

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5572199号

(P5572199)

(45) 発行日 平成26年8月13日 (2014. 8. 13)

(24) 登録日 平成26年7月4日 (2014. 7. 4)

(51) Int. Cl. F I
H O 1 L 51/50 (2006. 01) H O 5 B 33/14 B
C O 7 F 15/00 (2006. 01) C O 7 F 15/00 E
C O 9 K 11/06 (2006. 01) C O 9 K 11/06 6 6 O

請求項の数 26 (全 45 頁)

(21) 出願番号	特願2012-244931 (P2012-244931)	(73) 特許権者	500189296
(22) 出願日	平成24年11月6日 (2012. 11. 6)		イシス イノベーション リミテッド
(62) 分割の表示	特願2006-529359 (P2006-529359) の分割		イギリス国 オーエックス2 7エスジー オックスフォード、サマータウン、ユワ ート プレース、ユワート ハウス
原出願日	平成16年5月17日 (2004. 5. 17)	(73) 特許権者	504353877
(65) 公開番号	特開2013-63988 (P2013-63988A)		ザ ユニバーシティ コート オブ ザ ユニバーシティ オブ セント アンドル ーズ
(43) 公開日	平成25年4月11日 (2013. 4. 11)		イギリス国 ケイワイ16 9エイジェイ ファイフ、 セント アンドルーズ、ノ ース ストリート、カレッジ ゲート
審査請求日	平成24年11月6日 (2012. 11. 6)	(74) 代理人	110000855 特許業務法人浅村特許事務所
(31) 優先権主張番号	0311234.9		
(32) 優先日	平成15年5月16日 (2003. 5. 16)		
(33) 優先権主張国	英国 (GB)		

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機燐光材料および有機オプトエレクトロニクス素子

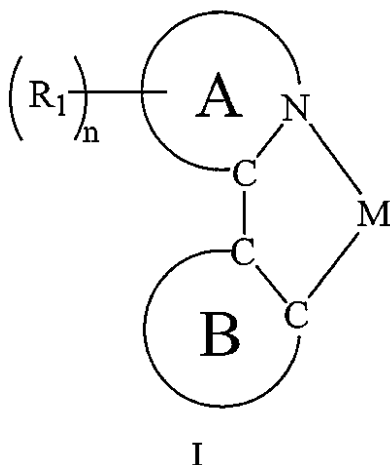
(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

シクロメタル化錯体を含むオプトエレクトロニクス素子であって、
シクロメタル化錯体が、以下の (a) 及び (b) :

(a) 式 I の構造

【化1】



(式中、

Mは、d-ブロック遷移金属であり；

Bは、6員のアリールまたはヘテロアリール環であり、それは、非置換であるか、一つまたはそれ以上のデンドロンであって、各々のデンドロンがアリール基またはヘテロアリール基を含むデンドロンによって置換されているか、または、ハロゲン原子、C₁～6アルキル、C₁～6アルコキシ、スルホキシド、スルホン、=O基、アリール基およびヘテロアリール基から選ばれる一つもしくはそれ以上の置換基によって置換されており、この置換基はそれ自体が、非置換であるか、または、一つまたはそれ以上のハロゲン原子、C₁～4アルキル、C₁～4アルコキシ、アミノ、C₁～4アルキルアミノまたはジ(C₁～4アルキル)アミノ基によって置換されており、そして、Bは、場合によっては一つまたはそれ以上の別のアリールまたはヘテロアリール環に縮合していてもよい；

Aは、トリアゾールまたはテトラゾールであり；

R₁は、アリール基またはヘテロアリール基を含むデンドロンであるか、または、R₁は、ハロゲン原子、C₁～6アルキル、アリール、C₁～6アルコキシ、アミノ、C₁～6アルキルアミノ、ジ(C₁～6アルキル)アミノ、カルバゾール、アリールアミノおよびジアリールアミノから選ばれる置換基であり、この置換基は、非置換であるか、または、一つまたはそれ以上のハロゲン原子、C₁～6アルキル基またはC₁～6アルコキシ基によって置換されており；

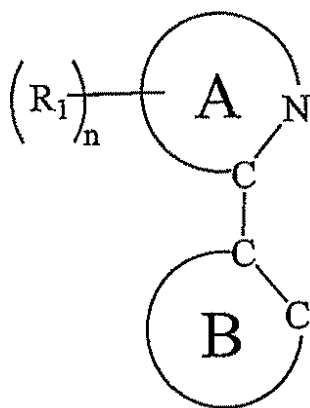
nは、0であるか又は1以上の整数であり；そして

A及びBは、場合によっては縮合していてもよいし又は一つ若しくはそれ以上の共有結合によって結合していてもよい。)；ならびに

(b) 以下の群：

式I Vの配位子

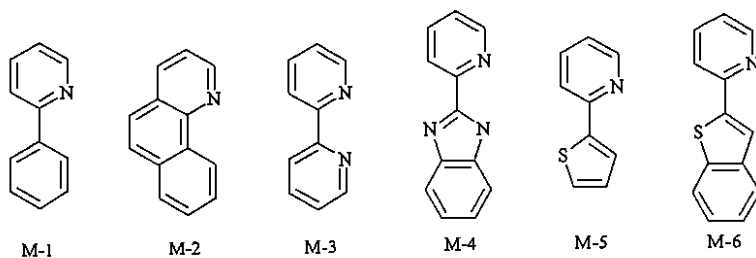
【化2】



I V

(式中、B、A、R₁およびnは、式Iの構造について上で定義したとおりである。)；
式M-1～M-6のいずれかの配位子；

【化 3】



ピコリネート、アセチルアセテート、ホスフィン、ピリジン、フェニルピリジン、ジホスフィン、カルボキシレート、テトラキス（1-ピラゾリル）ボレート、カルボニル、ニトリル、イソニトリル、アルキルイソニトリル、チオシアニド、アルキルホスフィン、アリールホスフィン、ハライドおよびアルキンから選ばれる一つまたはそれ以上の配位子からなり；

前記シクロメタル化錯体がホモレプティックまたはヘテロレプティックである、
オプトエレクトロニクス素子。

【請求項 2】

前記のデンドロンが、アリール基またはヘテロアリール基を含み、

このアリール基またはヘテロアリール基が、樹枝状分子構造であって、それぞれのアリール基またはヘテロアリール基の炭素原子が、互いに直接結合しているか、または互いに窒素原子を介して結合している樹枝状分子構造を有している、請求項 1に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 3】

B が、ベンゼン、ピリジン、ピラジンおよびピリミジンを含む群から選ばれる、請求項 1 又は 2 に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 4】

M が、イリジウム、ロジウム、パラジウム、白金、金、オスミウムおよびルテニウムからなる群から選ばれる、請求項 1 ～ 3 のいずれか 1 項に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 5】

M が、イリジウムおよび白金からなる群から選ばれる、請求項 1 ～ 3 のいずれか 1 項に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 6】

M がイリジウムである、請求項 1 ～ 3 のいずれか 1 項に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 7】

前記錯体がホモレプティックである、請求項 1 ～ 6 のいずれか 1 項に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 8】

前記錯体がヘテロレプティックである、請求項 1 ～ 6 のいずれか 1 項に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 9】

n が 1 以上であり、そして少なくとも一つの R_1 基が、 $C_{1 \sim 6}$ アルキル、アリール、 $C_{1 \sim 6}$ アルコキシ、アミノ、 $C_{1 \sim 6}$ アルキルアミノ、ジ（ $C_{1 \sim 6}$ アルキル）アミノ、カルバゾール、アリールアミノおよびジアリールアミノ基から選ばれる電子供与基である、請求項 1 に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 10】

n が 1 より大きい、請求項 9 に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 11】

10

20

30

40

50

前記電子供与基が、 $C_1 \sim 6$ アルキルアミノ、アリールアミノ、 $C_1 \sim 6$ アルキル、 $C_1 \sim 6$ アルコキシ、アリールおよびカルバゾール基から選ばれる、請求項 9 または 10 に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 12】

環 B が、少なくとも 1 個の電子吸引基によって置換されており、この電子吸引基が、ハロゲン原子、 $C_1 \sim 6$ ハロアルキル基、スルホキシドおよびスルホンから選ばれる、請求項 1 ～ 11 のいずれか一項に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 13】

前記電子吸引基が、フッ素およびペルフッ素化 $C_1 \sim 6$ ハロアルキル基から選ばれる、請求項 12 に記載のオプトエレクトロニクス素子。

10

【請求項 14】

A が、 $C_1 \sim 6$ アルキル、アリール、 $C_1 \sim 6$ アルコキシ、アミノ、 $C_1 \sim 6$ アルキルアミノ、ジ ($C_1 \sim 6$ アルキル) アミノ、カルバゾール、アリールアミノおよびジアリールアミノ基から選ばれる電子供与基である少なくとも 1 個の R_1 基によって置換されたトリアゾール基であり、B が、少なくとも 1 個のフッ素またはペルフッ素化 $C_1 \sim 6$ ハロアルキル基によって置換されたフェニル基であり、そして前記 d-ブロック遷移金属がイリジウムである、請求項 1 に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 15】

環 A が、アリール基またはヘテロアリール基を含むデンドロンである少なくとも 1 個の R_1 基によって置換されている、請求項 1 ～ 14 のいずれか一項に記載のオプトエレクトロニクス素子。

20

【請求項 16】

環 B が、アリール基またはヘテロアリール基を含む少なくとも 1 個のデンドロンによって置換されている請求項 1 ～ 14 のいずれか一項に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 17】

前記デンドロンのアリール基またはヘテロアリール基が、樹枝状分子構造であって、それぞれのアリール基またはヘテロアリール基の炭素原子が、互いに直接結合しているか、または互いに窒素原子を介して結合している樹枝状分子構造を有している、請求項 15 または 16 に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 18】

前記デンドロンが、カルバゾール部分またはトリアリールアミン部分を含む、請求項 15 または 16 に記載のオプトエレクトロニクス素子。

30

【請求項 19】

前記デンドロンが、1, 3, 5-置換フェニル部分を含み、この 1, 3, 5 位の置換基が、アリールおよびヘテロアリールから選択される、請求項 15 または 16 に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 20】

有機発光素子である、請求項 1 ～ 19 のいずれか 1 項に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 21】

燐光層を含み、この燐光層が、前記シクロメタル化錯体を含む、請求項 20 に記載のオプトエレクトロニクス素子。

40

【請求項 22】

前記燐光層が、更に有機ホスト材料を含む、請求項 21 に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 23】

前記有機ホスト材料がジ (t-ブチル) CBP である、請求項 22 に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 24】

前記燐光層が、更に希釈化合物を含む、請求項 22 または 23 に記載のオプトエレクト

50

ロニクス素子。

【請求項 2 5】

前記希釈化合物が、ポリメチルメタクリレート (PMMA) である、請求項 2 4に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【請求項 2 6】

前記希釈化合物が 3 0 ~ 8 0 重量%の量で存在する、請求項 2 4 または 2 5に記載のオプトエレクトロニクス素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0 0 0 1】

本発明は有機燐光材料(organic phosphorescent materials)、特に、青色有機燐光材料に関し、また、有機燐光材料を含む有機エレクトロルミネッセンス素子(organic electroluminescent device)に関する。

【背景技術】

【0 0 0 2】

有機エレクトロルミネッセンス素子は2つの電極の間に置かれた有機エレクトロルミネッセンス材料(organic electroluminescent material)の層を含んでいる。2つの電極間に電流を印加することにより、有機材料にエレクトロルミネッセンス(electroluminescence)を起こさせる。有機エレクトロルミネッセンスの現象はディスプレイおよび照明の分野に多数の応用を有する。1980年代の末期に、効率的な有機エレクトロルミネッセンスは、WO 9 0 / 1 3 1 4 8 に記載されているような共役ポリマーで、およびTang et al Applied Physics Letters 51, 913, (1987)に記載されているようなアルミニウム8-ヒドロキシキノレート錯体で、観察された。かかるシステムにおけるエレクトロルミネッセンスは蛍光(fluorescence)と称され、ポリマーまたは分子の電気的励起によって生じた一重項励起状態(singlet excited states)からの放射発光(radiative emission)によって生じる。最近10年間の多数の研究はかかる蛍光システム(fluorescent system)の検討に關していた。

【0 0 0 3】

1990年代には、電気的に励起された分子の三重項励起状態(triplet excited states)からの光の効率的発光が観察された: Baldo et al Applied Physics Letters 75, 4, (1999)。このエレクトロルミネッセンスシステム(electroluminescent system)は緑色の光を発するシクロメタル化されたイリジウムフェニルピリジン錯体を含んでおり、蛍光システムで従来観察されたものより高い効率を示した。この現象は燐光(phosphorescence)として知られ、広く検討されてきた。US 2 0 0 2 / 0 1 3 4 9 8 4 は一連のイリジウム錯体を開示しており、そこではイリジウムは下記の化合物1のように2個の窒素原子を介して2座配位子(bidentate ligand)に配位されている。US 2 0 0 1 / 0 0 1 9 7 8 2 は一連のイリジウム錯体を開示しており、そこではイリジウムは2座配位子に配位されており、その配位子は下記の化合物2のようにC-N結合によって結合された2個のアリール部分(aryl moieties)を含んでいる。US 2 0 0 2 / 0 0 5 5 0 1 4 は一連のイリジウム錯体を開示しており、そこではイリジウムは下記の化合物3のようにフェニラゾール誘導体を含む配位子に配位されている。WO 0 2 / 1 5 6 4 5 は、下記に示された、F i r P i c として知られている青色燐光錯体(blue phosphorescent complex) 4 を開示している。

【0 0 0 4】

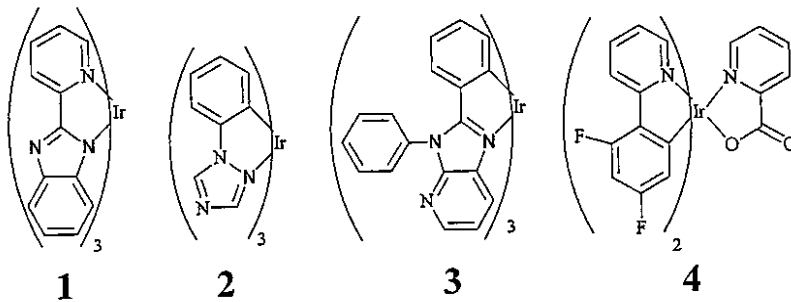
10

20

30

40

【化 1】



10

【0005】

上に引用されたシクロメタル化燐光錯体(cyclometallated phosphorescent complexes)はそれらが真空蒸着によって堆積されることを可能にするように揮発性であるべく設計されていた。真空蒸着はエレクトロルミネッセンス素子の製造において低分子量材料の層を堆積させるのに慣用されている技法である。他の研究はWO 02/068435およびEP 1245659に開示されているように燐光発光体(phosphorescent emitters)をポリマーの中に組み込むことに集中していた。ポリマーの中への燐光発光体の組み込みはインクジェット印刷やスクリーン印刷のような溶液加工技法(solution processing technique)を使用して燐光システム(phosphorescent systems)が堆積されるのを可能にする。エレクトロルミネッセンスディスプレイ(electroluminescent displays)を製造するのに溶液加工を使用する利点はたとえばEP 0880303に開示されているようにこの分野で広く認められてきた。

20

【0006】

溶液加工可能な燐光材料を提供する代替の手法はWO 02/066552に開示されているように燐光発光体をデンドリマー(dendrimers)の中に組み込むことであった。デンドリマーは高度に枝分れした巨大分子であり、そこではデンドロン(dendrons)またはデンドライト(dendrites)として知られている枝分れ分子亜単位(branched molecular sub-units)がコアに結合している。WO 02/066552に開示されたデンドリマーはシクロメタル化燐光コア(cyclometallated phosphorescent core)と一連の有機デンドロンを含んでいる。このようなデンドリマーの性質はそれらを溶液加工に理想的なものにさせる。エレクトロルミネッセンスデンドリマー(electroluminescent dendrimers)の更なるクラスが開発されており、それらには、WO 02/067343に開示されているようなアリールアリール部分を基本としたデンドロンを含むデンドリマーや、WO 02/066575に開示されているような非対称デンドリマー(asymmetric dendrimers)が挙げられる。

30

【0007】

有機発光素子(organic light emitting devices)の開発の多くは移動体電話や大画面ディスプレイのようなディスプレイ用途におけるこれら素子の応用に向けられている。フルカラーディスプレイは電磁スペクトルの赤と緑と青の領域の光を発する発光材料を必要とする。赤、緑および青の光を発することができる蛍光性有機材料が開発されてきた。

40

【0008】

赤および緑の光を発する燐光材料は開発されたが、青の光を発生できる燐光材料の例は比較的少ない。上に言及したイリジウム錯体F i r P i cは青の光を発するが、これはフルカラーディスプレイに要求される深い青色ではなくライトブルーのものである。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0009】

この分野の最近の研究についての上記概説から明らかなように、高い効率を有しそしてディスプレイ応用での使用に適切な範囲の色に利用可能である燐光化合物の開発が必要とされている。特に、電磁スペクトルの青色域で発光する高効率の燐光錯体の範囲が必要と

50

されている。さらに、溶液加工性の燐光発光性化合物の範囲が必要とされている。

【課題を解決するための手段】

【0010】

(発明の概要)

本発明はエレクトロルミネッセンス素子に使用するのに適する燐光発光性化合物を提供する。

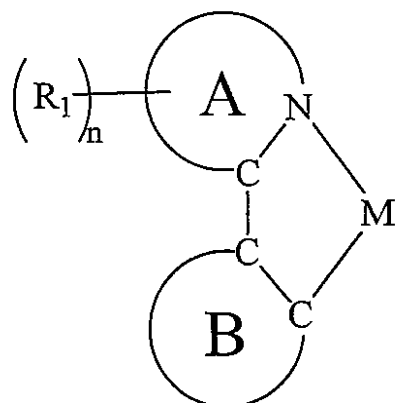
【0011】

第一の態様においては、本発明は式 I の錯体を提供する：

【0012】

【化 2】

10



I

20

【0013】

式中、

Mはd-ブロック遷移金属であり；

Bは5員または6員のアリールまたはヘテロアリール環であり、それは場合によっては置換されていてもよく、そして場合によっては一つまたはそれ以上の別のアリールまたはヘテロアリール環に縮合していてもよい；

