

【公報種別】 特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】 第 3 部門第 3 区分

【発行日】 平成 18 年 10 月 5 日 (2006.10.5)

【公表番号】 特表 2006-513278 (P2006-513278A)

【公表日】 平成 18 年 4 月 20 日 (2006.4.20)

【年通号数】 公開・登録公報 2006-016

【出願番号】 特願 2004-529129 (P2004-529129)

【国際特許分類】

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

C 0 7 D 213/26 (2006.01)

C 0 7 F 15/00 (2006.01)

【F I】

C 0 9 K 11/06 6 6 0

H 0 5 B 33/14 B

C 0 7 D 213/26

C 0 7 F 15/00 E

【手続補正書】

【提出日】 平成 18 年 8 月 18 日 (2006.8.18)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】 特許請求の範囲

【補正対象項目名】 全文

【補正方法】 変更

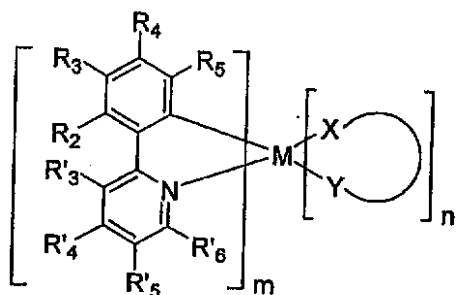
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

以下の構造：

【化 1】



(式中、Mは40以上の原子量を有する重金属であり；

R₃は約-0.17未満、約-0.15～0.05、又は約0.07より大きなハメット値を有する置換基であり；

R₂～R₅及びR'₃～R'₆のそれぞれは、H、ハロゲン、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、PO₃R、C≡CR、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール；ハロゲン、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、又はPO₃Rで置換されたアリール又はヘテロアリール基；OR、SR、NR₂（環式アミノを含む）、PR₂（環式ホスフィノを含む）からなる群から独立して選択され、ここでRは水素、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基であり；

mは1～4の整数であり、且つnは1～3の整数であり；さらに、

【化2】



がモノアニオン性非炭素配位性配位子である。))

で表される発光材料。

【請求項2】

R₄がHである、請求項1に記載の発光材料。

【請求項3】

R₃及びR₅の少なくとも1つが電子求引性基である、請求項1に記載の発光材料。

【請求項4】

R₃及びR₅が共に電子求引性基である、請求項1に記載の発光材料。

【請求項5】

R₃が電子求引性基である、請求項1に記載の発光材料。

【請求項6】

R₂及びR₄の少なくとも1つが電子求引性基である、請求項1に記載の発光材料。

【請求項7】

R₂及びR₄の少なくとも1つが電子求引性基である請求項4に記載の発光材料。

【請求項8】

前記電子求引性基が、ハロゲン、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、PO₃R、C≡CR；ハロゲン、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、又はPO₃Rで置換されたアリール又はヘテロアリール基、から選択され、ここでRは水素、アルキル、アリール、又はヘテロアリール基である、請求項1に記載の発光材料。

【請求項9】

R₃及びR₅の少なくとも1つが電子供与性基である、請求項1に記載の発光材料。

【請求項10】

R₃及びR₅が共に電子供与性基である、請求項1に記載の発光材料。

【請求項11】

R₃が電子供与性基である、請求項1に記載の発光材料。

【請求項12】

前記電子供与性基が、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール、OR、SR、NR₂（環式アミノを含む）、PR₂（環式ホスフィノを含む）から選択され、ここでRは水素、アルキル、アリール、又はヘテロアリール基である、請求項1に記載の発光材料。

