

【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】令和 3 年 9 月 30 日 (2021.9.30)

【公開番号】特開 2021-98709 (P2021-98709A)

【公開日】令和 3 年 7 月 1 日 (2021.7.1)

【年通号数】公開・登録公報 2021-029

【出願番号】特願 2021-21305 (P2021-21305)

【国際特許分類】

C 0 7 F 15/00 (2006.01)

C 0 7 C 49/92 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

H 0 5 B 33/10 (2006.01)

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

C 0 7 D 213/06 (2006.01)

C 0 7 D 401/04 (2006.01)

【 F I 】

C 0 7 F 15/00 C S P E

C 0 7 C 49/92

C 0 9 K 11/06 6 6 0

H 0 5 B 33/10

H 0 5 B 33/14 B

C 0 7 D 213/06

C 0 7 D 401/04

【手続補正書】

【提出日】令和 3 年 8 月 17 日 (2021.8.17)

【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】

式 (I) : $M (L^1) x (L^2) y$

の金属錯体であって、

式中、

M は第 2 列または第 3 列遷移金属であり、

L^1 は存在するごとに独立して発光配位子であり、

L^2 は補助配位子であり、

x は少なくとも 1 であり、

y は少なくとも 1 であり、

少なくとも 1 つの L^1 は、式 - (A r)_p (式中、A r は存在するごとに、独立して非置換または 1 つ以上の置換基で置換されていてもよいアリールまたはヘテロアリール基であり、p は少なくとも 2 である) の少なくとも 1 つの基で置換され、

前記金属錯体の遷移双極子モーメントベクトルと少なくとも 1 つの L^1 - (A r)_p 結合の結合ベクトルとの間の角度が 15 ° 未満である、金属錯体。

【請求項 2】

式 (I) : $M (L^1) x (L^2) y$

の金属錯体であって、

式中、

Mは第2列または第3列遷移金属であり、

L^1 は存在するごとに独立して発光配位子であり、

L^2 は補助配位子であり、

xは少なくとも1であり、

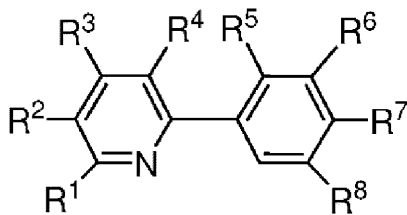
yは少なくとも1であり、

少なくとも1つの L^1 は式-(Ar)_p(式中、Arは存在するごとに、独立して非置換または1つ以上の置換基で置換されていてもよいアリールまたはヘテロアリール基であり、pは少なくとも2である)の少なくとも1つの基で置換され、その結果、前記金属錯体のa:b比は少なくとも3:1であり、aは前記錯体の遷移双極子モーメントと平行な方向における前記錯体の大きさであり、bは前記錯体の前記遷移双極子モーメントに垂直な任意の方向における前記錯体の大きさである、金属錯体。

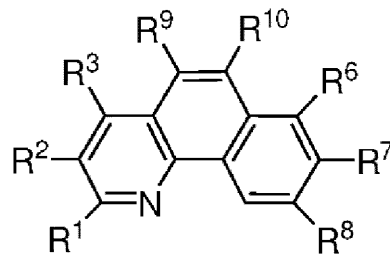
【請求項3】

前記 L^1 の発光配位子は存在するごとに独立に式(IIa)または(IIb)：

【化1】



(IIa)



(IIb)

の基であり、

式中、 $R^1 \sim R^{10}$ は、それぞれ独立してHまたは置換基であり、ただし少なくとも1つの L^1 の R^3 、 R^5 および R^9 の少なくとも1つが式-(Ar)_p(式中、Arは存在するごとに、独立して非置換または1つ以上の置換基で置換されていてもよいアリールまたはヘテロアリール基であり、pは少なくとも2である)の基である、請求項1または2に記載の金属錯体。

