

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 公 開 特 許 公 報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開2019-189604

(P2019-189604A)

(43) 公開日 令和1年10月31日 (2019. 10. 31)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
C07F 15/00 (2006.01)	C O 7 F 15/00 C S P E	2 G O 4 5
C07C 49/17 (2006.01)	C O 7 C 49/17 Z	3 K 1 0 7
C09K 11/06 (2006.01)	C O 9 K 11/06 6 6 O	4 C O 5 0
H01L 51/50 (2006.01)	H O 5 B 33/14 B	4 C O 7 1
C07D 491/048 (2006.01)	C O 7 D 491/048	4 C O 7 2
審査請求 未請求 請求項の数 20 O L (全 79 頁) 最終頁に続く		

(21) 出願番号 特願2019-81877 (P2019-81877)
 (22) 出願日 平成31年4月23日 (2019. 4. 23)
 (31) 優先権主張番号 10-2018-0046992
 (32) 優先日 平成30年4月23日 (2018. 4. 23)
 (33) 優先権主張国・地域又は機関
 韓国 (KR)
 (31) 優先権主張番号 10-2019-0046230
 (32) 優先日 平成31年4月19日 (2019. 4. 19)
 (33) 優先権主張国・地域又は機関
 韓国 (KR)

(71) 出願人 390019839
 三星電子株式会社
 Samsung Electronics
 Co., Ltd.
 大韓民国京畿道水原市靈通区三星路129
 129, Samsung-ro, Yeon
 gtong-gu, Suwon-si, G
 yeonggi-do, Republic
 of Korea
 (74) 代理人 110000051
 特許業務法人共生国際特許事務所
 (72) 発明者 崔 華 逸
 大韓民国 京畿道 水原市 靈通区 三星
 路 130 三星綜合技術院内

最終頁に続く

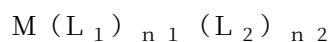
(54) 【発明の名称】 有機金属化合物とそれを含む有機発光素子及び診断用組成物

(57) 【要約】

【課題】 有機金属化合物とそれを含む有機発光素子及び診断用組成物を提供する。

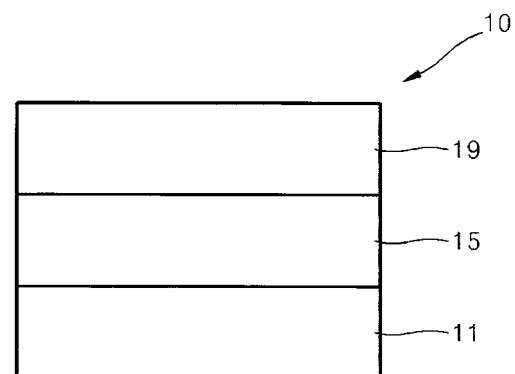
【解決手段】 本発明の有機金属化合物は、下記化学式1で表される。

〔化1〕



上記化学式1で、M、 L_1 、 L_2 、 $n1$ 、及び $n2$ に関する説明は、明細書の発明の詳細な説明を参照する。

【選択図】 図1

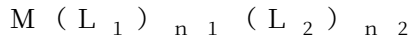


【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記化学式 1 で表されることを特徴とする有機金属化合物。

〔化 1〕



前記化学式 1 で、M は、第 1 周期遷移金属、第 2 周期遷移金属、及び第 3 周期遷移金属のうちから選択され、

前記化学式 1 で、 L_1 は、下記化学式 2 で表されるリガンドであり、

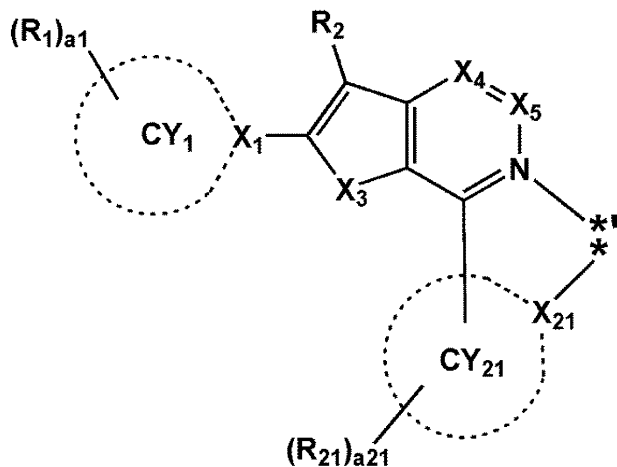
前記化学式 1 で、 n_1 は、1、2、又は 3 であり、 n_1 が 2 以上である場合、2 以上の L_1 は、それぞれ同一であるか又は異なり、

前記化学式 1 で、 L_2 は、単座リガンド、二座リガンド、三座リガンド、及び四座リガンドのうちから選択され、

前記化学式 1 で、 n_2 は、0、1、2、3、又は 4 であり、 n_2 が 2 以上である場合、2 以上の L_2 は、それぞれ同一であるか又は異なり、

前記化学式 1 で、 L_1 と L_2 とは、互いに異なり、

【化 2】



前記化学式 2 で、

X_1 は、C、N、Si、又は P であり、

X_{21} は、C 又は N であり、

環 CY_1 及び環 CY_{21} は、互いに独立して、 $C_3 - C_{60}$ 炭素環式基又は $C_1 - C_6$ ヘテロ環式基であり、

X_3 は、O、S、Se、又は N (R_3) であり、

X_4 は、N 又は C (R_4) であり、

X_5 は、N 又は C (R_5) であり、

R_1 ないし R_5 、及び R_{21} は、それぞれ独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-SF_5$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ アルキル基、置換若しくは非置換の $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、置換若しくは非置換の $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ 、 $-B(Q_6)(Q_7)$ 、及び $-P(=O)(Q_8)$

(Q₉) のうちから選択され、

a 1 及び a 2 1 は、互いに独立して、0～20のうちから選択される整数であり、

環 C Y₁ と R₂ とは、互いに結合されず、R₁ と R₂ とは、互いに結合されず、

R₄ と R₅ とは、選択的に互いに連結され、少なくとも1つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない C₅ - C₃₀ 炭素環式基、又は少なくとも1つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない C₁ - C₃₀ ヘテロ環式基を形成し

それぞれ隣接する複数の R₂₁ において、2個以上は、選択的に互いに連結され、少なくとも1つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない C₅ - C₃₀ 炭素環式基、又は少なくとも1つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない C₁ - C₃₀ ヘテロ環式基を形成し、

R_{10a} についての説明は、前記 R₂₁ についての説明を参照し、

* 及び * ' は、それぞれ前記化学式 1 において、M との結合サイトであり、

前記置換された C₁ - C₆₀ アルキル基、置換された C₂ - C₆₀ アルケニル基、置換された C₂ - C₆₀ アルキニル基、置換された C₁ - C₆₀ アルコキシ基、置換された C₃ - C₁₀ シクロアルキル基、置換された C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、置換された C₃ - C₁₀ シクロアルケニル基、置換された C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、置換された C₆ - C₆₀ アリール基、置換された C₆ - C₆₀ アリールオキシ基、置換された C₆ - C₆₀ アリールチオ基、置換された C₁ - C₆₀ ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基のうちの少なくとも一つは、

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C₁ - C₆₀ アルキル基、C₂ - C₆₀ アルケニル基、C₂ - C₆₀ アルキニル基、及び C₁ - C₆₀ アルコキシ基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C₃ - C₁₀ シクロアルキル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、C₃ - C₁₀ シクロアルケニル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、C₆ - C₆₀ アリール基、C₆ - C₆₀ アリールオキシ基、C₆ - C₆₀ アリールチオ基、C₁ - C₆₀ ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N(Q₁₁)(Q₁₂)、-Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅)、-B(Q₁₆)(Q₁₇)、及び -P(=O)(Q₁₈)(Q₁₉) のうちの少なくとも一つで置換された、C₁ - C₆₀ アルキル基、C₂ - C₆₀ アルケニル基、C₂ - C₆₀ アルキニル基、及び C₁ - C₆₀ アルコキシ基；

C₃ - C₁₀ シクロアルキル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、C₃ - C₁₀ シクロアルケニル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、C₆ - C₆₀ アリール基、C₆ - C₆₀ アリールオキシ基、C₆ - C₆₀ アリールチオ基、C₁ - C₆₀ ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、C₁ - C₆₀ アルキル基、C₂ - C₆₀ アルケニル基、C₂ - C₆₀ アルキニル基、C₁ - C₆₀ アルコキシ基、C₃ - C₁₀ シクロアルキル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、C₃ - C₁₀ シクロアルケニル基、C₁ - C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、C₆ - C₆₀ アリール基、C₆ - C₆₀ アリールオキシ基、C₆ - C₆₀ アリールチオ基、C₁ - C₆₀ ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N(Q₂₁)(Q₂₂)、-Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅)、-B(Q₂₆)(Q₂₇)、及び -P(=O)(Q₂₈)(Q₂₉) のうちの少

10

20

30

40

50

なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

$-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 、 $-B(Q_{36})(Q_{37})$ 、及び $-P(=O)(Q_{38})(Q_{39})$ ；のうちから選択され、

前記 Q_1 ないし Q_9 、 Q_{11} ないし Q_{19} 、 Q_{21} ないし Q_{29} 、及び Q_{31} ないし Q_{39} は、それぞれ独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} アルキル基、及び C_6-C_{60} アリール基のうち少なくとも一つで置換された、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択される。

【請求項 2】

前記 M は、 Ir 又は Os であり、 n_1+n_2 は、3又は4であるか、或いは

前記 M は、 Pt であり、 n_1+n_2 は、2であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機金属化合物。

【請求項 3】

前記環 CY_1 及び環 CY_{21} は、互いに独立して、シクロペンテン基、シクロヘキセン基、ベンゼン基、ナフタレン基、アントラセン基、フェナントレン基、トリフェニレン基、ピレン基、クリセン基、シクロペンタジエン基、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン基、チオフェン基、フラン基、インドール基、ベンゾボロール基、ベンゾホスホール基、インデン基、ベンゾシロール基、ベンゾゲルモール基、ベンゾチオフェン基、ベンゾセレノフェン基、ベンゾフラン基、カルバゾール基、ジベンゾボロール基、ジベンゾホスホール基、フルオレン基、ジベンゾシロール基、ジベンゾゲルモール基、ジベンゾチオフェン基、ジベンゾセレノフェン基、ジベンゾフラン基、ジベンゾチオフェン5-オキシド基、9H-フルオレン-9-オン基、ジベンゾチオフェン5, 5-ジオキシド基、アザインドール基、アザベンゾボロール基、アザベンゾホスホール基、アザインデン基、アザベンゾシロール基、アザベンゾゲルモール基、アザベンゾチオフェン基、アザベンゾセレノフェン基、アザベンゾフラン基、アザカルバゾール基、アザジベンゾボロール基、アザジベンゾホスホール基、アザフルオレン基、アザジベンゾシロール基、アザジベンゾゲルモール基、アザジベンゾチオフェン基、アザジベンゾセレノフェン基、アザジベンゾフラン基、アザジベンゾチオフェン5-オキシド基、アザ9H-フルオレン-9-オン基、アザジベンゾチオフェン5, 5-ジオキシド基、ピリジン基、ピリミジン基、ピラジン基、ピリダジン基、トリアジン基、キノリン基、イソキノリン基、キノキサリン基、キナゾリン基、フェナントロリン基、ピロール基、ピラゾール基、イミダゾール基、トリアゾール基、オキサゾール基、イソオキサゾール基、チアゾール基、イソチアゾール基、オキサジアゾール基、チアジアゾール基、ベンゾピラゾール基、ベンゾイミダゾール基、ベンゾオキサゾール基、ベンゾチアゾール基、ベンゾオキサジアゾール基、ベンゾチアジアゾール基、5, 6, 7, 8-テトラヒドロイソキノリン基、及び5, 6, 7, 8-テトラヒドロキノリン基のうちから選択されることを特徴とする請求項 1 に記載の有機金属化合物。

【請求項 4】

前記 X_3 は、 O 又は S であり、

X_5 は、 $C(R_5)$ であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機金属化合物。

【請求項 5】

10

20

30

40

50

前記 R_1 ないし R_5 、及び R_{21} は、それぞれ独立して、

水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 $-SF_5$ 、 C_1-C_{20} アルキル基、及び C_1-C_{20} アルコキシ基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、 $-CFH_2$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{10} アルキル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、及びピリミジニル基のうちの少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{20} アルキル基及び C_1-C_{20} アルコキシ基；

10

20

30

40

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、 $-CFH_2$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、フェニル基、ビフェニル基、 C_1-C_{20} アルキルフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントロリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、イミダゾピリジニル基、及びイミダゾピリミジニル基のうちから選択される少なくとも一つで置換されたか若しくは置換されない、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、フェニル基、ビフェニル基、 C_1-C_{20} アルキルフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントロリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、イミダゾピリジニル基、及びイミダゾピリミジニル基；並びに

$-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ 、 $-B(Q_6)(Q_7)$ 、及び $-P(=O)(Q_8)(Q_9)$ ；のうちから選択され、

Q_1 ないし Q_9 は、それぞれ独立して、

$-CH_3$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-CH_2CD_3$ 、 $-$

50

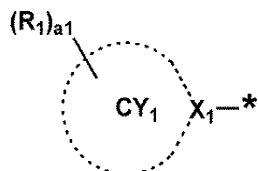
$\text{CH}_2\text{CD}_2\text{H}$ 、 $-\text{CH}_2\text{CDH}_2$ 、 $-\text{CHDCH}_3$ 、 $-\text{CHDCH}_2\text{H}$ 、 $-\text{CHDCH}_2\text{H}_2$ 、 $-\text{CHDCH}_2\text{H}_3$ 、 $-\text{CD}_2\text{CH}_3$ 、 $-\text{CD}_2\text{CH}_2\text{H}$ 、及び $-\text{CD}_2\text{CH}_2\text{H}_2$ ；並びに

重水素、 C_1-C_{10} アルキル基及びフェニル基のうちから選択される少なくとも一つで置換されたか若しくは置換されない、 n -プロピル基、イソプロピル基、 n -ブチル基、イソブチル基、 sec -ブチル基、 tert -ブチル基、 n -ペンチル基、イソペンチル基、 sec -ペンチル基、 tert -ペンチル基、フェニル基、及びナフチル基；のうちから選択されることを特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。

【請求項6】

前記化学式2の

【化2-1】



10

で表される基は、 $a1$ 個の R_1 で置換されたか若しくは置換されない、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

20

前記化学式2の R_1 及び R_2 は、互いに独立して、

水素、重水素、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、 $-\text{I}$ 、シアノ基、及び $-\text{SF}_5$ ；並びに

重水素、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、 $-\text{I}$ 、 $-\text{CD}_3$ 、 $-\text{CD}_2\text{H}$ 、 $-\text{CDH}_2$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CF}_2\text{H}$ 、 $-\text{CFH}_2$ 、シアノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、及びピリミジニル基のうちの少なくとも一つで置換されたか若しくは置換されない、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；のうちから選択され、

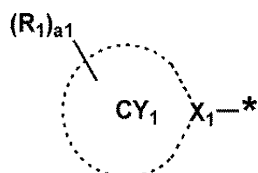
30

前記 $a1$ は、 $0\sim 10$ の整数のうちから選択されることを特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。

【請求項7】

前記化学式2の

【化2-1】



40

で表される基は、 $a1$ 個の R_1 で置換されたか若しくは置換されない、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントロリニル基、ベンゾイミダゾリル基

50

、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、イミダゾピリジニル基、及びイミダゾピリミジニル基のうちから選択され、

前記化学式 2 の R_1 及び R_2 は、互いに独立して、

水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基、及び $-SF_5$ ；並びに

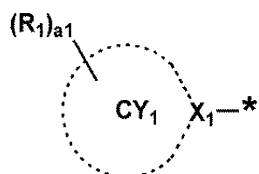
重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、 $-CFH_2$ 、シアノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、ジベンゾフラニル基、及びジベンゾチオフェニル基のうち少なくとも一つで置換されたか若しくは置換されない、メチル基、エチル基、プロピル基、 n -ブチル基、イソブチル基、 sec -ブチル基、 $tert$ -ブチル基、 n -ペンチル基、イソペンチル基、 sec -ペンチル基、 $tert$ -ペンチル基、 n -ヘキシル基、イソヘキシル基、 sec -ヘキシル基、 $tert$ -ヘキシル基、 n -ヘプチル基、イソヘプチル基、 sec -ヘプチル基、 $tert$ -ヘプチル基、 n -オクチル基、イソオクチル基、 sec -オクチル基、 $tert$ -オクチル基、 n -ノニル基、イソノニル基、 sec -ノニル基、 $tert$ -ノニル基、 n -デカニル基、イソデカニル基、 sec -デカニル基、 $tert$ -デカニル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、ジベンゾフラニル基、及びジベンゾチオフェニル基；のうちから選択され、

前記 a_1 は、0～5の整数のうちから選択されることを特徴とする請求項 1 に記載の有機金属化合物。

【請求項 8】

前記化学式 2 の

【化 2-1】



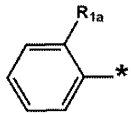
で表される基は、下記化学式 10-13 (1)～10-13 (18)、及び化学式 10-13 で表される基のうちから選択されることを特徴とする請求項 1 に記載の有機金属化合物。

10

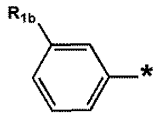
20

30

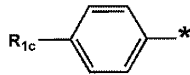
【化(10-13(1))-(10-13)】



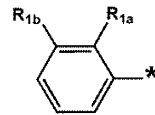
10-13(1)



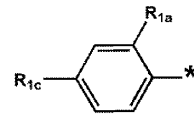
10-13(2)



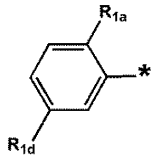
10-13(3)



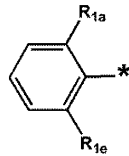
10-13(4)



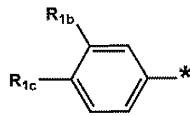
10-13(5)



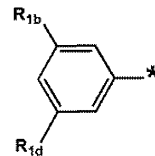
10-13(6)



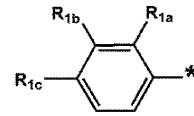
10-13(7)



10-13(8)

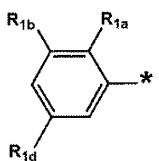


10-13(9)

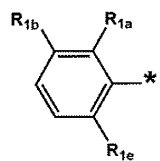


10-13(10)

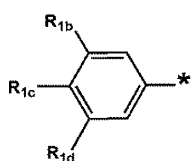
10



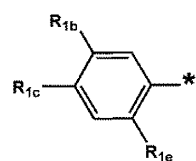
10-13(11)



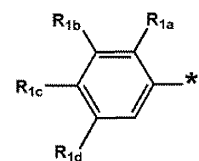
10-13(12)



10-13(13)

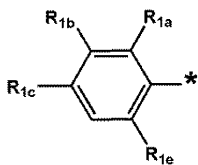


10-13(14)

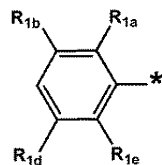


10-13(15)

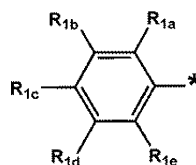
20



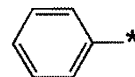
10-13(16)



10-13(17)



10-13(18)



10-13

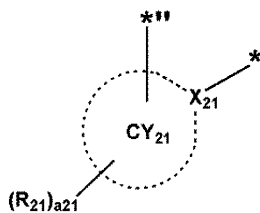
前記化学式10-13(1)~10-13(18)、及び化学式10-13で、 R_{1a} ないし R_{1e} についての説明は、それぞれ請求項1において、 R_1 についての説明を参照するが、 R_{1a} ないし R_{1e} は、水素ではなく、*は、隣接する原子との結合サイトである。

30

【請求項9】

前記化学式2で、

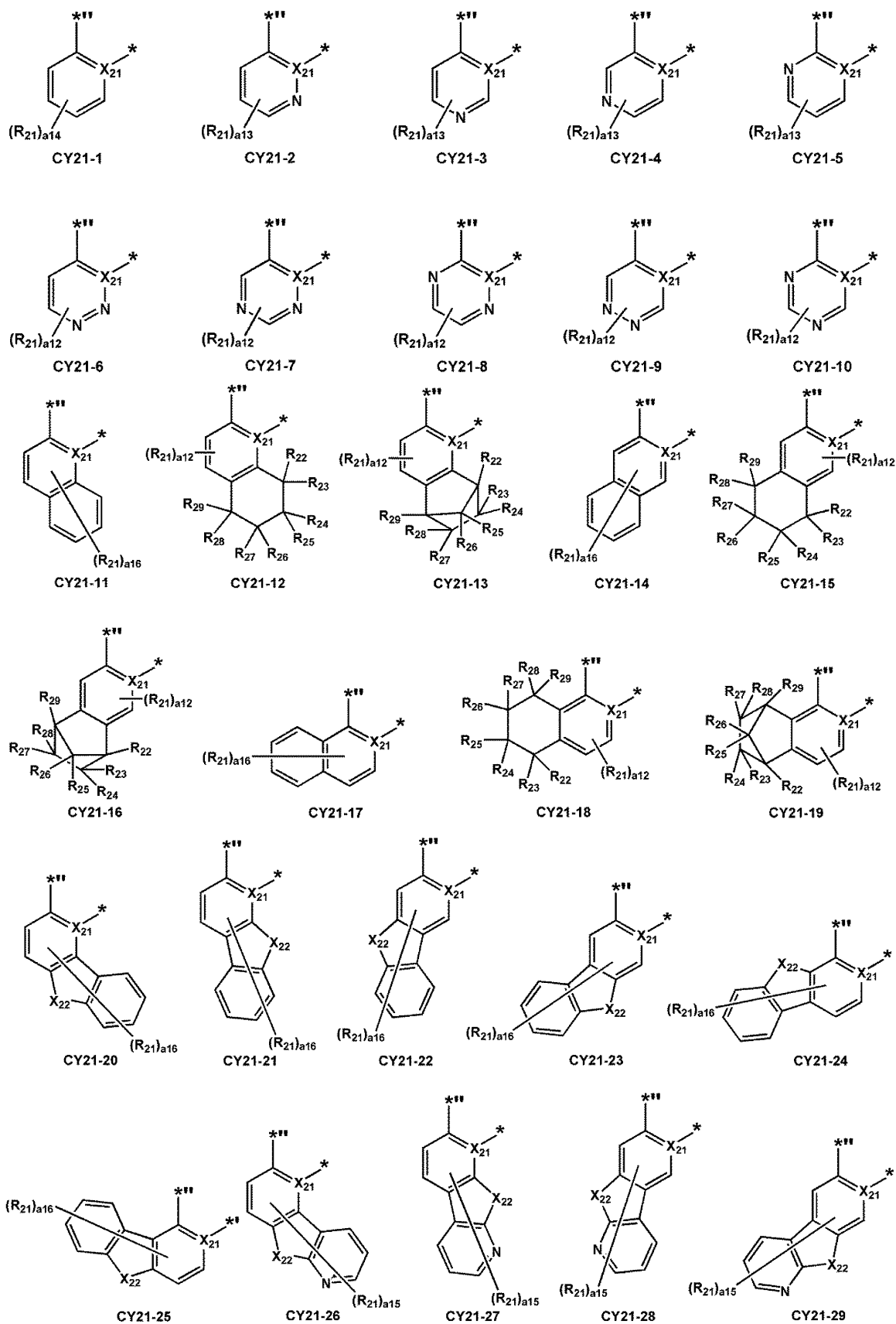
【化2-21】



で表される基は、下記化学式CY21-1~CY21-31で表される基のうちから選択されることを特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。

40

【化 (CY21-1) - (CY21-29)】



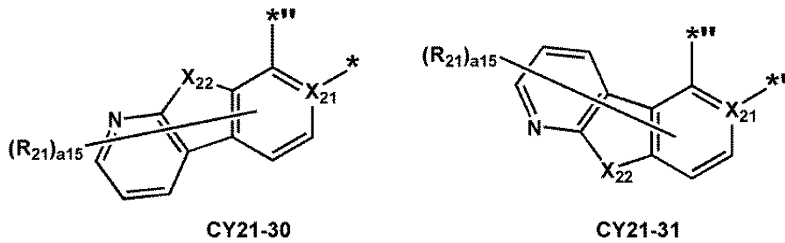
10

20

30

40

【化 (CY21-30) - (CY21-31)】



前記化学式CY21-1～CY21-31で、

X₂₁及びR₂₁についての説明は、それぞれ請求項1に記載された箇所を参照し、

10

X₂₂は、C(R₂₂)(R₂₃)、N(R₂₂)、O、S、又はSi(R₂₂)(R₂₃)であり、

R₂₂ないしR₂₉についての説明は、それぞれ請求項1において、R₂₁についての説明を参照し、

a₁₆は、0～6の整数のうちから選択され、

a₁₅は、0～5の整数のうちから選択され、

a₁₄は、0～4の整数のうちから選択され、

a₁₃は、0～3の整数のうちから選択され、

a₁₂は、0～2の整数のうちから選択され、

*[〃]は、前記化学式2で、隣接する6員環の炭素原子との結合サイトであり、

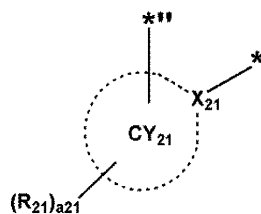
20

*は、前記化学式1において、Mとの結合サイトである。

【請求項10】

前記化学式2で、

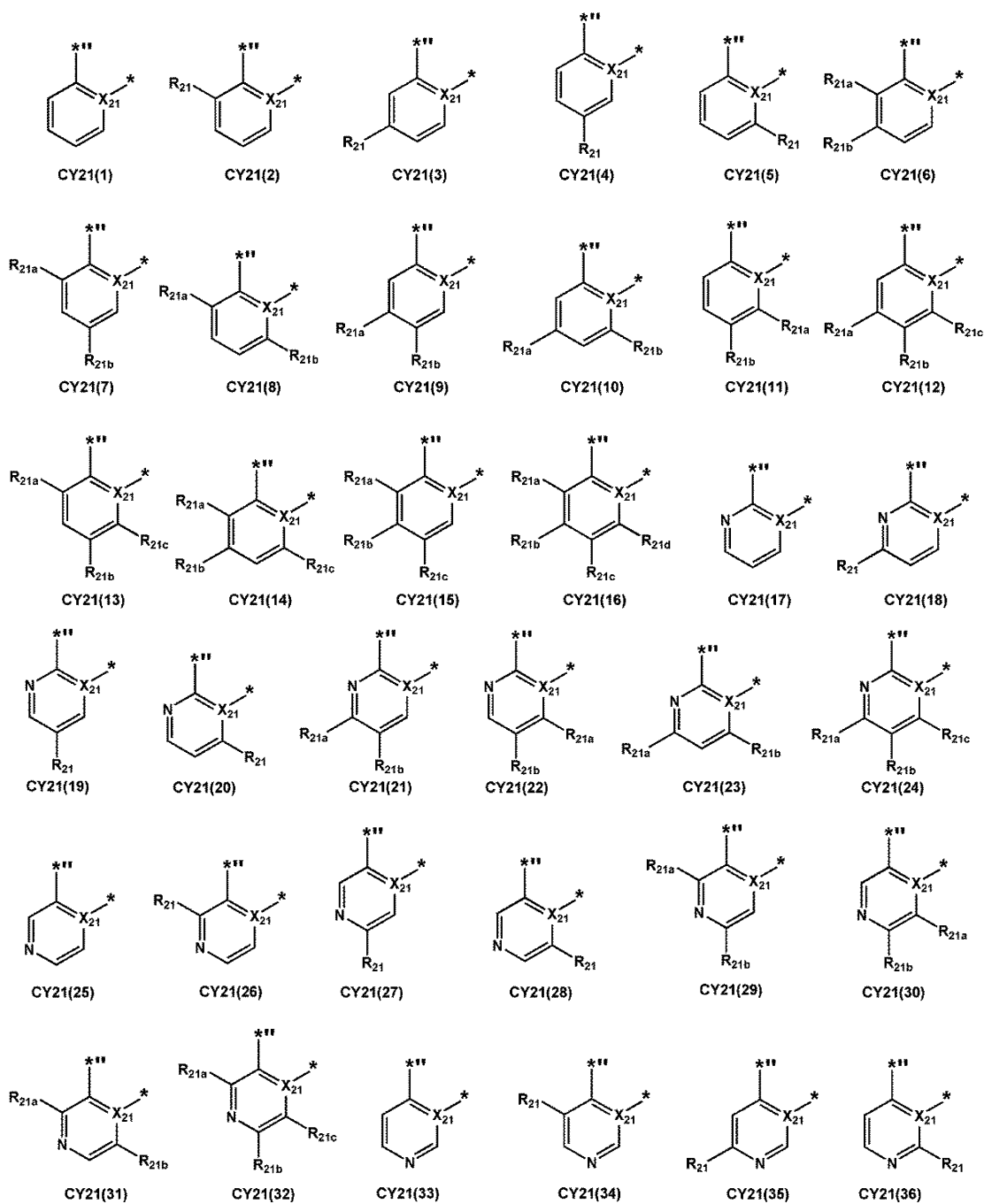
【化2-21】



30

で表される基は、下記化学式CY21(1)～CY21(56)で表される基、及び前記化学式CY21-20～CY21-31で表される基のうちから選択されることを特徴とする請求項9に記載の有機金属化合物。

