

【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2区分

【発行日】平成26年5月29日(2014.5.29)

【公表番号】特表2013-529188(P2013-529188A)

【公表日】平成25年7月18日(2013.7.18)

【年通号数】公開・登録公報2013-038

【出願番号】特願2013-504383(P2013-504383)

【国際特許分類】

C 07 F 15/00 (2006.01)

C 07 F 7/10 (2006.01)

C 07 D 233/58 (2006.01)

H 01 L 51/50 (2006.01)

【F I】

C 07 F 15/00 C S P E

C 07 F 7/10 S

C 07 D 233/58

H 05 B 33/14 B

H 05 B 33/22 D

【手続補正書】

【提出日】平成26年4月11日(2014.4.11)

【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

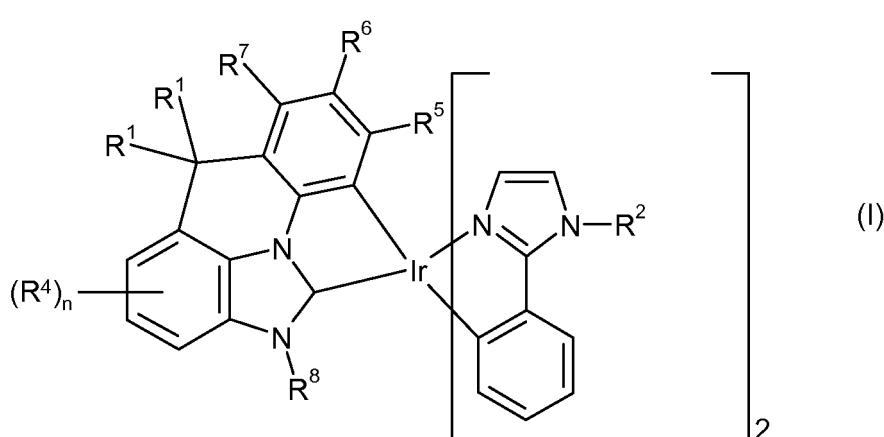
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

一般式(I)の金属カルベン錯体

【化1】



[式中、可変部分は各々、以下のとおりに定義される：

R¹は独立して、

- ・ 水素、
- ・ 直鎖または分枝鎖のアルキル基： 該アルキル基は、1～20個の炭素原子を有し、少なくとも1つのヘテロ原子によって中断されているかまたは中断されておらず、且つ、少なくとも1つの官能基を有するかまたは有さない、
- ・ シクロアルキル基： 該シクロアルキル基は、3～20個の炭素原子を有し、少な

くとも 1 つのヘテロ原子によって中断されているかまたは中断されておらず、且つ、少なくとも 1 つの官能基を有するかまたは有さない、

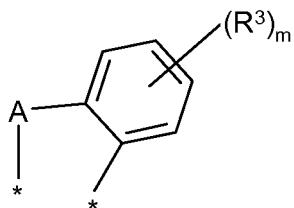
- ・ 置換または非置換のアリール基： 該アリール基は、6 ~ 30 個の炭素原子を有し、且つ少なくとも 1 つの官能基を有するかまたは有さない、

- ・ 置換または非置換のヘテロアリール基： 該ヘテロアリール基は、合計 5 ~ 18 個の炭素原子およびヘテロ原子を有し、且つ、少なくとも 1 つの官能基を有するかまたは有さない、

であるか、または、2 つの R¹ 基は、それらが結合している炭素原子と共に、置換または非置換の C₅、C₆、C₇、または C₈ 環である、

R⁵ と R⁶ とは共に、または R⁶ と R⁷ とは共に、式

【化 2】



[式中、

* は、R⁵ 基および R⁶ 基または R⁶ 基および R⁷ 基を有するベンゼン環の炭素原子への結合を示し、且つ、酸素原子は、R⁵ 基、R⁶ 基または R⁷ 基を有する炭素原子に結合される、

A は酸素または硫黄である]

の単位を形成する、

R² は、

- ・ 直鎖または分枝鎖のアルキル基： 該アルキル基は、1 ~ 20 個の炭素原子を有し、少なくとも 1 つのヘテロ原子によって中断されているかまたは中断されておらず、且つ、少なくとも 1 つの官能基を有するかまたは有さない、

- ・ シクロアルキル基： 該シクロアルキル基は、3 ~ 20 個の炭素原子を有し、少なくとも 1 つのヘテロ原子によって中断されているかまたは中断されておらず、且つ、少なくとも 1 つの官能基を有するかまたは有さない、