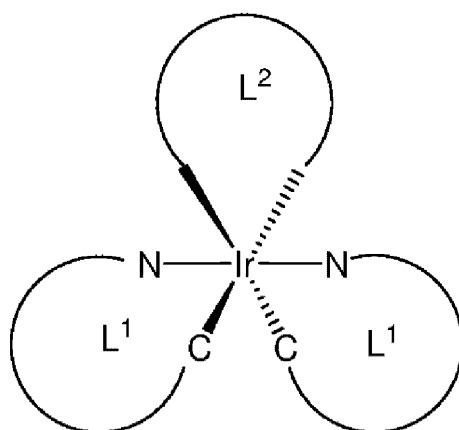
【請求項4】

xが2である、請求項1～3のいずれか1項に記載の金属錯体。

【請求項5】

式(I)の前記化合物が、式(Ia)：

【化 2】



(Ia)

を有する、請求項 4 に記載の金属錯体。

【請求項 6】

各配位子 L^1 が、式 $-(Ar)_p$ の少なくとも 1 つの置換基で置換されている、請求項 4 または 5 に記載の金属錯体。

【請求項 7】

前記 2 つの配位子 L^1 が同じである、請求項 6 に記載の金属錯体。

【請求項 8】

少なくとも 1 つの配位子 L^1 の R^3 のみが置換基 $-(Ar)_p$ である、請求項 1 ~ 7 のいずれかに記載の金属錯体。

【請求項 9】

y が 1 である、請求項 1 ~ 8 のいずれかに記載の金属錯体。

【請求項 10】

前記または各 L^2 が、独立して二座配位子である、請求項 1 ~ 9 のいずれかに記載の金属錯体。

【請求項 11】

前記または各 L^2 が、N, N - キレート配位子、N, O - - キレート配位子、および O, O - - キレート配位子からなる群から独立して選択される、請求項 10 に記載の金属錯体。

【請求項 12】

M がイリジウムである、請求項 1 ~ 11 のいずれかに記載の金属錯体。

【請求項 13】

各 Ar が、独立して、炭素原子および窒素原子の非置換もしくは置換フェニルまたは非置換もしくは置換ヘテロアリールである、請求項 1 ~ 12 のいずれかに記載の金属錯体。

【請求項 14】

前記または各配位子 L^1 の唯一の置換基または複数の置換基が、式 $-(Ar)_p$ の置換基である、請求項 1 ~ 13 のいずれかに記載の金属錯体。

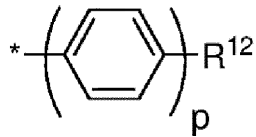
【請求項 15】

Ar が、非置換または 1 つ以上の置換基で置換されたフェニルである、請求項 1 ~ 14 のいずれかに記載の金属錯体。

【請求項 16】

$-(Ar)_p$ が、式：

【化 3】



の基であり、

式中、各フェニルは、独立して非置換または 1 つ以上の置換基で置換され、 R^{12} は H または置換基である、請求項 15 に記載の金属錯体。

【請求項 17】

請求項 1 ～ 16 のいずれか 1 項に記載の金属錯体を含む配合物。

【請求項 18】

アノード、カソード、および請求項 1 ～ 16 のいずれか 1 項に記載の金属錯体を含む前記アノードと前記カソードとの間の発光層を含む、有機発光素子。

【請求項 19】

請求項 1 ～ 16 のいずれか 1 項に記載の金属錯体を含む配合物を、前記アノードおよび前記カソードの一方の上に堆積させるステップと、

前記少なくとも 1 つの溶媒を蒸発させ、前記発光層を形成するステップと、

前記発光層上に前記アノードおよびカソードの他方を形成するステップと、を含む、有機発光素子を形成する方法。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0313

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0313】

本発明を特定の例示的な実施形態に関して説明してきたが、本明細書に開示された特徴の様々な変更、改変および / または組み合わせが、以下の特許請求の範囲に記載される本発明の範囲から逸脱することなく当業者には明らかであることが理解されよう。

