



## (12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 101567425 B

(45) 授权公告日 2012. 10. 24

(21) 申请号 200910135125. 4

C07D 409/14 (2006. 01)

(22) 申请日 2009. 04. 22

C07D 417/14 (2006. 01)

(30) 优先权数据

C07F 9/6568 (2006. 01)

111799/2008 2008. 04. 22 JP

C07F 15/00 (2006. 01)

310220/2008 2008. 12. 04 JP

C07F 1/08 (2006. 01)

C07F 3/06 (2006. 01)

(73) 专利权人 富士胶片株式会社

C07F 15/04 (2006. 01)

地址 日本东京都

(56) 对比文件

(72) 发明人 邑上健 伊势俊大 木下郁雄

CN 1875026 A, 2006. 12. 06,

高田早 武田玲 泷泽裕雄

US 2008/0001530 A1, 2008. 01. 03,

(74) 专利代理机构 永新专利商标代理有限公司

审查员 张月

72002

代理人 柴丽敏 于辉

(51) Int. Cl.

H01L 51/50 (2006. 01)

H01L 51/54 (2006. 01)

C07D 401/14 (2006. 01)

C07D 471/04 (2006. 01)

C07F 7/10 (2006. 01)

C07D 487/04 (2006. 01)

C07D 405/14 (2006. 01)

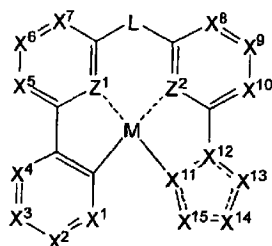
权利要求书 8 页 说明书 86 页

(54) 发明名称

有机电致发光装置、新型铂络合物和能够作为其配体的新型化合物

(57) 摘要

一种有机电致发光装置,其包含:一对电极;和包括发光层的至少一个有机层,所述发光层设置在所述一对电极之间,其中所述至少一个有机层的至少一层含有如说明书中定义的式(1)代表的化合物。式(1)

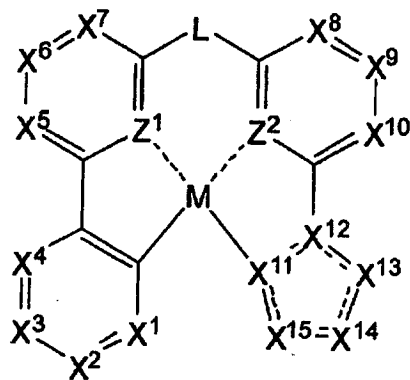


1. 一种有机电致发光装置,其包含:

一对电极;和

包括发光层的至少一个有机层,所述发光层设置在所述一对电极之间,其中所述至少一个有机层的至少一层含有式(1)代表的化合物:

式(1)



(1)

其中每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子;

$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子;

每个  $X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$ ,  $X^8$ ,  $X^9$  和  $X^{10}$  独立地代表碳原子或氮原子;

每个  $X^{11}$  和  $X^{12}$  独立地代表碳原子或氮原子;

每个  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子;

由  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5-元环结构中所含的氮原子数量不超过 2;

每个  $Z^1$  和  $Z^2$  独立地代表氮原子或磷原子;

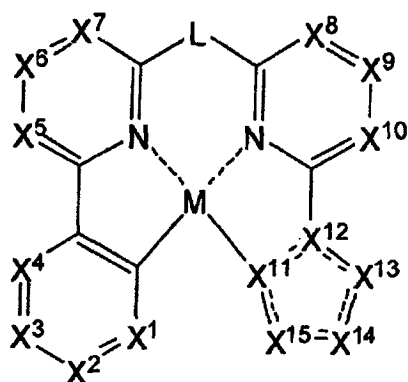
-L- 代表直接键或二价连接基团;和

M 代表二价金属离子。

2. 如权利要求 1 所述的有机电致发光装置,

其中所述式(1)代表的化合物是式(2)代表的化合物:

式(2)



(2)

其中每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子;

$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子;

每个  $X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$  和  $X^{10}$  独立地代表碳原子或氮原子；

每个  $X^{11}$  和  $X^{12}$  独立地代表碳原子或氮原子；

每个  $X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子；

由  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5-元环结构中所含的氮原子数量不超过 2；

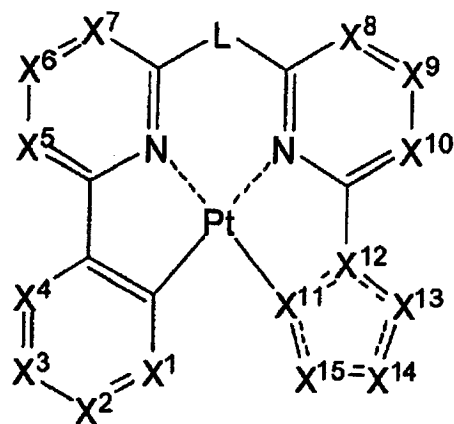
-L- 代表直接键或二价连接基团；和

M 代表二价金属离子。

3. 如权利要求 2 所述的有机电致发光装置，

其中所述式 (2) 代表的化合物是式 (3) 代表的化合物：

式 (3)



(3)

其中每个  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子；

$X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子；

每个  $X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$  和  $X^{10}$  独立地代表碳原子或氮原子；

每个  $X^{11}$  和  $X^{12}$  独立地代表碳原子或氮原子；

每个  $X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子；

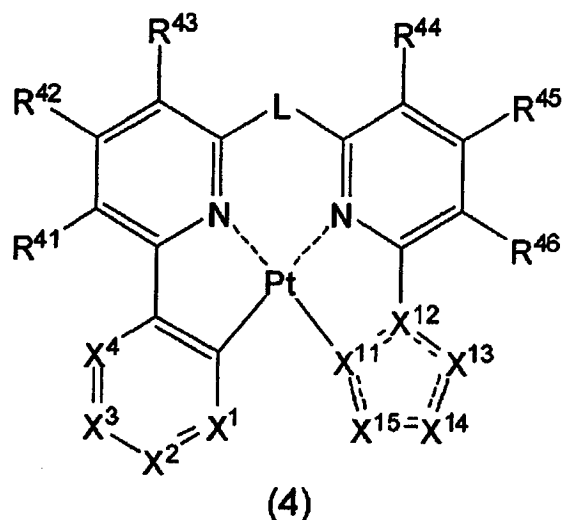
由  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5-元环结构中所含的氮原子数量不超过 2；和

-L- 代表直接键或二价连接基团。

4. 如权利要求 3 所述的有机电致发光装置，

其中所述式 (3) 代表的化合物是式 (4) 代表的化合物：

式 (4)



其中每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子；

$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子；

每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；

每个  $X^{11}$  和  $X^{12}$  独立地代表碳原子或氮原子；

每个  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子；

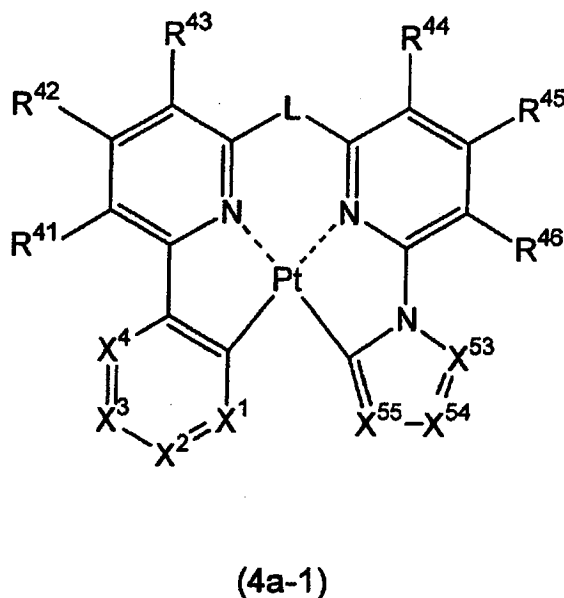
由  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5-元环结构中所含的氮原子数量不超过 2；和

-L- 代表直接键或二价连接基团。

5. 如权利要求 4 所述的有机电致发光装置，

其中所述式 (4) 代表的化合物是式 (4a-1) 代表的化合物：

式 (4a-1)



其中每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子；

$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子；

每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；

每个  $X^{53}$ ,  $X^{54}$  和  $X^{55}$  独立地代表碳原子或氮原子；

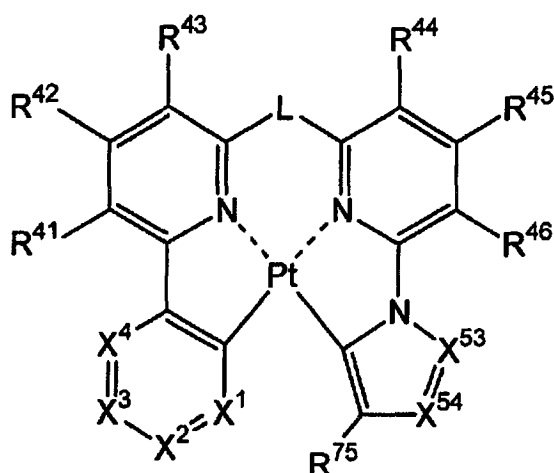
含有  $X^{53}$ ,  $X^{54}$  和  $X^{55}$  的 5-元环结构中所含的氮原子数量是 1 或 2；和

-L- 代表直接键或二价连接基团。

6. 如权利要求 5 所述的有机电致发光装置，

其中所述式 (4a-1) 代表的化合物是式 (4a-2) 代表的化合物：

式 (4a-2)



(4a-2)

其中每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子；

$X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子；

每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；

每个  $X^{53}$  和  $X^{54}$  独立地代表碳原子或氮原子；

含有  $X^{53}$  和  $X^{54}$  的 5-元环结构中所含的氮原子数量是 1 或 2；

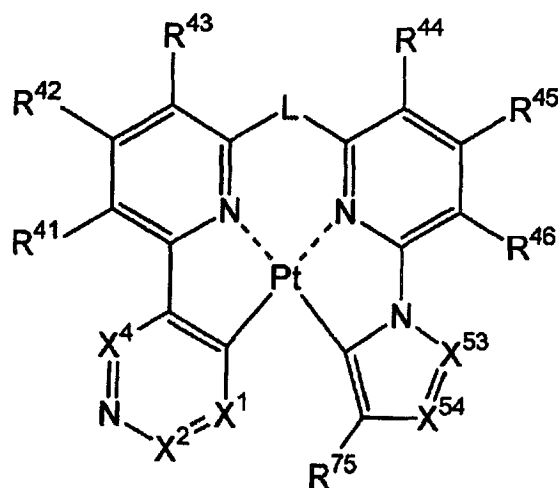
$R^{75}$  代表氢原子或取代基；和

-L- 代表直接键或二价连接基团。

7. 如权利要求 6 所述的有机电致发光装置，

其中所述式 (4a-2) 代表的化合物是式 (4a-3) 代表的化合物：

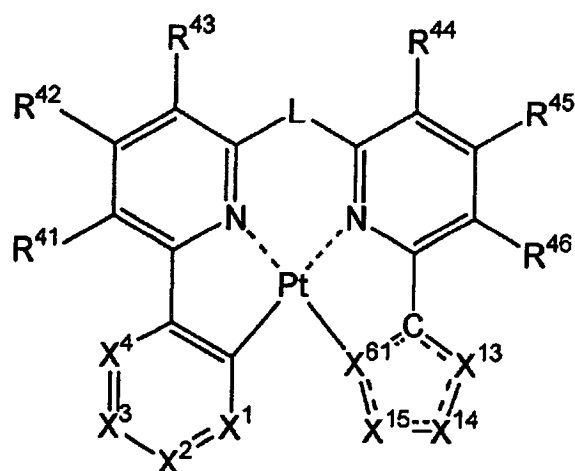
式 (4a-3)



(4a-3)

其中每个  $X^1$ ,  $X^2$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子；  
 每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；  
 每个  $X^{53}$  和  $X^{54}$  独立地代表碳原子或氮原子；  
 含有  $X^{53}$  和  $X^{54}$  的 5-元环结构中所含的氮原子数量是 1 或 2；  
 $R^{75}$  代表氢原子或取代基；和  
 $-L-$  代表直接键或二价连接基团。

8. 如权利要求 4 所述的有机电致发光装置，  
 其中所述式 (4) 代表的化合物是式 (4b-1) 代表的化合物：  
 式 (4b-1)

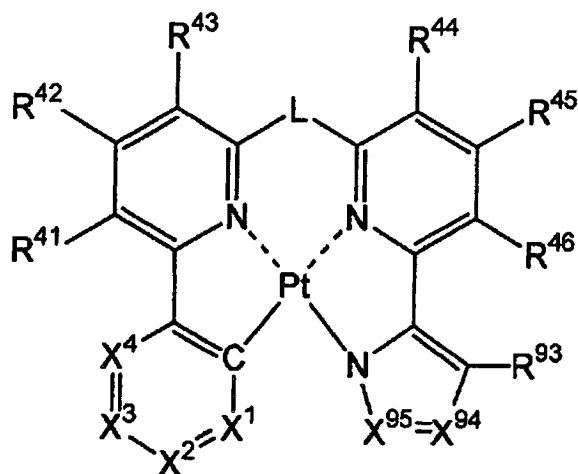


(4b-1)

其中每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子；  
 $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子；  
 每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；  
 $X^{61}$  代表碳原子或氮原子；

每个  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子 ;  
 由  $X^{61}$ 、碳原子、 $X^{13}$ 、 $X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5- 元环结构中所含的氮原子数量不超过 2 ;和  
 -L- 代表直接键或二价连接基团。

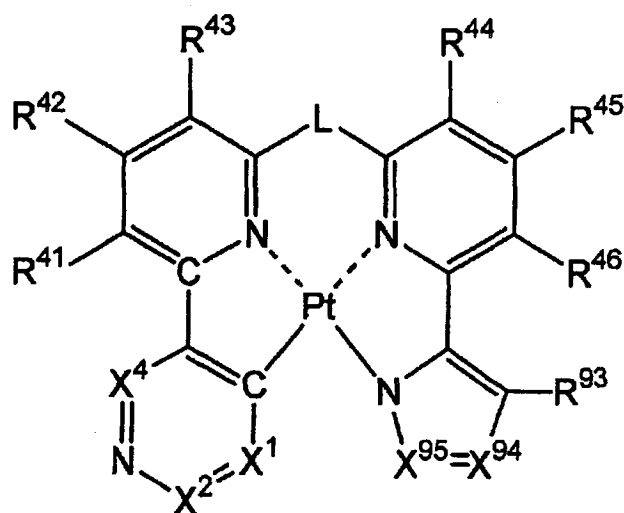
9. 如权利要求 8 所述的有机电致发光装置,  
 其中所述式 (4b-1) 代表的化合物是式 (4b-2) 代表的化合物 :  
 式 (4b-2)



**(4b-2)**

其中每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子 ;  
 $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子 ;  
 每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基 ;  
 每个  $X^{94}$  和  $X^{95}$  独立地代表碳原子或氮原子 ;  
 $X^{94}$  和  $X^{95}$  中的至少一个代表碳原子 ;  
 $R^{93}$  代表氢原子或取代基 ;和  
 -L- 代表直接键或二价连接基团。

10. 如权利要求 9 所述的有机电致发光装置,  
 其中所述式 (4b-2) 代表的化合物是式 (4b-3) 代表的化合物 :  
 式 (4b-3)



(4b-3)

其中每个  $X^1$ ,  $X^2$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子；

$X^1$ ,  $X^2$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子；

每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；

每个  $X^{94}$  和  $X^{95}$  独立地代表碳原子或氮原子；

$X^{94}$  和  $X^{95}$  中的至少一个代表碳原子；

$R^{93}$  代表氢原子或取代基；和

-L- 代表直接键或二价连接基团。

11. 如权利要求 1 所述的有机电致发光装置，

其中所述发光层含有所述式 (1) 代表的化合物中的至少一种。

12. 如权利要求 1 所述的有机电致发光装置，

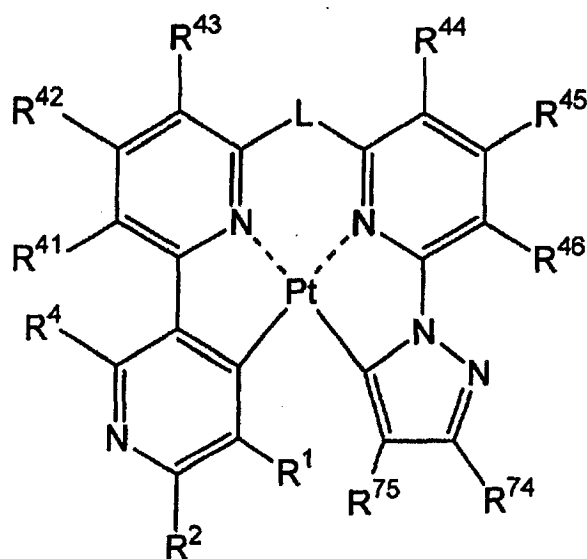
其中所述至少一个有机层的至少一层含有具有至少一个氧原子的材料。

13. 如权利要求 12 所述的有机电致发光装置，

其中所述具有至少一个氧原子的材料是含有各自具有至少一个氧原子的卞唑结构和  
吡啶结构中的任一种的材料。

14. 一种式 (4a-4) 代表的化合物：

式 (4a-4)

**(4a-4)**

其中每个  $R^1, R^2, R^4, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{74}$  和  $R^{75}$  独立地代表氢原子或取代基 ; 和 -L- 代表直接键或二价连接基团。

## 有机电致发光装置、新型铂络合物和能够作为其配体的新型化合物

### 技术领域

[0001] 本发明涉及一种有机电致发光装置（下面也称作“装置”或“有机 EL 装置”）。具体而言，本发明涉及一种在高亮度下具有优异耐用性的有机电致发光装置。

### 背景技术

[0002] 近年来，有机电致发光装置（有机 EL 装置）正被积极地研究和开发，因为可以通过低电压驱动获得高亮度的发光。通常，有机 EL 装置具有包括发光层的有机层和在其间夹持上述各层的一对电极，其中从阴极注入的电子和从阳极注入的空穴在发光层中重组产生激子，并且利用形成激子的能量发光。

[0003] 近年来，通过使用磷光材料已经提高了装置的效率。作为磷光发光材料，已知的有铱络合物、铂络合物等（参见，例如，JP-A-2005-220136）。

[0004] 使用具有四齿配体的铂络合物来增强有机 EL 装置的发光效率和耐用性的技术是已知的（参见，例如，WO 04/108857）。在铂络合物中，相对于具有苯基吡啶结构的络合物，具有吡啶基吡啶结构的络合物能够缩短发射波长，并且有希望作为蓝光到蓝色发光材料。然而，没有报道具有优异耐用性的发光材料。

[0005] 此外，具有吡啶基吡啶结构的发光材料和使用它的有机 EL 装置是已知的（参见 JP-A-2006-261623）。JP-A-2006-261623 公开了可以得到具有高发射亮度、高发光效率和高耐用性的有机 EL 装置。

### 发明内容

[0006] 然而，特别是在高亮度的同时能够满足高效率 and 耐用性的装置还没有研发出来。在考虑到对于显示器或照明设备发展有机 EL 装置的情况下，必须高亮度下利用有机 EL 装置。因此，需要开发一种在高亮度下耐用性优异的发光材料。

[0007] 本发明的目的是提供一种在高亮度下使用时具有优异耐用性的有机电致发光装置。

[0008] 此外，本发明的另一目的是提供一种能够在高亮度下使用时实现优异耐用性的发光材料。

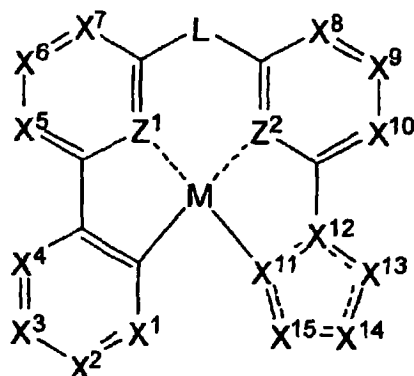
[0009] 为了解决上述问题，本发明人进行深入和广泛的研究。结果，本发明人发现了其中在含氮杂环 6-元环的碳原子处键合铂和在具有不超过两个氮原子的 5-元环的碳原子或氮原子处键合铂的金属络合物，并且还发现通过将这种金属络合物加到有机层中，与已知发光材料相比，在高亮度下使用时有机 EL 装置的耐用性得以增强。

[0010] 此外，已经发现，通过在有机层中使用具有至少一个氘原子的材料，耐用性进一步增强。

[0011] 即，通过下面方式能够解决上述问题。

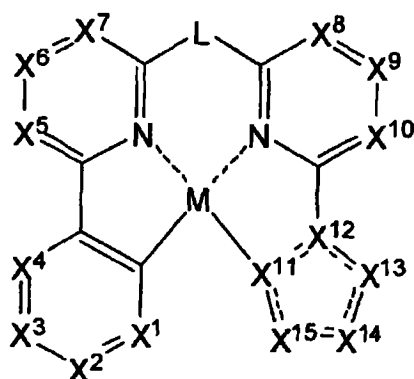
[0012] [1] 一种有机电致发光装置，其包含：

- [0013] 一对电极 ;和  
 [0014] 包括发光层的至少一个有机层,所述发光层设置在所述一对电极之间,  
 [0015] 其中所述至少一个有机层的至少一层含有式 (1) 代表的化合物 :  
 [0016] 式 (1)  
 [0017]



(1)

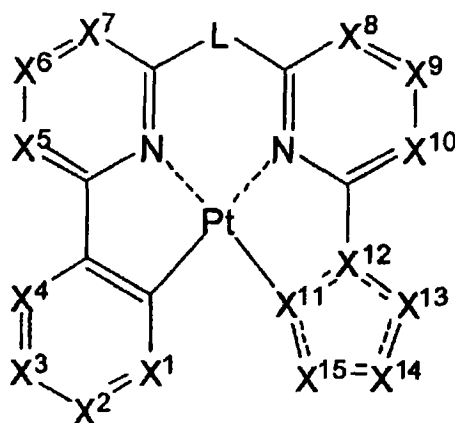
- [0018] 其中每个  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子 ;  
 [0019]  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子 ;  
 [0020] 每个  $X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$  和  $X^{10}$  独立地代表碳原子或氮原子 ;  
 [0021] 每个  $X^{11}$  和  $X^{12}$  独立地代表碳原子或氮原子 ;  
 [0022] 每个  $X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子 ;  
 [0023] 由  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5- 元环结构中所含的氮原子数量不超过 2 ;  
 [0024] 每个  $Z^1$  和  $Z^2$  独立地代表氮原子或磷原子 ;  
 [0025] -L- 代表直接键或二价连接基团 ;和  
 [0026] M 代表二价金属离子。  
 [0027] [2] 如上面 [1] 所述的有机电致发光装置,  
 [0028] 其中所述式 (1) 代表的化合物是式 (2) 代表的化合物 :  
 [0029] 式 (2)  
 [0030]



(2)

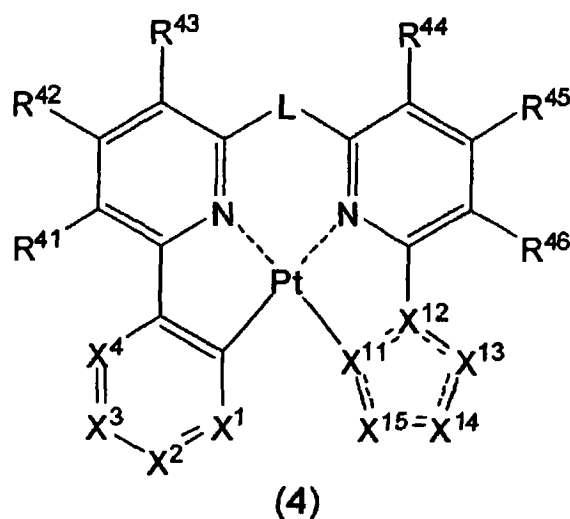
- [0031] 其中每个  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子 ;  
 [0032]  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子 ;

- [0033] 每个  $X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$  和  $X^{10}$  独立地代表碳原子或氮原子 ;
- [0034] 每个  $X^{11}$  和  $X^{12}$  独立地代表碳原子或氮原子 ;
- [0035] 每个  $X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子 ;
- [0036] 由  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5- 元环结构中所含的氮原子数量不超过 2 ;
- [0037] -L- 代表直接键或二价连接基团 ; 和
- [0038] M 代表二价金属离子。
- [0039] [3] 如上面 [2] 所述的有机电致发光装置,
- [0040] 其中所述式 (2) 代表的化合物是式 (3) 代表的化合物 :
- [0041] 式 (3)
- [0042]

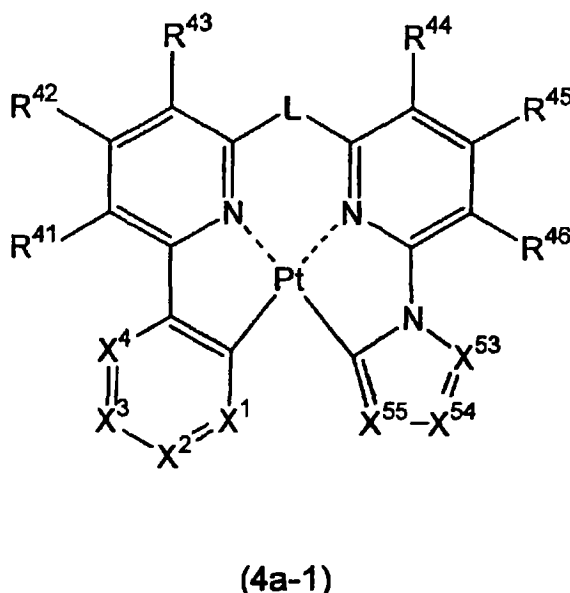


(3)

- [0043] 其中每个  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子 ;
- [0044]  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子 ;
- [0045] 每个  $X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$  和  $X^{10}$  独立地代表碳原子或氮原子 ;
- [0046] 每个  $X^{11}$  和  $X^{12}$  独立地代表碳原子或氮原子 ;
- [0047] 每个  $X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子 ;
- [0048] 由  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5- 元环结构中所含的氮原子数量不超过 2 ; 和
- [0049] -L- 代表直接键或二价连接基团。
- [0050] [4] 如上面 [3] 所述的有机电致发光装置,
- [0051] 其中所述式 (3) 代表的化合物是式 (4) 代表的化合物 :
- [0052] 式 (4)
- [0053]



- [0054] 其中每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子；
- [0055]  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子；
- [0056] 每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；
- [0057] 每个  $X^{11}$  和  $X^{12}$  独立地代表碳原子或氮原子；
- [0058] 每个  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子；
- [0059] 由  $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5-元环结构中所含的氮原子数量不超过 2；和
- [0060] -L- 代表直接键或二价连接基团。
- [0061] [5] 如上面 [4] 所述的有机电致发光装置，
- [0062] 其中所述式 (4) 代表的化合物是式 (4a-1) 代表的化合物：
- [0063] 式 (4a-1)
- [0064]



- [0065] 其中每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子；
- [0066]  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子；
- [0067] 每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；
- [0068] 每个  $X^{53}$ ,  $X^{54}$  和  $X^{55}$  独立地代表碳原子或氮原子；
- [0069] 含有  $X^{53}$ ,  $X^{54}$  和  $X^{55}$  的 5-元环结构中所含的氮原子数量是 1 或 2；和

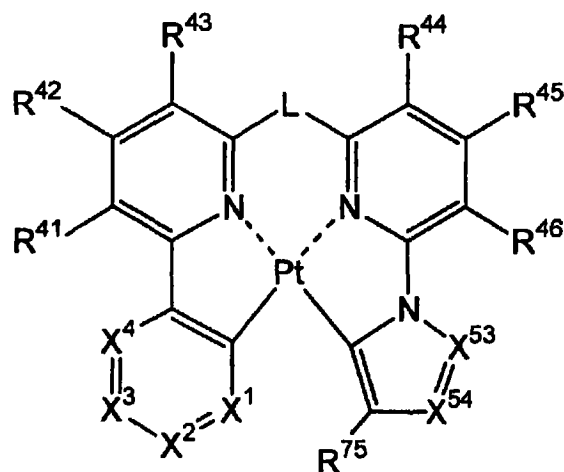
[0070] -L- 代表直接键或二价连接基团。

[0071] [6] 如上面 [5] 所述的有机电致发光装置，

[0072] 其中所述式 (4a-1) 代表的化合物是式 (4a-2) 代表的化合物：

[0073] 式 (4a-2)

[0074]



(4a-2)

[0075] 其中每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子；

[0076]  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子；

[0077] 每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；

[0078] 每个  $X^{53}$  和  $X^{54}$  独立地代表碳原子或氮原子；

[0079] 含有  $X^{53}$  和  $X^{54}$  的 5-元环结构中所含的氮原子数量是 1 或 2；

[0080]  $R^{75}$  代表氢原子或取代基；和

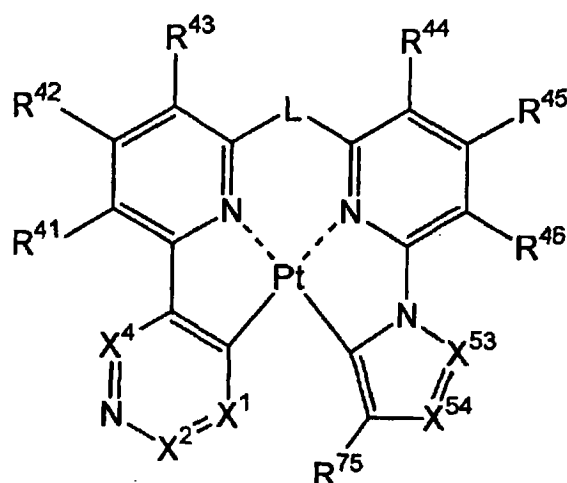
[0081] -L- 代表直接键或二价连接基团。

[0082] [7] 如上面 [6] 所述的有机电致发光装置，

[0083] 其中所述式 (4a-2) 代表的化合物是式 (4a-3) 代表的化合物：

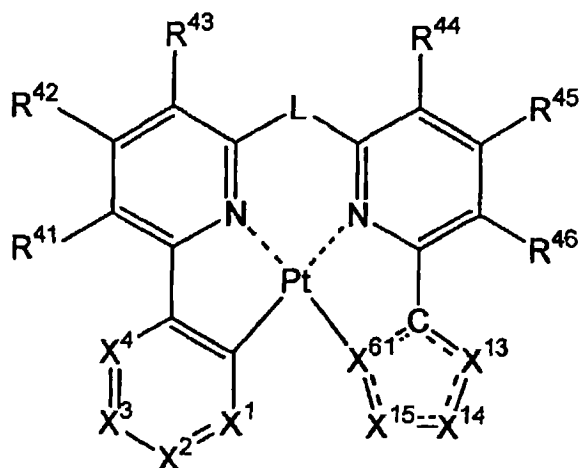
[0084] 式 (4a-3)

[0085]



(4a-3)

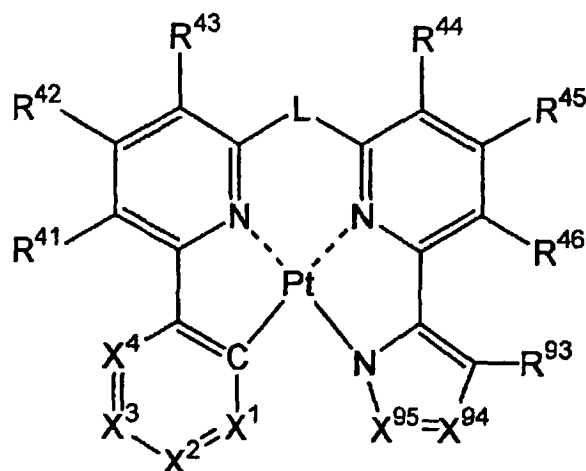
- [0086] 其中每个  $X^1$ ,  $X^2$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子；  
 [0087] 每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；  
 [0088] 每个  $X^{53}$  和  $X^{54}$  独立地代表碳原子或氮原子；  
 [0089] 含有  $X^{53}$  和  $X^{54}$  的 5-元环结构中所含的氮原子数量是 1 或 2；  
 [0090]  $R^{75}$  代表氢原子或取代基；和  
 [0091] -L- 代表直接键或二价连接基团。  
 [0092] [8] 如上面 [4] 所述的有机电致发光装置，  
 [0093] 其中所述式 (4) 代表的化合物是式 (4b-1) 代表的化合物：  
 [0094] 式 (4b-1)  
 [0095]



(4b-1)

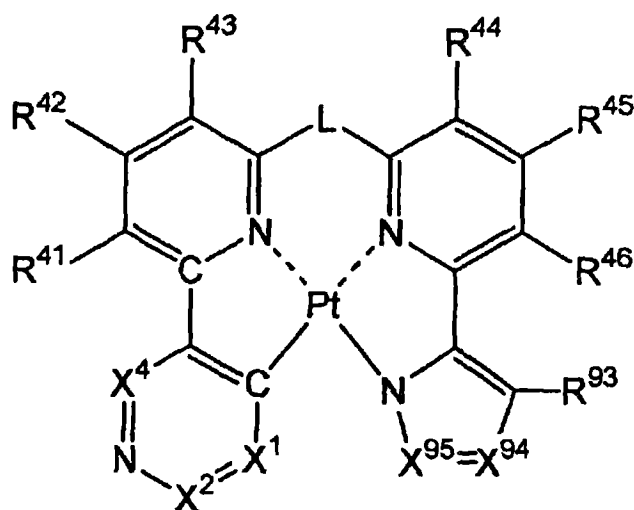
- [0096] 其中每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子；  
 [0097]  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子；  
 [0098] 每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；  
 [0099]  $X^{61}$  代表碳原子或氮原子；

- [0100] 每个  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子 ;  
 [0101] 由  $X^{61}$ 、碳原子、 $X^{13}$ 、 $X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5- 元环结构中所含的氮原子数量不超过 2 ;和  
 [0102] -L- 代表直接键或二价连接基团。  
 [0103] [9] 如上面 [8] 所述的有机电致发光装置,  
 [0104] 其中所述式 (4b-1) 代表的化合物是式 (4b-2) 代表的化合物 :  
 [0105] 式 (4b-2)  
 [0106]



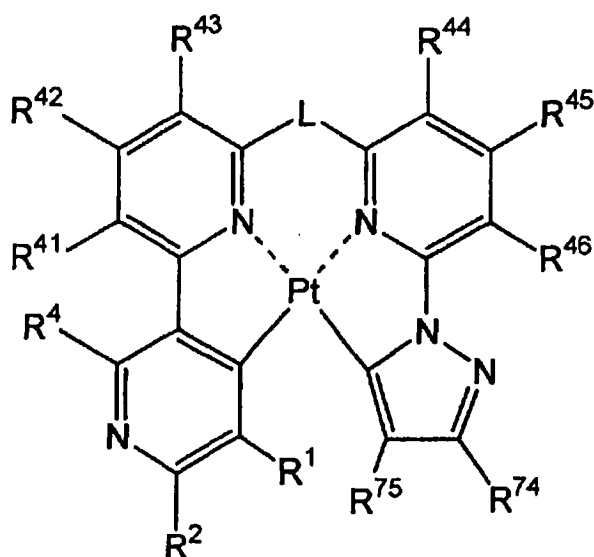
(4b-2)

- [0107] 其中每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子 ;  
 [0108]  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子 ;  
 [0109] 每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基 ;  
 [0110] 每个  $X^{94}$  和  $X^{95}$  独立地代表碳原子或氮原子 ;  
 [0111]  $X^{94}$  和  $X^{95}$  中的至少一个代表碳原子 ;  
 [0112]  $R^{93}$  代表氢原子或取代基 ;和  
 [0113] -L- 代表直接键或二价连接基团。  
 [0114] [10] 如上面 [9] 所述的有机电致发光装置,  
 [0115] 其中所述式 (4b-2) 代表的化合物是式 (4b-3) 代表的化合物 :  
 [0116] 式 (4b-3)  
 [0117]



(4b-3)

- [0118] 其中每个  $X^1$ ,  $X^2$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子；
- [0119]  $X^1$ ,  $X^2$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子；
- [0120] 每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；
- [0121] 每个  $X^{94}$  和  $X^{95}$  独立地代表碳原子或氮原子；
- [0122]  $X^{94}$  和  $X^{95}$  中的至少一个代表碳原子；
- [0123]  $R^{93}$  代表氢原子或取代基；和
- [0124]  $-L-$  代表直接键或二价连接基团。
- [0125] [11] 如上面 [1] ~ [10] 中任一项所述的有机电致发光装置，
- [0126] 其中所述发光层含有所述式 (1) ~ (4)、(4a-1) ~ (4a-3) 和 (4b-1) ~ (4b-3) 代表的化合物中的至少一种。
- [0127] [12] 如上面 [1] ~ [11] 中任一项所述的有机电致发光装置，
- [0128] 其中所述至少一个有机层的至少一层含有具有至少一个氮原子的材料。
- [0129] [13] 如上面 [12] 所述的有机电致发光装置，
- [0130] 其中所述具有至少一个氮原子的材料是含有各自具有至少一个氮原子的咪唑结构和吡啶结构中的任一种的材料。
- [0131] [14] 一种式 (4a-4) 代表的化合物：
- [0132] 式 (4a-4)
- [0133]



(4a-4)

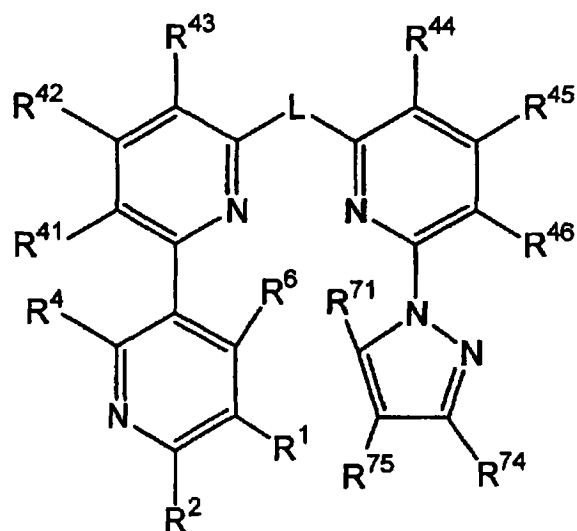
[0134] 其中每个  $R^1, R^2, R^4, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{74}$  和  $R^{75}$  独立地代表氢原子或取代基；  
和

[0135] -L- 代表直接键或二价连接基团。

[0136] [15] 一种下式 (4a-4') 代表的化合物：

[0137] 式 (4a-4')

[0138]



(4a-4')

[0139] 其中每个  $R^1, R^2, R^4, R^6, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{71}, R^{74}$  和  $R^{75}$  独立地代表氢原子或取代基；和