【化CY21(1) - CY21(36)】

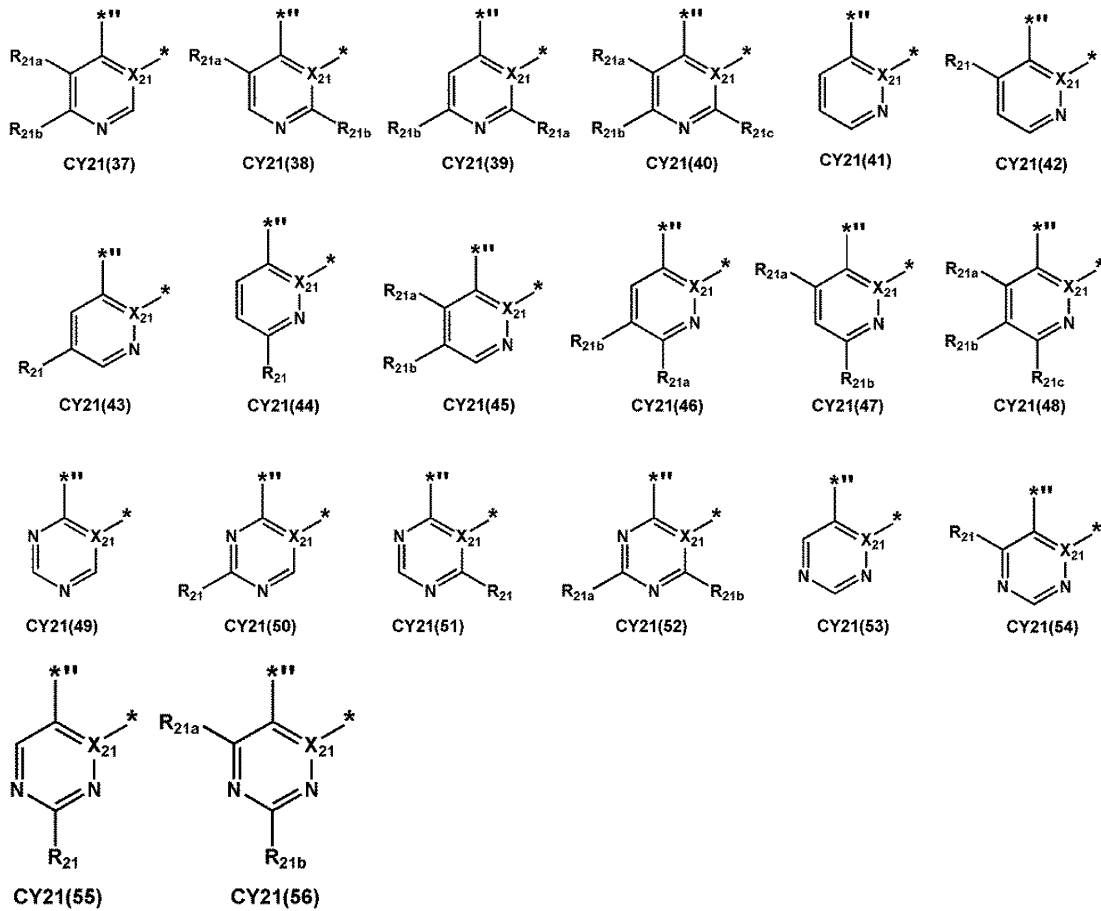


10

20

30

【化CY21(37) - CY21(56)】



10

20

前記化学式CY21(1) ~ CY21(56)で、

X₂₁及びR₂₁についての説明は、それぞれ請求項1に記載された箇所を参照し、

R_{21a}ないしR_{21d}についての説明は、それぞれ請求項1において、R₂₁についての説明を参照するが、R₂₁、及びR_{21a}ないしR_{21d}は、水素ではなく、

30

＊”は、前記化学式2で、隣接する6員環の炭素原子との結合サイトであり、

＊は、前記化学式1において、Mとの結合サイトである。

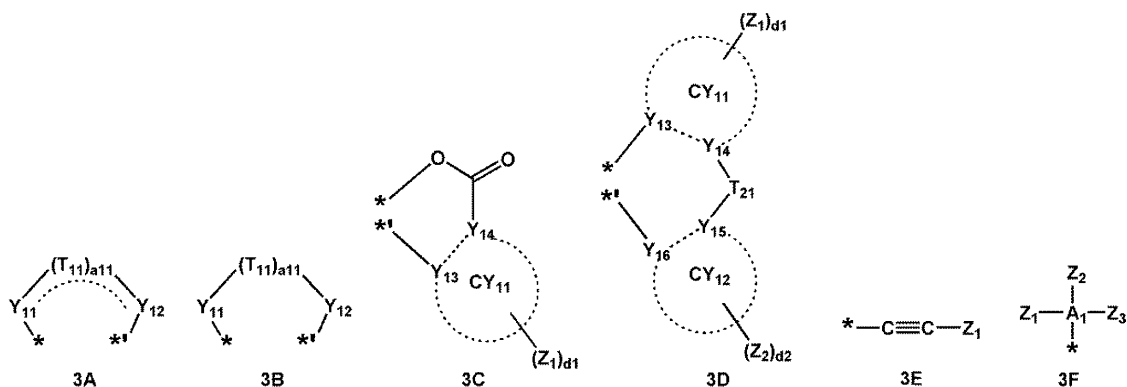
【請求項11】

前記化学式1で、L₂は、前記化学式1のMと、O、S、N、又はPとを介して、それぞれ結合された二座リガンドのうちから選択されることを特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。

【請求項12】

前記化学式1で、L₂は、下記化学式3A ~ 3Fで表される基のうちから選択されることを特徴とする請求項1に記載の有機金属化合物。

【化 3 A - 3 F】



10

前記化学式 3 A ~ 3 F で、

Y_{1 1} は、O、N、N (Z₁)、P (Z₁) (Z₂)、及び A s (Z₁) (Z₂) のうちから選択され、

Y_{1 2} は、O、N、N (Z₃)、P (Z₃) (Z₄)、及び A s (Z₃) (Z₄) のうちから選択され、

T_{1 1} は、それぞれ独立して、単一結合、二重結合、* - C (Z_{1 1}) (Z_{1 2}) - * '、* - C (Z_{1 1}) = C (Z_{1 2}) - * '、* = C (Z_{1 1}) - * '、* - C (Z_{1 1}) = * '、* = C (Z_{1 1}) - C (Z_{1 2}) = C (Z_{1 3}) - * '、* - C (Z_{1 1}) = C (Z_{1 2}) - C (Z_{1 3}) = * '、* - N (Z_{1 1}) - * '、及び少なくとも 1 つの Z_{1 1} で置換されたか若しくは置換されない C₅ - C_{3 0} 炭素環式基のうちから選択され、

20

a_{1 1} は、1 ~ 10 のうちから選択される整数であり、

Y_{1 3} ないし Y_{1 6} は、それぞれ独立して、C 又は N であり、

T_{2 1} は、単一結合、二重結合、O、S、C (Z_{1 1}) (Z_{1 2})、S i (Z_{1 1}) (Z_{1 2})、又は N (Z_{1 1}) であり、

環 C Y_{1 1} 及び C Y_{1 2} は、互いに独立して、C₃ - C_{6 0} 炭素環式基及び C₁ - C_{6 0} ヘテロ環式基のうちから選択され、

A₁ は、P 又は A s であり、

Z₁ ないし Z₄、及び Z_{1 1} ないし Z_{1 3} についての説明は、それぞれ請求項 1 において、R_{2 1} についての説明を参照し、

30

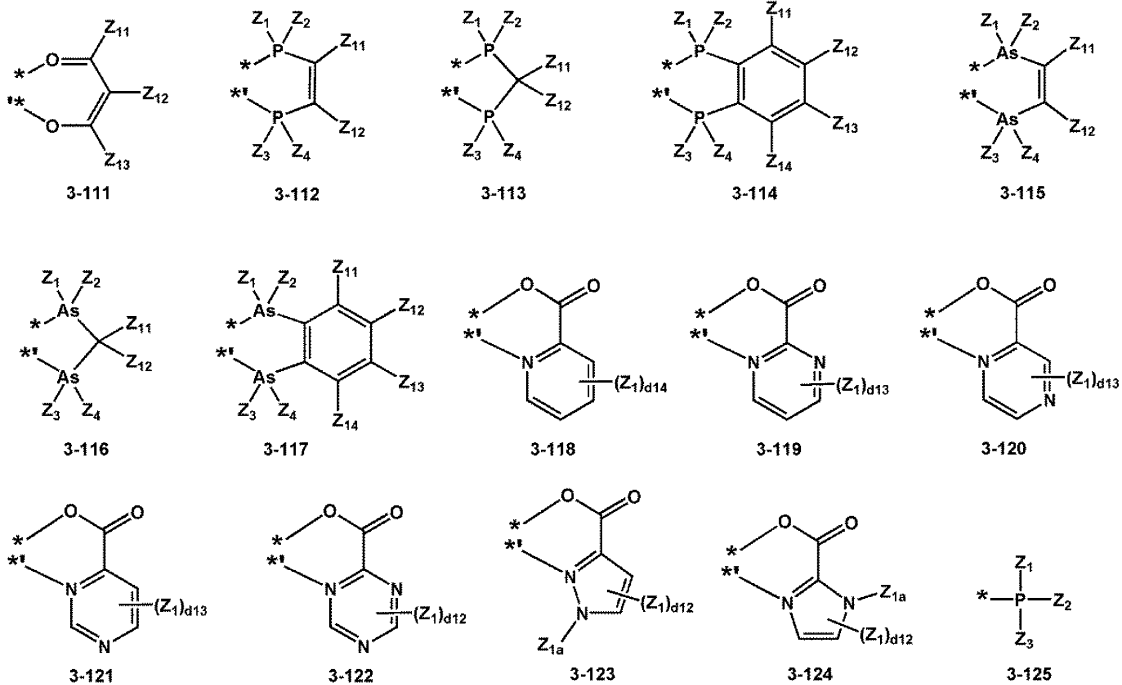
d₁ 及び d₂ は、互いに独立して、0 ~ 10 の整数のうちから選択され、

* 及び * ' は、前記化学式 1 において、M との結合サイトである。

【請求項 1 3】

前記化学式 1 で、L₂ は、下記化学式 3 - 1 1 1 ~ 3 - 1 2 5 で表される基のうちから選択されることを特徴とする請求項 1 に記載の有機金属化合物。

【化 (3 - 1 1 1) - (3 - 1 2 5) 】



10

20

前記化学式 3 - 1 1 1 ~ 3 - 1 2 5 で、

Z_1 ないし Z_4 、 Z_{1a} 、 Z_{1b} 、 Z_{2a} ないし Z_{2c} 、及び Z_{11} ないし Z_{14} についての説明は、それぞれ請求項 1 において、 R_{21} についての説明を参照し、

d_{14} は、0 ~ 4 の整数のうちから選択され、

d_{13} は、それぞれ独立して、0 ~ 3 の整数のうちから選択され、

d_{12} は、それぞれ独立して、0 ~ 2 の整数のうちから選択され、

* 及び * ' は、前記化学式 1 において、M との結合サイトである。

【請求項 1 4】

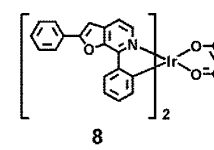
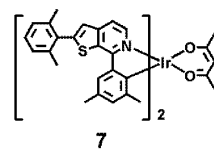
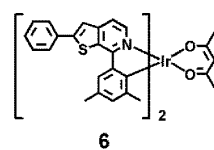
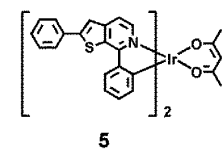
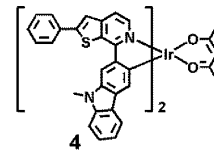
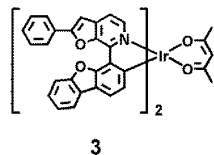
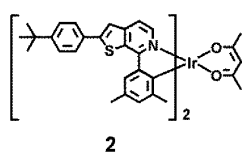
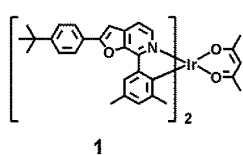
550 nm 以上の最大発光波長を有する赤色光を放出することを特徴とする請求項 1 に記載の有機金属化合物。

30

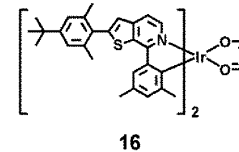
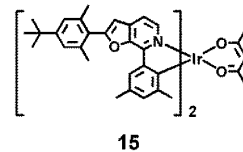
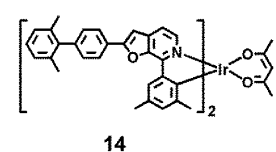
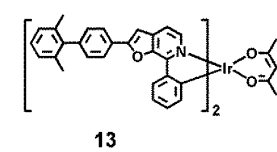
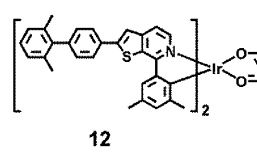
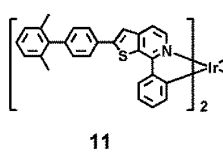
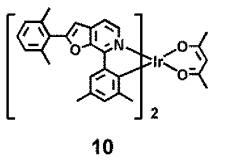
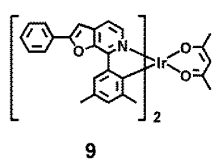
【請求項 1 5】

下記化合物 1 ~ 78 のうちの 1 つであることを特徴とする請求項 1 に記載の有機金属化合物。

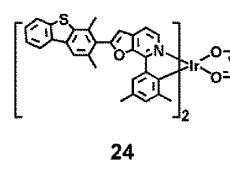
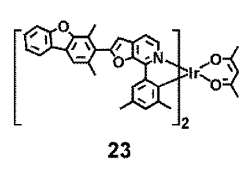
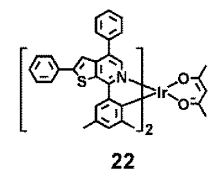
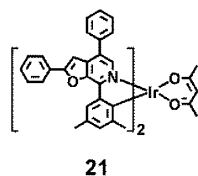
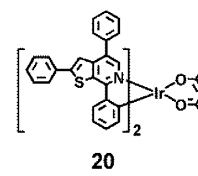
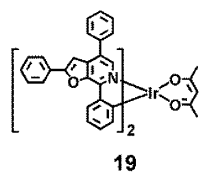
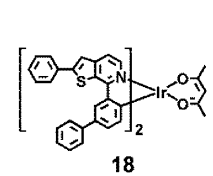
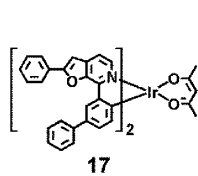
【化 1 - 3 2】



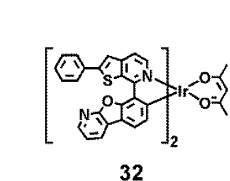
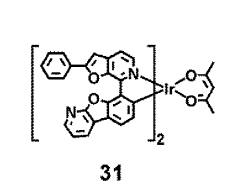
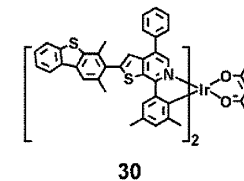
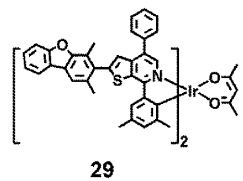
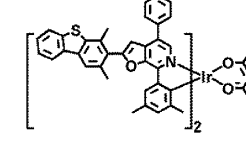
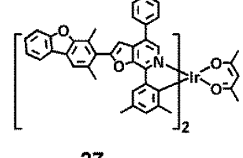
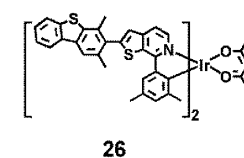
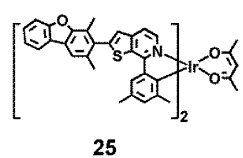
10



20

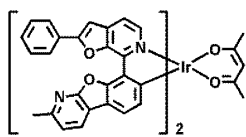


30

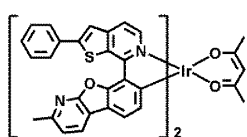


40

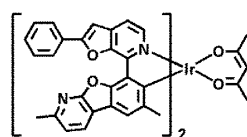
【化 3 3 - 5 6】



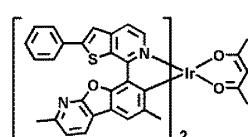
33



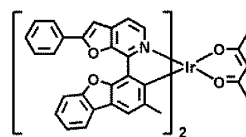
34



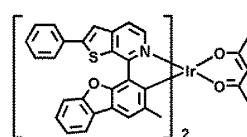
35



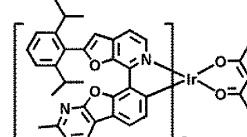
36



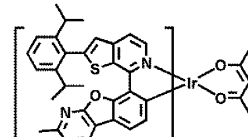
37



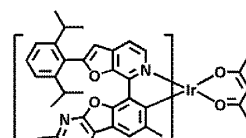
38



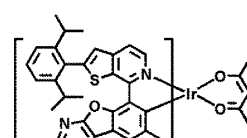
39



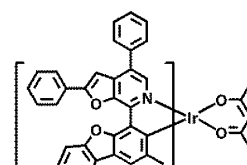
40



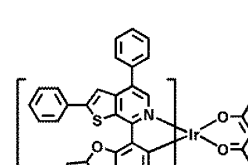
41



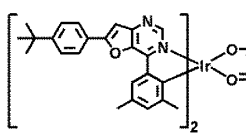
42



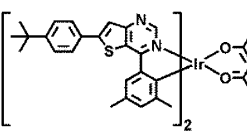
43



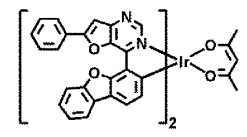
44



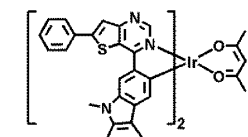
45



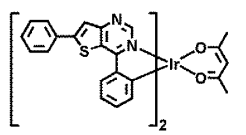
46



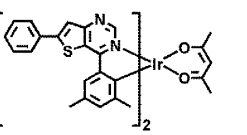
47



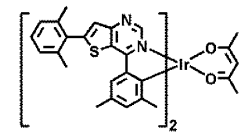
48



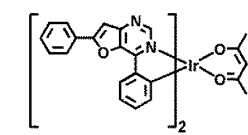
49



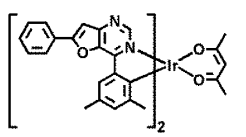
50



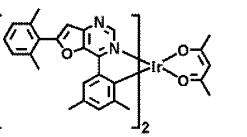
51



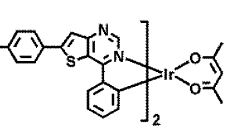
52



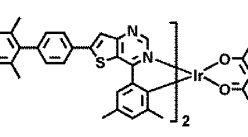
53



54



55



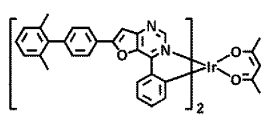
56

10

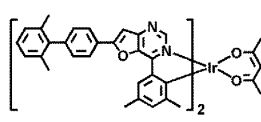
20

30

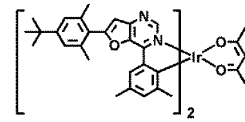
【化 57 - 78】



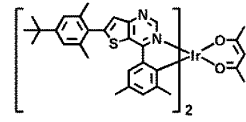
57



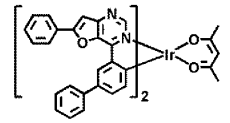
58



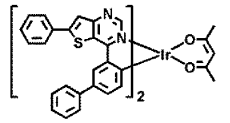
59



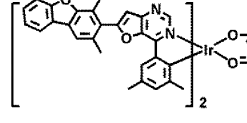
60



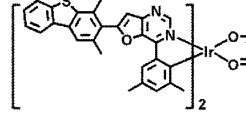
61



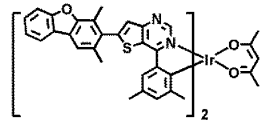
62



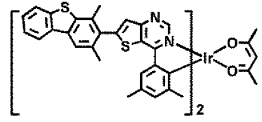
63



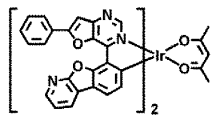
64



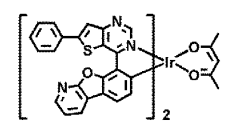
65



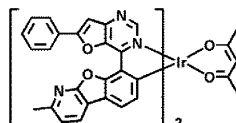
66



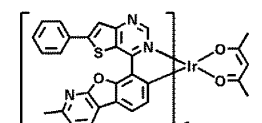
67



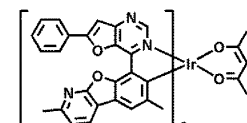
68



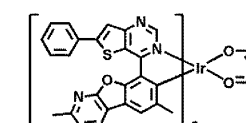
69



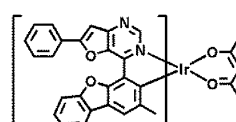
70



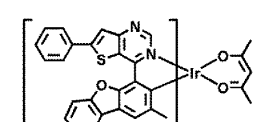
71



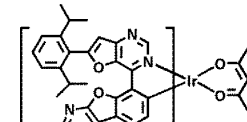
72



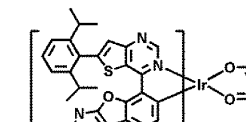
73



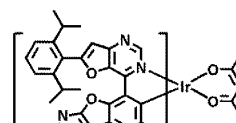
74



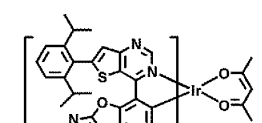
75



76



77



78

【請求項 16】

第 1 電極と、

第 2 電極と、

前記第 1 電極と前記第 2 電極との間に配置されて発光層を含む有機層と、を備え、

前記有機層は、請求項 1 乃至 15 のいずれか 1 項に記載の有機金属化合物を 1 種以上含むことを特徴とする有機発光素子。

【請求項 17】

前記第 1 電極は、アノードであり、

前記第 2 電極は、カソードであり、

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

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

前記電子輸送領域は、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、又はその任意の組み合わせを含むことを特徴とする請求項 16 に記載の有機発光素子。

【請求項 18】

前記有機金属化合物は、前記発光層に含まれることを特徴とする請求項 16 に記載の有機

10

20

30

40

50

機発光素子。

【請求項 19】

前記発光層はホストを更に含み、前記ホストの含量は、前記有機金属化合物の含量よりも多いことを特徴とする請求項 18 に記載の有機発光素子。

【請求項 20】

請求項 1 乃至 15 のいずれか 1 項に記載の有機金属化合物を含むことを特徴とする診断用組成物。

【発明の詳細な説明】

10

【技術分野】

【0001】

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

【背景技術】

【0002】

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

【0003】

20

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

【0004】

一方、各種細胞、タンパク質のような生物学的物質のモニタリング、センシング、検出などに、発光化合物、例えばリン光発光化合物が使用される。

30

【先行技術文献】

【特許文献】

【0005】

【特許文献 1】特開 2017-39713 号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

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

40

【課題を解決するための手段】

【0007】

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

〔化 1〕



前記化学式 1 で、M は、第 1 周期遷移金属、第 2 周期遷移金属、及び第 3 周期遷移金属のうちから選択され、

前記化学式 1 で、 L_1 は、下記化学式 2 で表されるリガンドであり、

前記化学式 1 で、 n_1 は、1、2、又は 3 であり、 n_1 が 2 以上である場合、2 以上の

50

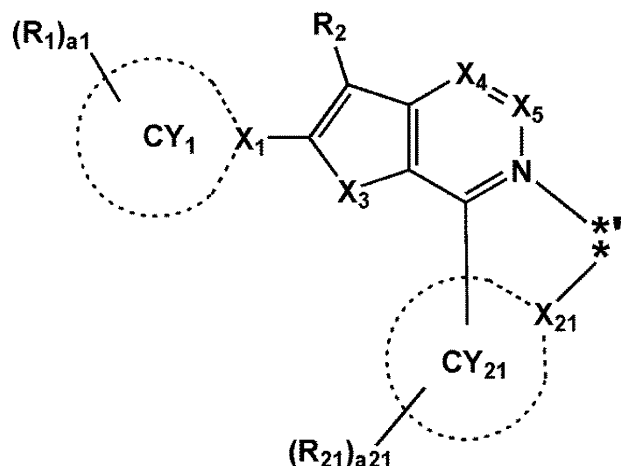
L_1 は、それぞれ同一であるか又は異なり、

前記化学式 1 で、 L_2 は、単座 (monodentate) リガンド、二座 (bidentate) リガンド、三座 (tridentate) リガンド、及び四座 (tetradentate) リガンドのうちから選択され、

前記化学式 1 で、 n_2 は、0、1、2、3、又は 4 であり、 n_2 が 2 以上である場合、2 以上の L_2 は、それぞれ同一であるか又は異なり、

前記化学式 1 で、 L_1 と L_2 とは、互いに異なり、

【化 2】



前記化学式 2 で、

X_1 は、C、N、Si、又は P であり、

X_{21} は、C 又は N であり、

環 CY_1 及び環 CY_{21} は、互いに独立して、 $C_3 - C_{60}$ 炭素環式基又は $C_1 - C_{60}$ ヘテロ環式基であり、

X_3 は、O、S、Se、又は N (R_3) であり、

X_4 は、N 又は C (R_4) であり、

X_5 は、N 又は C (R_5) であり、

R_1 ないし R_5 、及び R_{21} は、それぞれ独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-SF_5$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ アルキル基、置換若しくは非置換の $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、置換若しくは非置換の $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換若しくは非置換の $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換若しくは非置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ 、 $-B(Q_6)(Q_7)$ 、及び $-P(=O)(Q_8)(Q_9)$ のうちから選択され、

a_1 及び a_{21} は、互いに独立して、0～20 のうちから選択される整数であり、

環 CY_1 と R_2 とは、互いに結合されず、 R_1 と R_2 とは、互いに結合されず、

R_4 と R_5 とは、選択的に互いに連結され、少なくとも 1 つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない $C_5 - C_{30}$ 炭素環式基、又は少なくとも 1 つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない $C_1 - C_{30}$ ヘテロ環式基を形成し、

それぞれ隣接する複数の R_{21} において、2 個以上は、選択的に互いに連結され、少なくとも 1 つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない $C_5 - C_{30}$ 炭素環式基、又

は少なくとも1つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない C_1-C_{30} ヘテロ環式基を形成し、

R_{10a} についての説明は、前記 R_{21} についての説明を参照し、

及び'は、それぞれ前記化学式1において、Mとの結合サイトであり、

前記置換された C_1-C_{60} アルキル基、置換された C_2-C_{60} アルケニル基、置換された C_2-C_{60} アルキニル基、置換された C_1-C_{60} アルコキシ基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換された C_6-C_{60} アリール基、置換された C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換された C_6-C_{60} アリールチオ基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基のうちの少なくとも一つは、

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、 $-CFH_2$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、 $-CFH_2$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-Si(Q_{13})(Q_{14})(Q_{15})$ 、 $-B(Q_{16})(Q_{17})$ 、及び $-P(=O)(Q_{18})(Q_{19})$ のうちの少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、 $-CFH_2$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$ 、 $-B(Q_{26})(Q_{27})$ 、及び $-P(=O)(Q_{28})(Q_{29})$ のうちの少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

$-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 、 $-B(Q_{36})(Q_{37})$ 、及び $-P(=O)(Q_{38})(Q_{39})$ ；のうちから選択され、

前記 Q_1 ないし Q_9 、 Q_{11} ないし Q_{19} 、 Q_{21} ないし Q_{29} 、及び Q_{31} ないし Q

10

20

30

40

50

_{3 9} は、それぞれ独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} アルキル基、及び C_6-C_{60} アリール基のうちの少なくとも一つで置換された、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択される。

10

【0008】

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

【0009】

前記有機層において、有機金属化合物は、ドーパントの役割を行う。

【0010】

上記目的を達成するためになされた本発明の一態様による診断用組成物は、前記化学式1で表される有機金属化合物を1種以上含む。

【発明の効果】

20

【0011】

本発明による有機金属化合物は、高いスピン密度 (spin density) 及び高い放射減衰率 (radiative decay rate) を有し、有機金属化合物を用いた電子素子、例えば有機発光素子は、向上した駆動電圧、効率、色純度、及び／又は寿命特性を有する。また、有機金属化合物は、優秀なリン光発光特性を有するため、それを利用すると、高い診断効率を有する診断用組成物を提供することができる。