- ・ 置換または非置換のアリール基： 該アリール基は、6 ~ 30 個の炭素原子を有し、且つ少なくとも 1 つの官能基を有するかまたは有さない、

- ・ 置換または非置換のヘテロアリール基： 該ヘテロアリール基は、合計 5 ~ 18 個の炭素原子および / またはヘテロ原子を有し、且つ、少なくとも 1 つの官能基を有するかまたは有さない、

である、

R³、R⁴ は、各々独立して、

- ・ 直鎖または分枝鎖のアルキル基： 該アルキル基は、1 ~ 20 個の炭素原子を有し、少なくとも 1 つのヘテロ原子によって中断されているかまたは中断されておらず、且つ、少なくとも 1 つの官能基を有するかまたは有さない、

- ・ シクロアルキル基： 該シクロアルキル基は、3 ~ 20 個の炭素原子を有し、少なくとも 1 つのヘテロ原子によって中断されているかまたは中断されておらず、且つ、少なくとも 1 つの官能基を有するかまたは有さない、

- ・ 置換または非置換のアリール基： 該アリール基は、6 ~ 30 個の炭素原子を有し、且つ少なくとも 1 つの官能基を有するかまたは有さない、

- ・ 置換または非置換のヘテロアリール基： 該ヘテロアリール基は、合計 5 ~ 18 個の炭素原子および / またはヘテロ原子を有し、且つ、少なくとも 1 つの官能基を有するかまたは有さない、

である、

R⁸ は、1 ~ 4 個の炭素原子を有する直鎖または分枝鎖のアルキル基である、

m、nは各々独立して、0、1、2または3である]。

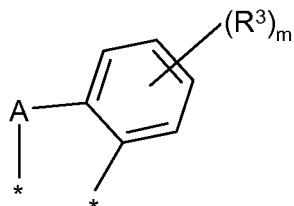
【請求項2】

式(I)における可変部分が、各々以下のとおりに定義される、請求項1に記載の金属カルベン錯体：

R¹は独立して、1～10個の炭素原子を有する直鎖または分枝鎖のアルキル基、6～30個の炭素原子を有する置換または非置換のアリール基であるか、または2つのR¹基が、それらが結合されている炭素原子と共に、置換または非置換のC₅またはC₆環を形成する、

R⁵とR⁶とは共に、またはR⁶とR⁷とは共に、式：

【化3】



[式中、

*は、R⁵基およびR⁶基、またはR⁶基およびR⁷基を有するベンゼン環の炭素原子への結合を示し、且つ、酸素原子はR⁵基、R⁶基またはR⁷基を有する炭素原子に結合される、

Aは酸素または硫黄である]

の単位を形成する、

R²は、6～30個の炭素原子を有するオルト、オルト'二置換のアリール基である、

R³およびR⁴は、各々、1～10個の炭素原子を有する直鎖または分枝鎖のアルキル基である、

R⁸は、1～4個の炭素原子を有する直鎖または分枝鎖アルキル基である、

m、nは各々独立して0、1または2である。

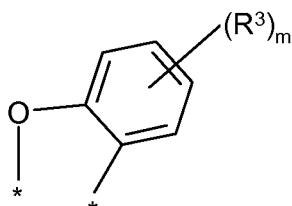
【請求項3】

式(I)における可変部分が、各々以下のとおりに定義される、請求項1に記載の金属カルベン錯体：

R¹は、独立して、1～4個の炭素原子を有する直鎖または分枝鎖のアルキル基である、

R⁶およびR⁷は共に、式

【化4】



[式中、

*は、R⁶基およびR⁷基を有するベンゼン環の炭素原子への結合を示し、且つ、酸素原子がR⁷基を有する炭素原子に結合されている]

の単位を形成する、

R²は、オルト、オルト'ジアルキル化されたフェニル基である、

R³、R⁴は、各々、1～4個の炭素原子を有する直鎖または分枝鎖のアルキル基である、

R⁸は、1～4個の炭素原子を有する直鎖または分枝鎖のアルキル基である、

m、nは各々独立して0、1または2である。

【請求項4】

請求項1から3までのいずれか1項に記載の金属カルベン錯体の少なくとも1つを含む発光層。

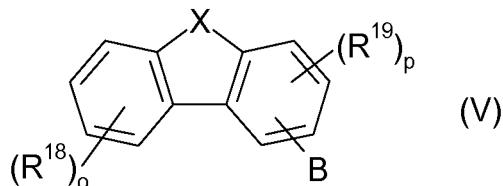
【請求項5】

請求項4に記載の発光層を含む有機発光ダイオード。

【請求項6】

請求項1から3までのいずれか1項に記載の金属カルベン錯体と、式(V)