[0140] -L- 代表直接键或二价连接基团。

### 具体实施方式

[0141] 下面描述根据本发明的有机 EL 装置的优选实施方案。

[0142] 在本说明书中,取代基 B 定义如下。

**[0143] (取代基 B)**

**[0144]** 取代基 B 的例子包括烷基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子的烷基, 更优选具有 1 ~ 20 个碳原子的烷基, 特别优选具有 1 ~ 10 个碳原子的烷基; 例如, 甲基、乙基、异丙基、叔丁基、正辛基、正癸基、正十六烷基、环丙基、环戊基、环己基等)、烯基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子的烯基, 更优选具有 2 ~ 20 个碳原子的烯基, 特别优选具有 2 ~ 10 个碳原子的烯基; 例如, 乙烯基、烯丙基、2-丁烯基、3-戊烯基等)、炔基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子的炔基, 更优选具有 2 ~ 20 个碳原子的炔基, 特别优选具有 2 ~ 10 个碳原子的炔基; 例如, 炔丙基、3-戊炔基等)、芳基 (优选具有 6 ~ 30 个碳原子的芳基, 更优选具有 6 ~ 20 个碳原子的芳基, 特别优选具有 6 ~ 12 个碳原子的芳基; 例如, 苯基、对甲基苯基、萘基、蒽基等)、氨基 (优选具有 0 ~ 30 个碳原子的氨基, 更优选具有 0 ~ 20 个碳原子的氨基, 特别优选具有 0 ~ 10 个碳原子的氨基; 例如, 氨基、甲基氨基、二甲基氨基、二乙基氨基、二苄基氨基、二苯基氨基、二甲苯基氨基等)、烷氧基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子的烷氧基, 更优选具有 1 ~ 20 个碳原子的烷氧基, 特别优选具有 1 ~ 10 个碳原子的烷氧基; 例如, 甲氧基、乙氧基、丁氧基、2-乙基己氧基等)、芳氧基 (优选具有 6 ~ 30 个碳原子的芳氧基, 更优选具有 6 ~ 20 个碳原子的芳氧基, 特别优选具有 6 ~ 12 个碳原子的芳氧基; 例如, 苯氧基、1-萘氧基、2-萘氧基等)、杂环氧基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子的杂环氧基, 更优选具有 1 ~ 20 个碳原子的杂环氧基, 特别优选具有 1 ~ 12 个碳原子的杂环氧基; 例如, 吡啶氧基、吡唑氧基、嘧啶氧基、喹啉氧基等)、酰基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子的酰基, 更优选具有 1 ~ 20 个碳原子的酰基, 特别优选具有 1 ~ 12 个碳原子的酰基; 例如, 乙酰基、苯甲酰基、甲酰基、戊酰基等)、烷氧基羰基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子的烷氧基羰基, 更优选具有 2 ~ 20 个碳原子的烷氧基羰基, 特别优选具有 2 ~ 12 个碳原子的烷氧基羰基; 例如, 甲氧基羰基、乙氧基羰基等)、芳氧基羰基 (优选具有 7 ~ 30 个碳原子的芳氧基羰基, 更优选具有 7 ~ 20 个碳原子的芳氧基羰基, 特别优选具有 7 ~ 12 个碳原子的芳氧基羰基; 例如, 苯氧基羰基等)、酰氧基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子的酰氧基, 更优选具有 2 ~ 20 个碳原子的酰氧基, 特别优选具有 2 ~ 10 个碳原子的酰氧基; 例如, 乙酰氧基、苯甲酰氧基等)、酰基氨基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子的酰基氨基, 更优选具有 2 ~ 20 个碳原子的酰基氨基, 特别优选具有 2 ~ 10 个碳原子的酰基氨基; 例如, 乙酰基氨基、苯甲酰基氨基等)、烷氧基羰基氨基 (优选具有 2 ~ 30 个碳原子的烷氧基羰基氨基, 更优选具有 2 ~ 20 个碳原子的烷氧基羰基氨基, 特别优选具有 2 ~ 12 个碳原子的烷氧基羰基氨基; 例如, 甲氧基羰基氨基等)、芳氧基羰基氨基 (优选具有 7 ~ 30 个碳原子的芳氧基羰基氨基, 更优选具有 7 ~ 20 个碳原子的芳氧基羰基氨基, 特别优选具有 7 ~ 12 个碳原子的芳氧基羰基氨基; 例如, 苯氧基羰基氨基等)、磺酰基氨基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子的磺酰基氨基, 更优选具有 1 ~ 20 个碳原子的磺酰基氨基, 特别优选具有 1 ~ 12 个碳原子的磺酰基氨基; 例如, 甲磺酰基氨基、苯磺酰基氨基等)、氨磺酰基 (优选具有 0 ~ 30 个碳原子的氨磺酰基, 更优选具有 0 ~ 20 个碳原子的氨磺酰基, 特别优选具有 0 ~ 12 个碳原子的氨磺酰基; 例如, 氨磺酰基、甲基氨磺酰基、二甲基氨磺酰基、苯基氨磺酰基等)、氨基甲酰基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子的氨基甲酰基, 更优选具有 1 ~ 20 个碳原子的氨基甲酰基, 特别优选具有 1 ~ 12 个碳原子的氨基甲酰基; 例如, 氨基甲酰基、甲基氨基甲酰基、二乙基氨基甲酰基、苯基氨基甲酰基等)、烷硫基 (优选具有 1 ~ 30 个碳原子的烷硫基, 更优选具有 1 ~ 20 个碳原子的烷硫基, 特别优选具有 1 ~ 12 个碳

原子的烷硫基；例如，甲硫基、乙硫基等）、芳硫基（优选具有 6～30 个碳原子的芳硫基，更优选具有 6～20 个碳原子的芳硫基，特别优选具有 6～12 个碳原子的芳硫基；例如，苯硫基等）、杂环硫基（优选具有 1～30 个碳原子的杂环硫基，更优选具有 1～20 个碳原子的杂环硫基，特别优选具有 1～12 个碳原子的杂环硫基；例如，吡啶硫基、2- 苯并咪唑硫基、2- 苯并噁唑硫基、2- 苯并噻唑硫基等）、磺酰基（优选具有 1～30 个碳原子的磺酰基，更优选具有 1～20 个碳原子的磺酰基，特别优选具有 1～12 个碳原子的磺酰基；例如，甲磺酰基、甲苯磺酰基等）、亚磺酰基（优选具有 1～30 个碳原子的亚磺酰基，更优选具有 1～20 个碳原子的亚磺酰基，特别优选具有 1～12 个碳原子的亚磺酰基；例如，甲烷亚磺酰基、苯亚磺酰基等）、酰脲基（优选具有 1～30 个碳原子的酰脲基，更优选具有 1～20 个碳原子的酰脲基，特别优选具有 1～12 个碳原子的酰脲基；例如，酰脲基、甲基酰脲基、苯基酰脲基等）、磷酸酰氨基（优选具有 1～30 个碳原子的磷酸酰氨基，更优选具有 1～20 个碳原子的磷酸酰氨基，特别优选具有 1～12 个碳原子的磷酸酰氨基；例如，二乙基磷酸酰氨基、苯基磷酸酰氨基等）、羟基、巯基、卤素原子（例如，氟原子、氯原子、溴原子、碘原子）、氰基、磺基、羧基、硝基、氧肟酸基团、亚磺基、胂基、亚氨基、杂环（杂芳基）基团（优选具有 1～30 个碳原子的杂环基团，更优选具有 1～12 个碳原子的杂环基团；杂原子的例子包括氮原子、氧原子和硫原子；杂环基团的具体例子包括咪唑基、吡啶基、喹啉基、呋喃基、噻吩基、吡啶基、吗啉基、苯并噁唑基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、呋唑基和 azepinyl 基团）、甲硅烷基（优选具有 3～40 个碳原子的甲硅烷基，更优选具有 3～30 个碳原子的甲硅烷基，特别优选具有 3～24 个碳原子的甲硅烷基；例如，三甲基甲硅烷基、三苯基甲硅烷基等）、甲硅烷基氧基（优选具有 3～40 个碳原子的甲硅烷基氧基，更优选具有 3～30 个碳原子的甲硅烷基氧基，特别优选具有 3～24 个碳原子的甲硅烷基氧基；例如，三甲基甲硅烷基氧基、三苯基甲硅烷基氧基等）。这些取代基可以被进一步取代。作为进一步的取代基，可以举出的有选自上述取代基 B 的基团。

[0145] 根据本发明的有机 EL 装置包括一对电极，其间具有至少包括发光层的有机层。除了发光层之外，有机层还可以包括空穴注入层、空穴输送层、电子注入层、电子输送层、空穴阻挡层、电子阻挡层、激子阻挡层等作为有机层。每个层还可以发挥其他功能。此外，每个层可以分成多个二级层。

[0146] 关于层叠有机层的实施方案，从阳极侧层合空穴输送层、发光层和电子输送层的实施方案是优选的。此外，电荷阻挡层等可以设置在空穴输送层和发光层之间，和 / 或发光层和电子输送层之间。空穴注入层可以设置在阳极和空穴输送层之间；以及电子注入层可以设置在阴极和电子输送层之间。

[0147] 有机层中的至少任一层含有具有特定结构的金属络合物，其由上式 (1)～(4)、(4a-1)～(4a-4) 和 (4b-1)～(4b-3) 中的任一个代表（下面一般将金属络合物称作“具有特定结构的金属络合物”）。

[0148] 具有特定结构的金属络合物其功能不受限制，只要可以用作发光材料、主体材料、激子阻挡材料、电荷阻挡材料或电荷输送材料。其中，利用具有特定结构的金属络合物作为发光材料、主体材料或电荷输送材料的情况是更优选的；利用具有特定结构的金属络合物作为发光材料或主体材料的情况是再更优选的；以及利用具有特定结构的金属络合物作为发光材料的情况是最优选的。

[0149] 此外,具有特定结构的金属络合物可以包含在上述有机层的任一层中。具有特定结构的金属络合物优选包含在发光层中,更优选包含在发光层中作为发光材料或主体材料,再更优选包含在发光层中作为发光材料,特别优选与至少一种主体材料一起包含在发光层中。

[0150] 在具有特定结构的金属络合物包含在发光层中作为发光材料的情况下,相对于发光层的总质量,其含量优选范围为 0.1 质量%以上至不超过 60 质量%,更优选范围为 0.2 质量%以上至不超过 50 质量%,再更优选范围为 0.3 质量%以上至不超过 40 质量%,最优选范围为 0.5 质量%以上至不超过 30 质量%。(在本说明书中,质量比等同于重量比。)

[0151] 此外,在具有特定结构的金属络合物与其他发光材料联用的情况下,相对于发光材料的总质量,具有特定结构的金属络合物的含量优选范围为 0.1 质量%以上至不超过 60 质量%,更优选范围为 0.2 质量%以上至不超过 50 质量%,再更优选范围为 0.3 质量%以上至不超过 40 质量%,最优选范围为 0.5 质量%以上至不超过 35 质量%。

[0152] 在具有特定结构的金属络合物用在发光层之外的其它层(例如,电荷输送层等)中的情况下,具有特定结构的金属络合物的含量优选占该层的 10 质量%~100 质量%,更优选 30 质量%~100 质量%。

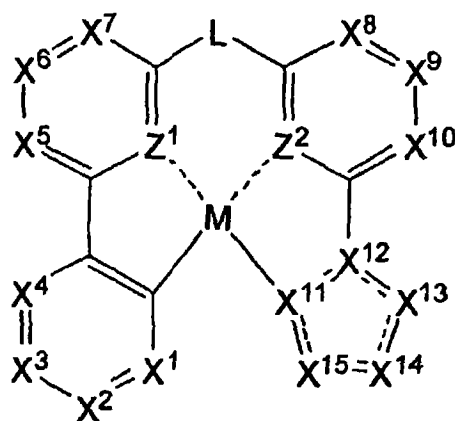
[0153] 下面描述具有特定结构的金属络合物。

[0154] 在式(1)~(4)、(4a-1)~(4a-4)、(4b-1)~(4b-3)和(4a-4')中,氢原子也包括同位素(例如,氘等);并且构成取代基的各原子也包括其同位素。

[0155] 此外,在上式中,配位键是当一对中性孤原子在金属上配位时所形成的键,并且在本说明书中用虚线表示。此外,共价键是当一价阴离子在金属上配位时所形成的键,并且在本说明书中用实线表示。

[0156] 下面说明式(1)代表的金属络合物。

[0157]



(1)

[0158] 在式中,每个 $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ 和 $X^4$ 独立地代表碳原子或氮原子; $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ 和 $X^4$ 中的一个或多个代表氮原子;每个 $X^5$ ,  $X^6$ ,  $X^7$ ,  $X^8$ ,  $X^9$ 和 $X^{10}$ 独立地代表碳原子或氮原子;每个 $X^{11}$ 和 $X^{12}$ 独立地代表碳原子或氮原子;每个 $X^{13}$ ,  $X^{14}$ 和 $X^{15}$ 独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子; $X^{11}$ ,  $X^{12}$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$ 和 $X^{15}$ 代表的5-元环结构中所含的氮原子数量不超过2;每个 $Z^1$ 和 $Z^2$ 独立地代表氮原子或磷原子;-L-代表直接键或二价连接基团;和M代表二价金属离子。

[0159] 每个  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子。在每个  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  可以进一步被取代的情况下,每个  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  可以独立地具有取代基。在每个  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  具有取代基的情况下,取代基的例子包括上述取代基 B 代表的那些。作为取代基,烷基、全氟烷基、芳基、芳香族杂环基团、二烷基氨基、二芳基氨基、烷氧基、氰基和卤素原子是优选的;烷基、全氟烷基、芳基、二烷基氨基、氰基和氟原子是更优选的;烷基、三氟甲基和氟原子是再更优选的。此外,如果可以,取代基可以彼此连接形成稠环结构。

[0160]  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  中的任一个或多个代表氮原子。氮原子的数量优选为 1 ~ 2,更优选 1。

[0161] 氮原子可以位于  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  中的任一个上。优选的是,  $X^2$  或  $X^3$  是氮原子;和更优选的是,  $X^3$  是氮原子。

[0162] 在式 (1) 中,由两个碳原子、 $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  形成的 6-元环的例子包括吡啶环、吡嗪环、嘧啶环、哒嗪环和三嗪环。其中,吡啶环、吡嗪环、嘧啶环和哒嗪环是更优选的;吡啶环是特别优选的。当由  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  形成的 6-元环是吡啶环、吡嗪环、嘧啶环或哒嗪环(特别优选吡啶环)时,在形成金属-碳键的位置处存在的氢原子的酸性与苯环相比增强,更易于形成金属络合物。因此,这是有利的。

[0163] 每个  $X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$  和  $X^{10}$  独立地代表碳原子或氮原子。每个  $X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$  和  $X^{10}$  优选是碳原子。

[0164] 在每个  $X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$  和  $X^{10}$  可以进一步被取代的情况下,每个  $X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$  和  $X^{10}$  可以独立地具有取代基。在每个  $X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$  和  $X^{10}$  具有取代基的情况下,取代基的例子包括上述取代基 B 代表的那些。作为取代基,烷基、全氟烷基、芳基、芳香族杂环基团、二烷基氨基、二芳基氨基、烷氧基、氰基和卤素原子是优选的;烷基、全氟烷基、芳基、二烷基氨基、氰基和氟原子是更优选的;烷基、二烷基氨基、三氟甲基和氟原子是再更优选的。此外,如果可以,取代基可以彼此连接形成稠环结构。

[0165] 每个  $X^{11}$  和  $X^{12}$  独立地代表碳原子或氮原子。优选的是,  $X^{11}$  或  $X^{12}$  中的任一个是碳原子,另一个是氮原子。

[0166] 每个  $X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子,优选碳原子或氮原子。

[0167]  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5-元环结构中所含的氮原子数量不超过 2(0、1 或 2),优选 1 或 2,更优选 2。

[0168] 在每个  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  可以进一步被取代的情况下,每个  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  可以独立地具有取代基。在每个  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  具有取代基的情况下,取代基的例子包括上述取代基 B 代表的那些。作为取代基,烷基、全氟烷基、芳基、芳香族杂环基团、二烷基氨基、二芳基氨基、烷氧基、氰基和卤素原子是优选的;烷基、全氟烷基、芳基、二烷基氨基、氰基和氟原子是更优选的;烷基、氰基、三氟甲基和氟原子是再更优选的。此外,如果可以,取代基可以彼此连接形成稠环结构。

[0169]  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5-元环结构中的键可以是单键和双键的任何组合。由  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  形成的 5-元环的例子包括吡咯环、吡唑环、咪唑环、呋喃环和噻吩环。其中,吡咯环、吡唑环和咪唑环是更优选的;吡咯环和吡唑环是再更优选的。当由  $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  形成的 5-元环是吡咯环、吡唑环或咪唑环(再更优选吡咯环或吡唑环)时,金

属络合物的稳定性增强,因此,这是有利的。

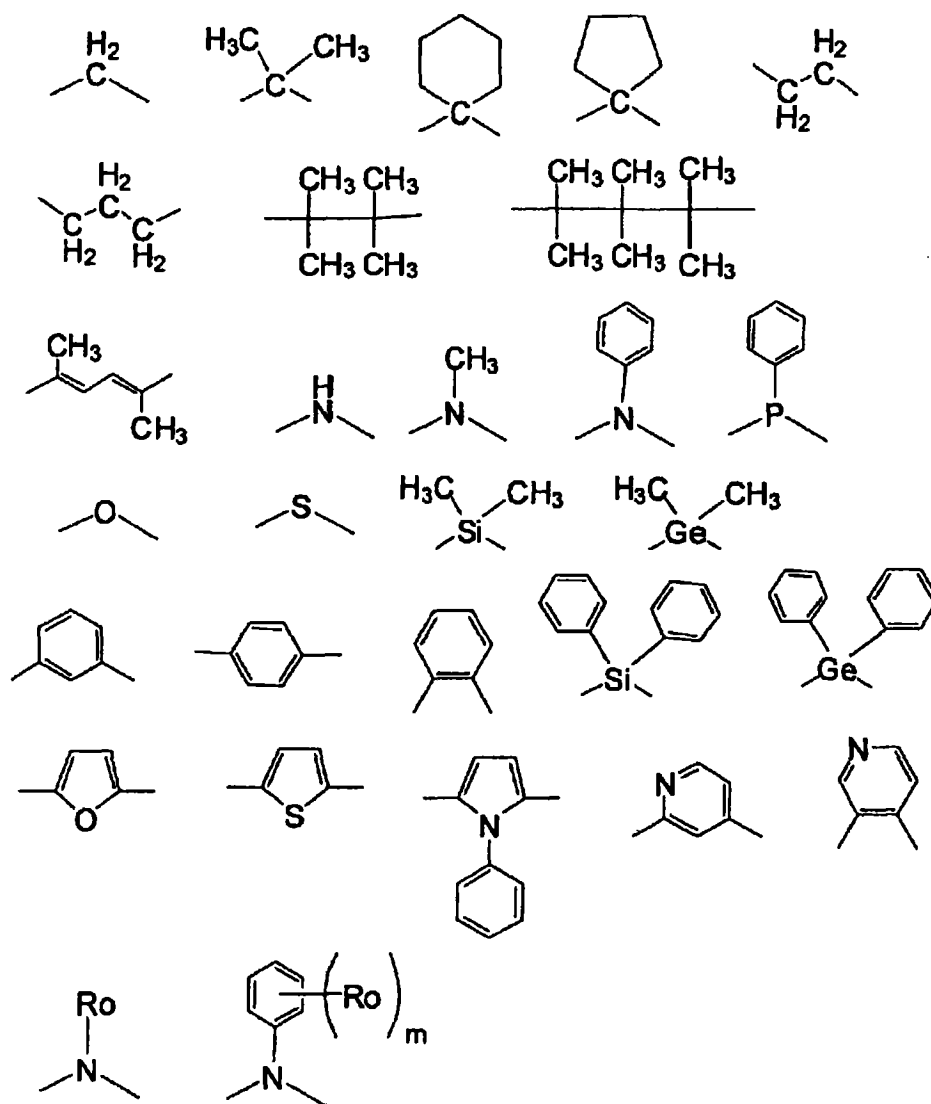
[0170] 每个  $Z^1$  和  $Z^2$  独立地代表氮原子或磷原子,优选氮原子。在式 (1) 中,每个由  $Z^1$ 、碳原子、 $X^5$ 、 $X^6$ 、 $X^7$  和碳原子形成的 6-元环和由  $Z^2$ 、碳原子、 $X^8$ 、 $X^9$ 、 $X^{10}$  和碳原子形成的 6-元环的例子包括磷环、吡啶环、吡嗪环、嘧啶环、哒嗪基团和三嗪环。其中,吡啶环、吡嗪环、嘧啶环和哒嗪环是更优选的;吡啶环是特别优选的。当 6-元环是吡啶环、吡嗪环、嘧啶环或哒嗪环(特别优选吡啶环)时,形成对金属稳定的配位键,金属络合物的稳定性增强。其中,在吡啶环中,在金属上的配位部分是一个氮原子。因此,与分子中具有多个氮原子的吡嗪环或嘧啶环相比,吡啶环是有利的,因为可以抑制在金属络合物合成过程中的副反应,并且可以高产率制备金属络合物。

[0171] -L- 代表直接键或二价连接基团。L 代表的二价连接基团的例子包括亚烷基(例如,亚甲基、亚乙基、亚丙基等)、亚芳基(例如,亚苯基、萘二基)、杂亚芳基(例如,吡啶二基、噻吩二基等)、亚氨基(-NR-) (例如,苯基亚氨基等)、氧基(-O-)、硫基(-S-)、亚磷基(-PR-) (例如,苯基亚磷基等)、亚甲硅烷基(-SiRR'-) (例如,二甲基亚甲硅烷基、二苯基亚甲硅烷基等) 和其组合。这些连接基团还可以具有取代基。在这些连接基团具有取代基的情况下,取代基的例子包括上述取代基 B 代表的那些。

[0172] L 优选是单键、亚烷基、亚芳基、杂亚芳基、亚氨基、氧基、硫基或亚甲硅烷基;更优选单键、亚烷基、亚芳基或亚氨基;再更优选单键、亚烷基或亚芳基;再更优选单键、亚甲基或亚苯基;甚至再更优选单键或二-取代的亚甲基;甚至再更优选单键、二甲基亚甲基、二乙基亚甲基、二异丁基亚甲基、二苄基亚甲基、乙基甲基亚甲基、甲基丙基亚甲基、异丁基甲基亚甲基、二苯基亚甲基、甲基苯基亚甲基、环己烷二基、环戊烷二基、苈二基或氟甲基亚甲基;特别优选单键、二甲基亚甲基、二苯基亚甲基或环己烷二基;最优选二甲基亚甲基或二苯基亚甲基。

[0173] 下面给出二价连接基团的具体例子,但不应被解释为本发明受限于此。

[0174]

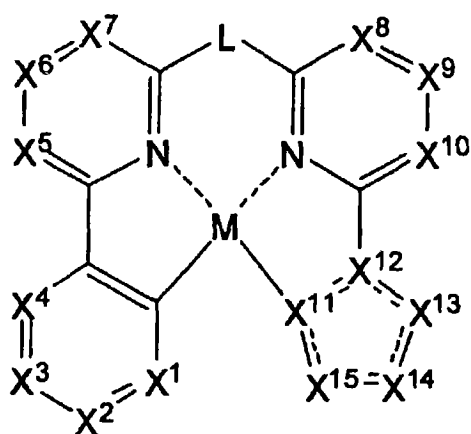


[0175] 其中, Ro 代表选自上述取代基 B 中那些的取代基。Ro 优选是烷基, 更优选具有 1 ~ 6 个碳原子的烷基。m 代表 1 ~ 5 的整数。m 优选为 2 ~ 5, 更优选 2 ~ 3。

[0176] M 代表二价金属离子。金属种类的例子包括锌离子、铜离子、镍离子、钪离子和铂离子。其中, 铜离子、钪离子和铂离子是更优选的; 钪离子和铂离子是再更优选的; 铂离子是特别优选的。

[0177] 式 (1) 代表的金属络合物优选是式 (2) 代表的金属络合物。

[0178]



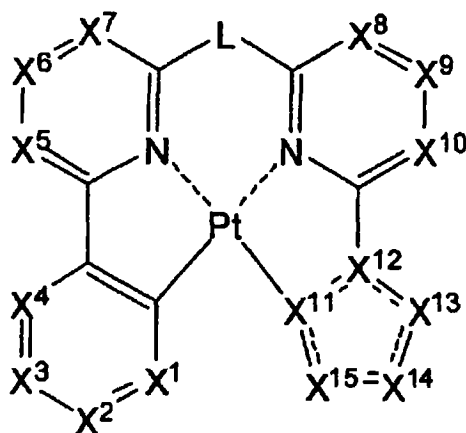
(2)

[0179] 在式中,每个  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子; $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子;每个  $X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$  和  $X^{10}$  独立地代表碳原子或氮原子;每个  $X^{11}$  和  $X^{12}$  独立地代表碳原子或氮原子;每个  $X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子; $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5-元环结构中所含的氮原子数量不超过 2;-L- 代表直接键或二价连接基团;和 M 代表二价金属离子。

[0180] 在式 (2) 中,  $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9, X^{10}, X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}, X^{15}, L$  和 M 与式 (1) 中的  $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9, X^{10}, X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}, X^{15}, L$  和 M 同义,其优选范围也相同。

[0181] 式 (2) 代表的金属络合物优选是式 (3) 代表的铂络合物。

[0182]



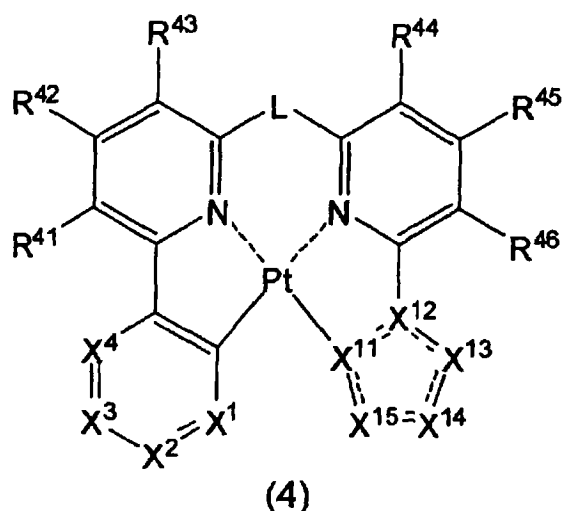
(3)

[0183] 在式中,每个  $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子; $X^1, X^2, X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子;每个  $X^5, X^6, X^7, X^8, X^9$  和  $X^{10}$  独立地代表碳原子或氮原子;每个  $X^{11}$  和  $X^{12}$  独立地代表碳原子或氮原子;每个  $X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子; $X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5-元环结构中所含的氮原子数量不超过 2;和 -L- 代表直接键或二价连接基团。

[0184] 在式 (3) 中,  $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9, X^{10}, X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}, X^{15}$  和 L 与式 (2) 中的  $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9, X^{10}, X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}, X^{15}$  和 L 同义,其优选范围也相同。

[0185] 式 (3) 代表的铂络合物优选是式 (4) 代表的铂络合物。

[0186]



[0187] 在式中,每个 $X^1$ , $X^2$ , $X^3$ 和 $X^4$ 独立地代表碳原子或氮原子; $X^1$ , $X^2$ , $X^3$ 和 $X^4$ 中的一个或多个代表氮原子;每个 $R^{41}$ , $R^{42}$ , $R^{43}$ , $R^{44}$ , $R^{45}$ 和 $R^{46}$ 独立地代表氢原子或取代基;每个 $X^{11}$ 和 $X^{12}$ 独立地代表碳原子或氮原子;每个 $X^{13}$ , $X^{14}$ 和 $X^{15}$ 独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子; $X^{11}$ , $X^{12}$ , $X^{13}$ , $X^{14}$ 和 $X^{15}$ 代表的5-元环结构中所含的氮原子数量不超过2;和-L-代表直接键或二价连接基团。

[0188] 在式(4)中, $X^1$ , $X^2$ , $X^3$ , $X^4$ , $X^{11}$ , $X^{12}$ , $X^{13}$ , $X^{14}$ , $X^{15}$ 和L与式(2)中的 $X^1$ , $X^2$ , $X^3$ , $X^4$ , $X^{11}$ , $X^{12}$ , $X^{13}$ , $X^{14}$ , $X^{15}$ 和L同义,其优选范围也相同。

[0189] 在式(4)中,每个 $R^{41}$ , $R^{42}$ , $R^{43}$ , $R^{44}$ , $R^{45}$ 和 $R^{46}$ 独立地代表氢原子或取代基。 $R^{41}$ , $R^{42}$ , $R^{43}$ , $R^{44}$ , $R^{45}$ 和 $R^{46}$ 代表的取代基与取代基B同义。如果可以, $R^{41}$ , $R^{42}$ , $R^{43}$ , $R^{44}$ , $R^{45}$ 和 $R^{46}$ 可以彼此键合形成环。

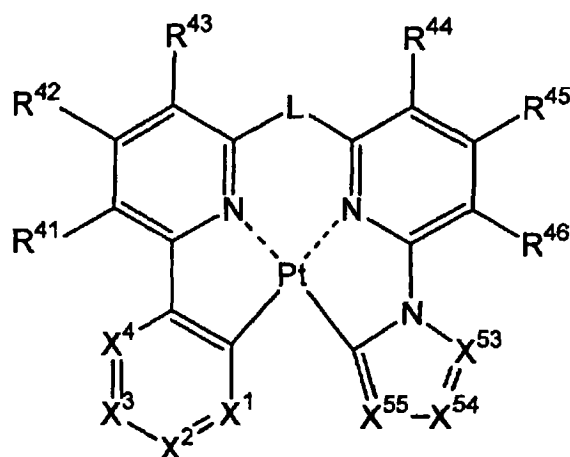
[0190]  $R^{41}$ 和 $R^{46}$ 优选是氢原子、烷基、芳基、氨基、烷氧基、芳氧基、酰基、烷氧基羰基、烷硫基、磺酰基、羟基、卤素原子、氰基、硝基或杂环基团;更优选氢原子、烷基、芳基、卤素原子、氰基或杂环基团;再更优选氢原子、甲基、叔丁基、三氟甲基、苯基、氟原子、氰基或吡啶基;再更优选氢原子、甲基或氟原子;特别优选氢原子。

[0191]  $R^{43}$ 和 $R^{44}$ 的优选范围优选与 $R^{41}$ 和 $R^{46}$ 的同义。

[0192]  $R^{42}$ 和 $R^{45}$ 优选是氢原子、烷基、芳基、氨基、烷氧基、芳氧基、烷硫基、芳硫基、卤素原子、氰基或杂环基团;更优选氢原子、烷基、芳基、氨基、烷氧基、芳硫基、卤素原子或杂环基团;再更优选氢原子、烷基、氨基、烷氧基、卤素原子或杂环基团;再更优选氢原子、甲基、叔丁基、二烷基氨基、二苯基氨基、甲氧基、苯氧基、氟原子、咪唑基、吡咯基或呋唑基;特别优选氢原子、氟原子或甲基;最优选氢原子。

[0193] 式(4)代表的铂络合物的一个优选实施方案是式(4a-1)代表的铂络合物。

[0194]



(4a-1)

[0195] 在式中,每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子;  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子;每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基;每个  $X^{53}$ ,  $X^{54}$  和  $X^{55}$  独立地代表碳原子或氮原子;含有  $X^{53}$ ,  $X^{54}$  和  $X^{55}$  的 5-元环结构中所含的氮原子数量是 1 或 2;和  $-L-$  代表直接键或二价连接基团。

[0196] 在式 (4a-1) 中,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  和  $L$  与式 (4) 中的  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  和  $L$  同义,其优选范围也相同。

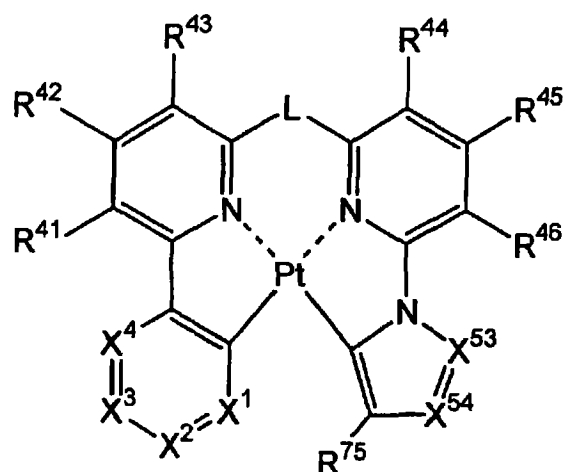
[0197] 每个  $X^{53}$ ,  $X^{54}$  和  $X^{55}$  独立地代表碳原子或氮原子。在每个  $X^{53}$ ,  $X^{54}$  和  $X^{55}$  可以进一步被取代的情况下,每个  $X^{53}$ ,  $X^{54}$  和  $X^{55}$  可以独立地具有取代基。在每个  $X^{53}$ ,  $X^{54}$  和  $X^{55}$  具有取代基的情况下,取代基的例子包括上述取代基 B 代表的那些。作为取代基,烷基、全氟烷基、芳基、芳香族杂环基团、二烷基氨基、二芳基氨基、烷氧基、氰基和卤素原子是优选的;烷基、全氟烷基、芳基、二烷基氨基、氰基和氟原子是更优选的;烷基、三氟甲基和氟原子是再更优选的。此外,如果可以,取代基可以彼此连接形成稠环结构。

[0198] 在式 (4a-1) 中,由碳原子、氮原子、 $X^{53}$ ,  $X^{54}$  和  $X^{55}$  形成的 5-元环结构中所含的氮原子的数量是 1 或 2,优选 2。

[0199] 由碳原子、氮原子、 $X^{53}$ ,  $X^{54}$  和  $X^{55}$  形成的 5-元环结构的例子包括吡咯环、吡唑环和咪唑环。其中,吡咯环和吡唑环是更优选的;吡唑环是最优选的。

[0200] 式 (4a-1) 代表的铂络合物优选是式 (4a-2) 代表的铂络合物。

[0201]



(4a-2)

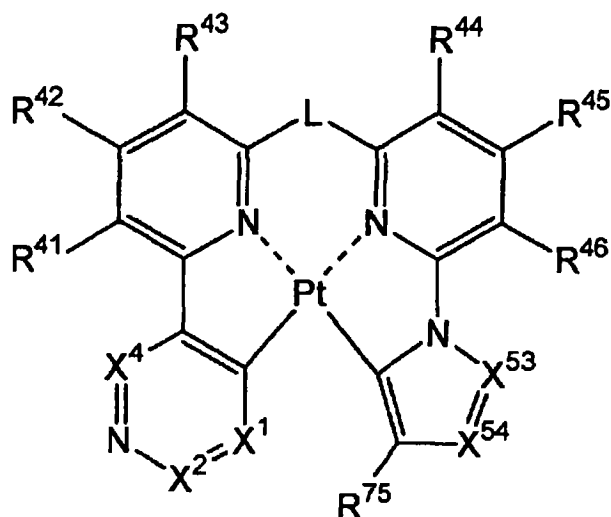
[0202] 在式中,每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子;  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子;每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基;每个  $R^{53}$  和  $R^{54}$  独立地代表碳原子或氮原子;含有  $R^{53}$  和  $R^{54}$  的 5-元环结构中所含的氮原子数量是 1 或 2;  $R^{75}$  代表氢原子或取代基;和 -L- 代表直接键或二价连接基团。

[0203] 在式 (4a-2) 中,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $X^{53}$ ,  $X^{54}$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  和 L 与式 (4a-1) 中的  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $X^{53}$ ,  $X^{54}$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  和 L 同义,其优选范围也相同。

[0204]  $R^{75}$  代表氢原子或取代基。取代基的例子包括在上述取代基 B 中的那些。 $R^{75}$  优选是氢原子、烷基、全氟烷基、芳基、芳香族杂环基团、二烷基氨基、二芳基氨基、烷氧基、氰基或卤素原子;更优选氢原子、烷基、全氟烷基、芳基、二烷基氨基、氰基或氟原子;再更优选氢原子、烷基、三氟甲基、氰基或氟原子;最优选氰基、氟原子或氢原子。此外,如果可以,  $R^{75}$  可以与  $X^{54}$  或  $X^{53}$  的取代基连接形成稠环结构。

[0205] 式 (4a-2) 代表的铂络合物优选是式 (4a-3) 代表的铂络合物。

[0206]



(4a-3)

[0207] 在式中,每个  $X^1$ ,  $X^2$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子;每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和

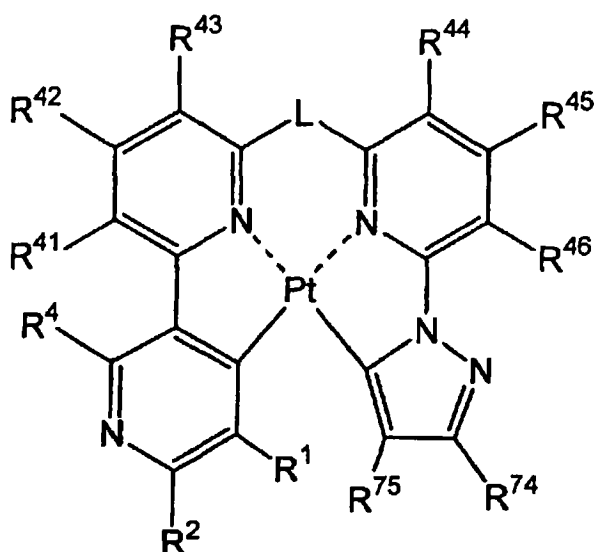
$R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基 ; 每个  $X^{53}$  和  $X^{54}$  独立地代表碳原子或氮原子 ; 含有  $X^{53}$  和  $X^{54}$  的 5- 元环结构中所含的氮原子数量是 1 或 2 ;  $R^{75}$  代表氢原子或取代基 ; 和 -L- 代表直接键或二价连接基团。

[0208] 在式 (4a-3) 中,  $X^1, X^2, X^4, X^{53}, X^{54}, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{75}$  和 L 与式 (4a-2) 中的  $X^1, X^2, X^4, X^{53}, X^{54}, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{75}$  和 L 同义, 其优选范围也相同。

[0209] 在式 (4a-3) 中, 由  $X^1, X^2$ 、氮原子、 $X^4$ 、碳原子和碳原子形成的 6- 元环结构中所含的氮原子的数量优选为 1 以上至不超过 3, 更优选 1 或 2, 再更优选 1。6- 元环的具体例子包括吡啶环、吡嗪环、嘧啶环、哒嗪基团和三嗪环。其中, 吡啶环、吡嗪环、嘧啶环和哒嗪环是更优选的 ; 吡啶环、吡嗪环和嘧啶环是再更优选的 ; 吡啶环是特别优选的。

[0210] 式 (4a-3) 代表的铂络合物优选是下式 (4a-4) 代表的铂络合物。式 (4a-4) 代表的铂络合物是一种新型化合物。

[0211]



(4a-4)

[0212] 在式中, 每个  $R^1, R^2, R^4, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{74}$  和  $R^{75}$  独立地代表氢原子或取代基 ; 和 -L- 代表直接键或二价连接基团。

[0213] 在式 (4a-4) 中,  $R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{75}$  和 L 与式 (4a-3) 中的  $R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{75}$  和 L 同义, 其优选范围也相同。

[0214] 每个  $R^1, R^2, R^4$  和  $R^{74}$  独立地代表氢原子或取代基。取代基的例子包括在上述取代基 B 中的那些。此外, 如果可以, 在  $R^4$  和  $R^{41}$ , 以及  $R^1$  和  $R^2$  中, 取代基可以彼此连接形成稠环结构 ; 和在  $R^1$  和  $R^{75}$  中, 取代基可以彼此连接, 从而整个配体形成环状结构。

[0215]  $R^1$  优选是氢原子、烷基、芳基、氨基、烷氧基、芳氧基、酰基、烷氧基羰基、烷硫基、磺酰基、羧基、卤素原子、氰基、硝基或杂环基团 ; 更优选氢原子、烷基、芳基、烷氧基、芳氧基、烷硫基、卤素原子或氰基 ; 再更优选氢原子、烷基、全氟烷基、芳基、卤素原子或氰基 ; 再更优选氢原子、甲基、三氟甲基、氟原子或氰基 ; 特别优选氢原子、三氟甲基、氟原子或氰基。

[0216]  $R^2$  和  $R^4$  优选是氢原子、卤素原子、氟原子 - 取代的苯基、氟原子 - 取代的烷氧基、全氟烷基、氰基、硝基或芳氧基 ; 更优选氢原子、氟原子、氟原子 - 取代的苯基、三氟甲氧基、三氟甲基、氰基或苯氧基 ; 再更优选氢原子、氟原子、全氟苯基、三氟甲基、氰基或吸电子基

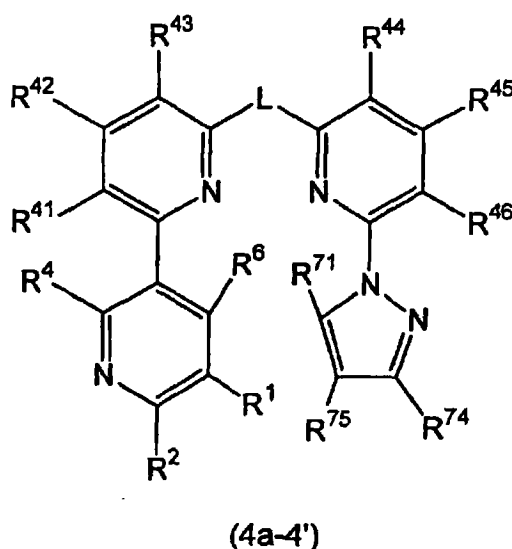
团-取代的苯氧基;特别优选氢原子或氟原子;最优选氟原子。

[0217]  $R^{74}$  优选是氢原子、烷基、芳基、氨基、烷氧基、芳氧基、酰基、烷氧基羰基、烷硫基、磺酰基、羟基、卤素原子、氰基、硝基或杂环基团;更优选氢原子、烷基、芳基、烷氧基、芳氧基、烷硫基、卤素原子或氰基;再更优选氢原子、烷基、全氟烷基、芳基、卤素原子或氰基;再更优选氢原子、甲基、三氟甲基、氟原子或氰基;特别优选氢原子、三氟甲基、氟原子或氰基;最优选三氟甲基或氰基。

[0218] 除了用作有机 EL 装置中所用的各种材料之外,式 (4a-4) 代表的铂络合物还可以用作适于用在以下领域中的发光材料:显示装置、显示器、背光装置、电子摄影(静电复印)、照明光源、记录光源、曝光光源、读取光源、标识、看板、内部设计等、医疗应用、荧光增白剂、照相材料、紫外吸收材料、激光染料、记录介质中用的材料、喷墨印刷中用的颜料、彩色滤光片中用的染料、彩色校正滤光片、分析应用、太阳能电池中用的材料、有机薄膜晶体管中用的材料等。

[0219] 接下来,描述式 (4a-4') 代表的化合物。式 (4a-4') 代表的化合物是一种可以作为上式 (4a-4) 代表的铂络合物的配体的新型化合物。

[0220]



