

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5753873号  
(P5753873)

(45) 発行日 平成27年7月22日 (2015. 7. 22)

(24) 登録日 平成27年5月29日 (2015. 5. 29)

(51) Int. Cl.

F I

H O 1 L 51/50 (2006. 01)

H O 5 B 33/14

B

C O 7 D 405/14 (2006. 01)

H O 5 B 33/22

B

C O 9 K 11/06 (2006. 01)

H O 5 B 33/22

D

C O 7 D 405/14

C S P

C O 9 K 11/06

6 9 0

請求項の数 12 (全 84 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2013-94610 (P2013-94610)  
 (22) 出願日 平成25年4月26日 (2013. 4. 26)  
 (62) 分割の表示 特願2012-508130 (P2012-508130)  
                   の分割  
       原出願日 平成23年2月14日 (2011. 2. 14)  
 (65) 公開番号 特開2013-163682 (P2013-163682A)  
 (43) 公開日 平成25年8月22日 (2013. 8. 22)  
       審査請求日 平成25年4月26日 (2013. 4. 26)  
 (31) 優先権主張番号 特願2010-84476 (P2010-84476)  
 (32) 優先日 平成22年3月31日 (2010. 3. 31)  
 (33) 優先権主張国 日本国 (JP)

(73) 特許権者 000183646  
                   出光興産株式会社  
                   東京都千代田区丸の内3丁目1番1号  
 (74) 代理人 100078732  
                   弁理士 大谷 保  
 (74) 代理人 100081765  
                   弁理士 東平 正道  
 (72) 発明者 沼田 真樹  
                   千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地  
 (72) 発明者 長島 英明  
                   千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地

審査官 小西 隆

最終頁に続く

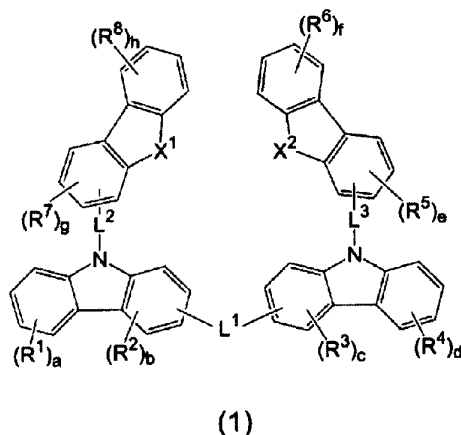
(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス素子用材料及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記式 (1) で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【化 1】



(式 (1) において、 $X^1$  及び  $X^2$  はそれぞれ独立して酸素原子又は硫黄原子であって同時に硫黄原子になることはなく、 $R^1 \sim R^8$  はそれぞれ独立して炭素数 1 ~ 20 のアルキル基

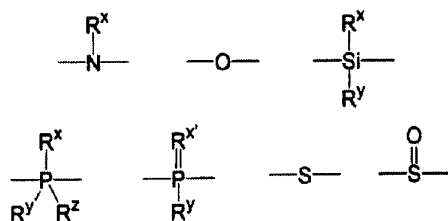
、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルコキシ基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリールオキシ基、環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基、アミノ基、シリル基、フルオロ基、又はシアノ基を表し、これらの置換基  $R^1 \sim R^8$  は、さらにこれらの置換基で置換されていてもよい。また、 $R^1 \sim R^8$  のそれぞれが複数ある場合はそれぞれ同一でも異なってもよい。

$a, d, f, h$  はそれぞれ独立して 0 ~ 4 のいずれかの整数を表し、 $b, c, e, g$  はそれぞれ独立して 0 ~ 3 のいずれかの整数を表し、 $a \sim h$  の合計が 6 以下である。

$L^1$  は、下記式 (1A) で表される 2 価の連結基のいずれか (式 (1A) 中、 $R^x, R^y$  及び  $R^z$  はそれぞれ独立に、水素原子又は前述した  $R^1 \sim R^8$  と同じであり、それらから選ばれる基である。また、 $R^{x'}$  は酸素である。)、

10

【化 2】



(1A)

20

環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基、又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリーレン基を表し、

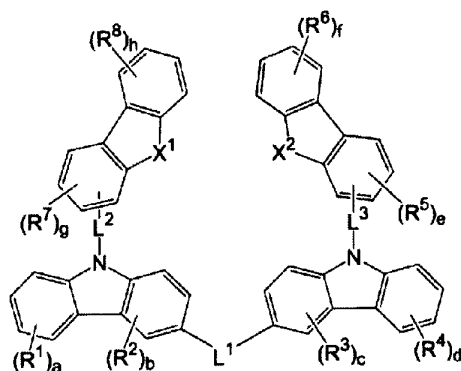
$L^2$  及び  $L^3$  はそれぞれ独立して、単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基、又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリーレン基を表す。 $L^1 \sim L^3$  はさらに、前記置換基  $R^1 \sim R^8$  のいずれかで置換されていてもよい。但し、 $L^1$  が環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリーレン基である場合は  $a$  及び  $d$  はそれぞれ独立して 1 ~ 4 のいずれかの整数を表す。)

30

【請求項 2】

下記式 (2) で表される請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【化 3】



(2)

40

(式 (2) 中、 $X^1$  及び  $X^2$ 、 $R^1 \sim R^8$ 、 $a \sim h$ 、 $L^1 \sim L^3$  は前記と同様である。)

【請求項 3】

前記  $L^2$  及び  $L^3$  が単結合である請求項 1 又は 2 に記載の有機エレクトロルミネッセンス

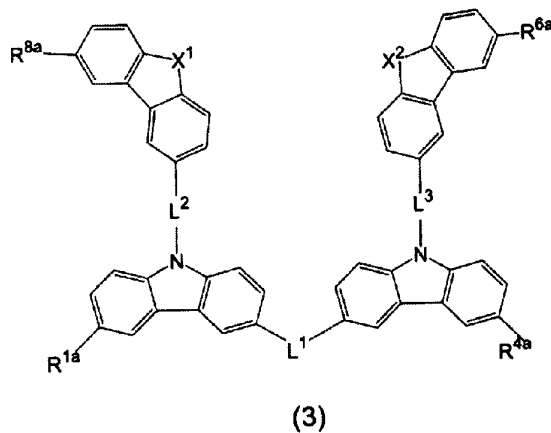
50

素子用材料。

【請求項 4】

下記式 (3) で表される請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【化 4】



(式 (3) 中、 $R^{1a}$  及び  $R^{4a}$  はそれぞれ独立して、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基を表し、当該アリール基は、さらに前記置換基  $R^1 \sim R^8$  のいずれかで置換されていてもよい。

$R^{6a}$  及び  $R^{8a}$  はそれぞれ独立して、水素原子、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基を表し、当該アリール基は、さらに前記置換基  $R^1 \sim R^8$  のいずれかで置換されていてもよい。  
 $X^1$ 、 $X^2$ 、 $L^1 \sim L^3$  は前記と同様である。)

【請求項 5】

陰極と陽極との間に、発光層を含む一層以上の有機薄膜層を有し、前記有機薄膜層の少なくとも一層が、請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 6】

前記発光層が、前記有機エレクトロルミネッセンス素子用材料をホスト材料として含有する請求項 5 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 7】

前記発光層が、ホスト材料とりん光発光性材料を含有し、該ホスト材料が前記有機エレクトロルミネッセンス素子用材料である請求項 5 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 8】

前記りん光発光性材料が、イリジウム (Ir)、オスミウム (Os) および白金 (Pt) から選ばれる金属を含有する化合物である請求項 7 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 9】

前記金属を含有する化合物が、オルトメタル化金属錯体である請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 10】

前記陰極と前記有機薄膜層との界面領域に還元性ドーパントを有する請求項 5 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 11】

前記発光層と前記陰極との間に電子注入層を有し、該電子注入層が含窒素環誘導体を含有する請求項 5 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 12】

前記発光層と前記陽極との間に正孔輸送層を有し、該正孔輸送層が前記有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有する請求項 5 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の有機エレクト

ロルミネッセンス素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、エレクトロルミネッセンスをELと略記することがある）は、電界を印加することより、陽極より注入された正孔と陰極より注入された電子の再結合エネルギーにより蛍光性物質あるいは燐光性物質が発光する原理を利用した自発光素子である。低電圧駆動の積層型有機EL素子が報告されて以来、有機材料を構成材料とする有機EL素子に関する研究が盛んに行われている。この積層型素子では、トリス（8-キノリノラト）アルミニウムを発光層に、テトラフェニルジアミン誘導体を正孔輸送層に用いている。積層構造の利点としては、発光層への正孔の注入効率を高めること、陰極より注入された電子をブロックして再結合により生成する励起子の生成効率を高めること、発光層内で生成した励起子を閉じ込めること等が挙げられる。この例のように有機EL素子の素子構造としては、正孔輸送（注入）層、電子輸送発光層の2層型、又は正孔輸送（注入）層、発光層、電子輸送（注入）層の3層型等がよく知られている。こうした積層型構造素子では注入された正孔と電子の再結合効率を高めるため、素子構造や素子の形成方法の工夫がなされている。

10

20

【0003】

有機EL素子の発光材料としてはトリス（8-キノリノラト）アルミニウム錯体等の金属錯体、クマリン誘導体、テトラフェニルブタジエン誘導体、ジスチリルアリーレン誘導体、オキサジアゾール誘導体等の発光材料が知られている。これらの発光材料からは青色から赤色までの可視領域の発光が得られることが報告されており、カラー表示素子が実現している。

従来、有機EL素子の発光材料として一重項励起子により発光する蛍光発光材料が用いられているが、近年、蛍光発光材料に加えて三重項励起子により発光する燐光発光材料利用することも提案されている（例えば、非特許文献1と2）。有機EL素子内で電子と正孔が再結合する際にはスピン多重度の違いから一重項励起子と三重項励起子とが1：3の割合で生成すると考えられているので、燐光発光材料を用いた有機EL素子は、蛍光発光材料のみを使った有機EL素子に比べて3～4倍の発光効率を達成し得る。しかし、青色燐光発光では、高効率かつ長寿命の達成が困難であり、それらを達成するホスト材料の開発が望まれている。

30

【0004】

特許文献1には、2つのカルバゾール骨格が連結基を介して結合された化合物が提案されている。特許文献2には、2つのカルバゾール骨格が1つのジベンゾフラン骨格またはジベンゾチオフエン骨格に結合した化合物が記載されている（例えば、化合物23および24）。特許文献3には、2つのカルバゾール骨格が1つのジベンゾフラン骨格に結合した化合物が記載されている（例えば、化合物43）。

40

しかし、これらには、2つのカルバゾール骨格を有し、それぞれの骨格のNの部位で必要に応じて連結基を介してジベンゾフラン骨格やジベンゾチオフエン骨格が結合している化合物は記載されていない。

また、特許文献1～3に記載の化合物は青色燐光発光の効率および寿命が不十分であった。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0005】

【特許文献1】WO2007/108459

50

【特許文献2】WO2007/119816

【特許文献3】WO2007/077810

【非特許文献1】Applied Physics letters Vol. 74  
No. 3, pp442-444

【非特許文献2】Applied Physics letters Vol. 75  
No. 1, pp4-6

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

本発明は、上記課題を解決するためになされたもので、燐光発光が高効率でかつ長寿命な有機EL素子及びそれを実現する有機EL素子用材料を提供することを目的とする。

10

【課題を解決するための手段】

【0007】

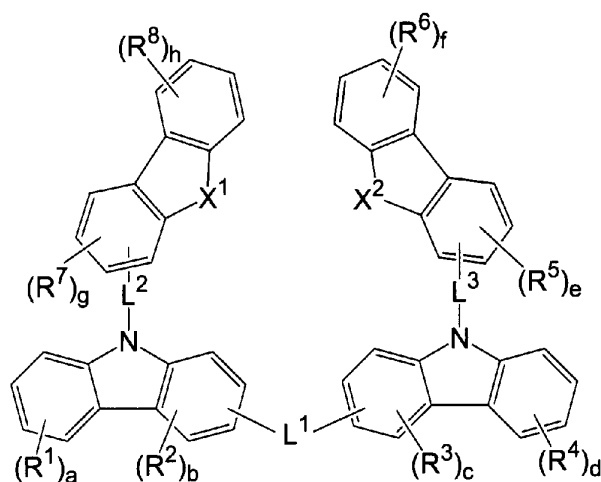
本発明者らは、前記目的を達成するために鋭意研究を重ねた結果、下記式(1)で表される化合物の構成が、有機EL素子材料として用いた場合に、後述する理由により高い効率で燐光発光を生じさせ、かつ素子の寿命を長くできることを見出し、本発明を解決するに至った。

【0008】

すなわち、本発明は、下記式(1)で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料である。

20

【化1】



30

(1)

(式(1)において、 $X^1$ 及び $X^2$ はそれぞれ独立して酸素原子又は硫黄原子であって同時に硫黄原子になることはなく、 $R^1 \sim R^8$ はそれぞれ独立して炭素数1~20のアルキル基、環形成炭素数3~20のシクロアルキル基、炭素数1~20のアルコキシ基、環形成炭素数3~20のシクロアルコキシ基、環形成炭素数6~18のアリール基、環形成炭素数6~18のアリールオキシ基、環形成原子数5~18のヘテロアリール基、アミノ基、シリル基、フルオロ基、又はシアノ基を表し、これらの置換基 $R^1 \sim R^8$ は、さらにこれらの置換基で置換されていてもよい。また、 $R^1 \sim R^8$ のそれぞれが複数ある場合はそれぞれ同一でも異なってもよい。

40

$a, d, f, h$ はそれぞれ独立して0~4のいずれかの整数を表し、 $b, c, e, g$ はそれぞれ独立して0~3のいずれかの整数を表し、 $a \sim h$ の合計が6以下である。

$L^1$ は単結合、Nを含む2価の連結基、Oを含む2価の連結基、Siを含む2価の連結基、Pを含む2価の連結基、Sを含む2価の連結基、炭素数1~20のアルキレン基、環形成炭素数3~20のシクロアルキレン基、環形成炭素数6~18のアリーレン基、環形

50

成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリーレン基、2 価のアミノ基、又は 2 価のシリル基を表し、  
 $L^2$  及び  $L^3$  はそれぞれ独立して、単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基、環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリーレン基を表す。 $L^1 \sim L^3$  はさらに、前記置換基  $R^1 \sim R^8$  のいずれかで置換されていてもよい。但し、 $L^1$  が環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリーレン基である場合は  $a$  及び  $d$  はそれぞれ独立して 1 ~ 4 のいずれかの整数を表す。)

【0009】

さらに、本発明は、陰極と陽極間に、発光層を含む一層以上の有機薄膜層を有し、前記有機薄膜層の少なくとも一層が、上記式 (1) で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子である。

10

【発明の効果】

【0010】

本発明によれば、燐光発光が高効率でかつ長寿命である有機 EL 素子及びそれを実現する有機 EL 素子用材料を提供することができる。

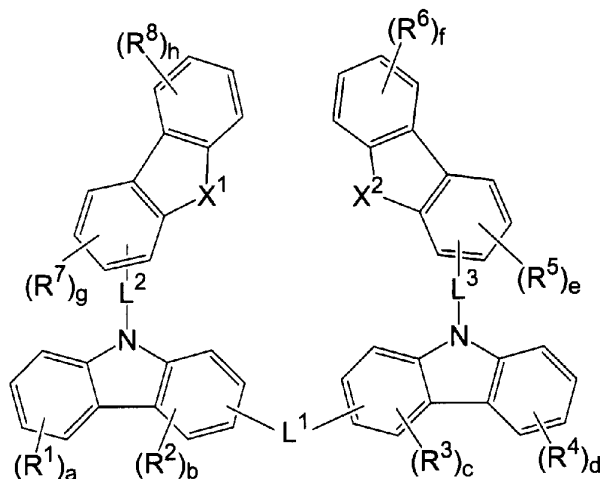
【発明を実施するための形態】

【0011】

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料は、下記式 (1) で表される。

【化 2】

20



30

(1)

(式 (1) において、 $X^1$  及び  $X^2$  はそれぞれ独立して酸素原子又は硫黄原子であって同時に硫黄原子になることはなく (すなわち、 $X^1$  及び  $X^2$  が酸素原子であるか、一方が酸素原子で他方が硫黄原子)、 $R^1 \sim R^8$  はそれぞれ独立して炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルコキシ基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーロキシ基、環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基、アミノ基、シリル基、フルオロ基、又はシアノ基を表し、これらの置換基  $R^1 \sim R^8$  は、さらにこれらの置換基 (以下、まとめて「置換基 R」ということがある) で置換されていてもよい。また、 $R^1 \sim R^8$  のそれぞれが複数ある場合はそれぞれ同一でも異なってもよい。

40

$a, d, f, h$  はそれぞれ独立して 0 ~ 4 のいずれかの整数を表し、 $b, c, e, g$  はそれぞれ独立して 0 ~ 3 のいずれかの整数を表し、 $a \sim h$  の合計が 6 以下である。

$L^1$  は単結合、N を含む 2 価の連結基、O を含む 2 価の連結基、Si を含む 2 価の連結基、P を含む 2 価の連結基、S を含む 2 価の連結基、炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基、環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリーレン基、2 価のアミノ基、又は 2 価のシリル基を表し、

50

$L^2$ 及び $L^3$ はそれぞれ独立して、単結合、炭素数1～20のアルキレン基、環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、環形成炭素数6～18のアリーレン基、環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基を表す。 $L^1 \sim L^3$ はさらに、前記置換基Rのいずれかで置換されていてよい。但し、 $L^1$ が環形成炭素数6～18のアリーレン基又は環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基である場合はa及びdはそれぞれ独立して1～4のいずれかの整数を表す。)

【0012】

特に式(1)のように、カリバゾリル基のN位(9位)でジベンゾフラニル基あるいはジベンゾチオフェニル基が直接又は結合基を介して結合することで、ジベンゾフランあるいはジベンゾチオフェンのLUMO準位が深くなり、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を用いた有機EL素子の発光層などへの電子の注入が容易になる。これにより、キャリアバランス調整を容易とすることが可能となり、本発明の効果が良好に奏される。

【0013】

$R^1 \sim R^8$ のアルキル基としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、s-ブチル基、イソブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基、n-ノニル基、n-デシル基、n-ウンデシル基、n-ドデシル基、n-トリデシル基、n-テトラデシル基、n-ペンタデシル基、n-ヘキサデシル基、n-ヘプタデシル基、n-オクタデシル基、ネオペンチル基、1-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基、3-メチルペンチル基等が挙げられる。

【0014】

$R^1 \sim R^8$ のシクロアルキル基の例としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、ノルボルニル基、アダマンチル基等が挙げられる。

$R^1 \sim R^8$ のアルコキシ基としては、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基等が挙げられ、炭素数が3以上のものは直鎖状、環状又は分岐を有するものでもよい。

【0015】

$R^1 \sim R^8$ のシクロアルコキシ基としては、シクロペントキシ基、シクロヘキシルオキシ基等が挙げられる。

$R^1 \sim R^8$ のアリール基としては、フェニル基、トリル基、キシリル基、メシチル基、o-ビフェニル基、m-ビフェニル基、p-ビフェニル基、o-ターフェニル基、m-ターフェニル基、p-ターフェニル基、ナフチル基、フェナントリル基などが挙げられる。中でもフェニル基、メシチル基が好ましい。

$R^1 \sim R^8$ のアリールオキシ基としては、例えば、フェノキシ基、ビフェニルオキシ基等が挙げられる。

【0016】

$R^1 \sim R^8$ のヘテロアリール基としては、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ピローリル基、フリル基、チエニル基、シローリル基、ピリジル基、キノリル基、イソキノリル基、ベンゾフリル基、イミダゾリル基、ピリミジル基、セレンフェニル基、オキサジアゾリル基、トリアゾーリル基等が挙げられる。

$R^1 \sim R^8$ のアミノ基及びシリル基は既述のような置換基で置換されていてよい。シリル基については、トリメチルシリル基が好ましい。

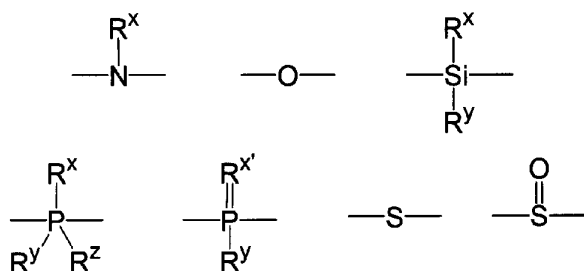
【0017】

a, d, f, hはそれぞれ独立して、0～3のいずれかの整数であることが好ましく、0～2のいずれかの整数であることがより好ましい。また、b, c, e, gはそれぞれ独立して、0～2のいずれかの整数であることが好ましく、0～1のいずれかの整数であることがより好ましい。さらに、昇華性及び分子量が大きすぎると蒸着の際に熱分解を伴いやすくなることを考慮して、a～hの合計が4以下であることが好ましい。

## 【 0 0 1 8 】

$L^1$  の、Nを含む2価の連結基、Oを含む2価の連結基、Siを含む2価の連結基、Pを含む2価の連結基、Sを含む2価の連結基としては、下記のような基が挙げられる。

## 【 化 3 】



10

(上記各式中、 $R^x$ 、 $R^y$ 及び $R^z$ はそれぞれ独立に、水素原子又は既述の置換基Rから選ばれる基である。また、 $R^{x'}$ は酸素である。) 上記の中では、「-S-」基、ホスホキシド基、エーテル基が好ましい。

## 【 0 0 1 9 】

$L^1 \sim L^3$ のアルキレン基、環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、環形成炭素数6～18のアリーレン基、環形成炭素数5～18のヘテロアリーレン基、2価のアミノ基、又は2価のシリル基としては、 $R^1 \sim R^8$ の置換基の1つの水素原子を結合手で置き換えたものが挙げられる。また、本発明においてはアリーレン基には9,9-フルオレニリデン基も含まれる。

20

アリーレン基としては後述する他、p-フェニレン基、m-フェニレン基、ビフェニレン基が好適であり、アミノ基としては後述する他、ビフェニルアミノ基が好適である。

$L^1 \sim L^3$ の連結基はさらに置換基を有してもよく、当該置換基と $R^1 \sim R^8$ の置換基で説明した置換基と同義である。

## 【 0 0 2 0 】

本発明の有機EL素子用材料は、りん光発光性材料と共に用いる、ホスト材料または正孔輸送材料であることが好ましい。また、3重項のエネルギーレベルが2.0 eV以上であることが好ましく、2.5 eV以上であることがより好ましい。

## 【 0 0 2 1 】

30

本発明の有機EL素子用材料は、下記式(2)で表されるものであることが好ましい。下記式(2)のように、2個のカルバゾール基が3位で、直接又は連結基を介して結合する場合の利点としては下記の通りである。

(1) 合成上の利便性が高い。

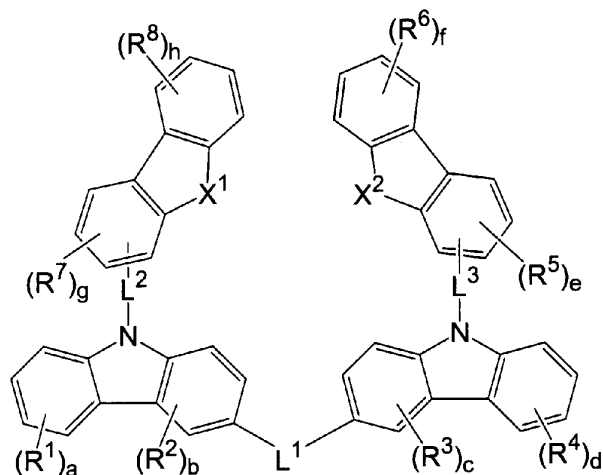
(2) カルバゾールの3,6位は化学的安定性に劣る部位であり、3,6位のうち一方でも水素原子以外の置換基を導入することで化学的安定性を高められる可能性がある。このため、さらに6位にも置換基を導入した構造はさらに好ましい。

(3) 3位でカルバゾールが単結合を介して結合した場合は2つのカルバゾール上のN原子同士が共役することによってHOMOが浅くなり、正孔注入・輸送性が高まり、キャリアバランス調整を容易とすることができる。

40

## 【 0 0 2 2 】

## 【化 4】



10

(2)

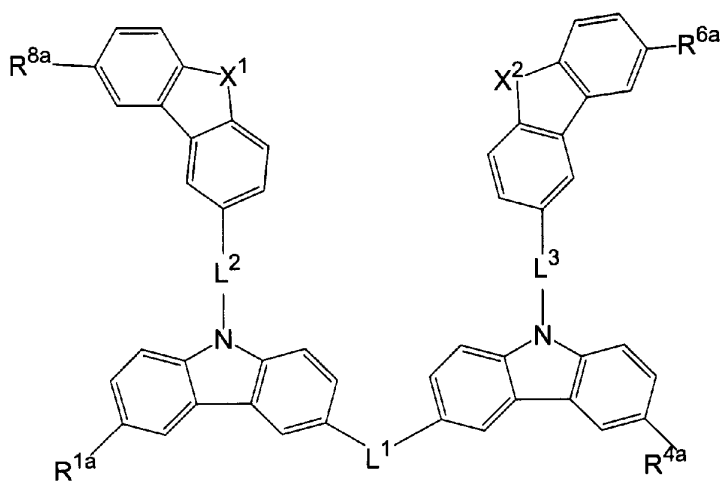
(式(2)中、 $X^1$ 及び $X^2$ 、 $R^1 \sim R^8$ 、 $a \sim h$ 、 $L^1 \sim L^3$ は前記と同様である。)

## 【0023】

また、本発明の有機EL素子用材料は、化学的安定性をさらに高める点で、下記式(3)で表されるものであることが好ましい。

20

## 【化 5】



30

(3)

(式(3)中、 $R^{1a}$ 、 $R^{4a}$ 、 $R^{6a}$ 、 $R^{8a}$ はそれぞれ独立して水素原子(一般式(1)における $a, d, h, f$ が0の場合に相当)又は環形成炭素数6~18のアリール基(前記置換基 $R$ と同様のアリール基)を表し、当該アリール基は、さらに前記置換基 $R$ で置換されていてもよい。 $X^1$ 、 $X^2$ 、 $L^1 \sim L^3$ は前記と同様である。)

40

## 【0024】

さらに、 $L^2$ 及び $L^3$ が単結合であることが好ましく、 $L^1$ も単結合であることが好ましい。これは、昇華性及び分子量が大きすぎると蒸着の際に熱分解を伴いやすくなる可能性があるからである。更に、低電圧化や半減寿命の点でも、「 $L^1$ 」及び/又は「 $L^2$ 及び $L^3$ 」が単結合であることが好ましい。また、一般式(1)~(3)における $X^1$ 及び $X^2$ は、酸素原子であることが外部量子効率と寿命の点で好ましい。

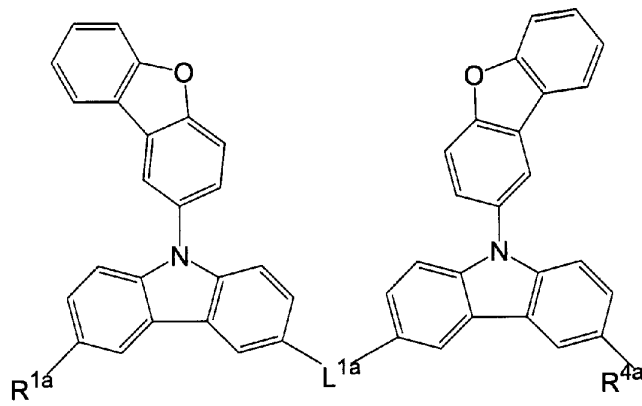
## 【0025】

また、一般式(3)はさらに低電圧化や半減寿命の点で、下記一般式(3a)で表され

50

るものであることが好ましい。

【化 6】



(3a)

(式(3a)中、 $R^{1a}$ 、 $R^{4a}$ はそれぞれ独立して水素原子又はメチル基で置換されていてもよいフェニル基を表し、 $L^{1a}$ は単結合又はフェニレン基である。但し、 $R^{1a}$ 及び $R^{4a}$ が共に水素原子であって、 $L^{1a}$ がフェニレン基である場合はない。)

上記において、 $R^{1a}$ 及び $R^{4a}$ が共に水素原子であって、 $L^{1a}$ がフェニレン基である場合には、カルバゾールの6位が水素原子であり、かつ、3位で単結合を介して結合していないため、化学的安定性やキャリアバランス調整の点で、有機EL素子用材料として特に優れた材料ではない。

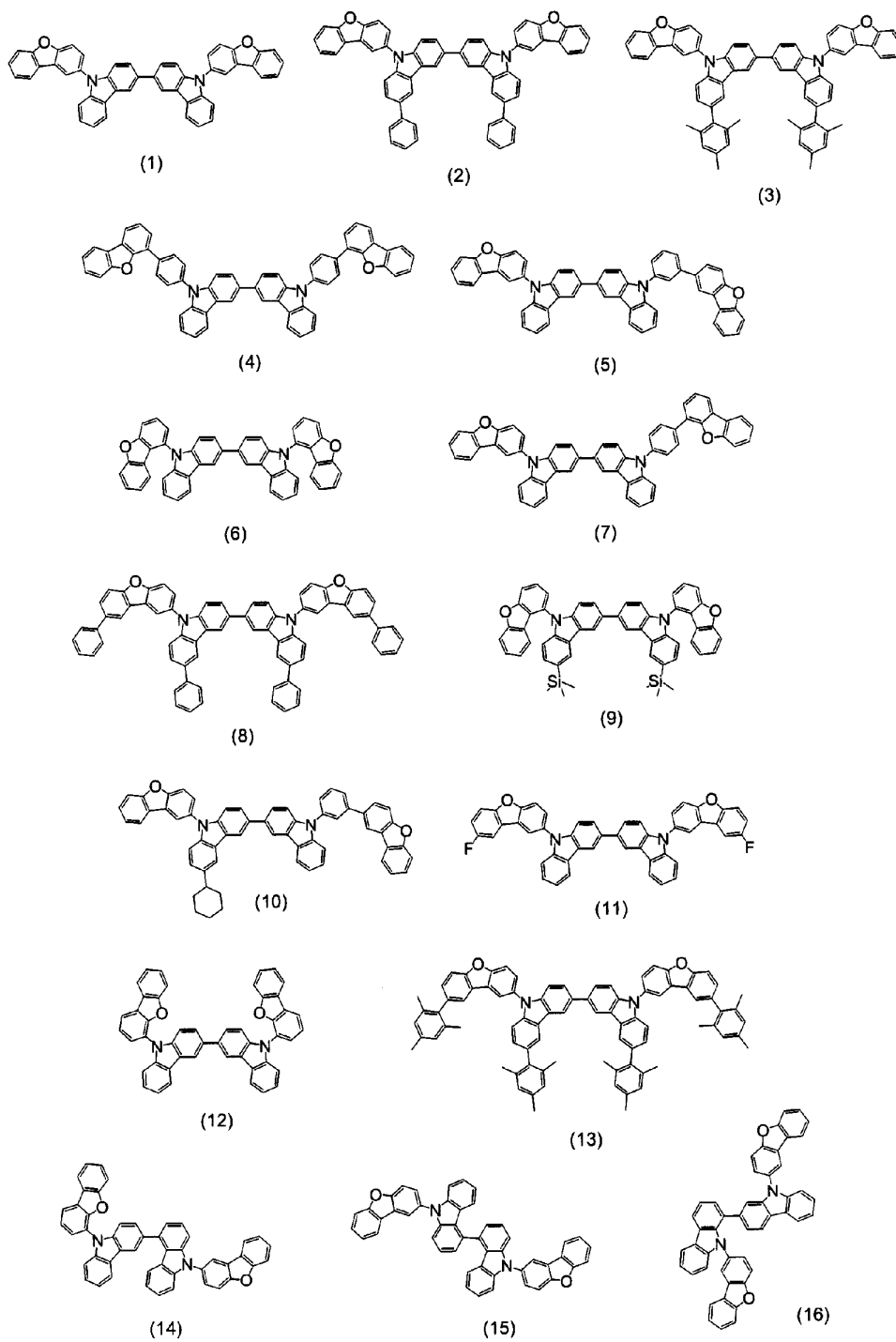
【0026】

本発明の一般式(1)で表される有機EL素子用材料の具体例を以下に示すが、本発明は、これら例示化合物に限定されるものではない。なお、下記具体例に示されている置換基は、本発明において好ましい置換基として挙げることができる。

