

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2012-517492

(P2012-517492A)

(43) 公表日 平成24年8月2日(2012.8.2)

(51) Int.Cl.

C09K 11/06 (2006.01)
C07F 15/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

F 1

C09K 11/06
C07F 15/00
H05B 33/14

660

E

B

テーマコード(参考)

3K107
4H050

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 42 頁)

(21) 出願番号 特願2011-548719 (P2011-548719)
(86) (22) 出願日 平成22年2月8日 (2010.2.8)
(85) 翻訳文提出日 平成23年10月5日 (2011.10.5)
(86) 國際出願番号 PCT/EP2010/051508
(87) 國際公開番号 WO2010/089394
(87) 國際公開日 平成22年8月12日 (2010.8.12)
(31) 優先権主張番号 PCT/KR2009/000590
(32) 優先日 平成21年2月6日 (2009.2.6)
(33) 優先権主張國 韓国(KR)

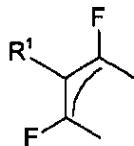
(71) 出願人 591001248
ソルヴェイ (ソシエテ アノニム)
ベルギー・B-1120・ブリュッセル・
リュ・ドゥ・ランスペーク・310
(74) 代理人 100108453
弁理士 村山 靖彦
(74) 代理人 100110364
弁理士 実広 信哉
(72) 発明者 モハンマド・カジャ・ナゼルディン
スイス・CH-1024・エキュプラン・
シュマン・ドゥ・モンタネ・10
(72) 発明者 エティエンヌ・ダヴィッド・バラノフ
スイス・CH-1020・ヴォー・ルナン
・シュマン・ドゥ・リオンザ・19

最終頁に続く

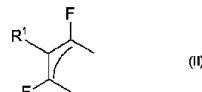
(54) 【発明の名称】OLEDの発光層中のホストドーパントとして使用される発光材料

(57) 【要約】

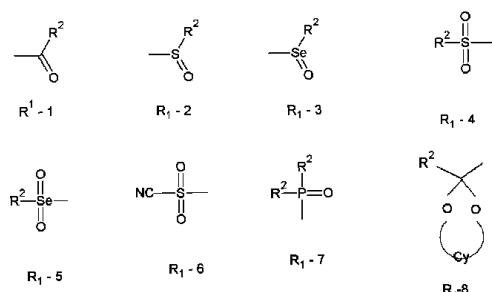
式(I) $(L^1)_x \cdot M \cdot (L^2)_y$ (I) (式)
中、 L^1 が、構造要素(II)



(II)



を環系中に含むモノアニオン性二座炭素配位性配位子で
あり、 R_1 は、 $R_1-1 \sim R_1-8$



【特許請求の範囲】

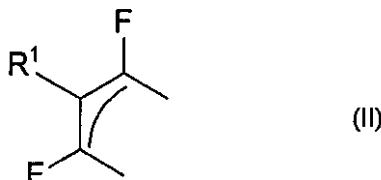
【請求項 1】

式 I

$$(L^1)_x \cdot M \cdot (L^2)_y \quad (I)$$

(式中、 L^1 は、構造要素)

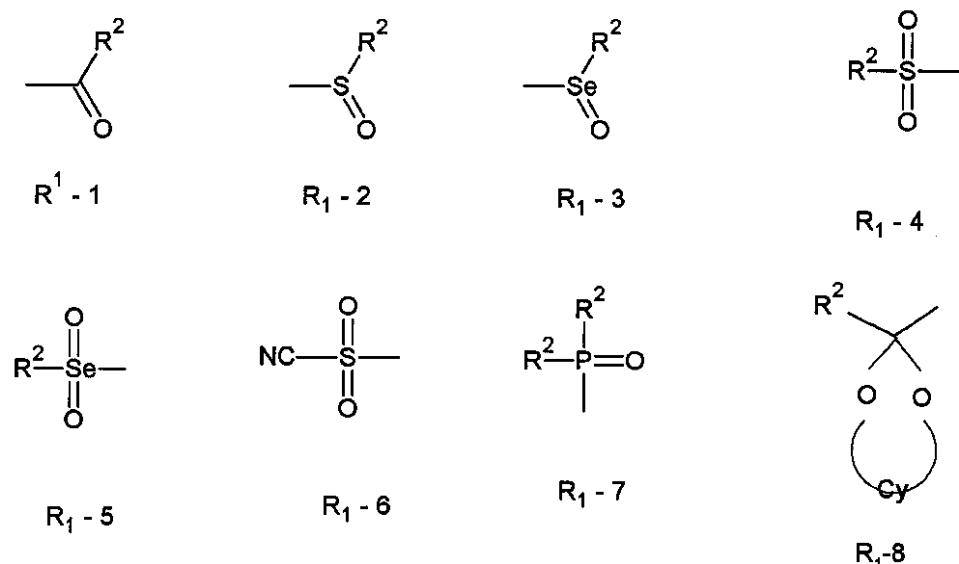
【化 1】



10

を環系中に含むモノアニオン性二座炭素配位性配位子であり、式中、 R^1 は、 $R_1 - 1$ ~ $R_1 - 8$

【化 2】



20

30

からなる群から選択される置換基であり、

式中、 R^2 は、1 ~ 20 個の炭素原子を有する、置換された直鎖状、分枝状、または環状のアルキル鎖、あるいは1 ~ 20 個の炭素原子を有する、場合により置換されたアルコキシ基を表し、

C_y は、1 ~ 20 個の炭素原子を有する、場合により置換された直鎖状、分枝状、または環状のアルキル鎖またはアルコキシ鎖からなる群から選択される置換基によって部分的または完全に置換されていてよい、4 ~ 7 品の炭素環式環または複素環式環を表し、

L^2 は、非モノアニオン性、非二座、または非炭素配位性の配位子であり、

M は、原子番号が少なくとも 40 である遷移金属を表し、

x は 1 ~ 3 の整数であり、 y は 0、1、または 2 である)

の錯体を含む発光材料。

【請求項 2】

前記遷移金属が Re、Os、Ir、Pt、Au、Ru、Rh、Pd、および Cu からなる群から選択される、請求項 1 に記載の発光材料。

【請求項 3】

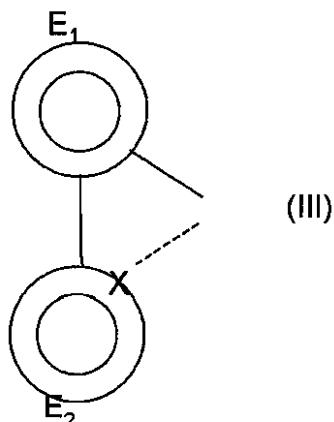
前記遷移金属が Ir または Pt である、請求項 1 に記載の発光材料。

【請求項 4】

L^1 が式 I I I

40

【化3】



10

(式中：

E_1 は、5または6員の炭素環式環または複素環式環、好ましくは芳香環または複素環式芳香環を形成するために必要な非金属原子基を表し、場合によりさらなる芳香族部分または非芳香族環と縮合し、前記環は場合により1つ以上の置換基を有し、場合により、 E_2 を含む環と縮合構造を形成し、前記環 E_1 は、 $s p^2$ 混成炭素を介して金属Mに配位し、前記環 E_1 は、前述の定義の前記構造要素(II)を含み；

E_2 は、5または6員の複素環式環、好ましくは複素環式芳香環を形成するために必要な非金属原子基を表し、場合によりさらなる芳香族部分または非芳香族環と縮合し、前記環は場合により1つ以上の置換基を有し、場合により、 E_1 を含む環と縮合構造を形成し、前記環 E_2 は、 $s p^2$ 混成窒素を介して金属Mに配位し、

Xは、周期系のIVa族、Va族、またはVIa族から選択される配位原子を表す)で表される、請求項1～3のいずれか1項に記載の発光材料。

【請求項5】

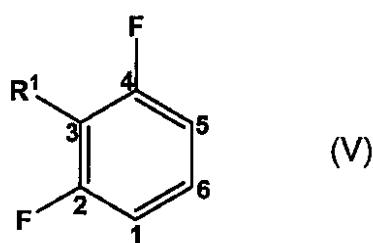
Xが、C、N、O、S、Se、Te、およびPからなる群から選択される、請求項4に記載の発光材料。

【請求項6】

E_1 が、式V

30

【化4】



(式中、重金属原子への結合および E_2 への結合は、互いに隣接する炭素原子によって行われる)

で表される2,4-ジフルオロ置換フェニル環である、請求項1～5のいずれか1項に記載の発光材料。

【請求項7】

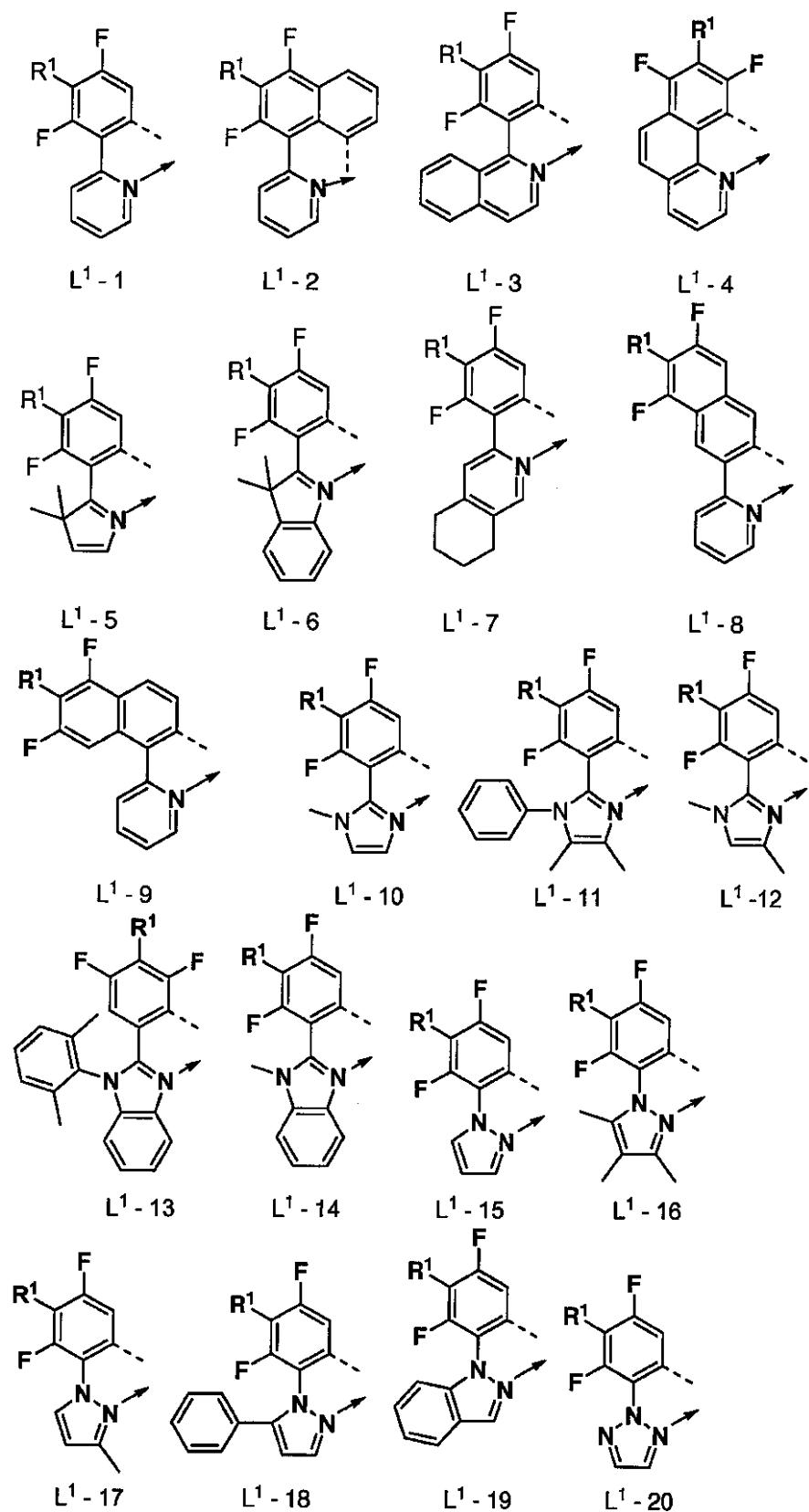
E_2 が、炭素原子2を介して環 E_1 に結合した、場合により置換されたピリジン環である、請求項6に記載の発光材料。

【請求項8】

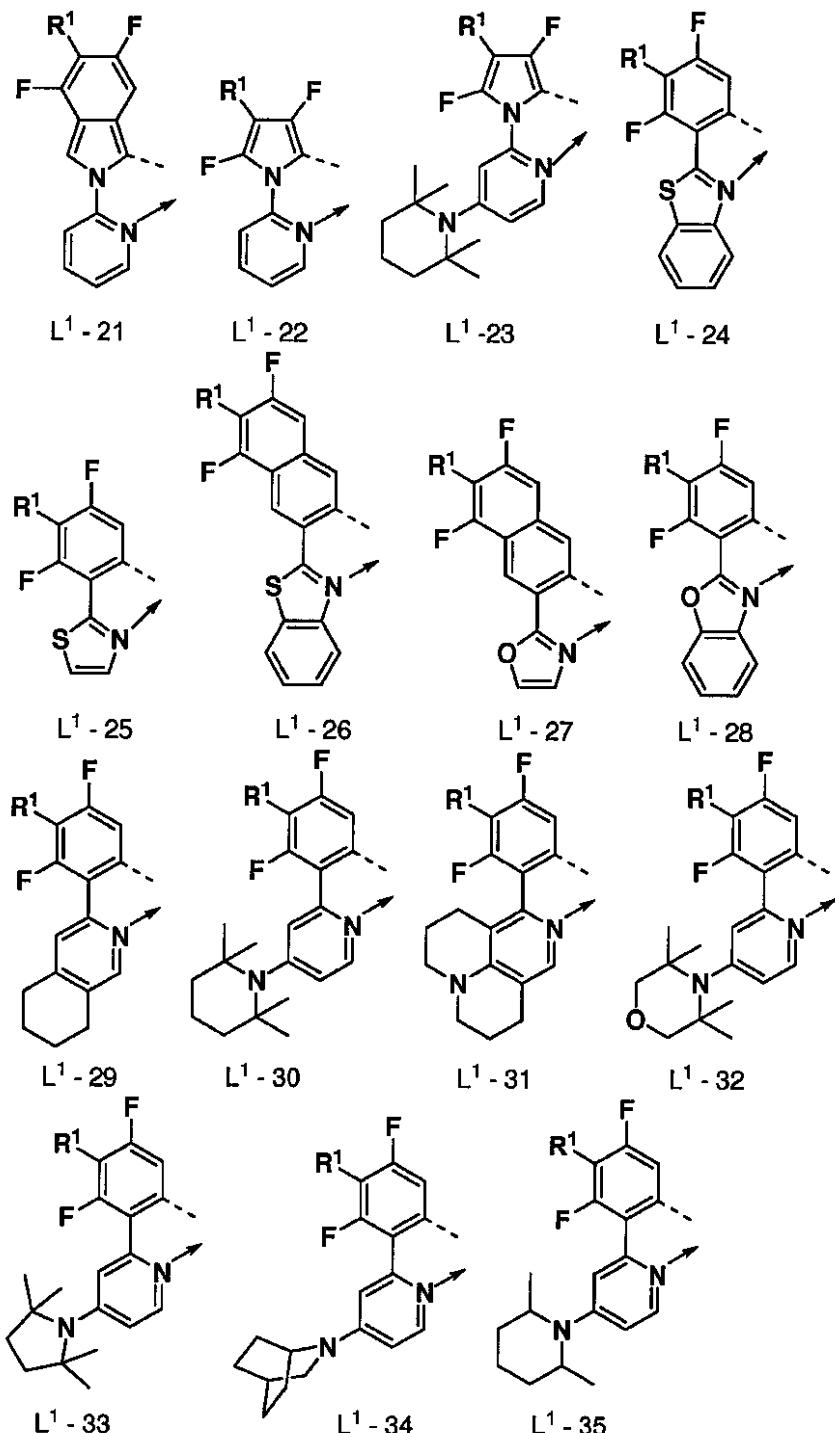
配位子 L^1 が、 $L^1 - 1 \sim L^1 - 35$

40

【化 5 A】



【化 5 B】



からなる化合物の群から選択される、請求項 1 ~ 4 および請求項 6 のいずれか 1 項に記載
の発光材料。

40

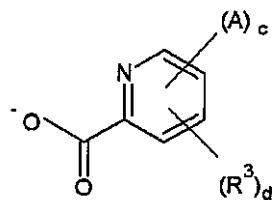
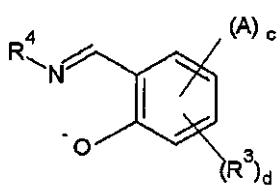
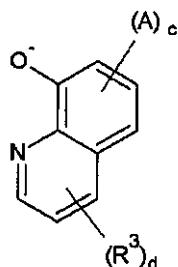
【請求項 9】

