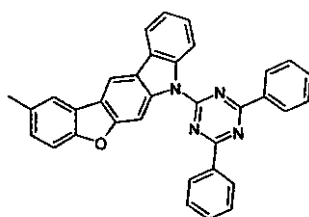


式(214)

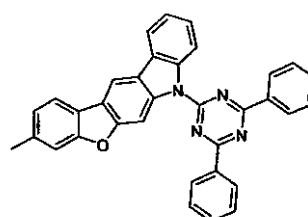
10



式(215)

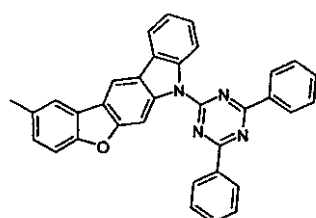


式(216)

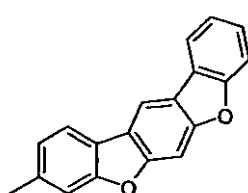


式(217)

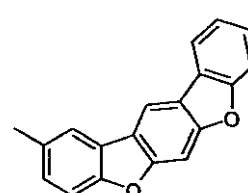
20



式(218)

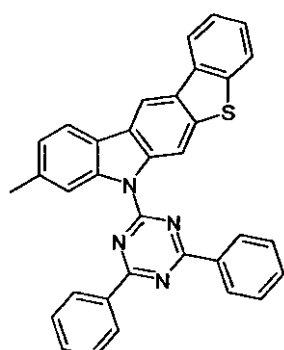


式(219)

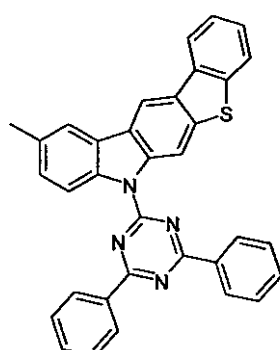


式(220)

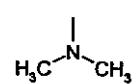
30



式(221)



式(222)



式(223)

40



式224

【 0 0 3 5 】

50

ここで、線は、配位子へのラジカル R^1 の結合部位を示す。

【0036】

本発明の一つの特別に好ましい態様において、ラジカル R^1 は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、H、 NH_2 または式(86)、(90)、(91)、(92)、(93)、(94)、(97)、(102)、(106)、(112)、(117)、(119)、(144)、(145)、(147)、(158)、(159)、(160)、(161)、(162)、(163)、(164)、(165)、(167)、(172)、(176)、(179)、(181)、(188)、(191)、(192)、(194)、(196)、(199)、(202)、(207)、(223) および (224) のラジカル(ここで、示された式は、それら自体、1個以上のラジカル R^3 (これらは、出現する毎に同一であるかまたは異なっているかまたは異なっていないか) で置換されていてもよい) である。

10

【0037】

本発明の一つのさらに特別に好ましい態様において、ラジカル R^1 は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、H、 $-CH_3$ または式(92)のラジカル(ここで、示された式(92)は、それら自体、1個以上のラジカル R^3 (これは、出現する毎に同一であるかまたは異なっているかまたは異なっていないか) で置換されていてもよい) である。

【0038】

本発明の意味におけるアリール基は、6～40個のC原子を含み；本発明の意味におけるヘテロアリール基は、2～40個のC原子および少なくとも1個のヘテロ原子を含み、但し、C原子およびヘテロ原子の合計が少なくとも5であることを条件とする。ヘテロ原子は、好ましくはN、Oおよび/またはSから選択される。アリール基またはヘテロアリール基は、本明細書で、単純な芳香族環、即ちベンゼン、または単純なヘテロ芳香族環、例えばピリジン、ピリミジン、チオフェンなど、または縮合アリールまたはヘテロアリール基、例えばナフタレン、アントラセン、フェナントレン、キノリン、イソキノリンなどのいずれかを意味すると解釈される。

20

【0039】

本発明の意味における芳香族環系は、環系に6～60個のC原子を含む。本発明の意味におけるヘテロ芳香族環系は、環系に2～60個のC原子および少なくとも1個のヘテロ原子を含み、但し、C原子およびヘテロ原子の合計が少なくとも5であることを条件とする。ヘテロ原子は、好ましくはN、Oおよび/またはSから選択される。本発明の目的のために、芳香族またはヘテロ芳香族環系は、必ずしもアリールまたはヘテロアリール基だけを含まず、代わりにその中で、さらに、複数のアリールまたはヘテロアリール基が、非芳香族単位(好ましくは10%未満のH以外の原子)、例えば、 sp^3 混成C、NまたはO原子またはカルボニル基などによって中断されていてもよい系を意味すると解釈されるよう意図されている。従って、例えば、9,9'-スピロビフルオレン、9,9-ジアリールフルオレン、トリアリールアミン、ジアリールエーテル、スチルベンなどの系は、同様に、本発明の目的のための芳香族環系を意味すると解釈されるよう意図されており、2個以上のアリール基が、例えば、直鎖または環状アルキル基またはシリル基によって中断されている系も同様である。

30

40

【0040】

本発明の意味における環状アルキル、アルコキシまたはチオアルコキシ基は、単環、二環または多環基を意味すると解釈される。

【0041】

本発明の目的のために、 $C_1 \sim C_{40}$ アルキル基(この中で、さらに、個々のH原子または CH_2 基が、上記の基で置換されていてもよい)は、例えば、ラジカル、メチル、エチル、*n*-プロピル、*i*-プロピル、*n*-ブチル、*i*-ブチル、*s*-ブチル、*t*-ブチル、2-メチルブチル、*n*-ペンチル、*s*-ペンチル、*tert*-ペンチル、2-ペンチル、シクロペンチル、*n*-ヘキシル、*s*-ヘキシル、*tert*-ヘキシル、2-ヘキシル、3-ヘキシル、シクロヘキシル、2-メチルペンチル、*n*-ヘプチル、2-ヘプチル、3-

50

ヘプチル、4-ヘプチル、シクロヘプチル、1-メチルシクロヘキシル、n-オクチル、
 2-エチルヘキシル、シクロオクチル、1-ビスシクロ〔2.2.2〕オクチル、2-ビス
 シクロ〔2.2.2〕オクチル、2-(2,6-ジメチル)オクチル、3-(3,7-ジメ
 チル)オクチル、トリフルオロメチル、ペンタフルオロエチルまたは2,2,2-トリフ
 ルオロエチルを意味すると解釈される。アルケニル基は、例えば、エテニル、プロベニル
 、ブテニル、ペンテニル、シクロペンテニル、ヘキセニル、シクロヘキセニル、ヘプテニ
 ル、シクロヘプテニル、オクテニル、シクロオクテニルまたはシクロオクタジエニルを意
 味すると解釈される。アルキニル基は、例えば、エチニル、プロピニル、ブチニル、ペン
 チニル、ヘキシニル、ヘプチニルまたはオクチニルを意味すると解釈される。 $C_{1} \sim C_{40}$
 アルコキシ基は、例えば、メトキシ、トリフルオロメトキシ、エトキシ、n-プロポキシ
 、i-プロポキシ、n-ブトキシ、i-ブトキシ、s-ブトキシ、t-ブトキシまたは2-
 メチルブトキシを意味すると解釈される。5~60個の芳香族環原子を有する芳香族また
 はヘテロ芳香族環系（これは、それぞれの場合において、上述されたラジカルRで置換
 されていてもよく、任意の所望の位置を介して芳香族またはヘテロ芳香族環系に結合して
 いてもよい）は、例えば、ベンゼン、ナフタレン、アントラセン、ベンズアントラセン、
 フェナントレン、ベンゾフェナントレン、ピレン、クリセン、ペリレン、フルオランテン
 、ベンゾフルオランテン、ナフタセン、ペンタセン、ベンゾピレン、ビフェニル、ビフェ
 ニレン、テルフェニル、テルフェニレン、フルオレン、スピロビフルオレン、ジヒドロフ
 ェナントレン、ジヒドロピレン、テトラヒドロピレン、シスーまたはトランスーインデノ
 フルオレン、シスーまたはトランスーモノベンゾインデノフルオレン、シスーまたはトラ
 ンスージベンゾインデノフルオレン、トルクセン、イソトルクセン、スピロトルクセン、
 スピロイソトルクセン、フラン、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ジベンゾフラン、チ
 オフェン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、ピロール、
 インドール、イソインドール、カルバゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、アク
 リジン、フェナントリジン、ベンゾ-5,6-キノリン、ベンゾ-6,7-キノリン、ベン
 ゾ-7,8-キノリン、フェノチアジン、フェノキサジン、ピラゾール、インダゾール
 、イミダゾール、ベンズイミダゾール、ナフチミダゾール、フェナントリミダゾール、ピ
 リジミダゾール、ピラジンイミダゾール、キノキサリンイミダゾール、オキサゾール、ベ
 ンズオキサゾール、ナフトオキサゾール、アントロオキサゾール、フェナントロオキサゾ
 ール、イソオキサゾール、1,2-チアゾール、1,3-チアゾール、ベンゾチアゾール
 、ピリダジン、ベンゾピリダジン、ピリミジン、ベンゾピリミジン、キノキサリン、1,
 5-ジアザアントラセン、2,7-ジアザピレン、2,3-ジアザピレン、1,6-ジア
 ザピレン、1,8-ジアザピレン、4,5-ジアザピレン、4,5,9,10-テトラア
 ザペリレン、ピラジン、フェナジン、フェノキサジン、フェノチアジン、フルオルビン、
 ナフチリジン、アザカルバゾール、ベンゾカルボリン、フェナントロリン、1,2,3-
 トリアゾール、1,2,4-トリアゾール、ベンゾトリアゾール、1,2,3-オキサジ
 アゾール、1,2,4-オキサジアゾール、1,2,5-オキサジアゾール、1,3,4-
 オキサジアゾール、1,2,3-チアジアゾール、1,2,4-チアジアゾール、1,
 2,5-チアジアゾール、1,3,4-チアジアゾール、1,3,5-トリアジン、1,
 2,4-トリアジン、1,2,3-トリアジン、テトラゾール、1,2,4,5-テトラ
 ジン、1,2,3,4-テトラジン、1,2,3,5-テトラジン、プリン、プテリジン
 、インドリジンおよびベンゾチアジアゾールから誘導される基を意味すると解釈される。

【0042】

式(1)の化合物は、帯電していても帯電しなくてもよい。好ましい一態様において
 、式(1)の化合物は、電氣的に中性である。これは簡単な方法で達成され、その方法は
 配位子LおよびL'の電荷が、錯体金属原子Mの電荷を相殺するように選択されることに
 ある。

【0043】

さらに、金属原子の周りの価電子の合計が、白金およびパラジウムでは16であり、イ
 リジウムおよびロジウムでは18であることを特徴とする式(1)の化合物が好ましい。

この選択は、これらの金属錯体の特定の安定性による。

【0044】

本発明の好ましい一態様において、Mは、イリジウムまたは白金を表す。Mは、特に好ましくはイリジウムを表す。

【0045】

Mが白金またはパラジウムを表す場合、添え字nは1または2を表す。添え字n=1である場合、1個の二座または2個の単座配位子L'、好ましくは1個の二座配位子L'も金属Mに配位している。相応じて、1個の二座配位子L'については添え字m=1であり、2個の単座配位子L'については添え字m=2である。添え字n=2である場合、添え字m=0である。

10

【0046】

Mがイリジウムまたはロジウムを表す場合、添え字nは、1、2または3、好ましくは2または3、特に好ましくは3を表す。添え字n=1である場合、4個の単座または2個の二座または1個の二座および2個の単座または1個の三座および1個の単座または1個の四座配位子L'、好ましくは2個の二座配位子L'も金属に配位している。相応じて、添え字mは、配位子L'に応じて、1、2、3または4に等しい。添え字n=2である場合、1個の二座または2個の単座配位子L'、好ましくは1個の二座配位子L'も金属に配位している。相応じて、添え字mは、配位子L'に応じて、1または2に等しい。添え字n=3である場合、添え字m=0である。

【0047】

本発明の好ましい一態様において、記号Xは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 CR^1 を表す。

20

【0048】

本発明の一つのさらに好ましい態様において、全ての記号Xは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 CR^1 を表すか、または全ての記号XはNを表すかのいずれかである。

【0049】

本発明の一つのさらに好ましい態様において、記号Qは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 $R^1C = CR^1$ 、 $R^1C = N$ 、Oまたは NR^1 、特に好ましくは $R^1C = CR^1$ および $R^1C = N$ 、特に好ましくは $R^1C = CR^1$ を表す。

30

【0050】

上述の選択が同時に適用されることが特に好ましい。

【0051】

本発明の一つの特に好ましい態様において、使用された記号には以下が適用される：

Mは、イリジウムまたは白金、特に好ましくはイリジウムであり；

Xは、出現する毎に、Mに直接結合していない全ての位置について CR^1 であり；

Qは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 $R^1C = CR^1$ または $R^1C = N$ 、特に好ましくは $R^1C = CR^1$ であり；

式中、使用された記号および添え字は、上述された意味、特に上述された好ましい意味を有する。

40

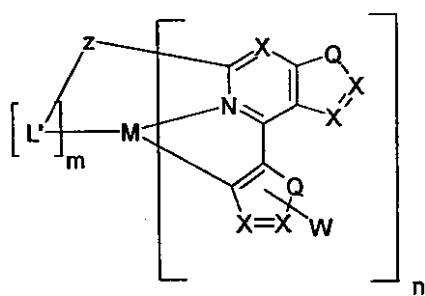
【0052】

配位子Lを1個以上のさらなる配位子LまたはL'に結び付ける架橋単位Zは、ラジカル R^1 の一つに存在してもよい。本発明の好ましい一態様において、架橋単位Zは、ラジカル R^1 の一つの代わりに存在し、配位子が三座または多座または多脚 (polypodal) の特徴を有することを意味している。このタイプの2個の架橋単位Zが存在してもよい。これは、大環状配位子の形成またはクリプテートの形成をもたらす。

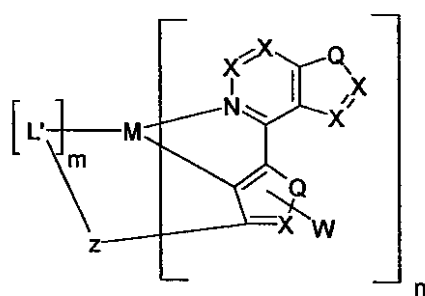
【0053】

多座配位子を有する好ましい構造は、以下の式(225)～(236)の金属錯体である。

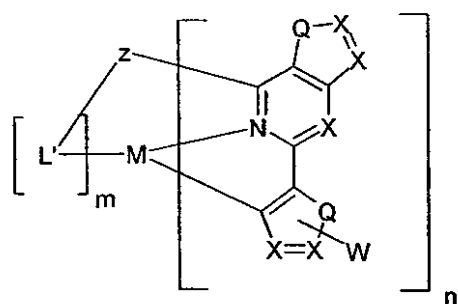
【化 3 0】



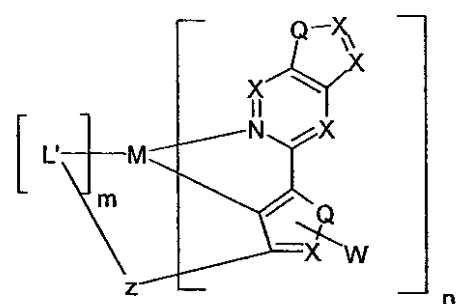
式(225)



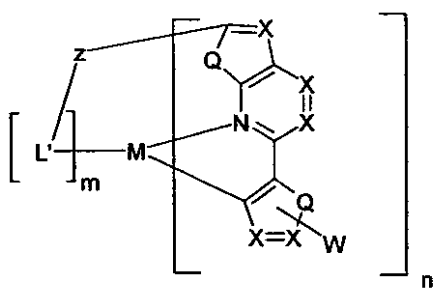
式(226)



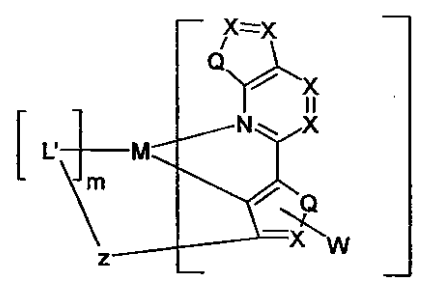
式(227)



式(228)



式(229)



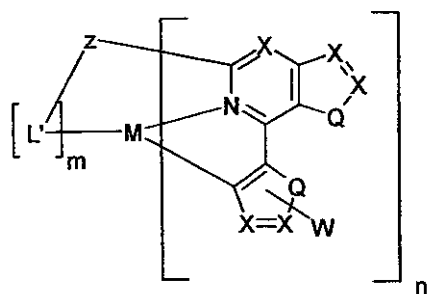
式(230)

10

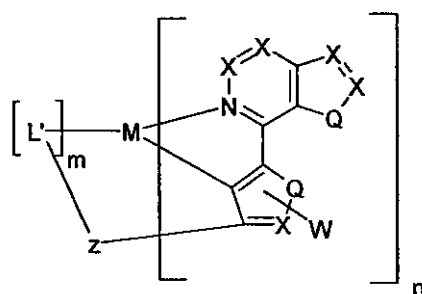
20

30

【化 3 1】

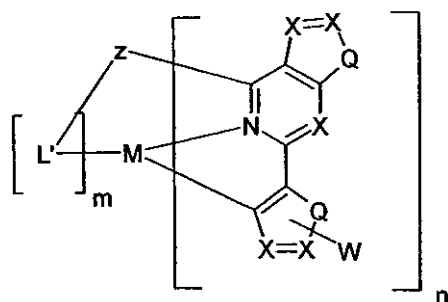


式(231)

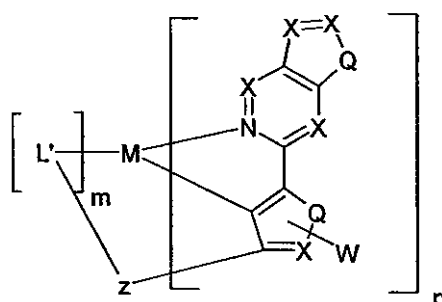


式(232)

10

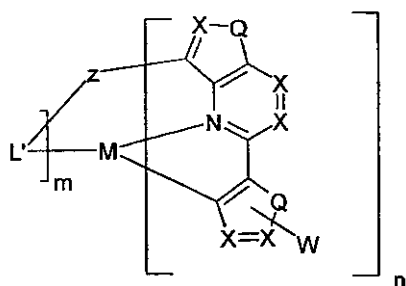


式(233)

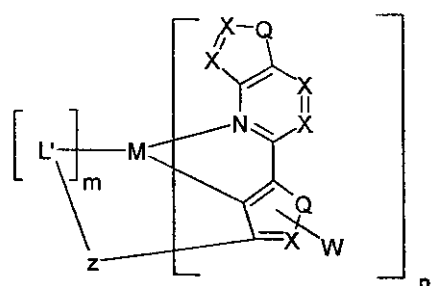


式(234)

20



式(235)



式(236)

30

【0054】

(式中、使用された記号は、上述された意味を有し、Zは、好ましくは、部分配位子Lを互いにまたはLをL'に共有結合させる第3、第4、第5および／または第6主族（IUPACグループ13、14、15または16）からの1～80個の原子を含む架橋単位または3～6員単素環または複素環を表す）。架橋単位Zは、本明細書で、非対称構造を有してもよく、即ち、ZのLまたはL'への結合は、同一でなくてもよい。

40

【0055】

架橋単位Zは、中性であってもよく、一重、二重もしくは三重に負に帯電し、または一重、二重もしくは三重に正に帯電していてもよい。Zは、好ましくは、中性であり、または一重に負に帯電または一重に正に帯電している。Zの電荷は、本明細書で、好ましくは、全体として中性な錯体が生ずるように選択される。

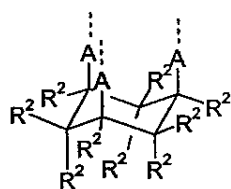
【0056】

Zが、三価の基であり、即ち、3個の配位子Lを互いにまたは2個の配位子LをL'にまたは1個の配位子Lを2個の配位子L'に橋架けする場合、Zは、好ましくは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 B 、 $B(R^2)^-$ 、 $B(C(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)B(C$