30

Aは少なくとも3個の窒素原子を含む5員または6員のヘテロアリール環であり；

R₁は水素以外の基であり；

nは0であるか又は1以上の整数であり；そして

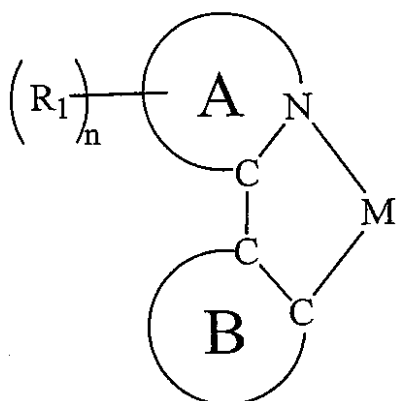
AとBは場合によっては縮合していてもよいし又は一つまたはそれ以上の共有結合によって結合していてもよい。

【0014】

第二の態様においては、本発明は式 I I の構造を含むシクロメタル化錯体を含む：

【0015】

【化 3】



II

10

【0016】

式中、Aは、少なくとも3個のヘテロ原子を含みそして場合によって置換または縮合されていてもよい5員または6員のヘテロアリール環であり、Bは、場合によって置換または縮合されていてもよい5員または6員のアリールまたはヘテロアリール環であり、nは1より大きく、そしてR₁はデンドロンまたは可溶化基である。

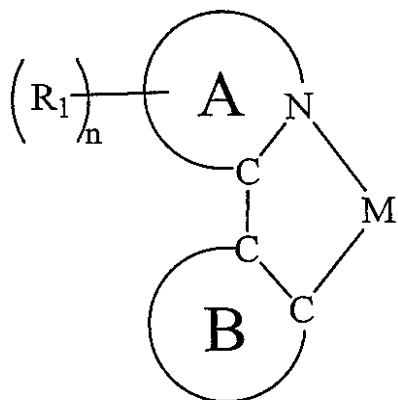
20

【0017】

第三の態様においては、本発明は式IIIの構造を含むシクロメタル化錯体を含むポリマーを含む：

【0018】

【化 4】



III

30

【0019】

式中、Aは、少なくとも3個のヘテロ原子を含みそして場合によって置換または縮合されていてもよい5員または6員のヘテロアリール環であり、Bは、場合によって置換または縮合されていてもよい5員または6員のアリールまたはヘテロアリール環であり、nは0であるか又は1より大きく、そしてR₁は水素以外の置換基である。

40

【0020】

本発明はまた、本発明のシクロメタル化錯体を含むオプトエレクトロニクス素子(optoelectronic device)に関する。好ましい態様においては、前記オプトエレクトロニクス素子は有機発光ダイオード(organic light emitting diode)である。

【0021】

本発明はさらに、本発明のシクロメタル化錯体と有機ホスト(organic host)を含むブレ

50

ンドを含む有機発光素子に関する。理論的に拘束することを望むものではないが、有機ホストは電荷輸送体(charge transporter)として、および発光性シクロメタル化錯体へ移送される三重項励起子(triplet excitons)の源として、作用する。代わりに、正孔と電子の電荷担体を再結合して励起子を生成することは、電荷輸送体として作用するホストをもったシクロメタル化錯体で起こってもよい。好ましくは、有機ホストはカルバゾール部分またはトリアリールアミン部分を含んでいる。

【0022】

本発明はまた、本発明によるシクロメタル化錯体をオプトエレクトロニクス素子に使用することに関する。

【0023】

本発明はまた、前記燐光層を2つの電極の間に配置して含んでいる有機発光素子であって0.25未満のCIE-y座標(coordinate)を有する前記素子を提供する。

【図面の簡単な説明】

【0024】

【図1】本発明のシクロメタル化錯体のフォトルミネッセンススペクトルを示す。

【発明を実施するための最良の形態】

【0025】

言及されていない限り、用語アルキルは線状または枝分れアルキルの基または部分、好ましくは1~6個の炭素原子を含有するもの、たとえばC₁~₄アルキル基または部分、を表わす。C₁~₄アルキル基および部分の例はメチル、エチル、n-プロピル、i-プロピル、n-ブチル、i-ブチルおよびt-ブチルを包含する。疑問を回避するため、基の中に2個のアルキル部分が存在する場合、アルキル部分は同一であってもよいし又は異なっているともよい。

【0026】

本明細書に使用されるとき、ハロゲンとは代表的には、塩素、フッ素、臭素またはヨウ素である。それは好ましくは、塩素、フッ素または臭素である。

【0027】

本明細書に使用されるとき、用語アミノは式-NH₂の基を表わす。用語C₁~₆アルキルアミノは式-NHR'の基(ここで、R'は先に定義した通り、C₁~₆アルキル基、好ましくはC₁~₄アルキル基、である)を表わす。用語ジ(C₁~₆アルキル)アミノは式-NR'R''の基(ここで、R'およびR''は同一または異なり、そして先に定義した通り、C₁~₆アルキル基、好ましくはC₁~₄アルキル基、を表わす)を表わす。本明細書に使用されるとき、用語アミドは式-C(O)NH₂の基を表わす。

【0028】

本明細書に使用されるとき、アリール基とは代表的には、C₆~₁₀アリール基たとえばフェニルまたはナフチルである。アリール基は非置換であってもよいし又はいずれかの位置において置換されていてもよい。代表的には、それは置換基を0個、1個、2個または3個、持っている。

【0029】

本明細書に使用されるとき、アリール基についての言及は、アリール基が炭素環式基、複素環式基またはヘテロアリール基に縮合している縮合環系も包含する。アリール基が縮合している炭素環式基、複素環式基またはヘテロアリール基はそれ自体が更なるアリール、ヘテロアリール、炭素環または複素環に縮合していてもよい。従って、用語アリールはフェニルのようなアリール基が他の単環式または多環式の環系に縮合している場合も包圍する。例示の縮合環系はそれ自体がフェニル環に縮合している単環式炭素環式環に更にフェニル環が縮合しているもの、たとえば、カルバゾリル基、を包含する。

【0030】

本明細書に使用されるとき、ヘテロアリール基は、代表的には、O、SおよびNから選ばれた少なくとも1個のヘテロ原子、たとえば1個、2個または3個のヘテロ原子を含有している、5員~14員芳香族環、たとえば5員~10員環、より好ましくは5員または

10

20

30

40

50

6員環である。例はピリジル、ピラジニル、ピリミジニル、ピリダジニル、フラニル、チエニル、ピラゾリジニル、ピロリル、オキサジアゾリル、イソキサゾリル、チアジアゾリル、チアゾリル、イミダゾリル、ピラゾリル、オキサゾリル、イソチアゾリル、ベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ベンゾチオフェニル、インドリル、インダゾリル、カルバゾリル、アクリジニル、プリニル(purinyl)、シンノリニル(cinnolinyl)、キノキサリニル(quinoxalinyll)、ナフチリジニル(naphthyridinyl)、ベンズイミダゾリル、ベンゾキサゾリル、キノリニル、キナゾリニルおよびイソキノリニルを包含する。

【0031】

本明細書に使用されるとき、ヘテロアリール基についての言及はヘテロアリール基がアリール基に縮合している縮合環系を包含する。ヘテロアリール基がかかる縮合ヘテロアリール環である場合には、好ましい例は5員～6員ヘテロアリール基がフェニル基に縮合している縮合環系である。かかる縮合環系の例はベンゾフラニル、イソベンゾフラニル、ベンゾチオフェニル、インドリル、インダゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンゾキサゾリル、キノリニル、キナゾリニルおよびイソキノリニル部分である。

10

【0032】

ヘテロアリール基は非置換であってもよいし又はいずれかの位置において置換されていてもよい。代表的には、それは置換基を0個、1個、2個または3個持っている。

【0033】

本明細書に使用されるとき、アルコキシ基は代表的には、酸素原子に結合された前記アルキル基である。ハロアルキルまたはハロアルコキシ基は代表的には、一つまたはそれ以上の前記ハロゲン原子によって置換されている前記アルキルまたはアルコキシ基である。代表的には、それは1個、2個または3個の前記ハロゲン原子によって置換されている。ハロアルキルおよびハロアルコキシ基はペルハロアルキルおよびペルハロアルコキシ基たとえば $-CX_3$ および $-OCX_3$ (ここで、Xは前記ハロゲン原子、たとえば、塩素またはフッ素、である)を包含する。

20

【0034】

本発明のシクロメタル化錯体に適する配位子は、少なくとも3個のヘテロ原子を含む5員または6員のヘテロアリール環(Aと称される)と、5員または6員のアリールまたはヘテロアリール環(Bと称される)を含んでいる。

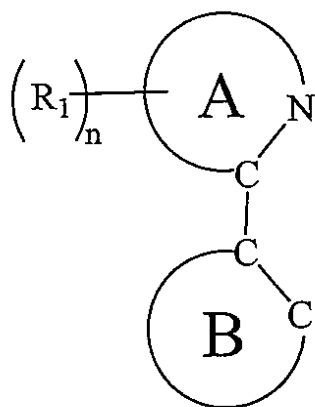
【0035】

疑問を回避するにあたり、シクロメタル化錯体が式I、IIおよびIIIにおいて環AとBを含む一つの配位子を担持するものとして示されていても、錯体は平明にするために示さなかった更なる配位子を含んでいてもよい。たとえば、錯体は同じ構造の更なる配位子すなわち下記構造の更なる配位子を含んでいてもよい：

30

【0036】

【化5】



40

【0037】

錯体は代わりに又は加えて、異なる構造の更なる配位子を含んでいてもよい。これらオ

50

プシオンは本記載の中で後述される。

【0038】

式 I および次の定義によって表わされる態様においては、A は少なくとも 3 個の窒素原子を含む。一態様によれば、式 I において、M が d-ブロック遷移金属であり、B が場合によって置換または縮合されていてもよい 5 員または 6 員アリールまたはヘテロアリール環であり、そして、(i) A が少なくとも 3 個の窒素原子を含む 5 員ヘテロアリール環であり、 R_1 が水素以外の基であり、そして n が 0 に等しいか又はそれより大きい、又は (ii) A が少なくとも 3 個の窒素原子を含む 6 員ヘテロアリール環であり、 R_1 が水素以外の基であり、そして n が 2 以上であるかのどちらかである、式 I のシクロメタル化錯体が提供される。

10

【0039】

環 A と B は炭素-炭素結合によって結合されている。環 A はシクロメタル化錯体の金属に配位している窒素原子を含む。環 B はシクロメタル化錯体の金属への炭素-金属シグマ結合を形成している。この仕方で、中心金属原子と、環 A の窒素と、環 B の炭素原子と、環 A と B の間に炭素結合を形成している 2 個の炭素原子とによって 5 員環が形成されている。環 A は 5 員環である場合には、それは適切には、トリアゾール、オキサジアゾール、チアジアゾールまたはテトラゾールであってもよい。上述の環 A と B の間の炭素-炭素結合に加えて、環は後述の通り縮合していてもよいし又は一つもしくはそれ以上の共有結合によって結合していてもよい。

20

【0040】

A は環の中に少なくとも 3 個の窒素原子を有する 5 員または 6 員ヘテロアリール環である。ヘテロアリール環は場合によって置換されていてもよいし又は一つもしくはそれ以上のアリールもしくはヘテロアリール基に縮合していてもよい。適する A 基は従って、トリアゾール、テトラゾールおよびトリアジンを含む。

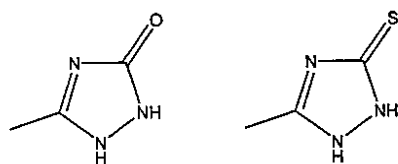
【0041】

A 基は環内に一つまたはそれ以上のケトンまたはチオケトン基によって置換されていてもよい。従って、適する A 基はトリアゾロン(triazolones)およびトリアゾールチオン(triazolethiones)、たとえば、下記式の基、を含む：

【0042】

【化 6】

30



【0043】

A が 5 員環である態様においては、A は好ましくは、トリアゾールまたはテトラゾールである。A が 6 員環である態様においては、A は好ましくはトリアジンである。A が 5 員環であることが好ましい。

40

【0044】

環 A は非置換であってもよいし又は一つもしくはそれ以上の R_1 基によって置換されていてもよい。適する R_1 基はハロゲン原子および C_{1-6} アルキル、アリール、 C_{1-6} アルコキシ、アミノ、 C_{1-6} アルキルアミノ、ジ (C_{1-6} アルキル) アミノおよびカルバゾール基を含む。これら置換基はそれ自体が置換されていてもよく、他の置換基の中でも、ハロゲン原子、 C_{1-6} アルキル基および C_{1-6} アルコキシ基によって置換されていてもよい。

【0045】

好ましくは、環 A の上の少なくとも一つの R_1 基は電子供与性(electron-donating)である。より好ましくは、環 A の上の全ての R_1 基が電子供与性である。特に好ましい R_1

50

基は $C_1 \sim 6$ アルコキシ、 $C_1 \sim 6$ アルキル、 $C_1 \sim 6$ アルキルアミノ、ジ($C_1 \sim 6$ アルキル) アミノ、アリール、カルバゾール、アリールアミノおよびジアリールアミノを包含する。好ましい $C_1 \sim 6$ アルコキシ基は $C_1 \sim 4$ アルコキシ基、たとえば、メトキシまたはエトキシ、である。好ましい $C_1 \sim 6$ アルキル基はエチル、 n -プロピル、 i -プロピル、 n -ブチル、 i -ブチルおよび t -ブチルを包含する。好ましいジアリールアミノ基は-NPhPh(ここで、フェニル環はそれら自体が1個、2個または3個のアルコキシ基によって置換されていてもよい)を包含する。

【0046】

代替態様においては、 R_1 基は電子吸引基(electron-withdrawing groups)であってもよく、たとえば、一つまたはそれ以上のハロゲン原子、ハロアルキル基(ペルハロアルキル基たとえばペルフルオロアルキル基)またはアリール基によって置換されていてもよい。

10

【0047】

環Aは更に置換されていてもよい。好ましい態様においては、ヘテロアリール環Aは少なくとも一つのデンドロン(dendron)によって置換されていてもよい。かかる態様はCORE-[DENDRON]_mの形態の構造を有していてもよく、ここで、COREは本発明によるシクロメタル化錯体を表わし、 m は1以上の整数を表わし、各DENDRONは同一であってもよいし異なってもよく樹枝状分子構造(dendritic molecular structure)を表わす。好ましくは、前記樹枝状分子構造はアリールおよび/またはヘテロアリール基または窒素を含んでおり、それらは好ましくは前記アリールまたはヘテロアリール基の sp^2 または sp 混成炭素原子(hybridized carbon atoms)によって結合されているか又はNと前記アリールもしくはヘテロアリール基との間の単結合を介して結合されている。COREは、1個より多くの樹枝状分枝が結合している第一番目のアリールもしくはヘテロアリール基の sp^2 混成環炭素原子または窒素に結合されている環Aからの単結合で末端となるとして定義され、前記環炭素原子またはNは前記DENDRONの部分形成している。存在する場合には、DENDRONは連結基を介してCOREに結合されることが好ましく、より好ましくは、連結基は非共役連結基たとえばアルキレン基、特に、メチレンまたはエチレン基、である。

20

【0048】

n は好ましくは、0であるか又は1~5の整数、適切には、1~4の整数、である。より好ましくは、 n は0、1、2または3であり、最も好ましくは、1、2または3である。

30

【0049】

Bは5員または6員アリールまたはヘテロアリール基である。アリールまたはヘテロアリール基はそれ自体が1個以上の更なるアリールまたはヘテロアリール基によって置換されていてもよいし又はそれらに縮合していてもよい。

【0050】

Bが5員または6員アリール基である場合には、それは好ましくは、場合によって他のアリールまたはヘテロアリール基に縮合していてもよいフェニル環から選ばれる。たとえば、適するアリール基はフェニル、フェナントレニル、ナフチル、ピレニルおよびフルオレニル基を包含する。最も好ましくは、Bはフェニル環である。

40

【0051】

Bが5員または6員ヘテロアリール基である場合には、環は好ましくは、独立に酸素、硫黄および窒素から選ばれた1個、2個または3個のヘテロ原子を含む。適するヘテロアリール基はピリジン、ピラジン、ピリミジン、チオフェン、フランおよびピロールを包含し、好ましくは、ピリジン、ピラジンおよびピリミジンである。ヘテロアリール基は場合によっては他のアリールまたはヘテロアリール基たとえばフェニル環に縮合していてもよい。たとえば、Bは、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、ベンゾイミダゾール、インドール、キノリン、イソキノリン、キナゾリンから選ばれた基であってもよい。