L^1 が、 $L^1 - 1$ 、および $L^1 - 29 \sim L^1 - 35$ からなる群から選択される、請求項
6 に記載の発光材料。

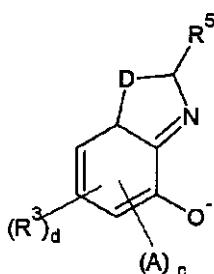
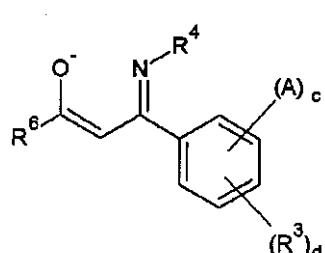
【請求項 10】

L^2 が、式 $L^2 - 1 \sim L^2 - 7$ 、 $U - 1 \sim U - 8$ 、 PL 、および $L^2 - 8 \sim L^2 - 27$

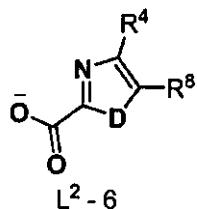
【化6】

L₂-1L₂-2L₂-3

10

L₂-4L₂-5

20

L₂-6L₂-7

30

(式中：

Aは、-C₁、-F、-Brなどのハロゲン；-OR₇；-SR₇；-N(R₇)₂；-P(OR₇)₂および-P(R₇)₂からなる群から選択される置換基であり；式中、R₇はC₁～C₆アルキル基、フルオロアルキル基、またはパーフルオロアルキル基、たとえば-C₁H₃、-nC₄H₉、-iC₃H₇、-CF₃、-C₂F₅、-C₃F₇、あるいは1つ以上のエーテル基を有するC₁～C₆アルキル、フルオロアルキル、またはパーフルオロアルキル、たとえば-CH₂-(CH₂-O-CH₂)_n-CH₃、-CH₂-[CH₂(CH₃)-O-CH₂]_n-CH₃、-(CF₂O)_n-C₂F₅であり、nは1～8の整数であり；好みしくはAは、-OR₇および-N(R₇)₂から選択され、R₇は前述の意味を有する。

Dは、-CHR⁸-、-CR⁸R⁸-、-CR⁸=CH-、-CR⁸=CR⁸-、N-H、N-R⁹、O、S、またはSeからなる群から選択される基であり；

R³、R⁵、R⁶は、出現するごとに互いに同じまたは異なるものであり、F、C₁、Br、NO₂、CN、1～20個の炭素原子を有する直鎖状または分枝状または環状のアルキル基またはアルコキシ基であって、そのそれぞれの中の1つ以上の非隣接-CH₂-基は、-O-、-S-、-NR⁹-、または-CONR¹⁰-で置換されていてもよく、そのそれぞれの中の1つ以上の水素原子はFで置換されていてもよいアルキル基またはアルコキシ基；あるいは、1つ以上の非芳香族基-R'によって置換されていてもよい4～14個の炭素原子を有するアリール基またはヘテロアリール基を表し；同じ環上または2つの異なる環上のいずれかの複数の置換基R'が一緒にになって、場合により芳香族であってよい単環式または多環式の環系をさらに形成することができ；

40

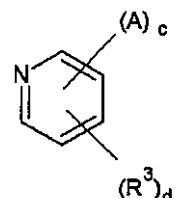
50

R^4 、 R^8 、 R^9 、および R^{10} は、出現するごとに互いに同じまたは異なるものであり、それぞれが、H、あるいは場合により置換された、1～20個の炭素原子を有する脂肪族または芳香族の炭化水素基であり；

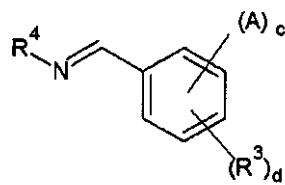
cは1～3の整数であり；

dは0～4の整数である）、または

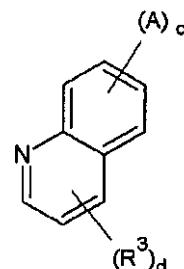
【化7】



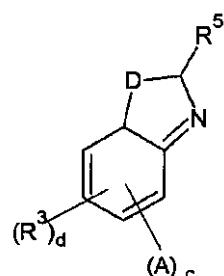
U-1



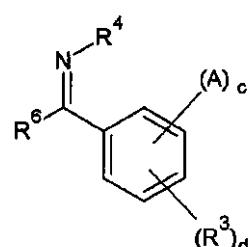
U-2



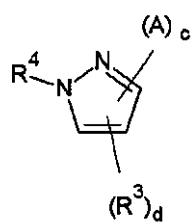
U-3



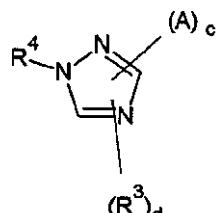
U-4



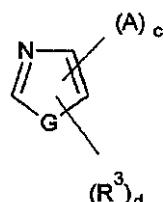
U-5



U-6



U-7



U-8

(式中、A、D、および R^3 ～ R^{10} は、配位子 L^2-1 ～ L^2-5 について前述の定義と同じ意味を有し；

Gは、 $-CH=CH-$ 、 $-CR^8=CH-$ 、 $-CR^8=CR^8-$ 、 $N-H$ 、 $N-R^9$ 、および $CR^8=N-$ からなる群から選択される基であり；

cは0～3の整数であり、

dは0～3の整数であり、 R^8 および R^9 は前述の定義と同じ意味を有する）、または

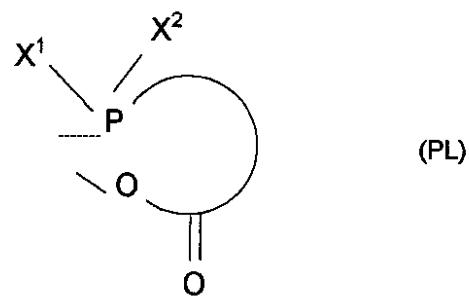
10

20

30

40

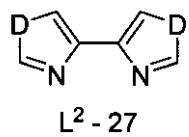
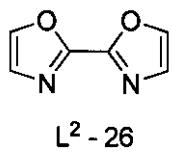
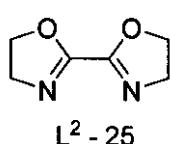
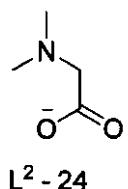
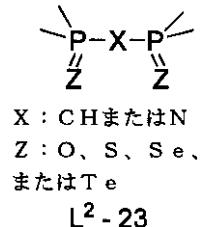
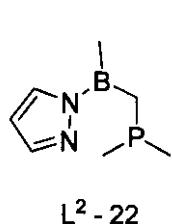
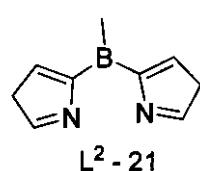
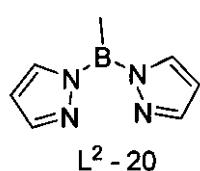
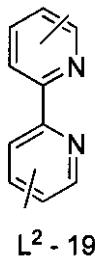
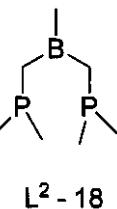
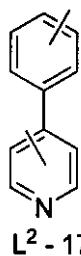
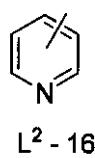
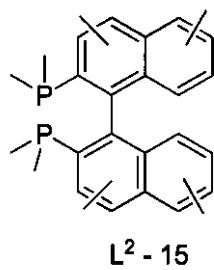
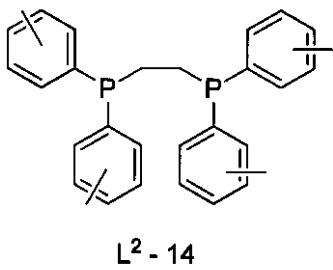
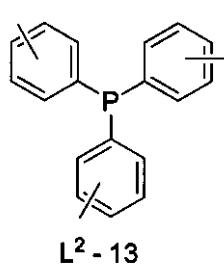
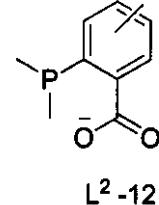
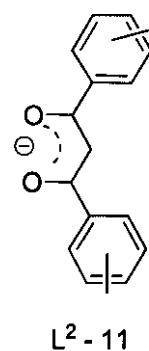
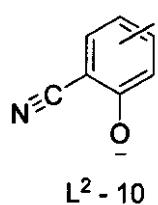
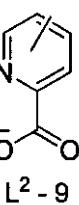
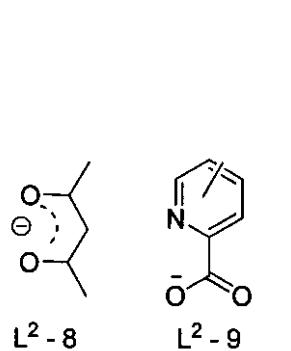
【化 8】



10

(式中、 X^1 および X^2 は、同じものまたは異なるものであり、1つ以上の置換基によって場合により置換されていてもよい $C_1 \sim C_8$ -アルキル、アリール、ヘテロアリールから選択される) または

【化 9】



20

30

40

50

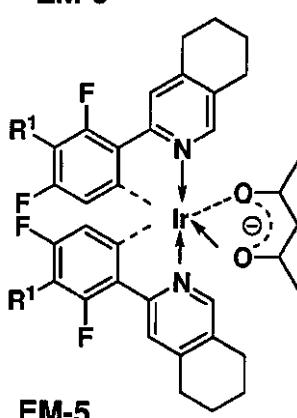
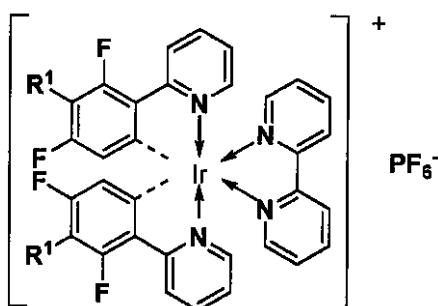
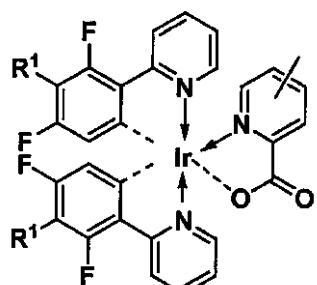
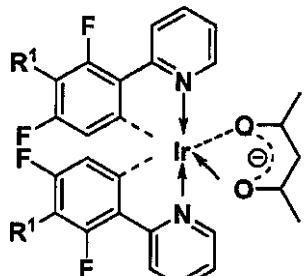
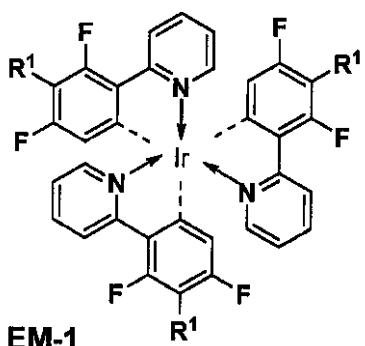
(構造 L² - 8 ~ L² - 27 中、結合記号によって示されるあらゆる置換基は、水素、ハロゲン、C₁ ~ C₈ - アルキル基、またはアリール基から独立して選択することができる)

の中の 1 つで表される、請求項 1 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の発光材料。

【請求項 11】

化合物 EM - 1 ~ EM - 5

【化 10】



10

20

30

40

50

(構造 EM - 1 ~ EM - 5 中、結合記号によって示されるあらゆる置換基は、水素、ハロゲン、C₁ ~ C₈ - アルキル基、またはアリール基から独立して選択することができる) からなる群から選択される、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の発光材料。

【請求項 12】

有機発光デバイスの発光層中における請求項 1 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の発光材料の使用。

【請求項 13】

有機発光デバイス中の発光層として機能するホスト層中のドーパントとしての請求項 1 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の発光材料の使用。

【請求項 14】

発光層を含む有機発光デバイス (OLED) であって、前記発光層が請求項 1 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の発光材料を含む、有機発光デバイス。

【発明の詳細な説明】**【技術分野】****【0001】**

本発明は、発光材料、上記材料の使用、および電気エネルギーを光に変換することができる発光デバイスに関する。

【背景技術】**【0002】**

有機発光デバイス(OLED)は、種々の用途の新しいディスプレイシステムの開発において重要な役割を有するとして最近関心が高まっている。

【0003】

OLEDは、有機材料からのエレクトロルミネッセンス(EL)に基づいている。

【0004】

フォトルミネッセンス、すなわち活性物質の光吸収の結果生じる発光および励起状態の放射崩壊による緩和とは対照的に、エレクトロルミネッセンスは、基体に電界を印加することにより生じる非熱的な発光である。この後者の場合、励起は、外部回路の存在下で有機半導体中に注入された符号が互いに逆の電荷キャリア(電子および正孔)の再結合によって生じる。

【0005】

有機発光ダイオード(OLED)の単純な原型の1つ、すなわち単層OLEDは、典型的には2つの電極の間に挟まれた活性有機材料の薄膜から構成され、電極の1つは、有機層からの発光を観察するために半透明である必要があり、通常はインジウムスズ酸化物(ITO)で被覆されたガラス基体がアノードとして使用される。

【0006】

外部電圧が2つの電極に印加される場合、使用される有機材料に依存する特定の閾値電圧を超えると、電荷キャリア、すなわちアノードにおける正孔およびカソードにおける電子が有機層に注入される。電界の存在下では、電荷キャリアは活性層を介して移動し、反対側に帶電した電極に到達したときに非放射的に放電する。しかし、有機層を移動するときに正孔と電子とが互いに衝突すると、励起一重項(反対称)および三重項(対称)状態、いわゆる励起子が形成される。このようにして、分子励起状態(または励起子)の崩壊によって有機材料中に光が発生する。OLED中の電気的励起によって3つの三重項励起子が形成されるごとに、わずか1つの反対称状態(一重項)励起子が発生する。