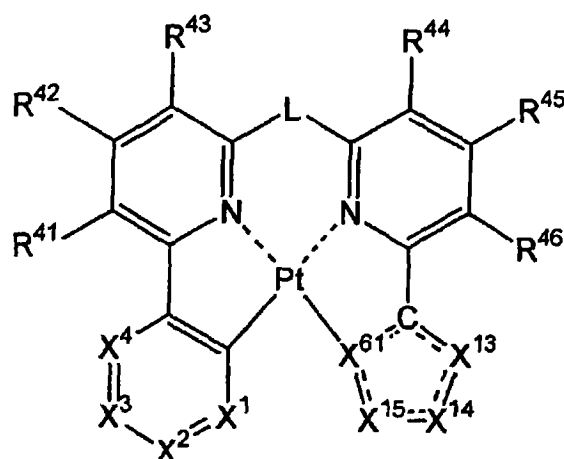
[0221] 在式中,每个  $R^1, R^2, R^4, R^6, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{71}, R^{74}$  和  $R^{75}$  独立地代表氢原子或取代基;和 -L- 代表直接键或二价连接基团。

[0222] 在式 (4a-4') 中,  $R^1, R^2, R^4, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{74}, R^{75}$  和 L 与式 (4a-4) 中的  $R^1, R^2, R^4, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{74}, R^{75}$  和 L 同义,其优选范围也相同。每个  $R^6$  和  $R^{71}$  独立地代表氢原子或取代基。取代基的例子包括在上述取代基 B 中的那些。 $R^6$  和  $R^{71}$  优选是卤素原子或氢原子,更优选氢原子。

[0223] 除了用作上式代表的金属络合物的配体之外,式 (4a-4') 代表的化合物还可以用作荧光材料、电荷输送材料、药物中间体、杀虫剂等等。

[0224] 式 (4) 代表的铂络合物的另一个优选实施方案是式 (4b-1) 代表的铂络合物。

[0225]



(4b-1)

[0226] 在式中,每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子;  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子;每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基;  $X^{61}$  代表碳原子或氮原子;每个  $X^{13}$ ,  $X^{14}$  和  $X^{15}$  独立地代表碳原子、氮原子、氧原子或硫原子;  $X^{61}$ 、碳原子、 $X^{13}$ 、 $X^{14}$  和  $X^{15}$  代表的 5-元环结构中所含的氮原子数量不超过 2; 和  $-L-$  代表直接键或二价连接基团。

[0227] 在式 (4b-1) 中,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$ ,  $X^{15}$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  和  $L$  与式 (4) 中的  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $X^{13}$ ,  $X^{14}$ ,  $X^{15}$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  和  $L$  同义, 其优选范围也相同。

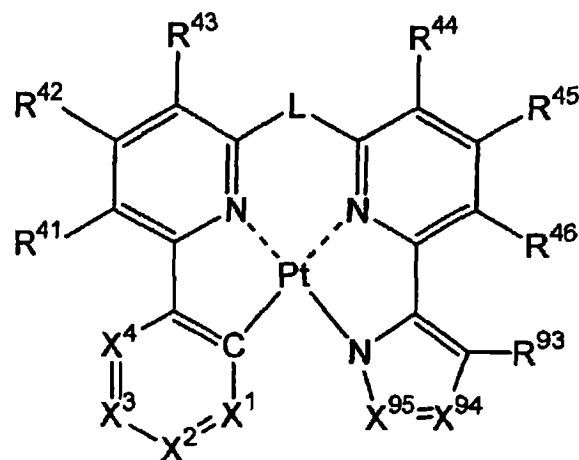
[0228]  $X^{61}$  代表碳原子或氮原子, 优选氮原子。

[0229] 在式 (4b-1) 中, 由  $X^{61}$ 、碳原子、 $X^{13}$ 、 $X^{14}$  和  $X^{15}$  形成的 5-元环结构中所含的氮原子的数量为 0、1 或 2, 优选 1 或 2, 更优选 2。

[0230] 由  $X^{61}$ 、碳原子、 $X^{13}$ 、 $X^{14}$  和  $X^{15}$  形成的 5-元环结构中的键可以是单键和双键的任何组合。由  $X^{61}$ 、碳原子、 $X^{13}$ 、 $X^{14}$  和  $X^{15}$  形成的 5-元环的例子包括吡咯环、吡唑环、咪唑环、呋喃环和噻吩环。其中, 吡咯环、吡唑环和咪唑环是更优选的; 吡唑环是再更优选的。

[0231] 式 (4b-1) 代表的铂络合物优选是式 (4b-2) 代表的铂络合物。

[0232]



(4b-2)

[0233] 在式中,每个  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子;  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  和  $X^4$  中的一个

或多个代表氮原子；每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；每个  $X^{94}$  和  $X^{95}$  独立地代表碳原子或氮原子； $X^{94}$  和  $X^{95}$  中的至少一个代表碳原子； $R^{93}$  代表氢原子或取代基；和  $-L-$  代表直接键或二价连接基团。

[0234] 在式 (4b-2) 中,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  和  $L$  与式 (4b-1) 中的  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$ ,  $X^4$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$  和  $L$  同义, 其优选范围也相同。

[0235] 每个  $X^{94}$  和  $X^{95}$  独立地代表碳原子或氮原子, 条件是  $X^{94}$  或  $X^{95}$  中的任一个代表碳原子。优选的是,  $X^{94}$  代表碳原子, 而  $X^{95}$  代表氮原子。

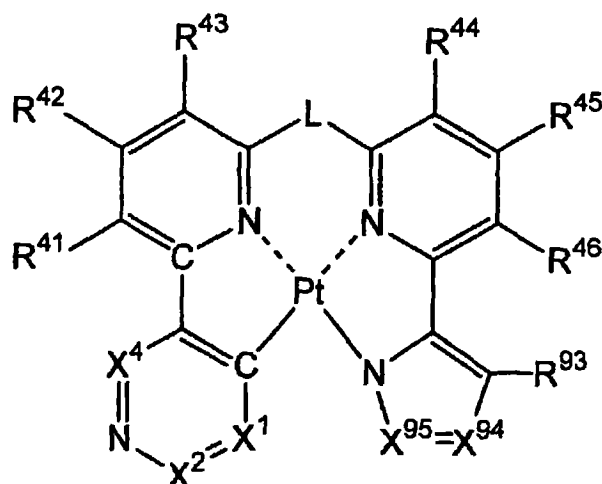
[0236] 在每个  $X^{94}$  和  $X^{95}$  可以进一步被取代的情况下, 每个  $X^{94}$  和  $X^{95}$  可以独立地具有取代基。在每个  $X^{94}$  和  $X^{95}$  具有取代基的情况下, 取代基的例子包括上述取代基 B 代表的那些。作为取代基, 烷基、全氟烷基、芳基、芳香族杂环基团、二烷基氨基、二芳基氨基、烷氧基、氰基和卤素原子是优选的；烷基、全氟烷基、芳基、二烷基氨基、氰基和氟原子是更优选的；烷基、三氟甲基和氟原子是再更优选的。此外, 如果可以, 取代基可以彼此连接形成稠环结构。

[0237] 在式 (4b-2) 中, 由氮原子、碳原子、碳原子、 $X^{94}$  和  $X^{95}$  形成的 5-元环的例子包括吡咯环、吡唑环和咪唑环。其中, 吡唑环和咪唑环是更优选的；吡唑环是再更优选的。

[0238]  $R^{93}$  代表氢原子或取代基。取代基的例子包括上述取代基 B 代表的那些。 $R^{93}$  优选是氢原子、烷基、全氟烷基、芳基、芳香族杂环基团、二烷基氨基、二芳基氨基、烷氧基、氰基或卤素原子；更优选氢原子、烷基、全氟烷基、芳基、二烷基氨基、氰基或氟原子；再更优选氢原子、烷基、三氟甲基或氟原子；最优选氟原子或氢原子。此外, 如果可以,  $X^{94}$  和  $X^{95}$  的取代基可以彼此连接形成稠环结构。

[0239] 式 (4b-2) 代表的铂络合物优选是式 (4b-3) 代表的铂络合物。

[0240]



(4b-3)

[0241] 在式中, 每个  $X^1$ ,  $X^2$  和  $X^4$  独立地代表碳原子或氮原子； $X^1$ ,  $X^2$  和  $X^4$  中的一个或多个代表氮原子；每个  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$  和  $R^{46}$  独立地代表氢原子或取代基；每个  $X^{94}$  和  $X^{95}$  独立地代表碳原子或氮原子； $X^{94}$  和  $X^{95}$  中的至少一个代表碳原子； $R^{93}$  代表氢原子或取代基；和  $-L-$  代表直接键或二价连接基团。

[0242] 在式 (4b-3) 中,  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^4$ ,  $X^{94}$ ,  $X^{95}$ ,  $R^{41}$ ,  $R^{42}$ ,  $R^{43}$ ,  $R^{44}$ ,  $R^{45}$ ,  $R^{46}$ ,  $R^{93}$  和  $L$  与式 (4b-2) 中

$X^1, X^2, X^4, X^{94}, X^{95}, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}, R^{93}$  和 L 的同义, 其优选范围也相同。

[0243] 在式 (4b-3) 中, 由  $X^1, X^2$ 、氮原子、 $X^4$ 、碳原子和碳原子形成的 6-元环结构中所含的氮原子的数量优选为 1 以上至不超过 3, 更优选 1 或 2, 再更优选 1。6-元环的具体例子包括吡啶环、吡嗪环、嘧啶环、哒嗪基团和三嗪环。其中, 吡啶环、吡嗪环、嘧啶环和哒嗪环是更优选的; 吡啶环、吡嗪环和嘧啶环是再更优选的; 吡啶环是特别优选的。

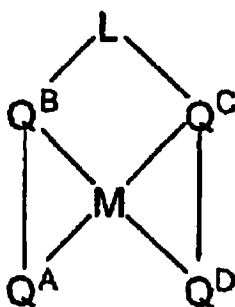
[0244] 上述具有特定结构的金属络合物可以是低分子量化合物, 或可以是其中残基结构与聚合物链连接的高分子化合物 (优选重均分子量为 1,000 ~ 5,000,000 的高分子化合物, 更优选重均分子量为 5,000 ~ 2,000,000 的高分子化合物, 再更优选重均分子量为 10,000 ~ 1,000,000 的高分子化合物) 或在主链中具有上述具有特定结构的金属络合物的结构的高分子化合物 (优选重均分子量为 1,000 ~ 5,000,000 的高分子化合物, 更优选重均分子量为 5,000 ~ 2,000,000 的高分子化合物, 再更优选重均分子量为 10,000 ~ 1,000,000 的高分子化合物)。具有特定结构的金属络合物优选是低分子量化合物。

[0245] 在聚合物化合物的情况下, 聚合物化合物可以是均聚物或可以是与其他聚合物的共聚物。在共聚物的情况下, 共聚物可以是无规共聚物或可以是嵌段共聚物。此外, 在共聚物的情况下, 具有发光功能的化合物和 / 或具有电荷输送功能的化合物可以存在于聚合物内。

[0246] 当式 (I) 代表的化合物由下式 (I) 表示时, 下面描述可以用于  $Q^A, Q^B, Q^C, Q^D$  和 L 的部分结构。

[0247] 式 (I)

[0248]



[0249] 可以用于  $Q^A$  的部分结构是 [QB61CC] 代表的部分结构基团。

[0250] 可以用于  $Q^B$  的部分结构是 [QT60CN] 代表的部分结构基团。

[0251] 可以用于  $Q^C$  的部分结构是 [QT60CN] 代表的部分结构基团。

[0252] 可以用于  $Q^D$  的部分结构是 [QB51CC]、[QB51CN] 或 [QB51NC] 代表的部分结构基团。

[0253] 可以用于 L 的部分结构是 [L] 代表的部分结构基团。

[0254] 在下式中, M 和 L 分别对应于式 (I) 中的 M 和 L; 对于 Q, 在“ $Q^A$  代表的部分结构”中的 Q 代表  $Q^B$ , 在“ $Q^B$  代表的部分结构”中的 Q 代表  $Q^A$ , 在“ $Q^C$  代表的部分结构”中的 Q 代表  $Q^D$ , 和在“ $Q^D$  代表的部分结构”中的 Q 代表  $Q^C$ 。

[0255] 对于连接基团 L 的部分结构 [L] 中的两个 Q, 左手侧的 Q 代表  $Q^B$ , 右手侧的 Q 代表  $Q^C$ 。

[0256] ● 可以用于  $Q^A$  的部分结构:

[0257] [QB61CC]

[0258]



[0259] QB61CC-1



QB61CC-2



QB61CC-3

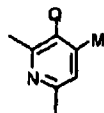


QB61CC-4

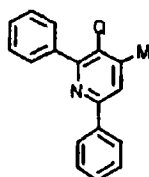


QB61CC-5

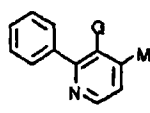
[0260]



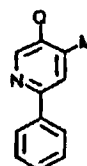
[0261] QB61CC-6



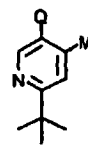
QB61CC-7



QB61CC-8

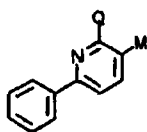


QB61CC-9

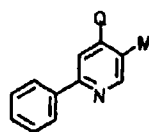


QB61CC-10

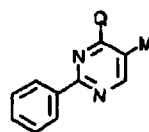
[0262]



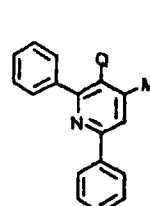
[0263] QB61CC-11



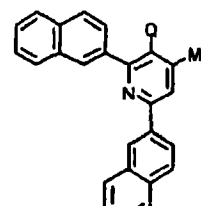
QB61CC-12



QB61CC-13

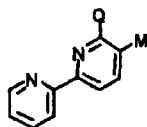


QB61CC-14

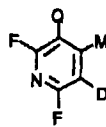


QB61CC-15

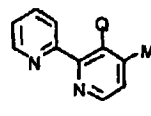
[0264]



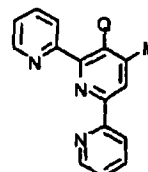
[0265] QB61CC-16



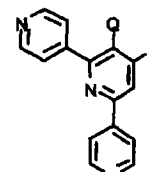
QB61CC-17



QB61CC-18

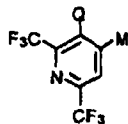


QB61CC-19

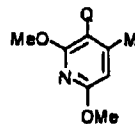


QB61CC-20

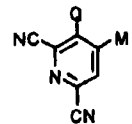
[0266]



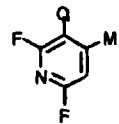
[0267] QB61CC-21



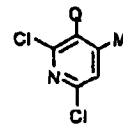
QB61CC-22



QB61CC-23

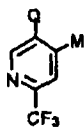


QB61CC-24

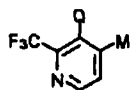


QB61CC-25

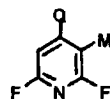
[0268]



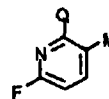
[0269] QB61CC-26



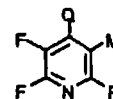
QB61CC-27



QB61CC-28

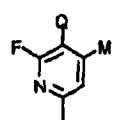


QB61CC-29

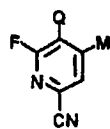


QB61CC-30

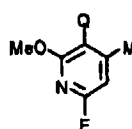
[0270]



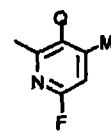
[0271] QB61CC-31



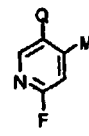
QB61CC-32



QB61CC-33

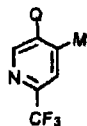
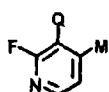


QB61CC-34



QB61CC-35

[0272]



[0273] QB61CC-36 QB61CC-37

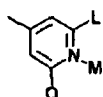
[0274] ●可以用于  $Q^B$  和  $Q^C$  的部分结构：

[0275] [QT60CN]

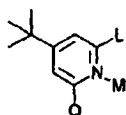
[0276]



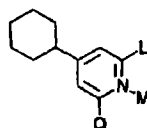
[0277] QT60CN-1



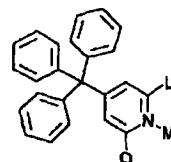
QT60CN-2



QT60CN-3



QT60CN-4



QT60CN-5

[0278]



[0279] QT60CN-6



QT60CN-7



QT60CN-8

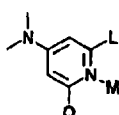


QT60CN-9

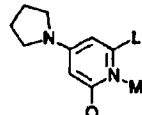


QT60CN-10

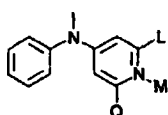
[0280]



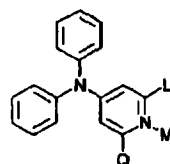
[0281] QT60CN-11



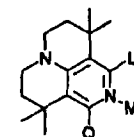
QT60CN-12



QT60CN-13

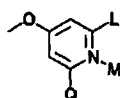


QT60CN-14

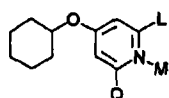


QT60CN-15

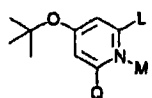
[0282]



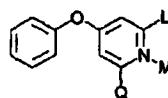
[0283] QT60CN-16



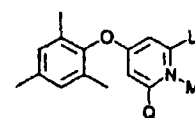
QT60CN-17



QT60CN-18

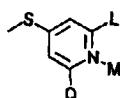


QT60CN-19

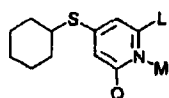


QT60CN-20

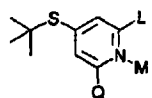
[0284]



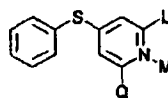
[0285] QT60CN-21



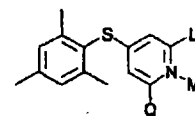
QT60CN-22



QT60CN-23

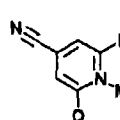


QT60CN-24

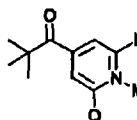


QT60CN-25

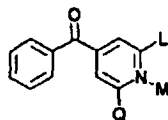
[0286]



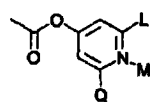
[0287] QT60CN-26



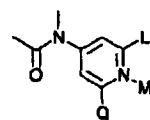
QT60CN-27



QT60CN-28

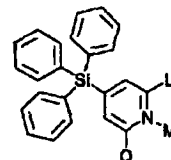
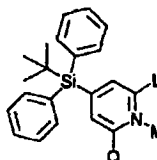
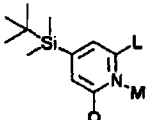
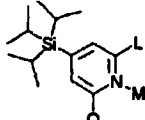
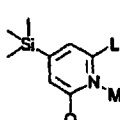


QT60CN-29



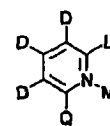
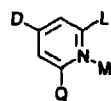
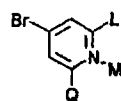
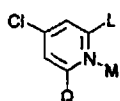
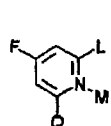
QT60CN-30

[0288]



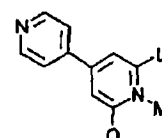
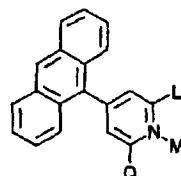
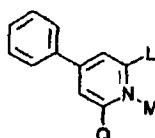
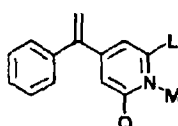
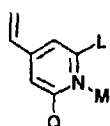
[0289] QT60CN-31 QT60CN-32 QT60CN-33 QT60CN-34 QT60CN-35

[0290]



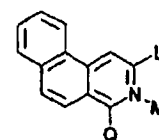
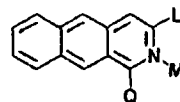
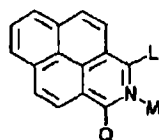
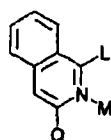
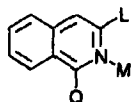
[0291] QT60CN-36 QT60CN-37 QT60CN-38 QT60CN-39 QT60CN-40

[0292]



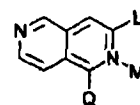
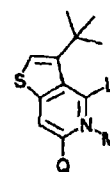
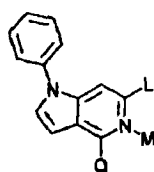
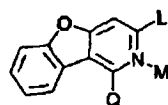
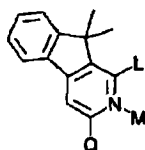
[0293] QT60CN-41 QT60CN-42 QT60CN-43 QT60CN-44 QT60CN-45

[0294]



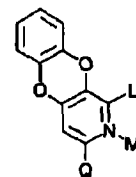
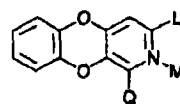
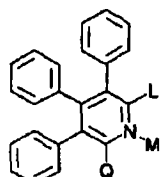
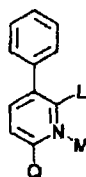
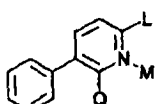
[0295] QT60CN-46 QT60CN-47 QT60CN-48 QT60CN-49 QT60CN-50

[0296]



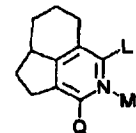
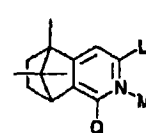
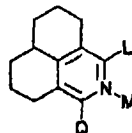
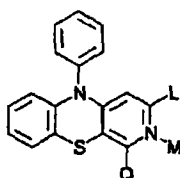
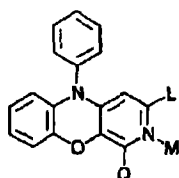
[0297] QT60CN-51 QT60CN-52 QT60CN-53 QT60CN-54 QT60CN-55

[0298]



[0299] QT60CN-56 QT60CN-57 QT60CN-58 QT60CN-59 QT60CN-60

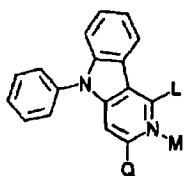
[0300]



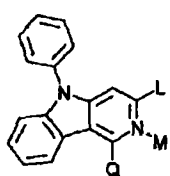
[0301] QT60CN-61 QT60CN-62 QT60CN-63 QT60CN-64

QT60CN-65

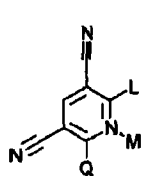
[0302]



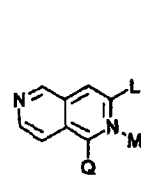
[0303] QT60CN-66



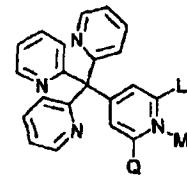
QT60CN-67



QT60CN-68

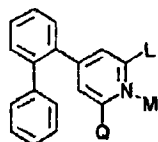


QT60CN-69

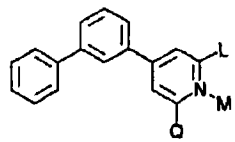


QT60CN-70

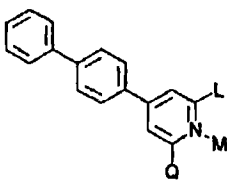
[0304]



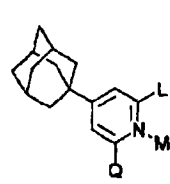
[0305] QT60CN-71



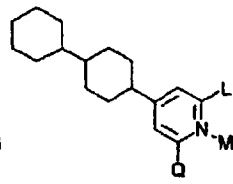
QT60CN-72



QT60CN-73



QT60CN-74

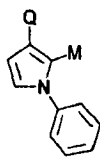


QT60CN-75

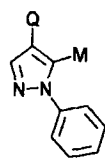
[0306] ●可以用于 Q<sup>p</sup> 的部分结构:

[0307] [QB51CC]

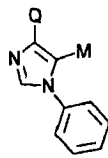
[0308]



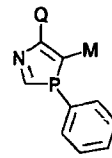
[0309] QB51CC-1



QB51CC-2



QB51CC-3



QB51CC-4



QB51CC-5

[0310]



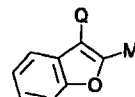
[0311] QB51CC-6



QB51CC-7



QB51CC-8



QB51CC-9



QB51CC-10

[0312]



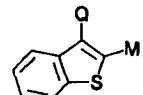
[0313] QB51CC-11



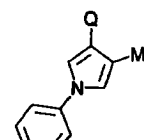
QB51CC-12



QB51CC-13



QB51CC-14



QB51CC-15

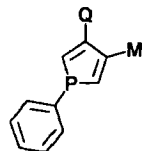
[0314]



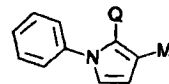
[0315] QB51CC-16



QB51CC-17



QB51CC-18



QB51CC-20

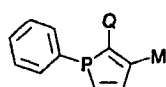
[0316]



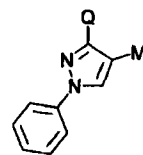
[0317] QB51CC-21



QB51CC-22

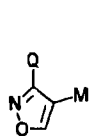


QB51CC-23

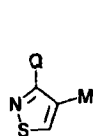


QB51CC-25

[0318]

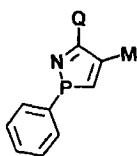


[0319] QB51CC-26

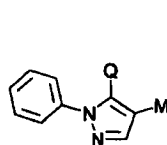


[0320]

QB51CC-27



QB51CC-28



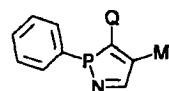
QB51CC-30



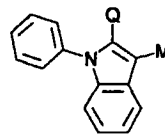
[0321] QB51CC-31



QB51CC-32

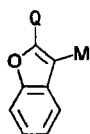


QB51CC-33

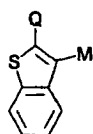


QB51CC-35

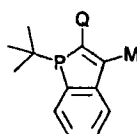
[0322]



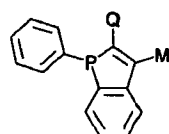
[0323] QB51CC-36



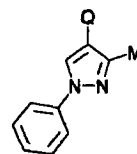
QB51CC-37



QB51CC-38



QB51CC-39



QB51CC-40

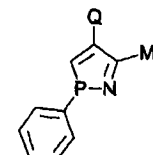
[0324]



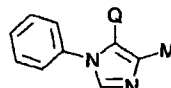
[0325] QB51CC-41



QB51CC-42



QB51CC-43



QB51CC-45

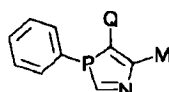
[0326]



[0327] QB51CC-46



QB51CC-47



QB51CC-48

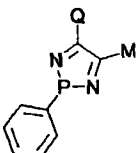


QB51CC-50

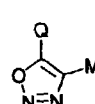
[0328]



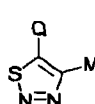
[0329] QB51CC-51



QB51CC-52

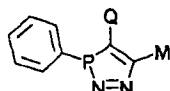


QB51CC-54

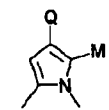


QB51CC-55

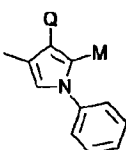
[0330]



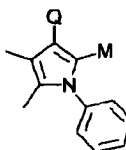
[0331] QB51CC-56



QB51CC-58

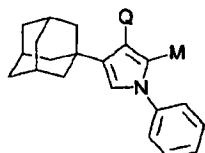


QB51CC-59

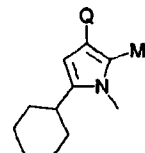


QB51CC-60

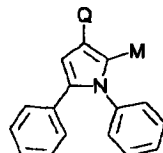
[0332]



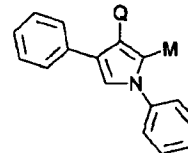
[0333] QB51CC-61



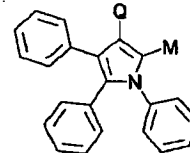
QB51CC-62



QB51CC-63

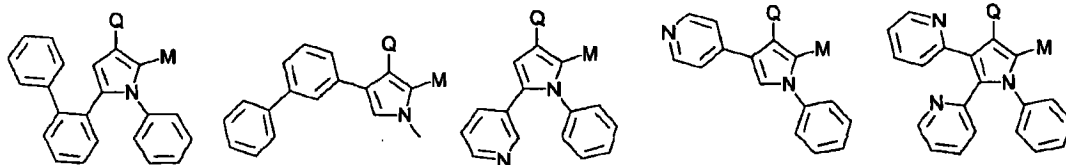


QB51CC-64

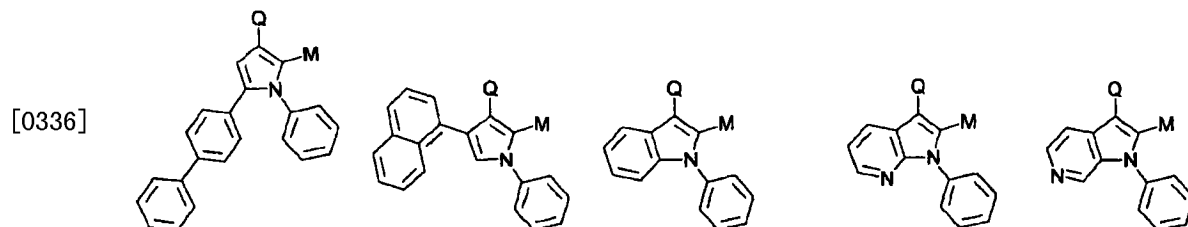


QB51CC-65

[0334]

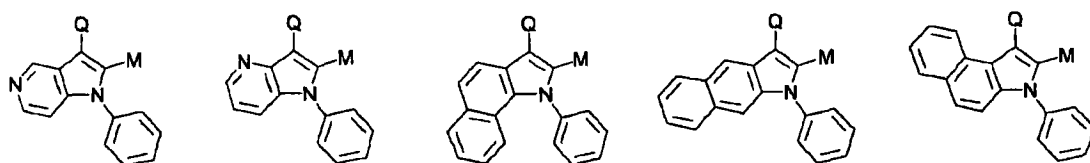


[0335] QB51CC-66 QB51CC-67 QB51CC-68 QB51CC-69 QB51CC-70



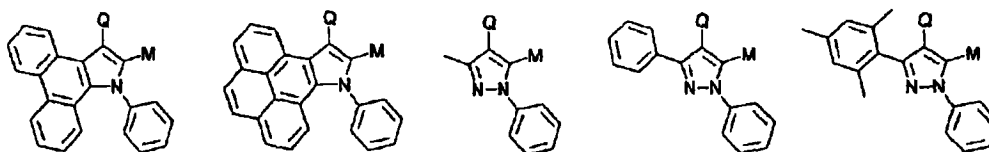
[0337] QB51CC-71 QB51CC-72 QB51CC-73 QB51CC-74 QB51CC-75

[0338]

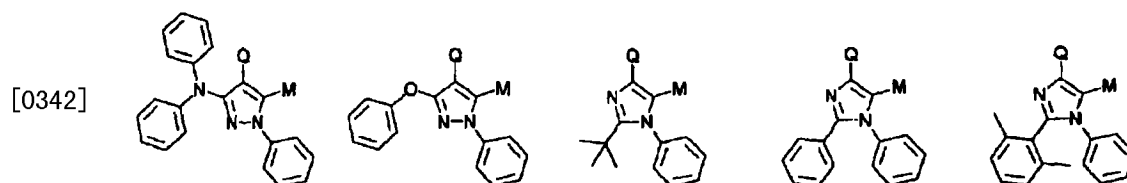


[0339] QB51CC-76 QB51CC-77 QB51CC-78 QB51CC-79 QB51CC-80

[0340]

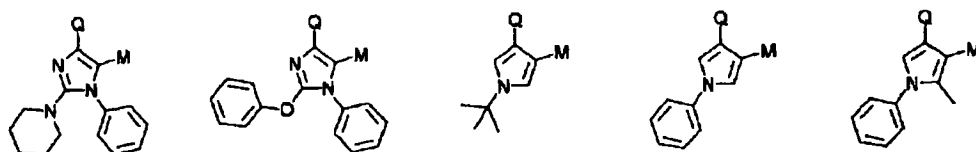


[0341] QB51CC-81 QB51CC-82 QB51CC-83 QB51CC-84 QB51CC-85

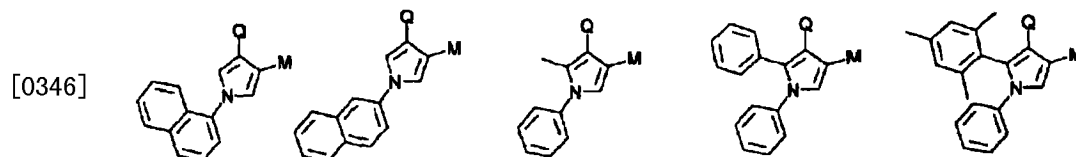


[0343] QB51CC-86 QB51CC-87 QB51CC-88 QB51CC-89 QB51CC-90

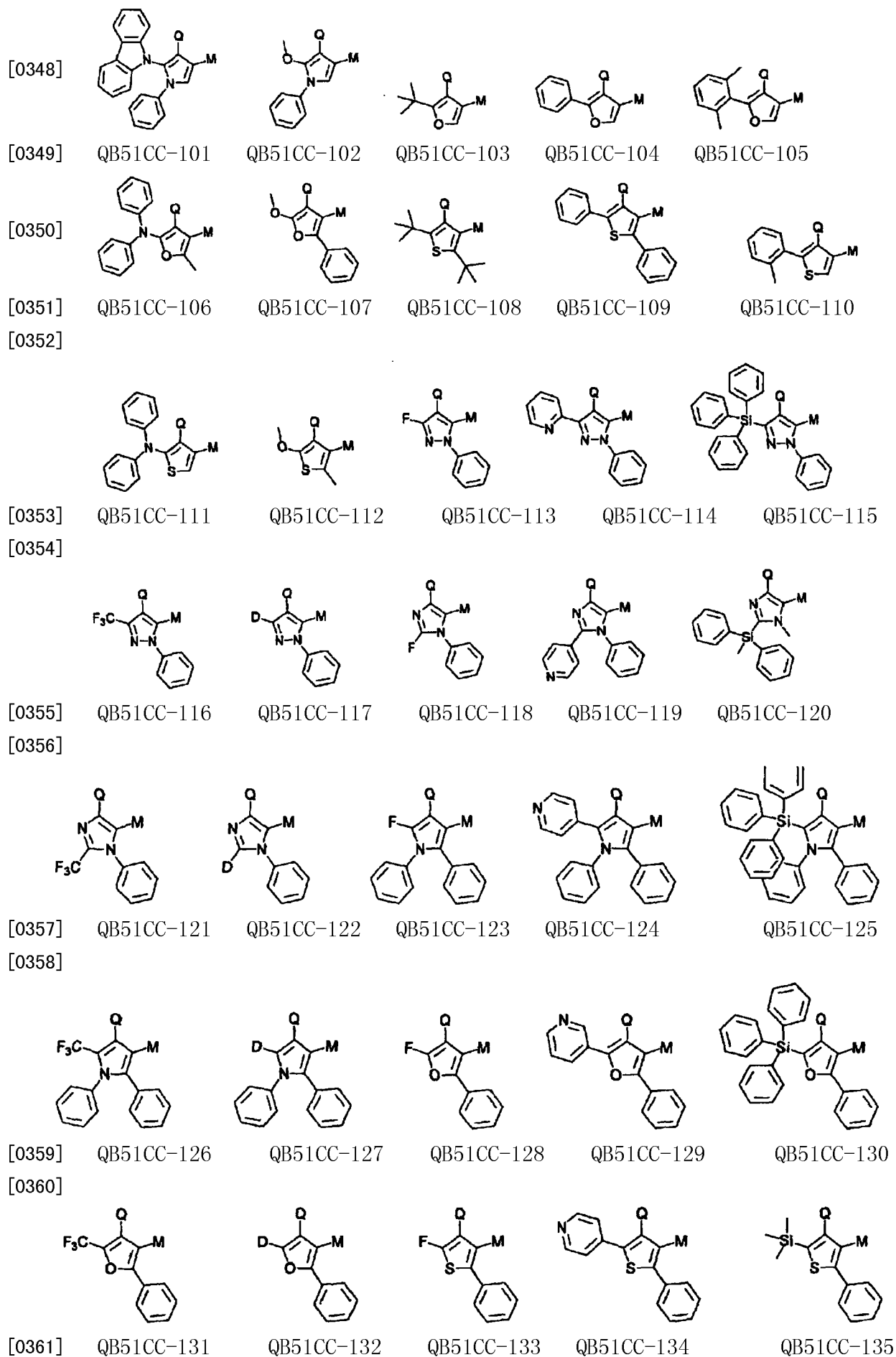
[0344]



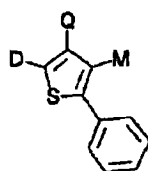
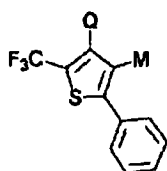
[0345] QB51CC-91 QB51CC-92 QB51CC-93 QB51CC-94 QB51CC-95



[0347] QB51CC-96 QB51CC-97 QB51CC-98 QB51CC-99 QB51CC-100



[0362]

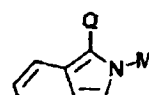


[0363] QB51CC-136

QB51CC-137

[0364] [QB51CN]

[0365]



[0366] QB51CN-1

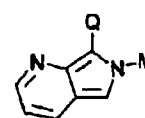
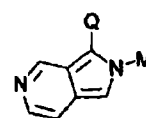
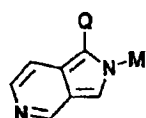
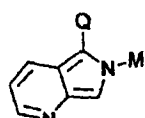
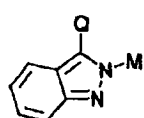
QB51CN-2

QB51CN-3

QB51CN-4

QB51CN-5

[0367]



[0368] QB51CN-6

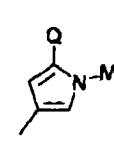
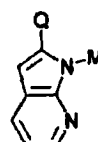
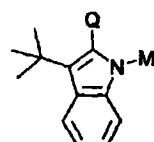
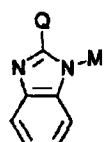
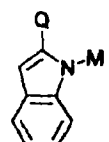
QB51CN-7

QB51CN-8

QB51CN-9

QB51CN-10

[0369]



[0370] QB51CN-11

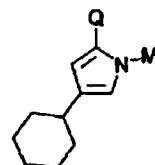
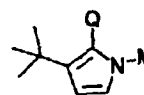
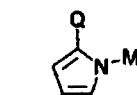
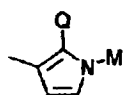
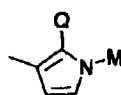
QB51CN-12

QB51CN-13

QB51CN-14

QB51CN-15

[0371]



[0372] QB51CN-16

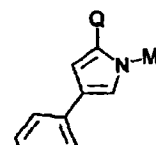
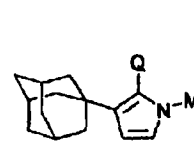
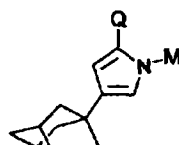
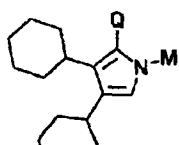
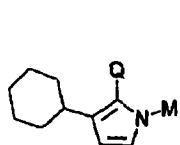
QB51CN-17

QB51CN-18

QB51CN-19

QB51CN-20

[0373]



[0374] QB51CN-21

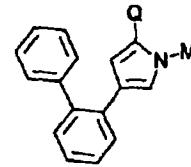
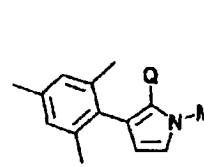
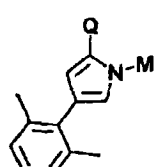
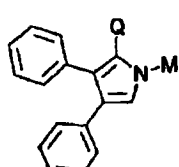
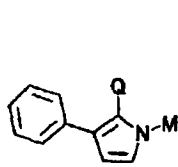
QB51CN-22

QB51CN-23

QB51CN-24

QB51CN-25

[0375]



[0376] QB51CN-26

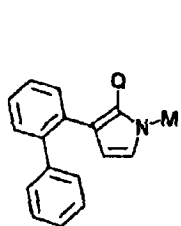
QB51CN-27

QB51CN-28

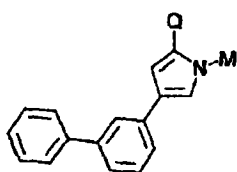
QB51CN-29

QB51CN-30

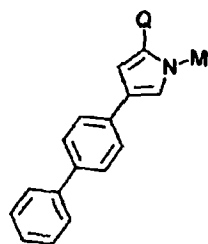
[0377]



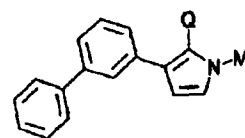
[0378] QB51CN-31



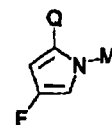
QB51CN-32



QB51CN-33

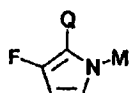


QB51CN-34

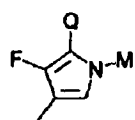


QB51CN-35

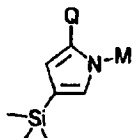
[0379]



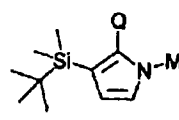
[0380] QB51CN-36



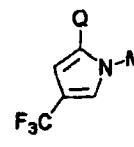
QB51CN-37



QB51CN-38

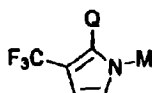


QB51CN-39

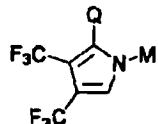


QB51CN-40

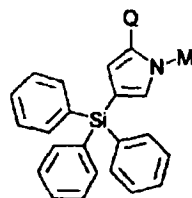
[0381]



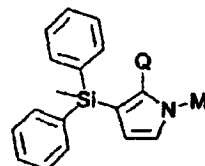
[0382] QB51CN-41



QB51CN-42



QB51CN-43



QB51CN-44

[0383] [QB51NC]

