

(19) 日本国特許庁(JP)

再公表特許(A1)

(11) 国際公開番号  
WO2009/008100

発行日 平成22年9月2日 (2010.9.2)

(43) 国際公開日 平成21年1月15日 (2009.1.15)

|                                     |           |              |             |           |
|-------------------------------------|-----------|--------------|-------------|-----------|
| (51) Int. Cl.                       |           | F I          | テーマコード (参考) |           |
| HO 1 L 51/50                        | (2006.01) | HO 5 B 33/14 | B           | 3 K 1 0 7 |
| CO 9 K 11/06                        | (2006.01) | HO 5 B 33/22 | B           | 4 C O 6 3 |
| CO 7 D 405/14                       | (2006.01) | HO 5 B 33/22 | D           |           |
|                                     |           | CO 9 K 11/06 | 6 6 0       |           |
|                                     |           | CO 9 K 11/06 | 6 9 0       |           |
| 審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 62 頁) 最終頁に続く |           |              |             |           |

|              |                              |          |                   |
|--------------|------------------------------|----------|-------------------|
| 出願番号         | 特願2009-522494 (P2009-522494) | (71) 出願人 | 000183646         |
| (21) 国際出願番号  | PCT/JP2007/072586            |          | 出光興産株式会社          |
| (22) 国際出願日   | 平成19年11月21日 (2007.11.21)     |          | 東京都千代田区丸の内3丁目1番1号 |
| (31) 優先権主張番号 | 特願2007-181142 (P2007-181142) | (74) 代理人 | 100078732         |
| (32) 優先日     | 平成19年7月10日 (2007.7.10)       |          | 弁理士 大谷 保          |
| (33) 優先権主張国  | 日本国 (JP)                     | (74) 代理人 | 100081765         |
|              |                              |          | 弁理士 東平 正道         |
|              |                              | (74) 代理人 | 100089185         |
|              |                              |          | 弁理士 片岡 誠          |
|              |                              | (74) 代理人 | 100119666         |
|              |                              |          | 弁理士 平澤 賢一         |
|              |                              | (72) 発明者 | 岩隈 俊裕             |
|              |                              |          | 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地   |
|              |                              | (72) 発明者 | 遠藤 潤              |
|              |                              |          | 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地   |
| 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) 【要約】

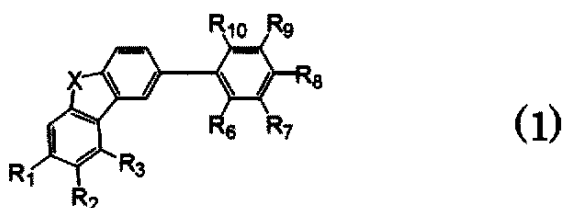
本発明の少なくとも1種のりん光発光性の金属錯体とともに用いる有機エレクトロルミネッセンス素子材料は特定のヘテロ環構造を含有する化合物からなる。該有機エレクトロルミネッセンス素子材料はホスト材料または正孔輸送材料として利用される。陰極と陽極間に一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されており、該有機薄膜層の少なくとも一層が該有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子は、発光効率が高く、画素欠陥が無く、耐熱性に優れ、長寿命である。

## 【特許請求の範囲】

## 【請求項 1】

下記一般式（1）で表される化合物からなる、少なくとも1種のりん光発光性の金属錯体とともに用いる有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

## 【化1】



10

〔一般式（1）において、 $R_1 \sim R_3$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～15のシクロアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～20の複素環基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数10～18の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数6～40のアリールアミノ基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～60のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～40のアリールカルボニル基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールチオ基、置換基を有してもよい炭素数1～40のハロゲン化アルキル基、または、シアノ基である、但し、 $R_1 \sim R_3$ の少なくとも1つは置換基を有してもよい9-カルバゾリル基、または、置換基を有してもよい窒素原子数2～5のアザカルバゾリル基であり、

20

$R_6$ と $R_{10}$ は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基であり、

$R_7 \sim R_9$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～15のシクロアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～20の複素環基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数10～18の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数6～40のアリールアミノ基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～60のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～40のアリールカルボニル基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールチオ基、置換基を有してもよい炭素数1～40のハロゲン化アルキル基、または、シアノ基である、但し、 $R_8$ と $R_9$ または $R_8$ と $R_7$ が互いに結合して環構造を形成しない場合、 $R_7 \sim R_9$ の少なくとも1つは置換基を有してもよい9-カルバゾリル基、置換基を有してもよい窒素原子数2～5のアザカルバゾリル基、置換基を有してもよいフェニル基、置換基を有してもよいジベンゾフラニル基、または、置換基を有してもよいジベンゾチオフェニル基であり、

30

40

$R_8$ と $R_9$ または $R_8$ と $R_7$ は互いに結合して置換基を有してもよい環構造を形成してもよく、該環構造を形成しない $R_7$ または $R_9$ は水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～15のシクロアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～20の複素環基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数10～18の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基、置換基を有

50

してもよい炭素数6～40のアリールアミノ基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～60のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～40のアリールカルボニル基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールチオ基、置換基を有してもよい炭素数1～40のハロゲン化アルキル基、または、シアノ基である、但し、 $R_8$ と $R_9$ または $R_8$ と $R_7$ とそれらが結合しているベンゼン環がカルバゾリル基を形成する場合は除く、

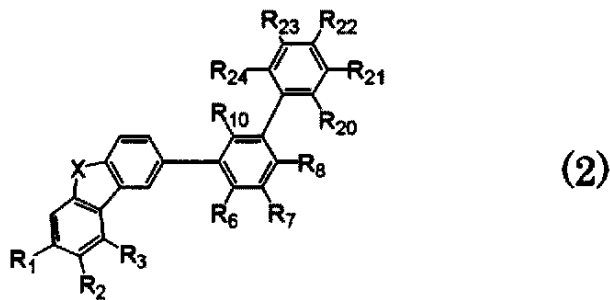
$R_1 \sim R_3$ および $R_6 \sim R_{10}$ の各置換基は末端に重合性官能基を有することなく、

Xは、硫黄原子または酸素原子である】。

【請求項2】

前記一般式(1)が下記一般式(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。 10

【化2】



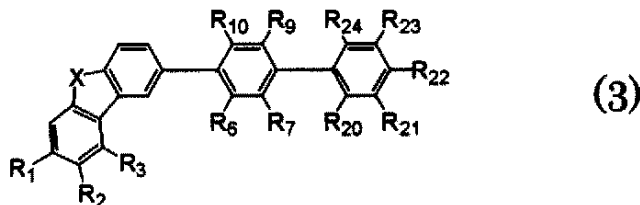
20

[一般式(2)において、 $R_1 \sim R_3$ 、 $R_6 \sim R_8$ 、 $R_{10}$ およびXは前記と同様であり、 $R_{20} \sim R_{24}$ は但し書きを除いて $R_1 \sim R_3$ の定義と同様である]。

【請求項3】

前記一般式(1)が下記一般式(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3】



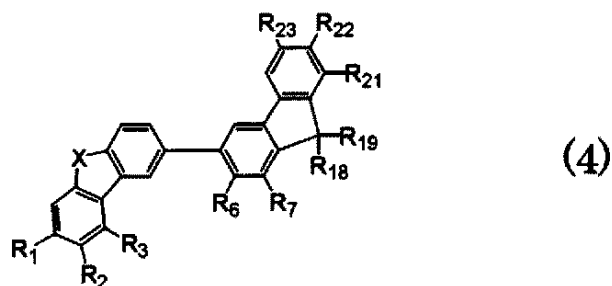
30

[一般式(3)において、 $R_1 \sim R_3$ 、 $R_6$ 、 $R_7$ 、 $R_9$ 、 $R_{10}$ 、およびXは前記と同様であり、 $R_{20} \sim R_{24}$ は但し書きを除いて $R_1 \sim R_3$ の定義と同様である]。

【請求項4】

前記一般式(1)が下記一般式(4)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。 40

## 【化 4】



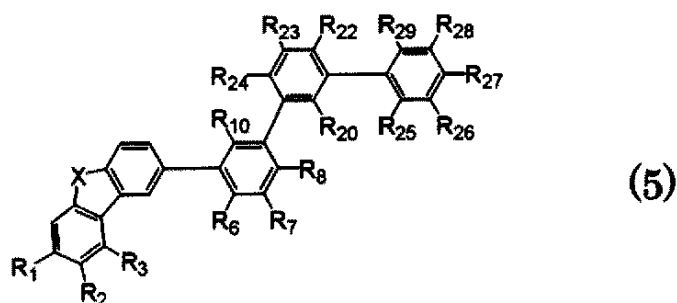
10

〔一般式（４）において、 $R_1 \sim R_3$ 、 $R_6$ 、 $R_7$ 、および $X$ は前記と同様であり、 $R_{18}$ 、 $R_{19}$ 、および $R_{21} \sim R_{23}$ は但し書きを除いて $R_1 \sim R_3$ の定義と同様である〕。

## 【請求項 5】

前記一般式（１）が下記一般式（５）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 5】



20

〔一般式（５）において、 $R_1 \sim R_3$ 、 $R_6$ 、 $R_7$ 、 $R_8$ 、 $R_{10}$ 、および $X$ は前記と同様であり、 $R_{20}$ 、 $R_{22} \sim R_{24}$ 、および $R_{25} \sim R_{29}$ は但し書きを除いて $R_1 \sim R_3$ の定義と同様である〕。

30

## 【請求項 6】

前記一般式（２）の置換基 $R_7$ 、 $R_8$ および $R_{20} \sim R_{24}$ の少なくとも１つ、前記一般式（３）の置換基 $R_7$ 、 $R_9$ および $R_{20} \sim R_{24}$ の少なくとも１つ、前記一般式（４）の置換基 $R_7$ および $R_{21} \sim R_{23}$ の少なくとも１つ、または、前記一般式（５）の置換基 $R_7$ 、 $R_8$ 、 $R_{20}$ 、および $R_{22} \sim R_{29}$ の少なくとも１つが、置換又は無置換の９－カルバゾリル基、置換又は無置換のジベンゾフラニル基、置換又は無置換の窒素原子数 2 ～ 5 のアザカルバゾリル基、および置換又は無置換のジベンゾチオフェニル基から選ばれた置換基である請求項 2 ～ 5 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

## 【請求項 7】

前記一般式（１）～（５）のいずれかで表される化合物の 3 重項エネルギーギャップが 2.2 ～ 3.2 eV である請求項 1 ～ 6 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

## 【請求項 8】

陰極と陽極間に一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されており、該有機薄膜層の少なくとも 1 層が少なくとも 1 種のりん光発光性の金属錯体とともに用いるホスト材料を含有する発光層であり、該有機薄膜層の少なくとも一層が請求項 1 ～ 7 のいずれか一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 9】

前記発光層が含有する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

50

る請求項 8 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 10】

前記発光層がホスト材料とりん光性の発光材料を含有し、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 8 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 11】

前記りん光性の発光材料がイリジウム (Ir)、オスmium (Os) 又は白金 (Pt) 金属を含有する化合物である請求項 10 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 12】

前記発光層の発光波長の最大ピーク波長が 500 nm 以下である青色系金属錯体を含有する請求項 10 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。 10

【請求項 13】

前記有機薄膜層の少なくとも 1 層が電子注入層であり、該電子注入層が、前記有機エレクトロルミネッセンス素子用材料とは異なる含窒素環誘導体を主成分として含有する請求項 8 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 14】

前記有機薄膜層の少なくとも 1 層が正孔輸送層であり、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 8 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 15】

20

陰極と有機薄膜層との界面領域に還元性ドーパントが添加されてなる請求項 8 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し、特に、発光効率が高く、画素欠陥が無く、耐熱性に優れ、長寿命である有機エレクトロルミネッセンス素子及びそれを実現する有機エレクトロルミネッセンス素子用材料に関するものである。

【背景技術】

30

【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が発光する原理を利用した自発光素子である。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、素子構造や形成方法の工夫がなされている。

【0003】

また、近年、有機 EL 素子の発光層に蛍光材料の他に、りん光材料を利用することも提案されている。このように有機 EL 素子の発光層において有機りん光材料の励起状態の一重項状態と三重項状態とを利用し、高い発光効率が達成されている。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、りん光性の発光材料を用いれば蛍光のみを使った素子に比べて 3 ~ 4 倍の発光効率の達成が考えられる。 40

【0004】

このような有機 EL 素子においては、3 重項の励起状態又は 3 重項の励起子が消光しないように順次、陽極、正孔輸送層、有機発光層、電子輸送層（正孔阻止層）、電子輸送層、陰極のように層を積層する構成が用いられ、有機発光層にホスト化合物とりん光発光性の化合物が用いられてきた（例えば、特許文献 1 ~ 6）。ここにはジベンゾフラン、ジベ 50

ンゾチオフエン骨格を有するホスト材が記載されている。しかしながら、他のカルバゾリル骨格と比較して素子性能で優位性が示されてない。

特許文献 7, 8 には、ジベンゾ化合物にカルバゾリル骨格を結合させた化合物群が記載されている。青色系りん光素子のホスト材料として実施例に記載されているが、本発明のような化合物群に関しては記載が無く、効果も不明である。

特許文献 9, 10, 11 には同様にジベンゾ化合物とアントラセン骨格との結合化合物が記載されている。しかしながらこれらの化合物はアントラセン骨格を有しているため、3重項の励起状態のエネルギーレベルが小さく、これらの化合物群のどれを発光層のホスト材料として用いても、青色系りん光発光材料を発光させることができない。

また、特許文献 12 には少なくとも 2 つの重合性官能基が必須であるジベンゾフラン骨格を有する化合物が記載されている。しかし、2重結合、3重結合等の不飽和結合で置き換えられることにより形成される基、例えば、プロペニレン基、ビニレン基、4-プロピル-2-ペンテニレン基等のような重合性置換基をりん光発光素子のホスト材料の分子骨格に組み込んだ場合、素子内でラジカルが連鎖的に発生し、発光効率、寿命に悪い影響を及ぼすことが懸念される。

#### 【0005】

【特許文献 1】 国際公開 WO 05 / 101912 号公報

【特許文献 2】 特開平 5 - 109485 号公報

【特許文献 3】 特開 2004 - 002351 号公報

【特許文献 4】 国際公開 WO 04 / 096945 号公報

【特許文献 5】 特開 2002 - 308837 号公報

【特許文献 6】 WO 2005 - 113531 号公報

【特許文献 7】 特開 2005 - 112765 号公報

【特許文献 8】 WO 2006 - 114966 号公報

【特許文献 9】 特開 2005 - 314239 号公報

【特許文献 10】 特開 2007 - 77094 号公報

【特許文献 11】 特開 2007 - 63501 号公報

【特許文献 12】 特開 2007 - 110097 号公報

#### 【発明の開示】

#### 【0006】

本発明は、前記の課題を解決するためになされたもので、発光効率が高く、画素欠陥が無く、耐熱性に優れ、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を目的とする。

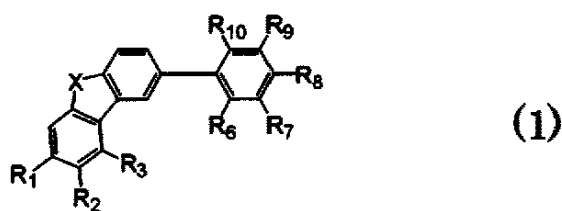
#### 【0007】

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、下記一般式 (1) で表される、ジベンゾチオフエン骨格またはジベンゾフラン骨格の 2 位が芳香族炭化水素基で置換された化合物であって、かつ、青色系りん光錯体の発光効率を損なわない十分な 3 重項の励起状態を得ることができる化合物群を有機 EL 素子材料として用いることにより、画素欠陥が無く、高効率、高耐熱かつ長寿命である有機 EL 素子が得られることを見出し、本発明を解決するに至った。

#### 【0008】

すなわち、本発明は、下記一般式 (1) で表される化合物からなる、少なくとも 1 種のりん光発光性の金属錯体とともに用いる有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を提供するものである。

## 【化 1】



【一般式 (1) において、 $R_1 \sim R_3$  は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数 3 ～ 15 のシクロアルキル基、置換基を有してもよい炭素数 3 ～ 20 の複素環基、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 40 の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 10 ～ 18 の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 20 のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数 7 ～ 20 のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 40 のアリールアミノ基、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数 7 ～ 60 のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数 7 ～ 40 のアリールカルボニル基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 20 のアリールチオ基、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のハロゲン化アルキル基、または、シアノ基である、但し、 $R_1 \sim R_3$  の少なくとも 1 つは置換基を有してもよい 9-カルバゾリル基、または、置換基を有してもよい窒素原子数 2 ～ 5 のアザカルバゾリル基であり、

$R_6$  と  $R_{10}$  は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のアルキル基であり、

$R_7 \sim R_9$  は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数 3 ～ 15 のシクロアルキル基、置換基を有してもよい炭素数 3 ～ 20 の複素環基、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 40 の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 10 ～ 18 の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 20 のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数 7 ～ 20 のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 40 のアリールアミノ基、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数 7 ～ 60 のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数 7 ～ 40 のアリールカルボニル基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 20 のアリールチオ基、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のハロゲン化アルキル基、または、シアノ基である、但し、 $R_8$  と  $R_9$ 、または  $R_8$  と  $R_7$  が互いに結合して環構造を形成しない場合、 $R_7 \sim R_9$  の少なくとも 1 つは置換基を有してもよい 9-カルバゾリル基、置換基を有してもよい窒素原子数 2 ～ 5 のアザカルバゾリル基、置換基を有してもよいフェニル基、置換基を有してもよいジベンゾフラニル基、または、置換基を有してもよいジベンゾチオフェニル基であり、

$R_8$  と  $R_9$ 、または  $R_8$  と  $R_7$  は互いに結合して置換基を有してもよい環構造を形成してもよく、該環構造を形成しない  $R_7$ 、または  $R_9$  は水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数 3 ～ 15 のシクロアルキル基、置換基を有してもよい炭素数 3 ～ 20 の複素環基、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 40 の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 10 ～ 18 の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 20 のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数 7 ～ 20 のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 40 のアリールアミノ基、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数 7 ～ 60 のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数 7 ～ 40 のアリールカルボニル基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 20 のアリールチオ基、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のハロゲン化アルキル基

、または、シアノ基である、但し、 $R_8$ と $R_9$ または $R_8$ と $R_7$ とそれらが結合しているベンゼン環がカルバゾリル基を形成する場合は除く、

$R_1 \sim R_3$  および  $R_6 \sim R_{10}$  の各置換基は末端に重合性官能基を有することはない、

$X$  は、硫黄原子または酸素原子である】。

【0009】

陰極と陽極間に、少なくとも1種のりん光発光性の金属錯体とともに用いるホスト材料を含有する発光層を有し、かつ、一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている有機エレクトロルミネッセンス素子において、前記有機薄膜層の少なくとも一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有機エレクトロルミネッセンス素子を提供するものである。