【請求項13】

前記金属が、Ir、Pt、Pd、Rh、Re、Os、Tl、Pb、Bi、In、Sn、Sb、Te、Au、及びAgから選択される、請求項1に記載の発光材料。

【請求項14】

前記金属がイリジウムである、請求項1に記載の発光材料。

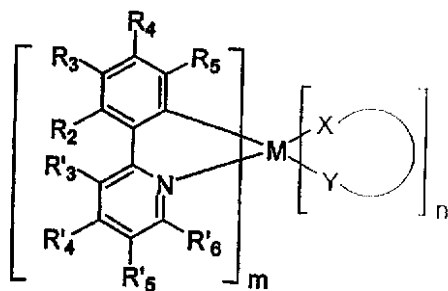
【請求項15】

前記金属が白金である、請求項1に記載の発光材料。

【請求項16】

以下の構造：

【化 3】



(式中、Mは40以上の原子量を有する重金属であり；

R_3 は約-0.17未満、約-0.15～0.05、又は約0.07よりも大きなハメット値を有する置換基であり；

$R_2 \sim R_5$ 及び $R'_3 \sim R'_6$ のそれぞれは、H、ハロゲン、CN、 CF_3 、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、 $PO_3 R$ 、 $C \equiv CR$ 、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール；ハロゲン、CN、 CF_3 、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、又は $PO_3 R$ で置換されたアリール又はヘテロアリール基；OR、SR、 NR_2 （環式アミノを含む）、 PR_2 （環式ホスフィノを含む）からなる群から独立して選択され、ここでRは水素、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基であり；

mは1～4の整数であり、且つnは1～3の整数であり；

【化 4】



は、炭素で配位していないモノアニオン性非炭素配位性配位子であり；さらに、ここで R'_4 は電子求引性基又は電子供与性基であるが、 R_3 及び R_5 のいずれも電子求引性基でない場合は R'_4 は電子求引性基であり、 R_3 及び R_5 のいずれも電子供与性基でない場合は R'_4 は電子供与性基である。）

で表される組成物。

【請求項 17】

R_3 及び R_5 のいずれも電子供与性基でなく、且つ R'_4 が電子供与性基である、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 18】

R_3 及び R_5 のいずれも電子求引性基でなく、且つ R'_4 が電子求引性基である、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 19】

R_3 及び R_5 の少なくとも1つが電子求引性基であり、且つ R'_4 が電子供与性基である、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 20】

R_3 及び R_5 の少なくとも1つが電子供与性基であり、且つ R'_4 が電子求引性基である、請求項 16 に記載の組成物。

【請求項 21】

前記電子求引性基が、ハロゲン、CN、 CF_3 、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、 $PO_3 R$ 、又は $C \equiv CR$ ；ハロゲン、CN、 CF_3 、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、又は $PO_3 R$ で置換されたアリール又はヘテロアリール基、から選択され、

ここでRは水素、アルキル、アリール、又はヘテロアリール基である、請求項16に記載の組成物。

【請求項22】

前記電子供与性基が、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール、OR、SR、NR₂（環式アミノを含む）、PR₂（環式ホスフィノを含む）、から選択され、ここでRは水素、アルキル、アリール、又はヘテロアリール基である、請求項16に記載の組成物。

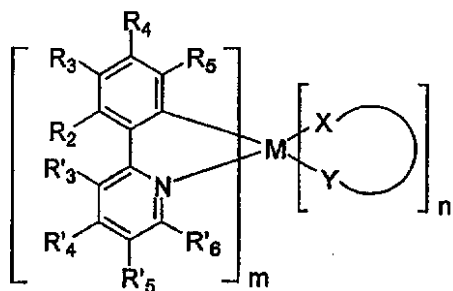
【請求項23】

前記金属が、Ir、Pt、Pd、Rh、Re、Os、Tl、Pb、Bi、In、Sn、Sb、Te、Au、及びAgから選択される、請求項16に記載の組成物。

【請求項24】

以下の構造：

【化5】



（式中、Mは40以上の原子量を有する重金属であり；

R₃は、約-0.17未満、約-0.15～-0.05、又は約0.07よりも大きなハメット値を有する置換基であり；

R₂～R₅及びR'₃～R'₆のそれぞれは、H、ハロゲン、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、PO₃R、C≡CR、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール；ハロゲン、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、又はPO₃Rで置換されたアリール又はヘテロアリール基；OR、SR、NR₂（環式アミノを含む）、PR₂（環式ホスフィノを含む）からなる群から独立して選択され、ここでRは水素、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基であり；