[0384]



[0385] QB51NC-1



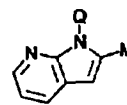
QB51NC-2



QB51NC-3

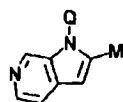


QB51NC-4

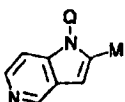


QB51NC-5

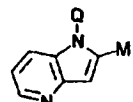
[0386]



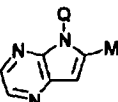
[0387] QB51NC-6



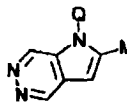
QB51NC-7



QB51NC-8

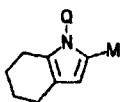


QB51NC-9

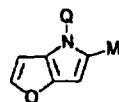


QB51NC-10

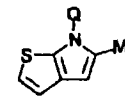
[0388]



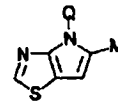
[0389] QB51NC-11



QB51NC-12



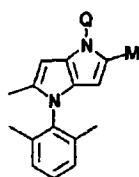
QB51NC-13



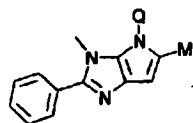
QB51NC-14

QB51NC-15

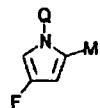
[0390]



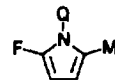
[0391] QB51NC-16



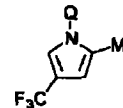
QB51NC-17



QB51NC-18

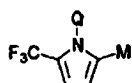


QB51NC-19

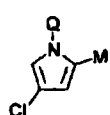


QB51NC-20

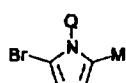
[0392]



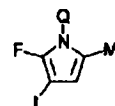
[0393] QB51NC-21



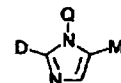
QB51NC-22



QB51NC-23

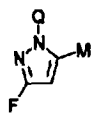


QB51NC-24

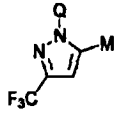


QB51NC-25

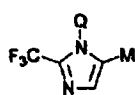
[0394]



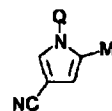
[0395] QB51NC-26



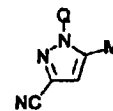
QB51NC-27



QB51NC-28

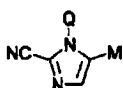


QB51NC-29

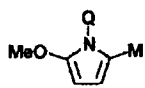


QB51NC-30

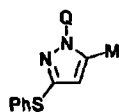
[0396]



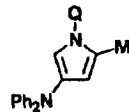
[0397] QB51NC-31



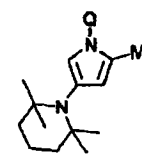
QB51NC-32



QB51NC-33

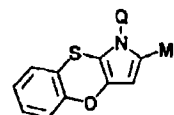


QB51NC-34

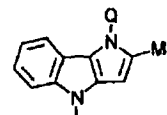


QB51NC-35

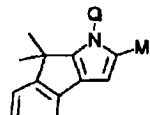
[0398]



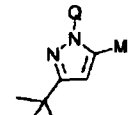
[0399] QB51NC-36



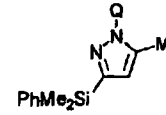
QB51NC-37



QB51NC-38

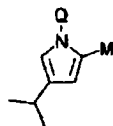


QB51NC-39

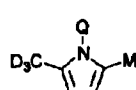


QB51NC-40

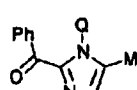
[0400]



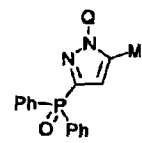
[0401] QB51NC-41



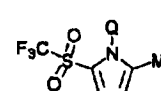
QB51NC-42



QB51NC-43

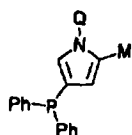


QB51NC-44

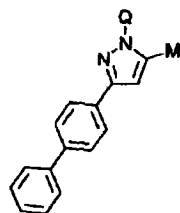


QB51NC-45

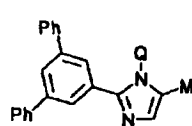
[0402]



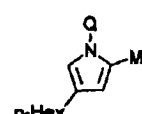
[0403] QB51NC-46



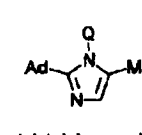
QB51NC-47



QB51NC-4B



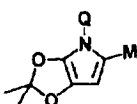
QB51NC-49



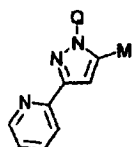
Ad: 1-Adamantyl

QB51NC-50

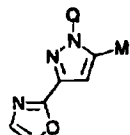
[0404]



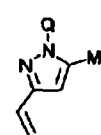
[0405] QB51NC-51



QB51NC-52



QB51NC-53

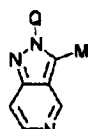
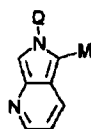
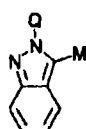


QB51NC-54



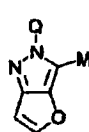
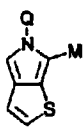
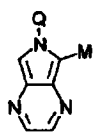
QB51NC-55

[0406]



[0407] QB51NC-56 QB51NC-57 QB51NC-58 QB51NC-59 QB51NC-60

[0408]

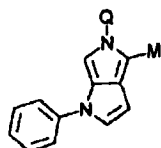
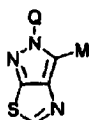
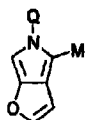


[0409] QB51NC-64

QB51NC-65

QB51NC-66

[0410]



[0411] QB51NC-67

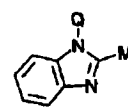
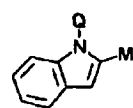
QB51NC-68

QB51NC-69

QB51NC-70

QB51NC-71

[0412]



[0413] QB51NC-72

QB51NC-73

QB51NC-74

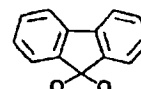
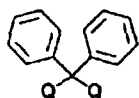
QB51NC-75

QB51NC-76

[0414] ●可以用于连接基 L 的部分结构：

[0415] [L]

[0416]



[0417] L-1

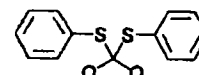
L-2

L-3

L-4

L-5

[0418]



[0419] L-6

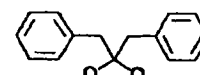
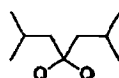
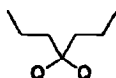
L-7

L-8

L-9

L-10

[0420]



[0421] L-11

L-12

L-13

L-14

L-15

[0422]



[0423] L-16

L-17

L-18

L-19

L-20

[0424]



[0425] L-21

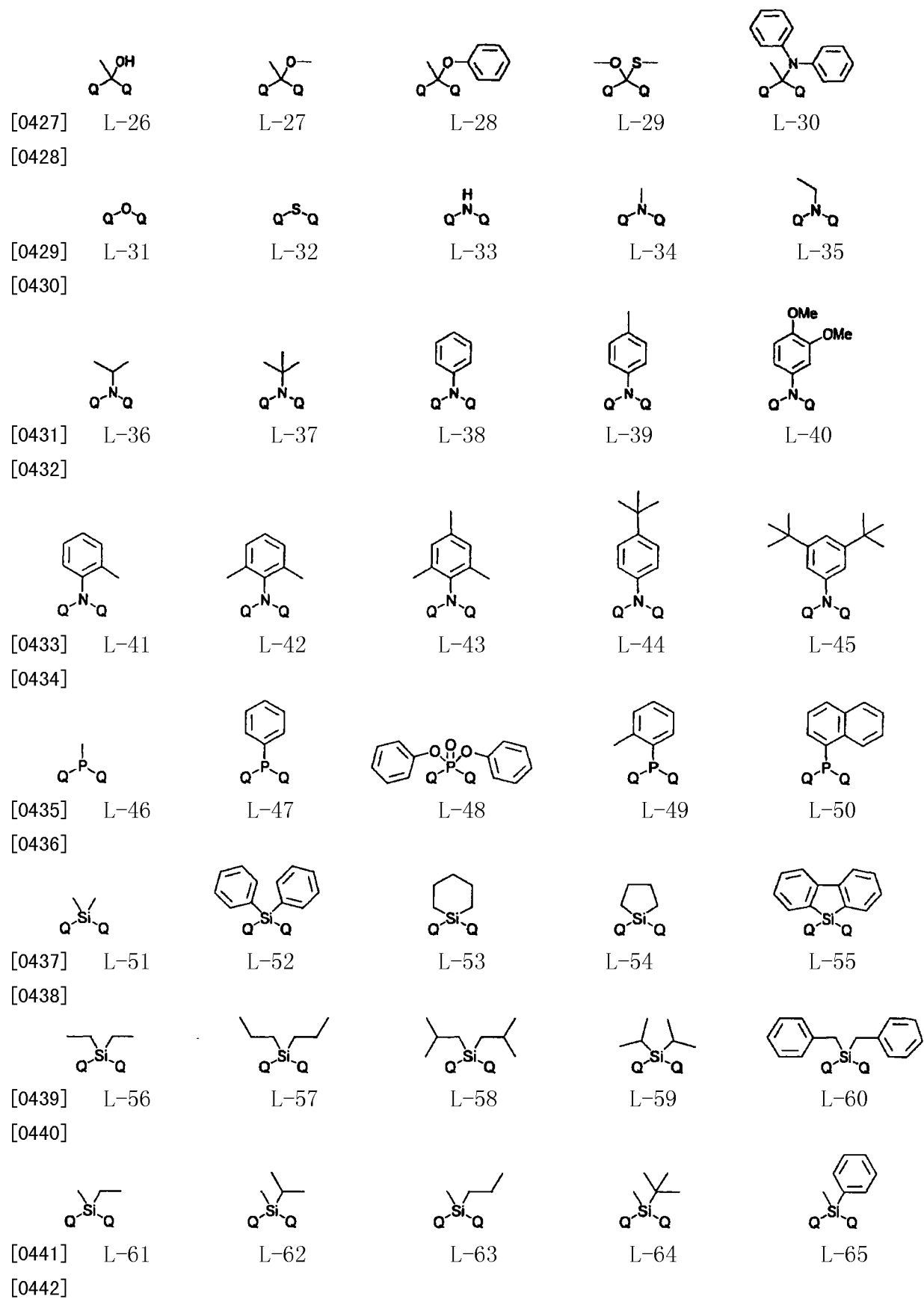
L-22

L-23

L-24

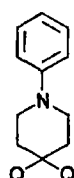
L-25

[0426]

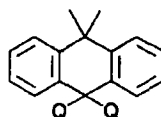




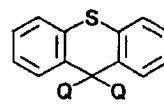
[0443] L-66



L-67

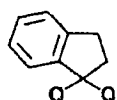


L-68

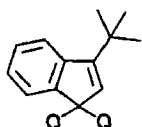


L-70

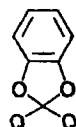
[0444]



[0445] L-71



L-72



L-73



L-74



L-75

[0446]



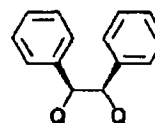
[0447] L-76



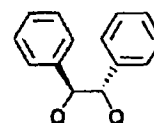
L-77



L-78



L-79



L-80

[0448]



[0449] L-81



L-82



L-83



L-84



L-85

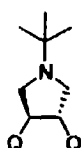
[0450]



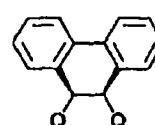
[0451] L-86



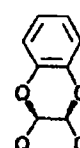
L-87



L-88



L-89



L-90

[0452]



[0453] L-91



L-92



L-93



L-94



L-95

[0454]



[0455] L-96



L-97



L-98



L-99

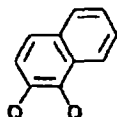


L-100

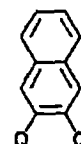
[0456]



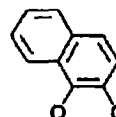
[0457] L-101



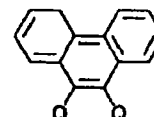
L-102



L-103



L-104



L-105

[0458]



[0459] L-106

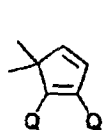
L-107

L-108

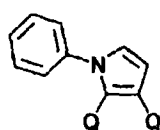
L-109

L-110

[0460]



[0461] L-111



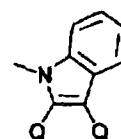
L-112



L-113

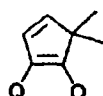


L-114

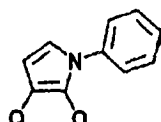


L-115

[0462]



[0463] L-116



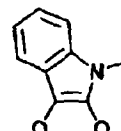
L-117



L-118



L-119

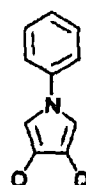


L-120

[0464]



[0465] L-121



L-122



L-123



L-124



L-125

[0466] 根据本发明的式 (1) 代表的化合物可以由式 (I) 中对应于表 1 示出的  $Q^A$ ,  $Q^B$ ,  $Q^C$  和  $Q^D$  的部分结构基团的组合 1 ~ 3 中的任一个表示。

[0467] 表 1

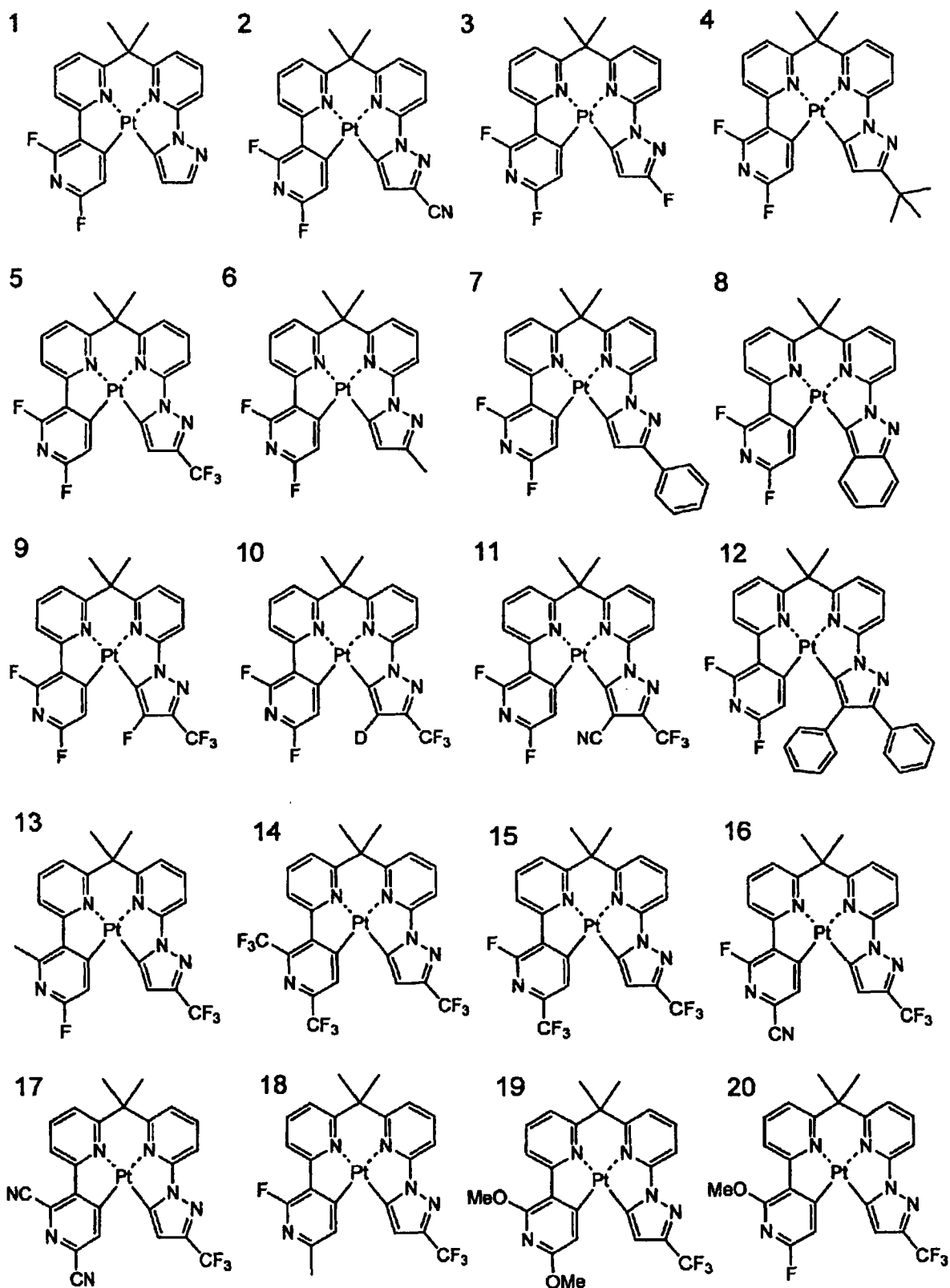
[0468]

|      | $Q^A$  | $Q^B$  | $Q^C$  | $Q^D$  |
|------|--------|--------|--------|--------|
| 组合 1 | QB61CC | QT60CN | QT60CN | QB51CC |
| 组合 2 | QB61CC | QT60CN | QT60CN | QB51CN |
| 组合 3 | QB61CC | QT60CN | QT60CN | QB51NC |

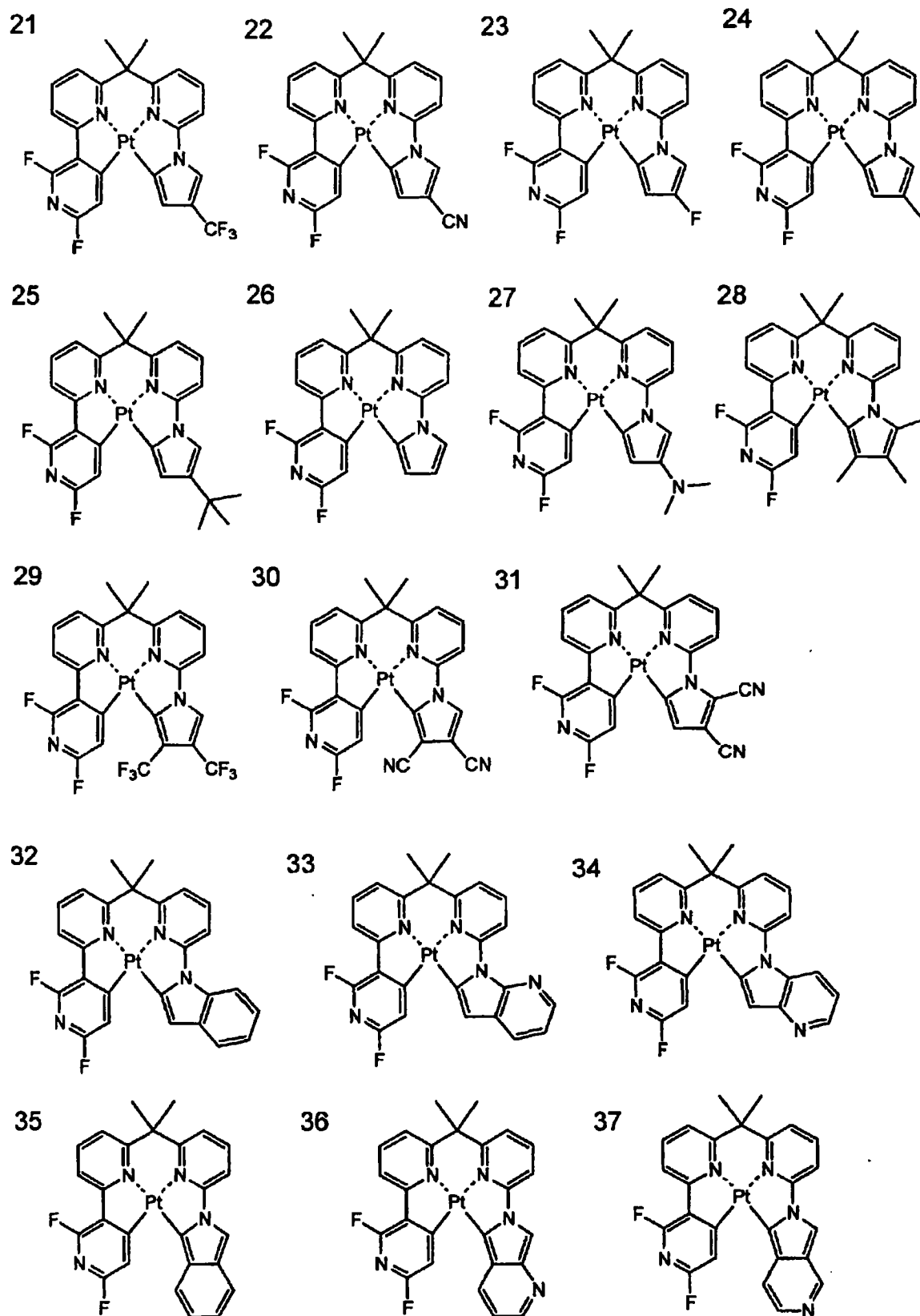
[0469] 下面描述式 (1) 代表的金属络合物的优选具体例子, 但不应被解释为本发明受限于此。

[0470] 在本说明书中, 将“以金属种类 - 化合物例子中所描述的化合物序号”用作化合物序号。例如, 在化合物例子中所描述的化合物序号是“1”并且金属种类是“铂”的情况下, 化合物表示为“Pt-1”。

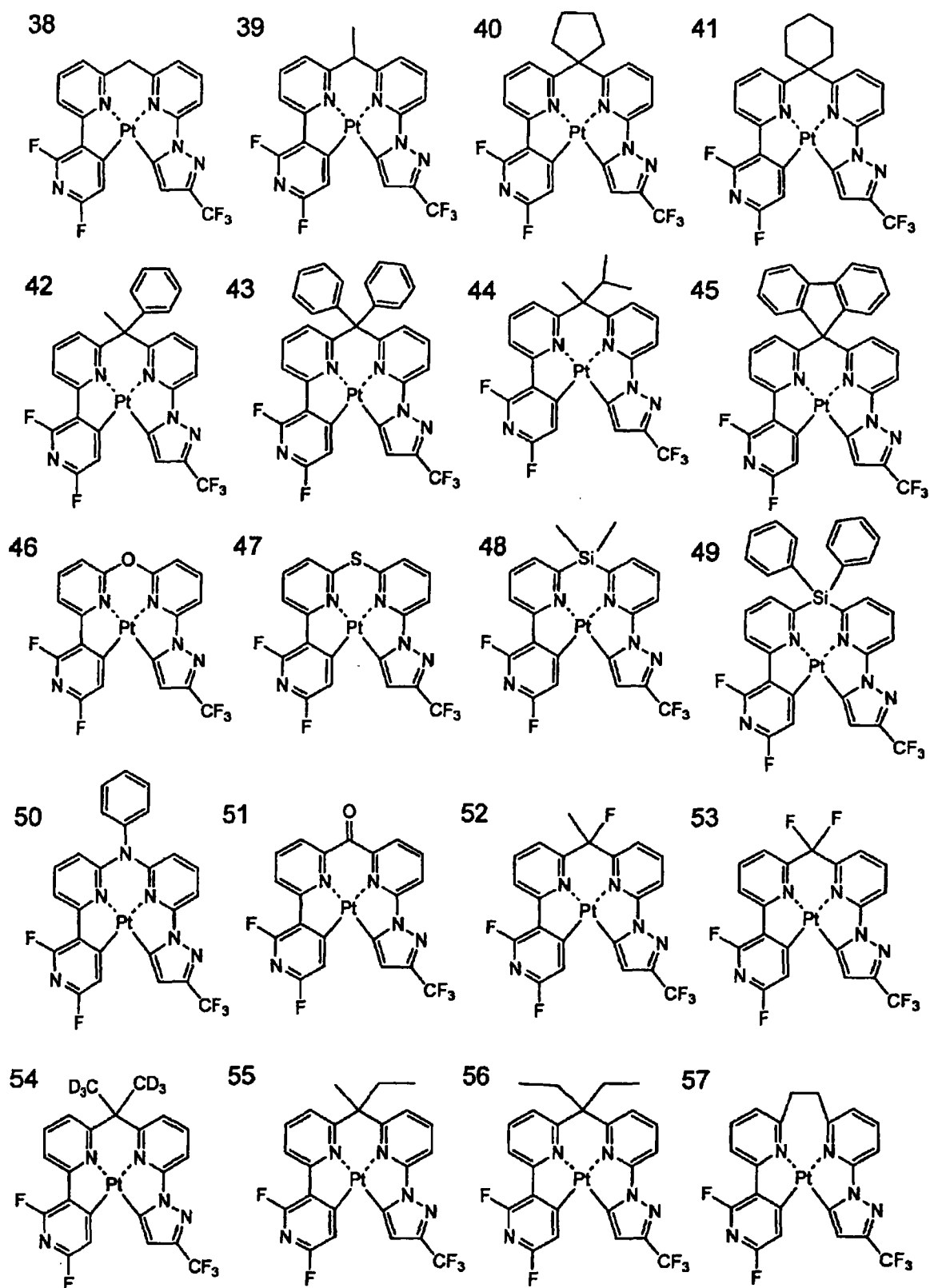
[0471]



[0472]

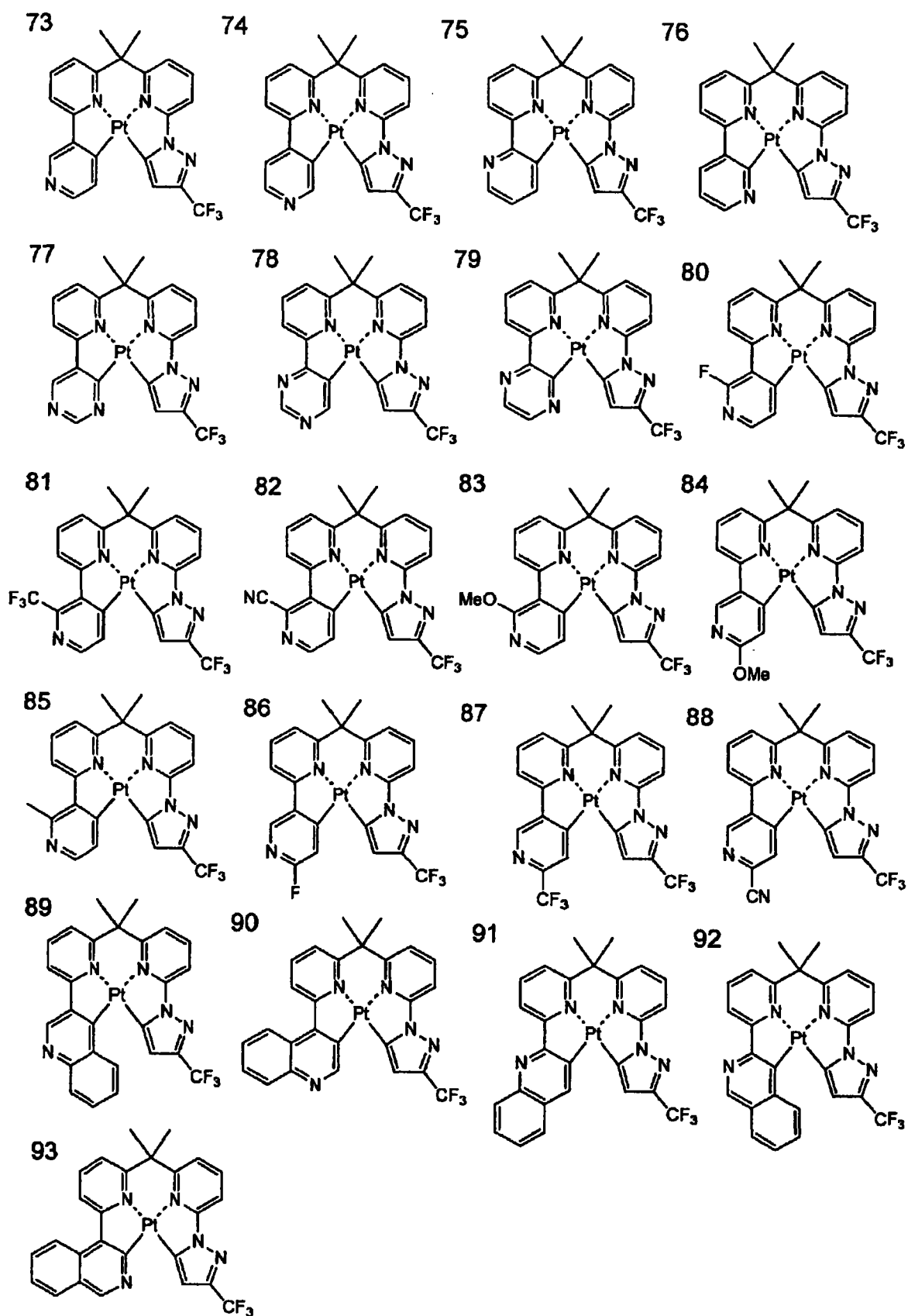


[0473]

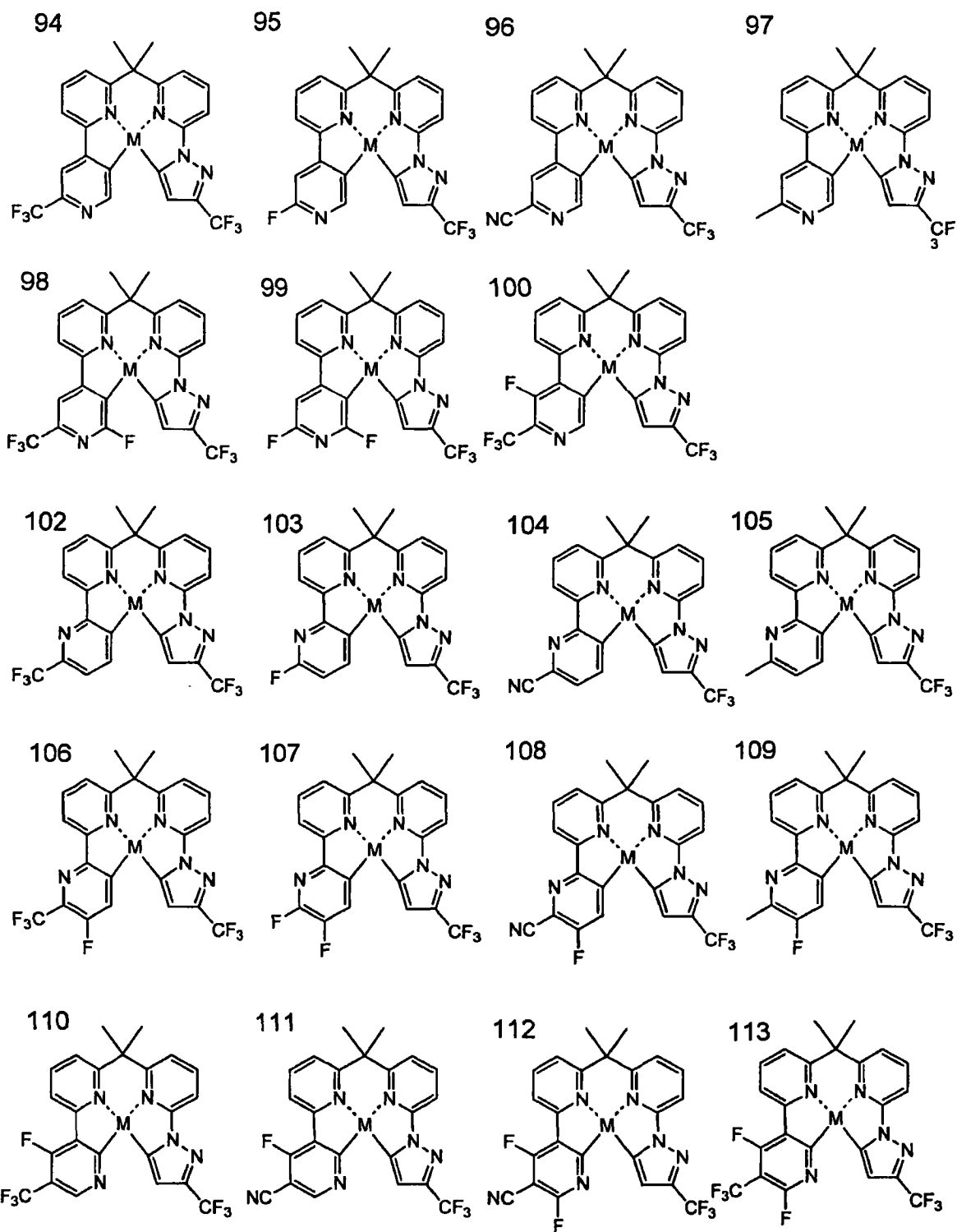


[0474]





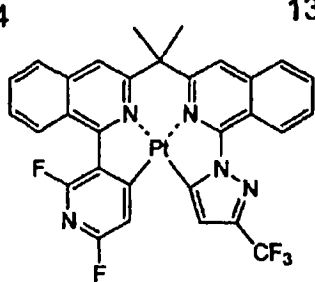
[0476]



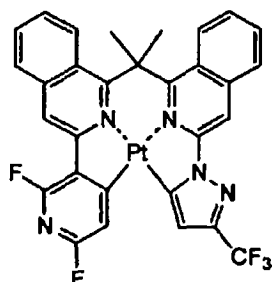
[0477]



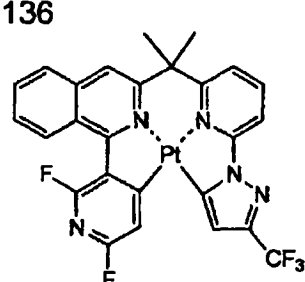
134



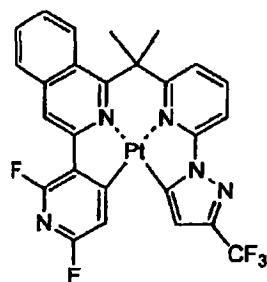
135



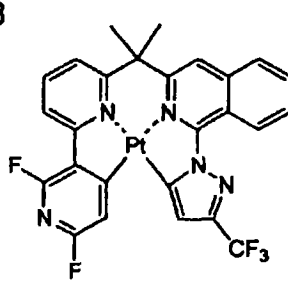
136



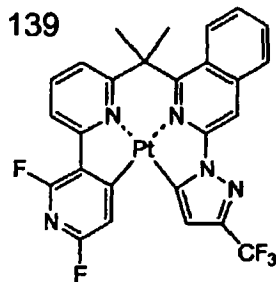
137



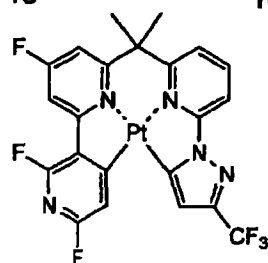
138



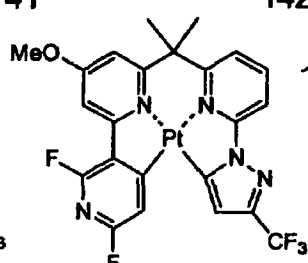
139



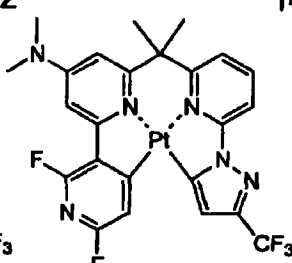
140



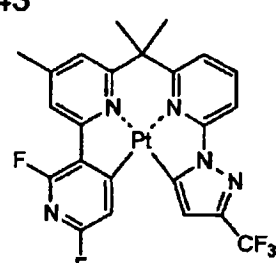
141



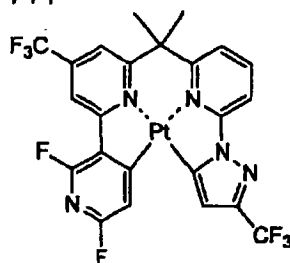
142



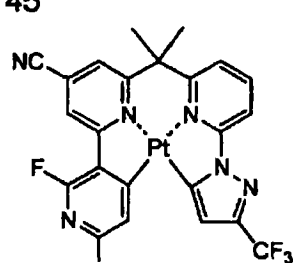
143



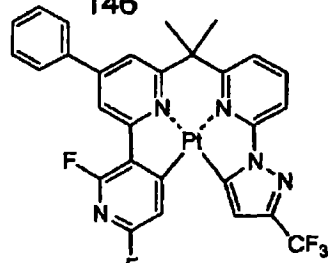
144



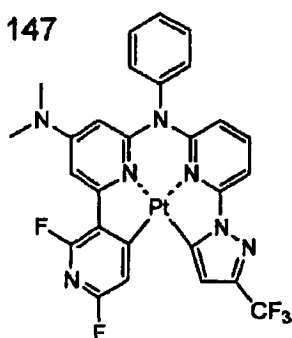
145



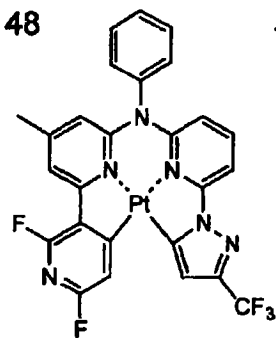
146



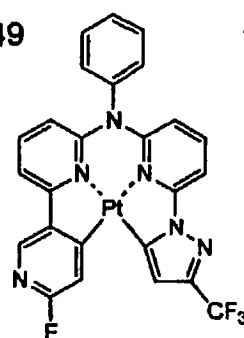
147



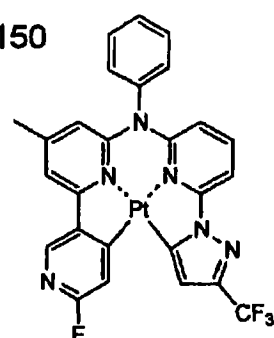
148



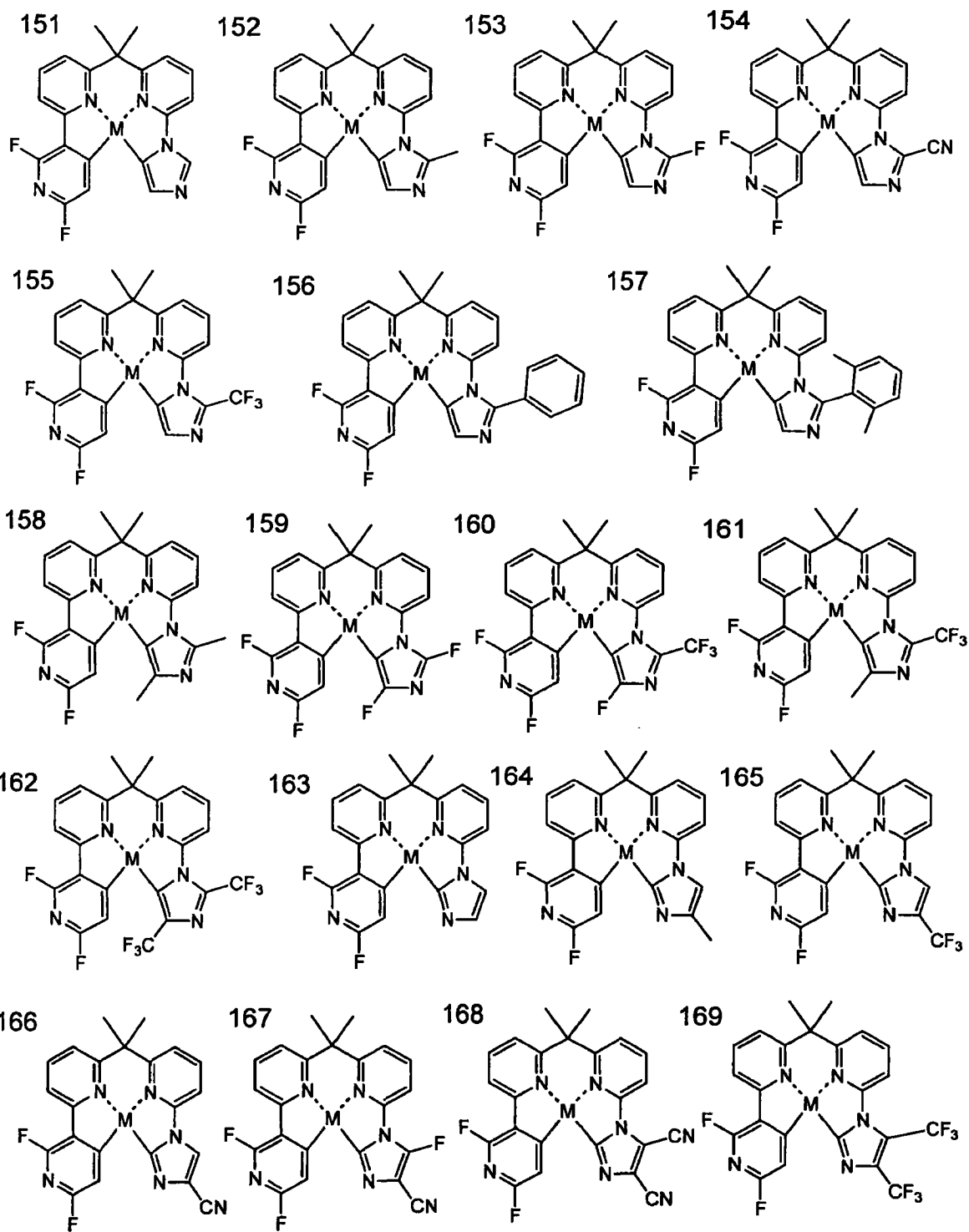
149



150

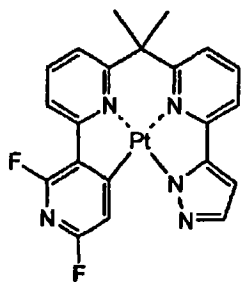


[0479]