【図面の簡単な説明】

【0012】

【図1】一具現例による有機発光素子を概略的に示した断面図である。

【発明を実施するための形態】

30

【0013】

以下、本発明を実施するための形態の具体例を詳細に説明する。

【0014】

本発明の有機金属化合物は、下記化学式1で表される。

【0015】

〔化1〕



【0016】

上記化学式1で、Mは、第1周期遷移金属、第2周期遷移金属、及び第3周期遷移金属のうちから選択される。

40

【0017】

例えば、Mは、イリジウム (Ir)、白金 (Pt)、オスミウム (Os)、チタン (Ti)、ジルコニウム (Zr)、ハフニウム (Hf)、ユウロピウム (Eu)、テルビウム (Tb)、ツリウム (Tm)、又はロジウム (Rh) である。

【0018】

一具現例によると、Mは、Ir、Pt、Os、又はRhであるが、それらに限定されるものではない。

【0019】

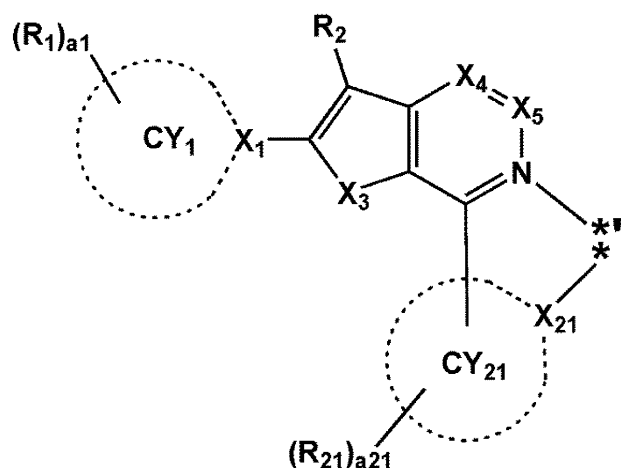
上記化学式1で、 L_1 は、下記化学式2で表されるリガンドであり、上記化学式1で、 n_1 は、前記化学式1の L_1 の個数を示したものであり、1、2、又は3である。 n_1 が

50

2 以上である場合、2 以上の L_1 は、それぞれ同一であるか又は異なる。

【0020】

【化2】



10

【0021】

上記化学式2についての説明は、後述の箇所を参照する。

【0022】

例えば、上記化学式1で、 n_1 は、1 又は2である。

20

【0023】

上記化学式1で、 L_2 は、単座 (monodentate) リガンド、二座 (bidentate) リガンド、三座 (tridentate) リガンド、及び四座 (tetradentate) リガンドのうちから選択され、上記化学式1で、 n_2 は、 L_2 の個数を示したものであり、0、1、2、3又は4である。 n_2 が2以上である場合、2以上の L_2 は、それぞれ同一であるか又は異なる。 L_2 についての説明は、後述の箇所を参照する。

【0024】

例えば、上記化学式1で、 n_2 は、1 又は2である。

【0025】

上記化学式1で、 L_1 と L_2 とは、互いに異なる。

30

【0026】

一具現例によると、Mは、Ir又はOsであり、 $n_1 + n_2$ は、3 又は4であるか、或いはMは、Ptであり、 $n_1 + n_2$ は、2である。

【0027】

上記化学式2で、 X_1 は、C、N、Si、又はPであり、 X_{21} は、C又はNである。

【0028】

例えば、上記化学式2で、 X_{21} は、Cである。

【0029】

上記化学式2で、環 CY_1 及び環 CY_{21} は、互いに独立して、 $C_3 - C_{60}$ 炭素環式基又は $C_1 - C_{60}$ ヘテロ環式基である。

40

【0030】

例えば、環 CY_1 及び環 CY_{21} は、互いに独立して、i) 第1環、ii) 第2環、iii) 2以上の第1環がそれぞれ縮合された縮合環、iv) 2以上の第2環がそれぞれ縮合された縮合環、及びv) 1以上の第1環と1以上の第2環とがそれぞれ縮合された縮合環のうちから選択され、

第1環は、シクロペンタン基、シクロペンタジエン基、フラン基、チオフェン基、ピロール基、シロール基、インデン基、ベンゾフラン基、ベンゾチオフェン基、インドール基、ベンゾシロール基、オキサゾール基、イソオキサゾール基、オキサジアゾール基、イソオキサジアゾール基、オキサトリアゾール基、イソオキサトリアゾール基、チアゾール基

50

、イソチアゾール基、チアジアゾール基、イソチアジアゾール基、チアトリアゾール基、イソチアトリアゾール基、ピラゾール基、イミダゾール基、トリアゾール基、テトラゾール基、アザシロール基、ジアザシロール基、及びトリアザシロール基のうちから選択され、

第2環は、アダマンタン基、ノルボルナン基、ノルボルネン基、シクロヘキササン基、シクロヘキセン基、ベンゼン基、ピリジン基、ピリミジン基、ピラジン基、ピリダジン基、及びトリアジン基のうちから選択される。

【0031】

一具現例によると、環CY₁及び環CY₂₋₁は、互いに独立して、シクロペンテン基、シクロヘキセン基、ベンゼン基、ナフタレン基、アントラセン基、フェナントレン基、トリフェニレン基、ピレン基、クリセン基、シクロペンタジエン基、1, 2, 3, 4-テトラヒドロナフタレン基、チオフェン基、フラン基、インドール基、ベンゾボロール基、ベンゾホスホール基、インデン基、ベンゾシロール基、ベンゾゲルモール基、ベンゾチオフェン基、ベンゾセレノフェン基、ベンゾフラン基、カルバゾール基、ジベンゾボロール基、ジベンゾホスホール基、フルオレン基、ジベンゾシロール基、ジベンゾゲルモール基、ジベンゾチオフェン基、ジベンゾセレノフェン基、ジベンゾフラン基、ジベンゾチオフェン5-オキシド基、9H-フルオレン-9-オン基、ジベンゾチオフェン5, 5-ジオキシド基、アザインドール基、アザベンゾボロール基、アザベンゾホスホール基、アザインデン基、アザベンゾシロール基、アザベンゾゲルモール基、アザベンゾチオフェン基、アザベンゾセレノフェン基、アザベンゾフラン基、アザカルバゾール基、アザジベンゾボロール基、アザジベンゾホスホール基、アザフルオレン基、アザジベンゾシロール基、アザジベンゾゲルモール基、アザジベンゾチオフェン基、アザジベンゾセレノフェン基、アザジベンゾフラン基、アザジベンゾチオフェン5-オキシド基、アザ-9H-フルオレン-9-オン基、アザジベンゾチオフェン5, 5-ジオキシド基、ピリジン基、ピリミジン基、ピラジン基、ピリダジン基、トリアジン基、キノリン基、イソキノリン基、キノキサリン基、キナゾリン基、フェナントロリン基、ピロール基、ピラゾール基、イミダゾール基、トリアゾール基、オキサゾール基、イソオキサゾール基、チアゾール基、イソチアゾール基、オキサジアゾール基、チアジアゾール基、ベンゾピラゾール基、ベンゾイミダゾール基、ベンゾオキサゾール基、ベンゾチアゾール基、ベンゾオキサジアゾール基、ベンゾチアジアゾール基、5, 6, 7, 8-テトラヒドロイソキノリン基及び5, 6, 7, 8-テトラヒドロキノリン基のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0032】

他の具現例によると、環CY₁は、シクロペンタン基、シクロヘキササン基、シクロヘプタン基、シクロオクタン基、アダマンタン基、ノルボルナン基、ノルボルネン基、シクロペンテン基、シクロヘキセン基、シクロヘプテン基、ベンゼン基、ナフタレン基、フルオレン基、フェナントレン基、アントラセン基、フルオランテン基、トリフェニレン基、ピレン基、クリセン基、ピロール基、チオフェン基、フラン基、イミダゾール基、ピラゾール基、チアゾール基、イソチアゾール基、オキサゾール基、イソオキサゾール基、ピリジン基、ピラジン基、ピリミジン基、ピリダジン基、イソインドール基、インドール基、インダゾール基、プリン基、キノリン基、イソキノリン基、ベンゾキノリン基、キノキサリン基、キナゾリン基、シンノリン基、カルバゾール基、フェナントロリン基、ベンゾイミダゾール基、ベンゾフラン基、ベンゾチオフェン基、イソベンゾチアゾール基、ベンゾオキサゾール基、イソベンゾオキサゾール基、トリアゾール基、テトラゾール基、オキサジアゾール基、トリアジン基、ジベンゾフラン基、ジベンゾチオフェン基、ジベンゾシロール基、ベンゾカルバゾール基、ジベンゾカルバゾール基、イミダゾピリジン基、及びイミダゾピリミジン基のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0033】

上記化学式2で、X₃は、O、S、Se、又はN(R₃)であり、X₄は、N又はC(R₄)であり、X₅は、N又はC(R₅)である。

【0034】

一具現例によると、 X_3 は、O 又は S であり、 X_5 は、C (R_5) である。

【0035】

他の具現例によると、 X_3 は、O 又は S であり、 X_4 は、N である。

【0036】

更に他の具現例によると、 X_4 は、N であり、 X_5 は、C (R_5) である。

【0037】

更に他の具現例によると、 X_4 は、C (R_4) であり、 X_5 は、C (R_5) である。

【0038】

上記化学式 2 で、 R_1 ないし R_5 、及び R_{21} は、それぞれ独立して、水素、重水素、
 -F、-Cl、-Br、-I、-SF₅、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ
 基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基
 又はその塩、リン酸基又はその塩、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換
 若しくは非置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換若しくは非置換の C_2-C_{60} アルキ
 ニル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換若しくは非置換の C_3-C_{10}
 シクロアルキル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、
 置換若しくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10}
 ヘテロシクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換若
 しくは非置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリ
 ールチオ基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換若しくは非置換
 の一価非芳香族縮合多環基、置換若しくは非置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-N
 (Q_1) (Q_2)、-Si (Q_3) (Q_4) (Q_5)、-B (Q_6) (Q_7)、及び -P
 (=O) (Q_8) (Q_9) のうちから選択される。 Q_1 ないし Q_9 についての説明は、そ
 れぞれ本明細書に記載された箇所を参照する。

【0039】

例えば、 R_1 ないし R_5 、及び R_{21} は、それぞれ独立して、

水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、
 アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホ
 ン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、-SF₅、 C_1-C_{20} アルキル基、及び C_1
 - C_{20} アルコキシ基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃
 、-CF₂H、-CFH₂、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ
 基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、
 リン酸基又はその塩、 C_1-C_{10} アルキル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、
 シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボル
 ネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、フェニル基
 、ビフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、及びピリミジニル基のうちの少なくとも一
 つで置換された、 C_1-C_{20} アルキル基及び C_1-C_{20} アルコキシ基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃
 、-CF₂H、-CFH₂、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ
 基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、
 リン酸基又はその塩、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペン
 チル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、
 ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シク
 ロヘプテニル基、フェニル基、ビフェニル基、 C_1-C_{20} アルキルフェニル基、ナフチ
 ル基、フルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、
 トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニ
 ル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル
 基、イソオキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル
 基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、キノリニル基、イ
 ソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニ

10

20

30

40

50

ル基、カルバゾリル基、フェナントロリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、イミダゾピリジニル基、及びイミダゾピリミジニル基のうちから選択される少なくとも一つで置換されたか若しくは置換されない、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、フェニル基、ビフェニル基、 $C_{1}-C_{20}$ アルキルフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントロリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、イミダゾピリジニル基、及びイミダゾピリミジニル基；並びに

$-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ 、 $-B(Q_6)(Q_7)$ 、及び $-P(=O)(Q_8)(Q_9)$ ；のうちから選択され、

Q_1 ないし Q_9 は、それぞれ独立して、

$-CH_3$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-CH_2CD_3$ 、 $-CH_2CD_2H$ 、 $-CH_2CDH_2$ 、 $-CHDCH_3$ 、 $-CHDCD_2H$ 、 $-CHDCDH_2$ 、 $-CHDCD_3$ 、 $-CD_2CH_3$ 、 $-CD_2CD_3$ 、 $-CD_2CD_2H$ 、及び $-CD_2CDH_2$ ；並びに

重水素、 $C_{1}-C_{10}$ アルキル基及びフェニル基のうちから選択される少なくとも一つで置換されたか若しくは置換されない、 n -プロピル基、イソプロピル基、 n -ブチル基、イソブチル基、 sec -ブチル基、 $tert$ -ブチル基、 n -ペンチル基、イソペンチル基、 sec -ペンチル基、 $tert$ -ペンチル基、フェニル基、及びナフチル基；のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0040】

上記化学式2で、 a_1 及び a_{21} は、それぞれ R_1 及び R_{21} の個数を示したものであり、互いに独立して、0～20のうちから選択される整数（例えば、0～10のうちから選択される整数、又は0～5のうちから選択される整数）である。 a_1 が2以上である場合、2以上の R_1 は、それぞれ同一であるか又は異なり、 a_{21} が2以上である場合、2以上の R_{21} は、それぞれ同一であるか又は異なる。

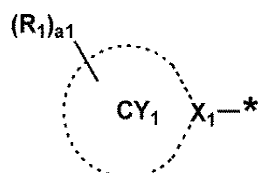
【0041】

上記化学式2で、環 CY_1 と R_2 とは、互いに結合されず、 R_1 と R_2 とは、互いに結合されない。

【0042】

一具現例によると、上記化学式2の

【化2-1】



で表される基は、 a_1 個の R_1 で置換されたか若しくは置換されない、 $C_{3}-C_{10}$ シク

ロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

上記化学式2の R_1 及び R_2 は、互いに独立して、

水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基及び $-SF_5$ ；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、 $-CFH_2$ 、シアノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、及びピリミジニル基のうち10の少なくとも一つで置換されたか若しくは置換されない、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；のうちから選択され、

a_1 は、0～10の整数のうちから選択される。

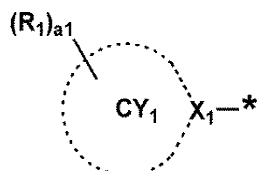
【0043】

a_1 、 R_1 、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基についての説明は、本明細書に記載された箇所を参照する。 20

【0044】

他の具現例によると、上記化学式2の

【化2-1】



で表される基は、 a_1 個の R_1 で置換されたか若しくは置換されない、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、イソインドリル基、インドリル基、インダゾリル基、プリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、カルバゾリル基、フェナントロリニル基、ベンゾイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、イミダゾピリジニル基、及びイミダゾピリミジニル基のうちから選択され、

上記化学式2の R_1 及び R_2 は、互いに独立して、

水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基及び $-SF_5$ ；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、 $-CFH_2$ 、シアノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、ジベン 50

ゾフラニル基、及びジベンゾチオフェニル基のうちの少なくとも一つで置換されたか若しくは置換されない、メチル基、エチル基、プロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*sec*-ブチル基、*tert*-ブチル基、*n*-ペンチル基、イソペンチル基、*sec*-ペンチル基、*tert*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、イソヘキシル基、*sec*-ヘキシル基、*tert*-ヘキシル基、*n*-ヘプチル基、イソヘプチル基、*sec*-ヘプチル基、*tert*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、イソオクチル基、*sec*-オクチル基、*tert*-オクチル基、*n*-ノニル基、イソノニル基、*sec*-ノニル基、*tert*-ノニル基、*n*-デカニル基、イソデカニル基、*sec*-デカニル基、*tert*-デカニル基、 C_{10} -アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニルギ、シクロヘプテニル基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、ジベンゾフラニル基、及びジベンゾチオフェニル基；のうちから選択され、

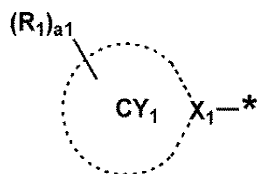
10

a_1 は、0～5の整数のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0045】

更に他の具現例によると、上記化学式2の

【化2-1】

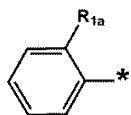


20

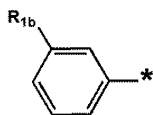
で表される基は、下記化学式10-13(1)～10-13(18)、及び化学式10-13で表される基のうちから選択される。

【0046】

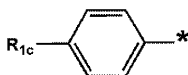
【化(10-13(1))-(10-13)】



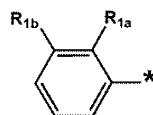
10-13(1)



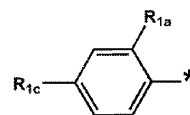
10-13(2)



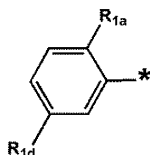
10-13(3)



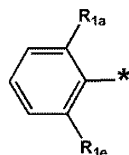
10-13(4)



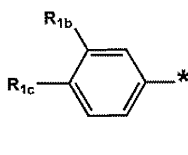
10-13(5)



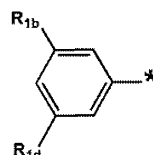
10-13(6)



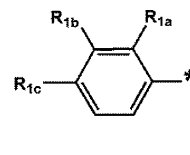
10-13(7)



10-13(8)

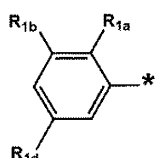


10-13(9)

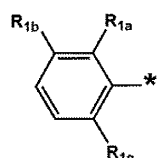


10-13(10)

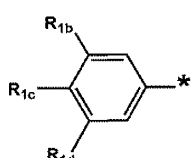
10



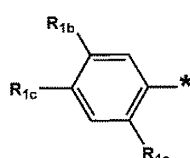
10-13(11)



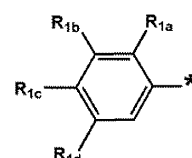
10-13(12)



10-13(13)

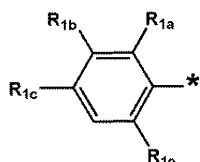


10-13(14)

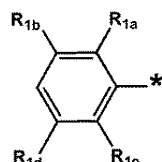


10-13(15)

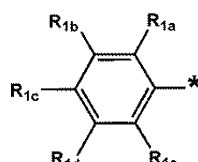
20



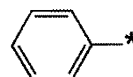
10-13(16)



10-13(17)



10-13(18)



10-13

【0047】

上記化学式10-13(1)~10-13(18)、及び化学式10-13で、 R_{1a} ないし R_{1e} についての説明は、それぞれ本明細書において、 R_1 についての説明を参照するが、 R_{1a} ないし R_{1e} は、水素ではなく、*は、隣接する原子との結合サイトである。

30

【0048】

更に他の具現例によると、上記化学式2で、

X_4 は、 $C(R_4)$ であり、

R_4 は、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-SF_5$ 、シアノ基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換若しくは非置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換若しくは非置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換若しくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換若しくは非置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換若しくは非置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ 、 $-B(Q_6)(Q_7)$ 、及び $-P(=O)(Q_8)(Q_9)$ のうちから選択される。

40

【0049】

更に他の具現例によると、上記化学式2で、

X_4 は、 $C(R_4)$ であり、

R_4 は、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリール基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換若しくは非置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換若しくは非置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換若しくは非置換の一個非芳香族縮合多環基、及び置換若しくは非置換の一個非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択される。

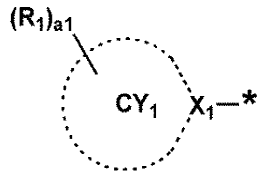
更に他の具現例によると、上記化学式2で、 X_4 は、 N である。

50

【 0 0 5 0 】

例えば、上記化学式 2 で、

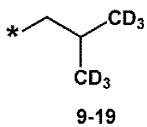
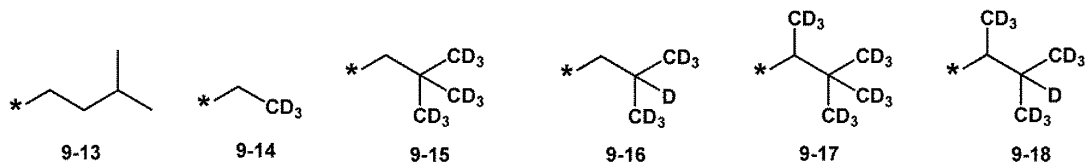
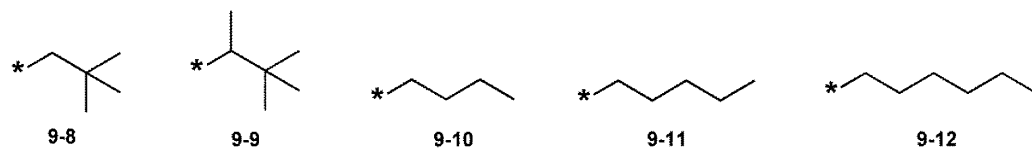
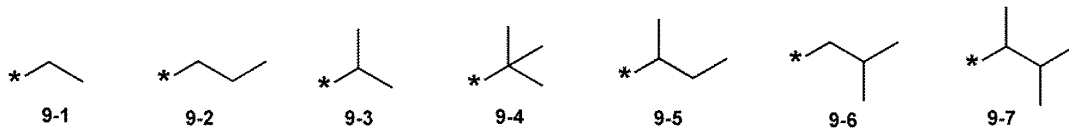
【 化 2 - 1 】



で表される基は、下記化学式 10-13～10-229 で表される基のうちから選択され、及び／又は R_1 ないし R_5 、及び R_{21} は、それぞれ独立して、水素、重水素、 $-F$ 、シアノ基、ニトロ基、 $-SF_5$ 、 $-CH_3$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、 $-CFH_2$ 、下記化学式 9-1～9-19 で表される基、下記化学式 10-1～10-229 で表される基、及び $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ (Q_3 ないし Q_5 についての説明は、それぞれ本明細書に記載された箇所を参照する)のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【 0 0 5 1 】

【 化 (9 - 1) - (9 - 1 9) 】



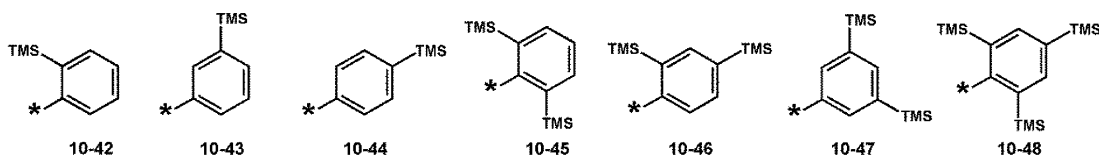
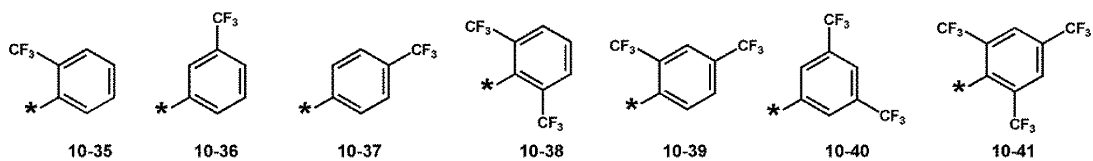
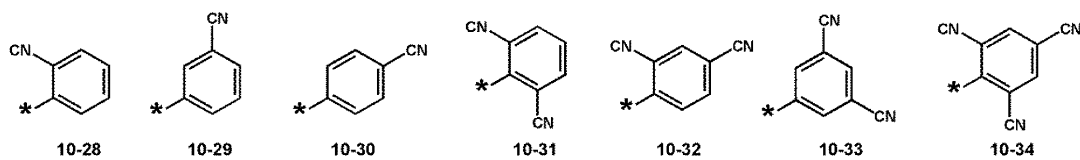
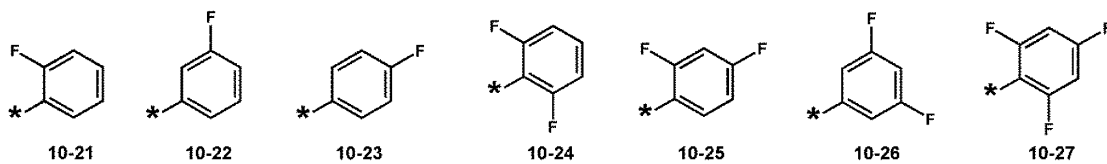
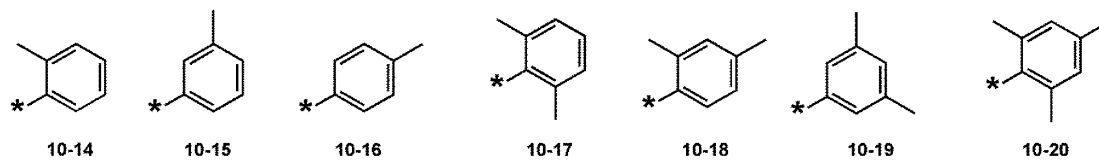
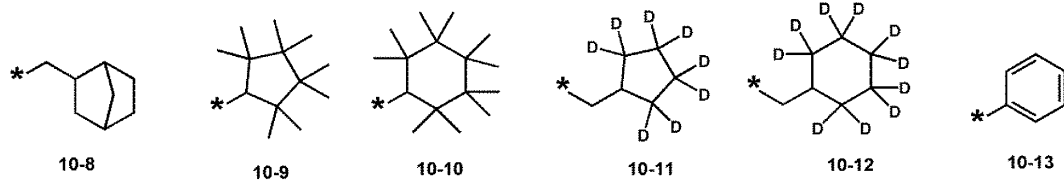
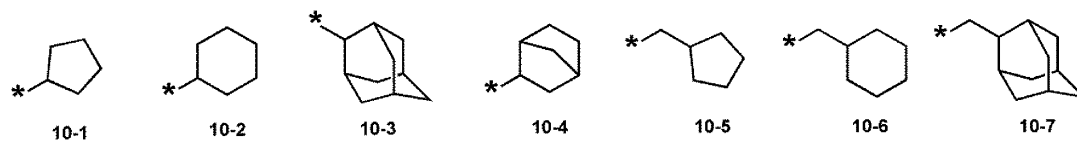
【 0 0 5 2 】