【化5】



[式中、

Xは、N R、S、OまたはP Rである；

Rは、アリール、ヘテロアリール、アルキル、シクロアルキルまたはヘテロシクロアルキルである；

Bは、-N R²⁰ R²¹、-P(O) R²² R²³、-P R²⁴ R²⁵、-S(O)₂ R²⁶、-S(O) R²⁷、-S R²⁸、または-O R²⁹である；

R¹⁸、R¹⁹は、各々独立して、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、SiR¹⁵R¹⁶R¹⁷、B基またはドナーまたはアクセプタ作用を有する基である；

oは0、1、2、3または4である；

pは0、1、2または3である；

R²⁰、R²¹は、窒素原子と共に環式基を形成し、該環式基は3～10個の環原子を有し、且つ非置換であるかまたはアルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリールおよびドナーまたはアクセプタ作用を有する基から選択される1つまたはそれより多くの置換基によって置換されていてよく、および/または、3～10個の環原子を有する1つまたはそれより多くのさらなる環式基に縮合されていてよく、その際、縮合された基は非置換であるか、またはアルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、およびドナーまたはアクセプタ作用を有する基から選択される1つまたはそれより多くの置換基によって置換されていてよい；

R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷、R²²、R²³、R²⁴、R²⁵、R²⁶、R²⁷、R²⁸、R²⁹は、各々独立して、アリール、ヘテロアリール、アルキル、シクロアルキルまたはヘテロシクロアルキルである。

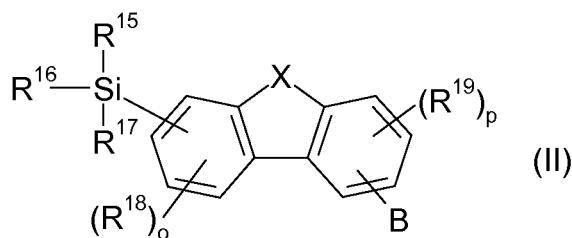
または一般式(V)の2つの単位が、直鎖または分枝鎖の、飽和または不飽和のブリッジ(少なくとも1つのヘテロ原子によって中断されているかまたは中断されていない)を介して、結合手を介して、またはOを介して結合されている]

の少なくとも1つの化合物とを含む有機発光ダイオード。

【請求項7】

請求項1から3までのいずれか1項に記載の金属カルベン錯体と、式(II)

【化6】



[式中、

X、B、R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷、R¹⁸、R¹⁹、R²⁰、R²¹、R²²、R²³、R²⁴、R²⁵、R²⁶、R²⁷、R²⁸およびR²⁹、oおよびpは、各々、以下のとおりに定義される：

Xは、N R、S、OまたはP Rであり、ここで、Rはアリール、ヘテロアリール、アルキル、シクロアルキルまたはヘテロシクロアルキルであって各々合計1～30個の炭素原子および/またはヘテロ原子を有するものである。

Bは、-NR²⁰R²¹、-P(O)R²²R²³、-PR²⁴R²⁵、-S(O)₂R²⁶、-S(O)R²⁷、-SR²⁸または-OR²⁹である、

R²²、R²³、R²⁴、R²⁵、R²⁶、R²⁷、R²⁸およびR²⁹は、各々独立して、アリール、ヘテロアリール、アルキル、シクロアルキルまたはヘテロシクロアルキルであって各々合計1～40個の炭素原子および/またはヘテロ原子を有するものである。

R¹⁵、R¹⁶、R¹⁷は、各々独立して、アリール、ヘテロアリール、アルキル、シクロアルキルまたはヘテロシクロアルキルであって各々合計1～20個の炭素原子および/またはヘテロ原子を有するものであり、ここで、R¹⁵基、R¹⁶基およびR¹⁷基の少なくとも1つは、アリールまたはヘテロアリールである。

R¹⁸、R¹⁹は、各々独立して、アルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリールであって各々合計1～20個の炭素原子および/またはヘテロ原子を有するもの、および/またはB基および/またはドナーまたはアクセプタ作用を有する基である。

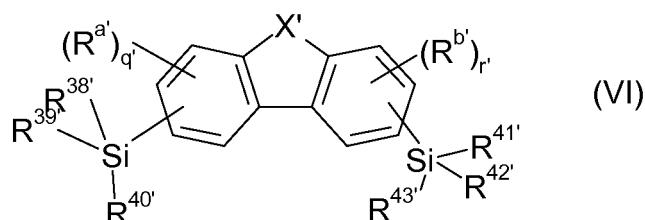
o、pは、各々独立して、0、1、2または3である、

R²⁰、R²¹は、窒素原子と共に環式基を形成し、該環式基は、3～10個の環原子を有し、且つ非置換であるか、またはアルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリールおよびドナーまたはアクセプタ作用を有する基から選択される1つまたはそれより多くの置換基によって置換されていてよく、および/または3～10個の環原子を有する1つまたはそれより多くのさらなる環式基に縮合していくよく、ここで、該縮合基は、非置換であるか、またはアルキル、シクロアルキル、ヘテロシクロアルキル、アリール、ヘテロアリール、およびドナーまたはアクセプタ作用を有する基から選択される1つまたはそれより多くの置換基によって置換されていてよい]の少なくとも1つの化合物とを含む有機発光ダイオード。

