

【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 0 7 F 15/00 (2006.01)

C 0 7 F 7/10 (2006.01)

C 0 7 D 233/58 (2006.01)

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 F 15/00 C S P E

C 0 7 F 7/10 S

C 0 7 D 233/58

H 0 5 B 33/14 B

H 0 5 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

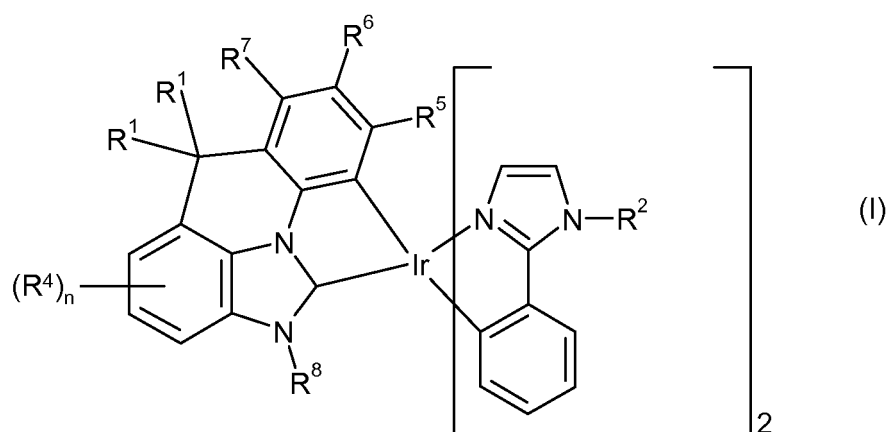
【補正の内容】

【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：

R<sup>1</sup>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、

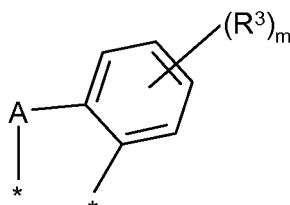
- ・ 置換または非置換のアリール基： 該アリール基は、6 ～ 30 個の炭素原子を有し、且つ少なくとも 1 つの官能基を有するかまたは有さない、

- ・ 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  $R^1$  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  $C_5$ 、 $C_6$ 、 $C_7$ 、または  $C_8$  環である、

$R^5$  と  $R^6$  とは共に、または  $R^6$  と  $R^7$  とは共に、式

【化 2】



[ 式中、

\* は、 $R^5$  基および  $R^6$  基または  $R^6$  基および  $R^7$  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、 $R^5$  基、 $R^6$  基または  $R^7$  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、

$R^2$  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、

$R^3$ 、 $R^4$  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、

$R^8$  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 ]。

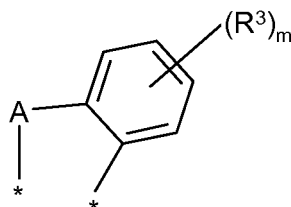
【請求項 2】

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：

$R^1$  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  $R^1$  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  $C_5$  または  $C_6$  環を形成する、

$R^5$  と  $R^6$  とは共に、または  $R^6$  と  $R^7$  とは共に、式：

【化 3】



[ 式中、

\* は、 $R^5$  基および  $R^6$  基、または  $R^6$  基および  $R^7$  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  $R^5$  基、 $R^6$  基または  $R^7$  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、

$R^2$  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、

$R^3$  および  $R^4$  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、

$R^8$  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】

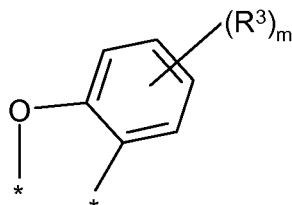
式 (I) における可変部分が、各々以下のとおりに定義される、請求項 1 に記載の金属カルベン錯体：

$R^1$  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、

、

$R^6$  および  $R^7$  は共に、式

【化 4】



[ 式中、

\* は、 $R^6$  基および  $R^7$  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  $R^7$  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、

$R^2$  は、オルト、オルト' ジアルキル化されたフェニル基である、

$R^3$ 、 $R^4$  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、

、

$R^8$  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。

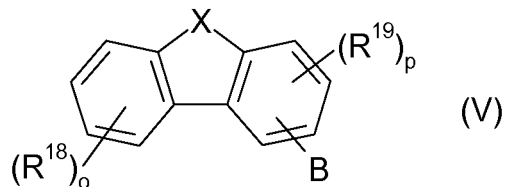
【請求項 5】

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 R<sup>20</sup> R<sup>21</sup>、- P ( O ) R<sup>22</sup> R<sup>23</sup>、- P R<sup>24</sup> R<sup>25</sup>、- S ( O )<sub>2</sub> R<sup>26</sup>、- S ( O ) R<sup>27</sup>、- S R<sup>28</sup>、または - O R<sup>29</sup>である；

R<sup>18</sup>、R<sup>19</sup> 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、Si R<sup>15</sup> R<sup>16</sup> R<sup>17</sup>、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；