10

20

30

【化(10-1)-(10-48)】

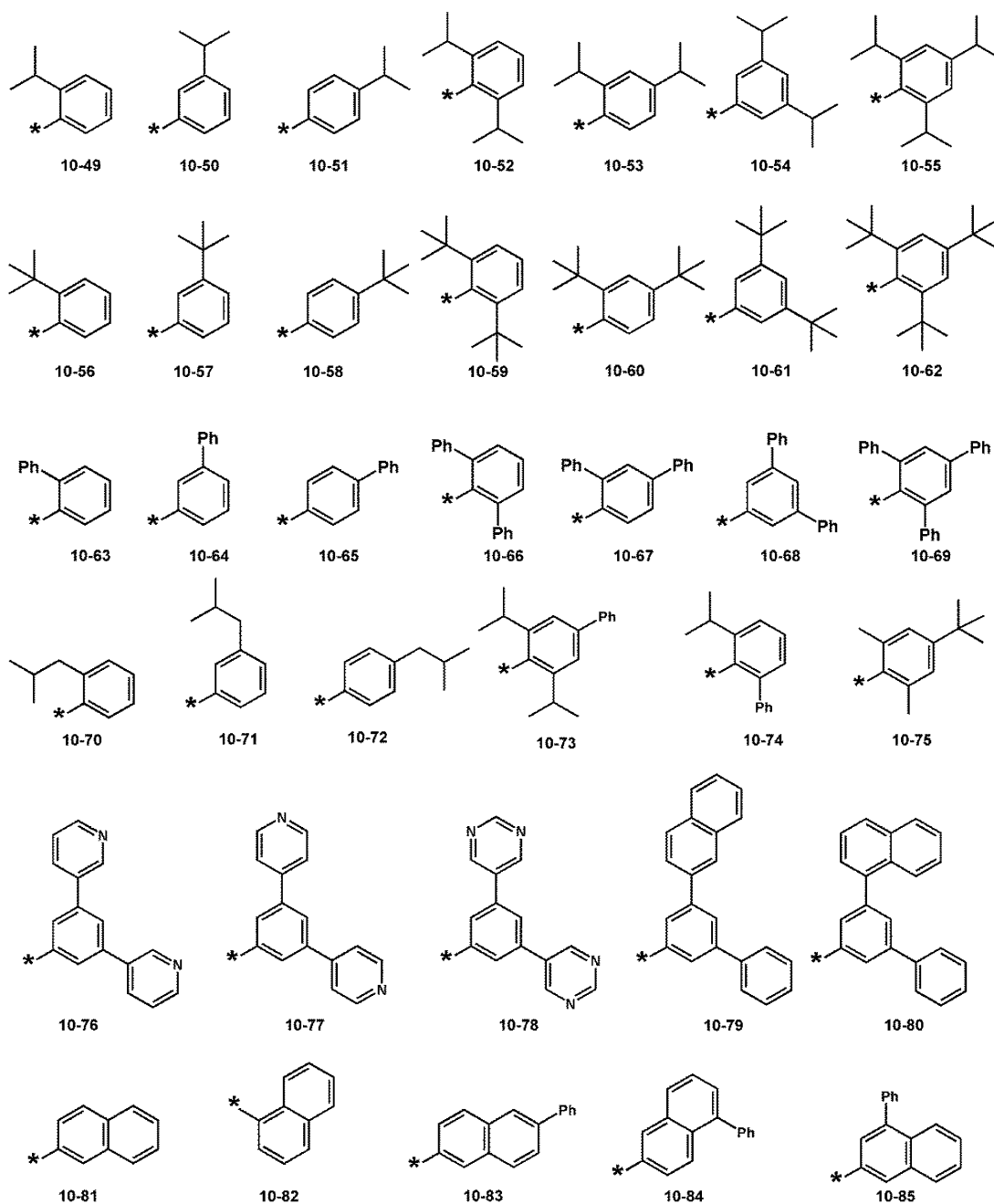


10

20

30

【化(10-49)-(10-85)】

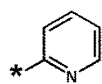


10

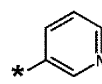
20

30

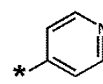
【化(10-86)-(10-130)】



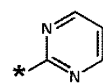
10-86



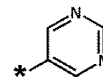
10-87



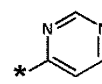
10-88



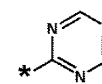
10-89



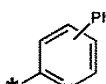
10-90



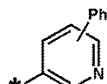
10-91



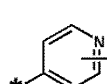
10-92



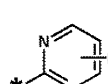
10-93



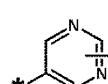
10-94



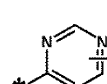
10-95



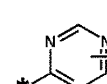
10-96



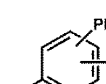
10-97



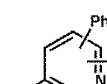
10-98



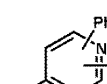
10-99



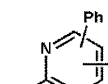
10-100



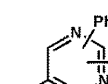
10-101



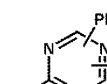
10-102



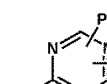
10-103



10-104

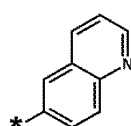


10-105

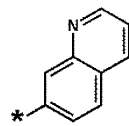


10-106

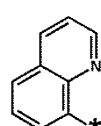
10



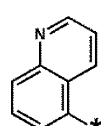
10-107



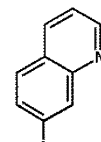
10-108



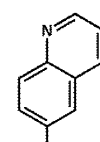
10-109



10-110

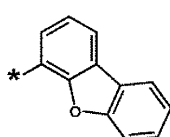


10-111

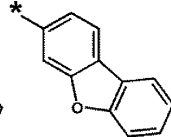


10-112

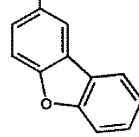
20



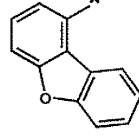
10-113



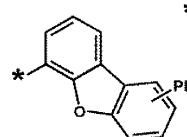
10-114



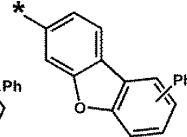
10-115



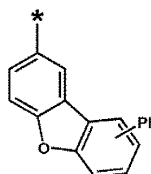
10-116



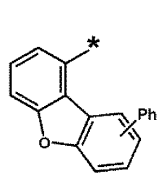
10-117



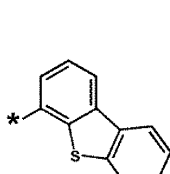
10-118



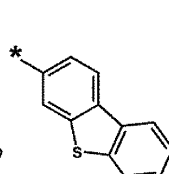
10-119



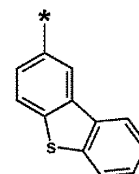
10-120



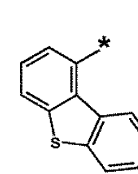
10-121



10-122

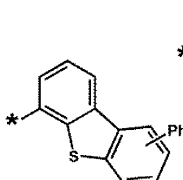


10-123

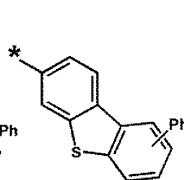


10-124

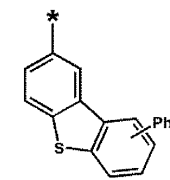
30



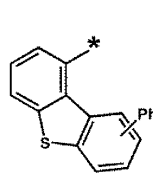
10-125



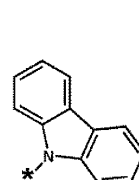
10-126



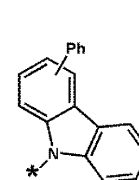
10-127



10-128

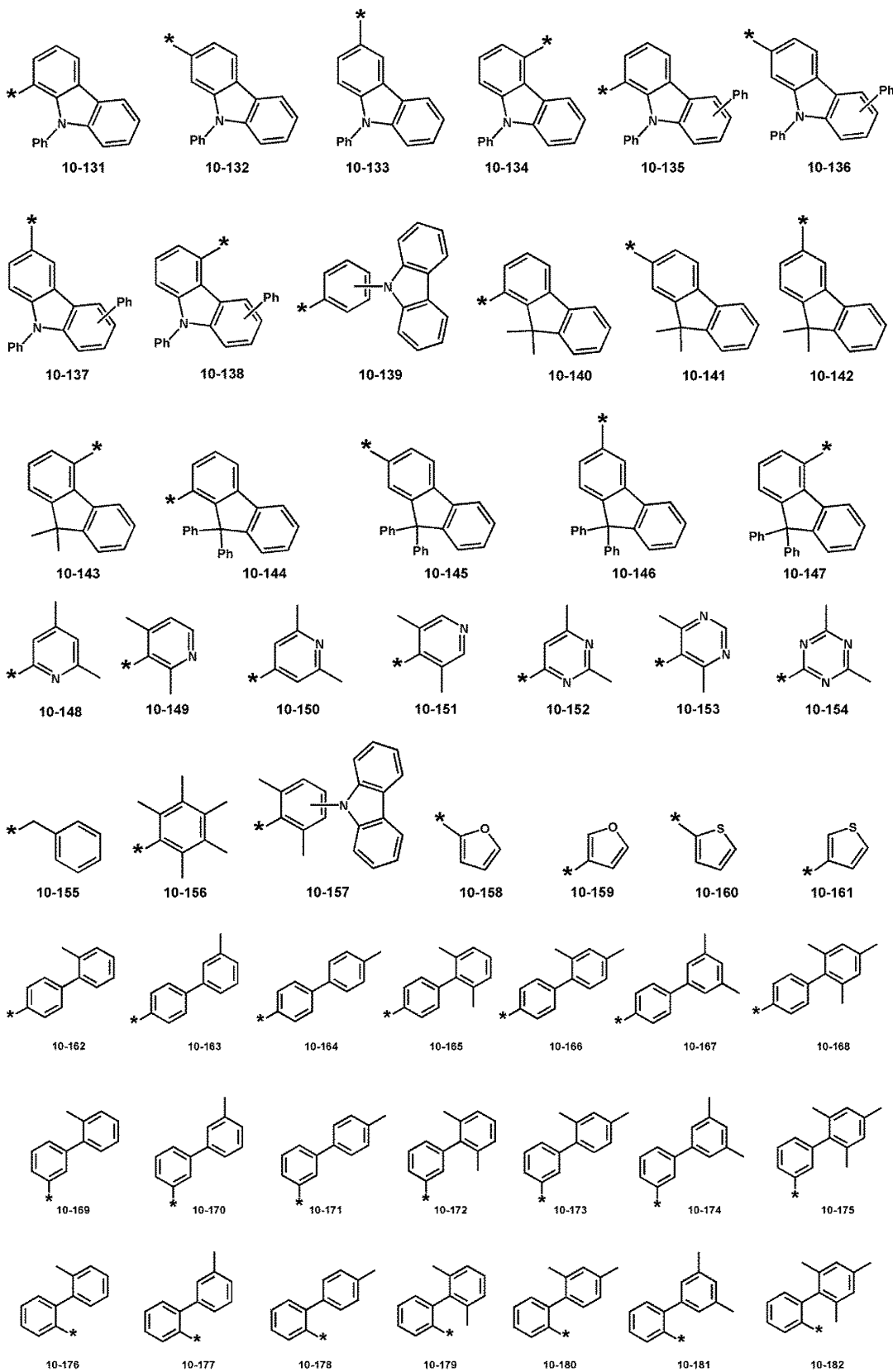


10-129



10-130

【化(10-131)-(10-182)】



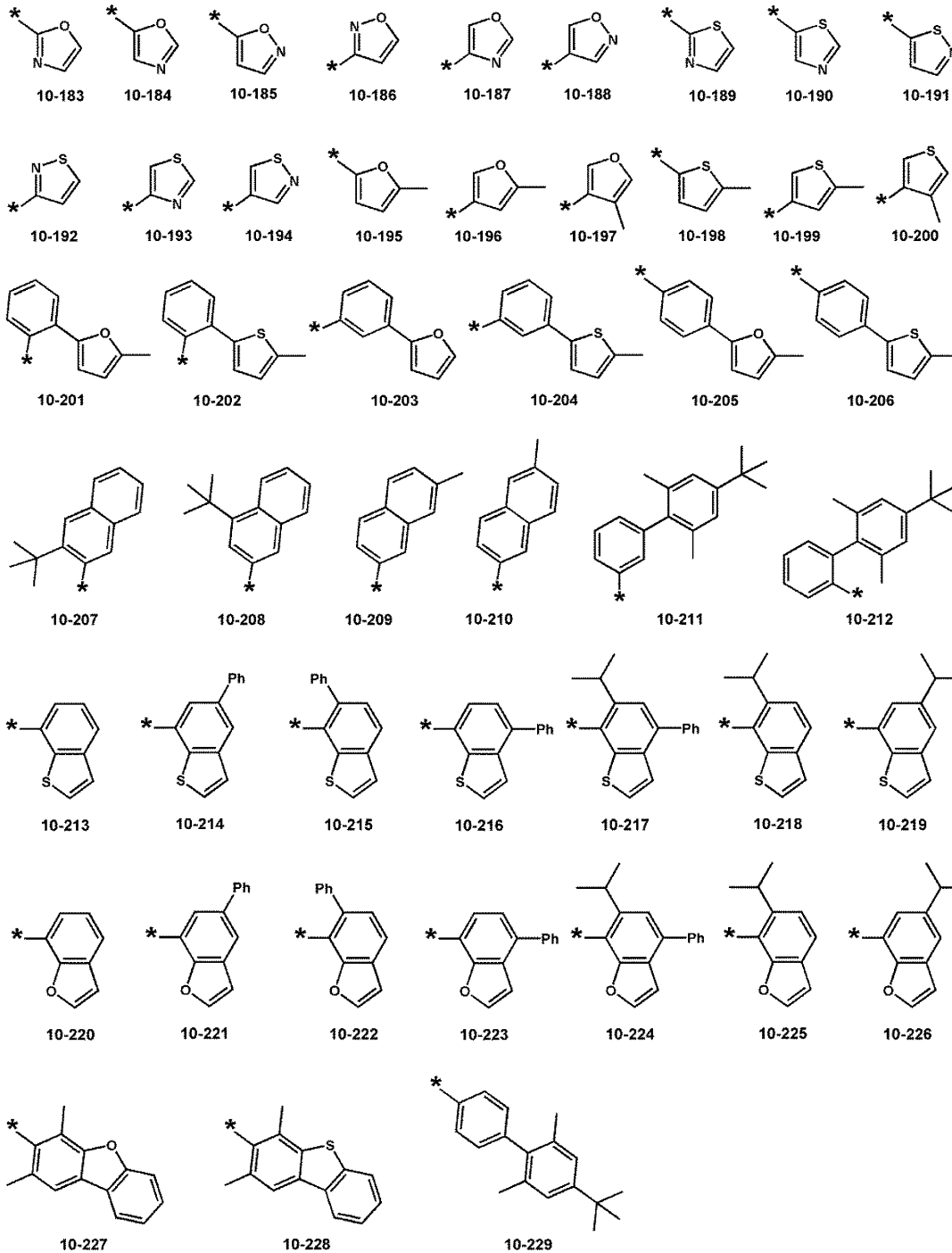
10

20

30

40

【化(10-183)-(10-229)】



【0053】

上記化学式9-1～9-19、及び化学式10-1～10-229で、*は、隣接する原子との結合サイトであり、Phは、フェニル基であり、TMSは、トリメチルシリル基である。

【0054】

上記化学式2で、 R_4 と R_5 とは、選択的に互いに連結され、少なくとも1つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない C_5-C_{30} 炭素環式基、又は少なくとも1つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない C_1-C_{30} ヘテロ環式基（例えば、少なくとも1つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない、ベンゼン基、シクロペンタン基、シクロペンタジエン基、フラン基、チオフェン基、ピロール基、シロール基、インデン基、ベンゾフラン基、ベンゾチオフェン基、インドール基、又はベンゾシロール基）を形成し、それぞれ隣接する複数の R_{21} において、2個は、選択的に互いに連結され

、少なくとも1つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない C_5-C_{30} 炭素環式基、又は少なくとも1つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない C_1-C_{30} ヘテロ環式基（例えば、少なくとも1つの R_{10a} で置換されたか若しくは置換されない、ベンゼン基、シクロペンタン基、シクロペンタジエン基、フラン基、チオフェン基、ピロール基、シロール基、インデン基、ベンゾフラン基、ベンゾチオフェン基、インドール基、又はベンゾシロール基）を形成し、 R_{10a} についての説明は、本明細書において、 R_{21} についての説明を参照する。 C_5-C_{30} 炭素環式基及び C_1-C_{30} ヘテロ環式基についての説明は、それぞれ本明細書に記載された箇所を参照する。

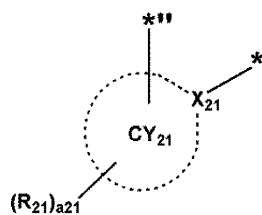
【0055】

上記化学式2で、*及び*'は、それぞれ上記化学式1において、Mとの結合サイトである。 10

【0056】

一方、上記化学式2で、

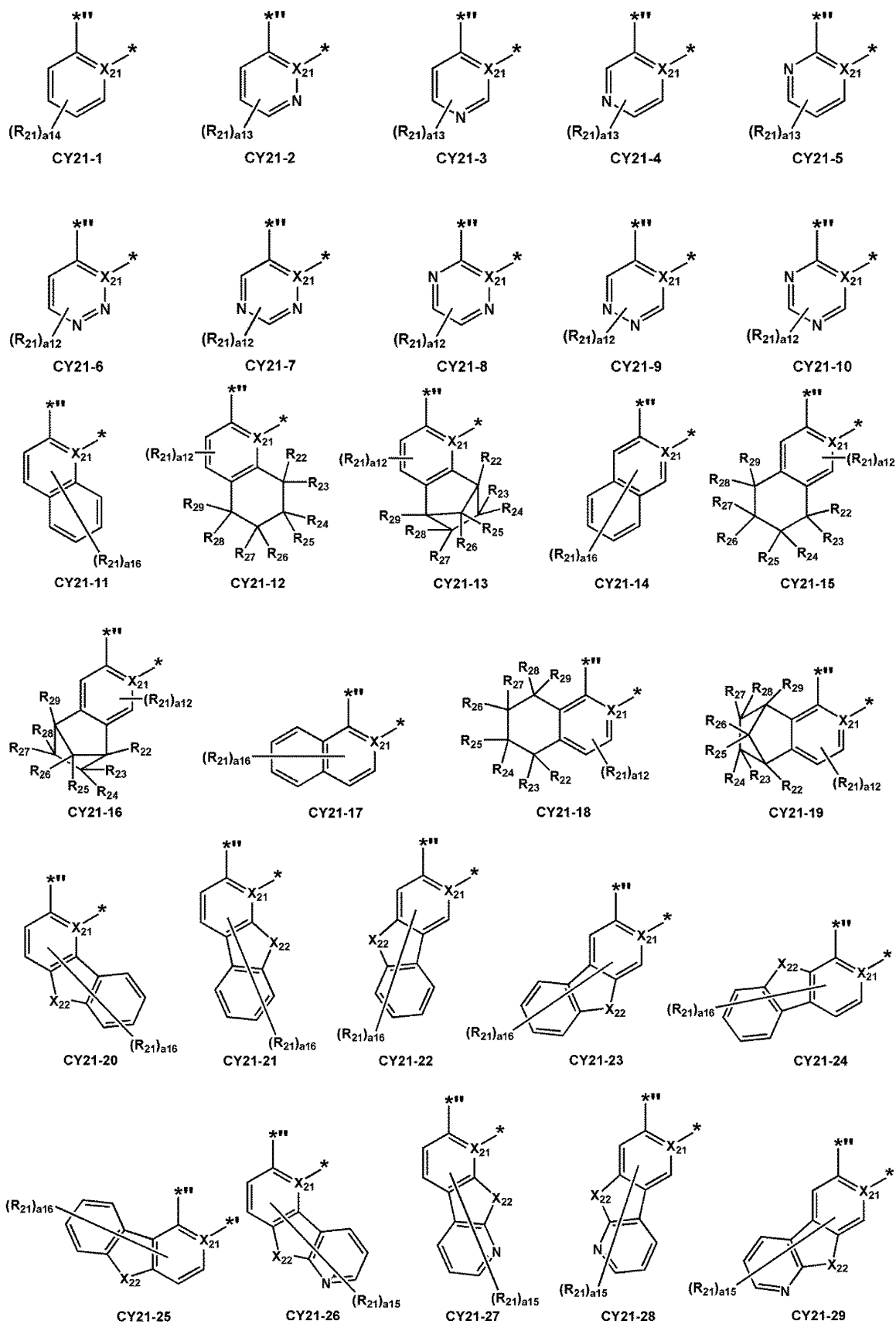
【化2-21】



で表される基は、下記化学式 $CY21-1 \sim CY21-31$ で表される基のうちから選択される。 20

【0057】

【化 (CY21-1) - (CY21-29)】



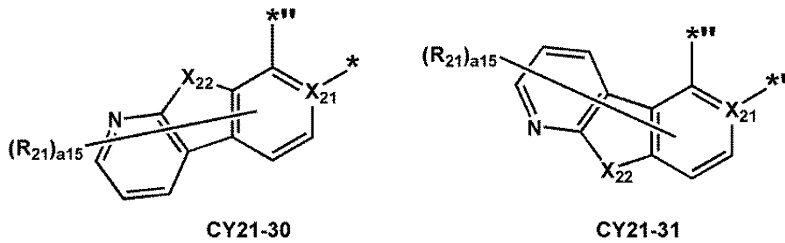
10

20

30

40

【化 (CY21-30) - (CY21-31)】



【0058】

上記化学式CY21-1～CY21-31で、

X₂₁及びR₂₁についての説明は、それぞれ本明細書に記載された箇所を参照し、

X₂₂は、C(R₂₂)(R₂₃)、N(R₂₂)、O、S、又はSi(R₂₂)(R₂₃)であり、

R₂₂ないしR₂₃についての説明は、それぞれ本明細書において、R₂₁についての説明を参照し、

a₁₆は、0～6の整数のうちから選択され、

a₁₅は、0～5の整数のうちから選択され、

a₁₄は、0～4の整数のうちから選択され、

a₁₃は、0～3の整数のうちから選択され、

a₁₂は、0～2の整数のうちから選択され、

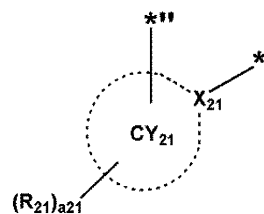
*^{'''}は、上記化学式2で、隣接する6員環の炭素原子との結合サイトであり、

*は、上記化学式1において、Mとの結合サイトである。

【0059】

更に他の例として、上記化学式2で、

【化2-21】



で表される基は、下記化学式CY21(1)～CY21(56)で表される基、及び上記化学式CY21-20～CY21-31で表される基のうちから選択される。

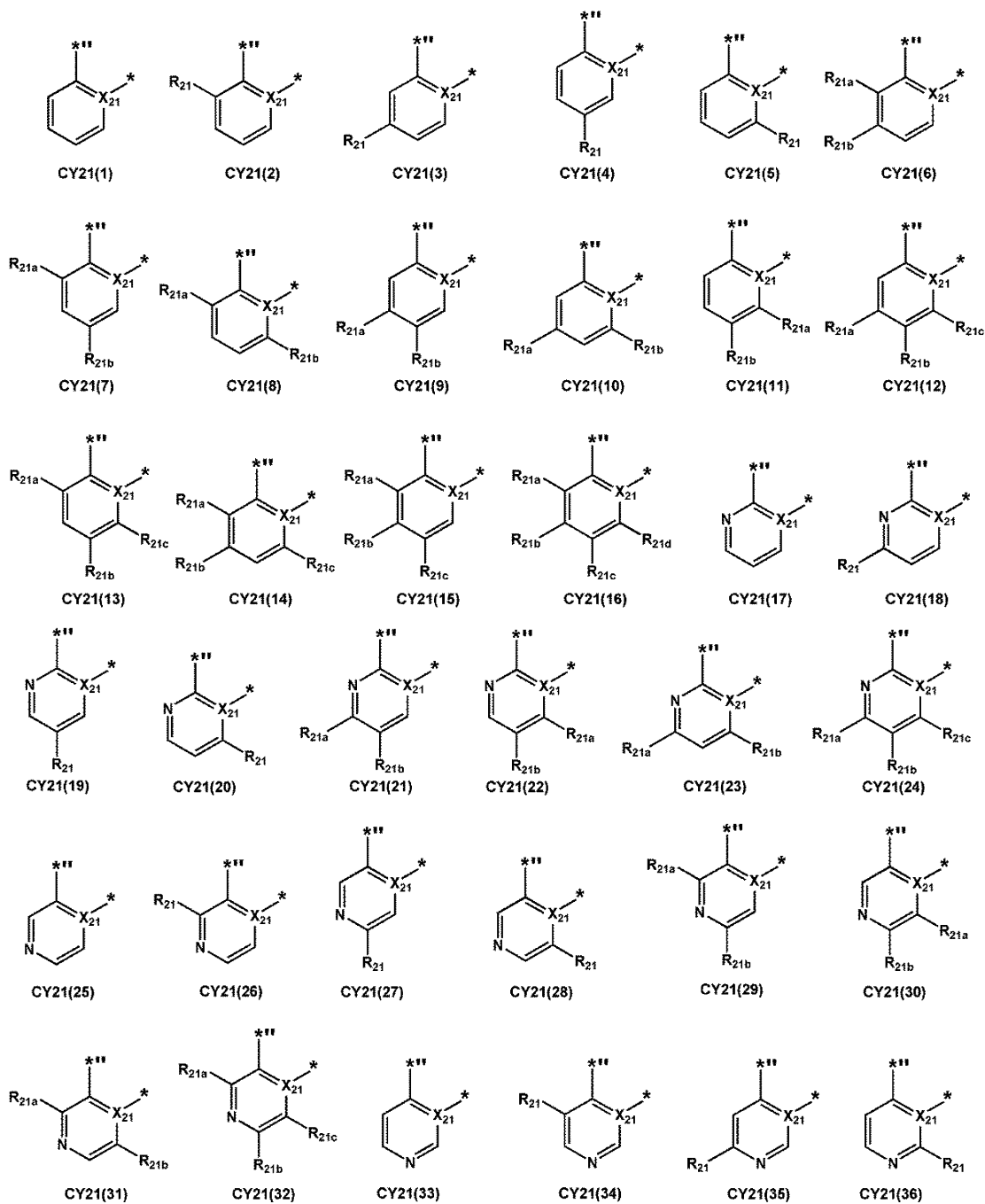
【0060】

10

20

30

【化CY21(1) - CY21(36)】

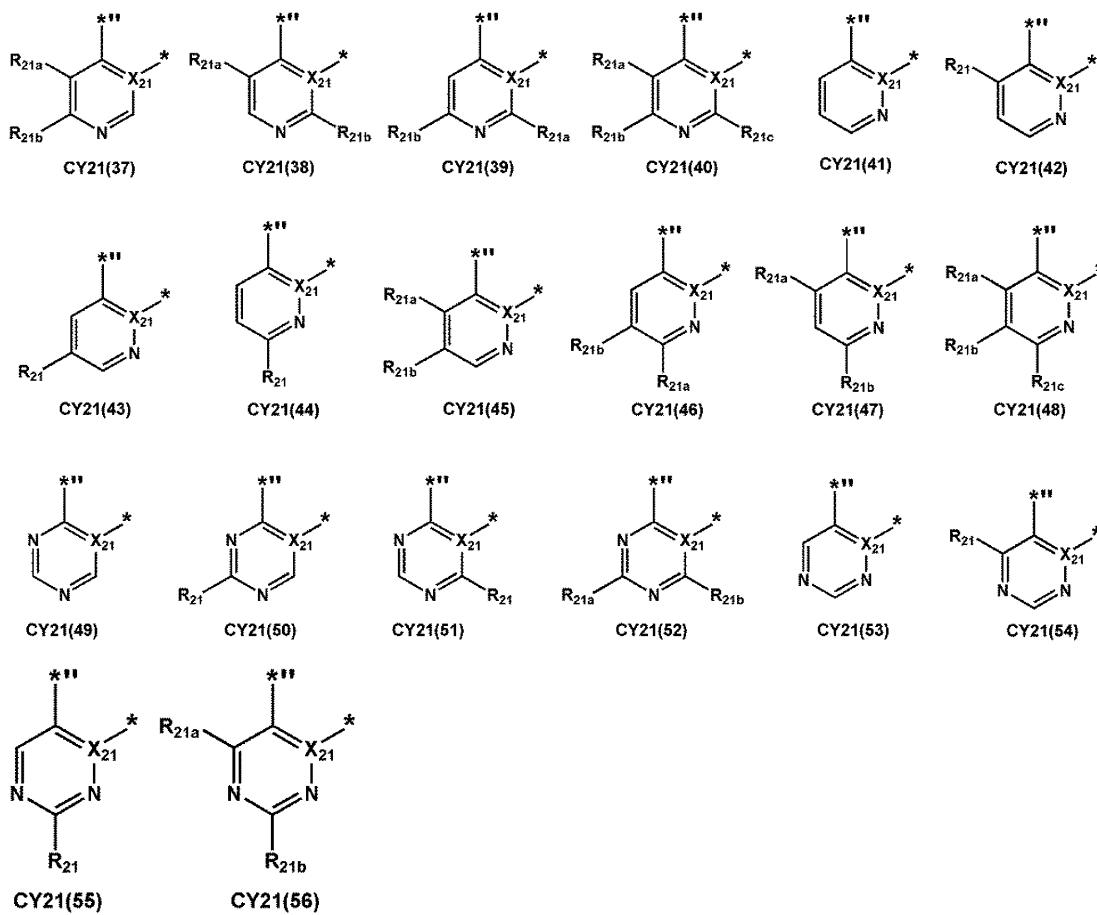


10

20

30

【化CY21(37) - CY21(56)】



10

20

【0061】

上記化学式CY21(1) ~ CY21(56)で、

X₂₁及びR₂₁についての説明は、それぞれ本明細書に記載された箇所を参照し、

R_{21a}ないしR_{21d}についての説明は、それぞれ本明細書において、R₂₁につい
ての説明を参照するが、R₂₁、及びR_{21a}ないしR_{21d}は、水素ではなく、

30

＊は、上記化学式2で、隣接する6員環の炭素原子との結合サイトであり、

＊は、上記化学式1において、Mとの結合サイトである。

【0062】

上記化学式1で、L₂は、上記化学式1のMと、O、S、C、N、又はPとを介して、それぞれ結合された二座リガンドのうちから選択される。例えば、上記化学式1で、L₂は、上記化学式1のMと、O、S、N、又はPとを介して、それぞれ結合された二座リガンドのうちから選択される。

【0063】

一具現例によると、上記化学式1で、L₂は、上記化学式1のMと、Oとを介して、そ
れぞれ結合された二座リガンドのうちから選択される。

40

【0064】

他の具現例によると、上記化学式1で、L₂は、単座リガンド、例えばI⁻、Br⁻、Cl⁻、スルフィド(sulfide)、ニトレート(nitrate)、アジド(azide)、ヒドロキシド(hydroxide)、シアネート(cyanate)、イソシアネート(isocyanate)、チオシアネート(thiocyanate)、水、アセトニトリル(acetonitrile)、ピリジン(pyridine)、アンモニア(ammonia)、一酸化炭素、P(Ph)₃、P(Ph)₂CH₃、PPh(CH₃)₂、及びP(CH₃)₃のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

50

【0065】

更に他の具現例によると、上記化学式1で、 L_2 は、二座リガンド、例えばオキサレート(oxalate)、アセチルアセトネート(acetylacetonate)、ピコリン酸(picolinic acid)、1,2-ビス(ジフェニルホスフィノ)エテン(1,2-bis(diphenylphosphino)ethane)、1,1-ビス(ジフェニルホスフィノ)メタン(1,1-bis(diphenylphosphino)methane)、グリシネート(glycinate)、及びエチレンジアミン(ethylenediamine)のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

