

發明專利說明書

(本說明書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※ 申請案號：96150459

607 F 15/00 (2006.01)

※ 申請日期：96.12.27

※IPC 分類：(2006.01)

607 D 40/04

609 K 11/06 (2006.01)

公告本

一、發明名稱：(中文/英文)

金屬錯合物、聚合物化合物及含有該等之元件 H01L 51/50 (2006.01)

METAL COMPLEX, POLYMER COMPOUND, AND DEVICES COMPRISING THE SAME

二、申請人：(共 1 人)

姓名或名稱：(中文/英文)

住友化學股份有限公司

SUMITOMO CHEMICAL COMPANY, LIMITED

代表人：(中文/英文)(簽章) 十倉雅和 / TOKURA, MASAKAZU

住居所或營業所地址：(中文/英文)

日本國東京都中央區新川二丁目 27 番 1 號

27-1, Shinkawa 2-chome, Chuo-ku, Tokyo, JAPAN

國 籍：(中文/英文) 日本國/JAPAN

三、發明人：(共 2 人)

姓 名：(中文/英文)

1. 秋野喜彥 / AKINO, NOBUHIKO

2. 岡村玲 / OKAMURA, REI

國 籍：(中文/英文) 1. 2. 日本國/JAPAN

四、聲明事項：

☐ 主張專利法第二十二條第二項☐第一款或☐第二款規定之事實，其事實發生日期為： 年 月 日。

☒ 申請前已向下列國家（地區）申請專利：

【格式請依：受理國家（地區）、申請日、申請案號 順序註記】

☒ 有主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

1. 日本國 2006 年 12 月 27 日 特願 2006-351846 （主張優先權）

☐ 無主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

☐ 主張專利法第二十九條第一項國內優先權：

【格式請依：申請日、申請案號 順序註記】

☐ 主張專利法第三十條生物材料：

☐ 須寄存生物材料者：

國內生物材料 【格式請依：寄存機構、日期、號碼 順序註記】

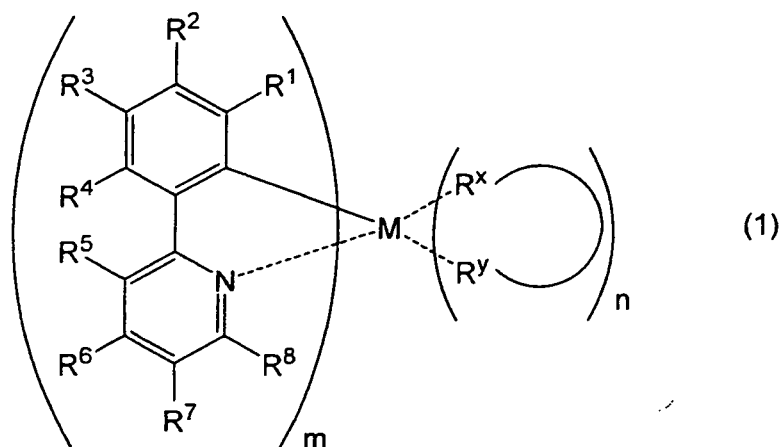
國外生物材料 【格式請依：寄存國家、機構、日期、號碼 順序註記】

☐ 不須寄存生物材料者：

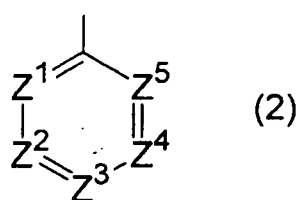
所屬技術領域中具有通常知識者易於獲得時，不須寄存。

五、中文發明摘要：

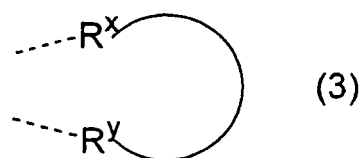
一種以下述式 (1) 所示之金屬錯合物：



(式中，M 為金屬原子； R^1 至 R^8 係表示氫原子、鹵原子或 1 價基，或者是 R^3 及 R^4 、或 R^5 及 R^6 可結合而形成環；惟， R^2 及 R^7 中之至少一者為下述式 (2) 所示之基：



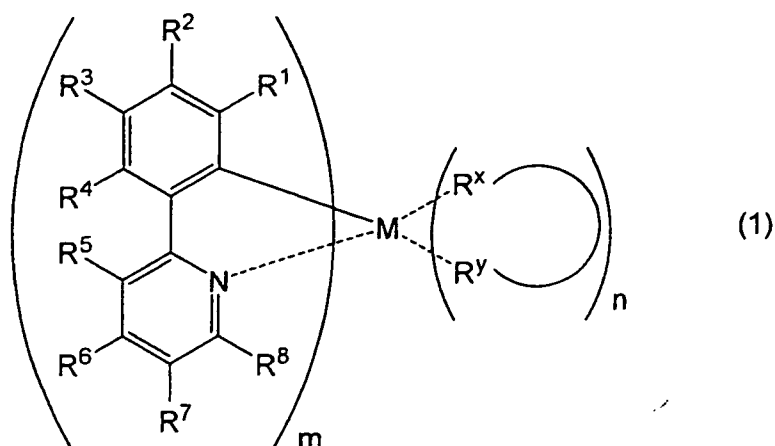
；m 為 1 至 3 之整數，n 為 0 至 2 之整數； Z^1 至 Z^5 係表示碳原子或氮原子；惟， Z^1 至 Z^5 中之至少二者為氮原子；當 Z^1 至 Z^5 中之任一者為碳原子時，結合於該碳原子上之氫原子係可經取代基所取代；下述式 (3) 所示之部分係表示單陰離子性之雙牙配位基：



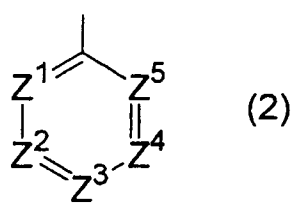
； R^x 及 R^y 係結合於金屬原子 M 上之原子，表示碳原子、氧原子或氮原子)。

六、英文發明摘要：

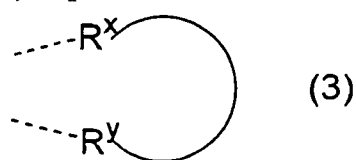
A metal complex is shown as following formula (1):



(wherein, M is metal atom; R^1 to R^8 represents hydrogen atom, halogen atom or one valent group, or R^3 and R^4 , or R^5 and R^6 are combined to form a ring; provided that at least one of R^2 and R^7 is a group shown as following formula (2):



; m is an integer of 1 to 3, n is an integer of 0 to 2; Z^1 to Z^5 represents carbon atom or nitrogen atom; provided that at least two of Z^1 to Z^5 are nitrogen atom; when any one of Z^1 to Z^5 is carbon atom, a hydrogen atom linked to the carbon atom may be substituted by a substituent; the part shown as following formula (3) represents a monoanionic bidentate ligand:



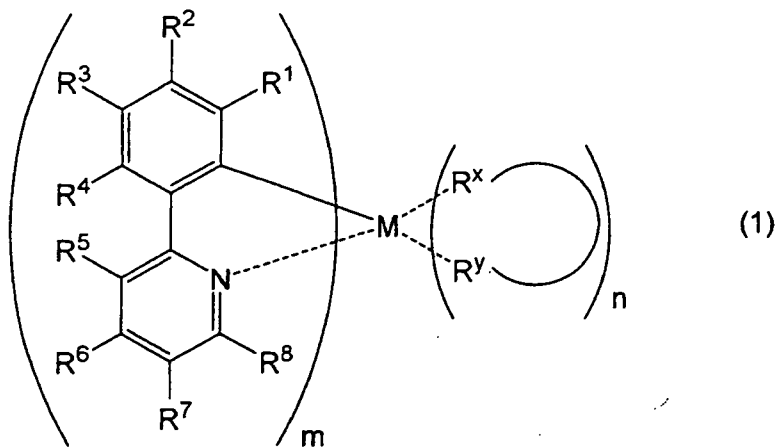
; R^x and R^y is atoms linked to the metal atom M, representing carbon atom, oxygen atom or nitrogen atom).

七、指定代表圖：本案無圖式

(一)本案指定代表圖為：第()圖。

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

八、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：



九、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明係關於金屬錯合物及含有該金屬錯合物之殘基的高分子化合物、以及含有該等之元件。

【先前技術】

以電致發光元件之發光層所用之發光材料而言，相較於顯示出從單重激發態而來之發光的螢光材料，顯示出從三重激發態而來之發光的金屬錯合物係更可期待其具有高發光效率。該顯示出從三重激發態而來之發光的金屬錯合物係提案如以銱作為中心金屬而成之鄰位金屬化錯合物(Ir(ppy)_3 ：銱(III)與 2-苯基吡啶之三-鄰位-金屬化錯合物)顯示綠色發光者(非專利文獻 1)。

[非專利文獻 1] Applied physics letters, Vol.75, p.4(1999)

【發明內容】

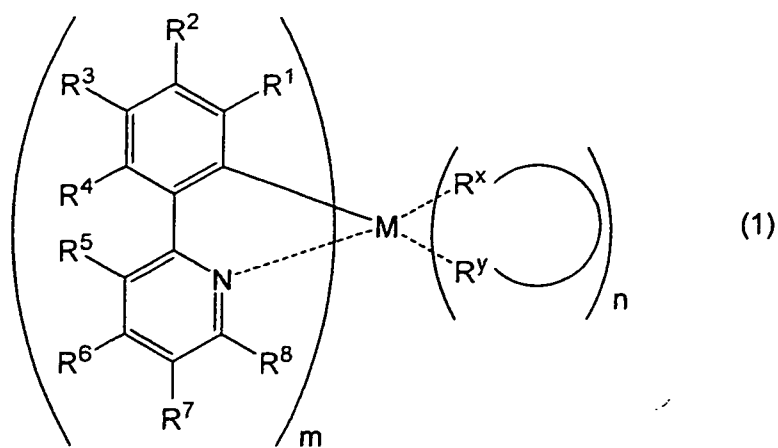
(發明欲解決之課題)

然而，當將前述金屬錯合物使用於製造電致發光元件等時，無法獲得發光效率優良之元件。

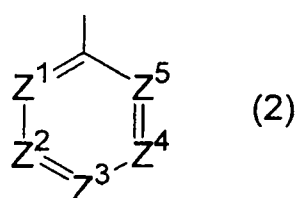
於是，本發明之目的係提供一種金屬錯合物，使用該金屬錯合物於製造電致發光元件等時，可獲得發光效率優良之元件。

(解決課題之方法)

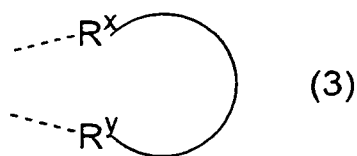
本發明之第 1 態樣係提供一種金屬錯合物，其係以下述式(1)所示：



(式中，M 為鈺、銻、鈹、鐵、銱或鉑之金屬原子； R^1 至 R^8 係各自獨立地表示氫原子、鹵原子、烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、醯基、醯氧基、醯胺基、醯亞胺基、亞胺殘基、取代胺基、取代矽烷基、取代矽烷氧基、取代矽烷硫基、取代矽烷胺基、1 價雜環基、雜芳氧基、雜芳硫基、芳烯基、芳炔基、取代羧基、或氰基，或者是 R^3 及 R^4 、或 R^5 及 R^6 可結合而形成環；惟， R^2 及 R^7 中之至少一者為下述式(2)所示之基：

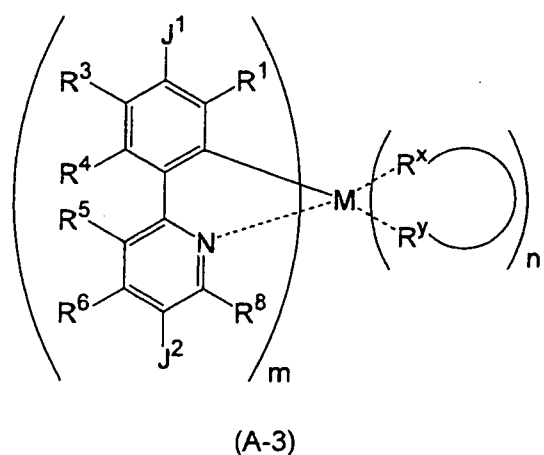
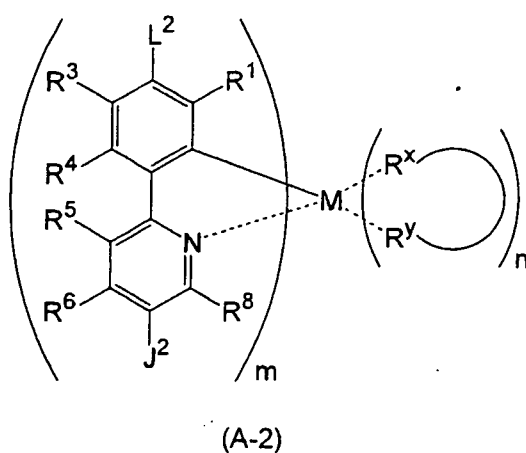
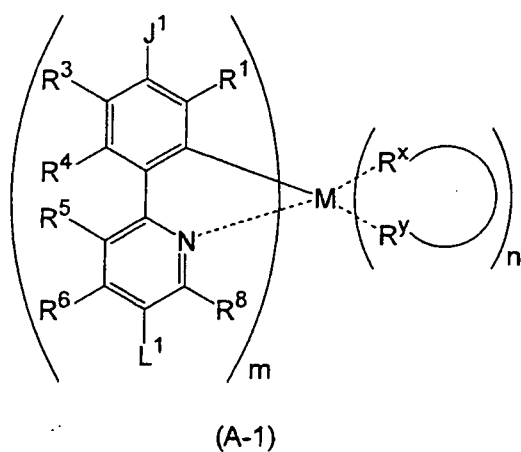


； m 為 1 至 3 之整數， n 為 0 至 2 之整數； Z^1 至 Z^5 係各自獨立地表示碳原子或氮原子；惟， Z^1 至 Z^5 中之至少二者為氮原子；當 Z^1 至 Z^5 中之任一者為碳原子時，結合於該碳原子上之氫原子係可經取代基所取代；下述式(3)所示之部分係表示單陰離子性之雙牙配位基：



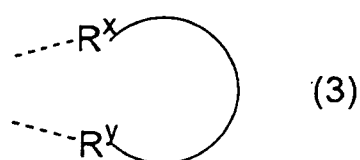
； R^x 及 R^y 係結合於金屬原子 M 上之原子，各自獨立地表示碳原子、氧原子或氮原子）。

本發明之第 2 態樣係提供前述金屬錯合物之製造方法，其包括使下述式 (A-1) 至 (A-3) 任一者所示之化合物、與具有鹵原子或烷磺酸酯基之雜環芳香族化合物進行偶合反應：

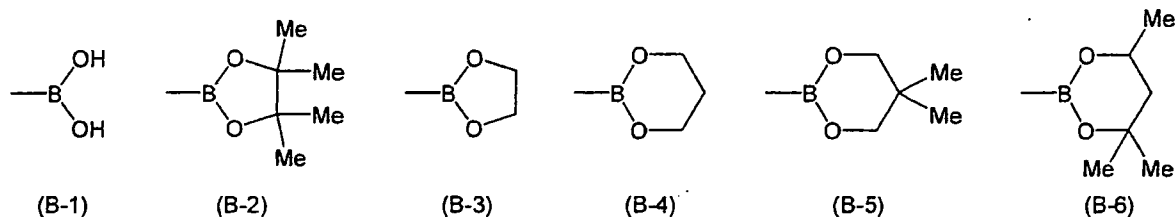


（式中， M 為鈮、銦、鈹、鐵、鋱或鉑之金屬原子； R^1 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^8 、 L^1 及 L^2 係各自獨立地表示氫原子、鹵原子、烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、鹽基、鹽氧基、鹽胺基、鹽亞胺基、

亞胺殘基、取代胺基、取代矽烷基、取代矽烷氧基、取代矽烷硫基、取代矽烷胺基、1價雜環基、雜芳氧基、雜芳硫基、芳烯基、芳炔基、取代羧基、或氰基，或者是 R^3 及 R^4 、或 R^5 及 R^6 可結合而形成環； m 為1至3之整數， n 為0至2之整數；下述式(3)所示之部分係表示單陰離子性之雙牙配位基：



； R^x 及 R^y 係結合於金屬原子 M 上之原子，各自獨立地表示碳原子、氧原子或氮原子； J^1 及 J^2 係各自獨立地以下述式(B-1)至(B-6)所示之基：



)。

本發明之第3態樣係提供以前述式(A-1)至(A-3)所示之化合物。

本發明之第4態樣係提供一種高分子化合物，其含有金屬錯合物之殘基。

本發明之第5態樣係提供一種組成物，其含有：前述金屬錯合物及/或前述高分子化合物、與電荷輸送材料及/或發光材料。

本發明之第6態樣係提供一種液狀組成物，其含有：前述金屬錯合物及/或前述高分子化合物、與溶劑及/或分

散媒。

本發明之第 7 態樣係提供一種膜，其含有前述金屬錯合物及/或前述高分子化合物。

本發明之第 8 態樣係提供一種元件，其含有前述金屬錯合物及/或前述高分子化合物。

本發明之第 9 態樣係提供使用有前述元件之面狀光源及照明。

(發明之效果)

本發明之金屬錯合物等係在使用於製造電致發光元件等時，可獲得發光效率優異(亦即量子收率高)之元件者。另外，本發明之金屬錯合物等通常為發光性物質。因此，本發明之金屬錯合物等係特別有用於製造發光元件(例如電致發光元件)、光電元件等元件。

【實施方式】

以下，針對本發明加以詳細說明。

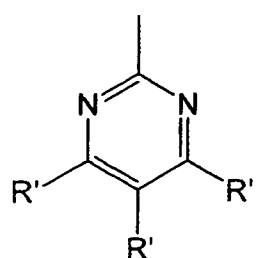
<金屬錯合物>

首先，說明關於本發明之金屬錯合物。

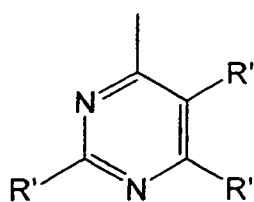
本發明之金屬錯合物係以前述式(1)所示者。

前述式(2)所示之取代基係 Z^1 至 Z^5 中之至少二個為氮原子者，較佳為二個或三個為氮原子者。特佳為此等複數存在之氮原子為不鄰接(亦即不存在於鄰接位)之組合。具體而言，亦即 Z^1 至 Z^5 中之二個或三個為氮原子，且氮原子不鄰接者。當 Z^1 至 Z^5 中之任一者為碳原子時，結合於該碳原子上之氮原子係可經取代基所取代。

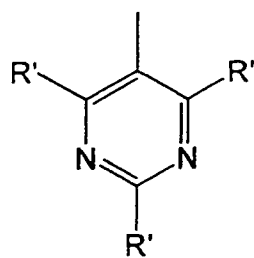
前述式(2)所示之取代基之具體結構係例示如以下之結構，此等之中，又以式(4-1)所示者、式(4-7)所示者為較佳。



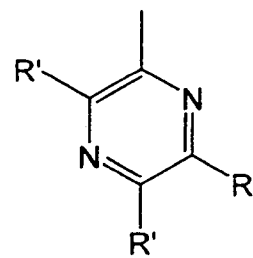
(4-1)



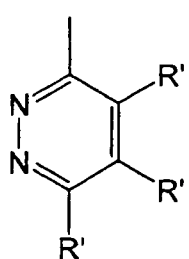
(4-2)



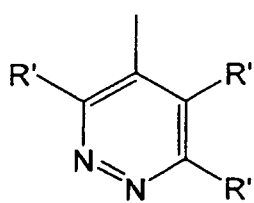
(4-3)



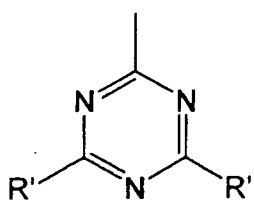
(4-4)



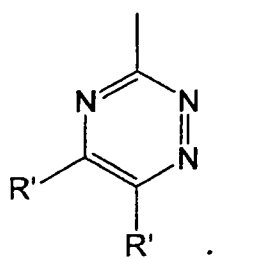
(4-5)



(4-6)



(4-7)



(4-8)

(式中， R' 係表示氫原子、鹵原子、烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、醯基、醯氧基、醯胺基、醯亞胺基、亞胺殘基、取代胺基、取代矽烷基、取代矽烷氧基、取代矽烷硫基、取代矽烷胺基、1價雜環基、雜芳氧基、雜芳硫基、芳烯基、芳炔基、取代羧基、或氰基；複數存在之 R' 可相同、亦可不同)。

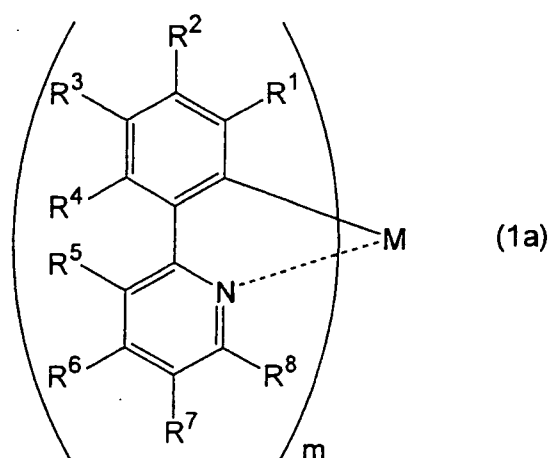
前述式中， R' 所示之氫原子、鹵原子、烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、醯基、醯氧基、醯胺基、醯亞胺基、亞胺殘基、取代胺基、取代矽烷基、取代矽烷氧基、取代矽烷硫基、取代矽烷胺基、1價雜環基、雜芳氧基、雜芳硫基、芳烯

基、芳炔基、取代羧基、及氰基，係與後述之 R 所示者具有相同之定義、具體例。

前述式(1)所示之金屬錯合物係由下述者所構成：M 所示之金屬原子、以標號 m 定義數目之配位基(以下，亦稱為「雙牙螯合配位基」)、以標號 n 定義數目之前述式(3)所示之單陰離子性之雙牙配位基(以下，亦稱為「單陰離子性雙牙配位基」)。另外，在下述中，單純提及「配位基」時，係指「前述雙牙螯合配位基、與前述單陰離子性雙牙配位基」兩方之配位基。

前述式(1)中，m 為 1 至 3 之整數，n 為 0 至 2 之整數；又以 n 為 0 或 1 為較佳，再以 n 為 0 為更佳。惟，m+n 係為可結合於中心金屬 M 上之配位基之合計數。例如，中心金屬為鈹時，m=1 且 n=2、或 m=2 且 n=1、或 m=3 且 n=0，較佳為 m=3 且 n=0、或 m=2 且 n=1，更佳為 m=3 且 n=0。

前述式(1)所示之金屬錯合物較佳為以下述式(1a)所示者：



(式中，M、R¹至 R⁸及 m 係與前述具有相同意義)(亦即 n=

0)。基本上， R^1 至 R^8 所示之原子、基係與後述之 R 所例示之原子、基相同。

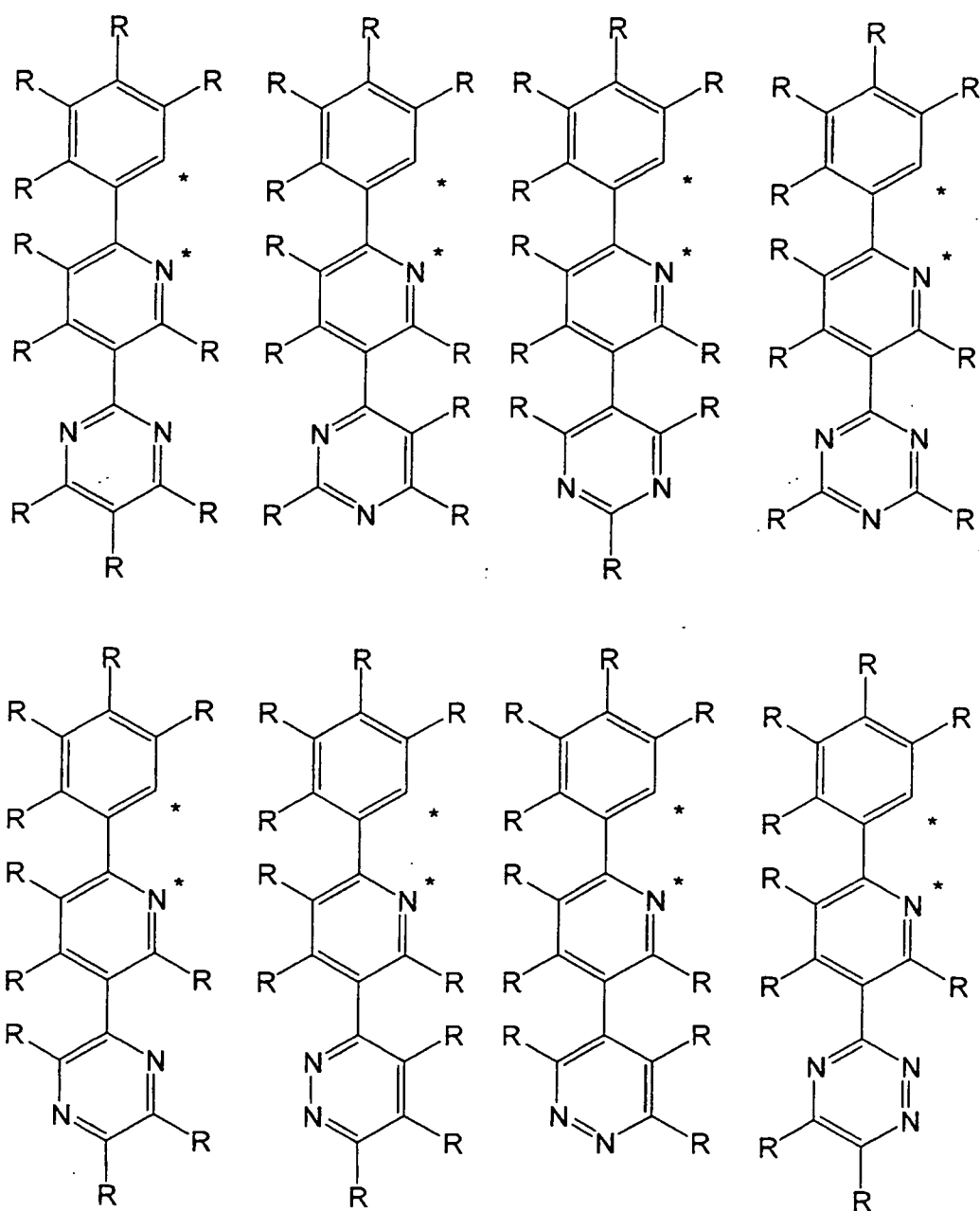
構成金屬錯合物之配位基，會對金屬錯合物之發光色、發光強度、發光效率等造成影響。因此，就金屬錯合物而言，較佳為由將配位基內之能量失活過程維持在最少之結構的配位基所構成者。更進一步，配位基所具有之取代基之種類及/或取代位置係由於會對配位基之電子特性造成影響，故會對金屬錯合物之特性造成影響。從以上之觀點來看，認為本發明之金屬錯合物係因採取前述式(1)所示之結構，而能使金屬錯合物之發光效率、安定性等上升。