R<sup>20</sup>、R<sup>21</sup> 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；

R<sup>15</sup>、R<sup>16</sup>、R<sup>17</sup>、R<sup>22</sup>、R<sup>23</sup>、R<sup>24</sup>、R<sup>25</sup>、R<sup>26</sup>、R<sup>27</sup>、R<sup>28</sup>、R<sup>29</sup> 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、

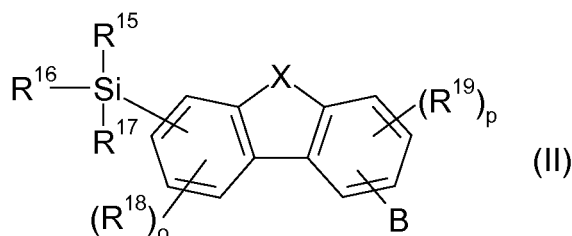
または一般式 (V) の 2 つの単位が、直鎖または分枝鎖の、飽和または不飽和のブリッジ (少なくとも 1 つのヘテロ原子によって中断されているかまたは中断されていない) を介して、結合手を介して、または O を介して結合されている ]

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、

$X$ 、 $B$ 、 $R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 、 $R^{18}$ 、 $R^{19}$ 、 $R^{20}$ 、 $R^{21}$ 、 $R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{24}$ 、 $R^{25}$ 、 $R^{26}$ 、 $R^{27}$ 、 $R^{28}$ および $R^{29}$ 、 $o$ および $p$ は、各々、以下のとおり定義される：

$X$ は、 $NR$ 、 $S$ 、 $O$ または $PR$ 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、 $-NR^{20}R^{21}$ 、 $-P(O)R^{22}R^{23}$ 、 $-PR^{24}R^{25}$ 、 $-S(O)_2R^{26}$ 、 $-S(O)R^{27}$ 、 $-SR^{28}$ または $-OR^{29}$ である、

$R^{22}$ 、 $R^{23}$ 、 $R^{24}$ 、 $R^{25}$ 、 $R^{26}$ 、 $R^{27}$ 、 $R^{28}$ および $R^{29}$ 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、

$R^{15}$ 、 $R^{16}$ 、 $R^{17}$ 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、 $R^{15}$ 基、 $R^{16}$ 基および $R^{17}$ 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、

$R^{18}$ 、 $R^{19}$ 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、

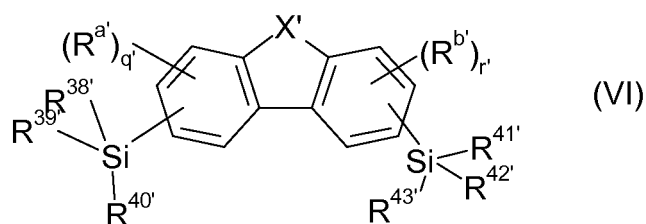
$o$ 、 $p$ は、各々独立して、0、1、2または3である、

$R^{20}$ 、 $R^{21}$ 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てよく、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、

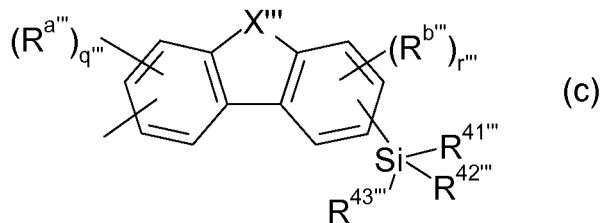
$X'$ は $NR^{37}$ 、 $S$ 、 $O$ 、 $PR^{37}$ 、 $SO_2$ または $SO$ である；

$R^{37}$ は置換または非置換の $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -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 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、または置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -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 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -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：

$C_1 \sim C_{20}$ -アルコキシ、 $C_6 \sim C_{30}$ -アリールオキシ、 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキルチオ、 $C_6 \sim C_{30}$ -アリールチオ、 $SiR^{34'}$ 、 $R^{35'}$ 、 $R^{36'}$ 、ハロゲン基、ハロゲン化 $C_1 \sim C_{20}$ -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、 $NO_2$ 、ボロン酸エステル、イミノ、ボラン基、スタナン基、ヒドラジン基、ヒドラゾン基、オキシム基、ニトロソ基、ジアゾ基、ビニル基、スルホキシイミン、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 $C_1 \sim C_{20}$ -アルキル、または置換または非置換の $C_6 \sim C_{30}$ -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 $X'$ 、 $R^{41'}$ 、 $R^{42'}$ 、 $R^{43'}$ 、 $R^{a'}$ 、 $R^{b'}$ 、 $q'$ および $r'$ は、各々独立して、一般式V Iの化合物の基および添字 $X'$ 、 $R^{41'}$ 、 $R^{42'}$ 、 $R^{43'}$ 、 $R^{a'}$ 、 $R^{b'}$ 、 $q'$ 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(II)、(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／または電荷ブ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。