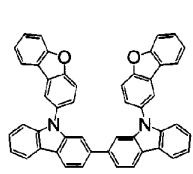
10

20

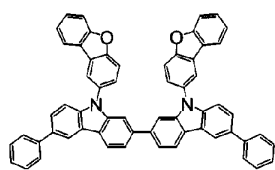
## 【化 7】



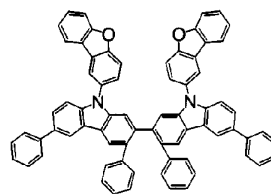
## 【化 8】



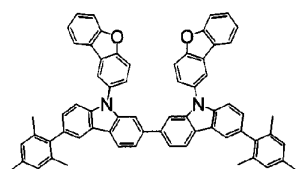
(17)



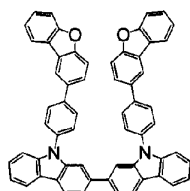
(18)



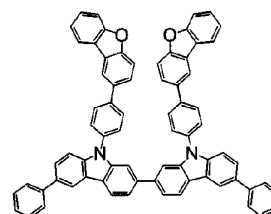
(19)



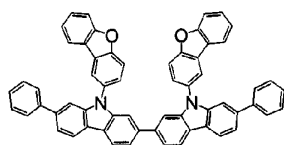
(20)



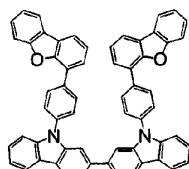
(21)



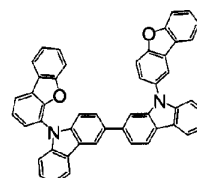
(22)



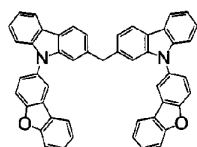
(23)



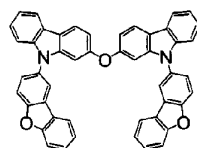
(24)



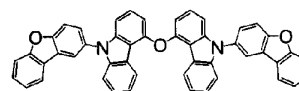
(25)



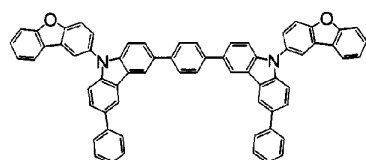
(26)



(27)



(28)



(31)

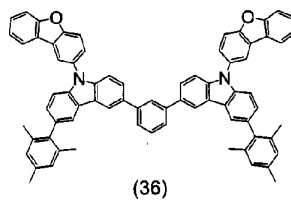
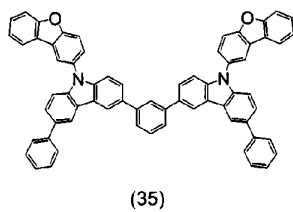
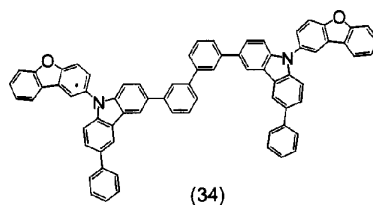
10

20

30

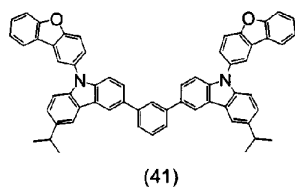
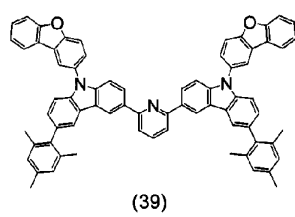
40

## 【化 9】



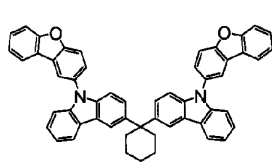
10

20

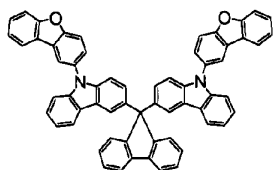


30

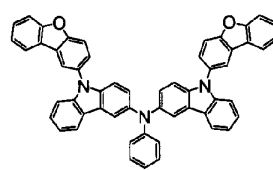
## 【化 10】



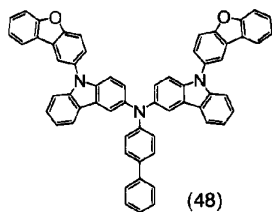
(45)



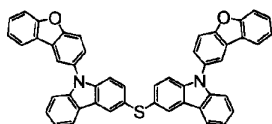
(46)



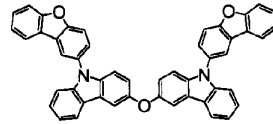
(47)



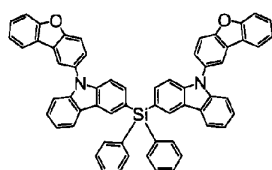
(48)



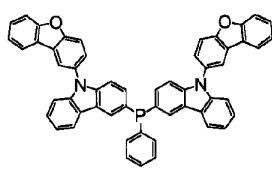
(49)



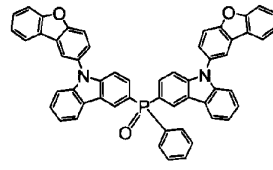
(50)



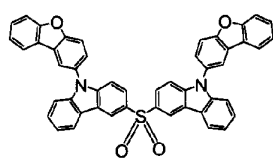
(51)



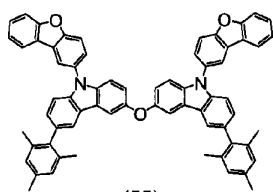
(52)



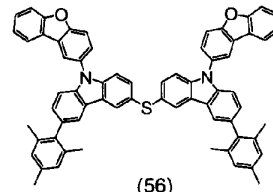
(53)



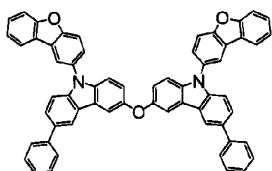
(54)



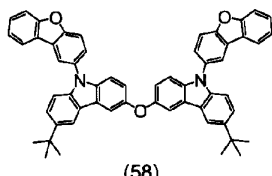
(55)



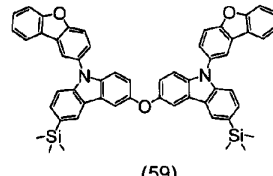
(56)



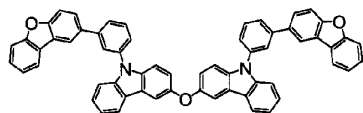
(57)



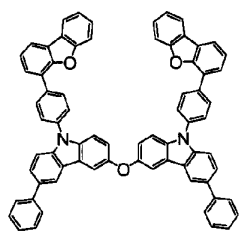
(58)



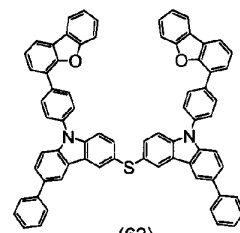
(59)



(60)



(61)



(62)

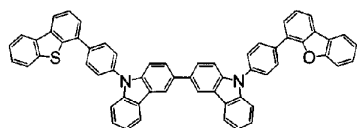
10

20

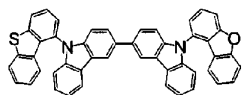
30

40

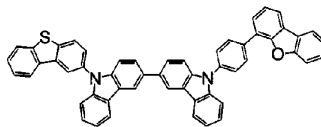
## 【化 1 1】



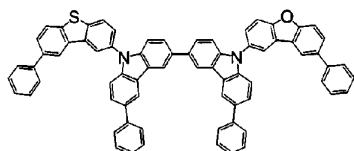
(66)



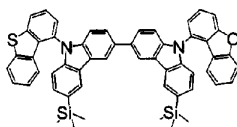
(68)



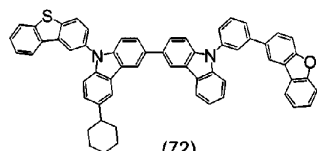
(69)



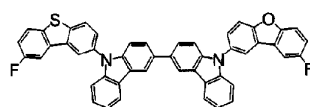
(70)



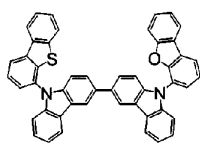
(71)



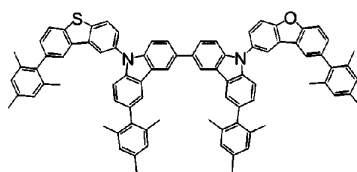
(72)



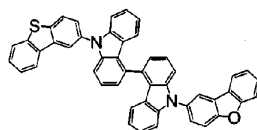
(73)



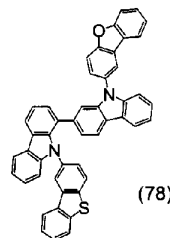
(74)



(75)



(77)



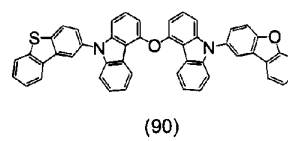
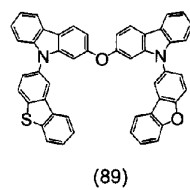
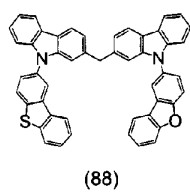
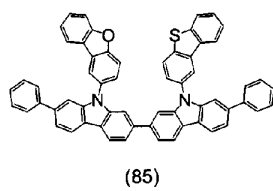
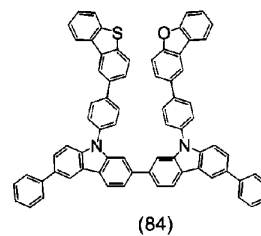
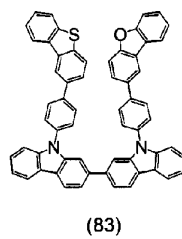
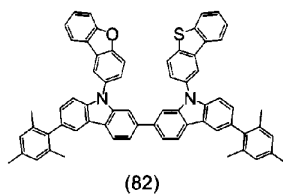
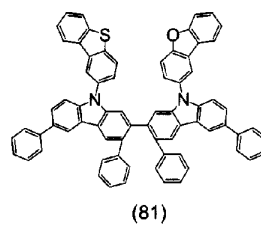
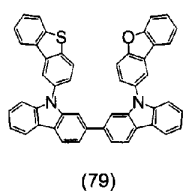
(78)

10

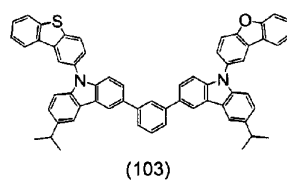
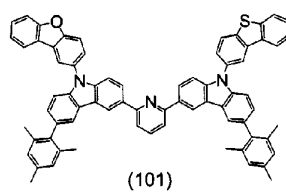
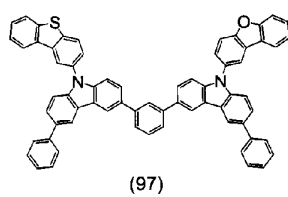
20

30

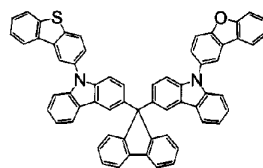
## 【化 1 2】



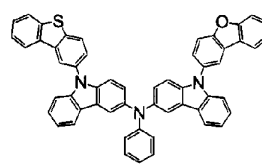
## 【化 1 3】



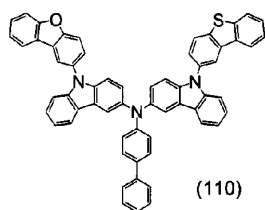
## 【化 1 4】



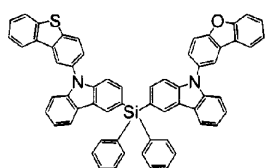
(108)



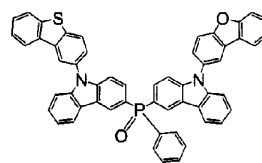
(109)



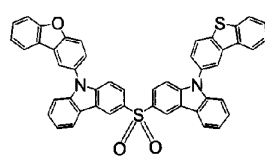
(110)



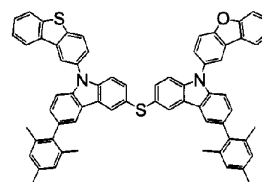
(113)



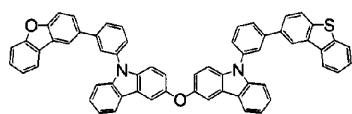
(115)



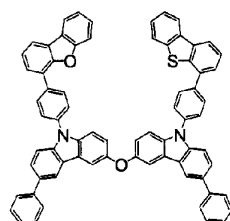
(116)



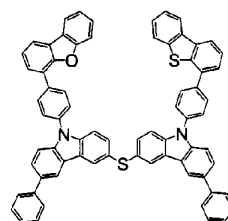
(118)



(122)



(123)



(124)

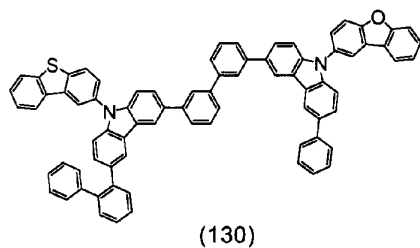
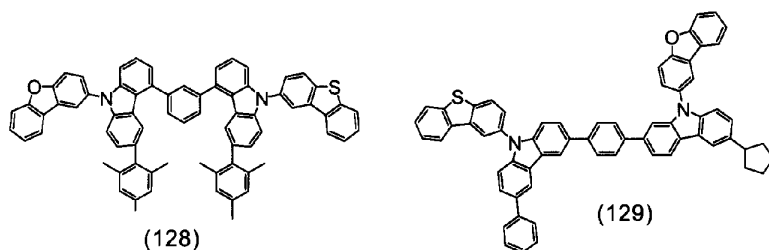
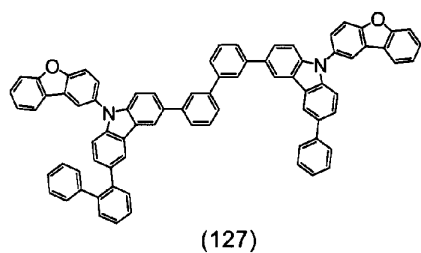
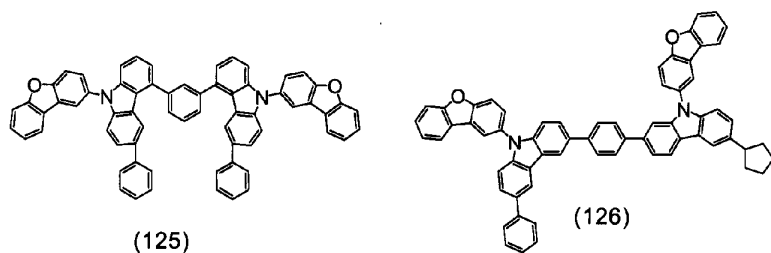
10

20

30

40

## 【化 15】



## 【0027】

上記化合物中、化合物(1)、(2)、(3)、(4)、(5)、(7)、(8)、(13)、(35)、(36)、(48)、(49)、(54)、(55)、(56)、(59)、(60)が好ましく、化合物(1)、(2)、(3)、(8)、(13)、(54)、(55)、(56)、(60)がより好ましい。

## 【0028】

本発明の有機EL素子用材料は、有機EL素子の発光層に含まれるホスト材料であると好ましい。

次に、本発明の有機EL素子について説明する。

本発明の有機EL素子は、陰極と陽極間に、発光層を含む一層以上の有機薄膜層を有し、この有機薄膜層の少なくとも一層が、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有する。

多層型の有機EL素子の構造としては、例えば、陽極/正孔輸送層(正孔注入層)/発光層/陰極、陽極/発光層/電子輸送層(電子注入層)/陰極、陽極/正孔輸送層(正孔注入層)/発光層/電子輸送層(電子注入層)/陰極、陽極/正孔輸送層(正孔注入層)/発光層/正孔障壁層/電子輸送層(電子注入層)/陰極、等の多層構成で積層したものが挙げられる。なお、本発明において「正孔注入・輸送層」は、正孔輸送層の態様に含ま

10

20

30

40

50

れる。

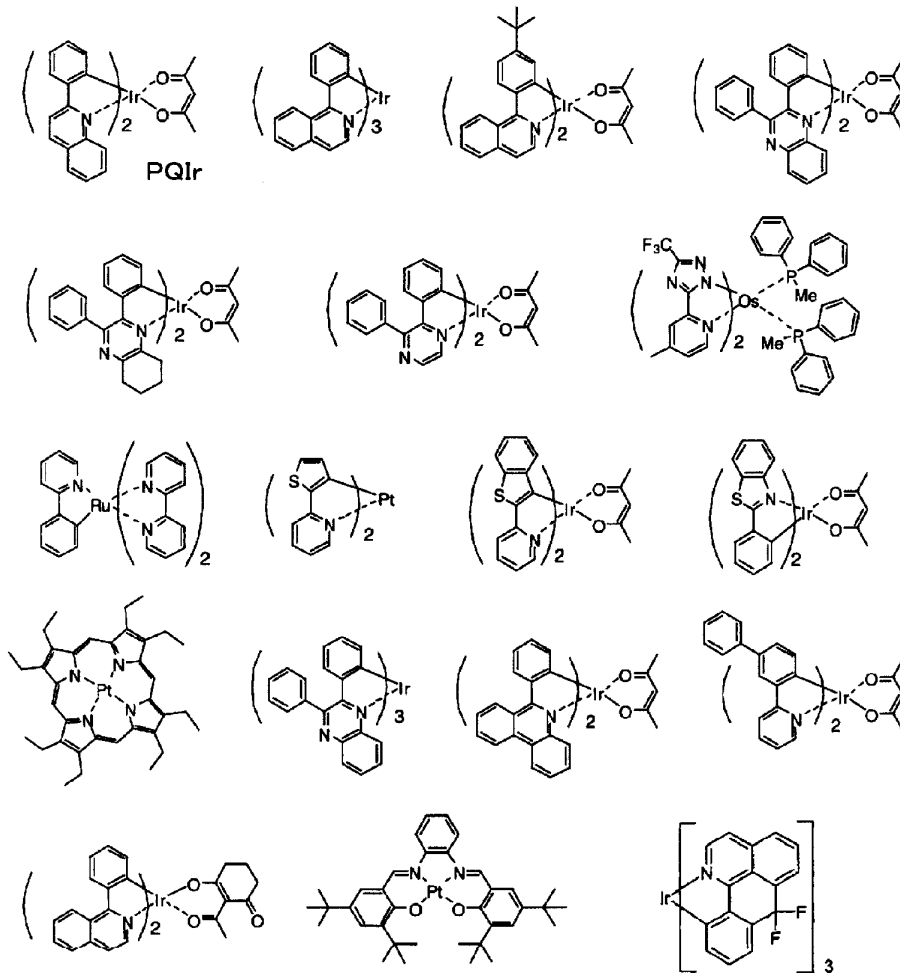
【 0 0 2 9 】

本発明の有機 E L 素子においては、前記発光層が、前記一般式 ( 1 ) で表される有機 E L 素子用材料をホスト材料として含有することが好ましく、さらに燐光発光性材料を含有していることがより好ましい。また、本発明の有機 E L 素子が正孔輸送層 ( 正孔注入層 ) を有する場合、該正孔輸送層 ( 正孔注入層 ) に本発明の有機 E L 素子用材料を好ましく含有させることもできる。

【 0 0 3 0 】

りん光発光性材料としては、りん光量子収率が高く、発光素子の外部量子効率をより向上させることができるという点で、イリジウム ( I r ) , オスミウム ( O s ) および白金 ( P t ) から選ばれる金属を含有する化合物であると好ましく、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等の金属錯体であるとさらに好ましく、中でもイリジウム錯体及び白金錯体がより好ましい。前記金属錯体は、中心金属原子と配位子に含まれる炭素原子とがオルトメタル結合しているオルトメタル化金属錯体であることが好ましく、オルトメタル化イリジウム錯体がより好ましい。オルトメタル化金属錯体のさらに好ましい形態としては、以下に示すイリジウム錯体が挙げられる。

【 化 1 6 】



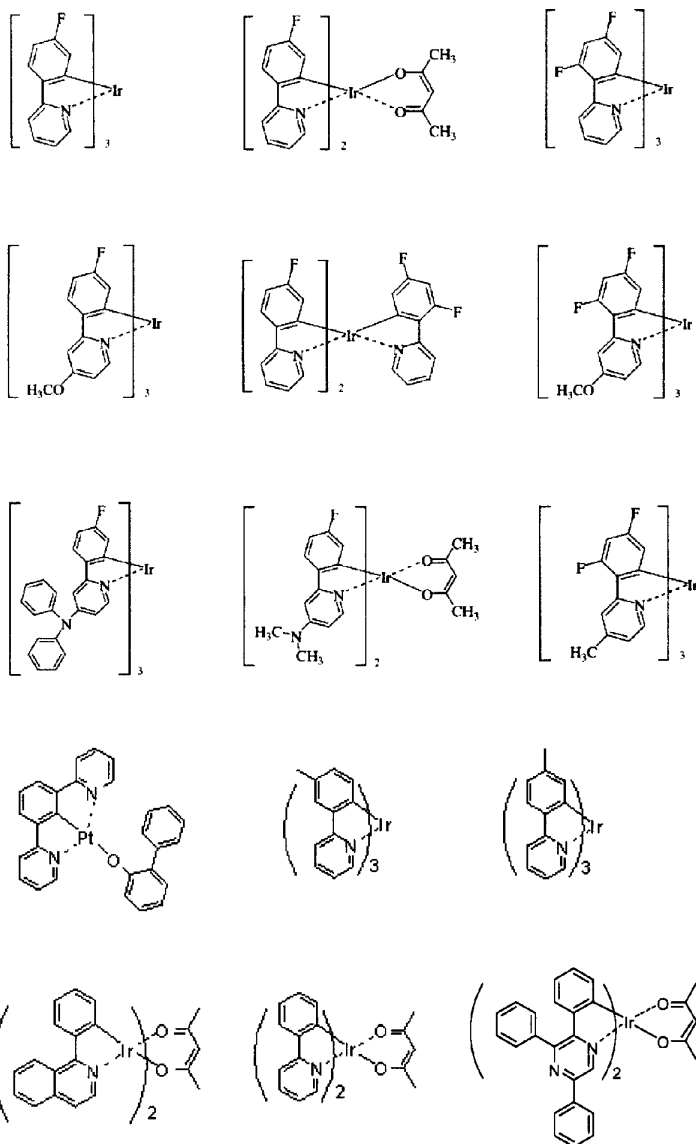
10

20

30

40

## 【化 17】

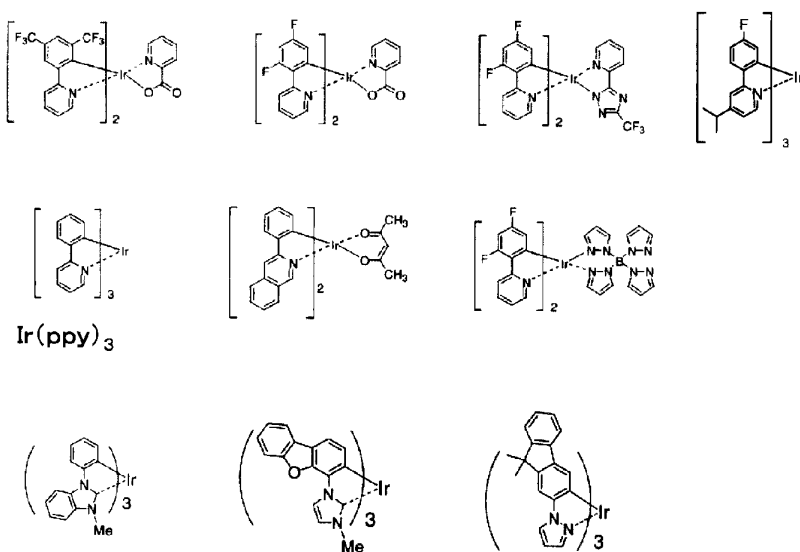


10

20

30

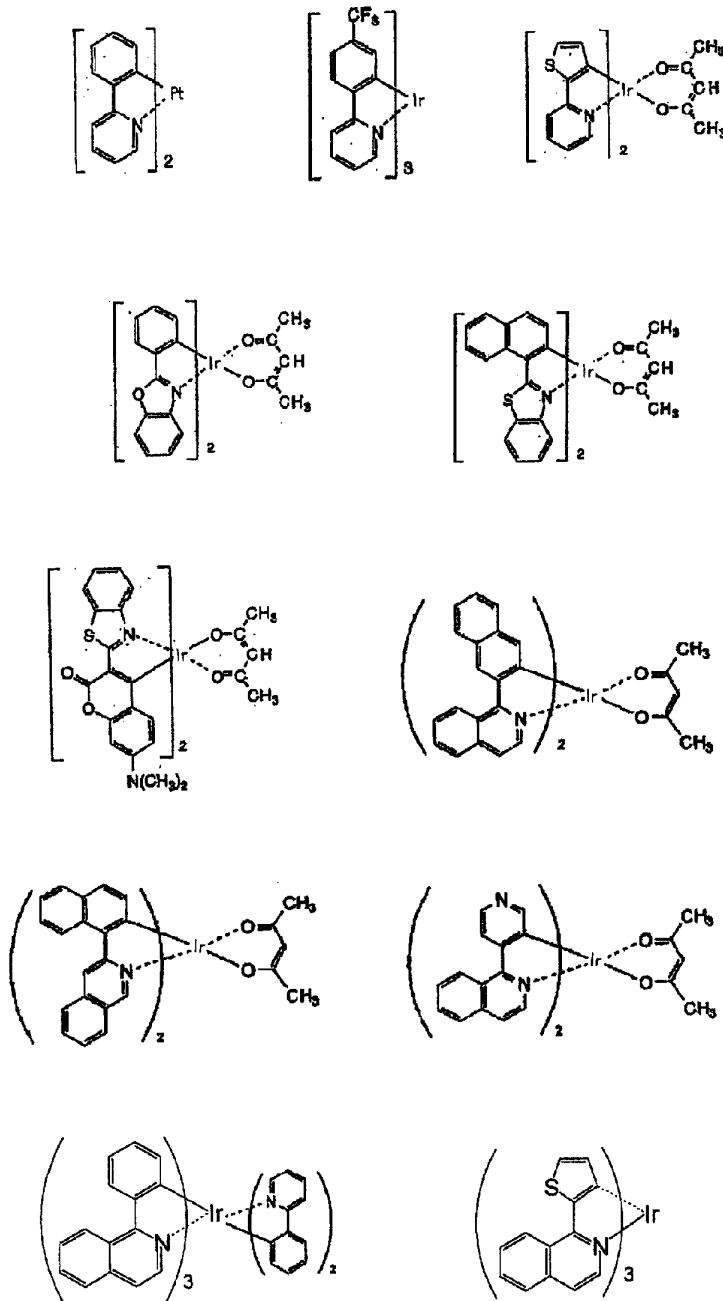
## 【化 18】



40

50

## 【化 19】



10

20

30

## 【0031】

また、本発明の有機EL素子は、前記発光層が本発明の有機EL用素子用材料を含有するホスト材料とりん光発光性材料を含有し、りん光発光性材料として発光波長の極大値が500nm以下である青色系金属錯体を含有することが好ましい。

40

## 【0032】

本発明の有機EL素子は、正孔輸送層（正孔注入層）を有し、該正孔輸送層（正孔注入層）が本発明の有機EL素子用材料を含有しても好ましい。

## 【0033】

本発明の有機EL素子は、陰極と有機薄膜層との界面領域に還元性ドーパントを有するのが好ましい。還元性ドーパントとしては、アルカリ金属、アルカリ金属錯体、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属錯体、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属錯体、及び希土類金属化合物等から選ばれた少なくとも一種が挙げられる。

50

## 【0034】

アルカリ金属としては、Na（仕事関数：2.36 eV）、K（仕事関数：2.28 eV）、Rb（仕事関数：2.16 eV）、Cs（仕事関数：1.95 eV）等が挙げられ、仕事関数が2.9 eV以下のものが特に好ましい。これらのうち好ましくはK、Rb、Cs、さらに好ましくはRb又はCsであり、最も好ましくはCsである。

アルカリ土類金属としては、Ca（仕事関数：2.9 eV）、Sr（仕事関数：2.0 ~ 2.5 eV）、Ba（仕事関数：2.52 eV）等が挙げられ、仕事関数が2.9 eV以下のものが特に好ましい。

希土類金属としては、Sc、Y、Ce、Tb、Yb等が挙げられ、仕事関数が2.9 eV以下のものが特に好ましい。

以上の金属のうち好ましい金属は、特に還元能力が高く、電子注入域への比較的少量の添加により、有機EL素子における発光輝度の向上や長寿命化が可能である。

## 【0035】

アルカリ金属化合物としては、 $\text{Li}_2\text{O}$ 、 $\text{Cs}_2\text{O}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$ 等のアルカリ酸化物、LiF、NaF、CsF、KF等のアルカリハロゲン化物等が挙げられ、LiF、 $\text{Li}_2\text{O}$ 、NaFが好ましい。

アルカリ土類金属化合物としては、 $\text{BaO}$ 、 $\text{SrO}$ 、 $\text{CaO}$ 及びこれらを混合した $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ （ $0 < x < 1$ ）、 $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ （ $0 < x < 1$ ）等が挙げられ、 $\text{BaO}$ 、 $\text{SrO}$ 、 $\text{CaO}$ が好ましい。

希土類金属化合物としては、 $\text{YbF}_3$ 、 $\text{ScF}_3$ 、 $\text{ScO}_3$ 、 $\text{Y}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Ce}_2\text{O}_3$ 、 $\text{GdF}_3$ 、 $\text{TbF}_3$ 等が挙げられ、 $\text{YbF}_3$ 、 $\text{ScF}_3$ 、 $\text{TbF}_3$ が好ましい。