【0007】

多くの有機材料は、一重項励起子からの蛍光(すなわち対称許容過程からのルミネッセンス)を示し；この過程は類似の対称状態の間で発生するため、非常に効率的となりうる。一方、励起子の対称性が基底状態の対称性とは異なる場合には、励起子の放射緩和が許容されず、ルミネッセンスは遅く非効率的となる。基底状態は通常は反対称であるため、三重項の崩壊によって対称性が破れ；したがってこの過程は許容されず、ELの効率は非常に低くなる。したがって、三重項状態に含まれるエネルギーの大部分は無駄となり、理論的に達成可能な最大量子効率はわずか25%となる(量子効率は、正孔および電子が再結合してルミネッセンスを示す効率を意味する)。

【0008】

対称禁制過程によるルミネッセンスはリン光と呼ばれる。特徴としては、リン光は、遷移の確率が低いため励起後に最長数秒間持続することができ、遷移の確率が高いため急速に減衰する蛍光とは対照的である。

【0009】

リン光材料の利用が成功すれば、有機エレクトロルミネッセンスデバイスが非常に期待できるものになる。たとえば、リン光材料の利用の利点の1つは、(一部の)リン光デバイスでは三重項が主となっているが、すべての励起子(EL中の正孔と電子との結合によって形成される)が、エネルギー移動およびルミネッセンスに関与することができるからである。このことは、リン光発光自体によって実現可能であるか、あるいはリン光ホスト

10

20

30

40

50

または蛍光ゲスト中のドーパントとして蛍光過程の効率を改善するためにリン光材料を使用することによって、ホストの三重項状態からのリン光がホストの三重項状態からゲストの一重項状態へのエネルギー移動を可能にして、実現可能である。

【0010】

スピン軌道結合によって一重項 - 三重項混合が生じるため、多数の重金属錯体は、室温において三重項からの効率的なリン光を示し、このような錯体を含むOLEDは、75%を超える内部量子効率を有することが示されている。

【0011】

特に、ある有機金属イリジウム錯体は、強いリン光を示し、赤色および緑色スペクトラルで発光する効率的なOLEDがこれらの錯体を使用して作製されている。発光デバイスの性質を改善する手段の1つとして、オルトメタル化イリジウム錯体Ir(ppy)3(イリジウム(III)と2-フェニルピリジンとのトリス-オルトメタル化錯体)からの発光を利用する緑色発光デバイスが報告されており、たとえば(非特許文献1)を参照することができる。

10

【0012】

いずれの場合でも、発光材料によって、三原色の赤色、緑色、および青色の1つに対応する選択されたスペクトラル領域付近を中心とする比較的狭い帯域で、エレクトロルミネッセンス発光が得られることが重要であり、それによってOLED中の着色層として使用可能となる。

20

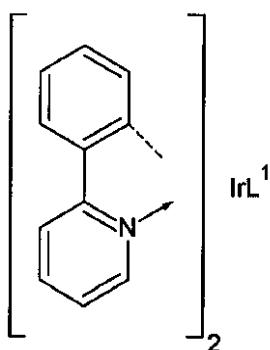
【0013】

(特許文献1)に対応する(特許文献2)には、2-フェニルピリジン(ppy)配位子を有するイリジウム(III)のビス-オルトメタル化錯体を含む有機発光材料、および上記の材料を含むデバイスが開示されている。

【0014】

これらの錯体の一般構造は

【化1】



30

(式中、L¹は、種々の構造を有することができる補助配位子である)
で表される。

【0015】

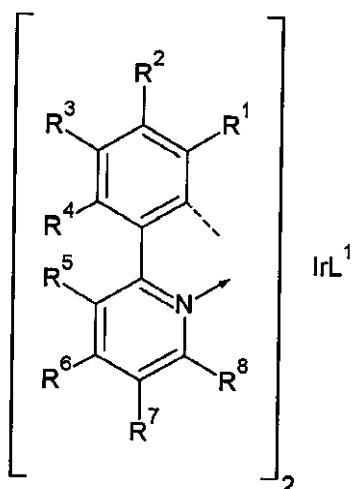
ppy配位子のフェニル環は、ピリジン環に結合する炭素原子に対してo位およびp位で置換することができ、特に2,4-ジフルオロ置換が上記参考文献の化合物2中に開示されており、上記参考文献の化合物3および4では、ピリジン環にさらなる置換基をそれぞれ有する錯体が示されている。

40

【0016】

(特許文献3)には、多種多様な置換基を以下の一般式

【化2】



10

20

30

40

50

中の R¹ ~ R⁸ に使用することができる新規なビス - オルトメタル化イリジウム ppy 錯体が開示されており、L¹ もさまざまな意味を有することができる。ppy 配位子の具体例としては、特に 2 - (4 - フルオロフェニル) - ピリジン、2 - (2, 4 - ジフルオロフェニル) - ピリジン、および 2 - (2, 3, 4 - トリフルオロフェニル) - ピリジン、および 2 - (2, 4 - ジフルオロフェニル) - 4 - ジメチルアミノ - ピリジンが挙げられている。フェニル環の 3 位には、フッ素以外の置換基は開示されていない。

【0017】

(特許文献 4) には、9 欄の式 7 中にビス - オルトメタル化 Ir (ppy) 錯体が開示されており、その ppy 配位子のフェニル環は、2 位および 4 位に 2 つのフッ素置換基を有し、3 位にシアノ基を有し、ピリジン環も場合により置換される場合がある。

【0018】

(特許文献 5) には、フッ素化されたフェニルピリジン類、フェニルピリミジン類、およびフェニルキノリン類を有するエレクトロルミネッセンスのイリジウム化合物が開示されている。この参考文献は、一般に、少なくとも 1 つのフッ素またはフッ素化基が配位子上に存在する少なくとも 2 つのフェニルピリジン配位子を有するイリジウム錯体に関する。フッ素含有置換基はピリジン環またはフェニル環のあらゆる位置に存在することができるが、記載されている好ましい例は、フェニル環の 4 位またはピリジン環の 4 位のいずれかで置換された ppy 配位子である。好ましいフッ素含有置換基は、フッ素、過フッ素化アルキル、または過フッ素化アルコキシである。

【0019】

(非特許文献 2) には、リン光有機発光デバイス中のイリジウム系発光材料の動作原理に関する情報が開示されており、配位子の構造に応じたこのような錯体の発光特性に関する情報が記載されている。シクロメタレート化配位子の性質の変化を利用して色調整が可能であると記載されている。

【0020】

(特許文献 6) には、種々の補助配位子を有するフェニル環中でフッ素原子が二置換したフェニルピリジン配位子を有するリン光 Ir 錯体、および補助配位子構造の発光波長に対する影響が開示されている。

【0021】

ルミネッセンス効率と安定性との許容される組み合わせを示す緑色および赤色の範囲において EL 発光を示す発光材料は開発されているが、青色範囲で発光する発光材料に関しては依然として改善が必要とされている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0022】

【特許文献1】米国特許出願公開第2004/091738号明細書

【特許文献2】米国特許第6,858,327号明細書

【特許文献3】米国特許第7,037,598号明細書

【特許文献4】米国特許出願公開第2004/0121184号明細書

【特許文献5】米国特許出願公開第2004/0188673号明細書

【特許文献6】国際公開第2002/15645号パンフレット

【非特許文献】

【0023】

【非特許文献1】Appl. phys. lett. 1999, vol. 75, p. 4

10

【非特許文献2】Int. J. Mol. Sci. 2008, 9, 1527 pp.

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0024】

したがって、本発明の目的の1つは、良好な安定性および十分なELルミネッセンスを示す発光材料を提供することである。本発明のさらに別の目的の1つは、青色範囲のスペクトル、特に440～500nmにおいて発光極大を有する発光材料を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【0025】

これらの目的は、請求項1に記載の発光材料を使用することで達成される。好ましい実施形態は、下位クレーム、および以下の詳細な説明に記載されている。

20

【0026】

本発明のさらなる目的は、前記発光材料を含む発光層、および前記発光材料を含む有機発光デバイスである。

【発明を実施するための形態】

【0027】

本発明による発光材料は、以下の一般式I

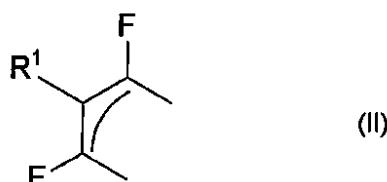
$$(L^1)_x - M - (L^2)_y \quad (I)$$

30

で表され、

式中、 L^1 は、構造要素

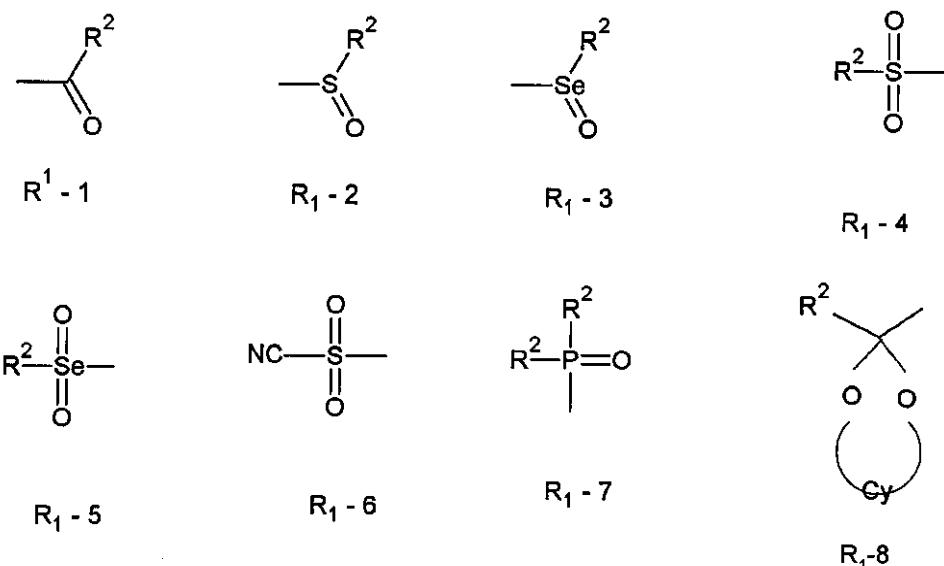
【化3】



を環系中に含むモノアニオン性二座炭素配位性配位子であり、式中、 R_1 は、R₁-1～R₁-8

40

【化4】



10

20

30

40

からなる群から選択される置換基であり、R²は、1～20個の炭素原子を有する置換された線状、分岐、または環状のアルキル鎖、あるいは1～20個の炭素原子を有する、場合により置換されたアルコキシ基を表し。

Cyは、1～20個の炭素原子を有する、場合により置換された線状、分岐、または環状のアルキル鎖またはアルコキシ鎖からなる群から選択される置換基によって部分的または完全に置換されていてよい4～7員の炭素環式環または複素環式環を表す。

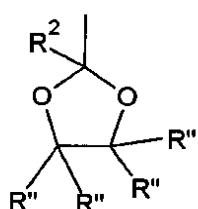
【0028】

R²は好ましくは、1～20個、好ましくは1～8個の炭素原子、特に好ましくは1～4個の炭素原子を有する部分または完全フッ素化アルキル基を表す。特に好ましい置換基R²は、トリフルオロメチル、ヘキサフルオロエチル、およびフッ素化プロパンの異性体である。

【0029】

置換基R₁-8の好ましい群の1つは、一般式

【化5】



で表される環状アセタール類であり、式中、それぞれのR'は、同じ場合も異なる場合もあり、個別に、他の置換基とは独立して、R²と同じ意味を有することができ、さらに、それぞれの非置換の基R²を表すことができる。

【0030】

式I中のL²は、非モノアニオン性、非二座、または非炭素配位性の配位子である。

【0031】

式I中のMは、原子番号が少なくとも40であり、好ましくは周期系の8族～12族である遷移金属を表している。好ましい遷移金属は、Re、Os、Ir、Pt、Au、Ru、Rh、Pd、およびCuであり、IrおよびPtが特に好ましい。

【0032】

式I中のxは1～3の整数であり、yは0、1、または2である。

【0033】

50

L^1 は、炭素 - 金属結合を介して金属が配位子に結合しているので炭素配位性配位子と記載され、配位子のわずか 1 つの炭素原子が金属に結合するためモノアニオン性と記載される。

【0034】

L^1 は二座配位子であり、すなわち金属原子に対する 2 つの結合点を有する。

【0035】

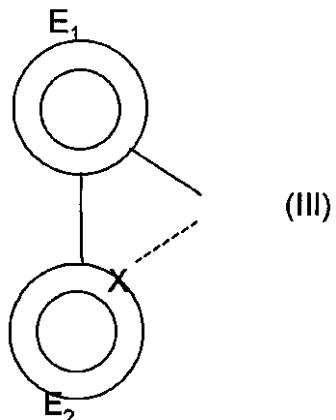
好みしい発光材料は、以下の詳細な説明に記載され、従属クレームにも記載されている。

【0036】

好みしい配位子 L^1 は、一般式 I II

10

【化6】



20

で表され、式中：

E_1 は、5 または 6 員の炭素環式環または複素環式環、好みしくは芳香環または複素環式芳香環を形成するために必要な非金属原子基を表し、場合によりさらなる芳香族部分または非芳香族環と縮合し、前記環は場合により 1 つ以上の置換基を有し、場合により、 E_2 を含む環と縮合構造を形成し、前記環 E_1 は、 $s p^2$ 混成炭素を介して金属 M に配位し、前記環 E_1 は、前述の定義の構造要素 (I II) を含み；

E_2 は、5 または 6 員の複素環式環、好みしくは複素環式芳香環を形成するために必要な非金属原子基を表し、場合によりさらなる芳香族部分または非芳香族環と縮合し、前記環は場合により 1 つ以上の置換基を有し、場合により、 E_1 を含む環と縮合構造を形成し、前記環 E_2 は、 $s p^2$ 混成窒素を介して金属 M に配位し、

30

X は、周期系の IV a 族、V a 族、または VI a 族から選択される配位原子を表す。

【0037】

好みしい配位原子 X は、C、N、O、S、Se、Te、およびP であり、C およびN が特に好みしい。

【0038】

式 I II 中の E_1 は、好みしくは、5 ~ 10 員、好みしくは 5 ~ 6 員の芳香環または複素環式芳香環、すなわちアリールまたはヘテロアリール基を表す。本明細書において使用される場合、アリール基は、典型的には、フェニルまたはナフチルなどの $C_6 \sim C_{10}$ アリール基であり、これらは 1 つ以上の置換基で置換されていてもよい。アリール基の意味には、前述のように定義されるアリール基がカルボシクリル基、ヘテロシクリル基、またはヘテロアリール基に縮合し、それ自体がさらに別の環系に縮合したり 1 つ以上の置換基を有したりすることができる縮合環基も含まれる。

40

【0039】

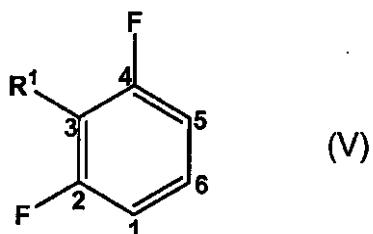
環 E_1 は、式 I II の構造要素を含み、すなわち、それぞれ炭素原子に結合する 2 つのフッ素置換基を有するジフルオロ置換要素であって、前記フッ素置換された炭素原子が、前述のように定義される置換基 R^1 を有する炭素原子によって分離されるジフルオロ置換要素を含む。