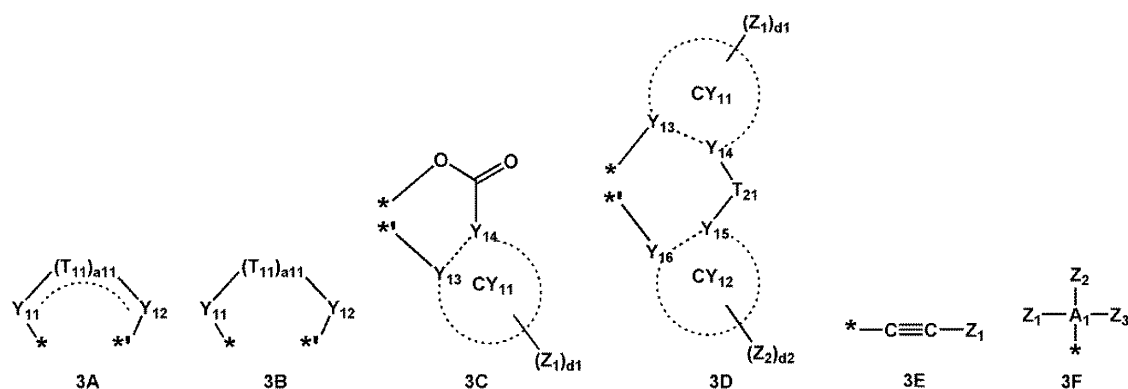
【0066】

10

更に他の具現例によると、上記化学式1で、 L_2 は、下記化学式3A～3Fで表される基のうちから選択される。

【0067】

【化3A-3F】



20

【0068】

上記化学式3A～3Fで、

Y_{11} は、O、N、 $N(Z_1)$ 、 $P(Z_1)(Z_2)$ 、及び $As(Z_1)(Z_2)$ のうちから選択され、

Y_{12} は、O、N、 $N(Z_3)$ 、 $P(Z_3)(Z_4)$ 、及び $As(Z_3)(Z_4)$ のうちから選択され、

30

T_{11} は、それぞれ独立して、単一結合、二重結合、 $* \text{---} C(Z_{11})(Z_{12}) \text{---} *$ 、 $* \text{---} C(Z_{11}) = C(Z_{12}) \text{---} *$ 、 $* = C(Z_{11}) \text{---} *$ 、 $* \text{---} C(Z_{11}) = *$ 、 $* = C(Z_{11}) \text{---} C(Z_{12}) = C(Z_{13}) \text{---} *$ 、 $* \text{---} C(Z_{11}) = C(Z_{12}) \text{---} C(Z_{13}) = *$ 、 $* \text{---} N(Z_{11}) \text{---} *$ 、及び少なくとも1つの Z_{11} で置換されたか若しくは置換されない $C_5 \text{---} C_{30}$ 炭素環式基のうちから選択され、

a_{11} は、1～10のうちから選択される整数であり、

Y_{13} ないし Y_{16} は、それぞれ独立して、C又はNであり、

T_{21} は、単一結合、二重結合、O、S、 $C(Z_{11})(Z_{12})$ 、 $Si(Z_{11})(Z_{12})$ 、又は $N(Z_{11})$ であり、

40

環 CY_{11} 及び CY_{12} は、互いに独立して、 $C_3 \text{---} C_{60}$ 炭素環式基及び $C_1 \text{---} C_{60}$ ヘテロ環式基のうちから選択され、

A_1 は、P又はAsであり、

Z_1 ないし Z_4 、及び Z_{11} ないし Z_{13} についての説明は、それぞれ本明細書において、 R_{21} についての説明を参照し、

d_1 及び d_2 は、互いに独立して、0～10の整数のうちから選択され、

$*$ 及び $*$ 'は、上記化学式1において、Mとの結合サイトである。

【0069】

上記化学式3A～3Fについての説明において、 $C_3 \text{---} C_{60}$ 炭素環式基及び $C_1 \text{---} C_{60}$ ヘテロ環式基についての説明は、それぞれ本明細書に記載された箇所を参照する。例

50

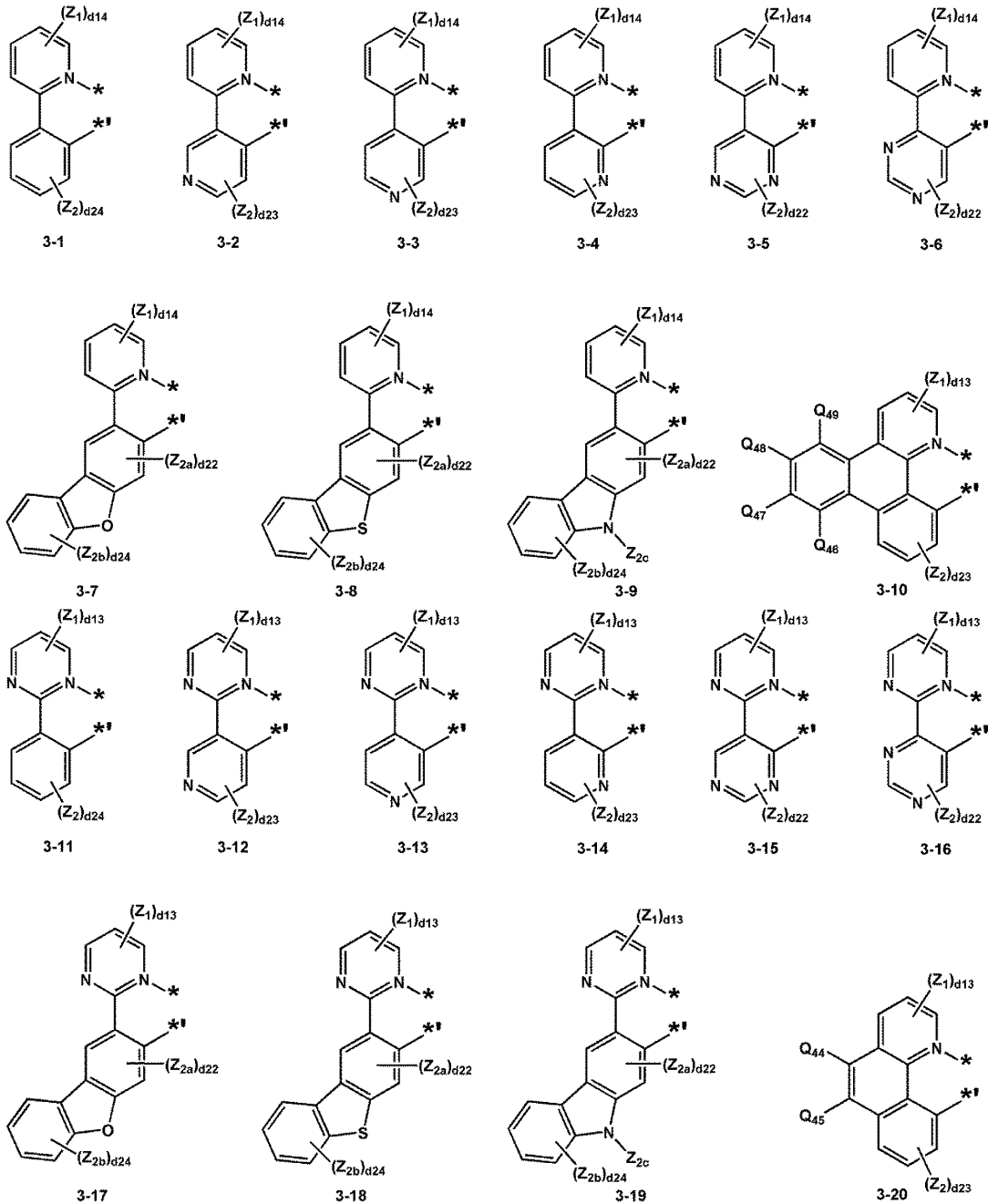
例えば、上記環 CY_{11} 及び CY_{12} についての説明において、上記環 CY_{21} についての説明を参照する。

【0070】

例えば、上記化学式 1 で、 L_2 は、下記化学式 3-1 ~ 3-100、及び化学式 3-111 ~ 3-125 で表される基のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0071】

【化(3-1) - (3-20)】



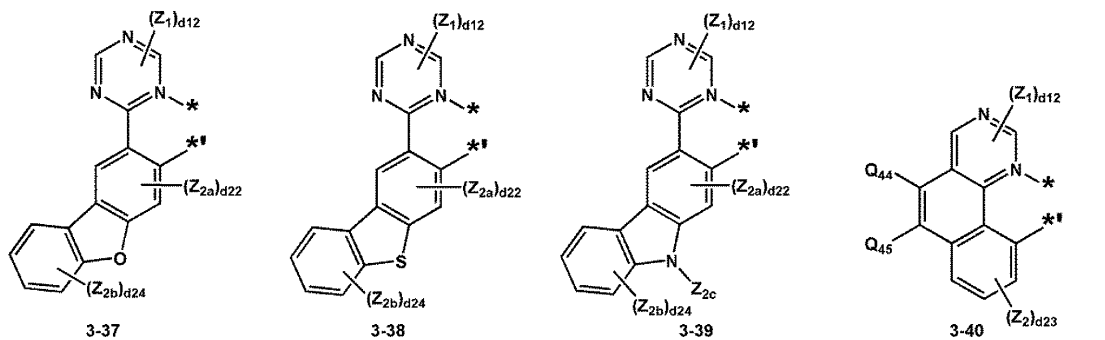
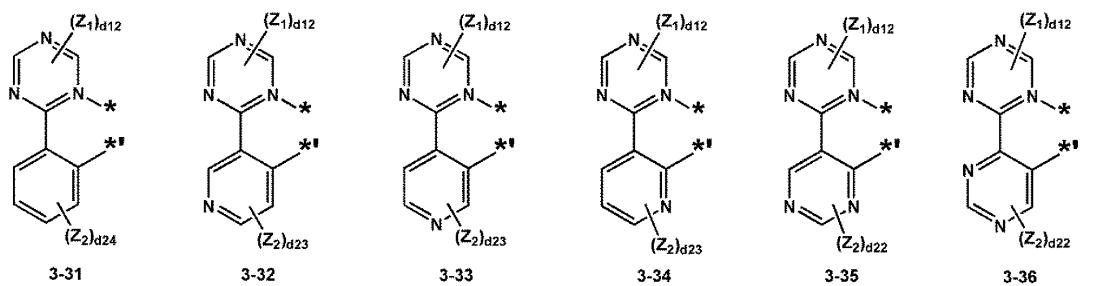
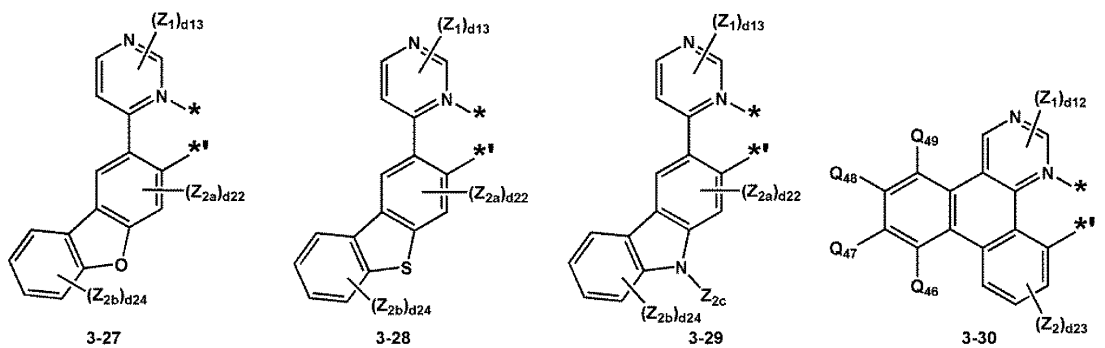
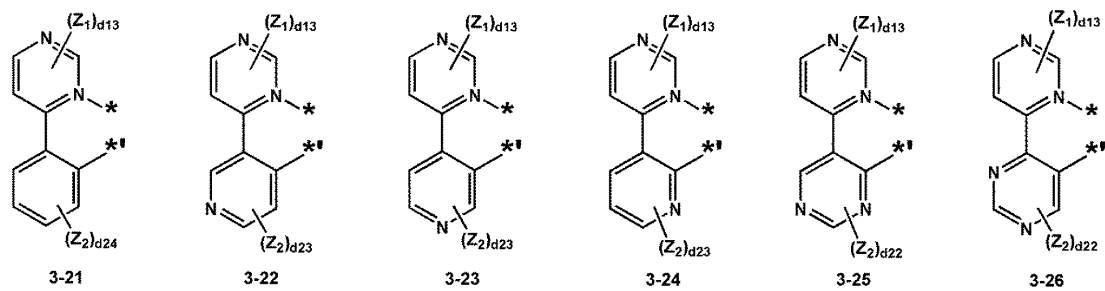
10

20

30

40

【化(3-21)-(3-40)】

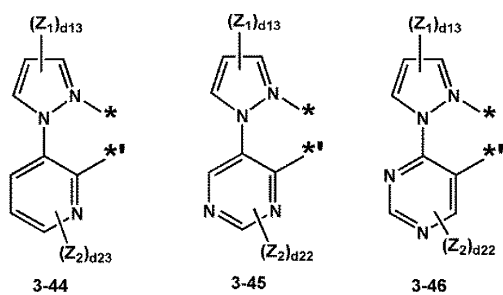
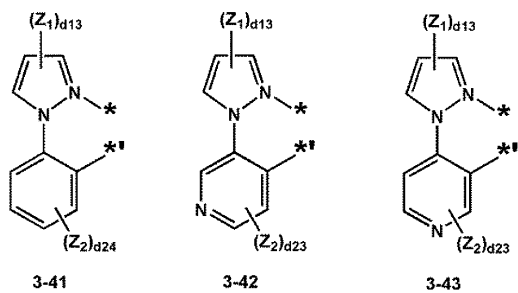


10

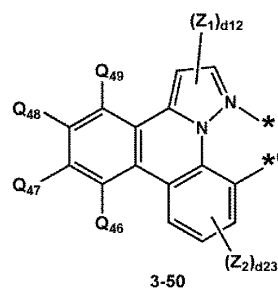
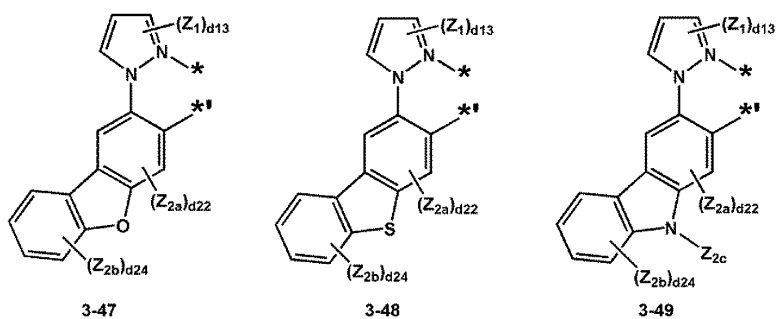
20

30

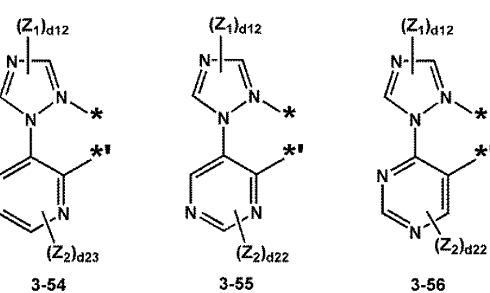
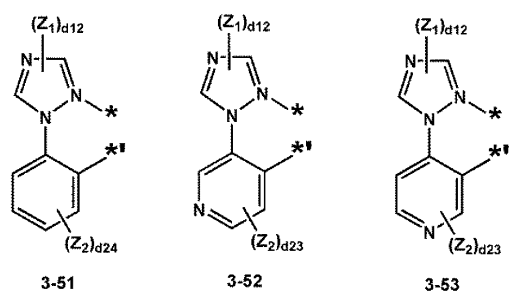
【化(3-41)-(3-60)】



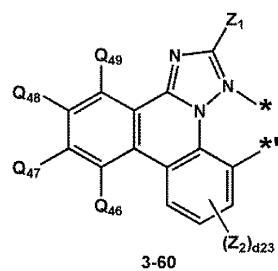
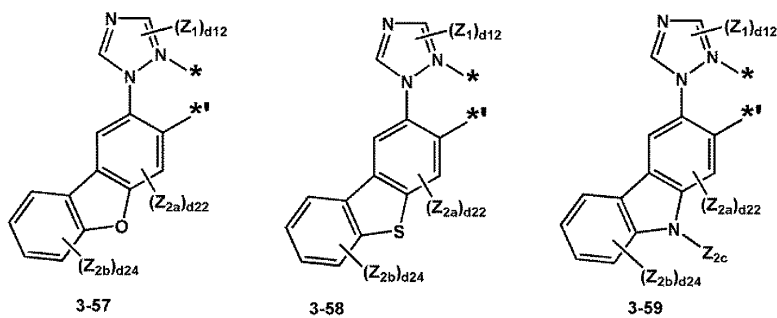
10



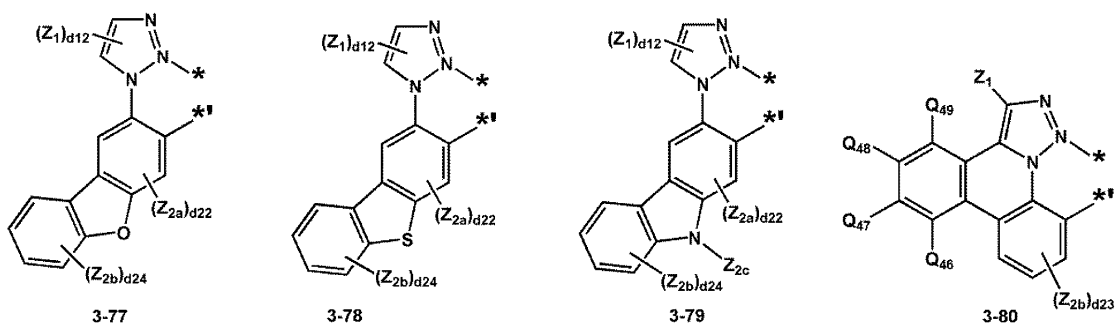
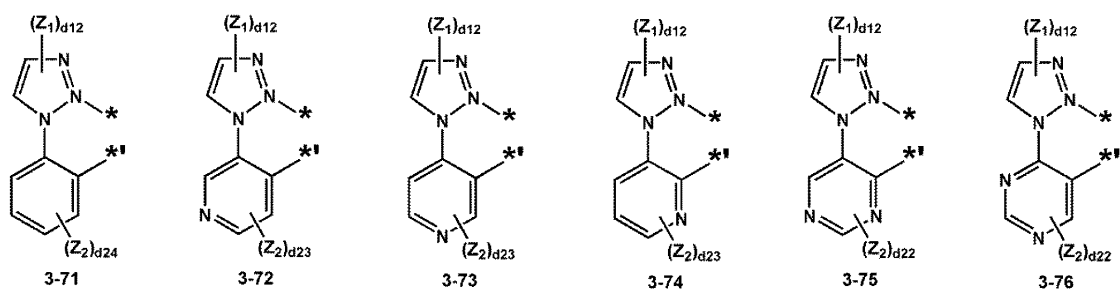
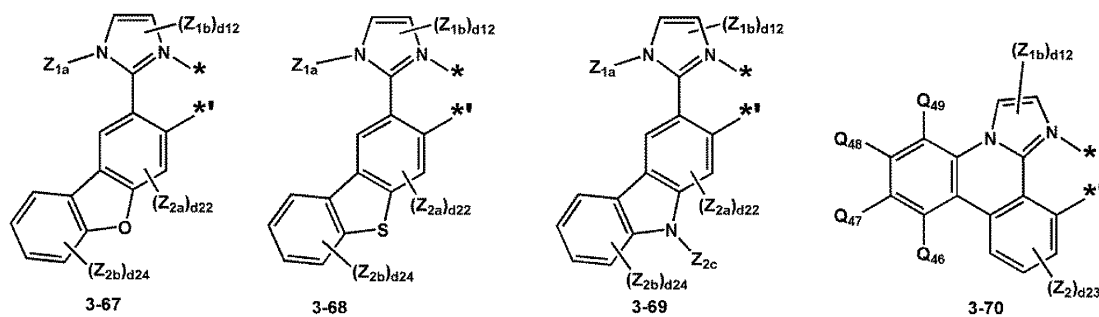
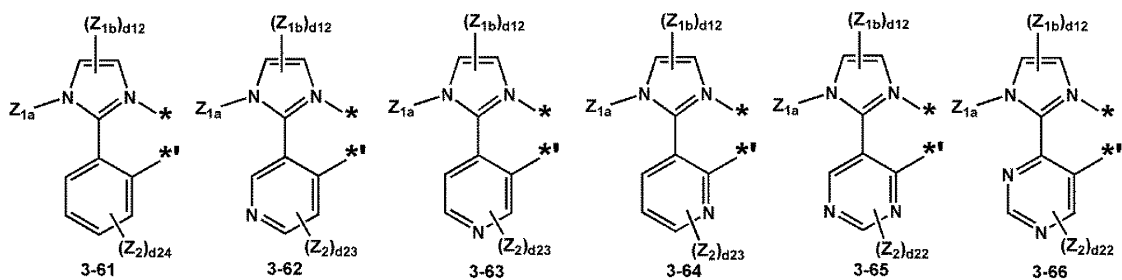
20



30



【化(3-61)-(3-80)】

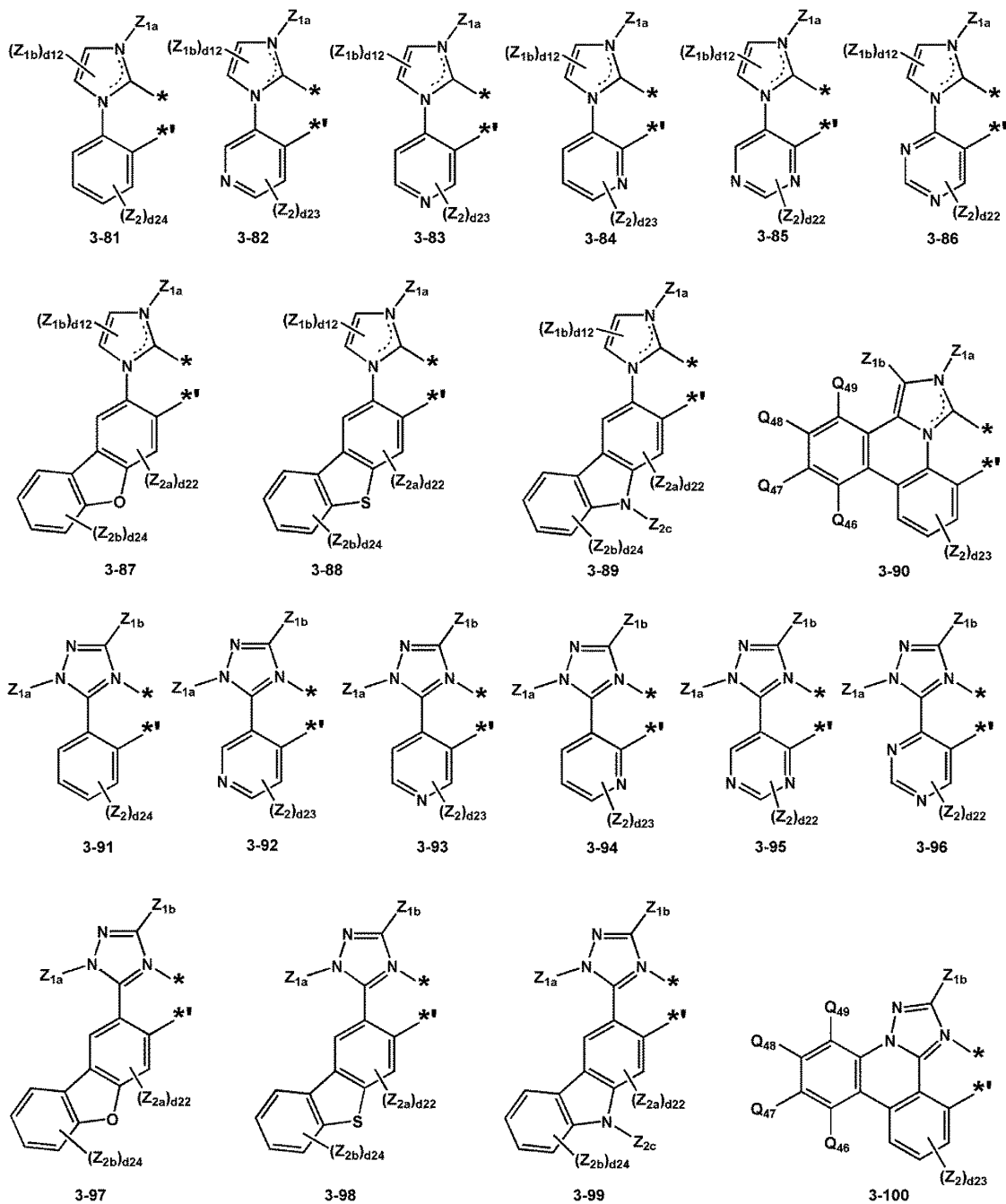


10

20

30

【化(3-81)-(3-100)】

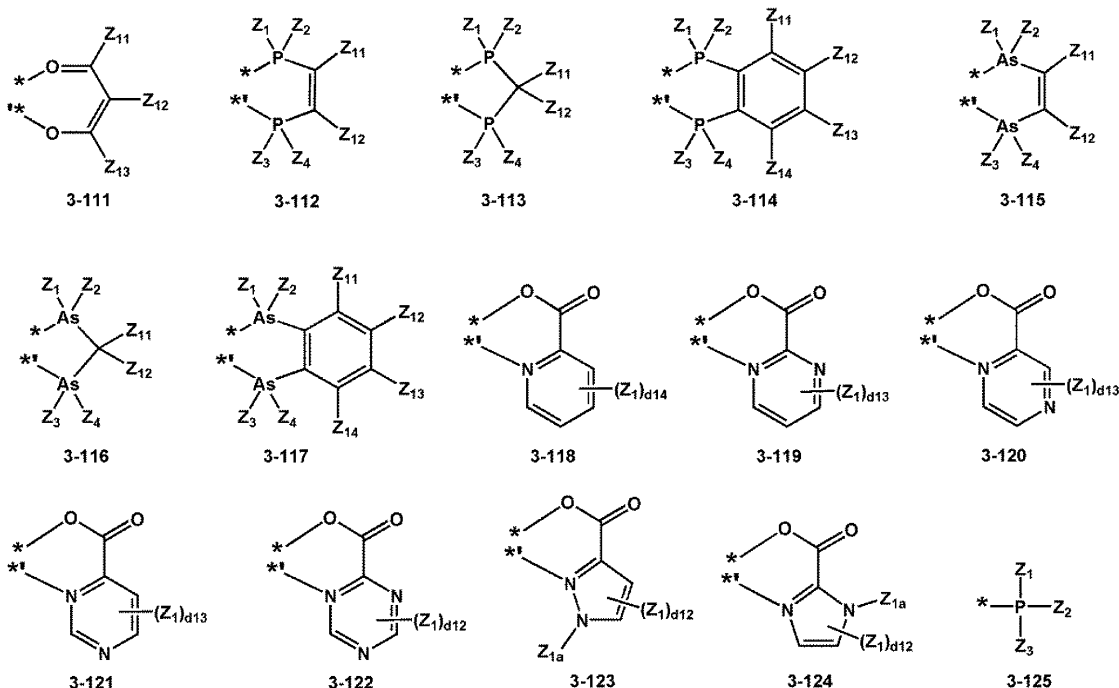


10

20

30

【化 (3-111) - (3-125)】



10

20

【0072】

上記化学式 3-1 ~ 3-100、及び化学式 3-111 ~ 3-125 で、

Z₁ ないし Z₄、Z_{1a}、Z_{1b}、Z_{2a} ないし Z_{2c}、及び Z₁₁ ないし Z₁₄ についての説明は、それぞれ本明細書において、R₂₁ についての説明を参照し、

d₁₄ 及び d₂₄ は、それぞれ独立して、0 ~ 4 の整数のうちから選択され、

d₁₃ 及び d₂₃ は、それぞれ独立して、0 ~ 3 の整数のうちから選択され、

d₁₂ 及び d₂₂ は、それぞれ独立して、0 ~ 2 の整数のうちから選択され、

* 及び *' は、上記化学式 1 において、M との結合サイトである。

【0073】

例えば、上記化学式 1 で、n₂ は、1 又は 2 であり、L₂ は、上記化学式 3-111 ~ 3-125 で表される基のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

30

【0074】

上記化学式 1 で表される有機金属化合物は、赤色光、例えば 550 nm 以上、例えば 550 nm 以上 900 nm 以下の範囲の最大発光波長（他の例として、575 nm 以上 650 nm 以下の範囲の最大発光波長）を有する赤色光を放出する。