## 【0036】

アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体、希土類金属錯体としては、それぞれ金属イオンとしてアルカリ金属イオン、アルカリ土類金属イオン、希土類金属イオンの少なくとも一つ含有するものであれば特に限定はない。また、配位子にはキノリノール、ベンゾキノリノール、アクリジノール、フェナントリジノール、ヒドロキシフェニルオキサゾール、ヒドロキシフェニルチアゾール、ヒドロキシジアリールオキサジアゾール、ヒドロキシジアリールチアジアゾール、ヒドロキシフェニルピリジン、ヒドロキシフェニルベンゾイミダゾール、ヒドロキシベンゾトリアゾール、ヒドロキシフルボラン、ビピリジル、フェナントロリン、フタロシアニン、ポルフィリン、シクロペンタジエン、ージケトン類、アゾメチン類、及びそれらの誘導体などが好ましいが、これらに限定されるものではない。

## 【0037】

還元性ドーパントの添加形態としては、界面領域に層状又は島状に形成すると好ましい。形成方法としては、抵抗加熱蒸着法により還元性ドーパントを蒸着しながら、界面領域を形成する発光材料や電子注入材料である有機物を同時に蒸着させ、有機物中に還元ドーパントを分散する方法が好ましい。分散濃度はモル比で有機物：還元性ドーパント = 100 : 1 ~ 1 : 100、好ましくは5 : 1 ~ 1 : 5である。還元性ドーパントを層状に形成する場合は、界面の有機層である発光材料や電子注入材料を層状に形成した後に、還元ドーパントを単独で抵抗加熱蒸着法により蒸着し、好ましくは層の厚み0.1 ~ 15 nmで形成する。還元性ドーパントを島状に形成する場合は、界面の有機層である発光材料や電子注入材料を島状に形成した後に、還元ドーパントを単独で抵抗加熱蒸着法により蒸着し、好ましくは島の厚み0.05 ~ 1 nmで形成する。

## 【0038】

本発明の有機EL素子は、発光層と陰極との間に電子注入層を有し、該電子注入層が含窒素複素環誘導体を主成分として含有すると好ましい。電子注入層に用いる電子輸送材料としては、分子内にヘテロ原子を1個以上含有する芳香族ヘテロ環化合物が好ましく用いられ、特に含窒素複素環誘導体が好ましい。

## 【0039】

この含窒素複素環誘導体としては、例えば、式(A)で表される含窒素複素環金属キレ

10

20

30

40

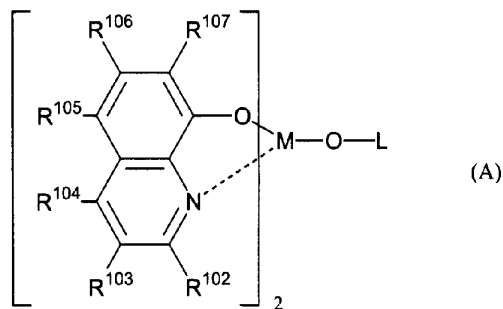
50

ート錯体が好ましい。

【 0 0 4 0 】

この含窒素複素環誘導体としては、例えば、式 ( A ) で表される含窒素複素環金属キレート錯体が好ましい。

【 化 2 0 】



10

【 0 0 4 1 】

$R^{102} \sim R^{107}$  は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、アミノ基、炭素数 1 ~ 40 の炭化水素基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アルコキシカルボニル基、または、複素環基であり、これらは置換されていてもよい。

ハロゲン原子の例としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子が挙げられる。また、置換されていてもよいアミノ基の例としては、前記アルキルアミノ基、アリールアミノ基と同様なものが挙げられる。また、アラルキルアミノ基でもよい。

20

炭素数 1 ~ 40 の炭化水素基としては、置換もしくは無置換のアルキル基、アルケニル基、シクロアルキル基、アリール基、アラルキル基、等が挙げられる。アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、アリール基、複素環基、アリールオキシ基の例としては、前記と同様のものが挙げられる。アルケニル基としては前記のアルキル基に対応する基が挙げられる。アラルキル基としては、前記アリール基で置換された前記のアルキル基が挙げられる。アルコキシカルボニル基は  $-COOY'$  と表され、 $Y'$  の例としては前記アルキル基と同様のものが挙げられる。

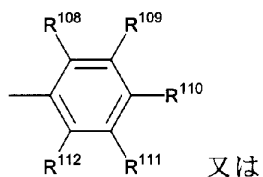
【 0 0 4 2 】

M は、アルミニウム ( Al )、ガリウム ( Ga ) 又はインジウム ( In ) であり、In であると好ましい。

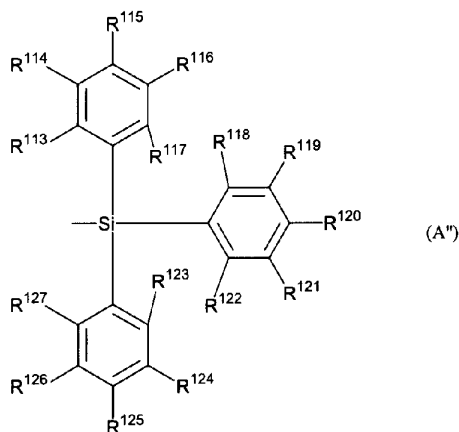
式 ( A ) の L は、下記式 ( A' ) 又は ( A' ' ) で表される基である。

30

## 【化 2 1】



又は



10

## 【 0 0 4 3 】

20

(式中、 $R^{108} \sim R^{112}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 40 の炭化水素基であり、互いに隣接する基が環状構造を形成していてもよい。また、 $R^{113} \sim R^{127}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 40 の炭化水素基であり、互いに隣接する基が環状構造を形成していてもよい。)

## 【 0 0 4 4 】

式 (A') 及び式 (A'') の  $R^{108} \sim R^{112}$  及び  $R^{113} \sim R^{127}$  が示す炭素数 1 ~ 40 の炭化水素基としては、 $R^1 \sim R^8$  の具体例と同様のものが挙げられる。

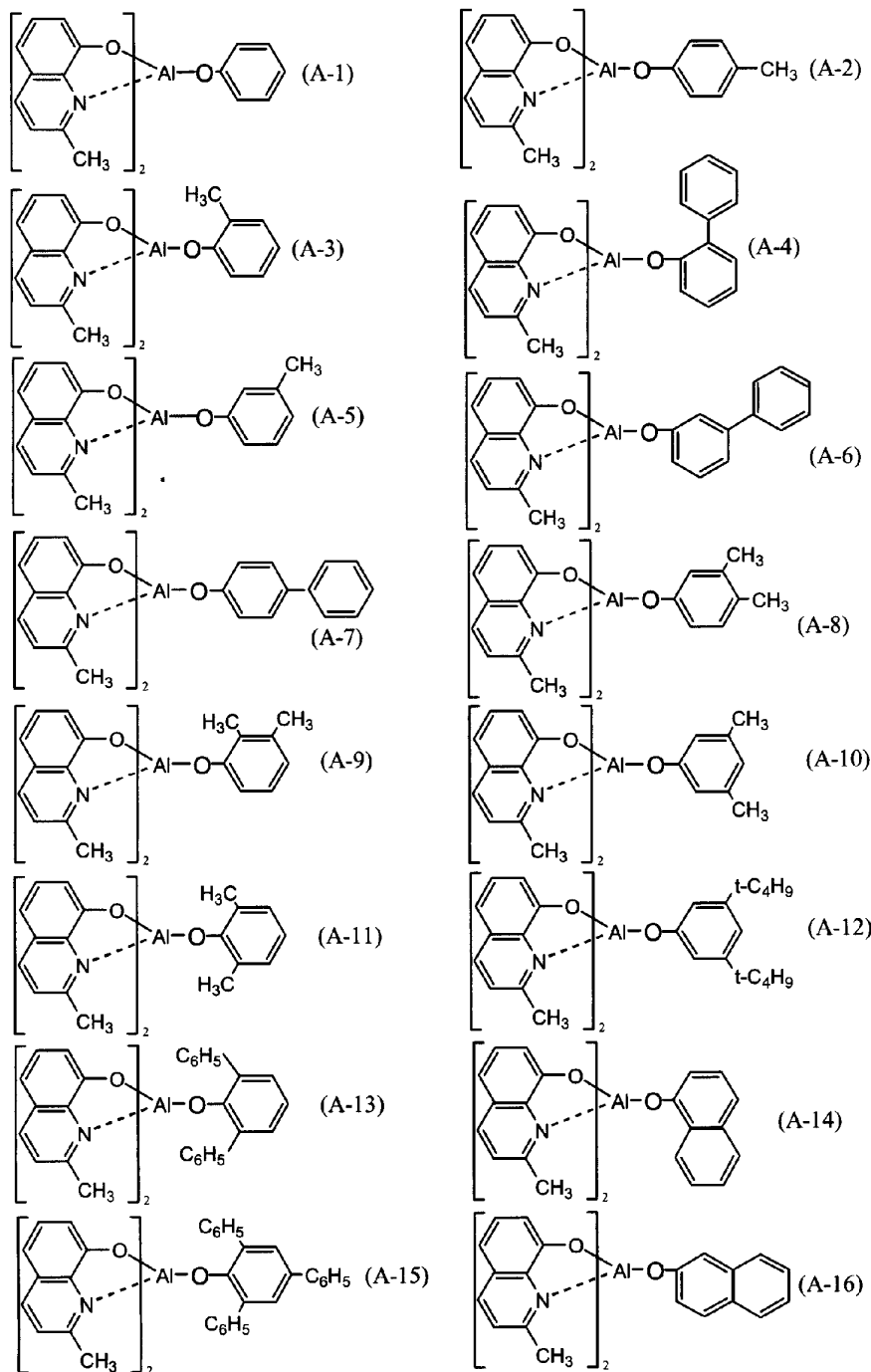
また、 $R^{108} \sim R^{112}$  及び  $R^{113} \sim R^{127}$  の互いに隣接する基が環状構造を形成した場合の 2 価の基としては、テトラメチレン基、ペンタメチレン基、ヘキサメチレン基、ジフェニルメタン - 2, 2' - ジイル基、ジフェニルエタン - 3, 3' - ジイル基、ジフェニルプロパン - 4, 4' - ジイル基等が挙げられる。

30

## 【 0 0 4 5 】

式 (A) で表される含窒素複素環の金属キレート錯体の具体例を以下に示すが、これら例示化合物に限定されるものではない。

【化 2 2】

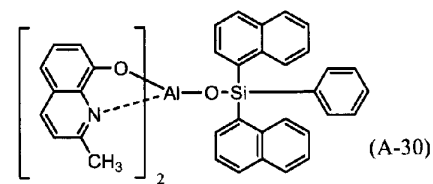
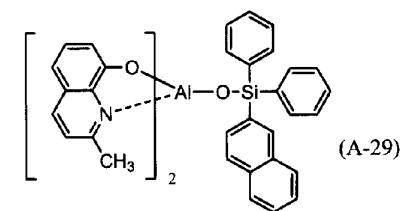
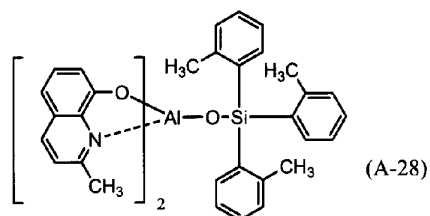
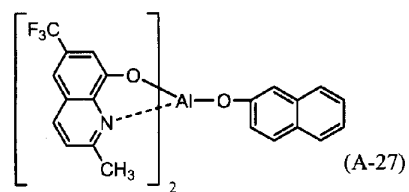
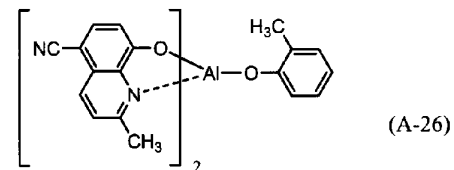
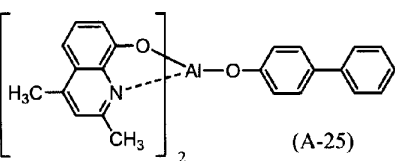
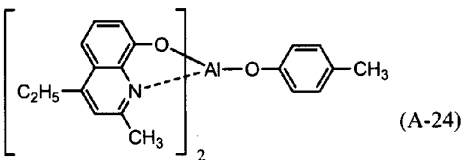
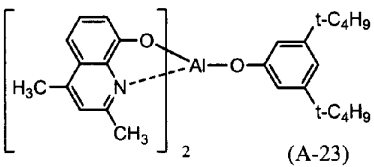
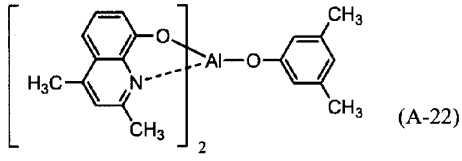
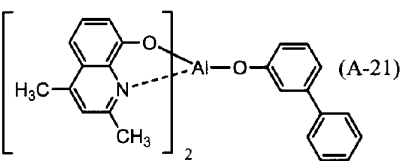
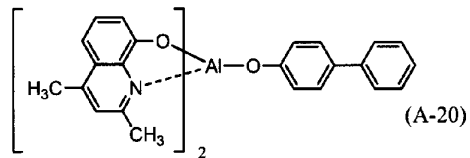
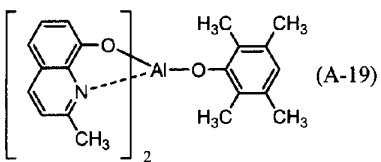
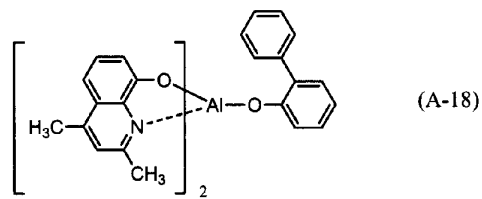
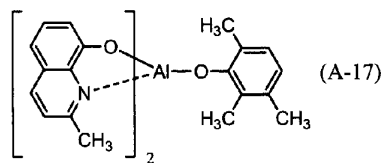


10

20

30

## 【化 2 3】

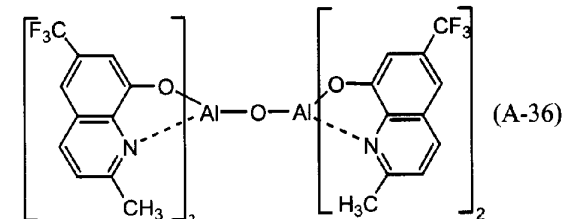
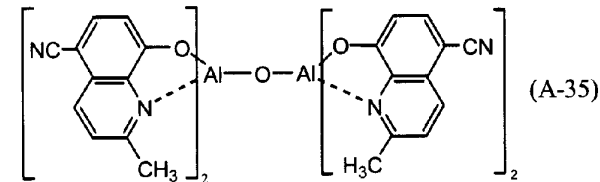
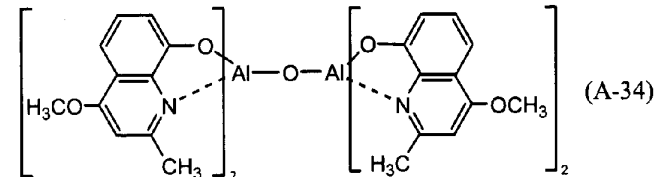
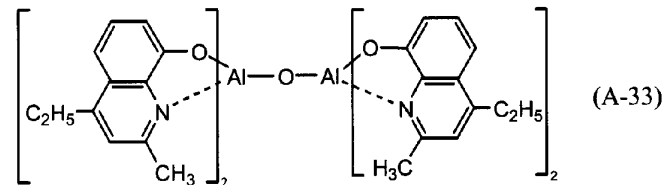
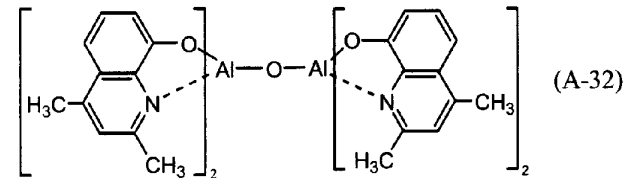
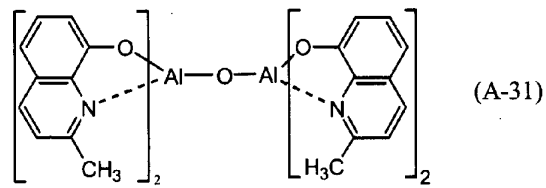


10

20

30

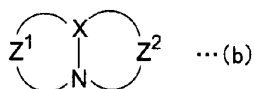
## 【化 2 4】



## 【0046】

含窒素複素環誘導体としては、以下の一般式を有する有機化合物からなる含窒素複素環誘導体であって、金属錯体でない含窒素化合物も挙げられる。例えば、(a)に示す骨格を含有する5員環もしくは6員環や、式(b)に示す構造のものが挙げられる。

## 【化 2 5】



## 【0047】

(式(b)中、Xは炭素原子もしくは窒素原子を表す。Z<sup>1</sup>ならびにZ<sup>2</sup>は、それぞれ独立に含窒素ヘテロ環を形成可能な原子群を表す。)

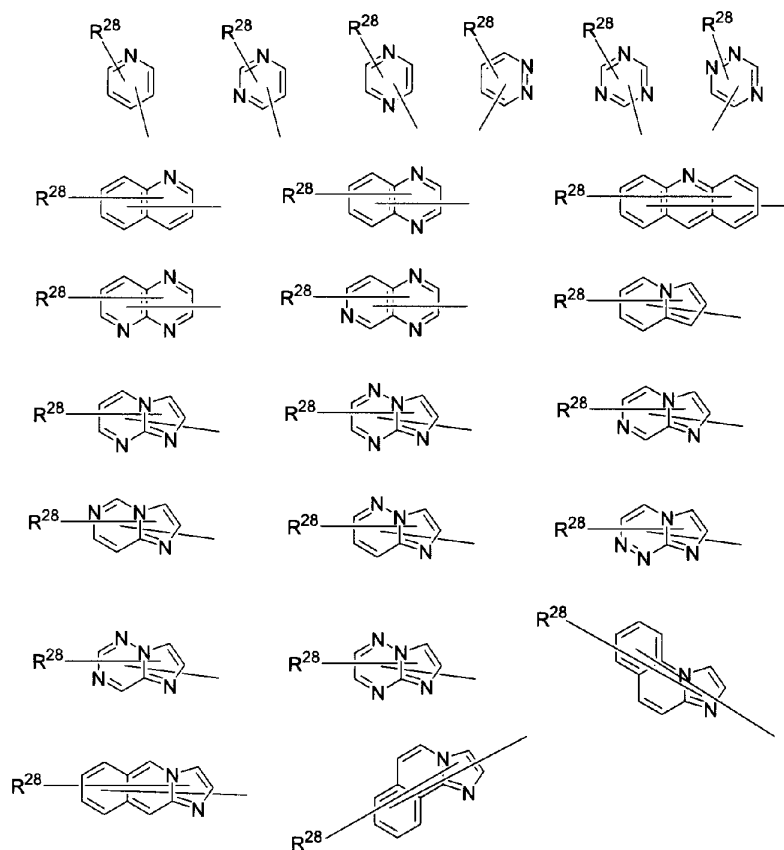
## 【0048】

好ましくは、5員環もしくは6員環からなる含窒素芳香多環族を有する有機化合物。さらには、このような複数窒素原子を有する含窒素芳香多環族の場合は、上記(a)と(b)を組み合わせた骨格を有する含窒素芳香多環有機化合物。

【0049】

含窒素有機化合物の含窒素基は、例えば、以下の一般式で表される含窒素複素環基から選択される。

【化26】



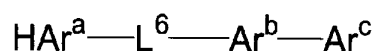
【0050】

(各式中、 $R^{28}$ はn個存在し、炭素数6～40のアリール基、炭素数3～40のヘテロアリール基、炭素数1～20のアルキル基又は炭素数1～20のアルコキシ基であり、 $R^{28}$ の個数を示すnは0～5の整数であり、nが2以上の整数であるとき、複数の $R^{28}$ は互いに同一又は異なってもよい。)

【0051】

さらに、好ましい具体的な化合物として、下記式で表される含窒素複素環誘導体が挙げられる。

【化27】



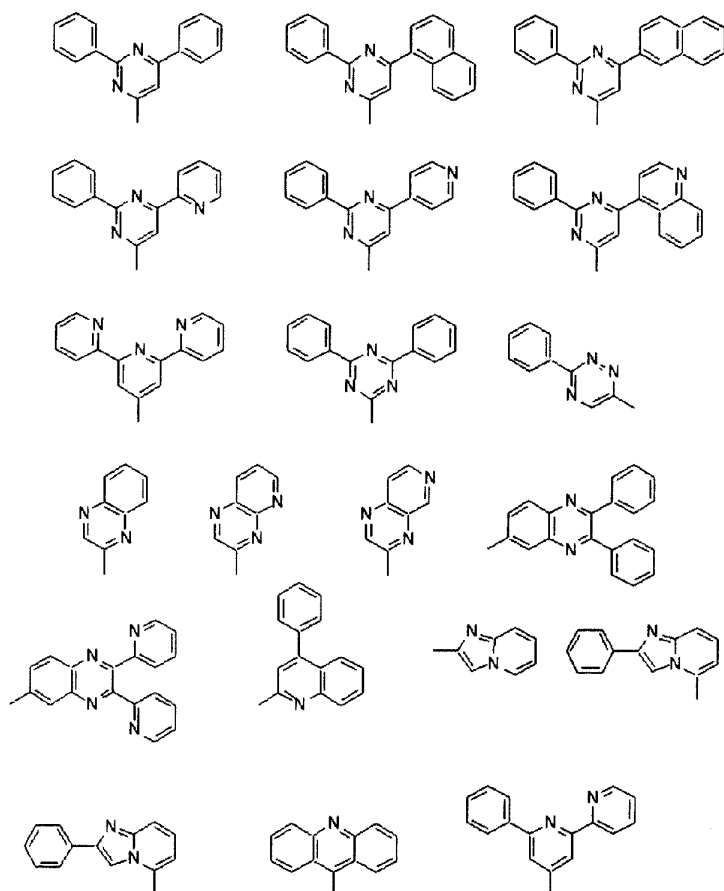
【0052】

(式中、 $HAr^a$ は、置換基を有していてもよい炭素数3～40の含窒素複素環であり、 $L^6$ は単結合、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリーレン基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリーレン基であり、 $Ar^b$ は置換基を有していてもよい炭素数6～40の2価の芳香族炭化水素基であり、 $Ar^c$ は置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基である。)

【 0 0 5 3 】

H A r<sup>a</sup>は、例えば、下記の群から選択される。

【化 2 8】



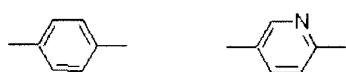
10

20

【 0 0 5 4 】

$L^6$ は、例えば、下記の群から選択される。

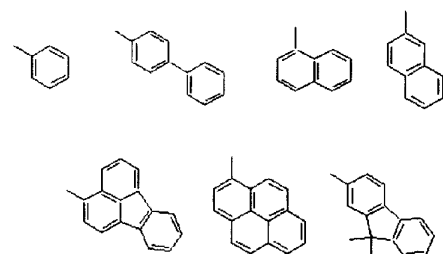
【化 2 9】



【 0 0 5 5 】

$A r^c$ は、例えば、下記の群から選択される。

【化 3 0】

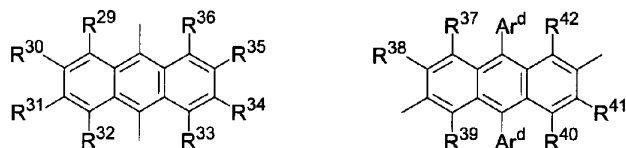


40

【 0 0 5 6 】

A r<sup>b</sup>は、例えば、下記のアリールアントラニル基から選択される。

## 【化 3 1】



## 【 0 0 5 7】

(式中、 $R^{29} \sim R^{42}$ は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、炭素数1～20のアルキル基、炭素数1～20のアルコキシ基、炭素数6～40のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は炭素数3～40のヘテロアリール基であり、 $Ar^d$ は、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は炭素数3～40のヘテロアリール基である。)

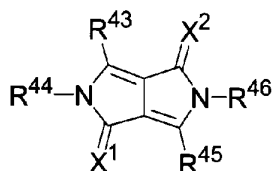
10

また、上記式で表される $Ar^b$ において、 $R^{29} \sim R^{36}$ は、いずれも水素原子である含窒素複素環誘導体が好ましい。

## 【 0 0 5 8】

この他、下記の化合物(特開平9-3448号公報参照)も好適に用いられる。

## 【化 3 2】



20

## 【 0 0 5 9】

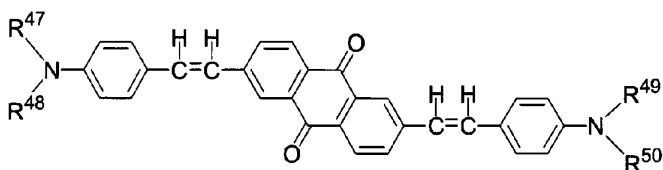
(式中、 $R^{43} \sim R^{46}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは未置換の脂肪族基、置換もしくは未置換の脂肪族式環基、置換もしくは未置換の炭素環式芳香族環基、置換もしくは未置換の複素環基を表し、 $X^1$ 、 $X^2$ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子もしくはジシアノメチレン基を表す。)

## 【 0 0 6 0】

また、下記の化合物(特開2000-173774号公報参照)も好適に用いられる。

30

## 【化 3 3】

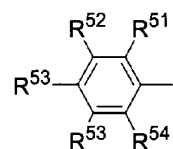


## 【 0 0 6 1】

式中、 $R^{47}$ 、 $R^{48}$ 、 $R^{49}$ 及び $R^{50}$ は互いに同一の又は異なる基であって、下記式で表わされるアリール基である。

40

## 【化 3 4】



## 【 0 0 6 2】

(式中、 $R^{51}$ 、 $R^{52}$ 、 $R^{53}$ 、 $R^{54}$ 及び $R^{55}$ は互いに同一の又は異なる基であって、水素原子、或いはそれらの少なくとも1つが飽和または不飽和アルコキシル基、アルキル基、ア

50

ミノ基又はアルキルアミノ基である。)

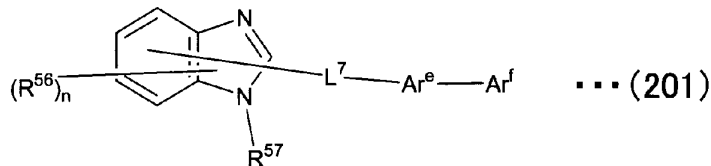
【 0 0 6 3 】

さらに、該含窒素複素環基もしくは含窒素複素環誘導体を含む高分子化合物であってもよい。

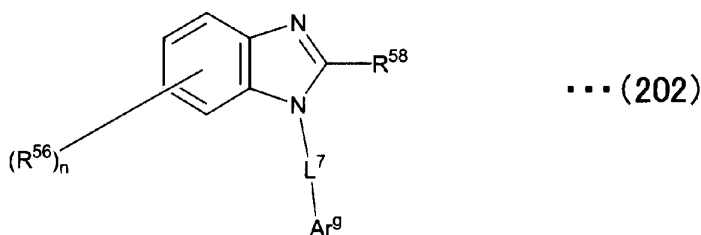
【 0 0 6 4 】

また、電子輸送層は、下記一般式 ( 2 0 1 ) ~ ( 2 0 3 ) で表される含窒素複素環誘導体の少なくともいずれか 1 つを含有することが好ましい。

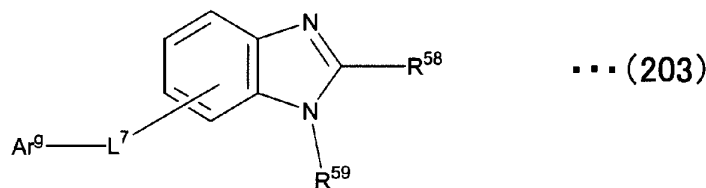
【 化 3 5 】



10



20



【 0 0 6 5 】

式 ( 2 0 1 ) ~ ( 2 0 3 ) 中、 $R^{56}$ は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 6 0 のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 2 0 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 2 0 のアルコキシ基で、 $n$ は 0 ~ 4 の整数であり、 $R^{57}$ は、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 6 0 のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 2 0 のアルキル基又は炭素数 1 ~ 2 0 のアルコキシ基であり、 $R^{58}$ 及び $R^{59}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 6 0 のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 2 0 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 2 0 のアルコキシ基であり、 $L^7$ は、単結合、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 6 0 のアリーレン基、置換基を有していてもよいピリジニレン基、置換基を有していてもよいキノリニレン基又は置換基を有していてもよいフルオレニレン基であり、 $Ar^e$ は、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 6 0 のアリーレン基、置換基を有していてもよいピリジニレン基又は置換基を有していてもよいキノリニレン基であり、 $Ar^f$ は、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 6 0 のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 2 0 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 2 0 のアルコキシ基である。

30

40

$Ar^g$ は、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 6 0 のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 2 0 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 2 0 のアルコキシ基、又は  $-Ar^e-Ar^f$  で表される基 ( $Ar^e$  及び  $Ar^f$  は、それぞれ前記と同じ) である。

50

## 【 0 0 6 6 】

なお、前記式(201)～(203)において、 $R^{56}$ は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基である。

## 【 0 0 6 7 】

前記炭素数6～60のアリール基としては、炭素数6～40のアリール基が好ましく、炭素数6～20のアリール基がさらに好ましく、具体的には、フェニル基、ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、ナфтаセニル基、クリセニル基、ピレニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、トリル基、*t*-ブチルフェニル基、(2-フェニルプロピル)フェニル基、フルオランテニル基、フルオレニル基、スピロピフルオレンからなる1価の基、パーフルオロフェニル基、パーフルオロナフチル基、パーフルオロアントリル基、パーフルオロピフェニル基、9-フェニルアントラセンからなる1価の基、9-(1'-ナフチル)アントラセンからなる1価の基、9-(2'-ナフチル)アントラセンからなる1価の基、6-フェニルクリセンからなる1価の基、9-[4-(ジフェニルアミノ)フェニル]アントラセンからなる1価の基等が挙げられ、フェニル基、ナフチル基、ピフェニル基、ターフェニル基、9-(10-フェニル)アントリル基、9-[10-(1'-ナフチル)]アントリル基、9-[10-(2'-ナフチル)]アントリル基等が好ましい。

## 【 0 0 6 8 】

炭素数1～20のアルキル基としては、炭素数1～6のアルキル基が好ましく、具体的には、メチル基、エチル基、プロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基等の他、トリフルオロメチル基等のハロアルキル基が挙げられ、炭素数が3以上のものは直鎖状、環状又は分岐を有するものでもよい。

炭素数1～20のアルコキシ基としては、炭素数1～6のアルコキシ基が好ましく、具体的には、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基等が挙げられ、炭素数が3以上のものは直鎖状、環状又は分岐を有するものでもよい。

## 【 0 0 6 9 】

$R^{56}$ の示す各基の置換基としては、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基等が挙げられる。