10

【0010】

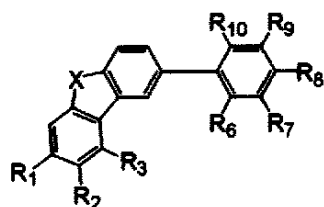
本発明の有機EL素子用材料を用いた有機EL素子は、画素欠陥が無く、高効率、高耐熱かつ長寿命である。

【発明を実施するための最良の形態】

【0011】

本発明の有機EL素子用材料は、下記一般式(1)で表される化合物からなる。

【化2】



(1)

20

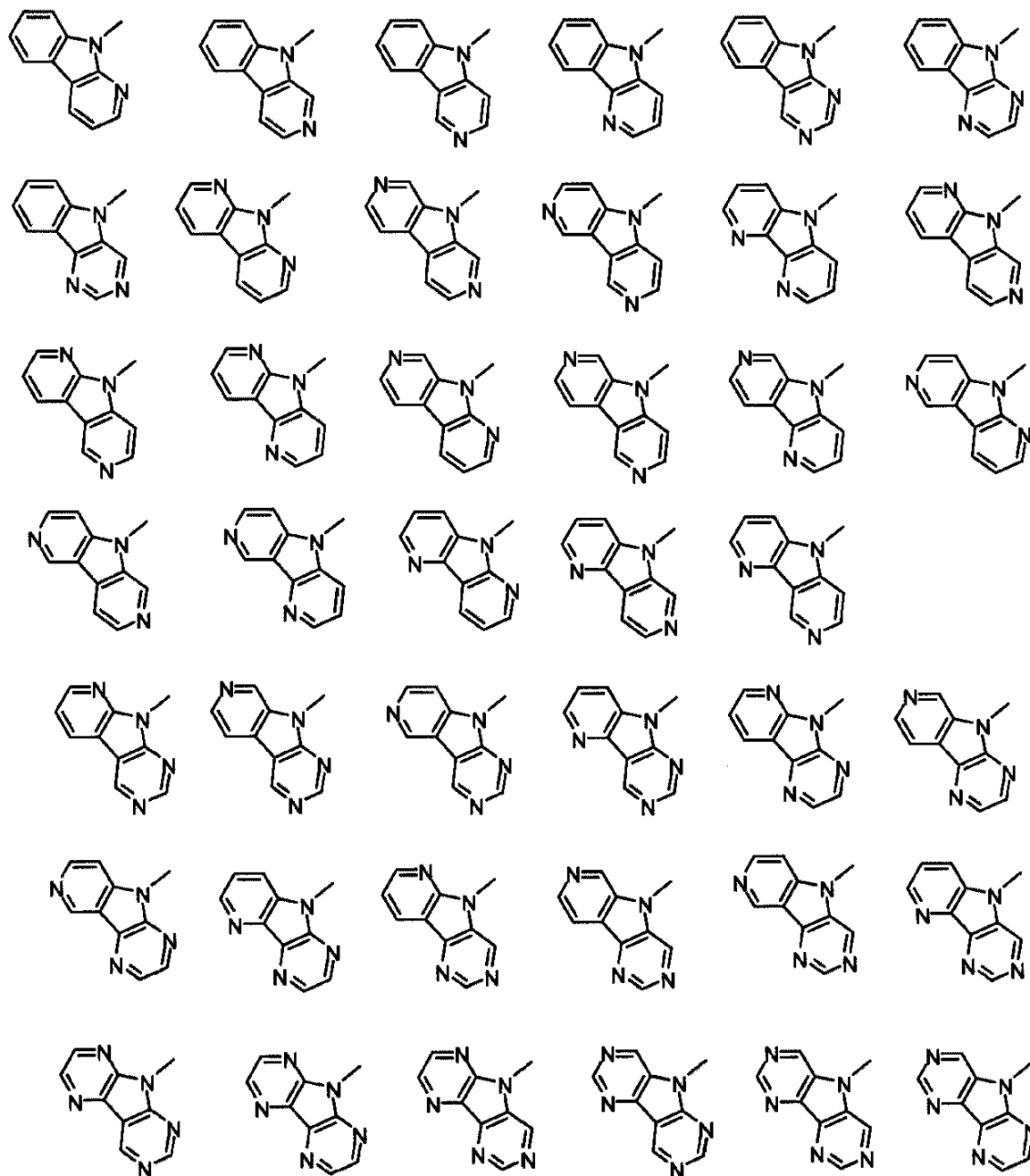
【0012】

一般式(1)において、 $R_1 \sim R_3$  は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～15のシクロアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～20の複素環基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数10～18の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数6～40のアリールアミノ基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～60のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～40のアリールカルボニル基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールチオ基、置換基を有してもよい炭素数1～40のハロゲン化アルキル基、または、シアノ基である。但し、 $R_1 \sim R_3$  の少なくとも1つは置換基を有してもよい9-カルバゾリル基、または、置換基を有してもよい窒素原子数2～5のアザカルバゾリル基である。該アザカルバゾリル基の具体例を以下に示すが(任意の置換基は省略)、これらに限定されるものではない。

30

40

## 【化 3】



## 【0013】

40

$R_6$ と $R_{10}$ は、それぞれ独立に、水素原子または置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基である。

$R_7 \sim R_9$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～15のシクロアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～20の複素環基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数10～18の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数6～40のアリールアミノ基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～60のアラルキルアミノ基、置換基を有し

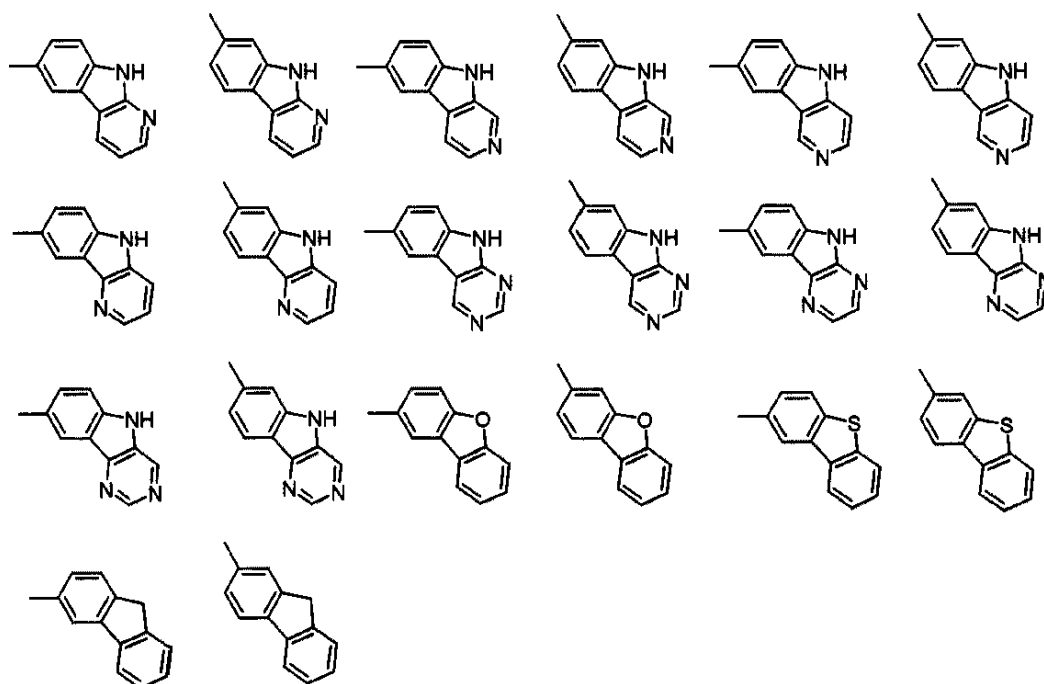
50

てもよい炭素数7～40のアリールカルボニル基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールチオ基、置換基を有してもよい炭素数1～40のハロゲン化アルキル基、または、シアノ基である。但し、 $R_8$ と $R_9$ 、または $R_8$ と $R_7$ が互いに結合して環構造を形成しない場合、 $R_7 \sim R_9$ の少なくとも1つは置換基を有してもよい9-カルバゾリル基、置換基を有してもよい窒素原子数2～5のアザカルバゾリル基、置換基を有してもよいフェニル基、置換基を有してもよいジベンゾフラニル基、または、置換基を有してもよいジベンゾチオフェニル基である。

#### 【0014】

$R_8$ と $R_9$ 、または $R_8$ と $R_7$ は互いに結合して置換基を有してもよい環構造を形成してもよい。該環構造を形成する場合、 $R_8$ と $R_9$ 、または $R_8$ と $R_7$ はそれらが結合しているベンゼン環と共に、例えば、下記の窒素原子数2～5のアザカルバゾール構造、ジベンゾフラン構造、ジベンゾチオフェン構造、フルオレン構造を形成するのが好ましい（置換基 $R_6$ など、および任意の置換基は省略した）。但し、 $R_8$ と $R_9$ 、または $R_8$ と $R_7$ はそれらが結合しているベンゼン環と共にカルバゾール構造を形成する場合は除く。

#### 【化4】



#### 【0015】

$R_8$ と $R_9$ 、または $R_8$ と $R_7$ が互いに結合して置換基を有してもよい環構造を形成する場合、該環構造を形成しない $R_7$ または $R_9$ は、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～15のシクロアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～20の複素環基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数10～18の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数6～40のアリールアミノ基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～60のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～40のアリールカルボニル基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールチオ基、置換基を有してもよい炭素数1～40のハロゲン化アルキル基、または、シアノ基である。

#### 【0016】

また、 $R_1 \sim R_3$ および $R_6 \sim R_{10}$ （置換されている場合も含む）のそれぞれは、末端に

重合性官能基、例えば、ビニル基、1-メチルビニル基、1-ハロビニル基、1-トリハロメチルビニル基などを有することはない。

#### 【0017】

前記ハロゲン原子としては、例えば、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素等が挙げられる。

#### 【0018】

前記置換基を有してもよい炭素数1~40のアルキル基としては、例えば、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-10  
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、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、ブロモメチル基、1-ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 20  
3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブロモ-t-ブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、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, 3-30  
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、1, 2-ジニトロエチル基、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、好ましくは、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、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である。アルキル基（置換基を除く）の炭素数は1~10であるのが好ましい。

#### 【0019】

置換基を有してもよい炭素数3~15のシクロアルキル基としては、例えば、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロオクチル基、3, 3, 5, 5-テトラメチルシクロヘキシル基等が挙げられ、好ましくは、シクロヘキシル基、シクロオクチル基、3, 5-テトラメチルシクロヘキシル基である。シクロアルキル基（置換基を除く）の炭素数は3~12であるのが好ましい。

#### 【0020】

前記置換基を有してもよい炭素数3~20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、1-イミダゾリル基、2-イミダゾリル基、1-ピラゾリル基、1-インドリジニル基、2-インドリジニル基、3-インドリジニル基、5-インドリジニル基、6-インドリジニル基、7-インドリジニル基、8-インドリジニル基、2-イミダゾピリジニル基、3-イミダゾピリジニル基、5-イミダゾピリジニル基、6-イミダゾピリジニル基、7-イミダゾピリ 50

ジニル基、8-イミダゾピリジニル基、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、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、9-カルバゾリル基、アザカルバゾリル-1-イル基、アザ  
 カルバゾリル-2-イル基、アザカルバゾリル-3-イル基、アザカルバゾリル-4-イル  
 基、アザカルバゾリル-5-イル基、アザカルバゾリル-6-イル基、アザカルバゾリ  
 ル-7-イル基、アザカルバゾリル-8-イル基、アザカルバゾリル-9-イル基、1-  
 フェナントリジニル基、2-フェナントリジニル基、3-フェナントリジニル基、4-フ  
 ェナントリジニル基、6-フェナントリジニル基、7-フェナントリジニル基、8-フ  
 ェナントリジニル基、9-フェナントリジニル基、10-フェナントリジニル基、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-フェナントロリン-2-イル基、1, 7-フェナントロリン-3-  
 イル基、1, 7-フェナントロリン-4-イル基、1, 7-フェナントロリン-5-イル  
 基、1, 7-フェナントロリン-6-イル基、1, 7-フェナントロリン-8-イル基、  
 1, 7-フェナントロリン-9-イル基、1, 7-フェナントロリン-10-イル基、1  
 , 8-フェナントロリン-2-イル基、1, 8-フェナントロリン-3-イル基、1, 8-  
 フェナントロリン-4-イル基、1, 8-フェナントロリン-5-イル基、1, 8-フ  
 ェナントロリン-6-イル基、1, 8-フェナントロリン-7-イル基、1, 8-フェナ  
 ントロリン-9-イル基、1, 8-フェナントロリン-10-イル基、1, 9-フェナン  
 トロリン-2-イル基、1, 9-フェナントロリン-3-イル基、1, 9-フェナントロ  
 リン-4-イル基、1, 9-フェナントロリン-5-イル基、1, 9-フェナントロリン  
 -6-イル基、1, 9-フェナントロリン-7-イル基、1, 9-フェナントロリン-8  
 -イル基、1, 9-フェナントロリン-10-イル基、1, 10-フェナントロリン-2  
 -イル基、1, 10-フェナントロリン-3-イル基、1, 10-フェナントロリン-4  
 -イル基、1, 10-フェナントロリン-5-イル基、2, 9-フェナントロリン-1-  
 イル基、2, 9-フェナントロリン-3-イル基、2, 9-フェナントロリン-4-イル  
 基、2, 9-フェナントロリン-5-イル基、2, 9-フェナントロリン-6-イル基、  
 2, 9-フェナントロリン-7-イル基、2, 9-フェナントロリン-8-イル基、2,  
 9-フェナントロリン-10-イル基、2, 8-フェナントロリン-1-イル基、2, 8-  
 フェナントロリン-3-イル基、2, 8-フェナントロリン-4-イル基、2, 8-フ  
 ェナントロリン-5-イル基、2, 8-フェナントロリン-6-イル基、2, 8-フェナ  
 ントロリン-7-イル基、2, 8-フェナントロリン-9-イル基、2, 8-フェナント  
 ロリン-10-イル基、2, 7-フェナントロリン-1-イル基、2, 7-フェナントロ  
 リン-3-イル基、2, 7-フェナントロリン-4-イル基、2, 7-フェナントロリン  
 -5-イル基、2, 7-フェナントロリン-6-イル基、2, 7-フェナントロリン-8  
 -イル基、2, 7-フェナントロリン-9-イル基、2, 7-フェナントロリン-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-ト-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-ト-ブチル-1-インドリル基、4-ト-ブチル-1-インドリル基、2-ト-ブチル-3-インドリル基、4-ト-ブチル-3-インドリル基、1-ジベンゾフラニル基、2-ジベンゾフラニル基、3-ジベンゾフラニル基、4-ジベンゾフラニル基、1-ジベンゾチオフェニル基、2-ジベンゾチオフェニル基、3-ジベンゾチオフェニル基、4-ジベンゾチオフェニル基、1-シラフルオレニル基、2-シラフルオレニル基、3-シラフルオレニル基、4-シラフルオレニル基、1-ゲルマフルオレニル基、2-ゲルマフルオレニル基、3-ゲルマフルオレニル基、4-ゲルマフルオレニル基等が挙げられる。

#### 【0021】

これらの中でも好ましくは、2-ピリジニル基、1-インドリジニル基、2-インドリジニル基、3-インドリジニル基、5-インドリジニル基、6-インドリジニル基、7-インドリジニル基、8-インドリジニル基、2-イミダゾピリジニル基、3-イミダゾピリジニル基、5-イミダゾピリジニル基、6-イミダゾピリジニル基、7-イミダゾピリジニル基、8-イミダゾピリジニル基、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、9-カルバゾリル基、1-ジベンゾフラニル基、2-ジベンゾフラニル基、3-ジベンゾフラニル基、4-ジベンゾフラニル基、1-ジベンゾチオフェニル基、2-ジベンゾチオフェニル基、3-ジベンゾチオフェニル基、4-ジベンゾチオフェニル基、1-シラフルオレニル基、2-シラフルオレニル基、3-シラフルオレニル基、4-シラフルオレニル基、1-ゲルマフルオレニル基、2-ゲルマフルオレニル基、3-ゲルマフルオレニル基、4-ゲルマフルオレニル基、アザカルバゾリル-1-イル基、アザカルバゾリル-2-イル基、アザカルバゾリル-3-イル基、アザカルバゾリル-4-イル基、アザカルバゾリル-5-イル基、アザカルバゾリル-6-イル基、アザカルバゾリル-7-イル基、アザカルバゾリル-8-イル基、アザカルバゾリル-9-イル基である。複素環基（置換基を除く）の炭素数は3～14であるのが好ましい。

#### 【0022】

前記置換基を有してもよい炭素数1～40のアルコキシ基は-OYと表される基であり、Yの具体例としては、前記アルキル基で説明したものと同様のものが挙げられ、好ましい例も同様である。

#### 【0023】

前記置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合アリール基としては、例えば、フェニル基、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-ト-ブチルフェニル基、p-(2-フェニルプロピル)フェニル基、4'-メチルビフェニルイル基、4"-ト-ブチル-p-ターフェニル-4-イル基、o-クメニル基、m-クメニル基、p-クメニル基、2,3-キシリル基、3,4-キシリル基、2,5-キシリル基、メシチル基、m-クウォーターフェニル基等が挙げられる。これらの中でも好ましくは、フェニル基、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、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、p- 40

トリル基、3, 4-キシリル基、m-クウォーターフェニル-2-イル基である。非縮合アリール基（置換基を除く）の炭素数は6～24であるのが好ましい。

【0024】

前記置換基を有してもよい炭素数10～18の縮合アリール基の例としては、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-フェナントレニル基、2-フェナントレニル基、3-フェナントレニル基、4-フェナントレニル基、9-フェナントレニル基、1-トリフェニレニル基、2-トリフェニレニル基、3-トリフェニレニル基、4-トリフェニレニル基、1-クリセニル基、2-クリセニル基、3-クリセニル基、4-クリセニル基、5-クリセニル基、6-クリセニル基が挙げられる。

【0025】

10

前記置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基は-OArと表される基であり、Arの具体例としては、前記非縮合アリール基で説明したものと同様のものが挙げられ、好ましい例も同様である。

【0026】

前記置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基としては、例えば、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-tert-ブチル基、 $\alpha$ -ナフチルメチル基、1- $\alpha$ -ナフチルエチル基、2- $\alpha$ -ナフチルエチル基、1- $\alpha$ -ナフチルイソプロピル基、2- $\alpha$ -ナフチルイソプロピル基、 $\beta$ -ナフチルメチル基、1- $\beta$ -ナフチルエチル基、2- $\beta$ -ナフチルエチル基、1- $\beta$ -ナフチルイソプロピル基、2- $\beta$ -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。これらの中でも好ましくは、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-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である。アラルキル基のアルキル部分の炭素数は1～8であるのが好ましく、アリール部分（ヘテロアリールを含む）の炭素数は6～18であるのが好ましい。