【0052】

50

B基は非置換であってもよいし、又は一つもしくはそれ以上の置換基によって置換されていてもよい。適する置換基はハロゲン原子、 $C_1 \sim 6$ アルキル、 $C_1 \sim 6$ アルコキシ、スルホキシド、スルホン、 $=O$ 基、アリール基たとえばフェニル環、およびヘテロアリール基を包含し、これら置換基はそれら自体が一つまたはそれ以上のハロゲン原子、 $C_1 \sim 4$ アルキル、 $C_1 \sim 4$ アルコキシ、アミノ、 $C_1 \sim 4$ アルキルアミノまたはジ ($C_1 \sim 4$ アルキル) アミノ基によって置換されていてもよい。好ましくは、B基は少なくとも一つの電子吸引基たとえばハロゲン原子、ハロアルキル、ハロアルコキシ、スルホキシドまたはスルホン基によって置換されている。好ましいハロゲン原子は臭素、塩素およびフッ素を包含し、より好ましくは塩素およびフッ素であり、最も好ましくはフッ素である。特に好ましいハロアルキル基はフルオロアルキル基である。アルキル基は全ての位置においてハロゲン原子によって置換されていてもよく、たとえば、トリフルオロメチルまたは $-CF_2CF_3$ を形成する。代わりに、ハロアルキル基のアルキル部分はいくつかの位置だけで置換されていてもよく、たとえば、ジフルオロメチルまたは $CFHCFH_2$ を形成する。好ましいハロアルキル基は酸素原子を介して連結される前記ハロアルキル基、たとえば、 $-OCF_3$ または $-OCF_2CF_3$ 、を包含する。スルホキシド基は式 $-SO_2R'$ の基（ここで、 R' は好ましくは水素または $C_1 \sim 6$ アルキル基である）である。スルホン基は式 $-SOR'$ の基（ここで、 R' は好ましくは水素または $C_1 \sim 6$ アルキル基である）である。

【0053】

B基は好ましくは、一つまたはそれ以上の置換基によって置換されており、より好ましくは一つまたは2つの置換基によって置換されている。B基は、中心金属原子Mへの結合箇所に対してメタ位にある2個の電子吸引基によって置換されているならば、特に好ましい。これら位置における適する置換基はフッ素、およびペルフッ素化基たとえばトリフルオロメチル、を包含する。置換基はそれ自体が非置換であってもよいし又はたとえば一つもしくはそれ以上の $C_1 \sim 4$ アルキル、 $C_1 \sim 4$ アルコキシ、アミノ、 $C_1 \sim 4$ アルキルアミノまたはジ ($C_1 \sim 4$ アルキル) アミノ基によって置換されていてもよい。

【0054】

環Bはまた、一つまたはそれ以上のデンドロンによって置換されていてもよい。かかる態様は $CORE-[DENDRON]_m$ の形態の構造を有していてもよく、ここで、COREは本発明によるシクロメタル化錯体を表わし、mは1以上の整数を表わし、各DENDRONは同一であってもよいし異なってもよく樹枝状分子構造を表わす。好ましくは、前記樹枝状分子構造はアリールおよび／またはヘテロアリール基または窒素を含んでおり、それらは好ましくは前記アリールまたはヘテロアリール基の sp^2 または sp 混成炭素原子によって結合されているか又はNと前記アリールもしくはヘテロアリール基との間の単結合を介して結合されている。COREは、1個より多くの樹枝状分枝が結合している第一番目のアリールもしくはヘテロアリール基の sp^2 混成環炭素原子または窒素に結合されている環Bからの単結合で末端となるとして定義され、前記環炭素原子またはNは前記DENDRONの部分形成している。存在する場合には、DENDRONは連結基を介してCOREに結合されることが好ましく、より好ましくは、連結基は非共役連結基たとえばアルキレン基、特に、メチレンまたはエチレン基、である。

【0055】

好ましくは、前記デンドロンはカルバゾール部分またはジアリールアミンもしくはトリアリールアミン部分を含む。好ましくは、前記デンドロンは1, 3, 5-置換フェニル部分を含む。

【0056】

本発明のシクロメタル化錯体の好ましい態様においては、Aは、電子供与基たとえばアルキルまたはアルキルアミン基によって置換されているトリアゾール基を含み、Bは、少なくとも1個のフッ素またはフッ素化基によって置換されているフェニル基を含み、そして前記d-ブロック遷移金属はイリジウムである。最も好ましくは、前記アルキル置換トリアゾールは1, 2, 4-トリアゾールを含む。

【0057】

本発明の全ての態様においては、基Mはd-ブロック遷移金属である。Mは好ましくは、イリジウム、ロジウム、パラジウム、白金、金、オスミウムおよびルテニウムから選ばれる。これら金属のシクロメタル化錯体は有機エレクトロルミネッセンス素子に使用するための燐光システムを提供することが明らかにされた。より好ましくは、Mはイリジウムおよび白金から選ばれ、両者は高効率の燐光システムを提供することが明らかにされた。

【0058】

別の態様においては、本発明は、本発明のシクロメタル化錯体を含むポリマーまたはオリゴマーを提供する。前記シクロメタル化錯体はポリマーまたはオリゴマーの主鎖の中に組み込まれていてもよいし、又は前記シクロメタル化錯体はポリマーまたはオリゴマーの主鎖にぶら下がっていてもよい。好ましくは、前記ポリマーまたはオリゴマーはさらにカルバゾールまたはトリアリールアミン基を含んでいる。

10

【0059】

以下に、本発明の更なる局面および好ましい特徴を具体的化合物に関して考察しよう。

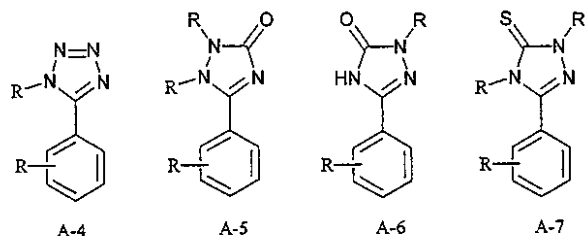
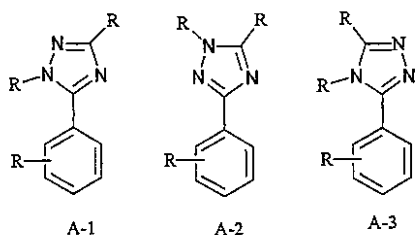
【0060】

下記化合物A-1からA-7までは、環Aが5員環でありそして環Bがフェニル環である配位子の例である。Rは置換基たとえば水素、アルキルもしくはアリール基またはハロゲンを表わす。

【0061】

【化7】

20



30

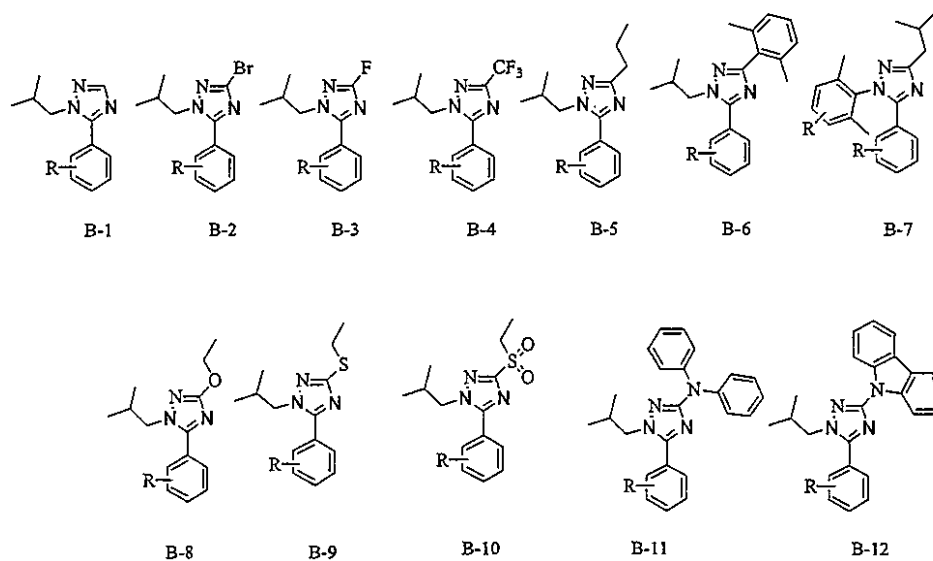
【0062】

環Aは置換されていてもよく、そこでは環Aは窒素を含み、これも置換されていてもよい。適する置換基はアルキルおよびアリール基、アルキルオキシ基、アルキルアミン、アリールアミン、特にジアリールアミンまたはトリアリールアミン、カルバゾールおよびハロゲン原子特にフッ素または臭素、を包含する。電子供与基は特に適するクラスの置換基であり、そしてアルコキシ基、アルキル基、アルキルアミンおよびアリールアミンを包含する。化合物B-1からB-12までは環Aの上に置換基をもつ配位子の例である。

40

【0063】

【化 8】



10

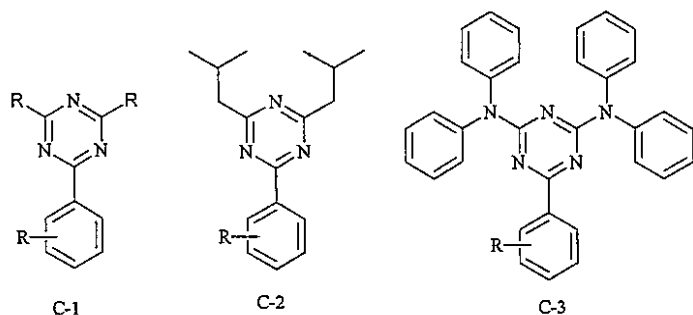
【0064】

代わりに、環Aは6員ヘテロ芳香族系たとえばトリアジンであってもよい。環Aが6員系である場合には、それは、アルキルもしくはアリール基、ハライドまたは電子供与基によって置換されていてもよい。化合物C-1からC-3までは環Aが6員環である適切な配位子の例を示している。Rは置換基たとえば水素、アルキルもしくはアリール基またはハロゲンを表わす。

20

【0065】

【化 9】



30

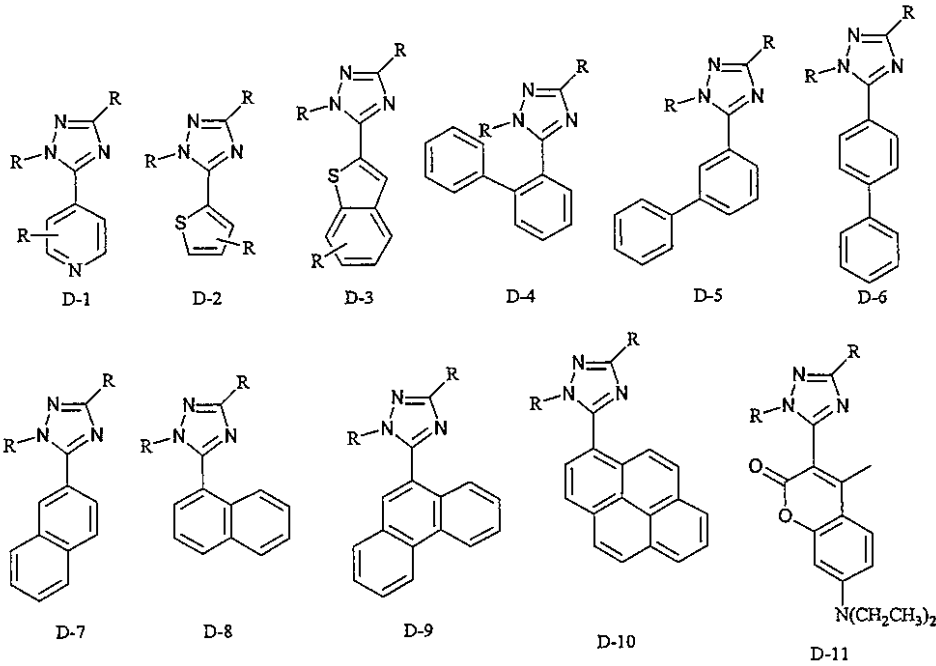
【0066】

環Bは5員または6員環であってもよく、そして芳香族またはヘテロ芳香族の環、たとえば、ベンゼン、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、チオフェン、フランおよびピロールおよびかかる基の誘導体、であってもよい。環Bは置換または縮合されていてもよい。化合物D-1からD-11までは環Aがトリアゾールである適切な配位子を示しているが、明らかに多数のその他のヘテロアリール基たとえば上記のものが環Aとして選択されてもよい。Rは置換基たとえば水素、アルキルもしくはアリール基またはハロゲンを表わす。

40

【0067】

【化 10】



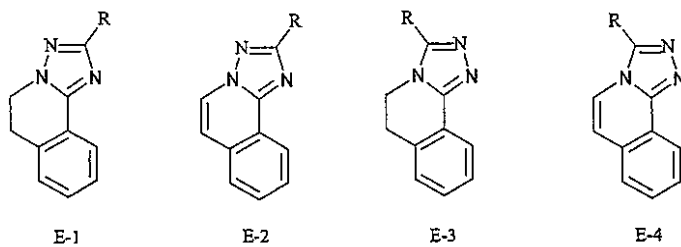
10

【0068】

環AとBは下記のE-1からE-4までに示されている通り縮合されていてもよい即ち共有結合によって結合されていてもよい。Rは置換基たとえば水素、アルキルもしくはアリール基またはハロゲンを表わす。

【0069】

【化 11】



30

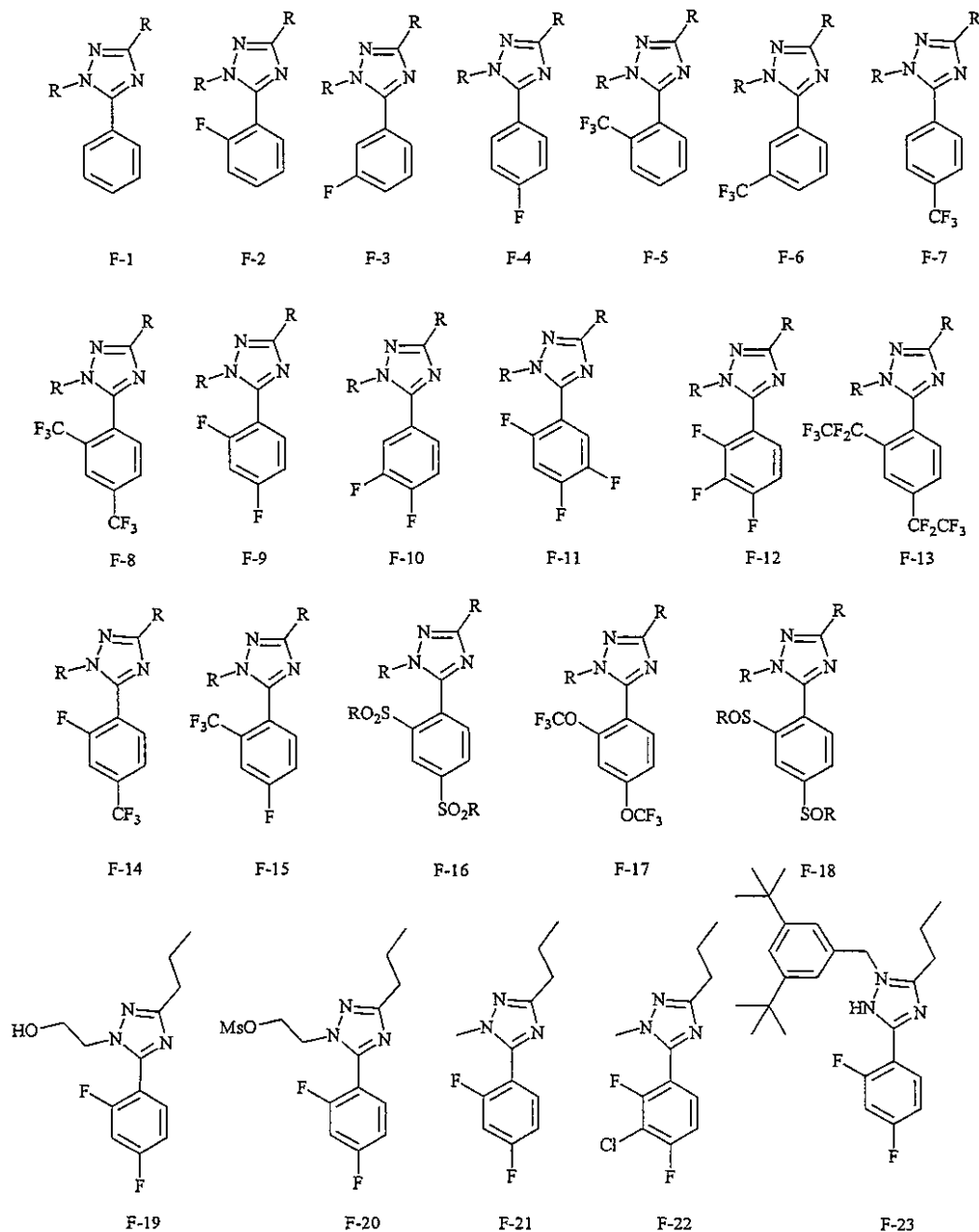
【0070】

環Bが電子吸引基たとえばフッ素、フルオロアルキル、フルオロアルコキシ、スルホキシドまたはスルホン基によって置換されている。化合物F-1からF-23までは電子吸引基によって置換されている配位子の例である。Rは置換基たとえば水素、アルキルもしくはアリール基またはハロゲンを表わす。