ハロゲン原子としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素等が挙げられる。

炭素数1～20のアルキル基、炭素数1～20のアルコキシ基、炭素数6～40のアリール基としては、前記と同様のものが挙げられる。

## 【 0 0 7 0 】

炭素数6～40のアリールオキシ基としては、例えば、フェノキシ基、ビフェニルオキシ基等が挙げられる。

炭素数3～40のヘテロアリール基としては、例えば、ピローリル基、フリル基、チエニル基、シローリル基、ピリジル基、キノリル基、イソキノリル基、ベンゾフリル基、イミダゾリル基、ピリミジル基、カルバゾリル基、セレノフェニル基、オキサジアゾリル基、トリアゾリル基等が挙げられる。

*n*は0～4の整数であり、0～2であると好ましい。

## 【 0 0 7 1 】

前記式(201)において、 $R^{57}$ は、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は炭素数1～20のアルコキシ基である。

これら各基の具体例、好ましい炭素数及び置換基としては、前記 R について説明したものと同様である。

【 0 0 7 2 】

前記式 ( 2 0 2 ) 及び ( 2 0 3 ) において、 $R^{58}$  及び  $R^{59}$  は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 6 0 のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 2 0 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 2 0 のアルコキシ基である。

これら各基の具体例、好ましい炭素数及び置換基としては、前記  $R^{56}$  について説明したものと同様である。

10

【 0 0 7 3 】

前記式 ( 2 0 1 ) ~ ( 2 0 3 ) において、 $L^7$  は、単結合、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 6 0 のアリーレン基、置換基を有していてもよいピリジニレン基、置換基を有していてもよいキノリニレン基又は置換基を有していてもよいフルオレニレン基である。

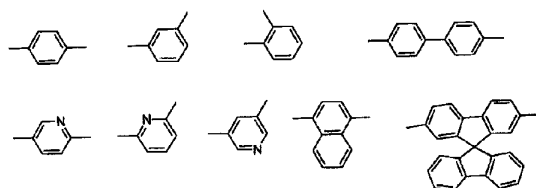
炭素数 6 ~ 6 0 のアリーレン基としては、炭素数 6 ~ 4 0 のアリーレン基が好ましく、炭素数 6 ~ 2 0 のアリーレン基がさらに好ましく、具体的には、前記 R について説明したアリール基から水素原子 1 個を除去して形成される 2 価の基が挙げられる。 $L^7$  の示す各基の置換基としては、前記  $R^{56}$  について説明したものと同様である。

【 0 0 7 4 】

また、 $L^7$  は、

20

【 化 3 6 】



【 0 0 7 5 】

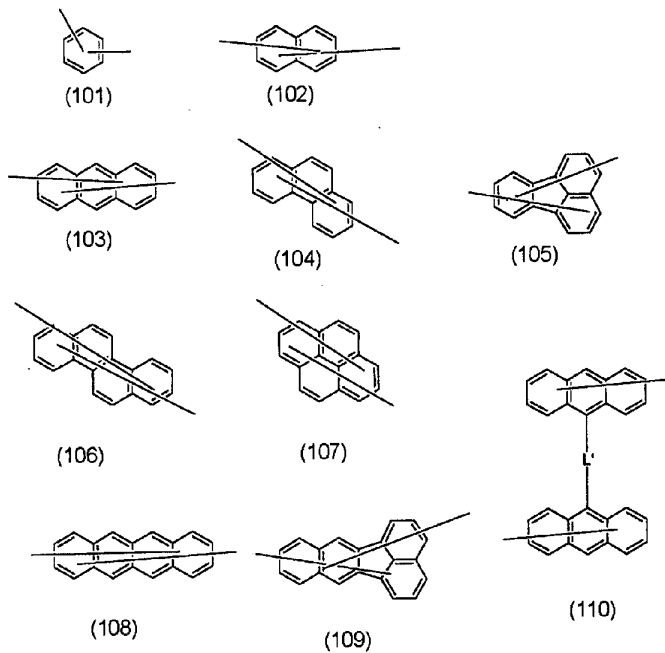
からなる群から選択される基であると好ましい。

30

前記式 ( 2 0 1 ) において、 $Ar^e$  は、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 6 0 のアリーレン基、置換基を有していてもよいピリジニレン基又は置換基を有していてもよいキノリニレン基である。 $Ar^e$  及び  $Ar^g$  の示す各基の置換基としては、それぞれ前記 R について説明したものと同様である。

また、 $Ar^e$  は、下記式 ( 1 0 1 ) ~ ( 1 1 0 ) で表される縮合環基から選択されるいずれかの基であると好ましい。

## 【化 3 7】



10

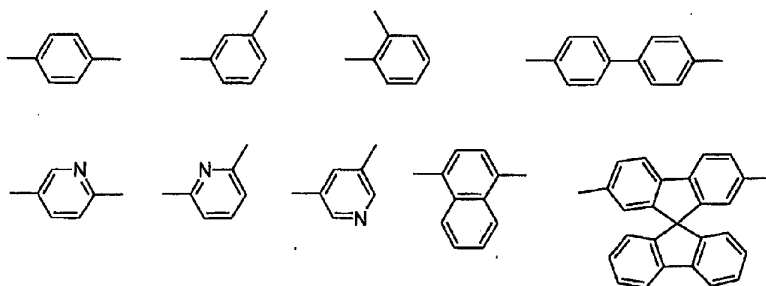
## 【 0 0 7 6 】

前記式(101)～(110)中、それぞれの縮合環は、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基からなる結合基が結合していてもよく、該結合基が複数ある場合は、該結合基は互いに同一でも異なってもよい。これら各基の具体例としては、前記と同様のものが挙げられる。

前記式(110)において、L'は、単結合、又は

## 【 0 0 7 7 】

## 【化 3 8】



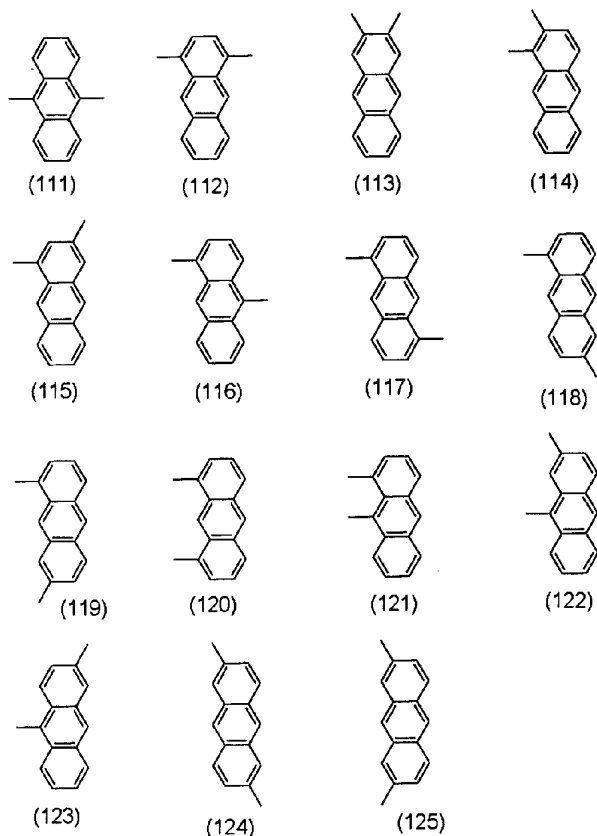
40

## 【 0 0 7 8 】

からなる群から選択される基である。

Ar<sup>o</sup>の示す前記式(103)が、下記式(111)～(125)で表される縮合環基であると好ましい。

## 【化 3 9】



10

20

## 【0079】

前記式(111)～(125)中、それぞれの縮合環は、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基からなる結合基が結合していてもよく、該結合基が複数ある場合は、該結合基は互いに同一でも異なってもよい。これら各基の具体例としては、前記と同様のものが挙げられる。

30

## 【0080】

前記式(201)において、 $Ar^f$ は、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基である。

これら各基の具体例、好ましい炭素数及び置換基としては、前記 $R^{56}$ について説明したものと同様である。

## 【0081】

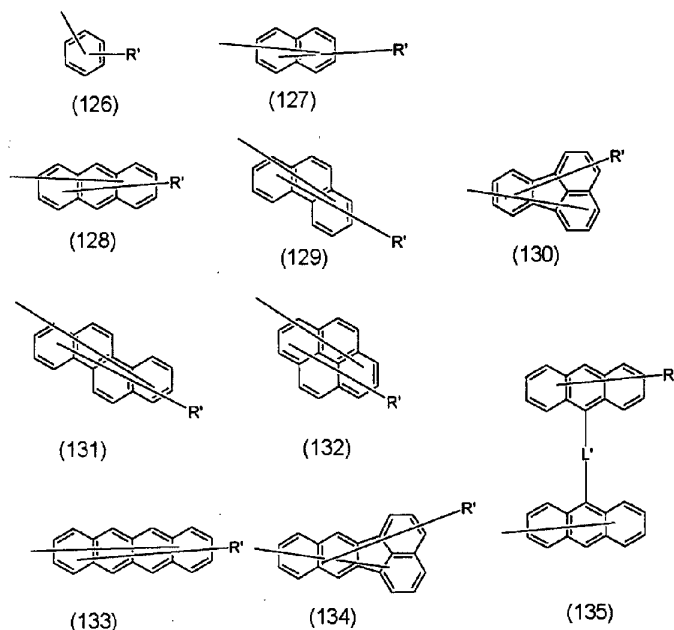
前記式(202)及び(203)において、 $Ar^g$ は、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基、又は $-Ar^e-Ar^f$ で表される基( $Ar^e$ 及び $Ar^f$ は、それぞれ前記と同じ)である。

これら各基の具体例、好ましい炭素数及び置換基としては、前記 $R^{56}$ について説明したものと同様である。

また、 $Ar^g$ は、下記式(126)～(135)で表される縮合環基から選択されるいずれかの基であると好ましい。

40

## 【化 40】



10

## 【0082】

20

前記式(126)～(135)中、それぞれの縮合環は、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基からなる結合基が結合していてもよく、該結合基が複数ある場合は、該結合基は互いに同一でも異なってもよい。これら各基の具体例としては、前記と同様のものが挙げられる。

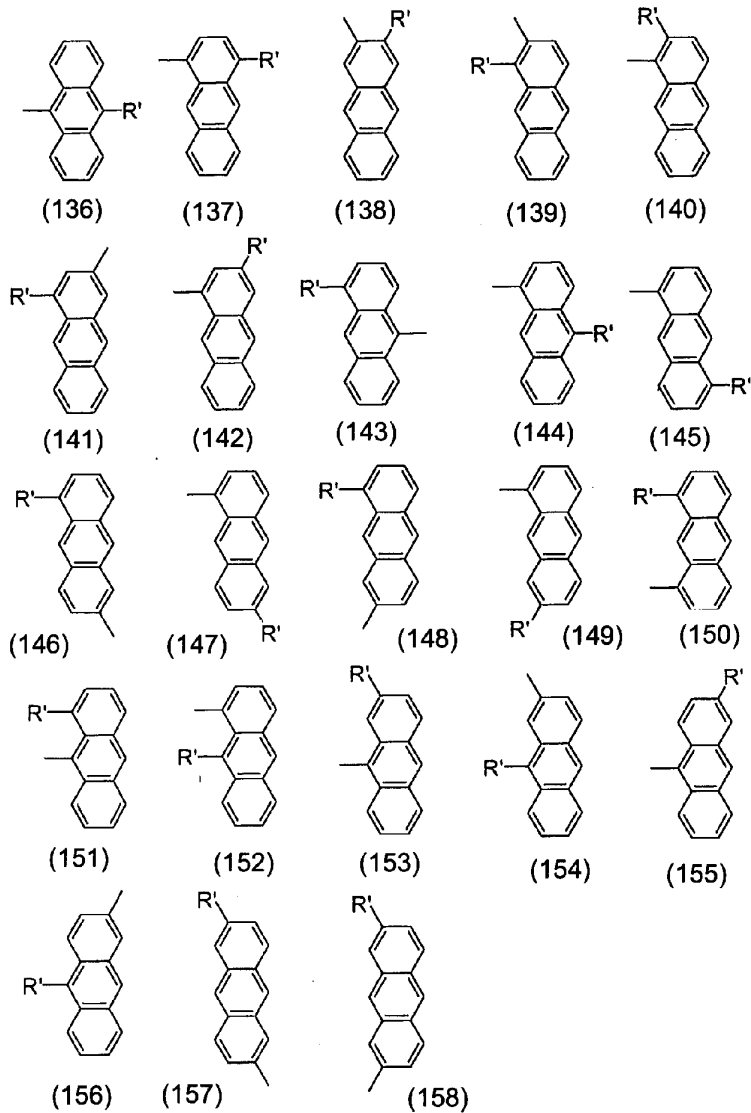
前記式(135)において、L'は、前記と同じである。

前記式(126)～(135)において、R'は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基である。これら各基の具体例としては、前記と同様のものが挙げられる。

30

Ar<sup>9</sup>の示す一般式(128)が、下記式(136)～(158)で表される縮合環基であると好ましい。

## 【化 4 1】



10

20

30

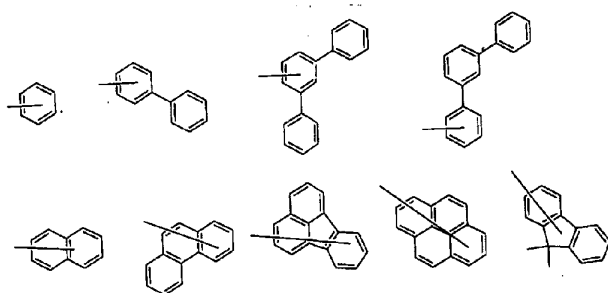
## 【 0 0 8 3】

前記式(136)～(158)中、それぞれの縮合環は、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基からなる結合基が結合していてもよく、該結合基が複数ある場合は、該結合基は互いに同一でも異なってもよい。これら各基の具体例としては、前記と同様のものが挙げられる。R'は、前記と同じである。

40

また、Ar<sup>f</sup>及びAr<sup>g</sup>は、それぞれ独立に、

## 【化 4 2】



10

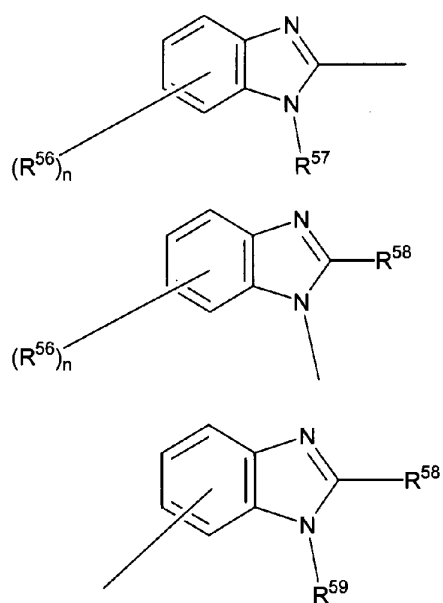
## 【 0 0 8 4】

からなる群から選択される基であると好ましい。

本発明の前記式(201)～(203)で示される含窒素複素環誘導体の具体例を下記に示すが、本発明はこれらの例示化合物に限定されるものではない。

なお、下記表において、H A r は、前記式(201)～(203)における、

## 【化 4 3】



20

30

を示す。

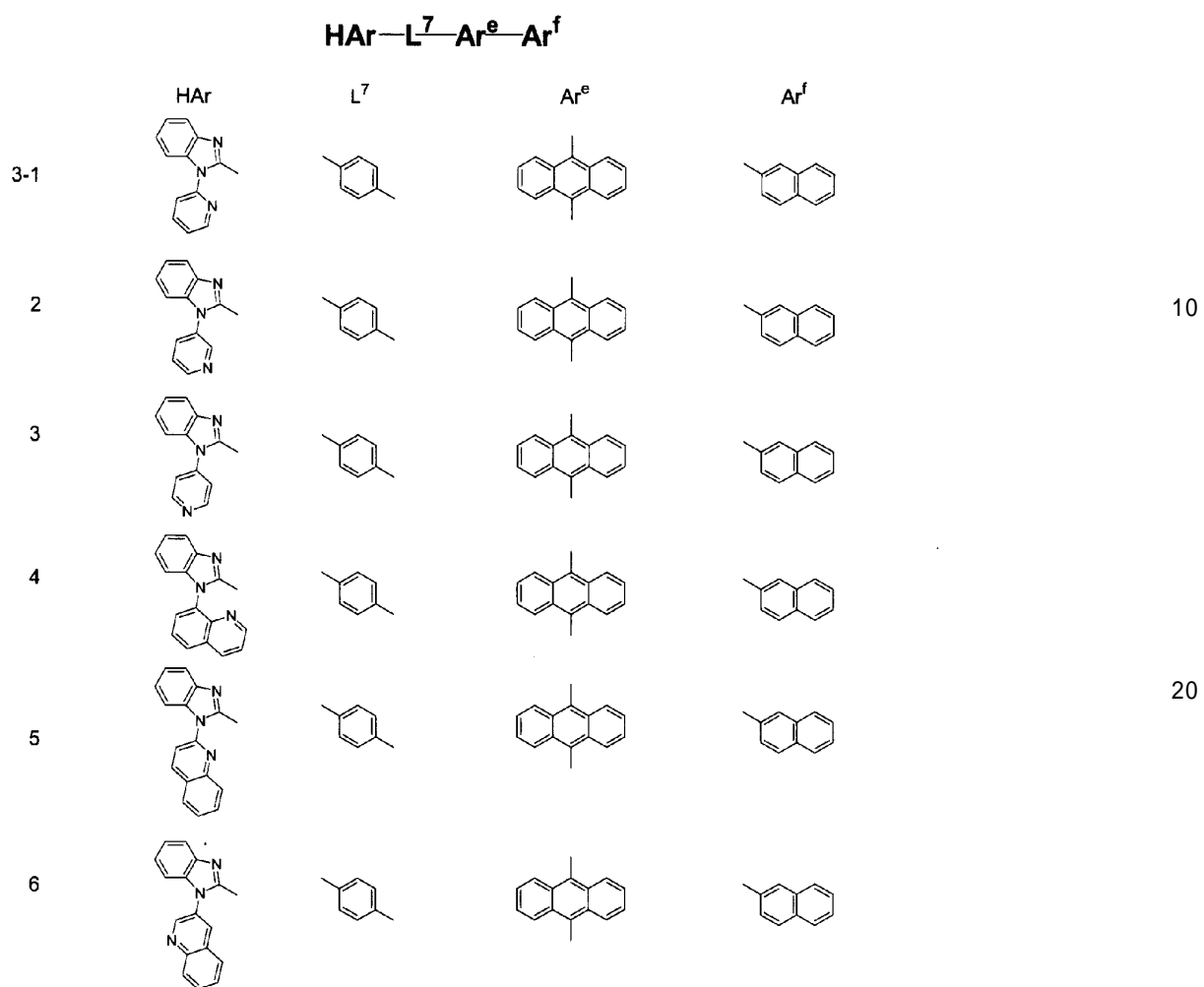
## 【化 4 4】



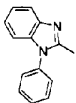



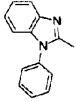



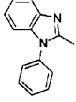



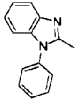



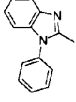



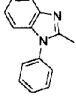



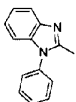
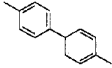


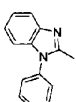
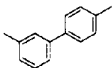


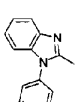
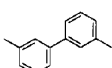


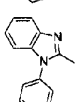



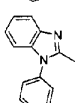



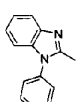



【化 4 5】



【化 4 6】



## 【化 4 7】

|     | $\text{HAr}$                                                                        | $\text{L}^7$                                                                        | $\text{Ar}^e$                                                                       | $\text{Ar}^f$                                                                       |
|-----|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|
| 4-1 |    |    |    |    |
| 2   |    |    |    |    |
| 3   |    |    |    |    |
| 4   |    |    |    |    |
| 5   |    |    |    |    |
| 6   |    |    |    |    |
| 7   |   |   |   |   |
| 8   |  |  |  |  |
| 9   |  |  |  |  |
| 10  |  |  |  |  |
| 11  |  |  |  |  |
| 12  |  |  |  |  |

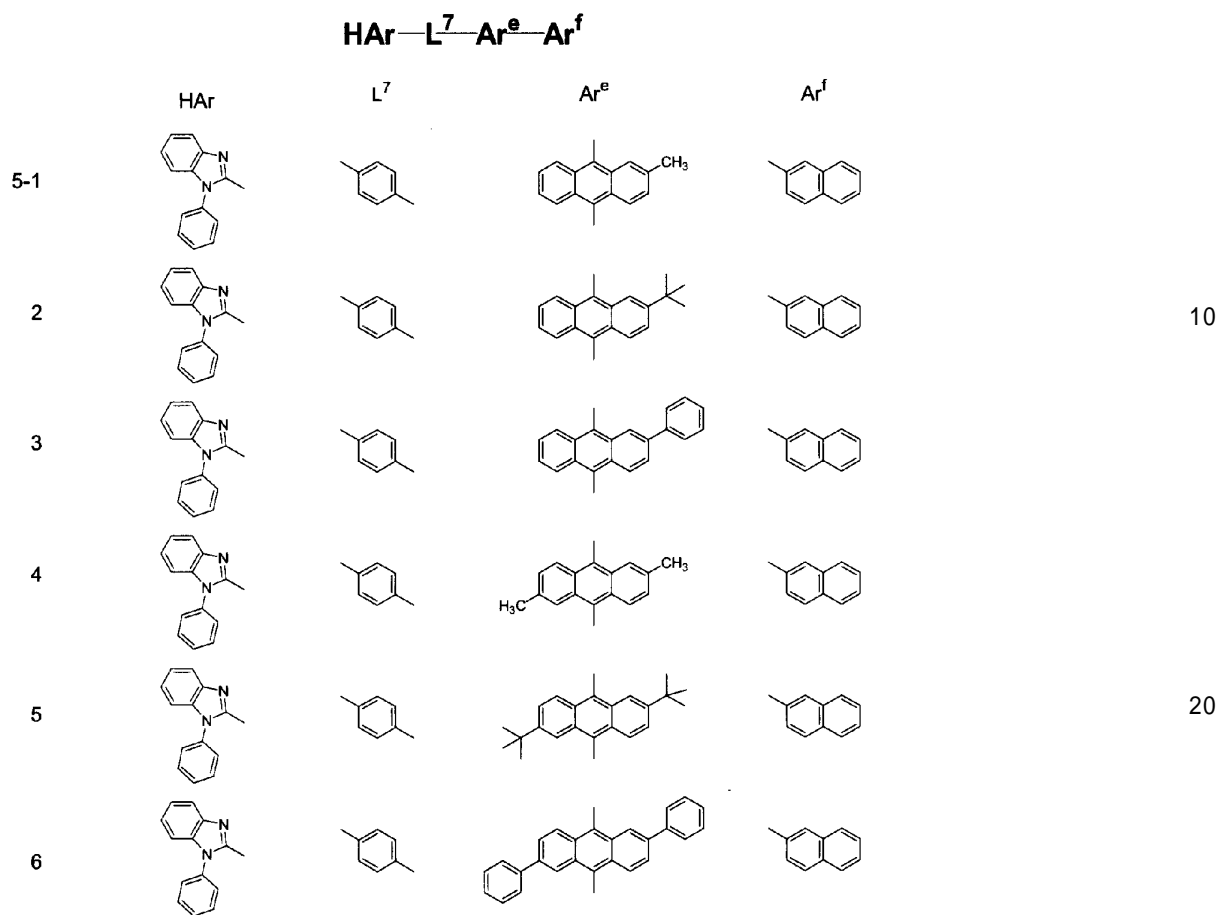
10

20

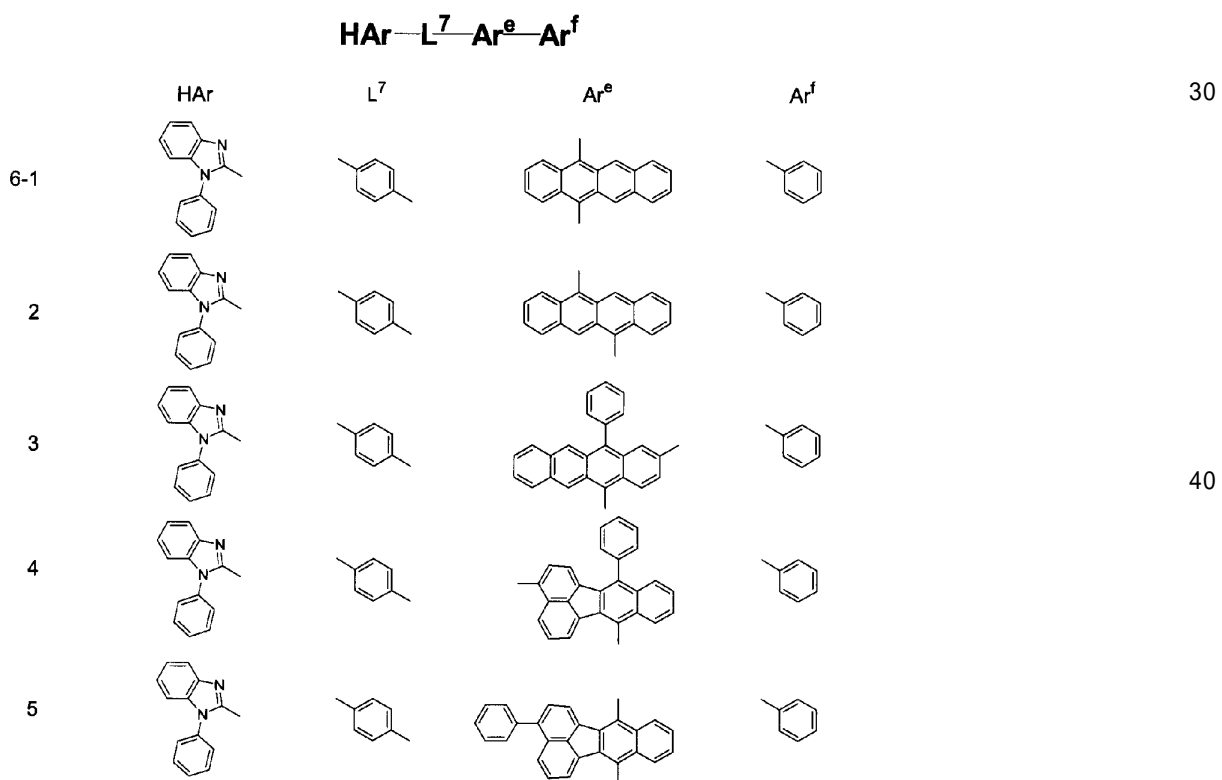
30

40

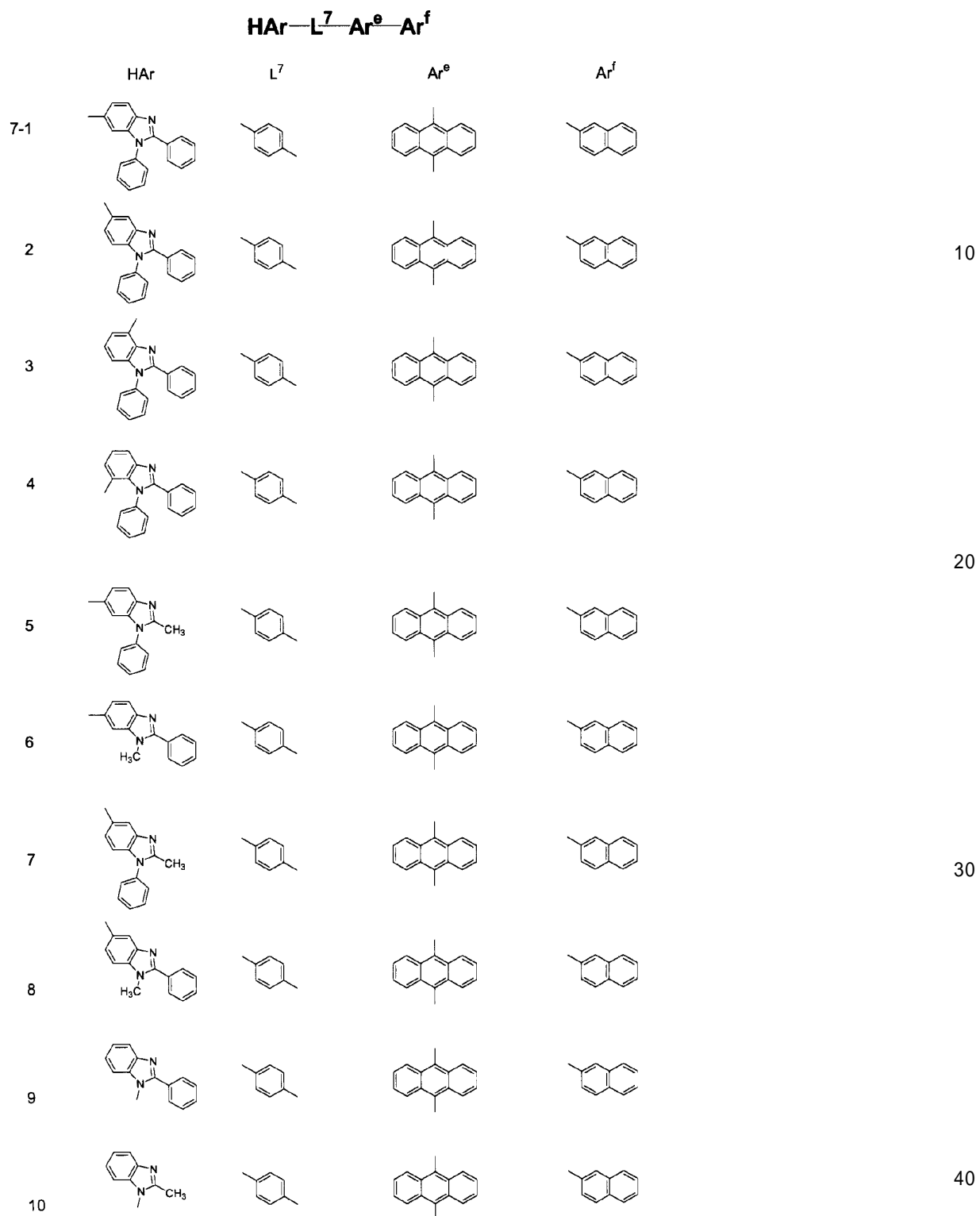
## 【化 4 8】





## 【化 4 9】



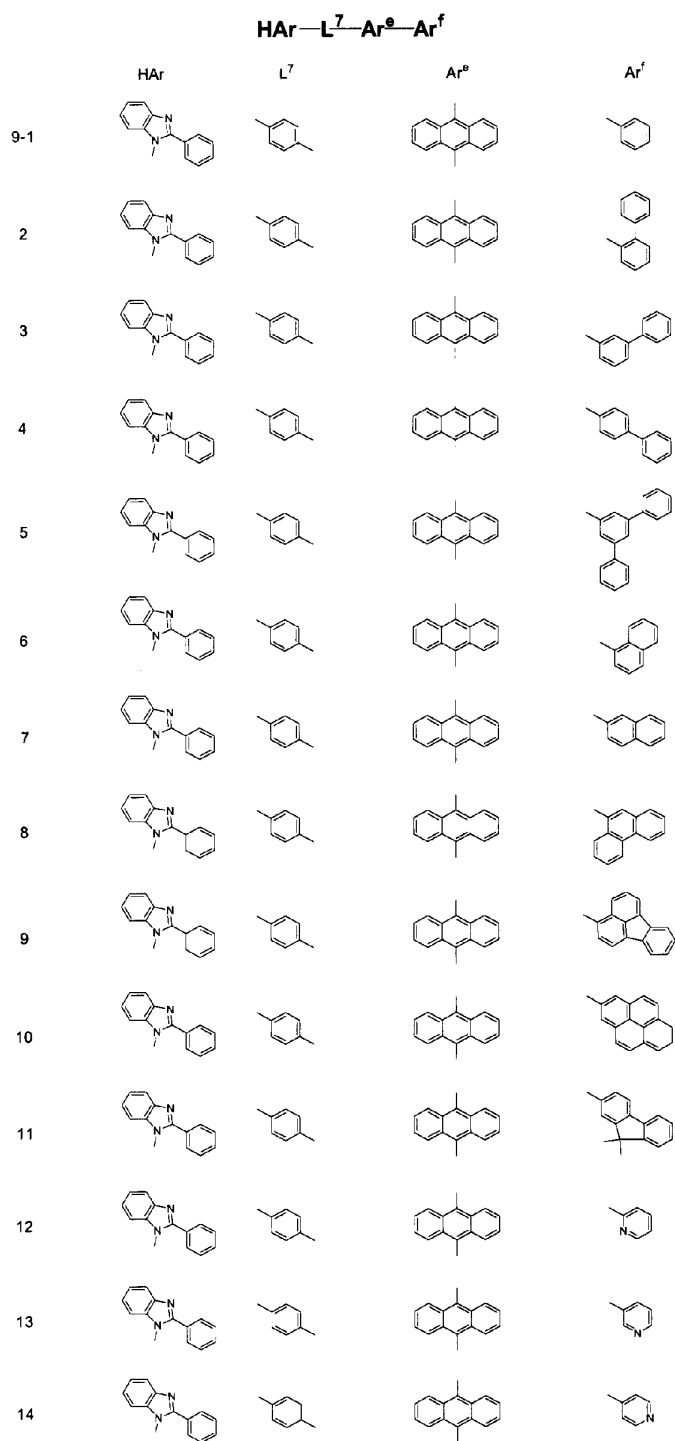
【化 5 0】



【化 5 1】

|     | $\text{HAr}$                                                                        | $\text{L}^7$                                                                        | $\text{Ar}^e$                                                                       | $\text{Ar}^f$                                                                       |    |
|-----|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 8-1 |    |    |    |    |    |
| 2   |    |    |    |    |    |
| 3   |    |    |    |    | 10 |
| 4   |    |    |    |    |    |
| 5   |    |    |    |    |    |
| 6   |    |    |    |    | 20 |
| 7   |   |  |   |   |    |
| 8   |  |  |  |  |    |
| 9   |  |  |  |  |    |
| 10  |  |  |  |  | 30 |
| 11  |  |  |  |  |    |
| 12  |  |  |  |  |    |
| 13  |  |  |  |  | 40 |