【0027】

前記置換基を有してもよい炭素数6～40のアリールアミノ基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～60のアラルキルアミノ基は、それぞれ、-NQ<sub>1</sub>Q<sub>2</sub>と表され、Q<sub>1</sub>及びQ<sub>2</sub>の具体例としては、それぞれ独立に、前記アルキル基、前記アリール基、前記アラルキル基で説明したものと同様のものが挙げられ、好ましい例も同様である。

【0028】

40

前記置換基を有してもよい炭素数7～40のアリールカルボニル基は-COAr<sub>2</sub>と表され、Ar<sub>2</sub>の具体例としては、前記アリール基で説明したものと同様のものが挙げられ、好ましい例も同様である。

【0029】

前記置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールチオ基としては、前記アリールオキシ基-OArの酸素原子を硫黄原子に置き換えることにより得られる基が挙げられ、好ましい例も同様である。

【0030】

前記置換基を有してもよい炭素数1～40のハロゲン化アルキル基としては、例えば、前記アルキル基の少なくとも一個の水素原子をハロゲン原子で置換したものが挙げられ、

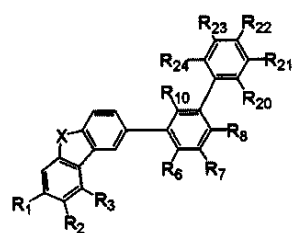
50

好ましい例も同様である。

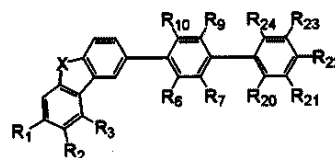
【0031】

前記一般式(1)で表される化合物は、好ましくは、下記一般式(2)～(5)で表される。

【化5】

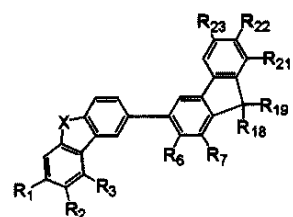


(2)

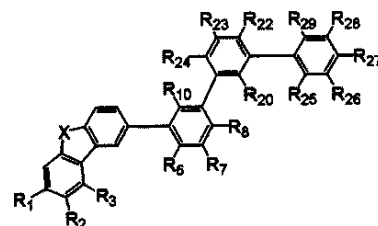


(3)

10



(4)



(5)

20

【0032】

前記一般式(2)～(5)において、 $R_1 \sim R_3$ 、 $R_6 \sim R_{10}$ およびXは前記と同様であり、 $R_{18} \sim R_{29}$ は、但し書きを除いて $R_1 \sim R_3$ の定義と同様である。

【0033】

一般式(1)～(5)の $R_1 \sim R_3$ 、 $R_6 \sim R_{10}$ および $R_{18} \sim R_{29}$ の定義中の置換基としては、例えば、炭素数1～8のアルキル基(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)；炭素数1～5個のヒドロキシアルキル基(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-ジヒドロキシー-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリヒドロキシプロピル基)；炭素数1～4個のハロアルキル基(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)；炭素数1～4個のアミノアルキル基(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)；炭素数1～4個のシアノアルキル基(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)；炭素数1～5個のニトロアルキル基(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)；炭素数3～10個の(アルキル)シクロアルキル基(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

30

40

50

ーアダマンチル基、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) ; 炭素数1~6のアルコキシ基(エトキシ基、メトキシ基、イソプロポキシ基、n-プロポキシ基、s-ブトキシ基、t-ブトキシ基、ペントキシ基、ヘキシルオキシ基) ; 炭素数3~6のシクロアルコキシ基(シクロペントキシ基、シクロヘキシルオキシ基等)、核原子数5~40のアリール基、核原子数5~40のアリール基で置換されたアミノ基、核原子数5~40のアリール基を有するエステル基、炭素数1~6のアルキル基を有するエステル基、シアノ基、ニトロ基、ハロゲン原子、ヒドロキシル基、アミノ基、置換又は無置換のカルバゾリル基(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)、置換又は無置換のジベンゾフラニル基(1-ジベンゾフラニル基、2-ジベンゾフラニル基、3-ジベンゾフラニル基、4-ジベンゾフラニル基)、置換又は無置換のジベンゾチオフェニル基(1-ジベンゾチオフェニル基、2-ジベンゾチオフェニル基、3-ジベンゾチオフェニル基、4-ジベンゾチオフェニル基)等が挙げられる。カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、およびジベンゾチオフェニル基の置換基は上記した置換基から選択される。

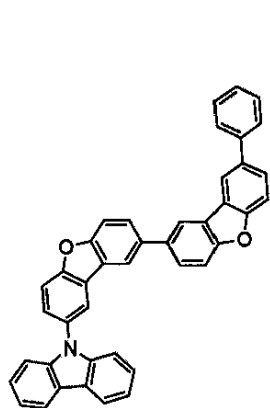
#### 【0034】

前記一般式(2)の置換基 $R_7$ 、 $R_8$ および $R_{20} \sim R_{24}$ の少なくとも1つ、前記一般式(3)の置換基 $R_7$ 、 $R_9$ および $R_{20} \sim R_{24}$ の少なくとも1つ、前記一般式(4)の置換基 $R_7$ および $R_{21} \sim R_{23}$ の少なくとも1つ、および、前記一般式(5)の置換基 $R_7$ 、 $R_8$ 、 $R_{20}$ 、および $R_{22} \sim R_{29}$ の少なくとも1つは、置換又は無置換の9-カルバゾリル基、置換又は無置換のジベンゾフラニル基、置換又は無置換の窒素原子数2~5のアザカルバゾリル基、および置換又は無置換のジベンゾチオフェニル基から選ばれた置換基であることが好ましい。

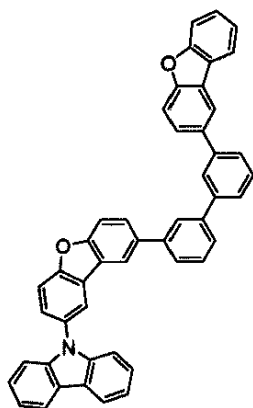
#### 【0035】

本発明の一般式(1)~(5)のいずれかで表される化合物の3重項エネルギーギャップは2.2~3.2 eVである。該化合物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。

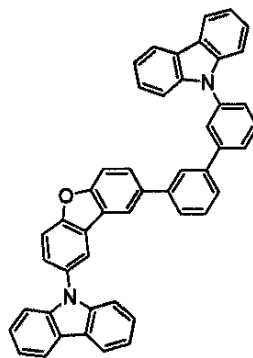
## 【化 6】



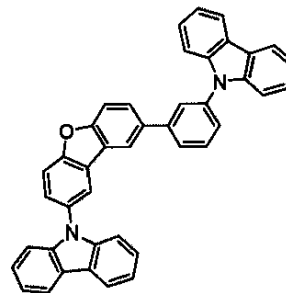
No.1



No.2

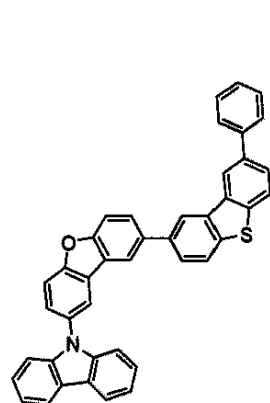


No.3

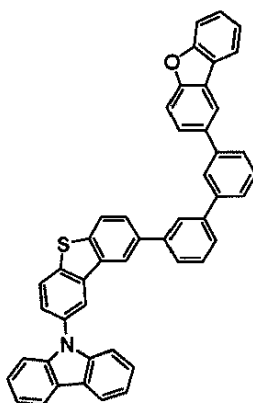


No.4

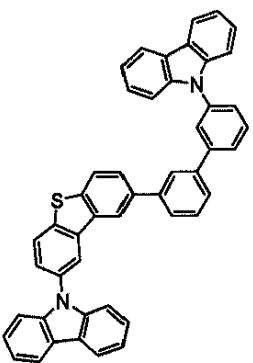
10



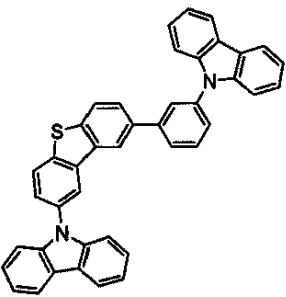
No.5



No.6

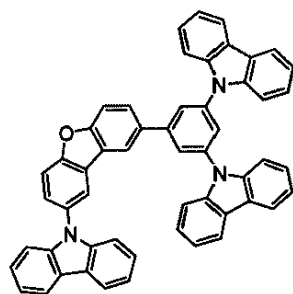


No.7

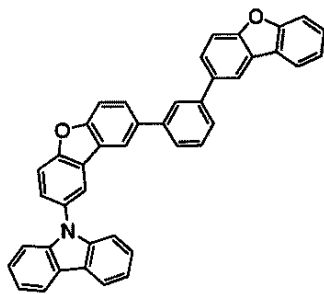


No.8

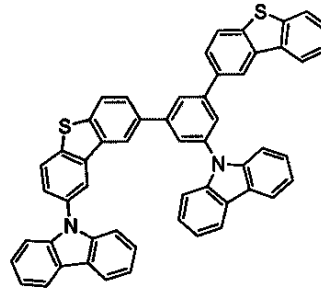
20



No.9

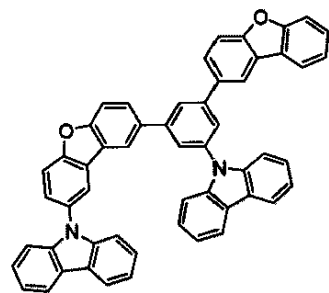


No.10



No.11

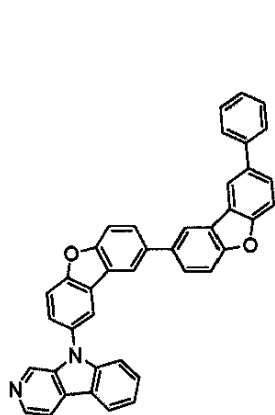
30



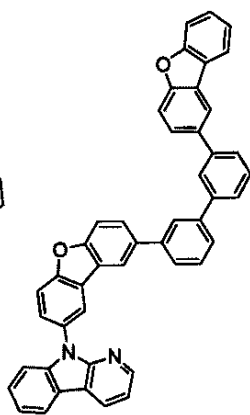
No.12

40

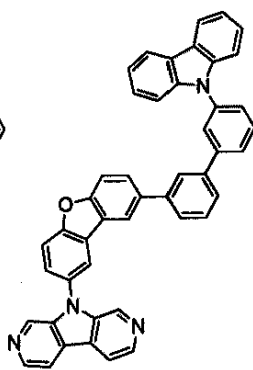
## 【化 7】



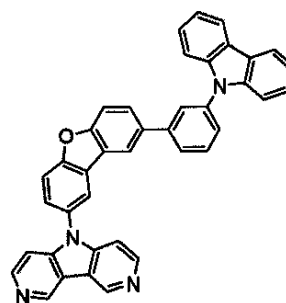
No.13



No.14

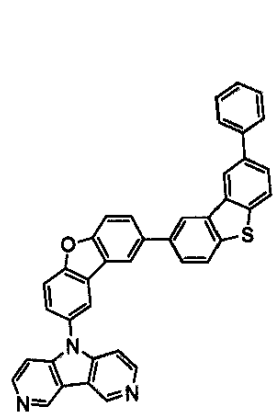


No.15

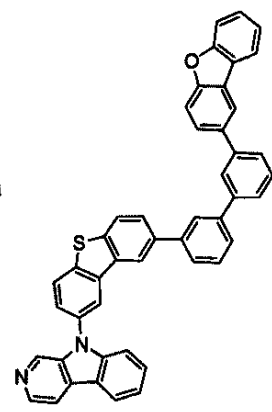


No.16

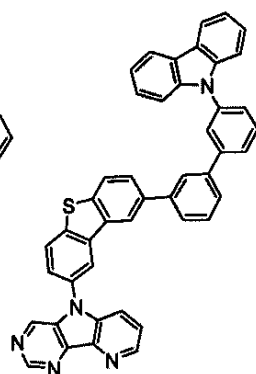
10



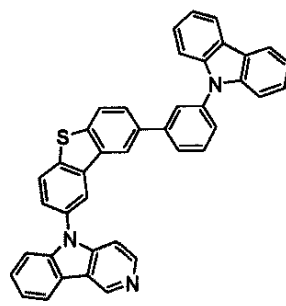
No.17



No.18

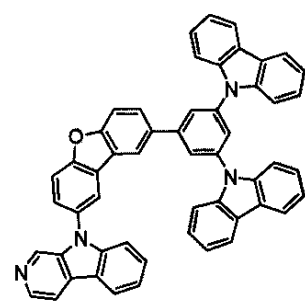


No.19

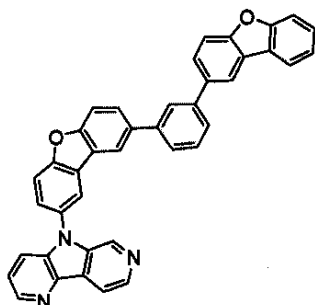


No.20

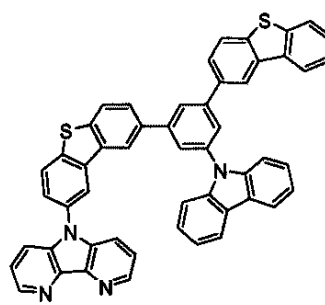
20



No.21

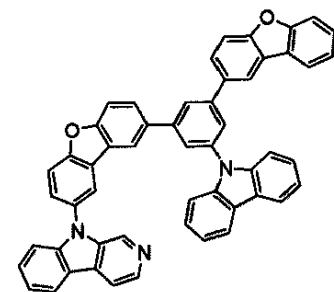


No.22



No.23

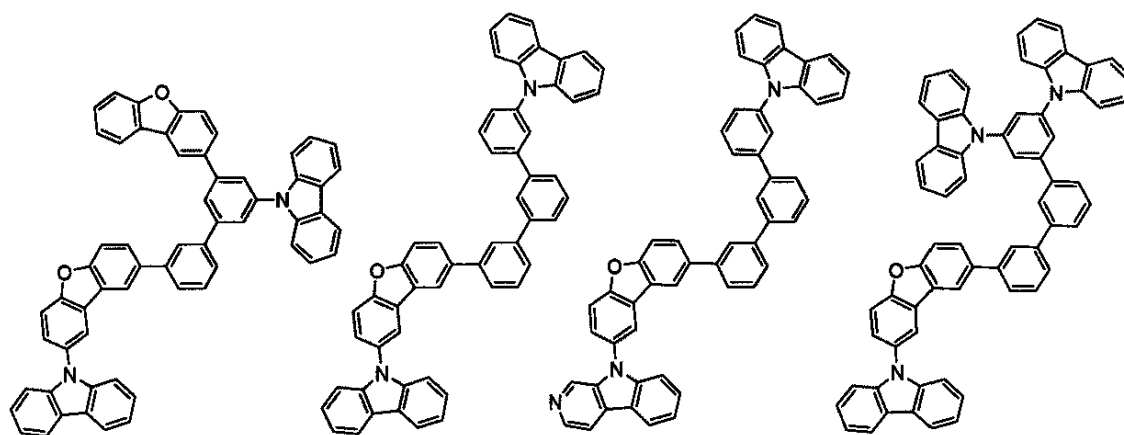
30



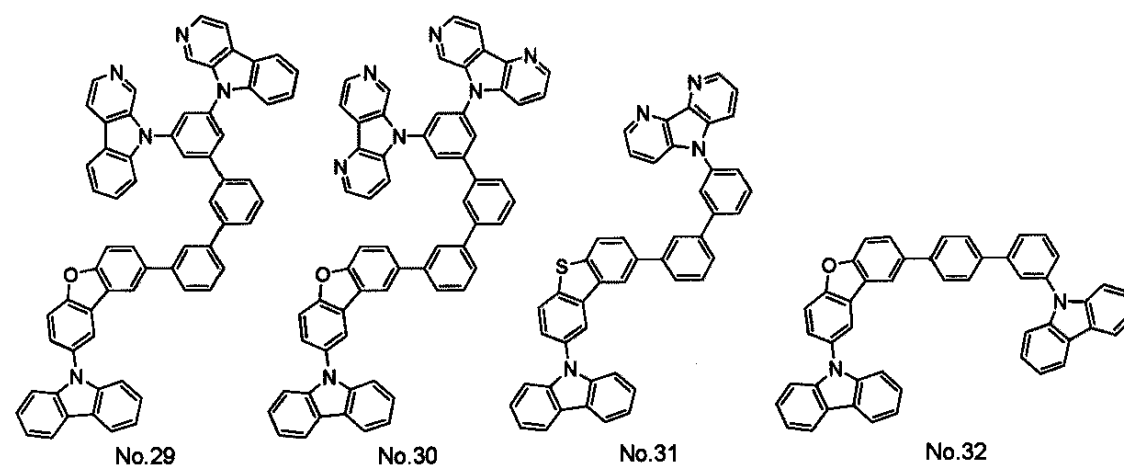
No.24

40

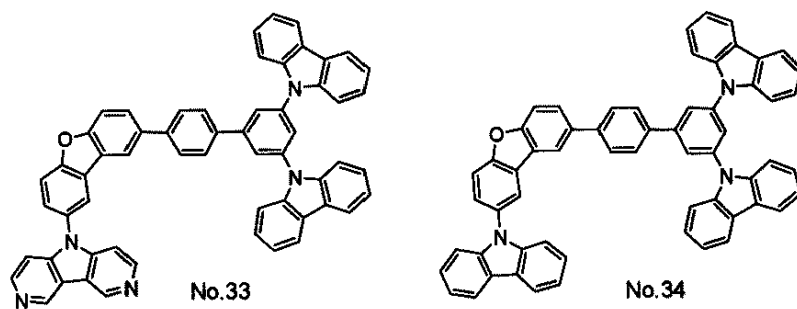
## 【化 8】



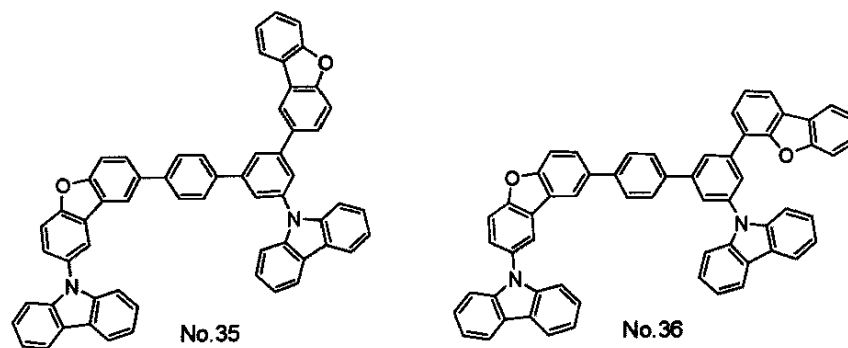
10



20

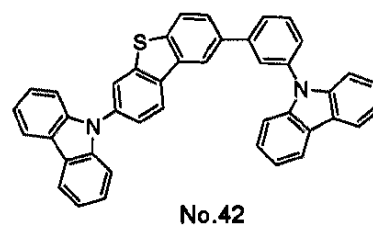
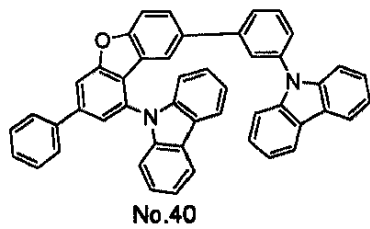
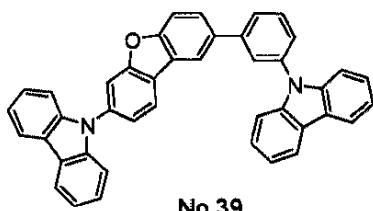