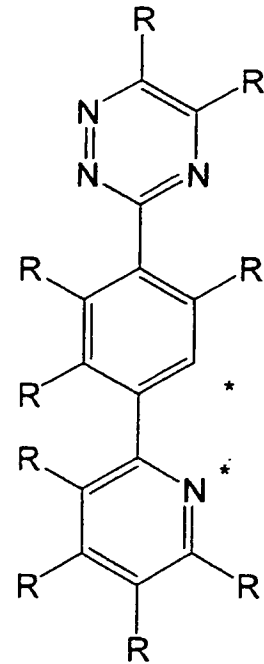
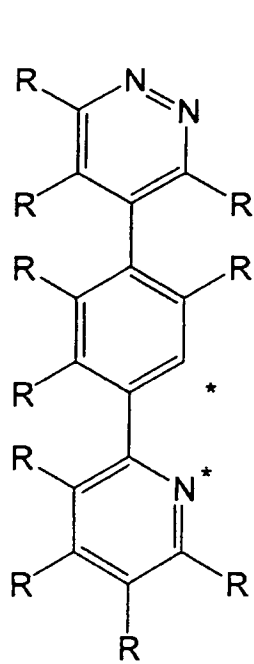
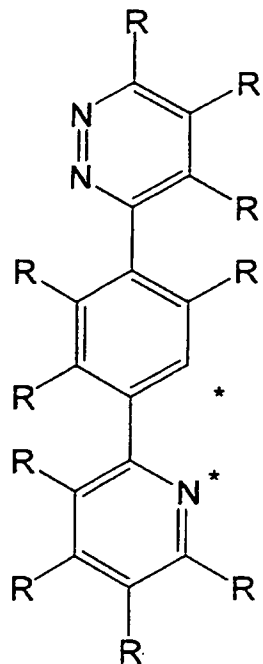
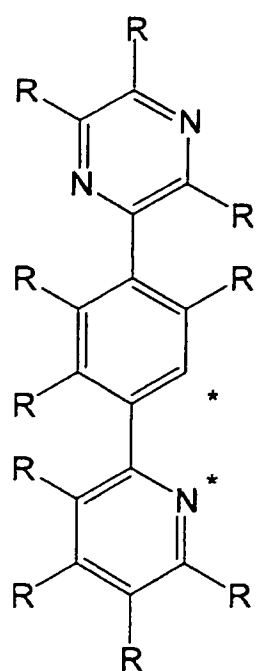
在本發明之金屬錯合物中，前述式(1)或前述式(1a)之 R^2 及 R^7 中之至少一者為前述式(2)所示之基，又以 R^7 為前述式(2)所示之基為較佳。另外，在本發明之金屬錯合物中， R^2 及 R^7 各自獨立地為前述式(2)所示之基的結構亦為較佳。更佳係 R^7 為前述式(4-1)所示者且前述 R^2 為氫原子、或 R^7 為前述式(4-7)所示者且前述 R^2 為氫原子、或前述 R^2 及 R^7 各自獨立地為前述式(4-1)或(4-7)所示之基。本發明之金屬錯合物之PL(光致發光，photoluminescence)光譜(磷光光譜)之波峰波長較佳為550nm至800nm，更佳為570nm至750nm，特佳為570nm至700nm，最佳為600nm至700nm。

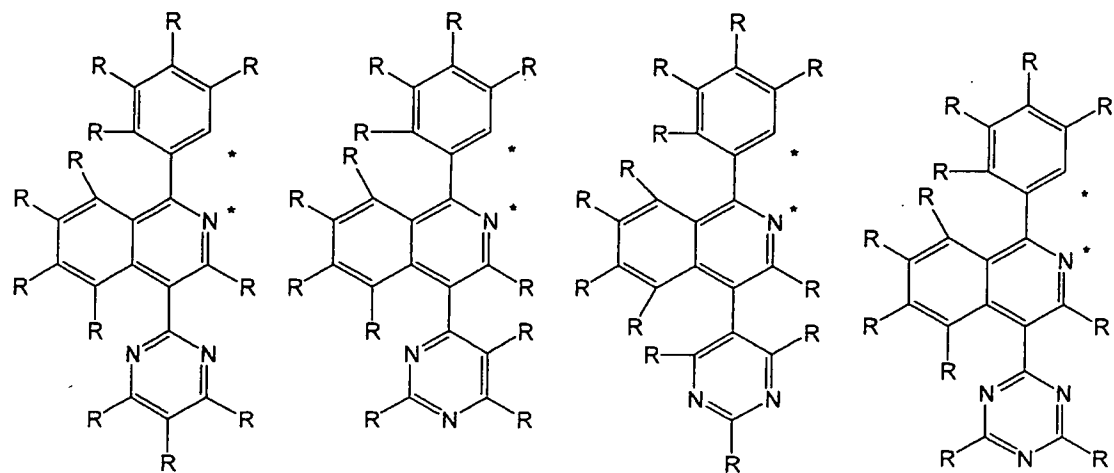
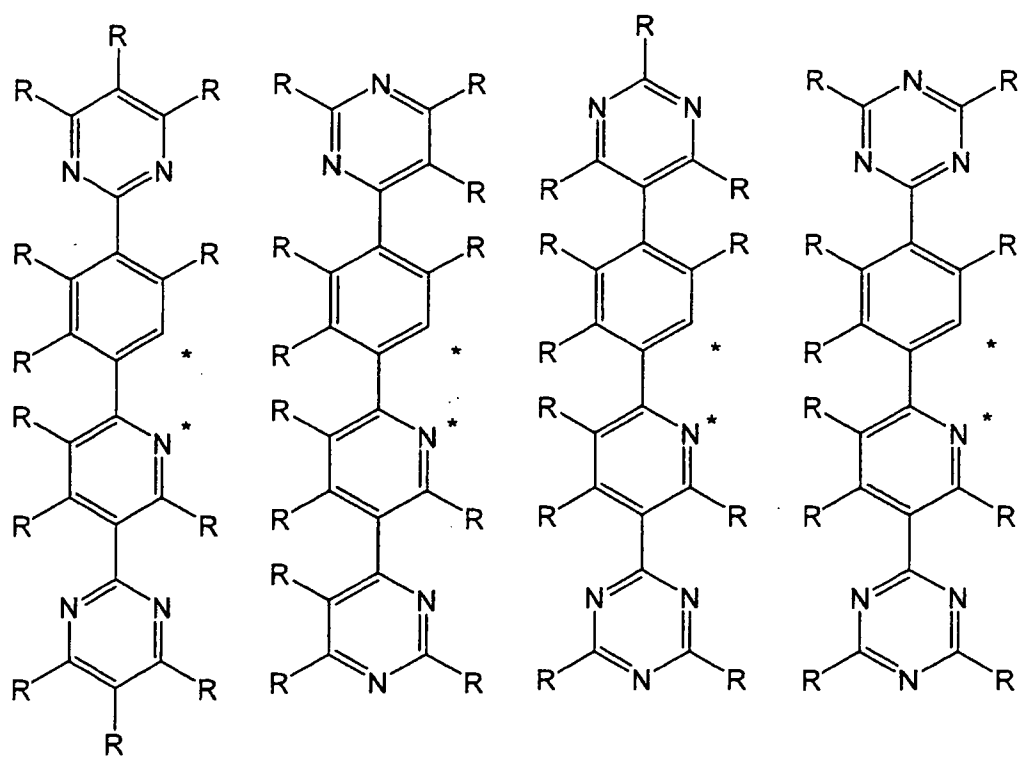
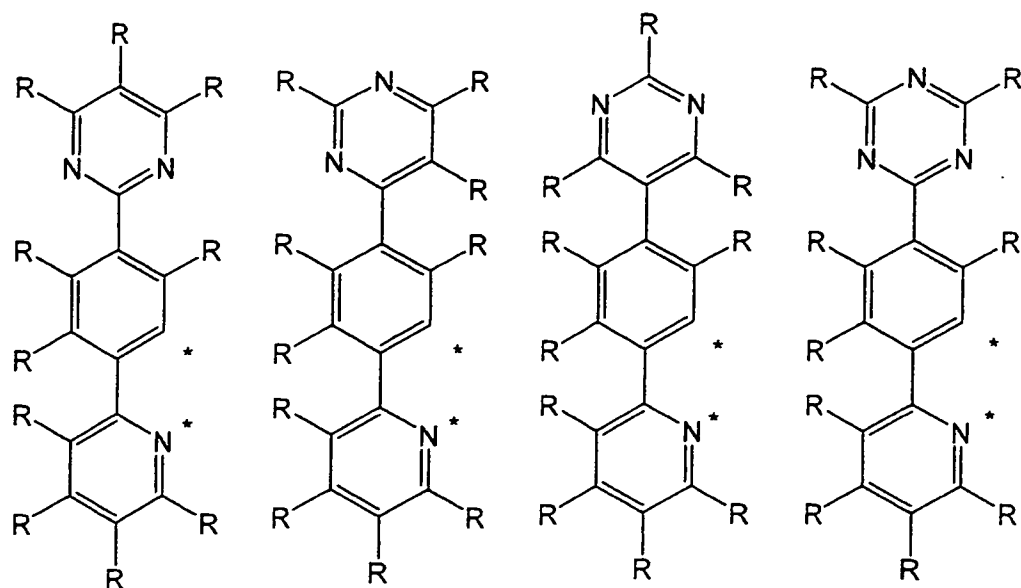
作為本發明之金屬錯合物之中心金屬的金屬原子 M ，為鈦、銦、鈮、鐵、鉍或鉑之金屬原子。此等金屬原子係

為對於金屬錯合物會造成自旋-軌道相互作用 (spin-orbit interaction)、並可引起單重態與三重態之系統間交差 (intersystem crossing) 者。前述金屬原子 M 較佳為鐵、鈷、鉑，更佳為鈷、鉑，特佳為鈷。

在前述式(1)或前述式(1a)所示之金屬錯合物中，前述雙牙螯合配位基之具體例係可列舉如以下述式所示之結構：







(式中，R 係氫原子、鹵原子、烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、醯基、醯氧基、醯胺基、醯亞胺基、亞胺殘基、取代胺基、取代矽烷基、取代矽烷氧基、取代矽烷硫基、取代矽烷胺基、1 價雜環基、雜芳氧基、雜芳硫基、芳烯基、芳炔基、取代羧基或氰基；* 係表示與金屬原子 M 結合之部位；複數存在之 R 可相同、亦可不同)。

前述 R 所示之鹵原子，係例示如氟原子、氯原子、溴原子、碘原子等。

前述 R 所示之烷基，可為直鏈、分支或環狀中之任一者。此烷基之碳數通常為 1 至 10 左右。烷基之具體例係可列舉如甲基、乙基、丙基、異丙基、丁基、異丁基、第三丁基、戊基、己基、環己基、庚基、辛基、2-乙基己基、壬基、癸基、3, 7-二甲基辛基、月桂基、三氟甲基、五氟乙基、全氟丁基、全氟己基、全氟辛基等，較佳為第三丁基、戊基、己基、辛基、2-乙基己基、癸基、3, 7-二甲基辛基。

前述 R 所示之烷氧基，可為直鏈、分支或環狀中之任一者。此烷氧基之碳數通常為 1 至 10 左右。烷氧基之具體例係可列舉如甲氧基、乙氧基、丙氧基、異丙氧基、丁氧基、異丁氧基、第三丁氧基、戊氧基、己氧基、環己氧基、庚氧基、辛氧基、2-乙基己氧基、壬氧基、癸氧基、3, 7-二甲基辛氧基、月桂氧基、三氟甲氧基、五氟乙氧基、全氟丁氧基、全氟己氧基、全氟辛氧基、甲氧基甲基氧基、

2-甲氧基乙基氧基等，較佳為戊氧基、己氧基、辛氧基、
2-乙基己氧基、癸氧基、3,7-二甲基辛氧基。

前述 R 所示之烷硫基，可為直鏈、分支或環狀中之任一者。此烷硫基之碳數通常為 1 至 10 左右。烷硫基之具體例係可列舉如甲硫基、乙硫基、丙硫基、異丙硫基、丁硫基、異丁硫基、第三丁硫基、戊硫基、己硫基、環己硫基、庚硫基、辛硫基、2-乙基己硫基、壬硫基、癸硫基、3,7-二甲基辛硫基、月桂硫基、三氟甲硫基等，較佳為戊硫基、己硫基、辛硫基、2-乙基己硫基、癸硫基、3,7-二甲基辛硫基。

前述 R 所示之芳基，其碳數通常為 6 至 60 左右，較佳為 7 至 48。就芳基而言，可例示如苯基、 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基（該「 C_1 至 C_{12} 烷氧基」係指烷氧基部分之碳數為 1 至 12 者，以下相同）、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基（該「 C_1 至 C_{12} 烷基」係指烷基部分之碳數為 1 至 12 者，以下相同）、1-萘基、2-萘基、1-蒎基、2-蒎基、9-蒎基、五氟苯基等，較佳為 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基。在此，芳基係指從芳香族烴去除 1 個氫原子而成之原子團。就此芳香族烴而言，包括：具有縮合環者、由 2 個以上獨立之苯環或縮合環直接或隔介伸乙烯基等基而結合者。更進一步，該芳基亦可具有取代基，該取代基可列舉如 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基。

前述 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基，可例示如甲氧基苯基、乙氧基苯基、丙氧基苯基、異丙氧基苯基、丁氧基苯基、異丁氧基

基苯基、第三丁氧基苯基、戊氧基苯基、己氧基苯基、環己氧基苯基、庚氧基苯基、辛氧基苯基、2-乙基己氧基苯基、壬氧基苯基、癸氧基苯基、3,7-二甲基辛氧基苯基、月桂氧基苯基等。

前述 C_1 至 C_{12} 烷基苯基，係可例示如甲基苯基、乙基苯基、二甲基苯基、丙基苯基、1,3,5-三甲苯基(mesityl)、甲基乙基苯基、異丙基苯基、丁基苯基、異丁基苯基、第三丁基苯基、戊基苯基、異戊基苯基、己基苯基、庚基苯基、辛基苯基、壬基苯基、癸基苯基、十二烷基苯基等。

前述 R 所示之芳氧基，其碳數通常為 6 至 60 左右，較佳為 7 至 48。就芳氧基而言，可例示如苯氧基、 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯氧基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯氧基、1-萘氧基、2-萘氧基、五氟苯氧基等，較佳為 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯氧基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯氧基。

前述 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯氧基，可例示如甲氧基苯氧基、乙氧基苯氧基、丙氧基苯氧基、異丙氧基苯氧基、丁氧基苯氧基、異丁氧基苯氧基、第三丁氧基苯氧基、戊氧基苯氧基、己氧基苯氧基、環己氧基苯氧基、庚氧基苯氧基、辛氧基苯氧基、2-乙基己氧基苯氧基、壬氧基苯氧基、癸氧基苯氧基、3,7-二甲基辛氧基苯氧基、月桂氧基苯氧基等。

前述 C_1 至 C_{12} 烷基苯氧基，係可例示如甲基苯氧基、乙基苯氧基、二甲基苯氧基、丙基苯氧基、1,3,5-三甲苯氧基、甲基乙基苯氧基、異丙基苯氧基、丁基苯氧基、

異丁基苯氧基、第三丁基苯氧基、戊基苯氧基、異戊基苯氧基、己基苯氧基、庚基苯氧基、辛基苯氧基、壬基苯氧基、癸基苯氧基、十二烷基苯氧基等。

芳硫基之碳數通常為 6 至 60 左右，較佳為 7 至 48。就芳硫基而言，可例示如苯硫基、 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯硫基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯硫基、1-萘硫基、2-萘硫基、五氟苯硫基等，較佳為 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯硫基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯硫基。

前述 R 所示之芳烷基，其碳數通常為 7 至 60 左右，較佳為 7 至 48。就芳烷基而言，可例示如苯基- C_1 至 C_{12} 烷基、 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基、1-萘基- C_1 至 C_{12} 烷基、2-萘基- C_1 至 C_{12} 烷基等，較佳為 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基。

前述 R 所示之芳烷氧基，其碳數通常為 7 至 60 左右，較佳為 7 至 48。就芳烷氧基而言，可例示如苯基甲氧基、苯基乙氧基、苯基丁氧基、苯基戊氧基、苯基己氧基、苯基庚氧基、苯基辛氧基等苯基- C_1 至 C_{12} 烷氧基， C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_1 至 C_{12} 烷氧基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_1 至 C_{12} 烷氧基、1-萘基- C_1 至 C_{12} 烷氧基、2-萘基- C_1 至 C_{12} 烷氧基等，較佳為 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_1 至 C_{12} 烷氧基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_1 至 C_{12} 烷氧基。

前述 R 所示之芳烷硫基，其碳數通常為 7 至 60 左右，較佳為 7 至 48。就芳烷硫基而言，可例示如苯基- C_1 至 C_{12} 烷硫基， C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_1 至 C_{12} 烷硫基、 C_1 至 C_{12} 烷

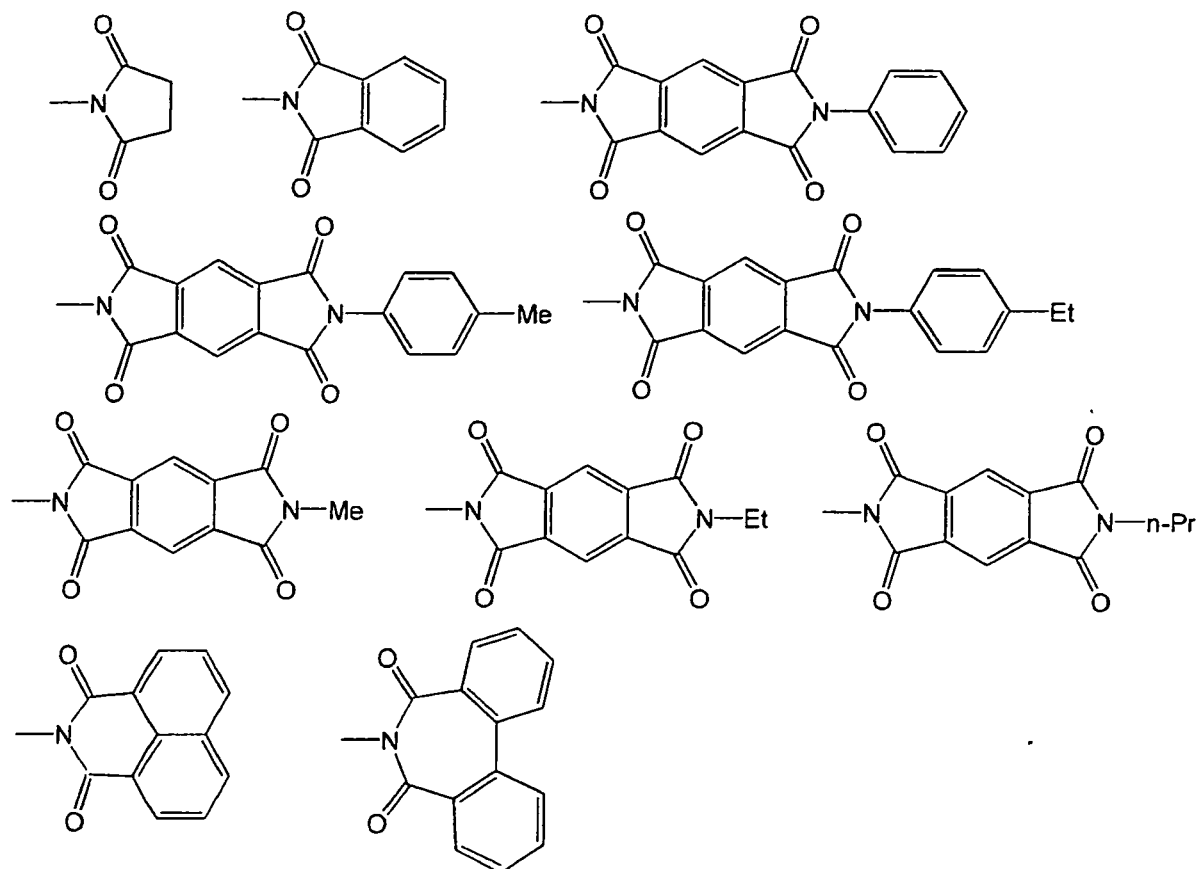
基苯基- C_1 至 C_{12} 烷硫基、1-萘基- C_1 至 C_{12} 烷硫基、2-萘基- C_1 至 C_{12} 烷硫基等，較佳為 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_1 至 C_{12} 烷硫基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_1 至 C_{12} 烷硫基。

前述 R 所示之醯基，其碳數通常為 2 至 20 左右，較佳為 2 至 18。就醯基而言，可例示如乙醯基、丙醯基、丁醯基、異丁醯基、三甲基乙醯基、苯甲醯基、三氟乙醯基、五氟苯甲醯基等。

前述 R 所示之醯氧基，其碳數通常為 2 至 20 左右，較佳為 2 至 18。就醯氧基而言，可例示如乙醯氧基、丙醯氧基、丁醯氧基、異丁醯氧基、三甲基乙醯氧基、苯甲醯氧基、三氟乙醯氧基、五氟苯甲醯氧基等。

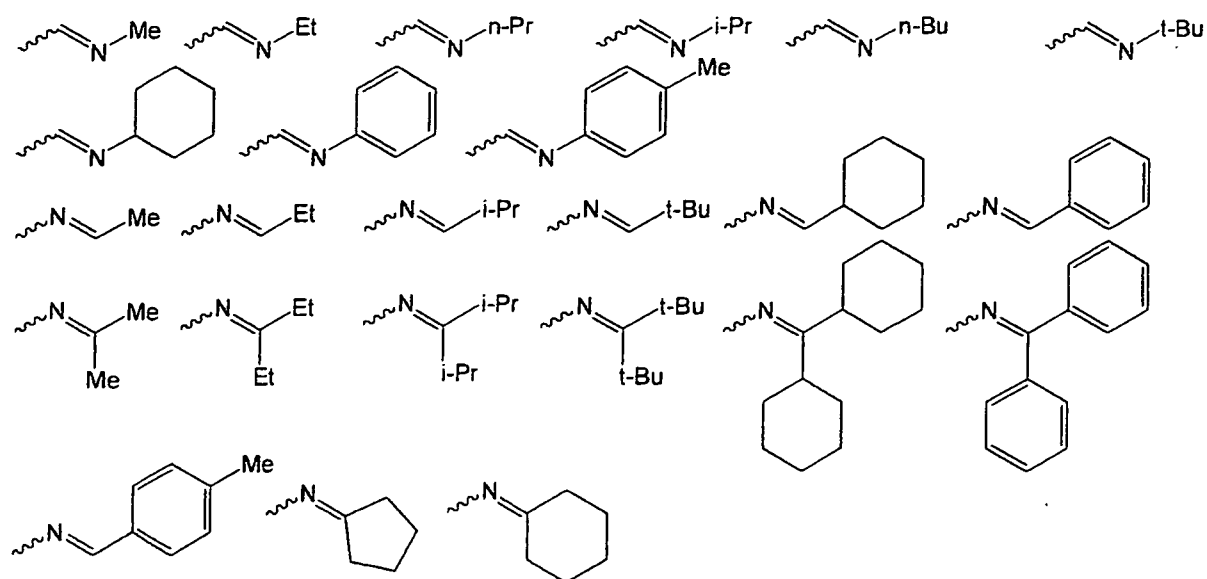
前述 R 所示之醯胺基，其碳數通常為 2 至 20 左右，較佳為 2 至 18。就醯胺基而言，可例示如甲醯胺基、乙醯胺基、丙醯胺基、丁醯胺基、苯甲醯胺基、三氟乙醯胺基、五氟苯甲醯胺基、二甲醯胺基、二乙醯胺基、二丙醯胺基、二丁醯胺基、二苯甲醯胺基、二-三氟乙醯胺基、二-五氟苯甲醯胺基等。

前述 R 所示之醯亞胺基係指從醯亞胺去除 1 個其氮原子所結合之氫原子而獲得的 1 價殘基。此醯亞胺基之碳數通常為 2 至 60 左右，較佳為 2 至 48。就醯亞胺基而言，可例示如以下述結構式所示之基等：



(式中，從氮原子所延伸之線係表示結合鍵，Me 表示甲基，Et 表示乙基，n-Pr 表示正丙基；以下相同)。

前述 R 所示之亞胺殘基係指從亞胺化合物(亦即分子內具有一 $N=C$ 之有機化合物，其具體例可列舉如醛亞胺、酮亞胺、以及此等分子中之氮原子所結合之氫原子經烷基等所取代之化合物等)去除 1 個氫原子而成的 1 價殘基。此亞胺殘基之碳數通常為 2 至 20 左右，較佳為 2 至 18。就亞胺殘基而言，可例示如以下述結構式所示之基等：



(式中，i-Pr 表示異丙基，n-Bu 表示正丁基，t-Bu 表示第三丁基；波浪線表示之鍵結係指「楔形所示之鍵結」及/或「虛線所示之鍵結」；在此，「楔形所示之鍵結」係指從紙面往閱讀者方向出來之鍵結，「虛線所示之鍵結」係指往紙面方向出去之鍵結)。

前述 R 所示之取代胺基係指經從由烷基、芳基、芳烷基及 1 價雜環基所成組群中選出之 1 個或 2 個基所取代的胺基。該烷基、芳基、芳烷基或 1 價雜環基亦可具有取代基。取代胺基之碳數若不包含該取代基之碳數，通常為 1 至 60 左右，較佳為 2 至 48。就取代胺基而言，可例示如甲基胺基、二甲基胺基、乙基胺基、二乙基胺基、丙基胺基、二丙基胺基、異丙基胺基、二異丙基胺基、丁基胺基、異丁基胺基、第三丁基胺基、戊基胺基、己基胺基、環己基胺基、庚基胺基、辛基胺基、2-乙基己基胺基、壬基胺基、癸基胺基、3,7-二甲基辛基胺基、月桂基胺基、環戊基胺基、二環戊基胺基、環己基胺基、二環己基胺基、吡

咯啉基、哌啉基、二-三氟甲基胺基、苯基胺基、二苯基胺基、 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基胺基、二(C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基)胺基、二(C_1 至 C_{12} 烷基苯基)胺基、1-萘基胺基、2-萘基胺基、五氟苯基胺基、吡啉基胺基、嗒吡基胺基、嘧啉基胺基、吡嗪基胺基、三吡基胺基、苯基- C_1 至 C_{12} 烷基胺基、 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基胺基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基胺基、二(C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基)胺基、二(C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基)胺基、1-萘基- C_1 至 C_{12} 烷基胺基、2-萘基- C_1 至 C_{12} 烷基胺基等。

前述 R 所示之取代矽烷基係指經從由烷基、芳基、芳烷基及 1 價雜環基所成組群中選出之 1 個、2 個或 3 個基所取代的矽烷基。取代矽烷基之碳數通常為 1 至 60 左右，較佳為 3 至 48。該烷基、芳基、芳烷基或 1 價雜環基亦可具有取代基。就取代矽烷基而言，可例示如三甲基矽烷基、三乙基矽烷基、三丙基矽烷基、三異丙基矽烷基、二甲基-異丙基矽烷基、二乙基-異丙基矽烷基、第三丁基二甲基矽烷基、戊基二甲基矽烷基、己基二甲基矽烷基、庚基二甲基矽烷基、辛基二甲基矽烷基、2-乙基己基-二甲基矽烷基、壬基二甲基矽烷基、癸基二甲基矽烷基、3,7-二甲基辛基-二甲基矽烷基、月桂基二甲基矽烷基、苯基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷基、 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷基、1-萘基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷基、2-萘基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷基、苯基- C_1 至 C_{12} 烷基二甲基矽烷基、三苯基矽烷基、三-對二甲苯基矽烷

基、三苯甲基矽烷基、二苯基甲基矽烷基、第三丁基二苯基矽烷基、二甲基苯基矽烷基等。

前述 R 所示之取代矽烷氧基係指經從由烷氧基、芳氧基、芳烷氧基及 1 價雜環氧基所成組群中選出之 1 個、2 個或 3 個基所取代的矽烷氧基(silyloxy)。取代矽烷氧基之碳數通常為 1 至 60 左右，較佳為 3 至 48。該烷氧基、芳氧基、芳烷氧基或 1 價雜環氧基亦可具有取代基。就取代矽烷氧基而言，可例示如三甲基矽烷氧基、三乙基矽烷氧基、三丙基矽烷氧基、三異丙基矽烷氧基、二甲基-異丙基矽烷氧基、二乙基-異丙基矽烷氧基、第三丁基二甲基矽烷氧基、戊基二甲基矽烷氧基、己基二甲基矽烷氧基、庚基二甲基矽烷氧基、辛基二甲基矽烷氧基、2-乙基己基-二甲基矽烷氧基、壬基二甲基矽烷氧基、癸基二甲基矽烷氧基、3,7-二甲基辛基-二甲基矽烷氧基、月桂基二甲基矽烷氧基、苯基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷氧基、 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷氧基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷氧基、1-萘基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷氧基、2-萘基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷氧基、苯基- C_1 至 C_{12} 烷基二甲基矽烷氧基、三苯基矽烷氧基、三-對二甲苯基矽烷氧基、三苯甲基矽烷氧基、二苯基甲基矽烷氧基、第三丁基二苯基矽烷氧基、二甲基苯基矽烷氧基等。

前述 R 所示之取代矽烷硫基係指經從由烷硫基、芳硫基、芳烷硫基及 1 價雜環硫基所成組群中選出之 1 個、2 個或 3 個基所取代的矽烷硫基(silylthio)。取代矽烷硫基