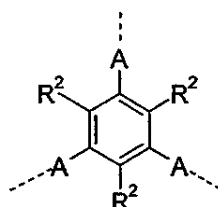
50

$(R^2)_2)_3^-$ 、 $B(O)_3$ 、 $(R^2)B(O)_3^-$ 、 $B(C(R^2)_2C(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)B(C(R^2)_2C(R^2)_2)_3^-$ 、 $B(C(R^2)_2O)_3$ 、 $(R^2)B(C(R^2)_2O)_3^-$ 、 $B(OC(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)B(OC(R^2)_2)_3^-$ 、 $C(R^2)$ 、 CO^- 、 $CN(R^2)_2$ 、 $(R^2)C(C(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)C(O)_3$ 、 $(R^2)C(C(R^2)_2C(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)C(C(R^2)_2O)_3$ 、 $(R^2)C(OC(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)C(Si(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)C(Si(R^2)_2C(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)C(C(R^2)_2Si(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)C(Si(R^2)_2Si(R^2)_2)_3$ 、 $Si(R^2)$ 、 $(R^2)Si(C(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)Si(O)_3$ 、 $(R^2)Si(C(R^2)_2C(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)Si(OC(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)Si(C(R^2)_2O)_3$ 、 $(R^2)Si(Si(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)Si(Si(R^2)_2C(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)Si(C(R^2)_2Si(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)Si(Si(R^2)_2Si(R^2)_2)_3$ 、 N 、 NO 、 $N(R^2)^+$ 、 $N(C(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)N(C(R^2)_2)_3^+$ 、 $N(C=O)_3$ 、 $N(C(R^2)_2C(R^2)_2)_3$ 、 $(R^2)N(C(R^2)_2C(R^2)_2)^+$ 、 P 、 $P(R^2)^+$ 、 PO 、 PS 、 PSe 、 PTe 、 $P(O)_3$ 、 $PO(O)_3$ 、 $P(OC(R^2)_2)_3$ 、 $PO(OC(R^2)_2)_3$ 、 $P(C(R^2)_2)_3$ 、 $P(R^2)(C(R^2)_2)_3^+$ 、 $PO(C(R^2)_2)_3$ 、 $P(C(R^2)_2C(R^2)_2)_3$ 、 $P(R^2)(C(R^2)_2C(R^2)_2)_3^+$ 、 $PO(C(R^2)_2C(R^2)_2)_3$ 、 S^+ 、 $S(C(R^2)_2)_3^+$ 、 $S(C(R^2)_2C(R^2)_2)_3^+$ 、または式(237)、(238)、(239)または(240)の単位からなる群から選択される

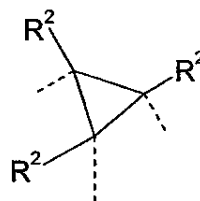
【化32】



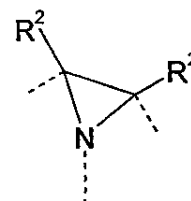
式(237)



式(238)



式(239)



式(240)

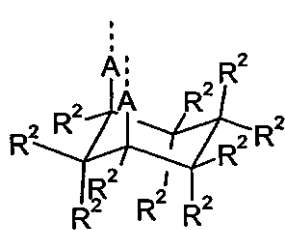
【0057】

(ここで、それぞれの場合における破線で示される結合は、部分配位子LまたはL'への結合を示し、Aは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、単結合、O、S、S(=O)、S(=O)₂、NR²、PR²、P(=O)R²、P(=NR²)、C(R²)₂、C(=O)、C(=NR²)、C(=C(R²)₂)、Si(R²)₂またはBR²からなる群から選択される)。使用された他の記号は、上述された意味を有する。

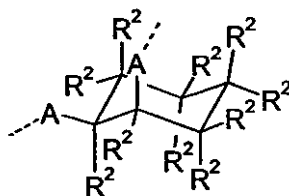
【0058】

Zが、二価の基であり、即ち、2個の配位子Lを互いにまたは1個の配位子LをL'に橋架けする場合、Zは、好ましくは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、BR²、B(R²)₂⁻、C(R²)₂、C(=O)、Si(R²)₂、NR²、PR²、P(R²)₂⁺、P(=O)(R²)、P(=S)(R²)、AsR²、As(=O)(R²)、As(=S)(R²)、O、S、Se、または式(241)～(249)の単位からなる群から選択される

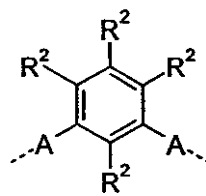
【化 3 3】



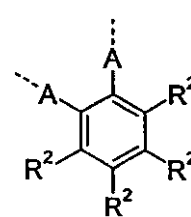
式(241)



式(242)

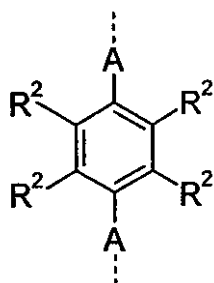


式(243)

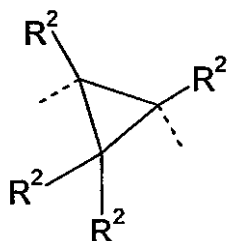


式(244)

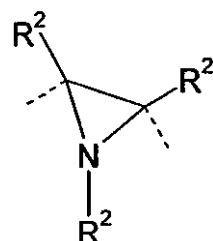
10



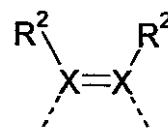
式(245)



式(246)

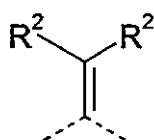


式(247)



式(248)

20



式(249)

【0059】

(ここで、それぞれの場合における破線で示される結合は、部分配位子LまたはL'への結合を示し、それぞれの場合における使用されたさらなる記号は、上述された意味を有する)。

【0060】

式(1)に出現する好ましい配位子L'は、下記に記載されている。相応じて、配位子基L'は、それらが架橋単位Zを介してLに結合している場合、選択することもできる。

【0061】

配位子L'は、好ましくは、中性、一価陰イオン性、二価陰イオン性または三価陰イオン性配位子、特に好ましくは、中性または一価陰イオン性配位子である。それらは、単座、二座、三座または四座であってもよく、好ましくは二座であり、即ち、好ましくは、2個の配位部位を有する。上記のとおり、配位子L'は、架橋基Zを介してLに結合している。

40

【0062】

好ましい中性、単座配位子L'は、一酸化炭素、一酸化窒素、シアン化アルキル、例えば、アセトニトリルなど、シアン化アリール、例えば、ベンゾニトリルなど、アルキルイソシアニド、例えば、メチルイソニトリルなど、アリールイソシアニド、例えば、ベンゾイソニトリルなど、アミン、例えば、トリメチルアミン、トリエチルアミン、モルホリンなど、ホスフィン、特にハロホスフィン、トリアルキルホスフィン、トリアリールホスフィンまたはアルキルアリールホスフィン、例えば、トリフルオロホスフィン、トリメチルホスフィン、トリシクロヘキシルホスフィン、トリーtert-ブチルホスフィン、トリ

50

フェニルホスフィン、トリス（ペンタフルオロフェニル）ホスフィンなど、亜リン酸塩、例えば、亜リン酸トリメチル、亜リン酸トリエチルなど、アルシン、例えば、トリフルオロアルシン、トリメチルアルシン、トリシクロヘキシルアルシン、トリ-*tert*-ブチルアルシン、トリフェニルアルシン、トリス（ペンタフルオロフェニル）アルシンなど、スチビン、例えば、トリフルオロスチビン、トリメチルスチビン、トリシクロヘキシルスチビン、トリ-*tert*-ブチルスチビン、トリフェニルスチビン、トリス（ペンタフルオロフェニル）スチビンなど、窒素含有複素環、例えば、ピリジン、ピリダジン、ピラジン、ピリミジン、トリアジンなど、およびカルベン、特に *Arduengo* カルベンから選択される。

【0063】

好ましい一価陰イオン性、単座配位子 L^- は、水素化物、重水素化物、ハロゲン化物 F^- 、 Cl^- 、 Br^- および I^- など、アルキルアセチリド、例えば、メチル- $C \equiv C^-$ 、*tert*-ブチル- $C \equiv C^-$ など、アリールアセチリド、例えば、フェニル- $C \equiv C^-$ など、シアン化物、シアン酸塩、イソシアネート、チオシアネート、イソチオシアネート、脂肪族または芳香族アルコレート、例えば、メタノレート、エタノレート、プロパノレート、イソプロパノレート、*tert*-ブチレート、フェノレートなど、脂肪族または芳香族チオアルコレート、例えば、メタンチオレート、エタンチオレート、プロパンチオレート、イソプロパンチオレート、*tert*-ブタンチオレート、チオフェノレートなど、アミド、例えば、ジメチルアミド、ジエチルアミド、ジイソプロピルアミド、モルホリド、カルボキシレート、例えば、アセテート、トリフルオロアセテート、プロピオネート、ベンゾエートなど、アリール基、例えば、フェニル、ナフチル、および陰イオン性、窒素含有複素環、例えば、ピロリド、イミダゾリド、ピラゾリドなどから選択される。これらの基におけるアルキル基は、好ましくは、 C_1-C_{20} アルキル基、特に好ましくは、 C_1-C_{10} アルキル基、非常に特に好ましくは、 C_1-C_4 アルキル基である。アリール基も、ヘテロアリール基を意味すると解釈される。これらの基は、上に定義されたとおりである。

【0064】

好ましい二価または三価陰イオン性配位子は、 O^{2-} 、 S^{2-} 、炭化物（これらは、 $R-C \equiv M$ の形態の配位をもたらす）、およびナイトレン（これらは、 $R-N \equiv M$ の形態の配位をもたらす）（ここで、 R は、一般的に置換基、または N^{3-} を表す）である。

【0065】

好ましい中性または一価または二価陰イオン性、二座または多座配位子 L' は、ジアミン、例えば、エチレンジアミン、 N, N, N' 、 N' -テトラメチルエチレンジアミン、プロピレンジアミン、 N, N, N' 、 N' -テトラメチルプロピレンジアミン、シス-またはトランス-ジアミノシクロヘキサン、シス-またはトランス- N, N, N' 、 N' -テトラメチルジアミノシクロヘキサンなど、イミン、例えば、2-[1-(フェニルイミノ)エチル]ピリジン、2-[1-(2-メチルフェニルイミノ)エチル]ピリジン、2-[1-(2, 6-ジイソプロピルフェニルイミノ)エチル]ピリジン、2-[1-(メチルイミノ)エチル]ピリジン、2-[1-(エチルイミノ)エチル]ピリジン、2-[1-(イソプロピルイミノ)エチル]ピリジン、2-[1-(*tert*-ブチルイミノ)エチル]ピリジンなど、ジイミン、例えば、1, 2-ビス(メチルイミノ)エタン、1, 2-ビス(エチルイミノ)エタン、1, 2-ビス(イソプロピルイミノ)エタン、1, 2-ビス(*tert*-ブチルイミノ)エタン、2, 3-ビス(メチルイミノ)ブタン、2, 3-ビス(エチルイミノ)ブタン、2, 3-ビス(イソプロピルイミノ)ブタン、2, 3-ビス(*tert*-ブチルイミノ)ブタン、1, 2-ビス(フェニルイミノ)エタン、1, 2-ビス(2-メチルフェニルイミノ)エタン、1, 2-ビス(2, 6-ジイソプロピルフェニルイミノ)エタン、1, 2-ビス(2, 6-ジ-*tert*-ブチルフェニルイミノ)エタン、2, 3-ビス(フェニルイミノ)ブタン、2, 3-ビス(2-メチルフェニルイミノ)ブタン、2, 3-ビス(2, 6-ジイソプロピルフェニルイミノ)ブタン、2, 3-ビス(2, 6-ジ-*tert*-ブチルフェニルイミノ)ブタンなど、2個の窒素原子を含む複素環、例えば、2, 2'-ビピリジン、*o*-フェナントロリンなど、ジホスフ

ィン、例えば、ビスジフェニルホスフィノメタン、ビスジフェニルホスフィノエタン、ビス（ジフェニルホスフィノ）プロパン、ビス（ジフェニルホスフィノ）ブタン、ビス（ジメチルホスフィノ）メタン、ビス（ジメチルホスフィノ）エタン、ビス（ジメチルホスフィノ）プロパン、ビス（ジエチルホスフィノ）メタン、ビス（ジエチルホスフィノ）エタン、ビス（ジエチルホスフィノ）プロパン、ビス（ジ-tert-ブチルホスフィノ）メタン、ビス（ジ-tert-ブチルホスフィノ）エタン、ビス（tert-ブチルホスフィノ）プロパンなど、1, 3-ジケトンから誘導される1, 3-ジケトネート、例えば、アセチルアセトン、ベンゾイルアセトン、1, 5-ジフェニルアセチルアセトン、ジベンゾイルメタン、ビス（1, 1, 1-トリフルオロアセチル）メタンなど、3-ケトエステルから誘導される3-ケトネート、例えば、エチルアセトアセテートなど、アミノカルボン酸から誘導されるカルボキシレート、例えば、ピリジン-2-カルボン酸、キノリン-2-カルボン酸、グリシン、N, N-ジメチルグリシン、アラニン、N, N-ジメチルアミノアラニンなど、サリチルイミンから誘導されるサリチルイミネート、例えば、メチルサリチルイミン、エチルサリチルイミン、フェニルサリチルイミンなど、ジアルコールから誘導されるジアルコレート、例えば、エチレングリコール、1, 3-プロピレングリコールなど、およびジチオールから誘導されるジチオレート、例えば、1, 2-エチレンジチオール、1, 3-プロピレンジチオールなどから選択される。

10

【0066】

好ましい三座配位子は、窒素含有複素環のホウ酸塩、例えば、テトラキス（1-イミダゾリル）ボレートおよびテトラキス（1-ピラゾリル）ボレートなどである。

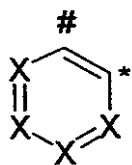
20

【0067】

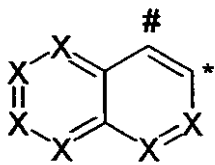
さらに、特に好ましいのは、少なくとも1個の金属-炭素結合を有するシクロメタル化5員または6員環、特にシクロメタル化5員環を、金属と形成する二座、一価陰イオン性配位子L'である。これらは、特に、有機エレクトロルミネッセンスデバイス用のリン光金属錯体の分野において一般的に使用される配位子、即ち、フェニルピリジン、ナフチルピリジン、フェニルキノリン、フェニルイソキノリンなどのタイプ（これらのそれぞれは、1種以上のラジカルR¹からR⁷で置換されていてもよい）の配位子である。非常に多数のこのタイプの配位子が、リン光エレクトロルミネッセンスデバイスの分野における当業者に知られており、当業者は、式（1）の化合物用の配位子L'として、進歩性のない状態で、このタイプのさらなる配位子を選択することができよう。一般に、以下の式（250）～（277）で表された2種の基の組合せは、この目的に特に好適であり、ここで、一つの基は、中性窒素原子またはカルベン原子を介して結合しており、他の基は、負に帯電した炭素原子または負に帯電した窒素原子を介して結合している。配位子L'は、それぞれの場合において#で示された位置で互いに結合するこれらの基によって式（250）～（277）の基から形成することができる。基が金属に配位する位置は*で示されている。これらの基は、1個以上の架橋単位Zを介して配位子Lに結合してもよい。

30

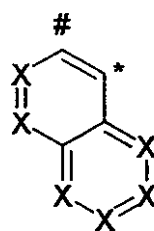
【化 3 4】



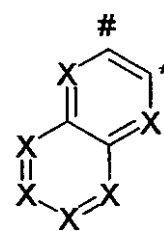
式(250)



式(251)

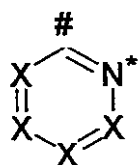


式(252)

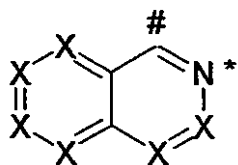


式(253)

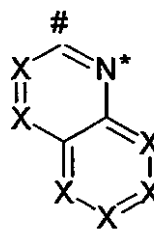
10



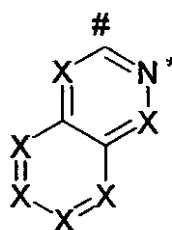
式(254)



式(255)

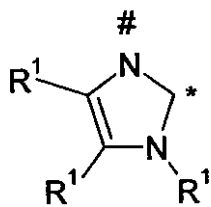


式(256)

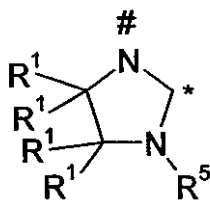


式(257)

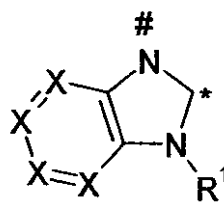
20



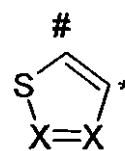
式(258)



式(259)

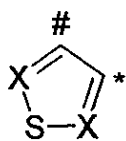


式(260)

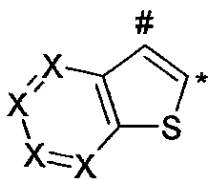


式(261)

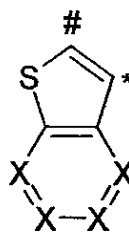
【化 3 5】



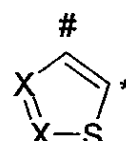
式(262)



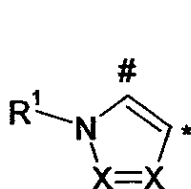
式(263)



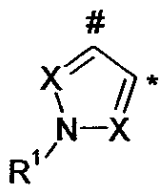
式(263)



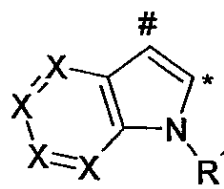
式(265)



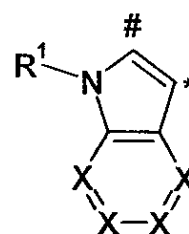
式(266)



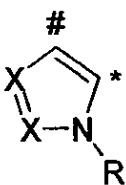
式(267)



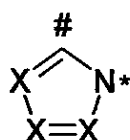
式(268)



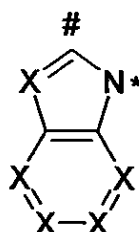
式(269)



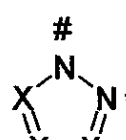
式(270)



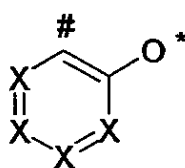
式(271)



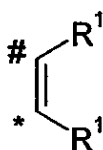
式(272)



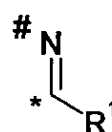
式(273)



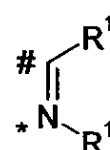
式(274)



式(275)



式(276)



式(277)

【0068】

式中、使用された記号は、上述されたものと同じ意味を有し、好ましくはそれぞれの基において最大3個の記号XがNを表し、特に好ましくはそれぞれの基において最大2個の記号XがNを表し、非常に特に好ましくはそれぞれの基において最大1個の記号XがNを表す。特別に好ましくは、全ての記号Xが、出現する毎に同一であるかまたは異なり、C R¹を表す。

【0069】

本発明の一つの特に好ましい態様において、式(250)～(277)の配位子L'の2個のフラグメントが、フラグメントの少なくとも一つが、位置*においてヘテロ原子を含むように位置#を介して互いに結合している。

【0070】

本発明の一つの非常に特に好ましい態様において、配位子L'は、式(250)～(277)のリストからのヘテロ原子を含まない厳密に1個のフラグメントおよび式(250

10

20

30

40

50

) ~ (277) を有するフラグメントのリストからのヘテロ原子、好ましくは窒素原子を含む厳密に 1 個のフラグメントからなる。

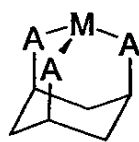
【0071】

同様に好ましい配位子 L' は、 η^5 -シクロペンタジエニル、 η^5 -ペンタメチルシクロペンタジエニル、 η^6 -ベンゼンおよび η^7 -シクロヘプタトリエニル（これらのそれぞれは、1 個以上のラジカル R^1 で置換されていてもよい）である。

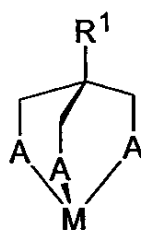
【0072】

同様に好ましい配位子 L' は、特に式 (278) の 1, 3, 5-シス-シクロヘキサン誘導体、特に式 (279) の 1, 1, 1-トリ(メチレン)メタン誘導体、ならびに、特に式 (280) および (281) の 1, 1, 1-三置換メタンである

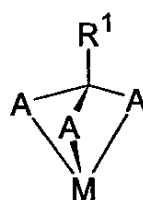
【化36】



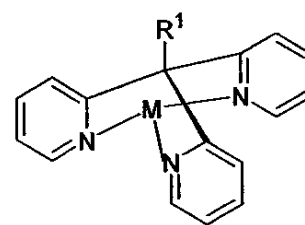
式(278)



式(279)



式(280)



式(281)

【0073】

(ここで、式のそれぞれにおいて、金属 M への配位が描かれており、 R^1 は、上述された意味を有し、 A は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 O^- 、 S^- 、 COO^- 、 $P(R^1)_2$ または $N(R^1)_2$ を表す)。