30

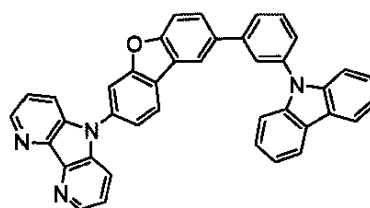
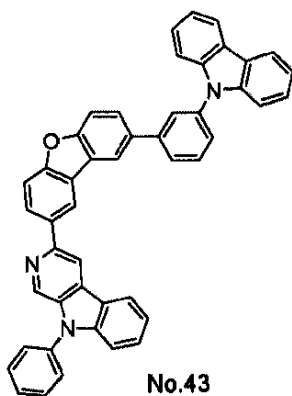


40

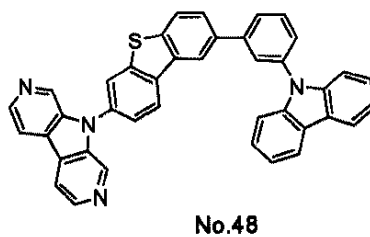
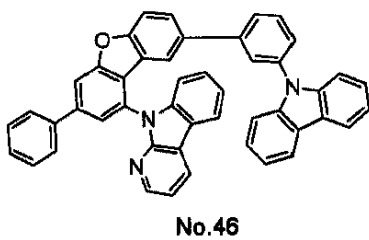
## 【化 9】



10

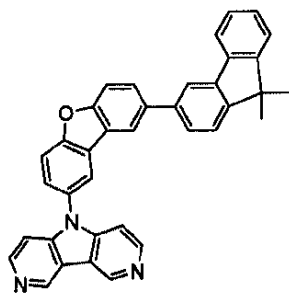


20

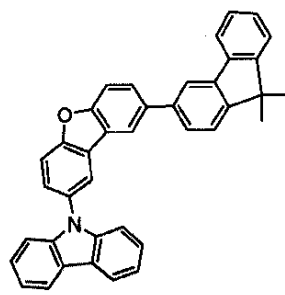


30

【化 10】

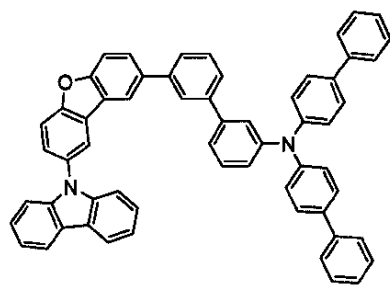


No.49

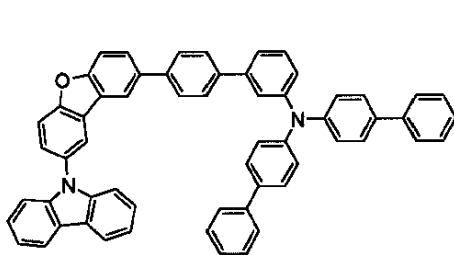


No.50

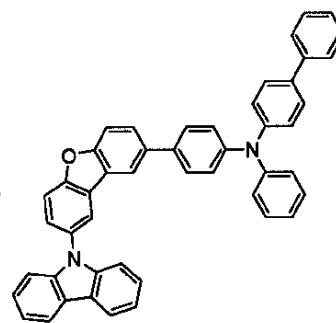
10



No.51

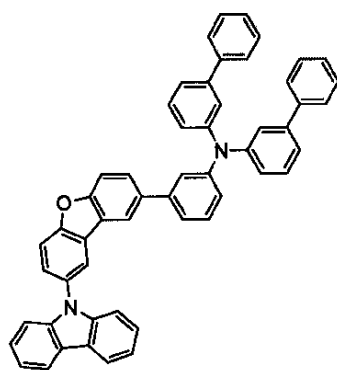


No.52

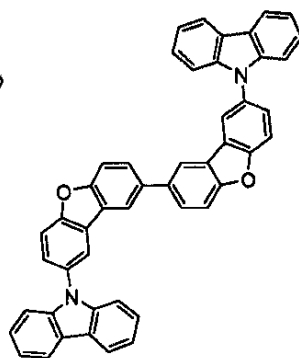


No.53

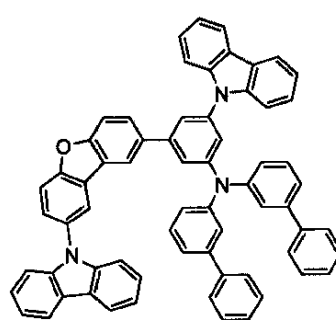
20



No.54

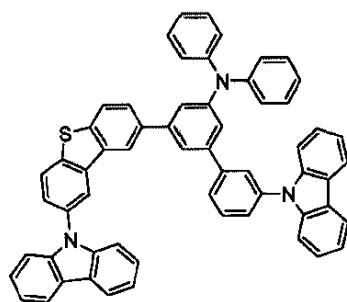


No.55

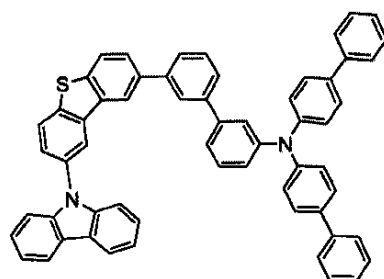


No.56

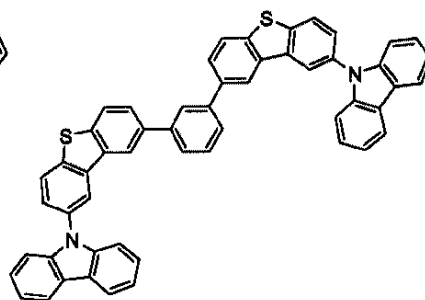
30



No.57



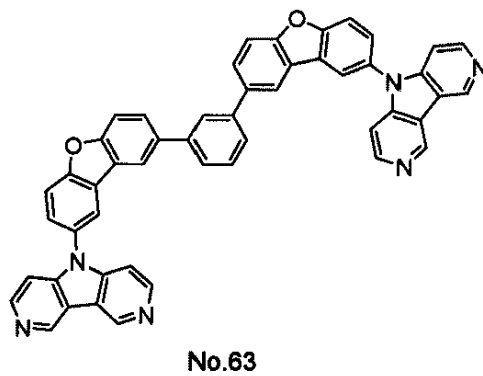
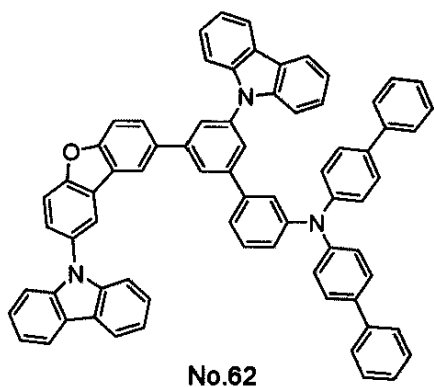
No.58



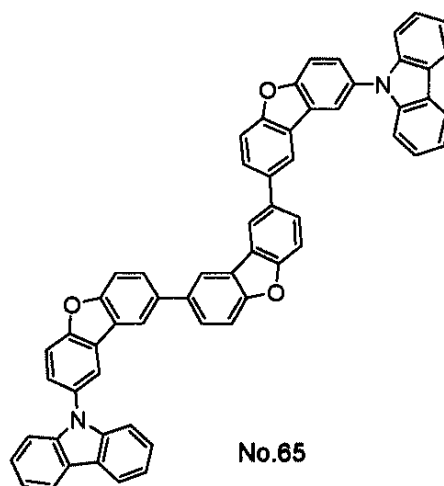
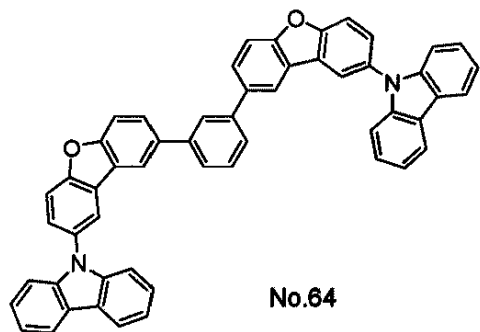
No.59

40

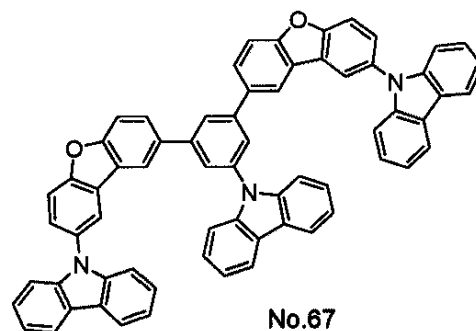
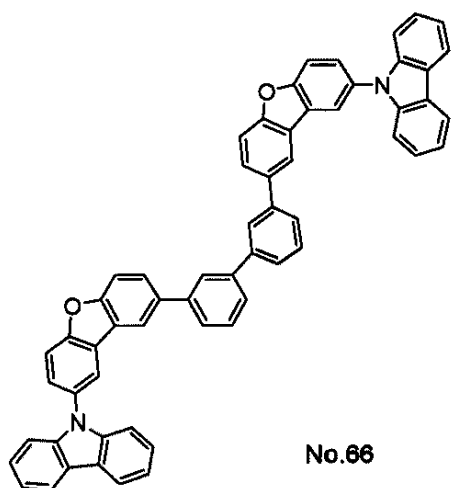
## 【化 1 1】



10



20



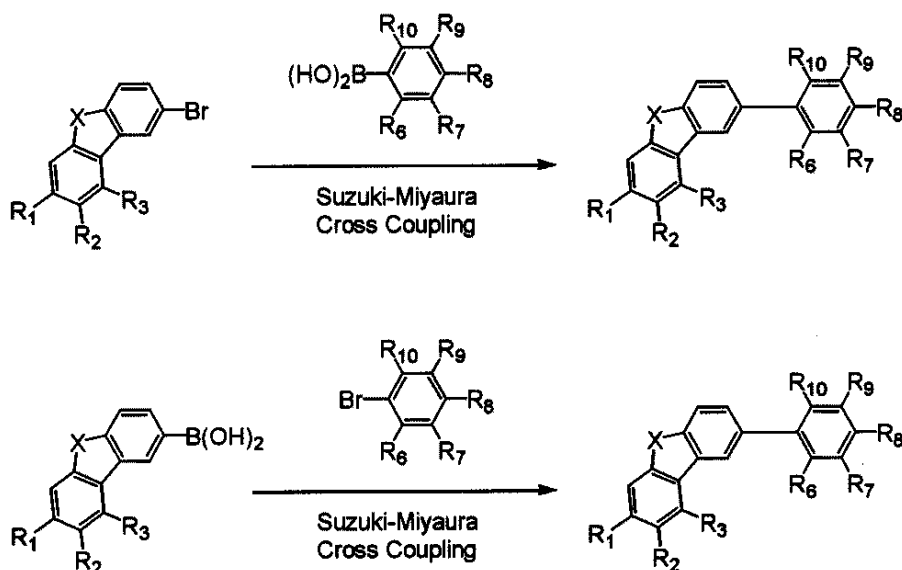
30

40

## 【0036】

一般式（1）の化合物は、下記のように有機ボロン酸とアリールハライドを用いた鈴木—宮浦反応を利用すると簡便に合成できる。

## 【化 1 2】



10

## 【0037】

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および正孔輸送材料として好ましく用いられる。 20

## 【0038】

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、陰極と陽極間に一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている構造を有する。該有機薄膜層は少なくとも一層は、少なくとも1種のりん光発光性の金属錯体とともに用いるホスト材料を含有する発光層である。該有機薄膜層の少なくとも一層が、本発明の有機EL素子用材料を含有する。

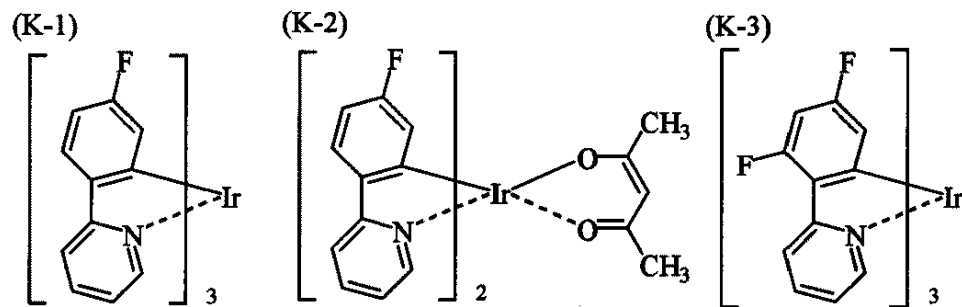
## 【0039】

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）／陰極等の多層積層構造が挙げられる。 30

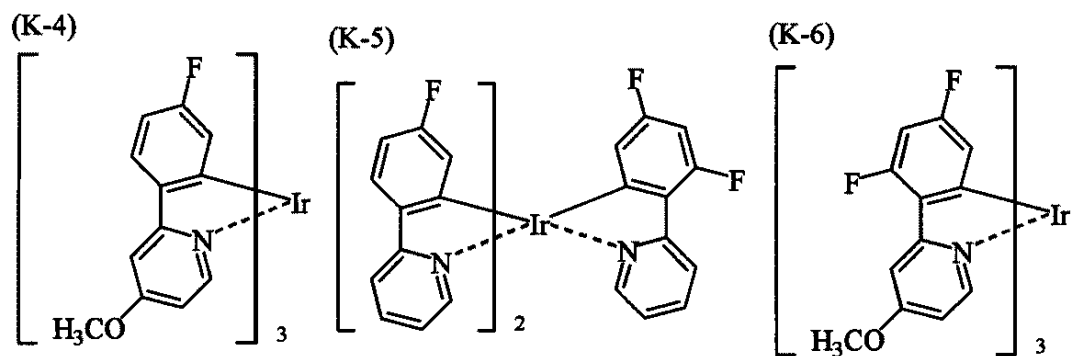
## 【0040】

本発明の有機EL素子において、前記発光層が、本発明の有機EL素子用材料をホスト材料として含有することが好ましい。また、前記発光層が、ホスト材料とりん光性の発光材料からなり、該ホスト材料が前記有機EL素子用材料であることが好ましい。りん光性の発光材料としては、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（Ir）、オスミウム（Os）又は白金（Pt）金属を含有する化合物が好ましく、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等の金属錯体がさらに好ましく、中でもイリジウム錯体及び白金錯体がより好ましく、オルトメタル化イリジウム錯体が最も好ましい。オルトメタル化イリジウム錯体のさらに好ましい形態を以下に示す。 40

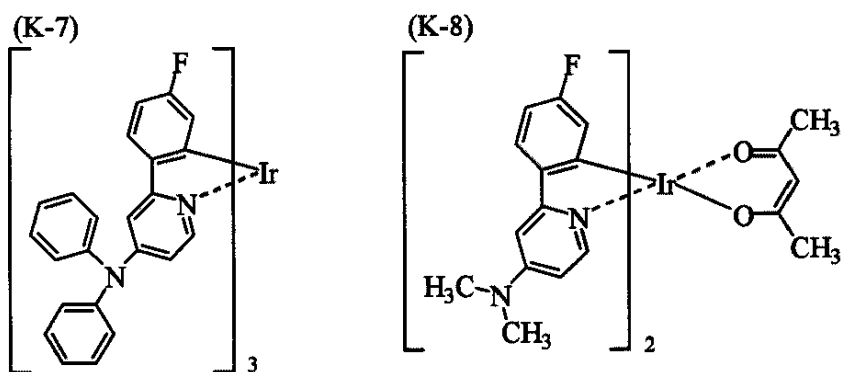
## 【化 1 3】



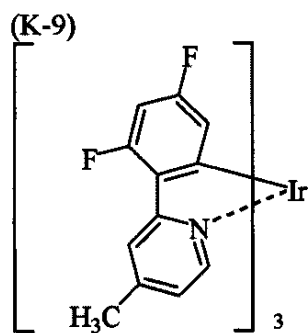
10



20

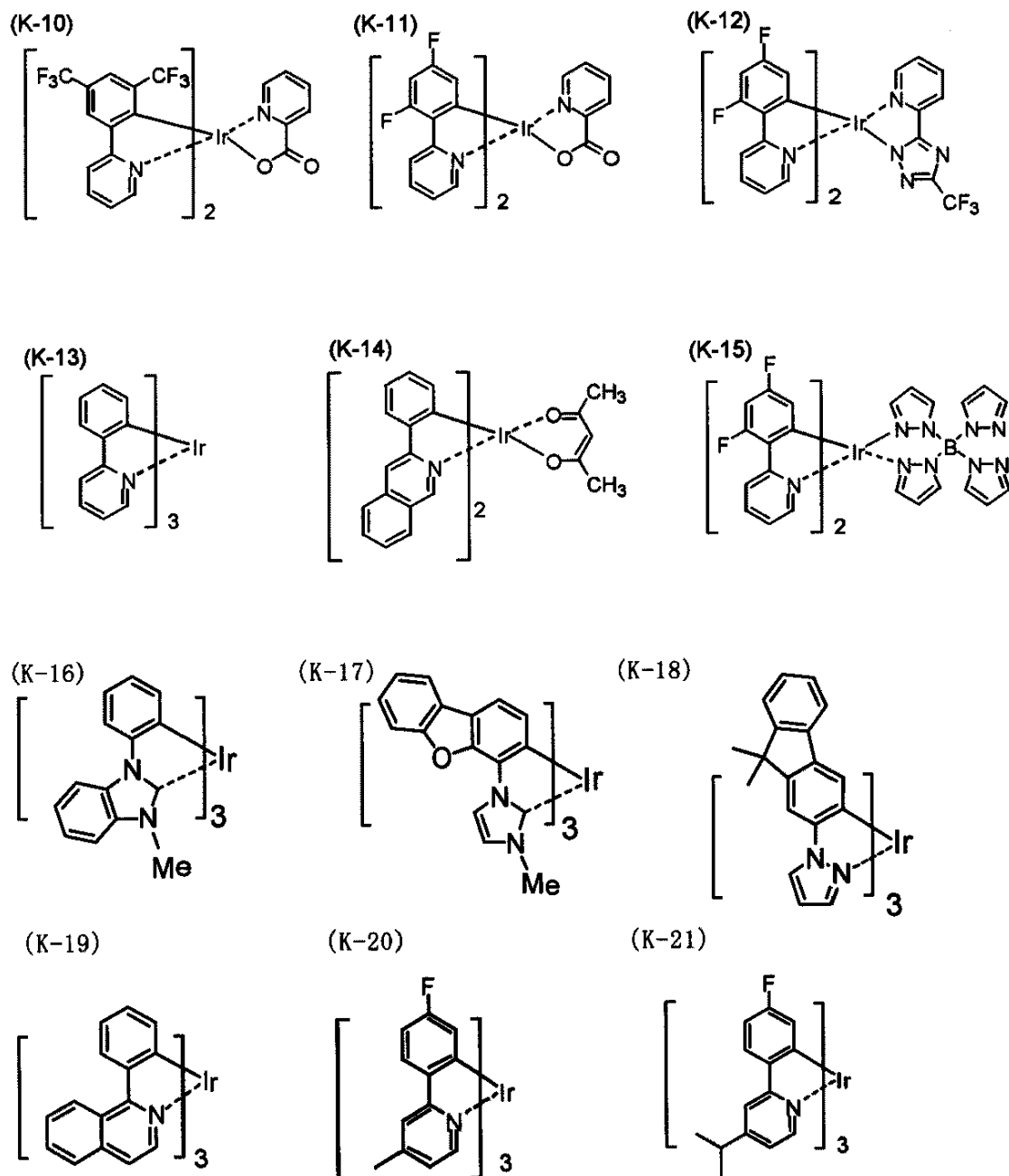


30



40

## 【化 1 4】



10

20

30

## 【0041】

40

また、本発明の他の好ましい有機EL素子では、前記発光層がホスト材料とりん光性の発光材料を含有し、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。このような青色系金属錯体としては、例えば、上記K-1, K-2, K-3, K-10, K-11, K-12, K-15, K-16, K-17, K-20, K-21等が挙げられる。