之碳數通常為 1 至 60 左右，較佳為 3 至 48。該烷硫基、芳硫基、芳烷硫基或 1 價雜環硫基亦可具有取代基。就取代矽烷硫基而言，可例示如三甲基矽烷硫基、三乙基矽烷硫基、三丙基矽烷硫基、三異丙基矽烷硫基、二甲基-異丙基矽烷硫基、二乙基-異丙基矽烷硫基、第三丁基二甲基矽烷硫基、戊基二甲基矽烷硫基、己基二甲基矽烷硫基、庚基二甲基矽烷硫基、辛基二甲基矽烷硫基、2-乙基己基-二甲基矽烷硫基、壬基二甲基矽烷硫基、癸基二甲基矽烷硫基、3, 7-二甲基辛基-二甲基矽烷硫基、月桂基二甲基矽烷硫基、苯基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷硫基、 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷硫基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷硫基、1-萘基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷硫基、2-萘基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷硫基、苯基- C_1 至 C_{12} 烷基二甲基矽烷硫基、三苯基矽烷硫基、三-對二甲苯基矽烷硫基、三苯甲基矽烷硫基、二苯基甲基矽烷硫基、第三丁基二苯基矽烷硫基、二甲基苯基矽烷硫基等。

前述 R 所示之取代矽烷胺基係指經從由烷基胺基、芳基胺基、芳烷基胺基及 1 價雜環胺基所成組群中選出之 1 個、2 個或 3 個基所取代的矽烷胺基。取代矽烷胺基之碳數通常為 1 至 60 左右，較佳為 3 至 48。該烷基胺基、芳基胺基、芳烷基胺基或 1 價雜環胺基亦可具有取代基。就取代矽烷胺基而言，可例示如三甲基矽烷胺基、三乙基矽烷胺基、三丙基矽烷胺基、三異丙基矽烷胺基、二甲基-異丙基矽烷胺基、二乙基-異丙基矽烷胺基、第三丁基二甲

基矽烷胺基、戊基二甲基矽烷胺基、己基二甲基矽烷胺基、庚基二甲基矽烷胺基、辛基二甲基矽烷胺基、2-乙基己基-二甲基矽烷胺基、壬基二甲基矽烷胺基、癸基二甲基矽烷胺基、3, 7-二甲基辛基-二甲基矽烷胺基、月桂基二甲基矽烷胺基、苯基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷胺基、 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷胺基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷胺基、1-萘基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷胺基、2-萘基- C_1 至 C_{12} 烷基矽烷胺基、苯基- C_1 至 C_{12} 烷基二甲基矽烷胺基、三苯基矽烷胺基、三-對二甲苯基矽烷胺基、三苯甲基矽烷胺基、二苯基甲基矽烷胺基、第三丁基二苯基矽烷胺基、二甲基苯基矽烷胺基等。

前述 R 所示之 1 價雜環基係指從雜環式化合物去除 1 個氫原子而殘留的原子團。1 價雜環基之碳數通常為 3 至 60 左右，較佳為 3 至 20。又，1 價雜環基之碳數不包含取代基之碳數。在此，雜環式化合物係指在具有環狀結構之有機化合物中，構成環之元素不僅為碳原子，亦於環內含有氧、硫、氮、磷、硼等雜原子者。就 1 價雜環基而言，可例示如噻吩基、 C_1 至 C_{12} 烷基噻吩基、吡咯基、呋喃基、吡啶基、 C_1 至 C_{12} 烷基吡啶基、哌啶基、喹啉基、異喹啉基等，較佳為噻吩基、 C_1 至 C_{12} 烷基噻吩基、吡啶基、 C_1 至 C_{12} 烷基吡啶基。又，1 價雜環基較佳為 1 價之芳香族雜環基。

前述 R 所示之雜芳氧基，其碳數通常為 6 至 60 左右，較佳為 7 至 48。就雜芳氧基而言，可例示如噻吩基氧基、

C_1 至 C_{12} 烷氧基噻吩基氧基、 C_1 至 C_{12} 烷基噻吩基氧基、吡啶基氧基、 C_1 至 C_{12} 烷氧基吡啶基氧基、 C_1 至 C_{12} 烷基吡啶基氧基、異喹啉基氧基等，較佳為 C_1 至 C_{12} 烷氧基吡啶基氧基、 C_1 至 C_{12} 烷基吡啶基氧基。

前述 C_1 至 C_{12} 烷氧基，可例示如甲氧基、乙氧基、丙氧基、異丙氧基、丁氧基、異丁氧基、第三丁氧基、戊氧基、己氧基、環己氧基、庚氧基、辛氧基、2-乙基己氧基、壬氧基、癸氧基、3,7-二甲基辛氧基、月桂氧基等。

前述 C_1 至 C_{12} 烷基吡啶基氧基，可例示如甲基吡啶基氧基、二甲基吡啶基氧基、丙基吡啶基氧基、1,3,5-三甲基吡啶基氧基、甲基乙基吡啶基氧基、異丙基吡啶基氧基、丁基吡啶基氧基、異丁基吡啶基氧基、第三丁基吡啶基氧基、戊基吡啶基氧基、異戊基吡啶基氧基、己基吡啶基氧基、庚基吡啶基氧基、辛基吡啶基氧基、壬基吡啶基氧基、癸基吡啶基氧基、十二烷基吡啶基氧基等。

前述 R 所示之雜芳硫基，其碳數通常為 6 至 60 左右，較佳為 7 至 48。就雜芳硫基而言，可例示如吡啶基硫基、 C_1 至 C_{12} 烷氧基吡啶基硫基、 C_1 至 C_{12} 烷基吡啶基硫基、異喹啉基硫基等，較佳為 C_1 至 C_{12} 烷氧基吡啶基硫基、 C_1 至 C_{12} 烷基吡啶基硫基。

前述 R 所示之芳烯基，其碳數通常為 8 至 60 左右，較佳為 8 至 48。就芳烯基而言，可例示如苯基- C_2 至 C_{12} 烯基（「 C_2 至 C_{12} 烯基」係指烯基部分之碳數為 2 至 12，以下相同）、 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_2 至 C_{12} 烯基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯

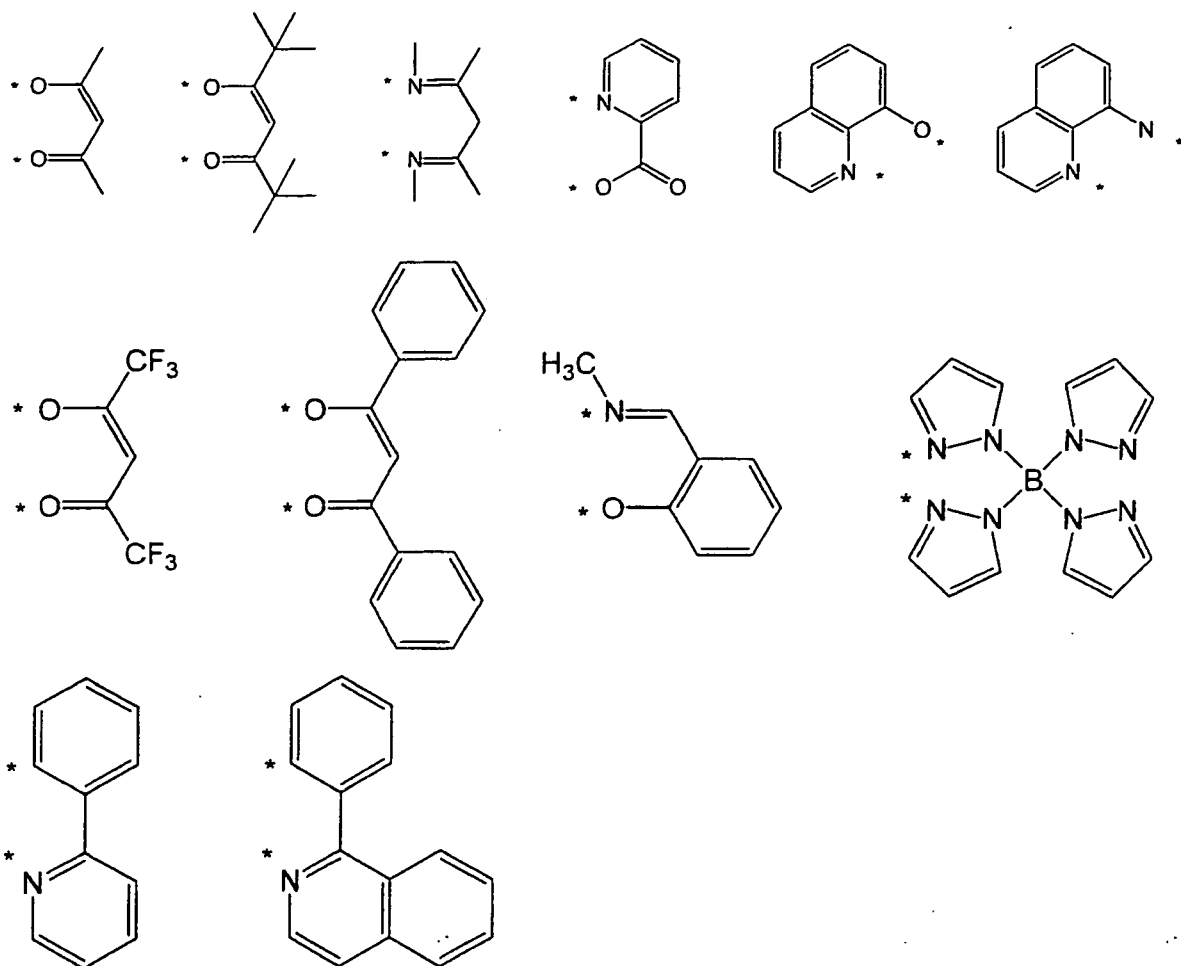
基- C_2 至 C_{12} 烯基、1-萘基- C_2 至 C_{12} 烯基、2-萘基- C_2 至 C_{12} 烯基等，較佳為 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_2 至 C_{12} 烯基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_2 至 C_{12} 烯基。

前述 R 所示之芳炔基，其碳數通常為 8 至 60 左右，較佳為 8 至 48。就芳炔基而言，可例示如苯基- C_2 至 C_{12} 炔基（「 C_2 至 C_{12} 炔基」係指炔基部分之碳數為 2 至 12，以下相同）、 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_2 至 C_{12} 炔基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_2 至 C_{12} 炔基、1-萘基- C_2 至 C_{12} 炔基、2-萘基- C_2 至 C_{12} 炔基等，較佳為 C_1 至 C_{12} 烷氧基苯基- C_2 至 C_{12} 炔基、 C_1 至 C_{12} 烷基苯基- C_2 至 C_{12} 炔基。

前述 R 所示之取代羧基，其碳數通常為 2 至 60 左右，較佳為 2 至 48，係指經烷基、芳基、芳烷基及 1 價雜環基所取代的羧基。就取代羧基而言，可列舉如甲氧基羧基、乙氧基羧基、丙氧基羧基、異丙氧基羧基、丁氧基羧基、異丁氧基羧基、第三丁氧基羧基、戊氧基羧基、己氧基羧基、環己氧基羧基、庚氧基羧基、辛氧基羧基、2-乙基己氧基羧基、壬氧基羧基、癸氧基羧基、3,7-二甲基辛氧基羧基、十二烷基氧基羧基、三氟甲氧基羧基、五氟乙氧基羧基、全氟丁氧基羧基、全氟己氧基羧基、全氟辛氧基羧基、吡啶基氧基羧基、萘氧基羧基、吡啶基氧基羧基等。該烷基、芳基、芳烷基或 1 價雜環基亦可具有取代基。取代羧基之碳數不包含該取代基之碳數。

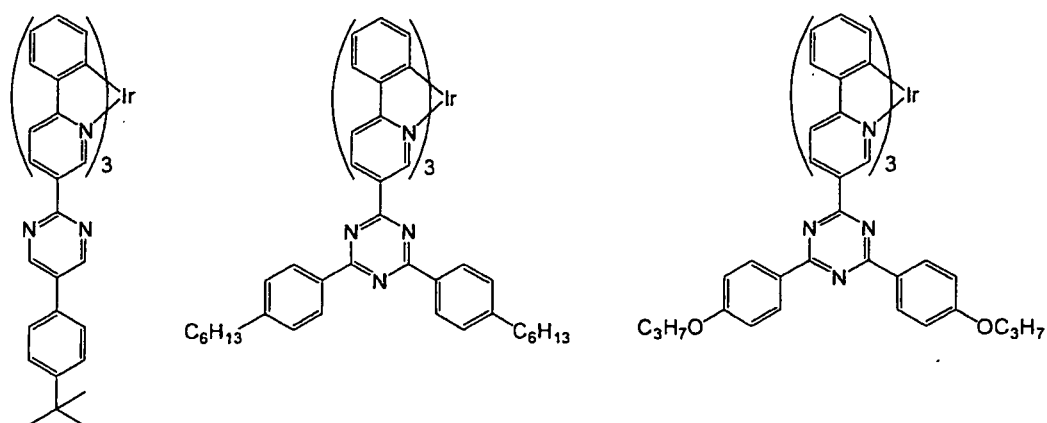
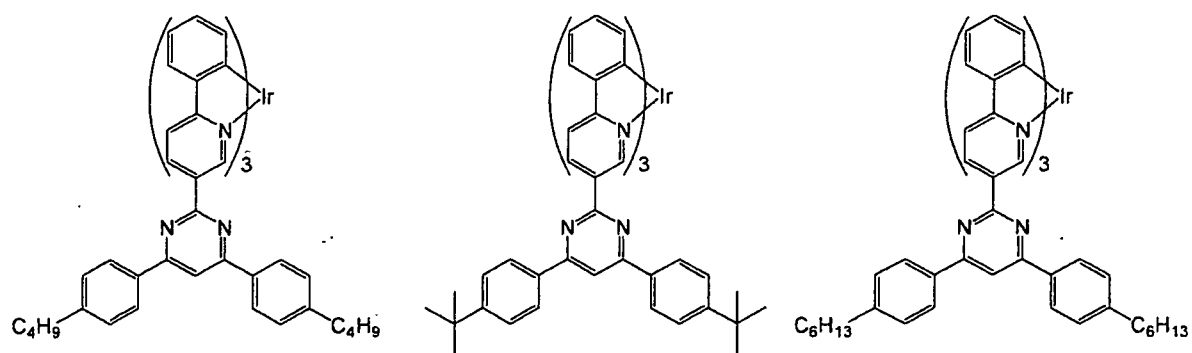
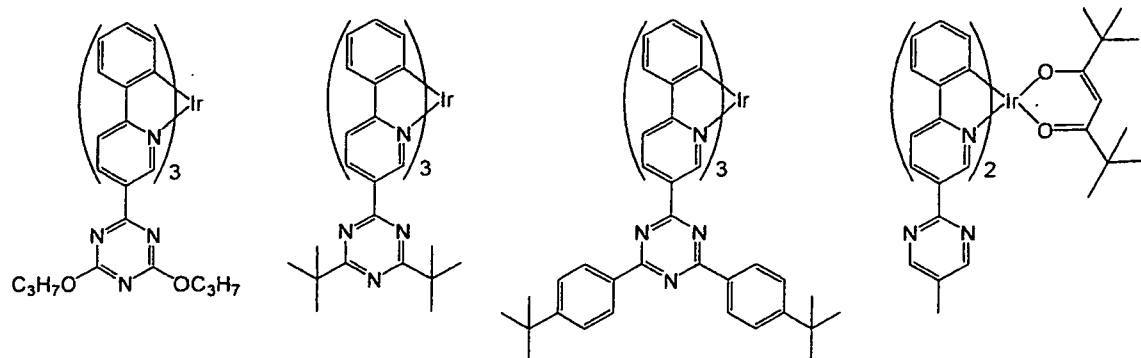
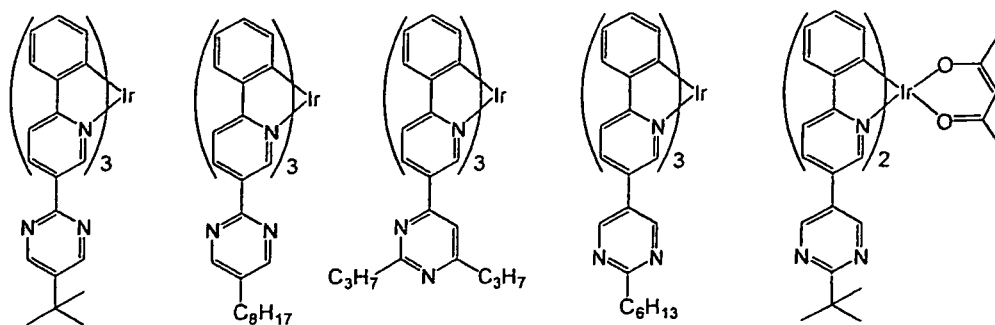
在前述式(3)中，連結 R_x 與 R_y 之圓弧部分較佳係氫原子以外之原子數為 3 至 20 之 2 價基。就前述單陰離子性雙

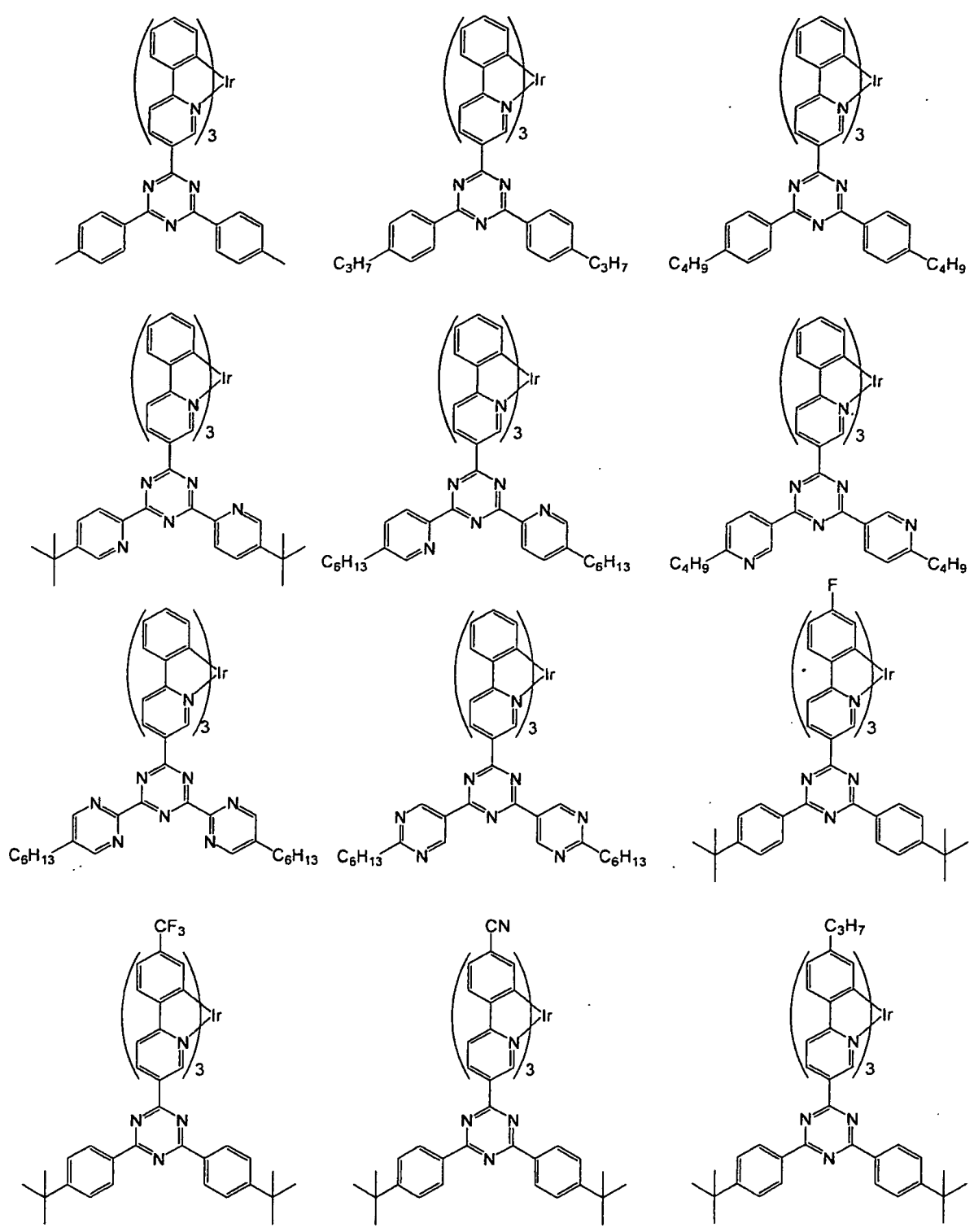
牙配位基而言，只要是單陰離子性之雙牙配位基即無特別限制，可列舉如以下之結構：

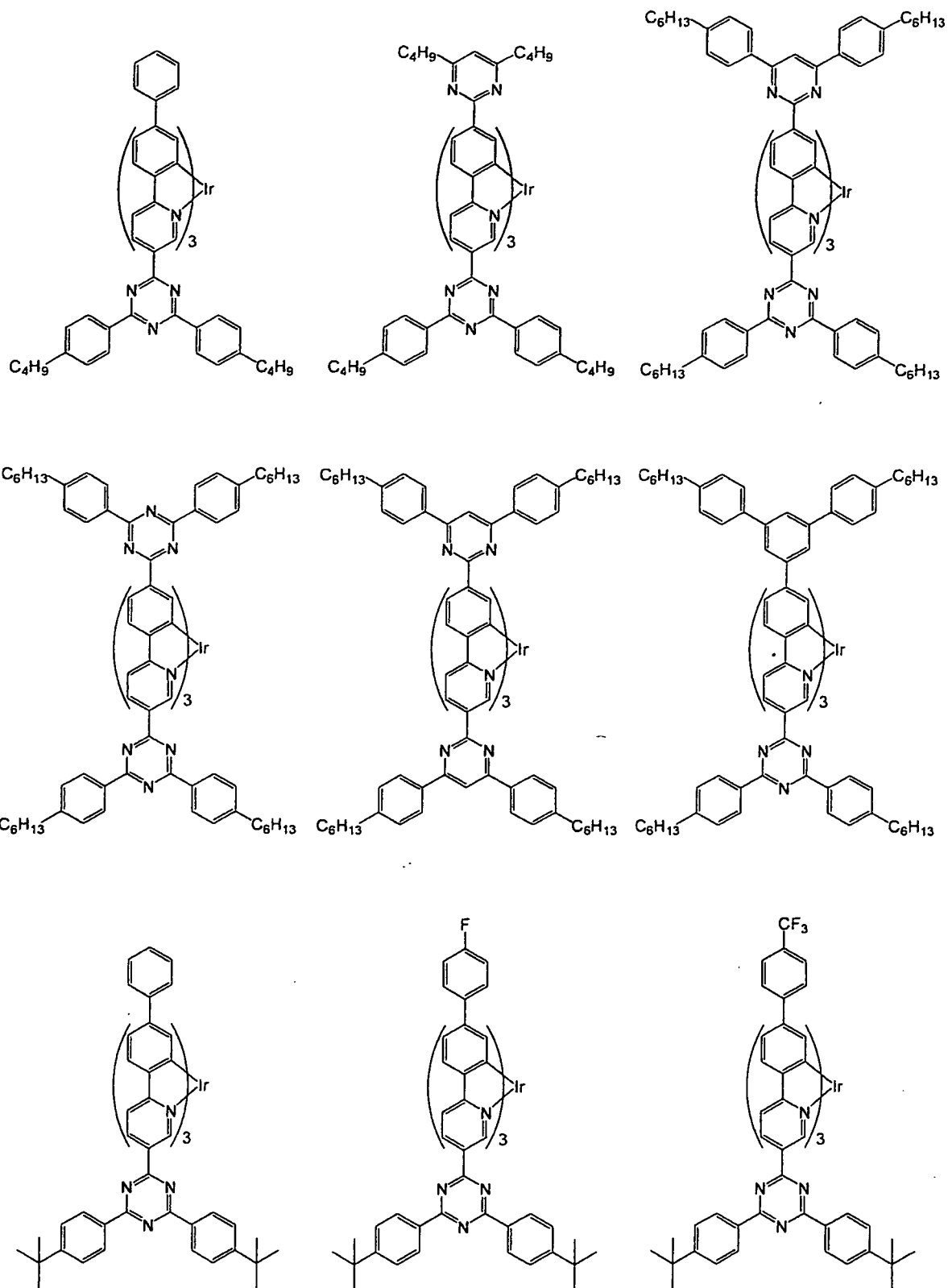


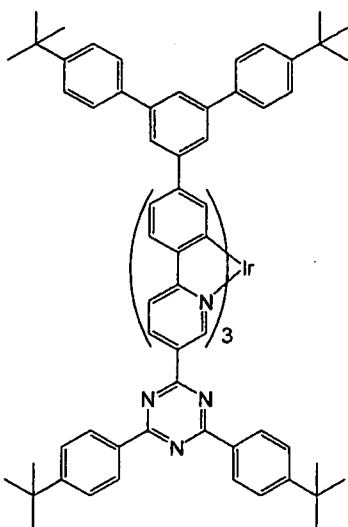
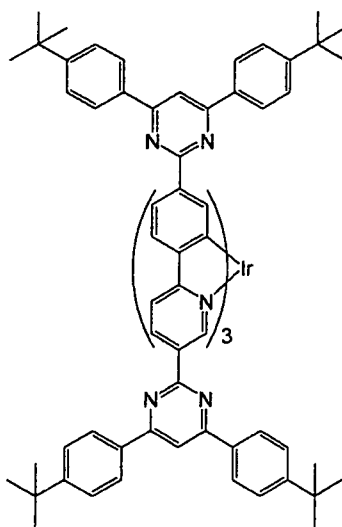
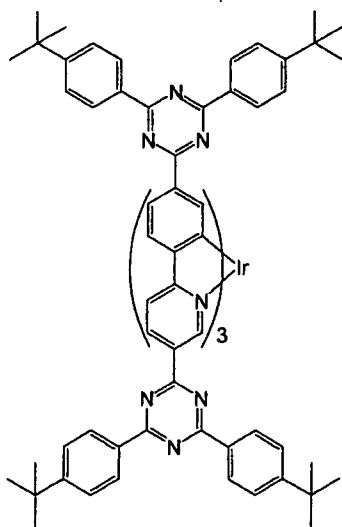
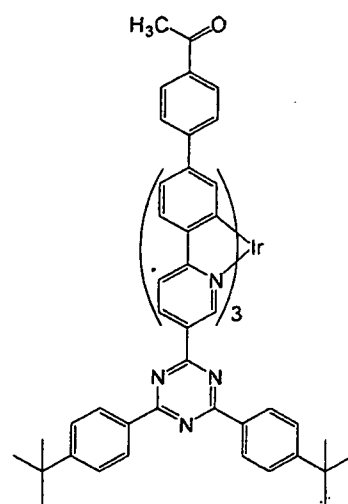
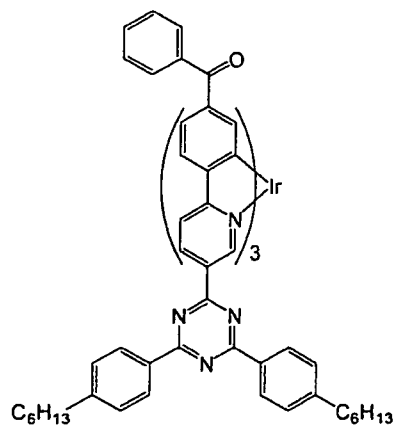
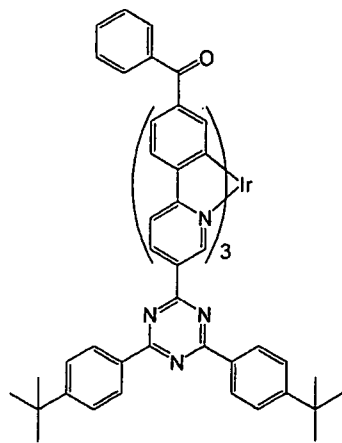
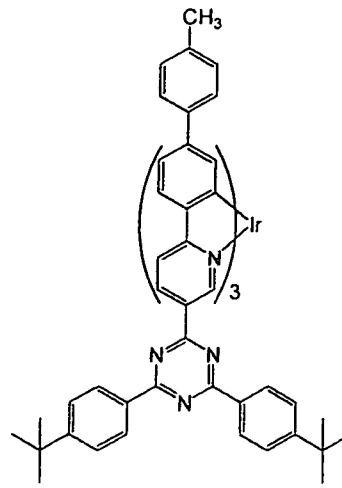
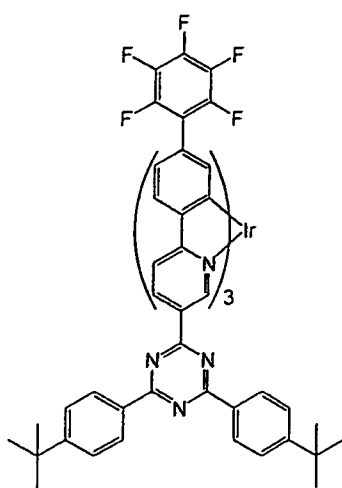
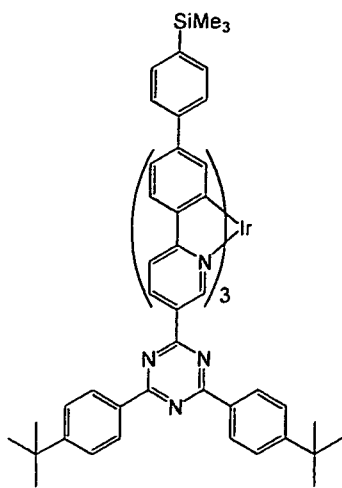
(式中，*表示與金屬原子 M 結合之部位)。