【化 5 2】



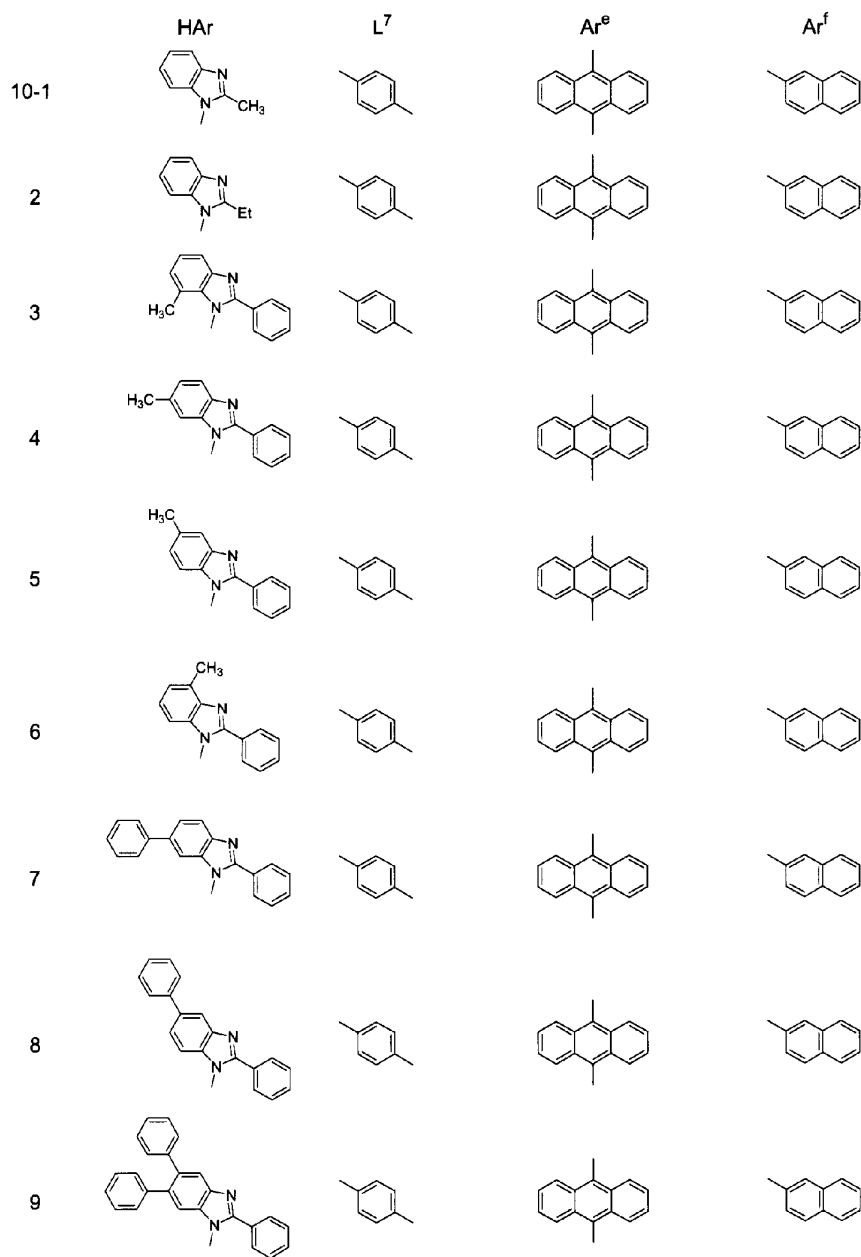
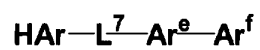
10

20

30

40

【化 5 3】

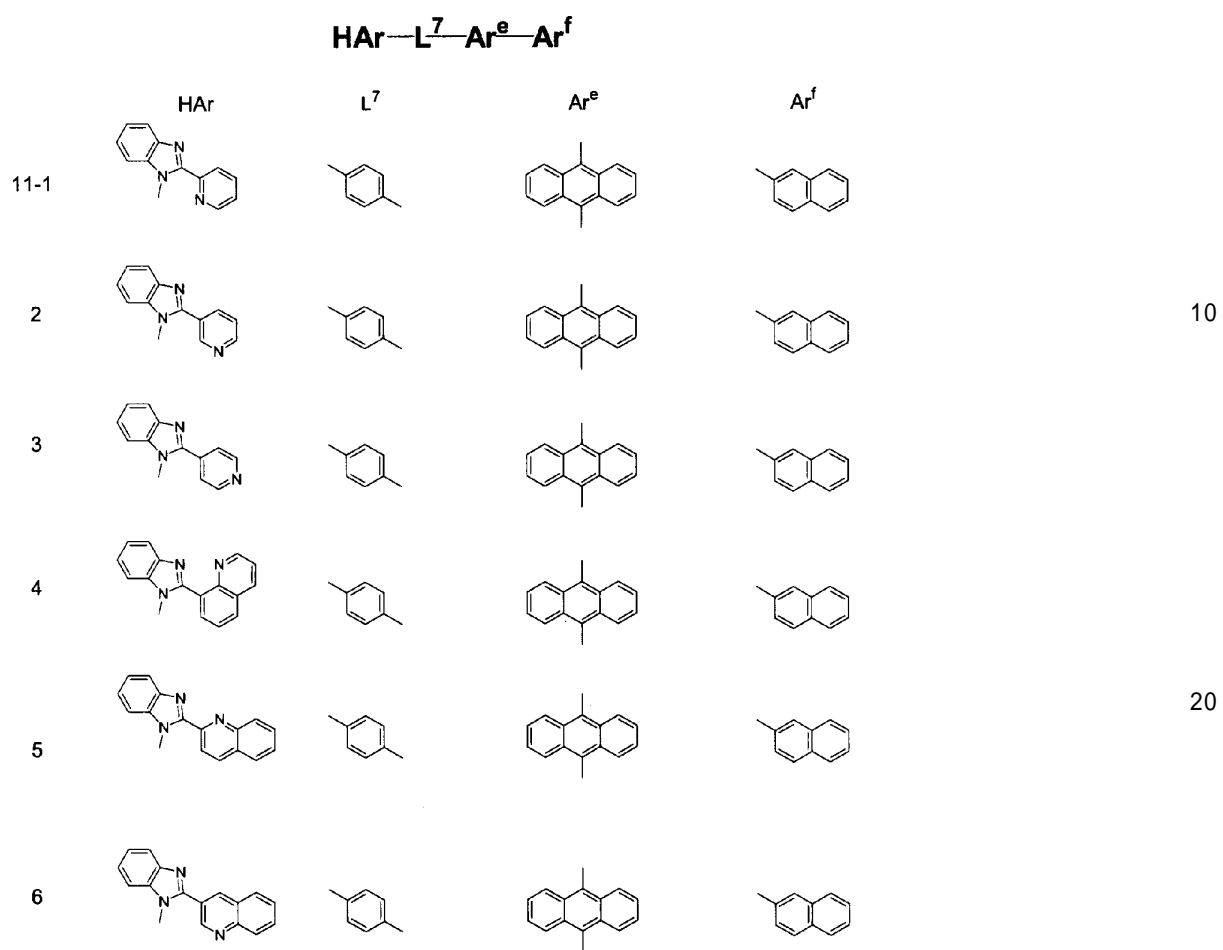


10

20

30

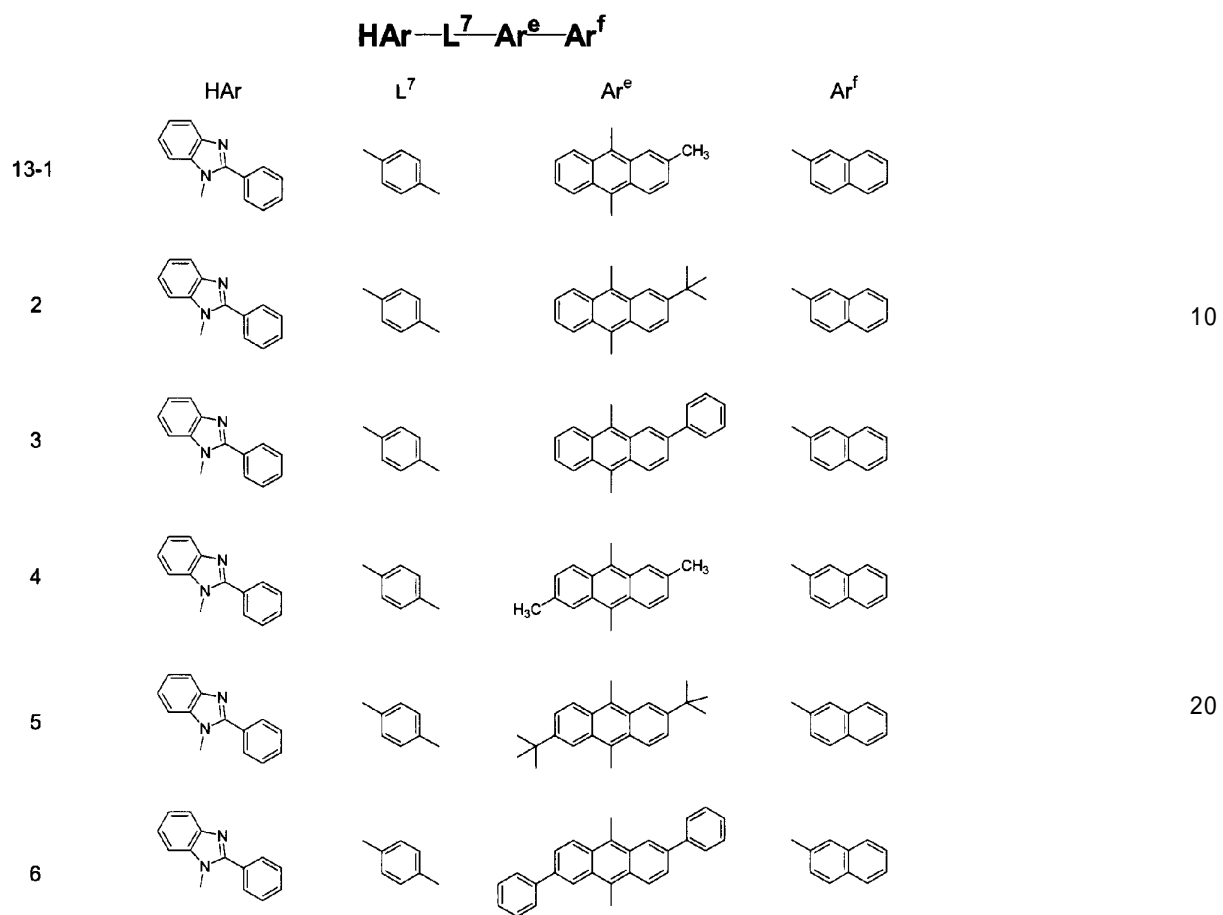
【化 5 4】



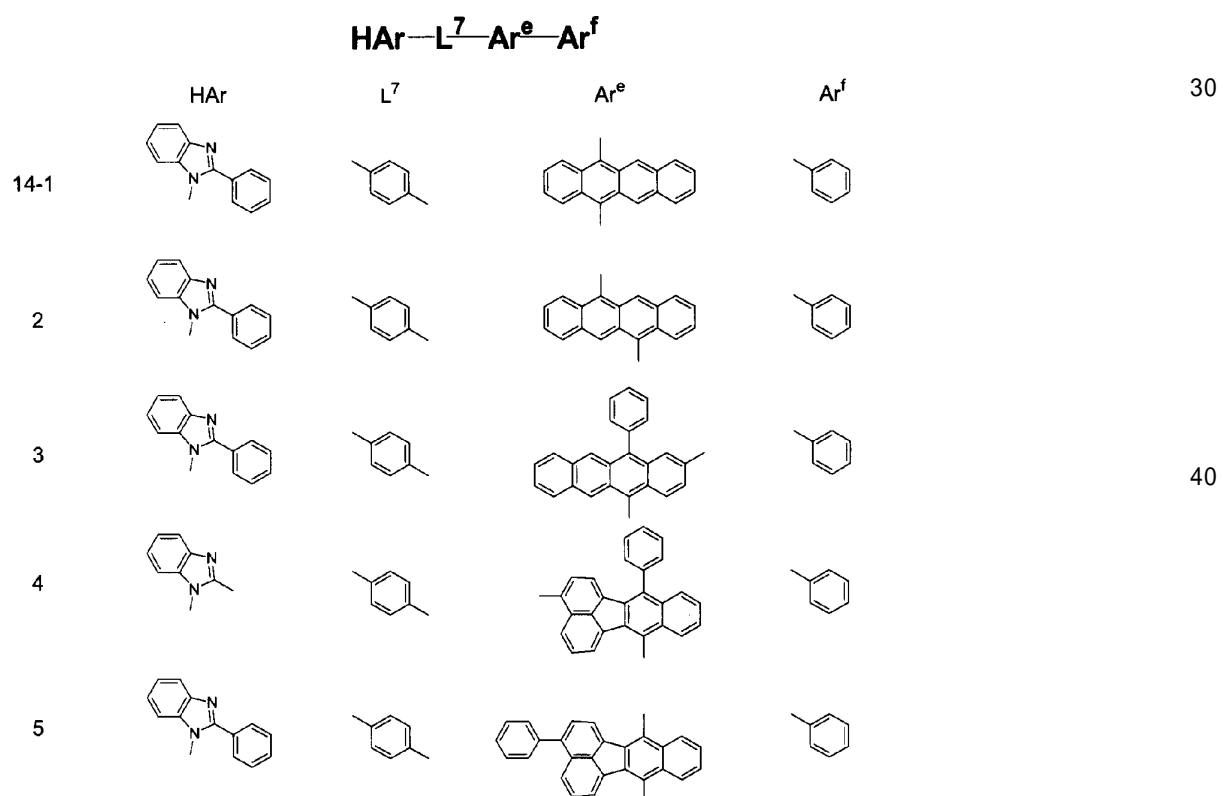
【化 5 5】

|      | $\text{HAr}-\text{L}^7-\text{Ar}^e-\text{Ar}^f$                                     |                                                                                     |                                                                                     |                                                                                      |    |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|----|
|      | HAr                                                                                 | $\text{L}^7$                                                                        | $\text{Ar}^e$                                                                       | $\text{Ar}^f$                                                                        |    |
| 12-1 |    |    |    |    |    |
| 2    |    |    |    |    | 10 |
| 3    |    |    |    |    |    |
| 4    |    |    |    |    |    |
| 5    |    |    |    |    | 20 |
| 6    |   |   |   |   |    |
| 7    |  |  |  |  |    |
| 8    |  |  |  |  | 30 |
| 9    |  |  |  |  |    |
| 10   |  |  |  |  |    |
| 11   |  |  |  |  | 40 |

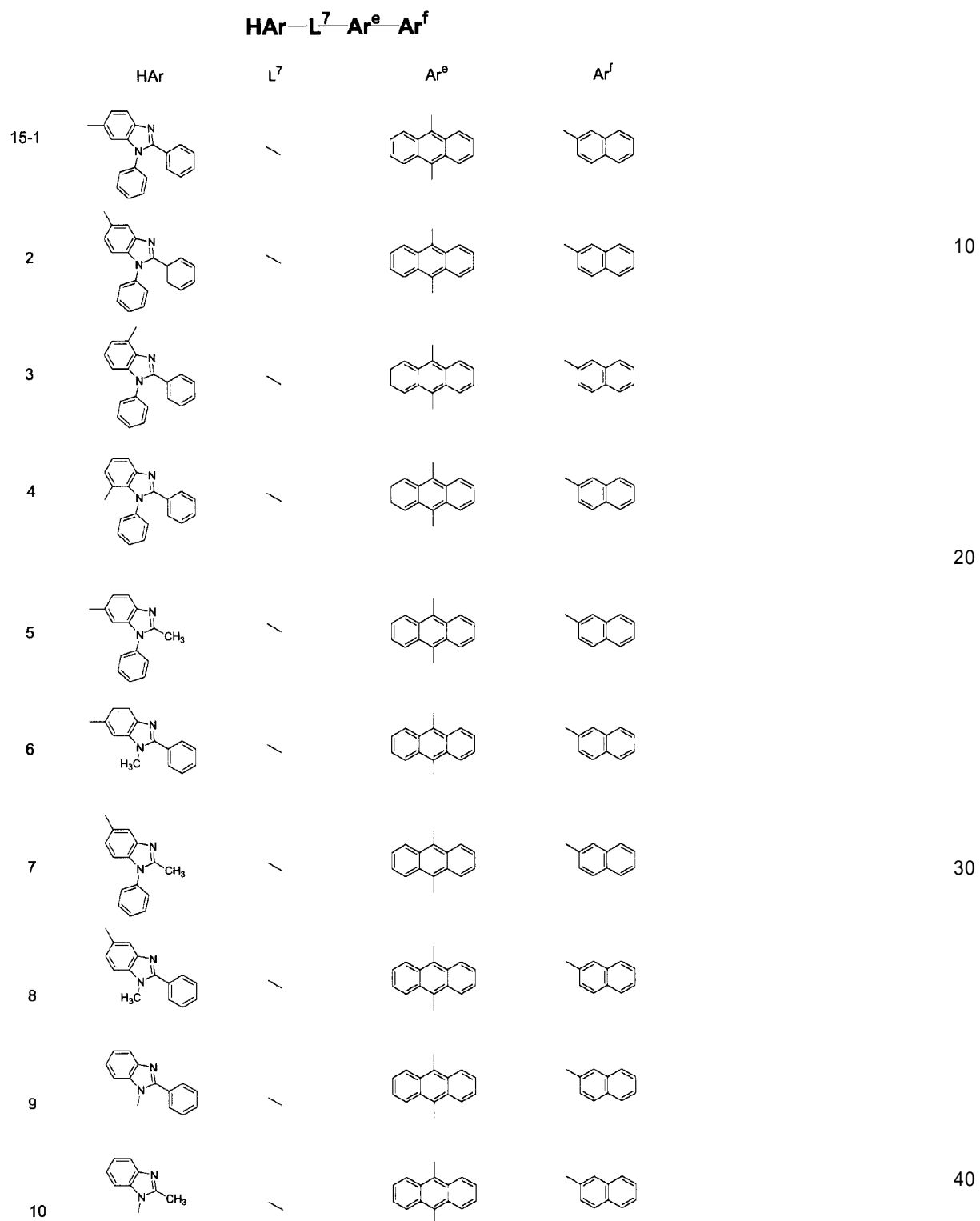
## 【化 5 6】



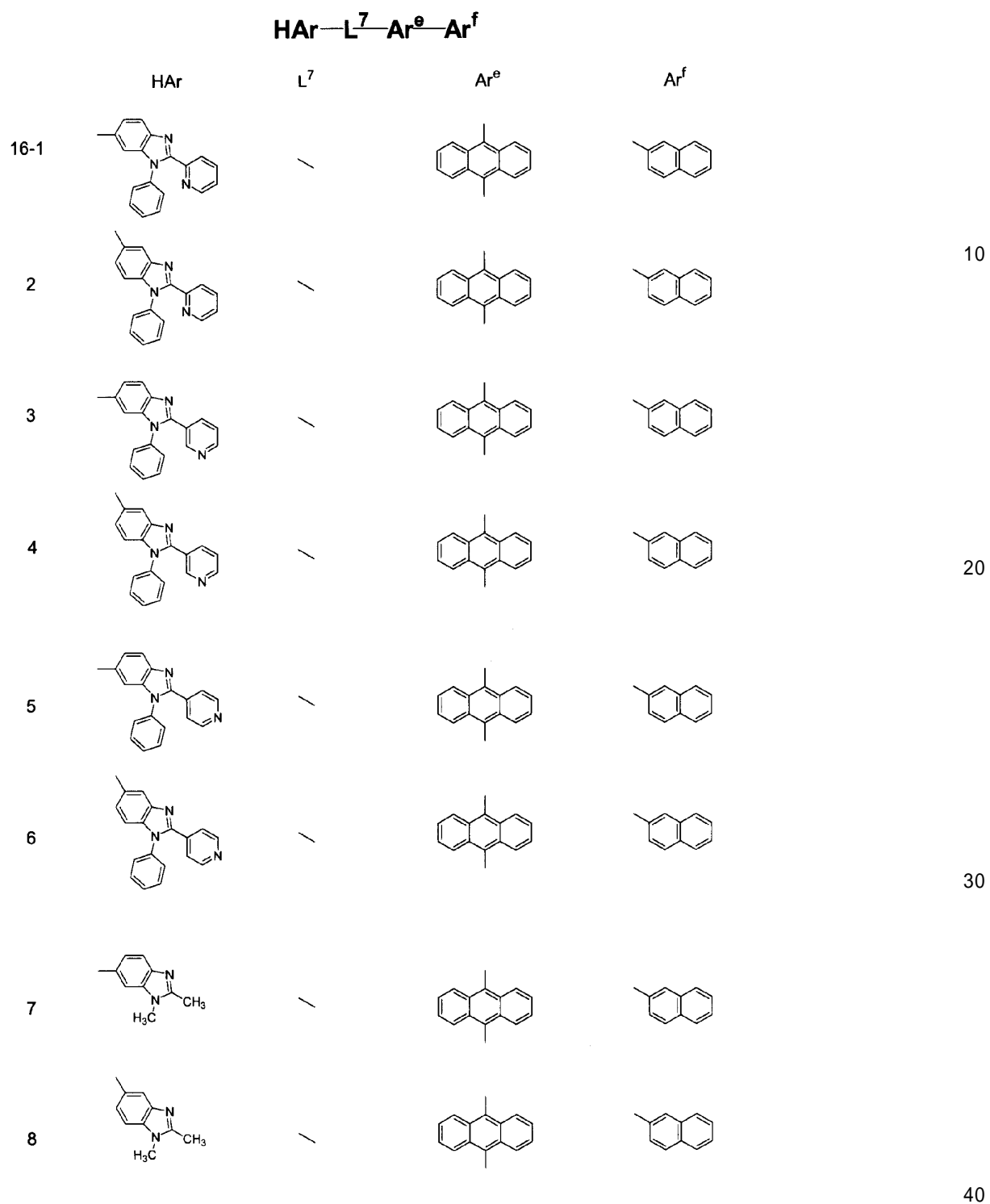
## 【化 5 7】



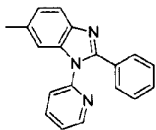

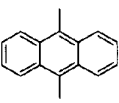
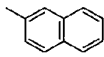
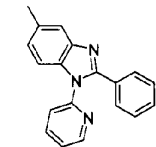

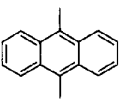
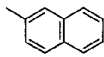
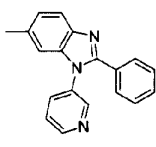

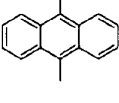
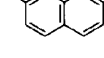
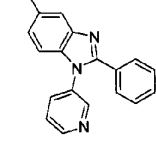

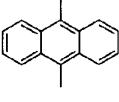
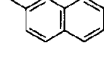
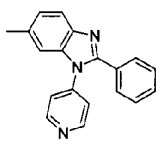

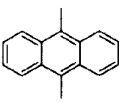
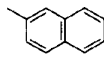
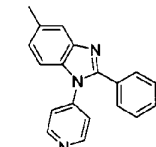

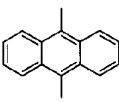
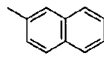
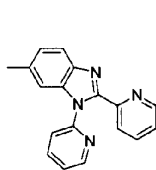

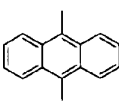
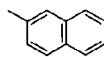
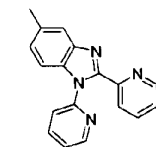

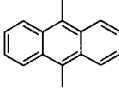
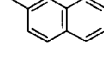
【化 5 8】



【化 5 9】



【化 6 0】

|      | $\text{HAr}$                                                                        | $\text{L}^7$                                                                        | $\text{Ar}^e$                                                                       | $\text{Ar}^f$                                                                         |    |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 17-1 |    |    |    |    |    |
| 2    |    |    |    |    | 10 |
| 3    |    |    |    |    |    |
| 4    |    |    |    |    | 20 |
| 5    |  |  |  |  |    |
| 6    |  |  |  |  | 30 |
| 7    |  |  |  |  |    |
| 8    |  |  |  |  | 40 |

【0085】

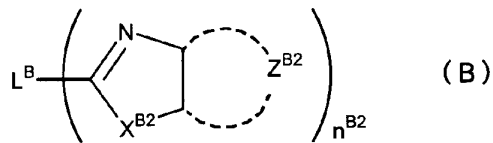
以上の具体例のうち、特に、(1-1)、(1-5)、(1-7)、(2-1)、(3-1)、(4-2)、(4-6)、(7-2)、(7-7)、(7-8)、(7-9)、(9-1)、(9-7)が好ましい。

【0086】

また、含窒素環誘導体としては、含窒素5員環誘導体も好ましく挙げられる。該含窒素5員環としては、例えばイミダゾール環、トリアゾール環、テトラゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、オキサトリアゾール環、チアトリアゾール環等が挙げられ、含窒素5員環誘導体としては、ベンゾイミダゾール環、ベンゾトリアゾール環、ピリジノイミダゾール環、ピリミジノイミダゾール環、ピリダジノイミダゾール環であり、特に

好ましくは、下記一般式 (B) で表されるものである。

【化 6 1】



【 0 0 8 7 】

一般式 (B) 中、 $L^B$  は二価以上の連結基を表し、例えば、炭素原子、ケイ素原子、窒素原子、ホウ素原子、酸素原子、硫黄原子、金属原子 (例えば、バリウム原子、ベリリウム原子)、芳香族炭化水素環、芳香族複素環等が挙げられ、これらのうち炭素原子、窒素原子、ケイ素原子、ホウ素原子、酸素原子、硫黄原子、芳香族炭化水素環、芳香族複素環基が好ましく、炭素原子、ケイ素原子、芳香族炭化水素環、芳香族複素環基がさらに好ましい。

10

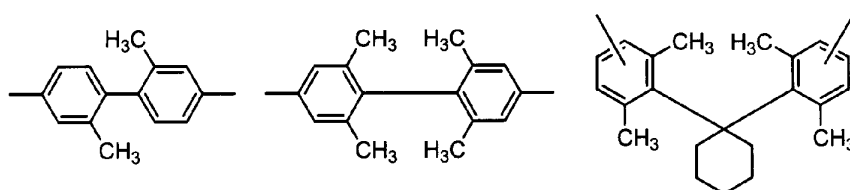
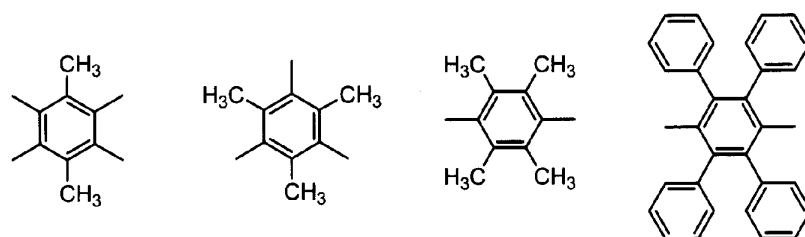
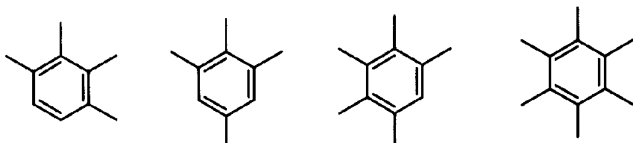
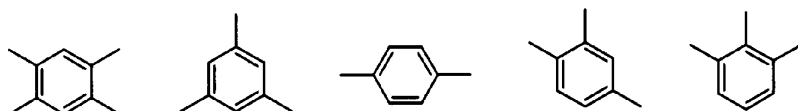
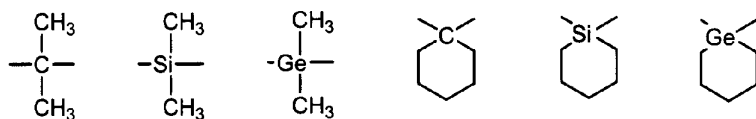
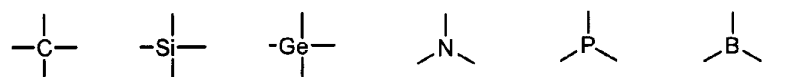
$L^B$  の芳香族炭化水素環及び芳香族複素環基は置換基を有していてもよく、かかる置換基としては、好ましくはアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アシルオキシ基、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、アリールオキシカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、スルファモイル基、カルバモイル基、アルキルチオ基、アリールチオ基、スルホニル基、ハロゲン原子、シアノ基、芳香族複素環基であり、より好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、芳香族複素環基であり、さらに好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、芳香族複素環基であり、特に好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、芳香族複素環基である。