【0074】

上述された構造における好ましいラジカル R^1 は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 H 、 D 、 F 、 Br 、 $N(R^2)_2$ 、 CN 、 $B(OR^2)_2$ 、 $C(=O)R^2$ 、 $P(=O)(R^2)_2$ 、1 ~ 10 個の C 原子を有する直鎖アルキル基または 2 ~ 10 個の C 原子を有する直鎖アルケニルまたはアルキニル基または 3 ~ 10 個の C 原子を有する分枝または環状アルキル、アルケニルまたはアルキニル基（これらのそれぞれは、1 個以上のラジカル R^2 （ここで、1 個以上の H 原子は、 F によって置きかえられていてもよい）または 5 ~ 14 個の芳香族環原子を有する芳香族またはヘテロ芳香族環系（これは、それぞれの場合において、1 個以上のラジカル R^2 で置換されていてもよい）で置換されていてもよい）からなる群から選択され；複数のラジカル R^1 は、単環または多環式、脂肪族、芳香族および／またはベンゾ縮合環系を、互いに形成してもよい。特に好ましいラジカル R^1 は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 H 、 F 、 Br 、 CN 、 $B(OR^2)_2$ 、1 ~ 6 個の C 原子を有する直鎖アルキル基、特にメチル、または 3 ~ 10 個の C 原子を有する分枝または環状アルキル基、特にイソプロピルまたは *tert*-ブチル（ここで、1 個以上の H 原子は F で置きかえられていてもよい）、または 5 ~ 12 個の芳香族環原子を有する芳香族またはヘテロ芳香族環系（これは、それぞれの場合において、1 個以上のラジカル R^2 で置換されていてもよい）からなる群から選択され；複数のラジカル R^1 は、単環または多環式、脂肪族、芳香族および／またはベンゾ縮合環系を、互いに形成してもよい。

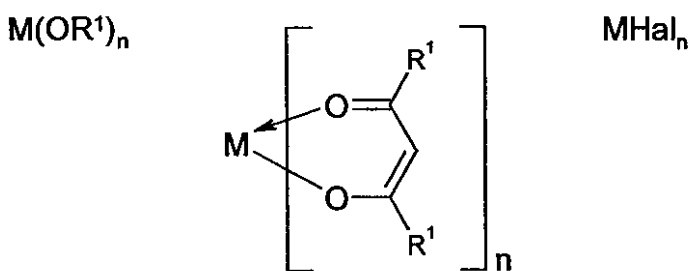
【0075】

本発明による金属錯体は、原理上は、種々の方法で調製することができる。しかし、下記に記載された方法は、とりわけ好適であることが判明した。

【0076】

従って、本発明は、さらに、対応する遊離配位子と、式 (282) の金属アルコキシド、式 (283) の金属ケトケトナートまたは式 (284) の金属ハロゲン化物との反応に

よる式(1)の金属錯体化合物の調製の方法に関する
【化37】



式(282)

式(283)

式(284)

10

【0077】

(ここで、記号M、nおよびR¹は、上記の意味を有し、Hal = F、Cl、BrまたはIである)。

【0078】

アルコレートおよび／またはハロゲン化物および／またはヒドロキシラジカルならびにケトケトナートラジカルを持っている金属化合物、特にイリジウム化合物を使用することも可能である。これらの化合物は、帯電していてもよい。出発材料として特に好適である対応するイリジウム化合物は、WO 2004/085449に開示されている。[IrCl₂(acac)₂]⁻、例えば、Na[IrCl₂(acac)₂]は、特に好適である。

20

【0079】

錯体は、好ましくは、WO 2002/060910およびWO 2004/085449に記載されたように合成される。ヘテロレプティック錯体も、例えば、WO 2005/042548に従って合成することができる。例えば、熱的に、光化学的および／またはマイクロ波照射によって合成を行うこともできる。

30

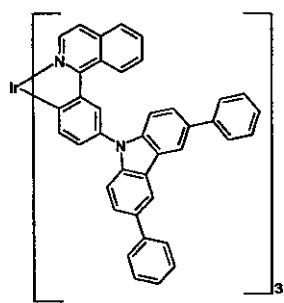
【0080】

これらの方法は、本発明による式(1)の化合物が、高純度で、好ましくは99% (¹H-NMRおよび／またはHPLCを用いて測定して)を上回って得られることを可能にする。

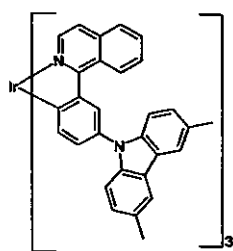
【0081】

本明細書で説明された合成方法は、とりわけ、以下に描かれた本発明による式(285)～(383)の化合物の調製を可能にする。

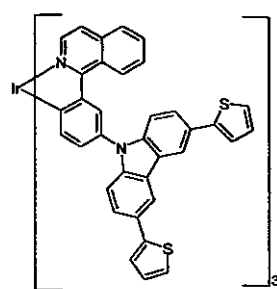
【化 3 8】



式(285)

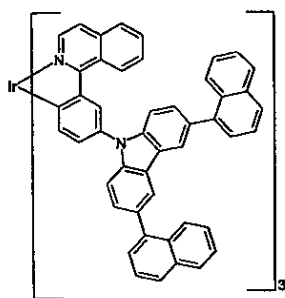


式(286)

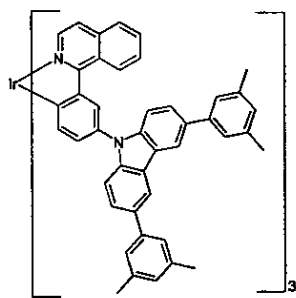


式(287)

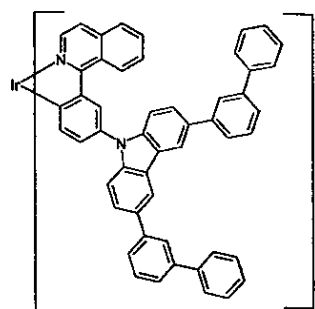
10



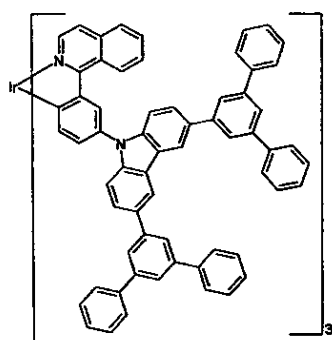
式(288)



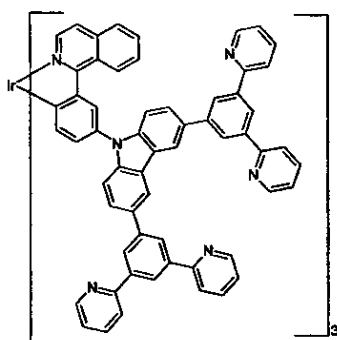
式(289)



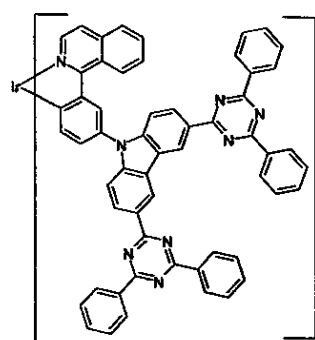
式(290)



式(291)

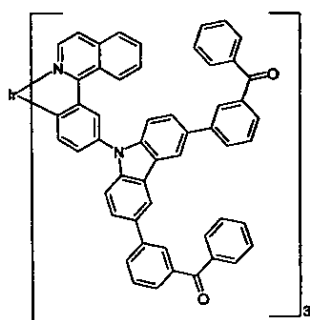


式(292)

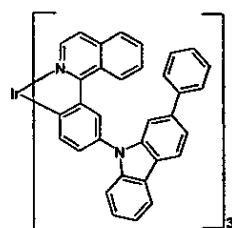


式(293)

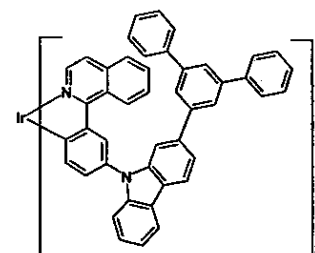
20



式(294)

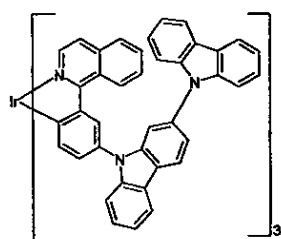


式(295)

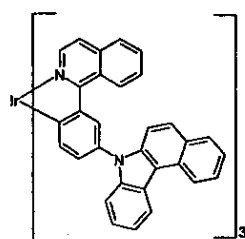


式(296)

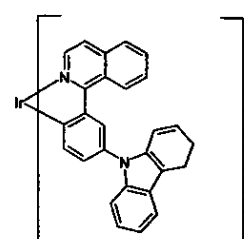
30



式(297)



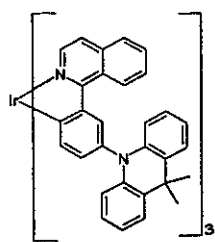
式(298)



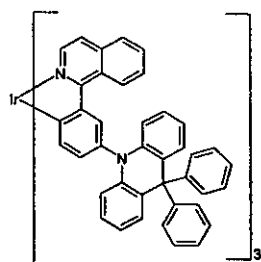
式(299)

40

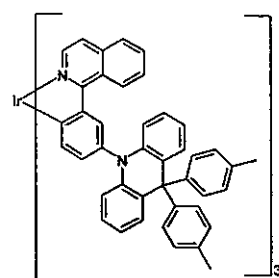
【化 4 0】



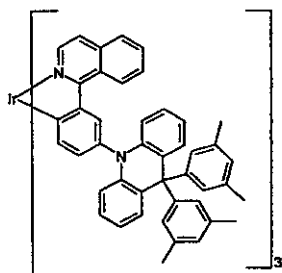
式(300)



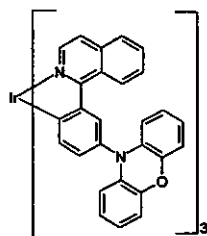
式(301)



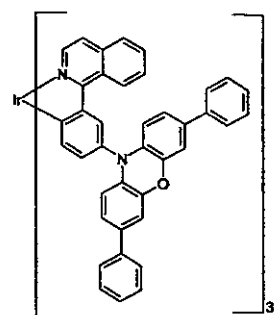
式(302)



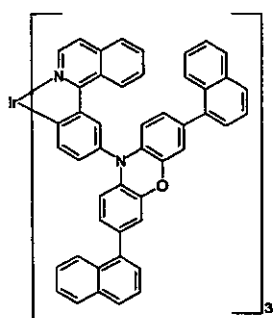
式(303)



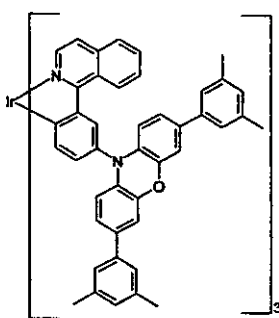
式(304)



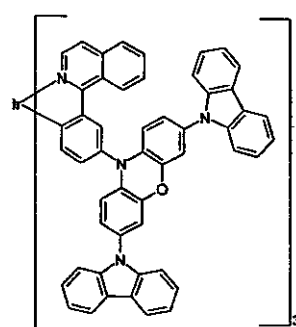
式(305)



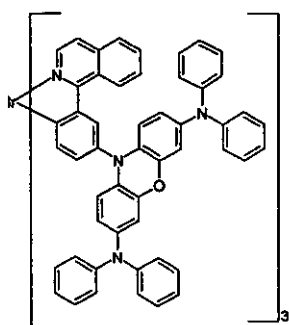
式(306)



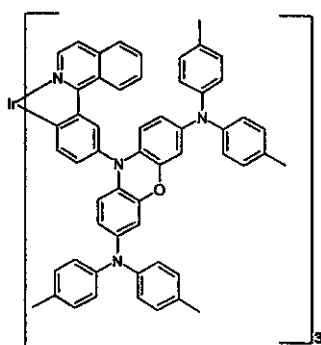
式(307)



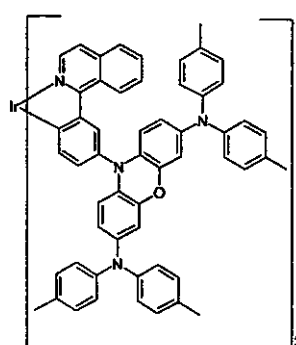
式(308)



式(309)



式(310)



式(311)

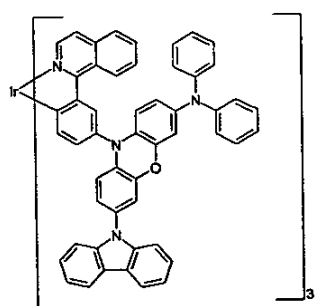
10

20

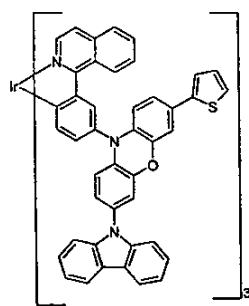
30

40

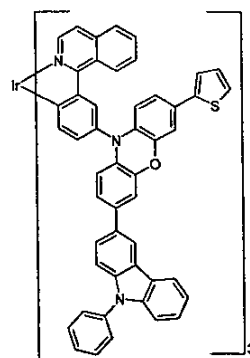
【化 4 1】



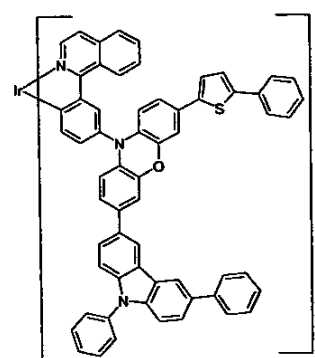
式(312)



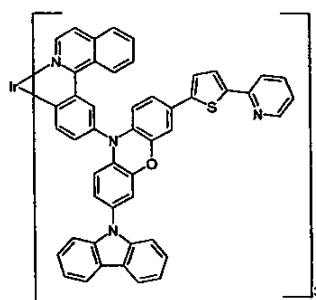
式(313)



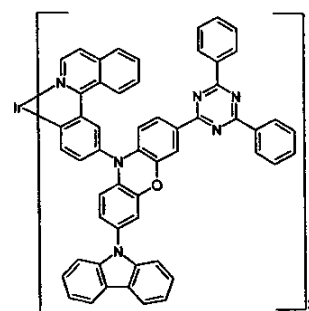
式(314)



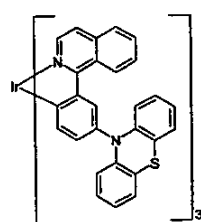
式(315)



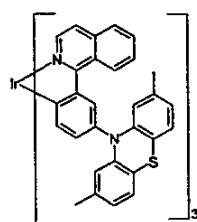
式(316)



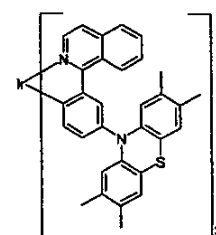
式(317)



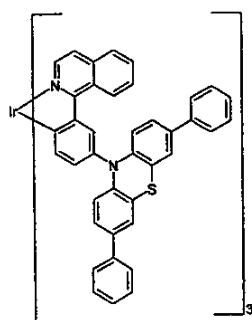
式(318)



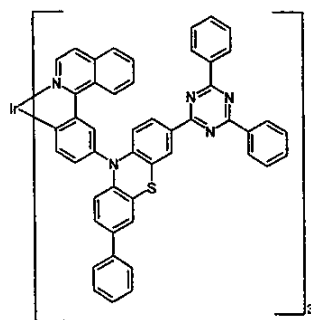
式(319)



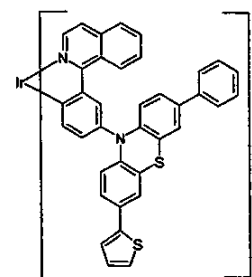
式(320)



式(321)



式(322)



式(323)

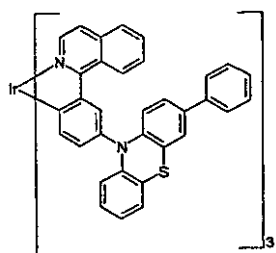
10

20

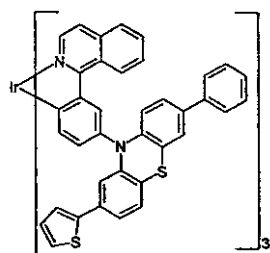
30

40

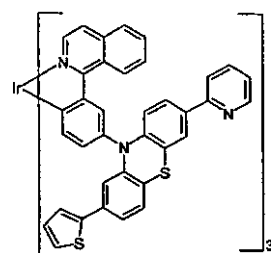
【化 4 2】



式(324)

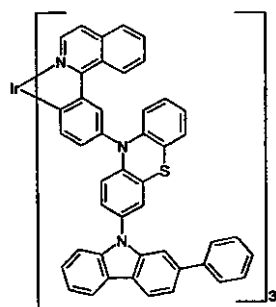


式(325)

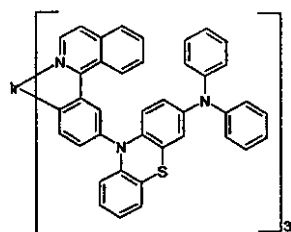


式(326)

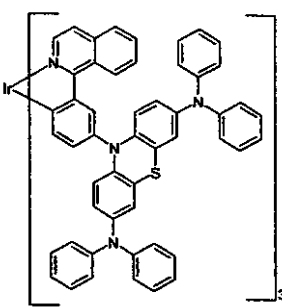
10



式(327)

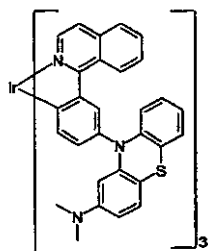


式(328)

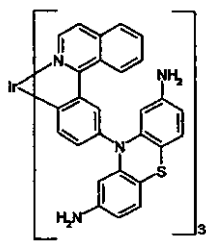


式(329)

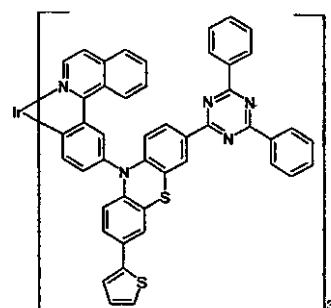
20



式(330)

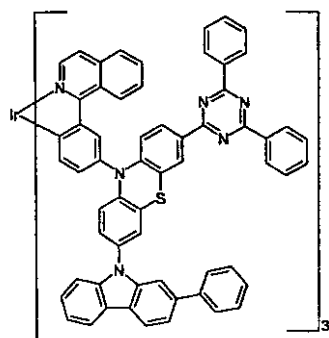


式(331)

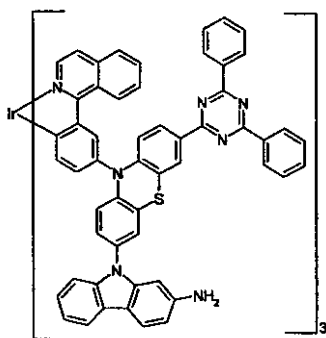


式(332)

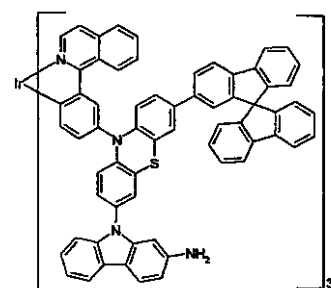
30



式(333)



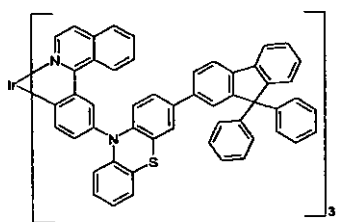
式(334)



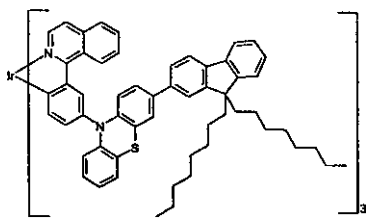
式(335)

40

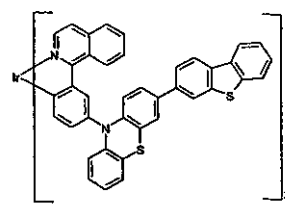
【化 4 3】



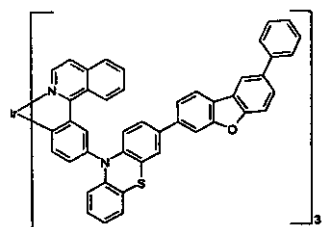
式(336)



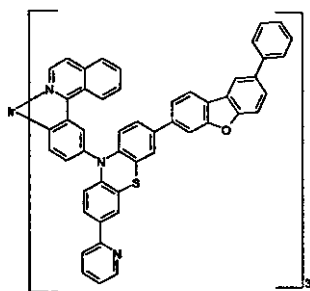
式(337)



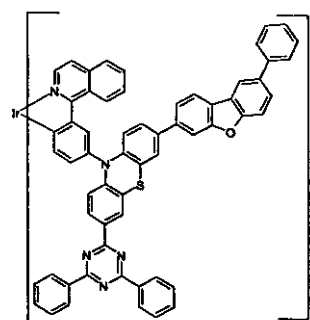
式(338)



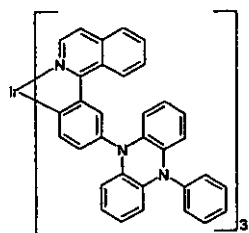
式(339)



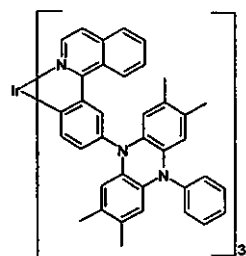
式(340)