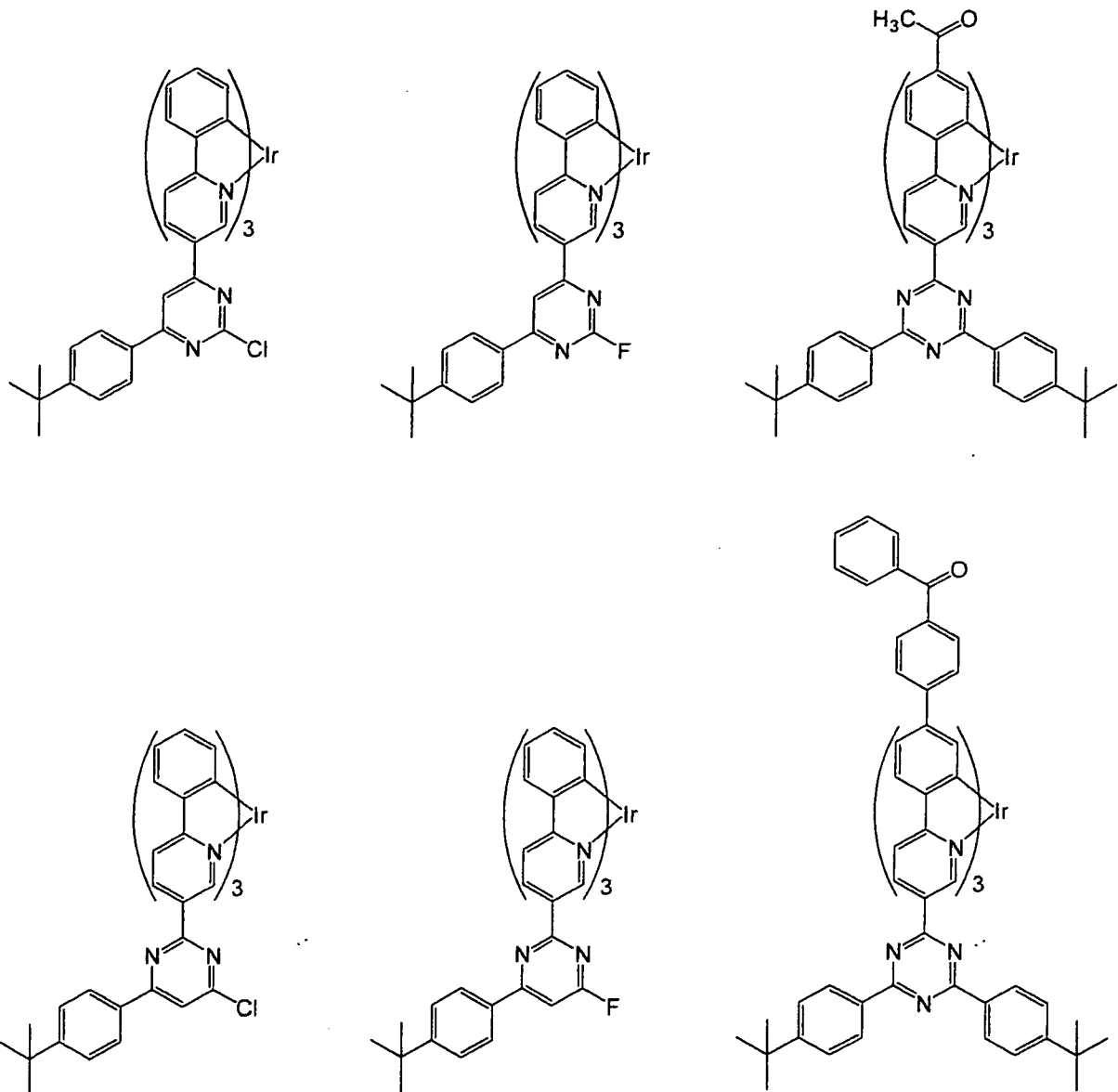
就本發明之金屬錯合物而言，可列舉如以下所示者：











就本發明之金屬錯合物而言，從安定之高效率發光之觀點來看，以容易解除禁制躍遷(forbidden transition)的三重激發態之壽命為短的金屬錯合物為較佳。

— 金屬錯合物之製造方法 —

其次，說明本發明之金屬錯合物之製造方法。

本發明之金屬錯合物係可藉由例如使成為配位基之化合物與金屬化合物在溶液中反應而合成。因應需要而亦可使鹼、銀鹽化合物等存在於反應系中。另外，藉由使於配

位基具有 2-苯基吡啶衍生物之金屬錯合物與雜環芳香族化合物進行偶合反應，即可合成本發明之金屬錯合物。

就錯合物化之方法(亦即，使成為配位基之化合物與金屬化合物在溶液中進行反應的方法)而言，當錯合物為銦錯合物時可例示如記載於 J. Am. Chem. Soc. 1984, 106, 6647; Inorg. Chem. 1991, 30, 1685; Inorg. Chem. 1994, 33, 545; Inorg. Chem. 2001, 40, 1704; Chem. Lett., 2003, 32, 252 等之方法，當錯合物為鉑錯合物時可例示如記載於 Inorg. Chem. 1984, 23, 4249; Chem. Mater. 1999, 11, 3709; Organometallics, 1999, 18, 1801 等之方法，當錯合物為鈀錯合物時可例示如記載於 J. Org. Chem., 1987, 52, 73 等之方法。

錯合物化之反應溫度並無特別限定，但通常為可在溶劑之熔點至沸點間進行反應的溫度，較佳為 -78°C 至溶劑之沸點。反應時間並無特別限定，通常為 30 分鐘至 30 小時左右。惟，在錯合物化反應中使用微波反應裝置時，即使溫度到達溶劑沸點以上亦可進行反應，而反應時間雖無特別限定，通常為數分鐘至數小時左右。

前述成為配位基之化合物，係可藉由使例如 2-苯基吡啶衍生物與雜環芳香族化合物進行鈴木(Suzuki)偶合反應、格林納(Grignard)偶合反應、史帝爾(Stille)偶合反應等而合成。因應需要可溶解於有機溶劑中，使用例如鹼、適當之溶劑等，於有機溶劑之熔點以上沸點以下之溫度進行反應，藉此而合成該成為配位基之化合物。此合成步驟

可使用記載於例如 Organic Syntheses, Collective Volume VI, 407-411 頁, John Wileys & Sons, Inc., 1988 年; Chem. Rev., 第 106 卷, 2651 頁, 2006 年; Chem. Rev., 第 102 卷, 1359 頁, 2002 年; Chem. Rev., 第 95 卷, 2457 頁, 1995 年; J. Organomet. Chem., 第 576 卷, 147 頁, 1999 年等之方法。

前述雜環芳香族化合物係可依據記載於 "Houben-Weyl methods of organic chemistry 4th Edition", 第 E9b 卷, 1 頁, Georg Thieme Verlag Stuttgart; "Houben-Weyl methods of organic chemistry 4th Edition", 第 E9c 卷, 667 頁, Georg Thieme Verlag Stuttgart 等之方法而合成。

另外, 本發明之金屬錯合物亦以依據下述方法製造為較佳: 包括使前述式 (A-1) 至 (A-3) 任一者所示之化合物、與具有鹵原子或烷磺酸酯基之雜環芳香族化合物進行偶合反應的方法。

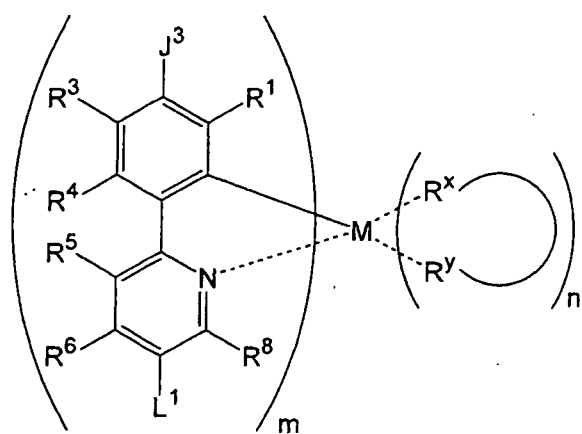
前述式 (A-1) 至 (A-3) 中, M 、 R^1 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^8 、 m 、 n 、 R^x 及 R^y 係與前述具有相同意義。 L^1 及 L^2 係與前述 R^1 所說明例示者具有相同意義。

前述偶合反應中所用之觸媒雖並無特別限定, 但以鈀觸媒為較佳。就鈀觸媒而言, 可例示如乙酸鈀、雙(三苯基膦)二氯鈀(II)、肆(三苯基膦)鈀(0)、[1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵(ferrocene)]二氯鈀(II)、參(二苯亞甲基丙酮)二鈀(0)(亦即 Tris(dibenzylideneacetone))

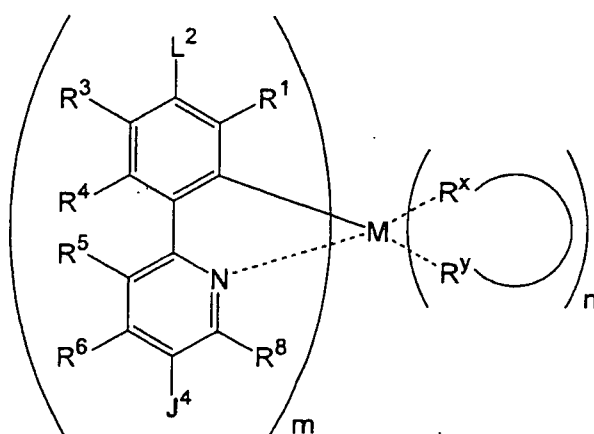
dipalladium(0))等，較佳為肆(三苯基膦)鉀(0)、[1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯鉀(II)、參(二苯亞甲基丙酮)二鉀(0)。因應需要，亦可使磷配位基存在。就前述磷配位基而言，可例示如三苯基膦、三(鄰甲苯基)膦、三(第三丁基)膦、三環己基膦、1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵等。

前述偶合反應所用之觸媒之量並無特別限定，較佳為相對於前述式(A-1)至(A-3)所示之化合物為1mol%以上，更佳為10mol%以上，特佳為30mol%以上。

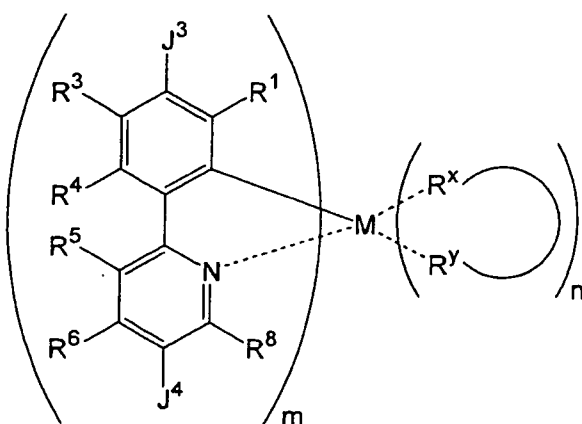
前述式(A-1)至(A-3)任一者所示之化合物，係可藉由使下述式(C-1)至(C-3)任一者所示之化合物進行硼酸化或硼酸酯化而合成：



(C-1)



(C-2)



(C-3)

(式中， M 、 R^1 、 R^3 至 R^6 、 R^8 、 L^1 、 L^2 、 R^x 、 R^y 、 m 及 n 係與前述具有相同意義； J^3 及 J^4 係各自獨立地表示鹵原子)。

另外，本發明之金屬錯合物係可藉由使前述式(C-1)至(C-3)任一者所示之化合物與雜環芳香族化合物進行鈴木(Suzuki)偶合反應、格林納(Grignard)偶合反應、史帝爾(Stille)偶合反應等而合成。

所得之金屬錯合物之鑑定、分析係可藉由CHN元素分析、NMR分析及MS分析而進行。

＜高分子化合物＞

本發明之高分子化合物(polymer compound)係含有本發明之金屬錯合物之殘基者，從導電性之觀點來看，較佳為共軛性高分子。就前述含有金屬錯合物之殘基的分子而言，可列舉例如作為後述之電荷輸送材料使用的高分子有機化合物，由於若其為共軛性高分子有機化合物，則共軛作用會變廣、載子(carrier)(電子或電洞)移動度會變高，故為較佳。

當高分子有機化合物內含有本發明之金屬錯合物時，在同一分子內具有高分子有機化合物之結構與金屬錯合物之殘基的高分子化合物係可列舉如：

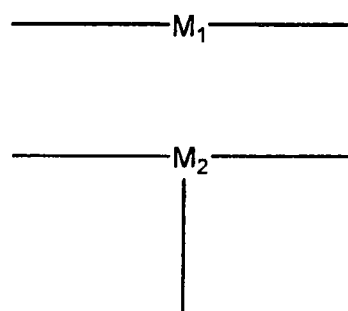
1. 於高分子有機化合物之主鏈上具有金屬錯合物之殘基的高分子化合物、
2. 於高分子有機化合物之末端上具有金屬錯合物之殘基的高分子化合物、
3. 於高分子有機化合物之側鏈上具有金屬錯合物之殘基

的高分子化合物。

當在主鏈上具有金屬錯合物之殘基時，除了組入金屬錯合物於線形高分子之主鏈上而成者以外，亦包括從金屬錯合物結合有 3 個以上高分子鏈而成者。

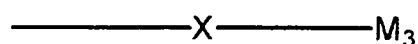
就前述高分子化合物而言，可列舉如：包含具備前述式(1)等所示之結構的金屬錯合物的殘基，且聚苯乙烯換算之數平均分子量為 1×10^3 至 1×10^8 ，並且其側鏈、主鏈或末端或是此等之 2 個以上具有前述式(1)等所示之結構的金屬錯合物的殘基者。

於高分子有機化合物之主鏈上具有金屬錯合物之殘基的高分子化合物，係例如以下述式所示：



(式中， M_1 及 M_2 表示金屬錯合物之殘基，其結合鍵具有該金屬錯合物之配位基；該 M_1 及 M_2 係藉由該結合鍵而與形成高分子主鏈之重複單位結合)。

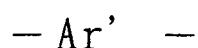
於高分子有機化合物之末端上具有金屬錯合物之殘基的高分子化合物，係例如以下述式所示：



(式中， M_3 表示金屬錯合物之 1 價殘基，其結合鍵具有該金屬錯合物之配位基；該 M_3 係藉由該結合鍵而與 X 結合；X 表示單鍵、可經取代之伸烯基、可經取代之伸炔基、可經

取代之伸芳基、或可經取代之 2 價雜環基)。

於高分子有機化合物之側鏈上具有金屬錯合物之殘基的高分子化合物，係例如以下述式所示：



該式中， Ar' 表示 2 價芳香族基，或表示具有 1 個以上從由氧原子、矽原子、鍍原子、錫原子、磷原子、硼原子、硫原子、硒原子及碲原子所成組群中選出之原子的 2 價雜環基；該 Ar' 具有 1 至 4 個以 $-\text{L}-\text{X}$ 所示之基； X 表示金屬錯合物之 1 價殘基； L 表示單鍵、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{S}(=\text{O})-$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2-$ 、 $-\text{Si}(\text{R}^{68})(\text{R}^{69})-$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{70})-$ 、 $-\text{B}(\text{R}^{71})-$ 、 $-\text{P}(\text{R}^{72})-$ 、 $-\text{P}(=\text{O})(\text{R}^{73})-$ 、可經取代之伸烷基、可經取代之伸烯基、可經取代之伸炔基、可經取代之伸芳基、或可經取代之 2 價雜環基；當該伸烷基、伸烯基、伸炔基含有一 $-\text{CH}_2-$ 基時，該伸烷基所含有之一 $-\text{CH}_2-$ 基之一個以上、該伸烯基所含有之一 $-\text{CH}_2-$ 基之一個以上、該伸炔基所含有之一 $-\text{CH}_2-$ 基之一個以上係分別亦可經從由 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})-$ 、 $-\text{C}(=\text{O})\text{O}-$ 、 $-\text{S}(=\text{O})-$ 、 $-\text{S}(=\text{O})_2-$ 、 $-\text{Si}(\text{R}^{74})(\text{R}^{75})-$ 、 $-\text{N}(\text{R}^{76})-$ 、 $-\text{B}(\text{R}^{77})-$ 、 $-\text{P}(\text{R}^{78})-$ 、 $-\text{P}(=\text{O})(\text{R}^{79})-$ 所成組群中選出之基所取代。 R^{68} 至 R^{79} 係各自獨立地表示從由氫原子、烷基、芳基、1 價雜環基及氰基所成組群中選出之基。 Ar' 除了具有一 $-\text{L}-\text{X}$ 所示之基以外，亦可具有從由烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、

取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、鹵原子、醯基、醯氧基、亞胺殘基、醯胺基、醯亞胺基、1價雜環基、羧基、取代羧基及氰基所成組群中選出之取代基。當 Ar' 具有複數之取代基時，該等可相同、亦可不同。

前述式中， R^{68} 至 R^{79} 所示之烷基、芳基、1價雜環基及氰基，以及為 Ar' 亦可具有之取代基的烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、鹵原子、醯基、醯氧基、亞胺殘基、醯胺基、醯亞胺基、1價雜環基、羧基、取代羧基及氰基，係與作為前述 R 所示之取代基所說明例示者相同。

前述式中，就2價芳香族基而言，可列舉如伸苯基、伸吡啶基(pyridinylene)、伸嘧啶基、伸萘基等。

前述式中，2價雜環基係指從雜環式化合物去除2個氫原子而殘留的原子團。2價雜環基之碳數通常為4至60左右，較佳為4至20。又，2價雜環基之碳數不包含取代基之碳數。前述雜環式化合物係與前述1價雜環基所說明例示者為相同。另外，2價雜環基較佳為2價之芳香族雜環基。

本發明之高分子化合物只要是具有本發明之金屬錯合物之殘基者即可，並無特別限定，較佳為不會大幅損害電荷輸送性或電荷注入性等者，具體而言，較佳為載子(電子或電洞)輸送性優良之共軛系高分子。

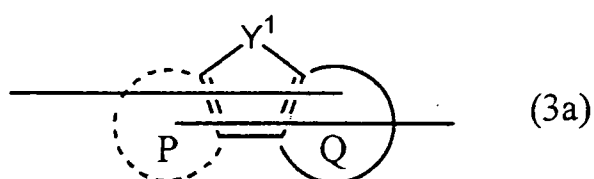
本發明之高分子化合物係以含有下述式(I)所示之基

者為較佳：



(式中，Ar 表示伸芳基、2 價雜環基、或 2 價芳香族胺基；此等基亦可具有取代基)。

前述式(I)中，就 Ar 所示之伸芳基而言，可例示如亦可具有取代基之伸苯基、亦可具有取代基之伸萘基、或以下述式(3a)所示之基：



(式中，P 環及 Q 環係各自獨立地表示芳香環，但 P 環可存在、亦可不存在；當 P 環存在時，2 支結合鍵係分別存在於 P 環或 Q 環上；當 P 環不存在時，2 支結合鍵係分別存在於含有 Y^1 之 5 員環或 6 員環、或是 Q 環上。P 環、Q 環、及含有 Y^1 之 5 員環或 6 員環係各自獨立地亦可具有從由烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、鹵原子、醯基、醯氧基、亞胺殘基、醯胺基、醯亞胺基、1 價雜環基、羧基、取代羧基及氰基所成組群中選出之至少 1 種取代基。 Y^1 係表示 $-\text{C}(\text{R}^{11})(\text{R}^{12})-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^{14})(\text{R}^{15})-\text{C}(\text{R}^{16})(\text{R}^{17})-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^{32})=\text{C}(\text{R}^{33})-$ 。 R^{11} 、 R^{12} 、 R^{14} 至 R^{17} 、 R^{32} 及 R^{33} 係各自獨立地表示氫原子、烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、

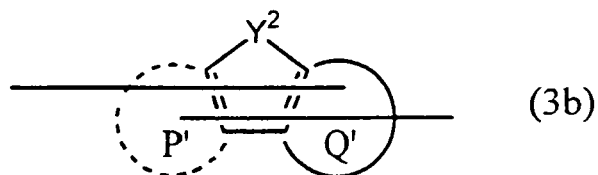
矽烷基、取代矽烷基、矽烷氧基、取代矽烷氧基、1 價雜環基或鹵原子)。

前述式(I)中，作為 P 環、Q 環及含有 Y^1 之 5 員環或 6 員環所亦可具有之取代基的烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、鹵原子、鹽基、鹽氧基、亞胺殘基、鹽胺基、鹽亞胺基、1 價雜環基、羧基、取代羧基及氰基，係與作為前述 R 所示之基所說明例示者相同。

前述式(I)中， R^{11} 、 R^{12} 、 R^{14} 至 R^{17} 、 R^{32} 及 R^{33} 所示之烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、矽烷氧基、取代矽烷氧基、1 價雜環基及鹵原子，係與作為前述 R 所示之基所說明例示者相同。

前述式(I)中，Ar 所示之 2 價雜環基係指從雜環式化合物去除 2 個氫原子而殘留之原子團，該基亦可具有取代基。前述雜環式化合物係指在具有環狀結構之有機化合物中，構成環之元素不僅為碳原子，亦於環內含有從由氧原子、氮原子、矽原子、鍺原子、錫原子、磷原子、硼原子、硫原子、硒原子及碲原子所成組群中選出之 1 種以上之原子者。另外，2 價雜環基較佳為 2 價之芳香族雜環基。2 價雜環基去除取代基之部分的碳數通常為 3 至 60 左右。2 價雜環基包含取代基之全部碳數通常為 3 至 100 左右。

前述式(I)中，就 Ar 所示之 2 價雜環基而言，可例示如以下述式(3b)所示之基：



(式中，P' 環及 Q' 環係各自獨立地表示芳香環，但 P' 環可存在、亦可不存在；當 P' 環存在時，2 支結合鍵係分別存在於 P' 環或 Q' 環上；當 P' 環不存在時，2 支結合鍵係分別存在於含有 Y² 之 5 員環或 6 員環、或是 Q' 環上。P' 環、Q' 環、及含有 Y² 之 5 員環或 6 員環係各自獨立地亦可具有從由烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、鹵原子、醯基、醯氧基、亞胺殘基、醯胺基、醯亞胺基、1 價雜環基、羧基、取代羧基及氰基所成組群中選出之至少 1 種取代基。Y² 係表示 —O—、—S—、—Se—、—B(R⁶)—、—Si(R⁷)(R⁸)—、—P(R⁹)—、—P R¹⁰(=O)—、—N(R¹³)—、—O—C(R¹⁸)(R¹⁹)—、—S—C(R²⁰)(R²¹)—、—N—C(R²²)(R²³)—、—Si(R²⁴)(R²⁵)—C(R²⁶)(R²⁷)—、—Si(R²⁸)(R²⁹)—Si(R³⁰)(R³¹)—、—N=C(R³⁴)—或 —Si(R³⁵)=C(R³⁶)—。R⁶ 至 R¹⁰、R¹³、R¹⁸ 至 R³¹、及 R³⁴ 至 R³⁶ 係各自獨立地表示氫原子、烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、矽烷基、矽烷氧基、取代矽烷氧基、1 價雜環基或鹵原子)。

例示如以下述式(7)所示之基：



(式中， Ar_6 、 Ar_7 、 Ar_8 及 Ar_9 係各自獨立地表示伸芳基或2價雜環基； Ar_{10} 、 Ar_{11} 及 Ar_{12} 係各自獨立地表示芳基或1價雜環基； Ar_6 至 Ar_{12} 亦可具有取代基； x 及 y 係各自獨立地為0或1，且 $0 \leq x + y \leq 1$)。

前述式(7)中， Ar_6 至 Ar_9 所示之伸芳基係指從芳香族烴去除2個氫原子而殘留之原子團，且亦包括具有縮合環者、由2個以上獨立之苯環或縮合環直接或隔介伸乙烯基等基而結合者。伸芳基亦可具有取代基。將伸芳基中之取代基去除之部分之碳數通常為6至60左右，較佳為6至20。伸芳基包含取代基之全部碳數通常為6至100左右。

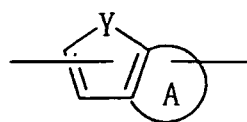
前述式(7)中， Ar_6 至 Ar_9 所示之2價雜環基，係與作為前述 Ar 所示之2價雜環基所說明例示者相同。

前述式(7)中， Ar_{10} 至 Ar_{12} 所示之芳基及1價雜環基，係與作為前述 R 所示之芳基及1價雜環基所說明例示者相同。

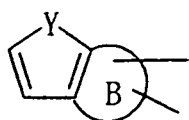
前述式(7)中，伸芳基、2價雜環基、芳基及1價雜環基所亦可具有之取代基，可列舉如烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、鹵原子、醯基、醯氧基、亞胺殘基、醯胺基、醯亞胺基、1價雜環基、羧基、取代羧基、氰基及硝基。具體而言，此等取代基係與作為構成本發明金屬錯合物之配位基所亦可具有之取代基所說明例示者相同。

就前述式(3a)、前述式(3b)所示之基而言，可列舉如

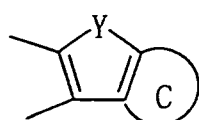
下述式(3-1)、下述式(3-2)或下述式(3-3)所示之基：



式 (3-1)



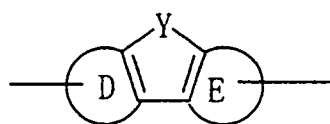
式 (3-2)



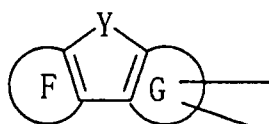
式 (3-3)

(式中，A 環、B 環及 C 環係各自獨立地表示芳香環；式(3-1)、式(3-2)及式(3-3)係各自亦可具有從由烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、鹵原子、醯基、醯氧基、亞胺殘基、醯胺基、醯亞胺基、1 價雜環基、羧基、取代羧基及氰基所成組群中選出之 1 個以上之取代基；Y 係表示與前述 Y^1 或 Y^2 相同之意義)；

下述式(3-4)或下述式(3-5)所示之基：



式 (3-4)



式 (3-5)

(式中，D 環、E 環、F 環及 G 環係各自獨立地表示亦可具有從由烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、鹵原子、醯基、醯氧基、亞胺殘基、醯胺基、醯亞胺基、1 價雜環基、羧基、取代羧基及氰基所成組群中選出之 1 個以上之取代基的芳香環；Y 係表示與前述相同之意義)；

其中，又以前述式(3-4)或前述式(3-5)所示之基為較佳。

前述式中，若 Y 為 $-S-$ 、 $-O-$ 、 $-C(R^{11})(R^{12})-$ ，則從高發光效率之觀點來看為較佳，更佳為 $-S-$ 、 $-O-$ 。在此， R^{11} 、 R^{12} 係表示與前述相同之意義。

前述式(3-1)至(3-5)中之芳香環，可列舉如苯環、萘環、蒽環、稠四苯環、稠五苯環、芘環、菲(phenanthrene)環等芳香族烴環；吡啶環、聯吡啶環、啡啉(phenanthroline)環、喹啉環、異喹啉環、噻吩環、呋喃環、吡咯環等雜芳香環。

前述式(3-1)至(3-5)所示之基亦可具有之取代基，較佳為烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、醯氧基、亞胺殘基、醯胺基、醯亞胺基、1價雜環基、羧基、或取代羧基。