## 【0042】

本発明の他の好ましい有機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素子用材料を正孔輸送材料として含有する。

## 【0043】

本発明の有機EL素子の陰極と有機薄膜層との界面領域には、還元性ドーパントを添加

50

するのが好ましい。前記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類が挙げられる。

#### 【0044】

前記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。

前記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。

前記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素子の発光輝度の向上や長寿命化が可能になる。

#### 【0045】

前記アルカリ金属化合物としては、Li<sub>2</sub>O、Cs<sub>2</sub>O、K<sub>2</sub>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、Li<sub>2</sub>O、NaFが好ましい。

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

前記希土類金属化合物としては、YbF<sub>3</sub>、ScF<sub>3</sub>、ScO<sub>3</sub>、Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、Ce<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、GdF<sub>3</sub>、TbF<sub>3</sub>等が挙げられ、YbF<sub>3</sub>、ScF<sub>3</sub>、TbF<sub>3</sub>が好ましい。

#### 【0046】

前記アルカリ金属錯体、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、 $\beta$ -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。

#### 【0047】

還元性ドーパントは、前記界面領域に層状又は島状になるように添加するのが好ましい。添加する方法としては、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、有機物中に還元性ドーパントを分散する方法が好ましい。分散濃度としてはモル比で有機物：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、界面の有機層を発光材料や電子注入材料により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、界面の有機層を発光材料や電子注入材料により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。

また、本発明の有機EL素子における、主成分である発光材料や電子注入材料と還元性ドーパントの割合としては、モル比で主成分：還元性ドーパント＝5：1～1：5である

と好ましく、2 : 1 ~ 1 : 2 であるとさらに好ましい。

【0048】

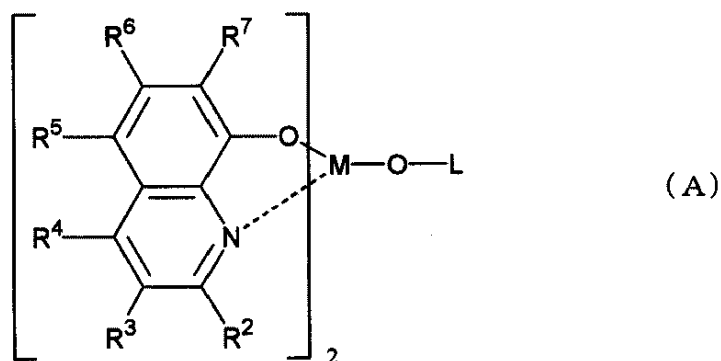
本発明の有機EL素子の他の好ましい態様では、前記発光層と陰極との間に電子注入層を有し、該電子注入層は、本発明の有機EL素子用材料とは異なる含窒素環誘導体を主成分として含有する。前記電子注入層に用いる電子輸送材料としては、分子内にヘテロ原子を1個以上含有する芳香族ヘテロ環化合物が好ましく用いられ、特に芳香族含窒素環化合物が好ましい。

【0049】

この芳香族含窒素環化合物としては、例えば、一般式(A)で表される含窒素環金属キレート錯体が好ましい。

10

【化15】



20

(A)

【0050】

式(A)において、 $R^2 \sim R^7$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、オキシ基、アミノ基、又は炭素数1~40の炭化水素基であり、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、前記と同様のものが挙げられる。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、アラルキルアミノ基と同様のものが挙げられる。

30

炭素数1~40の炭化水素基としては、アルキル基、アルケニル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、アリール基、複素環基、アラルキル基、アリールオキシ基、アルコキシカルボニル基等が挙げられ、それぞれ置換されていてもよい。該アルキル基、アルケニル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、アリール基、複素環基、アラルキル基、および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、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。

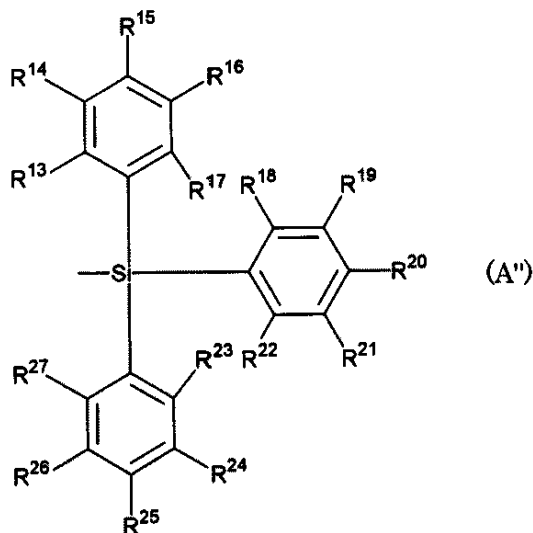
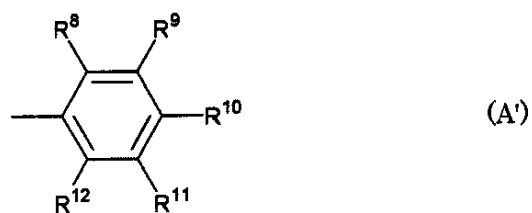
【0051】

式(A)の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、下記一般式(A')又は(A'')で表される基である。

40

## 【化 1 6】



10

20

(式中、 $R^8 \sim R^{12}$ 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、 $R^{13} \sim R^{27}$ 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。)

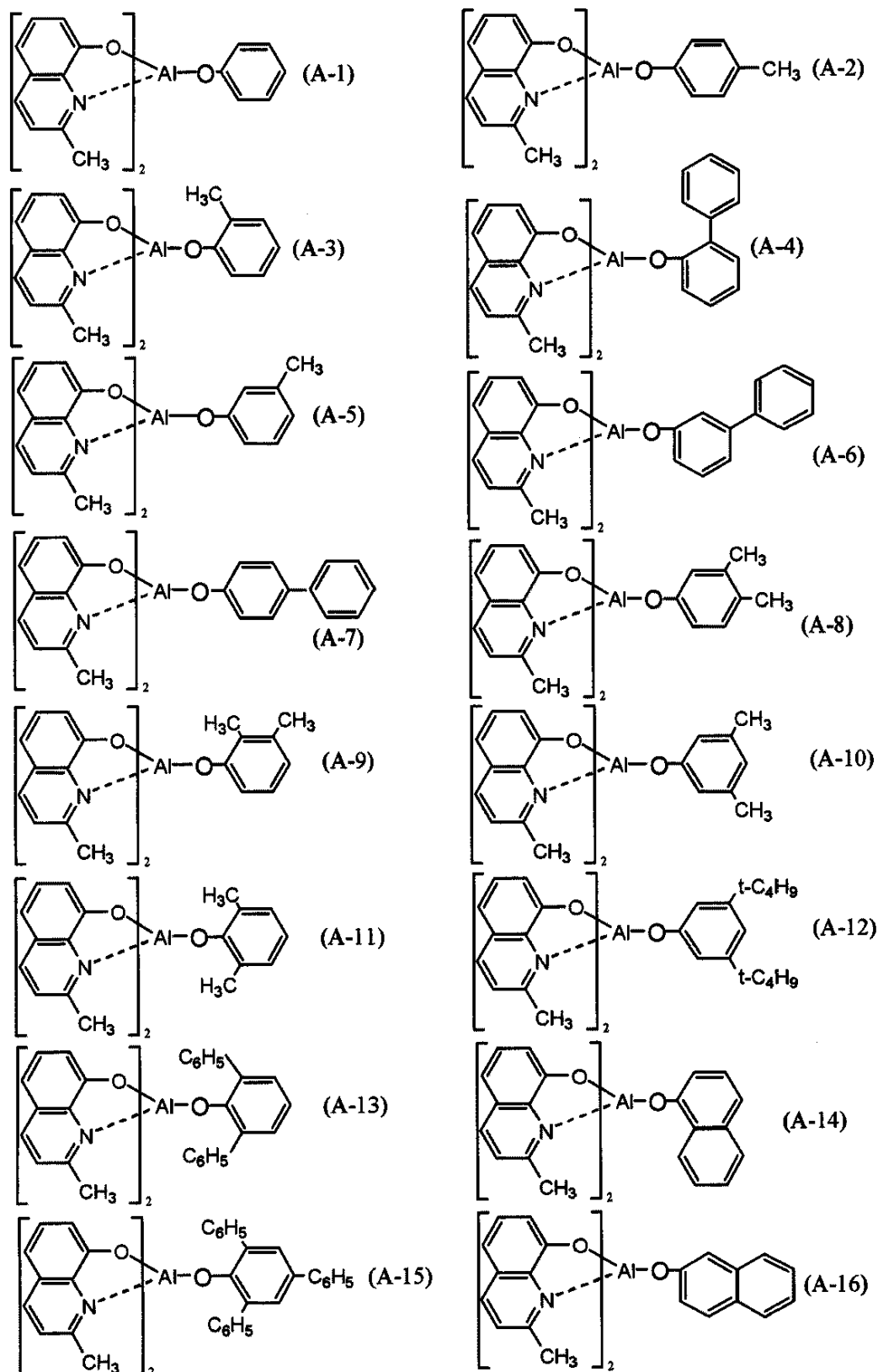
## 【0052】

一般式(A')及び(A'')の炭素数1～40の炭化水素基としては、前記 $R^2 \sim R^7$ の具体例と同様のものが挙げられる。また、前記 $R^8 \sim R^{12}$ 及び $R^{13} \sim R^{27}$ 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。

## 【0053】

一般式(A)で表される含窒素環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 17】



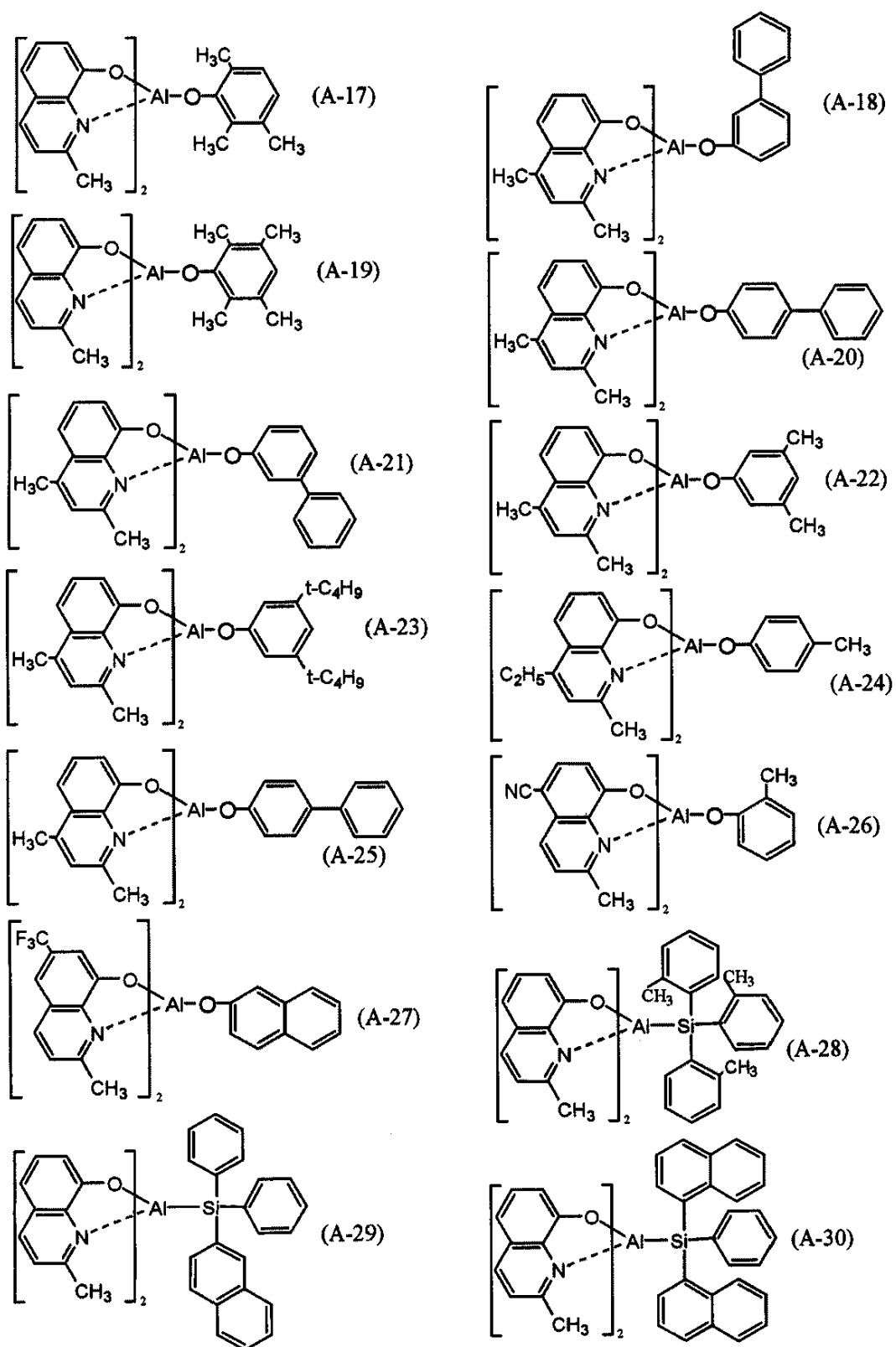
10

20

30

40

## 【化 18】



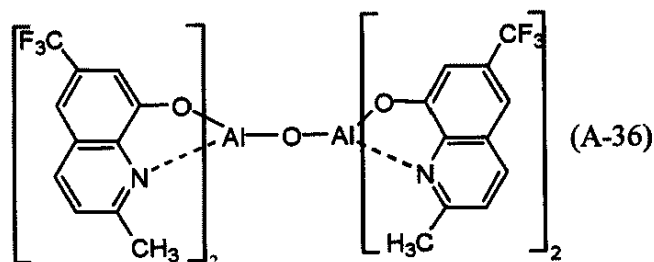
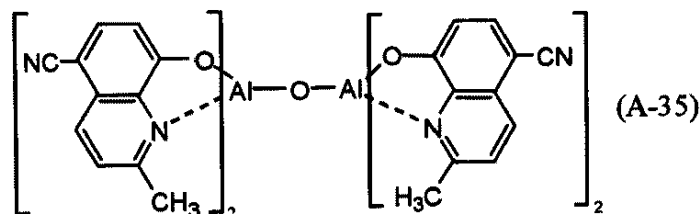
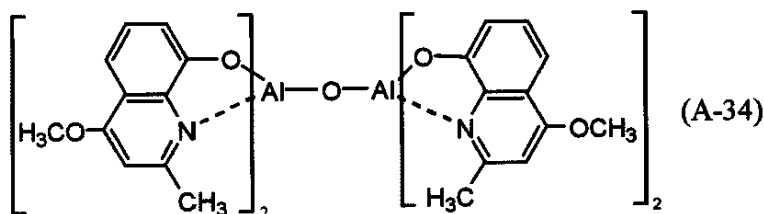
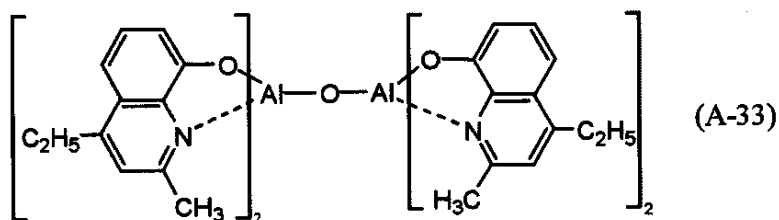
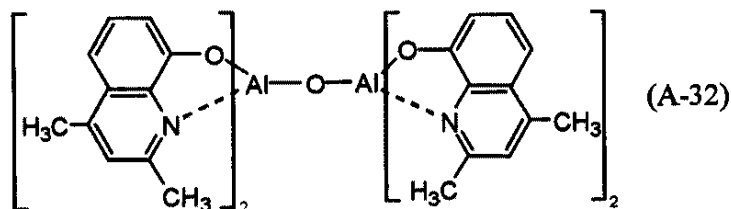
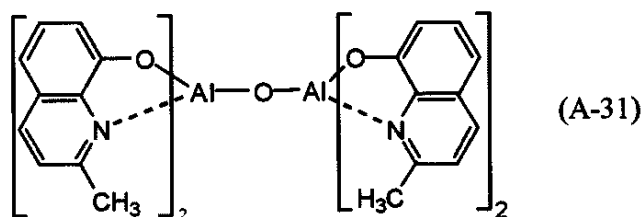
10

20

30

40

## 【化 19】



## 【0054】

前記芳香族含窒素環化合物の他の例として、含窒素5員環化合物も好ましい。含窒素5員環としては、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る。含窒素5員環化合物の骨格構造としては、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が挙げられ、下記一般式(B)で表される含窒素5員環化合物が特に好ましい。

10

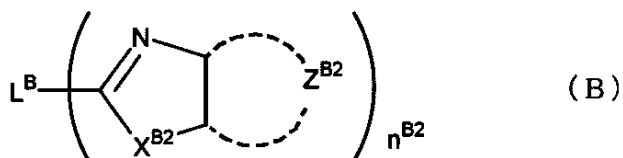
20

30

40

50

【化 2 0】



(B)