R₃及びR₅の少なくとも1つが、CN、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、PO₃R、C≡CR；ハロゲン、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、又はPO₃Rで置換されたアリール又はヘテロアリール基からなる群から独立して選択され、ここでRは水素、アルキル、アリール、又はヘテロアリール基であり、さらにここでmは1～4の整数であり、且つnは1～3の整数であり、且つX-Yが非炭素配位性モノアニオン性配位子である。）

で表される組成物。

【請求項25】

R₃及びR₅の少なくとも1つがCNである、請求項24に記載の組成物。

【請求項26】

R₂及びR₄の少なくとも1つがFである、請求項25に記載の組成物。

【請求項27】

R'₄が電子供与性基である、請求項26に記載の組成物。

【請求項28】

R'₄がNMe₂である、請求項26に記載の組成物。

【請求項 29】

R_3 及び R_5 の少なくとも 1 つが CF_3 である、請求項 24 に記載の組成物。

【請求項 30】

R_2 及び R_4 の少なくとも 1 つが F である、請求項 29 に記載の組成物。

【請求項 31】

R'_4 が電子供与性基である、請求項 29 に記載の組成物。

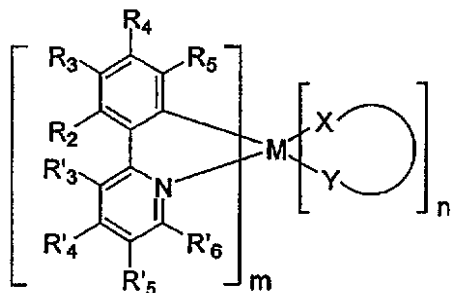
【請求項 32】

R'_4 が NMe_2 である、請求項 29 に記載の組成物。

【請求項 33】

有機層を含む発光デバイスであって、前記有機層が以下の構造：

【化 6】



(式中、Mは40以上の原子量を有する重金属であり；

R_3 は、約-0.17未満、約-0.15～-0.05、又は約0.07よりも大きなハメット値を有する置換基であり；

$R_2 \sim R_5$ 及び $R'_3 \sim R'_6$ のそれぞれは、H、ハロゲン、CN、 CF_3 、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、 $PO_3 R$ 、 $C \equiv CR$ 、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール；ハロゲン、CN、 CF_3 、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、又は $PO_3 R$ で置換されたアリール又はヘテロアリール基；OR、SR、 NR_2 （環式アミノを含む）、 PR_2 （環式ホスフィノを含む）からなる群から独立して選択され、ここでRは水素、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基であり；

R_3 及び R_5 の少なくとも 1 つが、電子求引性基又は電子供与性基であり；

mは1～4の整数であり、且つnは1～3の整数であり；さらに、

【化 7】



がモノアニオン性非炭素配位性配位子である。))

で表される組成物を含む発光デバイス。

【請求項 34】

R_3 及び R_5 の少なくとも 1 つが電子求引性基である、請求項 33 に記載の発光デバイス。

【請求項 35】

R_3 及び R_5 が共に電子求引性基である、請求項 33 に記載の発光デバイス。

【請求項 36】

R_3 が電子求引性基である、請求項 33 に記載の発光デバイス。

【請求項 37】

R_2 及び R_4 が電子求引性基である、請求項 33 に記載の発光デバイス。

【請求項 38】

R_2 及び R_4 が電子求引性基である、請求項 33 に記載の発光デバイス。

【請求項 39】

R_3 及び R_5 の少なくとも 1 つが電子供与性基である、請求項 33 に記載の発光デバイス。

【請求項 40】

R_3 及び R_5 が共に電子供与性基である、請求項 33 に記載の発光デバイス。

【請求項 41】

前記電子供与性基が、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール、OR、SR、 NR_2 （環式アミノを含む）、 PR_2 （環式ホスフィノを含む）から選択され、ここで R は水素、アルキル、アリール、又はヘテロアリール基である、請求項 33 に記載の発光デバイス。