20

【 0 0 8 8 】

$L^B$  の具体例としては、以下に示すものが挙げられる。

## 【化 6 2】



## 【0089】

一般式 (B) における  $X^{B2}$  は、 $-O-$ 、 $-S-$  又は  $-N(R^{B2})-$  を表す。 $R^{B2}$  は、水素原子、脂肪族炭化水素基、アリール基又は複素環基を表す。

$R^{B2}$  の脂肪族炭化水素基は、直鎖状又は分岐状アルキル基（好ましくは炭素数 1 ~ 20、より好ましくは炭素数 1 ~ 12、特に好ましくは炭素数 1 ~ 8 のアルキル基であり、例えば、メチル基、エチル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基、*n*-オクチル基、*n*-デシル基、*n*-ヘキサデシル基等が挙げられる。）、シクロアルキル基（好ましくは環形成炭素数 3 ~ 10 であり、例えば、シクロプロピル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等が挙げられる。）、アルケニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 20、より好ましくは炭素数 2 ~ 12、特に好ましくは炭素数 2 ~ 8 のアルケニル基であり、例えば、ビニル基、アリル基、2-ブテニル基、3-ペンテニル基等が挙げられる。）、アルキニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 20、より好ましくは炭素数 2 ~ 12、特に好ましくは炭素数 2 ~ 8 のアルキニル基であり、例えばプロパルギル基、3-ペンチニル基等が挙げられる。）であり、アルキル基が好ましい。

## 【0090】

$R^{B2}$  のアリール基は単環又は縮合環であり、好ましくは環形成炭素数 6 ~ 30、より好ましくは環形成炭素数 6 ~ 20、さらに好ましくは環形成炭素数 6 ~ 12 のアリール基であり、例えば、フェニル基、2-メチルフェニル基、3-メチルフェニル基、4-メチルフェニル基、2-メトキシフェニル基、3-トリフルオロメチルフェニル基、ペンタフルオロフェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基等が挙げられ、フェニル基、2-メチ

10

20

30

40

50

ルフェニル基が好ましい。

【0091】

$R^{B2}$ の複素環基は、単環又は縮合環であり、好ましくは環形成炭素数1～20、より好ましくは環形成炭素数1～12、さらに好ましくは環形成炭素数2～10の複素環基であり、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、セレン原子の少なくとも一つのヘテロ原子を含む芳香族複素環基である。この複素環基の例としては、例えばピロリジン、ピペリジン、ピペラジン、モルフォリン、チオフェン、セレノフェン、フラン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリダジン、ピリミジン、トリアゾール、トリアジン、インドール、インダゾール、プリン、チアゾリン、チアゾール、チアジアゾール、オキサゾリン、オキサゾール、オキサジアゾール、キノリン、イソキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、プテリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、テトラゾール、ベンゾイミダゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾトリアゾール、テトラザインデン、カルバゾール、アゼピン等から誘導される基が挙げられ、好ましくはフラン、チオフェン、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、キノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリンであり、より好ましくはフラン、チオフェン、ピリジン及びキノリンから誘導される基であり、さらに好ましくはキノリニル基である。

10

【0092】

$R^{B2}$ で表される脂肪族炭化水素基、アリール基及び複素環基は置換基を有していてもよく、かかる置換基としては、好ましくはアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アシルオキシ基、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、アリールオキシカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、スルファモイル基、カルバモイル基、アルキルチオ基、アリールチオ基、スルホニル基、ハロゲン原子、シアノ基、芳香族複素環基であり、より好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、芳香族複素環基であり、さらに好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、芳香族複素環基であり、特に好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、芳香族複素環基である。

20

$R^{B2}$ としては、好ましくは脂肪族炭化水素基、アリール基又は複素環基であり、より好ましくは脂肪族炭化水素基（好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、さらに好ましくは炭素数6～12のもの）又はアリール基であり、さらに好ましくは脂肪族炭化水素基（好ましくは炭素数1～20、より好ましくは炭素数1～12、さらに好ましくは炭素数2～10のもの）である。

30

$X^{B2}$ としては、好ましくは-O-又はN( $R^{B2}$ )-であり、より好ましくは-N( $R^{B2}$ )-である。

【0093】

$Z^{B2}$ は、芳香族環を形成するために必要な原子群を表す。 $Z^{B2}$ で形成される芳香族環は芳香族炭化水素環、芳香族複素環のいずれでもよく、具体例としては、例えば、ベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環、ピロール環、フラン環、チオフェン環、セレノフェン環、テルロフェン環、イミダゾール環、チアゾール環、セレナゾール環、テルラゾール環、チアジアゾール環、オキサジアゾール環、ピラゾール環などが挙げられ、好ましくはベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環であり、より好ましくはベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環であり、さらに好ましくはベンゼン環、ピリジン環であり、特に好ましくはピリジン環である。

40

【0094】

$Z^{B2}$ で形成される芳香族環は、さらに他の環と縮合環を形成してもよく、置換基を有していてもよい。置換基としては前記 $L^B$ で表される基の置換基として挙げたものと同様であり、好ましくはアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アシルオキシ基、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、アリー

50

ルオキシカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、スルファモイル基、カルバモイル基、アルキルチオ基、アリールチオ基、スルホニル基、ハロゲン原子、シアノ基、複素環基であり、より好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、複素環基であり、さらに好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、芳香族複素環基であり、特に好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、芳香族複素環基である。

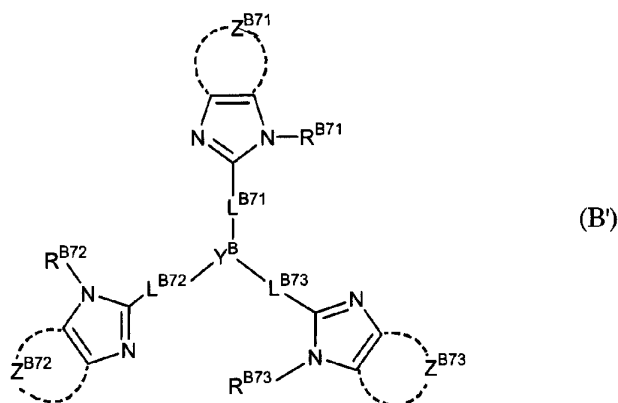
$n^{B2}$  は、1 ~ 4 の整数であり、2 ~ 3 であると好ましい。

【0095】

前記一般式 (B) で表される含窒素 5 員環誘導体のうち、さらに好ましくは下記一般式 (B') で表されるものが好ましい。

10

【化63】



20

【0096】

一般式 (B') 中、 $R^{B71}$ 、 $R^{B72}$  及び  $R^{B73}$  は、それぞれ一般式 (B) における  $R^{B2}$  と同様であり、また好ましい範囲も同様である。

$Z^{B71}$ 、 $Z^{B72}$  及び  $Z^{B73}$  は、それぞれ一般式 (B) における  $Z^{B2}$  と同様であり、また好ましい範囲も同様である。

$L^{B71}$ 、 $L^{B72}$  及び  $L^{B73}$  は、それぞれ連結基を表し、一般式 (B) における  $L^B$  の例を二価としたものが挙げられ、好ましくは、単結合、二価の芳香族炭化水素環基、二価の芳香族複素環基、及びこれらの組み合わせからなる連結基であり、より好ましくは単結合である。 $L^{B71}$ 、 $L^{B72}$  及び  $L^{B73}$  は置換基を有していてもよく、置換基としては前記一般式 (B) における  $L^B$  で表される基の置換基として挙げたものと同様であり、また好ましい置換基も同様である。

30

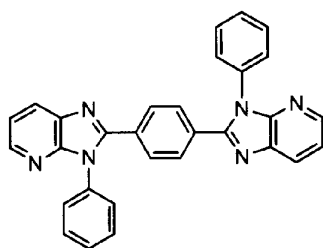
$Y^B$  は、窒素原子、1, 3, 5 - ペンゼントリイル基又は 2, 4, 6 - トリアジントリイル基を表す。1, 3, 5 - ペンゼントリイル基は 2, 4, 6 - 位に置換基を有していてもよく、置換基としては、例えばアルキル基、芳香族炭化水素環基、ハロゲン原子などが挙げられる。

【0097】

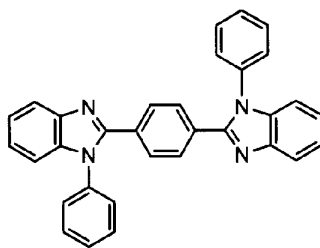
一般式 (B) 又は一般式 (B') で表される含窒素 5 員環誘導体の具体例を以下に示すが、これら例示化合物に限定されるものではない。

40

## 【化 6 4】

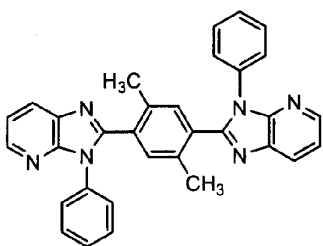


(B-1)

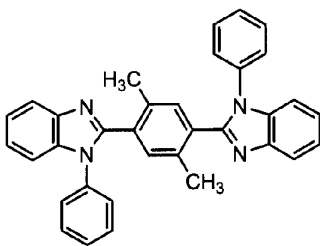


(B-5)

10

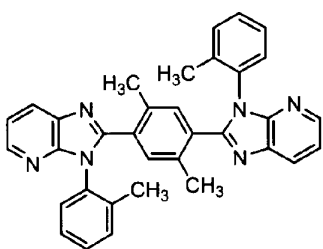


(B-2)

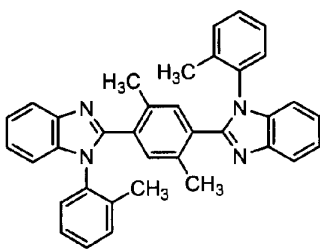


(B-6)

20

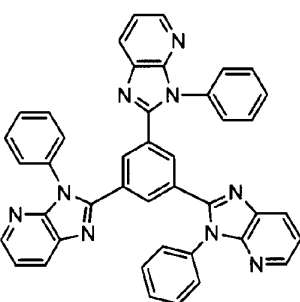


(B-3)

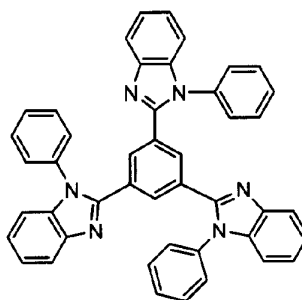


(B-7)

30

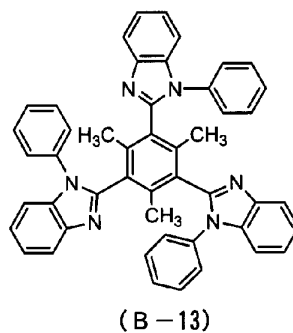
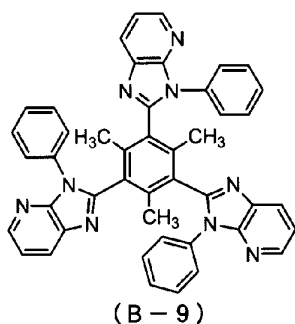


(B-4)

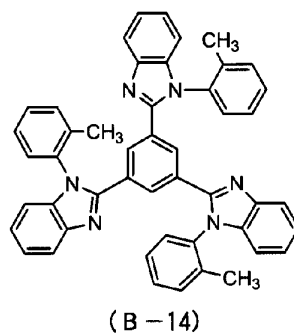
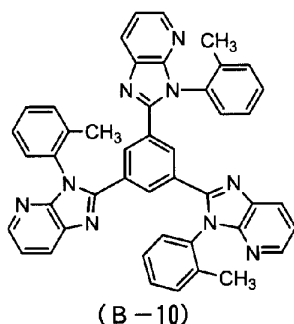


(B-8)

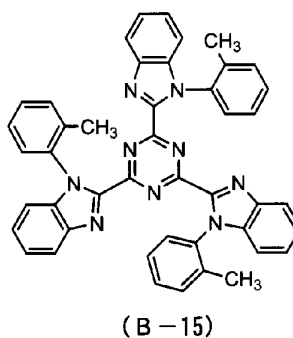
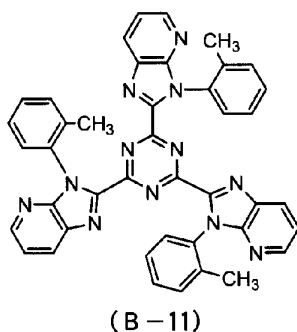
## 【化 6 5】



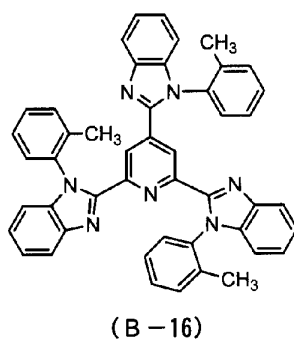
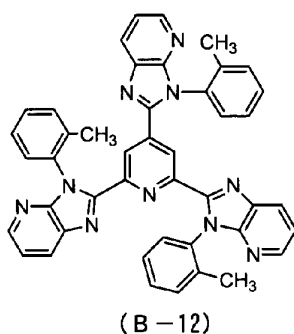
10



20



30



## 【0098】

40

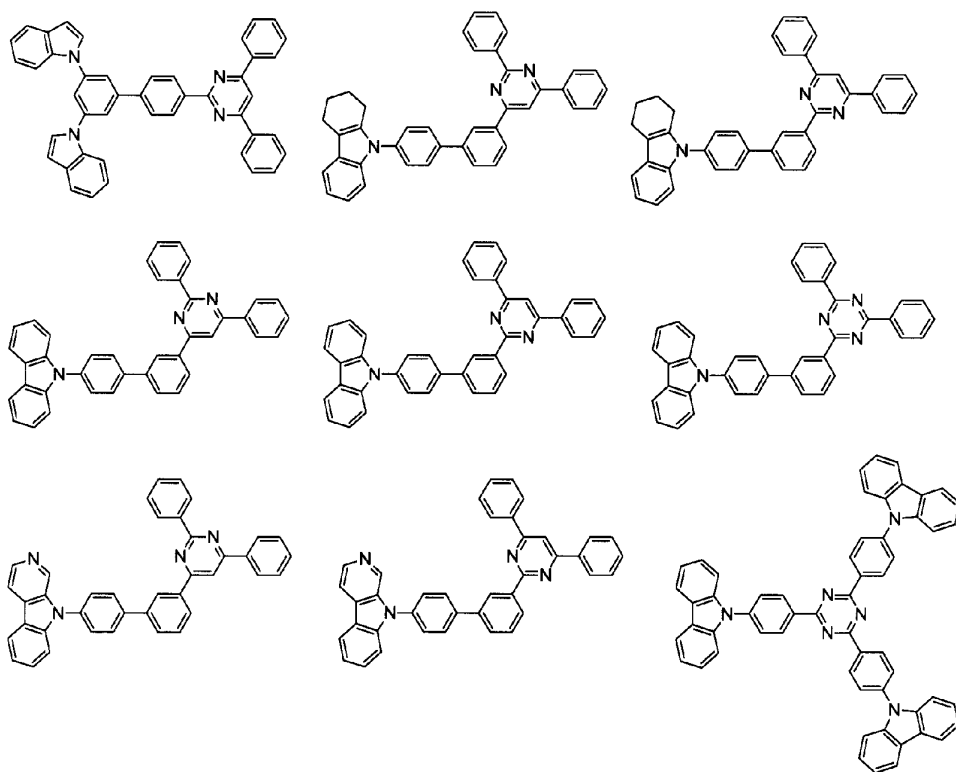
電子注入層及び電子輸送層を構成する化合物としては、電子欠乏性含窒素5員環又は電子欠乏性含窒素6員環骨格と、置換又は無置換のインドール骨格、置換又は無置換のカルバゾール骨格、置換又は無置換のアザカルバゾール骨格を組み合わせた構造を有する化合物等も挙げられる。また、好適な電子欠乏性含窒素5員環又は電子欠乏性含窒素6員環骨格としては、例えばピリジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、トリアゾール、オキサジアゾール、ピラゾール、イミダゾール、キノキサリン、ピロール骨格及び、それらがお互いに縮合したベンズイミダゾール、イミダゾピリジン等の分子骨格が挙げられる。これらの組み合わせの中でも、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン骨格と、カルバゾール、インドール、アザカルバゾール、キノキサリン骨格が好ましく挙げられる。前述の骨格は置換されていてもよいし、無置換でもよい。

50

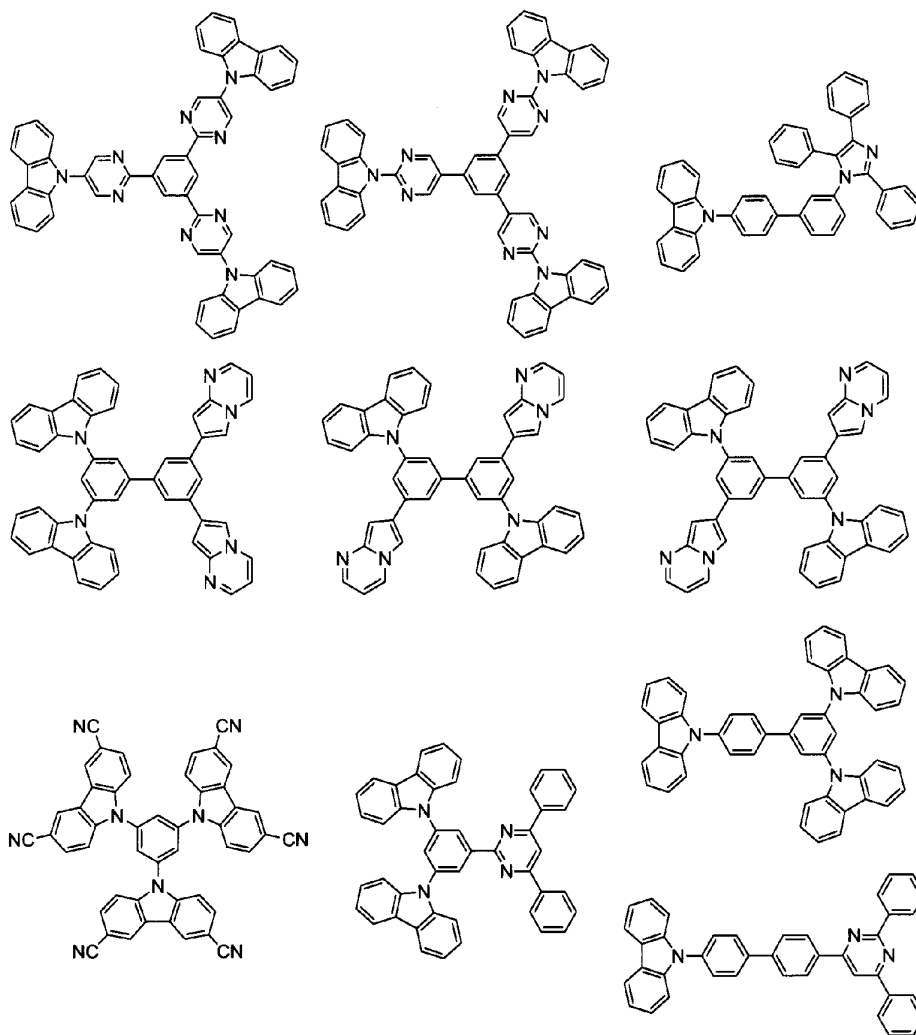
【 0 0 9 9 】

電子輸送性化合物の具体例を以下に示すが、特にこれらに限定されない。

【 化 6 6 】



## 【化 67】



10

20

## 【0100】

30

電子注入層及び電子輸送層は、前記材料の1種又は2種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。これらの層の材料は、電子欠乏性含窒素ヘテロ環基を有していることが好ましい。

## 【0101】

また、電子注入層の構成成分として、含窒素環誘導体の他に無機化合物として、絶縁体又は半導体を使用することが好ましい。電子注入層が絶縁体や半導体で構成されていれば、電流のリークを有効に防止して、電子注入性を向上させることができる。

## 【0102】

このような絶縁体としては、アルカリ金属カルコゲニド、アルカリ土類金属カルコゲニド、アルカリ金属のハロゲン化物及びアルカリ土類金属のハロゲン化物からなる群から選  
 40  
 択される少なくとも一つの金属化合物を使用するのが好ましい。電子注入層がこれらのアルカリ金属カルコゲニド等で構成されていれば、電子注入性をさらに向上させることができる点で好ましい。具体的に、好ましいアルカリ金属カルコゲニドとしては、例えばLi<sub>2</sub>O、K<sub>2</sub>O、Na<sub>2</sub>S、Na<sub>2</sub>Se及びNa<sub>2</sub>Oが挙げられ、好ましいアルカリ土類金属カルコゲニドとしては、例えばCaO、BaO、SrO、BeO、BaS及びCaSeが挙げられる。また、好ましいアルカリ金属のハロゲン化物としては、例えばLiF、NaF、KF、LiCl、KCl及びNaCl等が挙げられる。また、好ましいアルカリ土類金属のハロゲン化物としては、例えばCaF<sub>2</sub>、BaF<sub>2</sub>、SrF<sub>2</sub>、MgF<sub>2</sub>及びBeF<sub>2</sub>等のフッ化物や、フッ化物以外のハロゲン化物が挙げられる。

また、半導体としては、例えばBa、Ca、Sr、Yb、Al、Ga、In、Li、N

50

a、Cd、Mg、Si、Ta、Sb及びZnからなる群から選択される少なくとも一つの元素を含む酸化物、窒化物又は酸化窒化物等が挙げられ、これらは一種を単独で使用してもよいし、二種以上を組み合わせ使用してもよい。また、電子注入層を構成する無機化合物が、微結晶又は非晶質の絶縁性薄膜であることが好ましい。電子注入層がこれらの絶縁性薄膜で構成されていれば、より均質な薄膜が形成されるために、ダークスポット等の画素欠陥を減少させることができる。なお、このような無機化合物としては、例えばアルカリ金属カルコゲニド、アルカリ土類金属カルコゲニド、アルカリ金属のハロゲン化物及びアルカリ土類金属のハロゲン化物等が挙げられる。

また、本発明における電子注入層には、前述の還元性ドーパントを好ましく含有させることができる。

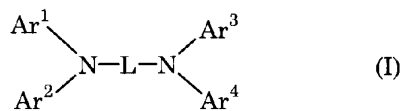
10

なお、電子注入層又は電子輸送層の膜厚は、特に限定されないが、好ましくは、1～100nmである。

#### 【0103】

正孔注入層又は正孔輸送層（正孔注入輸送層も含む）には芳香族アミン化合物、例えば、一般式（I）で表わされる芳香族アミン誘導体が好適に用いられる。

#### 【化68】



20

#### 【0104】

一般式（I）において、 $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^4$ は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基または置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基を表す。

#### 【0105】

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基としては、例えば、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントリル基、2-アントリル基、9-アントリル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェナントリル基、9-フェナントリル基、1-ナフタセニル基、2-ナフタセニル基、9-ナフタセニル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、2-ビフェニル基、3-ビフェニル基、4-ビフェニル基、p-ターフェニル-4-イル基、p-ターフェニル-3-イル基、p-ターフェニル-2-イル基、m-ターフェニル-4-イル基、m-ターフェニル-3-イル基、m-ターフェニル-2-イル基、o-トリル基、m-トリル基、p-トリル基、p-t-ブチルフェニル基、p-(2-フェニルプロピル)フェニル基、3-メチル-2-ナフチル基、4-メチル-1-ナフチル基、4-メチル-1-アントリル基、4'-メチルビフェニル基、4"-t-ブチル-p-ターフェニル-4-イル基、フルオランテニル基、フルオレニル基などが挙げられる。

30

#### 【0106】

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基としては、例えば、1-ピロリル基、2-ピロリル基、3-ピロリル基、ピラジニル基、2-ピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、1-インドリル基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インドリル基、5-インドリル基、6-インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、2-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル基、2-フリル基、3-フリル基、2-ベンゾフラニル基、3-ベンゾフラニル基、4-ベンゾフラニル基、5-ベンゾフラニル基、6-ベンゾフラニル基、7-ベンゾフラニル基、1-イソベンゾフラニル基、3-イソベンゾフラニル基、4-イソベンゾフラニル基、5-イソベンゾフラニル基、6-イソベンゾフラニル基、7-イソベンゾフラニル基、キノリル基、3-キノリル基、4-キノリル基、5-キノリル基、6-キノリル基、7-キノリル基、8-キノリル基、1-イソキノリル基、3-イソキノリル基、4-イソキノリル基、5-イソキノ

40

50

ノリル基、6 - イソキノリル基、7 - イソキノリル基、8 - イソキノリル基、2 - キノキサリニル基、5 - キノキサリニル基、6 - キノキサリニル基、1 - カルバゾリル基、2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、9 - カルバゾリル基、1 - フェナンスリジニル基、2 - フェナンスリジニル基、3 - フェナンスリジニル基、4 - フェナンスリジニル基、6 - フェナンスリジニル基、7 - フェナンスリジニル基、8 - フェナンスリジニル基、9 - フェナンスリジニル基、10 - フェナンスリジニル基、1 - アクリジニル基、2 - アクリジニル基、3 - アクリジニル基、4 - アクリジニル基、9 - アクリジニル基、1, 7 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1 - フェナジニル基、2 - フェナジニル基、1 - フェノチアジニル基、2 - フェノチアジニル基、3 - フェノチアジニル基、4 - フェノチアジニル基、10 - フェノチアジニル基、1 - フェノキサジニル基、2 - フェノキサジニル基、3 - フェノキサジニル基、4 - フェノキサジニル基、10 - フェノキサジニル基、2 - オキサゾリル基、4 - オキサゾリル基、5 - オキサゾリル基、2 - オキサジアゾリル基、5 - オキサジアゾリル基、3 - フラザニル基、2 - チエニル基、3 - チエニル基、2 - メチルピロール - 1 - イル基、2 - メチルピロール - 3 - イル基、2 - メチルピロール - 4 - イル基、2 - メチルピロール - 5 - イル基、3 - メチルピロール - 1 - イル基、3 - メチルピロール - 2 - イル基、3 - メチルピロール - 4 - イル基、3 - メチルピロール - 5 - イル基、2 - t - ブチルピロール - 4 - イル基、3 - (2 - フェニルプロピル)ピロール - 1 - イル基、2 - メチル - 1 - インドリル基、4 - メチル - 1 - インドリル基、2 - メチル - 3 - インドリル基、4 - メチル - 3 - インドリル基、2 - t - ブチル 1 - インドリル基、4 - t - ブチル 1 - インドリル基、2 - t - ブチル 3 - インドリル基、4 - t - ブチル 3 - インドリル基等が挙げられる。好ましくはフェニル基、ナフチル基、ビフェニル基、アントラニル基、フェナンスリル基、ピレニル基、クリセニル基、フルオランテニル基、フルオレニル基などが挙げられる。

【0107】

Lは連結基である。具体的には置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレ

10

20

30

40

50

ン基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリーレン基、または、2 個以上のアリーレン基もしくはヘテロアリーレン基を単結合、エーテル結合、チオエーテル結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、炭素数 2 ~ 20 のアルケニレン基、アミノ基で結合して得られる 2 価の基である。環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基としては、例えば、1, 4 - フェニレン基、1, 2 - フェニレン基、1, 3 - フェニレン基、1, 4 - ナフチレン基、2, 6 - ナフチレン基、1, 5 - ナフチレン基、9, 10 - アントラニレン基、9, 10 - フェナントレニレン基、3, 6 - フェナントレニレン基、1, 6 - ピレニレン基、2, 7 - ピレニレン基、6, 12 - クリセニレン基、4, 4' - ビフェニレン基、3, 3' - ビフェニレン基、2, 2' - ビフェニレン基、2, 7 - フルオレニレン基等が挙げられる。環形成原子数 5 ~ 50 のアリーレン基としては、例えば、2, 5 - チオフェニレン基、2, 5 - シローリレン基、2, 5 - オキサジアゾーリレン基等が挙げられる。好ましくは 1, 4 - フェニレン基、1, 2 - フェニレン基、1, 3 - フェニレン基、1, 4 - ナフチレン基、9, 10 - アントラニレン基、6, 12 - クリセニレン基、4, 4' - ビフェニレン基、3, 3' - ビフェニレン基、2, 2' - ビフェニレン基、2, 7 - フルオレニレン基である。

10

#### 【0108】

L が 2 個以上のアリーレン基またはヘテロアリーレン基からなる連結基である場合、隣り合うアリーレン基またはヘテロアリーレン基は 2 価の基を介して互いに結合して新たな環を形成してもよい。環を形成する 2 価基の例としては、テトラメチレン基、ペンタメチレン基、ヘキサメチレン基、ジフェニルメタン - 2, 2' - ジイル基、ジフェニルエタン - 3, 3' - ジイル基、ジフェニルプロパン - 4, 4' - ジイル基等が挙げられる。

20

#### 【0109】

$Ar^1 \sim Ar^4$  および L の置換基としては、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基または置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基で置換されたアミノ基、ハロゲン基、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基等である。

30

#### 【0110】

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基の例としては、フェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニルイル基、4'' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基、フルオランテニル基、フルオレニル基等が挙げられる。

40

#### 【0111】

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基の例としては、1 - ピロリル基、2 - ピロリル基、3 - ピロリル基、ピラジニル基、2 - ピリジニル基、3 - ピリジニル基、4 - ピリジニル基、1 - インドリル基、2 - インドリル基、3 - インドリル基、4 -