【0 0 5 5】

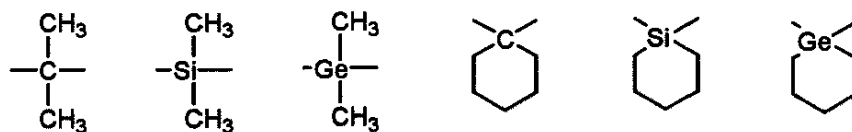
一般式 (B) 中、 $L^B$  は一価～四価の連結基を表し、例えば、炭素原子、ケイ素原子、  
窒素原子、ホウ素原子、酸素原子、硫黄原子、金属（例えば、バリウム、ベリリウム）、  
芳香族炭化水素環、芳香族複素環等が挙げられ、これらのうち炭素原子、窒素原子、ケイ  
素原子、ホウ素原子、酸素原子、硫黄原子、アリール基、芳香族複素環基が好ましく、炭  
素原子、ケイ素原子、アリール基、芳香族複素環基がさらに好ましい。

$L^B$  がアリール基または芳香族複素環基である場合、置換基を有していてもよい。該置  
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。

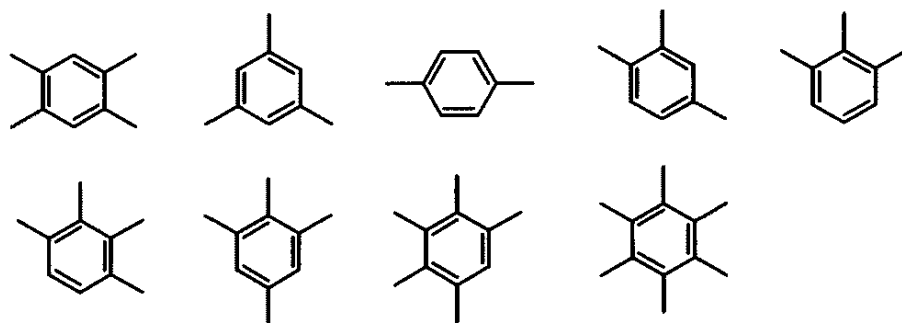
【0 0 5 6】

$L^B$  の具体例としては、以下に示すものが好ましい。

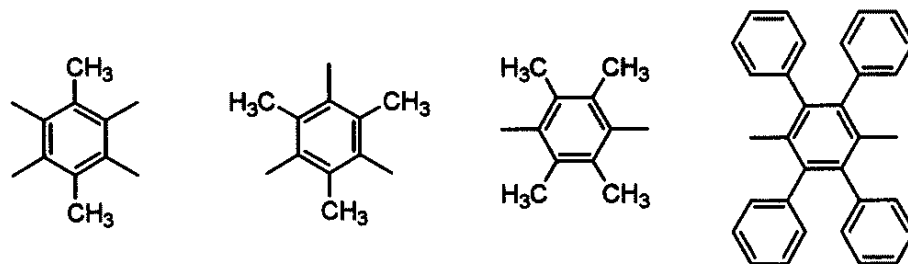
## 【化 2 1】



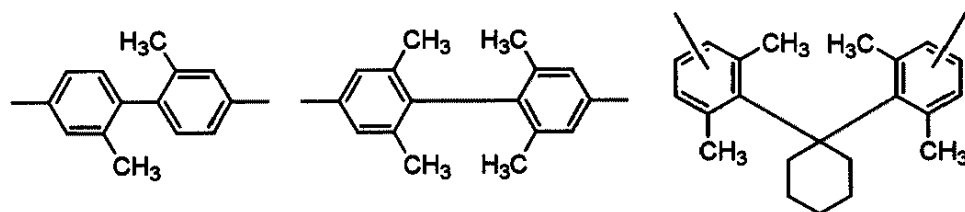
10



20



30



## 【0 0 5 7】

一般式 (B) における  $X^{B^2}$  は、 $-O-$ 、 $-S-$  又は  $=N-R^{B^2}$  を表し、好ましくは  $-O-$ 、 $=N-R^{B^2}$  であり、より好ましくは  $=N-R^{B^2}$  である。 $R^{B^2}$  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。

40

$R^{B^2}$  の脂肪族炭化水素基は、直鎖、分岐又は環状のアルキル基（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、エチル、イソプロピル、*t*-ブチル、*n*-オクチル、*n*-デシル、*n*-ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシル等が挙げられる。）  
、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、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニル等が挙げられる。）  
、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、3-ペンチニル等が挙げられる。）であり、アルキル基であると好ましい。

## 【0 0 5 8】

50

$R^{B2}$ のアリール基は、単環又は縮合環であり、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のアリール基であり、例えば、フェニル、2-メチルフェニル、3-メチルフェニル、4-メチルフェニル、2-メトキシフェニル、3-トリフルオロメチルフェニル、ペンタフルオロフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等が挙げられる。

#### 【0059】

$R^{B2}$ の複素環基は、単環又は縮合環であり、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の複素環基であり、好ましくは窒素原子、酸素原子、硫黄原子、セレン原子の少なくとも一つを含む芳香族複素環基である。複素環基の基本構造としては、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、キノリンであり、さらに好ましくはキノリンである。

#### 【0060】

$R^{B2}$ 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、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、また好ましい置換基も同様である。

$R^{B2}$ として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又はアリール基（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）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）である。

#### 【0061】

$Z^{B2}$ 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、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。

#### 【0062】

$Z^{B2}$ 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

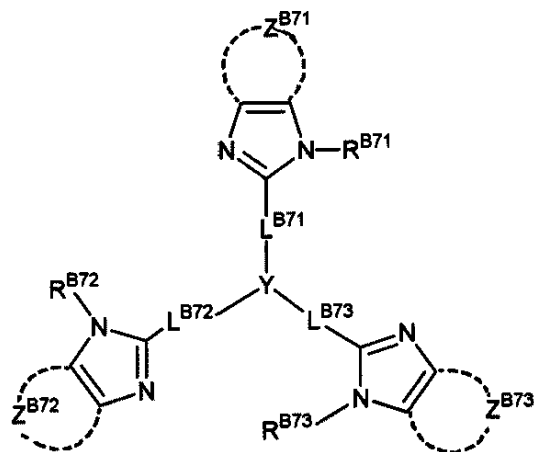
リール基、アルコキシ基、芳香族複素環基である。

$n^{B^2}$  は、1～6の整数、好ましくは1～4の整数、より好ましくは2または3である。

【0063】

前記一般式 (B) で表される含窒素5員環化合物は、下記一般式 (B') で表されることが好ましい。

【化22】



(B')

10

20

(B')

【0064】

一般式 (B') 中、 $R^{B71}$ 、 $R^{B72}$  及び  $R^{B73}$  は、それぞれ一般式 (B) の定義における  $R^{B2}$  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、それぞれ単結合または一般式 (B) における二価の  $L^B$  と同様であり、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二価の連結基であり、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。

Y は、窒素原子、1, 3, 5-ベ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-ベ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。

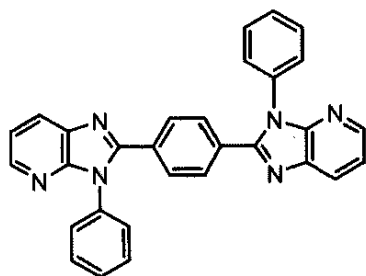
【0065】

一般式 (B) 又は (B') で表される含窒素5員環化合物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。

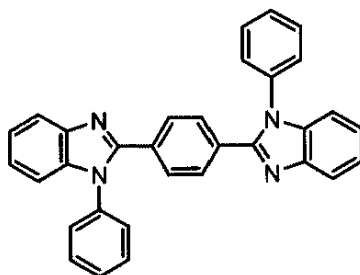
40

## 【化 2 3】

(B-1)

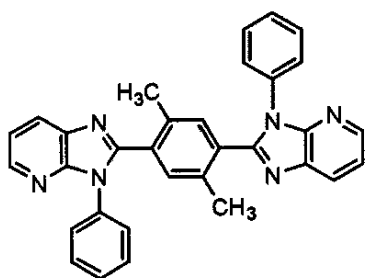


(B-5)

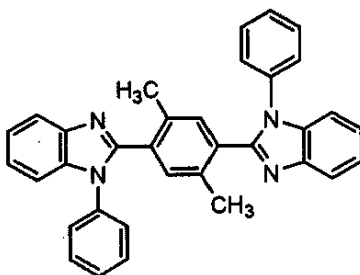


10

(B-2)

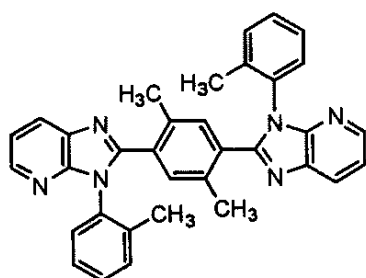


(B-6)

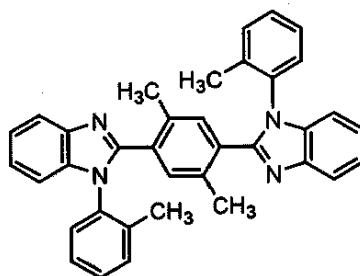


20

(B-3)

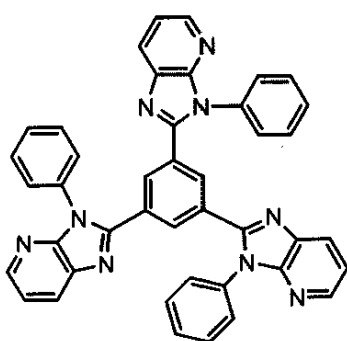


(B-7)

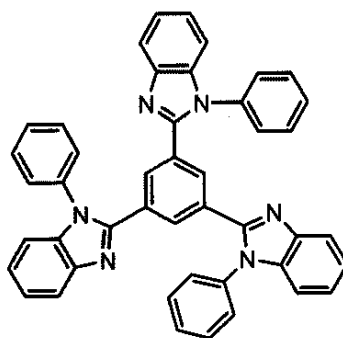


30

(B-4)



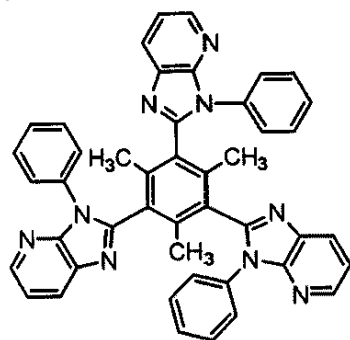
(B-8)



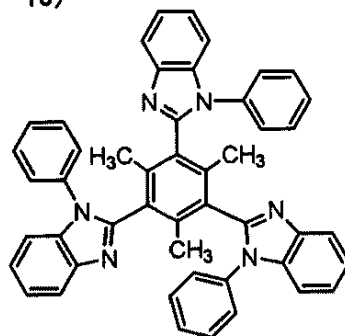
40

## 【化 2 4】

(B-9)

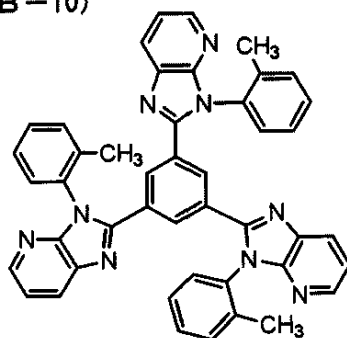


(B-13)

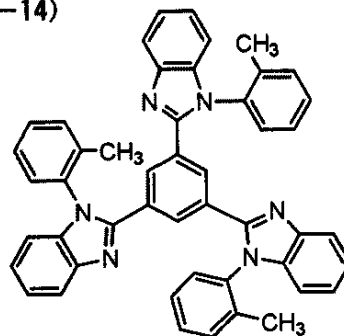


10

(B-10)

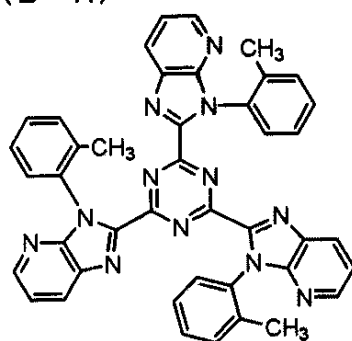


(B-14)

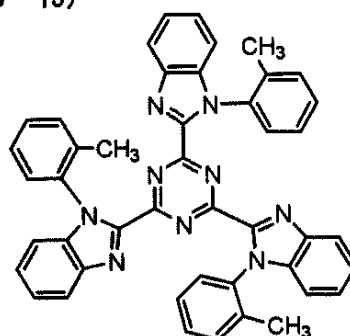


20

(B-11)

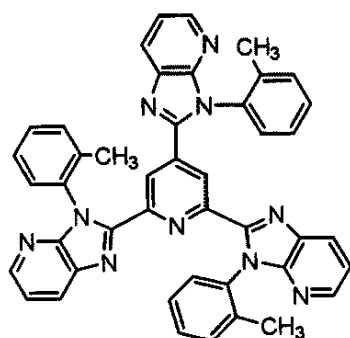


(B-15)

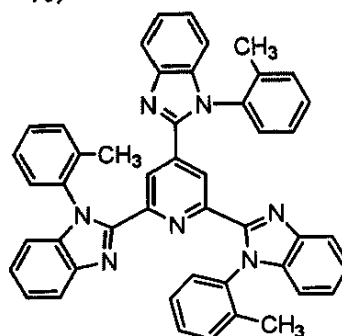


30

(B-12)



(B-16)



40

## 【0066】

電子注入層及び電子輸送層を構成する化合物としては、前記芳香族含窒素環化合物の他、電子欠乏性含窒素5または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、または、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電子欠乏性含窒素環化合物も挙げられる。好適な電子欠乏性含窒素5ま

50

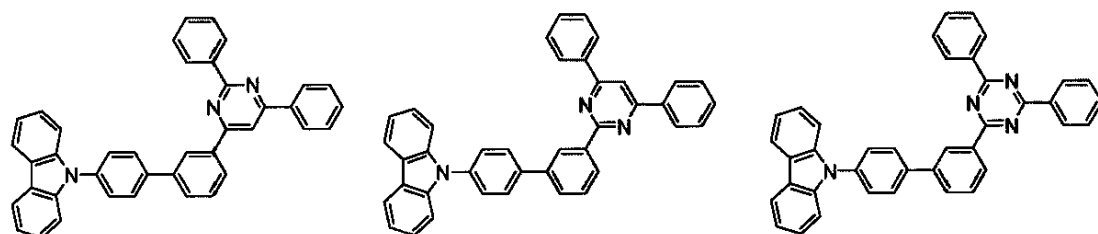
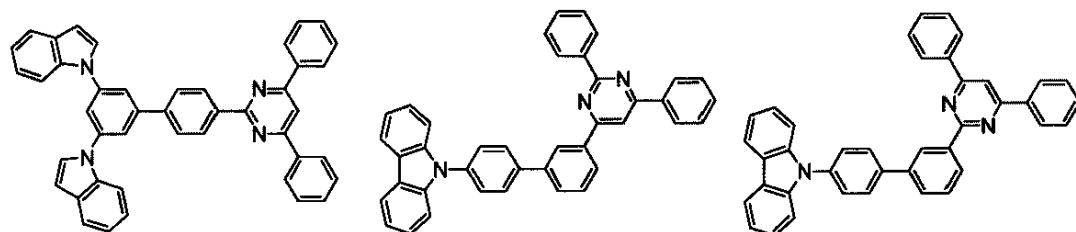
たは6員環としては、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、トリアゾール、オキサジアゾール、ピラゾール、イミダゾール、キノキサリン、ピロール骨格及び、それらがお互いに縮合したベンズイミダゾール、イミダゾピリジン等の骨格が挙げられる。これらの組み合わせの中で、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、またはトリアジン骨格と、カルバゾール、インドール、アザカルバゾール、またはキノキサリン骨格との組み合わせが好ましい。前述の各骨格は置換されていても無置換であってもよい。

【0067】

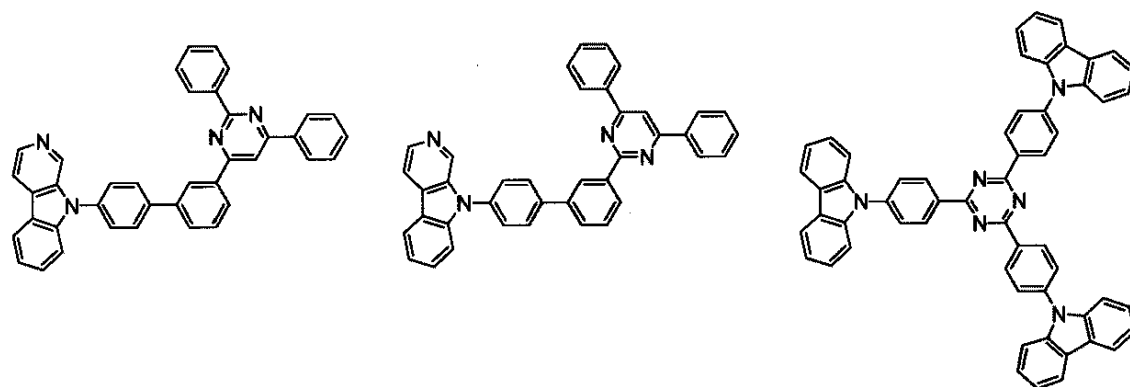
前記電子欠乏性含窒素環化合物の具体例を以下に示す。

【化25】

10

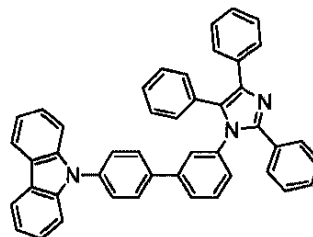
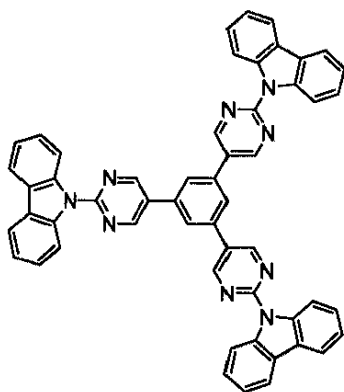
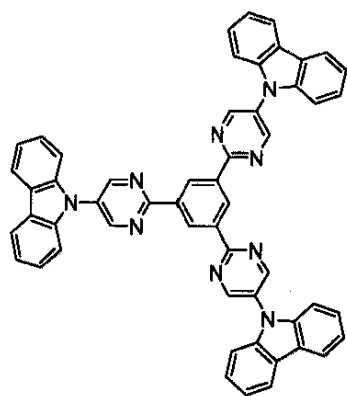


20

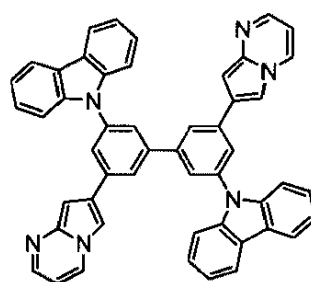
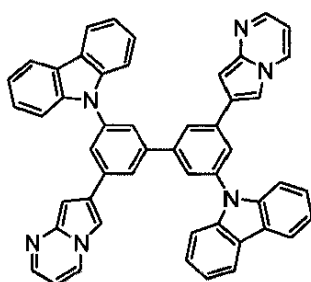
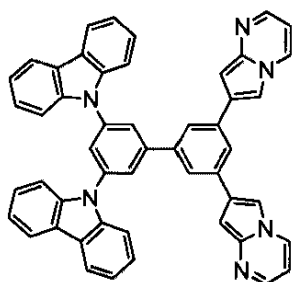