【0071】

40

【化 1 2】



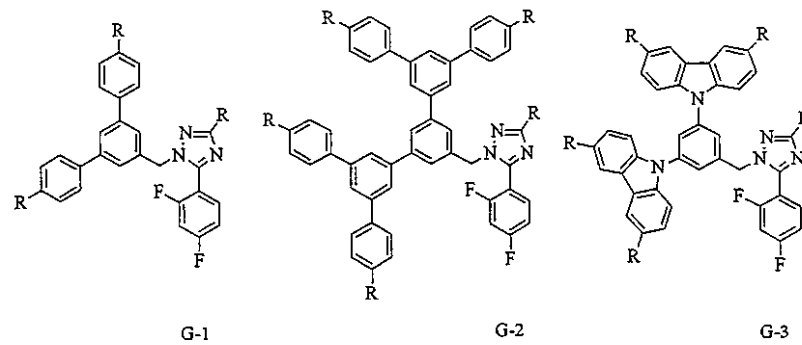
【0072】

金属Mへの配位子は、向上した溶液加工特性を付与するための及び配位子に更なる官能性(functionality)たとえば電荷輸送性官能性を導入するためのデンドロンによって置換されていてもよい。デンドロンは分枝構造(branching structure)であり、高密度の官能性を得られる金属錯体に導入するのを可能にする。本発明のシクロメタル化錯体においては、第一の配位領域(coordination sphere)を形成する中心金属イオンと配位子は、環A、Bまたは両者で置換されたデンドロンをもつデンドリマーのコアを形成するであろう。デンドロンが配位子の環Aで置換されていること及びデンドロンが環Aと共役でないことが好ましい。デンドロンと環Aの間にアルキレン連結基特にメチレンまたはエチレン連結基を設けることは特に有利であることが判明した。環Bがデンドロン置換基を有する場合には、これら置換基はシクロメタル化錯体の中で炭素－金属結合を形成するであろう環Bの炭素に対してパラ位にあることが好ましい。カルバゾール、トリアリールアミンおよび1, 3, 5-フェニル基を含むデンドロンは発光素子への応用に特に適している。化合物G-1からG-9までは、環Aにおいてデンドロンで置換されている本発明の配位子を示

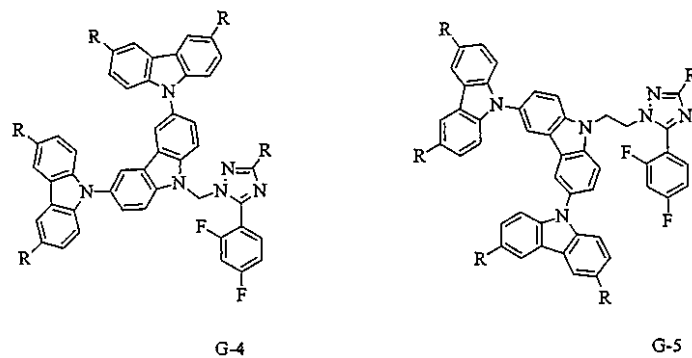
す。Rは置換基たとえば水素、アルキルもしくはアリール基またはハロゲンまたはアルキルオキシ基を表わす。

【0073】

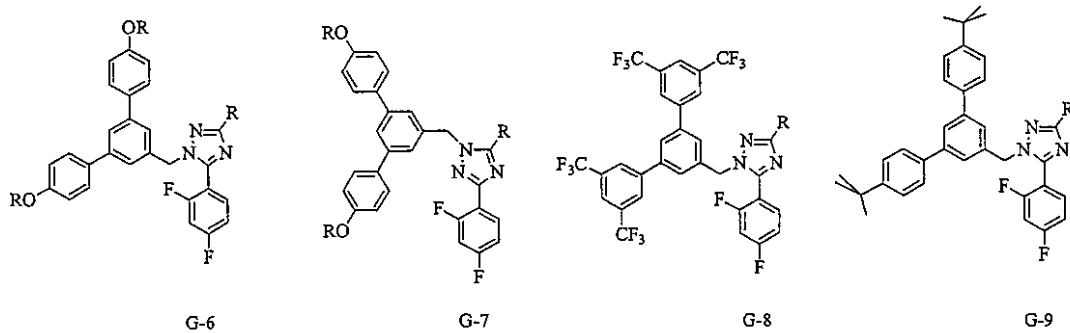
【化13】



10



20



30

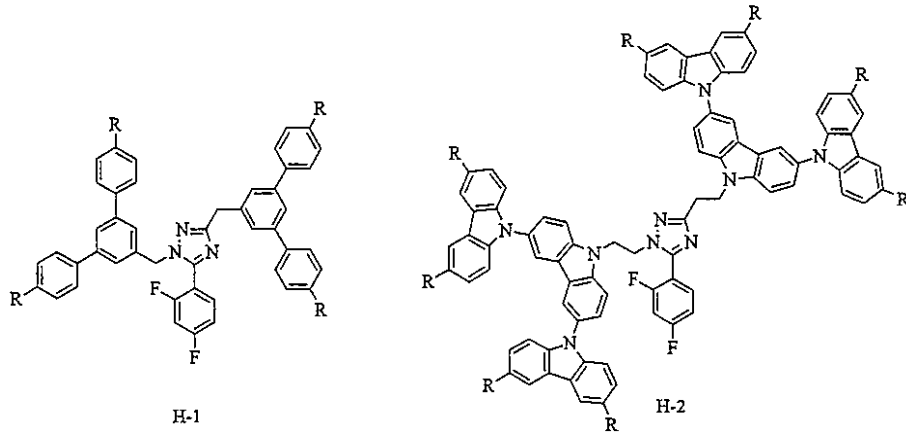
【0074】

環Aは複数のデンドロンによって置換されていてもよく、たとえば化合物H-1およびH-2は環Aにおいて1対のデンドロンによって置換されている配位子を示す。Rは置換基たとえば水素、アルキルもしくはアリール基またはハロゲンを表わす。

40

【0075】

【化 1 4】



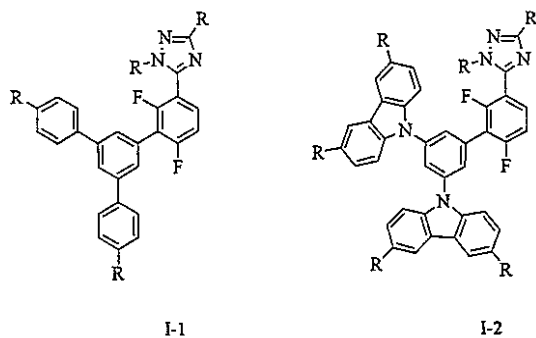
10

【0076】

本発明の配位子は下記の化合物 I-1 および I-2 によって示される通り、環 B においてデンドロンによって置換されていてもよい。R は置換基たとえば水素、アルキルもしくはアリール基またはハロゲンを表わす。

【0077】

【化 1 5】



20

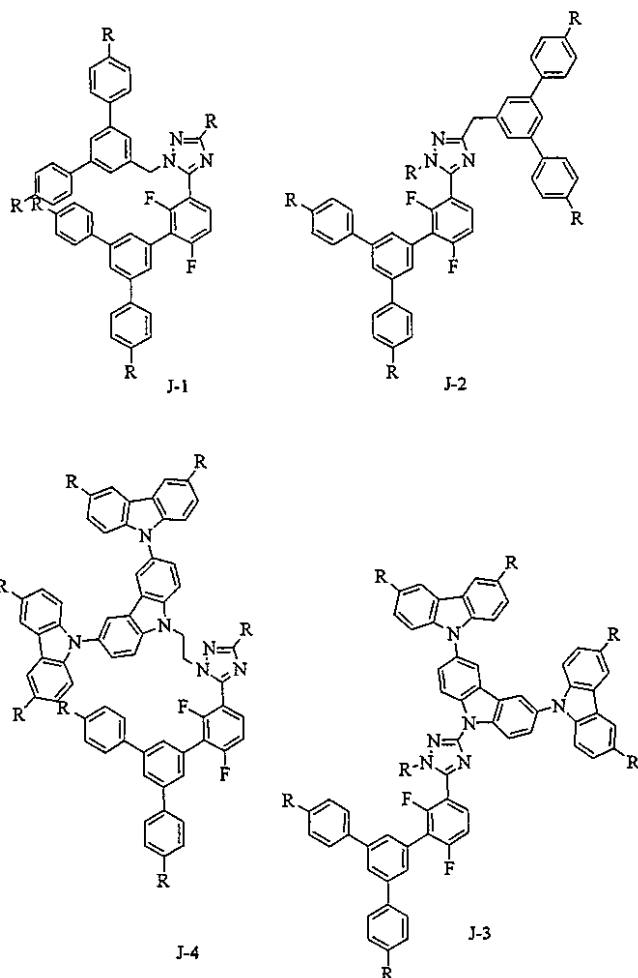
【0078】

代わりに、下記の化合物 J-1 から J-4 までによって示されている通り、環 A および B の両方がデンドロンによって置換されていてもよい。R は置換基たとえば水素、アルキルもしくはアリール基またはハロゲンを表わす。英国特許出願 GB 0 2 1 9 9 8 7. 5 は金属コアの周りに置換された複数のデンドロンを有することに関連した利点を記載している。

【0079】

30

【化 1 6】



10

20

【0080】

本発明のシクロメタル化錯体はホモレプティック(homoleptic)またはヘテロレプティック(heteroleptic)であってもよい。ホモレプティック錯体においては、全ての配位子が同一であり、ヘテロレプティック錯体においては、異なる配位子が金属に結合されている。

30

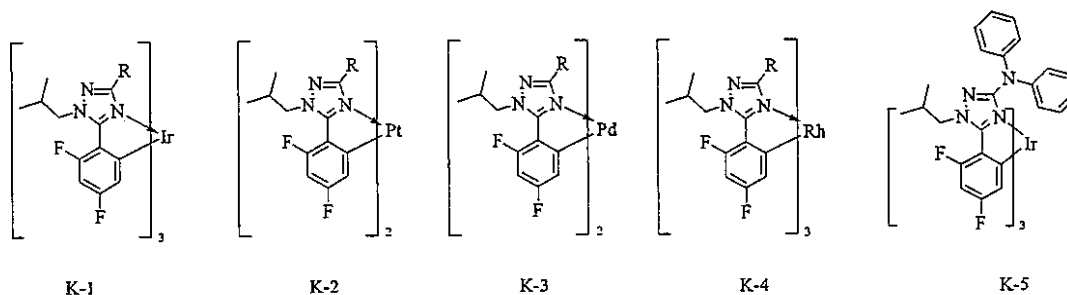
【0081】

前記シクロメタル化錯体がヘテロレプティックである場合には、それは好ましくは、ピコリネート、アセチルアセテート、ホスフィン、ピリジンおよびピリジン誘導体、カルボニル、ニトリル、イソニトリルおよびハライドを含む群から選ばれた配位子を含む。最も好ましくは、前記シクロメタル化錯体がヘテロレプティックである場合には、それはピコリネートまたはテトラキス(1-ピラゾリル)ボレート共配位子(co-ligand)を含む。前記シクロメタル化錯体がヘテロレプティックである場合、それは同じ一般構造の更なる配位子(即ち、同じ仕方で連結された環AとBを有し、そして基 R_1 によってn度置換された環Aを有する)を含んでいてもよいが、A、B、 R_1 およびnの定義が異なってもよい。適するホモレプティック錯体は下記のそれら化合物K-1からK-5までを包含する。

40

【0082】

【化 1 7】



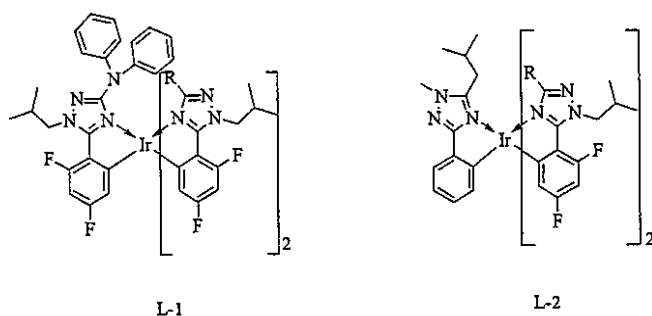
10

【0083】

本発明のシクロメタル化錯体は式 I の異なる配位子を含むヘテロレプティック錯体であってもよく、かかる錯体の例は下記の化合物 L-1 および L-2 によって示される。

【0084】

【化 1 8】



20

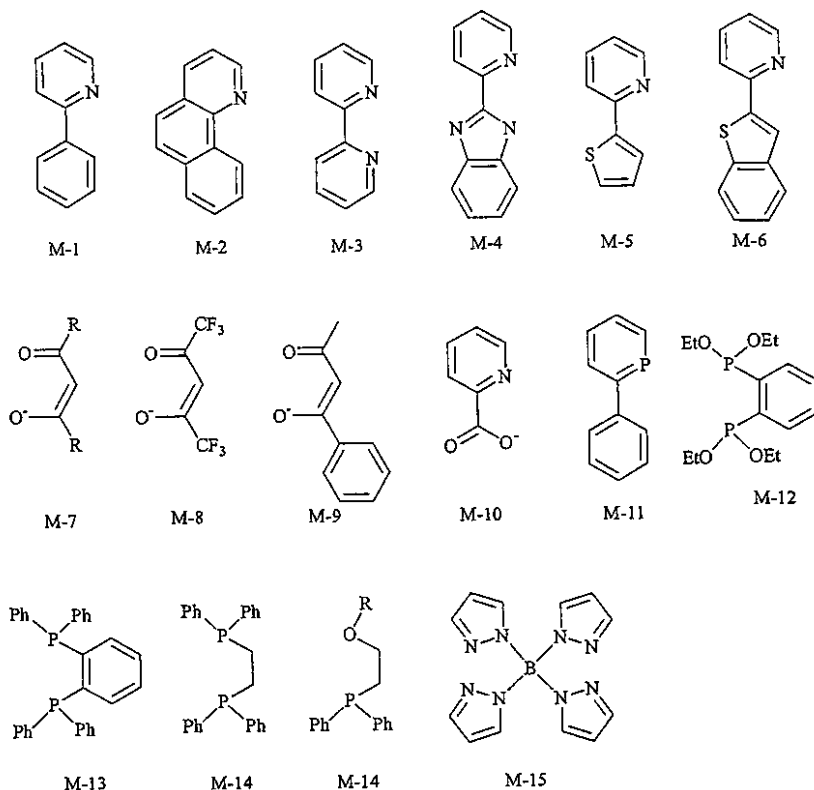
【0085】

本発明のシクロメタル化錯体はまた、式 I の少なくとも一つの配位子と、異なる構造の他の配位子とを含むヘテロレプティック錯体であってもよい。本発明においてヘテロレプティック錯体を形成するのに使用されてもよい適切な配位子の例はフェニルピリジンおよび他の 2-置換ピリジン、1, 3-ジオンたとえばピコリネート、ホスフィンおよびジホスフィン、およびカルボキシレートを含む。ピコリネートは特に好ましい共配位子である。1-ピラゾリルボレートたとえばテトラキス(1-ピラゾリル)ボレートは好ましいクラスの共配位子である。化合物 M-1 から M-15 までは本発明のヘテロレプティック錯体の中に使用するための適する配位子の例である。

30

【0086】

【化 1 9】



10

20

【0087】

上に例が示されている 2 座共配位子(bidentate co-ligands)の他に、1 座配位子(monodentate ligands)も本発明のシクロメタル化錯体における共配位子として使用されてもよい。適する 1 座配位子の例はカルボニル、ニトリル、イソニトリルおよびアルキルイソニトリル、チオシアニド、アルキルホスフィンおよびアリールホスフィン特にトリフェニルホスフィン、ハライド特にクロライドまたはブロマイド、複素環式化合物たとえばピリジンおよび置換ピリジン、およびアルキンを含む。好ましい 1 座配位子はカルボニル、ニトリル、イソニトリル、トリアリールホスフィンおよびハライドを含む。

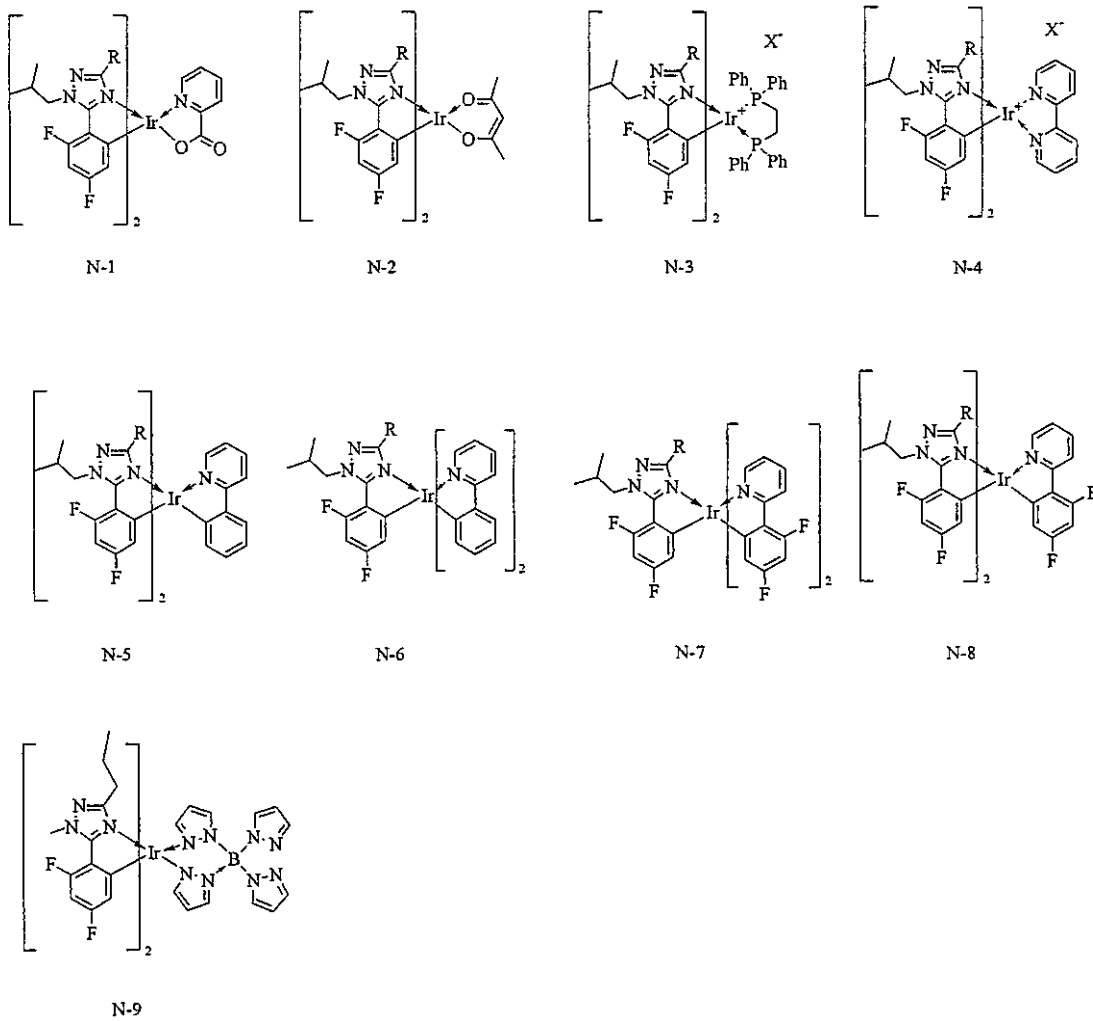
30

【0088】

式 I の配位子と、異なる構造の配位子とを含むヘテロレプティック錯体の例は下記の化合物 N-1 から N-9 までによって示される。X は金属錯体の電荷と釣り合わせるのに十分な電荷をもつ帯電部分を表わし、そして好ましくはクロライド、テトラフルオロボレートまたはヘキサフルオロホスフェートである。