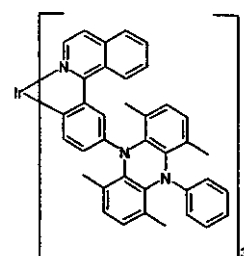
式(341)



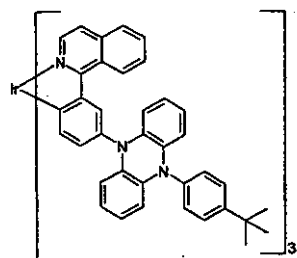
式(342)



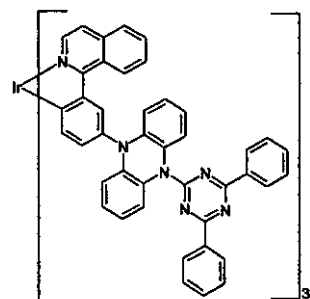
式(343)



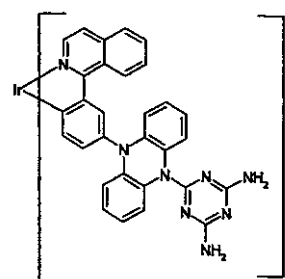
式(344)



式(345)



式(346)



式(347)

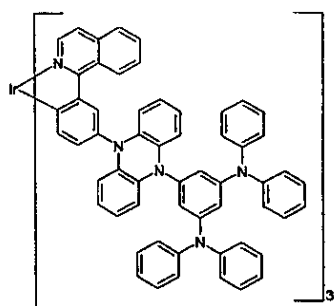
10

20

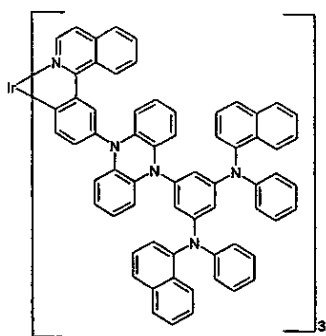
30

40

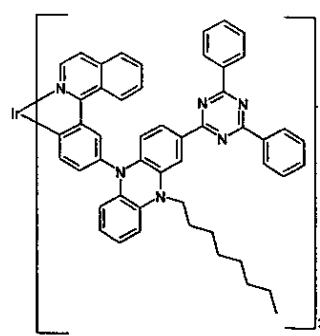
【化 4 4】



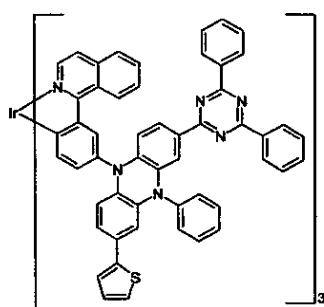
式(348)



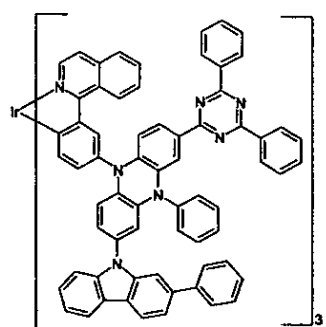
式(349)



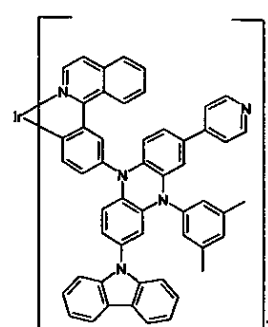
式(350)



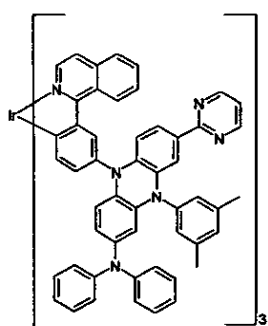
式(351)



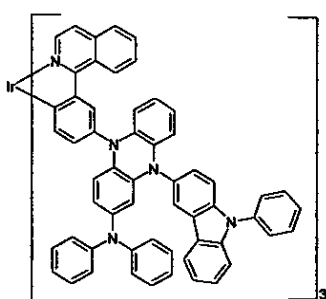
式(352)



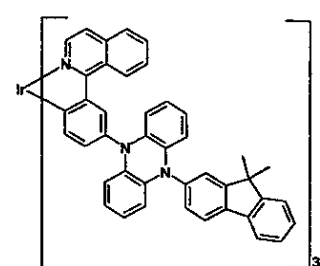
式(353)



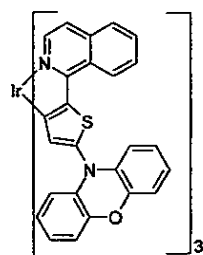
式(354)



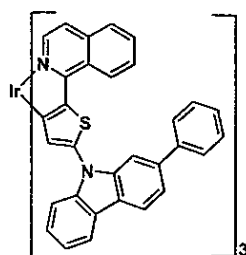
式(355)



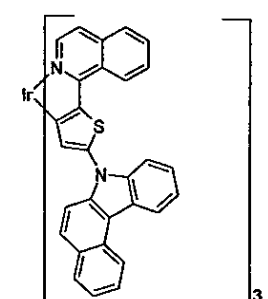
式(356)



式(357)



式(358)



式(359)

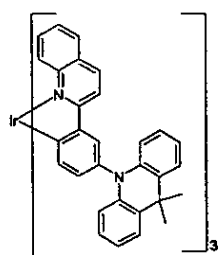
10

20

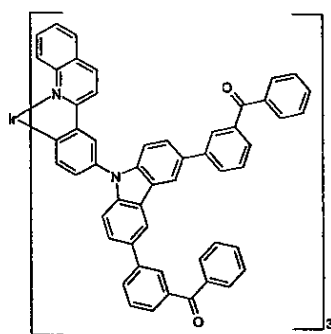
30

40

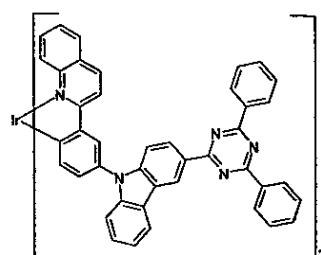
【化 4 5】



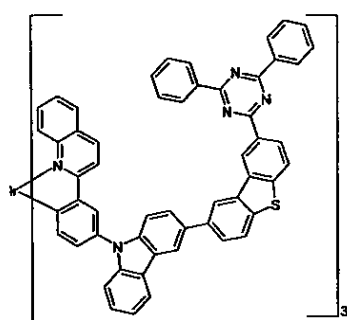
式(360)



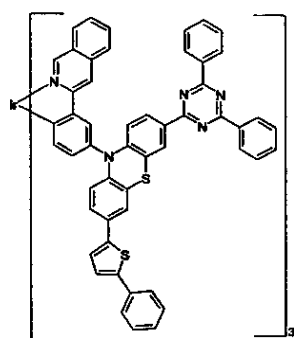
式(361)



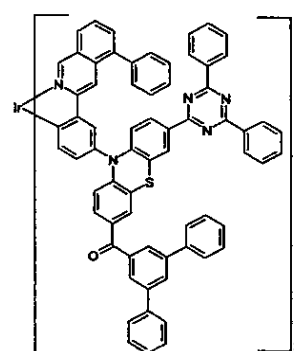
式(362)



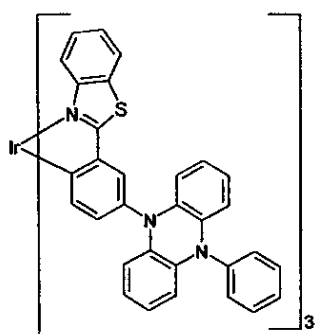
式(363)



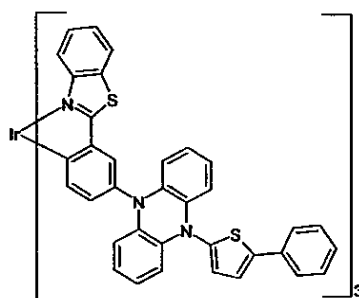
式(364)



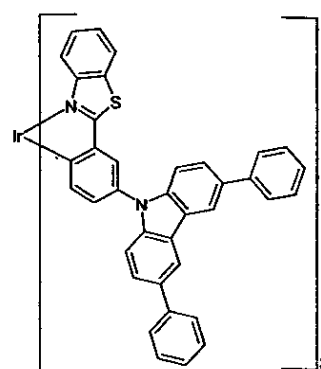
式(365)



式(366)



式(367)



式(368)

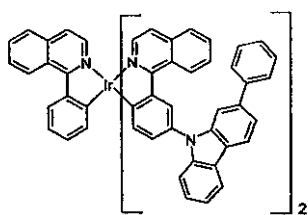
10

20

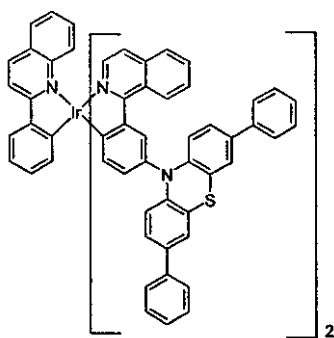
30

40

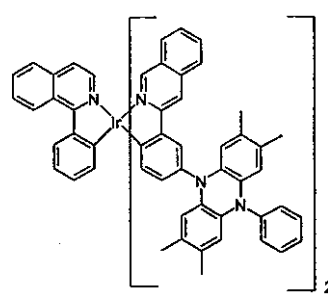
【化 4 6】



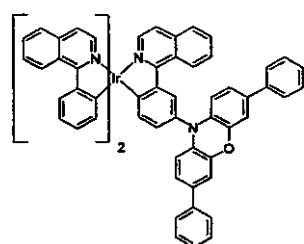
式(369)



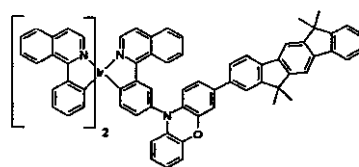
式(370)



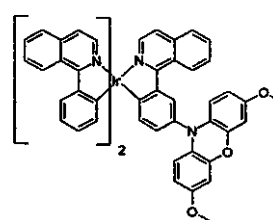
式(371)



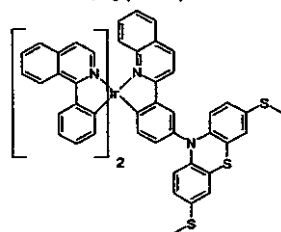
式(372)



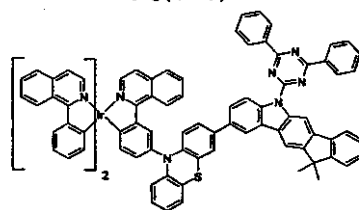
式(373)



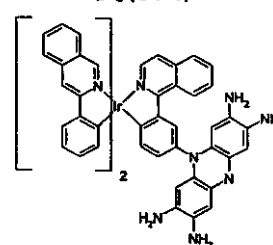
式(374)



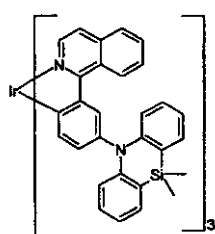
式(375)



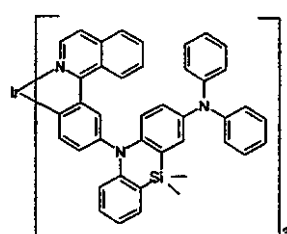
式(376)



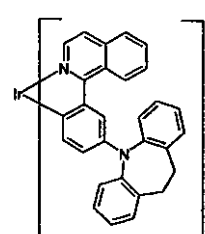
式(377)



式(378)



式(379)



式(380)

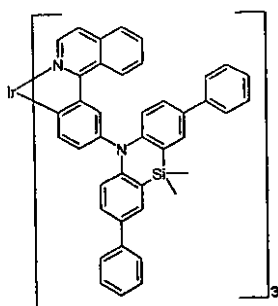
10

20

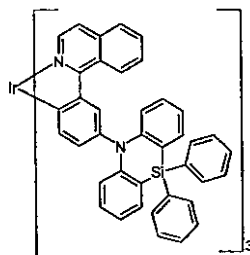
30

40

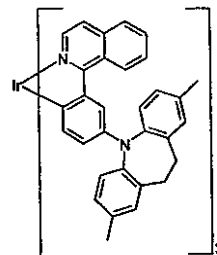
【化 4 7】



式(381)



式(382)



式(383)

10

【0082】

上記の式(1)の錯体および上述された好ましい態様は、電子デバイスにおける活性成分として使用することができる。電子デバイスは、アノード、カソードおよび少なくとも一つの層(ここで、この層は、少なくとも1種の有機または有機金属化合物を含む)を含むデバイスを意味すると解釈される。従って、本発明による電子デバイスは、アノード、カソードおよび上に示された式(1)の少なくとも1種の化合物を含む少なくとも一つの層を含む。本明細書で好ましい電子デバイスは、有機エレクトロルミネッセンスデバイス(OLED、PLED)、有機集積回路(O-IC)、有機電界効果トランジスタ(O-FET)、有機薄膜トランジスタ(O-TFT)、有機発光トランジスタ(O-LET: organic light-emitting transistor)、有機太陽電池(O-SC)、有機光学検出器、有機感光体、有機電場消光デバイス(O-FQD: organic field-quench device)、発光電気化学セル(LEC: light-emitting electrochemical cell)または有機レーザーダイオード(O-レーザー)からなる群から選択され、少なくとも一つの層に上に示された式(1)の少なくとも1種の化合物を含む。特に好ましいのは、有機エレクトロルミネッセンスデバイスである。活性成分は、一般的に、アノードおよびカソードの間に導入される有機または無機材料、例えば、電荷注入、電荷輸送または電荷遮断材料であるが、特に発光材料およびマトリックス材料である。本発明による化合物は、有機エレクトロルミネッセンスデバイスにおける発光材料として特に良好な性質を示す。従って、有機エレクトロルミネッセンスデバイスは、本発明の好ましい一態様である。

20

30

【0083】

有機エレクトロルミネッセンスデバイスは、カソード、アノードおよび少なくとも一つの発光層を含む。これらの層の他に、それは、さらなる層、それぞれの場合において、例えば、一つ以上の正孔注入層、正孔輸送層、正孔遮断層、電子輸送層、電子注入層、励起子遮断層、電荷発生層および／または有機または無機p/n接合を含んでもよい。例えば、エレクトロルミネセントデバイスにおける励起子遮断機能を有し、かつ／または電荷バランスを制御する中間層が、二つの発光層の間に導入されることも可能である。しかし、これらの層のそれぞれは、必ずしも存在しなくてもよいことは指摘されるべきである。有機エレクトロルミネッセンスデバイスは、一つの発光層または複数の発光層を含んでもよい。複数の発光層が存在する場合、これらは、好ましくは、全体として白色発光をもたらす全体で380nm〜750nmの複数の発光極大を有し、即ち、蛍光を発するかリン光を発することができる種々の発光化合物が、発光層中に使用される。特に好ましいのは、三層が青色、緑色および橙色または赤色の発光を示す三層システム(基本構造については、例えばWO 2005/011013を参照されたい)、または四つ以上の発光層を含むシステムである。

40

【0084】

本発明の好ましい一態様において、有機エレクトロルミネッセンスデバイスは、一つ以

50

上の発光層中に発光化合物として式(1)の化合物または上述された好ましい態様を含む。

【0085】

式(1)の化合物が、発光層中に発光化合物として使用される場合、それは、好ましくは、1種以上のマトリックス材料と混合して使用される。式(1)の化合物およびマトリックス材料の混合物は、発光体およびマトリックス材料を含む混合物全体に対して、0.1～99重量%、好ましくは0.5～40重量%、特に好ましくは1～30重量%、とりわけ2～25重量%の式(1)の化合物を含む。相応じて、混合物は、発光体およびマトリックス材料を含む混合物全体に対して、99～1重量%、好ましくは98～60重量%、特に好ましくは97～70重量%、とりわけ95～75重量%のマトリックス材料を含む。

10

【0086】

本発明による化合物に好適なマトリックス材料は、例えば、WO 2004/013080、WO 2004/093207、WO 2006/005627または出願DE 102008033943.1によるケトン、ホスフィンオキシド、スルホキシドおよびスルホン、トリアリールアミン、カルバゾール誘導体、例えばCBP(N,N-ビスカルバゾリルビフェニル)またはWO 2005/039246、US 2005/0069729、JP 2004/288381、EP 1205527またはWO 2008/086851に開示されたカルバゾール誘導体、例えば、WO 2007/063754またはWO 2008/056746によるインドロカルバゾール誘導体、例えば、出願DE 102009023155.2およびDE 102009031021.5によるインデノカルバゾール誘導体、例えば、EP 1617710、EP 1617711、EP 1731584、JP 2005/347160によるアザカルバゾール、例えば、WO 2007/137725による双極性マトリックス材料、例えば、WO 2005/111172によるシラン、例えば、WO 2006/117052によるアザボロールまたはボロン酸エステル、例えば、出願DE 102008036982.9、WO 2007/063754またはWO 2008/056746によるトリアジン誘導体、例えば、EP 652273またはWO 09/062578による亜鉛錯体、例えば、出願DE 102008056688.8によるジアザーまたはテトラアザシロール誘導体、あるいは、例えば、出願DE 102009022858.6によるジアザホスホール誘導体である。

20

30

【0087】

混合物として複数の異なるマトリックス材料、特に少なくとも1種の電子伝導マトリックス材料および少なくとも1種の正孔伝導マトリックス材料を使用することが好ましい場合もある。好ましい一つの組合せは、例えば、本発明による金属錯体用の混合マトリックスとしての芳香族ケトンまたはトリアジンのトリアリールアミン誘導体またはカルバゾール誘導体との使用である。同様に、好ましいのは、例えば、出願DE 102009014513.3に開示された、正孔または電子輸送材料の、正孔輸送にも電子輸送にも関与しない材料との混合物である。

【0088】

本発明の一つのさらに好ましい態様において、本発明による化合物は、1種以上のさらなる発光体との混合物中に使用することができる。本明細書で非常に特に好ましいのは、本発明による化合物の1種以上の蛍光発光体との混合物である。好ましいのは、さらに、1種以上のリン光発光体との混合物である。蛍光発光体は、主として励起一重項状態から発光するが、一方、リン光発光体は、主として高スピン状態(例えば、三重項および四重項)から発光する。本発明の目的のために、有機遷移金属の錯体がリン光発光体として選択される。さらなる発光体は、好ましくは有機化合物である。

40

【0089】

本発明の一つの特に好ましい態様において、本発明による化合物は、3種のさらなる発光体と混合され、一つの特に好ましい態様において、2種のさらなる発光体と、特別に非

50

常に好ましい態様において、1種のさらなる発光体と混合される。

【0090】

本発明の一つのさらに好ましい態様において、発光体混合物は、3種の、特に好ましくは2種の、非常に特に好ましくは1種の本発明による化合物を含む。

【0091】

本発明の一つの特に好ましい態様において、発光体混合物は、厳密に本発明による化合物の1種および厳密に1種のさらなる発光体を含む。

【0092】

混合物の少なくとも1種の発光体の吸収スペクトルおよび少なくとも1種の他の発光体の発光スペクトルが、重複して、発光体の間のエネルギー伝達（二重ドーピング）を簡単にすることが、本発明の目的のためにさらに好ましい。本明細書でエネルギー伝達は、種々のメカニズムで起こり得る。これの非限定的な例は、F o r s t e rまたはD e x t e rエネルギー移動である。

10

【0093】

記載された発光体混合物は、好ましくは、両方とも赤色光を発光する少なくとも2種の発光体を含む。好ましいのは、さらに、両方とも緑色光を発光する少なくとも2種の発光体を含む発光体混合物である。好ましいのは、さらに、赤色光を発光する少なくとも1種の発光体および緑色光を発光する少なくとも1種の発光体を含む発光体混合物である。

【0094】

カソードは、好ましくは、低い仕事関数を有する金属、種々の金属（例えば、アルカリ土類金属、アルカリ金属、主族金属またはランタノイドなど（例えばC a、B a、M g、A l、I n、M g、Y b、S m、など））を含む金属合金または多層構造を含む。同様に好適なのは、アルカリ金属またはアルカリ土類金属および銀の合金、例えばマグネシウムおよび銀の合金である。多層構造の場合、比較的高い仕事関数を有するさらなる金属、例えば、銀なども、前記金属に加えて使用してもよく、この場合、金属の組合せ、例えば、C a／A gまたはB a／A gなどが一般的に使用される。金属カソードおよび有機半導体の間に高誘電率を有する材料の薄い中間層を導入することも好ましい場合がある。この目的に適するのは、例えば、アルカリ金属またはアルカリ土類金属フッ化物のみならず、対応する酸化物または炭酸塩（例えばL i F、L i₂O、B a F₂、M g O、N a F、C s F、C s₂C O₃、など）である。この層の層厚さは、好ましくは0.5～5nmである。