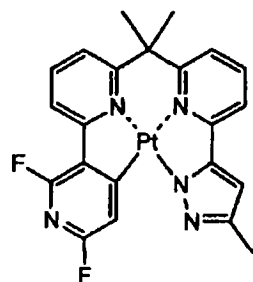


[0480]

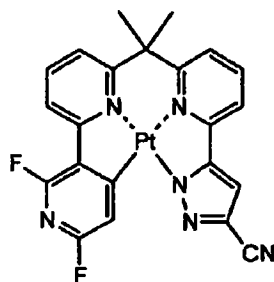
170



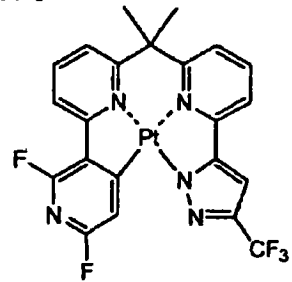
171



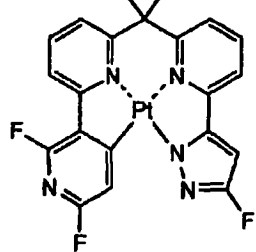
172



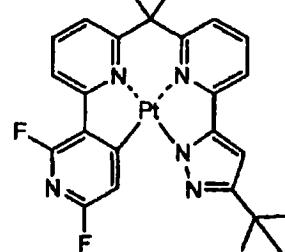
173



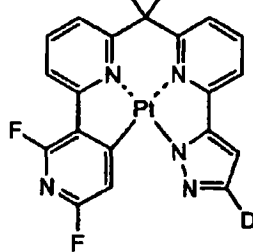
174



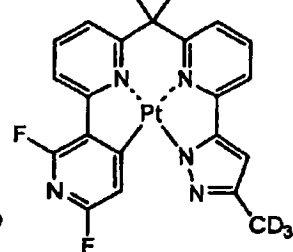
175



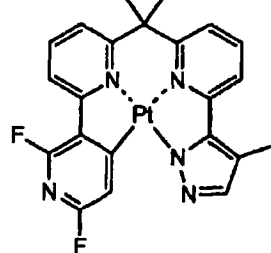
176



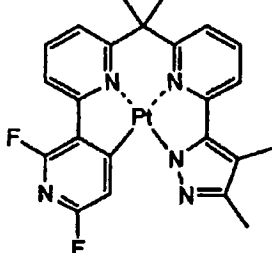
177



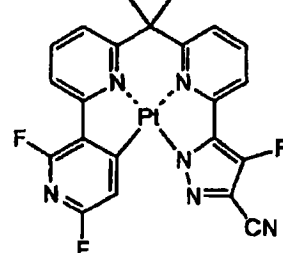
178



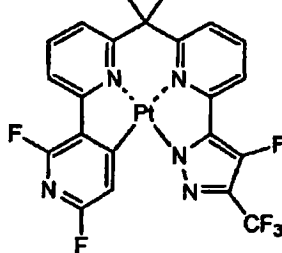
179



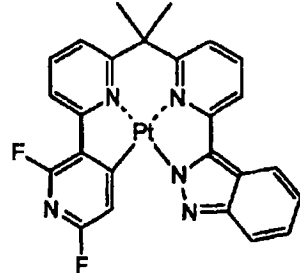
180



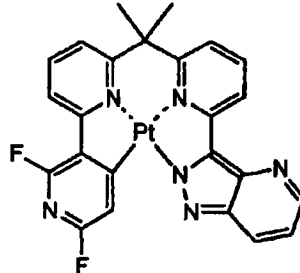
181



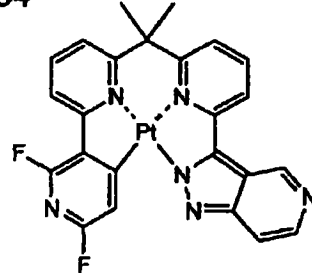
182



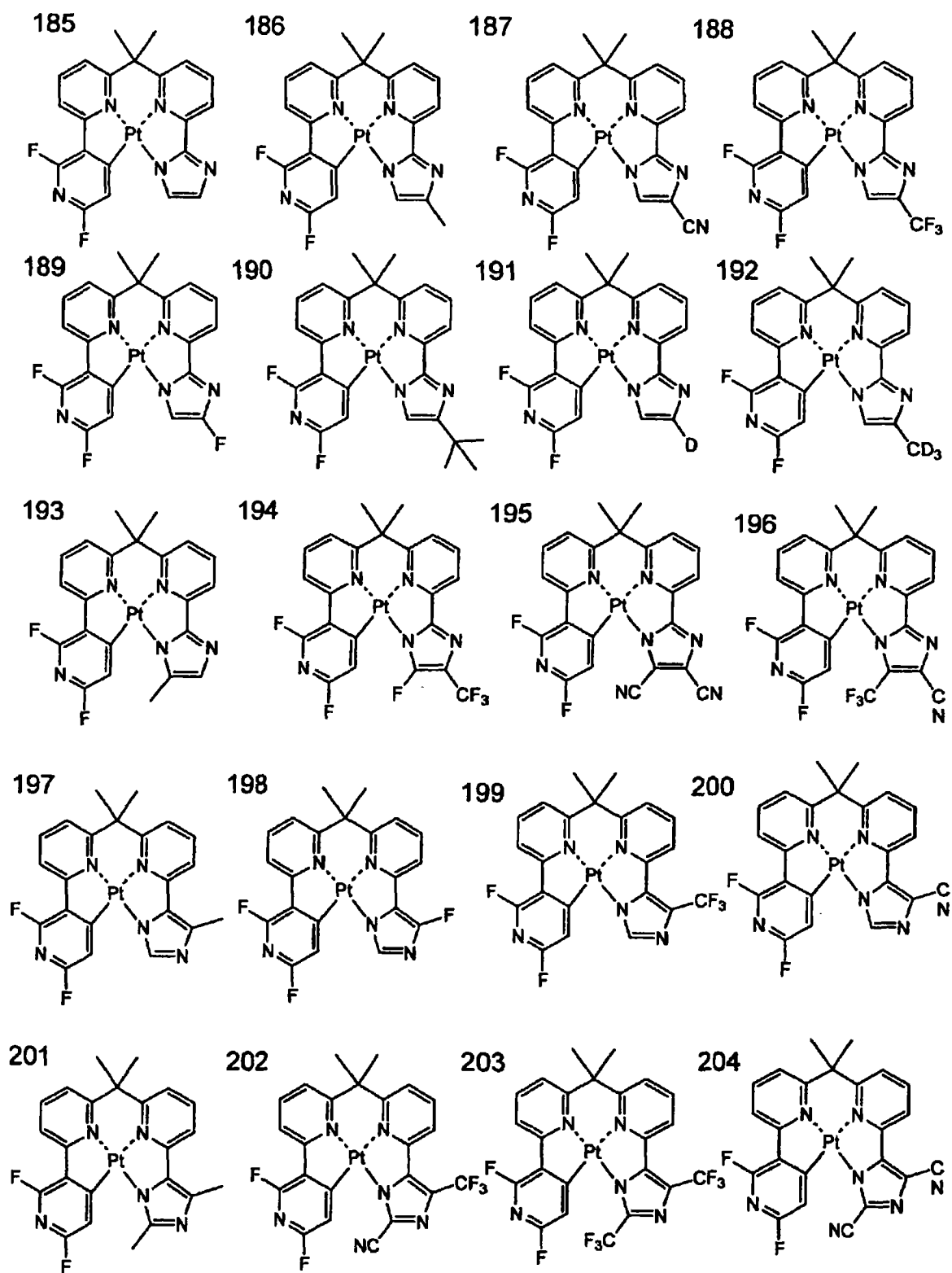
183



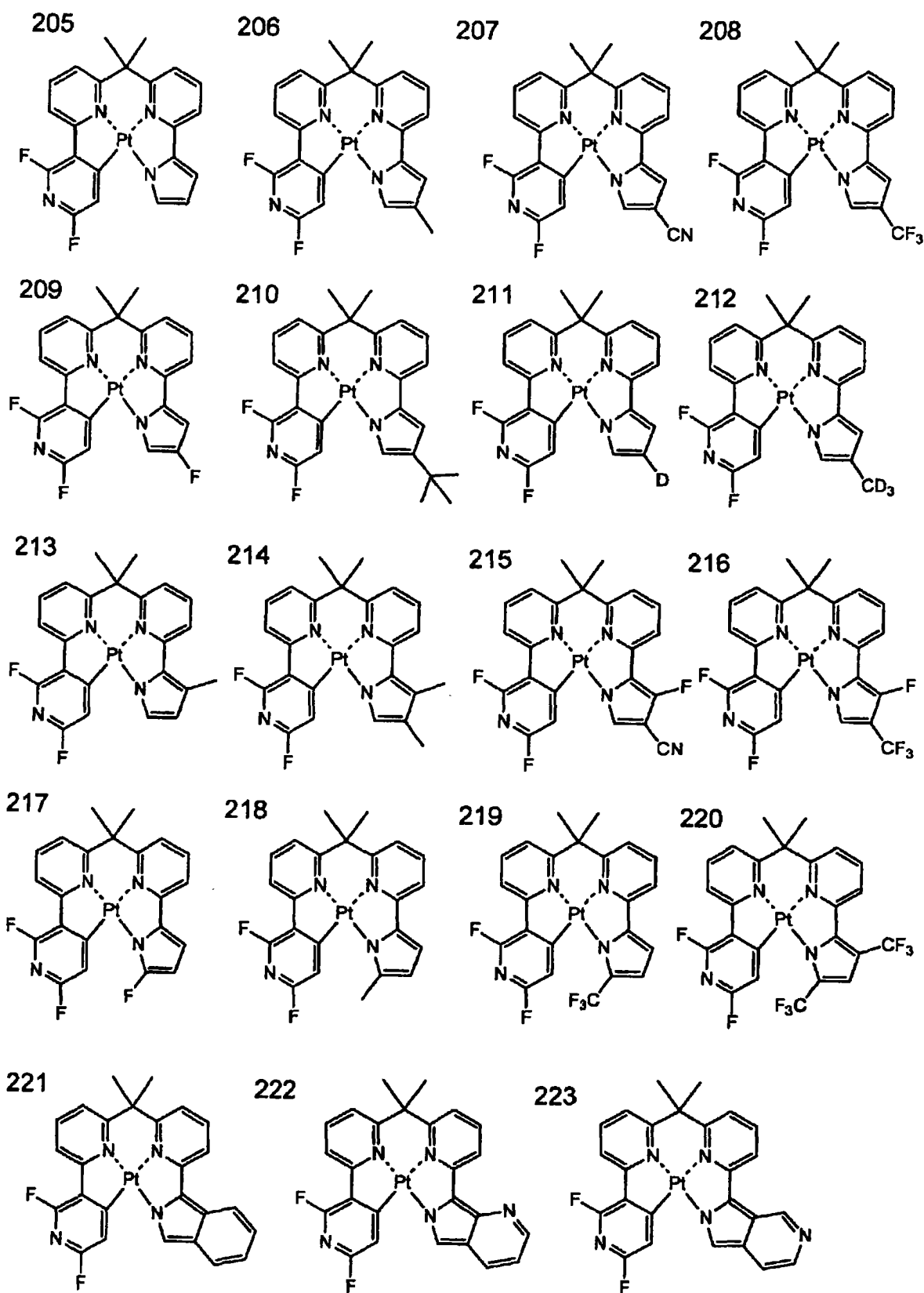
184



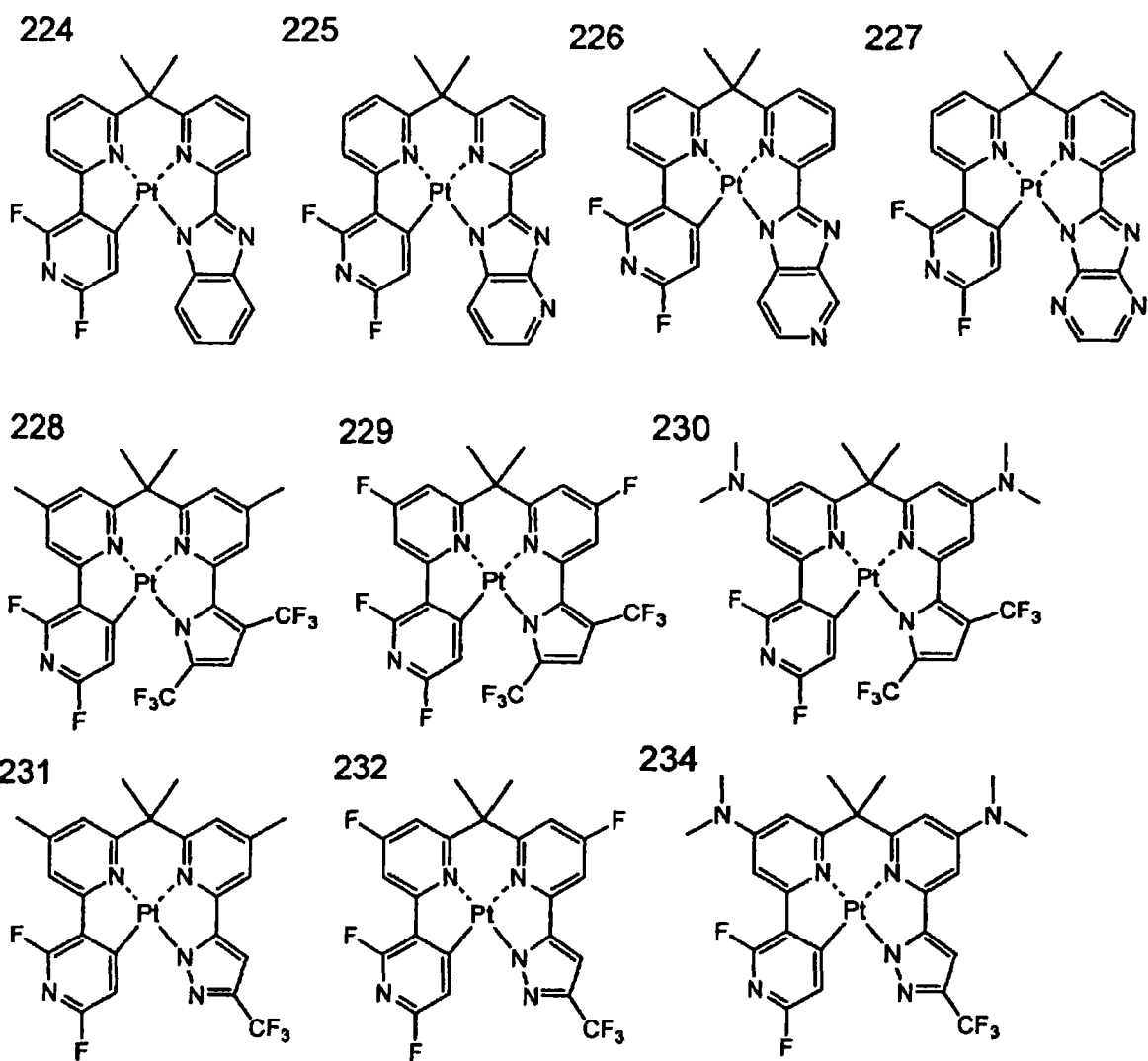
[0481]



[0482]

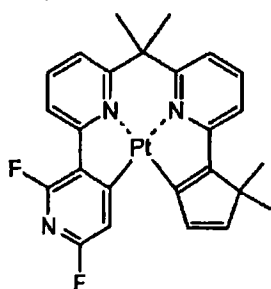


[0483]

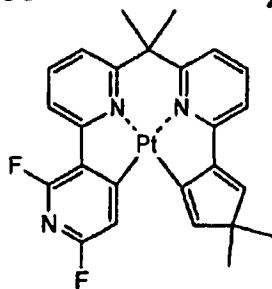


[0484]

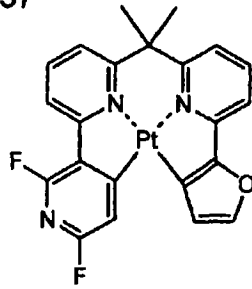
235



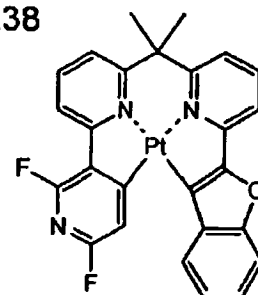
236



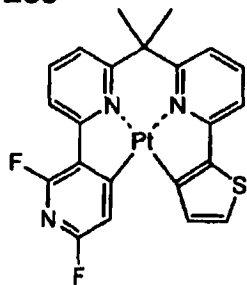
237



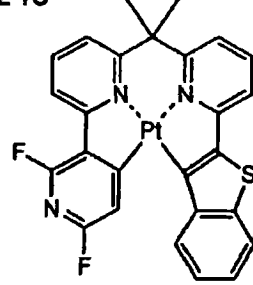
238



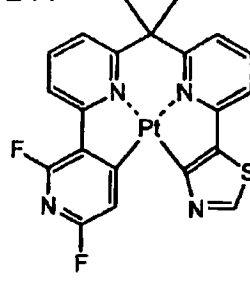
239



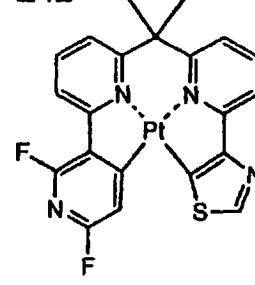
240



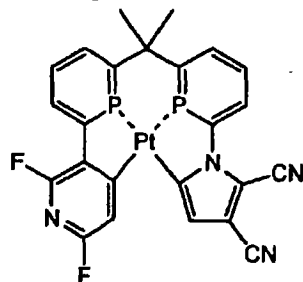
241



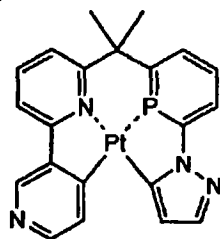
242



243

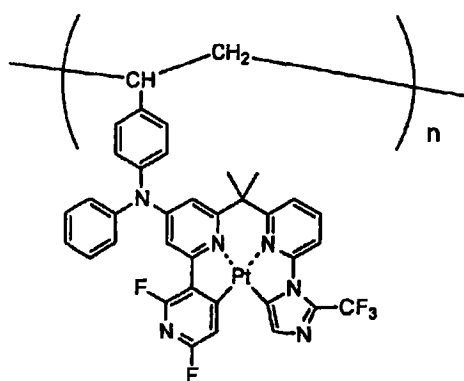


244



[0485]

245



[0486]

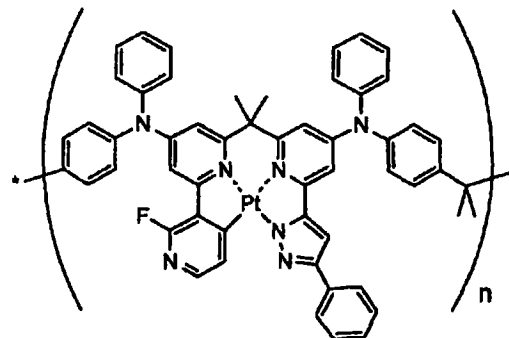
n : 自然数

[0487]

n, m : 自然数

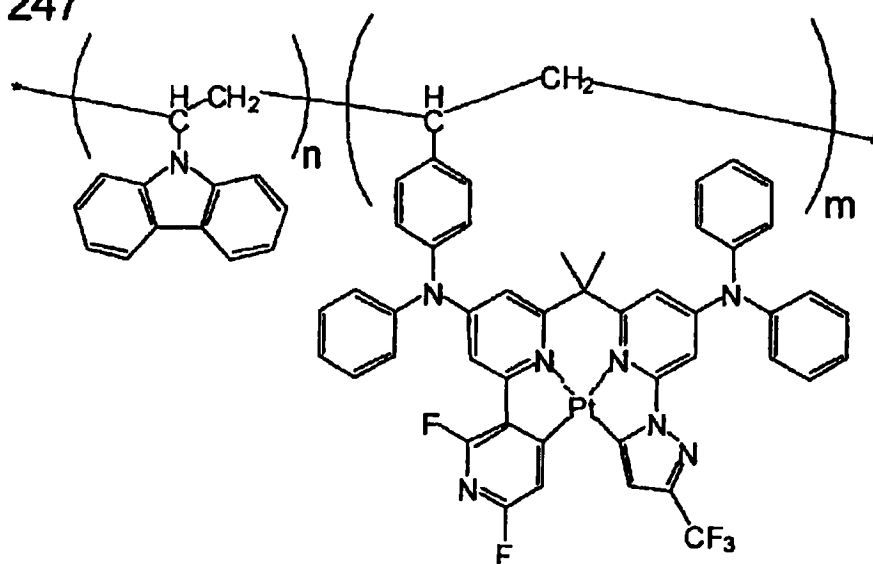
[0488]

246



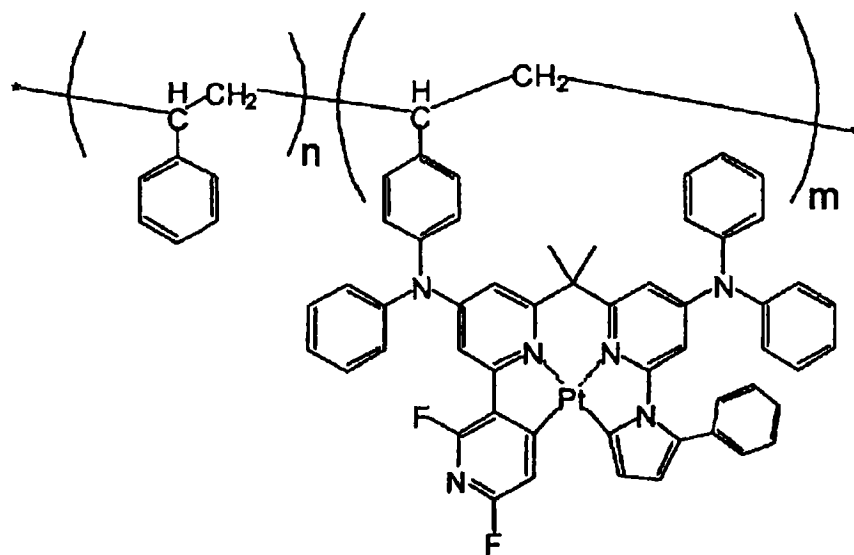
n : 自然数

247

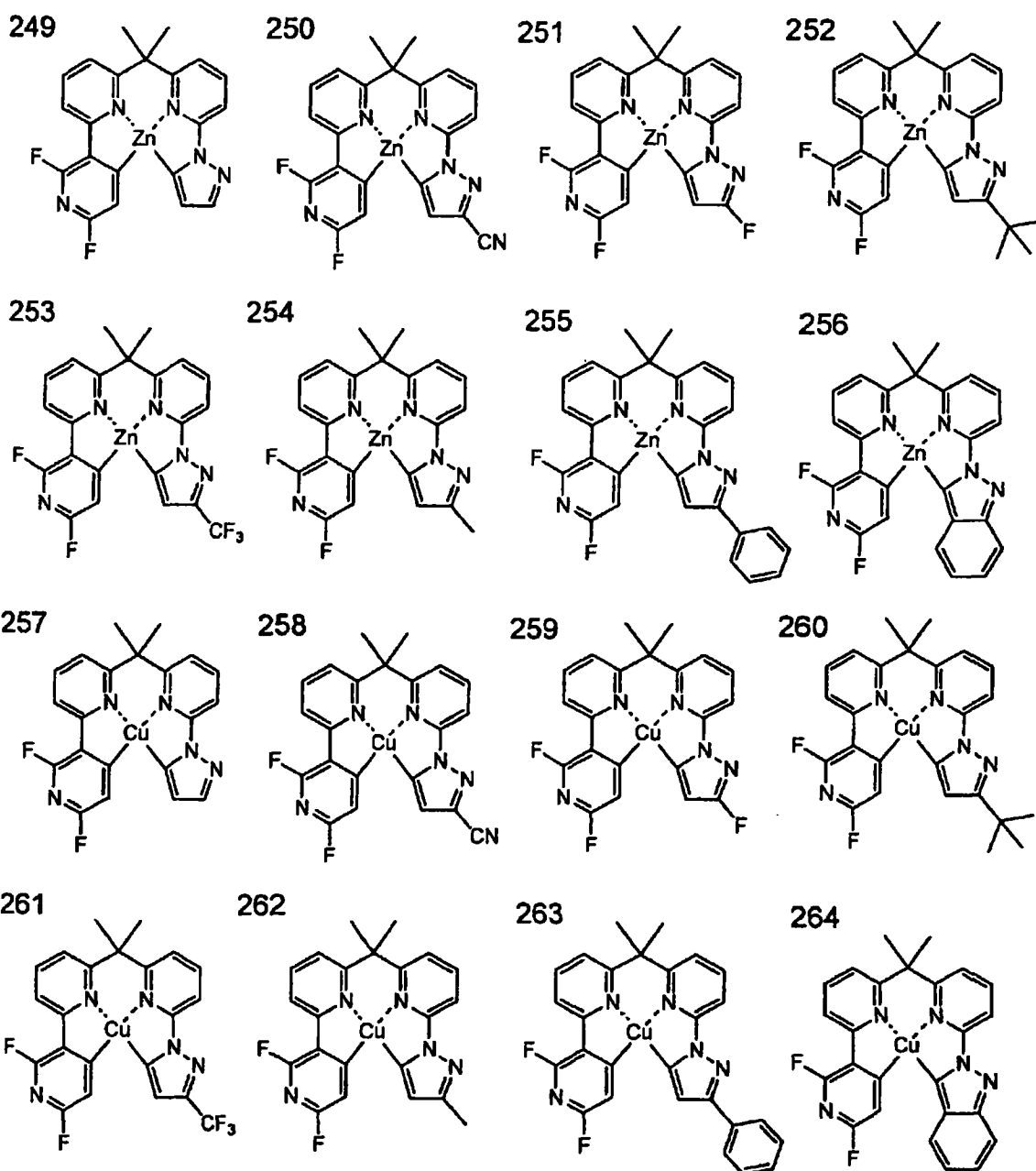
[0489]  $n, m$ : 自然数

[0490]

248

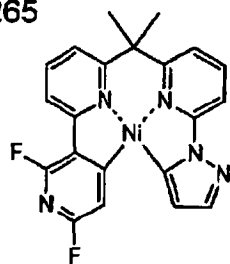


[0491]

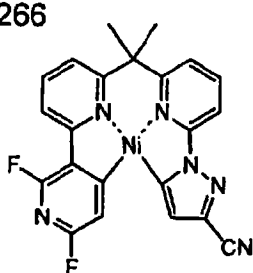


[0492]

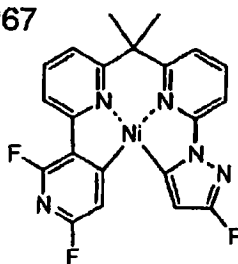
265



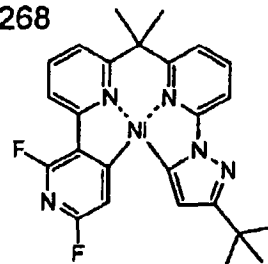
266



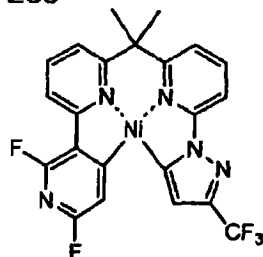
267



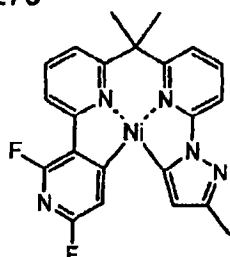
268



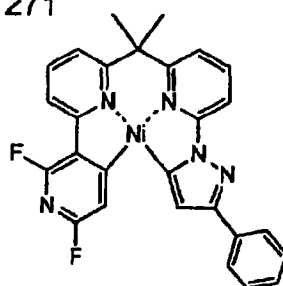
269



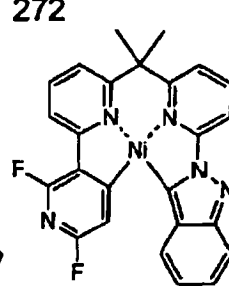
270



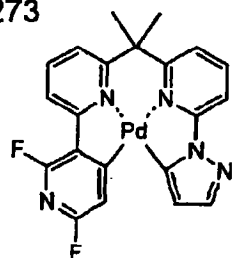
271



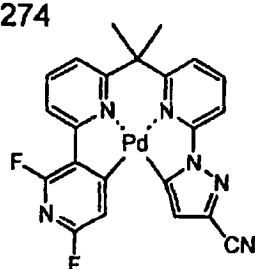
272



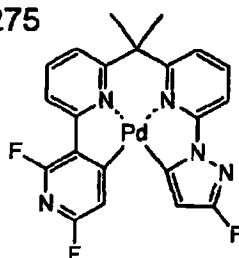
273



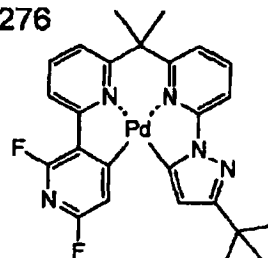
274



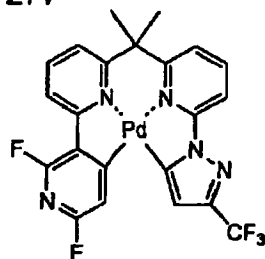
275



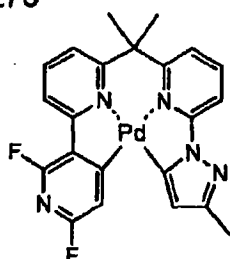
276



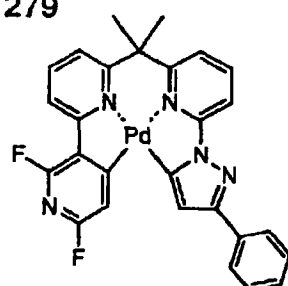
277



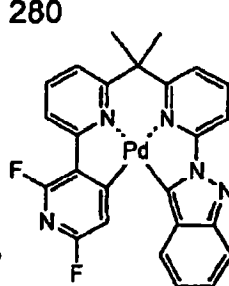
278



279



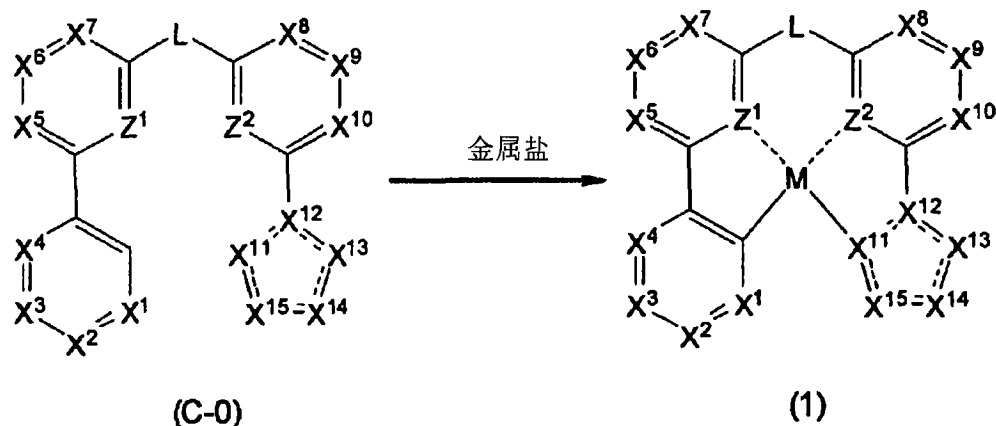
280



[0493] 接下来,下面说明合成式(1)代表的金属络合物的方法。

[0494] 通过在溶剂存在下使式(C-0)代表的化合物(下面称作“配体”)与金属盐反应可以得到式(1)代表的金属络合物。

[0495]



[0496] 在式 (C-0) 中,  $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9, X^{10}, X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}, X^{15}, Z^1, Z^2, L$  和  $M$  与上式 (1) 中的  $X^1, X^2, X^3, X^4, X^5, X^6, X^7, X^8, X^9, X^{10}, X^{11}, X^{12}, X^{13}, X^{14}, X^{15}, Z^1, Z^2, L$  和  $M$  同义, 其优选范围也相同。

[0497] 在合成金属络合物时, 在与配体反应形成络合物时使用的含有二价锌的化合物的例子包括二氯 (N,N,N',N' - 丁二胺) 锌、醋酸锌、乙酰丙酮酸锌、溴化锌、氯化锌和氟化锌。锌盐的更优选例子包括卤化锌, 如溴化锌和氯化锌。

[0498] 在合成金属络合物时, 在与配体反应形成络合物时使用的含有二价铜的化合物的例子包括醋酸铜、乙酰丙酮酸铜、溴化铜、氯化铜、氟化铜、碳酸铜、氰化铜、氢氧化铜、氧化铜、硫酸铜和三氟乙酸铜。铜盐的更优选例子包括卤化铜, 如溴化铜、氯化铜和氟化铜。

[0499] 在合成金属络合物时, 在与配体反应形成络合物时使用的含有二价镍的化合物的例子包括醋酸镍、乙酰丙酮酸镍、氯化镍、溴化镍、氟化镍、碘化镍、硝酸镍和硫酸镍。镍盐的更优选例子包括卤化镍, 如氯化镍和溴化镍。

[0500] 在合成金属络合物时, 在与配体反应形成络合物时使用的含有二价钯的化合物的例子包括氯化钯、溴化钯、碘化钯、醋酸钯、乙酰丙酮酸钯、六氟乙酰丙酮酸钯、三氟乙酸钯、烯丙基氯化钯二聚体、(2,2' - 联吡啶) 二氯化钯、双 (苄腈) 二氯化钯、双 (乙腈) 二氯化钯、(双环 [2.2.1] 庚-2,5-二烯) 二氯化钯、二氯 (1,5-环辛二烯) 钯、二溴双 (三苯基膦) 钯、二氯 (N,N,N',N' - 四甲基亚乙基二胺) 钯、二氯 (1,10-菲咯啉) 钯、二氯双 (三苯基膦) 钯、四氯钯酸铵、二胺二溴化钯、二胺二氯化钯、二胺二碘化钯、四溴钯酸钾、四氯钯酸钾和四氯钯酸钠; 含有 0 价钯的化合物的例子包括四 (三苯基膦) 钯和三 (二亚苄基丙酮) 钯。

[0501] 钯盐的更优选例子包括卤化钯, 如氯化钯和溴化钯; 腈络合物, 如双 (苄腈) 二氯化钯和双 (乙腈) 二氯化钯; 和烯烃络合物, 如 (双环 [2.2.1] 庚-2,5-二烯) 二氯化钯和二氯 (1,5-环辛二烯) 钯。其中, 卤化钯, 如氯化钯和溴化钯; 和腈络合物, 如双 (苄腈) 二氯化钯和双 (乙腈) 二氯化钯是再更优选的。

[0502] 在合成金属络合物时, 关于在与配体反应形成络合物时使用的铂盐, 含有二价铂的化合物的例子包括氯化铂、溴化铂、碘化铂、乙酰丙酮酸铂、双 (苄腈) 二氯化铂、双 (乙腈) 二氯化铂、二氯 (1,5-环辛二烯) 铂、二溴双 (三苯基膦) 铂、二氯 (1,10-菲咯啉) 铂、二氯双 (三苯基膦) 铂、四氯铂酸铵、二胺二溴化铂、二胺二氯化铂、二胺二碘化铂、四溴铂酸钾、四氯铂酸钾、四氯铂酸钠、二甲基双 (二甲基亚砷) 铂、二甲基双 (二甲基硫化) 铂和二甲基 (双环 [2.2.1] 庚-2,5-二烯) 铂。

[0503] 铂盐的更优选例子包括卤化铂, 如氯化铂、溴化铂和碘化铂; 腈络合物, 如双 (苄

腈) 二氯化铂和双(乙腈)二氯化铂;烯烃络合物,如二氯(1,5-环辛二烯)铂。其中,卤化铂,如氯化铂和溴化铂;和腈络合物,如双(苄腈)二氯化铂和双(乙腈)二氯化铂是再更优选的。

[0504] 在制备金属络合物时使用的金属盐可以含有结晶水、结晶溶剂或配位溶剂。尽管金属的价态没有特别限制,但金属优选是二价或 0 价的,更优选二价。

[0505] 在制备金属络合物时,关于在与配体反应形成络合物时使用的金属盐的量,在金属盐中含有能够形成络合物的一种金属原子的情况下,按 1 摩尔配体计,通常为 0.1 ~ 10 摩尔,优选 0.5 ~ 5 摩尔,更优选 1 ~ 3 摩尔。在能够形成金属盐的金属原子的含量为“n”的情况下,其量可以为 1/n 倍。

[0506] 在制备金属络合物时,在金属盐和配体之间反应形成络合物时使用的溶剂的例子包括酰胺类,如 N, N-二甲基甲酰胺、甲酰胺和 N, N-二甲基乙酰胺;腈类,如乙腈、丙腈、丁腈和苄腈;卤代烃类,如二氯甲烷、1,2-二氯乙烷、氯仿、四氯化碳、氯苯和邻二氯苯;脂肪烃类,如戊烷、己烷、辛烷和癸烷;芳香烃类,如苯、甲苯、二甲苯和三甲苯;醚类,如乙醚、二异丙基醚、丁基醚、叔丁基甲基醚、1,2-二甲氧基乙烷、四氢呋喃和 1,4-二噁烷;酮类,如丙酮、甲基乙基酮和甲基异丁基酮;醇类,如甲醇、乙醇、1-丙醇、2-丙醇、叔丁基醇、2-甲氧基乙醇、2-乙氧基乙醇、乙二醇和甘油;和水。

[0507] 溶剂的更优选例子包括腈类,如乙腈、丙腈、丁腈和苄腈;芳香烃类,如苯、甲苯、二甲苯和三甲苯;和醇类,如甲醇、乙醇、1-丙醇、2-丙醇、叔丁基醇、2-甲氧基乙醇、2-乙氧基乙醇、乙二醇和甘油。其中,腈类,如乙腈、丙腈、丁腈和苄腈;和芳香烃类,如苯、甲苯、二甲苯和三甲苯是再更优选的。

[0508] 溶剂可以单独使用,或者可以两种以上混合使用。

[0509] 在合成金属络合物时,在金属盐和配体之间反应形成络合物时使用的溶剂的量没有特别限制,只要足以彻底地完成反应。相对于使用的配体计,通常为 1 ~ 200 倍体积,优选 5 ~ 100 倍体积。

[0510] 在合成金属络合物时,当在金属盐和配体之间反应形成络合物时形成酸性物质如卤化氢的情况下,反应可以在碱性物质的存在下进行。碱性物质的例子包括叔胺类,如三乙胺、二异丙基乙基胺、吡啶和 1,8-二甲基氨基萘;金属醇盐,如甲醇钠和乙醇钠;和无机碱类,如氢氧化钠、氢氧化钾、碳酸钾和碳酸氢钠。

[0511] 在合成金属络合物时,优选的是,在金属盐和配体之间反应形成络合物在惰性气体中进行。惰性气体的例子包括氮气和氩气。

[0512] 在制备金属络合物时,在金属盐和配体之间反应形成络合物时的反应温度、反应时间和反应压力随原材、溶剂等变化。反应温度通常为 20℃ ~ 300℃,优选 50℃ ~ 250℃,更优选 80℃ ~ 220℃。反应时间通常为 30 分钟至 24 小时,优选 1 ~ 12 小时,更优选 2 ~ 10 小时。尽管反应压力通常为大气压力,但是如果需要,可以是高压或低压。