50

インドリル基、5 - インドリル基、6 - インドリル基、7 - インドリル基、1 - イソインドリル基、2 - イソインドリル基、3 - イソインドリル基、4 - イソインドリル基、5 - イソインドリル基、6 - イソインドリル基、7 - イソインドリル基、2 - フリル基、3 - フリル基、2 - ベンゾフラニル基、3 - ベンゾフラニル基、4 - ベンゾフラニル基、5 - ベンゾフラニル基、6 - ベンゾフラニル基、7 - ベンゾフラニル基、1 - イソベンゾフラニル基、3 - イソベンゾフラニル基、4 - イソベンゾフラニル基、5 - イソベンゾフラニル基、6 - イソベンゾフラニル基、7 - イソベンゾフラニル基、キノリル基、3 - キノリル基、4 - キノリル基、5 - キノリル基、6 - キノリル基、7 - キノリル基、8 - キノリル基、1 - イソキノリル基、3 - イソキノリル基、4 - イソキノリル基、5 - イソキノリル基、6 - イソキノリル基、7 - イソキノリル基、8 - イソキノリル基、2 - キノキサリニル基、5 - キノキサリニル基、6 - キノキサリニル基、1 - カルバゾリル基、2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、9 - カルバゾリル基、1 - フェナンスリジニル基、2 - フェナンスリジニル基、3 - フェナンスリジニル基、4 - フェナンスリジニル基、6 - フェナンスリジニル基、7 - フェナンスリジニル基、8 - フェナンスリジニル基、9 - フェナンスリジニル基、10 - フェナンスリジニル基、1 - アクリジニル基、2 - アクリジニル基、3 - アクリジニル基、4 - アクリジニル基、9 - アクリジニル基、1, 7 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1 - フェナジニル基、2 - フェナジニル基、1 - フェノチアジニル基、2 - フェノチアジニル基、3 - フェノチアジニル基、4 - フェノチアジニル基、10 - フェノチアジニル基、1 - フェノキサジニル基、2 - フェノキサジニル基、3 - フェノキサジニル基、4 - フェノキサジニル基、10 - フェノキサジニル基、2 - オキサゾリル基、4 - オキサゾリル基、5 - オキサゾリル基、2 - オキサジアゾリル基、5 - オキサジアゾリル基、3 - フラザニル基、2 - チエニル基、3 - チエニル基、2 - メチルピロール - 1 - イル基、2 - メチルピロール - 3 - イル基、2 - メチルピロール - 4 - イル基、2 - メチルピロール - 5 - イル基、3 - メチルピロール - 1 - イル基、3 - メチルピロール - 2 - イル基、3 - メチルピロール - 4 - イル基、3 - メチルピロール - 5 - イル基、2 - t - ブチルピロ

10

20

30

40

50

ール - 4 - イル基、3 - (2 - フェニルプロピル)ピロール - 1 - イル基、2 - メチル - 1 - インドリル基、4 - メチル - 1 - インドリル基、2 - メチル - 3 - インドリル基、4 - メチル - 3 - インドリル基、2 - t - ブチル 1 - インドリル基、4 - t - ブチル 1 - インドリル基、2 - t - ブチル 3 - インドリル基、4 - t - ブチル 3 - インドリル基等が挙げられる。

#### 【0112】

置換又は無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、s - ブチル基、イソブチル基、t - ブチル基、n - ペンチル基、n - ヘキシル基、n - ヘプチル基、n - オクチル基、ヒドロキシメチル基、1 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシイソブチル基、1, 2 - ジヒドロキシエチル基、1, 3 - ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3 - ジヒドロキシ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1 - クロロエチル基、2 - クロロエチル基、2 - クロロイソブチル基、1, 2 - ジクロロエチル基、1, 3 - ジクロロイソプロピル基、2, 3 - ジクロロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリクロロプロピル基、ブromoメチル基、1 - ブromoエチル基、2 - ブromoエチル基、2 - ブromoイソブチル基、1, 2 - ジブromoエチル基、1, 3 - ジブromoイソプロピル基、2, 3 - ジブromo - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリブromoプロピル基、ヨードメチル基、1 - ヨードエチル基、2 - ヨードエチル基、2 - ヨードイソブチル基、1, 2 - ジヨードエチル基、1, 3 - ジヨードイソプロピル基、2, 3 - ジヨード - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1 - アミノエチル基、2 - アミノエチル基、2 - アミノイソブチル基、1, 2 - ジアミノエチル基、1, 3 - ジアミノイソプロピル基、2, 3 - ジアミノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基、2 - シアノイソブチル基、1, 2 - ジシアノエチル基、1, 3 - ジシアノイソプロピル基、2, 3 - ジシアノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1 - ニトロエチル基、2 - ニトロエチル基、2 - ニトロイソブチル基、1, 2 - ジニトロエチル基、1, 3 - ジニトロイソプロピル基、2, 3 - ジニトロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリニトロプロピル基等が挙げられる。

#### 【0113】

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基の例としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、4 - メチルシクロヘキシル基、1 - アダマンチル基、2 - アダマンチル基、1 - ノルボルニル基、2 - ノルボルニル基等が挙げられる。

#### 【0114】

置換又は無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基は、- OY で表される基である。Y の例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、s - ブチル基、イソブチル基、t - ブチル基、n - ペンチル基、n - ヘキシル基、n - ヘプチル基、n - オクチル基、ヒドロキシメチル基、1 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシイソブチル基、1, 2 - ジヒドロキシエチル基、1, 3 - ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3 - ジヒドロキシ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1 - クロロエチル基、2 - クロロエチル基、2 - クロロイソブチル基、1, 2 - ジクロロエチル基、1, 3 - ジクロロイソプロピル基、2, 3 - ジクロロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリクロロプロピル基、ブromoメチル基、1 - ブromoエチル基、2 - ブromoエチル基、2 - ブromoイソブチル基、1, 2 - ジブromoエチル基、1, 3 - ジブromoイソプロピル基、2, 3 - ジブromo - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリブromoプロピル基、ヨードメチル基、1 - ヨードエチル基、2 - ヨードエチル基、2 - ヨードイソブチル基、1, 2 - ジヨードエチル基、1, 3 - ジヨードイソプロピル基、2, 3 - ジヨード - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1 - アミノエチル基、2 - アミノエチル基、2 - アミノイソブチル基、1, 2 - ジアミノエチル基、1, 3 - ジアミノイソプロピル基、2, 3 - ジアミノ - t - ブチル基、1

、2、3 - トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基、2 - シアノイソプロピル基、1、2 - ジシアノエチル基、1、3 - ジシアノイソプロピル基、2、3 - ジシアノ - t - ブチル基、1、2、3 - トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1 - ニトロエチル基、2 - ニトロエチル基、2 - ニトロイソプロピル基、1、2 - ジニトロエチル基、1、3 - ジニトロイソプロピル基、2、3 - ジニトロ - t - ブチル基、1、2、3 - トリニトロプロピル基等が挙げられる。

#### 【0115】

置換又は無置換の炭素数7～50のアラルキル基の例としては、ベンジル基、1 - フェニルエチル基、2 - フェニルエチル基、1 - フェニルイソプロピル基、2 - フェニルイソプロピル基、フェニル - t - ブチル基、 - ナフチルメチル基、1 - - ナフチルエチル基、2 - - ナフチルエチル基、1 - - ナフチルイソプロピル基、2 - - ナフチルイソプロピル基、 - ナフチルメチル基、1 - - ナフチルエチル基、2 - - ナフチルエチル基、1 - - ナフチルイソプロピル基、2 - - ナフチルイソプロピル基、1 - ピロリルメチル基、2 - (1 - ピロリル)エチル基、p - メチルベンジル基、m - メチルベンジル基、o - メチルベンジル基、p - クロロベンジル基、m - クロロベンジル基、o - クロロベンジル基、p - ブロモベンジル基、m - ブロモベンジル基、o - ブロモベンジル基、p - ヨードベンジル基、m - ヨードベンジル基、o - ヨードベンジル基、p - ヒドロキシベンジル基、m - ヒドロキシベンジル基、o - ヒドロキシベンジル基、p - アミノベンジル基、m - アミノベンジル基、o - アミノベンジル基、p - ニトロベンジル基、m - ニトロベンジル基、o - ニトロベンジル基、p - シアノベンジル基、m - シアノベンジル基、o - シアノベンジル基、1 - ヒドロキシ - 2 - フェニルイソプロピル基、1 - クロロ - 2 - フェニルイソプロピル基等が挙げられる。

#### 【0116】

置換又は無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基は、- O Y 'と表され、Y 'の例としてはフェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナフタセニル基、2 - ナフタセニル基、9 - ナフタセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4 ' - メチルビフェニルイル基、4 '' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基等が挙げられる。

#### 【0117】

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリールオキシ基は、- O Z 'と表され、Z 'の例としては2 - ピロリル基、3 - ピロリル基、ピラジニル基、2 - ピリジニル基、3 - ピリジニル基、4 - ピリジニル基、2 - インドリル基、3 - インドリル基、4 - インドリル基、5 - インドリル基、6 - インドリル基、7 - インドリル基、1 - イソインドリル基、3 - イソインドリル基、4 - イソインドリル基、5 - イソインドリル基、6 - イソインドリル基、7 - イソインドリル基、2 - フリル基、3 - フリル基、2 - ベンゾフラニル基、3 - ベンゾフラニル基、4 - ベンゾフラニル基、5 - ベンゾフラニル基、6 - ベンゾフラニル基、7 - ベンゾフラニル基、1 - イソベンゾフラニル基、3 - イソベンゾフラニル基、4 - イソベンゾフラニル基、5 - イソベンゾフラニル基、6 - イソベンゾフラニル基、7 - イソベンゾフラニル基、2 - キノリル基、3 - キノリル基、4 - キノリル基、5 - キノリル基、6 - キノリル基、7 - キノリル基、8 - キノリル基、1 - イソキノリル基、3 - イソキノリル基、4 - イソキノリル基、5 - イソキノリル基、6 - イソキノリル基、7 - イソキノリル基、8 - イソキノリル基、2 - キノキサリニル基、5 - キノキサリニル基、6 - キノキサリニル基、1 - カルバゾリル基、2 - カルバゾリル基、3

10

20

30

40

50

- カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、1 - フェナンスリジニル基、2 - フェナンスリジニル基、3 - フェナンスリジニル基、4 - フェナンスリジニル基、6 - フェナンスリジニル基、7 - フェナンスリジニル基、8 - フェナンスリジニル基、9 - フェナンスリジニル基、10 - フェナンスリジニル基、1 - アクリジニル基、2 - アクリジニル基、3 - アクリジニル基、4 - アクリジニル基、9 - アクリジニル基、1, 7 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1 - フェナジニル基、2 - フェナジニル基、1 - フェノチアジニル基、2 - フェノチアジニル基、3 - フェノチアジニル基、4 - フェノチアジニル基、1 - フェノキサジニル基、2 - フェノキサジニル基、3 - フェノキサジニル基、4 - フェノキサジニル基、2 - オキサゾリル基、4 - オキサゾリル基、5 - オキサゾリル基、2 - オキサジアゾリル基、5 - オキサジアゾリル基、3 - フラザニル基、2 - チエニル基、3 - チエニル基、2 - メチルピロール - 1 - イル基、2 - メチルピロール - 3 - イル基、2 - メチルピロール - 4 - イル基、2 - メチルピロール - 5 - イル基、3 - メチルピロール - 1 - イル基、3 - メチルピロール - 2 - イル基、3 - メチルピロール - 4 - イル基、3 - メチルピロール - 5 - イル基、2 - t - ブチルピロール - 4 - イル基、3 - (2 - フェニルプロピル)ピロール - 1 - イル基、2 - メチル - 1 - インドリル基、4 - メチル - 1 - インドリル基、2 - メチル - 3 - インドリル基、4 - メチル - 3 - インドリル基、2 - t - ブチル 1 - インドリル基、4 - t - ブチル 1 - インドリル基、2 - t - ブチル 3 - インドリル基、4 - t - ブチル 3 - インドリル基等が挙げられる。

# 【0118】

置換又は無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基は、-SY”と表され、Y”の例としてはフェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - タ

10

20

30

40

50

ーフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニルイル基、4" - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基等が挙げられる。

# 【0119】

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリールチオ基は、-SZ"と表され、Z"の例としては2 - ピロリル基、3 - ピロリル基、ピラジニル基、2 - ピリジニル基、3 - ピリジニル基、4 - ピリジニル基、2 - インドリル基、3 - インドリル基、4 - インドリル基、5 - インドリル基、6 - インドリル基、7 - インドリル基、1 - イソインドリル基、3 - イソインドリル基、4 - イソインドリル基、5 - イソインドリル基、6 - イソインドリル基、7 - イソインドリル基、2 - フリル基、3 - フリル基、2 - ベンゾフラニル基、3 - ベンゾフラニル基、4 - ベンゾフラニル基、5 - ベンゾフラニル基、6 - ベンゾフラニル基、7 - ベンゾフラニル基、1 - イソベンゾフラニル基、3 - イソベンゾフラニル基、4 - イソベンゾフラニル基、5 - イソベンゾフラニル基、6 - イソベンゾフラニル基、7 - イソベンゾフラニル基、2 - キノリル基、3 - キノリル基、4 - キノリル基、5 - キノリル基、6 - キノリル基、7 - キノリル基、8 - キノリル基、1 - イソキノリル基、3 - イソキノリル基、4 - イソキノリル基、5 - イソキノリル基、6 - イソキノリル基、7 - イソキノリル基、8 - イソキノリル基、2 - キノキサリニル基、5 - キノキサリニル基、6 - キノキサリニル基、1 - カルバゾリル基、2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、1 - フェナンスリジニル基、2 - フェナンスリジニル基、3 - フェナンスリジニル基、4 - フェナンスリジニル基、6 - フェナンスリジニル基、7 - フェナンスリジニル基、8 - フェナンスリジニル基、9 - フェナンスリジニル基、10 - フェナンスリジニル基、1 - アクリジニル基、2 - アクリジニル基、3 - アクリジニル基、4 - アクリジニル基、9 - アクリジニル基、1, 7 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 9 -

10

20

30

40

50

イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1 - フェナジニル基、2 - フェナジニル基、1 - フェノチアジニル基、2 - フェノチアジニル基、3 - フェノチアジニル基、4 - フェノチアジニル基、1 - フェノキサジニル基、2 - フェノキサジニル基、3 - フェノキサジニル基、4 - フェノキサジニル基、2 - オキサゾリル基、4 - オキサゾリル基、5 - オキサゾリル基、2 - オキサジアゾリル基、5 - オキサジアゾリル基、3 - フラザニル基、2 - チエニル基、3 - チエニル基、2 - メチルピロール - 1 - イル基、2 - メチルピロール - 3 - イル基、2 - メチルピロール - 4 - イル基、2 - メチルピロール - 5 - イル基、3 - メチルピロール - 1 - イル基、3 - メチルピロール - 2 - イル基、3 - メチルピロール - 4 - イル基、3 - メチルピロール - 5 - イル基、2 - t - ブチルピロール - 4 - イル基、3 - (2 - フェニルプロピル)ピロール - 1 - イル基、2 - メチル - 1 - イン  
 ドリル基、4 - メチル - 1 - インドリル基、2 - メチル - 3 - インドリル基、4 - メチル - 3 - インドリル基、2 - t - ブチル 1 - インドリル基、4 - t - ブチル 1 - インドリル基、2 - t - ブチル 3 - インドリル基、4 - t - ブチル 3 - インドリル基等が挙げられる。

10

# 【0120】

置換又は無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルコキシカルボニル基は - COOZ と表され、Z の例としてはメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、s - ブチル基、イソブチル基、t - ブチル基、n - ペンチル基、n - ヘキシル基、n - ヘプチル基、n - オクチル基、ヒドロキシメチル基、1 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシイソブチル基、1, 2 - ジヒドロキシエチル基、1, 3 - ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3 - ジヒドロキシ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1 - クロロエチル基、2 - クロロエチル基、2 - クロロイソブチル基、1, 2 - ジクロロエチル基、1, 3 - ジクロロイソプロピル基、2, 3 - ジクロロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリクロロプロピル基、プロモメチル基、1 - プロモエチル基、2 - プロモエチル基、2 - プロモイソブチル基、1, 2 - ジプロモエチル基、1, 3 - ジプロモイソプロピル基、2, 3 - ジプロモ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリプロモプロピル基、ヨードメチル基、1 - ヨードエチル基、2 - ヨードエチル基、2 - ヨードイソブチル基、1, 2 - ジヨードエチル基、1, 3 - ジヨードイソプロピル基、2, 3 - ジヨード - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1 - アミノエチル基、2 - アミノエチル基、2 - アミノイソブチル基、1, 2 - ジア  
 ミノエチル基、1, 3 - ジアミノイソプロピル基、2, 3 - ジアミノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基、2 - シアノイソブチル基、1, 2 - ジシアノエチル基、1, 3 - ジシアノイソプロピル基、2, 3 - ジシアノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1 - ニトロエチル基、2 - ニトロエチル基、2 - ニトロイソブチル基、1, 2 - ジニトロエチル基、1, 3 - ジニトロイソプロピル基、2, 3 - ジニトロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリニトロプロピル基等が挙げられる。

20

30

# 【0121】

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基または置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基で置換されたアミノ基は - NPQ と表わされ、P、Q の例としては、フェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニルイル基、4

40

50

” - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基、2 - ピロリル基、3 - ピロリル基、ピ  
 ラジニル基、2 - ピリジニル基、3 - ピリジニル基、4 - ピリジニル基、2 - インドリル  
 基、3 - インドリル基、4 - インドリル基、5 - インドリル基、6 - インドリル基、7 -  
 インドリル基、1 - イソインドリル基、3 - イソインドリル基、4 - イソインドリル基、  
 5 - イソインドリル基、6 - イソインドリル基、7 - イソインドリル基、2 - フリル基、  
 3 - フリル基、2 - ベンゾフラニル基、3 - ベンゾフラニル基、4 - ベンゾフラニル基、  
 5 - ベンゾフラニル基、6 - ベンゾフラニル基、7 - ベンゾフラニル基、1 - イソベンゾ  
 フラニル基、3 - イソベンゾフラニル基、4 - イソベンゾフラニル基、5 - イソベンゾフ  
 ラニル基、6 - イソベンゾフラニル基、7 - イソベンゾフラニル基、2 - キノリル基、3  
 - キノリル基、4 - キノリル基、5 - キノリル基、6 - キノリル基、7 - キノリル基、8  
 - キノリル基、1 - イソキノリル基、3 - イソキノリル基、4 - イソキノリル基、5 - イ  
 ソキノリル基、6 - イソキノリル基、7 - イソキノリル基、8 - イソキノリル基、2 - キ  
 ノキサリニル基、5 - キノキサリニル基、6 - キノキサリニル基、1 - カルバゾリル基、  
 2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、1 - フェナンスリジニ  
 ル基、2 - フェナンスリジニル基、3 - フェナンスリジニル基、4 - フェナンスリジニル  
 基、6 - フェナンスリジニル基、7 - フェナンスリジニル基、8 - フェナンスリジニル基  
 、9 - フェナンスリジニル基、10 - フェナンスリジニル基、1 - アクリジニル基、2 -  
 アクリジニル基、3 - アクリジニル基、4 - アクリジニル基、9 - アクリジニル基、1 ,  
 7 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1 , 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1 , 7 -  
 フェナンスロリン - 4 - イル基、1 , 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1 , 7 - フェ  
 ナンスロリン - 6 - イル基、1 , 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1 , 7 - フェナ  
 スロリン - 9 - イル基、1 , 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1 , 8 - フェナンス  
 ロリン - 2 - イル基、1 , 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1 , 8 - フェナンスロリ  
 ン - 4 - イル基、1 , 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1 , 8 - フェナンスロリン -  
 6 - イル基、1 , 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1 , 8 - フェナンスロリン - 9 -  
 イル基、1 , 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1 , 9 - フェナンスロリン - 2 - イ  
 ル基、1 , 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1 , 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基  
 、1 , 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1 , 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1  
 , 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1 , 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1 , 9  
 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1 , 10 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1 , 1  
 0 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1 , 10 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1 , 1  
 0 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2 , 9 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2 , 9 -  
 フェナンスロリン - 3 - イル基、2 , 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2 , 9 - フェ  
 ナンスロリン - 5 - イル基、2 , 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2 , 9 - フェナ  
 スロリン - 7 - イル基、2 , 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2 , 9 - フェナンスロ  
 リン - 10 - イル基、2 , 8 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2 , 8 - フェナンスロリ  
 ン - 3 - イル基、2 , 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2 , 8 - フェナンスロリン -  
 5 - イル基、2 , 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2 , 8 - フェナンスロリン - 7 -  
 イル基、2 , 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2 , 8 - フェナンスロリン - 10 - イ  
 ル基、2 , 7 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2 , 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基  
 、2 , 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2 , 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2  
 , 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2 , 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2 , 7  
 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2 , 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1 - フェ  
 ナジニル基、2 - フェナジニル基、1 - フェノチアジニル基、2 - フェノチアジニル基、  
 3 - フェノチアジニル基、4 - フェノチアジニル基、1 - フェノキサジニル基、2 - フェ  
 ノキサジニル基、3 - フェノキサジニル基、4 - フェノキサジニル基、2 - オキサゾリル  
 基、4 - オキサゾリル基、5 - オキサゾリル基、2 - オキサジアゾリル基、5 - オキサジ  
 アゾリル基、3 - フラザニル基、2 - チエニル基、3 - チエニル基、2 - メチルピロール  
 - 1 - イル基、2 - メチルピロール - 3 - イル基、2 - メチルピロール - 4 - イル基、2  
 - メチルピロール - 5 - イル基、3 - メチルピロール - 1 - イル基、3 - メチルピロール

10

20

30

40

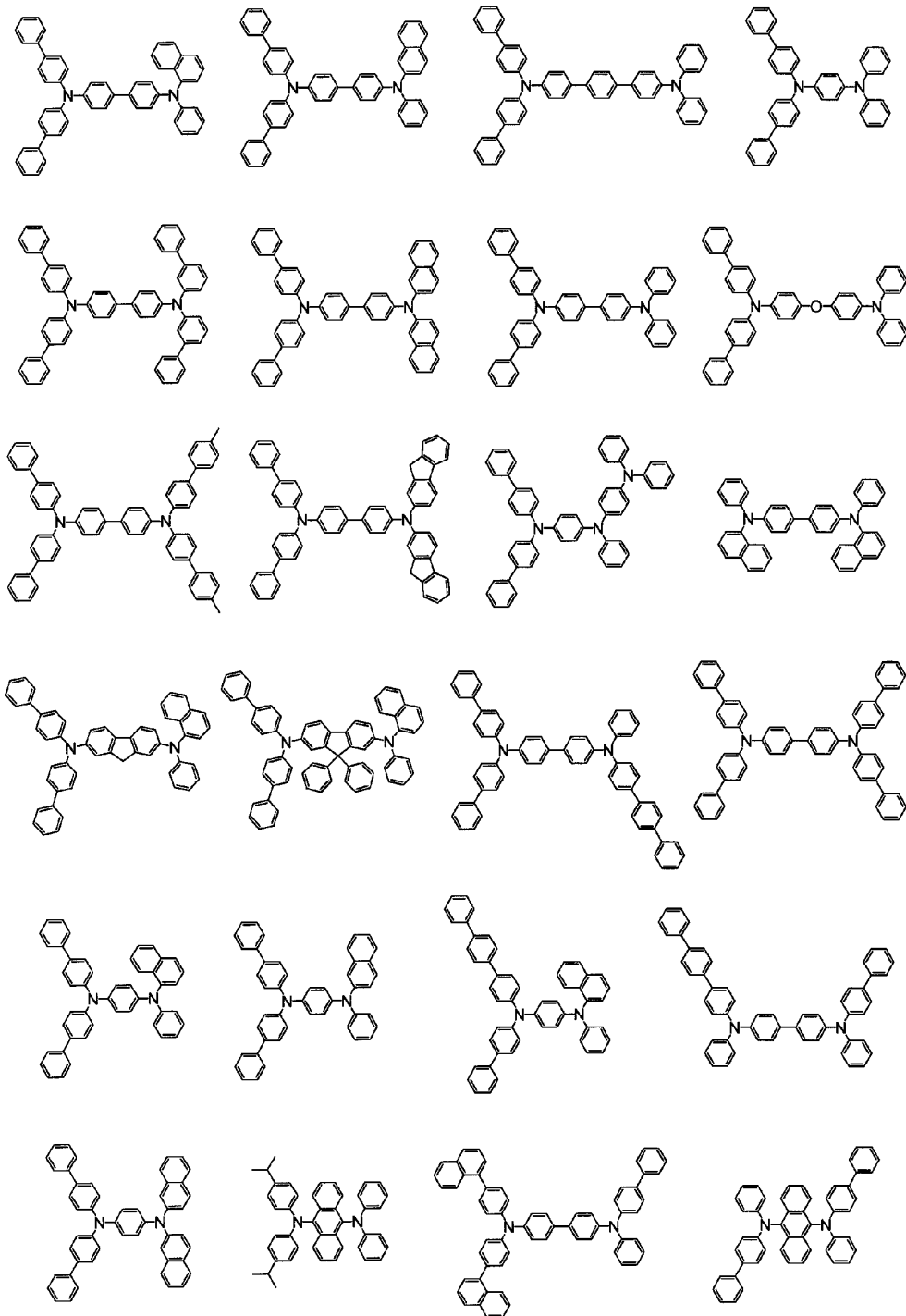
50

- 2 - イル基、3 - メチルピロール - 4 - イル基、3 - メチルピロール - 5 - イル基、2 - t - ブチルピロール - 4 - イル基、3 - (2 - フェニルプロピル)ピロール - 1 - イル基、2 - メチル - 1 - インドリル基、4 - メチル - 1 - インドリル基、2 - メチル - 3 - インドリル基、4 - メチル - 3 - インドリル基、2 - t - ブチル 1 - インドリル基、4 - t - ブチル 1 - インドリル基、2 - t - ブチル 3 - インドリル基、4 - t - ブチル 3 - インドリル基等が挙げられる。

【0122】

一般式 (I) の化合物の具体例を以下に記すが、これらに限定されるものではない。

【化69】



【0123】

また、下記一般式 (II) の芳香族アミンも正孔注入層または正孔輸送層の形成に好適に用いられる。

10

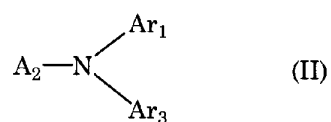
20

30

40

50

## 【化 7 0】

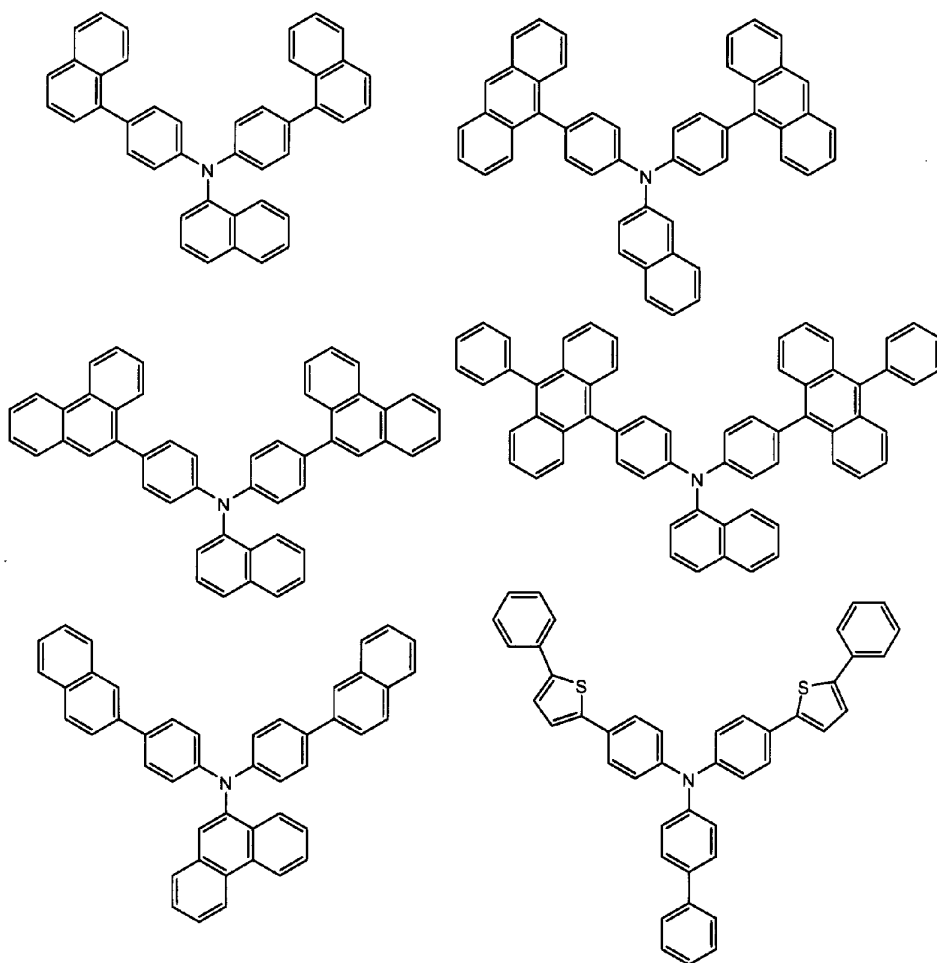


## 【 0 1 2 4 】

一般式 ( I I ) において、 $\text{Ar}_1 \sim \text{Ar}_3$  の定義は前記一般式 ( I ) の  $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^4$  の定義と同様である。以下に一般式 ( I I ) の化合物の具体例を記すがこれらに限定されるものではない。