【請求項 42】

前記金属が、Ir、Pt、Pd、Rh、Re、Os、Tl、Pb、Bi、In、Sn、Sb、Te、Au、及び Ag から選択される、請求項 33 に記載の発光デバイス。

【請求項 43】

前記金属が Pt である、請求項 33 に記載の発光デバイス。

【請求項 44】

前記金属が Ir である、請求項 33 に記載の発光デバイス。

【請求項 45】

前記有機層から放射される光が 520 nm 未満の極大波長を有する、請求項 33 に記載の発光デバイス。

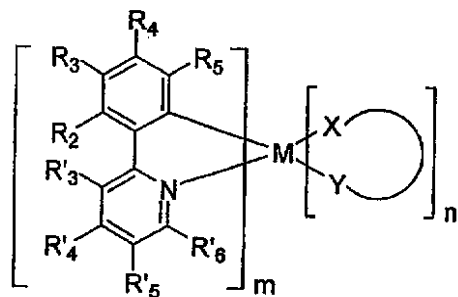
【請求項 46】

前記有機層から放射される光が約 420 nm～約 480 nm の波長を有する、請求項 33 に記載の発光デバイス。

【請求項 47】

有機層を含む発光デバイスであって、前記有機層が以下の構造：

【化 8】



（式中、M は 40 以上の原子量を有する重金属であり；

R_3 は、約 -0.17 未満、約 -0.15～-0.05、又は約 0.07 よりも大きなハメット値を有する置換基であり；

$R_2 \sim R_5$ 及び $R'_3 \sim R'_6$ のそれぞれは、H、ハロゲン、CN、 CF_3 、 C_nF_{2n+1} 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 CO_2R 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 SO_2R 、 SO_3R 、 $P(O)R$ 、 PO_2R 、 PO_3R 、 $C \equiv CR$ 、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール；ハロゲン、CN、 CF_3 、 C_nF_{2n+1} 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 CO_2R 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 SO_2R 、 SO_3R 、 $P(O)R$ 、 PO_2R 、又は PO_3R で置換されたアリール又はヘテロアリール基；OR、SR、 NR_2 （環式アミノを含む）、 PR_2 （環式ホスフィノを含む）からなる群から独立して選択され、ここで R は水素、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基であり；

R_3 及び R_5 の少なくとも 1 つが、電子求引性基又は電子供与性基であり；

m は 1～4 の整数であり、且つ n は 1～3 の整数であり；

【化 9】



はモノアニオン性非炭素配位性配位子であり；さらに、

式中、 R'_4 は電子求引性基又は電子供与性基であって、 R_3 及び R_5 のいずれも電子求引性基でない場合は R'_4 が電子求引性基であり、且つ R_3 及び R_5 のいずれも電子供与性基でない場合は R'_4 が電子供与性基である。）

で表される組成物を含む発光デバイス。

【請求項 48】

R_3 及び R_5 の少なくとも 1 つが電子求引性基であり、且つ R'_4 が電子供与性基である、請求項 47 に記載の発光デバイス。

【請求項 49】

R_3 及び R_5 が電子求引性基であり、且つ R'_4 が電子供与性基である、請求項 47 に記載の発光デバイス。

【請求項 50】

R_3 及び R_5 の少なくとも 1 つが電子供与性基であり、且つ R'_4 が電子求引性基である、請求項 47 に記載の発光デバイス。

【請求項 51】

R_3 及び R_5 が電子供与性基であり、且つ R'_4 が電子求引性基である、請求項 47 に記載の発光デバイス。

【請求項 52】

前記電子求引性基が、ハロゲン、 CN 、 CF_3 、 C_nF_{2n+1} 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 CO_2R 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 SO_2R 、 SO_3R 、 $P(O)R$ 、 PO_2R 、 PO_3R 、又は $C \equiv CR$ ；ハロゲン、 CN 、 CF_3 、 C_nF_{2n+1} 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 CO_2R 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 SO_2R 、 SO_3R 、 $P(O)R$ 、 PO_2R 、又は PO_3R で置換されたアリール又はヘテロアリール基、から選択され、ここで R は水素、アルキル、アリール、又はヘテロアリール基である、請求項 47 に記載の発光デバイス。