【0075】

本明細書において、「アザインドール基、アザベンゾボロール基、アザベンゾホスホール基、アザインデン基、アザベンゾシロール基、アザベンゾゲルモール基、アザベンゾチオフエン基、アザベンゾセレノフェン基、アザベンゾフラン基、アザカルバゾール基、アザジベンゾボロール基、アザジベンゾホスホール基、アザフルオレン基、アザジベンゾシロール基、アザジベンゾゲルモール基、アザジベンゾチオフエン基、アザジベンゾセレノフェン基、アザジベンゾフラン基、アザジベンゾチオフエン 5-オキシド基、アザー 9H-フルオレン-9-オン基、アザジベンゾチオフエン 5, 5-ジオキシド基」は、それぞれ、「インドール基、ベンゾボロール基、ベンゾホスホール基、インデン基、ベンゾシロール基、ベンゾゲルモール基、ベンゾチオフエン基、ベンゾセレノフェン基、ベンゾフラン基、カルバゾール基、ジベンゾボロール基、ジベンゾホスホール基、フルオレン基、ジベンゾシロール基、ジベンゾゲルモール基、ジベンゾチオフエン基、ジベンゾセレノフェン基、ジベンゾフラン基、ジベンゾチオフエン 5-オキシド基、9H-フルオレン-9-オン基、ジベンゾチオフエン 5, 5-ジオキシド基」と同一バックボーンを有するが、それらの環を形成する炭素のうちの少なくとも一つが窒素で置換されたヘテロ環を意味する

40

50

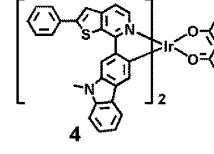
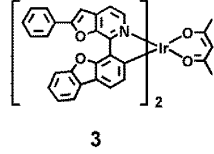
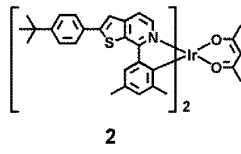
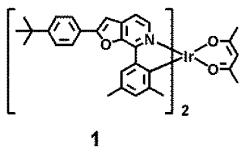
。

【 0 0 7 6 】

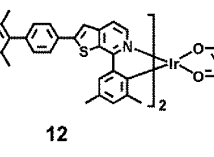
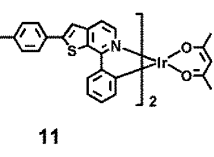
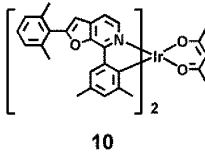
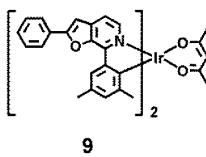
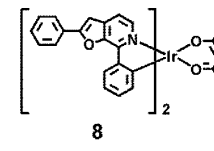
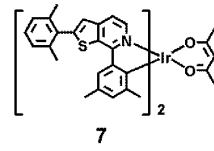
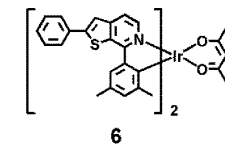
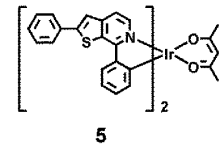
上記化学式 1 で表される有機金属化合物は、例えば下記化合物 1 ～ 7 8 のうちのひとつであるが、それらに限定されるものではない。

【 0 0 7 7 】

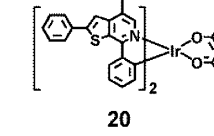
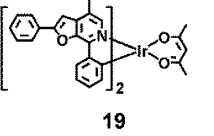
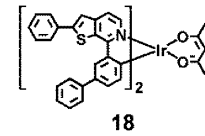
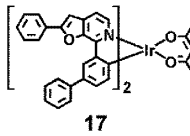
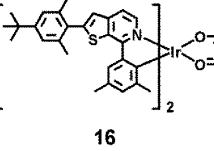
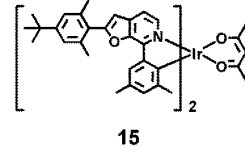
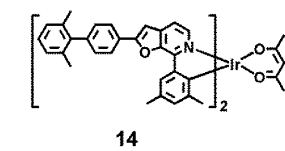
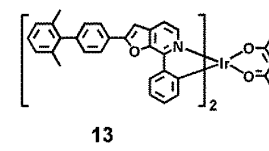
【 化 1 - 3 2 】



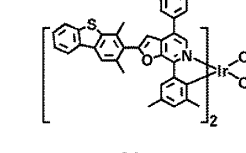
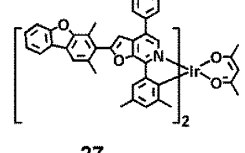
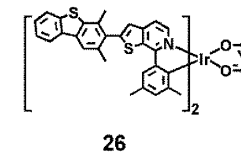
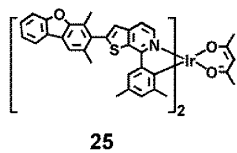
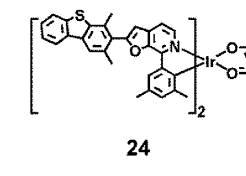
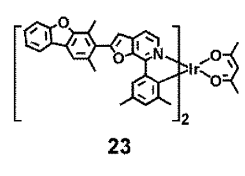
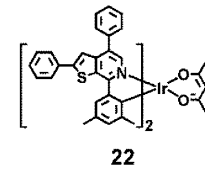
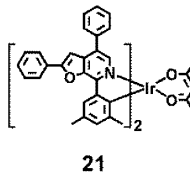
10



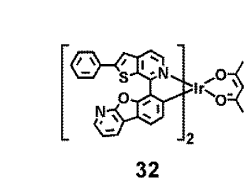
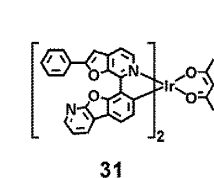
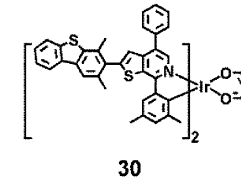
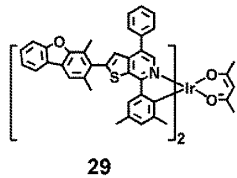
20



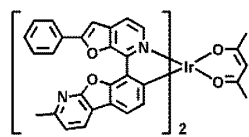
30



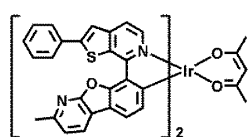
40



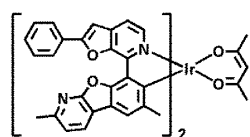
【化 3 3 - 5 6】



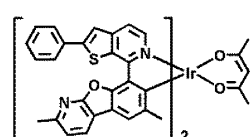
33



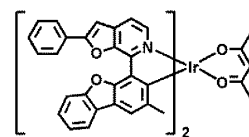
34



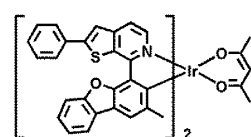
35



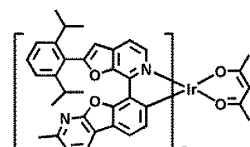
36



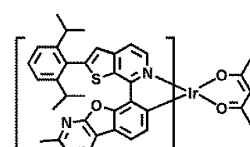
37



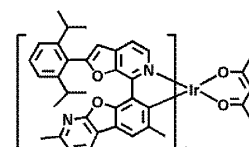
38



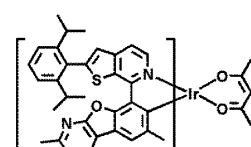
39



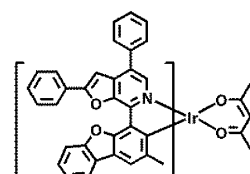
40



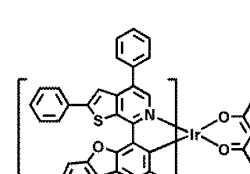
41



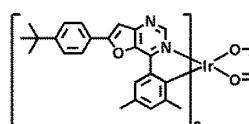
42



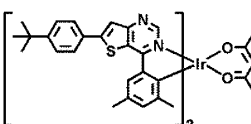
43



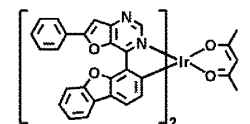
44



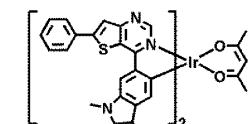
45



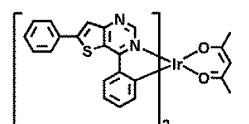
46



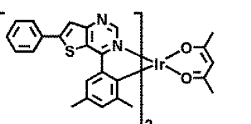
47



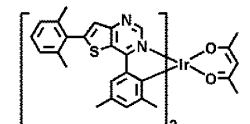
48



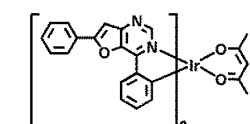
49



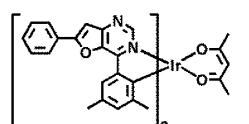
50



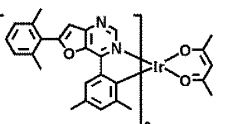
51



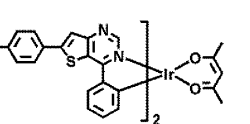
52



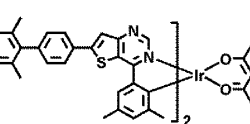
53



54



55



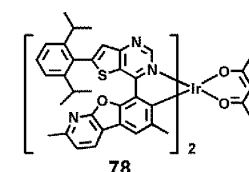
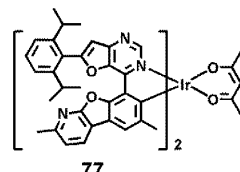
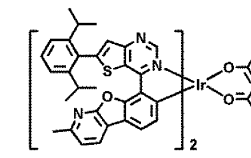
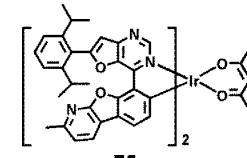
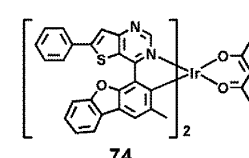
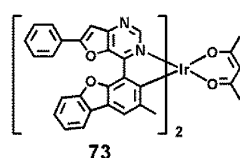
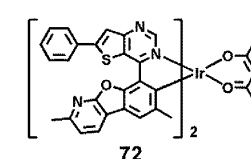
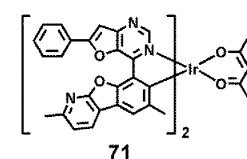
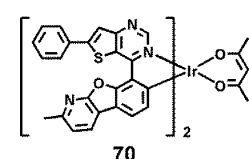
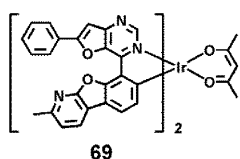
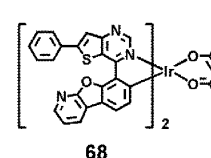
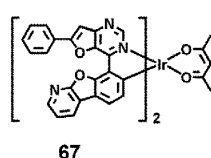
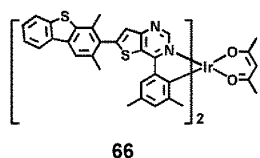
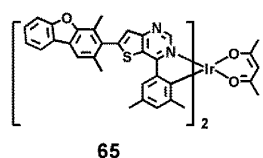
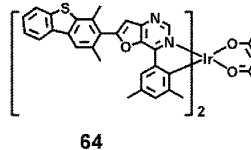
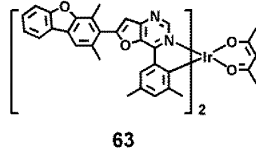
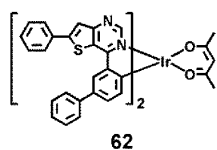
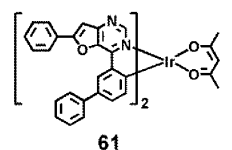
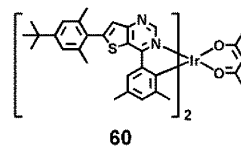
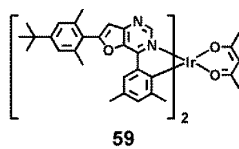
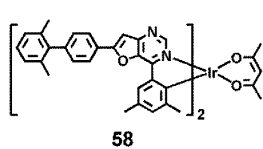
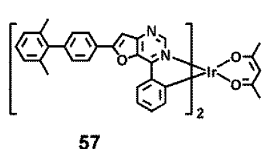
56

10

20

30

【化 57 - 78】



【0078】

上記化学式1で表される有機金属化合物において、 L_1 は、上記化学式2で表される基のうちから選択され、 L_1 の個数である n_1 は、1、2、又は3である。即ち、上記有機金属化合物は、金属Mと結合されたりガンドであり、少なくとも1つの上記化学式2で表される基を必ず含む。

【0079】

上記化学式2で表される基は、「環CY₁」を必ず含み、上記化学式2で表される基において、5員環のX₃は、上記化学式2に示す位置に存在する。それにより、上記化学式1の配向軸方向に転移双極子（transition dipole）が増加して上記化学式1で表される有機金属化合物の配向が向上し、上記化学式1で表される有機金属化合物を含む電子素子、例えば有機発光素子の発光効率が上昇する。

【0080】

一方、上記化学式2で、環CY₁とR₂とは、互いに結合せず、R₁とR₂とは、互いに結合しない。それにより、上記化学式1の配向軸方向ではない方向に上記化学式1の転移双極子がねじれることが防止され、上記化学式1で表される有機金属化合物を含む電子素子、例えば有機発光素子の発光効率が上昇する。

【0081】

10

20

30

40

50

更に、上記化学式 2 で、5 員環は、環形成原子として、 $* = N - *$ （* 及び * ' は、それぞれ隣接する原子との結合サイト）を含まない。それにより、上記化学式 1 で表される有機金属化合物の分子間結合力低下が防止され、上記化学式 1 で表される有機金属化合物を含む電子素子、例えば有機発光素子の寿命低下が防止される。

【0082】

上記化学式 1 で表される有機金属化合物において、一部化合物の HOMO (highest occupied molecular orbital) エネルギーレベル、LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) エネルギーレベル、及び T_1 エネルギーレベルを、B3LYP に基づいた DFT (density functional theory) による分子構造最適化を伴う Gaussian 09 プログラムを利用しながら評価した結果は、下記表 1 の通りである。

10

【0083】

【表 1】

化合物No.	HOMO(eV)	LUMO(eV)	T_1 (eV)
1	-4.461	-1.667	2.061
2	-4.520	-1.729	2.055
5	-4.726	-1.796	2.176
6	-4.566	-1.793	2.040
7	-4.571	-1.530	2.174
8	-4.669	-1.746	2.172
9	-4.513	-1.747	2.039
10	-4.500	-1.511	2.162

20

【0084】

上記表 1 から、上記化学式 1 で表される有機金属化合物は、電子素子、例えば有機発光素子のドーパントとして使用するのに適する電気的特性を有するということが確認される。

【0085】

一方、B3LYP に基づいた DFT による分子構造最適化を伴う Gaussian 09 プログラムを利用して、上記化合物 1 ~ 10、及び下記化合物 B ~ D のスピン密度 (spin density) を測定した結果を表 2 に示した。

30

【0086】

【表 2】

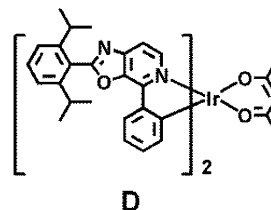
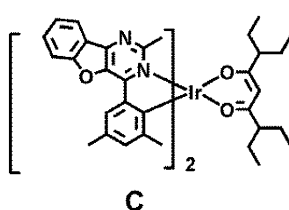
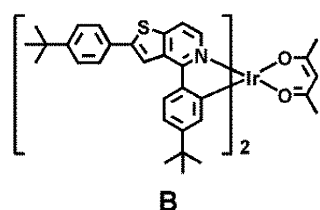
化合物No.	spin density
1	0.483
2	0.477
3	0.347
4	0.339
5	0.528
6	0.477
7	0.396
8	0.530
9	0.484
10	0.481
B	0.286
C	0.174
D	0.303

40

50

【 0 0 8 7 】

【化 B - D】



【 0 0 8 8 】

10

上記表 2 から、上記化学式 1 で表される有機金属化合物は、化合物 B ～ D に比べて、高いスピン密度（例えば 0.33 以上、他の例として 0.33 以上 1.0 以下）を有し、相対的に高い確率でスピンオービタルカップリング（spin orbital coupling）をなす。従って、上記化学式 1 で表される有機金属化合物を含む電子素子、例えば有機発光素子は、高い発光効率を有する。

【 0 0 8 9 】

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

【 0 0 9 0 】

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

20

【 0 0 9 1 】

有機発光素子は、上記化学式 1 で表される有機金属化合物を含む有機層を具備することにより、低駆動電圧、高効率、高電力、高量子効率、長寿命、及び低ロールオフ比の特性、並びに優秀な色純度を有する。

【 0 0 9 2 】

上記化学式 1 で表される有機金属化合物は、有機発光素子の 1 対の電極間に使用される。例えば、上記化学式 1 で表される有機金属化合物は、発光層に含まれる。このとき、有機金属化合物はドーパントの役割を行い、発光層はホストを更に含む（即ち、上記化学式 1 で表される有機金属化合物の含量は、ホストの含量よりも少ない）。発光層は、赤色光、例えば 550 nm 以上（例えば、550 nm 以上 900 nm 以下の範囲）の最大発光波長を有する赤色光を放出する。

30

【 0 0 9 3 】

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

【 0 0 9 4 】

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

40

【 0 0 9 5 】

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

【 0 0 9 6 】

例えば、有機発光素子において、第 1 電極は、アノードであり、第 2 電極はカソードで

50

あり、有機層は、第1電極と発光層との間に介在する正孔輸送領域、及び発光層と第2電極との間に介在する電子輸送領域を更に含み、正孔輸送領域は、正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、バッファ層、又はその任意の組み合わせを含み、電子輸送領域は、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、又はその任意の組み合わせを含む。

【0097】

本明細書において、「有機層」は、有機発光素子において、第1電極と第2電極との間に介在する単一及び／又は複数の層を示す用語である。「有機層」は、有機化合物だけではなく、金属を含む有機金属錯体なども含む。

【0098】

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

【0099】

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

【0100】

第1電極11は、例えば基板上部に第1電極用物質を、蒸着法又はスパッタリング法などを利用して提供することによって形成される。第1電極11は、アノードである。第1電極用物質は、正孔注入が容易であるように、高い仕事関数を有する物質のうちから選択される。第1電極11は、反射型電極、半透過型電極、又は透過型電極である。第1電極用物質としては、酸化インジウムスズ（ITO）、酸化インジウム亜鉛（IZO）、酸化スズ（SnO₂）、酸化亜鉛（ZnO）などが利用される。或いは、マグネシウム（Mg）、アルミニウム（Al）、アルミニウム－リチウム（Al－Li）、カルシウム（Ca）、マグネシウム－インジウム（Mg－In）、マグネシウム－銀（Mg－Ag）のような金属が利用される。

【0101】

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

【0102】

第1電極11の上部には、有機層15が配置される。

【0103】

有機層15は、正孔輸送領域（hole transport region）と、発光層（emission layer）と、電子輸送領域（electron transport region）と、を含む。

【0104】

正孔輸送領域は、第1電極11と発光層との間に配置される。

【0105】

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

【0106】

正孔輸送領域は、正孔注入層のみを含むか、又は正孔輸送層のみを含む。或いは、正孔輸送領域は、第1電極11から順に積層された正孔注入層／正孔輸送層、又は正孔注入層／正孔輸送層／電子阻止層の構造を有する。

【0107】

正孔輸送領域が正孔注入層を含む場合、正孔注入層（HIL）は、第1電極11の上部に、真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、LB（Langmuir－Blo

10

20

30

40

50

d g e t t) 法のような多様な方法を利用して形成される。

【0108】

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

【0109】

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

10

【0110】

正孔輸送層及び電子阻止層の形成条件は、正孔注入層形成条件を参照する。

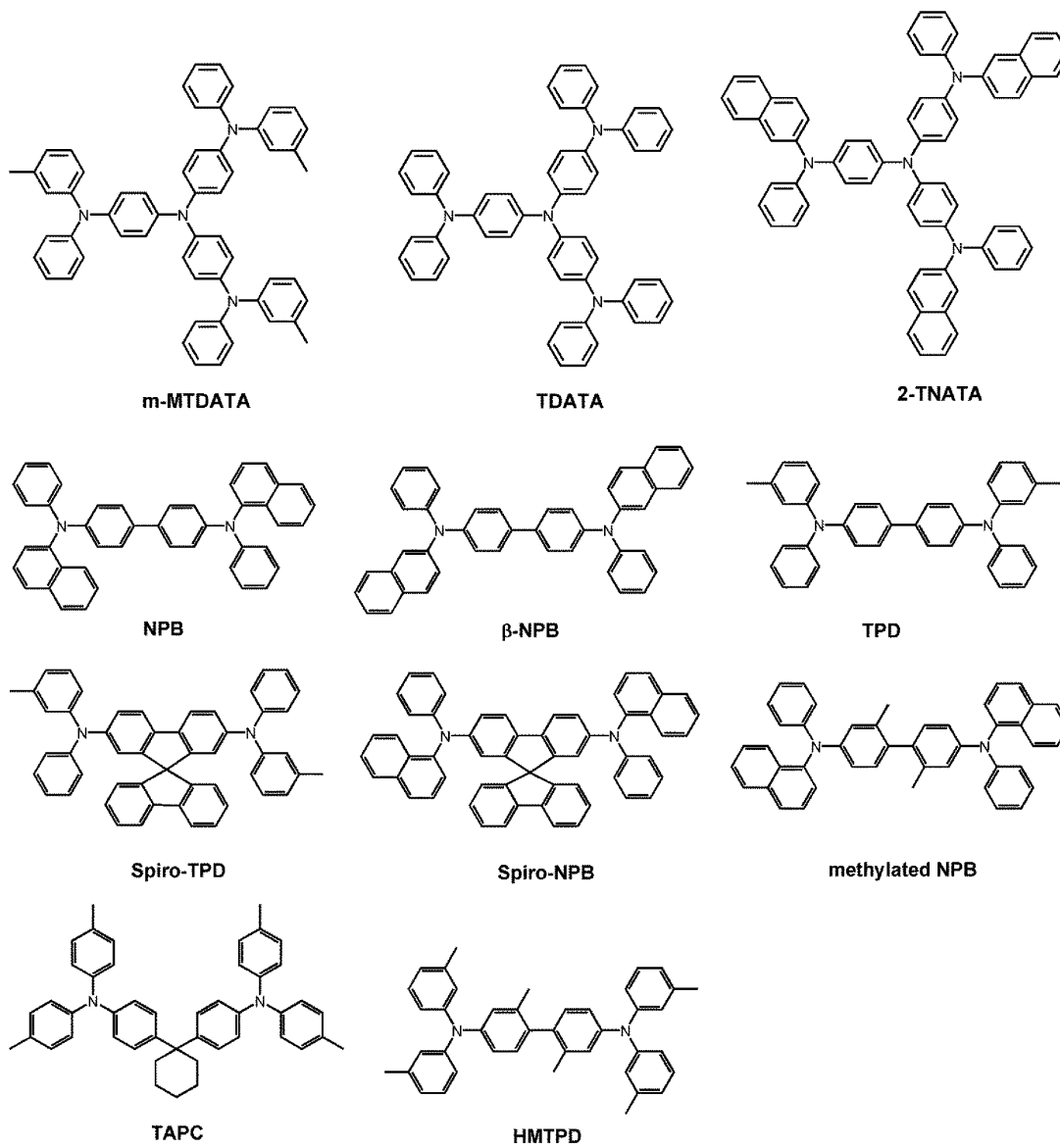
【0111】

正孔輸送領域は、例えば、m-MTDATA、TDATA、2-TNATA、NPB、β-NPB、TPD、spiro-TPD、spiro-NPB、methylated-NPB、TAPC、HMTPD、4,4',4"-トリス(N-カルバゾリル)トリフェニルアミン(TCTA)、ポリアニリン/ドデシルベンゼンスルホン酸(Pani/DBSA)、ポリ(3,4-エチレンジオキシチオフェン)/ポリ(4-スチレンスルホネート)(PEDOT/PSS)、ポリアニリン/カンファースルホン酸(Pani/CSA)、ポリアニリン/ポリ(4-スチレンスルホネート)(PANI/PSS)、下記化学式201で表される化合物、及び下記化学式202で表される化合物のうちの少なくとも一つを含む。

20

【0112】

【化 (m-MTDATA) - (HMTDPD)】



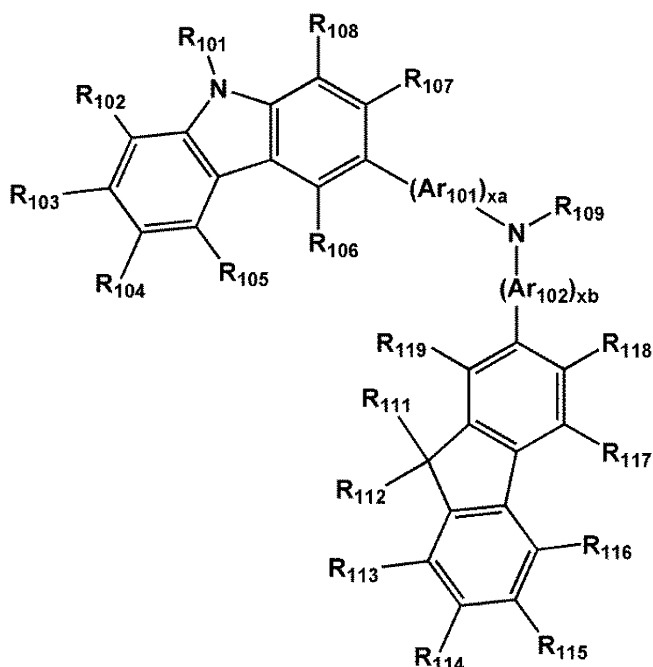
10

20

30

【 0 1 1 3 】

【化 2 0 1】

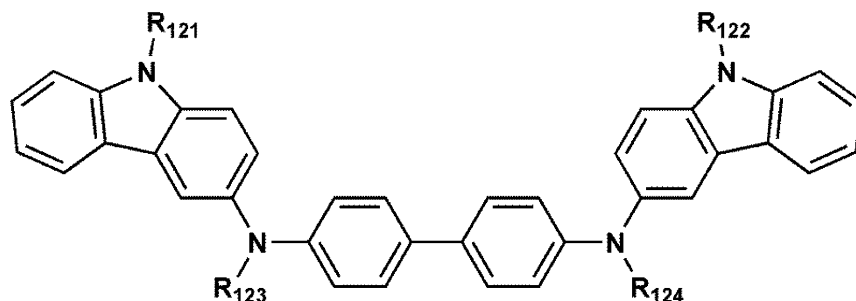


10

【 0 1 1 4】

20

【化 2 0 2】



【 0 1 1 5】

30

上記化学式 2 0 1 で、 Ar_{101} 及び Ar_{102} は、互いに独立して、

フェニレン基、ペンタレニレン基、インデニレン基、ナフチレン基、アズレニレン基、ヘプタレニレン基、アセナフチレン基、フルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレニレン基、ナфтаセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、及びペンタセニレン基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちの少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ペンタレニレン基、インデニレン基、ナフチレン基、アズレニレン基、ヘプタレニレン基、アセナフチレン基、フルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレニレン基、ナфтаセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、及びペンタセニレン基；のうちから選択される。

40

【 0 1 1 6】

50

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

【0117】

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

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

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

フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フルオレニル基、及びピレニル基；並びに

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

【0118】

上記化学式 201 で、 R_{109} は、

フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、及びピリジニル基；並びに

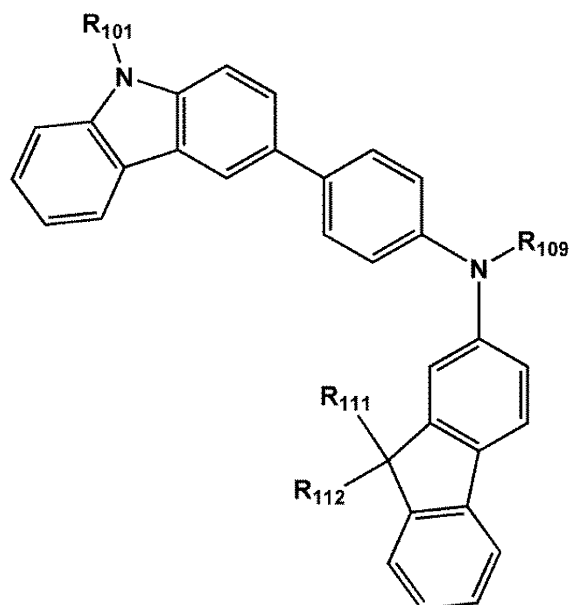
重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、及びピリジニル基のうちの一つ以上で置換された、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、及びピリジニル基；のうちから選択される。

【0119】

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

【0120】

【化 2 0 1 A】



10

【 0 1 2 1】

上記化学式 2 0 1 A で、R_{1 0 1}、R_{1 1 1}、R_{1 1 2}、及び R_{1 0 9} についての詳細な説明は、上述の箇所を参照する。