本発明は一態様において、以下を提供する。

[項目 1]

式 (I) : $\text{M}(\text{L}^1)_x(\text{L}^2)_y(\text{I})$ の金属錯体であって、

式中、

M は第 2 列または第 3 列遷移金属であり、

L^1 は存在するごとに独立して発光配位子であり、

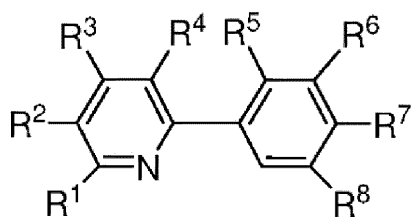
L^2 は補助配位子であり、

x は少なくとも 1 であり、

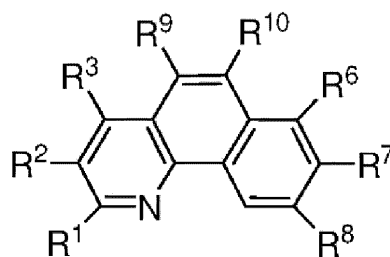
y は少なくとも 1 であり、

各 L^1 は式 (I Ia) または (I Ib) :

【化 1】



(IIa)



(IIb)

の基であり、

式中、 $R^1 \sim R^{10}$ は、それぞれ独立して H または置換基であり、ただし少なくとも 1 つの L^1 の R^3 、 R^5 および R^9 の少なくとも 1 つが式 - (Ar)_p (式中、Ar は存在するごとに、独立して非置換または 1 つ以上の置換基で置換されていてよいアリールまたはヘテロアリール基であり、p は少なくとも 2 である) の基である、金属錯体。

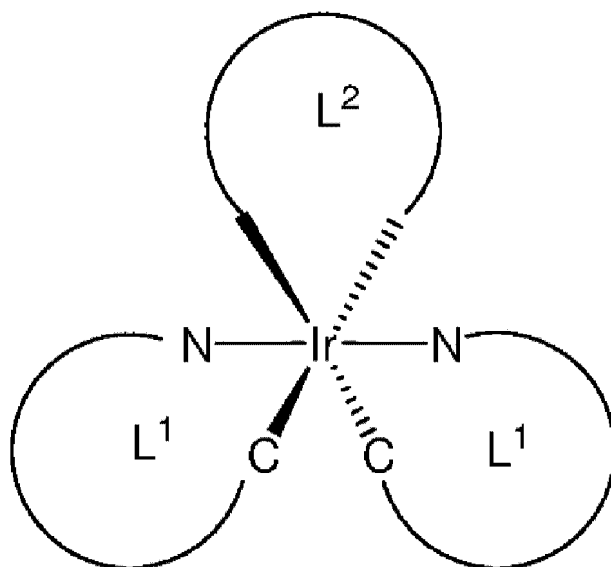
[項目 2]

x が 2 である、項目 1 に記載の金属錯体。

[項目 3]

式 (I) の前記化合物が、式 (Ia) :

【化 2】



(Ia)

を有する、項目 2 に記載の金属錯体。

[項目 4]

各配位子 L^1 が、式 - (Ar)_p の少なくとも 1 つの置換基で置換されている、項目 2 または 3 に記載の金属錯体。

[項目 5]

前記 2 つの配位子 L^1 が同じである、項目 4 に記載の金属錯体。

[項目 6]

少なくとも 1 つの配位子 L^1 の R^3 のみが置換基 $-(Ar)_p$ である、項目 1 ~ 5 のいずれかに記載の金属錯体。

[項目 7]

y が 1 である、項目 1 ~ 6 のいずれかに記載の金属錯体。

[項目 8]

前記または各 L^2 が、独立して二座配位子である、項目 1 ~ 7 のいずれかに記載の金属錯体。

[項目 9]