<組成物>

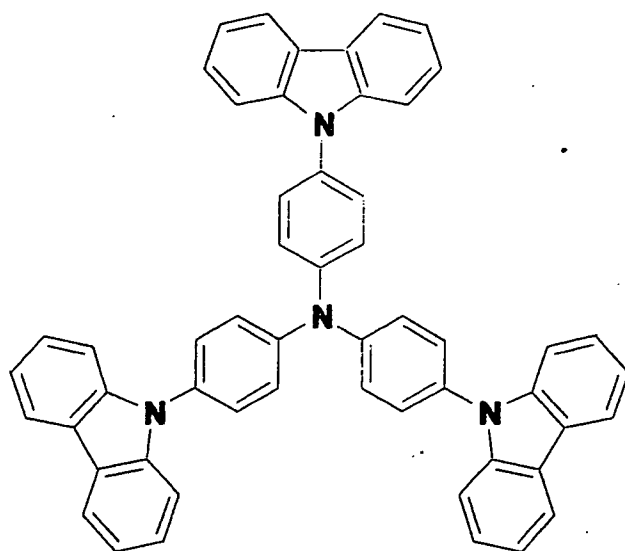
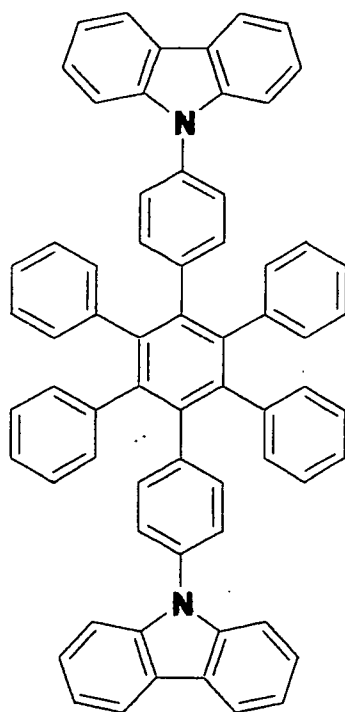
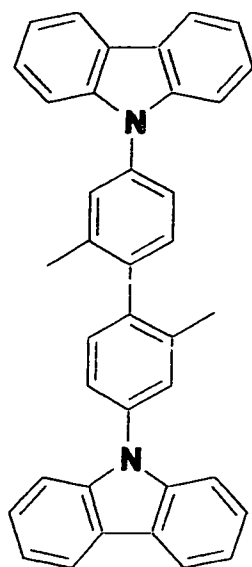
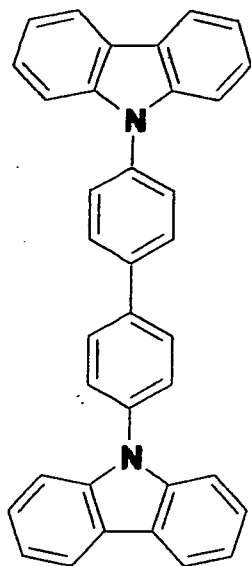
本發明之組成物係含有前述金屬錯合物及/或高分子化合物，較佳為復含有電荷輸送材料及/或發光材料者。

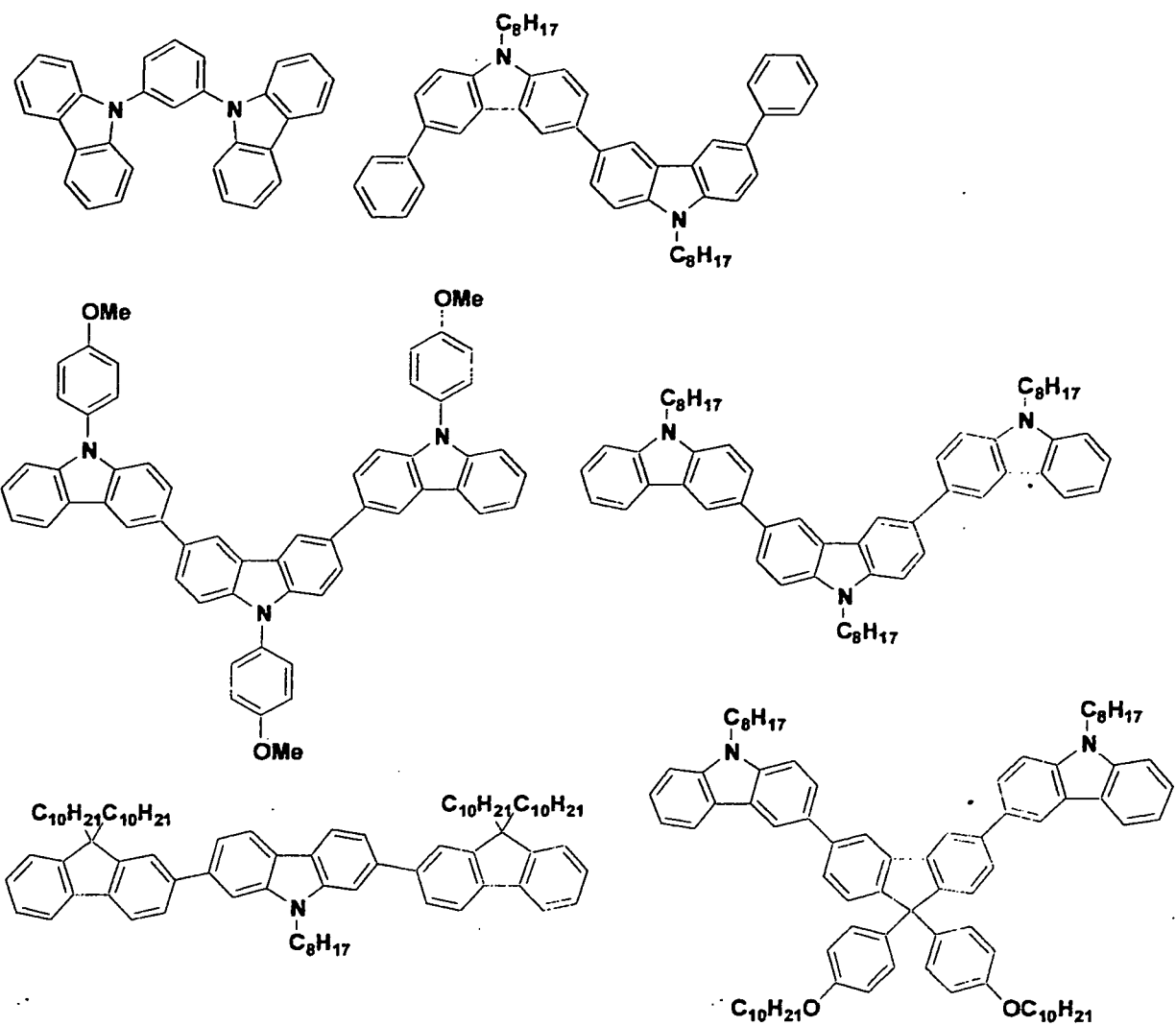
前述電荷輸送材料係分類為電洞輸送材料與電子輸送材料，具體而言，可使用有機化合物(低分子有機化合物及/或高分子有機化合物)。

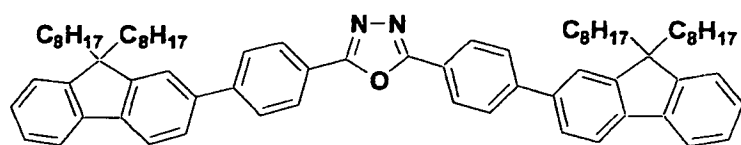
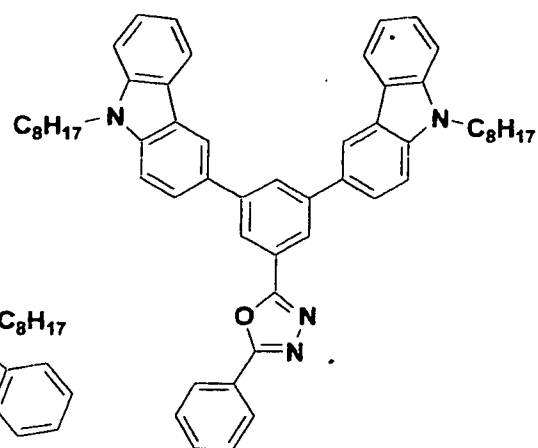
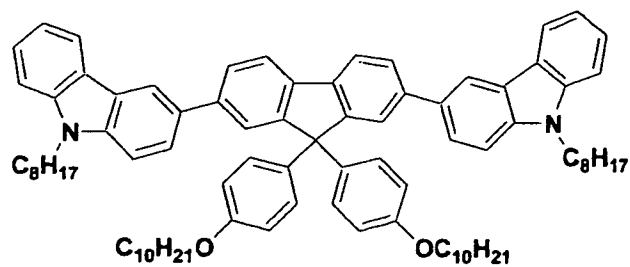
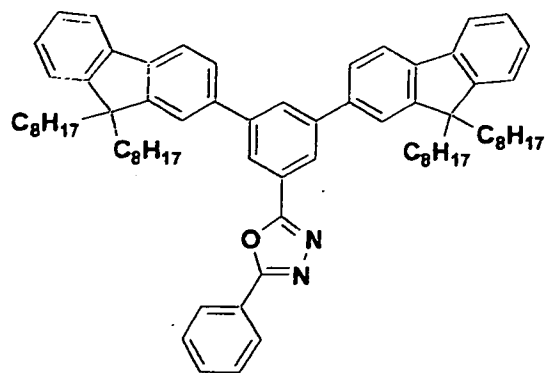
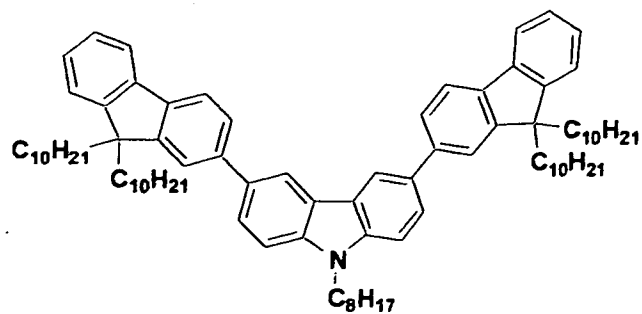
前述電洞輸送材料係可列舉如芳香族胺、咪唑衍生物、聚對苯(poly-p-phenylene)衍生物等作為有機 EL 元件之電洞輸送材料而公知者。前述電子輸送材料係可列舉如作為於有機 EL 元件中作為電子輸送材料而公知者，例如噁二唑衍生物、蒽醌二甲烷(anthraquinodimethane)及其衍

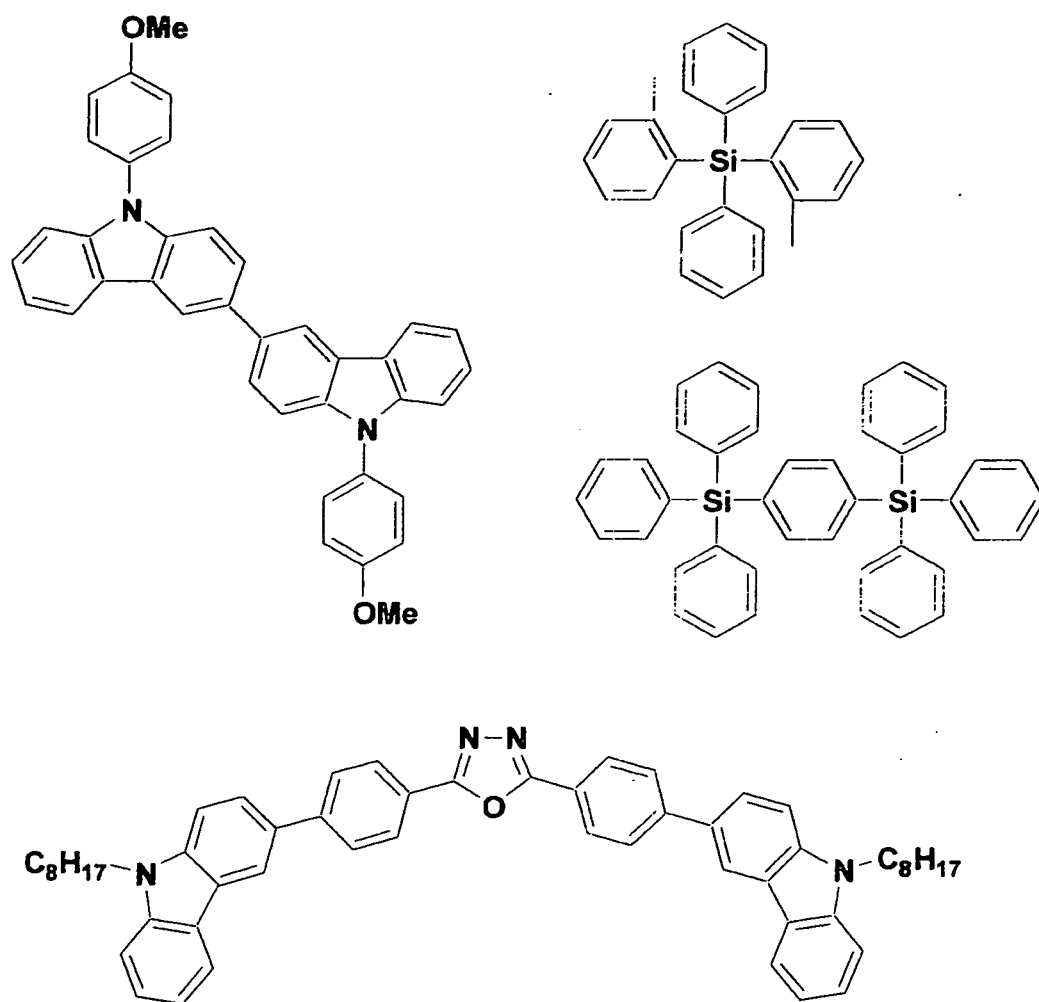
生物、苯醌(Benzoquinone)及其衍生物、萘醌及其衍生物、蒽醌及其衍生物、四氫基蒽醌二甲烷及其衍生物、蒾酮衍生物、二苯基二氫基乙烯及其衍生物、聯苯醌(Diphenoquinone)及其衍生物、8-羥基喹啉及其衍生物之金屬錯合物。前述電荷輸送材料之低分子有機化合物係指低分子有機 EL 元件所使用之主體(host)化合物、電荷注入輸送材料，具體而言，可列舉如「有機 EL 顯示器」(時任靜士、安達千波矢、村田英幸共著，Ohm 公司)107 頁、月刊顯示器(vol.9, No.9, 2003 年 26 至 30 頁)、日本特開 2004-244400 號公報、日本特開 2004-277377 號公報等所記載之化合物。依此等電荷輸送材料之種類而有所不同，但一般而言，為了獲得從金屬錯合物發出的良好發光，此等電荷輸送材料之最低三重激發態能量較佳為大於金屬錯合物之最低三重激發態能量。

前述電荷輸送材料之低分子有機化合物，可列舉如下述化合物：





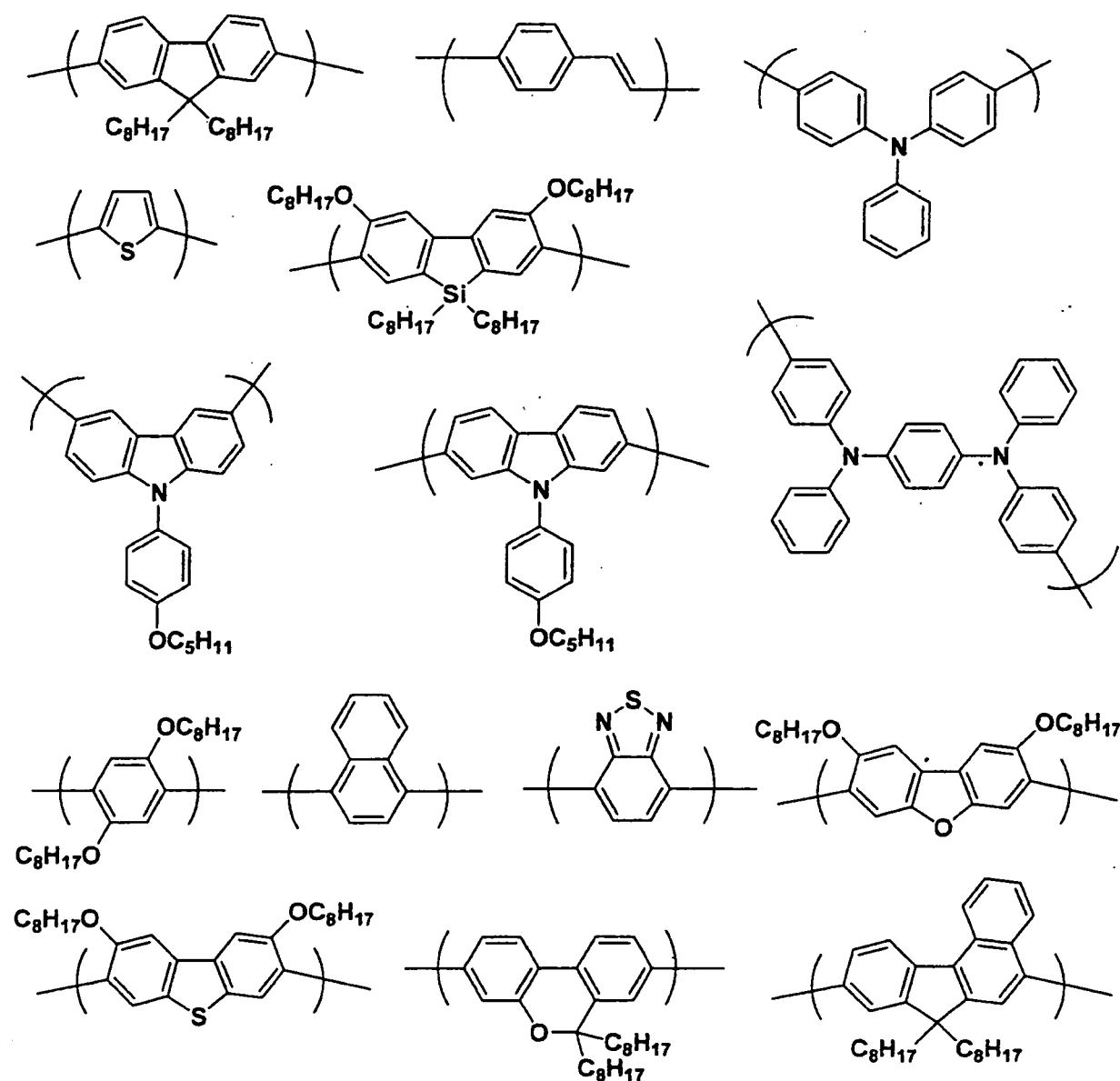




前述電荷輸送材料之高分子有機化合物，可列舉如非共軛系高分子、共軛系高分子。非共軛系高分子可列舉如聚乙炔基吡啶等。共軛系高分子係以在主鏈上含有芳香環之聚合物為例，可列舉例如：於主鏈中包含亦可具有取代基之伸苯基、亦可具有取代基之萘、亦可具有取代基之二苯并噻吩、亦可具有取代基之二苯并呋喃、亦可具有取代基之二苯并矽呢(dibenzosilole)等作為重複單元者；或是與該等單元之共聚物。具體而言，可列舉如一種高分子化合物，其特徵為具備亦可具有取代基之苯環作為部分結構。更具體而言，可列舉例如日本特開 2003-231741 號公報、日本特開 2004-059899 號公報、日本特開 2004-002654

號公報、日本特開 2004-292546 號公報、US5708130、
W099/54385、W000/46321、W002/077060、「有機 EL 顯示器」
(時任靜士、安達千波矢、村田英幸共著，Ohm 公司)111
頁、月刊顯示器(vol.9, No.9, 2002 年)47 至 51 頁等所記
載之高分子。

前述電荷輸送材料之高分子有機化合物，除此之外亦
可列舉如含有前述式(3a)或(3b)所示之重複單元的高分
子，例如可列舉如含有下述基(亦即，在下述例示中除去括
號者)者、含有下述結構作為重複單元者：



前述電荷輸送材料之低分子有機化合物或高分子有機化合物之最低三重激發態能量(TH)係以與金屬錯合物之最低三重激發態能量(TM)滿足下述式之關係為較佳：

$$TH > TM - 0.2(\text{eV})$$

當使用前述電荷輸送材料之高分子有機化合物時，該高分子有機化合物之聚苯乙烯換算之數平均分子量較佳為 10^3 至 10^8 ，更佳為 10^4 至 10^6 。另外，該高分子有機化合物之聚苯乙烯換算之重量平均分子量較佳為 10^3 至 10^8 ，更佳為 5×10^4 至 5×10^6 。

前述發光材料可使用公知者，可列舉如萘衍生物、蒽及其衍生物、茈及其衍生物、聚次甲基(polymethine)系、氧雜蒽(xanthene)系、香豆素系、花菁(cyanine)系等色素類；8-羥基喹啉及其衍生物之金屬錯合物、芳香族胺、四苯基環戊二烯及其衍生物、四苯基丁二烯及其衍生物等低分子發光材料等。

本發明之組成物中的本發明之金屬錯合物之調配量，由於係依組合之有機化合物種類或想要改善之特性而有所不同，故無特別限定，但若將本發明之組成物之全體量設為 100 重量份時，則通常本發明之金屬錯合物之調配量為 0.01 至 80 重量份，較佳為 0.1 至 60 重量份。前述金屬錯合物可單獨使用 1 種，亦可併用 2 種以上。

< 元件 >

本發明之元件係含有本發明之金屬錯合物及/或本發明之高分子化合物者，其具有：由例如陽極與陰極所構成

的電極、以及設置於該電極間並含有本發明之金屬錯合物及/或本發明之高分子化合物的層。以下，就其代表性之例而言，針對本發明之元件為發光元件時之情形加以說明。

本發明之發光元件係以下述者所構成者：由陽極及陰極所構成的一對電極、以及於該電極間所挾持之至少具有發光層之由一層(單層型)或複數層(多層型)所構成之薄膜。該薄膜層之至少一層含有本發明之金屬錯合物及/或本發明之高分子化合物。相對於發光層整體之重量，前述薄膜中之本發明之金屬錯合物及/或本發明之高分子化合物的合計含量通常為 0.1 至 100 重量%，較佳為 0.1 至 30 重量%，更佳為 0.5 至 15 重量%，特佳為 1 至 10 重量%。本發明之發光元件係以前述發光層含有本發明之金屬錯合物及/或本發明之高分子化合物作為發光材料為較佳。

當本發明之發光元件為前述單層型時，前述薄膜為發光層，此發光層含有本發明之金屬錯合物。另外，當本發明之發光元件為多層型時，例如可採取如下之層構成：

- (a)陽極/電洞注入層(電洞輸送層)/發光層/陰極、
- (b)陽極/發光層/電子注入層(電子輸送層)/陰極、
- (c)陽極/電洞注入層(電洞輸送層)/發光層/電子注入層(電子輸送層)/陰極。

本發明之發光元件之陽極係為將電洞供給至電洞注入層、電洞輸送層、發光層等者，若具有 4.5eV 以上之功函數則為有效。陽極之材料可使用金屬、合金、金屬氧化物、導電性化合物、此等之混合物等。具體而言，可列舉如氧

化錫、氧化鋅、氧化銦、氧化銦錫(ITO)等導電性金屬氧化物；金、銀、鉻、鎳等金屬；此等導電性金屬氧化物與金屬之混合物或積層物；碘化銅、硫化銅等無機導電性物質；聚苯胺類、聚噻吩類(如 PEDOT 等)、聚吡咯等有機導電性材料；此等與 ITO 之積層物等。

本發明之發光元件之陰極係為將電子供給至電子注入層、電子輸送層、發光層等者。陰極之材料可使用金屬、合金、金屬鹵化物、金屬氧化物、導電性化合物、或此等之混合物。陰極之材料之具體例可列舉如鹼金屬(鋰、鈉、鉀等)以及其氟化物及氧化物；鹼土金屬(鎂、鈣、鋇、鉍等)以及其氟化物及氧化物；金、銀、鉛、鋁、合金及混合金屬類(鈉-鉀合金、鈉-鉀混合金屬、鋰-鋁合金、鋰-鋁混合金屬、鎂-銀合金、鎂-銀混合金屬等)；稀土金屬(銦、鐿等)等。

本發明之發光元件之電洞注入層及電洞輸送層，只要是具有下述任一機能者即可：從陽極注入電洞之機能、輸送電洞之機能、將從陰極注入之電子予以阻隔之機能。此等層之材料可適當選擇公知之材料而使用，就其具體例而言，可列舉如呋唑衍生物、三唑衍生物、噁唑衍生物、噁二唑衍生物、咪唑衍生物、聚芳基烷烴衍生物、吡唑啉衍生物、吡唑啉酮衍生物、苯二胺衍生物、芳基胺衍生物、胺基取代查耳酮(chalcone)衍生物、苯乙烯基蒽衍生物、萘酮衍生物、肼(hydrazone)衍生物、二苯乙烯衍生物、矽氮烷(silazane)衍生物、芳香族三級胺化合物、苯乙烯基

胺化合物、芳香族二次甲基(dimethylidyne)系化合物、卟啉(porphyrin)系化合物、聚矽烷系化合物、聚(N-乙基吡啶)衍生物、有機矽烷衍生物、本發明之金屬錯合物等、含有此等之聚合物等。除此之外，亦可列舉如苯胺系共聚物、噻吩寡聚物、聚噻吩等導電性高分子寡聚物。此等材料可單獨使用 1 種，亦可併用複數種。另外，前述電洞注入層及電洞輸送層係可為由前述材料之 1 種或 2 種以上所構成的單層結構，亦可為由單一組成或不同種組成之複數層所構成的多層結構。

本發明之發光元件之電子注入層及電子輸送層，只要是具有下述任一機能者即可：從陰極注入電子之機能、輸送電子之機能、將從陽極注入之電洞予以阻隔之機能。可適當選擇公知之材料而使用，就其具體例而言，可列舉如三唑衍生物、噁唑衍生物、噁二唑衍生物、咪唑衍生物、萘酮衍生物、蔥醌二甲烷衍生物、蔥酮衍生物、聯苯醌衍生物、二氧化噻喃衍生物、碳二亞胺衍生物、亞萘基甲烷衍生物、二(苯乙基)吡啶衍生物、萘、茈等之芳香環四羧酸酐、酞花菁(phthalocyanine)衍生物、8-喹啉醇衍生物之金屬錯合物或金屬酞花菁、將苯并噁唑或苯并噻唑作為配位基之金屬錯合物所代表之各種金屬錯合物、有機矽烷衍生物、本發明之金屬錯合物化合物等。另外，前述電子注入層及電子輸送層係可為由前述材料之 1 種或 2 種以上所構成的單層結構，亦可為由單一組成或不同種組成之複數層所構成的多層結構。

此外，在本發明之發光元件中，電子注入層、電子輸送層之材料亦可使用絕緣體或半導體之無機化合物。若電子注入層、電子輸送層係由絕緣體或半導體所構成，則可有效防止電流之洩漏，而可提升電子注入性。就如此之絕緣體而言，可使用從由鹼金屬硫屬化物、鹼土金屬硫屬化物、鹼金屬鹵化物及鹼土金屬鹵化物所成組群中選出之至少 1 種金屬化合物。較佳之鹼金屬硫屬化物之具體例可列舉如 CaO 、 BaO 、 SrO 、 BeO 、 BaS 、 CaSe 。另外，構成電子注入層、電子輸送層之半導體係可列舉如含有從由 Ba、Ca、Sr、Yb、Al、Ga、In、Li、Na、Cd、Mg、Si、Ta、Sb 及 Zn 所成組群中選出之至少 1 種元素的氧化物、氮化物、或氮氧化物等。此等氧化物、氮化物、或氮氧化物可單獨使用 1 種，亦可併用 2 種以上。

在本發明中，於陰極與相接之薄膜的界面區域中亦可添加還原性摻雜劑。就還原性摻雜劑而言，較佳為從由鹼金屬、鹼土金屬之氧化物、鹼土金屬、稀土金屬、鹼金屬之氧化物、鹼金屬之鹵化物、鹼土金屬之氧化物、鹼土金屬之鹵化物、稀土金屬之氧化物、稀土金屬之鹵化物、鹼金屬錯合物、鹼土金屬錯合物及稀土金屬錯合物所成組群中選出之至少 1 種化合物。

本發明之發光元件之發光層係具有下述機能：當外加電壓時，可從陽極或電洞注入層將電洞予以注入，並可從陰極或電子注入層將電子予以注入的機能；以電場之力使經注入之電荷（電子或電洞）移動的機能；提供電子與電洞