50

【0040】

好ましい一実施形態によると、 E_1 は、式V

【化7】



10

の2,4-ジフルオロ置換フェニル環であり、

式中、上記フェニル環は、互いに隣接する炭素原子を介して、遷移金属原子および E_2 に結合している。

【0041】

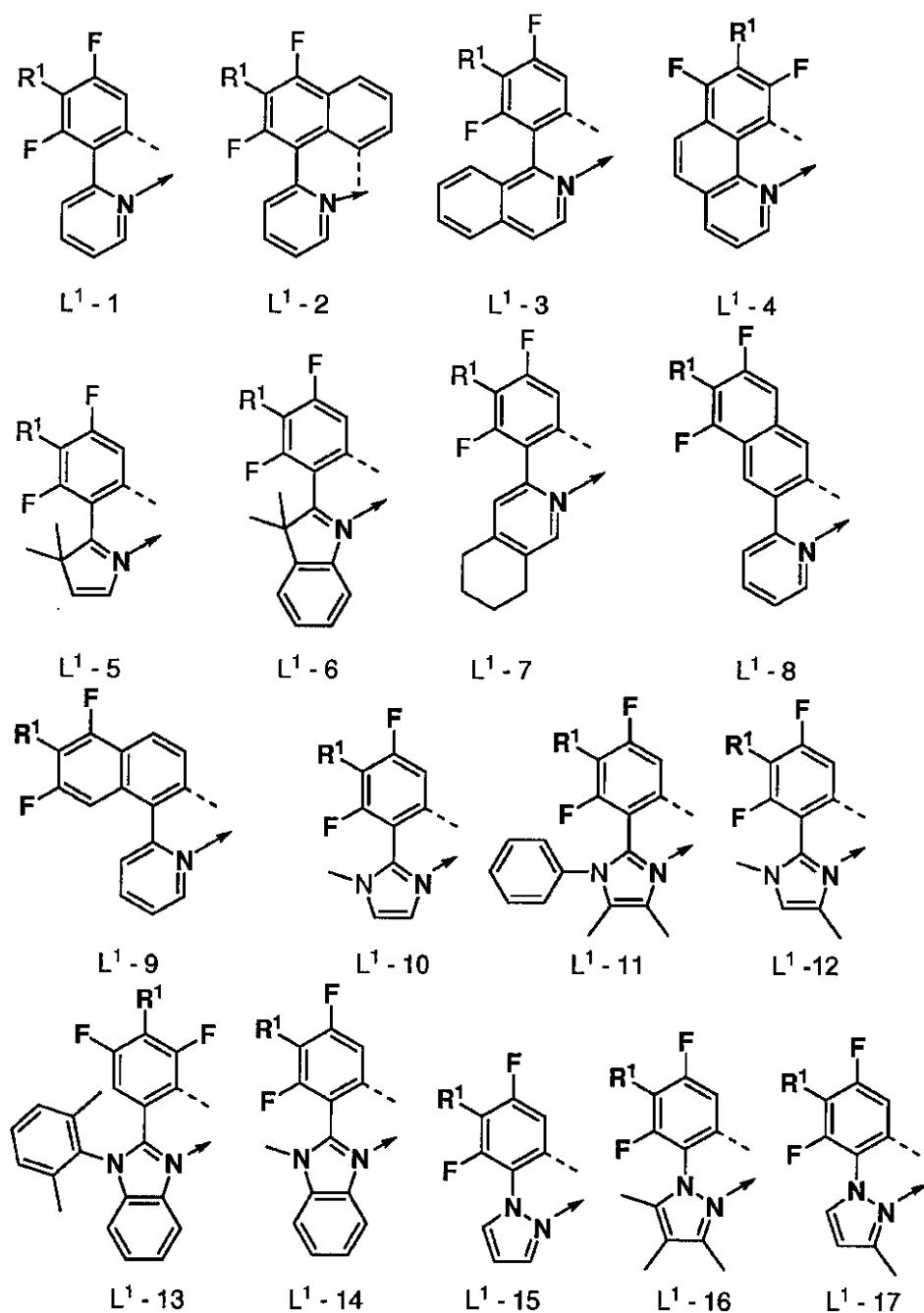
さらに好ましい一実施形態によると、 E_2 は、5または6員の芳香環または複素環式芳香環を表し、5および6員の複素環式芳香環、特にピリジンが好ましい。特定の一実施形態においては、 E_2 は、ピリジン環の炭素原子2を介して E_1 に結合したピリジン環を表す。

【0042】

構造要素IIを含む典型的な配位子 L^1 は以下の通りであり：

20

【化 8 A】

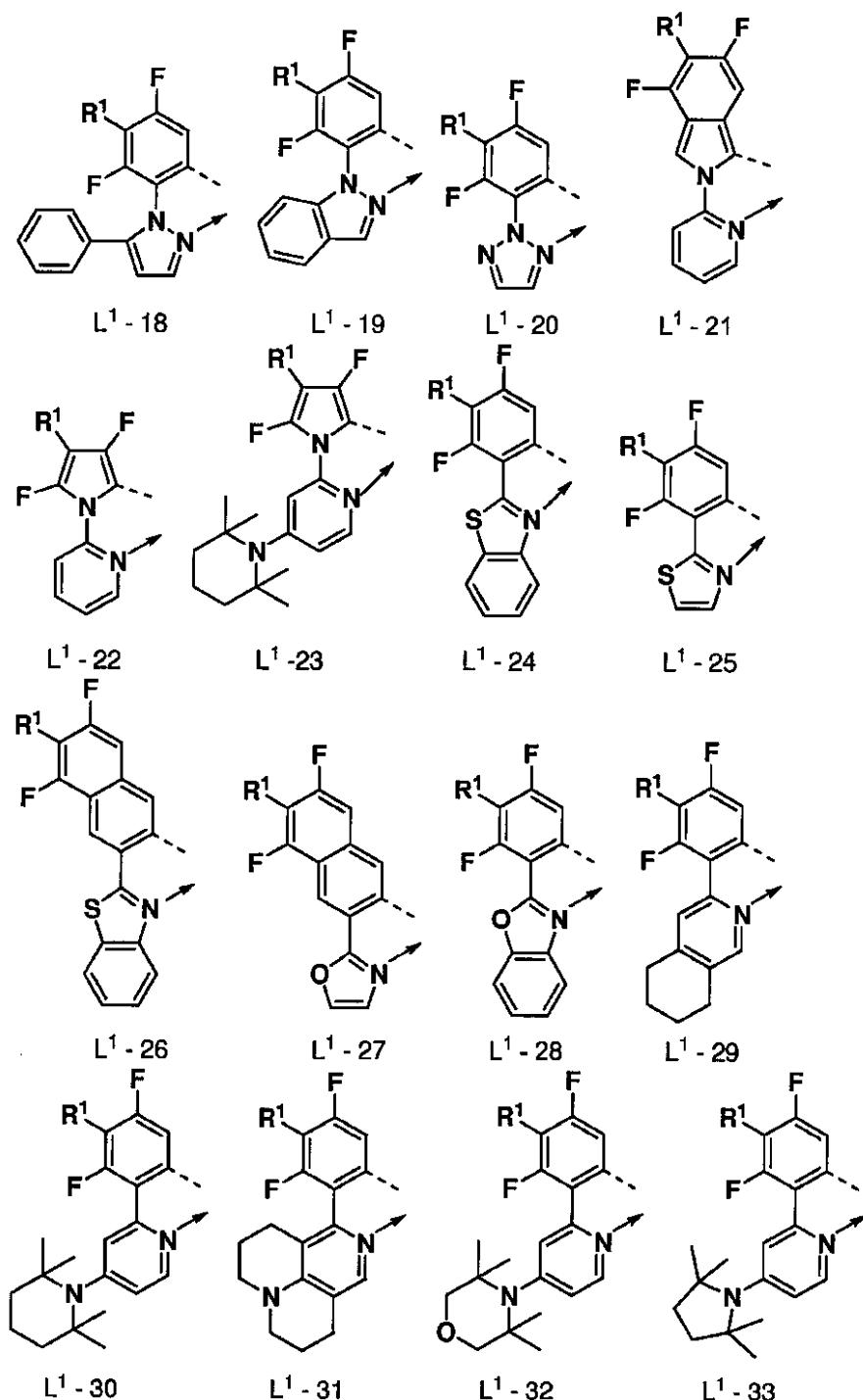


10

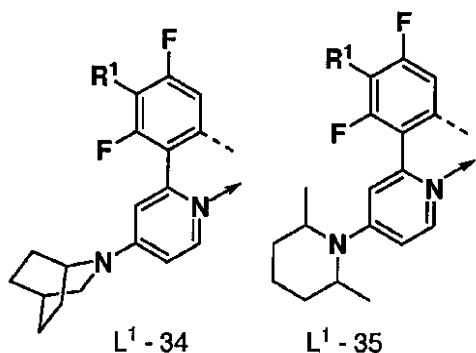
20

30

【化 8 B】



【化 8 C】



10

$L^1 \cdot 1$ および $L^1 \cdot 29 \sim L^1 \cdot 35$ が好ましい。

【0043】

前述したように、配位子 L^1 の環 E_2 は、1つ以上の非環式置換基、好ましくは強い電子供与基、すなわち負の Hammett 置換基定数を有する基からなる群から選択される1つ以上の非環式置換基を有することができます。環 E_2 における好ましい置換基の例は、 $C_1 \sim C_8$ - アルキル基、 $C_1 \sim C_8$ - チオアルキル基、 $C_1 \sim C_8$ - アルコキシ基、アミノ基、 $C_1 \sim C_8$ - アルキルアミノ基、 $C_1 \sim C_8$ - ジアルキルアミノ基、および環状アセタール構造などの立体的に固定された構造を有する二置換アミノ基である。

20

【0044】

特に好ましいジアルキルアミノ置換基は、立体的に固定された構造を有するアミノ基、ジメチルアミノ、およびジエチルアミノであり、好ましくは E_2 と E_1 とを連結する原子に対してパラ位にあり、すなわち E_2 としてのピリジン環の場合、そのピリジン環の4位にある。たとえば、 $L^1 \cdot 30 \sim L^1 \cdot 35$ に示されるピリジン環上の置換アミノ基が、好ましい立体的に固定された構造として挙げられる。

【0045】

特に好ましい配位子 L^1 は、前述の式 $L^1 \cdot 1$ で表される、場合により置換された2-フェニルピリジン (ppy)、ならびに構造 $L^1 \cdot 29 \sim L^1 \cdot 31$ および $L^1 \cdot 33$ で表されるフェニルピリジン化合物である。

30

【0046】

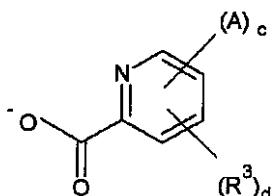
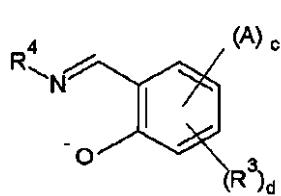
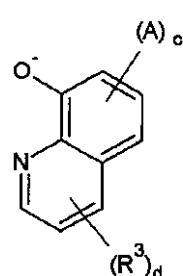
L^2 は、「非モノアニオン性」、「非二座」、または「非炭素配位性」の配位子であり、すなわち、2つ以上のアニオン性原子を介して金属に結合する（非モノアニオン性）、または金属と1つのみの結合を形成する（非二座）、または炭素以外の原子を介して金属原子に配位する（非炭素配位性）のいずれかの配位子である。 L^2 は一般に補助配位子と呼ばれる。代表的な補助配位子は、たとえば国際公開第02/015645号パンフレットに記載されている。

【0047】

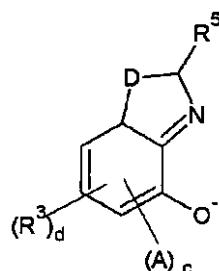
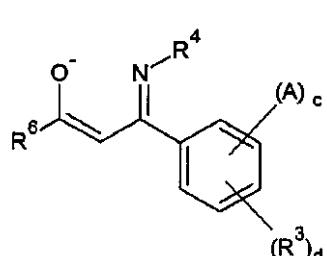
第1の好ましい実施形態によると、配位子 L^2 は、以下の式 $L^2 \cdot 1 \sim L^2 \cdot 7$ またはそれらの互変異性体：

40

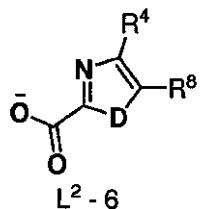
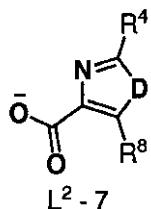
【化9】

L²-1L₂-2L₂-3

10

L₂-4L₂-5

20

L²-6L²-7

30

で表される構造から選択されるモノアニオン性非C配位性二座配位子であり、式中：

Aは、-Cl、-F、-Brなどのハロゲン；-OR₇；-SR₇；-N(R₇)₂；-P(OR₇)₂および-P(R₇)₂からなる群から選択される置換基であり；式中、R₇はC₁～C₆アルキル基、フルオロアルキル基、またはパーフルオロアルキル基、たとえば-CH₃、-nC₄H₉、-iC₃H₇、-CF₃、-C₂F₅、-C₃F₇、あるいは1つ以上のエーテル基を有するC₁～C₆アルキル、フルオロアルキル、またはパーフルオロアルキル、たとえば-CH₂-(-CH₂-O-CH₂)_n-CH₃、-CH₂-[CH₂(CH₃)-O-CH₂]_n-CH₃、-(CF₂O)_n-C₂F₅であり、nは1～8の整数であり；好ましくはAは、-OR₇および-N(R₇)₂から選択され、R₇は前述の意味を有する。

Dは、-CHR⁸-、-CR⁸R⁸-、-CR⁸=CH-、-CR⁸=CR⁸-、N-H、N-R⁹、O、S、またはSeからなる群から選択される基であり；

R³、R⁵、R⁶は、出現するごとに互いに同じまたは異なるものであり、F、Cl、Br、NO₂、CN、1～20個の炭素原子を有する直鎖状または分枝状または環状のアルキル基またはアルコキシ基であって、そのそれぞれの中の1つ以上の非隣接-CH₂-基は、-O-、-S-、-NR⁹-、または-CO NR¹⁰-で置換されていてもよく、そのそれぞれの中の1つ以上の水素原子はFで置換されていてもよいアルキル基またはアルコキシ基；あるいは、1つ以上の非芳香族基-R'によって置換されていてもよい4～14個の炭素原子を有するアリール基またはヘテロアリール基を表し；同じ環上または2つの異なる環上のいずれかの複数の置換基R'が一緒にになって、場合により芳香族であって

40

50

よい単環式または多環式の環系をさらに形成することができ；

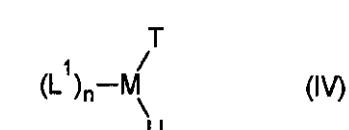
R^4 、 R^8 、 R^9 、および R^{10} は、出現するごとに互いに同じまたは異なるものであり、それぞれが、H、あるいは場合により置換され1～20個の炭素原子を有する脂肪族または芳香族の炭化水素基であり；

cは1～3の整数であり；

dは0～4の整数である。

【0048】

第2の好ましい実施形態によると、 L^2 は、同じ場合も異なる場合もある2つの単座配位子を含む。これらの第1の単座配位子（本明細書では以降Tと記載する）は好ましくはシアニド（CN）、チオシアネート（NCS）、およびシアネート（NCO）から選択され；好ましくはシアニド（CN）であり；第2の単座配位子（本明細書では以降Uと記載する）は、sp²またはsp³混成窒素原子を介して、好ましくはsp²混成窒素原子を介して金属Mに配位する単座中性配位子である。この実施形態による発光材料は、一般式【化10】