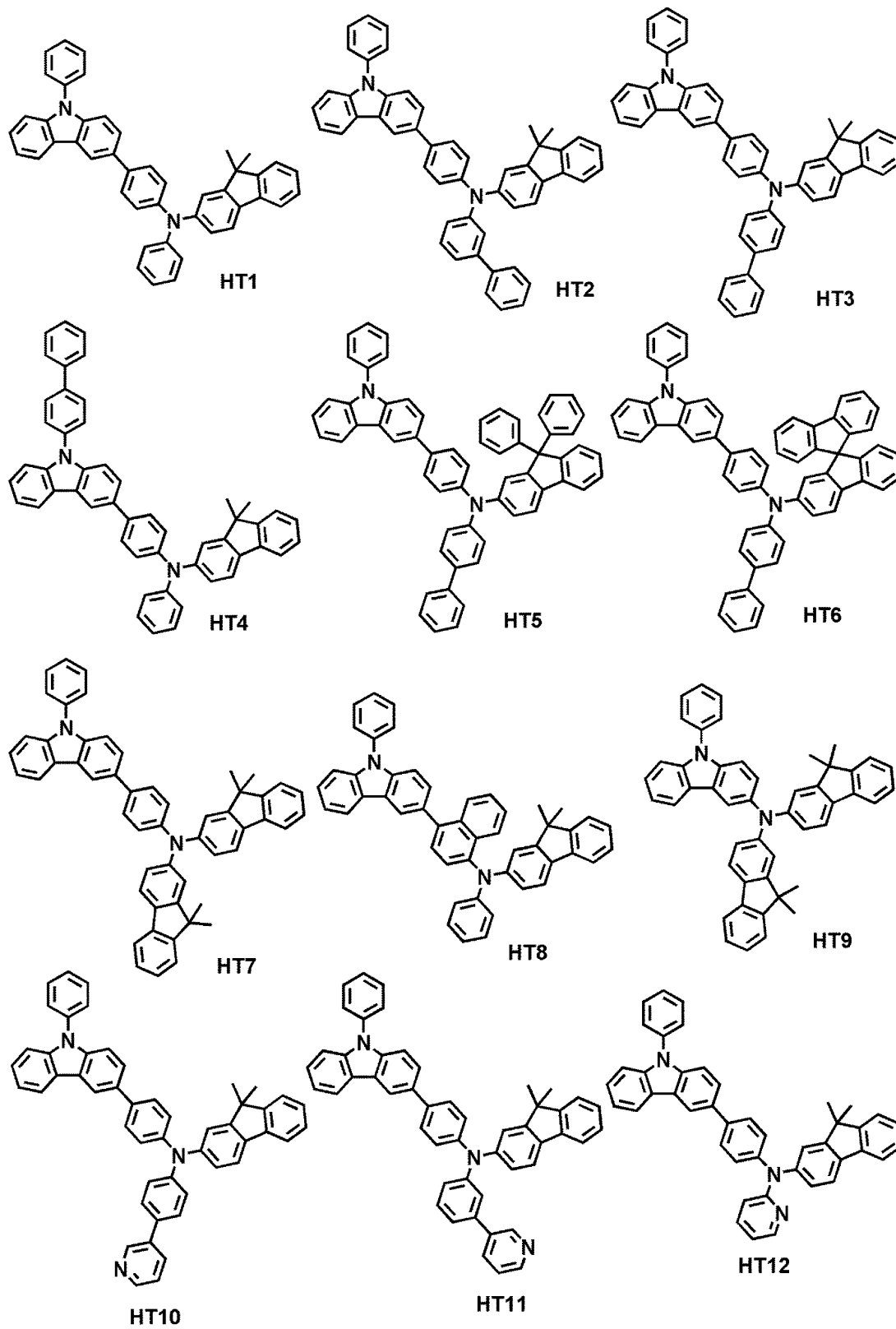
20

【 0 1 2 2】

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

【 0 1 2 3】

【化HT1-HT12】



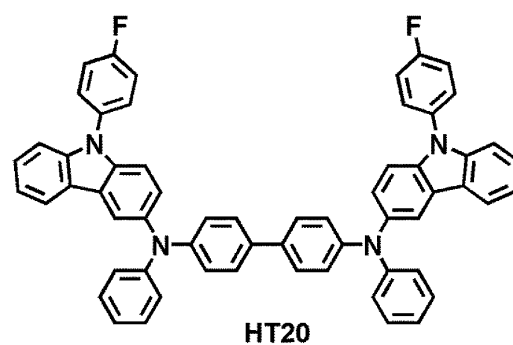
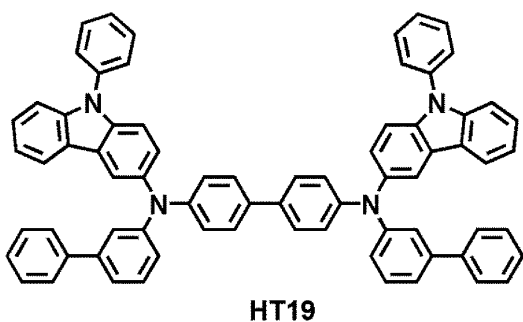
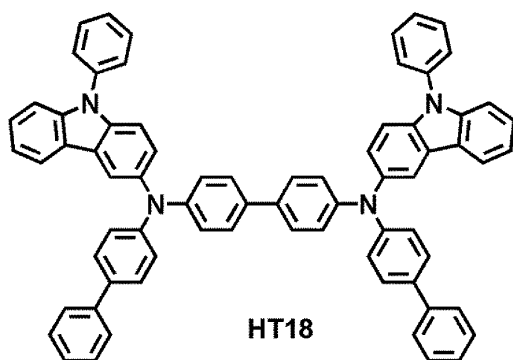
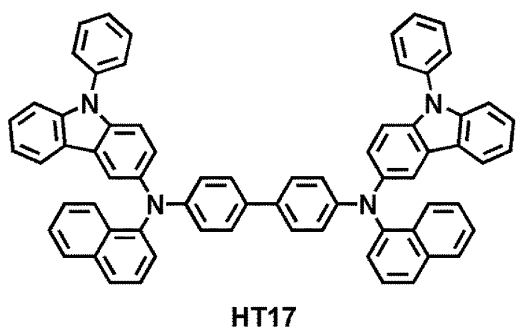
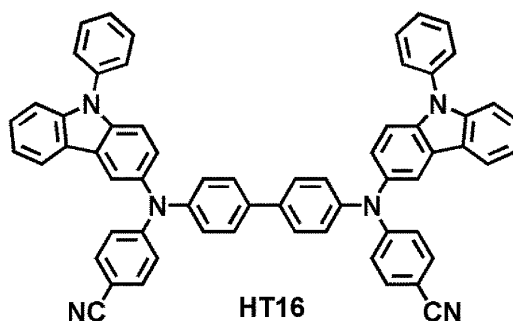
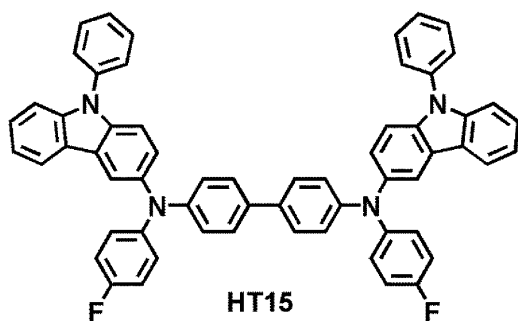
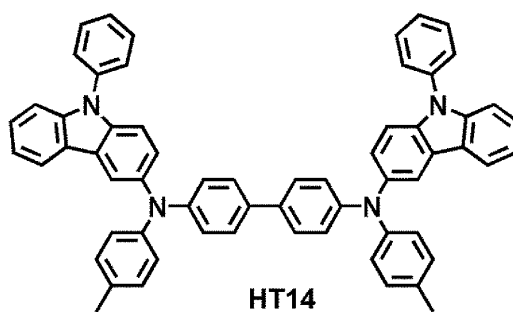
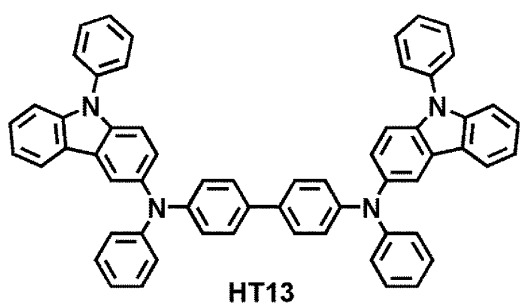
10

20

30

40

【化HT13-HT20】



【0124】

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

【0125】

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

【0126】

10

20

30

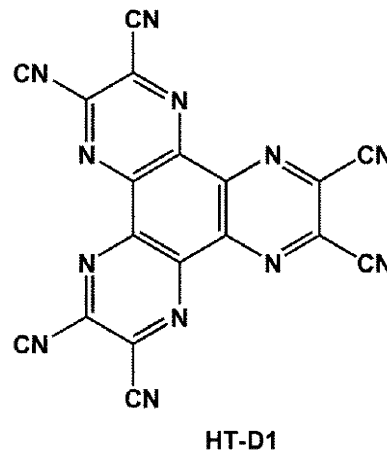
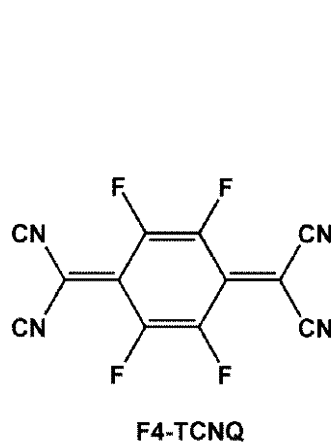
40

50

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

【0127】

【化（F4-TCNQ）－（HT-D1）】



10

20

【0128】

正孔輸送領域は、バッファ層を更に含む。

【0129】

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

【0130】

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

30

【0131】

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

【0132】

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

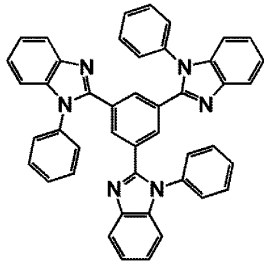
【0133】

ホストは、下記の TPBi、TBADN、ADN（「DNA」ともいう）、CBP、CDBP、TCP、mCP、化合物 H50～化合物 H52 のうちの少なくとも一つを含む。

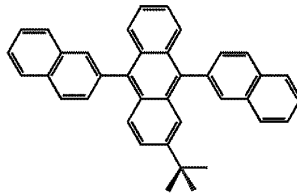
40

【0134】

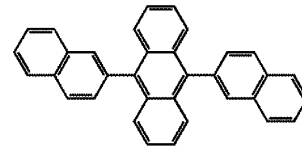
【化 T P B i - H 5 2】



TPBi

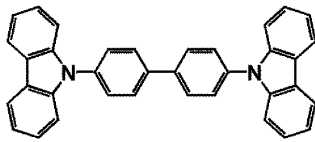


TBADN

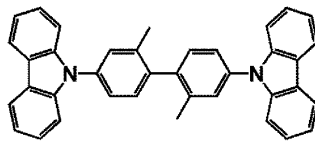


ADN

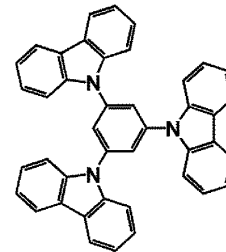
10



CBP

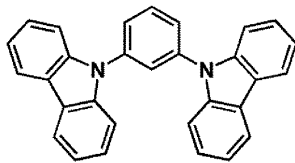


CDBP

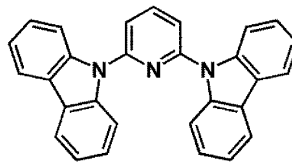


TCP

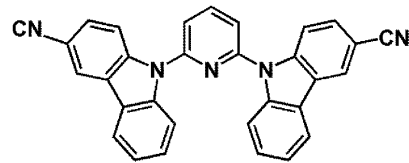
20



mCP

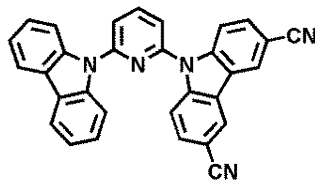


H50



H51

30



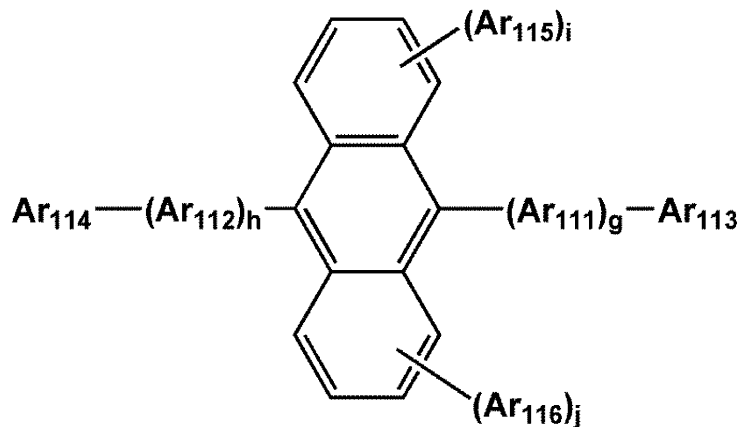
H52

【 0 1 3 5】

或いは、ホストは、下記化学式 3 0 1 で表される化合物を更に含む。

【 0 1 3 6】

【化 3 0 1】



40

【 0 1 3 7】

上記化学式 3 0 1 で、 Ar_{111} 及び Ar_{112} は、互いに独立して、フェニレン基、ナフチレン基、フェナントレニレン基、及びピレニレン基；並びに

50

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

【0138】

上記化学式301で、 Ar_{113} ないし Ar_{116} は、それぞれ独立して、

C_1-C_{10} アルキル基、フェニル基、ナフチル基、フェナントレニル基、及びピレニル基；並びに

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

【0139】

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

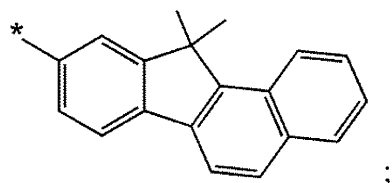
【0140】

上記化学式301で、 Ar_{113} ないし Ar_{116} は、それぞれ独立して、

フェニル基、ナフチル基、及びアントラセニル基のうちの一つ以上で置換された C_1-C_{10} アルキル基；

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

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、及びフルオレニル基のうちの一つ以上で置換された、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、ピレニル基、フェナントレニル基、及びフルオレニル基；並びに



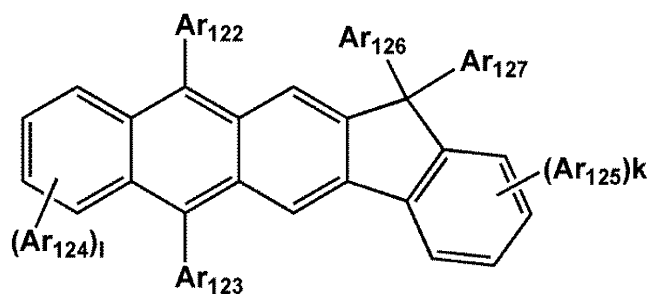
のうちから選択されるが、それらに限定されるものではない。

【0141】

或いは、ホストは、下記化学式302で表される化合物を含む。

【0142】

【化302】



【0143】

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

【0144】

上記化学式302で、 Ar_{126} 及び Ar_{127} は、互いに独立して、 C_1-C_{10} アルキル基（例えば、メチル基、エチル基、又はプロピル基）である。

【0145】

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

【0146】

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

【0147】

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

10

【0148】

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

【0149】

次に、発光層上部に、電子輸送領域が配置される。

【0150】

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

20

【0151】

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

【0152】

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

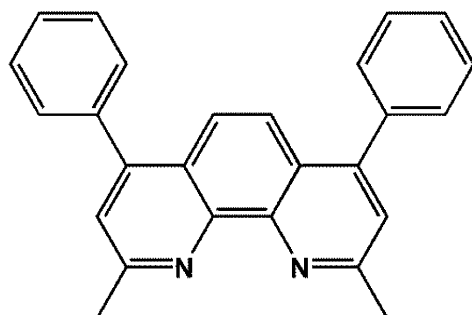
【0153】

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

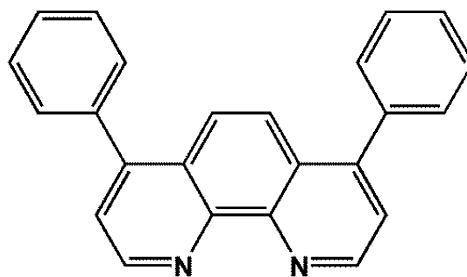
30

【0154】

【化BCP-Bphen】



BCP



Bphen

40

【0155】

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

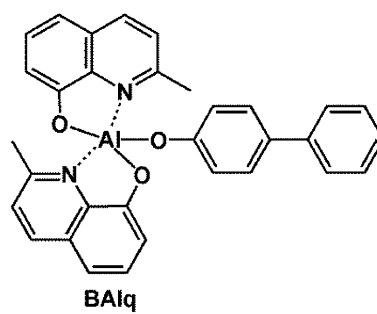
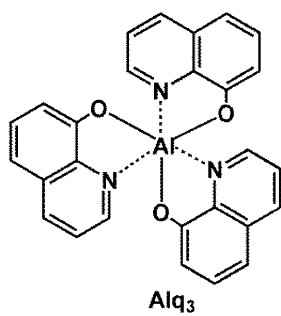
【0156】

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

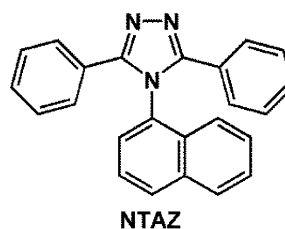
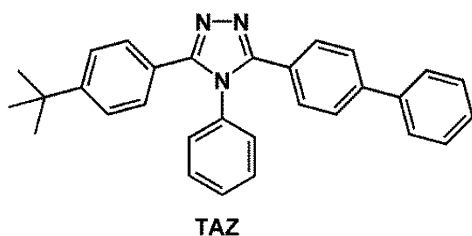
50

【 0 1 5 7 】

【 化 A 1 q 3 - N T A Z 】



10



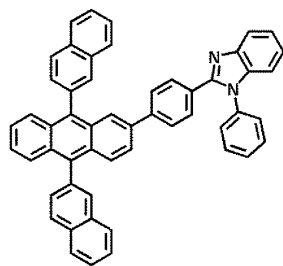
20

【 0 1 5 8 】

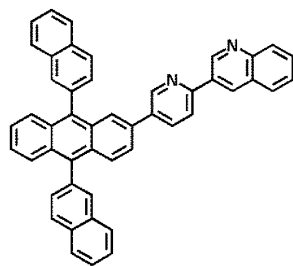
或いは、電子輸送層は、下記化合物 E T 1 ～ E T 2 5 のうちの少なくとも一つを含むが、それらに限定されるものではない。

【 0 1 5 9 】

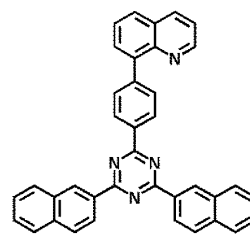
【化 E T 1 - E T 1 2】



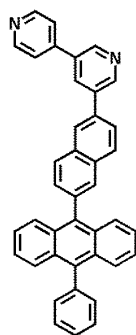
ET1



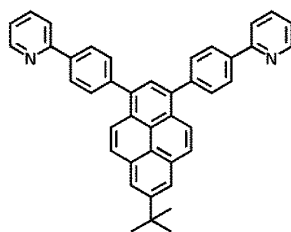
ET2



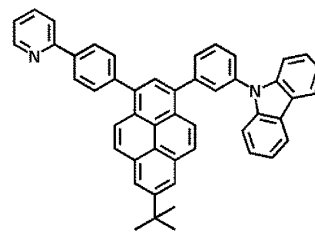
ET3



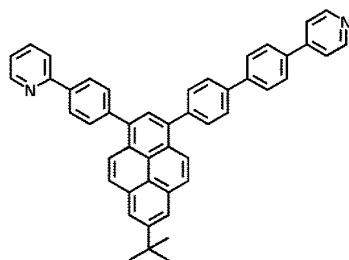
ET4



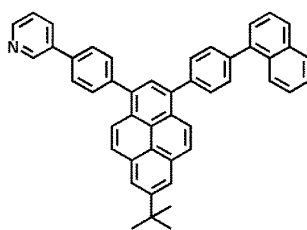
ET5



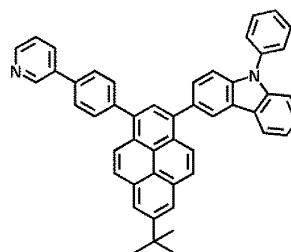
ET6



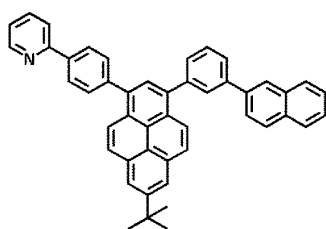
ET7



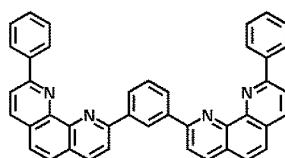
ET8



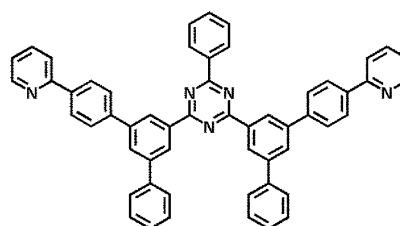
ET9



ET10



ET11



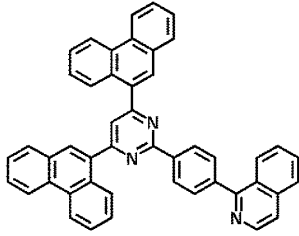
ET12

10

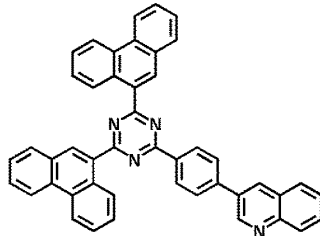
20

30

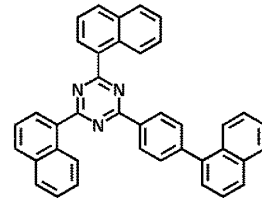
【化 E T 1 3 - E T 2 5】



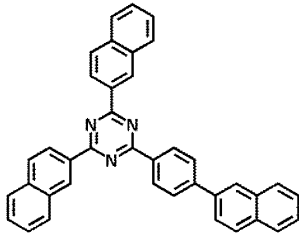
ET13



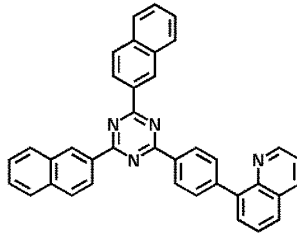
ET14



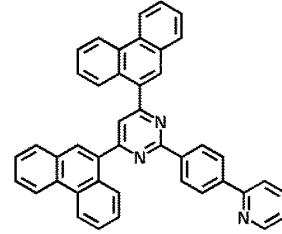
ET15



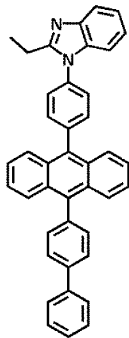
ET16



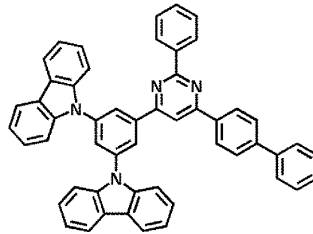
ET17



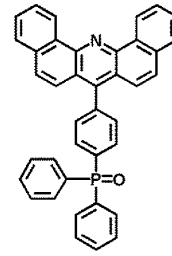
ET18



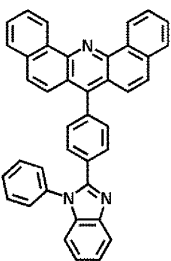
ET19



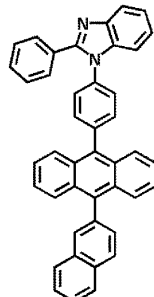
ET20



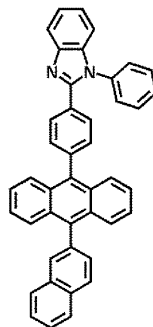
ET21



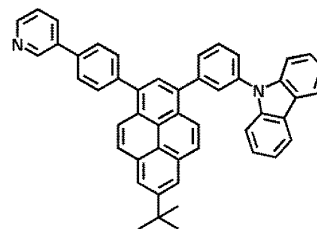
ET22



ET23



ET24



ET25

【0 1 6 0】

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

【0 1 6 1】

電子輸送層は、上述のような物質以外に金属含有物質を更に含む。

【0 1 6 2】

金属含有物質は、Li 錯体を含む。Li 錯体は、例えば下記化合物 ET-D1（リチウムキノレート（LiQ））又は ET-D2 を含む。

【0 1 6 3】

10

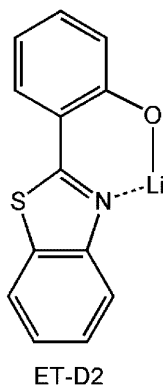
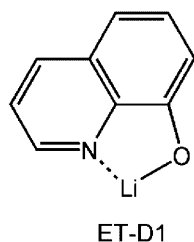
20

30

40

50

【化 (E T - D 1) - (E T - D 2) 】



10

【 0 1 6 4 】

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

【 0 1 6 5 】

電子注入層は、 LiF 、 NaCl 、 CsF 、 Li_2O 、及び BaO のうちから選択される少なくとも一つを含む。

【 0 1 6 6 】

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

20

【 0 1 6 7 】

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

30

【 0 1 6 8 】

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

【 0 1 6 9 】

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

【 0 1 7 0 】

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

40

【 0 1 7 1 】

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

【 0 1 7 2 】

本明細書において、 $\text{C}_1 - \text{C}_{60}$ アルキル基は、炭素数 1 ～ 60 の線状又は分枝状の飽和脂肪族炭化水素一価基を意味し、具体的な例には、メチル基、エチル基、プロピル基、イソブチル基、sec-ブチル基、tert-ブチル基、ペンチル基、iso-アミル基、ヘキシル基などが含まれる。本明細書において、 $\text{C}_1 - \text{C}_{60}$ アルキレン基は、 $\text{C}_1 - \text{C}_{60}$ アルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【 0 1 7 3 】

50

本明細書において、 C_1-C_{60} アルコキシ基は、 $-OA_{101}$ （ここで、 A_{101} は、 C_1-C_{60} アルキル基である）の化学式を有する一価基を意味し、その具体的な例には、メトキシ基、エトキシ基、イソプロピルオキシ基などが含まれる。

【0174】

本明細書において、 C_2-C_{60} アルケニル基は、 C_2-C_{60} アルキル基の中間又は末端に、1以上の炭素・炭素二重結合を含む構造を有し、その具体的な例には、エテニル基、プロベニル基、ブテニル基などが含まれる。本明細書において、 C_2-C_{60} アルケニレン基は、 C_2-C_{60} アルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0175】

本明細書において、 C_2-C_{60} アルキニル基は、 C_2-C_{60} アルキル基の中間又は末端に1以上の炭素・炭素三重結合を含む構造を有し、その具体的な例には、エチニル基、プロピニル基などが含まれる。本明細書において、 C_2-C_{60} アルキニレン基は、 C_2-C_{60} アルキニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0176】

本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルキル基は、 C_3-C_{10} 一価飽和炭化水素単環基を意味し、その具体例は、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基などを含む。本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルキレン基は、 C_3-C_{10} シクロアルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0177】

本明細書において、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基は、N、O、P、Si、及びSのうちから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含む C_1-C_{10} 一価単環基を意味し、その具体例は、テトラヒドロフラニル基、テトラヒドロチオフェニル基などを含む。本明細書において、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基は、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0178】

本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基は、 C_3-C_{10} 一価単環基として、環内に少なくとも1つの炭素・炭素二重結合を有するが、芳香族性（aromaticity）を有さない基を意味し、その具体例は、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基などを含む。本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルケニレン基は、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0179】

本明細書において、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基は、N、O、P、Si、及びSのうちから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含む C_1-C_{10} 一価単環基として、環内に少なくとも1つの二重結合を有する。 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基の具体例は、2,3-ジヒドロフラニル基、2,3-ジヒドロチオフェニル基などを含む。本明細書において、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基は、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0180】

本明細書において、 C_6-C_{60} アリール基は、 C_6-C_{60} 炭素環式芳香族系を有する一価基を意味し、 C_6-C_{60} アリーレン基は、 C_6-C_{60} 炭素環式芳香族系を有する二価基を意味する。 C_6-C_{60} アリール基の具体例は、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、ピレニル基、クリセニル基などを含む。 C_6-C_{60} アリール基及び C_6-C_{60} アリーレン基が2以上の環を含む場合、2以上の環は、それぞれ融合される。

【0181】

本明細書において、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基は、N、O、P、Si、及びSのうちから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、 C_1-C_{60} ヘテロ芳香族系を有する一価基を意味し、 C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基は、N、O、P、及びSのうちから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、C