30

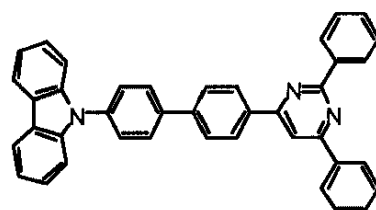
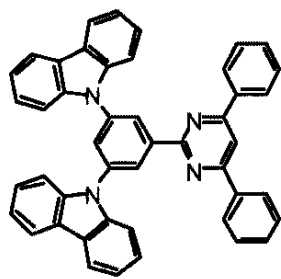
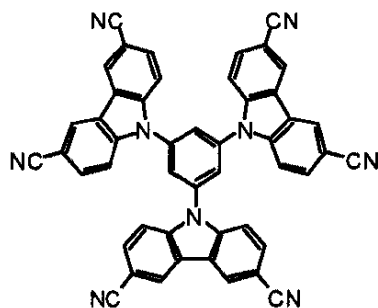
## 【化 2 6】



10



20



30

## 【0068】

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。前記材料は $\pi$ 電子密度が小さい含窒素ヘテロ環基を有する化合物であることが好ましい。

## 【0069】

また、前記電子注入層の構成成分として、前記含窒素環誘導体、前記電子欠乏性含窒素環化合物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を含むと、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。

40

## 【0070】

前記絶縁体としては、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、アルカリ金属ハロゲン化物及びアルカリ土類金属ハロゲン化物からなる群から選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金属化合物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。好ましいアルカリ金属カルコゲニドとしては、例えば、 $\text{Li}_2\text{O}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$ 、 $\text{Na}_2\text{S}$ 、 $\text{Na}_2\text{Se}$ 及び $\text{Na}_2\text{O}$ 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、 $\text{CaO}$ 、 $\text{BaO}$ 、 $\text{SrO}$ 、 $\text{BeO}$ 、 $\text{BaS}$ 及び $\text{CaSe}$ が挙げられる。また、好ましいアルカリ金属ハロゲン化物としては、例えば、 $\text{LiF}$ 、 $\text{NaF}$ 、 $\text{KF}$ 、 $\text{LiCl}$ 、 $\text{KCl}$ 及び $\text{Na}$

50

C l 等が挙げられる。また、好ましいアルカリ土類金属ハロゲン化物としては、例えば、 $\text{CaF}_2$ 、 $\text{BaF}_2$ 、 $\text{SrF}_2$ 、 $\text{MgF}_2$  及び  $\text{BeF}_2$  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。

#### 【0071】

前記半導体としては、Ba、Ca、Sr、Yb、Al、Ga、In、Li、Na、Cd、Mg、Si、Ta、Sb 及び Zn から選ば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の単独又は二種以上の組み合わせが挙げられる。また、電子注入層に含まれる無機化合物は、微結晶又は非晶質の絶縁性薄膜であることが好ましい。電子注入層がこのような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、  
10 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、前記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は、前述の還元性ドーパントを含有していても好ましい。

#### 【0072】

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好ましい。本発明に用いられる陽極材料としては、例えば、酸化インジウム錫合金 (ITO)、酸化錫 (NSA)、金、銀、白金、銅等が挙げられる。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、  
20 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。

#### 【0073】

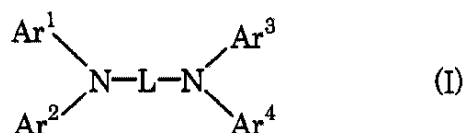
本発明の有機EL素子の各層の形成方法は特に限定されない。従来公知の真空蒸着法、スピコーティング法等を用いることができる。本発明の有機EL素子用材料を含有する有機薄膜層は、真空蒸着法、分子線蒸着法 (MBE法)、あるいは、ディッピング法、スピコーティング法、キャスト法、バーコート法、ロールコート法等による溶液の塗布等の公知の方法で形成することができる。

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  $1 \mu\text{m}$  の範囲が好ましい。  
30

#### 【0074】

正孔注入/輸送層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27】



40

#### 【0075】

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核原子数 5 ~ 50 のアリール基 (ヘテロアリール基を含む) を表す。

#### 【0076】

核原子数 5 ~ 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  
50

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-tert-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"-tert-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、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-インドル基、2-インドル基、3-インドル基、4-インドル基、5-インドル基、6-インドル基、7-インドル基、1-イソインドル基、2-イソインドル基、3-イソインドル基、4-イソインドル基、5-イソインドル基、6-イソインドル基、7-イソインドル基、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

エナジニル基、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、フルオレニル基である。

#### 【0077】

Lは連結基である。具体的には置換もしくは無置換の核原子数5～50のアリーレン基(ヘテロアリーレン基を含む)、もしくは2個以上の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個の基である。核原子数5～50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、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。

#### 【0078】

Lが2個以上の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は2個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個基の例としては、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。

#### 【0079】

$Ar^1 \sim Ar^4$ およびLの置換基としては、置換もしくは無置換の核原子数5～50のアリール基(ヘテロアリール基を含む)、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核原子数5～50のアリールオキシ基(ヘテロアリールオキシ基を含む)、置換もしくは無置換の核原子数5～50のアリールチオ基(ヘテロアリールチオ基を含む)、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核原子数5～50のアリール基(ヘテロアリール基を含む)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。

#### 【0080】

置換もしくは無置換の核原子数5～50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、フルオランテニル基、フルオレニル基、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 10  
 、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 20  
 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 30  
 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 40  
 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 50

、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。

#### 【0081】

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、ブロモメチル基、1-ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブロモ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、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、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。

#### 【0082】

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、ブロモメチル基、1-

ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブロモ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、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。

#### 【0083】

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、 $\alpha$ -ナフチルメチル基、1- $\alpha$ -ナフチルエチル基、2- $\alpha$ -ナフチルエチル基、1- $\alpha$ -ナフチルイソプロピル基、2- $\alpha$ -ナフチルイソプロピル基、 $\beta$ -ナフチルメチル基、1- $\beta$ -ナフチルエチル基、2- $\beta$ -ナフチルエチル基、1- $\beta$ -ナフチルイソプロピル基、2- $\beta$ -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。

#### 【0084】

置換又は無置換の核原子数5～50のアリールオキシ基は、-OY'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、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-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、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-ト-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-ト-ブチル-1-インドリル基、4-ト-ブチル-1-インドリル基、2-ト-ブチル-3-インドリル基、4-ト-ブチル-3-インドリル基等が挙げられる。

# 【0085】

置換又は無置換の各原子数5～50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  
 エニル-4-イル基、p-ターフエニル-3-イル基、p-ターフエニル-2-イル基、  
 m-ターフエニル-4-イル基、m-ターフエニル-3-イル基、m-ターフエニル-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-ターフエニル-4-イル基、2-ピロリル基、3-ピロリル基、ピラジ 10  
 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 20  
 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 30  
 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 40  
 エナンスロリン-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 50

ーフェナンスロリンー6-イル基、2, 7-フェナンスロリンー8-イル基、2, 7-フェナンスロリンー9-イル基、2, 7-フェナンスロリンー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-メチルピロールー1-イル基、2-メチルピロールー3-イル基、2-メチルピロールー4-イル基、2-メチルピロールー5-イル基、3-メチルピロールー1-イル基、3-メチルピロールー2-イル基、3-メチルピロールー4-イル基、3-メチルピロールー5-イル基、2- $\alpha$ -10  
 ーブチルピロールー4-イル基、3-(2-フェニルプロピル)ピロールー1-イル基、2-メチルー1-インドリル基、4-メチルー1-インドリル基、2-メチルー3-インドリル基、4-メチルー3-インドリル基、2- $\alpha$ -1-インドリル基、4- $\alpha$ -1-インドリル基、2- $\alpha$ -3-インドリル基、4- $\alpha$ -3-インドリル基等が挙げられる。

#### 【0086】

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、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。

#### 【0087】

置換または無置換の核原子数5~50のアリール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、 $p$ -ターフェニルー4-イル基、 $p$ -ターフェニルー3-イル基、 $p$ -ターフェニルー2-イル基、 $m$ -ターフェニルー4-イル基、 $m$ -ターフェニルー3-イル基、 $m$ -ターフェニルー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-メチルー2-ナフチル基、4-メチルー1-ナフチル基、4-メチルー1-アントリル基、4'-メチルピ 50

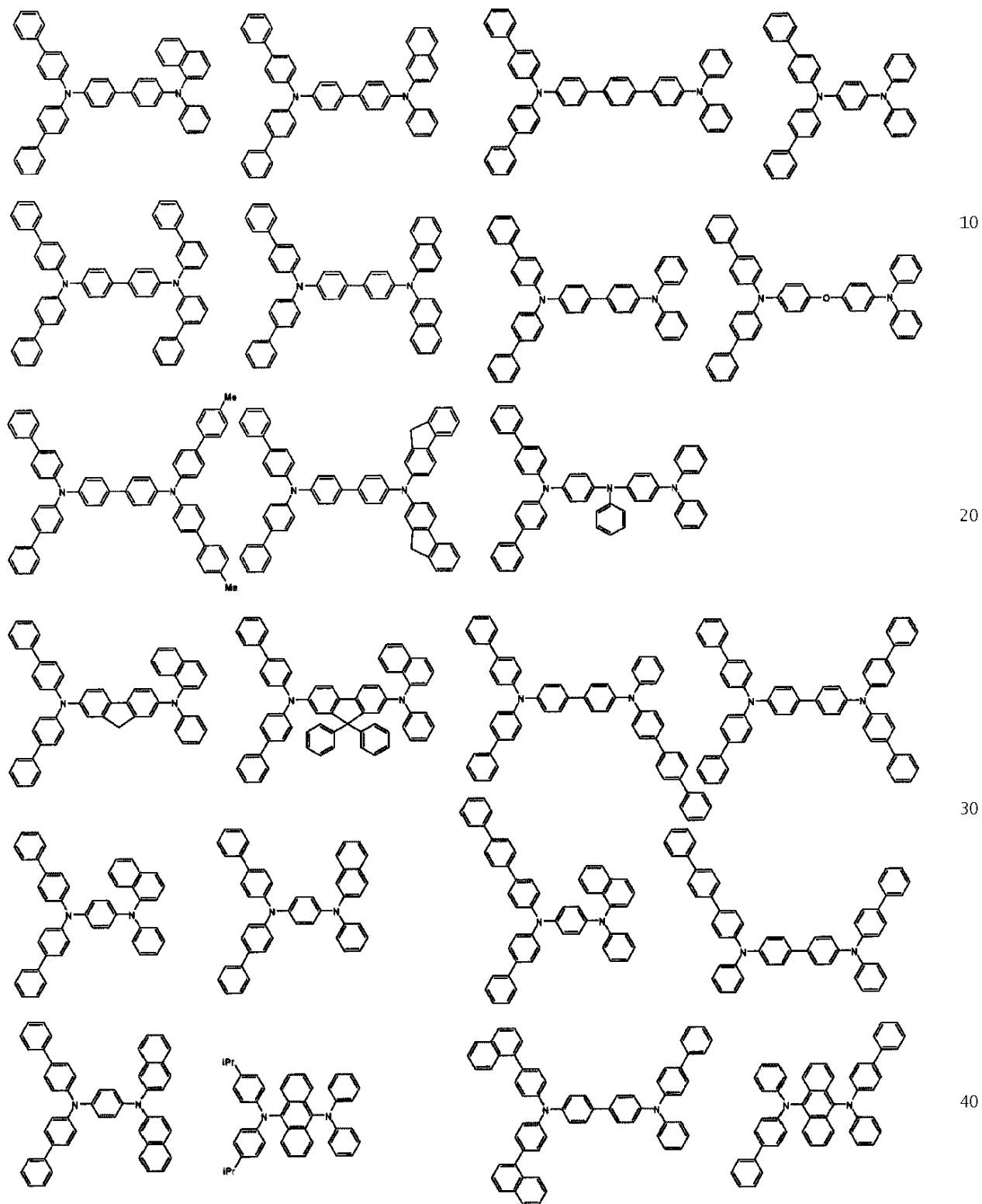
フェニルイル基、4''-t-ブチル-p-ターフェニル-4-イル基、2-ピロリル基、  
 3-ピロリル基、ピラジニル基、2-ピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル  
 基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インドリル基、5-インドリル基、6-  
 インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-  
 イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル  
 基、2-フリル基、3-フリル基、2-ベンゾフラニル基、3-ベンゾフラニル基、4-  
 ベンゾフラニル基、5-ベンゾフラニル基、6-ベンゾフラニル基、7-ベンゾフラニル  
 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  
 エナンスリジニル基、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  
 エナンスロリン-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  
 エナンスロリン-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  
 エノチアジニル基、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、  
 50

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。

【0088】

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。

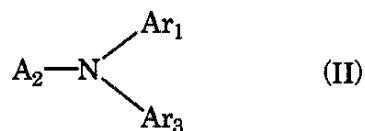
## 【化 2 8】



## 【0089】

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

## 【化 2 9】

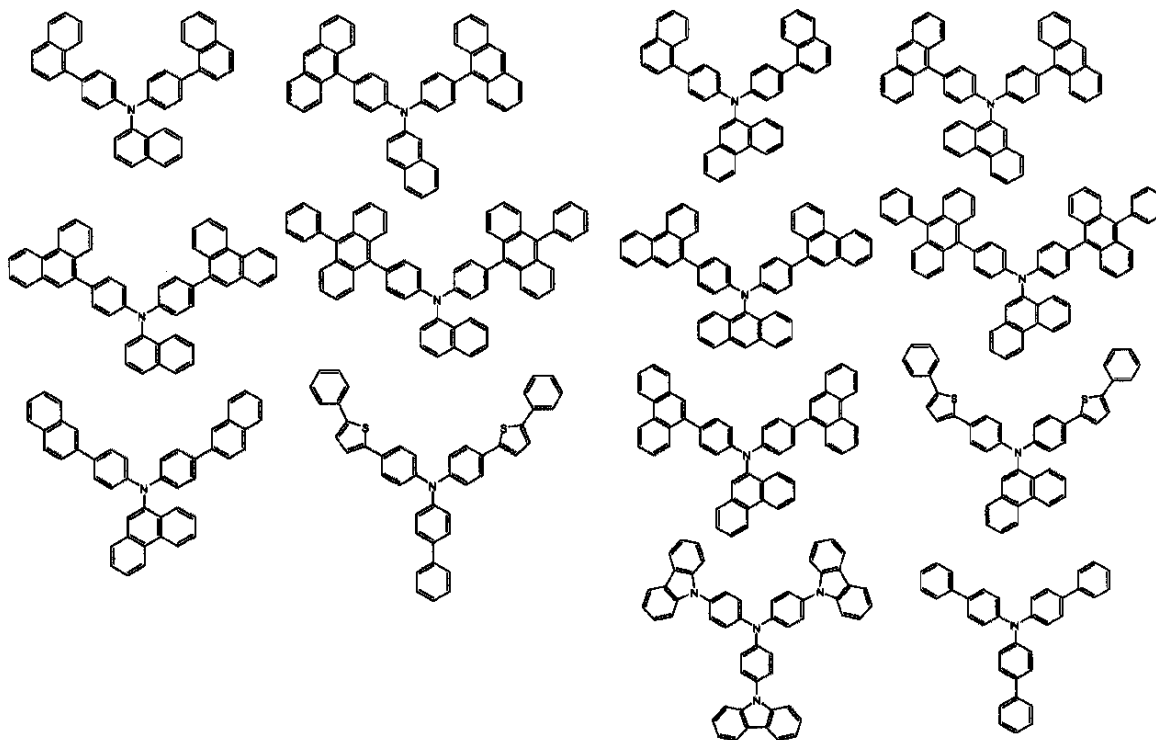


## 【0 0 9 0】

一般式 (II) 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 (II) 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 3 0】



20

30

## 【実施例】

## 【0 0 9 1】

次に、実施例を用いて本発明をさらに詳細に説明するが、本発明は下記実施例に限定されるものではない。

## 【0 0 9 2】

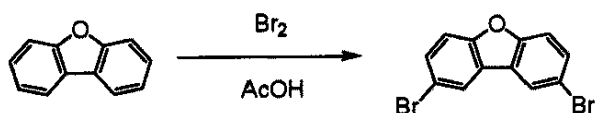
## 合成実施例 1

## 化合物 No. 4 の合成

40

## (1) 2,8-dibromodibenzofuran の合成

## 【化 3 1】



三口フラスコにdibenzofuran (100.91 g, 600 mmol)、AcOH 300 mlを入れ、40℃に加熱し、 $\text{Br}_2$  (191.8 g, 1200 mmol)/AcOH 300 ml溶液を滴下した。40℃にて9 h攪拌した後6 h還流させた。反応終了後、反応生成液を室温まで冷却し、水600 mlを加えた。析出物をろ

50

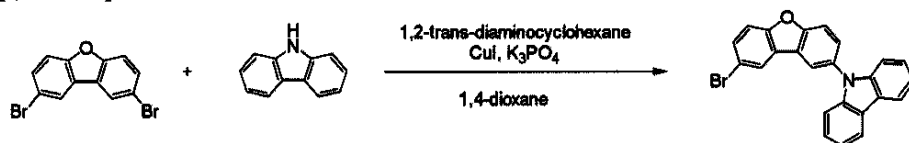
取し、これをトルエンに溶解させ、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、ろ過、濃縮した。得られた固形物をヘキサンから5回再結晶し目的物を得た。収量62.83 g 収率32%。

FDマスペクトル分析

$C_{12}H_6Br_2O$ : 理論値325.6、観測値326

(2) 2-bromo-8-carbazolyldibenzofuranの合成

【化32】



10

三口フラスコに2,8-dibromodibenzofuran (39.12 g, 120 mmol)、carbazole (20.07 g, 120 mmol)、 $K_3PO_4$  (50.94 g, 240 mmol)、copper iodide (11.43 g, 60 mmol)、1,2-trans-diaminocyclohexane (20.55 g, 180 mmol)、1,4-dioxane (120 ml) を入れ、9h還流させた。反応終了後、反応生成液を室温まで冷却した後、分液ロートを用いて $CH_2Cl_2$ にて抽出した。抽出液を無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、ろ過、濃縮した。得られた固形物をカラムクロマトグラフィー(ヘキサン：トルエン=8：2)にて精製した。上記操作はすべてアルゴン雰囲気下で行った。収量16.0 g 収率32%