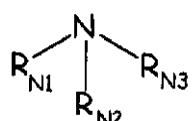


で表されることを特徴とすることができる。

【0049】

sp³混成窒素原子を介して金属に配位する単座中性配位子Uの非限定的な例は、特に次式：

【化11】

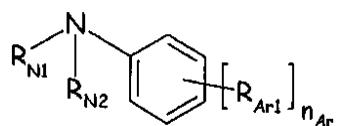


で表され、式中、R_{N1}、R_{N2}、R_{N3}は、互いに同じ場合も異なる場合もあり、C₁～₂₀炭化水素基、たとえば脂肪族のおよび/または芳香族で、直鎖状または分枝状の場合により置換された置換C₁～₂₀炭化水素基から独立して選択される。

【0050】

sp³混成窒素原子を介して金属に配位する好ましい単座中性配位子Uは、本明細書において次式：

【化12】



で表され、式中、R_{N1}、R_{N2}は、前述の定義と同じ意味を有し、好ましくはR_{N1}、R_{N2}は、直鎖状または分枝状の、場合により置換されたC₁～₂₀脂肪族基から選択され、

R_{Ar1}は、ヘテロ原子、たとえば窒素または酸素を場合により含む置換基であり、たとえば特にC₁～₆アルコキシ基、C₁～₆ジアルキルアミノ基などであり；好ましくはR_{Ar1}はメトキシ基であり；

n_{Ar}は0～5の整数、好ましくは1～3の整数、より好ましくは2である。

【0051】

好ましくは単座中性配位子Uは、sp²混成窒素原子を介して金属に配位する。sp²

10

20

30

40

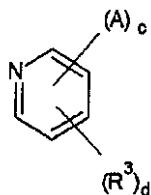
50

混成窒素原子を介して金属に配位する单座中性配位子 L^2 は、好都合には少なくとも 1 つのイミン基を含む。

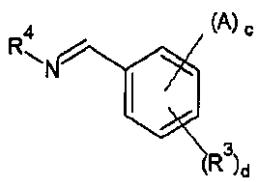
【0052】

特に好ましい单座中性配位子 U は、以下の構造 $U-1 \sim U-8$ またはそれらの互変異性体から選択される。

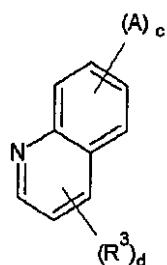
【化13】



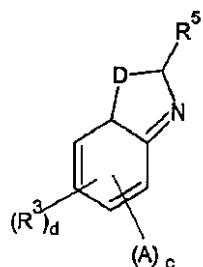
U-1



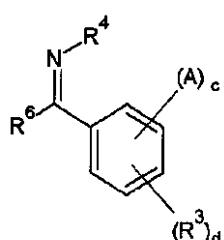
U-2



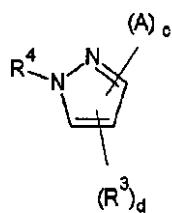
U-3



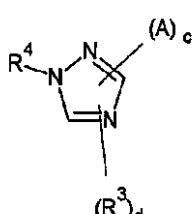
U-4



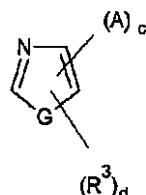
U-5



U-6



U-7



U-8

(式中、 A 、 D および $R^3 \sim R^{10}$ は、配位子 $L^2-1 \sim L^2-5$ に関して本発明で先に定義した意味を有し；

G は、 $-CH=CH-$ 、 $-CR^8=CH-$ 、 $-CR^8=CR^8-$ 、 $N-H$ 、 $N-R^9$ 、および $CR^8=N-$ からなる群から選択される基であり；

c は 0 ~ 3 の整数であり、

d は 0 ~ 3 の整数である)

【0053】

本明細書において使用される場合、互変異性体という用語は、平衡状態で存在し、たとえば電子および / または水素原子の同時移動によって 1 つの異性体から別の異性体に容易に変換される、2 つ以上の構造異性体のうち 1 つを意味することを意図している。

【0054】

さらに好ましい一実施形態によると、配位子 L^2 は、酸素原子およびリン原子を介して金属に結合する二座ホスフィノカルボキシレートモノアニオン性配位子であり、一般式 P

10

20

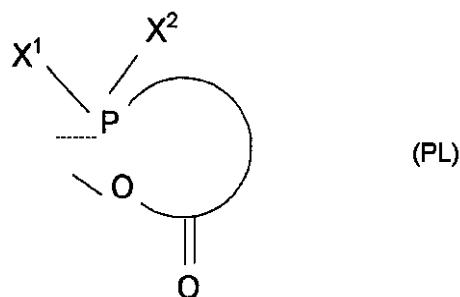
30

40

50

L

【化14】



10

によって表され、式中、 X^1 および X^2 は、同じものまたは異なるものであり、C₁ ~ C₈ - アルキル、アリール、ヘテロアリールから選択され、これらは1つ以上の置換基によって場合により置換されていてもよい。

【0055】

この実施形態におけるキレート二座 (bidentate) ホスフィノカルボキシレートモノイオン性配位子 PL は、一般に、中心遷移金属原子とともに5員、6員、または7員のメタラサイクル (metallocycle) を形成し、すなわちホスフィノ基とカルボキシレート部分とを、特に1、2、または3個の炭素原子によって分離することができる。

20

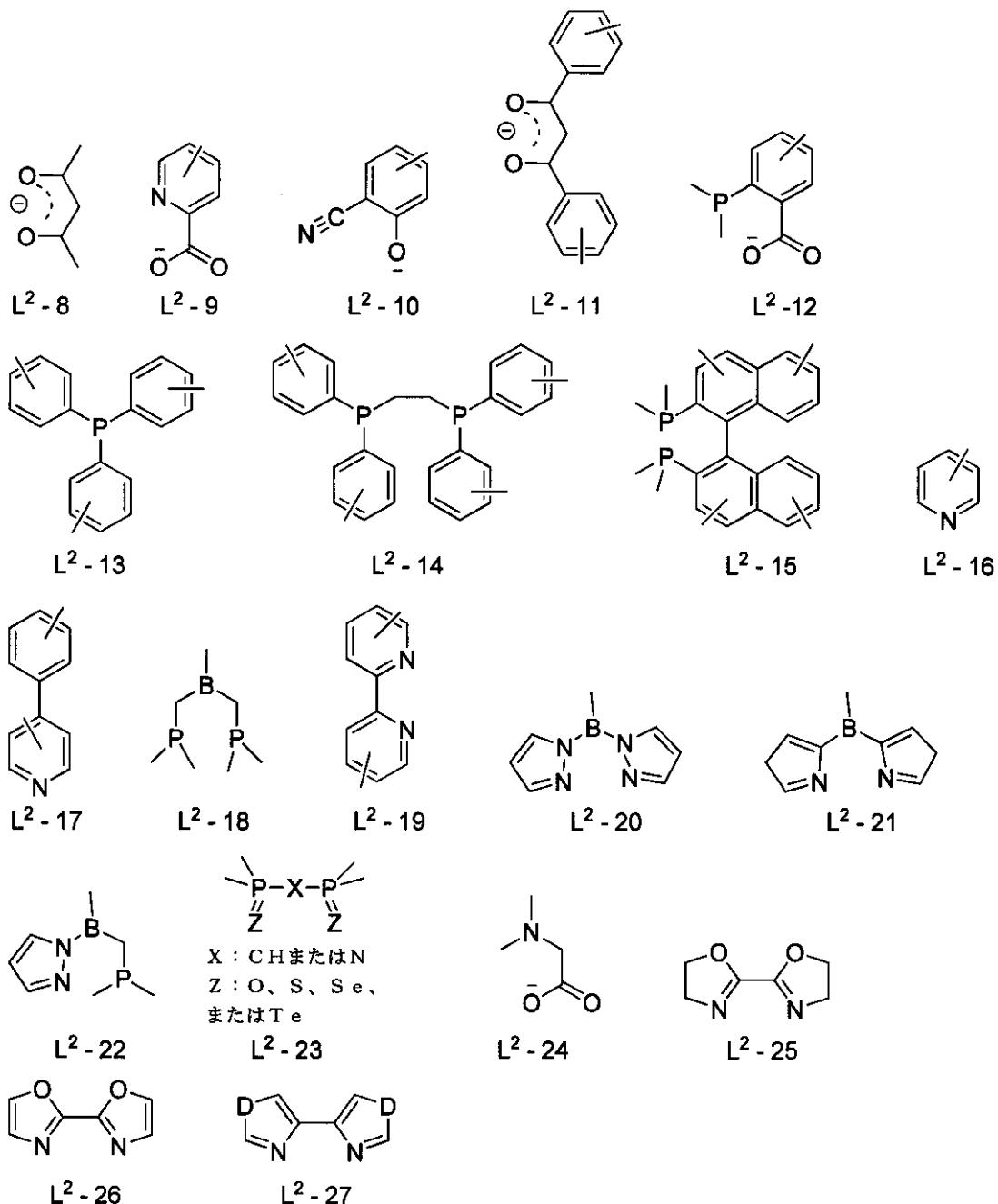
【0056】

特に好ましい配位子 PL は、ホスフィノ基とカルボキシレート基とが同じ炭素原子に結合するものであり；これらの配位子は、5員メタラサイクル (metallocycle) を含む好都合に錯体を形成し、ほとんどの場合にこれが特に安定となる。

【0057】

好ましい第4の実施形態によると、配位子 L² は、国際公開第02/15645号パンフレットに開示されているような以下の好ましい配位子 L²-8 ~ L²-27：

【化15】



から選択される。

【0058】

上記構造中、結合記号によって示されるあらゆる置換基は、水素、ハロゲン、C₁～C₈ - アルキル基、またはアリール基から独立して選択することができる。

【0059】

以上の説明は、本発明による発光材料の種々の要素の構造の可能性の概説である。これに関して、任意の好ましい配位子L¹を任意の好ましい配位子L²（配位子T、U、およびPLを含む）と組み合わせることができ、これらの可能な組み合わせのいずれも本発明の範囲内となることを意図している。当業者であれば、式Iによって意図されるようなあらゆる配位子L¹、特に好ましい配位子L¹-1～L¹-35のあらゆる好ましい配位子と、好ましくは、式Iにおいて意図されるようなあらゆる配位子L²、特にL²-1～L²-5、T、U、およびPLのあらゆる好ましい配位子、ならびに国際公開第02/15645号パンフレットによる前述の好ましい配位子との組み合わせを可能とする方法は明らかであろう。

10

20

30

40

50

【0060】

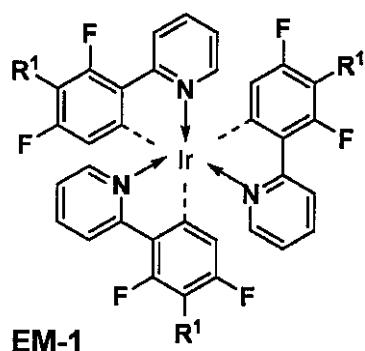
特に好ましい発光材料は、一般式 I II I で表され、E¹ および E² が本発明の前述の定義による意味を有し、L² が L²-1 ~ L²-27、T、U₁ ~ U₈、またはPLから選択される発光材料である。

【0061】

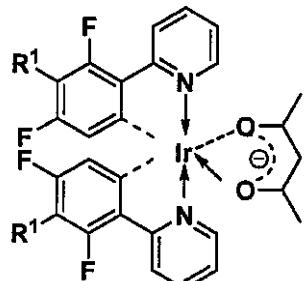
L¹ が、構造要素 I I と、場合により 1 つ以上の置換基、好ましくは負の Hammett 置換基定数を有する置換基、すなわち強い供与基とをピリジン環中に含む置換 2 - フェニルピリジン部分を表す発光材料が最も好ましい。以下の化合物は、本発明による特に好ましい発光材料である。

【化16】

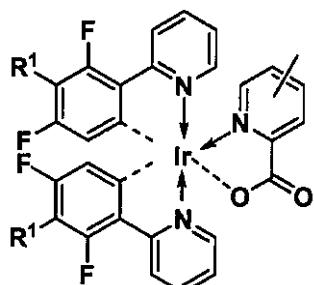
10



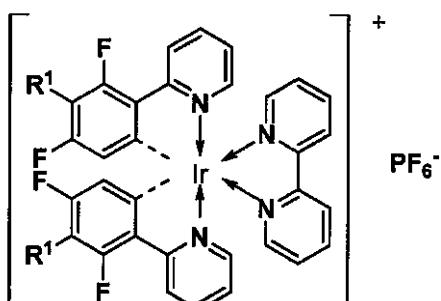
EM-1



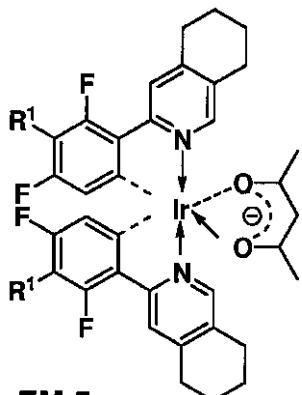
EM-2



EM-3



EM-4



EM-5

20

30

40

【0062】

特に好ましい発光材料は、場合により置換された 2 - フェニルピリジン部分を配位子 L¹ として有し、場合により置換されたピコリネート部分またはアセチルアセトン部分を配位子 L² として含む Ir 錯体である。これらの錯体は良好な化学的および熱的（昇華に関して）安定性を有することが示されており、このことは材料の加工において好都合となる。

【0063】

本明細書で前述した式 (I) の錯体、すなわち前述のように規定される 2 つのオルトメタル化配位子 (C^N 配位子) と 1 つの補助配位子 (L) とを含む金属錯体の合成は、あ

50

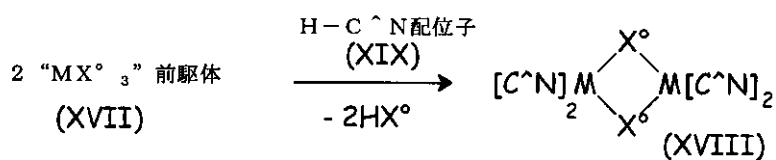
らゆる周知の方法によって行うことができる。本明細書において前述した式(I)の錯体の調製に好適な合成方法の詳細は、特に、“Inorg. Chem.”, No. 30, pag. 1685 (1991); “Inorg. Chem.”, No. 27, pag. 3464 (1988); “Inorg. Chem.”, No. 33, pag. 545 (1994); “Inorg. Acta”, No. 181, pag. 245 (1991)、“J. Organomet. Chem.”, No. 35, pag. 293 (1987)、“J. Am. Chem. Soc.”, No. 107, pag. 1431 (1985)に開示されている。

【0064】

典型的には、合成は以下の反応スキームにより2工程で行われ：

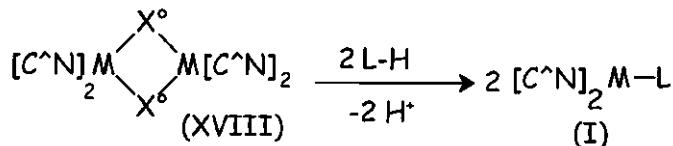
【化17】

工程1：



10

工程2：



20

式中、 X° は、ハロゲン、好ましくはClであり、M、L、 $\text{C}^{\wedge}\text{N}$ は前述のように定義された意味を有する。

【0065】

オルトメタル化配位子の酸性型(H-C $^{\wedge}$ N)および補助配位子の酸性型(L-H)は、市販されているか、周知の有機合成反応経路によって容易に合成可能であるかのいずれかである。