【0089】

【化 20】



10

20

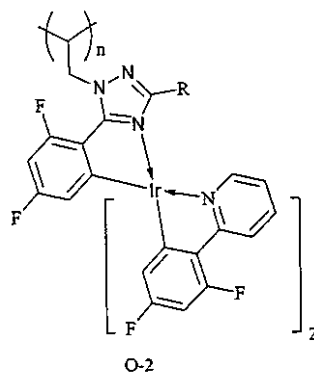
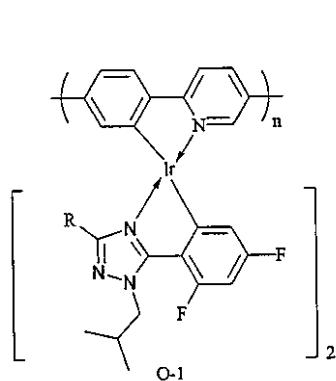
【0090】

30

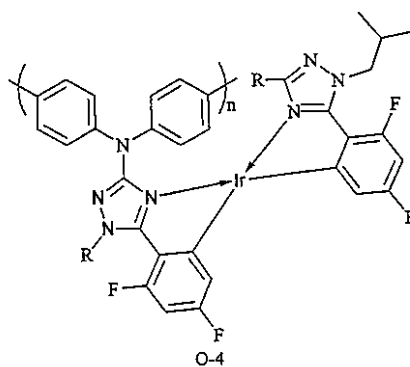
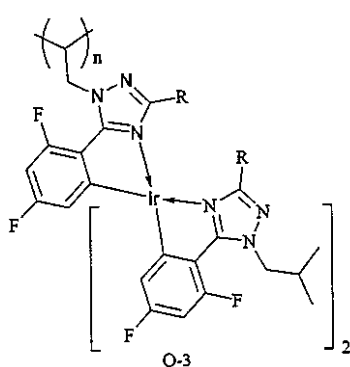
本発明のシクロメタル化錯体はポリマーの中に組み込まれてもよい。錯体はポリマーの主鎖の中に又は側鎖として組み込まれてもよい。本発明のシクロメタル化錯体を組み込んだポリマーはホモポリマーまたはコポリマーであってもよく、コポリマーはさらに、フルオレンたとえば9, 9-ジ-*n*-オクチルフルオレン、トリアリールアミンたとえばN, N-ビス(フェニル)-4-sec-ブチルフェニルアミン、ベンゾチアジアゾールまたはフェニレンビニレンを含む群から選ばれたコモノマーを含んでもよい。かかる系の例は下記のO-1からO-4までのポリマーによって示される。

【0091】

【化 2 1】



10



20

【0092】

コポリマーの特に有利なクラスは、本発明のシクロメタル化錯体と、ホスト材料として作用するのに適するコモノマー、たとえば、カルバゾール、カルバゾール誘導体およびトリアリールアミン、とを含むそれらコポリマーを包含する。

【0093】

本発明の代替態様においては、式 I I (式中、Aは少なくとも3個のヘテロ原子を含み、かつ、場合によって別の環に縮合していてもよい、5員または6員のヘテロアリール環であり、Bは、場合によって置換されていてもよく、かつ、場合によって別の環に縮合していてもよい、5員または6員のアリールまたはヘテロアリール環であり、nは1より大きく、そしてR₁はデンドロンまたは可溶化基である)の構造を含むシクロメタル化錯体が提供される。環Aの中のヘテロ原子は好ましくは、酸素、硫黄および窒素から選ばれる。より好ましくは、環Aは少なくとも2個の窒素原子、より好ましくは少なくとも3個の窒素原子、を含有している。好ましくは、環Aは3個、4個または5個のヘテロ原子、より好ましくは3個または4個のヘテロ原子を含有する。この態様のAおよびBのための好ましい環、好ましいR₁置換基および好ましいnの値は本発明の第一の態様に関連して上記に定義されている通りである。

30

【0094】

好ましいデンドロンは式 I に言及して規定された本発明の第一の態様に関連して上に記載されている。好ましい可溶化基は炭素原子数3~12のアルキル基、およびヘテロアルキル基たとえばアルコキシ基を包含する。適するアルコキシ基はC₁~₆アルコキシ基を包含する。

40

【0095】

本発明の更なる態様においては、式 I I I (式中、Aは少なくとも3個のヘテロ原子を含みそして別の環に縮合している5員または6員のヘテロアリール環であり、Bは場合によって置換されていてもよくそして場合によって別のアリールまたはヘテロアリール環に縮合していてもよい5員または6員のアリールまたはヘテロアリール環であり、nは0であるか又は1より大きく、そしてR₁は水素以外の置換基である)の構造を含むシクロメ

50

タル化錯体を含むポリマーが提供される。環Aの中のヘテロ原子は好ましくは、酸素、硫黄および窒素から選ばれる。より好ましくは、環Aは少なくとも2個の窒素原子、より好ましくは少なくとも3個の窒素原子を含有している。好ましくは、環Aは3個、4個または5個のヘテロ原子、より好ましくは3個または4個のヘテロ原子、を含有している。

【0096】

この態様のAおよびBのための好ましい環、好ましい R_1 置換基および好ましいnの値は、本発明の第一の態様に関連して上に定義されている通りである。

【0097】

本発明の発明者らは驚くべきことには、式Iのシクロメタル化イリジウム錯体のクラスが青色の光を発することを見出した。式I（式中、Aは5員環でありそして電子供与基によって置換されており、そしてBはフェニル環でありそして少なくとも1個の電子吸引基によって置換されている）のシクロメタル化イリジウム錯体は青色の光を発することが明らかにされた。特に、式I（式中、環Aはアルキル基によって置換されたトリアゾールを含み、そして環Bはフッ素およびトリフルオロメタンから選ばれた2個の電子吸引基によって炭素-金属結合に対してメタ位を置換されているフェニル環を含む）のシクロメタル化イリジウム錯体は深い青色の光を発することが明らかにされた。好ましくは、本発明の錯体は0.30未満のCIE-y座標、好ましくは0.25未満の、より好ましくは0.15~0.25の、CIE-y座標を有する。

【0098】

本発明の目的のためには、青色の光は $0.30 > x > 0.05$ および $0.3 > y > 0.01$ のCIE（国際照明委員会(Commission Internationale de l'Eclairage)）座標および430~490nmの波長を有する光を含むと考えられており、そして深い青色は $0.3 > x > 0.1$ および $0.2 > y > 0.01$ のCIE座標および430~470nmの波長を有する光を含むと考えられている。CIEは原色青(primary colour blue)を435.8nmの波長を有すると規定しており、そしてPALテレビジョンシステムは $x = 0.15$ 、 $y = 0.06$ のCIE座標をもつ青色光源を使用している。

【0099】

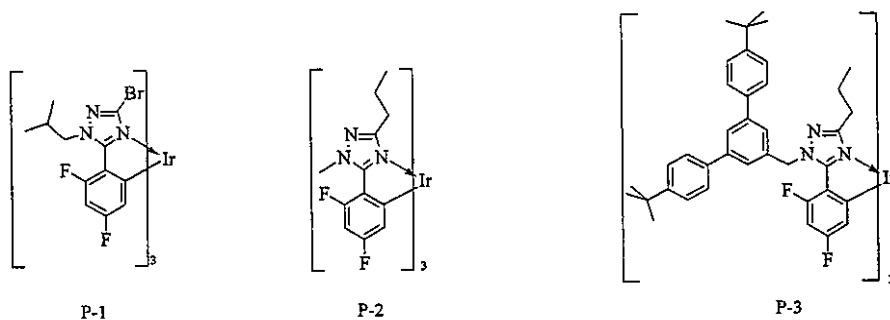
従来技術の青色燐光発光性イリジウム錯体（その例は先に言及したF i r P i cである）は $x = 0.16$ 、 $y = 0.29$ のCIE座標を有し470nmの波長に最大発光をもつライトブルーの色の光を発する。

【0100】

下記のシクロメタル化錯体P-1は図1に示されたフォトルミネッセンススペクトル(photoluminescent spectrum)を有し、450nmの波長にピーク発光を有し428nmと490nmに付随的発光を有し、そして $x = 0.15$ 、 $y = 0.09$ のCIE座標を有する。明らかに、このシクロメタル化錯体のフォトルミネッセンスは従来技術の青色燐光発光体F i r P i cに比べて有意に青シフトされている。この錯体のCIE座標は従来技術の青色燐光システムよりも深い青色であり、そしてこのようなものはフルカラーディスプレイを製造するのにより適している。デンドロン置換錯体P-3は $x = 0.16$ 、 $y = 0.14$ のCIE座標を示す。

【0101】

【化 2 2】



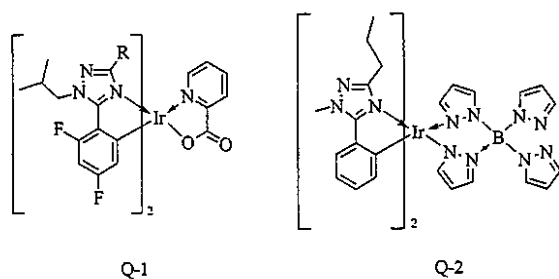
10

【0102】

上記青色発光性イリジウムシクロメタル化錯体の中に使用されている配位子と、錯体の発光の色をシフトさせることを知られている更なる配位子とを含むヘテロレプティック錯体も製造できる。かかる配位子の例はアニオン性配位子たとえばピコリネート、アセチルアセテート、テトラキス（1-ピラゾリル）ボレートおよびニトリルを包含する。上記配位子と青シフト共配位子との両方を組み込んであるシクロメタル化イリジウム錯体の例は下記に示された化合物Q-1からQ-2までである。

【0103】

【化 2 3】



20

【0104】

深い青色を発光するシクロメタル化錯体を得るためには、環AおよびBの置換基は環と共役でないか又は環AもしくはBのπ-共役系を有意に拡張しないことが好ましい。かかる拡張されたいずれの共役もシクロメタル化錯体の中に導入されると発光を赤シフトさせる働きをする。テトラキス（1-ピラゾリル）ボレート置換錯体Q-2はx = 0.16、y = 0.19のCIE座標を有する深い青色のフォトルミネッセンス発光を有する。

30

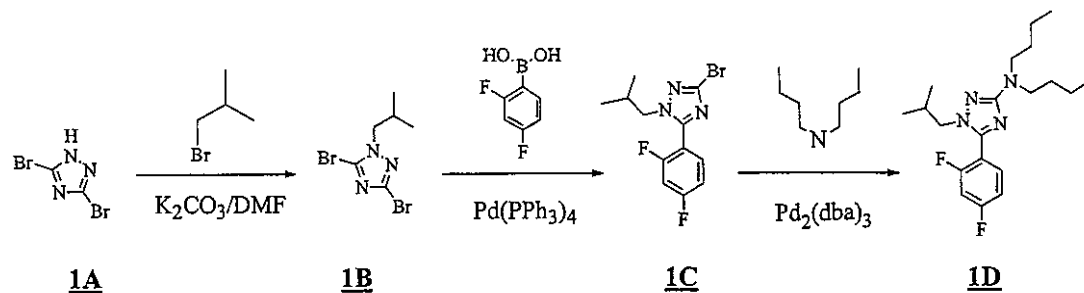
【0105】

本発明のシクロメタル化錯体、および本発明のシクロメタル化錯体の配位子は、標準合成技法に従って製造されてもよい。本発明のシクロメタル化錯体を製造するための代表的な合成スキームは下記のスキーム (Scheme) 1 に示されている。

【0106】

40

【化 2 4】



スキーム 1

10

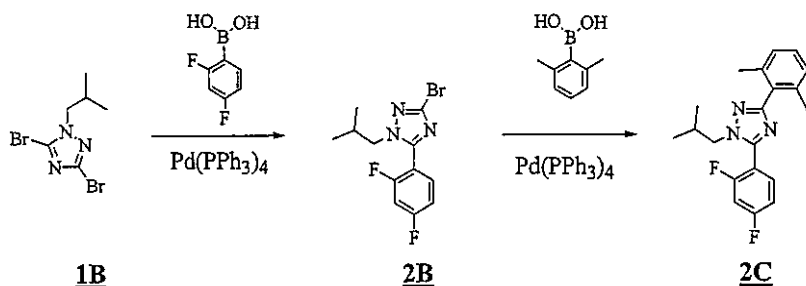
【0107】

上記スキーム1においては、二臭素化トリアゾール1Aを塩基の存在下で過剰の臭化イソブチルと反応させて置換トリアゾール1Bを提供する。スズキカップリング(Suzuki coupling)を使用して、置換トリアゾール1Bを更にフェニル置換ボロン酸(phenyl substituted boronic acid)と反応させて化合物1Cを提供する。それから、化合物1Cをトリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0) ($\text{Pd}_2(\text{dba})_3$)の存在下でジプロピルアミンによって更に置換して配位子1Dを提供する。この合成法は広範囲の配位子を製造することを可能にする。この合成法の融通性はデンドロン置換配位子を包含する配位子の範囲の製造向けに下記に示された合成スキーム2および3によって際立たされる。

20

【0108】

【化 2 5】

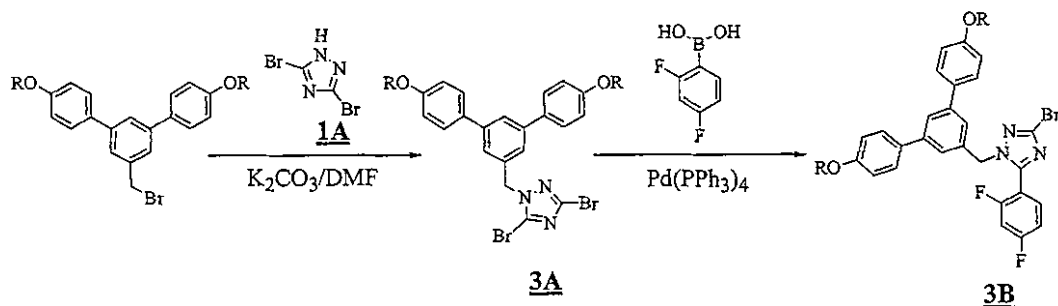


スキーム 2

30

【0109】

【化 2 6】



スキーム 3

40

【0110】

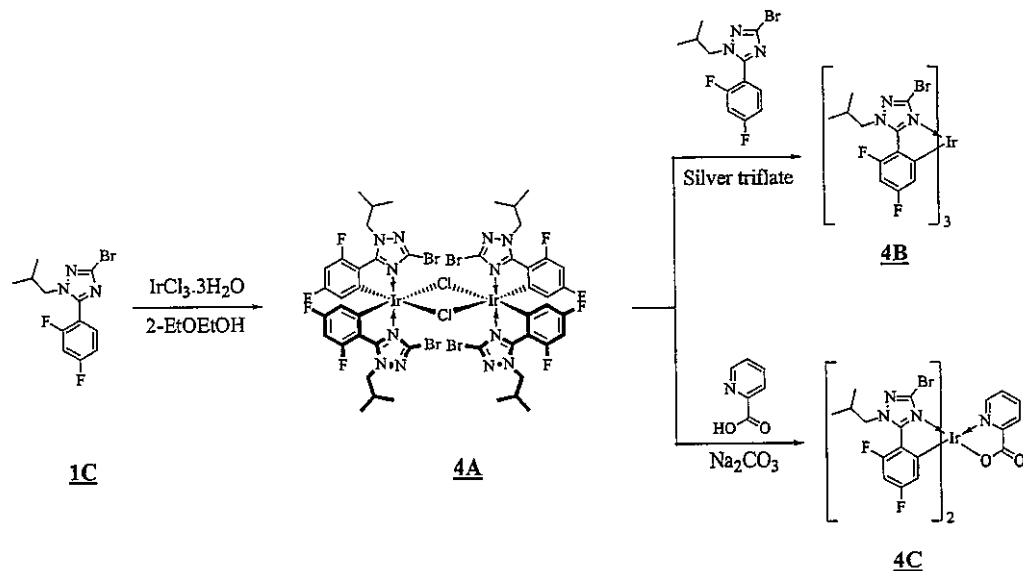
配位子の金属錯体は特にInorganic Chemistry (1994), 33(3), 545-50に記載通りの標

50

準合成技法によって製造できる。下記のスキーム 4 に示された手順においては、過剰のフェニルtriaゾール配位子 1 C をプロトン性溶媒の中で塩化イリジウムと反応させる。反応混合物から二量体錯体 4 A を単離し、そして銀トリフルオロメタンスルホネートの存在下で更なるフェニルtriaゾール配位子 1 C と反応させてシクロメタル化イリジウム錯体 4 B を生じる。代わりに、二量体錯体 4 A を異なる共配位子と反応させ、4 C のようなヘテロレプティック錯体を生じてよい。