20

30

【0095】

アノードは、好ましくは、高い仕事関数を有する材料を含む。アノードは、好ましくは、真空準位に対して4.5eVより大きい仕事関数を有する。この目的に適するのは、一方では、高い酸化還元電位を有する金属、例えば、A g、P tまたはA uなどである。他方では、金属／金属酸化物電極（例えばA l／N i／N i O_x、A l／P t O_x）も好ましい場合がある。いくつかの用途については、有機材料（O－S C）の照射または光のカップリングアウト（coupling-out）（O L E D／P L E D、O－レーザー）のいずれかを可能にするために、電極の少なくとも一つは、透明でなければならない。一つの好ましい構造は、透明なアノードを使用する。本明細書で好ましいアノード材料は、導電性混合金属酸化物である。特に好ましいのは、インジウムスズ酸化物（I T O）またはインジウム亜鉛酸化物（I Z O）である。好ましいのは、さらに、導電性ドーパ有機材料、特に導電性ドーパポリマーである。

40

【0096】

一般に、従来技術による層に使用されるあらゆる材料を、さらなる層に使用することができ、当業者は、これらの材料を、発明のステップを用いずに電子デバイスにおいて本発明による材料と組み合わせることができよう。

【0097】

このタイプのデバイスの寿命は、水および／または空気の下で劇的に短縮化されるため、デバイスは、（用途に応じて）相応じて構造化され、接触子が供給され、最後に密封される。

50

【0098】

好ましいのは、さらに、一つ以上の層が、昇華プロセス（このプロセスにおいて、材料は、通常 10^{-5} mbar 未満、好ましくは 10^{-6} mbar 未満の初期圧力において真空昇華装置中で蒸着される）を用いて付着されることを特徴とする有機エレクトロルミネッセンスデバイスである。初期圧力が、さらに低い、例えば、 10^{-7} mbar 未満であることも可能である。

【0099】

同様に好ましいのは、一つ以上の層が、OVPD（有機気相蒸着：organic vapour phase deposition）プロセスを用いてまたはキャリアガス昇華（ここで、材料は 10^{-5} mbar ~ 1 bar の圧力において付着される）を用いて付着されることを特徴とする有機エレクトロルミネッセンスデバイスである。このプロセスの特殊な場合は、OVJP（有機気相ジェット印刷：organic vapour jet printing）プロセス（ここで、材料は、ノズルを通して直接付着され、構造化される）である（例えば、M. S. Arnold ら、Appl. Phys. Lett. 2008、92、053301）。

10

【0100】

好ましいのは、さらに、一つ以上の層が、例えば、スピンコーティングによって、または任意の所望の印刷法、例えば、スクリーン印刷、フレキソ印刷またはオフセット印刷など、しかし、特に好ましくはLITI（光誘起熱画像化、熱転写印刷）またはインクジェット印刷によって溶液から生成されることを特徴とする有機エレクトロルミネッセンスデバイスである。本発明による式（1）の化合物は、有機溶媒中における非常に良好な溶解性を有するので、それらは、溶液からの処理に特に好適である。

20

【0101】

有機エレクトロルミネッセンスデバイスは、同様に、溶液から一つ以上の層を付着し、気相堆積法によって一つ以上の他の層を付着することによってハイブリッドシステムとして形成され得る。従って、例えば、溶液から式（1）の化合物およびマトリックス材料を含む発光層を付着し、真空気相堆積法によって上に正孔遮断層および／または電子輸送層を付着することが可能である。

【0102】

これらのプロセスは、当業者には一般的に知られており、問題なく当業者によって式（1）の化合物または上述された好ましい態様を含む有機エレクトロルミネッセンスデバイスに適用され得る。

30

【0103】

溶液からの処理については、式（1）の化合物の溶液または配合物が必要である。2種以上の溶媒の混合物を使用することも好ましい場合がある。好適な好ましい溶媒は、例えば、トルエン、アニソール、*o*-、*m*-または*p*-キシレン、メチルベンゾエート、ジメチルアニソール、メシチレン、テトラリン、ペラトロール、THF、メチルーTHF、THP、クロロベンゼン、ジオキサン、またはこれらの溶媒の混合物である。

【0104】

従って、本発明は、さらに、式（1）の少なくとも1種の化合物と、1種以上の溶媒、特に有機溶媒とを含む溶液または配合物に関する。このタイプの溶液を調製することができる方法は、当業者に知られており、例えば、WO 2002/072714、WO 03/019694 およびそれらの中に引用された文献に記載されている。

40

【0105】

本発明による電子デバイス、特に有機エレクトロルミネッセンスデバイスは、従来技術に対して以下の驚くべき利点によって区別される。

【0106】

1. 式（1）の化合物は、非常に多くの通常の有機溶媒中で非常に良好な溶解性を有し、従って、溶液からの処理に極めて好適である。特に、本発明による化合物は、従来技術に記載された類似の化合物に比べてより高い溶解性を有する。

【0107】

50

2. 発光材料として式(1)の化合物を含む有機エレクトロルミネッセンスデバイスは、卓越した寿命を有する。特に、寿命は、従来技術による類似の化合物の場合に比べて良い。

【0108】

3. 発光材料として式(1)の化合物を含む有機エレクトロルミネッセンスデバイスは、卓越した効率を有する。特に、効率は、従来技術による類似の化合物の場合に比べて良い。

【0109】

これらの上記の利点は、他の電子特性における低下を伴わない。

【0110】

本発明による化合物は、特定の要件下で発光し得る。従って、これらの化合物は、非常に多用途である。本明細書での用途の主要な分野のいくつかは、表示装置または照明技術である。光療法(phototherapy)の分野に本化合物およびこれらの化合物を含むデバイスを使用することは、さらに特に有利である。

【0111】

従って、本発明は、さらに、疾患の治療、予防および診断のために本発明による化合物および化合物を含むデバイスの使用に関する。本発明は、さらに、美容上の状態の治療および予防のために本発明による化合物および化合物を含むデバイスの使用に関する。

【0112】

本発明は、さらに、治療疾患の治療、予防および／または診断のためのデバイスの生産のための本発明による化合物の使用に関する。

【0113】

多くの疾患は、美容的側面を伴う。従って、顔面の重篤な座瘡の患者は、疾患の医学的原因および結果のみならず、美容的な状況にも苦しむ。

【0114】

光療法または光線療法(light therapy)は、多くの医学的および／または美容分野で使用されている。従って、本発明による化合物およびこれらの化合物を含むデバイスは、そのために当業者が光療法の使用を考えるあらゆる疾患の治療および／または予防および／または診断ならびに／あるいは美容用途に使用され得る。照射の他に、光療法という用語は、光力学的療法(PDT: photodynamic therapy)ならびに一般的な消毒および殺菌も含む。光療法または光線療法は、ヒトまたは動物のみならず任意の他のタイプの生物または非生物の治療に使用され得る。これらには、例えば、菌類、細菌、微生物、ウイルス、真核生物、原核生物、食物、飲料、水および飲料水が含まれる。

【0115】

光療法という用語には、光線療法および他のタイプの療法、例えば、活性な化合物による治療などのいずれのタイプの組合せも含まれる。多くの光線療法は、ヒトおよび動物の皮膚、外傷、粘膜、目、毛、爪、爪床、歯肉および舌などの目的物の外部に照射または治療する目的を有する。本発明による治療または照射は、さらに、例えば、内臓(心臓、肺、など)または血管または乳房を治療するために対象の内部で実施され得る。

【0116】

本発明による用途の治療的および／または美容分野は、好ましくは、皮膚疾患および皮膚に関係する疾患または変化または状態、例えば、乾癬、皮膚の老化、しわ、皮膚の若返り、拡大した毛穴、セルライト、油性肌、毛嚢炎、光線性角化症、前癌光線性角化症、皮膚病変、太陽で痛んだおよび太陽からストレスを受けた肌、カラスの足跡、皮膚潰瘍、座瘡、酒さ性座瘡、座瘡に起因する瘢痕、座瘡細菌、脂腺およびそれらの周辺組織のフォトモジュレーション(photomodulation)、黄疸、新生児の黄疸、白斑、皮膚癌、皮膚腫瘍、クリーグラーナジャール病、皮膚炎、アトピー性皮膚炎、糖尿病性皮膚潰瘍および皮膚の脱感作などの群から選択される。

【0117】

本発明の目的のために、特に好ましいのは、乾癬、座瘡、セルライト、しわ、皮膚の老

10

20

30

40

50

化、黄疸および白斑の治療および／または予防である。

【0118】

本発明による組成物および／または組成物を含むデバイスのための本発明による用途のさらなる分野は、炎症性疾患、関節リウマチ、疼痛治療、外傷の治療、神経系の疾患および状態、浮腫、パジェット病、原発腫瘍および転移性腫瘍、結合組織疾患または変化、哺乳類の組織におけるコラーゲン、線維芽細胞、線維芽細胞由来の細胞レベルの変化、網膜の照射、新生血管および肥大性疾患、アレルギー反応、気道の照射、発汗、眼の血管新生疾患、ウイルス感染症、特にいぼおよび性器いぼの治療用の単純ヘルペスまたはHPV（ヒト乳頭腫ウイルス）に起因する感染症の群から選択される。

【0119】

本発明の目的のために、特に好ましいのは、関節リウマチ、ウイルス感染症および疼痛の治療および／または予防である。

【0120】

本発明による化合物および／または化合物を含むデバイスのための本発明による用途のさらなる分野は、冬期うつ病、睡眠病、気分を改善するための照射、疼痛の軽減、特に例えば、緊張または関節痛に起因する筋肉痛、関節の硬さの除去および歯を白くすること（漂白）から選択される。

【0121】

本発明による化合物および／または化合物を含むデバイスのための本発明による用途のさらなる分野は、消毒の群から選択される。本発明による化合物および／または本発明によるデバイスは、消毒の目的でいずれのタイプの目的物（非生物）または対象（生物、例えば、ヒトおよび動物など）の治療のために使用することができる。これには、例えば、外傷の消毒、細菌の減少、手術器具または他の物品の消毒、食物、液体、特に水、飲料水および他の飲料の消毒、粘膜および歯肉および歯の消毒が含まれる。本明細書で消毒は、望ましくない影響の生きている微生物学的な病原因子、例えば、細菌、病原菌の削減を意味すると解釈される。

【0122】

上記の光療法の目的のためには、本発明による化合物を含むデバイスは、好ましくは、250～1250nm、特に好ましくは300～1000nm、特別に好ましくは400～850nmの波長を有する光を発光する。

【0123】

本発明の一つの特に好ましい態様において、本発明による化合物は、光療法の目的のための有機発光ダイオード（OLED）または有機発光電気化学セル（OLEC）に使用される。OLEDとOLECの両方とも、単層または多層構造を有する任意の所望の切断面（例えば、丸い、楕円の、多角形の、四角な）を有する平面のまたは繊維に似た構造を有し得る。これらのOLECおよび／またはOLEDは、さらなる機械的、接着性および／または電子的要素（例えば、照射回数、強度および波長の調節のための電池および／または制御装置）を含む他のデバイスに組み込むことができる。本発明によるOLECおよび／またはOLEDを含むこれらのデバイスは、好ましくは、プラスター、パッド、テープ、包帯、カフ、ブランケット、キャップ、寝袋、織物およびステントを含む群から選択される。

【0124】

OLEDおよび／またはOLECを使用する本発明によるデバイスを用いて、より低い照射強度の均一な照射が、実質的に任意の場所および1日の任意の時間において可能であるので、前記治療的および／または美容目的のための前記デバイスの使用は、従来技術と比べて特に有利である。照射は、入院患者として、通院患者としておよび／または患者自身によって、即ち、医師または美容専門家によって開始されることなく実施され得る。従って、例えば、プラスターは、衣服の下に付けることができ、従って、労働時間、余暇時間または睡眠中にも照射が可能である。複雑な入院患者／通院患者の処置は、多くの場合、回避することができ、またはそれらの頻度を減らすことができる。本発明によるデバイ

10

20

30

40

50

スは、再使用または使い捨て商品向きであってもよく、これは、1回、2回または3回の使用後に使い捨てすることができる。

【0125】

従来技術に比べたさらなる利点は、例えば、より低い熱の発生および情緒的な側面である。従って、黄疸のため治療される新生児は、一般的に、親と身体が接触することなく保育器中で目隠しされたまま照射を受けなければならない、これは、親と新生児にとっての情緒的なストレス状況に相当する。本発明によるO L E Dおよび／またはO L E Cを含む本発明によるブランケットを用いて、情緒的なストレスを著しく低減させることができる。さらに、従来の照射装置と比べた本発明によるデバイスの低減された熱発生によって、小児のより良い温度制御が可能である。

10

【0126】

本発明において記載された態様の変形は、本発明の範囲に含まれることは、指摘されるべきである。本発明に開示されたそれぞれの特徴は、明示的に除外された場合を除き、同一、同等または類似の目的を果たす代替りの特徴によって置き換えられ得る。従って、本発明に開示されたそれぞれの特徴は、特に指定のない限り、一般的な系列の一例としてまたは同等または類似の特徴としてみなされるべきである。

【0127】

本発明のあらゆる特徴は、特定の特徴および／またはステップが相互排他的ではないかぎり、任意の方法で互いに組み合わせることができる。これは、特に、本発明の好ましい特徴に当てはまる。同様に、本質的でない組合せの特徴は、別々に（組み合わせずに）使用することができる。

20

【0128】

特徴の多く、特に本発明の好ましい態様のものは、それら自体創意に富むものとしてみなされるべきであり、単に本発明の態様の部分としてみなされるべきではないことは、さらに指摘されるべきである。独立した保護が、現在、特許請求の範囲に記載されたそれぞれの発明に加えてまたは代替物としてこれらの特徴に与えられ得る。

【0129】

本発明と共に開示された技術的活動に関する教示は、要約し、他の例と組み合わせることができる。

【0130】

それによって制限されることを望むことなく以下の実施例によって本発明がさらに詳細に説明される。

30

【0131】

[実施例]

以下の合成は、他に指示がない限り、無水溶媒中において保護ガス雰囲気下で実施される。出発材料I VおよびX Iおよび使用された溶媒は、例えばA L D R I C Hから市販されている。化合物IおよびXは、W O 02/068435と同様に調製することができる。化合物I Iは、S y n t h e s i s、2005、1619-1624に従って調製することができる。化合物V Iは、C h e m. B e r.、1984、117、2703-2713に従って調製することができる。化合物V I I Iは、B i o o r g. M e d. C h e m. L e t t. 2007、17、3014-3017に従って調製することができる。

40

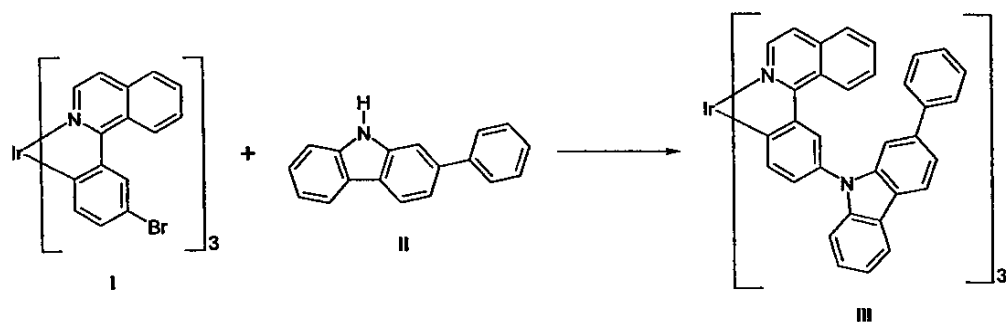
【0132】

例1

化合物I I Iの調製

化合物I I Iの調製のための合成手順

【化 4 8】



10

【0133】

7.0 g (6.7 mmol) の化合物 I、13.1 g (53.8 mmol) の化合物 I および 57 g (269 mmol) の K_3PO_4 を、850 ml の p-キシレン中に懸濁する。45 mg (0.20 mmol) の $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ および 2.7 ml の 1M トリ-tert-ブチルホスフィン溶液を、この懸濁液に添加する。この反応混合物を、還流下で 42 時間加熱する。冷却後、有機相を分離し、125 ml の水で 3 回洗浄し、続いて蒸発乾固する。残留物をエタノールで洗浄し、トルエンから再結晶させ、最後に減圧下で乾燥する。収量は 6.3 g (4.1 mmol) であり、理論値の 61.3% に相当する。

20

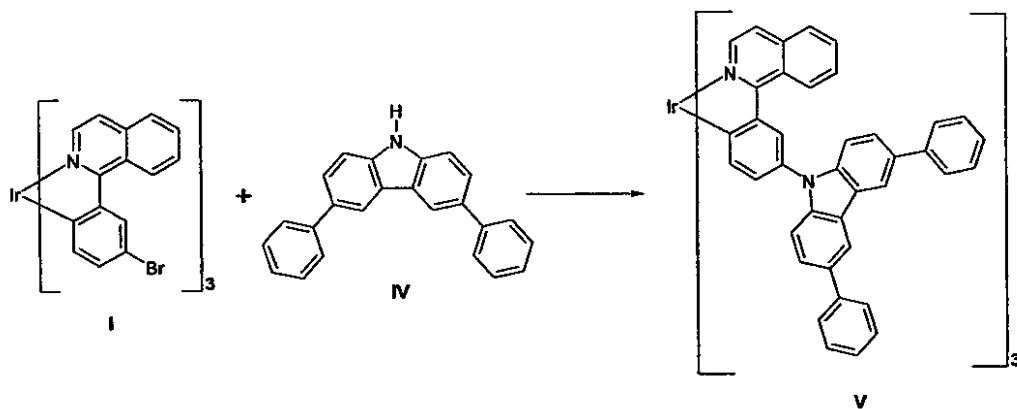
【0134】

例 2

化合物 V の調製

化合物 V の調製のための合成手順

【化 4 9】



30

40

【0135】

6.2 g (6.0 mmol) の化合物 I を使用して化合物 III と同様に合成を実施し、ここで、例 1 からの化合物 II は、15.21 g (47.6 mmol) の 3,6-ジフェニル-9H-カルバゾール (化合物 IV) で置きかえられている。収量は 7.2 g (4.1 mmol) であり、理論値の 68.8% に相当する。

【0136】

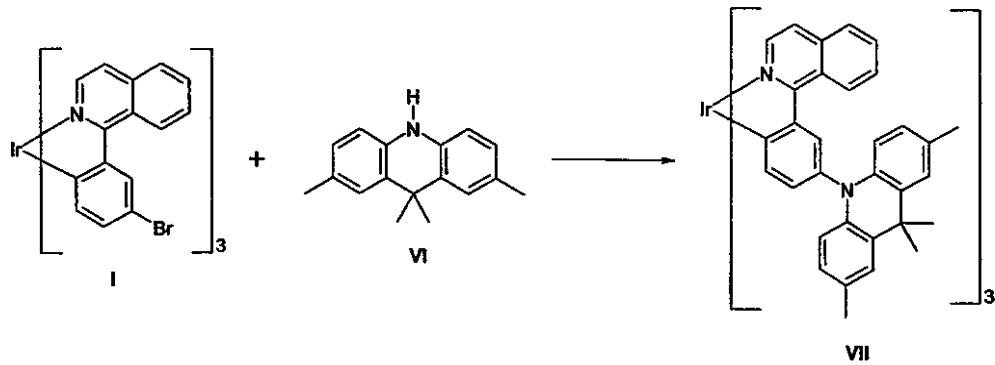
例 3

化合物 V II の調製

化合物 V II の調製のための合成手順

50

【化 5 0】



10

【0137】

5.8 g (5.6 mmol) の化合物 I を使用して化合物 III と同様に合成を実施し、ここで、例 1 からの化合物 II は、10.6 g (44.5 mmol) の 2,7,9,9-テトラメチル-9,10-ジヒドロアクリジン (化合物 IV) で置き換えられている。収量は 4.5 g (3.0 mmol) であり、理論値の 53.5% に相当する。

【0138】

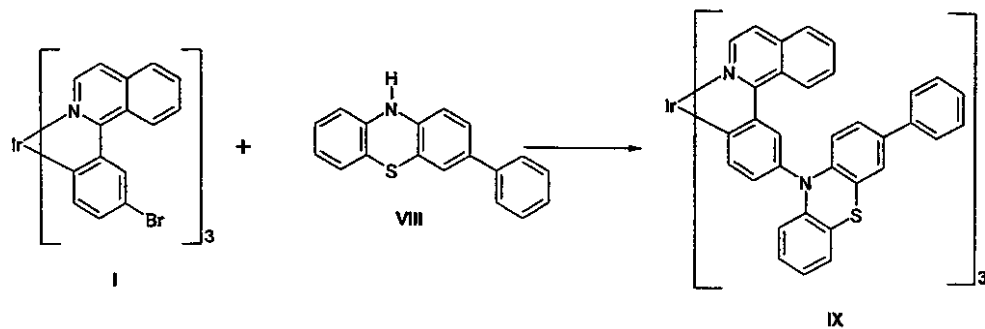
20

例 4

化合物 IX の調製

化合物 IX の調製のための合成手順

【化 5 1】



30

【0139】

6.2 g (6.0 mmol) の化合物 I を使用して化合物 III と同様に合成を実施し、ここで、例 1 からの化合物 II は、13.1 g (47.6 mmol) の 3-フェニル-10H-フェノチアジンで置き換えられている。収量は 5.7 g (3.5 mmol) であり、理論値の 58.9% に相当する。