【請求項 53】

前記電子供与性基が、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール、 OR 、 SR 、 NR_2 （環式アミノを含む）、 PR_2 （環式ホスフィノを含む）から選択され、ここで R は水素、アルキル、アリール、又はヘテロアリール基である、請求項 47 に記載の発光デバイス。

【請求項 54】

前記金属が、 Ir 、 Pt 、 Pd 、 Rh 、 Re 、 Os 、 Tl 、 Pb 、 Bi 、 In 、 Sn 、 Sb 、 Te 、 Au 、及び Ag から選択される、請求項 47 に記載の発光デバイス。

【請求項 55】

前記金属が Pt である、請求項 47 に記載の発光デバイス。

【請求項 56】

前記金属が Ir である、請求項 47 に記載の発光デバイス。

【請求項 57】

前記有機層によって放射される光が 520 nm 未満の極大波長を有する、請求項 47 に記載の発光デバイス。

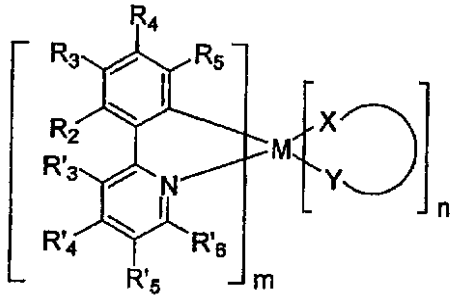
【請求項 58】

前記有機層によって放射される光が約 420 nm～約 480 nm の波長を有する、請求項 47 に記載の発光デバイス。

【請求項 59】

有機層を含む発光デバイスであって、前記有機層が以下の構造：

【化 1 0】



(式中、Mは40以上の原子量を有する重金属であり；

R_3 は、約-0.17未満、約-0.15～0.05、又は約0.07よりも大きなハメット値を有する置換基であり；

$R_2 \sim R_5$ 及び $R'_3 \sim R'_6$ のそれぞれは、H、ハロゲン、CN、 CF_3 、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、 $PO_3 R$ 、 $C \equiv CR$ 、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール；ハロゲン、CN、 CF_3 、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、又は $PO_3 R$ で置換されたアリール又はヘテロアリール基；OR、SR、 NR_2 （環式アミノを含む）、 PR_2 （環式ホスフィノを含む）からなる群から独立して選択され、ここでRは水素、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基であり；

mは1～4の整数であり、且つnは1～3の整数であり；さらに、

【化 1 1】



はモノアニオン性非炭素配位性配位子であり、

R_3 及び R_5 の少なくとも1つが、CN、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、 $PO_3 R$ 、 $C \equiv CR$ ；ハロゲン、CN、 CF_3 、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、 $PO_3 R$ で置換されたアリール又はヘテロアリール基からなる群から独立して選択され、ここでRは水素、アルキル、アリール、又はヘテロアリール基である。）