【0111】

【化27】

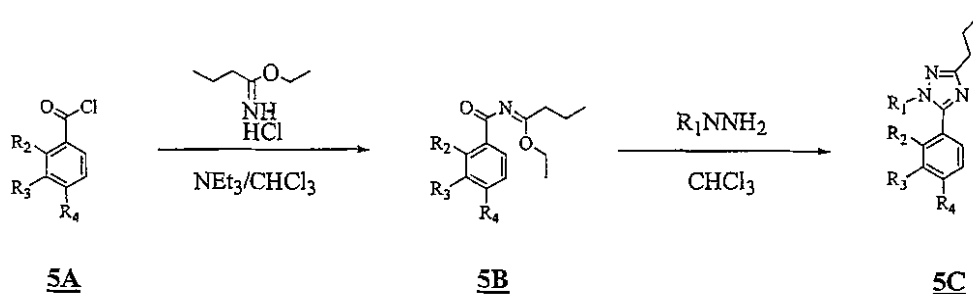


【0112】

スキーム 5 は triaゾール環を含む triaゾール系配位子の製造に至る代替のそしてより好ましい手法を示す。

【0113】

【化28】



【0114】

スキーム 6 はシクロメタル化イリジウム錯体 6 B ~ 6 D に至る一般合成手法を示している。

【0115】

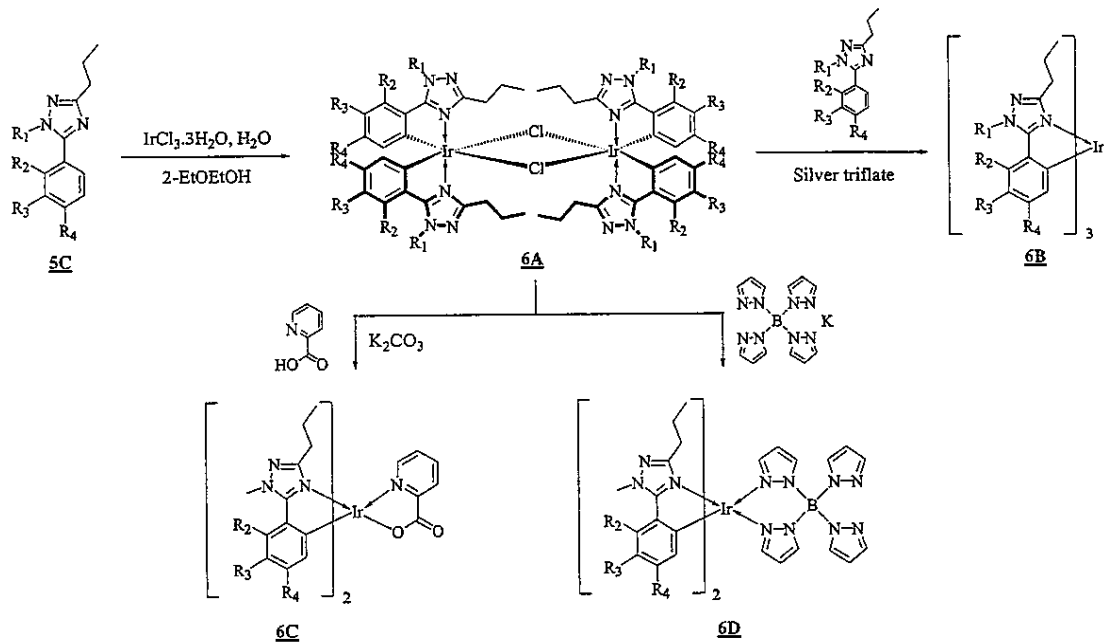
10

20

30

40

【化 29】



スキーム 6

【0116】

本発明のシクロメタル化錯体がデンドロンを含む場合には、金属による配位子の錯体化に先立って配位子の上にそれらを置換させてもよいし又は代わりにシクロメタル化錯体をまず形成しそしてデンドロンをシクロメタル化コアの上に置換させてもよい。

【0117】

本発明のシクロメタル化錯体は有機オプトエレクトロニクス素子への応用を有する。有機オプトエレクトロニクス素子には、エレクトロルミネッセンス、フォトルミネッセンス、蛍光および光導電性の有機デバイスおよび有機トランジスターが挙げられる。光導電性有機デバイスには、光起電力素子、フォトダイオードおよびフォトセンサーが挙げられる。特に、本発明のシクロメタル化錯体は有機発光ダイオードへの応用を有する。

【0118】

有機発光ダイオードは、基板の上に位置している下方電極と、有機発光材料の一層または複数層と、上方電極を含んでいる積層構造を成す。素子の電極間に電圧をかけたときに、反対電荷の担体すなわち電子と正孔が有機発光材料の中に注入される。電子と正孔は有機発光材料の層の中で再結合して、励起状態（または励起子）を形成し、放射的に（発光をもって）又は非放射的に減衰することができる。蛍光性有機発光体の場合には、放射的励起状態は一重項励起子であり、燐光性有機発光体の場合には、放射的励起状態は三重項励起子である。本発明のシクロメタル化錯体は燐光性有機発光体であり、そして特に、イリジウムと白金を含む本発明のシクロメタル化錯体は高度に効率的な燐光発光体を形成する。

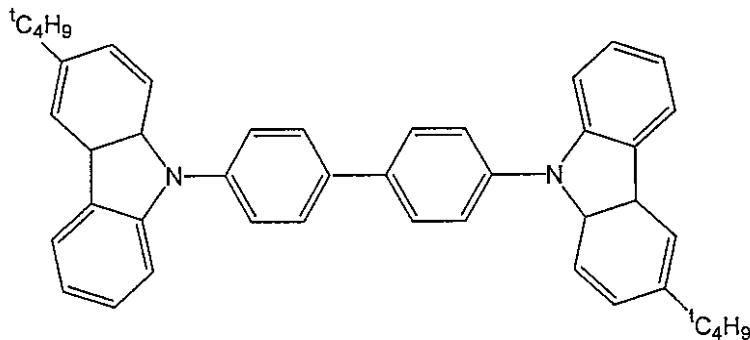
【0119】

有機燐光発光素子の有機発光層は一般に、本発明のシクロメタル化錯体のような有機燐光発光体と有機ホストを含んでいる。有機ホストは電荷を燐光発光体へ輸送するように作用し且つ三重項源としても作用しそれによって三重項励起状態が有機ホストの中に形成され次いで燐光発光体へ移送されそこでそれらが発光をもって減衰する。燐光発光システムの中に使用される従来技術の有機ホストはカルバゾール、たとえば、PVKとして知られているポリビニルカルバゾール、CBPとして知られている4,4'-ビス（カルバゾール-9-イル）ビフェニル）、mCPとして知られているN,N-ジカルバゾリル-3,5-ベンゼン、UGH1およびUGH2としてそれぞれ知られてそしてHolmes et al. (Appl. Phys. Lett., 83, No. 18, 2003, 3818)に記載されているジフェニルジ（オトリ

ル) シランまたは p-ビス (トリフェニルシリル) ベンゼン、および T C T A として知られている (4, 4', 4''-トリス (カルバゾール-9-イル) トリフェニルアミン) を包含し、かかるホストは Ikai et al. (Appl. Phys. Lett., 79, No. 2, 2001, 156) に記載されている。一つの特に適するホスト材料はジ (tert-ブチル) C B P であり、それは下記構造を有する:

【0120】

【化30】



10

【0121】

トリアリールアミン特にトリス-4-(N-3-メチルフェニル-N-フェニル) フェニルアミン (MTDA TA として知られている) もホスト材料として使用されてもよい。蛍光発光体およびホストが両方とも可溶性である場合には、それらはブレンドとして、スピンコーティング、ドクターブレードコーティング、スクリーンプリンティングまたはインクジェットプリンティングのような溶液加工技法によって堆積させられてもよい。蛍光発光体およびホストが不溶性でかつ揮発性である場合には、それらは真空蒸着によって堆積させられてもよい。蛍光発光体とホストは好ましくはブレンドで存在し、5~50モル%の蛍光発光体、好ましくは10~30モル%の蛍光発光体、を含む。テトラアリールシランホストが好ましく、テトラアリールシラン U G H 1 および U G H 2 が特に好ましい。青色の光を発する本発明のシクロメタル化錯体のためのホストとしては広いバンドギャップのホストたとえばテトラアリールシランが特に好ましい。

20

30

【0122】

別々の発光体とホストを含んでいる有機蛍光発光素子は先行技術において周知である。より最近では、蛍光発光体とホストを単一の分子、 dendrimer またはポリマーの中に組み合わせることが有利であることが判明し、かかるシステムの例は G B 0 2 0 6 3 5 6 . 8 の中に開示されている。かかるシステムの利点は素子の改善された膜安定性 (相分離なし)、改善された電気化学的安定性、および改善された製造適性、特に改善された溶液加工性、および改善された発光が挙げられる。先に論じた通り、本発明のシクロメタル化錯体においては、ホスト成分は置換基としてアリールまたはヘテロアリール環 A および/または B に直接、導入されることができ、それは、環 A および/または B に結合した dendron の中にホスト成分を組み入れることによって又は本発明のシクロメタル化錯体のモノマーとホスト成分を組み込んだモノマーとを含んでいる copolymer を形成することによって行うことができる。

40

【0123】

本発明の発光素子の有機発光層はさらに希釈化合物を含んでもよい。特に、ポリメチルメタクリレート (PMMA) が本発明のシクロメタル化錯体およびホスト材料と混合されてもよい。場合によって存在してもよいこの PMMA は発光層の中のホストおよびドープ材料の濃度を、より高い濃度において起こり得るクエンチング効果 (quenching effects) を防ぐために、希釈するのに使用される。PMMA は電荷輸送材料ではないので、使用される量は、クエンチングを最小にすることと発光層における良好な伝導性を維持することとの間の釣り合いである。発光層の中の PMMA の好ましいレベルは 0~90 重量%

50

、より好ましくは30～80%、より好ましくは50～80%、最も好ましくは50～75%、である。

【0124】

量子効率を増大させることに加えて、PMMAは成膜を改善するのに寄与するかも知れない。

【0125】

発光性有機層は好ましくは5～200nmの厚さ、より好ましくは10～60nm、最も好ましくは20～50nmの厚さを有する。燐光発光体とホストを組み入れた発光層は正孔輸送材料をも含有していてもよく、その例を以下に論じる。

【0126】

有機発光素子の電極の一方、陽極(anode)、は、有機発光材料の層の中に正孔を注入するのに適する高い仕事関数の材料を含んでおり、この材料は代表的には4.3eVより大きい仕事関数を有し、そしてインジウム－錫酸化物(indium-tin oxide) (ITO)、酸化錫、アルミニウムまたはインジウムをドーブした酸化亜鉛、マグネシウム－インジウム酸化物、カドミウム－錫酸化物、金、銀、ニッケル、パラジウムおよび白金を含む群から選ばれてもよい。陽極材料は妥当なときにはスパッタリングまたは蒸着によって堆積させられる。薄層たとえば酸化ケイ素の薄層を陽極の表面上に、特にITOの上に、組み込むことは、WO02/093662に示されているように、有機発光素子の性能を改善することができる。

【0127】

他方の電極、陰極(cathode)、は、有機発光材料の層の中に電子を注入するのに適する低い仕事関数の材料を含んでいる。低い仕事関数の材料は代表的には、3.5eV未満の仕事関数を有し、そしてLi、Na、K、Rb、Be、Mg、Ca、Sr、Ba、Yb、SmおよびAlを包含する群から選ばれてもよい。陰極は、かかる金属の合金またはかかる金属と他の金属との組合せにおける合金たとえば合金MgAgおよびLiAlを含んでもよい。陰極は好ましくは、多層、たとえば、Ca/Al、Ba/AlまたはLiAl/Al、を構成する。素子はさらに、WO97/42666に開示されているような、陰極と発光層の間に誘電体材料の層を含んでいてもよい。特に、陰極と発光材料の間の誘電体層としてアルカリ金属フッ化物またはアルカリ土類金属フッ化物を使用することが好ましい。特に好ましい陰極はLiF/Alを構成し、LiFの層は1～10nmの厚さを有し、そしてAlの層は10～500nmの厚さを有する。陰極材料は真空蒸着法によって堆積させられる。

【0128】

素子から発光が現われるためには、陰極、陽極のどちらか又はその両方が透明または半透明であることが好ましい。透明陽極に適する材料は、ITOと、白金のような金属の薄層、を包含する。透明陰極に適する材料は、有機発光材料の層に隣接した電子注入材料の薄層と、この電子注入材料の層の上の透明な伝導性材料のより厚い層、を包含する；たとえば、Ca/Auを構成する陰極構造。陰極も陽極も透明または半透明でない場合には、発光は素子の縁端を通して現われる。

【0129】

有機発光素子は電荷注入および素子効率を改善するために陽極と陰極の間に更なる有機層を含有してもよい。特に、正孔輸送材料の層を陽極の上に配置させてもよい。正孔輸送材料は素子を通しての電荷伝導を増大させるのに役立つ。この技術分野で使用される好ましい正孔輸送材料は伝導性有機ポリマーたとえばWO98/05187に開示されているようなポリスチレンスルホン酸をドーブしたポリエチレンジオキシチオフェン(PEDOT-PPS)である。他の正孔輸送材料たとえばドーブドポリアニリン、TPD(N,N'-ジフェニル-N,N'-ビス(3-メチルフェニル)[1,1'-ビフェニル]-4,4'-ジアミン)、NPD(4,4'-ビス[N-ナフチル-N-フェニル-アミノ]ビフェニル)およびMIDATAも使用されてもよい。シクロメタル化錯体との組合せで使用されたときに特に有利であることが明らかにされた正孔輸送層はポリマー化されたジビニ

ルー TPD を含んでいる。

【0130】

本発明のシクロメタル化錯体は正孔輸送成分を含んでもよい。正孔輸送機能をシクロメタル化錯体の中に組み込むことの利点は改善された膜安定性および改善された製造適性が挙げられる。正孔輸送基は、シクロメタル化錯体の中に直接に配位子上に置換基として、たとえば、デンドロンとして組み込まれてもよいし、又は本発明のシクロメタル化錯体を含むコポリマーの中にモノマーとして存在することによって組み込まれてもよい。本発明のシクロメタル化錯体はまた、電子輸送成分を含んでもよい。

【0131】

電子輸送／正孔遮断(hole blocking)材料の層が発光材料の層と陰極との間に置かれてもよく、これは素子効率を改善することが判明した。電子輸送／正孔遮断層に適する材料は2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン(BCP)、1,3,5-トリス(2-N-フェニルベンズイミダゾリル)ベンゼン(TPBI)および2-ビフェニル-5-(4'-tert-ブチルフェニル)オキサジアゾール(PBD)が挙げられる。発光層と陰極の間に電子輸送／正孔遮断層を設けることは素子効率と寿命の両方の意味で素子性能を有意に改善することが判明した。

【0132】

有機オプトエレクトロニクス素子の基板は素子に機械的安定性を付与しそして環境から素子を封止するバリヤとして作用するはずである。基板を通して光が素子に入る又は素子から出ることが必要とされる場合には、基板は透明または半透明であるべきである。ガラスはその優れたバリヤ特性と透明性のせいで基板として広く使用されている。他の適する基板はWO02/23579に開示されているようなセラミック、およびプラスチックたとえばアクリル樹脂、ポリカーボネート樹脂、ポリエステル樹脂、ポリエチレンテレフタレート樹脂および環式オレフィン樹脂が挙げられる。プラスチック基板はそれらが不浸透性を維持することを確実にするためにバリヤコーティングを必要とするかも知れない。基板はEP0949850に開示されているガラスとプラスチックの複合体のような複合材料を含んでもよい。

【0133】

環境保護のために、素子は封入される。封入(encapsulation)は低温フリット材料によって基板に結合されたガラスであるガラスシートの形態をとってもよい。素子を封入するのにガラスシートを使用する必要性を回避するために、素子の上に不動態化用材料(passivating material)の層を堆積させてもよい。適するバリヤ層はポリマー膜とセラミック膜とが交互に積層した積層構造を含み、そしてWO00/36665およびUS5,686,360に開示されているようなPECVDによって堆積させられてもよい。代わりに、素子を金属製の缶(can)の中に閉じ込めることによって封入してもよい。

【0134】

本発明の燐光発光性シクロメタル化錯体にとって好ましい素子構造は下記のものが挙げられる：

ガラス／ITO／PEDOT:PSS／CBP：発光体／TPBI／LiF／Al
 ガラス／ITO／ポリ(ビニル-TPD)／CBP：発光体／TPBI／LiF／Al
 ガラス／ITO／SiO／PEDOT:PSS／CBP：発光体／TPBI／LiF／Al
 ガラス／ITO／SiO／ポリ(ビニル-TPD)／CBP：発光体／TPBI／LiF／Al
 ガラス／ITO／PEDOT:PSS／PVK：発光体／TPBI／LiF／Al
 ガラス／ITO／ポリ(ビニル-TPD)／PVK：発光体／TPBI／LiF／Al
 ガラス／ITO／SiO／PEDOT:PSS／PVK：発光体／TPBI／LiF／Al
 ガラス／ITO／SiO／ポリ(ビニル-TPD)／PVK：発光体／TPBI／LiF／Al