前記または各 L^2 が、N, N - キレート配位子、N, O - - キレート配位子、および O, O - - キレート配位子からなる群から独立して選択される、項目 8 に記載の金属錯体。

[項目 10]

M がイリジウムである、項目 1 ~ 9 のいずれかに記載の金属錯体。

[項目 11]

各 Ar が、独立して、炭素原子および窒素原子の非置換もしくは置換フェニルまたは非置換もしくは置換ヘテロアリールである、項目 1 ~ 10 のいずれかに記載の金属錯体。

[項目 12]

前記または各配位子 L^1 の唯一の置換基または複数の置換基が、式 $-(Ar)_p$ の置換基である、項目 1 ~ 11 のいずれかに記載の金属錯体。

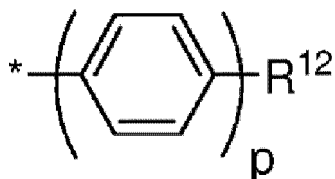
[項目 13]

Ar が、非置換または 1 つ以上の置換基で置換されたフェニルである、項目 1 ~ 12 のいずれかに記載の金属錯体。

[項目 14]

$-(Ar)_p$ が、式：

【化 3】



の基であり、

式中、各フェニルは、独立して非置換または 1 つ以上の置換基で置換され、 R^{12} は H または置換基である、項目 13 に記載の金属錯体。

[項目 15]

項目 1 ~ 14 のいずれかに記載の金属錯体およびホストを含む、組成物。

[項目 16]

前記ホストがポリマーである、項目 15 に記載の組成物。

[項目 17]

項目 15 または 16 に記載の組成物および少なくとも 1 つの溶媒を含む、配合物。

[項目 18]

アノード、カソードおよび項目 15 または 16 に記載の組成物を含む前記アノードと前記カソードとの間の発光層を含む、有機発光素子。

[項目 19]

項目 17 に記載の前記配合物を、前記アノードおよび前記カソードの一方の上に堆積さ

せるステップと、

前記少なくとも 1 つの溶媒を蒸発させ、前記発光層を形成するステップと、
前記発光層上に前記アノードおよびカソードの他方を形成するステップと、
を含む、項目 18 に記載の素子を形成する方法。

[項目 20]

式 (I) : $M(L^1)_x(L^2)_y$ (I) の金属錯体であって、

式中、

M は第 2 列または第 3 列遷移金属であり、

L^1 は存在するごとに独立して発光配位子であり、

L^2 は補助配位子であり、

x は少なくとも 1 であり、

y は少なくとも 1 であり、

少なくとも 1 つの L^1 は、式 - (Ar)_p (式中、Ar は存在するごとに、独立して非置換または 1 つ以上の置換基で置換されていてもよいアリーールまたはヘテロアリーール基であり、p は少なくとも 2 である) の少なくとも 1 つの基で置換され、

前記金属錯体の遷移双極子モーメントベクトルと少なくとも 1 つの L^1 - (Ar)_p 結合の結合ベクトルとの間の角度が 15° 未満である、金属錯体。

[項目 21]

式 (I) : $M(L^1)_x(L^2)_y$ (I) の金属錯体であって、

式中、

M は第 2 列または第 3 列遷移金属であり、

L^1 は存在するごとに独立して発光配位子であり、

L^2 は補助配位子であり、

x は少なくとも 1 であり、

y は少なくとも 1 であり、

少なくとも 1 つの L^1 は式 - (Ar)_p (式中、Ar は存在するごとに、独立して非置換または 1 つ以上の置換基で置換されていてもよいアリーールまたはヘテロアリーール基であり、p は少なくとも 2 である) の少なくとも 1 つの基で置換され、その結果、前記金属錯体の a : b 比は少なくとも 3 : 1 であり、a は前記錯体の遷移双極子モーメントと平行な方向における前記錯体の大きさであり、b は前記錯体の前記遷移双極子モーメントに垂直な任意の方向における前記錯体の大きさである、金属錯体。