再結合之場所，並使其與發光相關的機能。本發明之發光元件之發光層較佳為至少含有本發明之金屬錯合物及/或本發明之高分子化合物，亦可含有以該金屬錯合物及/或該高分子化合物作為客體(guest)材料的主體材料。前述主體材料可列舉如具有萸骨架者、具有呋唑骨架者、具有二芳基胺骨架者、具有吡啶骨架者、具有吡嗪骨架者、具有三吡嗪骨架者、具有芳基矽烷骨架者等。前述主體材料之 T1(最低三重激發態之能階)較佳為大於客體材料之 T1，以其差大於 0.2eV 為更佳。前述主體材料可為低分子化合物，亦可為高分子化合物。另外，藉由將前述主體材料與前述金屬錯合物等發光材料予以混合並塗佈、或共蒸鍍等而可形成由前述主體材料中摻雜有前述發光材料而成之發光層。

在本發明之發光元件中，前述各層之形成方法並無特別限定，可使用公知之方法。具體而言，可列舉如真空蒸鍍法(電阻加熱蒸鍍法、電子束法等)、濺鍍法、LB 法、分子積層法、塗佈法(澆鑄法、旋塗法、棒塗法、刮刀塗法、輥塗法、凹版印刷、網版印刷、噴墨法等)等。在此等之中，從使製作步驟簡略化之觀點來看，較佳為以塗佈來成膜。在前述塗佈法中，可將本發明之金屬錯合物及/或本發明之高分子化合物溶解於溶劑中以調製塗佈液，藉由將該塗佈液塗佈及/或乾燥於所期望之層(或電極)上而予以形成。在該塗佈液中亦可含有樹脂作為主體材料及/或黏合劑，可使該樹脂於溶劑中為溶解狀態，亦可為分散狀態。就前述樹脂而言，可使用非共軛系高分子(例如聚乙烯基呋唑)、共

軛系高分子(例如聚烯烴系高分子)。更具體而言，可因應目的而選自聚氯乙烯、聚碳酸酯、聚苯乙烯、聚甲基丙烯酸甲酯、聚甲基丙烯酸丁酯、聚酯、聚砜、聚苯醚(poly(phenylene oxide))、聚丁二烯、聚(N-乙烯基吡啶)、烴樹脂、酮樹脂、苯氧基樹脂、聚醯胺、乙基纖維素、乙酸乙烯酯、ABS樹脂、聚胺酯、三聚氰胺樹脂、不飽和聚酯樹脂、醇酸樹脂、環氧樹脂、矽氧樹脂等。溶液係因應目的而亦可含有抗氧化劑、黏度調整劑等作為任意成分。

— 光電元件 —

本發明之金屬錯合物、高分子化合物係可使用於製造光電元件。

就光電元件而言，有例如光電轉換元件，具體而言，可列舉如：由在至少一方為透明或半透明之二個電極間設置含有本發明之金屬錯合物及/或本發明之高分子化合物的層而成的元件；或是具有將含有本發明之金屬錯合物及/或本發明之高分子化合物的層予以製膜於基板上並於該層上形成之櫛型電極的元件。為了提升特性，亦可混合富勒烯(fullerene)或碳奈米管等。

就光電轉換元件之製造方法而言，可例示如日本專利第 3146296 號公報所記載之方法。具體而言，可例示如在具有第一電極之基板上形成含有本發明之金屬錯合物及/或本發明之高分子化合物的層(薄膜)並於該層上形成第二電極的方法、在形成於基板上之一組之櫛型電極上形成含有本發明之金屬錯合物及/或本發明之高分子化合物的層

- (薄膜)的方法。第一電極或第二電極中，有一方為透明或半透明。

關於該含有本發明之金屬錯合物及/或本發明之高分子化合物的層的形成方法、或是將富勒烯或碳奈米管予以混合的方法，並無特別限制，但以發光元件所例示者為較適用。

<液狀組成物>

本發明之液狀組成物係由含有本發明之金屬錯合物及/或本發明之高分子化合物、與溶劑或分散媒而成者。本發明之液狀組成物所用之溶劑、分散媒，可從公知之溶劑中適當選擇能使薄膜之成分均一地溶解或分散且為安定者。如此之溶劑係可列舉如氯系溶劑(氯仿、二氯甲烷、1,2-二氯乙烷、1,1,2-三氯乙烷、氯苯、鄰二氯苯等)、醚系溶劑(四氫呋喃、二噁烷等)、芳香族烴系溶劑(苯、甲苯、二甲苯等)、脂肪族烴系溶劑(環己烷、甲基環己烷、正戊烷、正己烷、正庚烷、正辛烷、正壬烷、正癸烷等)、酮系溶劑(丙酮、甲基乙基酮、環己酮等)、酯系溶劑(乙酸乙酯、乙酸丁酯、乙酸乙賽璐蘇(ethyl cellosolve acetate)等)、多元醇及其衍生物(乙二醇、乙二醇單丁基醚、乙二醇單乙基醚、乙二醇單甲基醚、二甲氧基乙烷、丙二醇、二乙氧基甲烷、三乙二醇單乙基醚、甘油、1,2-己二醇等)、醇系溶劑(甲醇、乙醇、丙醇、異丙醇、環己醇等)、亞砜(sulfoxide)系溶劑(二甲基亞砜等)、鹽胺系溶劑(N-甲基-2-吡咯啉酮、N,N-二甲基甲鹽胺等)等。此等溶劑可單獨

使用 1 種，亦可併用 2 種以上。

將前述液狀組成物適用於噴墨法時，為了使該液狀組成物之吐出性及其重現性更為良好，該液狀組成物亦可含有公知之添加劑。為了抑制從噴嘴之蒸發，此公知之添加劑可列舉如高沸點之溶劑(苯甲醚、雙環己基苯等)等。然後，含有此公知添加劑而成之液狀組成物，係以在 25 時之黏度為 1 至 100mPa·s 為較佳。

本發明之發光元件之各層較佳膜厚係依材料之種類或層構成而有所不同，並無特別限定，但一般若膜厚太薄則容易產生針孔等缺陷，相反地，若太厚則會需要較高之外加電壓而使發光效率變差，故通常以數 nm 至 1 μ m 為較佳。

本發明之發光元件之用途係並無特別限制，可列舉如面狀光源、照明用光源(或是光源)、標誌用光源、背光用光源、顯示裝置、列印頭等。前述顯示裝置係使用公知之驅動技術、驅動電路等而可選擇區段型、點矩陣型等之構成。

< 其他之用途 >

本發明之金屬錯合物、本發明之高分子化合物不僅是有用於製作元件，亦可使用作為例如有機半導體材料等半導體材料、發光材料、光學材料、導電性材料(例如藉由摻雜而適用)等。因此，使用該金屬錯合物、該高分子化合物，可製作發光性膜、導電性膜、有機半導體膜等膜(亦即，含有前述金屬錯合物及/或前述高分子化合物之膜)。

本發明之金屬錯合物、本發明之高分子化合物可依據

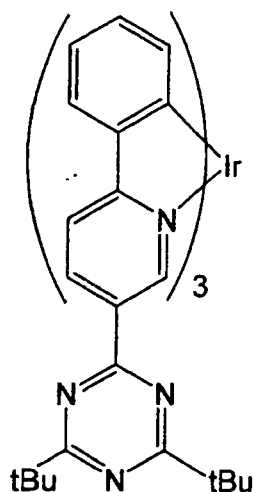
與前述發光元件之發光層所用之發光性膜之製作方法相同的方法，而將導電性薄膜及半導體薄膜予以製膜、元件化。半導體薄膜係以電子移動度或電洞移動度較大之一方為 $10^{-5} \text{cm}^2/\text{V}$ 秒以上為更佳。另外，有機半導體膜可利用於有機太陽電池、有機電晶體等。

(實施例)

以下，為了更加詳細說明本發明而表示實施例，但本發明不受此等所限定。

< 實施例 1 > (金屬錯合物 (MC-1) 之合成)

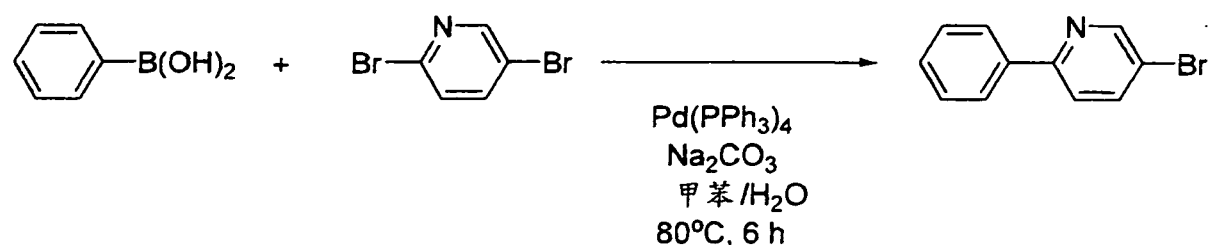
調製金屬錯合物 (MC-1) 與有機溶劑之溶液，測定其光致發光，可觀測到發光。



(MC-1)

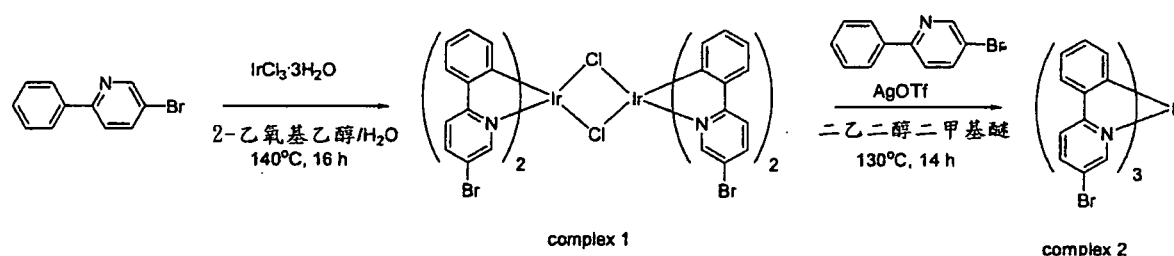
< 實施例 2 > (金屬錯合物 (MC-2) 之合成)

5-溴-2-苯基吡啶之合成



在反應容器中，量取 2,5-二溴吡啶(7.11g, 30mmol)、甲苯(130mL)、苯基硼酸(4.57g, 37.5mmol)以及肆(三苯基膦)鈀(0)(1.73g, 1.5mmol)，於氮氣氣流下、50°C 中一邊攪拌一邊使反應物溶解。於其中添加 2M 碳酸鈉水溶液(30mL)，於 80°C 攪拌 6 小時。將所得之反應溶液之有機層回收，以碳酸鈉水溶液及飽和食鹽水洗淨。將有機層以硫酸鈉乾燥，過濾後再蒸餾去除。將此殘渣以矽膠管柱層析(己烷/甲苯)精製，蒸餾去除溶劑，而獲得 5-溴-2-苯基吡啶(6.21g, 26.5mmol)。

金屬錯合物(complex 1 及 complex 2)之合成



在反應容器中，量取 5-溴-2-苯基吡啶(7.39g, 30mmol)、氯化銦三水合物(4.76g, 13.5mmol)、2-乙氧基乙醇(58mL)、以及水(19mL)，於氮氣氣流下、140°C 中加熱 16 小時。經空氣冷卻後，濾出所得之反應混合物，依序以水、甲醇、己烷洗淨，藉此而獲得黃色固體之以上述式所示之金屬錯合物(complex 1)(9.10g, 6.58mmol)。

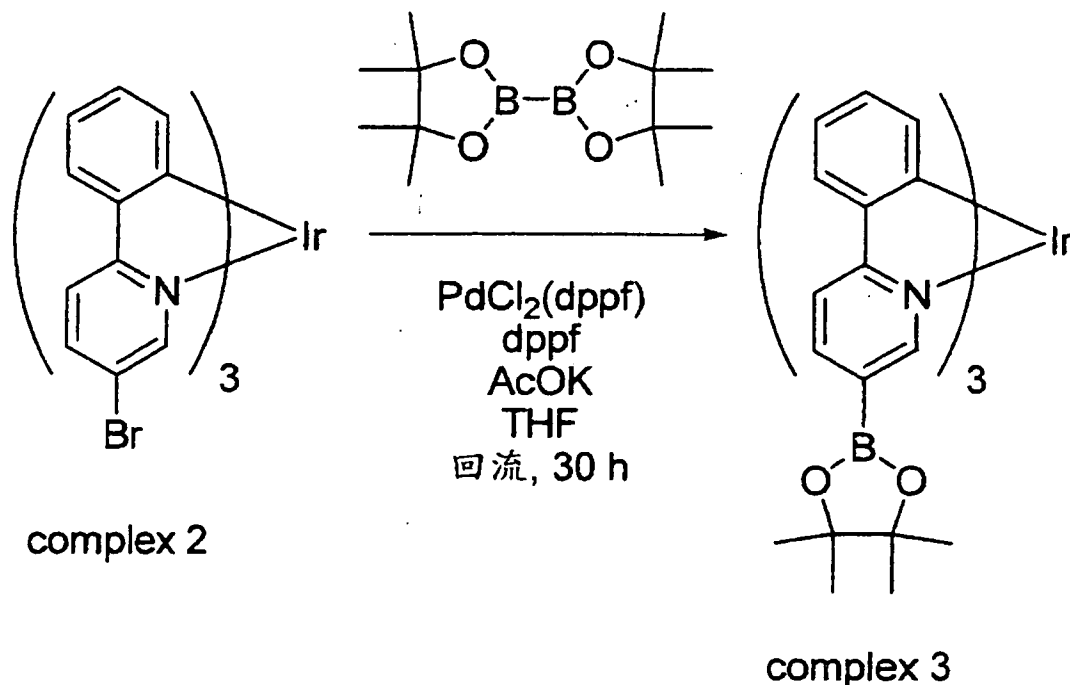
在反應容器中，量取金屬錯合物(complex 1)(6.94g, 5.0mmol)、5-溴-2-苯基吡啶(7.32g, 30.0mmol)以及二乙二醇二甲基醚(Diglyme)(43mL)，並添加三氟甲磺酸銀(2.57g, 10.0mmol)，於 130°C 攪拌 14 小時。濾出所得之反應物，將固體溶解於二氯甲烷(1.3L)。過濾此溶液，將濾液濃縮至約 150mL 左右。將析出之固體濾出回收，並以己烷洗淨，藉此而獲得以上述式所示之金屬錯合物(complex 2)(6.35g, 7.1mmol)。

LC-MS(正離子) m/z : 890($[M+H]^+$)

^1H NMR (300 MHz, $\text{DMSO}-d_6$)

δ 6.51 (d, $J = 7.8$ Hz, 3 H), δ 6.72 (m, 3 H), δ 6.84 (m, 3 H), δ 7.66 (d, $J = 2.0$ Hz, 3 H), δ 7.80 (d, $J = 7.8$ Hz, 3 H), δ 8.05 (dd, $J = 2.0, 8.8$ Hz, 3 H), δ 8.14 (d, $J = 8.8$ Hz, 3 H)

金屬錯合物(complex 3)之合成



在氮氣氣流下，於反應容器中，量取金屬錯合物(complex 2)(3.27g, 3.7mmol)、乙酸鉀(3.27g, 33.3mmol)、雙(頻哪醇)二硼

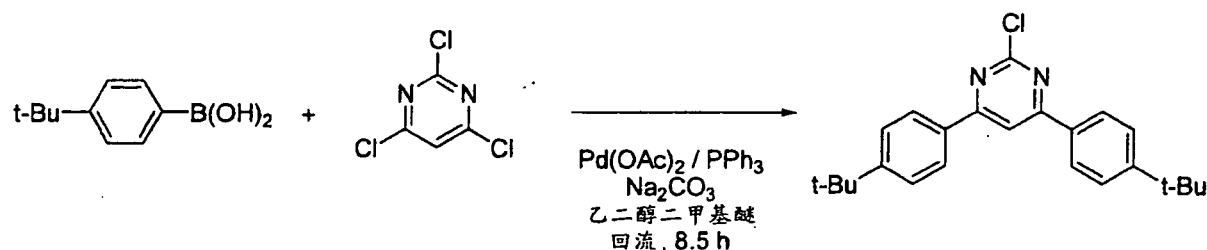
(Bis(pinacolato)diboron)(3.38g, 13.3mmol)、1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵(245mg, 0.44mmol)、[1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯鈹(II)(361mg, 0.44mmol)、以及四氫呋喃(400mL)，回流 30 小時。濃縮所得之反應溶液，添加二氯甲烷(150mL)並溶解後，進行過濾。將此濾液以矽膠層析(二氯甲烷)精製，蒸餾去除溶劑，並將殘渣以二乙基醚洗淨，藉此而獲得以上述式所示之金屬錯合物 (complex 3)(2.55g, 2.47mmol)。

LC-MS(正離子) m/z : 1072($[M+H]^+$)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

δ 1.21 (s, 36 H), δ 6.87 (m, 9 H), δ 7.69 (d, $J = 7.7$ Hz, 3 H), δ 7.82 (s, 3 H), δ 7.86 (m, 6 H)

2-氯-4,6-二(4'-第三丁基)苯基嘓啶之合成



在氮氣氣流下，於反應容器中加入三聚氯化氰 (cyanuric chloride)(1.83g, 10mmol)、4-第三丁基苯基硼酸(3.73g, 21mmol)、碳酸鈉(6.57g, 62mmol)、乙酸鈹(89mg, 0.40mmol)、三苯基膦(0.21g, 0.80mmol)、乙二醇二甲基醚(glyme)(50mL)、以及水(20mL)，回流 8.5 小時。將所得之反應混合物中之溶劑蒸餾去除，添加氯仿(50mL)與水(50mL)，萃取有機層。將此有機層以硫酸鎂乾燥，過濾後蒸餾去除溶劑。將此殘渣以矽膠層析(己烷/甲苯)精製

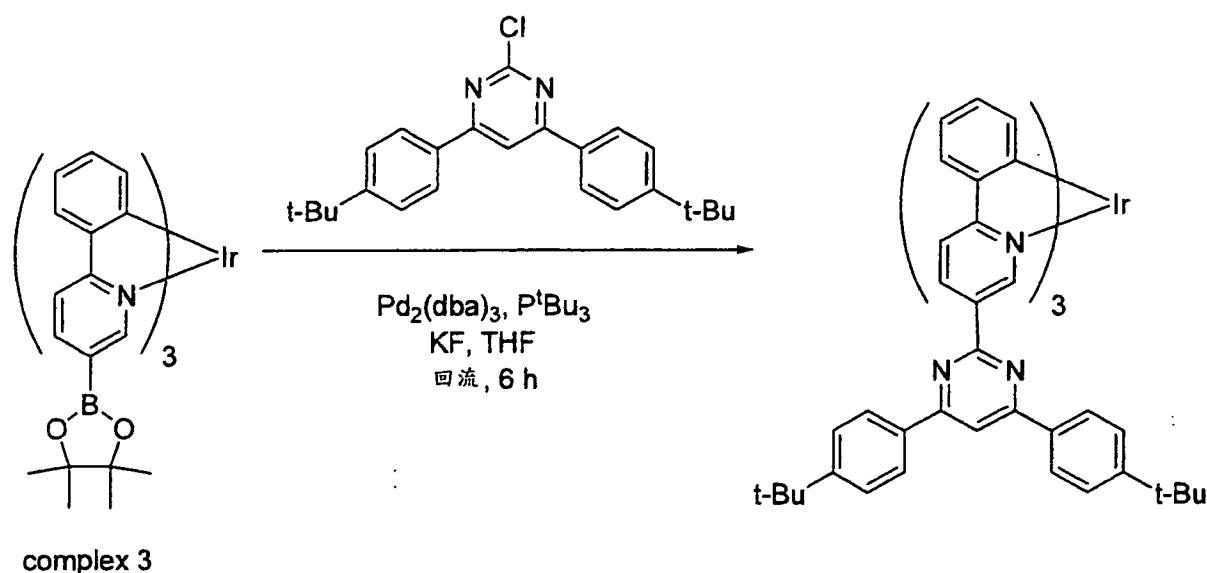
2 次，藉由蒸餾去除溶劑，而獲得 2-氯-4,6-二(4'-第三丁基)苯基嘓啶(2.64g, 7.0mmol)。

LC-MS(APPI, 正離子) m/z : 379.2($[M+H]^+$)

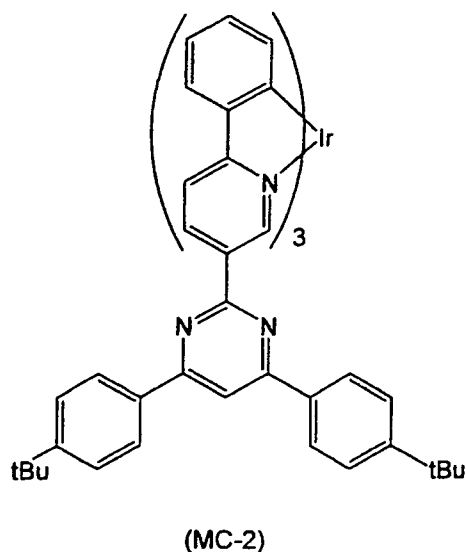
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

δ 1.38 (s, 18 H), δ 7.55 (d, $J = 6.9$ Hz, 4 H), δ 7.97 (s, 1 H), δ 8.07 (d, $J = 6.9$ Hz, 4 H)

金屬錯合物(MC-2)之合成



在氮氣氣流下，於反應容器中，量取金屬錯合物 (complex 3)(103mg, 0.10mmol)、2-氯-4,6-二(4'-第三丁基)苯基嘓啶(125mg, 0.33mmol)、氟化鉀(58mg, 1.0mmol)、參(二苯亞甲基丙酮)二鈀(0)(13.7mg, 0.015mmol)、以及四氫呋喃(10mL)，並添加三-第三丁基膦(7.3 μL)，回流 6 小時。濃縮所得之反應溶液，溶解於甲苯，以硫酸鈉乾燥。將此有機層以矽膠層析(甲苯)精製，蒸餾去除溶劑。將殘渣以甲醇洗淨，藉此而獲得以下述式所示之金屬錯合物(MC-2)(69.8mg, 0.042mmol)。



LC-MS(APCI, 正離子) m/z : 1683($[M+H]^+$)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

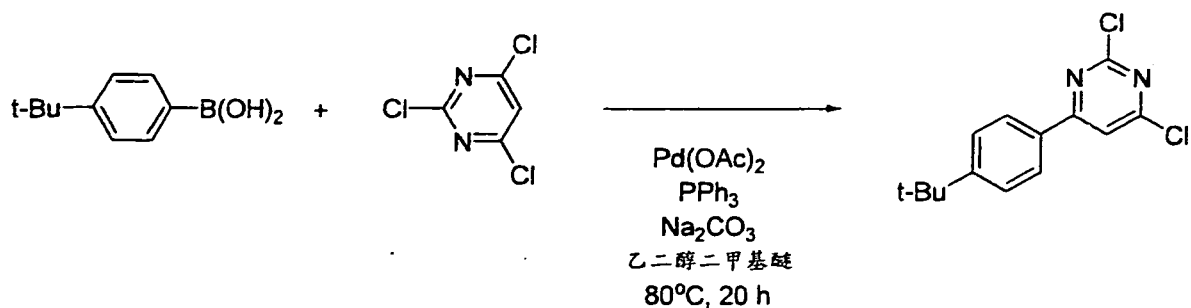
δ 1.19 (s, 54 H), δ 6.93 (m, 9 H), δ 7.41 (d, $J = 8.4$ Hz, 12 H), δ 7.79 (d, $J = 7.5$ Hz, 3 H), δ 7.82 (s, 3 H), δ 7.90 (d, $J = 8.4$ Hz, 12 H), δ 8.12 (d, $J = 8.4$ Hz, 3 H), δ 9.12 (d, $J = 8.4$ Hz, 3 H), δ 9.34 (s, 3 H)

金屬錯合物(MC-2)之物性測定

將金屬錯合物(MC-2)與聚甲基丙烯酸甲酯樹脂(Aldrich 公司製)(以下稱為「PMMA」)以重量比 2:98 之比率混合,調製該混合物之 10 重量% 氯仿液。將此溶液滴下於石英基板上並使其乾燥,將摻雜金屬錯合物(MC-2)之 PMMA 膜予以成膜於石英基板上。使用所得之基板,測定其光致發光後,可觀測到於 575nm 具有波峰之發光,量子收率為 80%。光致發光量子收率係使用有機 EL 發光特性評估裝置(Optel 股份公司製,商品名:IES-150)以激發波長 325nm 測定。

<實施例 3>(金屬錯合物(MC-3)之合成)

2,4-二氯-6-(4-第三丁基)苯基嘓啶之合成



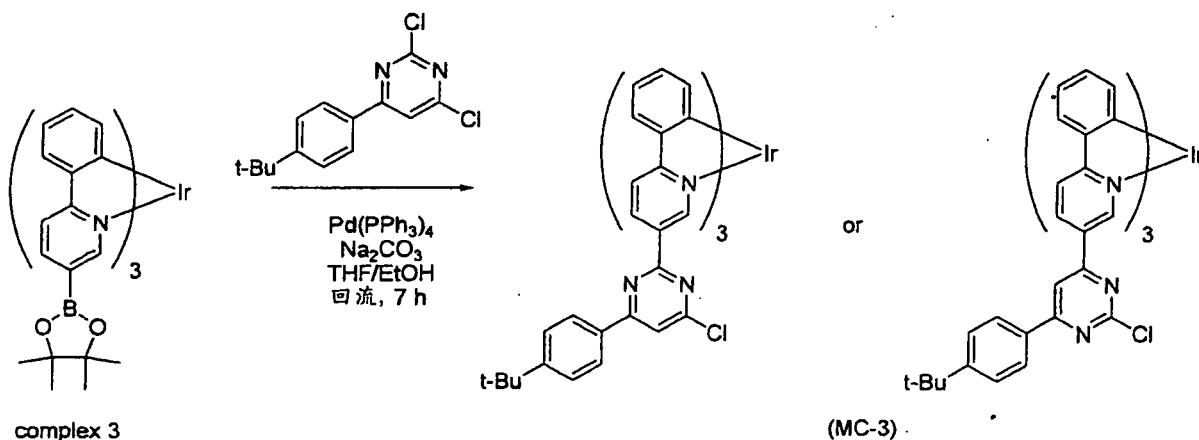
在氮氣氣流下，於反應容器中，加入 2,4,6-三氯嘓啶 (18.3g, 100mmol)、4-第三丁基苯基硼酸 (37.4g, 210mmol)、碳酸鈉 (65.7g, 620mmol)、乙酸鈾 (0.56g, 2.5mmol)、三苯基膦 (1.31g, 5.0mmol)、乙二醇二甲基醚 (glyme) (500mL)，於 80°C 回流 20 小時。將所得之反應混合物中之溶劑蒸餾去除，添加乙酸乙酯 (200mL) 與水 (200mL)，萃取有機層。將此有機層以硫酸鎂乾燥，過濾後蒸餾去除濾液。將此殘渣以矽膠層析 (己烷/乙酸乙酯) 精製，蒸餾去除溶劑。藉由將此殘渣進行再結晶化，而獲得 2,4-二氯-6-(4-第三丁基)苯基嘓啶 (2.0g, 7.1mmol)。

LC-MS (正離子) m/z : 281 ($[M+H]^+$)

$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3)

δ 1.36 (s, 9 H), δ 7.54 (d, $J = 6.9$ Hz, 2 H), δ 7.64 (s, 1 H), δ 8.01 (d, $J = 6.9$ Hz, 2 H)

金屬錯合物 (MC-3) 之合成



在氮氣氣流下，於反應容器中量取金屬錯合物 (complex 3)(341mg, 0.33mmol)、2,4-二氯-6-(4-第三丁基)苯基嘧啶(540mg, 1.7mmol)、碳酸鉀(547mg, 3.9mmol)、肆(三苯基膦)鈦(0)(97mg, 0.084mmol)、四氫呋喃(60mL)、以及乙醇(10mL)，回流 7 小時。過濾所得之反應溶液，濃縮濾液並添加甲醇(50mL)。將所生之沉澱濾出回收，溶解於二氯甲烷，以硫酸鈉乾燥。將此溶液過濾後，以矽膠層析(第 1 次：二氯甲烷，第 2 次：甲苯)精製 2 次，蒸餾去除溶劑。藉由將殘渣以甲醇及己烷洗淨，而獲得以上述式所示之金屬錯合物(MC-3)(56.0mg, 0.040mmol)。

LC-MS(正離子) m/z : 1388($[M+H]^+$)