で表される組成物を含む発光デバイス。

【請求項 6 0】

R_3 及び R_5 の少なくとも1つがCNである、請求項 5 9に記載の発光デバイス。

【請求項 6 1】

R_3 及び R_5 の少なくとも1つがCNであり、且つ R_2 及び R_4 の少なくとも1つがFである、請求項 6 0に記載の発光デバイス。

【請求項 6 2】

R_3 及び R_5 の少なくとも1つが CF_3 である、請求項 6 0に記載の発光デバイス。

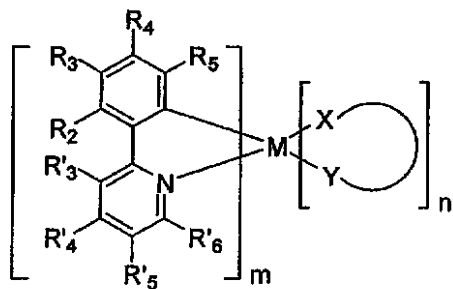
【請求項 6 3】

R_3 及び R_5 の少なくとも1つが CF_3 であり、且つ R_2 及び R_4 の少なくとも1つがFである、請求項 6 0に記載の発光デバイス。

【請求項 6 4】

以下の構造：

【化 1 2】



(式中、Mは40以上の原子量を有する重金属であり；

R_3 は、約-0.17未満、約-0.15～-0.05、又は約0.07よりも大きなハメット値を有する置換基であり；

$R_2 \sim R_5$ 及び $R'_3 \sim R'_6$ のそれぞれは、H、ハロゲン、CN、 CF_3 、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、 $PO_3 R$ 、 $C \equiv CR$ 、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール；ハロゲン、CN、 CF_3 、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、又は $PO_3 R$ で置換されたアリール又はヘテロアリール基；OR、SR、 NR_2 （環式アミノを含む）、 PR_2 （環式ホスフィノを含む）からなる群から独立して選択され、ここでRは水素、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基であり；

mは1～4の整数であり、且つnは1～3の整数であり；さらに、

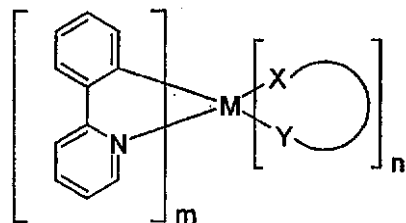
【化 1 3】



はモノアニオン性非炭素配位性配位子であり、

式中、 R_3 及び R_5 は、以下の構造：

【化 1 4】



をもつ組成物の発光スペクトルと比較した場合に、前記化合物の発光スペクトルに約40 nm以上の浅色移動を生じさせるように R_3 及び R_5 が選択される。))

で表される組成物。

【請求項 6 5】

R_3 が0.3より大きなハメット値をもつ、請求項1に記載の発光材料。

【請求項 6 6】

R_3 が0.5より大きなハメット値をもつ、請求項1に記載の発光材料。

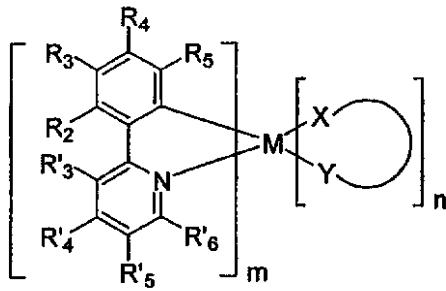
【請求項 6 7】

R_3 が0.6より大きなハメット値をもつ、請求項1に記載の発光材料。

【請求項 6 8】

以下の構造：

【化 15】



(式中、Mは40以上の原子量をもつ重金属であり；

mは少なくとも1、nは少なくとも0であり；

X-Yは補助配位子であり；

R₂ 及び R₄ が共に F であり；

R₃ は、約-0.17未満、約-0.15～0.05、又は約0.7より大きなハメット値を有する置換基であり；

R₃、R₅、及び R'₃～R'₆ のそれぞれは、H、ハロゲン、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、PO₃R、C≡CR、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール；ハロゲン、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、又はPO₃Rで置換されたアリール又はヘテロアリール基；OR、SR、NR₂（環式アミノを含む）、PR₂（環式ホスフィノを含む）からなる群から独立して選択され、ここでRは水素、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基である。）

で表される発光材料。

【請求項69】

R₃ 及び R₅ の少なくとも1つが電子求引性基である、請求項68に記載の発光材料。

【請求項70】

R₃ 及び R₅ が共に電子求引性基である、請求項68に記載の発光材料。

【請求項71】

R₃ が電子求引性基である請求項68に記載の発光材料。

【請求項72】

前記電子求引性基が、ハロゲン、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、PO₃R、C≡CR；ハロゲン、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、又はPO₃Rで置換されたアリール又はヘテロアリール基、から選択され、ここでRは水素、アルキル、アリール、又はヘテロアリール基である、請求項68に記載の発光材料。