【0135】

燐光発光体が、青色の光を発する本発明のシクロメタル化錯体を含む場合には、広いバンドギャップのホスト材料たとえばテトラアリアルシランを使用することが好ましい。

【0136】

最も好ましい態様においては、燐光発光体とホストは、小さな分子であってもよい分子、デンドリマーまたはポリマーの中において組み合わされている。

ガラス／ITO／PEDOT：PSS／組み合わされたホスト－発光体／TPBI／LiF／Al

ガラス／ITO／ポリ（ビニルーTPD）／組み合わされたホスト－発光体／TPBI／LiF／Al

ガラス／ITO／SiO／PEDOT：PSS／組み合わされたホスト－発光体／TPBI／LiF／Al

ガラス／ITO／SiO／ポリ（ビニルーTPD）／組み合わされたホスト－発光体／TPBI／LiF／Al

【0137】

有機オプトエレクトロニクス素子は当業者に知られているいずれの適する方法によって作製されてもよい。代表的には、基板はガラスシートを含むであろう、その上にはITOのような陽極材料の層がスパッタリングによって堆積させられてもよい。ITOまたはその他の陽極材料は必要ならばパターン化されてもよく、それは堆積中に加法(additive methods)たとえば印刷を使用するか又は堆積後に減法(subtractive methods)たとえばフォトリソグラフィーを使用するかどちらかによって行われてもよい。素子の有機層は蒸着によって堆積させられてもよく、これは低分子量の有機オプトエレクトロニクス材料を堆積させるのに特に適する方法である。

【0138】

有機オプトエレクトロニクス材料が可溶性である場合には、それらは溶液加工技法によって有利に堆積させられてもよい。溶液加工技法には、スクリーン印刷やインクジェット印刷のような堆積の選択的方法と、スピコートやドクターブレードコーティングのような非選択的方法が包含される。ホスト成分を組み込んだ本発明のシクロメタル化錯体は特に溶液加工に適している、何故ならば、かかる材料はブレンドの形態で存在しているのではなく従って堆積時に相分離しないからである。

【0139】

陰極およびいずれかの追加の誘電体層または電子輸送／正孔遮断層は蒸着によって堆積させられてもよい。有機オプトエレクトロニクス素子の中には、素子の電荷注入を改善またはパターン化を促進するのに妥当なときには補助的な層および特徴を含有させてもよい。

実施例

【実施例1】

【0140】

3, 5-ジブロモ-1-イソブチル-1H-[1, 2, 4]-トリアゾール（化合物1B）
3, 5-ジブロモ-1H-[1, 2, 4]トリアゾール（Zumbrunn, Synthesis, 1998, 1357）（1A）（440mg、1.94ミリモル）と、炭酸カリウム（483mg、3.49ミリモル）と、臭化イソブチル（0.4mL、3.49ミリモル）と、N, N-ジメチルホルムアミド（5mL）との混合物をアルゴン下で103℃で4時間加熱した。混合物を室温にまで冷却した。水（20mL）を加えそして混合物をエーテル（3×20mL）で抽出した。エーテル抽出物を合わせ、塩水(brine)（1×30mL）で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥し、濾過し、そして溶媒を完全に除去した後に淡黄色(pale yellow)油状物（548mg、100%）として1Bが残された；

【0141】

【表 1】

^1H (200 MHz; CDCl_3) 0.96 (6 H, J 6.6 Hz, CH_3), 2.28 (1 H, m, CH), 及び 3.94 (2 H, d, J 7.4 Hz, CH_2); m/z [APCl^+] 280, 282, 284 (M^+).

【実施例 2】

【0142】

3-ブロモ-1-イソブチル-5-(2', 4'-ジフルオロフェニル)-1H-[1, 2, 4]トリアゾール (化合物 1C)

1B (6.80 g, 24.0 ミリモル) と、2, 4-ジフルオロフェニルボロン酸 (6.07 g, 38.5 ミリモル) と、テトラキス(トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) (833 mg, 0.721 ミリモル) と、無水炭酸ナトリウム (2 M, 21 mL) と、エタノール (21 mL) と、トルエン (63 mL) との混合物を脱酸素しそしてアルゴン下で 103 °C で 19 時間加熱した。混合物を室温に冷却した。有機層を分離した。水性層をエーテル (3 × 30 mL) で抽出した。有機層とエーテル抽出物を合わせ、塩水 (1 × 50 mL) で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥し、そして濾過した。溶媒を完全に除去して 8.2 mg の黄白色 (light yellow) の油状物を生じた。油状物を、ジクロロメタン-軽質石油 (light petroleum) 混合物 (1 : 100 から 1 : 10 まで) を溶離剤として使用するシリカゲルでカラムクロマトグラフィーによって精製して、1C (900 mg, 12%) を生じた;

【0143】

【表 2】

^1H (200 MHz; CDCl_3) 0.80 (6 H, d, J 6.6 Hz, CH_3), 2.26 (1 H, m, CH), 3.84 (2 H, d, J 8.0 Hz, CH_2), 6.92-7.14 (2 H, m, ArH), 及び 7.45-7.60 (1 H, m, ArH).

【実施例 3】

【0144】

[BDFIB トリアゾール]₃ Ir (化合物 4B)

1C (470 mg, 1.49 ミリモル) と、塩化イリジウム 3 水和物 (131 mg, 0.371 ミリモル) と、水 (2.0 mL) と、2-エトキシエタノール (6.0 mL) との混合物を、アルゴン下で 130 °C で 13 時間加熱した後に冷却した。混合物から沈殿物を分離した。固体をエタノール (8 × 3 mL) および軽質石油 (5 × 8 mL) で洗浄し、そして乾燥して淡黄色固体としてジクロロ架橋二量体 (dichloro-bridged dimer) 4A (262 mg, 82%) を生じた;

【0145】

【表 3】

^1H (200 MHz; CDCl_3) 0.95-1.10 (24 H, m, CH_3), 2.20-2.43 (4 H, m, CH), 4.40-4.68 (8 H, m, CH_2), 5.74 (4 H, m, ArH), 及び 6.40 (4 H, m, ArH).

【0146】

イリジウム錯体 (4A) (180 mg, 0.210 ミリモル) と 1C (370 mg, 1.17 ミリモル) と銀トリフルオロメタンスルホネート (108 mg, 0.420 ミリモル) との混合物をアルゴン下で 156 ~ 160 °C で 38 時間加熱した。それから、反応物を室温に冷却した。混合物をジクロロメタン (~4 mL) の中に溶解し、そして溶離剤としてジクロロメタン-軽質石油混合物 (1 : 30 から 1 : 8 まで) を使用するシリカゲルでカラムクロマトグラフィーによって精製して淡黄色固体の 4B を異性体の混合物 (232 mg, 97%) として生じた;

【0147】

【表4】

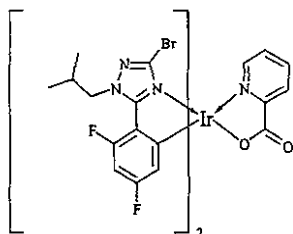
^1H (200 MHz; CDCl_3) 0.80-1.02 (18 H, m, CH_3),
2.10-2.31 (3 H, m, CH), 4.40 (6 H, m, CH_2), 6.05 (3 H, m, ArH), 及び 6.46 (3 H, m,
ArH); m/z [MALDI] 1133, 1135, 1136, 1137, 1138, 1139, 1140, 1141, 1142 (M^+).

【0148】

錯体4Bをクロロホルム中の9.5%溶液からスピンコーティングしたニート膜(neat film)のフォトルミネッセンススペクトルが図1に示されている。ニート膜は428 nm、450 nmおよび490 nmにピークを与える明瞭な振電構造(vibronic structure)をもつ非常に良好な青色発光を示す。

【0149】

【化31】



【実施例4】

【0150】

(IBBrF, Phトリアゾール), IrPic (上に示した化合物4C)

イリジウム錯体(4A)(28 mg、0.033ミリモル)と、ピコリン酸(12 mg、0.098ミリモル)と、炭酸ナトリウム(35 mg、0.284ミリモル)と、1,2-ジクロロエタン(2 mL)との混合物を Ar(g) 下で20時間加熱還流した。ジクロロメタン(3 mL)と水(2 mL)を加えた。有機層を分離しそして水性層をジクロロメタン(3×2 mL)で抽出した。有機部分を合わせそして塩水(1×5 mL)で洗浄し、そして溶媒を完全に除去した。残留物を、シリカゲル上で溶離剤として酢酸エチル-ジクロロメタン(0:1から2:1まで)を使用して精製して、黄色がかった固体4C(31 mg、100%)を生じた;

【0151】

【表5】

^1H (200 MHz; CDCl_3) 0.80-1.02

(12 H, m, Me), 2.13-2.38 (2 H, m, CH), 4.32-4.67 (4 H, m, CH_2), 5.79 (1 H, m, ArH),
6.10 (1 H, m, ArH), 6.49 (2 H, m, ArH), 7.41 (1 H, m, PyH), 7.72 (1 H, m, PyH), 7.93
(1 H, m, PyH), 及び 8.31 (1 H, m, PyH); m/z [APES $^+$] 942, 944, 946, 947, 948, 949
(MH^+).

【実施例5】

【0152】

3,5-ジブロモ-1-{3',5'-ジ[4''-(2''-エチルヘキシルオキシ)フェニル]ベンジル}-1H-[1,2,4]トリアゾール(スキーム3の化合物3A)

ジブロモトリアゾール1A(805 mg、3.55ミリモル)と、3,5-ジ[4'-(2''-エチルヘキシルオキシ)フェニル]ベンジルブロマイド(WO0159030に

10

20

30

40

50

開示されている通りに製造された) (2.67 g、4.61ミリモル)と、 K_2CO_3 (896 mg、6.48ミリモル)と、乾燥DMF (16 cm³)との混合物を脱酸素しそしてアルゴン下で98~108℃の浴温度で46時間加熱した。混合物を室温に冷却し、そして70 cm³の水の中に注いだ。混合物をエーテル (4×30 cm³)で抽出した。エーテル抽出物を合わせ、水 (2×40 cm³)および塩水 (1×40 cm³)で洗浄し、そして無水硫酸ナトリウムで乾燥した。溶媒を完全に除去して後に黄色油状物が残された。油状物を、溶離剤としてDCM-軽質石油 (0:1から1:10まで)を使用するシリカゲル上でのカラムクロマトグラフィーによって精製して、白色固体として1.82 g (71%)の3Aを生じた;

【0153】

【表6】

10

¹H(400

MHz; CDCl₃) 0.91-1.02 (12 H, m, 4 x Me), 1.32-1.63 (16 H, m, 8 x CH₂), 1.72-1.83

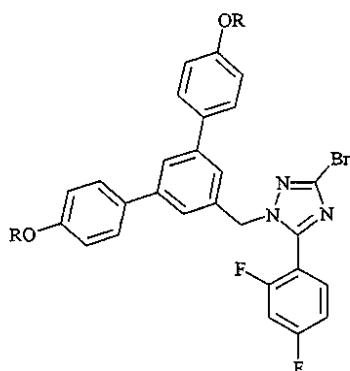
(2 H, m, 2 x CH), 3.91 (4 H, m, 2 x ArOCH₂), 5.42 (2H, s, ArCH₂), 7.01 (4 H, m, 4 x

ArCH), 7.42 (2 H, m, 2 x ArH), 7.54 (4 H, m, 4 x ArCH), 及び7.70 (1 H, m, ArH)

【0154】

【化32】

20



30

【実施例6】

【0155】

3-ブromo-1-{3',5'-ジ[4''-(2'''-エチルヘキシルオキシ)フェニル]ベンジル}-5-(2',4'-ジフルオロフェニル)-1H-[1,2,4]トリアゾール (上に示した化合物3B)

ジブromotリアゾール3A (375 mg、0.517ミリモル)と、2',4'-ジフルオロフェニルボロン酸 (146 mg、0.93ミリモル)と、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (42 mg、0.036ミリモル)と、2MのNa₂CO₃ (aq) (0.3 cm³)と、EtOH (0.3 cm³)と、トルエン (1.0 cm³)との混合物を、脱酸素しそしてアルゴン下で5日間 (110℃の浴温度で)加熱還流した。混合物を冷却した。混合物に水 (5 cm³)とエーテル (10 cm³)を加えた。有機層を分離した。水性層をエーテル (3×6 cm³)で抽出した。有機層とエーテル抽出物を合わせ、塩水 (1×19 cm³)で洗浄し、そして無水硫酸ナトリウムで乾燥した。溶媒を完全に除去した。残留物を、溶離剤としてDCM-軽質石油 (0:1から1:10まで)を使用するシリカゲル上でのカラムクロマトグラフィーによって精製して、無色油状物として187 mg (48%)の3Bを生じた;

【0156】

40

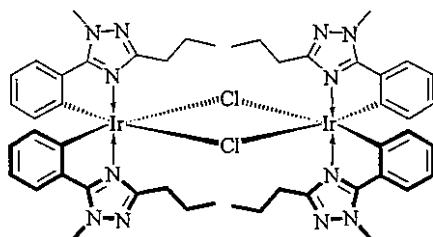
【表 7】

 ^1H (200 MHz; CDCl_3) 0.72-

1.04 (12 H, m, CH_3), 1.12-1.84 (18 H, m, CH_2 & CH), 3.89 (4 H, m, OCH_2), 5.37 (2 H, s, ArCH_2), 及び 6.80-7.62 (14 H, m, ArH).

【0157】

【化 33】



10

【実施例 7】

【0158】

(MePrPhトリアゾール) $_2$ IrCl (上に示した化合物 6A)

20

トリアゾール配位子 (MePrPhトリアゾール) (5C) (1.43 g、7.09 ミリモル) と、塩化イリジウム 3 水和物 (1.00 g、2.84 ミリモル) と、水 (14 mL) と、2-EtOEtOH (40 mL) との混合物を、 N_2 (g) 下で 13 時間加熱還流した。混合物を室温に冷却した。混合物に水 (48 mL) を加えて黄色固体を沈殿させた。固体を濾過しそして水で洗浄した。混合物を蒸発乾固して褐色がかった黄色固体の 6A が 1.50 g (84%) 得られた;

【0159】

【表 8】

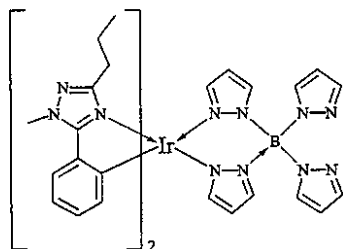
 ^1H (200

30

MHz; CDCl_3) 0.83 (12 H, m, Me), 1.51-1.98 (8 H, m, CH_2), 2.20-2.42 (4 H, m, CH_2), 2.71-2.94 (4 H, m, CH_2), 4.31 (12 H, s, Me), 6.21 (4 H, m, ArH), 6.66 (4 H, m, ArH), 6.80 (4 H, m, ArH), 及び 7.40 (4 H, m, ArH).

【0160】

【化 34】



40

【実施例 8】

【0161】

(MePrPhトリアゾール) $_2$ IrTPB (上に示した化合物 6D)

イリジウム錯体 (6A) (250 mg、0.398 ミリモル) と、テトラキス (1-ピラゾリル) ボレート (TPB) カリウム塩 (250 mg、0.786 ミリモル) と、ジク

50

ロロメタン（25 mL）との混合物を、 N_2 （g）下で室温で23時間攪拌した。溶媒を除去し、そして混合物を、溶離剤として酢酸エチル-軽質石油（1：10から1：3まで）を使用するシリカゲルクロマトグラフィーによって精製して、黄色粉末（6D）（206 mg、59%）を生じた；

【0162】

【表9】

1H (400 MHz; $CDCl_3$) 0.68 (6 H, m, Me), 1.21-1.28 (2 H, m, CH_2), 1.36-1.58 (6 H, m, CH_2), 4.23 (6 H, s, Me), 6.12 (4 H, m, PyrazolylH), 6.40, (2 H, d, 7.6 Hz, ArH), 6.45 (2 H, m, PyrazolylH), 6.71 (2 H, m, PyrazolylH), 6.88 (2 H, m, ArH), 7.00 (2 H, m, ArH), 7.20 (2 H, m, PyrazolylH), 7.53 (2 H, d, 7.6 Hz, ArH), 及び 7.68 (2 H, m, PyrazolylH).

10

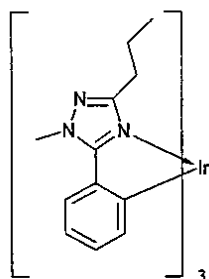
【0163】

6Dをクロロホルム中の溶液からスピンコーティングしたニート膜のフォトルミネッセンス量子収量(photoluminescence quantum yield)は1%であり、CIE座標 $x = 0.16$ 、 $y = 0.19$ を有する。

【0164】

【化35】

20



【実施例9】

【0165】

(MePrPhトリアゾール) $_3$ Ir（上に示した化合物6B）

イリジウム錯体（6A）（370 mg、0.589ミリモル）と、トリアゾール配位子（MePrPhトリアゾール）（5C）（710 mg、3.53ミリモル）と銀トリフレート(silver triflate)（303 mg、1.18ミリモル）との混合物を、 N_2 （g）下で170℃の油浴温度で19時間加熱した。混合物を室温に冷却しそして溶離剤として酢酸エチル-軽質石油（1：50から1：2まで）を使用してシリカゲル上で精製して黄色粉末の6B（450 mg、96%）を生じた；

【0166】

【表10】

30

40

1H (400 MHz; $CDCl_3$) 0.69 (9 H, t, 7.3 Hz, Me), 1.09-1.22 (3 H, m, CH_2), 1.30-1.44 (3 H, m, CH_2), 1.82-1.94 (3 H, m, CH_2), 2.14-2.26 (3 H, m, CH_2), 4.16 (9 H, s, Me), 6.61 (3 H, d, 7.5 Hz, ArH), 6.81 (3 H, m, ArH), 6.90 (3 H, m, ArH), 及び 7.52 (3 H, d, 7.7 Hz, ArH).