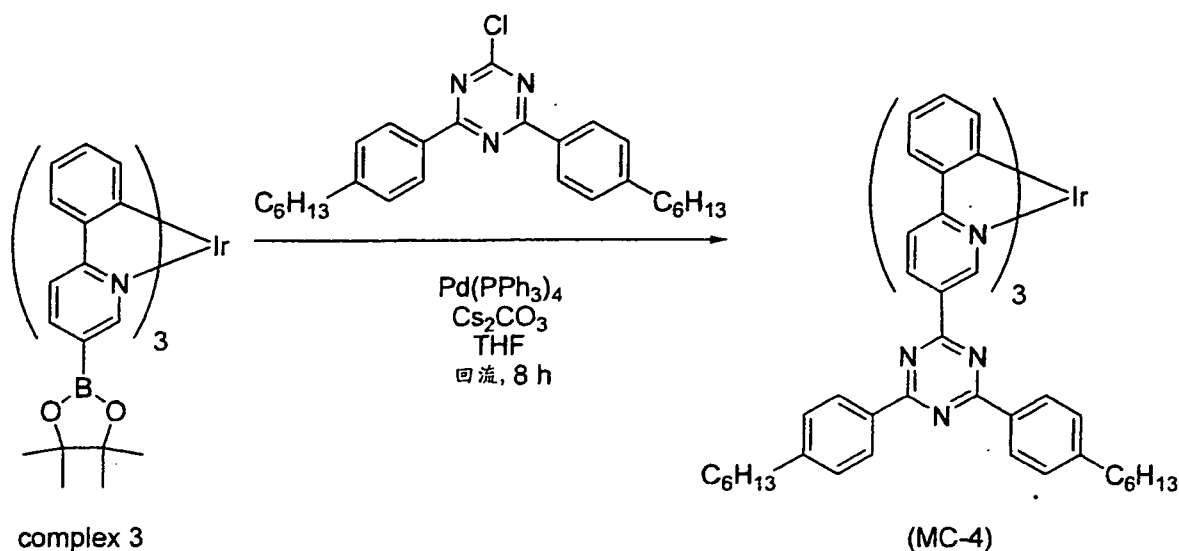
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

δ 1.31 (s, 27 H), δ 6.99 (m, 6 H), δ 7.08 (m, 3 H), δ 7.42 (d, $J = 6.8$ Hz, 6 H), δ 7.55 (s, 3 H), δ 7.80 (m, 9 H), δ 8.05 (d, $J = 8.4$ Hz, 3 H), δ 8.40 (m, 6 H)

金屬錯合物(MC-3)之物性測定

將金屬錯合物(MC-3)以 2 重量% 之濃度溶解於聚甲基丙烯酸甲酯樹脂(Aldrich 公司製)之 10 重量% 甲苯液中，調製溶液。將此溶液滴下於石英基板上並使其乾燥，將摻雜金屬錯合物(MC-3)之 PMMA 膜予以成膜於石英基板上。使用所得之基板，測定其光致發光後，可觀測到於 630nm 具有波峰之發光，量子收率為 65%。光致發光量子收率係使用有機 EL 發光特性評估裝置(Optel 股份公司製，商品名：IES-150)以激發波長 325nm 測定。

<實施例 4> (金屬錯合物(MC-4)之合成)



在氮氣氣流下，於反應容器中，量取金屬錯合物 (complex 3)(929mg, 0.90mmol)、2-氯-4,6-二(4'-己基苯基)-1,3,5-三吡(1.29g, 3.0mmol)、碳酸鉀(2.93g, 9.0mmol)、肆(三苯基膦)鉀(0)(312mg, 0.27mmol)、以及四氫呋喃(90mL)，回流 8 小時。於所得之反應混合物中添加甲苯並過濾，濃縮濾液。將此甲苯溶液以矽膠層析(第 1 次之展開溶劑：甲苯/第 2 次及第 3 次之展開溶劑：己烷/甲苯=1/1)精製 3 次，蒸餾去除溶劑。藉由將殘渣以甲醇洗淨，而獲得以上述式所示之金屬錯合物(MC-4)(227mg, 0.12mmol)。

LC-MS(APCI, 正離子) m/z : 1854($[M+H]^+$)

$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3)

δ 0.88 (t, $J = 6.6$ Hz, 18 H), δ 1.22 (m, 36 H), δ 1.49 (m, 12 H), δ 2.48 (m, 12 H), δ 6.96 (m, 9 H), δ 7.22 (d, $J = 7.8$ Hz, 12 H), δ 7.83 (d, $J = 7.5$ Hz, 3 H), δ 8.18 (d, $J = 8.4$ Hz, 3 H), δ 8.35 (d, $J = 7.8$ Hz, 12 H), δ 9.19 (d, $J = 8.4$ Hz, 3 H), δ 9.31 (s, 3 H)

金屬錯合物(MC-4)之物性測定

將金屬錯合物(MC-4)與 PMMA 以重量比 2:98 之比率混

合，調製該混合物之 10 重量% 氯仿液。將此溶液滴下於石英基板上並使其乾燥，將摻雜金屬錯合物(MC-4)之 PMMA 膜予以成膜於石英基板上。使用所得之基板，測定其光致發光後，可觀測到於 605nm 具有波峰之發光，量子收率為 88%。

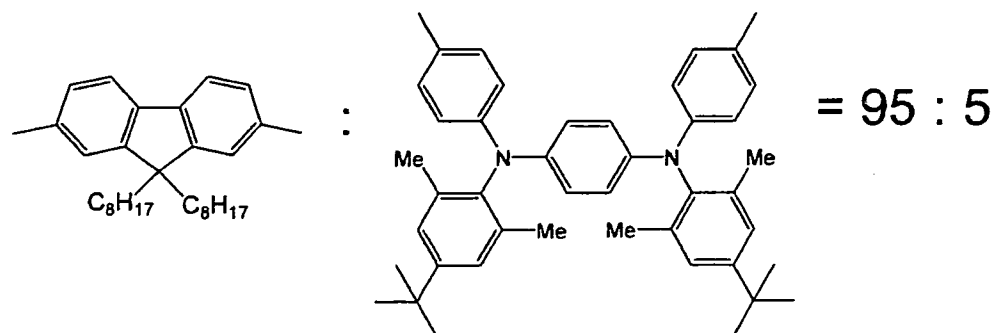
化合物(P-1)之合成

在連接有戴氏冷凝器(Dimroth condenser)之 200mL 可分離式燒瓶中，添加 9,9-二辛基芐-2,7-二硼酸乙二醇酯 3.18g(6.0mmol)、9,9-二辛基-2,7-二溴芐 3.06g(5.4mmol)、N,N'-雙(4-溴苯基)-N,N'-雙(2,6-二溴-4-第三丁基苯基)-1,4-苯二胺 0.44g(0.6mmol)、氯化甲基三辛基銨(Aldrich 公司製，商品名：Aliquat 336)0.82g、以及甲苯 60mL。在氮氣環境下，添加雙(三苯基膦)二氯鈹 4.2mg，加熱至 85℃。一邊於所得之溶液中滴下 17.5 重量% 碳酸鈉水溶液 16.3mL，一邊加熱至 105℃，然後攪拌 15 小時。其次，添加苯基硼酸 0.74g、以及雙(三苯基膦)二氯鈹 4.2mg 與甲苯 30mL，於 105℃ 攪拌 17 小時。

從所得之溶液中去除水層後，添加 N,N-二乙基二硫胺甲酸鈉三水合物 3.65g、離子交換水 36 mL，於 85℃ 攪拌 2 小時。將有機層與水層分離後，將有機層依序以離子交換水 80mL(2 次)、3 重量% 乙酸水溶液 80mL(2 次)、離子交換水 80mL(2 次)洗淨。

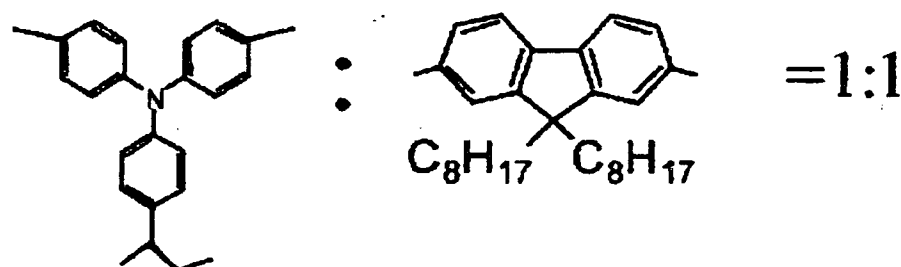
於甲醇 930mL 中滴下有機層，使聚合物沉澱，過濾沉澱物後進行乾燥，而獲得固體。將此固體溶解於甲苯 190mL

中，將溶液通液於預先已通液甲苯之矽膠/氧化鋁管柱中，滴下此溶液於甲醇 930mL 中，使聚合物沉澱，過濾沉澱物後進行乾燥，而獲得以下述式所示之化合物(P-1)4.17g：



此化合物(P-1)之聚苯乙烯換算之數平均分子量 Mn 為 2.7×10^5 ，聚苯乙烯換算之重量平均分子量 Mw 為 7.1×10^5 。

調製由以 5 重量% 之比率添加金屬錯合物(MC-4)於前述化合物(P-1)中而成的混合物的 1.0 重量% 二甲苯溶液、以及下述聚合物(TFB)的 0.5 重量% 二甲苯溶液。



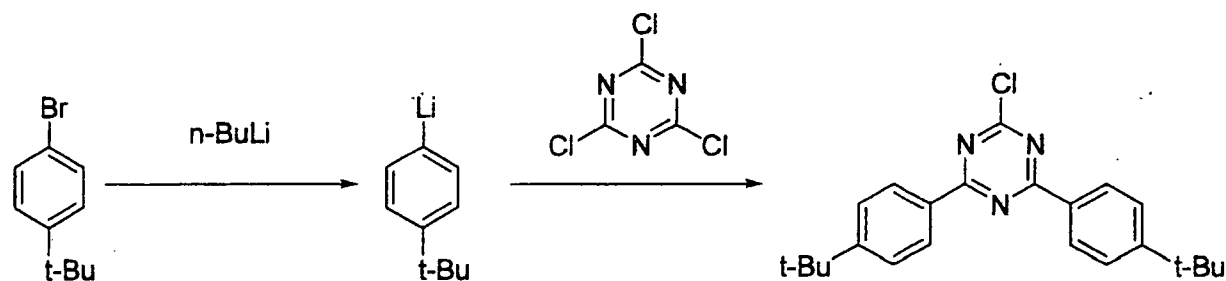
在藉濺鍍法而以 150nm 之厚度附有 ITO 膜之玻璃基板上，使用聚(伸乙基二氧基噻吩)/聚苯乙烯磺酸之溶液 (Bayer 公司製，商品名：Baytron P)，依據旋塗法而以 50nm 之厚度進行溶液之成膜，於加熱板上以 200℃ 乾燥 10 分鐘。其次，使用上述調製之 TFB 之二甲苯溶液，藉由旋塗法以 2000rpm 之迴轉速度成膜，於氮氣環境下以 180℃ 乾燥 15 分鐘。使此基板回到室溫後，使用上述調製之金屬錯

合物(MC-4)與化合物(P-1)之混合二甲苯溶液，藉由旋塗法以 2000rpm 之迴轉速度成膜。所得之膜之平均膜厚為約 100nm。將其於氮氣環境下以 130°C 乾燥 10 分鐘後，就陰極而言，蒸鍍銀約 5nm，其次蒸鍍鋁約 80nm，而製作 EL 元件。又，當真空度到達 1×10^{-4} Pa 以下後，開始蒸鍍金屬。藉由外加電壓於所得之元件上，而可獲得於 605nm 具有波峰之紅色之 EL 發光。發光效率最大為 7.8cd/A。

更進一步，使用此元件並設定初期輝度為 4000 cd/m^2 、且以定電流驅動來驅動 50 小時後，相對於初期輝度，能保持 70% 之輝度，而為長壽命。

<實施例 5> (金屬錯合物(MC-5)之合成)

2,4-二(4'-第三丁基苯基)-6-氯-1,3,5-三吡之合成



在氮氣氣流下，於反應容器中，加入 1-溴-4-第三丁基苯(125g, 587mmol)與四氫呋喃(470mL)，冷卻至 -70°C 。於其中，以 -70°C 耗費 90 分鐘滴下正丁基鋰/己烷溶液(1.6M, 367mL, 587mmol)，滴下完畢後，於 -70°C 攪拌 2 小時，而獲得 4-第三丁基苯基鋰/THF 溶液。在氮氣氣流下，於另外之反應容器中，加入三聚氯化氰(50.8g, 276mmol)與四氫呋喃(463mL)，冷卻至 -70°C 。於其中，以使反應溫度成為 -60°C 以下之方式，一邊冷卻一邊緩慢地滴下先前

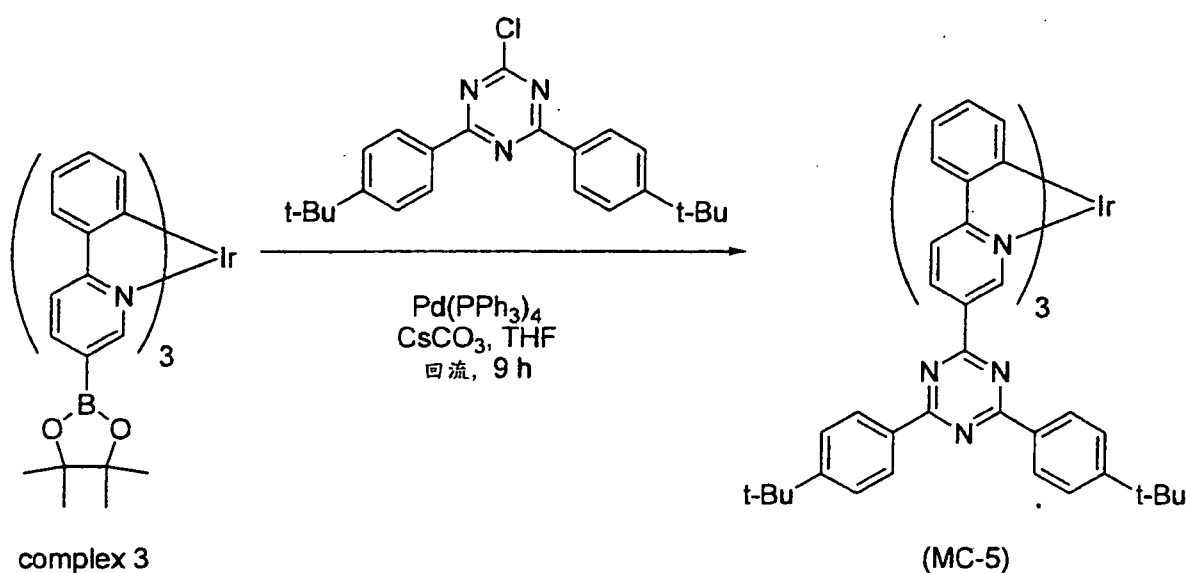
所調製之 4-第三丁基苯基鋰/THF 溶液。滴下完畢後，將反應溶液於 -40°C 攪拌 4 小時、於室溫攪拌 4 小時。於此反應混合物中加入水(50mL)而結束反應，並蒸餾去除四氫呋喃。於此殘渣中添加水(1L)與氯仿(2L)而萃取有機層，再以水(1L)洗淨有機層後，蒸餾去除溶劑。將此殘渣溶解於乙腈(600mL)，以熱過濾去除不溶固體。將所得之濾液濃縮至 100mL 左右，冷卻至 -70°C ，濾出回收所析出之固體。將回收之固體溶解於氯仿(200mL)/己烷(600mL)混合溶劑，以矽膠管柱層析(展開溶劑：氯仿/己烷)精製。蒸餾去除溶劑，藉由將此殘渣從乙腈進行再結晶，而獲得 2,4-二(4'-第三丁基苯基)-6-氯-1,3,5-三吡啶(41.3g, 109mmol)。

LC-MS(APPI, 正離子) m/z : 380($[M+H]^+$)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

δ 1.39 (s, 18 H), δ 7.56 (d, $J = 8.4$ Hz, 4 H), δ 8.54 (d, $J = 8.4$ Hz, 4 H)

金屬錯合物(MC-5)之合成



在氮氣氣流下，於反應容器中，量取金屬錯合物 (complex 3)(546mg, 0.53mmol)、2,4-二(4'-第三丁基苯

基)-6-氯-1,3,5-三吡(702mg, 1.85mmol)、碳酸鈹(1.73g, 5.31mmol)、肆(三苯基膦)鈹(0)(196mg, 0.17mmol)、以及四氫呋喃(53mL), 回流 9 小時。濃縮所得之反應溶液, 於其中添加甲苯並使其溶解。過濾此溶液後, 將濾液以矽膠層析(第 1 次之展開溶劑: 甲苯, 第 2 次之展開溶劑: 己烷/甲苯 = 1/1)精製 2 次。蒸餾去除溶劑, 藉由將殘渣以甲醇洗淨, 而獲得以上述式所示之金屬錯合物(MC-5)(257mg, 0.15mmol)。

LC-MS(APCI, 正離子) m/z : 1686($[M+H]^+$)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

δ 1.14 (s, 54 H), δ 6.96 (m, 9 H), δ 7.39 (d, $J = 8.4$ Hz, 12 H), δ 7.83 (d, $J = 7.5$ Hz, 3 H), δ 8.18 (d, $J = 8.4$ Hz, 3 H), δ 8.36 (d, $J = 8.4$ Hz, 12 H), δ 9.14 (d, $J = 8.4$ Hz, 3 H), δ 9.33 (s, 3 H)

金屬錯合物(MC-5)之物性測定

將金屬錯合物(MC-5)以 2 重量% 之濃度溶解於聚甲基丙烯酸甲酯樹脂(Aldrich 公司製)之 10 重量% 甲苯液中, 調製溶液。將此溶液滴下於石英基板上並使其乾燥, 將摻雜金屬錯合物(MC-5)之 PMMA 膜予以成膜於石英基板上。使用所得之基板, 測定其光致發光後, 可觀測到於 610nm 具有波峰之發光, 量子收率為 89%。

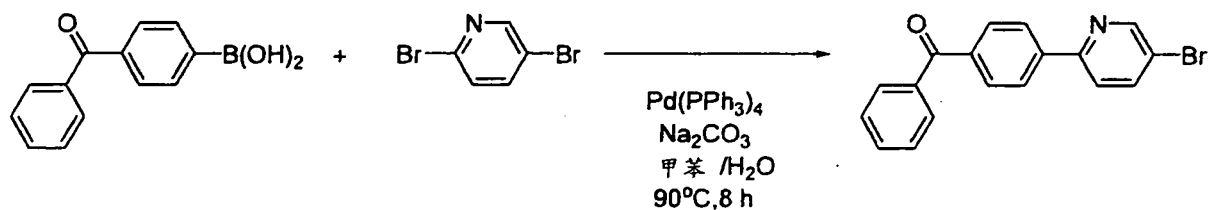
除了在實施例 4 中使用金屬錯合物(MC-5)替代金屬錯合物(MC-4)以外, 其餘與實施例 4 進行同樣操作, 而製作 EL 元件。

藉由外加電壓於所得之 EL 元件上, 而可獲得於 620nm 具有波峰之紅色之 EL 發光。發光效率最大為 6.9cd/A。設定初期輝度為 4000 cd/m^2 、且驅動 50 小時後, 相對於初

期輝度，能保持 73% 之輝度，而為長壽命。

<實施例 6> (金屬錯合物(MC-6)之合成)

2-(4'-苯甲醯基苯基)-5-溴吡啶之合成



在氫氣氣流下，於反應容器中，量取 2,5-二溴吡啶 (15.85g, 66.0mmol)，並添加甲苯 (300mL) 而製成溶液。於其中，加入 4-苯甲醯基苯基硼酸 (18.86g, 83.0mmol)、肆(三苯基磷)鈀(0) (3.05g, 2.6mmol)、以及 1.41M 碳酸鈉水溶液 (100mL)，於 90°C 攪拌 8 小時。從所得之反應混合物中濾出回收固體，將此固體依序以冷甲苯、冷二乙基醚洗淨。將此固體溶解於甲苯/氯仿混合溶劑 (容積比 2/1)，以矽膠管柱層析精製。蒸餾去除溶劑，將所得之殘渣溶解於氯仿/乙醇混合溶劑 (容積比 9/2)，藉由重複進行數次再結晶，而獲得黃色固體之 2-(4'-苯甲醯基苯基)-5-溴吡啶 (3.00g, 8.87mmol)。

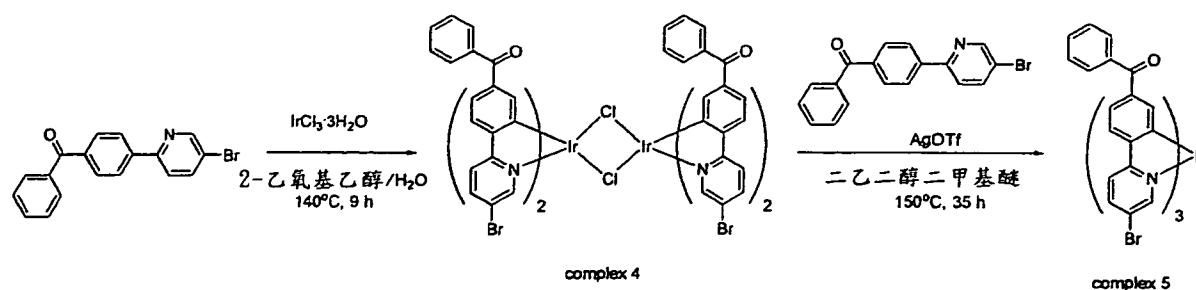
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

δ 7.49-7.92 (m, 9H), δ 8.08 (d, $J = 7.8$ Hz, 2H), δ 8.77 (s, 1H)

^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

δ 120.5, δ 122.9, δ 126.9, δ 128.6, δ 130.3, δ 130.9, δ 132.8, δ 137.7, δ 138.3, δ 139.8, δ 142.0, δ 151.2, δ 154.9, δ 196.5

金屬錯合物 (complex 4、complex 5) 之合成



於反應容器中，量取 2-(4' - 苯甲醯基苯基)-5-溴吡啶(1.01g, 3.0mmol)、氯化銨三水合物(0.48g, 1.4mmol)、2-乙氧基乙醇(12mL)、以及水(4mL)，於氮氣氣流下以 140°C 加熱 9 小時。經空氣冷卻後，濾出所得之反應混合物，依序以甲醇、己烷洗淨，而獲得橘色固體之上述式所示之金屬錯合物(complex 4)(1.23g, 0.68mmol)。

於反應容器中，量取金屬錯合物(complex 4)(1.23g, 0.68mmol)、2-(4' - 苯甲醯基苯基)-5-溴吡啶(1.38g, 4.1mmol)、以及二乙二醇二甲基醚(Diglyme)(12mL)，添加三氟甲磺酸銀(0.35g, 1.4mmol)，於 150°C 攪拌 35 小時。濾出所得之反應混合物，將固體溶解於二氯甲烷(100mL)。過濾此溶液，從濾液蒸餾去除溶劑。將此殘渣依序以甲醇、己烷洗淨，而獲得上述式所示之金屬錯合物(complex 5)(1.26g, 1.05mmol)。

LC-MS(APPI, 正離子) m/z : 1203.9($[\text{M} + \text{H}]^+$)

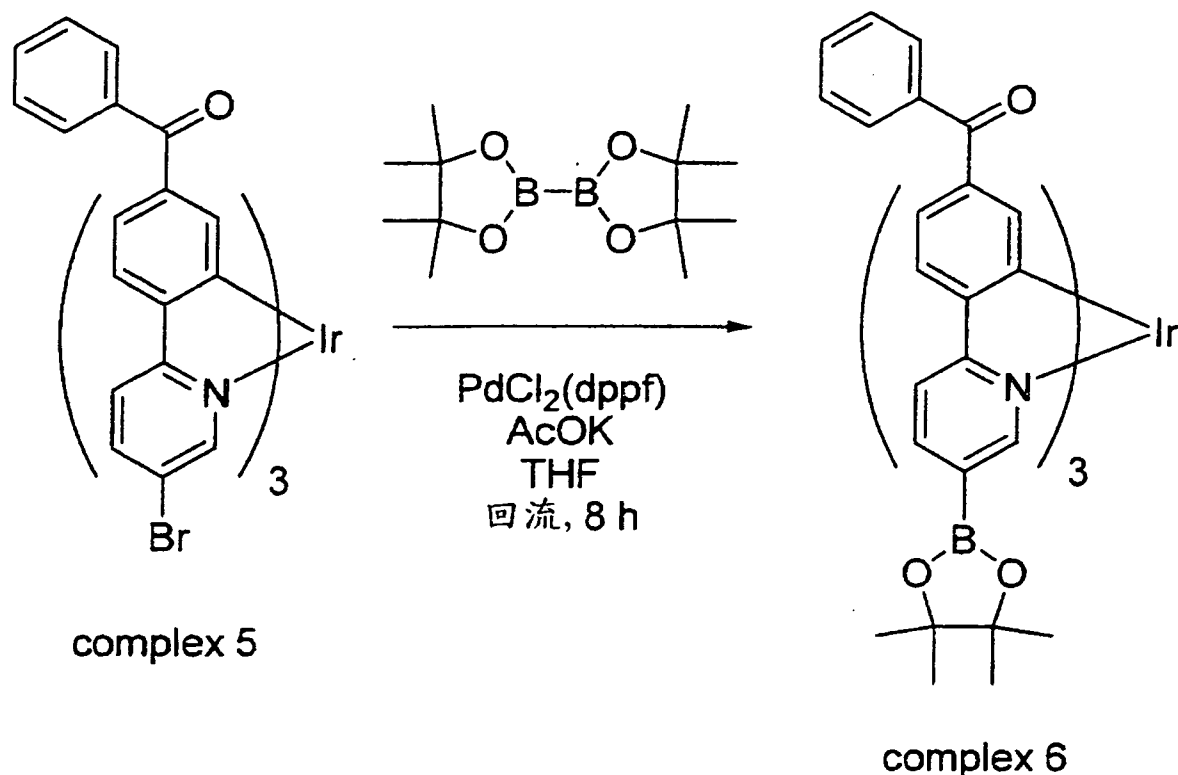
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

δ 7.02 (s, 3 H), δ 7.19 (dd, $J = 7.1, 7.5$ Hz, 6 H), δ 7.35 (m, 12 H), δ 7.64 (s, 3 H), δ 7.67 (d, $J = 8.1$ Hz, 3 H), δ 7.89 (dd, $J = 6.9, 8.8$ Hz, 6 H)

^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

δ 119.1, δ 121.3, δ 123.0, δ 124.5, δ 128.1, δ 130.1, δ 132.1, δ 137.9, δ 138.3, δ 138.9, δ 140.3, δ 146.5, δ 148.6, δ 157.6, δ 164.3, δ 197.4

金屬錯合物(complex 6)之合成



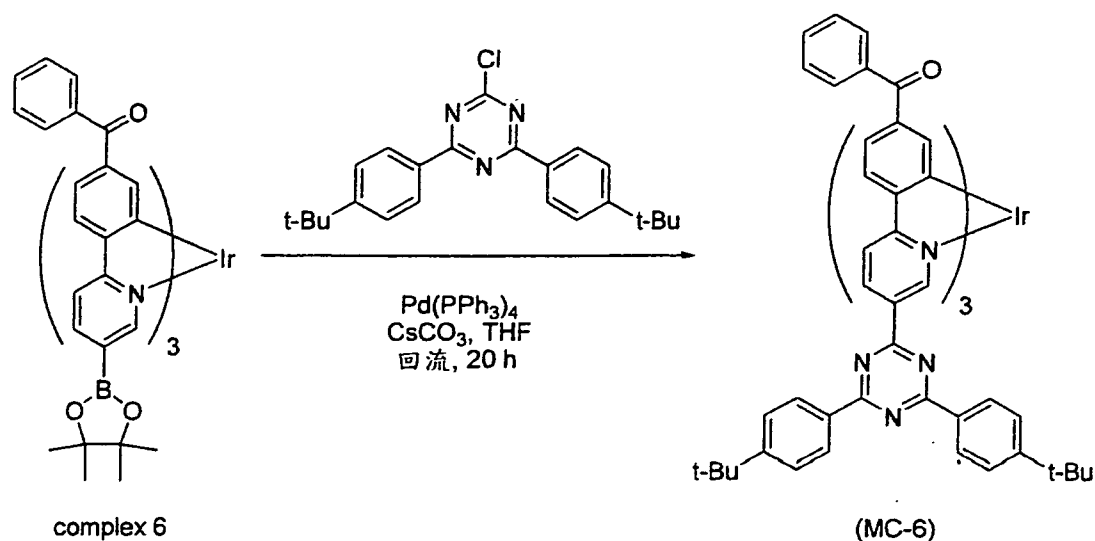
在氮氣氣流下，於反應容器中，量取金屬錯合物 (complex 5)(1.21g, 1.0mmol)、乙酸鉀(1.10g, 11.2mmol)、雙(頻哪醇)二硼(1.19g, 4.2mmol)、[1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯鈾(II)(0.32g, 0.35mmol)、以及四氫呋喃(100mL)，回流 8 小時。濃縮所得之反應溶液，於其中添加二氯甲烷並使其溶解後過濾。將此濾液以矽膠層析(二氯甲烷/甲醇=10/1)精製，蒸餾去除溶劑。將此殘渣依序以甲醇、己烷洗淨，而獲得以上述式所示之金屬錯合物 (complex 6)(0.62g, 0.46mmol)。