【0066】

遷移金属がイリジウムである場合、IrCl₃・H₂Oなどのトリハロゲン化イリジウム(II)化合物、M₃IrX₆(式中、X[°]はハロゲン、好ましくはClであり、M[°]はアルカリ金属、好ましくはKである)などのヘキサハロゲン化イリジウム(II)化合物、およびM₂IrX₆(式中、X[°]はハロゲン、好ましくはClであり、M[°]はアルカリ金属、好ましくはKである)などのヘキサハロゲン化イリジウム(IV)化合物(以降、Irハロゲン化前駆体と記載)を、前述の定義の式(I)の錯体を合成するための出発物質として使用することができる。

【0067】

したがって、X[°]がハロゲン、好ましくはClである $[\text{C}^{\wedge}\text{N}]_2\text{Ir}(\mu-\text{X}^{\circ})_2\text{Ir}[\text{C}^{\wedge}\text{N}]_2$ 錯体(式XVII、式中のM=Ir)は、前記Irハロゲン化前駆体および適切なオルトメタル化配位子から、文献(S. Sprouse, K. A. King, P. J. Spellane, R. J. Watts, J. Am. Chem. Soc., 1984, 106, 6647-6653; M. E. Thompson et al., Inorg. Chem., 2001, 40(7), 1704; M. E. Thompson et al., J. Am. Chem. Soc., 2001, 123(18), 4304-4312)によっての手順によって調製することができる。

【0068】

30

40

50

この反応は、過剰の中性型オルトメタル化配位子（H - C^{^N}）を使用して好都合に行われ；高沸騰温度溶媒が好ましい。

【0069】

本発明の目的の場合、高沸騰温度溶媒という用語は、沸点が少なくとも80°、好ましくは少なくとも85°、より好ましくは少なくとも90°である溶媒を示すことを意図している。好適な溶媒は、たとえば、エトキシエタノール、グリセロール、ジメチルホルムアミド（DMF）、N-メチルピロリドン（NMP）、ジメチルスルホキシド（DMSO）などであり；前記溶媒は、そのまま使用することもできるし、水と混合して使用することもできる。

【0070】

場合により、反応は、好適なブレンステッド塩基の存在下で行うことができる。

【0071】

[C^{^N}]₂IrL錯体は、前記[C^{^N}]₂Ir(μ-X[°])₂Ir[C^{^N}]₂錯体と、酸型の補助配位子（L-H）との反応によって最終的に得ることができる。反応：



は、高沸騰温度溶媒中または低沸騰温度溶媒中で行うことができる。

【0072】

好適な高沸騰温度溶媒は、特にエトキシエタノールなどのアルコール類、グリセロール、DMF、NMP、DMSOなどであり；前記溶媒は、そのまま使用することもできるし、水と混合して使用することもできる。

【0073】

反応は、好ましくは、金属炭酸塩、特に炭酸カリウム（K₂CO₃）、金属水素化物、特に水素化ナトリウム（NaH）、金属エトキシドまたは金属メトキシド、特にNaOC_H₃、NaOC₂H₅などのブレンステッド塩基の存在下で行われる。

【0074】

好適な低沸騰温度溶媒は、特にクロロメタン類（たとえばCH₃Cl；CH₂Cl₂；CHCl₃）などのクロロハイドロカーボン類であり；ジクロロメタンが好ましい。

【0075】

場合により、配位子Lの前駆体を、前述の定義の合成の第2工程において使用することができ、この前駆体は前記第2工程の反応媒体中で好都合に反応して、目標のL配位子が得られる。

【0076】

本発明の別の目的の1つは、有機発光デバイスの発光層中で前述の定義の発光材料を使用することである。

【0077】

特に、本発明は、有機発光デバイス（OLED）中の発光層として機能するホスト層中のドーパントとしての前述の定義の発光材料の使用に関する。

【0078】

好適なOLEDは、好ましくは図1中に示されるような多層構造を有し、図1中、1はガラス基体であり、2はインジウム-スズ酸化物層（ITO）であり、3は正孔輸送層（HTL）であり、4は、ホスト材料と前述の定義の発光材料とを含む発光層（EML）であり；5は正孔阻止層（HBL）であり；6は電子輸送層（ETL）であり；7はAl層カソードである。

【0079】

本発明による発光材料は、複数の性質の良好な組み合わせを示すため、OLEDデバイス中の意図された使用に特に好適となる。特に興味深いことは、本発明による発光材料のほとんどは、スペクトルの青色範囲において安定な発光を示し、したがってこれまで十分に解決されていなかった問題の解決法となることである。好ましい材料の発光極大は、430～500nmの範囲内であり、特に440～495nmの範囲内である。

10

20

30

40

50

【0080】

さらに、本発明の発光材料は、良好なエレクトロルミネッセンス効率をも示し、このことはさらなる利点となる。

【0081】

以下の実施例は本発明の特に好ましい実施形態を単に説明するものであり、これらの実施形態に本発明が限定されるものではない。他の発光材料を類似の方法で調製することができる。

【0082】

NMR分光法

NMRスペクトルは、Oxford NMR分光計、またはVarian Mercury Plus分光計を使用して記録し、どちらも400MHzで動作させた。

【0083】

フォトルミネッセンス分光法

フォトルミネッセンススペクトルはJASCOモデルFP-750分光蛍光光度計上で測定した。特に明記しない限り、フォトルミネッセンススペクトル測定(0.001~0.002mMの濃度において測定)は、375nmの励起波長を使用しエタノール溶液中室温で行った。fac-Ir(tpy)₃を標準物質として使用して発光量子収率を求めた。

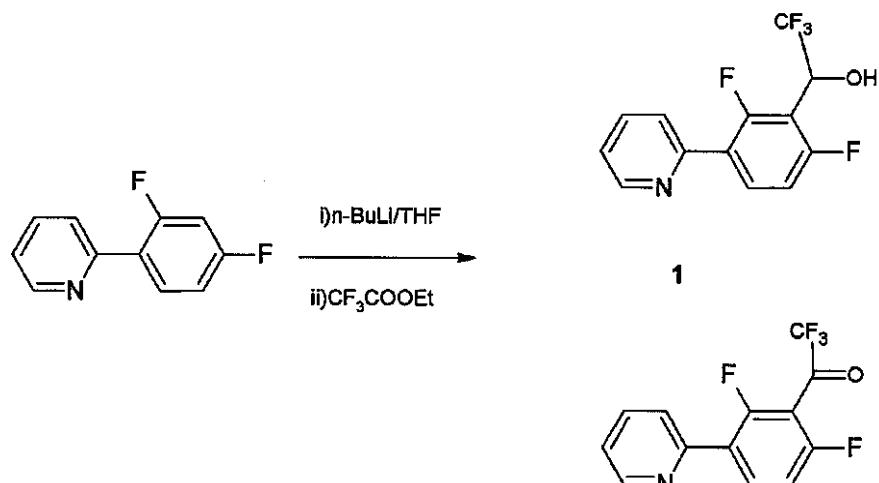
【0084】

シリカプレートを使用して薄層クロマトグラフィーを行った。

【0085】

実施例1：2-(2,4-ジフルオロ-3-(2,2,2-トリフルオロエタノール)フェニル)ピリジン(1)および2-(2,4-ジフルオロ-3-(2,2,2-トリフルオロエタノン)フェニル)ピリジン(2)の合成

【化18】



2

【0086】

2-(2,4-ジフルオロフェニル)ピリジン(1.7g、8.89mmol、1当量)のテトラヒドロフラン(THF、30ml)中の溶液を-78まで冷却し、この攪拌混合物に、ヘキサン中のn-ブチルリチウム(n-BuLi)(6.12ml、9.78mmol、1.1当量)を15分間かけて滴下した。

【0087】

約-78において1時間攪拌を行った後、その溶液にトリフルオロ酢酸エチル(1.17ml、9.78mmol、1.1当量)を10分以内に滴下した。

10

20

30

40

50

【0088】

冷却を停止した後、混合物の温度を室温(23)まで上昇させ、連続攪拌しながらこの温度を終夜維持した。

【0089】

その後、この混合物に水(50ml)を加え、次に、得られた有機化合物をジクロロメタンで抽出し(3回)、その有機相をブライン(50ml)で洗浄した。

【0090】

得られた有機抽出物MgSO₄上で乾燥させ、ロータリーエバポレーター上で溶媒を除去した。

【0091】

エチルアセテート/ヘキサンの1:2混合物を溶離液として使用したシリカゲル上のカラムクロマトグラフィーによって粗生成物を精製して、淡黄色油(1:R_f=0.1、0.61g、24%、2:R_f=0.4、0.53g、21%)を得た。空気条件下で数時間後に、この黄色油は淡黄色結晶に変化した。

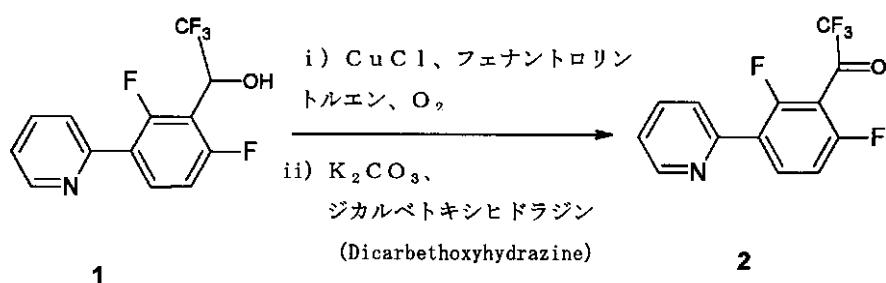
(1) ¹H NMR(400MHz、CDCl₃) : 8.73(d, 1H)、8.04(dd, 1H)、7.79(t, 1H)、7.73(d, 1H)、7.30(t, 1H)、7.11(t, 1H)、5.47(bs, 1H)、3.51(bs, 1H)。

(2) ¹H NMR(400MHz、CDCl₃) : 8.73(d, 1H)、8.31(dd, 1H)、7.80(t, 1H)、7.78(s, 1H)、7.32(t, 1H)、7.18(t, 1H)。

【0092】

2-(2,4-ジフルオロ-3-(2,2,2-トリフルオロエタノン)フェニル)ピリジン(2)

【化19】



25mLの2口フラスコに還流冷却器および酸素流入口を取り付けた。トルエン(15ml)を加え、続いてCuCl(0.010g、0.10mmol、5%当量)および1.10-フェナントロリン(0.019g、0.10mmol、5%当量)を加えた。溶液の色が透き通った黒色に変化するまで、室温で20分間攪拌を続けた。

【0093】

その後、1,2-ジカルベトキシドラジン(Dicarbethoxyhydrazine)(0.09g、0.52mmol、25%当量)を加え、続いて固体のK₂CO₃(0.56g、4.15mmol、2当量)を加え、攪拌をさらに10分間続けた。

【0094】

2-(2,4-ジフルオロ-3-(2,2,2-トリフルオロエタノール)フェニル)ピリジン(1:0.6g、2.07mmol、1当量)をそのまま加え、得られた溶液を、酸素バーリングを行いながら還流条件で加熱した。

【0095】

2時間後、薄層クロマトグラフィー(TLC)によって反応が完了したことがわかり、得られた混合物を室温まで冷却し、減圧下で溶媒を蒸発させた。

【0096】

得られた粗生成物を、CH₂Cl₂を溶離液として使用したシリカゲル上のクロマトグラフィーによって精製して、黄色油(0.52g、87%)を得た。

10

20

30

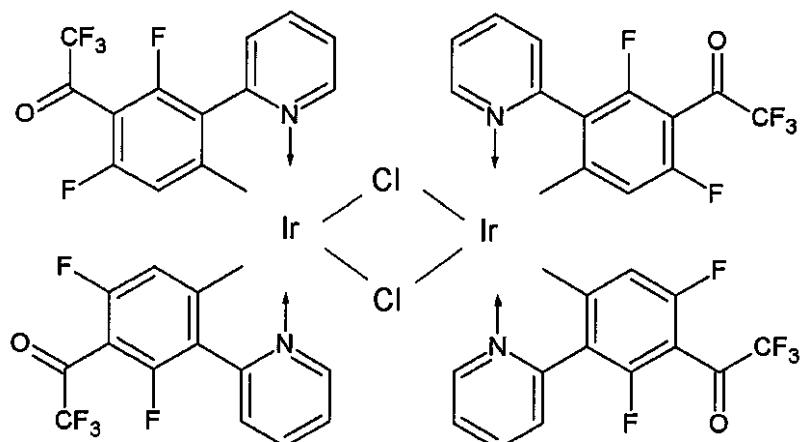
40

50

【0097】

実施例2：化合物3の合成

【化20】



10

3

20

$\text{IrCl}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ (1当量) を 2 - エトキシエタノール中に溶解させ、アルゴンを使用して 75 で 30 分間脱気した。次に、2 . 2 当量のシクロメタレート化配位子 ($\text{C}^{\wedge}\text{N}$) を直接加えた。得られた混合物を、アルゴン下 125 で 18 時間加熱し、アルミニウム箔を使用して光から保護した。約 50 まで冷却した後、減圧下で溶媒の体積を半分まで減らした。室温まで冷却した後、混合物を、脱イオン水が入れられた三角フラスコ中に注いだ。このフラスコを冷蔵庫 (約 6) 中で 4 時間保存した。沈殿物をフリットガラスで減圧濾過して分離し、水で十分に洗浄した。得られた黄色固体を、アルミニウム箔で光から保護して、室温で終夜減圧乾燥させて、化合物3を黄色固体として得た。

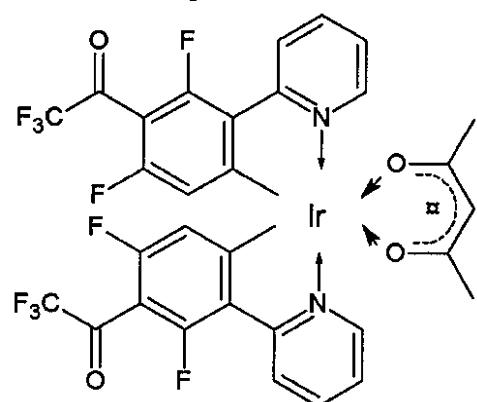
$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 、400MHz) : 9.08 (d, 4H); 8.41 (d, 4H); 7.99 (t, 4H); 6.97 (t, 4H); 5.42 (d, 4H)。

30

【0098】

実施例3：化合物4の合成

【化21】



40

4

アセチルアセトン (4当量) と TBAOH (3当量) とのジクロロメタン中の混合物を 40 において 30 分間還流して、30 まで冷却した。化合物3 (1当量) をジクロロメタン中に溶解させ、上記の TBAアセチルアセトネート混合物に加えた。得られた混合物を、アルミニウム箔で光から保護しながらアルゴン下で 30 で 12 時間加熱した。混

50

合物を室温まで冷却し、シリカカラム ($\text{SiO}_2 / \text{CH}_2\text{Cl}_2$) の上部に付着させた。0 ~ 25 % の CH_2Cl_2 / アセトンを使用して生成物を溶出させて、化合物 4 を黄色粉末として得た。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 、400 MHz) : 8.43 (d, 2 H); 8.34 (d, 2 H); 7.94 (t, 2 H); 7.34 (t, 2 H); 5.83 (d, 2 H); 5.30 (s, 1 H); 1.82 (s, 6 H)。