40

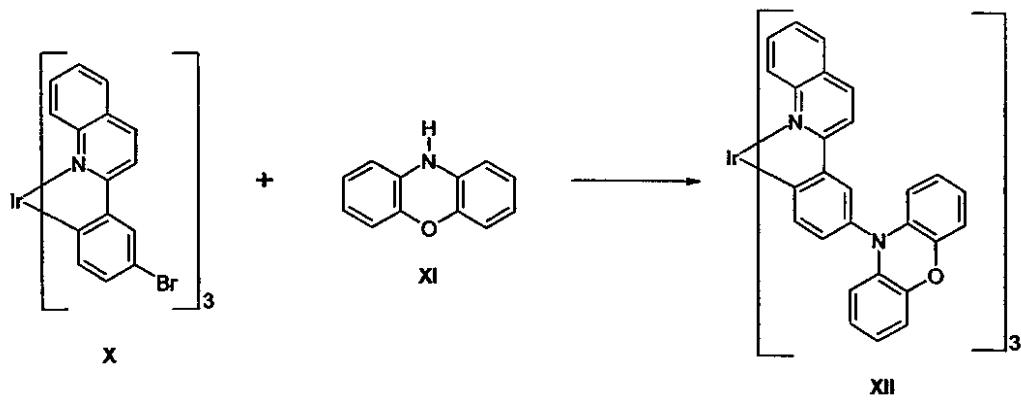
【0140】

例 5

化合物 XII の調製

化合物 XII の調製のための合成手順

【化 5 2】



10

【0141】

化合物 I I I と同様に合成を実施し、ここで、化合物 I は、8.5 g (8.2 mmol) の化合物 X で置き換えられており、化合物 I I は、12.0 g (65.3 mmol) の 10H-フェノキサジン (化合物 X I) で置き換えられている。収量は 6.9 g (5.1 mmol) であり、理論値の 62.7% に相当する。

20

【0142】

例 6 ~ 10

本発明による化合物を含む有機エレクトロルミネッセンスデバイスの製造および特徴づけ

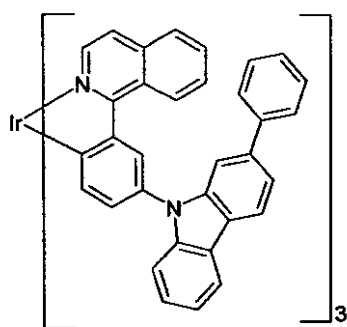
本発明による化合物 T-1 ~ T-5、TMM 1 (DE 102008036982.9 に従って合成された) および TMM-2 (DE 102008017591.9 に従って合成された) の構造が、明確に以下に描かれている。

【0143】

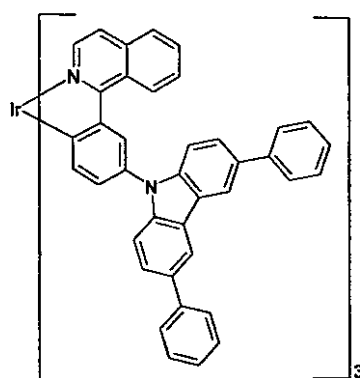
発光体の構造

30

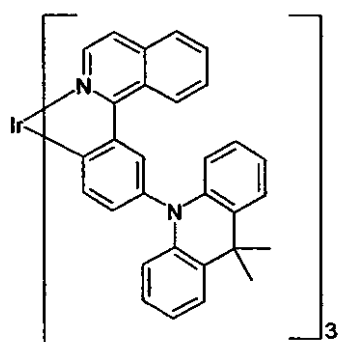
【化 5 3】



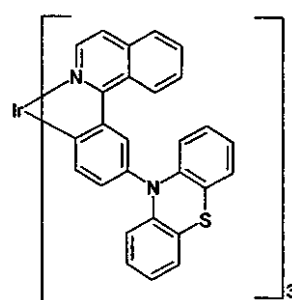
T-1



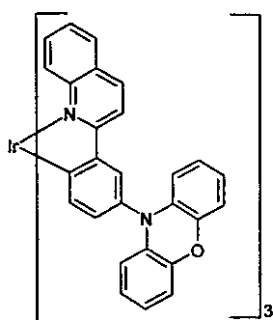
T-2



T-3



T-4



T-5

【0144】
マトリックスの構造

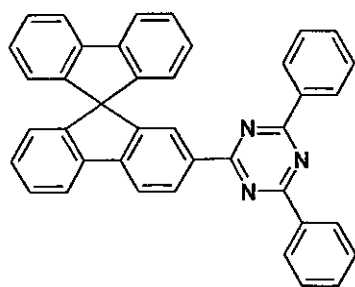
10

20

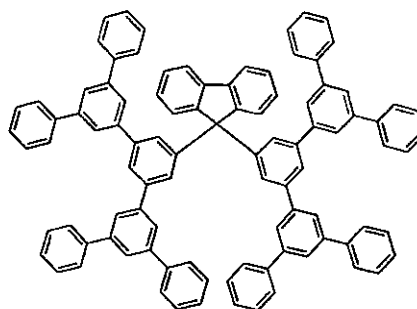
30

40

【化 5 4】



TMM-1



TMM-2

10

【0145】

本発明による材料は、溶液から使用することができ、ここで、それらは、良好な性質を有する単一のデバイスをもたらす。このような部品の生産は、ポリマー発光ダイオード（PLED）の生産に基づき、これは、既に文献（例えばWO 2004/037887に）に度々記載されている。本発明の場合、本発明による化合物T-1～T-5をトルエンに溶解する。本明細書におけるようにデバイスの80nmの一般的な層厚さがスピニングを用いて達成される場合、このような溶液の一般的な固形成分含有量は、16～25g/lである。使用されるPLEDデバイスは、次の構造を示す。ITO/PEDOT:PSS/中間層/EML/カソード、ここでEMLは、発光層を表す。本発明による化合物T-1～T-5（それぞれ4重量%の濃度で存在する）の他に、発光層（EML）は、それぞれ48重量%の濃度で（即ちTMM-1：TMM2=1：1）マトリックス材料TMM-1およびTMM-2を含む。構造化されたITO基板およびいわゆる緩衝層（PEDOT、実際はPEDOT:PSS）の材料は市販されている（ITOはTechnoprint他から、PEDOT:PSSはClevios Baytron P水性分散液としてH. C. Starckから）。使用される中間層は、正孔注入に役立ち、この場合、MerckからのHIL-012を使用した。発光層は、不活性ガス雰囲気（本発明の場合、アルゴン）スピニングによって付着し、120℃において10分間加熱することにより乾燥する。最後に、バリウムおよびアルミニウムカソードを、真空気相堆積法によって付着する。正孔遮断層および／または電子輸送層も、発光層およびカソードの間に気相堆積法によって付着することができ、中間層は、1種以上の層によって置き換えられてもよく、この層は、溶液からの発光層の堆積の後続処理ステップによって再び引き離されることがないという条件を単に満たせばよい。

20

30

【0146】

デバイスは標準の方法によって特徴づけられ、記載されたOLEDの例は、未だ最適化されていない。表1は得られたデータを要約している。処理されたデバイスの場合、本発明による材料は、効率および／または寿命において従来得られるものに対して優れていることは本明細書で明らかである。

40

【表 1】

表1:示されたデバイス構成における溶液処理された材料の結果

Ex.	EML 80 nm	最大 効率 [cd/A]	100cd/m ² における 電圧[V]	CIE (x, y)	寿命[h]、 初期輝度 1000cd/m ²
6	TMM-1:TMM-2:T-1	8	5.7	0.65/0.35	25000
7	TMM-1:TMM-2:T-2	9	5.6	0.65/0.35	22000
8	TMM-1:TMM-2:T-3	10	5.7	0.66/0.34	15000
9	TMM-1:TMM-2:T-4	8	5.4	0.64/0.35	14000
10	TMM-1:TMM-2:T-5	9	5.5	0.66/0.36	18000

以下に、本願の出願当初の請求項を実施の態様として付記する。

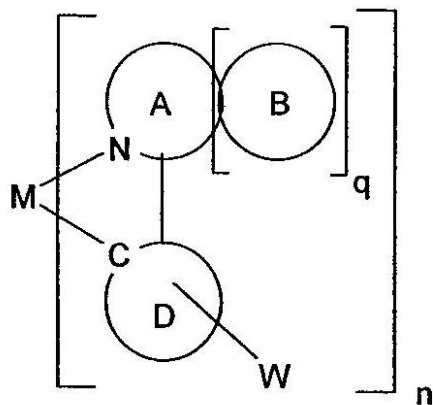
【1】 式（1）の化合物

【化 5 5】



（ここで、前記化合物は、式（2）の部分 $M(L)_n$ を含み、

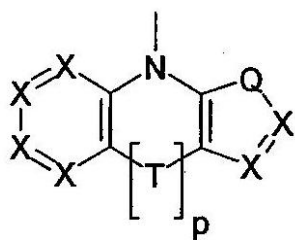
【化 5 6】



式(2)

ここで、Mは、窒素原子Nおよび炭素原子Cを介して任意の所望の二座配位子Lに結合しており、ここで、A、BおよびDは、任意の所望の芳香族またはヘテロ芳香族環を表し、第1のB環（ $q = 1$ ）は、任意の所望の可能な様式でA環と縮合しており、複数のB環が出現する場合（ $q > 1$ ）、後続のB環は、任意の所望の可能な様式で直接A環にまたはそれぞれの先行のB環に縮合しており、B環は、それらが q 回出現する場合、互いに独立に、同一であるかまたは異なってもよく、式中、使用された記号および添え字には以下が適用される：Mは、イリジウム、ロジウム、白金およびパラジウムからなる群から選択される金属であり；L'は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、任意の所望の共配位子であり；Wは、式（3）に等しく、

【化 5 7】



式(3)

10

ここで、Tは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 $-C(R^1)_2$ 、 $-Si(R^1)_2$ 、 $-N$ 、 $-NR^1$ 、 $-O$ 、 $-S$ 、 $-C(=O)$ 、 $-S(=O)$ 、 $-SO_2$ 、 $-CF_2$ 、 $-SF_4$ 、 $-P$ 、 $-P(=O)R^1$ 、 $-PF_2$ 、 $-P(=S)R^1$ 、 $-As$ 、 $-As(=O)$ 、 $-As(=S)$ 、 $-Sb$ 、 $-Ge$ 、 $-Si$ 、 $-Sb(=O)$ 、 $-C(R^1)_2-C(R^1)_2-$ 、および $-Sb(=S)$ からなる群から選択され；Qは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 $R^1C=CR^1$ 、 $R^1C=N$ 、 O 、 S 、 Se または NR^1 であり；Xは、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 CR^1 または N であり；qは、1以上の整数であり、pは、0または1であり、ここで、 $p=0$ については、式(3)における中央の環は5員環を形成し；nは、イリジウムまたはロジウムに等しいMについては1、2または3であり、白金またはパラジウムに等しいMについては1または2であり；mは、0、1、2、3または4であり； R^1 は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $N(R^2)_2$ 、 CN 、 NO_2 、 $Si(R^2)_3$ 、 $B(OR^2)_2$ 、 $C(=O)R^2$ 、 $P(=O)(R^2)_2$ 、 $S(=O)R^2$ 、 $S(=O)_2R^2$ 、 OSO_2R^2 、1～40個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシまたはチオアルコキシ基または2～40個のC原子を有する直鎖アルケニルまたはアルキニル基または3～40個のC原子を有する分枝または環状アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシまたはチオアルコキシ基（これらのそれぞれは、1個以上のラジカル R^2 で置換されている）もよく、ここで、1個以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^2C=CR^2$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^2)_2$ 、 $Ge(R^2)_2$ 、 $Sn(R^2)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^2$ 、 $P(=O)(R^2)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^2 、 O 、 S または $CONR^2$ によって置きかえられていてもよく、1個以上のH原子は、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 CN または NO_2 によって置きかえられていてもよい）、または5～60個の芳香族環原子を有する芳香族またはヘテロ芳香族環系（これは、それぞれの場合において、1個以上のラジカル R^2 で置換されている）もよく、または5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシまたはヘテロアリールオキシ基（これは、1個以上のラジカル R^2 で置換されている）もよく、または10～40個の芳香族環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基またはアリールヘテロアリールアミノ基（これは、1個以上のラジカル R^2 で置換されている）もよく、またはこれらの基の2種以上の組合せであり；2個以上のラジカル R^1 は、互いに単環式または多環式、脂肪族、芳香族および／または、ベンゾ縮合環系を形成してもよく； R^2 は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、 H 、 D 、 F 、 Cl 、 Br 、 I 、 $N(R^3)_2$ 、 CN 、 NO_2 、 $Si(R^3)_3$ 、 $B(OR^3)_2$ 、 $C(=O)R^3$ 、 $P(=O)(R^3)_2$ 、 $S(=O)R^3$ 、 $S(=O)_2R^3$ 、 OSO_2R^3 、1～40個のC原子を有する直鎖アルキル、アルコキシまたはチオアルコキシ基または2～40個のC原子を有する直鎖アルケニルまたはアルキニル基または3～40個のC原子を有する分枝または環状アルキル、アルケニル、アルキニル、アルコキシまたはチオアルコキシ基（これらのそれぞれは、1個以上のラジカル R^3 で置換されている）もよく、ここで、1個以上の隣接しない CH_2 基は、 $R^3C=CR^3$ 、 $C\equiv C$ 、 $Si(R^3)_2$ 、 $Ge(R^3)_2$ 、 $Sn(R^3)_2$ 、 $C=O$ 、 $C=S$ 、 $C=Se$ 、 $C=NR^3$ 、 $P(=O)(R^3)$ 、 SO 、 SO_2 、 NR^3 、 O 、 S または $CONR^3$ によって置きかえられていてもよく、1個

20

30

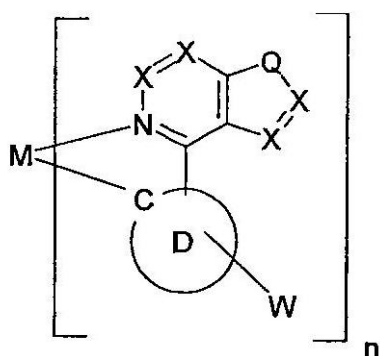
40

50

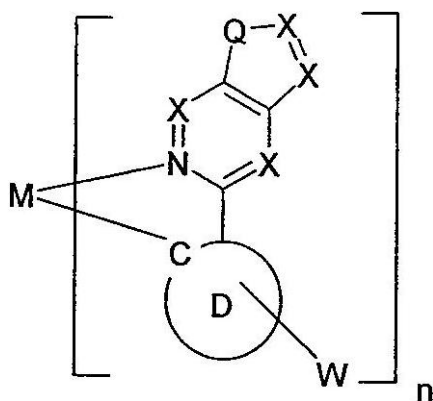
以上のH原子は、D、F、Cl、Br、I、CNまたはNO₂によって置きかえられていてもよい)、または5～60個の芳香族環原子を有する芳香族またはヘテロ芳香族環系(これは、それぞれの場合において、1個以上のラジカルR³で置換されていてもよい)、または5～60個の芳香族環原子を有するアリールオキシまたはヘテロアリールオキシ基(これは、1個以上のラジカルR³で置換されていてもよい)、または10～40個の芳香族環原子を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基またはアリールヘテロアリールアミノ基(これは、1個以上のラジカルR³で置換されていてもよい)、またはこれらの基の2種以上の組合せであり; 2個以上の隣接したラジカルR²は、互いに単環式または多環式、脂肪族または芳香族環系を形成してもよく; R³は、出現する毎に同一であるかまたは異なり、H、D、Fまたは1～20個のC原子を有する脂肪族、芳香族および/またはヘテロ芳香族環炭化水素ラジカル(ここで、さらに、1個以上のH原子は、Fで置きかえられていてもよい)であり; 2個以上の置換基R³は、互いに、単環式または多環式、脂肪族または芳香族環系を形成してもよく; 添え字nおよびmは、金属の配位数が、イリジウムまたはロジウムに等しいMについては6に一致し、白金またはパラジウムに等しいMについては4に一致するように選択され; 複数個の配位子Lは、互いに結合し、またはLは、任意の所望の架橋Zを介してL'に結合し、三座、四座、五座または六座配位子系を形成してもよい)。

[2] 式(1)の化合物が、式(4)～(9)

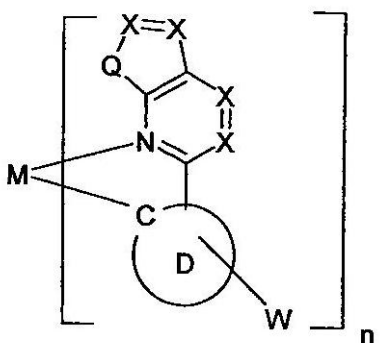
【化 5 8】



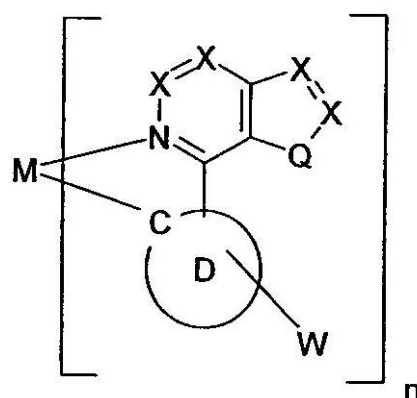
式(4)



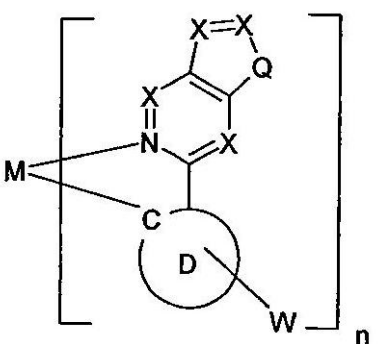
式(5)



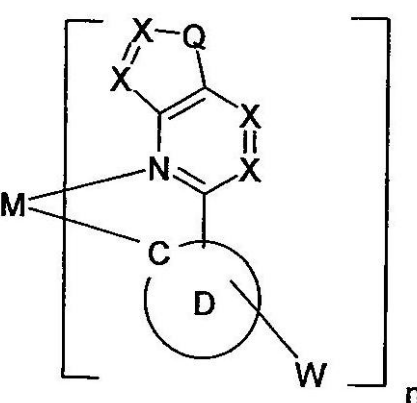
式(6)



式(7)



式(8)



式(9)

(ここで、[1]からの定義は、使用された記号および添え字に適用される)を有する部分 $M(L)_n$ を含有することを特徴とする、[1]に記載の化合物。

[3] 式(1)の化合物が、式(11)～(16)

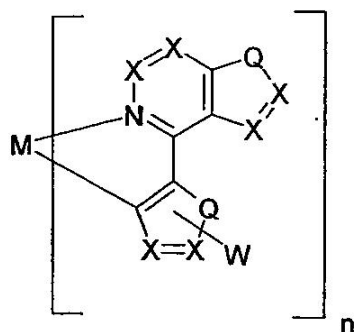
10

20

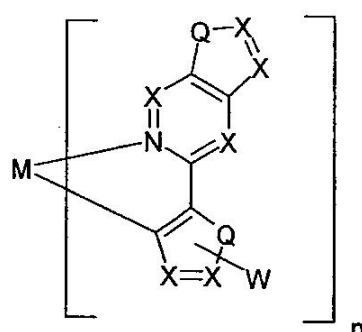
30

40

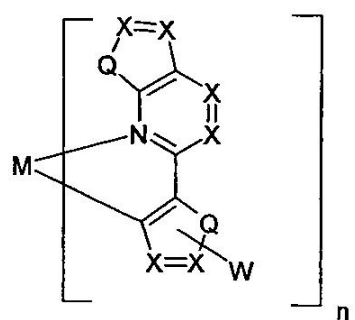
【化 5 9】



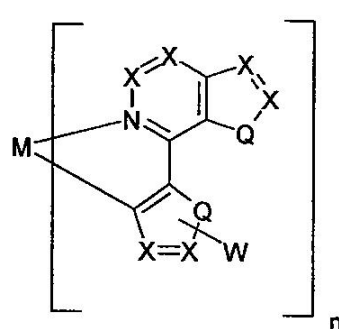
式(11)



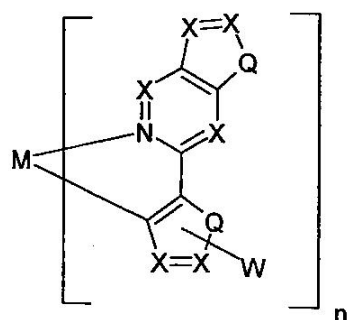
式(12)