【0167】

6Bをクロロホルム中の溶液からスピンコーティングしたニート膜のフォトルミネッセンス量子収量は9%であり、CIE座標 $x = 0.21$ 、 $y = 0.30$ を有する。

50

【実施例 10】

【0168】

エレクトロルミネッセンス素子

ガラス基板／ITO／化合物 6 B (100 nm)／TPBI (40 nm)／LiF (5 nm)／Ca (20 nm)／Al (100 nm) の構造を有する有機エレクトロルミネッセンス素子を製造した。5 V の順バイアス (forward bias) 下で操作したときに、素子は CIE 座標 $x = 0.21$ 、 $y = 0.31$ を有する青色光を発光した。

【実施例 11】

【0169】

エレクトロルミネッセンス素子

ITO 陽極を担持するガラス基板の上にスピンコーティングによって PEDT/PSS (ポリエチレンジオキシチオフェン/ポリスチレンスルホネート、独国レーバークーゼン (Leverkusen) の H. C. Starck から入手可能) の層を堆積させた。PEDT/PSS の上に、ホスト材料ジ (t-ブチル) CBP と燐光化合物 6 B と場合によってはポリメチルメタクリレート (PMMA) とを含む燐光層を、それら燐光層成分の混合物をトルエン溶液からスピンコーティングすることによって、堆積させた。混合物中の化合物 6 B の量は 10 重量%であった。

【0170】

それから、燐光層の上に、第一層フッ化リチウムと第二層アルミニウムを含む陰極を真空蒸着によって堆積させた。燐光層の中の PMMA のレベルは様々であった。

【実施例 12】

【0171】

エレクトロルミネッセンス素子

PEDT/PSS の代わりに酸化ケイ素 (SiO₂) の層を使用して実施例 11 に従って素子を作製した。

【実施例 13】

【0172】

エレクトロルミネッセンス素子の発光特性

実施例 11 および 12 の素子を試験して CIE および量子効率 (quantum efficiency) について測定した。結果は下記の第 1 表に示されている。ジ (t-ブチル) CBP : PMMA : 6 B の比は重量比である。

【0173】

【表 1】

第1表

素子構造	CIE-x	CIE-y	QE Max (%)
PEDT:PSS / di ^t Bu-CBP:6B (9:1)	0.201	0.268	1.15
PEDT:PSS / di ^t Bu-CBP:PMMA:6B (9:9:2)	0.176	0.233	1.93
SiO ₂ / di ^t Bu-CBP:PMMA:6B (9:9:2)	0.176	0.284	1.26
PEDT:PSS / di ^t Bu-CBP:PMMA:6B (13:5:2)	0.186	0.245	1.62
SiO ₂ / di ^t Bu-CBP:PMMA:6B (13:5:2)	0.177	0.279	0.43
PEDT:PSS / di ^t Bu-CBP:PMMA:6B (5:13:2)	0.175	0.243	2.28
SiO ₂ / CBP2:PMMA:PBIA (5:13:2)	0.171	0.284	0.19

【実施例 14】

【0174】

エレクトロルミネッセンス層の真空蒸着

素子が下記構造を含む以外は実施例 11 のプロセスに従った：

ガラス／ITO／SiO／NPD（無くてもよい）／組み合わせられたホスト－発光体 6B／TPBI／LiF／Al

【0175】

正孔輸送性 NPD 層（存在する場合）および組み合わせられたホスト－発光体の層は両方とも真空蒸着によって形成された。使用されたホスト材料は CBP および MTDA TA であった。

【0176】

最良の結果（すなわち、ホスト材料からの発光が最小化されたとき）は NPD 層の存在と共に mTDA TA を使用して得られた。NPD の正孔輸送層と、mTDA TA：化合物 6B（9：1 比）のエレクトロルミネッセンス層とを有する素子は 0.44 % の最大量子効率、 $CIE-x0.175$ 、 $CIE-y0.232$ を与えた。

【0177】

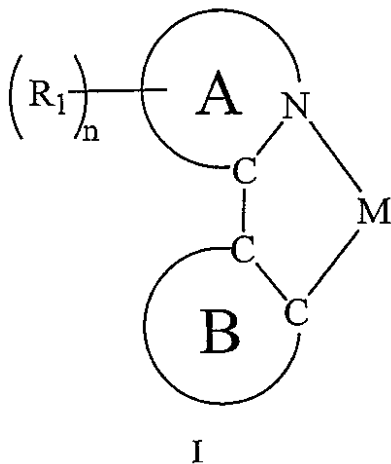
ここでの教示が本発明のその他の多数の態様と有効な代替を当業者に明らかにさせることは疑問の余地がない。本発明はここに記載の具体的態様に限定されるものではなく、当業者に明らかになるであろう変更態様をも包囲し、そして添付の特許請求の範囲の精神および範囲と共にある。

【0178】

なお、本発明の諸態様は、以下のように要約することができる。

[1]．式 I の構造を含むシクロメタル化錯体：

【化 36】



（式中、

M は d-ブロック遷移金属であり；

B は 5 員または 6 員のアリールまたはヘテロアリール環であり、それは場合によっては置換されていてもよく、そして場合によっては一つまたはそれ以上の別のアリールまたはヘテロアリール環に縮合していてもよい；

A は少なくとも 3 個の窒素原子を含む 5 員または 6 員のヘテロアリール環であり；

R_1 は水素以外の基であり；

n は 0 であるか又は 1 以上の整数であり；そして

A 及び B は、場合によっては縮合していてもよいし又は一つ若しくはそれ以上の共有結合によって結合していてもよい。）

[2]．A が 5 員環である、上記 [1] 項に記載のシクロメタル化錯体。

[3] . Aがトリアゾールおよびテトラゾールを含む群から選ばれる、上記[2]項に記載のシクロメタル化錯体。

[4] . Aが6員環である、上記[1]項に記載のシクロメタル化錯体。

[5] . Aがトリアジンである、上記[4]項に記載のシクロメタル化錯体。

[6] . Bが5員環である、上記[1]～[5]項のいずれか一項に記載のシクロメタル化錯体。

[7] . Bがチオフェン、フランおよびピロールを含む群から選ばれる、上記[6]項に記載のシクロメタル化錯体。

[8] . Bが6員環である、上記[1]～[5]項のいずれか一項に記載のシクロメタル化錯体。

10

[9] . Bがベンゼン、ピリジン、ピラジンおよびピリミジンを含む群から選ばれる、上記[8]項に記載のシクロメタル化錯体。

[10] . Mがイリジウム、ロジウム、パラジウム、白金、金、オスミウムおよびルテニウムを含む群から選ばれる、上記[1]～[9]項のいずれか一項に記載のシクロメタル化錯体。

[11] . Mがイリジウムおよび白金を含む群から選ばれる、上記[10]項に記載のシクロメタル化錯体。

[12] . 前記錯体がホモレプティックである、上記[1]～[11]項のいずれか一項に記載のシクロメタル化錯体。

[13] . 前記錯体がヘテロレプティックである、上記[1]～[11]項のいずれか一項に記載のシクロメタル化錯体。

20

[14] . 前記錯体が、ピコリネート、アセチルアセテート、ホスフィン、ピリジンおよびピリジン誘導体、カルボニル、ニトリル、イソニトリル、ハライドおよびテトラキス(1-ピラゾリル)ボレートを含む群から選ばれた配位子を更に含み、好ましくは、前記錯体が、ピコリネートおよびテトラキス(1-ピラゾリル)ボレートを含む群から選ばれた配位子を更に含む、上記[13]項に記載のシクロメタル化錯体。

[15] . R_1 が1個以上であり、そして少なくとも一つの R_1 基が電子供与基である、上記[1]項に記載のシクロメタル化錯体。

[16] . n が1より大きい、上記[15]項に記載のシクロメタル化錯体。

[17] . 前記電子供与基がアルキルアミノ、アリールアミノ、アルキル、アルコキシ、アリールおよびカルバゾール基を含む群から選ばれる、上記[15]または[16]項に記載のシクロメタル化錯体。

30

[18] . 前記環Bが少なくとも1個の電子吸引基によって置換されている、上記[1]～[17]項のいずれか一項に記載のシクロメタル化錯体。

[19] . 前記電子吸引基がハロゲン原子、ハロアルキル基、スルホキシドおよびスルホンを含む群から選ばれる、上記[18]項に記載のシクロメタル化錯体。

[20] . 前記電子吸引基がフッ素またはペルフッ素化 $C_{1\sim 6}$ ハロアルキル基から選ばれる、上記[19]項に記載のシクロメタル化錯体。

[21] . Aが、電子供与基である少なくとも1個の R_1 基によって置換されたトリアゾール基を含み、Bが、少なくとも1個のフッ素またはフッ素化基によって置換されたフェニル基を含み、そして前記d-ブロック遷移金属がイリジウムである、上記[1]～[3]項のいずれか一項に記載のシクロメタル化錯体。

40

[22] . 環Aが、デンドロンである少なくとも1個の R_1 基によって置換されている、上記[1]～[21]項のいずれか一項に記載のシクロメタル化錯体。

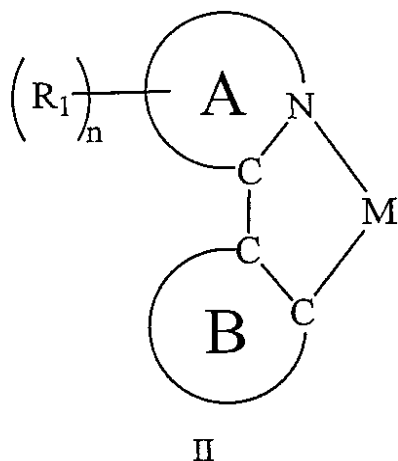
[23] . 環Bが少なくとも1個のデンドロンによって置換されている、上記[1]～[22]項のいずれか一項に記載のシクロメタル化錯体。

[24] . 前記デンドロンがカルバゾール部分またはトリアゾールアミン部分を含む、上記[22]または[23]項に記載のシクロメタル化錯体。

[25] . 前記デンドロンが1, 3, 5-置換フェニル部分を含む、上記[20]または[21]項に記載のシクロメタル化錯体。

50

〔26〕．式ⅠⅠの構造を含むシクロメタル化錯体：
【化37】



10

（式中、Mは、d-ブロック遷移金属であり、
Aは、少なくとも3個のヘテロ原子を含み、かつ、場合によって置換または縮合されていてもよい、5員または6員のヘテロアリール環であり、
Bは、場合によって置換または縮合されていてもよい、5員または6員のアリールまたはヘテロアリール環であり、
nは、1より大きく、そして
R₁は、デンドロンまたは可溶化基である。）

20

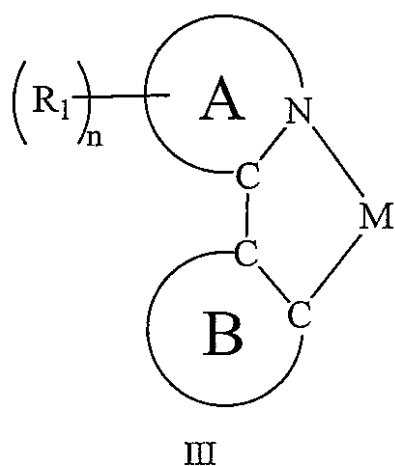
〔27〕．環AおよびB、置換基R₁および下付符号nが請求項2～23のいずれか一項に定義されている通りである、上記〔26〕項に記載のシクロメタル化錯体。

〔28〕．上記〔1〕～〔27〕項のいずれか一項に記載のシクロメタル化錯体を含むポリマー。

〔29〕．式ⅠⅠⅠの構造を含むシクロメタル化錯体を含むポリマー：

【化38】

30



40

（式中、Aは少なくとも3個のヘテロ原子を含みそして場合によって置換または縮合されていてもよい5員または6員のヘテロアリール環であり、
Bは場合によって置換または縮合されていてもよい5員または6員のアリールまたはヘテロアリール環であり、

50

nは0であるか又は1より大きく、そして
R₁は水素以外の置換基である。)

[30]．環AおよびB、置換基R₁および下付符号nが上記[2]～[25]項のいずれか一項に定義されている通りである、上記[29]項に記載のポリマー。

[31]．前記シクロメタル化錯体がポリマーの主鎖の中に組み込まれている、上記[28]～[30]項のいずれか一項に記載のポリマー。

[32]．前記シクロメタル化錯体がポリマーの主鎖にぶら下がっている、上記[28]～[30]項のいずれか一項に記載のポリマー。

[33]．前記ポリマーが更にカルバゾールまたはトリアリールアミン基を含む、上記[28]～[32]項のいずれか一項に記載のポリマー。

[34]．上記[1]～[27]項のいずれか一項に記載のシクロメタル化錯体を含むオプトエレクトロニクス素子。

[35]．上記[1]～[27]項のいずれか一項に記載のシクロメタル化錯体を含む有機発光素子。

[36]．前記シクロメタル化錯体と有機ホストのブレンドを含む、上記[35]項に記載の有機発光素子。

[37]．前記シクロメタル化錯体が有機ホストを含み、好ましくは前記有機ホストがカルバゾール部分またはトリアリールアミン部分を含む、上記[35]項に記載の有機発光素子。

[38]．前記有機ホストがカルバゾール部分またはトリアリールアミン部分を含む、上記[36]または[37]項に記載の有機発光素子。

[39]．上記[1]～[27]項のいずれか一項に記載のシクロメタル化錯体の、オプトエレクトロニクス素子での使用。

[40]．2つの電極の間に配置された燐光層を含む有機発光素子であって、0.25未満のCIE-y座標を有する有機発光素子。

[41]．前記素子が0.15～0.25の間のCIE-y座標を有する、上記[40]項に記載の有機発光素子。

[42]．前記燐光層が、上記[1]～[27]項のいずれか一項に規定された通りのシクロメタル化錯体または上記[28]～[33]項のいずれか一項に規定された通りのポリマーを含む、上記[35]～[38]項のいずれか一項、上記[40]または[41]項に記載の有機発光素子。

[43]．燐光層が有機ホスト材料を含む、上記[35]～[38]項のいずれか一項または上記[40]～[42]項のいずれか一項に記載の有機発光素子。

[44]．有機ホスト材料がジ(テブチル)CBPである、上記[43]項に記載の有機発光素子。

[45]．燐光層がさらに希釈化合物を含む、上記[43]または[44]項に記載の有機発光素子。

[46]．希釈化合物がポリメチルメタクリレート(PMMA)である、上記[46]項に記載の有機発光素子。

[47]．希釈化合物が30～80重量%の量で存在する、上記[45]または[46]項に記載の有機発光素子。

[48]．燐光層が組み込まれている有機発光素子の量子効率を増大させるための、燐光層の中でのポリメチルメタクリレートの使用。

[49]．燐光層の膜形成を改善するためのポリメチルメタクリレートの使用。

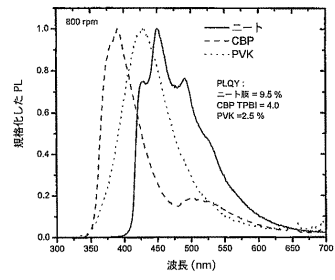
10

20

30

40

【図 1】



フロントページの続き

- (72)発明者 バーン、ポール、レスリー
イギリス国、オクスフォード、サウス パークス ロード、ザ ダイソン ペリンス ラボラトリー 気付
- (72)発明者 サムエル、イフォー、デビッド、ウィリアム
イギリス国、ファイフ、ユニバーシティ オブ セント アンドルーズ、スクール オブ フィジックス アンド アストロノミー 気付
- (72)発明者 ロー、シー ー チャン
イギリス国、オクスフォード、サウス パークス ロード、ザ ダイソン ペリンス ラボラトリー 気付

審査官 天野 宏樹

- (56)参考文献 Jonathan W. Slater, Jonathan P. Rourke, Cyclometalated nitrogen heterocycles, Journal of Organometallic Chemistry, NL, Elsevier B. V., 2003年10月16日, Vol.688, No.1-2, p.112-120

- (58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C07F15

C08G85

C08K5/56

C08L101

C09K11/06

H01L51/50

CA/REGISTRY (STN)

专利名称(译)	有机磷光材料和有机光电器件		
公开(公告)号	JP5572199B2	公开(公告)日	2014-08-13
申请号	JP2012244931	申请日	2012-11-06
[标]申请(专利权)人(译)	伊西斯井野湾化有限公司 圣安德鲁斯大学的大学学院		
申请(专利权)人(译)	伊西斯Inobeishon有限公司 圣安德鲁斯大学的大学学院		
当前申请(专利权)人(译)	伊西斯Inobeishon有限公司 圣安德鲁斯大学的大学学院		
[标]发明人	バーンポールレスリー サムエルイフォーデビッドウィリアム ローシーチャン		
发明人	バーン、ポール、レスリー サムエル、イフォー、デビッド、ウィリアム ロー、シー - チャン		
IPC分类号	H01L51/50 C07F15/00 C09K11/06 H01L51/00 H01L51/30 H05B33/14		
CPC分类号	H05B33/14 C07F15/0033 C09K11/06 H01L51/0037 H01L51/0062 H01L51/0085 H01L51/5016 Y10S428/917		
FI分类号	H05B33/14.B C07F15/00.E C09K11/06.660 C07F15/00.ECS.P		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC04 3K107/CC07 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD61 3K107/DD63 3K107/DD64 3K107/DD67 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/FF14 4H050/AA01 4H050/AB91 4H050/AB92 4H050/WB11 4H050/WB13 4H050/WB14 4H050/WB17 4H050/WB21 4H050/WB22		
优先权	2003011234 2003-05-16 GB		
其他公开文献	JP2013063988A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

要解决的问题：提供一种具有高效率并且可以用于适合于显示器的颜色范围的磷光化合物。溶剂：环化金属化配合物包括式 (I) 的结构 (其中 M是d-嵌段过渡金属; B是5至6元芳基或杂芳基环, 其任选地被取代并任选地与一个或多个其他芳基或杂芳基环稠合; A是包含至少3个氮的5至6元杂芳基环; R 1 是氢以外的基团; n是不小于0的整数;并且A和B任选地通过一个或多个共价键耦合或连接)。该复合物用于光电器件中, 特别是用于有机发光器件中。

(a) 式 I の構造 【化 1 】