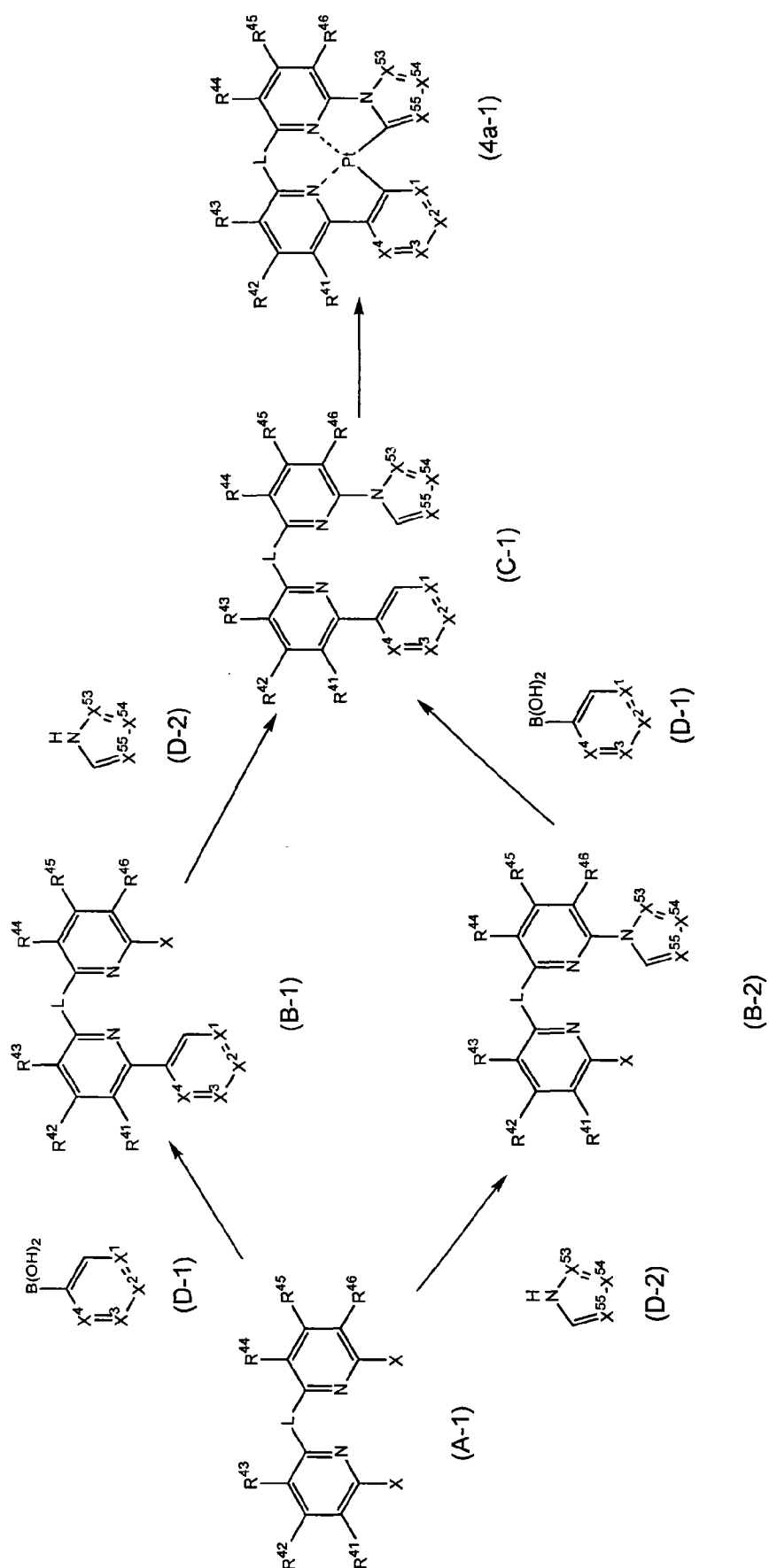
[0513] 在合成金属络合物时,在金属盐和配体之间反应形成络合物时的加热手段没有特别限制。具体而言,可以使用油浴或加热套加热,或利用微波辐射加热。

[0514] 在需要时,可以分离并纯化这样得到的金属络合物。分离和纯化方法的例子包括柱色谱、重结晶、重沉淀和升华。这些方法可以单独使用或组合使用。

[0515] 在式 (1) 代表的金属络合物中,还可以根据以下制备方法合成式 (4a-1) 代表的金

属络合物。然而,不应被解释为本发明受限于以下方法。

[0516]



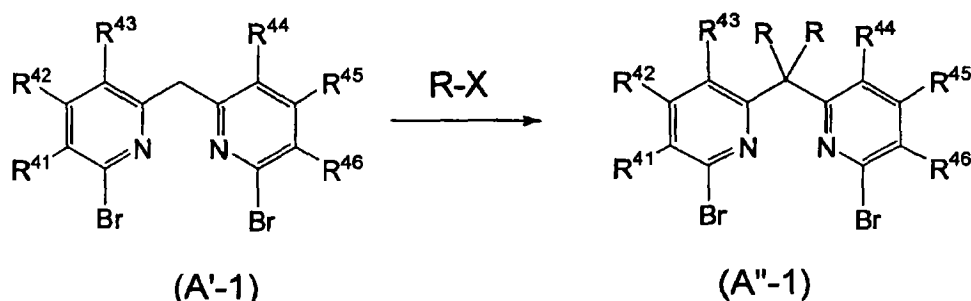
[0517] 在上式中,  $X^1, X^2, X^3, X^4, X^{53}, X^{54}, X^{55}, R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}, R^{46}$  和 L 与上式 (4a-1) 中的那些同义。X 代表卤素原子, 优选氯原子、碘原子或溴原子, 更优选碘原子或溴原子, 最优选碘原子。

[0518] 作为从 (A-1) 获得 (B-1) 的步骤和从 (B-2) 获得 (C-1) 的步骤, 可以使用记载在 *Synth. Commun.*, 11, 513 (1981) 等中的方法合成每个所需的化合物。

[0519] 作为从 (B-1) 获得 (C-1) 的步骤和从 (A-1) 获得 (B-2) 的步骤, 可以使用记载在 *Angew. Chem. Int. Ed.*, 42, 2051-2053 (2003) 等中的方法合成每个所需的化合物。

[0520] 其中连接基团 L 是亚甲基的上式 (A-1) 代表的化合物 (A'-1), 可以通过记载在 *Journal of Organic Chemistry*, 53, 786 (1988) 等中的方法获得。此外, 可以通过在诸如四氢呋喃和 N,N-二甲基甲酰胺等溶剂中溶解化合物 (A'-1), 并在诸如二异丙基酰胺锂、叔丁醇钾和氯化钠等碱存在下使其与烷基卤化物 R-X (其中 R 代表烷基; X 代表卤素原子, 如溴和碘) 反应来合成其中连接基团是二烷基亚甲基的化合物 (A''-1)。

[0521]



[0522] 在上式中,  $R^{41}, R^{42}, R^{43}, R^{44}, R^{45}$  和  $R^{46}$  与上式 (A-1) 中的那些同义。

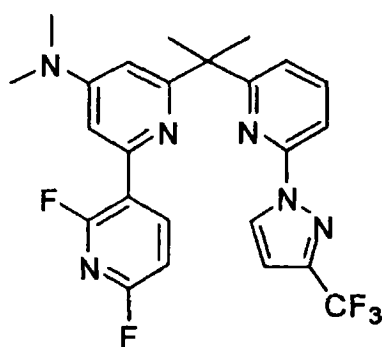
[0523] 关于从 (C-1) 获得式 (4a-1) 代表的铂络合物的步骤, 可以通过在苕腈中溶解化合物 (C-1) 和 1 ~ 1.5 当量的氯化铂 (II), 在 130°C 加热溶液至热回流温度 (苕腈的沸点: 191°C), 并搅拌 30 分钟至 4 小时, 来合成所需化合物。可以通过用氯仿、二氯甲烷、甲苯、二甲苯、乙腈、丁腈、苕腈、乙酸乙酯等重结晶、硅胶柱色谱、升华纯化等来纯化式 (4a-1) 代表的金属络合物。

[0524] 在上述制备方法中, 当在某一合成方法条件下限定的取代基发生变化或不适宜实施所述方法的情况下, 可以通过诸如保护官能团和脱保护等措施来容易地制备 (参见, 例如, *Protective Groups in Organic Synthesis*, T.W. Greene 编著, John Wiley & Sons Inc. (1981) 等)。此外, 如果需要, 可以适当地改变反应步骤的顺序, 如取代基的引入。

[0525] 下面参照以下具体例子描述化合物 (C-1) 的合成, 但不应被解释为本发明受限于以下方法。

[0526] <合成化合物 L-142>

[0527]

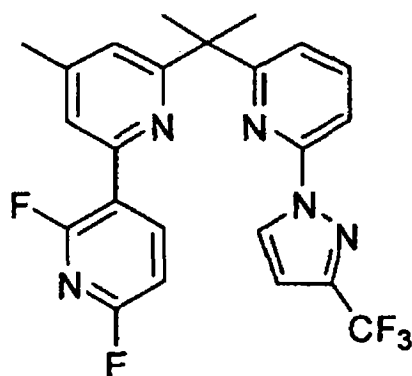


(L-142)

[0528] 化合物 L-142 的合成如下:使用上式 (A''-1) 代表的化合物,其中每个 R<sup>41</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup> 和 R<sup>46</sup> 是氢原子, R<sup>42</sup> 是二甲基氨基, R 是甲基,并在下述的合成例示化合物 Pt-5 所示的反应条件下使其与 3- 三氟甲基吡唑和 2,6- 二氟吡啶基 -3- 硼酸 (boronic acid) 反应。

[0529] < 合成化合物 L-143 >

[0530]



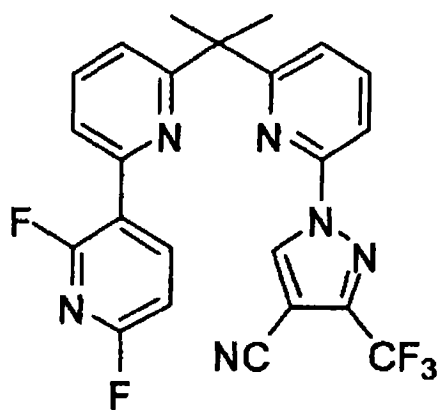
(L-143)

[0531] 化合物 L-143 的合成如下:使用上式 (A''-1) 代表的化合物,其中每个 R<sup>41</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup> 和 R<sup>46</sup> 是氢原子,每个 R<sup>42</sup> 和 R 是甲基,并在下述的合成例示化合物 Pt-5 所示的反应条件下使其与 3- 三氟甲基吡唑和 2,6- 二氟吡啶基 -3- 硼酸反应。

[0532] < 合成化合物 L-11 >

[0533] 化合物 L-11 的合成如下:使用上式 (A''-1) 代表的化合物,其中每个 R<sup>41</sup>, R<sup>42</sup>, R<sup>43</sup>, R<sup>44</sup>, R<sup>45</sup> 和 R<sup>46</sup> 是氢原子, R 是甲基,并在下述的合成例示化合物 Pt-5 所用的反应条件下使其与 4- 氰基 -3- 三氟甲基吡唑和 2,6- 二氟吡啶基 -3- 硼酸反应。

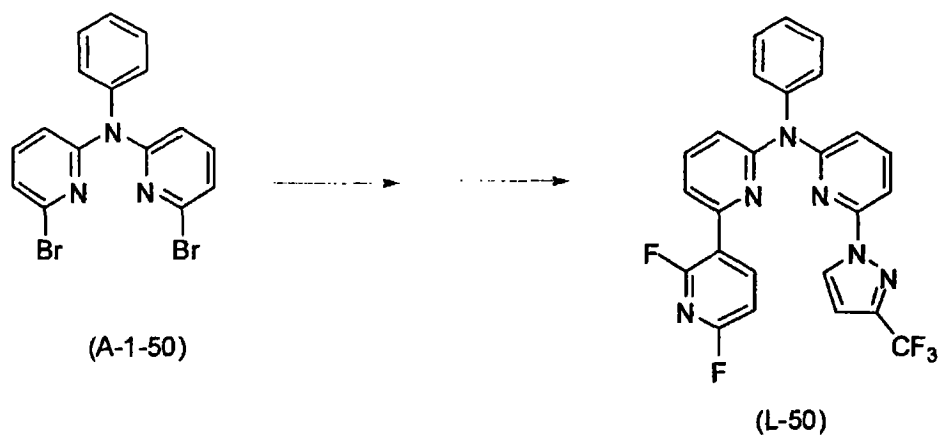
[0534]



(L-11)

[0535] < 合成化合物 L-50 >

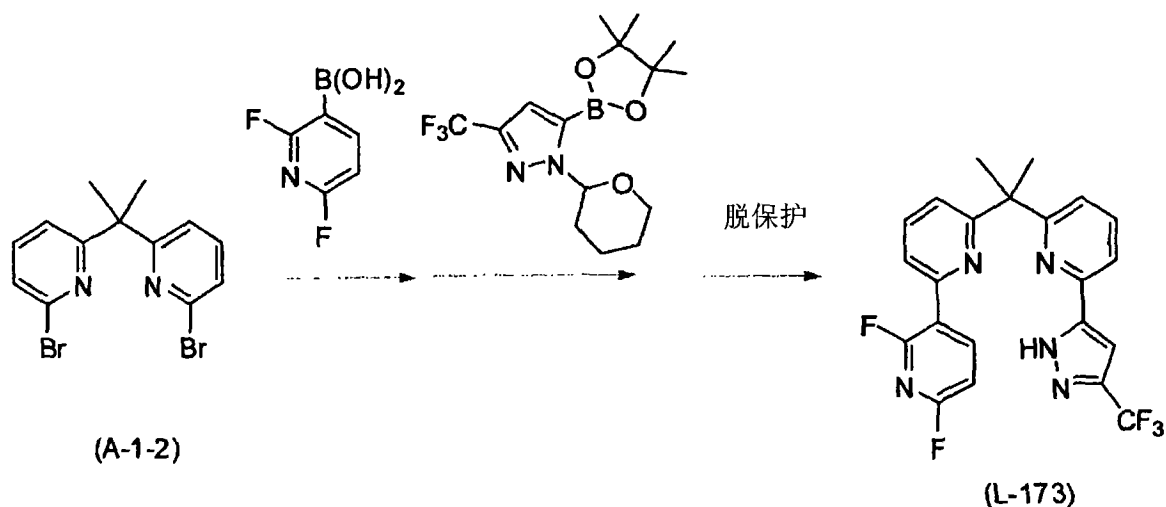
[0536]



[0537] 利用 Syn. Lett., 2, 263 (2005) 等中记载的方法合成化合物 A-1-50。此外,通过在下述的合成例示化合物 Pt-5 等所用的反应条件下使化合物 A-1-50 与 3- 三氟甲基吡唑和 2,6- 二氟吡啶基 -3- 硼酸反应合成配体 L-50。

[0538] 此外,可以按以下方式合成为获得上式 (4b-1) 代表的金属络合物使用的化合物。

[0539]



[0540] 化合物 L-173 的合成如下:使化合物 A-1-2 与相应的硼酸或硼酸酯反应,然后脱去

氮上的保护基团。

[0541] 如前所述,特别优选的是,上述具有特定结构的金属络合物与至少一种主体材料一起包含在发光层中。

[0542] 在本说明书中,主体材料是主要进行发光层中电荷的注入或输送并且本身基本上不发光的化合物。在本说明书中,术语“基本上不发光”是指以由该装置发出的光的总量计,由基本上不发光的化合物发出的光的量优选不超过 5%,更优选不超过 3%,再更优选不超过 1%。

[0543] 主体材料在发光层中的量没有特别的限制,但优选的是,主体材料是发光层中的主要成分(含量最高的成分)。主体材料的量更优选为 50 质量%以上至不超过 99.9 质量%,再更优选 70 质量%以上至不超过 99.8 质量%,特别优选 80 质量%以上至不超过 99.7 质量%,最优选 85 质量%以上至不超过 99.5 质量%。

[0544] 主体材料的玻璃化转变温度优选是 100℃ 以上至不高于 500℃,更优选 110℃ 以上至不高于 300℃,再更优选 120℃ 以上至不高于 250℃。

[0545] 主体材料在薄膜状态下的荧光波长优选范围为 400nm 以上至不超过 650nm,更优选范围为 420nm 以上至不超过 600nm,再更优选范围为 440nm 以上至不超过 550nm。

[0546] 作为主体材料,可以适宜地使用 JP-A-2002-100476 第 0113 ~ 0161 段中公开的化合物和 JP-A-2004-214179 第 0087 ~ 0098 段中公开的化合物,但不应被解释为本发明受限于这些化合物。

[0547] 此外,主体材料的例子不仅包括具有叔胺结构的材料、具有咔唑结构的材料、具有吲哚结构的材料、具有二芳基胺结构的材料、具有吡啶结构的材料、具有吡嗪结构的材料、具有三嗪结构的材料和具有芳基硅烷结构的材料,而且包括在后述空穴注入层、空穴输送层、电子注入层和电子输送层的部分中例举的材料。其中,具有咔唑结构或吲哚结构的材料是更优选的;具有咔唑结构的材料是特别优选的。

[0548] 优选的是,有机层含有具有至少一个氘原子的材料。

[0549] 通过使用具有至少一个氘原子的材料,耐用性可以进一步增强。

[0550] 已知的是,碳-氘(C-D)键的结合能高于碳-氢(C-H)键的结合能。因此,可以抑制其中碳-氢键断裂的退化机制。为此,可以认为用氘原子取代氢原子对于增强耐用性是有效的。

[0551] 具有至少一个氘原子的材料可以是有机材料和无机材料中的任一种或者二者兼有,优选是有机材料。

[0552] 术语“具有至少一个氘原子的有机材料”指在有机材料中可以结合氢原子或氘原子的位置处以 100/0 ~ 1/99 的比例((氘原子的原子数)/(氢原子的原子数))含有氘原子和氢原子。这里,可以结合氢原子或氘原子的位置可以从一个分子中的至少一个指定位置到全部位置的任何位置。换句话说,上述比例与在可以结合氢原子或氘原子的位置总和中原子占据的比例(氘比)为 1 ~ 100% 同义。

[0553] 因此,通过以适宜比例同时在所述位置使用含有氘的化合物和在所述位置使用不含有氘的化合物可以实现上述比例状态。

[0554] 关于氘原子相对于氢原子的组成,其比例优选范围为 100/0 ~ 5/95,更优选范围为 100/0 ~ 50/50,特别优选范围为 100/0 ~ 80/20。

[0555] 尽管具有至少一个氮原子的有机材料可以包含在有机电致发光装置的任何层中,但优选的是包含在空穴注入层、空穴输送层、发光层、电子输送层、电子注入层、激子阻挡层和电荷阻挡层中的任一个或多个中;更优选含在发光层、激子阻挡层和电荷阻挡层的任一个或多个中;再更优选包含在发光层中;特别优选作为主体材料包含在发光层中。当用作主体材料时,具有至少一个氮原子的有机材料的量与在主体材料中前述的量相同。

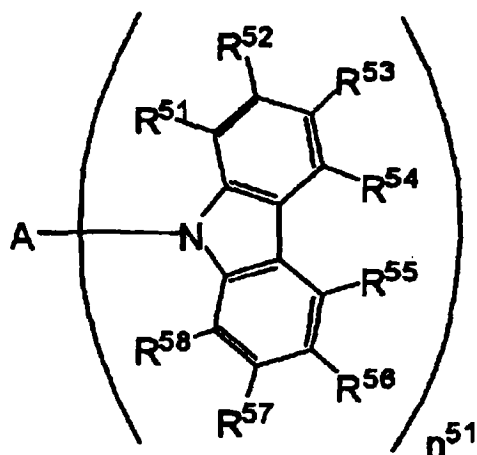
[0556] 具有至少一个氮原子的有机材料的例子包括 WO 02/47440 中公开的化合物,但不应被解释为本发明受限于此。

[0557] 特别地,具有至少一个氮原子的有机材料的优选例子包括含有氮原子的材料。其中,具有叔胺结构、咪唑结构或吡啶结构的材料是优选的;具有咪唑结构或吡啶结构的材料是更优选的;和具有咪唑结构的材料是特别优选的。

[0558] 关于具有咪唑结构的材料,式 (V) 代表的化合物是特别优选的。下面说明式 (V) 代表的化合物。

[0559] 式 (V)

[0560]



[0561] 在式 (V) 中,每个 R<sup>51</sup> ~ R<sup>58</sup> 代表氢原子或取代基,并且在 R<sup>51</sup> ~ R<sup>58</sup> 中,相邻取代基可以彼此键合形成稠环。A 代表连接基团;  $n^{51}$  代表 2 ~ 6 的整数。式 (V) 代表的化合物含有至少一个氮原子。

[0562] 取代基的例子包括氮原子和对于上述取代基 B 举出的那些。

[0563] R<sup>51</sup> ~ R<sup>58</sup> 代表的取代基优选是氮原子、烷基、芳基、杂芳基、卤素基团、氰基或甲硅烷基;更优选氮原子、烷基、杂芳基、卤素基团、氰基或甲硅烷基;特别优选氮原子、烷基、杂芳基或甲硅烷基。这些取代基还可以用其他取代基进一步取代,或这些取代基可以彼此键合形成环。

[0564] R<sup>51</sup> ~ R<sup>58</sup> 代表的烷基优选是甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、叔丁基、正辛基、环丙基、环戊基、环己基、1-金刚烷基或三氟甲基;更优选甲基、异丙基、叔丁基、正辛基、环戊基、环己基、1-金刚烷基或三氟甲基;特别优选叔丁基、环己基、1-金刚烷基或三氟甲基。这些取代基还可以用其他取代基进一步取代,或这些取代基可以彼此键合形成环。

[0565] R<sup>51</sup> ~ R<sup>58</sup> 代表的杂芳基优选是咪唑基、吡唑基、吡啶基、喹啉基、异喹啉基、吡咯基、吡啶基、呋喃基、噻吩基、苯并噻吩基、苯并咪唑基、苯并噻唑基、咪唑基或 azepinyl;更优选咪唑基、吡唑基、喹啉基、吡啶基、呋喃基、噻吩基、苯并咪唑基、咪唑基或 azepinyl;特别优选咪唑基、呋喃基、噻吩基、苯并咪唑基、咪唑基或 azepinyl。这些取代基还可以用其他取

代基进一步取代或可以形成稠环结构,或这些取代基可以彼此键合形成环。

[0566]  $R^{51} \sim R^{58}$  代表的甲硅烷基优选是三甲基甲硅烷基、三乙基甲硅烷基、三异丙基甲硅烷基、甲基二苯基甲硅烷基、二甲基-叔丁基甲硅烷基、二甲基苯基甲硅烷基、二苯基-叔丁基甲硅烷基或三苯基甲硅烷基;更优选三甲基甲硅烷基、三异丙基甲硅烷基、二甲基-叔丁基甲硅烷基、二苯基-叔丁基甲硅烷基或三苯基甲硅烷基;特别优选三甲基甲硅烷基、二甲基-叔丁基甲硅烷基或三苯基甲硅烷基。这些取代基还可以用其他取代基进一步取代,或这些取代基可以彼此键合形成环。

[0567] 特别地,  $R^{52}$  和  $R^{57}$  代表的取代基优选是烷基、芳基、甲硅烷基或氧原子;更优选烷基、甲硅烷基或氧原子;特别优选叔丁基、金刚烷基、三甲基甲硅烷基、三苯基甲硅烷基或氧原子。

[0568] 特别地,  $R^{53}$  和  $R^{56}$  代表的取代基优选是烷基、芳基、甲硅烷基或氧原子;更优选烷基、甲硅烷基或氧原子;特别优选叔丁基、金刚烷基、三甲基甲硅烷基、三苯基甲硅烷基或氧原子。

[0569]  $n^{51}$  优选为 2 ~ 4, 更优选 2 ~ 3, 特别优选 2。

[0570] A 代表的连接基团优选是亚烷基、亚芳基、杂亚芳基、亚甲硅烷基或具有联苯基结构的二价连接基团(联苯基二基);更优选亚芳基、杂亚芳基或具有联苯基结构的二价连接基团(联苯基二基);特别优选亚芳基或具有联苯基结构的二价连接基团(联苯基二基)。这些连接基还可以用氧原子或上述取代基 B 代表的取代基进一步取代。

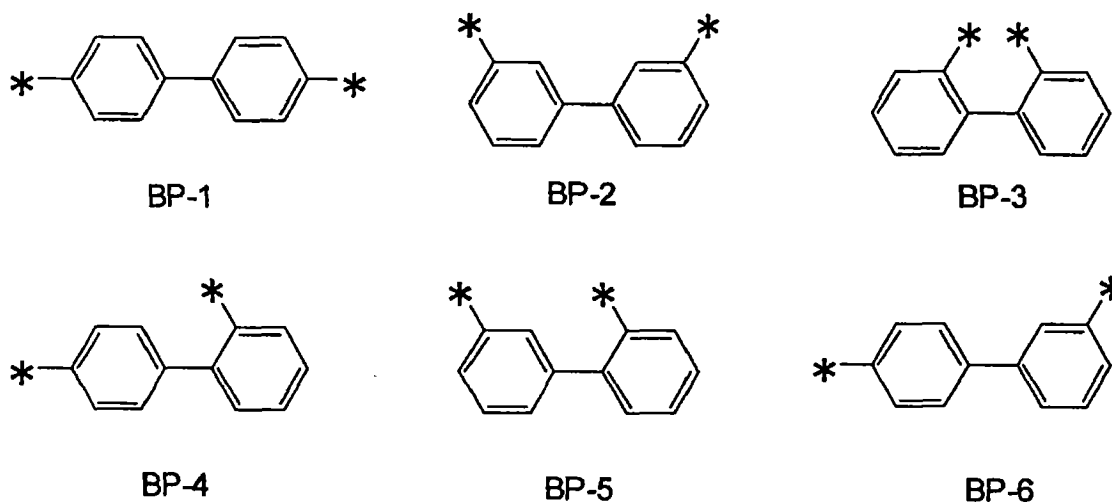
[0571] 亚芳基优选是亚苯基、亚萘基、亚联苯基或亚三联苯基;更优选亚苯基或亚联苯基;特别优选亚苯基。

[0572] 亚苯基优选是 1,2,3,4,5,6- 六取代的亚苯基、1,2,4,5- 四取代的亚苯基、1,3,5- 三取代的亚苯基、1,2- 二取代的亚苯基、1,3- 二取代的亚苯基或 1,4- 二取代的亚苯基;更优选 1,2- 二取代的亚苯基、1,3- 二取代的亚苯基或 1,4- 二取代的亚苯基;特别优选举出的有 1,3- 二取代的亚苯基或 1,4- 二取代的亚苯基。

[0573] 杂亚芳基优选是二取代的亚吡啶基或二取代的 N- 苯基亚咔唑基;更优选 2,6- 二取代的亚吡啶基、3,5- 二取代的亚吡啶基或 3,6- 二取代的 N- 苯基亚咔唑基;特别优选 3,6- 二取代的 N- 苯基亚咔唑基。

[0574] 具有联苯基结构的二价连接基团(联苯基二基)的例子包括下面描述的那些。其中, BP-1, BP-2 和 BP-6 是优选的;BP-1 和 BP-2 是更优选的;BP-2 是再更优选的。

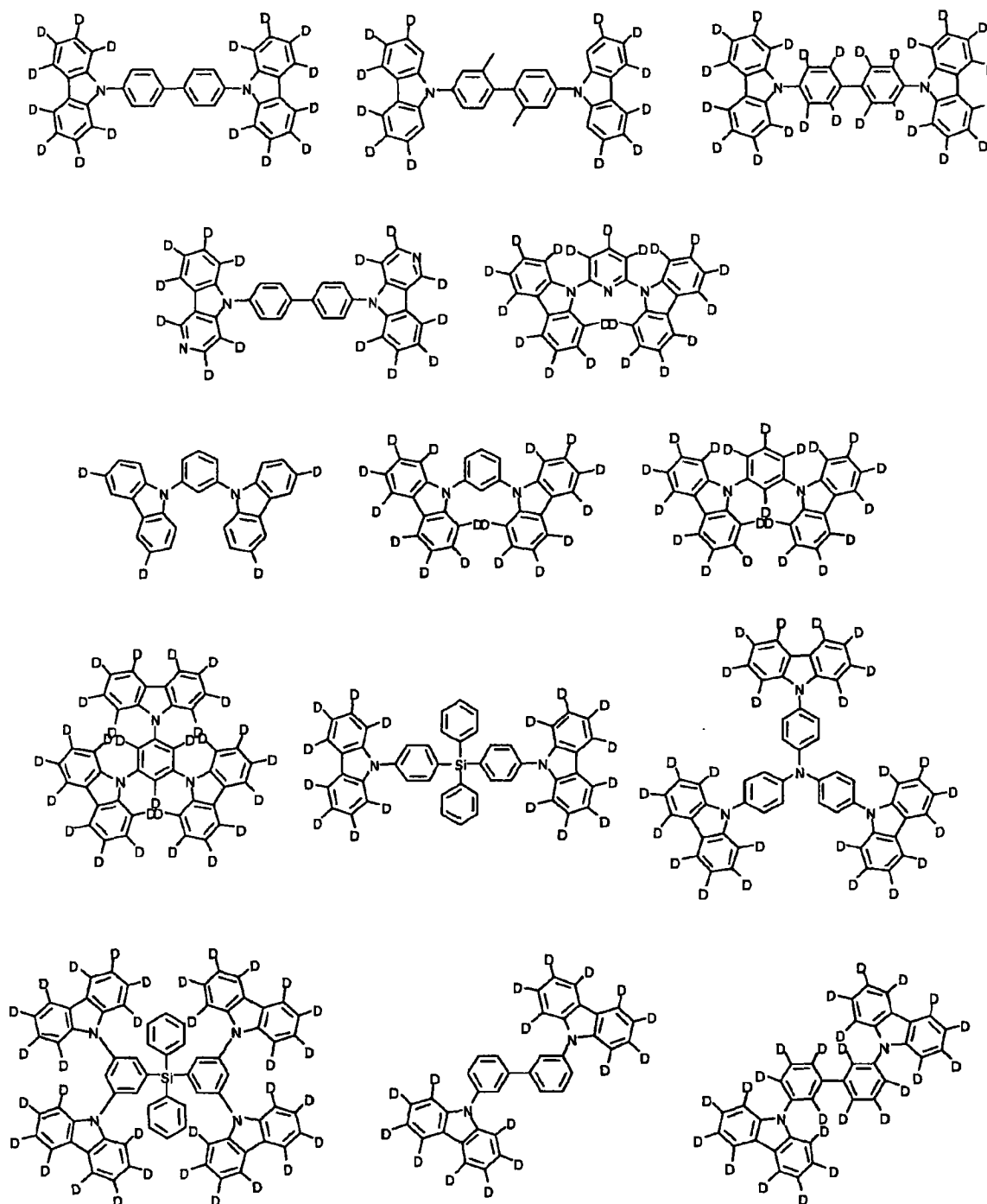
[0575]



[0576] 在结构式中,\* 代表与吡唑的氮原子键合的位置。

[0577] 具有各自含有至少一个氘原子的吡唑结构或吡啶结构的材料的例子是下述那些。

[0578]



[0579] 在本发明的有机电致发光装置（有机 EL 装置）中，优选的是，上式（1）～（4）、（4a-1）～（4a-3）和（4b-1）～（4b-3）代表的化合物中的至少一个包含在发光层中。

[0580] 接下来，下面说明构成有机 EL 装置的各个元件。

[0581] < 有机层 >

[0582] 下面说明本发明的有机层。本发明的装置具有包括发光层的至少一个有机层。如前所述，有机发光层之外的有机层的例子包括诸如空穴输送层、电子输送层、空穴阻挡层、电子阻挡层、空穴注入层和电子注入层等层。

[0583] - 有机层的形成 -

[0584] 有机层的每一层可以通过诸如气相沉积法和溅射法等干式制作法、转印法、印刷法等中的任一种适宜地形成。

[0585] - 发光层 -

[0586] 发光层是具有以下功能的层：在施加电场时从阳极、空穴注入层或空穴输送层接收空穴，从阴极、电子注入层或电子输送层接收电子，并提供空穴和电子再组合的位置，从而发光。

[0587] 发光层可以仅由发光材料构成或由主体材料和发光材料的混合层构成。发光材料可以是荧光材料或磷光材料。发光材料可以由一种或两种以上构成。优选的是，主体材料是电荷输送材料。主体材料可以由一种或两种以上的材料制成。其例子包括其中电子输送主体材料和空穴输送主体材料混合的构型。此外，发光层可以含有不具有电荷输送性能和不发光的材料。

[0588] 此外，发光层可以由一层或两个以上的层构成。各层可以以彼此不同的发光颜色发光。

[0589] 荧光材料的例子包括化合物，例如，苯并噁唑衍生物、苯并咪唑衍生物、苯并噻唑衍生物、苯乙烯基苯衍生物、聚苯衍生物、二苯基丁二烯衍生物、四苯基丁二烯衍生物、萘酰亚胺衍生物、香豆素衍生物、稠合芳香族化合物、紫环酮衍生物、噻二唑衍生物、噻吩衍生物、噻利达嗪衍生物、pyralizine 衍生物、环戊二烯衍生物、二苯乙烯基蒽衍生物、喹吖啶酮衍生物、吡咯并吡啶衍生物、噻二唑并吡啶衍生物、环戊二烯衍生物、苯乙烯基胺衍生物、吡咯并吡咯二酮衍生物、芳香族二次甲基化合物、8-羟基喹啉衍生物络合物和 pyrromethene 衍生物络合物代表的各种络合物、诸如聚噻吩、聚苯撑、聚苯乙炔等高分子化合物、有机硅烷衍生物等。

[0590] 除了上述具有特定结构的金属络合物之外，磷光材料的例子还包括在例如 US6303238B1、US6097147、WO 00/57676、WO 00/70655、W001/08230、WO 01/39234A2、WO 01/41512A1、WO 02/02714A2、W002/15645A1、WO 02/44189A1、WO 05/19373A2、JP-A-2001-247859、JP-A-2002-302671、JP-A-2002-117978、JP-A-2003-133074、JP-A-2002-235076、JP-A-2003-123982、JP-A-2002-170684、EP1211257、JP-A-2002-226495、JP-A-2002-234894、JP-A-2001-247859、JP-A-2001-298470、JP-A-2002-173674、JP-A-2002-203678、JP-A-2002-203679、JP-A-2004-357791、JP-A-2006-256999、JP-A-2007-19462、JP-A-2007-84635、JP-A-2007-96259 等中公开的磷光化合物。其中，发光材料的更优选例子包括 Ir 络合物、Pt 络合物、Cu 络合物、Re 络合物、W 络合物、Rh 络合物、Ru 络合物、Pd 络合物、Os 络合物、Eu 络合物、Tb 络合物、Gd 络合物、Dy 络合物和 Ce 络合物。特别地，Ir 络合物、Pt 络合物和 Re 络合物是优选的；含有金属-碳键、金属-氮键、金属-氧键和金属-硫键的至少一种配位体系的 Ir 络合物、Pt 络合物和 Re 络合物是更优选的。此外，从发光效率、驱动耐用性和色度等的观点来看，含有三齿或多齿配体的 Ir 络合物、Pt 络合物和 Re 络合物是特别优选的。

[0591] 作为发光层中所含的主体材料，可以使用上述那些。

[0592] 发光层的厚度没有特别限制。通常，发光层的厚度优选为 1nm ~ 500nm，更优选 5nm ~ 200nm，再更优选 10nm ~ 100nm。

[0593] - 空穴注入层和空穴输送层 -

[0594] 空穴注入层和空穴输送层是具有以下功能的层：从阳极或阳极侧接收空穴并将空穴输送到阴极侧。具体而言，空穴注入层和空穴输送层各自优选是含有卟啉衍生物、氮杂卟啉衍生物、吡啉衍生物、氮杂吡啉衍生物、咪唑衍生物、多芳基烷烃衍生物、吡啶衍生物、吡啶酮衍生物、苯二胺衍生物、芳基胺衍生物、氨基-取代的查耳酮衍生物、苯乙烯基蒽衍生物、茚酮衍生物、蒽衍生物、二苯乙烯衍生物、硅氮烷衍生物、芳香族叔胺化合物、苯乙烯基胺化合物、芳香族二次甲基系化合物、卟啉系化合物、有机硅烷衍生物、具有碳、苯基唑或苯基噻作为配体的各种金属络合物（由 Ir 络合物代表）的层。

[0595] 空穴注入层或空穴输送层可以含有接收电子的掺杂剂。作为引入空穴注入层或空穴输送层中的接收电子的掺杂剂，可以使用无机化合物或有机化合物，只要其是电子接收性的并且具有氧化有机化合物的性能。

[0596] 具体而言，无机化合物的例子包括金属卤化物，如氯化铁、氯化铝、氯化镓、氯化铟和五氯化锑，以及金属氧化物，如五氧化二钒和三氧化二钨。

[0597] 作为有机化合物，可以适宜地使用具有硝基、卤素、氰基或三氟甲基等作为取代基的化合物、苯醌系化合物、酸酐系化合物和富勒烯等。

[0598] 除此之外，还可以适宜地使用在 JP-A-6-212153、JP-A-11-111463、JP-A-11-251067、JP-A-2000-196140、JP-A-2000-286054、JP-A-2000-315580、JP-A-2001-102175、JP-A-2001-160493、JP-A-2002-252085、JP-A-2002-56985、JP-A-2003-157981、JP-A-2003-217862、JP-A-2003-229278、JP-A-2004-342614、JP-A-2005-72012、JP-A-2005-166637、JP-A-2005-209643 等中公开的化合物。

[0599] 其中，六氰基丁二烯、六氰基苯、四氰基乙烯、四氰基醌二甲烷、四氟四氰基醌二甲烷、四氟对苯醌、四氯对苯醌、四溴对苯醌、对苯醌、2,6-二氯苯醌、2,5-二氯苯醌、1,2,4,5-四氰基苯、1,4-二氰基四氟苯、2,3-二氯-5,6-二氰基苯醌、对二硝基苯、间二硝基苯、邻二硝基苯、1,4-萘醌、2,3-二氯萘醌、1,3-二硝基萘、1,5-二硝基萘、9,10-蒽醌、1,3,6,8-四硝基卟啉、2,4,7-三硝基-9-茚酮、2,3,5,6-四氰基吡啶和富勒烯 C60 是优选的；六氰基丁二烯、六氰基苯、四氰基亚乙基、四氰基醌二甲烷、四氟四氰基醌二甲烷、四氟对苯醌、四氯对苯醌、四溴对苯醌、2,6-二氯苯醌、2,5-二氯苯醌、2,3-二氯萘醌、1,2,4,5-四氰基苯、2,3-二氯-5,6-二氰基苯醌和 2,3,5,6-四氰基吡啶是更优选的；四氟四氰基醌二甲烷是特别优选的。

[0600] 这些接收电子的掺杂剂可以单独使用，或可以混合使用两种以上。尽管接收电子的掺杂剂的量根据材料种类而不同，但相对于空穴输送层材料，其用量优选为 0.01 质量%~50 质量%，更优选 0.05 质量%~20 质量%，特别优选 0.1 质量%~10 质量%。

[0601] 从降低驱动电压的观点来看，空穴注入层和空穴输送层的厚度优选均不超过 500nm。

[0602] 空穴输送层的厚度优选为 1~500nm，更优选 5~200nm，再更优选 10~100nm。此外，空穴注入层的厚度优选为 0.1~200nm，更优选 0.5~100nm，再更优选 1~100nm。

[0603] 空穴注入层和空穴输送层均可以是由一种或两种以上的上述材料构成的单层结构，或者可以是由具有相同组成或不同组成的多个层构成的多层结构。

[0604] - 电子注入层和电子输送层 -

[0605] 电子注入层和电子输送层是具有以下功能的层：从阴极或阴极侧接收电子并将电子输送到阳极侧。具体而言，电子注入层和电子输送层优选是含有三唑衍生物、噁唑衍生物、噁二唑衍生物、咪唑衍生物、茚酮衍生物、蒽醌二甲烷衍生物、蒽酮衍生物、二苯基苯醌衍生物、硫代吡喃二氧化物衍生物、碳二亚胺衍生物、亚茚基甲烷衍生物、二苯乙烯基吡嗪衍生物、萘的芳香族四羧酸酐、二萘嵌苯、酞菁衍生物、8-羟基喹啉衍生物络合物和含有酞菁、苯并噁唑或苯并噻唑作为配体的络合物代表的各种络合物、有机硅烷衍生物等的层。

[0606] 电子注入层和电子输送层可以含有给予电子的掺杂剂。作为引入电子注入层和电子输送层中的给予电子的掺杂剂，适宜地使用碱金属（如 Li）、碱土金属（如 Mg）、包括稀土金属的过渡金属、还原性有机化合物等，只要它们是给予电子性的并且具有还原有机化合物的性能。作为金属，可以适宜使用功函数不超过 4.2eV 的金属。具体例子包括 Li、Na、K、Be、Mg、Ca、Sr、Ba、Y、Cs、La、Sm、Gd 和 Yb。此外，还原性有机化合物的例子包括含氮化合物、含硫化合物和含磷化合物。

[0607] 除此之外，可以使用在 JP-A-6-212153、JP-A-2000-196140、JP-A-2003-68468、JP-A-2003-229278、JP-A-2004-342614 等中公开的材料。

[0608] 这些给予电子的掺杂剂可以单独使用或可以两种以上组合使用。尽管给予电子的掺杂剂的量根据材料种类而不同，但相对于电子输送层材料，其用量优选为 0.1 质量%～99 质量%，更优选 1.0 质量%～80 质量%，特别优选 2.0 质量%～70 质量%。

[0609] 从降低驱动电压的观点来看，电子注入层和电子输送层的厚度优选为不超过 500nm。

[0610] 电子输送层的厚度优选为 1～500nm，更优选 5～200nm，再更优选 10～100nm。此外，电子注入层的厚度优选为 0.1～200nm，更优选 0.2～100nm，再更优选 0.5～50nm。