【請求項8】

請求項1から3までのいずれか1項に記載の金属カルベン錯体と、式(VI)

【化7】



[式中、

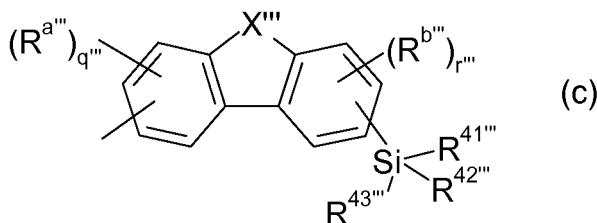
X'はN R³⁷'、S、O、PR³⁷'、SO₂またはSOである；

R³⁷'は置換または非置換のC₁～C₂₀-アルキル、置換または非置換のC₆～C₃₀-ア

リール、または置換または非置換のヘテロアリールであって5～30個の環原子を有するものである；

R^{38} 、 R^{39} 、 R^{40} 、 R^{41} 、 R^{42} 、 R^{43} は、各々独立して、置換または非置換のC₁～C₂₀-アルキル、または置換または非置換のC₆～C₃₀-アリール、または一般式(c)

【化8】



の構造である；

R^a 、 R^b は各々独立して、置換または非置換のC₁～C₂₀-アルキル、置換または非置換のC₆～C₃₀-アリール、または置換または非置換のヘテロアリールであって5～30個の環原子を有するもの、または以下からなる群から選択されるドナーまたはアクセプタ作用を有する置換基である：

C₁～C₂₀-アルコキシ、C₆～C₃₀-アリールオキシ、C₁～C₂₀-アルキルチオ、C₆～C₃₀-アリールチオ、SiR³⁴、R³⁵、R³⁶、ハロゲン基、ハロゲン化C₁～C₂₀-アルキル基、カルボニル、カルボニルチオ、カルボニルオキシ、オキシカルボニル、チオカルボニル、アミノ、OH、擬ハロゲン基、アミド、ホスホネート、ホスフェート、ホスフィン、ホスフィンオキシド、スルフェート、スルホキシド、スルホネート、スルホニル、スルホンアミド、NO₂、ボロン酸エステル、イミノ、ボラン基、スタナン基、ヒドrazin基、ヒドラゾン基、オキシム基、ニトロソ基、ジアゾ基、ビニル基、スルホキシミン、アラン、ゲルマン、ボロキシムおよびボラジン；

R^{34} 、 R^{35} 、 R^{36} は各々独立して、置換または非置換のC₁～C₂₀-アルキル、または置換または非置換のC₆～C₃₀-アリールである

q' 、 r' は各々独立して、0、1、2または3である；ここで、 q' または r' が0である場合においては、アリール基の全ての置換可能な位置は、水素によって置換されている；

ここで、式(c)の基における基および添字X'、R⁴¹、R⁴²、R⁴³、R^a、R^b、q'およびr'は、各々独立して、一般式VIの化合物の基および添字X'、R⁴¹、R⁴²、R⁴³、R^a、R^b、q'およびr'について定義されたとおりである]

の少なくとも1つの化合物とを含む、有機発光ダイオード。

【請求項9】

請求項1から3までのいずれか1項に記載の少なくとも1つの金属カルベン錯体、請求項6から8までのいずれか1項において定義された式(I I)、(V)および/または(VI)の少なくとも1つのマトリックス材料、および少なくとも1つのさらなるホール輸送マトリックス材料を含む発光層を含む、請求項6から8までのいずれか1項に記載の有機発光ダイオード。

【請求項10】

請求項4に記載の発光層または請求項5から9までのいずれか1項に記載の有機発光ダイオードを含む、定置式視覚表示装置、移動式視覚表示装置および照明手段からなる群から選択される装置。

【請求項11】

請求項1から3までのいずれか1項に記載の金属カルベン錯体を含む有機発光ダイオード。

【請求項12】

前記金属カルベン錯体を発光体、マトリックス材料、電荷輸送材料および／または電荷プロッカーとして使用する、請求項 11 に記載の有機発光ダイオード。