10

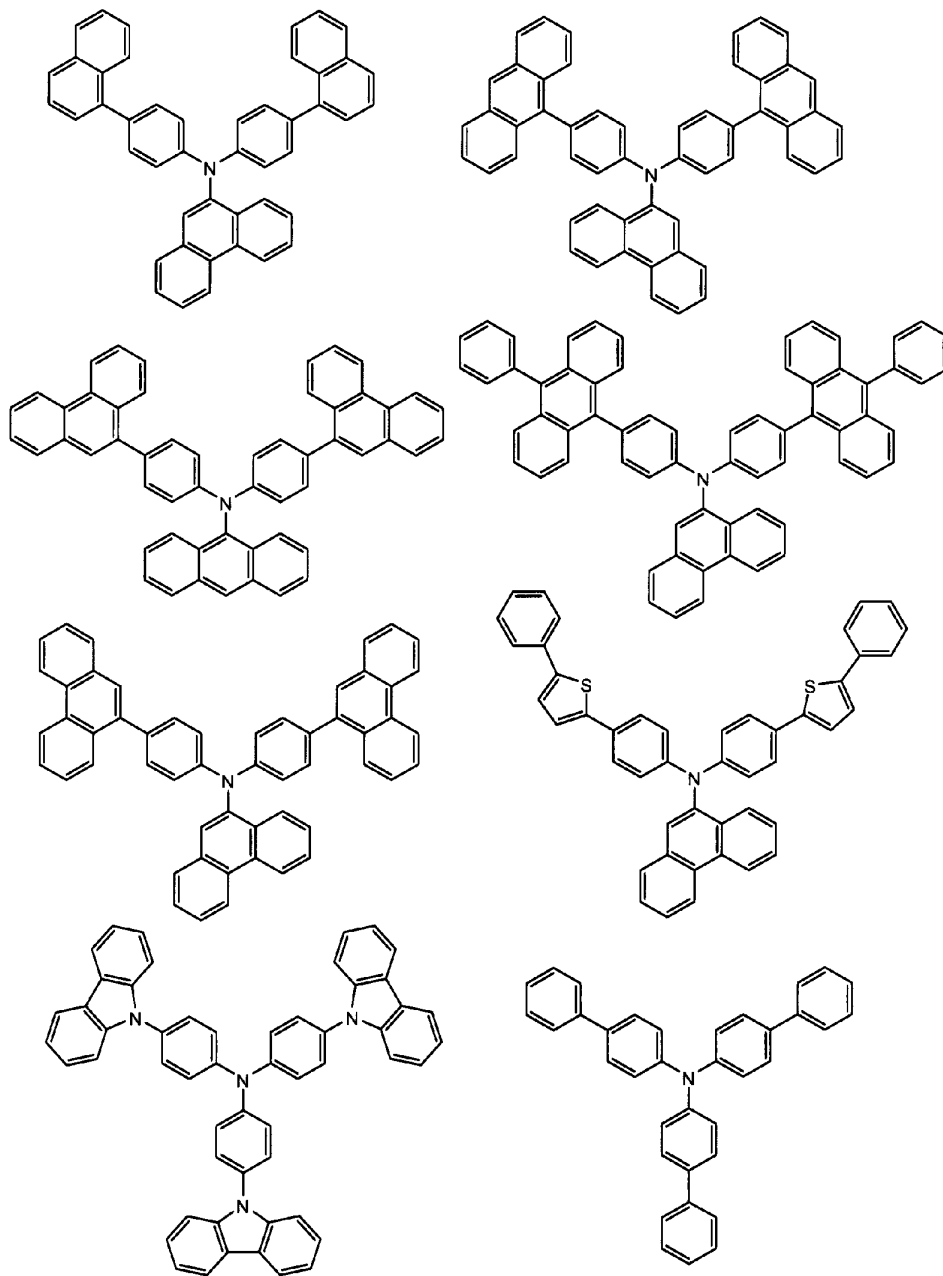
## 【化 7 1】



20

30

## 【化 7 2】



10

20

30

## 【0125】

本発明において、有機EL素子の陽極は、正孔を正孔輸送層又は発光層に注入する役割を担うものであり、4.5 eV以上の仕事関数を有することが効果的である。本発明に用いられる陽極材料の具体例としては、酸化インジウム錫合金（ITO）、酸化錫（NE S A）、金、銀、白金、銅等が適用できる。また陰極としては、電子注入層又は発光層に電子を注入する目的で、仕事関数の小さい材料が好ましい。陰極材料は特に限定されないが、具体的にはインジウム、アルミニウム、マグネシウム、マグネシウム - インジウム合金、マグネシウム - アルミニウム合金、アルミニウム - リチウム合金、アルミニウム - スカンジウム - リチウム合金、マグネシウム - 銀合金等が使用できる。

40

## 【0126】

本発明の有機EL素子の各層の形成方法は特に限定されない。従来公知の真空蒸着法、スピンドーティング法等による形成方法を用いることができる。本発明の有機EL素子に用いる、前記式（1）で表される化合物を含有する有機薄膜層は、真空蒸着法、分子線蒸着法（MBE法）あるいは溶媒に解かした溶液のディッピング法、スピンドーティング法

50

、キャストリング法、バーコート法、ロールコート法等の塗布法による公知の方法で形成することができる。

本発明の有機EL素子の各有機層の膜厚は特に制限されないが、一般に膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、逆に厚すぎると高い印加電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常は数nmから1μmの範囲が好ましい。

#### 【実施例】

#### 【0127】

次に、合成例および実施例を用いて本発明をさらに詳細に説明する。ただし、本発明は以下の合成例、実施例に限定されない。

#### 【0128】

有機EL素子の評価方法は下記の通りである。

#### (1) 外部量子効率(%)

23、乾燥窒素ガス雰囲気下で、輝度1000cd/m<sup>2</sup>時の外部量子効率を輝度計(ミノルタ社製分光輝度放射計CS-1000)を用いて測定した。

#### (2) 半減寿命(時間)

初期輝度1000cd/m<sup>2</sup>で連続通電試験(直流)をおこない、初期輝度が半減するまでの時間を測定した。

#### (3) 電圧(V)

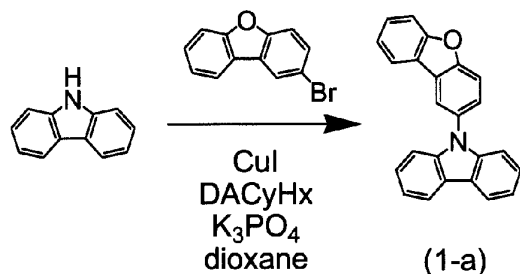
23、乾燥窒素ガス雰囲気下で、KEITHLY 236 SOURCE MEASURE UNITを用いて、電気配線された素子に電圧を印加して発光させ、素子以外の配線抵抗にかかる電圧を差し引いて素子印加電圧を測定した。

#### 【0129】

合成例1(化合物(1)の合成)

#### (1) 化合物(1-a)の合成

#### 【化73】



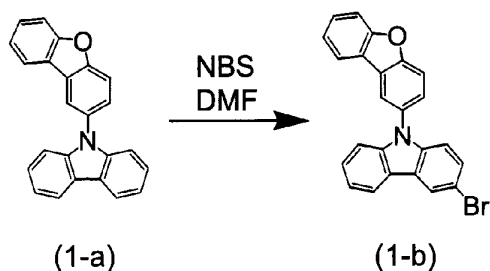
#### 【0130】

窒素雰囲気下、三口フラスコにカルバゾール40.1g(240mmol)、2-ブロモベンゾフラン49.4g(200mmol)、ヨウ化銅3.81g(20mmol)、リン酸カリウム84.91g(400mmol)、トランス-1,2-ジアミノシクロヘキサン7.21ml(60mmol)、1,4-ジオキサン100mlを入れ、24時間還流させた。反応終了後、室温まで冷却した後トルエン400mlで希釈し、吸引ろ過で無機塩等をろ別し、ろ液をシリカゲルのショートカラムを通し、濃縮した。酢酸エチル/メタノール混合溶媒で洗浄し白色の固体(化合物(1-a))を得た。収量54.0g、収率81%

#### 【0131】

#### (2) 化合物(1-b)の合成

## 【化 7 4】



## 【 0 1 3 2】

10

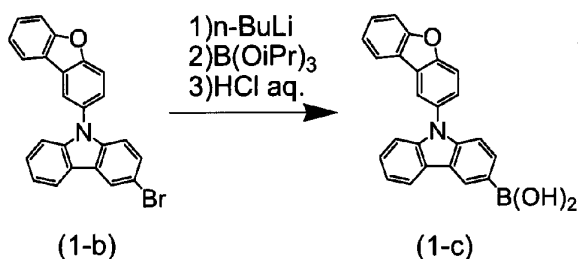
大気雰囲気下、ナスフラスコに化合物 (1-a) 26.7 g (80 mmol), N, N - ジメチルホルムアミド 160 ml を入れ試料を溶解させ、氷水で 0℃ に冷却し、そこへ N, N - ジメチルホルムアミド 80 ml に溶解させた N - プロモスクシンイミド 14.2 g (80 mmol) を滴下により 10 分かけてゆっくり加えた。0℃ で 3 時間撹拌した後、室温で 1 日放置した。反応終了後、トルエン 200 ml を加え、分液ロートを用いて 2 回水洗した。これを無水硫酸マグネシウムで乾燥後、ろ過、濃縮した。これをヘキサンから再結晶し、白色の固体 (化合物 (1-b)) を得た。収量 25.6 g、収率 78 %

## 【 0 1 3 3】

(3) 化合物 (1-c) の合成

## 【化 7 5】

20



## 【 0 1 3 4】

30

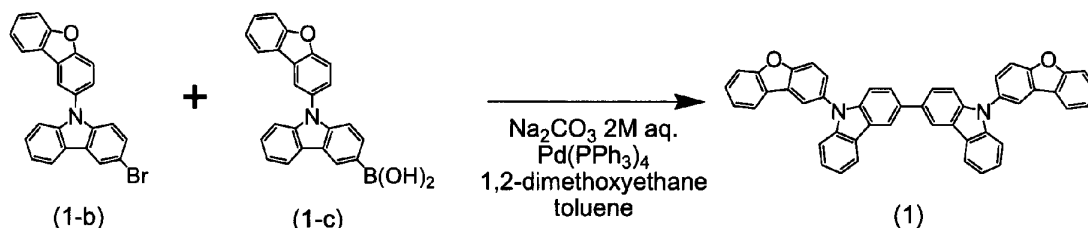
窒素雰囲気下、三口フラスコに化合物 (1-b) 16.5 g (40 mmol), 脱水テトラヒドロフラン 200 ml を入れ試料を溶解させ、-78℃ に冷却した。その混合溶液に n - ブチルリチウム 30.6 ml (1.57 M in hexane, 48 mmol) を 10 分かけて滴下した。-78℃ で 20 分撹拌した後、トリイソプロピルボレート 18.3 ml (80 mmol) を一度に加え、その後室温で 3 時間撹拌した。反応終了後、溶液を半分程度に濃縮し、塩酸水溶液 (1 N) 20 ml を加え、室温で 2 時間撹拌した。分液ロートを用いてジクロロメタンで抽出し、無水硫酸マグネシウムで乾燥、ろ過、濃縮した。これをシリカゲルクロマトグラフィー (展開溶媒 ジクロロメタン : 酢酸エチル = 9 : 1) で精製した後、これにヘキサンを加えて試料を析出させ、分散洗浄を行い、濾別して白色の固体 (化合物 (1-c)) を得た。収量 10.3 g、収率 68 %

## 【 0 1 3 5】

40

(4) 化合物 (1) の合成

## 【化 7 6】



50

## 【 0 1 3 6 】

窒素雰囲気下、三口フラスコに化合物 ( 1 - b ) 9 . 1 1 g ( 2 2 . 1 m m o l ) , 化合物 ( 1 - c ) 1 0 . 0 g ( 2 6 . 5 m m o l ) , 炭酸ナトリウム 2 M 水溶液 2 2 . 1 m l , 1 , 2 - ジメトキシエタン 4 0 m l , トルエン 4 0 m l を入れ、この混合溶液にテトラキス ( トリフェニルホスフィン ) パラジウム 0 . 5 1 g ( 0 . 4 4 2 m m o l ) を加え、8 時間還流させた。

反応終了後、室温まで冷却した後、メタノールを加えて析出した試料を回収し、真空乾燥させた。試料をトルエン 1 L に加熱して溶解させ、室温まで冷却した後、シリカゲルのショートカラムを通し、濃縮した。これを酢酸エチルで分散洗浄して白色の固体 ( 化合物 ( 1 ) ) を得た。収量 1 2 . 0 g 、収率 8 1 %

10

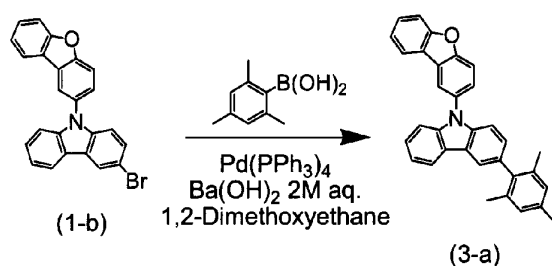
## 【 0 1 3 7 】

合成例 2 ( 化合物 ( 3 ) の合成 )

## 【 0 1 3 8 】

( 1 ) 化合物 ( 3 - a ) の合成

## 【 化 7 7 】



20

## 【 0 1 3 9 】

窒素雰囲気下、三口フラスコに化合物 ( 1 - b ) 4 1 . 2 g ( 1 0 0 m m o l ) , メシチルボロン酸 2 3 . 0 g ( 1 4 0 m m o l ) , 水酸化バリウム 2 M 水溶液 2 0 0 m l , 1 , 2 - ジメトキシエタン 5 0 m l を入れ、この混合溶液にテトラキス ( トリフェニルホスフィン ) パラジウム 3 . 4 7 g ( 3 m m o l ) を加え、8 時間還流させた。

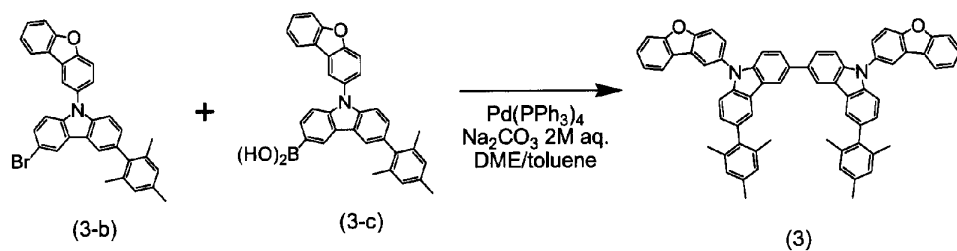
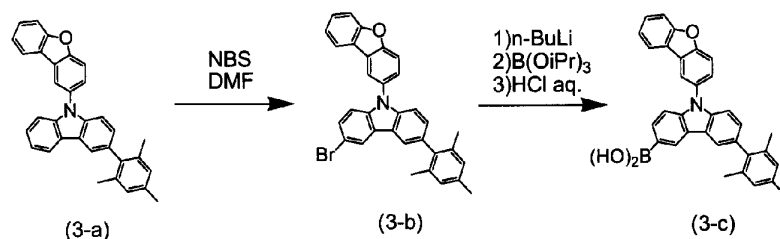
反応終了後、室温まで冷却した後、分液ロートを用いてトルエンで抽出した。無水硫酸マグネシウムで乾燥、ろ過、濃縮した後、これをシリカゲルカラムクロマトグラフィー ( トルエン : ヘキサン = 3 : 7 ) にて精製した。これをヘキサンから再結晶して白色の固体 ( 化合物 ( 3 - a ) ) を得た。収量 1 5 . 3 g 、収率 3 4 %

30

## 【 0 1 4 0 】

( 2 ) 化合物 ( 3 ) の合成

## 【化 7 8】



10

## 【 0 1 4 1】

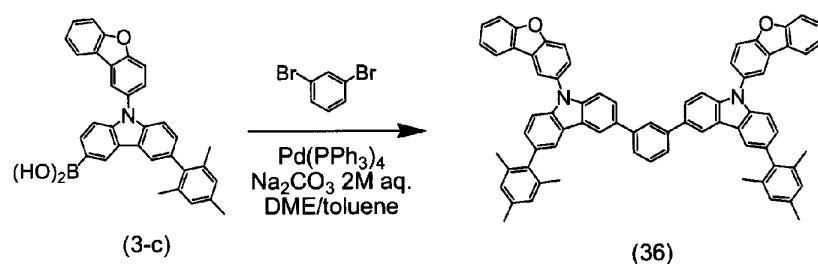
原料として化合物(1-a)を化合物(3-a)に変更する以外は化合物(1-b)~(1)と同様の方法によって化合物(3)を合成した。

20

## 【 0 1 4 2】

合成例 3 (化合物(36)の合成)

## 【化 7 9】



30

## 【 0 1 4 3】

窒素雰囲気下、三口フラスコに化合物(3-c) 7.13 g (14.4 mmol), 1,3-ジブロモベンゼン 1.42 g (6 mmol), 炭酸ナトリウム 2M 水溶液 12 ml, 1,2-ジメトキシエタン 12 ml, トルエン 12 ml を入れ、この混合溶液にテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 0.35 g (0.3 mmol) を加え、8 時間還流させた。

反応終了後、室温まで冷却した後、試料溶液を分液ロートに移し、トルエンにて数回抽出した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、ろ過、濃縮し、これをシリカゲルクロマトグラフィーで精製して白色の固体(化合物(36))を得た。収量 4.3 g、収率 73%

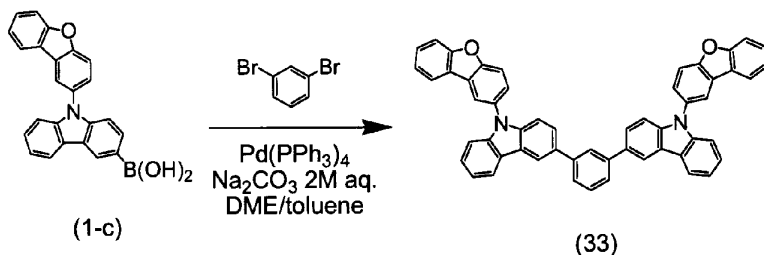
40

これらの化合物は FD/MS を測定し、分子量の理論値と実測値との一致によって同定した。

## 【 0 1 4 4】

比較合成例 (化合物(33)の合成)

## 【化 8 0】



## 【 0 1 4 5】

10

窒素雰囲気下、三口フラスコに化合物(1-c) 5.43 g (14.4 mmol), 1,3-ジブロモベンゼン 1.42 g (6 mmol), 炭酸ナトリウム 2 M 水溶液 12 ml, 1,2-ジメトキシエタン 12 ml, トルエン 12 ml を入れ、この混合溶液にテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 0.35 g (0.3 mmol) を加え、8 時間還流させた。

反応終了後、室温まで冷却した後、メタノールを加えて析出した試料を回収し、真空乾燥させた。試料をトルエン 1 L に加熱して溶解させ、室温まで冷却した後、シリカゲルのショートカラムを通し、濃縮した。これを酢酸エチル/ヘキサンの混合溶媒で分散洗浄して白色の固体(化合物(33))を得た。収量 3.78 g、収率 85%

## 【 0 1 4 6】

20

## 実施例 1

25 mm × 75 mm × 1.1 mm の ITO 透明電極付きガラス基板(ジオマテック社製)を、イソプロピルアルコール中で 5 分間、超音波洗浄した後、UV オゾン洗浄を 30 分間行なった。洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に、透明電極を覆うようにして化合物(HT)を抵抗加熱蒸着した(厚さ 60 nm)。成膜レートは 1 / s とした。この HT 膜は正孔注入・輸送層として機能する。

次に、HT 膜上に、化合物(1)(ホスト化合物)を抵抗加熱蒸着して厚さ 30 nm の化合物(1)膜を成膜した。同時に燐光ドーパントとして、化合物(BD)を、化合物(1)に対し質量比で 10% になるように蒸着した。成膜レートはそれぞれ 1 / s、0.11 / s とした。この膜は、燐光発光層として機能する。

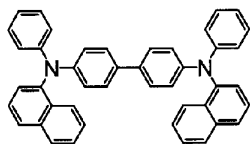
30

次に、この燐光発光層上に、化合物(HB)を抵抗加熱蒸着して、厚さ 10 nm の HB 膜を成膜した。成膜レートは 1 / s であった。この HB 膜は正孔ブロック層として機能する。

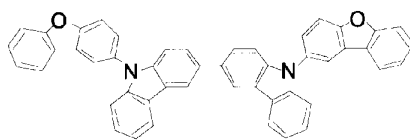
この膜上に成膜レート 1 / s にてトリス(8-キノリノール)アルミニウム(Alq)錯体を蒸着した(膜厚 30 nm)。この膜は電子注入層として機能する。

その後、Alq 膜上に LiF を成膜レート 0.1 / s で蒸着した(膜厚 0.5 nm)。この LiF 膜上に金属 Al を成膜レート 1 / s にて蒸着し金属陰極(膜厚 100 nm)を形成し有機 EL 素子を得た。

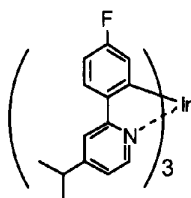
## 【化 8 1】



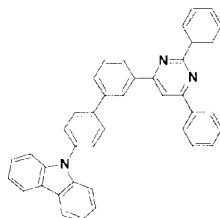
化合物 (HT)



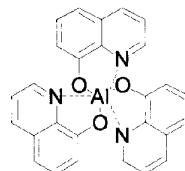
化合物 (1)



化合物 (BD)



化合物 (HB)



Alq

10

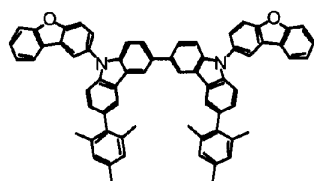
## 【 0 1 4 7】

実施例 2 及び 3

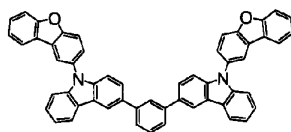
実施例 1 において化合物 (1) を用いる代わりに表 1 に記載のホスト材料を用いた以外は実施例 1 と同様にして有機 EL 素子を作製した。

20

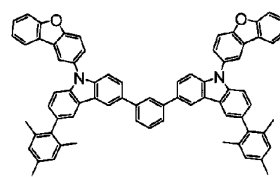
## 【化 8 2】



化合物 (3)



化合物 (33)



化合物 (36)

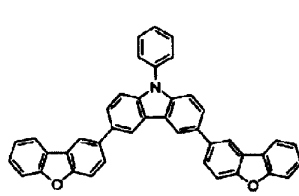
## 【 0 1 4 8】

比較例 1 ~ 6

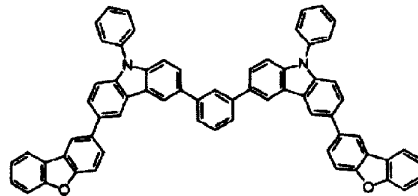
化合物 (1) の代わりに下記化合物 (H1) ~ (H6) 及び上記化合物 (33) を用いた以外は実施例 1 と同様にして有機 EL 素子を作製した。

30

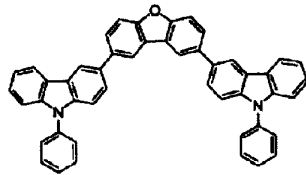
## 【化 8 3】



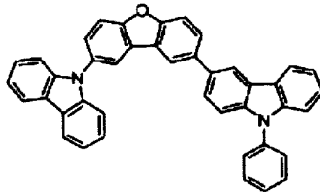
化合物 (H 1)



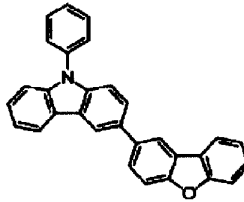
化合物 (H 2)



化合物 (H 4)



化合物 (H 5)



化合物 (H 6)

## 【 0 1 4 9 】

## 【表 1】

|       | ホスト  | 電圧<br>(V) | 外部量子効率<br>(%) | 半減寿命<br>(時間) |
|-------|------|-----------|---------------|--------------|
| 実施例 1 | (1)  | 7.4       | 6.3           | 1050         |
| 実施例 2 | (3)  | 7.6       | 11.1          | 1190         |
| 実施例 3 | (36) | 7.4       | 9.2           | 1010         |
| 比較例 1 | H1   | 8.8       | 7.0           | 700          |
| 比較例 2 | H2   | 8.8       | 7.1           | 650          |
| 比較例 3 | H4   | 9.3       | 6.4           | 450          |
| 比較例 4 | H5   | 9.5       | 6.9           | 480          |
| 比較例 5 | H6   | 9.3       | 6.9           | 250          |
| 比較例 6 | (33) | 8.3       | 7.2           | 1000         |

## 【 0 1 5 0 】

表 1 より、本発明の化合物 (1)、(3) および (36) が比較例 1 ~ 5 の化合物よりも高効率で長寿命であることがわかる。また、より低電圧での駆動が可能であることから、消費電力の低減された有機 EL 素子であることがわかる。

表 1 において、比較例 6 は低電圧化及び半減寿命の点で、他の実施例に及ばない。これは、カルバゾールの 6 位が共に水素原子であり、かつ 3 位で単結合を介して結合していないことに起因して、化学的安定性やキャリアバランス調整の点で他の実施例に及ばないためと思われる。

## 【 0 1 5 1 】

## 実施例 4

25 mm × 75 mm × 1.1 mm の ITO 透明電極付きガラス基板 (ジオマティック社

10

20

30

40

50

製)を、イソプロピルアルコール中で5分間、超音波洗浄した後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に、透明電極を覆うようにして化合物(1)を抵抗加熱蒸着した(厚さ60nm)。成膜レートは1 / sとした。この化合物(1)膜は正孔注入・輸送層として機能する。

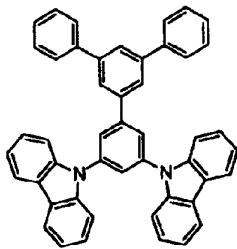
次に、化合物(1)膜上に、化合物(A-1)(ホスト化合物)を抵抗加熱蒸着して厚さ30nmの化合物(A-1)膜を成膜した。同時に燐光ドーパントとして、化合物(BD)を、化合物(A-1)に対し質量比で10%になるように蒸着した。成膜レートはそれぞれ1 / s、0.11 / sとした。この膜は、燐光発光層として機能する。

次に、この燐光発光層上に、化合物(HB)を抵抗加熱蒸着して、厚さ10nmのHB膜を成膜した。成膜レートは1 / sであった。このHB膜は正孔ブロック層として機能する。

この膜上に成膜レート1 / sにてトリス(8-キノリノール)アルミニウム(Alq)錯体を蒸着した(膜厚30nm)。この膜は電子注入層として機能する。

その後、Alq膜上にLiFを成膜レート0.1 / sで蒸着した(膜厚0.5nm)。このLiF膜上に金属Alを成膜レート1 / sにて蒸着し金属陰極(膜厚100nm)を形成し有機EL素子を得た。

【化84】



化合物(A-1)

【0152】

実施例5

実施例4において化合物(1)を用いる代わりに化合物(3)を正孔注入・輸送層に用いた以外は実施例4と同様にして有機EL素子を作製した。

【0153】

比較例7

化合物(1)の代わりに化合物(HT)を用いた以外は実施例4と同様にして有機EL素子を作製した。

【0154】

【表2】

|      | 正孔注入・輸送層 | 電圧<br>(V) | 外部量子効率<br>(%) | 半減寿命<br>(時間) |
|------|----------|-----------|---------------|--------------|
| 実施例4 | (1)      | 8.3       | 10.4          | 1000         |
| 実施例5 | (3)      | 8.5       | 10.2          | 1030         |
| 比較例7 | HT       | 7.3       | 5.5           | 420          |

【0155】

表2より、本発明の化合物(1)および(3)が比較例の化合物よりも低電圧且つ高効率で長寿命であることがわかる。

【産業上の利用可能性】

【0156】

以上詳細に説明したように、本発明の有機ＥＬ素子用材料を利用すると、発光効率が高く、かつ寿命の長い有機ＥＬ素子が得られる。このため、本発明の有機ＥＬ素子は、各種電子機器のディスプレイ、光源等として極めて有用である。

---

フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I  
C 0 9 K 11/06 6 6 0

(56)参考文献 特開 2 0 1 0 - 0 2 1 3 3 6 ( J P , A )  
国際公開第 2 0 0 8 / 0 2 9 6 5 2 ( W O , A 1 )  
国際公開第 2 0 0 8 / 0 2 9 7 2 9 ( W O , A 1 )  
特開 2 0 1 0 - 0 4 0 8 3 0 ( J P , A )

(58)調査した分野(Int.Cl. , D B 名)  
H 0 1 L 5 1 / 5 0 - 5 1 / 5 6  
H 0 1 L 2 7 / 3 2  
H 0 5 B 3 3 / 0 0 - 3 3 / 2 8  
C A p l u s / R E G I S T R Y ( S T N )

|                |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |         |            |
|----------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|------------|
| 专利名称(译)        | 用于有机电致发光器件的材料和使用其的有机电致发光器件                                                                                                                                                                                                                                                                                             |         |            |
| 公开(公告)号        | <a href="#">JP5753873B2</a>                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 公开(公告)日 | 2015-07-22 |
| 申请号            | JP2013094610                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 申请日     | 2013-04-26 |
| [标]申请(专利权)人(译) | 出光兴产株式会社                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |         |            |
| 申请(专利权)人(译)    | 出光兴产株式会社                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |         |            |
| 当前申请(专利权)人(译)  | 出光兴产株式会社                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |         |            |
| [标]发明人         | 沼田真樹<br>長島英明                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |         |            |
| 发明人            | 沼田 真樹<br>長島 英明                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |         |            |
| IPC分类号         | H01L51/50 C07D405/14 C09K11/06                                                                                                                                                                                                                                                                                         |         |            |
| CPC分类号         | C07D405/14 C07D209/86 C07D403/10 C07D405/04 C09K11/025 C09K11/06 C09K2211/1007<br>C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/1059 C09K2211/1074 C09K2211/1092 C09K2211/185<br>H01L51/0062 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/0085 H01L51/5012 H01L51/5016<br>H01L51/5024 H01L51/5056 H01L51/5092 H05B33/14 H05B33/20 |         |            |
| FI分类号          | H05B33/14.B H05B33/22.B H05B33/22.D C07D405/14.CSP C09K11/06.690 C09K11/06.660                                                                                                                                                                                                                                         |         |            |
| F-TERM分类号      | 3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/CC04 3K107/CC12 3K107/CC14 3K107/CC21 3K107<br>/DD59 3K107/DD64 3K107/DD67 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/DD71 3K107/DD75 3K107/DD76<br>3K107/DD78 3K107/DD80 3K107/DD84 3K107/DD86 4C063/AA05 4C063/BB02 4C063/CC76 4C063<br>/DD08 4C063/EE10                                     |         |            |
| 审查员(译)         | 小西孝                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |         |            |
| 优先权            | 2010084476 2010-03-31 JP                                                                                                                                                                                                                                                                                               |         |            |
| 其他公开文献         | JP2013163682A                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |         |            |
| 外部链接           | <a href="#">Espacenet</a>                                                                                                                                                                                                                                                                                              |         |            |

# 摘要(译)

本发明提供具有特定结构的有机电致发光元件用材料，其中二苯并噻吩基或咔唑基直接或通过连接基团在其N-位（9-位）与咔唑基键合。还提供了一种有机电致发光器件，其包括一个或多个有机薄膜层，所述有机薄膜层包括在阴极和阳极之间的发光层，其中至少一个有机薄膜层包含用于本发明的有机电致发光器件的材料。

|              |                                     |           |                   |
|--------------|-------------------------------------|-----------|-------------------|
| (21) 出願番号    | 特願2013-94610 (P2013-94610)          | (73) 特許権者 | 000183646         |
| (22) 出願日     | 平成25年4月26日 (2013. 4. 26)            |           | 出光興産株式会社          |
| (62) 分割の表示   | 特願2012-508130 (P2012-508130)<br>の分割 |           | 東京都千代田区丸の内3丁目1番1号 |
| 原出願日         | 平成23年2月14日 (2011. 2. 14)            | (74) 代理人  | 100078732         |
| (65) 公開番号    | 特開2013-163682 (P2013-163682A)       |           | 弁理士 大谷 保          |
| (43) 公開日     | 平成25年8月22日 (2013. 8. 22)            | (74) 代理人  | 100081765         |
| 審査請求日        | 平成25年4月26日 (2013. 4. 26)            |           | 弁理士 東平 正暹         |
| (31) 優先権主張番号 | 特願2010-84476 (P2010-84476)          | (72) 発明者  | 沼田 真樹             |
| (32) 優先日     | 平成22年3月31日 (2010. 3. 31)            |           | 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地   |
| (33) 優先権主張国  | 日本国 (JP)                            | (72) 発明者  | 長島 英明             |
|              |                                     |           | 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地   |
|              |                                     | 審査官       | 小西 隆              |