[0611] 电子注入层和电子输送层可以是由一种或两种以上的上述材料构成的单层结构，或者可以是由具有相同组成或不同组成的多个层构成的多层结构。

[0612] - 空穴阻挡层 -

[0613] 空穴阻挡层是具有防止已经从阳极侧输送到发光层的空穴渗透到阴极侧的功能的层。在本发明中，空穴阻挡层可以被设置作为与阴极侧上的发光层相邻的有机层。

[0614] 构成空穴阻挡层的有机化合物的例子包括铝络合物，如双(2-甲基-8-喹啉酸)-4-苯基苯酚铝(III)（简写作“BAIq”）；三唑衍生物；菲咯啉衍生物，如 2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-菲咯啉（简写作“BCP”）。空穴阻挡层的厚度优选为 1～500nm，更优选 5～200nm，再更优选 10～100nm。

[0615] 空穴阻挡层可以是由一种或两种以上的上述材料构成的单层结构，或者可以是由具有相同组成或不同组成的多个层构成的多层结构。

[0616] - 电荷发生层 -

[0617] 为了增强发光效率，电荷发生层可以设置在多个发光层之间。

[0618] 电荷发生层是具有在施加电场时不仅产生电荷（空穴和电子）的功能而且具有将所产生的电荷注入到与电荷发生层相邻的层的功能的层。

[0619] 作为能够形成电荷发生层的材料，可以使用具有上述功能的任何材料。这些材料可以由单一化合物构成或可以由多种化合物构成。

[0620] 具体而言，所述材料可以是具有导电性的材料，可以是具有半导体性的材料，如

在掺杂的有机层中,或者可以是具有电绝缘性的材料。其例子包括在 JP-A-11-329748、JP-A-2003-272860 和 JP-A-2004-39617 等中公开的材料。

[0621] 更具体而言,可以使用透明的导电性材料,如 ITO 和 IZO(氧化铟锌);富勒烯,如 C60;导电性有机材料,如低聚噻吩;导电性有机材料,如金属酞菁类、非金属酞菁类、金属卟啉类和非金属卟啉类;金属材料,如 Ca、Ag、Al、Mg:Ag 合金、Al:Li 合金和 Mg:Li 合金;空穴导电性材料;电子导电性材料;以及这些材料的混合物。

[0622] 空穴导电性材料的例子包括通过用具有吸电子性的氧化剂(例如, F4-TCNQ、TCNQ、FeCl<sub>3</sub> 等)掺杂空穴输送有机材料(例如, 2-TNATA、NPD 等)得到的材料;P-型导电性高分子;和 P-型半导体。电子导电性材料的例子包括通过用功函数小于 4.0eV 的金属或金属化合物掺杂电子输送有机材料得到的材料;N-型导电性聚合物;和 N-型半导体。N-型半导体的例子包括 N-型 Si、N-型 CdS 和 N-型 ZnS, P-型半导体的例子包括 P-型 Si、P-型 CdTe 和 P-型 CuO。

[0623] 此外,电绝缘性材料如 V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 也可用作电荷发生层。

[0624] 电荷发生层可以是单层或多层的叠层。多层叠层的结构的例子包括其中具有导电性的材料(如透明的导电性材料和金属材料)和空穴导电性材料或电子导电性材料层合的结构层;以及具有其中上述空穴导电性材料和电子导电性材料层合的结构层。

[0625] 通常,优选的是,选择电荷发生层的厚度和材料,使得可见光的透过率为 50% 以上。此外,电荷发生层的厚度没有特别限制,优选为 0.5 ~ 200nm,更优选 1 ~ 100nm,再更优选 3 ~ 50nm,特别优选 5 ~ 30nm。

[0626] 形成电荷发生层的方法没有特别限制,可以使用上述形成有机化合物层的方法。

[0627] 电荷发生层形成在上述两个以上的发光层之间,电荷发生层的阳极侧和阴极侧可以含有具有将电荷注入到相邻层的功能的材料。为了增强电子注入与阳极侧相邻的层的性能,电子注入化合物,例如 BaO、SrO、Li<sub>2</sub>O、LiCl、LiF、MgF<sub>2</sub>、MgO、CaF<sub>2</sub> 等,可以层合在电荷发生层的阳极侧。

[0628] 除了上述说明之外,可以基于 JP-A-2003-45676、美国专利 No. 6,337,492、6,107,734 和 6,872,472 等的说明来选择电荷发生层的材料。

[0629] <保护层>

[0630] 整个有机 EL 装置可以被保护层保护。

[0631] 作为保护层中含有的材料,可以使用具有防止加速装置劣化的物质(例如水分和氧)进入装置的功能的任意材料。

[0632] 其具体例子包括金属(例如, In、Sn、Pb、Au、Cu、Ag、Al、Ti、Ni 等)、金属氧化物(例如, MgO、SiO、SiO<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、GeO、NiO、CaO、BaO、Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、TiO<sub>2</sub> 等)、金属氮化物(例如, SiN<sub>x</sub>、SiN<sub>x</sub>O<sub>y</sub> 等)、金属氟化物(例如, MgF<sub>2</sub>、LiF、AlF<sub>3</sub>、CaF<sub>2</sub> 等)、聚乙烯、聚丙烯、聚甲基丙烯酸甲酯、聚酰亚胺、聚脲、聚四氟乙烯、聚氯三氟乙烯、聚二氯二氟乙烯、氯三氟乙烯和二氯二氟乙烯的共聚物、通过共聚合含有四氟乙烯和至少一种共聚单体的单体混合物获得的共聚物、在共聚物的主链具有环状结构的含氟共聚物、吸水因子为 1% 以上的吸水物质和吸水因子不超过 0.1% 的防水物质。

[0633] 形成保护层的方法没有特别限制。例如,可以使用真空沉积法、溅射法、反应性溅射法、MBE(分子束外延)法、簇离子束法、离子电镀法、等离子体聚合法(高频激发离子电

镀法)、等离子体 CVD 法、激光 CVD 法、热 CVD 法、气源 CVD 法、涂布法、印刷法和转移法。

[0634] < 阳极 >

[0635] 通常,阳极作为电极可以具有向有机层供入空穴的功能。阳极的形状、结构和尺寸等没有特别限制,并且可以根据发光装置的用途和目的从已知的电极材料中适当选择。如上所述,阳极经常以透明阳极提供。

[0636] 阳极的材料的适宜例子包括金属、合金、金属氧化物、导电性化合物和其混合物。阳极材料的具体例子包括导电性金属氧化物,如掺杂铟、氟等的锡氧化物(例如,ATO、FTO等)、氧化锡、氧化锌、氧化铟、氧化铟锡(ITO)和氧化铟锌(IZO);金属,如金、银、铬和镍;上述金属和导电性金属氧化物的混合物或层合物;无机导电性物质,如碘化铜和硫化铜;有机导电性材料,如聚苯胺、聚噻吩和聚吡咯;以及它们与 ITO 的层合物。其中,导电性金属氧化物是优选的;从生产性、高导电性和透明性等的观点来看,ITO 是特别优选的。

[0637] 考虑到构成阳极的材料适用性,可以根据适当选自例如湿模式(例如印刷模式、涂布模式等)、物理模式(例如真空气相沉积法、溅射法、离子电镀法等)、化学模式(例如,CVD 法、等离子体 CVD 法等)的方法,在前述基板上形成阳极。例如,在选择 ITO 作为阳极的材料的情况下,阳极的形成可以根据直流或高频溅射法、真空气相沉积法、离子电镀法等进行。

[0638] 阳极的形成位置没有特别限制,并且可以根据发光装置的用途和目的适当选择,但优选的是,阳极形成在基板上。在这种情况下,阳极可以形成在基板一个表面的全部或部分上面。

[0639] 形成阳极时的图案化可以通过化学蚀刻(如光刻法)或可以通过用激光的物理蚀刻等来进行。此外,图案化可以通过叠置掩模并进行真空气相沉积或溅射等或者可以通过剥离法或印刷法来进行。

[0640] 阳极的厚度可以根据构成阳极的材料适当选择,不能明确限定。阳极的厚度通常约 10nm ~ 50 μm,优选 50nm ~ 20 μm。

[0641] 阳极的电阻值优选是不超过  $10^3 \Omega / \square$ ,更优选不超过  $10^2 \Omega / \square$ 。在阳极是透明的情况下,阳极可以是无色透明的,或者可以是有色透明的。为了从透明的阳极侧收集发光,其透射率优选是 60% 以上,更优选 70% 以上。

[0642] 透明阳极详细记载在 New Developments of Transparent Conductive Films, Yutaka Sawada 主编(CMC Publishing Co., Ltd. 出版,1999)中,其中描述的内容可用于本发明。在使用具有低耐热性的塑料系材料的情况下,优选通过在不高于 150℃ 的低温下使用 ITO 或 IZO 并制作而得到的透明阳极。

[0643] < 阴极 >

[0644] 通常,阴极作为电极具有将电子注入有机层的功能。阴极的形状、结构和尺寸等没有特别限制,并且可以根据发光装置的用途和目的从已知电极材料中适当选择。

[0645] 构成阴极的材料例子包括金属、合金、金属氧化物、导电性化合物及其混合物。阴极材料的具体例子包括碱金属(例如, Li、Na、K、Cs 等)、碱土金属(例如, Mg、Ca 等)、金、银、铅、铝、钠-钾合金、锂-铝合金、镁-银合金、铟和稀土金属(如, 镱)。这些材料可以单独使用,但是从相兼容的稳定性和电子注入性能的观点来看,可以将两种或多种适宜地组合使用。

[0646] 其中,从电子注入性能的观点来看,碱金属和碱土金属优选作为构成阴极的材料;并且从优异的贮藏稳定性的观点来看,主要由铝构成的材料是优选的。

[0647] 本说明书中,主要由铝构成的材料是指单独的铝、或者铝与 0.01 ~ 10 质量%的碱金属或碱土金属或其混合物的合金(例如,锂-铝合金、镁-铝合金等)。

[0648] 阴极的材料详细公开在 JP-A-2-15595 和 JP-A-5-121172 中,并且这些专利文献中公开的材料也适用于本发明。

[0649] 形成阴极的方法没有特别限制,可以根据已知的方法进行阴极的形成。考虑到构成阴极的材料的适用性,可以根据适当选自例如湿模式(例如印刷模式、涂布模式等)、物理模式(例如真空气相沉积法、溅射法、离子电镀法等)、化学模式(例如,CVD 法、等离子体 CVD 法等)等的方法,形成阴极。例如,在金属等被选择作为阴极的材料的情况下,阴极的形成可以通过同时或相继使用它们中的一种、两种或多种按照溅射法进行。

[0650] 形成阴极时的图案化可以通过化学蚀刻(如光刻法)或可以通过用激光的物理蚀刻等来进行。此外,图案化可以通过叠置掩模并进行真空气相沉积或溅射等或者可以通过剥离法或印刷法来进行。

[0651] 阴极的形成位置没有特别限制。阴极可以形成在有机层的全部或部分上。

[0652] 此外,由碱金属或碱土金属的氟化物或氧化物等制成的介电层可以 0.1 ~ 5nm 的厚度插在阴极与有机层之间。该介电层可以被看作是一种电子注入层。介电层可以通过例如真空气相沉积法、溅射法、离子电镀法等形成。

[0653] 阴极的厚度可以根据构成阴极的材料适当选择,不能明确限定。阴极的厚度通常约 10nm ~ 5  $\mu$ m,优选 50nm ~ 1  $\mu$ m。

[0654] 此外,阴极可以是透明的或不透明的。可以通过制作厚度为 1 ~ 10nm 的阴极材料,然后层合透明导电性材料如 ITO 或 IZO 来形成透明阴极。

[0655] 从装置的性能来看,优选的是,阳极和阴极中的至少一个是透明或半透明的。

[0656] < 基板 >

[0657] 可以在基板上制作电极和有机层。

[0658] 优选的是,基板是不散射或削弱从有机层发出的光的基板。其具体例子包括无机材料,如氧化钇稳定的氧化锆(YSZ)和玻璃;聚酯类,如聚对苯二甲酸乙二酯、聚邻苯二甲酸丁二酯和聚萘二甲酸乙二酯;以及有机材料,如聚苯乙烯、聚碳酸酯、聚醚砜、多芳基化合物、聚酰亚胺、聚环烯烃、降冰片烯树脂和聚(氯三氟乙烯)。

[0659] 例如,在使用玻璃作为基板的情况下,关于材料质量,为了降低从玻璃中溶出的离子的量,优选的是,使用无碱玻璃。此外,在使用钠钙玻璃的情况下,优选的是,使用在其上涂布具有二氧化硅等的隔离涂层的玻璃。在有机材料的情况下,优选的是,有机材料具有优异的耐热性、尺寸稳定性、耐溶剂性、电绝缘性能和可加工性。

[0660] 基板的形状、结构和尺寸等没有特别限制,并且可以根据发光装置的用途和目的适当选择。通常,基板的形状优选是片状。基板的结构可以是单层结构或可以是层合结构。此外,可以由一种成分形成基板或者可以由两种以上的成分形成基板。

[0661] 基板可以是无色透明的或者可以是有色透明的,但是考虑到从有机发光层发出的光不散射或削弱,基板优选是无色透明的。

[0662] 在基板的正面或背面上可以设有渗水防止层(气体阻挡层)。

[0663] 作为渗水防止层（气体阻挡层）的材料，可以适宜地使用无机材料，如氮化硅或氧化硅。渗水防止层（气体阻挡层）可以通过例如高频溅射法等形成。在使用热塑性基板的情况下，在需要时，还可以提供硬涂层、内涂层等。

[0664] < 密封容器 >

[0665] 本发明的有机 EL 装置可以通过使用密封容器密封整个装置而得到的装置。密封容器和装置之间的空间可以充入有吸水剂或不活泼液体。吸水剂没有特别限制，其例子包括氧化钡、氧化钠、氧化钾、氧化钙、硫酸钠、硫酸钙、硫酸镁、五氧化二磷、氯化钙、氯化镁、氯化铜、氟化铯、氟化铷、溴化钙、溴化钡、分子筛、沸石和氧化镁。不活泼液体没有特别限制，其例子包括石蜡、液体石蜡、氟系溶剂（例如，全氟烷烃、全氟胺、全氟醚）、氯系溶剂和硅油。

[0666] < 驱动方法 >

[0667] 根据本发明的有机 EL 装置，通过在阳极和阴极之间施加直流（任选含有交流成分）电压（通常 2 ~ 15 伏）或通过施加直流电流，可以实现发光。

[0668] 关于本发明的有机 EL 装置的驱动方法，可以使用在 JP-A-2-148687、JP-A-6-301355、JP-A-5-29080、JP-A-7-134558、JP-A-8-234685、JP-A-8-241047、日本专利 No. 2784615、美国专利 No. 5, 828, 429 和 6, 023, 308 中公开的驱动方法。

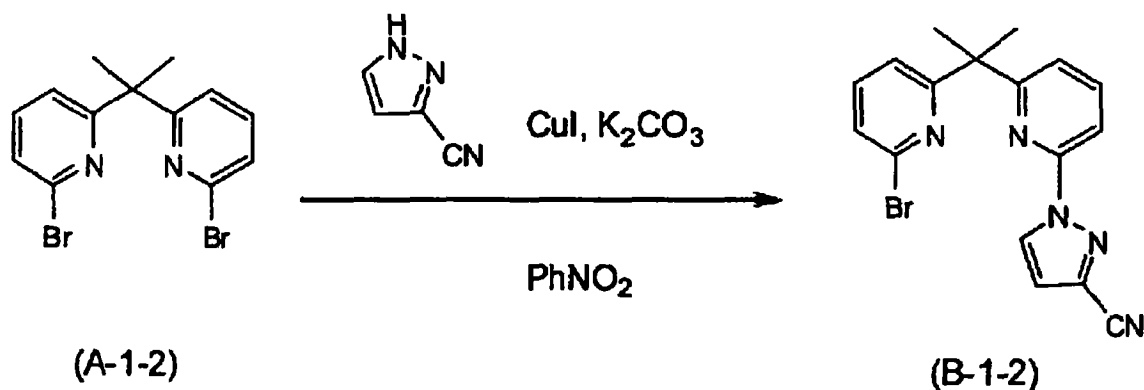
[0669] 本发明的装置可以适宜地用于显示装置、显示器、背光装置、电子摄影、照明光源、记录光源、曝光光源、读取光源、标识、看板、内部设计、光通讯等。

[0670] [ 实施例 ]

[0671] 下面结合以下实施例详细地说明本发明，但不应被解释为本发明受限于此。

[0672] < 合成化合物 B-1-2 >

[0673]

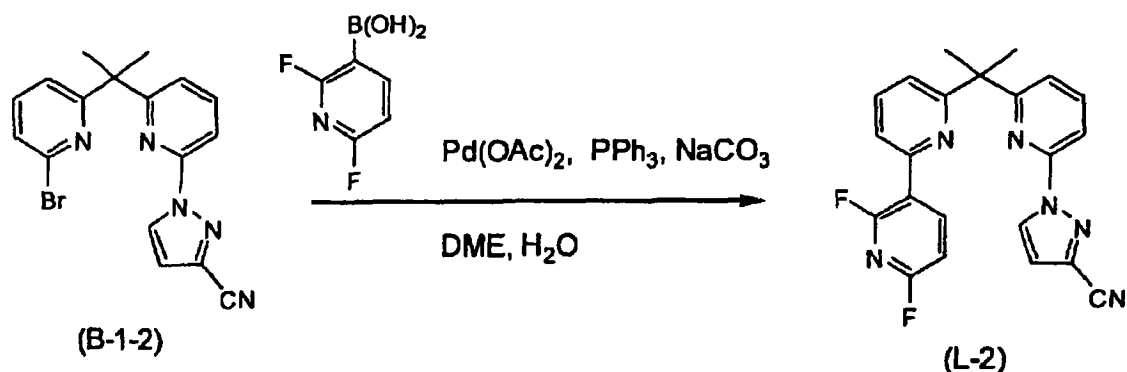


[0674] 在氮气气氛下向三颈烧瓶中加入化合物 A-1-2 (14.24g, 40.0mmole)、3- 氰基吡啶 (1.86g, 20.0mmoles)、碘化铜 (0.38g, 2.0mmole)、碳酸钾 (8.29g, 30.0mmole) 和硝基苯 (80mL)，混合物搅拌下加热回流 6 小时。真空蒸馏掉硝基苯后，加入水；用乙酸乙酯萃取反应混合物；用硫酸钠干燥得到的有机层，过滤，然后浓缩。通过柱色谱纯化得到的残余物，从而得到 2.60g 化合物 B-1-2。

[0675]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 300MHz)  $\delta$  : 1.84 (s, 6H), 6.82 (s, 1H), 7.12 (d,  $J = 4.5\text{Hz}$ , 1H), 7.20 (d,  $J = 3.0\text{Hz}$ , 1H), 7.31 (d,  $J = 4.5\text{Hz}$ , 1H), 7.44 (t,  $J = 9.0\text{Hz}$ , 1H), 7.77 (d,  $J = 4.0\text{Hz}$ , 1H), 7.82 (t,  $J = 9.6\text{Hz}$ , 1H), 8.56 (s, 1H)

[0676] < 合成化合物 L-2 >

[0677]

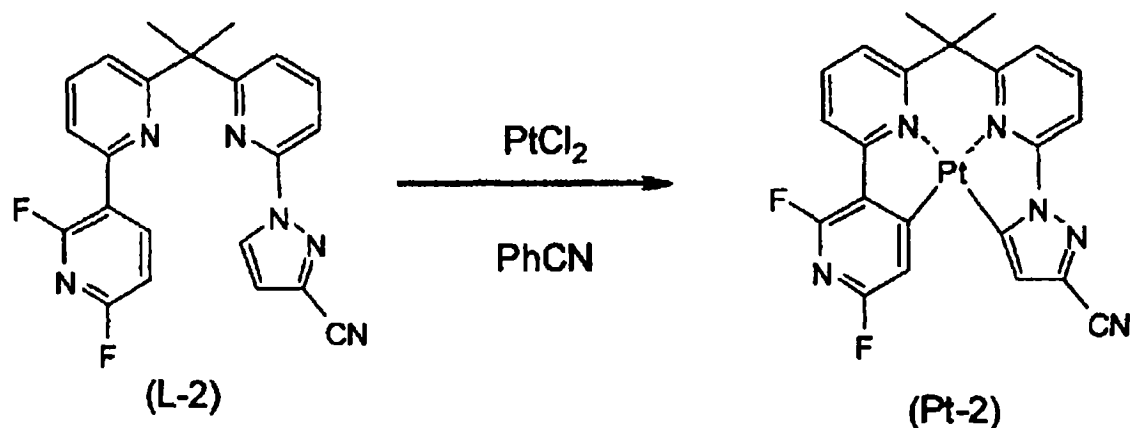


[0678] 在氮气气氛下向三颈烧瓶中加入得到的化合物 B-1-2 (1.84g, 5.0mmole)、2,6-二氟吡啶基-3-硼酸 (0.93g, 6.0mmole)、醋酸钯 (28mg, 0.125mmole)、三苯基膦 (0.13g, 0.5mmole)、碳酸钠 (2.65g, 25mmole)、1,2-二甲氧基乙烷 (25mL) 和水 (25mL), 混合物搅拌下加热回流 4 小时 30 分钟。冷却到室温后, 加入水; 用乙酸乙酯萃取反应混合物; 用硫酸钠干燥得到的有机层, 过滤, 然后浓缩。通过柱色谱纯化得到的残余物, 从而得到 1.91g 化合物 L-2。

[0679]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{DMSO-d}^6$ , 300MHz)  $\delta$ : 1.88 (s, 6H), 7.26 (s, 1H), 7.32 (d,  $J = 4.5\text{Hz}$ , 1H), 7.39 (d,  $J = 4.5\text{Hz}$ , 1H), 7.43 (d,  $J = 6.0\text{Hz}$ , 1H), 7.72 (d,  $J = 3.0\text{Hz}$ , 1H), 7.81 (d,  $J = 6.0\text{Hz}$ , 1H), 7.89 (t,  $J = 6.0\text{Hz}$ , 1H), 8.00 (t,  $J = 9.0\text{Hz}$ , 1H), 8.67 (dd,  $J = 6.0, 4.5\text{Hz}$ , 1H), 8.81 (s, 1H)

[0680] &lt; 合成例示化合物 Pt-2 &gt;

[0681]

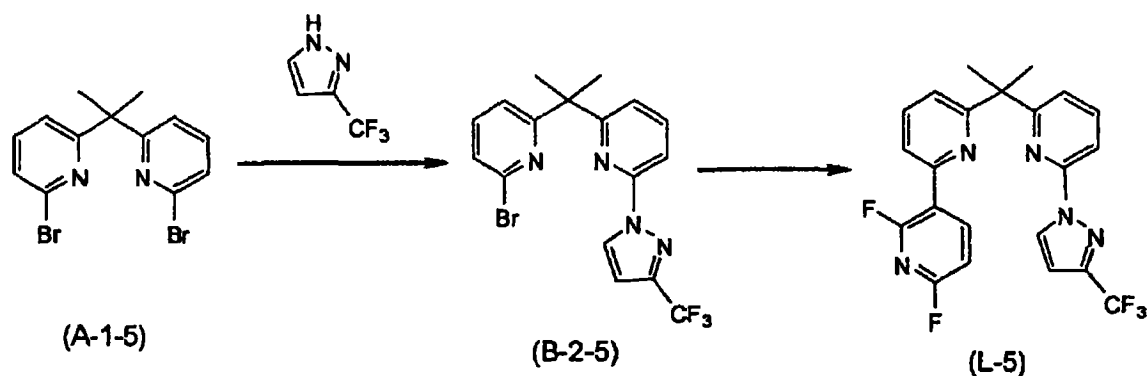


[0682] 在氮气气氛下向烧瓶中加入化合物 L-2 (1.60g, 4.0mmole)、氯化铂 (II) (1.07g, 4.0mmole) 和苯腈 (50mL), 混合物在  $180^\circ\text{C}$  下搅拌加热 3 小时。冷却到室温后, 浓缩溶剂, 过滤沉淀的晶体, 得到 1.27g (产率: 53%) 例示化合物 Pt-2, 黄色晶体。

[0683]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 300MHz)  $\delta$ : 2.06 (s, 6H), 6.83 (s,  $J_{\text{Pt-H}} = 6.0\text{Hz}$ , 1H), 7.41 (dd,  $J = 0.91, 1.2\text{Hz}$ ,  $J_{\text{Pt-H}} = 28\text{Hz}$ , 1H), 7.58 (d,  $J = 3.9\text{Hz}$ , 1H), 7.63 (d,  $J = 3.9\text{Hz}$ , 1H), 7.89 (d,  $J = 4.5\text{Hz}$ , 1H), 8.00 (t,  $J = 9.0\text{Hz}$ , 1H), 8.07 (t,  $J = 9.0\text{Hz}$ , 1H), 8.13 (d,  $J = 4.5\text{Hz}$ , 1H)

[0684] &lt; 合成化合物 L-5 &gt;

[0685]



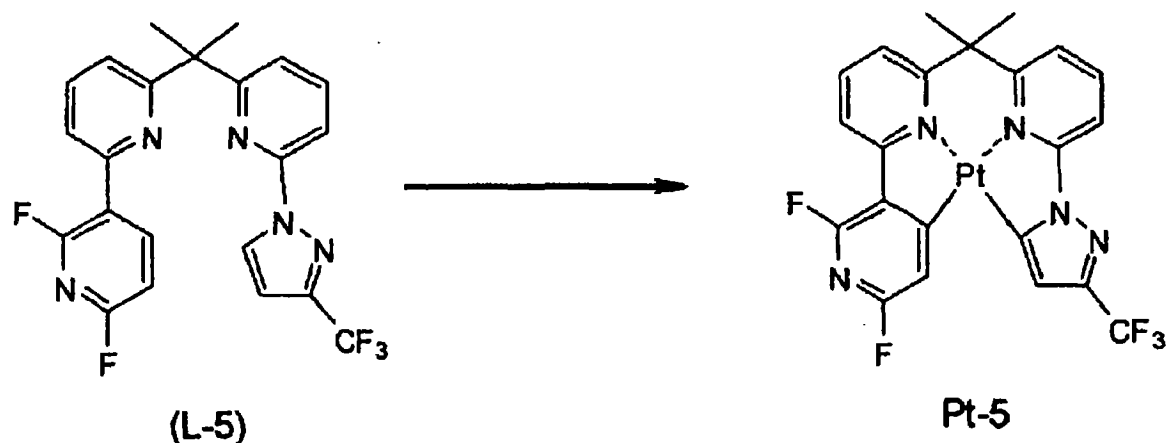
[0686] 在氮气气氛下向三颈烧瓶中加入化合物 A-1-5 (10.0g, 28.09mmole)、3- 三氟甲基吡啶 (1.91g, 14.05mmole)、碘化铜 (0.267g, 1.40mmole)、碳酸钾 (5.82g, 42.1mmole) 和丁腈 (200mL), 混合物搅拌下加热回流 7 小时 30 分钟。冷却到室温后, 加入水; 用乙酸乙酯萃取反应混合物; 用硫酸钠干燥得到的有机层, 过滤, 然后浓缩。得到的产物的一半原样用于后续反应。

[0687] 在氮气气氛下向三颈烧瓶中加入 5.0g 得到的产物、2,6- 二氟吡啶基-3- 硼酸 (5.00g, 31.5mmole)、醋酸钯 (137mg, 0.608mmole)、三苯基膦 (0.638g, 2.43mmole)、碳酸钠 (12.9g, 121.6mmole)、1,2- 二甲氧基乙烷 (150mL) 和水 (200mL), 混合物搅拌下加热回流 4 小时 30 分钟。冷却到室温后, 加入水; 用乙酸乙酯萃取反应混合物; 用硫酸钠干燥得到的有机层, 过滤, 然后浓缩。通过柱色谱纯化得到的残余物, 从而得到 1.74g 化合物 L-5。

[0688]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 300MHz)  $\delta$ : 1.89 (s, 6H), 6.67 (d,  $J = 2.4\text{Hz}$ , 1H), 6.94 (dd,  $J = 3, 8.4\text{Hz}$ , 1H), 7.15 ~ 7.25 (m, 2H), 7.60 ~ 7.90 (m, 4H), 8.50 ~ 8.59 (m, 1H), 8.69 (dt,  $J = 8.1, 9.6\text{Hz}$ , 1H)

[0689] < 合成例示化合物 Pt-5 >

[0690]

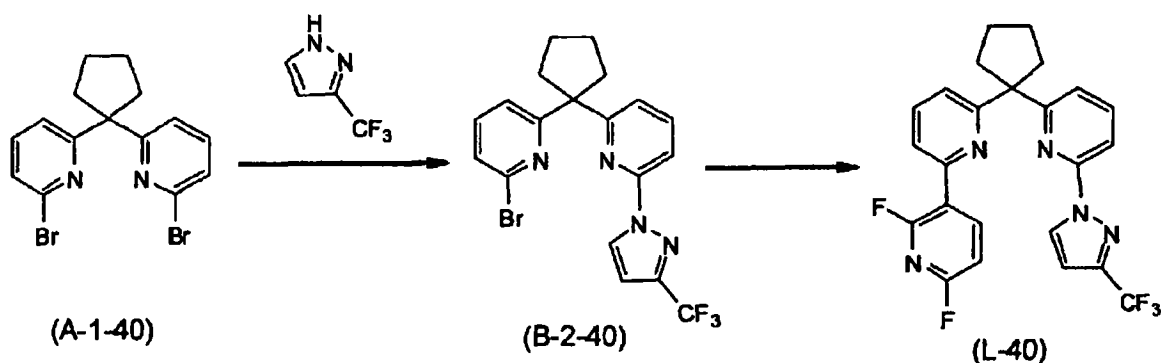


[0691] 在氮气气氛下向烧瓶中加入化合物 L-5 (1.70g, 3.82mmole)、氯化铂 (11) (1.02g, 3.82mmole) 和苯腈 (50mL), 混合物在  $180^\circ\text{C}$  下搅拌加热 3 小时。冷却到室温后, 浓缩溶剂, 过滤沉淀的晶体, 得到 1.84g (产率: 75%) 例示化合物 Pt-5, 黄色晶体。

[0692]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 300MHz)  $\delta$ : 2.05 (s, 6H), 6.72 (s,  $J_{\text{Pt-H}} = 12\text{Hz}$ , 1H), 7.45 (s,  $J_{\text{Pt-H}} = 60\text{Hz}$ , 1H), 7.52 (dd,  $J = 0.6, 7.2\text{Hz}$ , 1H), 7.62 (d,  $J = 7.2\text{Hz}$ , 1H), 7.89 (d,  $J = 7.5\text{Hz}$ , 1H), 7.95 ~ 8.20 (m, 3H)

[0693] < 合成化合物 L-40 >

[0694]



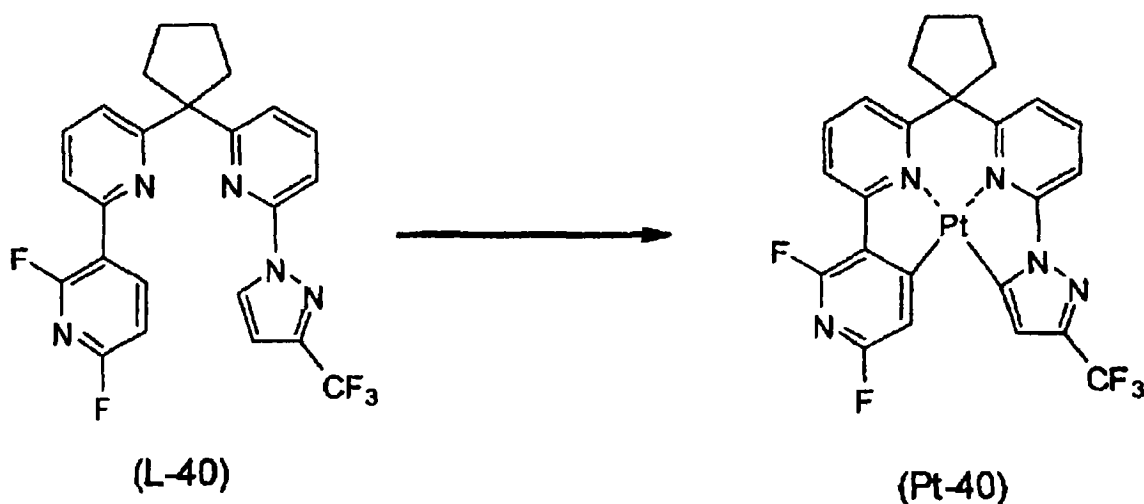
[0695] 在氮气气氛下向三颈烧瓶中加入化合物 A-1-40 (5.00g, 13.00mmole)、3- 三氟甲基吡啶 (0.88g, 6.5mmole)、碘化铜 (0.124g, 0.65mmole)、碳酸钾 (2.70g, 20mmole) 和丁腈 (100mL), 混合物搅拌下加热回流 7 小时 30 分钟。冷却到室温后, 加入水; 用乙酸乙酯萃取反应混合物; 用硫酸钠干燥得到的有机层, 过滤, 然后浓缩。得到的产物原样用于后续反应。

[0696] 在氮气气氛下向三颈烧瓶中加入 2.7g 得到的产物、2,6- 二氟吡啶基-3- 硼酸 (1.47g, 9.3mmole)、醋酸钯 (69mg, 0.3mmole)、三苯基膦 (0.33g, 1.2mmole)、碳酸钠 (3.29g, 31mmole)、1,2- 二甲氧基乙烷 (75mL) 和水 (100mL), 混合物搅拌下加热回流 4 小时 30 分钟。冷却到室温后, 加入水; 用乙酸乙酯萃取反应混合物; 用硫酸钠干燥得到的有机层, 过滤, 然后浓缩。通过柱色谱纯化得到的残余物, 从而得到 1.8g 化合物 L-40。

[0697]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 300MHz)  $\delta$ : 1.79 (m, 4H), 2.64 (m, 4H), 6.70 (d,  $J = 2.6\text{Hz}$ , 1H), 6.97 (dd,  $J = 2.8, 8.2\text{Hz}$ , 1H), 7.19 (d,  $J = 7.4\text{Hz}$ , 1H), 7.23 (dd,  $J = 1.3, 7.3\text{Hz}$ , 1H), 7.67 (t,  $J = 7.7\text{Hz}$ , 1H), 7.72 (dd,  $J = 1.5, 8.0\text{Hz}$ , 1H), 7.73 (d,  $J = 7.8\text{Hz}$ , 1H), 7.82 (d,  $J = 7.7\text{Hz}$ , 1H), 8.65 (d,  $J = 1.6\text{Hz}$ , 1H), 8.77 (dt,  $J = 8.1, 9.5\text{Hz}$ , 1H)

[0698] < 合成例示化合物 Pt-40 >

[0699]



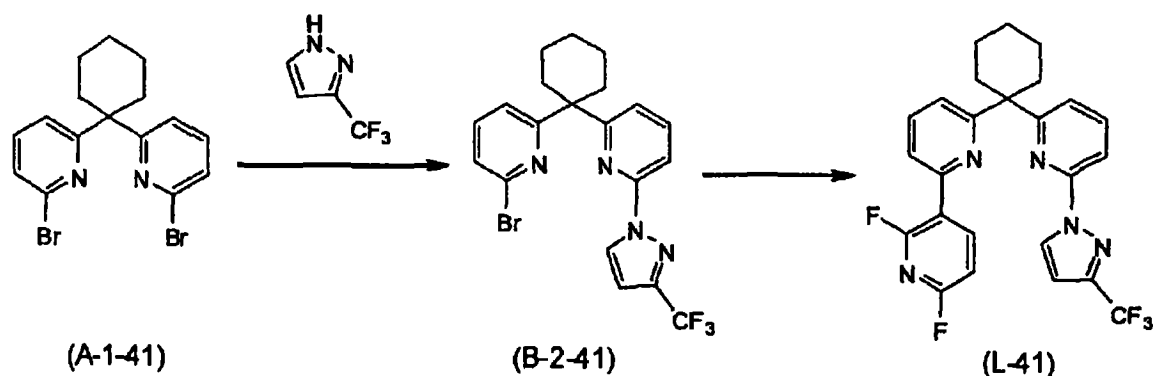
[0700] 在氮气气氛下向烧瓶中加入化合物 L-40 (1.70g, 3.6mmole)、氯化铂 (II) (0.96g, 3.6mmole) 和苕腈 (50mL), 混合物在  $180^\circ\text{C}$  下搅拌加热 3 小时。冷却到室温后, 浓缩溶剂, 过滤沉淀的晶体, 得到 1.56g (产率: 65%) 例示化合物 Pt-40, 黄色晶体。

[0701]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 300MHz)  $\delta$ : 1.76 (m, 4H), 2.71 (m, 4H), 6.74 (s,  $J_{\text{Pt-H}} = 11.7\text{Hz}$ , 1H), 7.45 (t,  $J = 2.2\text{Hz}$ ,  $J_{\text{Pt-H}} = 64.0\text{Hz}$ , 1H), 7.52 (dd,  $J = 0.6, 7.8\text{Hz}$ , 1H), 7.60 (dd,  $J = 1.0$ ,

7.8Hz, 1H), 7.84(dd,  $J = 0.7, 8.2$ Hz, 1H), 8.01(t,  $J = 8.0$ Hz, 1H), 8.06(t,  $J = 8.1$ Hz, 1H), 8.07(d,  $J = 8.0$ Hz, 1H)

[0702] <合成化合物 L-41>

[0703]



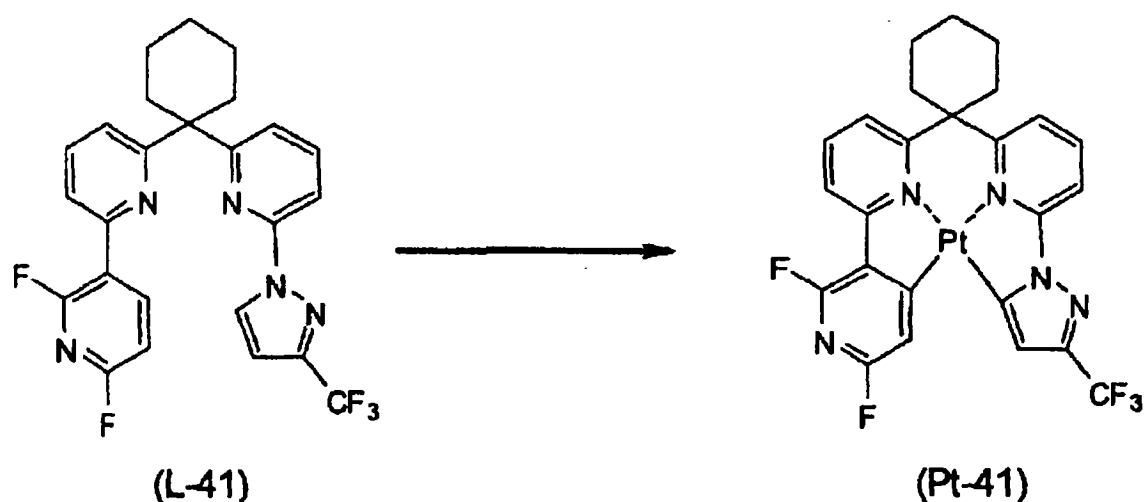
[0704] 将由化合物 A-1-41 (4.7g, 11.9mmole)、3-三氟甲基吡啶 (0.8g, 5.9mmole)、碘化铜 (113.0mg, 0.6mmole)、碳酸钾 (2.5g, 17.9mmole) 和正丁腈 (80.0mL) 构成的混合物在氮气气氛下于 115℃ 搅拌 7 小时。冷却到室温后, 过滤反应混合物, 浓缩, 然后通过柱色谱纯化, 从而得到 5.0g 淡黄色固体。

[0705] 将由得到的淡黄色固体 (5.0g)、2,6-二氟吡啶基-3-硼酸 (4.5g, 28.3mmole)、醋酸钯 (212mg, 0.94mmole)、三苯基膦 (991mg, 3.8mmole)、碳酸钠 (9.2g, 86mmole)、1,2-二甲氧基乙烷 (200.0mL) 和水 (200.0mL) 构成的混合物在氮气气氛下于 80℃ 搅拌 1.5 小时。冷却到室温后, 过滤反应混合物, 然后用乙酸乙酯萃取。合并干燥有机层, 然后浓缩, 通过柱色谱纯化得到的残余物, 从而得到 1.0g 化合物 L-41, 白色固体。

[0706]  $^1\text{H-NMR}$  (300MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$ : 1.60 ~ 1.66(br, 6H), 2.53 ~ 2.60(br, 4H), 6.69(d,  $J = 2.4$ Hz, 1H), 6.97(dd,  $J = 3.0, 8.4$ Hz, 1H), 7.18(d,  $J = 7.2$ Hz, 1H), 7.23 ~ 7.28(m, 1H), 7.56 ~ 7.53(m, 4H), 8.62(s, 1H), 8.74(dt,  $J = 8.1, 9.6$ Hz, 1H)

[0707] <合成例示化合物 Pt-41>

[0708]