【請求項73】

R₃ 及び R₅ の少なくとも1つが電子供与性基である、請求項68に記載の発光材料。

【請求項74】

R₃ 及び R₅ が共に電子供与性基である、請求項68に記載の発光材料。

【請求項75】

R₃ が電子供与性基である、請求項68に記載の発光材料。

【請求項76】

前記電子供与性基が、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール、OR、SR、NR₂（環式アミノを含む）、PR₂（環式ホスフィノを含む）から選択され、ここでRは水素、アルキル、アリール、又はヘテロアリール基である、請求項68に記載の発光材料。

料。

【請求項 77】

前記金属が、I r、P t、P d、R h、R e、O s、T l、P b、B i、I n、S n、S b、T e、A u、及びA gから選択される、請求項 68 に記載の発光材料。

【請求項 78】

前記金属が I r である、請求項 68 に記載の発光材料。

【請求項 79】

前記金属が白金である、請求項 68 に記載の発光材料。

【請求項 80】

R'_4 は電子求引性基又は電子供与性基であって、 R_3 及び R_5 のいずれも電子求引性基でない場合は R'_4 が電子求引性基であり、且つ R_3 及び R_5 のいずれも電子供与性基でない場合は R'_4 が電子供与性基である、請求項 68 に記載の組成物。

【請求項 81】

R_3 及び R_5 のいずれも電子供与性基でなく、且つ R'_4 が電子供与性基である、請求項 80 に記載の発光材料。

【請求項 82】

R_3 及び R_5 のいずれも電子求引性基でなく、且つ R'_4 が電子求引性基である、請求項 80 に記載の発光材料。

【請求項 83】

R_3 及び R_5 の少なくとも 1 つが電子求引性基であり、且つ R'_4 が電子供与性基である、請求項 80 に記載の発光材料。

【請求項 84】

R_3 及び R_5 の少なくとも 1 つが電子供与性基であり、且つ R'_4 が電子求引性基である、請求項 80 に記載の発光材料。

【請求項 85】

前記電子求引性基が、ハロゲン、CN、 CF_3 、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、 $PO_3 R$ 、又は $C \equiv CR$ ；ハロゲン、CN、 CF_3 、 $C_n F_{2n+1}$ 、トリフルオロビニル、 NO_2 、 $CO_2 R$ 、 $C(O)R$ 、 $S(O)R$ 、 $SO_2 R$ 、 $SO_3 R$ 、 $P(O)R$ 、 $PO_2 R$ 、又は $PO_3 R$ で置換されたアリール又はヘテロアリール基から選択され、ここで R は水素、アルキル、アリール、又はヘテロアリール基である、請求項 80 に記載の発光材料。

【請求項 86】

前記電子供与性基が、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール、OR、SR、 NR_2 （環式アミノを含む）、 PR_2 （環式ホスフィノを含む）から選択され、ここで R は水素、アルキル、アリール、又はヘテロアリール基である、請求項 80 に記載の発光材料。

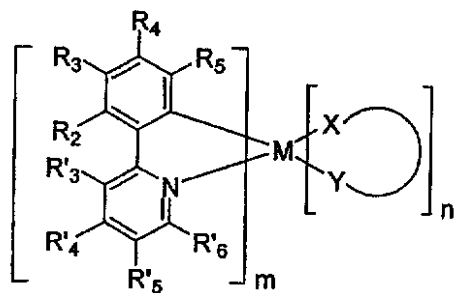
【請求項 87】

前記金属が、I r、P t、P d、R h、R e、O s、T l、P b、B i、I n、S n、S b、T e、A u、及びA gから選択される、請求項 80 に記載の発光材料。