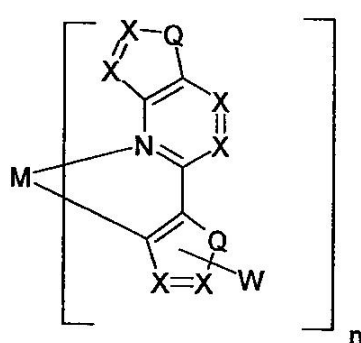
式(13)



式(14)



式(15)



式(16)

を有する部分M (L)_nを含有することを特徴とする、[1]または[2]に記載の化合物。

[4] 部分M (L)_nが、式(17)～(22)

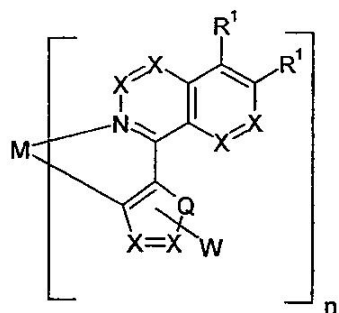
10

20

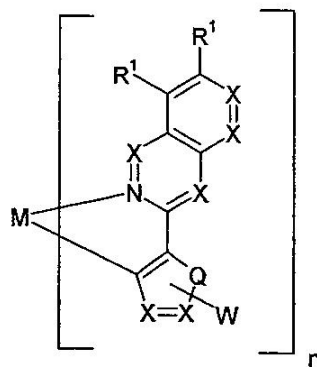
30

40

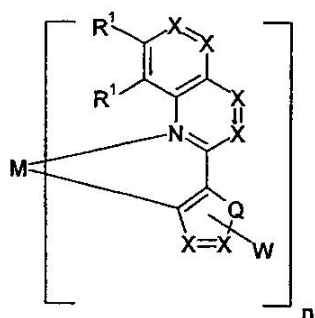
【化 60】



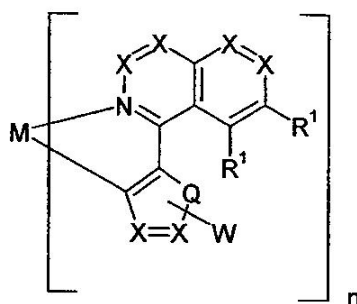
式(17)



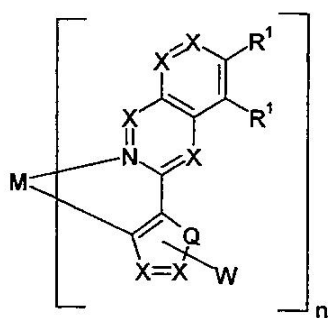
式(18)



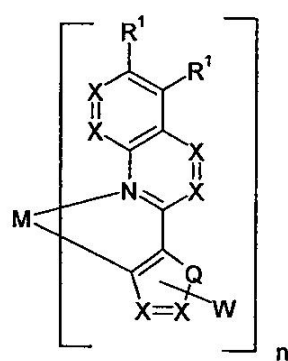
式(19)



式(20)



式(21)



式(22)

から選択されることを特徴とする、〔1〕～〔3〕の何れか一項に記載の化合物。

〔5〕 部分M(L)_nが、式(23)～(28)

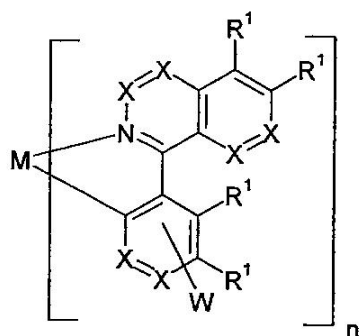
10

20

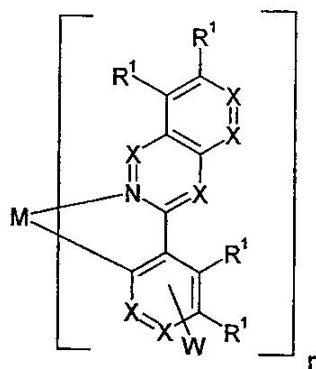
30

40

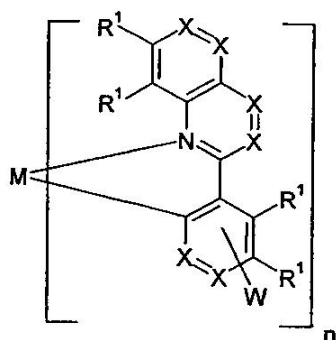
【化 6 1】



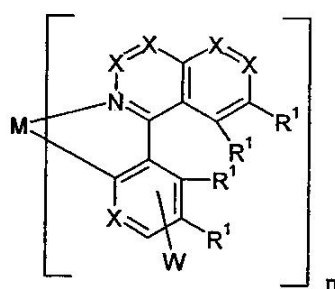
式(23)



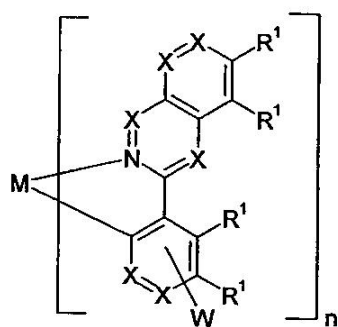
式(24)



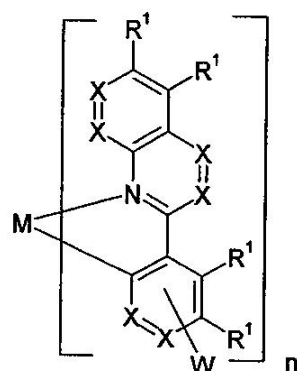
式(25)



式(26)



式(27)



式(28)

から選択されることを特徴とする、〔1〕～〔4〕の何れか一項に記載の化合物。

〔6〕 mが、1、2、3、または4であることを特徴とする、〔1〕～〔5〕の何れか一項に記載の化合物。

〔7〕 m=0であり、M(L)_nが、式(29)～(34)

10

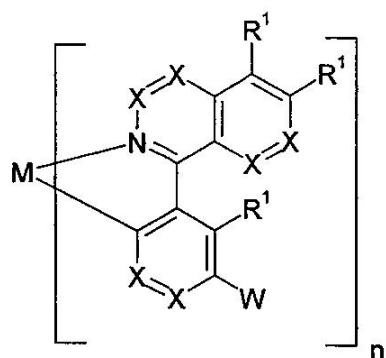
20

30

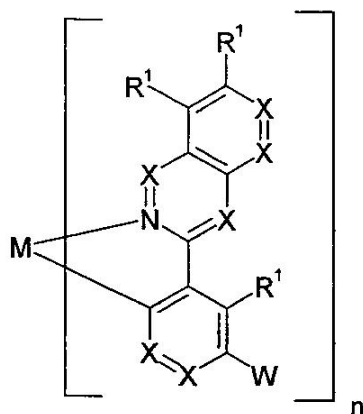
40

50

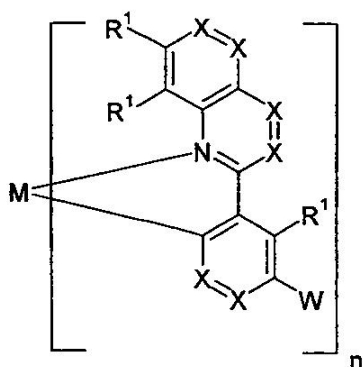
【化 6 2】



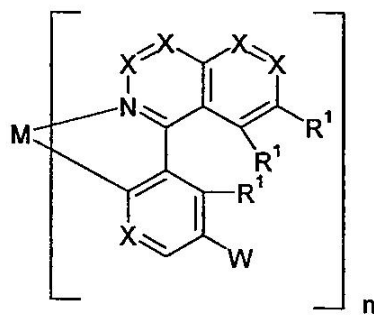
式(29)



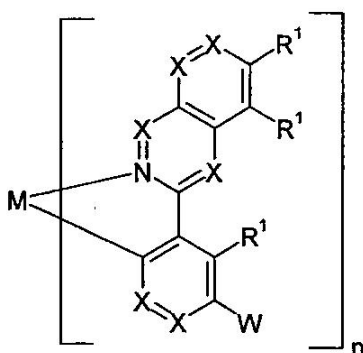
式(30)



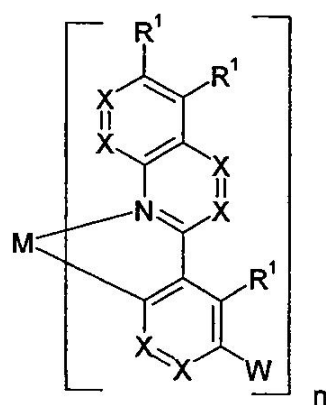
式(31)



式(32)



式(33)

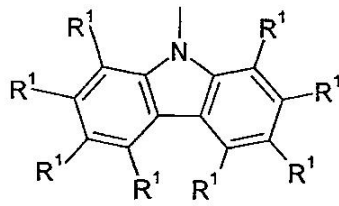


式(34)

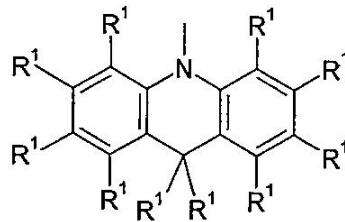
から選択されることを特徴とする、〔1〕～〔5〕の何れか一項に記載の化合物。

〔8〕 ラジカルWが、式(47)～(55)

【化 6 3】

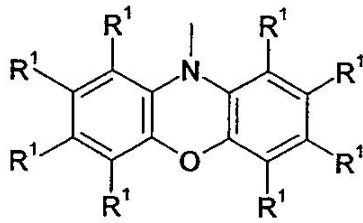


式(47)

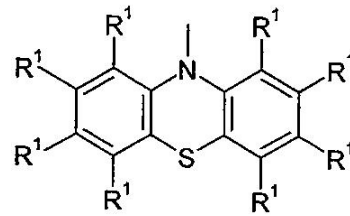


式(48)

10

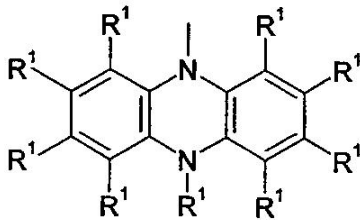


式(49)

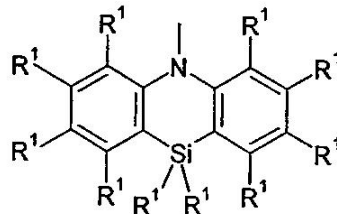


式(50)

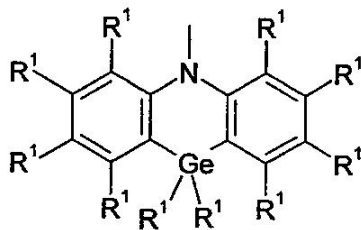
20



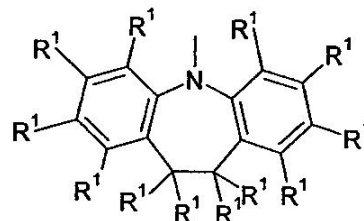
式(51)



式(52)

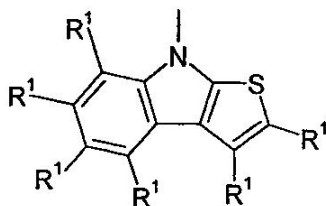


式(53)



式(54)

30



式(55)

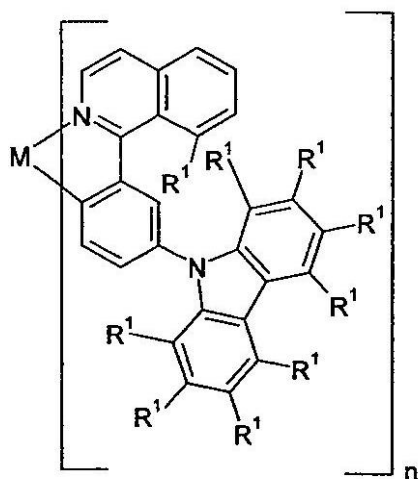
40

(ここで、線は、ラジカルWの配位子への結合が起こる位置を示し、使用された記号は、
 [1] で定義された記号と一致する) によって与えられることを特徴とする、 [1] ~ [7] の何れか一項に記載の化合物。

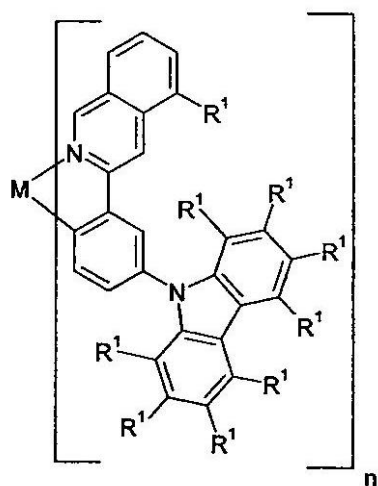
[9] 部分M (L)_nが、式 (7 1) ~ (8 5)

50

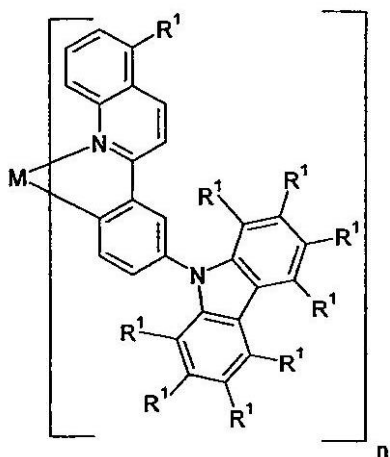
【化 6 4】



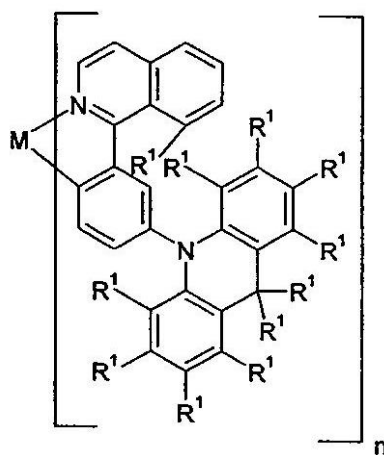
式(71)



式(72)



式(73)



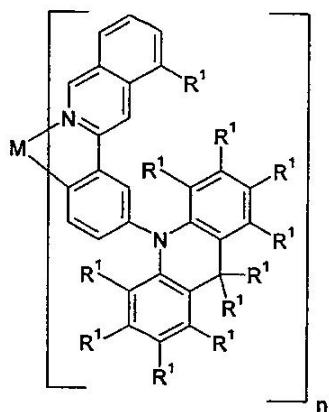
式(74)

10

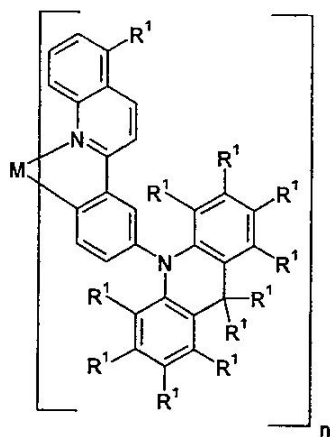
20

30

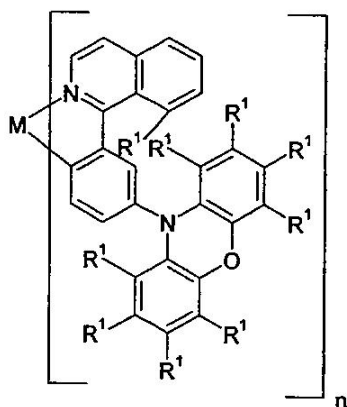
【化 6 5】



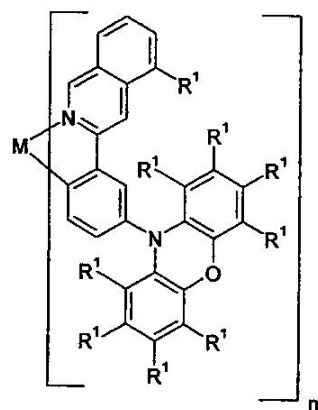
式(75)



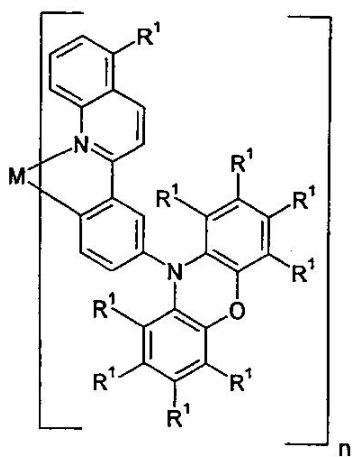
式(76)



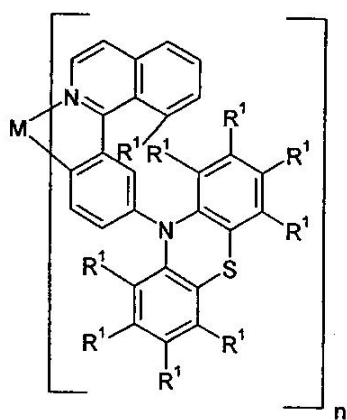
式(77)



式(78)



式(79)



式(80)

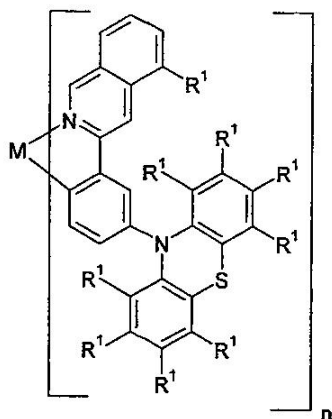
10

20

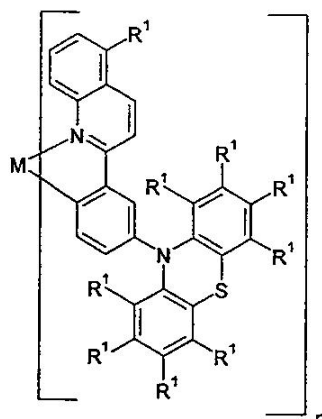
30

40

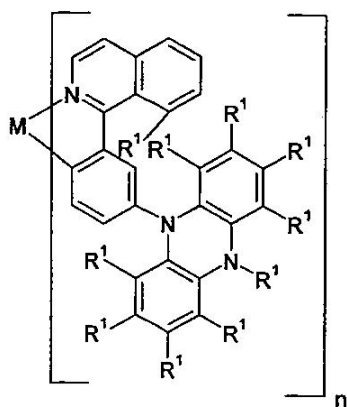
【化 6 6】



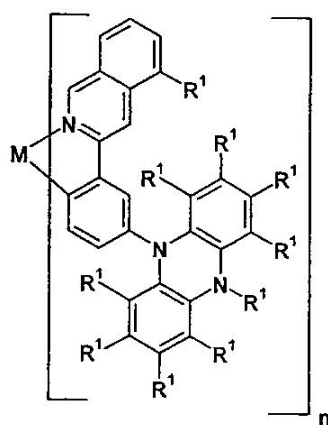
式(81)



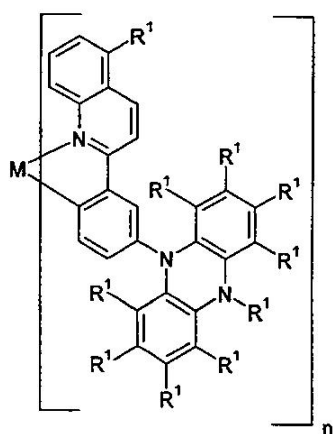
式(82)



式(83)



式(84)



式(85)

から選択されることを特徴とする、[1]～[8]の何れか一項に記載の化合物。

[10] R¹が、出現する毎に同一であるかまたは異なり、-H、-NH₂または式(86)～(224)

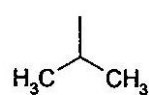
【化 6 7】



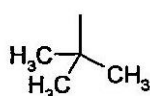
式(86)



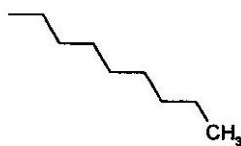
式(87)



式(88)



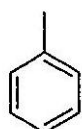
式(89)



式(90)



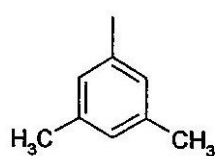
式(91)



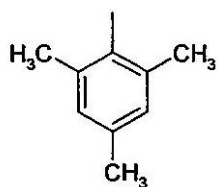
式(92)



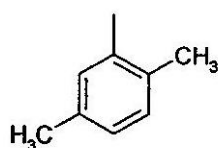
式(93)



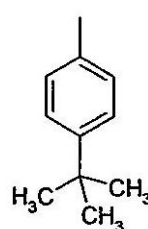
式(94)



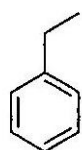
式(95)



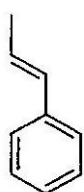
式(96)



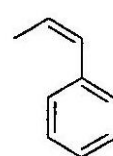
式(97)



式(98)



式(99)



式(100)