【0099】

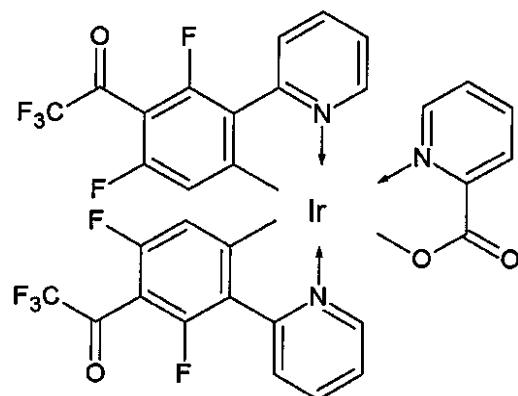
図2は、375 nmにおいて励起させた後の化合物4の発光スペクトルを示している。

【0100】

実施例4：化合物5の合成

10

【化22】



20

5

ピコリン酸（4当量）とTBAOH（3当量）とのジクロロメタン中の混合物を40において30分間還流して、30まで冷却する。化合物3（1当量）をジクロロメタン中に溶解させ、上記TBAピコリネート混合物に加える。得られた混合物を、アルミニウム箔で光から保護してアルゴン下30で12時間加熱する。混合物を室温まで冷却し、シリカカラム ($\text{SiO}_2 / \text{CH}_2\text{Cl}_2$) の上部に付着させた。0 ~ 25 % の CH_2Cl_2 / アセトンを使用して生成物を溶出させて、化合物5を黄色粉末として得た。

30

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 、400 MHz) : 8.78 (d, 1 H); 8.38 (m, 2 H); 8.33 (d, 1 H); 8.03 (t, 1 H); 7.92 (t, 2 H); 7.76 (d, 1 H); 7.53 (t, 1 H); 7.45 (d, 1 H); 7.35 (t, 1 H); 7.13 (t, 1 H); 6.02 (d, 1 H); 5.72 (d, 1 H);

【0101】

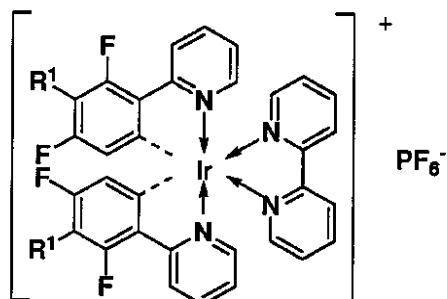
図3は、375 nmにおいて励起させた後の化合物5の発光スペクトルを示している。

【0102】

実施例5：化合物6の合成

40

【化23】



EM-4

50

ビピリジン（4当量）と化合物3（1当量）との混合物をジクロロメタン中に溶解させ、アルゴン下で終夜還流した。溶媒を蒸発させ、混合物を最小量のジクロロメタン中に溶解させ、次にジエチルエーテル中に注いだ。得られた沈殿物を濾過し、ジエチルエーテルで洗浄した。得られた固体分をアセトン中に溶解させ、ヘキサフルオロリン酸アンモニウムの飽和水溶液を加えた。減圧下でアセトンを穏やかに除去し、沈殿物を濾過し、水で洗浄し、乾燥させて、化合物6を淡青色固体として得た。

¹H-NMR (CDCl₃, 400MHz) : 8.70 (d, 2H); 8.39 (d, 2H); 8.25 (t, 2H); 7.92 (m, 4H); 7.62 (d, 2H); 7.57 (t, 2H); 7.28 (d, 2H); 5.86 (d, 2H)。

【0103】

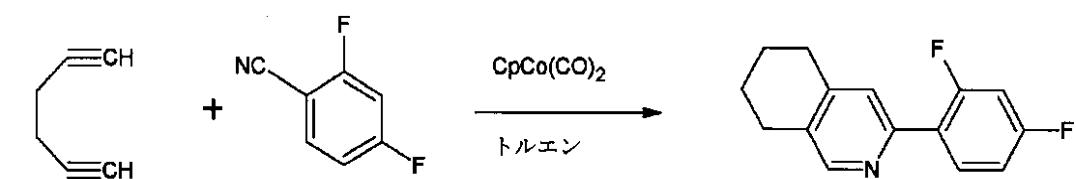
10

図4は、375nmにおいて励起させた後の化合物6の発光スペクトルを示している。

【0104】

実施例6：3-(2,4-ジフルオロフェニル)-5,6,7,8-テトラヒドロイソキノリン(7)の合成

【化24】



20

7

500mlの2口フラスコに、滴下漏斗の下の還流冷却器およびAr流入口を取り付けた。2,4-ジフルオロベンゾニトリル(4.4g、31.6mmol、1当量)を減圧下で乾燥させた後1,7-オクタジイン(1.05ml、7.91mmol、0.25当量)をフラスコに加え、次に蒸留したトルエン(200ml)をこの混合物に加えた。滴下漏斗にトルエン(150ml)を加え、続いて1,7-オクタジイン(3.15ml、23.7mmol、0.75当量)を加え、続いてCpCo(CO)₂(0.28g、1.58mmol、5%当量)を加えた。

【0105】

30

h(200W)およびArバブリングを使用しながら、還流条件下でフラスコ中のもう1つの混合物に、触媒を有するトルエン溶液を36時間かけて滴下した。触媒の添加後、溶液の色が暗褐色に変化した。

【0106】

滴下終了後、同じ条件下で攪拌をさらに12時間続けた。

【0107】

得られた混合物を室温まで冷却し、ロータリーエバポレーター上で溶媒を除去した。

【0108】

得られた粗生成物を、CH₂Cl₂(R_f=0.2)を溶離液として使用してシリカゲルのクロマトグラフィーによって精製して、淡褐色油(3.2g、41%)を得た。この淡黄色は空气中で数時間後に結晶化した。

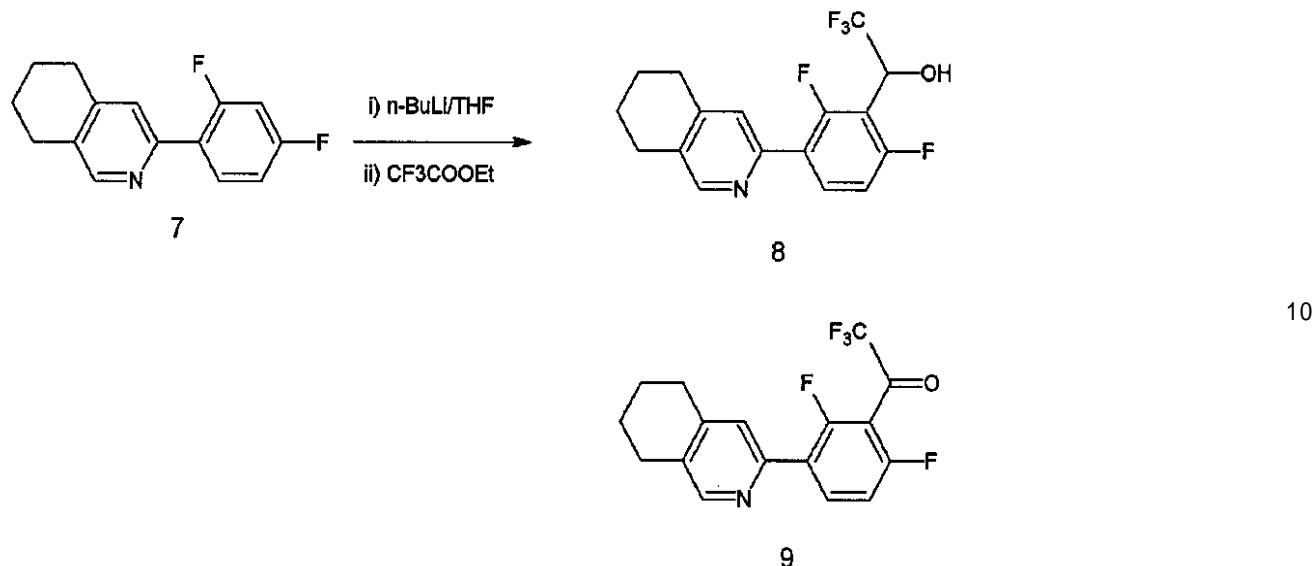
40

¹H-NMR (400MHz, CDCl₃) : 8.38 (s, 1H)、7.92 (q, 1H)、7.41 (s, 1H)、6.96 (t, 1H)、6.89 (t, 1H)、2.79 (d, 4H)、1.84 (t, 4H)。

【0109】

実施例7：3-(2,4-ジフルオロ-3-(2,2,2-トリフルオロエタノール)フェニル)-5,6,7,8-テトラヒドロイソキノリン(8)および3-(2,4-ジフルオロ-3-(2,2,2-トリフルオロエタノン)フェニル)-5,6,7,8-テトラヒドロイソキノリン(9)の合成

【化25】



3 - (2 , 4 - ジフルオロフェニル) - 5 , 6 , 7 , 8 - テトラヒドロイソキノリン 7 (2 g 、 8 . 1 5 m m o l 、 1 当量) の T H F (5 0 m l) 中の溶液を - 7 8 まで冷却し、この攪拌混合物中に、ヘキサン中の n - B u L i (5 . 6 m l 、 8 . 9 7 m m o l 、 1 . 1 当量) を 1 5 分かけて滴下した。

【0110】

冷却を停止した後、混合物の温度を室温 (2 3) まで上昇させて、連続攪拌しながらこの温度を終夜維持した。

【0111】

その後、この混合物に水 (5 0 m l) を加え、次に有機化合物をジクロロメタンで抽出し (3 回) 、得られた有機相をブライン (5 0 m l) で洗浄した。

【0112】

得られた有機抽出物を M g S O 4 上で乾燥させ、ロータリーエバポレーター上で溶媒を除去した。

【0113】

エチルアセテート / ヘキサンの 1 : 2 混合物を溶離液として使用してシリカゲル上のカラムクロマトグラフィーによって生成物を精製すると、黄色油 (8 : R f = 0 . 4 、 1 . 1 3 g 、 4 0 % . 9 : R f = 0 . 2 、 0 . 5 1 g 、 1 8 %) として得られた。

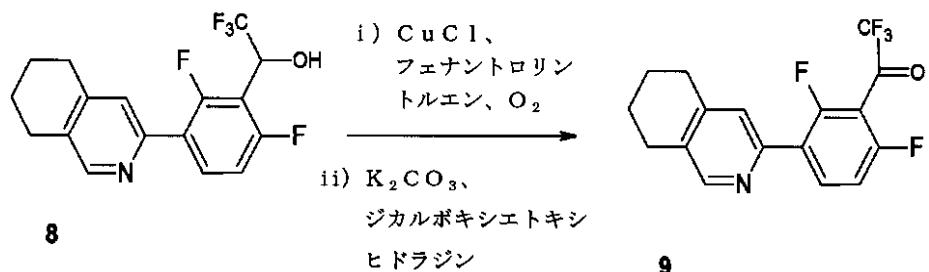
(8) 1 H N M R (4 0 0 M H z 、 C D C l 3) : 8 . 3 4 (s , 1 H) 、 7 . 6 8 (q , 1 H) 、 7 . 2 8 (s , 1 H) 、 6 . 8 9 (t , 1 H) 、 5 . 3 5 (q , 1 H) 、 4 . 1 0 (q , 1 H) 、 2 . 7 7 (d , 4 H) 、 1 . 8 2 (t , 4 H) 。

(9) 1 H N M R (4 0 0 M H z 、 C D C l 3) : 8 . 4 0 (s , 1 H) 、 8 . 2 4 (q , 1 H) 、 7 . 4 4 (s , 1 H) 、 7 . 1 4 (t , 1 H) 、 2 . 8 0 (d , 4 H) 、 1 . 8 6 (t , 4 H) 。

【0114】

実施例 8 : 3 - (2 , 4 - ジフルオロ - 3 - (2 , 2 , 2 - トリフルオロエタノン) フェニル - 5 , 6 , 7 , 8 - テトラヒドロイソキノリン (9) の合成

【化 2 6】



25 mL の2口フラスコに還流冷却器および酸素流入口を取り付けた。トルエン(15 mL)を加え、続いてCuCl(0.014 g, 0.15 mmol, 5%当量)を加え、続いて1.10-フェナントロリン(0.026 g, 0.15 mmol, 5%当量)を加えた。

[0 1 1 5]

濁液の色が透き通った黒色に変化するまで室温で20分間攪拌を続けた。

【 0 1 1 6 】

1, 2-ジカルベトキシヒドラジン (D i c a r b e t h o x y h y d r a z i n e) (0.13 g、0.73 mmol、25%当量) を加え、続いて固体の K_2CO_3 (0.81 g、5.83 mmol、2当量) を加え、さらに10分間攪拌を続けた。

【 0 1 1 7 】

2 - (2 , 4 - デフルオロ - 3 - (2 , 2 , 2 - トリフルオロエタノール) フェニル) ピリジン (8 : 1 . 0 g 、 2 . 9 1 m m o l 、 1 当量) をそのまま加え、酸素バブリングを行いながら、得られた溶液を還流条件で加熱した。

[0 1 1 8]

3 時間後、TLC によって反応が完了したことがわかり、得られた混合物を室温まで冷却し、減圧下で溶媒を除去した。

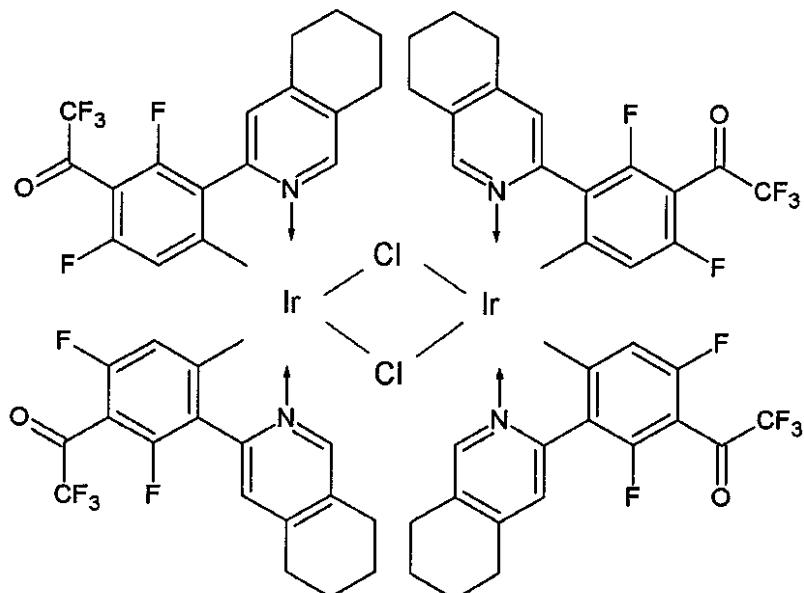
【 0 1 1 9 】

得られた粗生成物を、エチルアセテート / ヘキサンの 1 : 2 混合物を溶離液として使用したシリカゲル上のクロマトグラフィーによって精製して、化合物 9 を黄色油 ($R_f = 0.2, 0.4$ g, 41%) として得た。

[0 1 2 0]

実施例 9： 化合物 10 の合成

【化27】



10

10

20

$\text{IrCl}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ (1当量) を 2 - エトキシエタノール中に溶解させ、75においてアルゴンで30分間脱気した。次に2.2当量のシクロメタレート化配位子 ($\text{C}^{\wedge}\text{N}$) を直接加えた。得られた混合物をアルゴン下125において18時間加熱し、アルミニウム箔を使用して光から保護した。約50まで冷却した後、減圧下で溶媒の体積を半分まで減らした。室温まで冷却した後、混合物を、脱イオン水が入れられた三角フラスコに注いだ。このフラスコを冷蔵庫(約6)中で4時間保存した。沈殿物をフリットガラスで減圧濾過して分離し、水で十分に洗浄した。得られた黄色固体を、アルミニウム箔で光から保護して、室温で終夜減圧乾燥させて、化合物10を黄色固体として得た。