【請求項 88】

有機層を含む発光デバイスであって、前記有機層が以下の一般構造：

【化 16】



(式中、Mは40以上の原子量を有する重金属であり；

mは少なくとも1であり、nは少なくとも0であり；

X-Yは補助配位子であり；

R₂ 及び R₄ は共に F であり；

R₃ は、約-0.17未満、約-0.15～0.05、又は約0.07よりも大きなハメット値を有する置換基であり；

R₃、R₅、及び R'₃～R'₆ のそれぞれは、H、ハロゲン、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、PO₃R、C≡CR、アルキル、アルケニル、アリール、ヘテロアリール；ハロゲン、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、NO₂、CO₂R、C(O)R、S(O)R、SO₂R、SO₃R、P(O)R、PO₂R、又は PO₃R で置換されたアリール又はヘテロアリール基；OR、SR、NR₂（環式アミノを含む）、PR₂（環式ホスフィノを含む）からなる群から独立して選択され、ここで R は水素、アルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基である。）

で表される組成物を含む、発光デバイス。

【請求項 89】

R₃ 及び R₅ の少なくとも1つが電子求引性基である、請求項 88 に記載の発光デバイス。

【請求項 90】

R'₄ は電子求引性基又は電子供与性基であって、R₃ 及び R₅ のいずれも電子求引性基でない場合は R'₄ が電子求引性基であり、且つ R₃ 及び R₅ のいずれも電子供与性基でない場合は R'₄ が電子供与性基である、請求項 88 に記載の発光デバイス。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0139

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0139】

〔比較例 A〕

2-ブロモピリジン（5.0 g、31.6 mmol）、2,4-ジフルオロフェニルボロン酸（6.0 g、37.9 mmol）、及びトリフェニルホスフィン（0.83 g、3.2 mmol）を 50 mL のジメトキシエタンに溶かした。この混合物に酢酸パラジウム（0.18 g、0.8 mmol）及び 43 mL の 2 M 炭酸カリウム溶液を加えた。この混合物を還流して 18 時間加熱した。有機層を分離し、さらに水層を 125 mL の酢酸エチルを使って 3 回抽出した。有機層を一緒にし、最初に水で洗い、続いて食塩水で洗った。有機層を硫酸マグネシウム上で乾燥し、濾過し、そして溶媒を留去してオイルが残った。粗生成物を、シリカゲル及び溶出液として酢酸エチル及びヘキサンを用いたカラムクロマトグラフィーで精製した。フラクションを集め且つ一緒にして、所望する生成物である 2-(4,6-ジフルオロフェニル)ピリジンを得て、NMR で確認した。

【手続補正 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0141

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0141】

ステップ3:

500mlのフラスコを使用し、10.8g (8.7mmol)の上記ダイマー、2.1g (17mmol)のピコリン酸、及び9.2g (87mmol)の炭酸ナトリウムを、150mlの2-エトキシエタノールに加えた。この混合物を次に還流して18時間加熱した。混合物を次に室温まで冷却し、さらに真空濾過した。集めた固体を200mLの脱イオン水に加え、さらに室温で1時間攪拌した。この混合物を次に真空濾過し、さらに100mLのエタノール及び100mLのヘキサンで洗浄した。集めた生成物を次に真空オーブン中で乾燥した。収量=11.6g、95.8%。

【手続補正4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0169

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0169】

それに代わり、以下に示す反応Kにおいては、図式XIV(ここで R_3 はシアノ基である)で表される化合物を以下の方法によって調製することができる。以下の反応Kで示される図式XVで表される化合物は、低温で適当な塩基(例えば、リチウムジイソプロピルアミド(LDA))と反応させられ、さらに二酸化炭素(CO_2)と反応(クエンチ)させられる。化合物XVIはチオニルクロライド及び水酸化アンモニウムと反応させられて、カルボキシアミドとしてXVIIを与える。化合物XVIIは次に脱水条件(すなわち、酸(H^+)下で反応させられてXVIIIを与える。図式XVIIIで表される化合物は、次に反応HにおいてXIをXVIIIに置き換えることによって光活性配位子に転換され、 R_3 がシアノ置換基で置換されているIIIを与える。