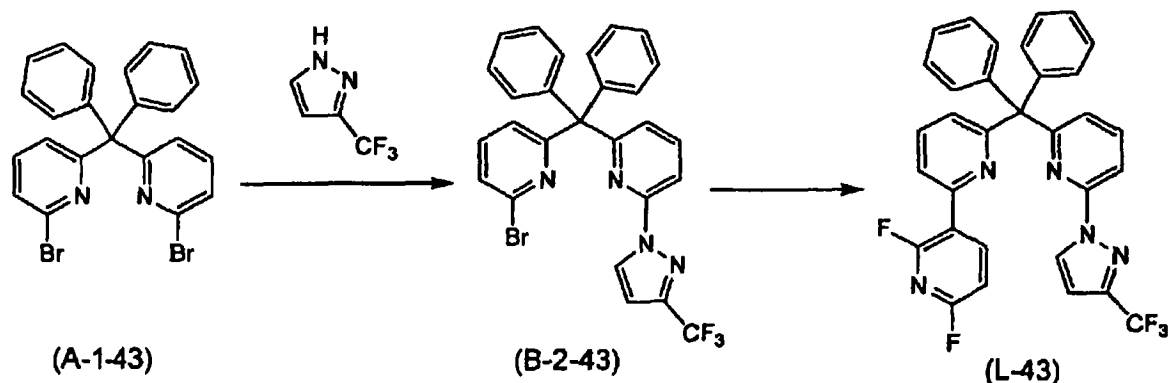


[0709] 在氮气气氛下向烧瓶中加入化合物 L-41 (1.00g, 2.1mmole)、氯化铂 (II) (0.55g, 2.1mmole) 和苄腈 (20mL), 混合物在 180℃ 下搅拌加热 8 小时。冷却到室温后, 过滤沉淀的晶体, 得到 0.91g (产率: 65%) 例示化合物 Pt-41, 黄色晶体。

[0710]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 300MHz)  $\delta$  : 1.39 (br, 6H), 2.51 (br, 2H), 2.82 (br, 2H), 6.61 (s, 1H), 7.32 (t,  $J = 2.1\text{Hz}$ ,  $J_{\text{Pt-H}} = 63.6\text{Hz}$ , 1H), 7.45 (d,  $J = 8.4\text{Hz}$ , 1H), 7.54 (dd,  $J = 1.8$ , 4.5Hz, 1H), 7.72 (d,  $J = 8.1\text{Hz}$ , 1H), 7.93 ~ 8.01 (m, 3H)

[0711] < 合成化合物 L-43 >

[0712]



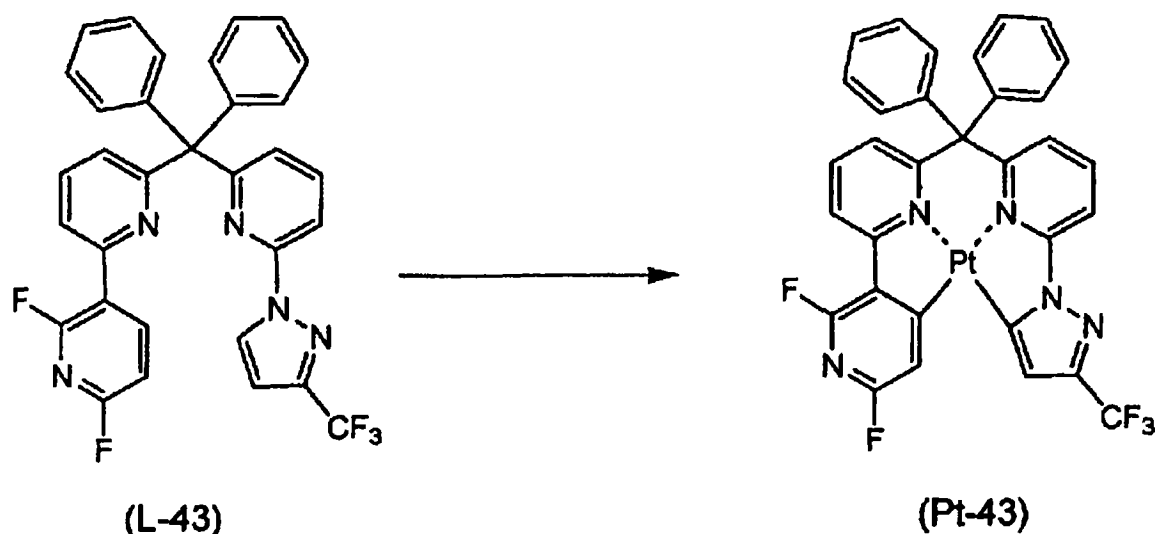
[0713] 在氮气气氛下向三颈烧瓶中加入化合物 A-1-43 (9.46g, 19.7mmole)、3-三氟甲基吡啶 (1.34g, 9.85mmole)、碘化铜 (0.187g, 0.98mmole)、碳酸钾 (4.00g, 29.55mmole) 和丁腈 (50mL), 混合物搅拌下加热回流 6 小时。冷却到室温后, 加入水; 用乙酸乙酯萃取反应混合物; 用硫酸钠干燥得到的有机层, 过滤, 然后浓缩。得到的产物原样用于后续反应。

[0714] 在氮气气氛下向三颈烧瓶中加入 5.85g 得到的产物、2,6-二氟吡啶基-3-硼酸 (3.47g, 21.85mmole)、醋酸钯 (122mg, 0.54mmole)、三苯基膦 (0.571g, 2.1mmole)、碳酸钠 (11.55g, 109mmole)、1,2-二甲氧基乙烷 (100mL) 和水 (100mL), 混合物搅拌下加热回流 4 小时 30 分钟。冷却到室温后, 加入水; 用乙酸乙酯萃取反应混合物; 用硫酸钠干燥得到的有机层, 过滤, 然后浓缩。通过柱色谱纯化得到的残余物, 从而得到 1.75g 化合物 L-43。

[0715]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 300MHz)  $\delta$  : 6.58 (d, 1H), 6.80 (dd, 1H), 7.10 ~ 7.40 (m, 13H), 7.70 ~ 7.90 (m, 3H), 8.15 (d, 1H), 8.40 (dt, 1H)

[0716] < 合成例示化合物 Pt-43 >

[0717]



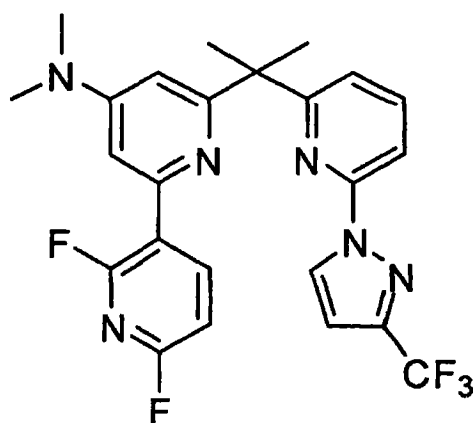
[0718] 在氮气气氛下向烧瓶中加入化合物 L-43 (1.75g, 3.07mmole)、氯化铂 (11) (0.817g, 3.07mmole) 和苄腈 (20mL), 混合物在 180℃ 下搅拌加热 2 小时。冷却到室温后, 浓

缩溶剂, 过滤沉淀的晶体, 得到 1.72g (产率: 73%) 例示化合物 Pt-43, 黄色晶体。

[0719]  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , 300MHz)  $\delta$ : 6.55 (dd, 3H), 6.64 (s, 1H), 6.91 (dd, 1H), 7.03 (dd, 1H), 7.20 ~ 7.40 (m, 6H), 7.40 ~ 7.52 (m, 1H), 7.57 ~ 7.70 (m, 1H), 7.80 ~ 8.00 (m, 3H), 8.12 (d, 1H)

[0720] < 合成化合物 L-142 >

[0721]



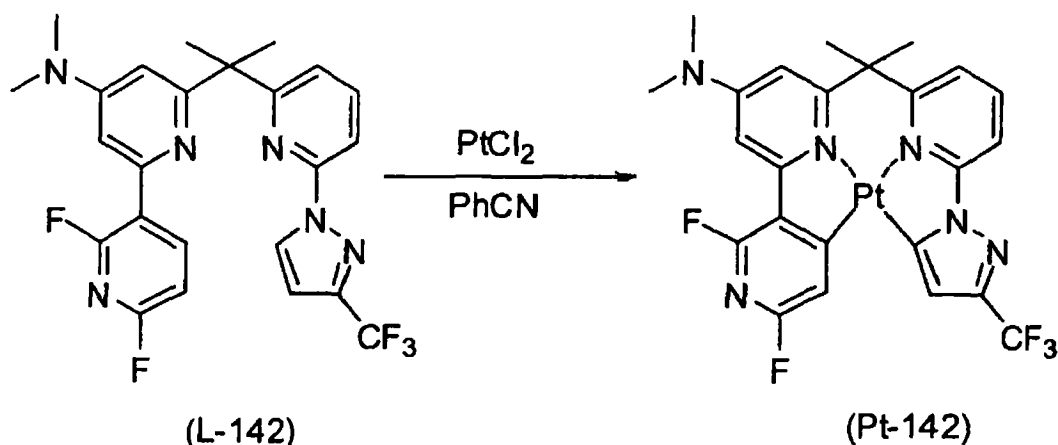
(L-142)

[0722] 以与合成例示化合物 Pt-5 相同的方式合成化合物 L-142。

[0723]  $^1\text{H-NMR}$  (300MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$ : 1.88 (s, 6H), 3.04 (s, 6H), 6.41 (s, 1H), 6.72 (s, 1H), 6.90 (d,  $J = 8.1\text{Hz}$ , 1H), 7.04 (s, 1H), 7.18 (d,  $J = 8.9\text{Hz}$ , 1H), 7.75 (t,  $J = 7.2\text{Hz}$ , 1H), 7.84 (d,  $J = 7.2\text{Hz}$ , 1H), 8.63 ~ 8.73 (m, 2H)

[0724] < 合成例示化合物 Pt-142 >

[0725]



(L-142)

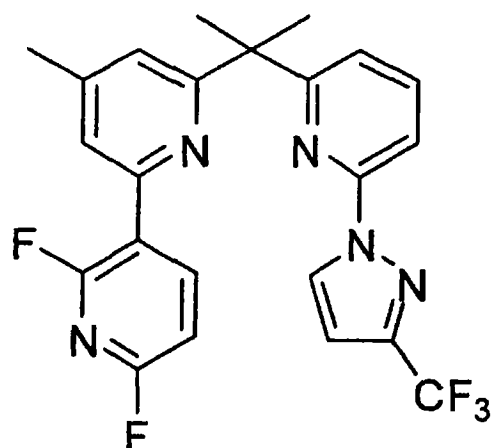
(Pt-142)

[0726] 在氮气气氛下, 在加热回流条件下, 将氯化铂 (II) (871mg, 3.3mmole) 和化合物 L-142 (1.6g, 3.3mmole) 在苯腈 (100mL) 中搅拌 8 小时。使反应混合物放置冷却后, 加入甲醇, 过滤沉淀的固体, 然后用甲醇洗涤, 从而得到 1.2g 例示化合物 Pt-142, 亮黄色粉末。产率: 54%

[0727]  $^1\text{H-NMR}$  (300MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ )  $\delta$ : 1.99 (s, 6H), 3.19 (s, 6H), 6.68 (t,  $J = 6.0\text{Hz}$ , 1H), 6.76 (d,  $J = 2.4\text{Hz}$ , 1H), 7.25 (t,  $J = 2.4\text{Hz}$ , 1H), 7.41 (t,  $J(\text{H-F}) = 2.1\text{Hz}$ ,  $J(\text{Pt-H}) = 64.2\text{Hz}$ , 1H), 7.52 (d,  $J = 7.8\text{Hz}$ , 1H), 7.82 (d,  $J = 8.1\text{Hz}$ , 1H), 8.03 (t,  $J = 8.1\text{Hz}$ , 1H)

[0728] < 合成化合物 L-143 >

[0729]



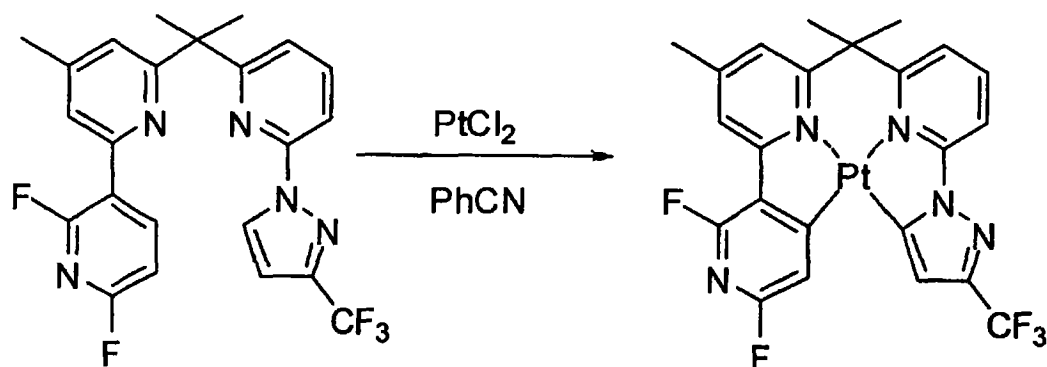
(L-143)

[0730] 以与合成例示化合物 Pt-5 相同的方式合成化合物 L-143。

[0731]  $^1\text{H-NMR}$  (300MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  : 1.87 (s, 6H), 2.37 (s, 3H), 6.67 (d,  $J = 2.4\text{Hz}$ , 1H), 6.92 (dd,  $J = 1.8, 8.4\text{Hz}$ , 1H), 7.00 (s, 1H), 7.16 (t,  $J = 7.2\text{Hz}$ , 1H), 7.56 (s, 1H), 7.75 (t,  $J = 7.8\text{Hz}$ , 1H), 7.85 (d,  $J = 7.5\text{Hz}$ , 1H), 8.59 (s, 1H), 8.68 (dd,  $J = 8.4, 17.1\text{Hz}$ , 1H)

[0732] &lt; 合成例示化合物 Pt-143 &gt;

[0733]



(L-143)

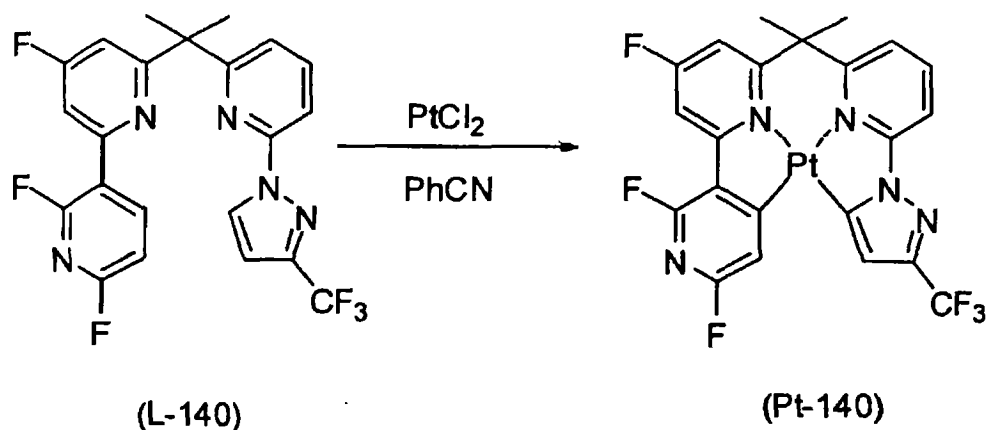
(Pt-143)

[0734] 在氮气气氛下,在加热回流条件下,将氯化铂 (II) (266mg, 1.0mmole, 1.05 当量) 和化合物 L-143 (400mg, 0.95mmole, 1.0 当量) 在苕腈 (4mL) 中搅拌 4 小时。使反应混合物放置冷却后,加入甲醇,过滤沉淀的固体,然后用甲醇洗涤,从而得到 380mg 例示化合物 Pt-143,亮黄色粉末。产率 :65%

[0735]  $^1\text{H-NMR}$  (300MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ )  $\delta$  : 2.05 (s, 6H), 2.56 (s, 3H), 6.74 (t,  $J = 6.0\text{Hz}$ , 1H), 7.46 (t,  $J(\text{H-F}) = 2.4\text{Hz}$ ,  $J(\text{Pt-H}) = 64.2\text{Hz}$ , 1H), 7.51 (s, 1H), 7.59 (d,  $J = 7.2\text{Hz}$ , 1H), 7.87 (d,  $J = 7.5\text{Hz}$ , 1H), 7.95 (s, 1H), 8.09 (t,  $J = 8.1\text{Hz}$ , 1H)

[0736] &lt; 合成例示化合物 Pt-140 &gt;

[0737]



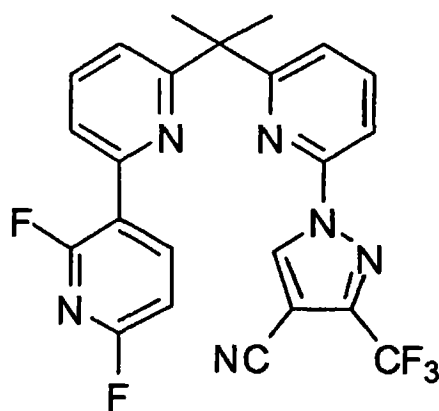
[0738] 在氮气气氛下,在加热回流条件下,将氯化铂 (11) (980mg, 3.7mmole) 和化合物 L-140 (1.72g, 3.7mmole) 在苯腈 (80mL) 中搅拌 18 小时。使反应混合物放置冷却后,加入甲醇,过滤沉淀的固体,然后用甲醇洗涤,从而得到 1.22g 例示化合物 Pt-140,亮黄色粉末。产率:50%

[0739]  $^1\text{H-NMR}$  (300MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ )  $\delta$ : 2.06 (s, 6H), 7.35 ~ 7.52 (m, 2H), 7.60 (dd,  $J = 0.6, 7.8\text{Hz}$ , 1H), 7.82 ~ 7.94 (m, 2H), 8.12 (t,  $J = 8.1\text{Hz}$ , 1H)

[0740] <合成化合物 L-11>

[0741] 化合物 L-11 的合成如下:使用式 (A"-1) 代表的化合物,其中每个  $\text{R}^{41}, \text{R}^{42}, \text{R}^{43}, \text{R}^{44}, \text{R}^{45}$  和  $\text{R}^{46}$  是氢原子, R 是甲基,并在合成例示化合物 Pt-5 等所用的反应条件下使其与 4-氰基-3-三氟甲基吡啶和 2,6-二氟吡啶基-3-硼酸反应。

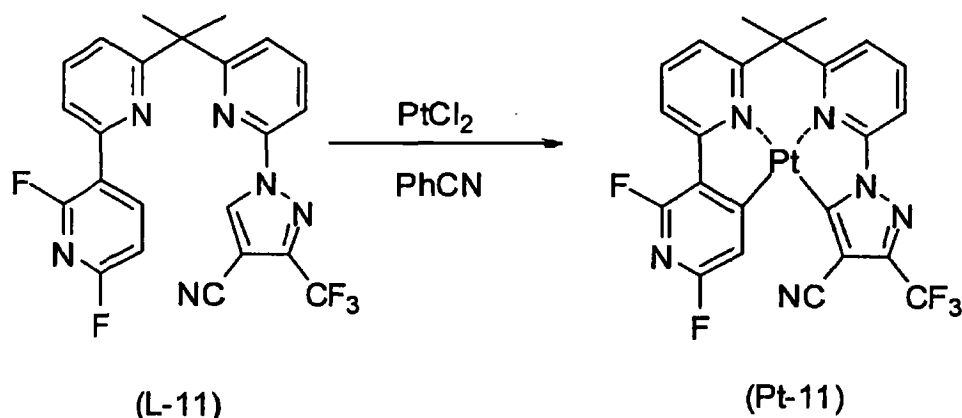
[0742]



[0743]  $^1\text{H-NMR}$  (300MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ )  $\delta$ : 1.94 (s, 6H), 6.99 (ddd,  $J = 0.9, 3.0, 8.4\text{Hz}$ , 1H), 7.36 (ddd,  $J = 1.5, 6.9, 15\text{Hz}$ , 2H), 7.70 ~ 8.00 (m, 4H), 8.65 (dt,  $J = 8.1, 9.6\text{Hz}$ , 1H), 9.04 (d,  $J = 0.9\text{Hz}$ , 1H)

[0744] <合成例示化合物 Pt-11>

[0745]

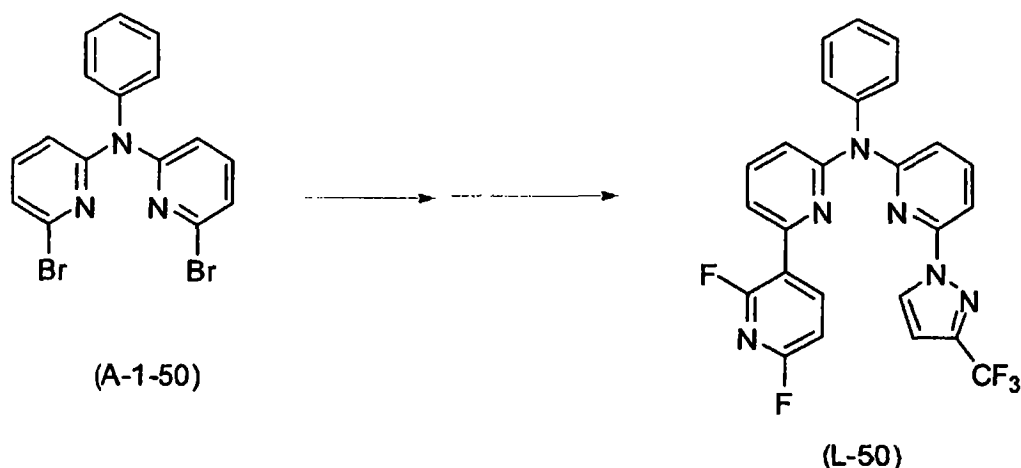


[0746] 在氮气气氛下,在加热回流条件下,将氯化铂(11)(791mg,2.98mmole)和化合物L-11(1.4g,2.98mmole)在苄腈(50mL)中搅拌3小时。使反应混合物放置冷却后,加入甲醇,过滤沉淀的固体,然后用甲醇洗涤,从而得到1.49g例示化合物Pt-11,亮黄色粉末。产率:75%

[0747] <sup>1</sup>H-NMR(300MHz, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) δ :2.10(s,6H),7.63~7.72(m,2H),7.95(dd, J = 0.6, 8.1Hz, 1H),8.07(t, J = 8.1Hz, 1H),8.12~8.23(m,2H),8.31(t, J(H-F) = 1.5Hz, J(Pt-H) = 63.0Hz, 1H)

[0748] <合成化合物L-50>

[0749]



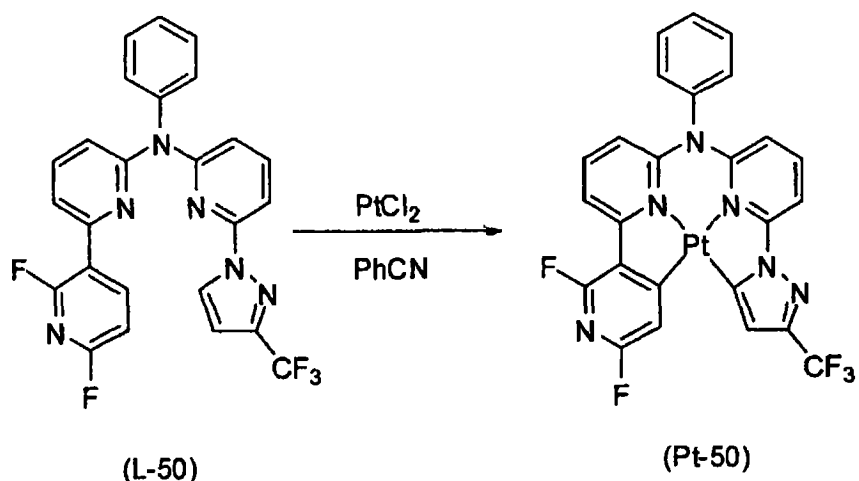
[0750] 利用 Syn. Lett., 2, 263(2005) 等中记载的方法合成化合物 A-1-50。

[0751] 以与合成例示化合物 Pt-5 相同的方式合成化合物 L-50。

[0752] <sup>1</sup>H-NMR(300MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ :6.56(d, J = 2.7Hz, 1H),6.82(ddd, J = 0.6, 3.0, 8.4Hz, 1H),7.01(d, J = 8.4Hz, 1H),7.10(d, J = 8.4Hz, 1H),7.25~7.37(m,3H),7.46(t, J = 7.5Hz, 2H),7.56~7.63(m,2H),7.71(dt, J = 1.5, 8.1Hz, 2H),8.11(dd, J = 0.9, 2.7Hz, 1H),8.32(dt, J = 7.8, 8.1Hz, 1H)

[0753] <合成例示化合物 Pt-50>

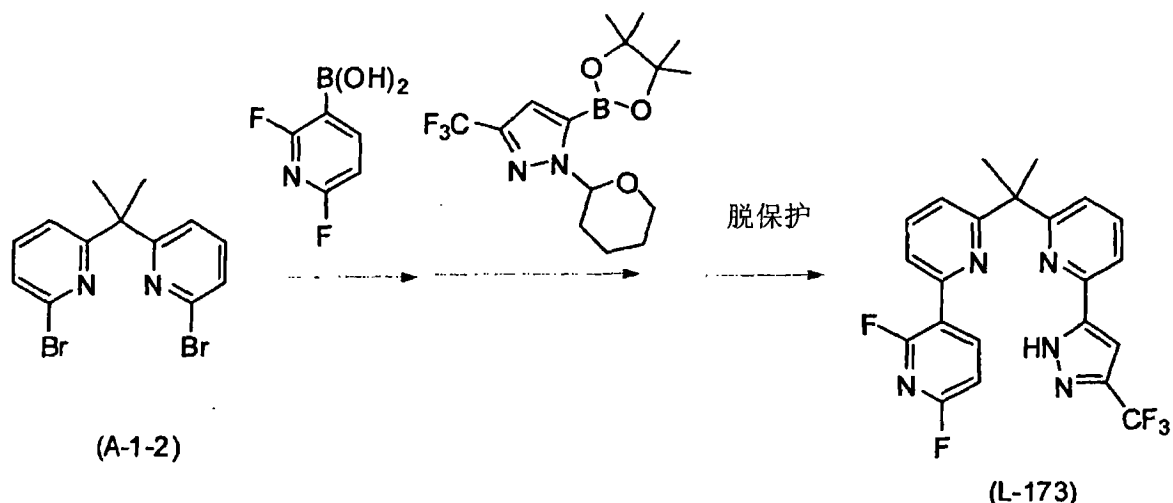
[0754]



[0755] 在氮气气氛下,在加热回流条件下,将氯化铂(II)(45mg,0.172mmole)和化合物 L-50(85mg,0.172mmole)在苯腈(5mL)中搅拌3小时。使反应混合物放置冷却后,加入甲醇,过滤沉淀的固体,然后用甲醇洗涤,从而得到93mg例示化合物 Pt-50,亮黄色粉末。产率:79%

[0756]  $^1\text{H-NMR}$ (300MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ )  $\delta$ : 6.45(d,  $J = 8.7\text{Hz}$ , 1H), 6.64(d,  $J = 8.7\text{Hz}$ , 1H), 6.75(s, 1H), 7.46 ~ 7.56(m, 3H), 7.66(d,  $J = 7.5\text{Hz}$ , 1H), 7.75 ~ 7.90(m, 6H)

[0757]

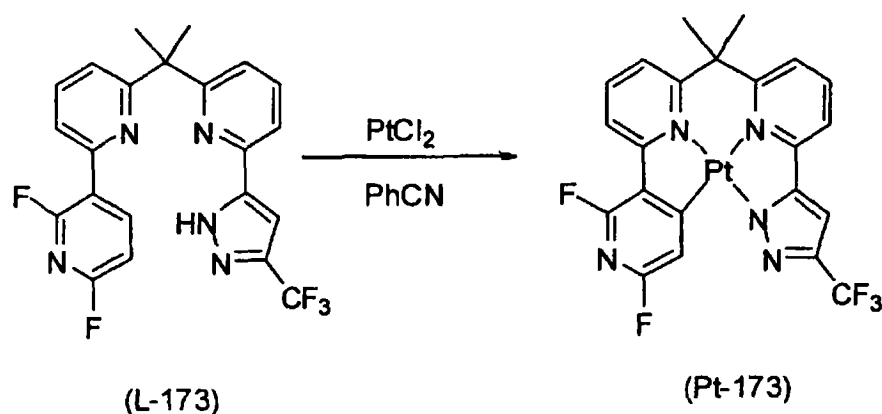


[0758] 化合物 L-173 的合成如下:使化合物 A-1-2 与硼酸酯反应,然后脱去氮上的保护基团。

[0759]  $^1\text{H-NMR}$ (300MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ )  $\delta$ : 1.85(s, 6H), 6.85(dd,  $J = 0.9, 3.0\text{Hz}$ , 1H), 6.88(s, 1H), 7.21(dt,  $J = 0.9, 7.8\text{Hz}$ , 2H), 7.43(dd,  $J = 0.9, 7.8\text{Hz}$ , 1H), 7.60 ~ 7.72(m, 3H), 8.55(dt,  $J = 9.6, 10.8\text{Hz}$ , 1H), 11.7(brs, 1H)

[0760] <合成例示化合物 Pt-173>

[0761]



[0762] 在氮气气氛下,在加热回流条件下,氯化铂(11)(537mg,2.02mmole)和化合物 L-173(900mg,2.02mmole)在苯腈(50mL)中搅拌3小时。使反应混合物放置冷却后,加入甲醇,过滤沉淀的固体,然后用甲醇洗涤,从而得到1.06g例示化合物 Pt-173,亮黄色粉末。产率:82%

[0763]  $^1\text{H-NMR}$ (300MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ )  $\delta$ : 2.07(s,6H), 6.97(s,1H), 7.60 ~ 7.67(m,2H), 7.71(dd,  $J = 0.9, 8.1\text{Hz}$ ), 7.90 ~ 8.08(m,3H), 8.17(t,  $J = 2.1\text{Hz}$ ,  $J(\text{Pt-H}) = 46.8\text{Hz}$ , 1H)

[0764] <有机 EL 装置的评价>

[0765] 将洗过的ITO基板置于气相沉积设备中;铜酞菁在其上气相沉积厚度为10nm;NPD((N,N'-二- $\alpha$ -萘基-N,N'-二苯基)-联苯胺)在其上进一步气相沉积厚度为40nm。主体材料和发光材料以比例85/15(质量比)在其上气相沉积厚度为40nm;BAIq在其上进一步气相沉积厚度为10nm;然后Alq还在其上气相沉积厚度为30nm。在其上气相沉积厚度为3nm的氟化锂之后,铝气相沉积厚度为厚度60nm,从而制得有机EL装置。使用光源测量装置MODEL 2400(Toyo Corporation制造)施加直流恒电压,使有机EL装置发光。结果,获得从发光材料的发光。此外,分别在亮度条件360cd/m<sup>2</sup>(发光面积:4mm<sup>2</sup>)和在较高亮度条件1,000cd/cm<sup>2</sup>(发光面积:4mm<sup>2</sup>)下测量已经被驱动的装置的亮度半衰期。在实施例8和9中,使用氘代Alq(D-Alq)代替Alq制备相同装置。得到的结果示于表2。

[0766] 表2

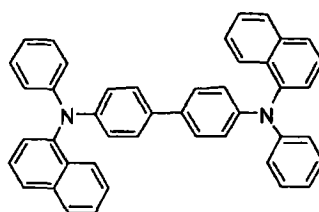
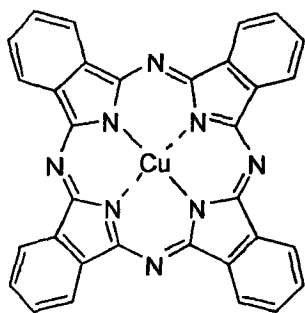
[0767]

| 发光装置   | 发光层中使用的主体材料 | 发光层中使用的发光材料 | 亮度半衰期<br>(开始 :360cd/m <sup>2</sup> ) | 亮度半衰期<br>(开始 :1,000cd/m <sup>2</sup> ) |
|--------|-------------|-------------|--------------------------------------|----------------------------------------|
| 比较例 1  | mCP         | 化合物 I       | 810                                  | 176                                    |
| 比较例 2  | mCP         | 化合物 II      | 750                                  | 162                                    |
| 实施例 1  | mCP         | Pt-2        | 850                                  | 230                                    |
| 实施例 2  | mCP         | Pt-5        | 890                                  | 230                                    |
| 实施例 3  | mCP         | Pt-40       | 850                                  | 220                                    |
| 实施例 4  | mCP         | Pt-41       | 850                                  | 230                                    |
| 实施例 5  | mCP         | Pt-43       | 972                                  | 246                                    |
| 实施例 6  | 主体 1        | Pt-5        | 1053                                 | 300                                    |
| 实施例 7  | 主体 2        | Pt-5        | 970                                  | 246                                    |
| 实施例 8  | mCP         | Pt-5        | 930                                  | 246                                    |
| 实施例 9  | 主体 1        | Pt-5        | 1134                                 | 316                                    |
| 实施例 10 | mCP         | Pt-11       | 900                                  | 240                                    |
| 实施例 11 | mCP         | Pt-50       | 850                                  | 235                                    |
| 实施例 12 | mCP         | Pt-140      | 950                                  | 250                                    |
| 实施例 13 | mCP         | Pt-142      | 850                                  | 220                                    |
| 实施例 14 | mCP         | Pt-143      | 910                                  | 260                                    |
| 实施例 15 | mCP         | Pt-173      | 850                                  | 240                                    |
| 实施例 16 | 主体 1        | Pt-11       | 1100                                 | 310                                    |
| 实施例 17 | 主体 1        | Pt-140      | 1170                                 | 330                                    |
| 实施例 18 | 主体 1        | Pt-143      | 1200                                 | 340                                    |
| 实施例 19 | 主体 2        | Pt-11       | 1010                                 | 250                                    |
| 实施例 20 | 主体 2        | Pt-140      | 1080                                 | 260                                    |

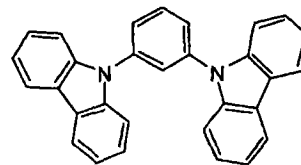
|        |      |        |      |     |
|--------|------|--------|------|-----|
| 实施例 21 | 主体 2 | Pt-143 | 1100 | 270 |
| 实施例 22 | 主体 3 | Pt-5   | 1155 | 320 |
| 实施例 23 | 主体 3 | Pt-11  | 1200 | 325 |
| 实施例 24 | 主体 3 | Pt-140 | 1270 | 338 |
| 实施例 25 | 主体 3 | Pt-143 | 1300 | 350 |

[0768] 下面示出上面实施例中使用的各个化合物的化学结构。

[0769]



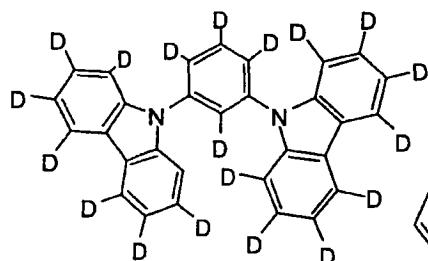
NPD



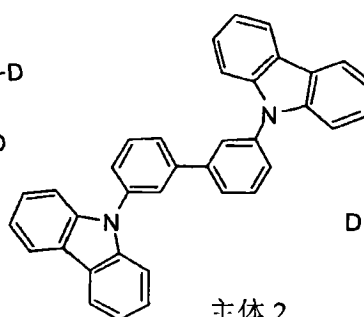
mCP

[0770] 铜酞菁

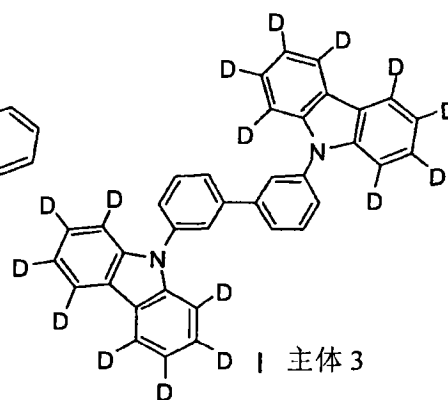
[0771]



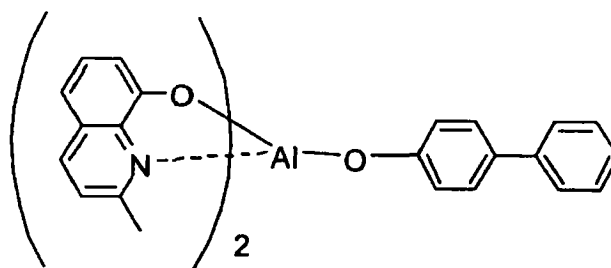
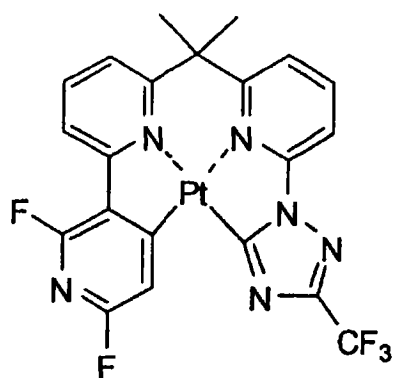
主体 1



主体 2



主体 3

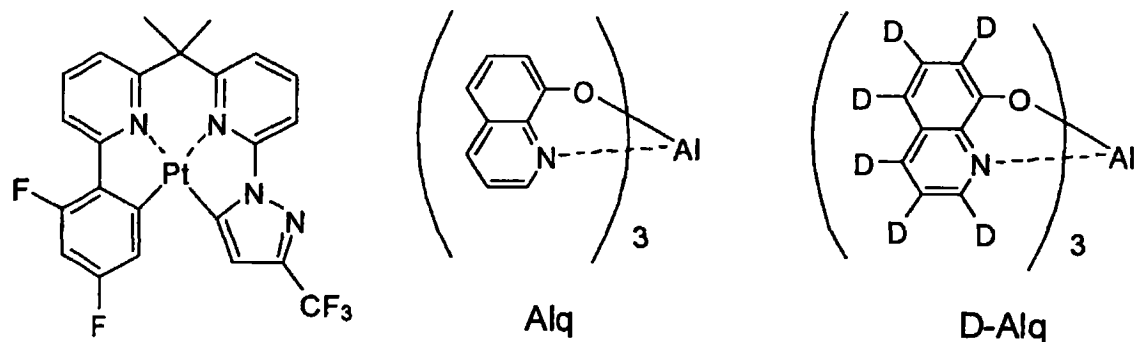


BAiq

[0772] 化合物 1

[0773] JP-A-2006-261623 中公开的化合物 130

[0774]



[0775] 化合物 11

[0776] JP-A-2006-261623 中公开的化合物 176

[0777] 从上面的实施例可以看到,根据本发明,可以获得特别是在高亮度时耐用性优异的有机电致发光装置。

[0778] 根据本发明,通过在有机层中含有上式(1)代表的化合物,可以提供一种特别是在高亮度下使用时具有优异耐用性的有机电致发光装置。

[0779] 此外,根据本发明的式(4a-4)代表的化合物和式(4a-4')代表的化合物,可以提供一种能够在高亮度下使用时实现优异耐用性的发光材料。

[0780] 在本申请中引入所主张外国优先权的每个外国专利申请的全部公开内容通过引用加入本文,就如同在此完全公开一样。

|                |                                                                                                                                                    |         |            |
|----------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|------------|
| 专利名称(译)        | 有机电致发光装置、新型铂络合物和能够作为其配体的新型化合物                                                                                                                      |         |            |
| 公开(公告)号        | <a href="#">CN101567425B</a>                                                                                                                       | 公开(公告)日 | 2012-10-24 |
| 申请号            | CN200910135125.4                                                                                                                                   | 申请日     | 2009-04-22 |
| [标]申请(专利权)人(译) | 富士胶片株式会社                                                                                                                                           |         |            |
| 申请(专利权)人(译)    | 富士胶片株式会社                                                                                                                                           |         |            |
| 当前申请(专利权)人(译)  | 富士胶片株式会社                                                                                                                                           |         |            |
| [标]发明人         | 邑上健<br>伊势俊大<br>木下郁雄<br>高田早<br>武田玲<br>泷泽裕雄                                                                                                          |         |            |
| 发明人            | 邑上健<br>伊势俊大<br>木下郁雄<br>高田早<br>武田玲<br>泷泽裕雄                                                                                                          |         |            |
| IPC分类号         | H01L51/50 H01L51/54 C07D401/14 C07D471/04 C07F7/10 C07D487/04 C07D405/14 C07D409/14<br>C07D417/14 C07F9/6568 C07F15/00 C07F1/08 C07F3/06 C07F15/04 |         |            |
| 代理人(译)         | 柴丽敏<br>于辉                                                                                                                                          |         |            |
| 审查员(译)         | 张月                                                                                                                                                 |         |            |
| 优先权            | 2008310220 2008-12-04 JP<br>2008111799 2008-04-22 JP                                                                                               |         |            |
| 其他公开文献         | CN101567425A                                                                                                                                       |         |            |
| 外部链接           | <a href="#">Espacenet</a> <a href="#">SIPO</a>                                                                                                     |         |            |

#### 摘要(译)

一种有机电致发光装置，其包含：一对电极；和包括发光层的至少一个有机层，所述发光层设置在所述一对电极之间，其中所述至少一个有机层的至少一层含有如说明书中定义的式(1)代表的化合物。式(1)