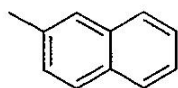
10

20

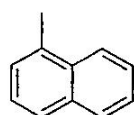
30

40

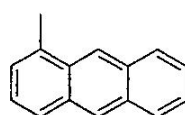
【化 6 8】



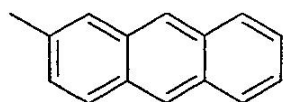
式(101)



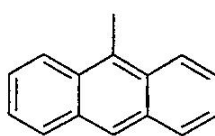
式(102)



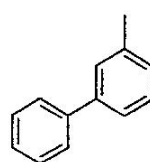
式(103)



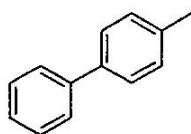
式(104)



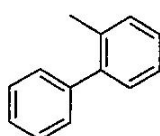
式(105)



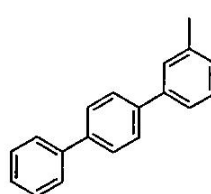
式(106)



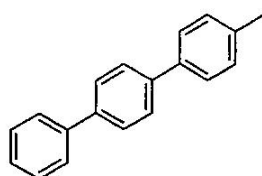
式(107)



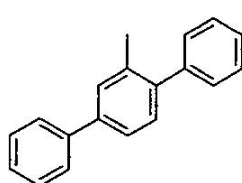
式(108)



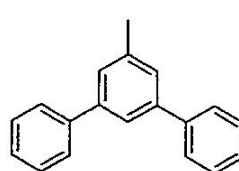
式(109)



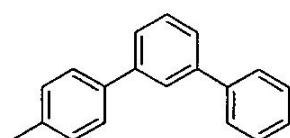
式(110)



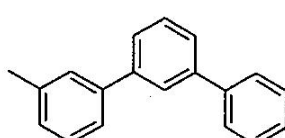
式(111)



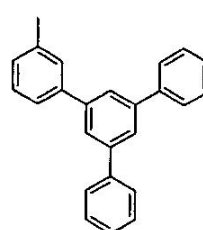
式(112)



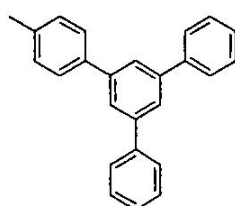
式(113)



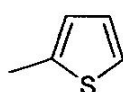
式(114)



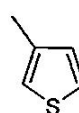
式(115)



式(116)



式(117)



式(118)

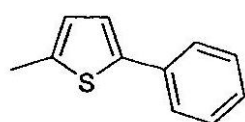
10

20

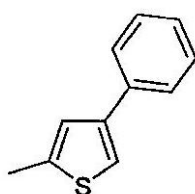
30

40

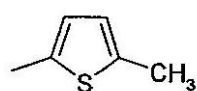
【化 6 9】



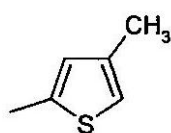
式(119)



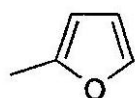
式(120)



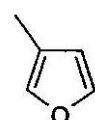
式(121)



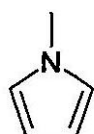
式(122)



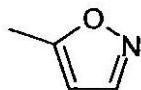
式(123)



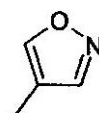
式(124)



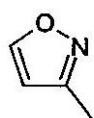
式(125)



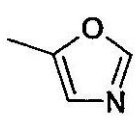
式(126)



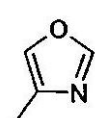
式(127)



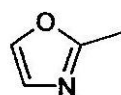
式(128)



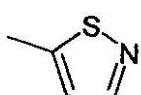
式(129)



式(130)



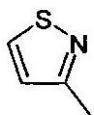
式(131)



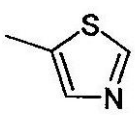
式(132)



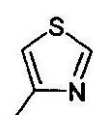
式(133)



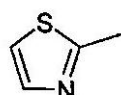
式(134)



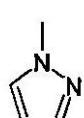
式(135)



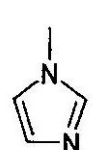
式(136)



式(137)



式(138)



式(139)

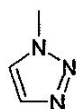
10

20

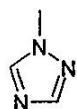
30

40

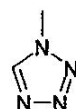
【化 7 0】



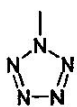
式(140)



式(141)



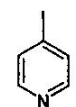
式(142)



式(143)



式(144)



式(145)



式(146)



式(147)



式(148)



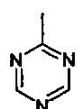
式(149)



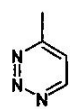
式(150)



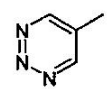
式(151)



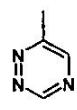
式(152)



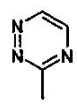
式(153)



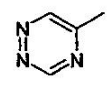
式(154)



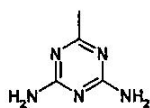
式(155)



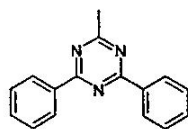
式(156)



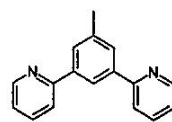
式(157)



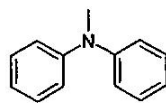
式(158)



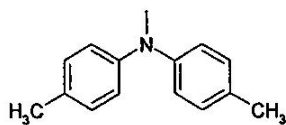
式(159)



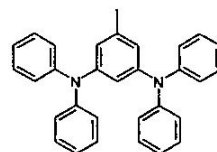
式(160)



式(161)



式(162)



式(163)

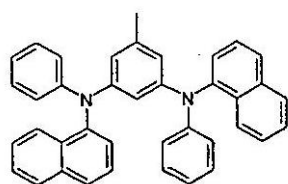
10

20

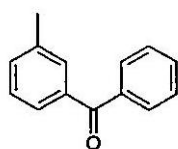
30

40

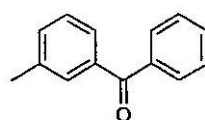
【化 7 1】



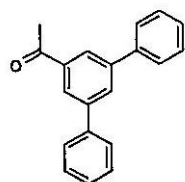
式(164)



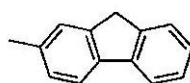
式(165)



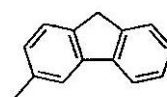
式(166)



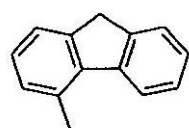
式(167)



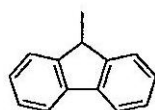
式(168)



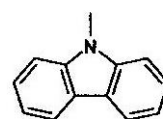
式(169)



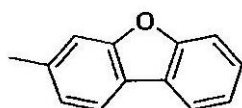
式(170)



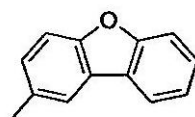
式(171)



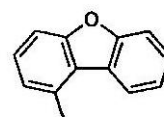
式(172)



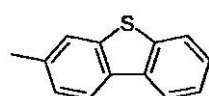
式(173)



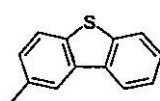
式(174)



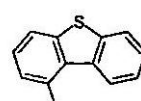
式(175)



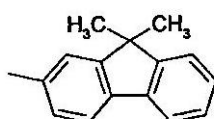
式(176)



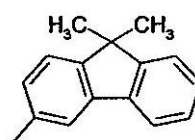
式(177)



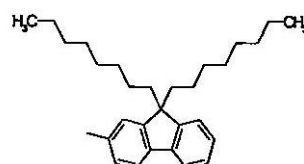
式(178)



式(179)



式(180)



式(181)

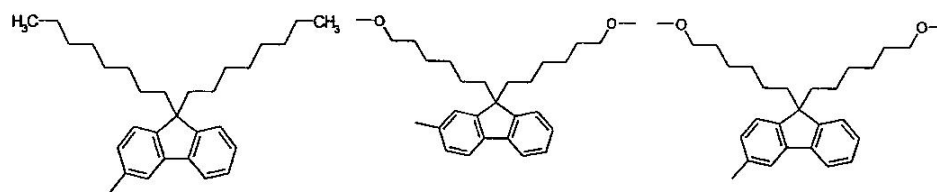
10

20

30

40

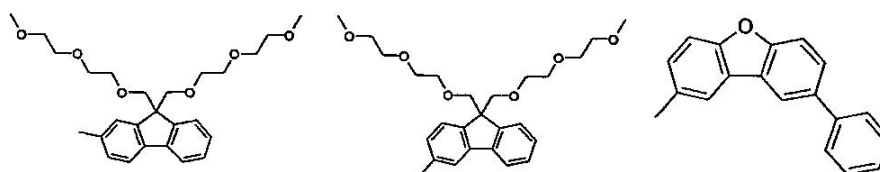
【化 7 2】



式(182)

式(183)

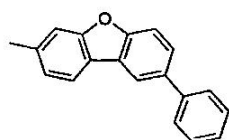
式(184)



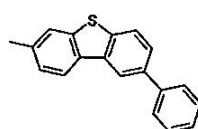
式(185)

式(186)

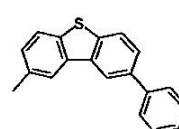
式(187)



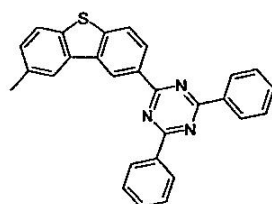
式(188)



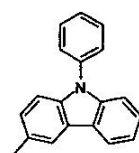
式(189)



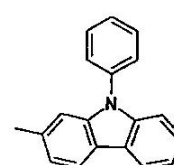
式(190)



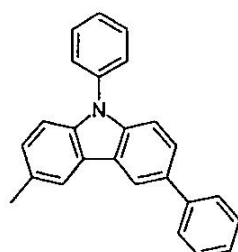
式(191)



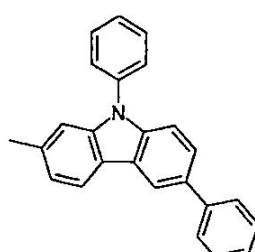
式(192)



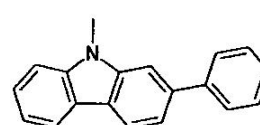
式(193)



式(194)



式(195)



式(196)

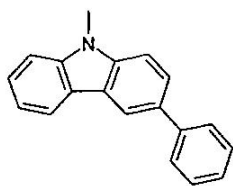
10

20

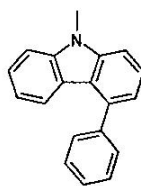
30

40

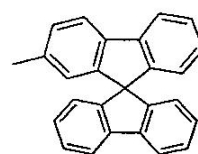
【化 7 3】



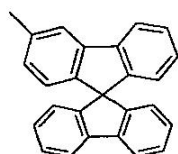
式(197)



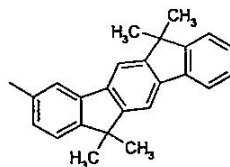
式(198)



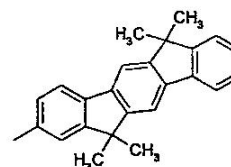
式(199)



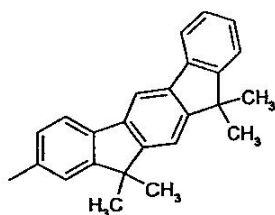
式(200)



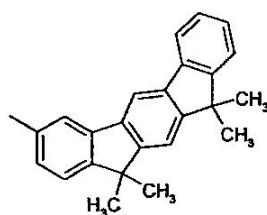
式(201)



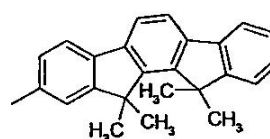
式(202)



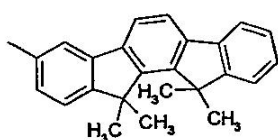
式(203)



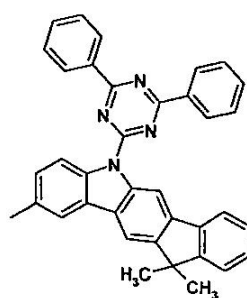
式(204)



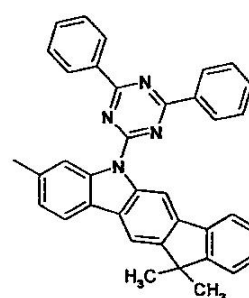
式(205)



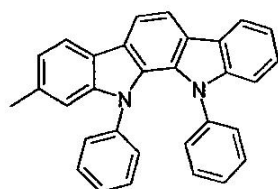
式(206)



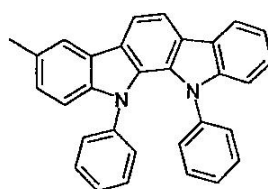
式(207)



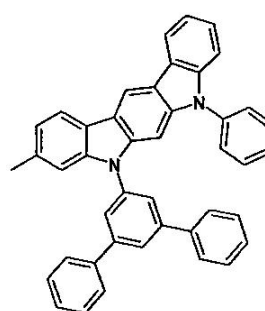
式(208)



式(209)



式(210)



式(211)

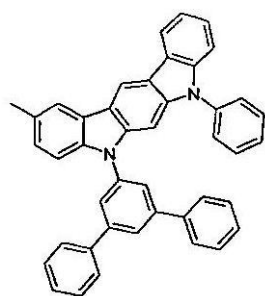
10

20

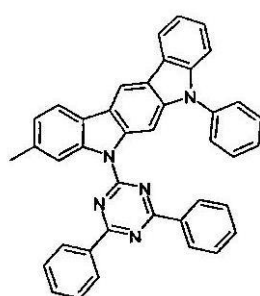
30

40

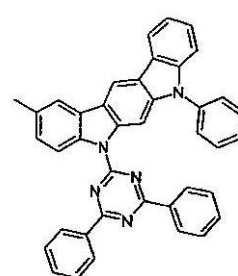
【化 7 4】



式(212)

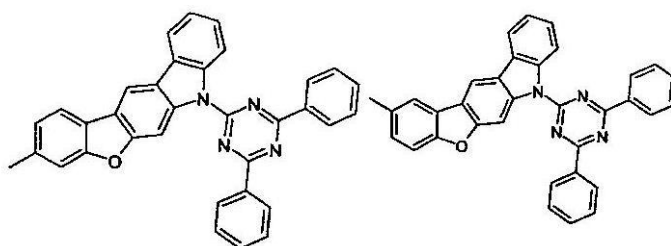


式(213)

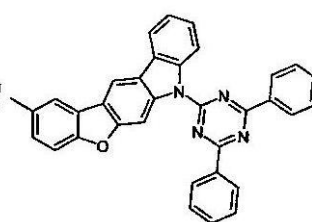


式(214)

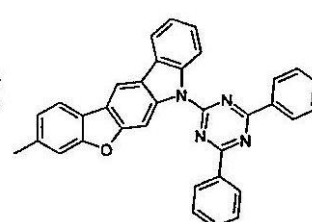
10



式(215)

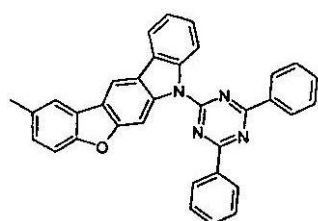


式(216)

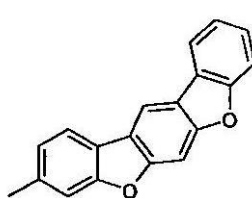


式(217)

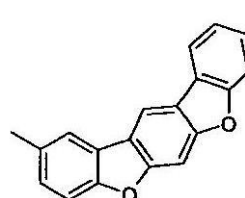
20



式(218)

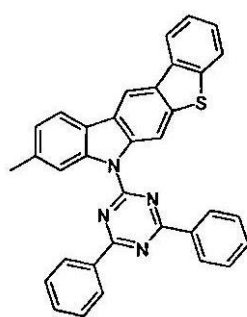


式(219)

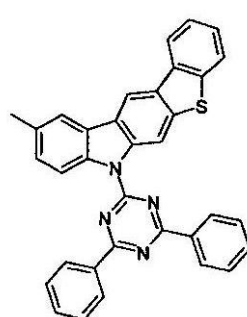


式(220)

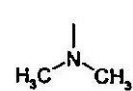
30



式(221)



式(222)



式(223)

40



式(224)

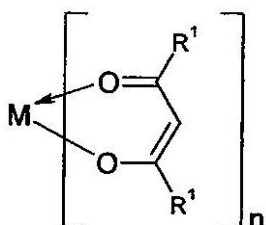
のラジカル（ここで前記ラジカルは、さらに、ラジカル R^3 （これは、それらが2回以上出現する場合、同一であるかまたは互いに独立であってもよい）で一置換または多置換されていてもよい）であることを特徴とする、[1]～[9]の何れか一項に記載の化合物

50

。 [1 1] Mが、イリジウムに等しいことを特徴とする、[1] ～ [1 0] の何れか一項に記載の化合物。

[1 2] 対応する遊離配位子と、式 (2 8 2) の金属アルコキシド、式 (2 8 3) の金属ケトケトナートまたは式 (2 8 4) の金属ハロゲン化物

【化 7 5】



式(282)

式(283)

式(284)

10

(ここで、記号M、nおよびR¹は、上に示された意味を有し、Hal = F、Cl、Br またはIである)との反応による、[1] ～ [1 1] の何れか一項に記載の化合物の調製方法。

[1 3] [1] ～ [1 1] の何れか一項に記載の少なくとも1種の化合物と少なくとも1種の溶媒とを含む配合物。

[1 4] 電子デバイス、好ましくは有機エレクトロルミネッセンスデバイス (OLED、PLED)、有機集積回路 (O-IC)、有機電界効果トランジスタ (O-FET)、有機薄膜トランジスタ (O-TFT)、有機発光トランジスタ (O-LET)、有機太陽電池 (O-SC)、有機光学検出器、有機感光体、有機電場消光デバイス (O-FQD)、発光電気化学セル (LEC) または有機レーザーダイオード (O-レーザー) からなる群から選択される電子デバイスにおける [1] ～ [1 1] の何れか一項に記載の化合物の使用。

[1 5] [1] ～ [1 1] の何れか一項に記載の少なくとも1種の化合物を含む電子デバイス、好ましくは有機エレクトロルミネッセンスデバイス (OLED、PLED)、有機集積回路 (O-IC)、有機電界効果トランジスタ (O-FET)、有機薄膜トランジスタ (O-TFT)、有機発光トランジスタ (O-LET)、有機太陽電池 (O-SC)、有機光学検出器、有機感光体、有機電場消光デバイス (O-FQD)、発光電気化学セル (LEC) または有機レーザーダイオード (O-レーザー) からなる群から選択される電子デバイス。

[1 6] [1] ～ [1 1] の何れか一項に記載の化合物が、好ましくはマトリックス材料との組み合わせで、一つ以上の発光層において発光化合物として使用されることを特徴とする、[1 5] に記載の有機エレクトロルミネッセンスデバイスであって、前記マトリックス材料は、好ましくは、ケトン、ホスフィンオキシド、スルホキシド、スルホン、トリアリールアミン、カルバゾール誘導体、インドロカルバゾール誘導体、インデノカルバゾール誘導体、アザカルバゾール誘導体、双極性マトリックス材料、シラン、アザボロール、ボロン酸エステル、トリアジン誘導体、亜鉛錯体、ジアザーもしくはテトラアザシロール誘導体またはジアザホスホール誘導体あるいはこれらのマトリックス材料の混合物からなる群から選択される有機エレクトロルミネッセンスデバイス。

[1 7] 疾患および／または美容上の状態の治療、予防および／または診断のための [1] ～ [1 1] の何れか一項に記載の化合物または [1 5] もしくは [1 6] に記載のデバイス。

40

50

フロントページの続き

- (74)代理人 100199565
弁理士 飯野 茂
- (72)発明者 アネミアン、レミ・マノウク
大韓民国、ソウル 140-210、ヨムサンング、ハンナムードン、657-169、コピウス
2-101、ファーストフロアー
- (72)発明者 シュローデル、ベルンド
ドイツ連邦共和国、65606 フィルマール・パイアー、イム・バングルト 6
- (72)発明者 ドゥ・ノナンクール、クレール
ドイツ連邦共和国、65929 フランクフルト・アム・マイン、ハイムヒェンベーク 86

審査官 黒川 美陶

- (56)参考文献 特開2004-067658 (JP, A)
特開2007-262134 (JP, A)
特開2007-262135 (JP, A)
特開2004-155728 (JP, A)
特開2006-188493 (JP, A)
特開2005-170809 (JP, A)
特開2005-047811 (JP, A)
国際公開第2010/031738 (WO, A1)
中国特許出願公開第101108964 (CN, A)
中国特許出願公開第101200635 (CN, A)
特表2004-533430 (JP, A)
Ding, Junqiao; Wang, Bin; Yue, Zhengyu; Yao, Bing; Xie, Zhiyuan; Cheng, Yanxiang;
Wang, Lixiang; Jing, Xiabin; Wang, Fosong, "Self-Host" Feature for Highly Efficient
Nondoped Electrophosphorescent Devices, Angewandte Chemie, International Edition, ド
イツ, 2009年, 48(36), 6664-6666
- (58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
C07F, C07D
CAplus/REGISTRY (STN)