20

30

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 、400MHz) : 8.92 (s, 4H); 7.76 (s, 4H); 5.69 (d, 4H); 3.07 (m, 1H); 2.89 (m, 1H); 2.60 (m, 1H); 2.42 (m, 1H); 1.83 (m, 2H); 1.70 (m, 2H)。

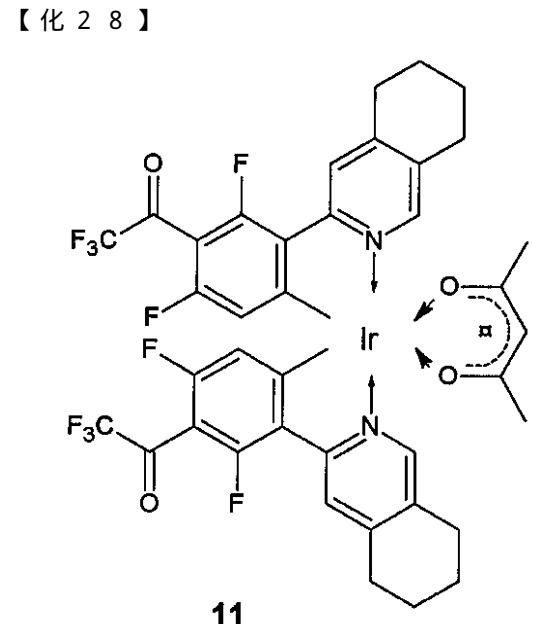
30

【0121】

実施例10：化合物11の合成

30

40



11

50

アセチルアセトン(4当量)とTBAOH(3当量)とのジクロロメタン中の混合物を40において30分間還流して、30まで冷却した。化合物10(1当量)をジクロロメタン中に溶解させ、TBAアセチルアセトネート混合物に加えた。得られた混合物をアルミニウム箔で光から保護しながらアルゴン下で30で12時間加熱した。混合物を室温まで冷却し、シリカカラム(SiO₂/CH₂Cl₂)の上部に付着させた。0~25%のCH₂Cl₂/アセトンを使用して生成物を溶出させて、化合物10を黄色粉末として得た。

¹H-NMR(CDCl₃、400MHz): 8.04(s, 2H); 8.00(s, 2H); 5.84(d, 2H); 5.27(s, 1H); 3.05(m, 4H); 2.80(m, 4H); 1.92(m, 8H); 1.83(s, 6H)。

【0122】

図5は、375nmにおいて励起させた後の化合物11の発光スペクトルを示している。

【0123】

実施例11.OLEDデバイス中に化合物5を使用した結果

スピニコートしたOLED

OLED構造:

ITO/CH₈000/PVK:OXD7:EB166/TPBI/Cs₂CO₃/Al
化合物5(実施例4)-種々の濃度:1.5重量%;2.5重量%;5重量%、および10重量%。

【0124】

ポリ(9-ビニルカルバゾール)(PVK、Mw=1,100,000)およびOXD-7(1,3-ビス[2-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾ-5-イル]ベンゼン)は、それぞれSP2およびLuminescence Technology Corp.より入手した。ポリ(3,4-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)(PEDOT:PSS、Clevios CH8000)および1,3,5-トリス[N-(フェニル)ベンゾイミダゾール]ベンゼン(TPB1)は、それぞれHC StarckおよびLuminescence Technology Corp.より購入した。デバイス構造は、ガラス基体上に支持された底面電極としての120nmの透明ITO(インジウム/酸化スズ)層からなった。Süss MicrotecのDelta6 RCスピニコーターを使用して、ITOの表面上にPEDOT:PSS層および発光層を順次スピニコーティングした。次に、Lesker Spectroscopyシステムを使用してTPBI、Cs₂CO₃、およびアルミニウム金属トップコンタクトを順次蒸着した。ITO表面はO₂プラズマクリーナーであらかじめ処理してから、さらなる処理を行った。PVK:OXD7および種々の質量比の化合物5のクロロベンゼン溶液から発光層をスピニコーティングした。得られたOLEDについて、浜松ホトニクスのC9920-12外部量子効率測定装置を使用して光学的および電気的な特性決定を行った。

【0125】

得られた最高効率は、1%のドーピングで0.91%、1.2Cd/A、および0.741m/Wであった。ターンオン電圧は6Vであった。化合物5を発光材料として含むデバイスは、標準的な発光体Firpicよりも深い青色の座標を示した。

【0126】

CIE座標は以下の通りであった:

化合物5:(0.17; 0.28)

Firpic(0.18, 0.39)

【0127】

エレクトロルミネッセンススペクトルを図6に示している。

【0128】

蒸着させたOLED

10

20

30

40

50

O L E D 構造 :

I T O / A I 4 0 8 3 / N P D / m C P : 化合物 5 / T P B I / C s₂ C O₃ / A l

発光層 (E M L) :

1) m C P : 化合物 5 。化合物 5 のドーピング濃度は 7 重量 % であった。

2) T P B I : 化合物 5 。化合物 5 のドーピング濃度は 1 0 重量 % であった。

P E D O T : P S S (C l e v i o s A I 4 0 8 3) は H C S t a r c k より購入した。N P D (N , N ' - ビス [ナフタレン - 1 - イル] - N , N ' - ビス [フェニル] - ベンジジン) および m C P (1 , 3 - ビス [カルバゾール - 9 - イル] ベンゼン) は L uminescence T echnology C o r p . より購入した。N P D 、 m C P : 化合物 5 、 T P B I 、 C s₂ C O₃ 、およびアルミニウム金属トップコンタクトは L esker S pectro s ystem を使用して順次蒸着した。

10

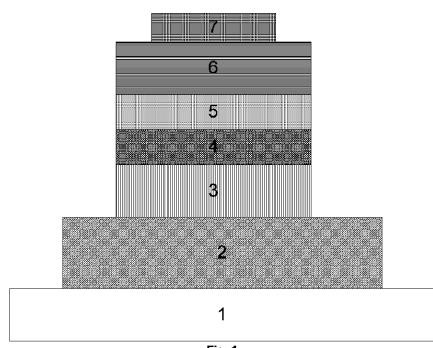
【 0 1 2 9 】

最高効率は、 T P B i をホストとして使用した場合に達成され、 1 . 8 4 % 、 3 . 6 3 C d / A 、および 1 . 8 1 1 m / W が達成された。ターンオフ電圧は約 5 . 5 V であった。

C I E 座標 : 0 . 1 5 ; 0 . 2 6

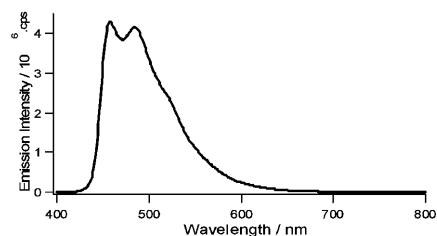
【 図 1 】

Figure 1:



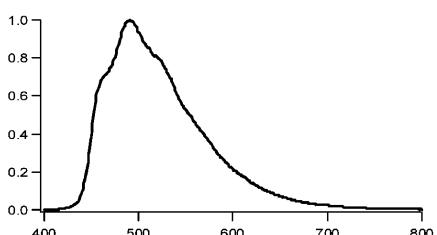
【 図 3 】

Figure 3



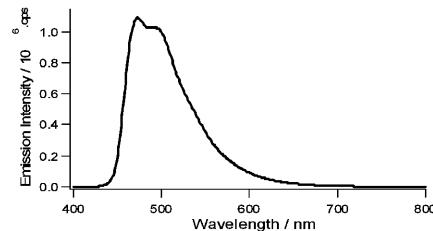
【 図 4 】

Figure 4



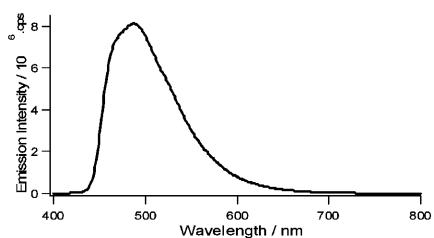
【 図 2 】

Figure 2:



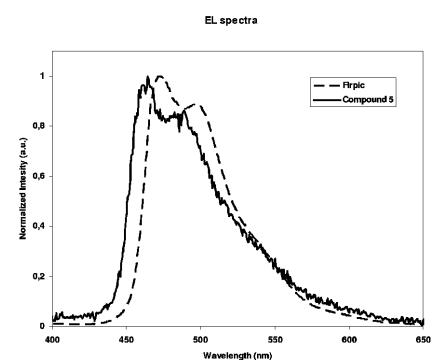
【図5】

Figure 5:



【図6】

Figure 6



【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/EP2010/051508

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER INV. C07F15/00 C09K11/06 H01L51/00 ADD.		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C07F C09K H01L		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used) EPO-Internal, BEILSTEIN Data, CHEM ABS Data		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	US 2004/121184 A1 (THOMPSON ET AL) 24 June 2004 (2004-06-24) cited in the application table II; compound 18, paragraph [0012] - paragraph [0014] paragraph [0061] - paragraph [0062]	1-14
A	KIMYONOK A ET AL.: "Norbornene-Based Copolymers with Iridium Complexes and Bis(carbazolyl)fluorene Groups in Their Side-Chains and Their Use in Light-Emitting Diodes" CHEMISTRY OF MATERIALS, vol. 19, no. 23, 13 November 2007 (2007-11-13), pages. 5602-5608, XP002523644 ISSN: 0897-4756 DOI: 10.1021/cm0717357 compounds 3,10,11,12	1-14
	-/-	
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C.		<input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier document but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority, claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed		
"T" later document published after the International filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art. "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the International search report	
22 April 2010	11/05/2010	
Name and mailing address of the ISA/ European Patent Office, P.B. 5816 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040 Fax: (+31-70) 340-3016	Authorized officer Elliott, Adrian	

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No PCT/EP2010/051508

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	US 2005/208335 A1 (KAMATANI ET AL) 22 September 2005 (2005-09-22) page 37; compound 396	1-14
A	US 2002/024293 A1 (IGARASHI ET AL) 28 February 2002 (2002-02-28) page 8; compounds K-17	1-14
A	BOOTH B L ET AL: "Metal carbonyl chemistry. XI. Comparison of the reactivities of the anions [M(CO)2(PPh3)2]– (M = Co, Rh or Ir) towards fluoroaromatic compounds" JOURNAL OF THE CHEMICAL SOCIETY, DALTON TRANSACTIONS, 1975, pages 1843-1847, XP009132476 ISSN: 1472-7773 DOI: 10.1039/DT9750001843 compound III	1-14

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No PCT/EP2010/051508

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)		Publication date
US 2004121184 A1	24-06-2004	AU	2003263929 A1	03-03-2004
		CN	1681904 A	12-10-2005
		EP	1534799 A1	01-06-2005
		JP	4343838 B2	14-10-2009
		JP	2006513278 T	20-04-2006
		KR	20050052473 A	02-06-2005
		WO	2004016711 A1	26-02-2004
US 2005208335 A1	22-09-2005	AU	2256502 A	11-06-2002
		CN	1478372 A	25-02-2004
		WO	0245466 A1	06-06-2002
		JP	4006335 B2	14-11-2007
		US	2003059646 A1	27-03-2003
US 2002024293 A1	28-02-2002	JP	2009246373 A	22-10-2009
		US	2008132701 A1	05-06-2008

フロントページの続き

(81) 指定国 AP(BW,GH,GM,KE,LS,MW,MZ,NA,SD,SL,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,MD,RU,TJ,TM),EP(AT,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV,MC,MK,MT,NL,NO,PL,PT,RO,SE,SI,S,K,SM,TR),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,ML,MR,NE,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,CO,CR,CU,CZ,DE,DK,DM,DO,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IS,JP,KE,KG,KM,KN,KP,KR,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LT,LU,LY,MA,MD,ME,MG,MK,MN,MW,MX,MY,MZ,NA,NG,NI,NO,NZ,OM,PE,PG,PH,PL,PT,RO,RS,RU,SC,SD,SE,SG,SK,SL,SM,ST,SV,SY,TH,TJ,TM,TN,TR,TT,TZ,UA,UG,US,UZ,VC,VN,ZA,ZM,ZW

(72) 発明者 イル・ジュン

スイス・CH - 1024・エキュプラン・アヴニュ・デブネ・13

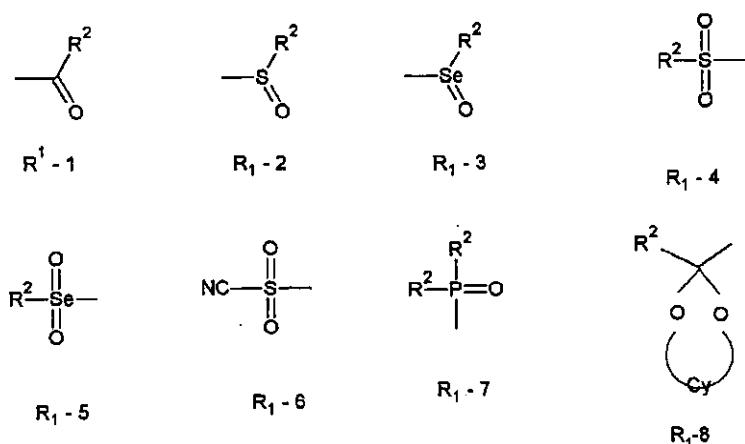
(72) 発明者 ミヒヤエル・グレツツエル

スイス・CH - 1025・サン・スュルピス・シュマン・デュ・マルキーザ・7A

F ターム(参考) 3K107 AA01 BB01 CC04 CC06 CC21 DD53 DD59 DD64 DD67 DD69

4H050 AA01 AB92 WB14

【要約の続き】



からなる群から選択される置換基である)で表される錯体を含む発光材料、その発光材料の有機発光デバイス中の発光材料としての使用、および前記発光材料を含む有機発光デバイス。

专利名称(译)	一种发光材料，用作OLED的发光层中的主体掺杂剂		
公开(公告)号	JP2012517492A	公开(公告)日	2012-08-02
申请号	JP2011548719	申请日	2010-02-08
[标]申请(专利权)人(译)	索尔维公司		
申请(专利权)人(译)	苏威 (兴业ANONYME)		
[标]发明人	モハンマド・カジャ・ナゼルデイン エティエンヌ・ダヴィッド・ラノフ イル・ジュン ミヒヤエルグレツツエル		
发明人	モハンマド・カジャ・ナゼルデイン エティエンヌ・ダヴィッド・ラノフ イル・ジュン ミヒヤエルグレツツエル		
IPC分类号	C09K11/06 C07F15/00 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0085 C07F15/0033 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1029 C09K2211/1033 C09K2211/1037 C09K2211/1044 C09K2211/185 H01L51/0037 H01L51/0042 H01L51/007 H01L51/5016 H01L2251/308		
FI分类号	C09K11/06.660 C07F15/00.E H05B33/14.B		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC04 3K107/CC06 3K107/CC21 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD64 3K107/DD67 3K107/DD69 4H050/AA01 4H050/AB92 4H050/WB14		
代理人(译)	村山彥		
优先权	PCT/KR2009/000590 2009-02-06 WO		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

具有在其吡啶环上被至少一个取代基取代的吡啶基三唑配体的Ir配合物，和包含这种Ir配合物的发光材料。发现这种发光材料与吡啶环中没有取代基的吡啶基三唑配体相比，具有显着增强的光致磷光量子产率和蓝色偏移的光致磷光发射，而非其他Ir配合物。使用这种发光材料和包括其的有机发光装置。