LC-MS(APPI, 正離子) m/z : 1346.4($[M+H]^+$)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

δ 1.24 (s, 36 H), δ 7.17 (m, 9 H), δ 7.34 (m, 12 H), δ 7.73 (d, $J = 8.1$ Hz, 3 H), δ 7.84 (s, 3 H), δ 7.95 (d, $J = 8.1$ Hz, 3 H), δ 8.02 (d, $J = 8.1$ Hz, 3 H)

金屬錯合物(MC-6)之合成



在氮氣氣流下，於反應容器中，量取金屬錯合物 (complex 6)(460mg, 0.342mmol)、2,4-二(4'-第三丁基苯基)-6-氯-1,3,5-三吡啶(456mg, 1.20mmol)、碳酸鉀(1.11g, 3.40mmol)、肆(三苯基膦)鉀(0)(121mg, 0.105mmol)、以及四氫呋喃(34mL)，回流 20 小時。濃縮所得之反應溶液，於其中添加二氯甲烷並使其溶解後過濾。將此濾液以矽膠層析(二氯甲烷/甲醇=20/1)精製 3 次，蒸餾去除溶劑。藉由將此殘渣以甲醇洗淨，而獲得以上述式所示之金屬錯合物(MC-6)(121mg, 0.060mmol)。

ESI-MS(正離子) m/z : 2036($[M+H]^+$)

$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3)

δ 1.20 (s, 54 H), δ 7.18–7.45 (m, 33 H), δ 7.87 (d, $J = 8.2$ Hz, 3 H), δ 8.30 (d, $J = 8.6$ Hz, 3 H), δ 8.38 (d, $J = 8.4$ Hz, 12 H), δ 9.25 (d, $J = 8.6$ Hz, 3 H), δ 9.39 (s, 3 H)

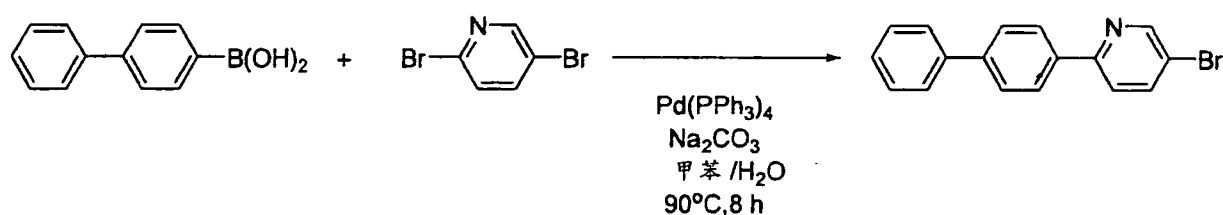
金屬錯合物(MC-6)之物性測定

將金屬錯合物(MC-6)以 2 重量% 之濃度溶解於聚甲基丙烯酸甲酯樹脂(Aldrich 公司製)之 10 重量% 甲苯液中，調製溶液。將此溶液滴下於石英基板上並使其乾燥，將摻雜金屬錯合物(MC-6)之 PMMA 膜予以成膜於石英基板上。使

用所得之基板，測定其光致發光後，可觀測到於 620nm 具有波峰之發光。另外，光致發光之測定係使用濱松光子學公司製之 PL 量子收率測定裝置(商品名：C9920-02)，以激發波長 325nm 測定。

<實施例 7> (金屬錯合物(MC-7)之合成)

2-(4'-聯苯基)-5-溴吡啶之合成

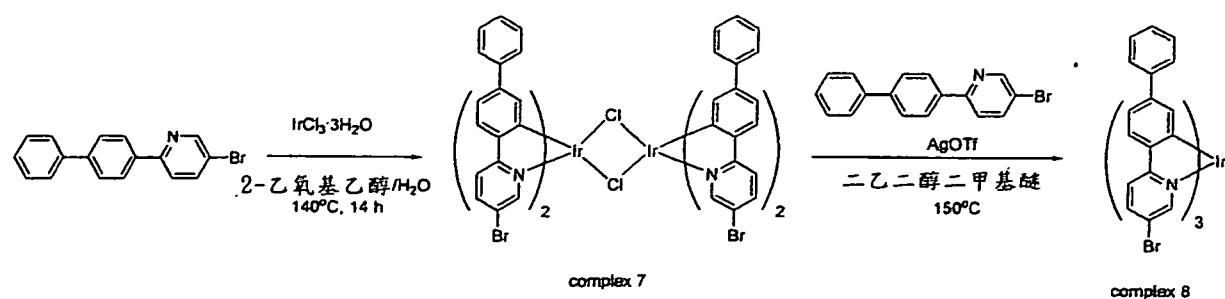


在氬氣氣流下，於反應容器中，量取 2,5-二溴吡啶 (2.37g, 10mmol)，並添加甲苯(100mL)而製成溶液。於其中，加入 4-聯苯基硼酸(2.47g, 12.5mmol)、肆(三苯基膦)鈀(0)(0.46g, 0.4mmol)、以及 2M 碳酸鈉水溶液(10mL)，於 90°C 攪拌 8 小時。從所得之反應混合物中濾出回收固體，將此固體以冷甲苯洗淨。將此固體溶解於氯仿/乙醇混合溶劑(容積比 1/1)，藉由重複進行數次再結晶，而獲得黃色固體之 2-(4'-聯苯基)-5-溴吡啶(1.10g, 3.55mmol)。

¹H NMR (300 MHz, CDCl₃)

δ 7.72-7.28 (m, 8H), δ 7.88 (d, J = 10.5 Hz, 1H), δ 8.05 (d, J = 6.6 Hz, 2H),
δ 8.75 (s, 1H)

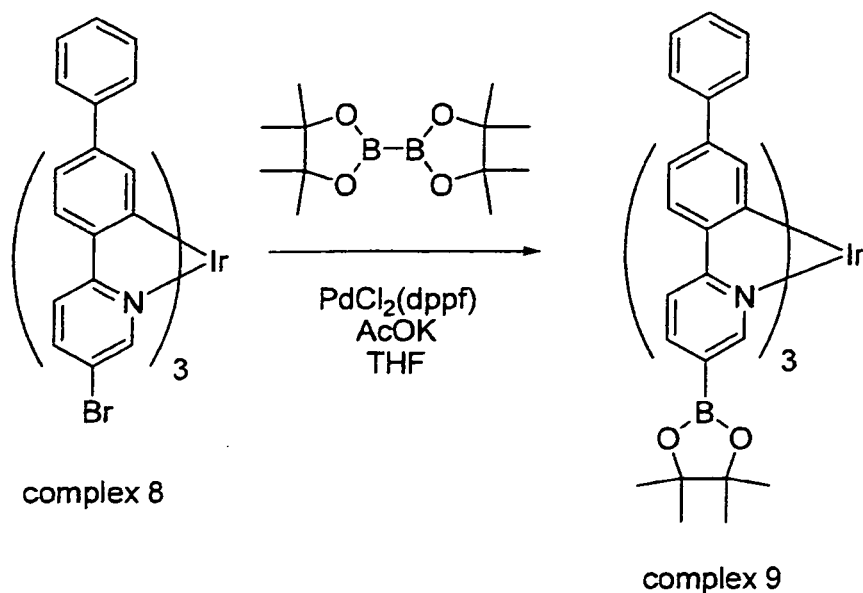
金屬錯合物(complex 7、complex 8)之合成



於反應容器中，量取 2-(4'-聯苯基)-5-溴吡啶 (463mg, 1.5mmol)、氯化銱三水合物 (241mg, 0.68mmol)、2-乙氧基乙醇 (6mL)、以及水 (2mL)，於氮氣氣流下以 140°C 加熱 14 小時。經空氣冷卻後，濾出所得之反應混合物，依序以甲醇、己烷洗淨，而獲得黃色固體之上述式所示之金屬錯合物 (complex 7) (539mg, 0.32mmol)。

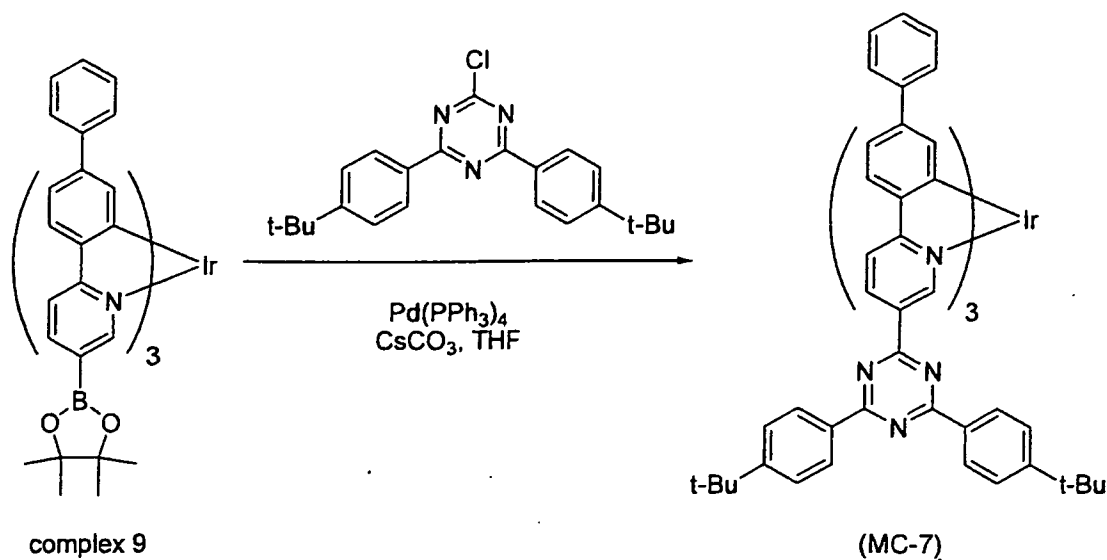
於反應容器中，量取金屬錯合物 (complex 7) (539mg, 0.32mmol)、2-(4'-聯苯基)-5-溴吡啶 (609mg, 0.20mmol)、以及二乙二醇二甲基醚 (Diglyme) (12mL)，添加三氟甲磺酸銀 (175mg, 0.68mmol)，於 150°C 攪拌 11 小時。濾出所得之反應混合物，將固體溶解於二氯甲烷。過濾此溶液，從濾液蒸餾去除溶劑。將此殘渣依序以甲醇、己烷洗淨，而獲得上述式所示之金屬錯合物 (complex 8) (580mg, 0.52mmol)。

金屬錯合物 (complex 9) 之合成



在氮氣氣流下，於反應容器中，量取金屬錯合物 (complex 8)(580mg, 0.52mmol)、乙酸鉀(468mg, 4.8mmol)、雙(頻哪醇)二硼(538mg, 2.1mmol)、[1,1'-雙(二苯基膦基)二茂鐵]二氯鈹(II)(130mg, 0.16mmol)、以及四氫呋喃(60mL)，回流 18 小時。濃縮所得之反應溶液，使其溶解於二氯甲烷後過濾。將此濾液以矽膠層析(二氯甲烷/甲醇=20/1)精製，蒸餾去除溶劑。將此殘渣以甲醇洗淨，而獲得以上述式所示之金屬錯合物 (complex 9)(483mg, 0.38mmol)。

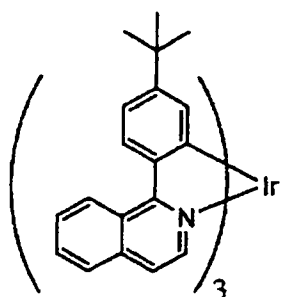
金屬錯合物(MC-7)之合成



在氮氣氣流下，於反應容器中，量取金屬錯合物 (complex 9)、2,4-二(4'-第三丁基苯基)-6-氯-1,3,5-三吡、碳酸鉯、肆(三苯基膦)鉀(0)、以及四氫呋喃(34mL)並回流。濃縮所得之反應溶液，於其中添加二氯甲烷並使其溶解。過濾此溶液，將濾液以矽膠層析精製。蒸餾去除溶劑。藉由將殘渣洗淨，而獲得以上述式所示之金屬錯合物(MC-7)。

<比較例 1>

依據 W003/040256A2 記載之方法，合成下述式所示之金屬錯合物：



針對此金屬錯合物，與實施例 3 同樣地測定光致發光量子收率。可觀測到於 643nm 具有波峰之發光，量子收率為 51%。

其次，除了在實施例 4 中使用上述式所示之金屬錯合物替代前述金屬錯合物(MC-4)以外，其餘皆與實施例 4 進行同樣操作，而製作 EL 元件。

藉由將電壓外加至所得之元件上，而獲得於 620nm 具有波峰之紅色之 EL 發光。發光效率最大為 5.6cd/A。將初期輝度設定為 400cd/m²、且驅動 50 小時後，相對於初期輝度，則輝度僅止於 45%。

【圖式簡單說明】

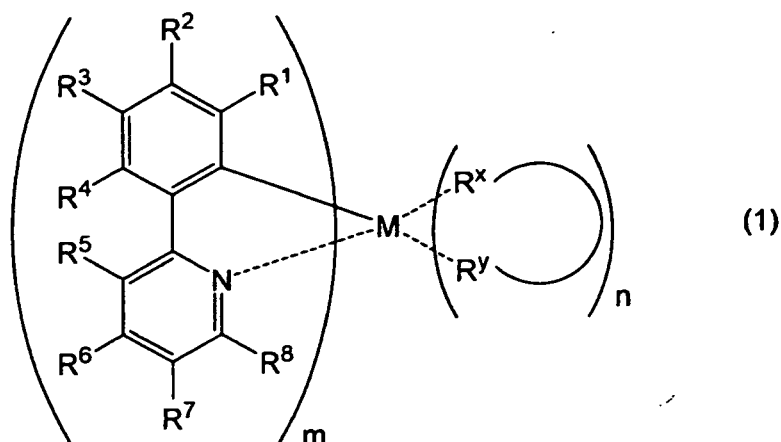
無

【主要元件符號說明】

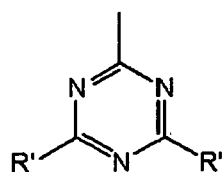
無

十、申請專利範圍：

1. 一種金屬錯合物，其係以下述式(1)所示：



(式中，M 為鈐、銻、鈹、鐵、鉍或鉑之金屬原子； R^1 至 R^8 係各自獨立地表示氫原子、鹵原子、烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、醯基、醯氧基、醯胺基、醯亞胺基、亞胺殘基、取代胺基、取代矽烷基、取代矽烷氧基、取代矽烷硫基、取代矽烷胺基、1 價雜環基、雜芳氧基、雜芳硫基、芳烯基、芳炔基、取代羧基、或氰基，或者是 R^3 及 R^4 、或 R^5 及 R^6 可結合而形成環；惟， R^2 及 R^7 中之至少一者為下述式(4-7)所示之基：

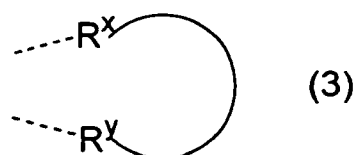


(4-7)

(式中， R' 係各自獨立地表示氫原子、鹵原子、烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、醯基、醯氧基、醯胺基、醯亞胺基、

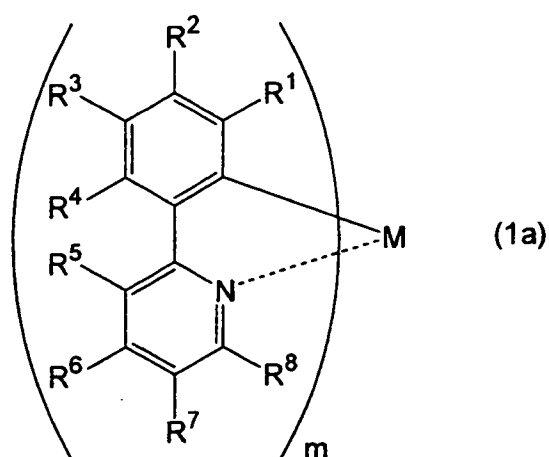
亞胺殘基、取代胺基、取代矽烷基、取代矽烷氧基、取代矽烷硫基、取代矽烷胺基、1 價雜環基、雜芳氧基、雜芳硫基、芳烯基、芳炔基、取代羧基、或氰基；複數存在之 R' 可相同、亦可不同)；

m 為 1 至 3 之整數， n 為 0 至 2 之整數； Z^1 至 Z^5 係各自獨立地表示碳原子或氮原子；惟， Z^1 至 Z^5 中之至少二者為氮原子；當 Z^1 至 Z^5 中之任一者為碳原子時，結合於該碳原子上之氫原子係可經取代基所取代；下述式(3)所示之部分係表示單陰離子性之雙牙配位基：



； R^x 及 R^y 係結合於金屬原子 M 上之原子，各自獨立地表示碳原子、氧原子或氮原子)。

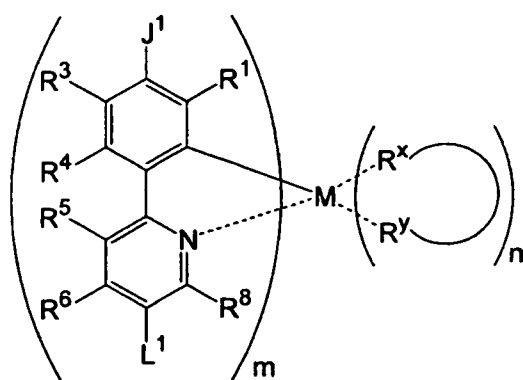
2. 如申請專利範圍第 1 項之金屬錯合物，其中，前述式(1)係以下述式(1a)所示：



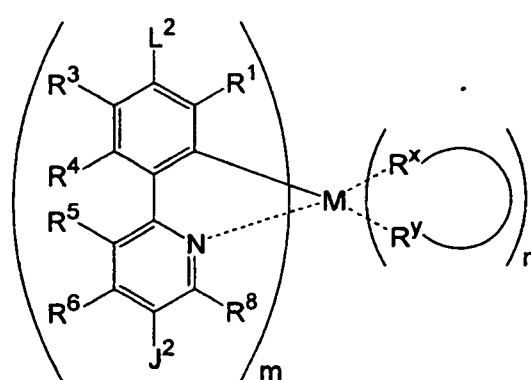
(式中， M 、 R^1 至 R^8 及 m 係具有與前述相同之意義)。

3. 如申請專利範圍第 1 項或第 2 項之金屬錯合物，其中，前述 R^7 係以前述式(4-7)所示之基。

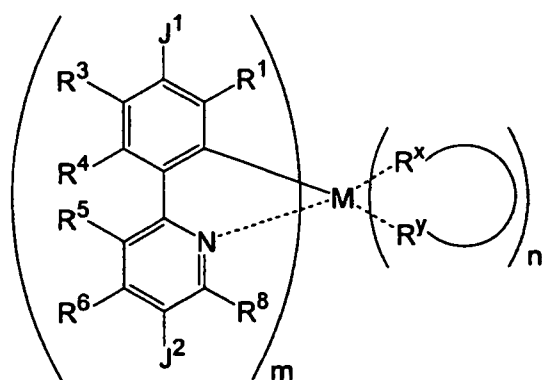
4. 如申請專利範圍第 1 項或第 2 項之金屬錯合物，其中，
前述 R^2 及 R^7 係各自獨立地為前述式(4-7)所示之基。
5. 如申請專利範圍第 1 項或第 2 項之金屬錯合物，其中，
前述 R^7 為前述式(4-7)所示之基，且前述 R^2 為氫原子。
6. 如申請專利範圍第 1 項或第 2 項之金屬錯合物，其中，
前述 M 為鉑原子或銨原子。
7. 如申請專利範圍第 1 項或第 2 項之金屬錯合物，其顯示
出 PL 光譜之波峰波長為 550nm 至 800nm 的磷光發光。
8. 一種申請專利範圍第 1 項至第 7 項中任一項之金屬錯合
物之製造方法，其包括使下述式(A-1)至(A-3)任一者所
示之化合物、與具有鹵原子或烷磺酸酯基之雜環芳香族
化合物進行偶合反應：



(A-1)

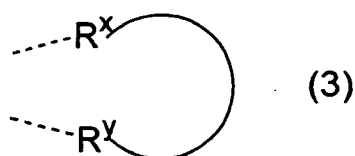


(A-2)

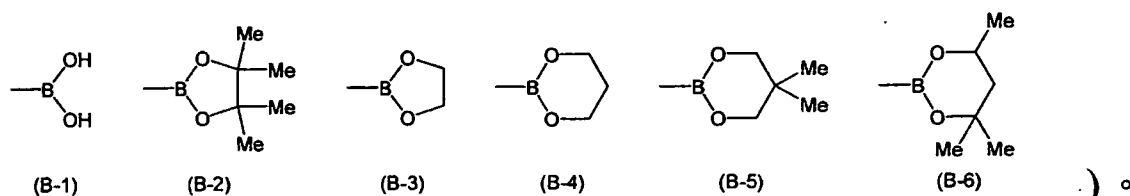


(A-3)

(式中，M 為鈐、銻、鈹、鐵、銓或鉑之金屬原子； R^1 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^8 、 L^1 及 L^2 係各自獨立地表示氫原子、鹵原子、烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、醯基、醯氧基、醯胺基、醯亞胺基、亞胺殘基、取代胺基、取代矽烷基、取代矽烷氧基、取代矽烷硫基、取代矽烷胺基、1 價雜環基、雜芳氧基、雜芳硫基、芳烯基、芳炔基、取代羧基、或氰基，或者是 R^3 及 R^4 、或 R^5 及 R^6 可結合而形成環；m 為 1 至 3 之整數，n 為 0 至 2 之整數；下述式 (3) 所示之部分係表示單陰離子性之雙牙配位基：



； R^x 及 R^y 係結合於金屬原子 M 上之原子，各自獨立地表示碳原子、氧原子或氮原子； J^1 及 J^2 係各自獨立地以下述式 (B-1) 至 (B-6) 所示之基：



9. 一種化合物，其係以前述式 (A-1) 所示。
10. 一種化合物，其係以前述式 (A-2) 所示。
11. 一種化合物，其係以前述式 (A-3) 所示。
12. 一種高分子化合物，其含有申請專利範圍第 1 項至第 7 項中任一項之金屬錯合物之殘基。
13. 如申請專利範圍第 12 項之高分子化合物，其係共軛性

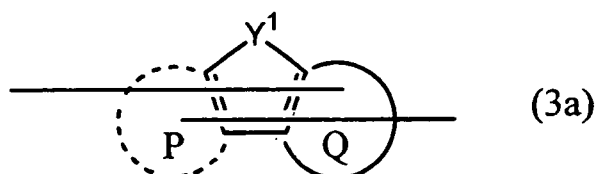
高分子。

14. 如申請專利範圍第 12 項或第 13 項之高分子化合物，其含有下述式(I)所示之基：



(式中，Ar 表示伸芳基、2 價雜環基、或 2 價芳香族胺基；此等基亦可具有取代基)。

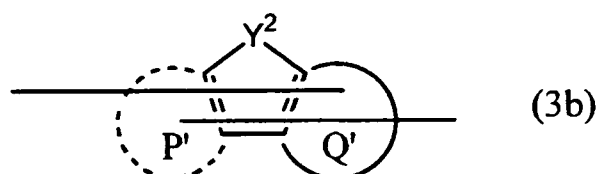
15. 如申請專利範圍第 14 項之高分子化合物，其中，前述伸芳基係亦可具有取代基之伸苯基、亦可具有取代基之伸萘基、或以下述式(3a)所示之基：



(式中，P 環及 Q 環係各自獨立地表示芳香環，但 P 環可存在、亦可不存在；當 P 環存在時，2 支結合鍵係分別存在於 P 環或 Q 環上；當 P 環不存在時，2 支結合鍵係分別存在於含有 Y¹ 之 5 員環或 6 員環、或是 Q 環上；P 環、Q 環、及含有 Y¹ 之 5 員環或 6 員環係各自獨立地亦可具有從由烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、鹵原子、醯基、醯氧基、亞胺殘基、醯胺基、醯亞胺基、1 價雜環基、羧基、取代羧基及氰基所成組群中選出之至少 1 種取代基；Y¹ 係表示 $-\text{C}(\text{R}^{11})(\text{R}^{12})-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^{14})(\text{R}^{15})-\text{C}(\text{R}^{16})(\text{R}^{17})-$ 、 $-\text{C}(\text{R}^{32})=\text{C}(\text{R}^{33})-$ ；R¹¹、R¹²、R¹⁴ 至

R^{17} 、 R^{32} 及 R^{33} 係各自獨立地表示氫原子、烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、矽烷氧基、取代矽烷氧基、1 價雜環基或鹵原子)。

16. 如申請專利範圍第 14 項之高分子化合物，其中，前述 2 價雜環基係以下述式(3b)所示之基：



(式中， P' 環及 Q' 環係各自獨立地表示芳香環，但 P' 環可存在、亦可不存在；當 P' 環存在時，2 支結合鍵係分別存在於 P' 環或 Q' 環上；當 P' 環不存在時，2 支結合鍵係分別存在於含有 Y^2 之 5 員環或 6 員環、或是 Q' 環上； P' 環、 Q' 環、及含有 Y^2 之 5 員環或 6 員環係各自獨立地亦可具有從由烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、鹵原子、醯基、醯氧基、亞胺殘基、醯胺基、醯亞胺基、1 價雜環基、羧基、取代羧基及氰基所成組群中選出之至少 1 種取代基； Y^2 係表示 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Se-$ 、 $-B(R^6)-$ 、 $-Si(R^7)(R^8)-$ 、 $-P(R^9)-$ 、 $-P R^{10}(=O)-$ 、 $-N(R^{13})-$ 、 $-O-C(R^{18})(R^{19})-$ 、 $-S-C(R^{20})(R^{21})-$ 、 $-N-C(R^{22})(R^{23})-$ 、 $-Si(R^{24})(R^{25})-C(R^{26})(R^{27})-$ 、

— Si(R²⁸)(R²⁹) — Si(R³⁰)(R³¹) — 、 — N = C(R³⁴) — 或 — Si(R³⁵) = C(R³⁶) — ； R⁶ 至 R¹⁰、R¹³、R¹⁸ 至 R³¹、及 R³⁴ 至 R³⁶ 係各自獨立地表示氫原子、烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳烷基、芳烷氧基、芳烷硫基、芳烯基、芳炔基、胺基、取代胺基、矽烷基、取代矽烷基、矽烷氧基、取代矽烷氧基、1 價雜環基或鹵原子)。

17. 一種組成物，其含有：申請專利範圍第 1 項至第 7 項中任一項之金屬錯合物及/或申請專利範圍第 12 項至第 16 項中任一項之高分子化合物。
18. 一種液狀組成物，其含有：申請專利範圍第 1 項至第 7 項中任一項之金屬錯合物及/或申請專利範圍第 12 項至第 16 項中任一項之高分子化合物、與溶劑或分散媒。
19. 一種膜，其含有：申請專利範圍第 1 項至第 7 項中任一項之金屬錯合物及/或申請專利範圍第 12 項至第 16 項中任一項之高分子化合物。
20. 一種元件，其含有：申請專利範圍第 1 項至第 7 項中任一項之金屬錯合物及/或申請專利範圍第 12 項至第 16 項中任一項之高分子化合物。
21. 如申請專利範圍第 20 項之元件，其具有：

由陽極及陰極所構成的電極；以及

設置於該電極間並含有申請專利範圍第 1 項至第 7 項中任一項之金屬錯合物及/或申請專利範圍第 12 項至第 16 項中任一項之高分子化合物的層。

- 22.如申請專利範圍第 20 項或第 21 項之元件，其係發光元件。
- 23.一種面狀光源，其係使用有申請專利範圍第 22 項之元件。
- 24.一種照明，其係使用有申請專利範圍第 22 項之元件。