10

20

30

40

50

C_1-C_{60} ヘテロ芳香族系を有する二価基を意味する。 C_1-C_{60} ヘテロアリール基の具体例は、ピリジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基などを含む。 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、及び C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基が 2 以上の環を含む場合、2 以上の環はそれぞれ融合される。

【0182】

本明細書において、 C_6-C_{60} アリールオキシ基は、 $-OA_{102}$ （ここで、 A_{102} は、 C_6-C_{60} アリール基である）を示し、 C_6-C_{60} アリールチオ基は、 $-SA_{103}$ （ここで、 A_{103} は、 C_6-C_{60} アリール基である）を示す。

【0183】

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

【0184】

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

【0185】

本明細書において、 C_3-C_{60} 炭素環式基（又は、 C_5-C_{30} 炭素環式基）は、環形成原子として、3～60 個の炭素のみ（又は、5～30 個の炭素のみ）を有する飽和又は不飽和の環式基を示す。 C_3-C_{60} 炭素環式基（又は、 C_5-C_{30} 炭素環式基）は、単環基又は多環基である。

【0186】

本明細書において、 C_1-C_{60} ヘテロ環式基（又は、 C_1-C_{30} ヘテロ環式基）は、環形成原子として、1～60 個の炭素（又は、1～30 個の炭素）以外に、N、O、P、Si、及び S のうちから選択されるヘテロ原子を少なくとも一つ有する飽和又は不飽和の環式基を示す。 C_1-C_{60} ヘテロ環式基（又は、 C_1-C_{30} ヘテロ環式基）は、単環基又は多環基である。

【0187】

置換された C_3-C_{60} 炭素環式基（又は、 C_5-C_{30} 炭素環式基）、置換された C_1-C_{60} ヘテロ環式基（又は、 C_1-C_{30} ヘテロ環式基）、置換された C_1-C_{60} アルキル基、置換された C_2-C_{60} アルケニル基、置換された C_2-C_{60} アルキニル基、置換された C_1-C_{60} アルコキシ基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換された C_6-C_{60} アリール基、置換された C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換された C_6-C_{60} アリールチオ基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基のうちの少なくとも一つは、

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、 $-CFH_2$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、 $-CFH_2$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ

10

20

30

40

50

基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-Si(Q_{13})(Q_{14})(Q_{15})$ 、 $-B(Q_{16})(Q_{17})$ 、及び $-P(=O)(Q_{18})(Q_{19})$ のうちから選択される少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CF_2H$ 、 $-CFH_2$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-Si(Q_{23})(Q_{24})(Q_{25})$ 、 $-B(Q_{26})(Q_{27})$ 、及び $-P(=O)(Q_{28})(Q_{29})$ のうちから選択される少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

$-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-Si(Q_{33})(Q_{34})(Q_{35})$ 、 $-B(Q_{36})(Q_{37})$ 、及び $-P(=O)(Q_{38})(Q_{39})$ ；のうちから選択され、

Q_1 ないし Q_9 、 Q_{11} ないし Q_{19} 、 Q_{21} ないし Q_{29} 、及び Q_{31} ないし Q_{39} は、それぞれ独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、アミジノ基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、カルボン酸基又はその塩、スルホン酸基又はその塩、リン酸基又はその塩、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} アルキル基、及び C_6-C_{60} アリール基のうちの少なくとも一つで置換された、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択される。

【0188】

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

【0189】

〔実施例〕

【0190】

<合成例1：化合物1の合成>

10

20

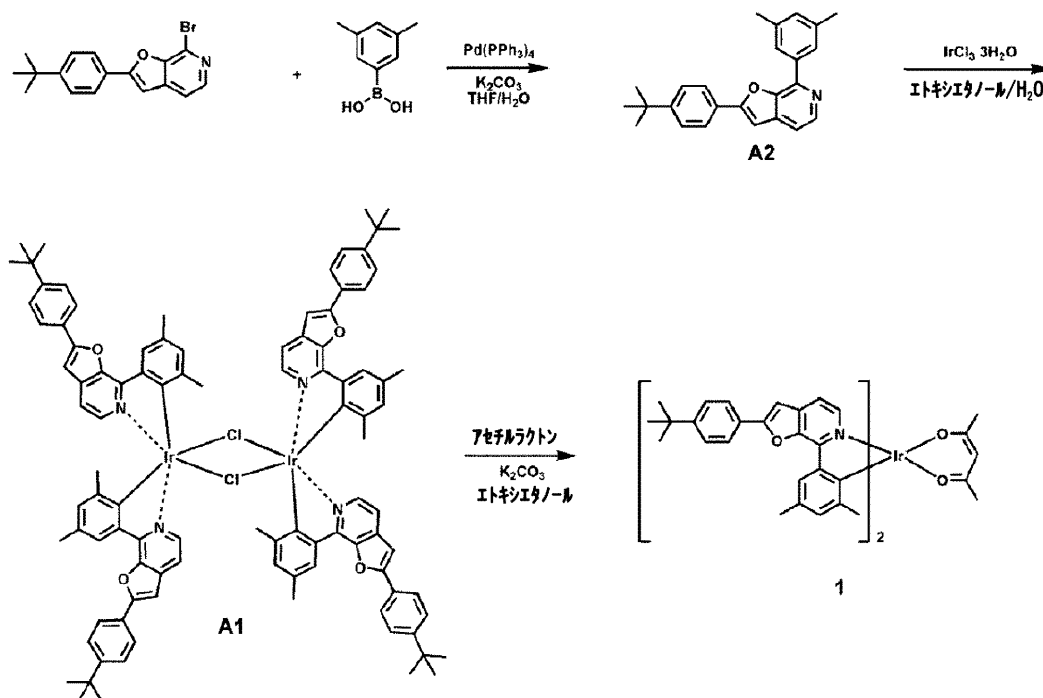
30

40

50

【0191】

【化c1】



10

20

【0192】

<中間体A2の合成>

【0193】

7-ブロモ-2-(4-(tert-ブチル)フェニル)フロ[2,3-c]ピリジン (2.32 g、7.03 mmol)、3,5-ジメチルフェニルボロン酸 (1.16 g、7.74 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.46 g、0.49 mmol)、K₂CO₃ (1.46 g、10.6 mmol) に、30 mL のテトラヒドロフランと15 mL の蒸溜水とを混合した後、75℃で5時間攪拌した後、室温まで冷却させた。そこから、酢酸エチルを使用して有機層を抽出し、無水硫酸マグネシウム (MgSO₄) を添加して水分を除去した後で濾過して得られた濾過液を減圧して得られた残留物を、酢酸エチル：ヘキサン=1：5条件で、カラムクロマトグラフィ法を介して精製し、中間体A2 1.92 g (77%) を得た。得られた化合物は、LCMS (liquid chromatography-mass spectrometry) 及び¹H NMR (nuclear magnetic resonance) で確認した。

30

¹H-NMR (CDCl₃) δ 8.40 (d, 1H)、8.09 (s, 2H)、7.80 (d, 1H)、7.72 (m, 2H)、7.30 (m, 3H)、6.61 (s, 1H)、2.30 (s, 6H)、1.29 (s, 9H)

MS: m/z 356.25 [(M+1)⁺]

【0194】

<中間体A1の合成>

【0195】

中間体A2 (1.92 g、5.41 mmol) と塩化イリジウム水和物 (0.94 g、2.67 mmol) とに、21 mL のエトキシエタノールと7 mL の蒸溜水とを混合した後、120℃で12時間攪拌した後、室温まで冷却させた。形成された沈殿物を減圧フィルタし、メタノール100 mL とヘキサン100 mL とで順に洗浄して乾燥させた後、中間体A1 1.89 g (76%) を得た。得られた化合物は、更なる精製なしに、次の反応で使用了。

40

【0196】

<化合物1の合成>

50

【0197】

中間体A1 (1.89 g、1.01 mmol)、アセチルアセトン (0.52 g、5.05 mmol)、そして K_2CO_3 (0.70 g、5.05 mmol) に2.0 mLの2-エトキシエタノールを入れた後、常温で12時間撹拌させた。そこから、酢酸エチルを使用して有機層を抽出し、無水硫酸マグネシウム ($MgSO_4$) を添加して水分を除去した後で濾過して得られた濾過液を減圧して得られた残留物を、酢酸エチル：ヘキサン=1：5条件で、カラムクロマトグラフィ法を介して精製し、化合物1 0.26 g (26%) を得た。得られた化合物は、LCMS及び ^1H -NMRで確認した。

^1H -NMR (CDCl₃) δ 8.43 (d, 2H)、8.11 (s, 2H)、7.82 (d, 2H)、7.75 (m, 4H)、7.33 (m, 6H)、6.61 (s, 2H)、2.31 (s, 12H)、1.30 (s, 18H)

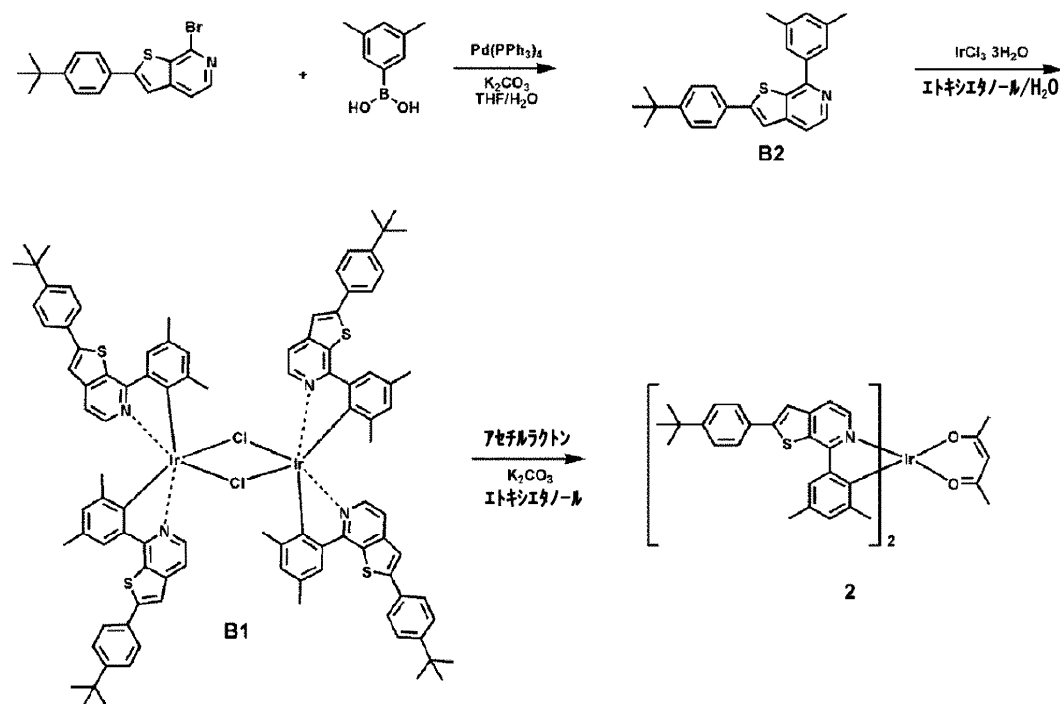
MS: m/z 1001.31 [(M+1)⁺]

【0198】

<合成例2：化合物2の合成>

【0199】

【化c2】



【0200】

<中間体B2の合成>

【0201】

7-ブロモ-2-(4-(tert-ブチル)フェニル)シアノ[2,3-c]ピリジン (2.33 g、6.73 mmol)、3,5-ジメチルフェニル硼酸 (1.11 g、7.40 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (0.44 g、0.47 mmol)、 K_2CO_3 (1.40 g、10.1 mmol) に、30 mLのテトラヒドロフランと15 mLの蒸留水とを混合した後、75℃で5時間撹拌した後、室温まで冷却させた。そこから、酢酸エチルを使用して有機層を抽出し、無水硫酸マグネシウム ($MgSO_4$) を添加して水分を除去した後で濾過して得られた濾過液を減圧して得られた残留物を、酢酸エチル：ヘキサン=1：5条件で、カラムクロマトグラフィ法を介して精製し、中間体B2 1.88 g (75%) を得た。得られた化合物は、LCMS及び ^1H -NMRで確認した。

^1H -NMR (CDCl₃) δ 8.33 (d, 1H)、8.02 (s, 2H)、7.77 (d, 1H)、7.65 (m, 2H)、7.28 (m, 3H)、6.33 (s, 1H)、2.33 (s, 6H)、1.30 (s, 9H)

MS : m/z 372.24 [(M+1)+]

【0202】

<中間体B1の合成>

【0203】

中間体B2 (1.88 g、5.06 mmol) と塩化イリジウム水和物 (0.88 g、2.50 mmol) とに、21 mL のエトキシエタノールと7 mL の蒸留水とを混合した後、120℃で12時間攪拌した後、室温まで冷却させた。形成された沈殿物を減圧フィルタし、メタノール100 mL とヘキサン100 mL とで順に洗浄して乾燥させた後、中間体B1 1.74 g (72%) を得た。得られた化合物は、更なる精製なしに、次の反応で使用した。

【0204】

<化合物2の合成>

【0205】

中間体B1 (1.74 g、0.90 mmol)、アセチルアセトン (0.46 g、4.49 mmol)、そしてK₂CO₃ (0.62 g、4.49 mmol) に、20 mL の2-エトキシエタノールを入れた後、常温で12時間攪拌させた。そこから、酢酸エチルを使用して有機層を抽出し、無水硫酸マグネシウム (MgSO₄) を添加して水分を除去した後で濾過して得られた濾過液を減圧して得られた残留物を、酢酸エチル：ヘキサン=1：5条件で、カラムクロマトグラフィ法を介して精製し、化合物2 0.34 g (37%) を得た。得られた化合物は、LCMS及び¹H NMRで確認した。

¹H-NMR (CDCl₃) δ 8.36 (d, 2H)、8.06 (s, 2H)、7.81 (d, 2H)、7.70 (m, 4H)、7.31 (m, 6H)、6.34 (s, 2H)、2.34 (s, 12H)、1.31 (s, 18H)

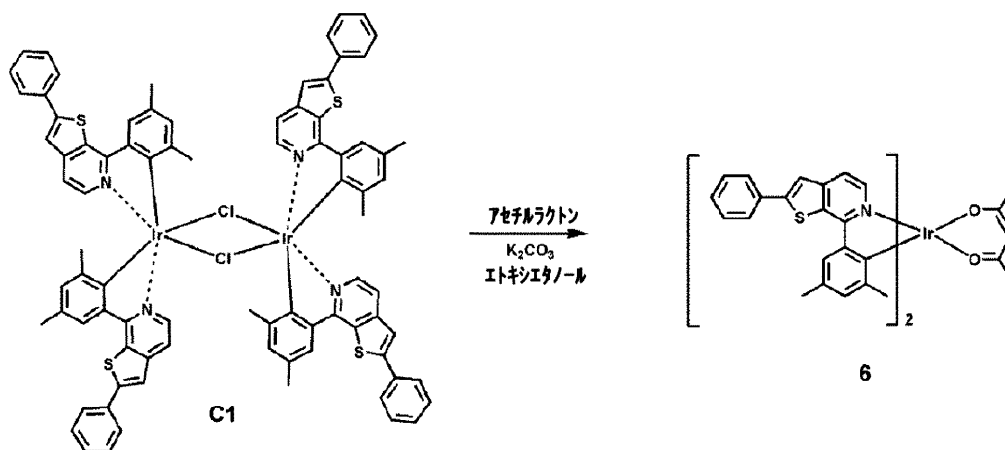
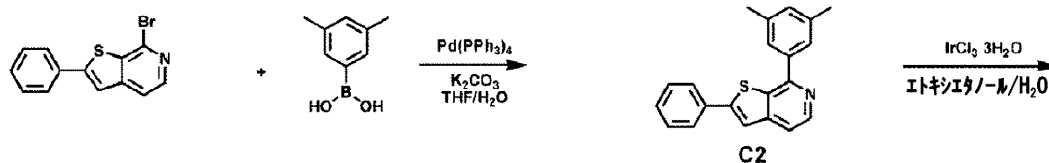
MS : m/z 1033.37 [(M+1)+]

【0206】

<合成例3：化合物6の合成>

【0207】

【化c6】



【0208】

中間体C2の合成時、7-ブロモ-2-(4-(tert-ブチル)フェニル)シアノ[2,3-c]ピリジンの代わりに、7-ブロモ-2-フェニルシアノ[2,3-c]ピ

10

20

30

40

50

リジンを使用したという点を除いては、上記合成例 2 と同一方法を利用して、化合物 6 を合成した。

【0209】

＜評価例 1：放射減衰率 (radiative decay rate) 評価＞

【0210】

CBP と化合物 1 とを、9：1 の重量比で、 10^{-7} torr の真空度で共蒸着し、40 nm 厚のフィルムを作製した。

【0211】

フィルムに対して、PicoQuant 社の TRPL 測定計である FluoTime 300 と、PicoQuant 社の励起光源 (pumping source) である PLS 340 (励起波長 = 340 nm、スペクトル幅 (spectral width) = 20 nm) を利用し、PL スペクトルを常温で評価した後、スペクトルの主ピークの波長を決定し、PLS 340 がフィルムに加える光子パルス (photon pulse) (パルス幅 (pulse width) = 500 ps) により、フィルムから、主ピークの波長で放出される光子 (photon) の個数を、TCSPS (time-correlated single photon counting) を基に、経時的に測定することを反復し、近似 (fitting) が十分に可能な TRPL カーブを求めた。そこから得られた結果に、1 以上の指数関数減衰関数 (exponential decay function) を近似させ、フィルムの T_{decay} (Ex)、即ち減衰時間 (decay time) を求めた後、その逆数である放射減衰率を計算し、その結果を表 2 に記載した。近似に使用される関数は、下記数式 10 の通りである、近似に使用された各指数関数減衰関数から得られた T_{decay} のうちの最大値を T_{decay} (Ex) として取得した。このとき、TRPL カーブを求めるための測定時間と同一測定時間の間、同一測定を暗闇 (dark) 状態 (所定のフィルムに入射するポンピング信号 (pumping signal) を遮断した状態) で更に 1 回反復し、ベースライン (baseline) 或いはバックグラウンド信号 (background signal) カーブを得て、近似にベースラインとして使用した。

【0212】

【数 10】

$$f(t) = \sum_{i=1}^n A_i \exp(-t/T_{decay, i})$$

【0213】

放射減衰率測定を、下記化合物 1、2、及び 6、並びに化合物 A～D に対してそれぞれ反復し、その結果を表 3 に記載した。

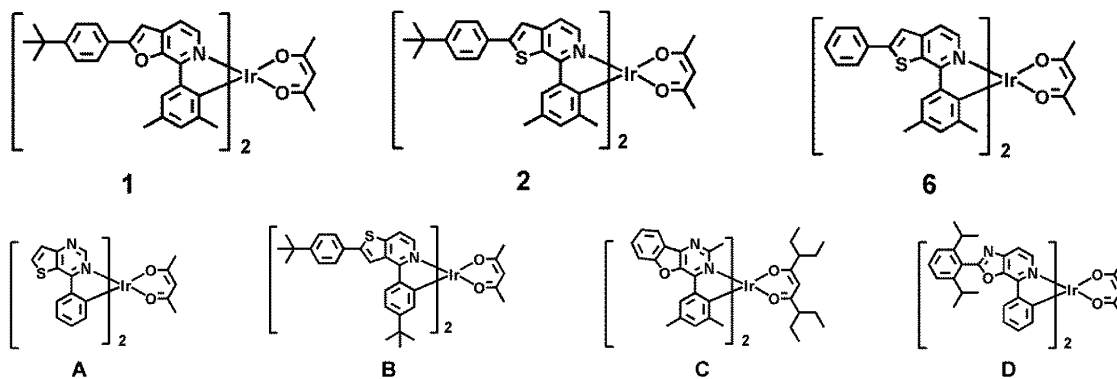
【0214】

【表 3】

化合物No.	放射減衰率(s^{-1}) (radiative decay rate)
1	1.53×10^6
2	1.31×10^6
6	1.25×10^6
A	6.94×10^5
B	4.62×10^5
C	2.67×10^5
D	3.79×10^5

【0215】

【化 1 - D】



10

【0216】

表 3 から、上記化合物 1、2、及び 6 は、化合物 A ~ D に比べて、高い放射減衰率を有するということが確認される。

【0217】

<実施例 1>

【0218】

アノードとして、ITO / Ag / ITO が 70 / 1, 000 / 70 Å 厚に蒸着されたガラス基板を 50 mm × 50 mm × 0.5 mm サイズに切り、イソプロピルアルコールと純水とを使用してそれぞれ 5 分間超音波洗浄した後、30 分間紫外線を照射してオゾンに露出させて洗浄し、真空蒸着装置に設けた。

20

【0219】

アノード上に 2-TNATA を真空蒸着して 600 Å 厚の正孔注入層を形成し、正孔注入層上に 4,4'-ビス [N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ] ビフェニル (以下、NPB) を真空蒸着して 1,350 Å 厚の正孔輸送層を形成した。

【0220】

次に、正孔輸送層上に CBP (ホスト) 及び化合物 1 (ドーパント) を 98 : 2 の重量比で共蒸着して 400 Å 厚の発光層を形成した。

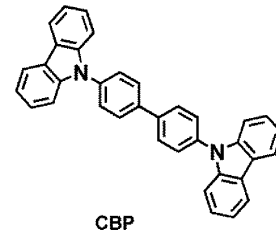
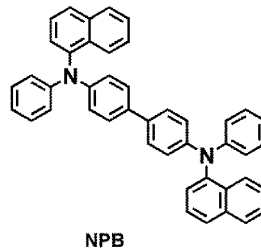
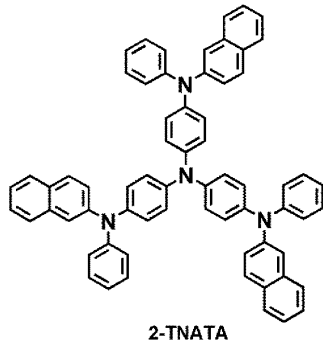
【0221】

その後、発光層上に BCP を真空蒸着して 50 Å 厚の正孔阻止層を形成した後、正孔阻止層上に Alq3 を真空蒸着して 350 Å 厚の電子輸送層を形成した後、電子輸送層上に LiF を真空蒸着して 10 Å 厚の電子注入層を形成し、電子注入層上に Mg 及び Ag を 90 : 10 の重量比で共蒸着して 120 Å 厚のカソードを形成することにより、有機発光素子 (赤色光放出) を作製した。

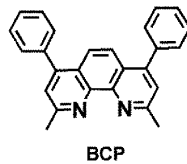
30

【0222】

【化（2-TNATA）-（BCP）】



10



【0223】

<実施例2～3、及び比較例A～D>

【0224】

20

発光層の形成時、ドーパントとして、化合物1の代わりに、表4に記載された化合物をそれぞれ使用したという点を除いては、上記実施例1と同一方法を利用して有機発光素子を作製した。

【0225】

<評価例2：有機発光素子の特性評価>

【0226】

上記実施例1～3、及び比較例A～Dで製造されたそれぞれの有機発光素子に対して、駆動電圧、外部量子効率の最大値（Max EQE）、ロールオフ比（roll-off）、ELスペクトルのメインピークの半値幅、最大発光波長、及び寿命（ T_{97} ）を評価し、その結果を表4に示した。評価装置として、電流・電圧計（Keithley 2400）及び輝度計（Minolta Cs-1000A）を使用し、寿命（ T_{97} ）（3,500nit）は、初期輝度100%対比で97%輝度になるのにかかる時間を評価した。ロールオフ比は、下記数式20によって計算した。

30

【0227】

〔数20〕

$$\text{Roll-off} = \{1 - (\text{効率}(3,500\text{nit}) / \text{最大発光効率})\} \times 100\%$$

【0228】

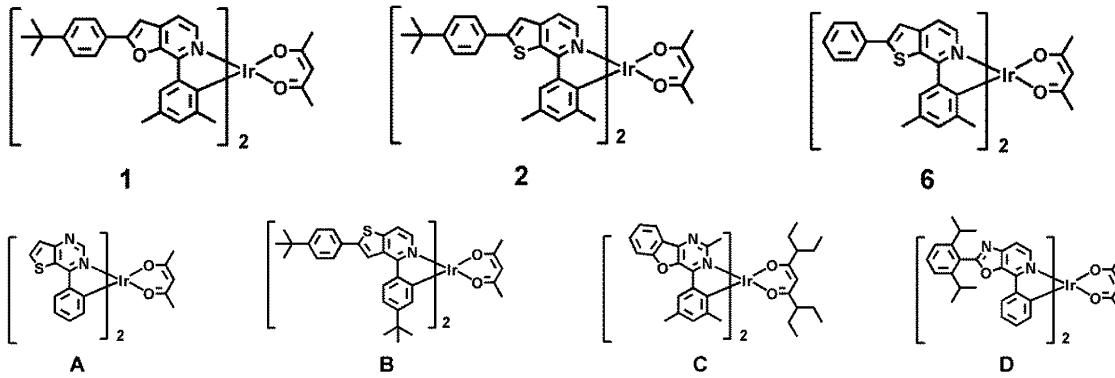
【表4】

40

	発光層中のドーパント	駆動電圧(V)	Max EQE(%)	roll-off (%)	半値幅(nm)	最大発光波長(nm)	T_{97} (hr) (3,500nit)
実施例1	化合物1	4.08	29.7	3.0	65	596	300
実施例2	化合物2	4.10	28.4	3.0	66	580	180
実施例3	化合物6	4.21	28.0	8.0	72	601	100
比較例A	化合物A	4.05	18.1	25	68	606	80
比較例B	化合物B	4.32	26.0	14	76	580	60
比較例C	化合物C	5.44	15.5	31	80	622	90
比較例D	化合物D	5.20	17.9	28	82	565	25

【0229】

【化 1 - D】



10

【 0 2 3 0 】

上記表 4 から、実施例 1 ～ 3 の有機発光素子は、赤色光を放出しながら、比較例 A ～ D の有機発光素子に比べて、向上した駆動電圧、外部量子効率、ロールオフ比、及び寿命の特性を有するということが確認される。

【 0 2 3 1 】

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

20

【産業上の利用可能性】

【 0 2 3 2 】

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

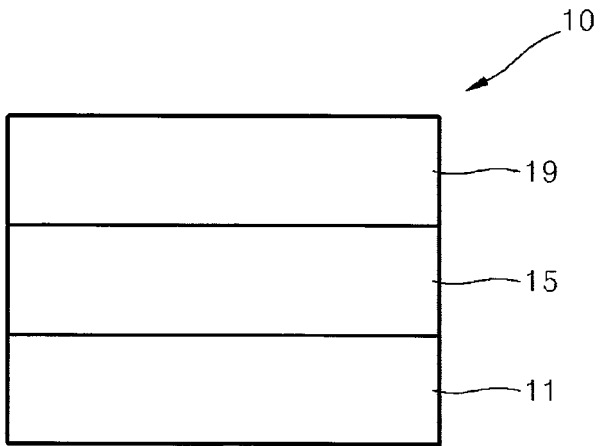
【符号の説明】

【 0 2 3 3 】

- 1 0 有機発光素子
- 1 1 第 1 電極
- 1 5 有機層
- 1 9 第 2 電極

30

【図 1】



フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I		テーマコード (参考)
C 0 7 D 495/04 (2006.01)		C 0 7 D 495/04	1 0 5 A	4 H 0 0 6
C 0 7 D 519/00 (2006.01)		C 0 7 D 519/00		4 H 0 5 0
G 0 1 N 33/58 (2006.01)		C 0 7 D 495/04	1 0 5 Z	
		G 0 1 N 33/58	Z	

(72)発明者 郭 允 鉉
大韓民国 京畿道 水原市 霊通区 三星路 1 3 0 三星綜合技術院内

(72)発明者 具 賢
大韓民国 京畿道 水原市 霊通区 三星路 1 3 0 三星綜合技術院内

(72)発明者 金 成 俊
大韓民国 京畿道 水原市 霊通区 三星路 1 3 0 三星綜合技術院内

(72)発明者 荒谷 介和
大韓民国 京畿道 水原市 霊通区 三星路 1 3 0 三星綜合技術院内

(72)発明者 李 錦 喜
大韓民国 京畿道 水原市 霊通区 三星路 1 3 0 三星綜合技術院内

(72)発明者 李 善 英
大韓民国 京畿道 水原市 霊通区 三星路 1 3 0 三星綜合技術院内

(72)発明者 黄 圭 榮
大韓民国 京畿道 水原市 霊通区 三星路 1 3 0 三星綜合技術院内

F ターム(参考) 2G045 AA25 FB13

3K107 AA01 CC04 CC12 CC21 DD53 DD59 DD68 DD69
4C050 AA01 BB07 BB08 CC16 EE01 FF05 GG01 HH01 HH02 HH03
4C071 AA01 BB01 CC01 CC02 CC21 DD13 EE13 FF05 FF06 GG01
JJ01 JJ05 JJ06 KK11 KK21 LL05 LL10
4C072 MM08
4H006 AA01 AB91
4H050 AA01 AA03 AB91 WB11 WB13 WB14