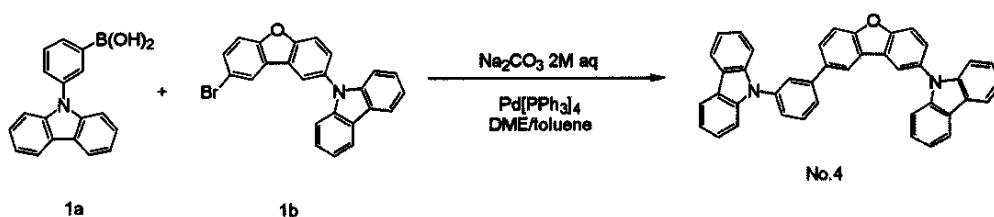
FDマスペクトル分析

$C_{24}H_{14}BrNO$ : 理論値412.3、観測値412

20

(3) 化合物No.4の合成

【化33】



三口フラスコに化合物1a (7.7 mmol, 2.21 g)、化合物1b (7 mmol, 2.89 g)、 $Na_2CO_3$  2M aq. (7 ml)、 $Pd[PPh_3]_4$  (0.35 mmol, 0.40 g)、DME (14 ml)、toluene (7 ml) を入れ、10 h還流させた。反応終了後、反応生成液を室温まで冷却し、分液ロートを用いて $CH_2Cl_2$ にて抽出した。抽出液を無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、ろ過、濃縮した。得られた固形物をカラムクロマトグラフィー(ヘキサン：トルエン=6：4)にて精製し、さらにエタノールで洗浄、真空乾燥して白色の固体を得た。上記操作はすべてアルゴン雰囲気下で行った。収量2.49 g 収率62%

30

FDマスペクトル分析

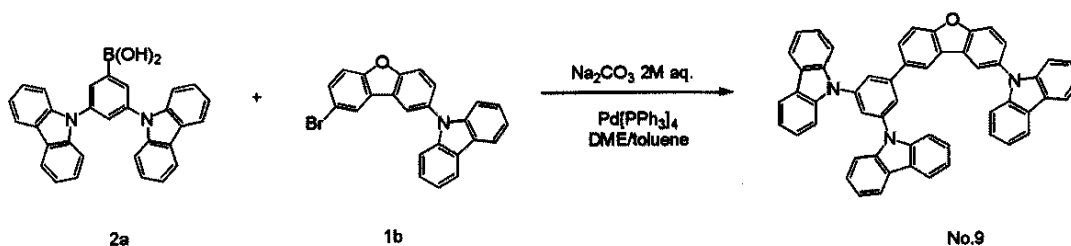
$C_{42}H_{26}N_2O$ : 理論値574.67、観測値574

【0093】

合成実施例2

化合物No. 9の合成

【化34】



50

40

三口フラスコに化合物2a (6.3 mmol, 2.85 g)、化合物1b (6 mmol, 2.47 g)、 $\text{Na}_2\text{CO}_3$  2 M aq.(6 ml)、 $\text{Pd}[\text{PPh}_3]_4$  (0.3 mmol, 0.35 g)、DME (12 ml)、toluene (6 ml)を入れ、9 h還流させた。反応終了後、反応生成液を室温まで冷却し、分液ロートを用いて $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ にて抽出した。抽出液を無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、ろ過、濃縮した。得られた固形物をカラムクロマトグラフィー(ヘキサン：トルエン=6：4)にて精製し、さらにエタノールで洗浄、真空乾燥して白色の固体を得た。上記操作はすべてアルゴン雰囲気で行った。収量2.12 g 収率48%

FDマスマスペクトル分析

$\text{C}_{54}\text{H}_{33}\text{N}_3\text{O}$ ：理論値739.9、観測値739

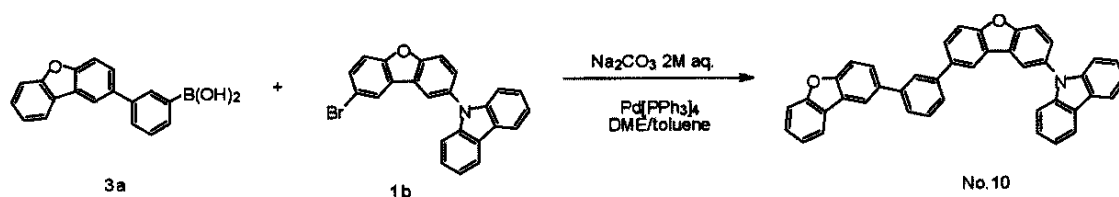
【0094】

10

合成実施例3

化合物No. 10の合成

【化35】



20

三口フラスコに化合物3a (7.35 mmol, 2.12 g)、化合物1b (7 mmol, 2.89 g)、 $\text{Na}_2\text{CO}_3$  2M aq.(7 ml)、 $\text{Pd}[\text{PPh}_3]_4$  (0.35 mmol, 0.40 g)、DME (14 ml)、toluene (7 ml)を入れ、9 h還流させた。反応終了後、反応生成液を室温まで冷却し、分液ロートを用いて $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ にて抽出した。抽出液を無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、ろ過、濃縮した。得られた固形物をカラムクロマトグラフィー(ヘキサン：トルエン=6：4)にて精製し、さらにエタノールで洗浄、真空乾燥して白色の固体を得た。上記操作はすべてアルゴン雰囲気で行った。収量2.55 g 収率63%

FDマスマスペクトル分析

$\text{C}_{42}\text{H}_{25}\text{NO}_2$ ：理論値575.7、観測値575

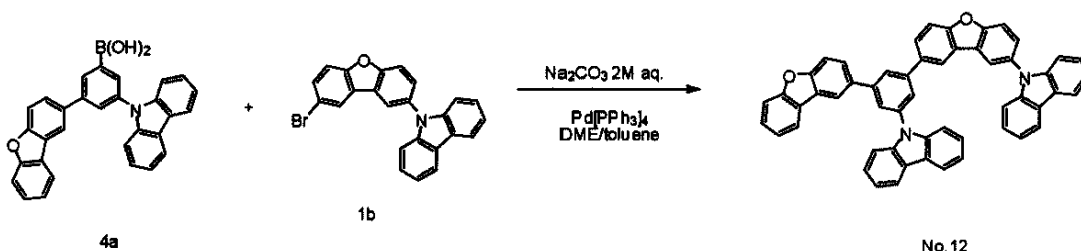
【0095】

30

合成実施例4

化合物No. 12の合成

【化36】



40

三口フラスコに化合物4a (6.6 mmol, 2.87 g)、化合物1b (6 mmol, 2.47 g)、 $\text{Na}_2\text{CO}_3$  2 M aq.(6 ml)、 $\text{Pd}[\text{PPh}_3]_4$  (0.3 mmol, 0.35 g)、DME (12 ml)、toluene (6 ml)を入れ、9 h還流させた。反応終了後、反応生成液を室温まで冷却し、分液ロートを用いて $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ にて抽出した。抽出液を無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、ろ過、濃縮した。得られた固形物をカラムクロマトグラフィー(ヘキサン：トルエン=6：4)にて精製し、さらにエタノールで洗浄、真空乾燥して白色の固体を得た。上記操作はすべてアルゴン雰囲気で行った。収量2.70 g 収率61%

FDマスマスペクトル分析

$\text{C}_{54}\text{H}_{32}\text{N}_2\text{O}_2$ ：理論値740.84、観測値740

50

## 【0096】

合成実施例1～4において合成した化合物の構造はFD-MS（フィールドディソープシオンマス分析）により確認した。

装置：HX110（日本電子社製）

条件：加速電圧 8 kV

スキャンレンジ  $m/z = 50 \sim 1500$

エミッタ種：カーボン

エミッタ電流：0 mA → 2 mA / 分 → 40 mA（10分保持）

## 【0097】

## 実施例1

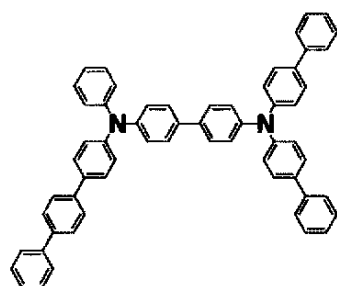
10

（有機EL素子の作製）

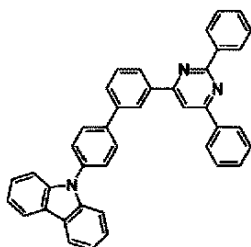
25 mm × 75 mm × 1.1 mm厚のITO透明電極付きガラス基板（旭硝子製）をイソプロピルアルコール中で5分間超音波洗浄した後、30分間UVオゾン洗浄した。洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に、前記透明電極を覆うようにして膜厚80 nmのHTM1（下記構造式参照）膜を抵抗加熱により成膜した。該HTM1膜は正孔輸送／正孔注入層として機能する。引き続いて、該HTM1膜上に、ホスト化合物として化合物No. 4およびドーパント化合物として錯体K-21を含む膜厚30 nmの共蒸着膜を抵抗加熱により成膜した。錯体K-21の濃度は7.5 wt %であった。この共蒸着膜は発光層として機能する。引き続き、該発光層上に膜厚10 nmのETM1膜、該ETM1膜上に膜厚20 nmのETM2膜を積層成膜した。該ETM1膜及びETM2膜はそれぞれ第一及び第二電子輸送層として機能する。次いで、成膜速度0.1 Å/minで膜厚0.5 nmのLiF電子注入性電極（陰極）を形成した。このLiF層上に金属Alを蒸着させ、膜厚150 nmの金属陰極を形成し有機EL素子を得た。

20

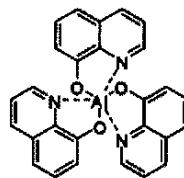
【化37】



HTM1



ETM1



ETM2

30

## 【0098】

（有機EL素子の発光性能評価）

以上のように作製した有機EL素子を直流電流駆動により発光させ、発光波長（λ）、輝度（L）、電流密度を測定し、電流効率（L/J）を求めた。電流密度1 mA/cm<sup>2</sup>時の結果を表1に示す。

40

## 【0099】

## 実施例2～8

実施例1においてホスト化合物No. 4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。発光性能評価結果を表1に示す。

## 【0100】

## 比較例1

50

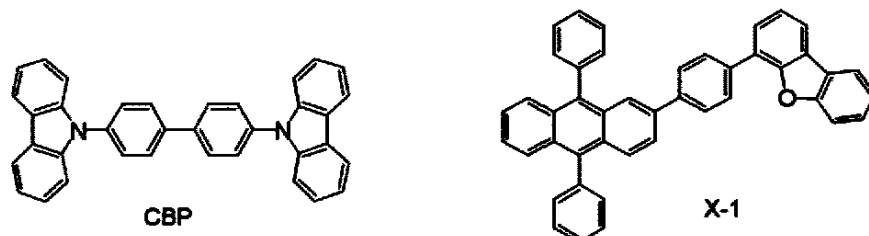
実施例 1 においてホスト化合物 No. 4 を用いる代わりにホスト材料として CBP を用いた以外は実施例 1 と同様にして有機 EL 素子を作製した。発光性能評価結果を表 1 に示す。

【0101】

比較例 2

実施例 1 においてホスト化合物 No. 4 を用いる代わりにホスト材料として国際公開特許 WO2005-113531 号公報記載の下記化合物 X-1 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。発光性能評価結果を表 1 に示す。

【化 38】



10

【表 1】

|       | ホスト<br>化合物 No. | 電圧<br>(V) | 輝度<br>(cd/m <sup>2</sup> ) | L / J<br>(cd/A) | EQE<br>(%) | 発光波長<br>(nm) |
|-------|----------------|-----------|----------------------------|-----------------|------------|--------------|
| 実施例 1 | No. 4          | 6.2       | 190                        | 19.0            | 8.3        | 481          |
| 実施例 2 | No. 9          | 6.6       | 182                        | 18.2            | 7.7        | 480          |
| 実施例 3 | No. 10         | 5.8       | 161                        | 16.1            | 6.9        | 480          |
| 実施例 4 | No. 12         | 6.0       | 170                        | 17.0            | 7.3        | 481          |
| 実施例 5 | No. 24         | 6.2       | 163                        | 16.3            | 7.0        | 479          |
| 実施例 6 | No. 26         | 6.1       | 165                        | 16.5            | 7.2        | 481          |
| 実施例 7 | No. 55         | 5.7       | 162                        | 16.2            | 6.9        | 481          |
| 実施例 8 | No. 64         | 6.1       | 152                        | 15.2            | 6.4        | 480          |
| 比較例 1 | CBP            | 6.0       | 82                         | 8.2             | 3.7        | 480          |
| 比較例 2 | X-1            | 発光せず      |                            |                 |            |              |

20

30

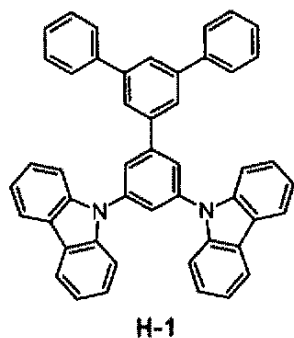
【0102】

実施例 9 ~ 11

(正孔輸送層への応用)

実施例 1 において正孔輸送／正孔注入層として HTM1 の代わりに表 2 に記載の化合物を用い、ホスト材料として下記 H-1 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。発光性能評価結果を表 2 に示す。

## 【化 3 9】



10

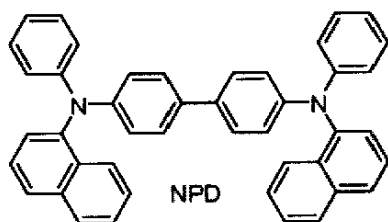
26

## 【0 1 0 3】

## 比較例 3

実施例 9 において正孔輸送性化合物 No. 4 を用いる代わりに正孔輸送性材料として NPD を用いた以外は実施例 9 と同様にして有機 EL 素子を作製した。発光性能評価結果を 20 表 2 に示す。

## 【化 4 0】



30

【表 2】

|        | 正孔輸送性化合物 No. | 電圧 (V) | 輝度 (cd/m <sup>2</sup> ) | L / J (cd/A) | EQE (%) | 発光波長 (nm) |
|--------|--------------|--------|-------------------------|--------------|---------|-----------|
| 実施例 9  | No. 4        | 6.2    | 148                     | 14.8         | 6.7     | 479       |
| 実施例 10 | No. 9        | 6.4    | 144                     | 14.4         | 6.5     | 479       |
| 実施例 11 | No. 54       | 6.3    | 150                     | 15.0         | 6.8     | 481       |
| 比較例 3  | NPD          | 6.5    | 101                     | 10.1         | 4.6     | 480       |

## 【0 1 0 4】

40

実施例で使用した化合物に比べて比較例で用いた化合物はいずれも電流効率が低い値を示し、効率よくドーパントを発光させることが出来なかった。

## 【0 1 0 5】

以上詳細に説明したように、本発明の一般式 (1) ~ (5) で表される化合物からなる有機 EL 素子用材料を利用すると、発光効率が高く、画素欠陥がなく、耐熱性に優れ、かつ寿命の長い有機 EL 素子が得られる。このため、該有機 EL 素子は、各種電子機器のディスプレイや光源等として極めて有用である。

## 【国際調査報告】

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                           |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>INTERNATIONAL SEARCH REPORT</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                             | International application No.<br><b>PCT/JP2007/072586</b>                                 |
| <b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b><br><b>H01L51/50 (2006.01) i</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                           |
| According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                           |
| <b>B. FIELDS SEARCHED</b><br>Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)<br><b>H01L51/50-51/56, 27/32</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                           |
| Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched<br><b>Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2008</b><br><b>Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2008 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2008</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                           |
| Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)<br><b>CAPLUS (STN)</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                           |
| <b>C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                           |
| Category*                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                                                                                                                          | Relevant to claim No.                                                                     |
| P, X                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | WO 2007/108362 A1 (Konica Minolta Holdings, Inc.),<br>27 September, 2007 (27.09.07),<br>Par. No. [0199] (exemplified compound HA-41);<br>Par. No. [0200] (exemplified compound HA-47);<br>Par. No. [0378]<br>(Family: none) | 1, 8-13, 15                                                                               |
| P, X                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | WO 2007/108459 A1 (Konica Minolta Holdings, Inc.),<br>27 September, 2007 (27.09.07),<br>Par. No. [0139] (exemplified compound H-36)<br>(Family: none)                                                                       | 1, 8-13, 15                                                                               |
| <input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input type="checkbox"/> See patent family annex.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                           |
| * Special categories of cited documents:<br>"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance<br>"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date<br>"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)<br>"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means<br>"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed<br>"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention<br>"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone<br>"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art<br>"&" document member of the same patent family |                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                           |
| Date of the actual completion of the international search<br><b>23 January, 2008 (23.01.08)</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                                                                                                             | Date of mailing of the international search report<br><b>05 February, 2008 (05.02.08)</b> |
| Name and mailing address of the ISA/<br><b>Japanese Patent Office</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                                                                                                                                                                                                                             | Authorized officer                                                                        |
| Facsimile No.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                                                                                                             | Telephone No.                                                                             |

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2007/072586

| C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT |                                                                                                                                                                                                          |                       |
|-------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| Category*                                             | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                                                                                                       | Relevant to claim No. |
| A                                                     | JP 2002-308837 A (Fuji Photo Film Co., Ltd.),<br>23 October, 2002 (23.10.02),<br>Par. Nos. [0001], [0024] (exemplified compounds<br>HT-8, HT-10); Par. No. [0052]<br>(Family: none)                      | 1-15                  |
| A                                                     | WO 2006/128800 A1 (CIBA SPECIALTY CHEMICALS<br>HOLDING INC.),<br>07 December, 2006 (07.12.06),<br>Page 45, line 11 to page 49, line 3; page 90<br>(compounds B-4, B-5)<br>(Family: none)                 | 1-15                  |
| A                                                     | JP 2005-112765 A (Mitsui Chemicals, Inc.),<br>28 April, 2005 (28.04.05),<br>Par. No. [0024] (exemplified compound 5);<br>Par. No. [0029] (exemplified compound 25);<br>Par. No. [0090]<br>(Family: none) | 1-15                  |

|                                                                                                                                                                                                                         |                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                |         |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|
| 国際調査報告                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                 | 国際出願番号 PCT/J P 2 0 0 7 / 0 7 2 5 8 6                                                                                                                                                                                           |         |
| A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))<br>Int.Cl. H01L51/50 (2006, 01) i                                                                                                                                                         |                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                |         |
| B. 調査を行った分野<br>調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))<br>Int.Cl. H01L51/50-51/56, 27/32                                                                                                                                             |                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                |         |
| 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの<br>日本国実用新案公報 1922-1996年<br>日本国公開実用新案公報 1971-2008年<br>日本国実用新案登録公報 1996-2008年<br>日本国登録実用新案公報 1994-2008年                                                                                        |                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                |         |
| 国際調査で使用了電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)<br>CAplus (STN)                                                                                                                                                                  |                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                |         |
| C. 関連すると認められる文献                                                                                                                                                                                                         |                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                |         |
| 引用文献の<br>カテゴリー*                                                                                                                                                                                                         | 引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示                                                                               | 関連する<br>請求の範囲の番号                                                                                                                                                                                                               |         |
| P、X                                                                                                                                                                                                                     | WO 2007/108362 A1 (コニカミノルタホールディングス株式会社) 2007.09.27、<br>段落【0199】(例示化合物HA-41)、【0200】(例示化合物HA-47)、【0378】 (ファミリーなし) | 1、8-13、15                                                                                                                                                                                                                      |         |
| P、X                                                                                                                                                                                                                     | WO 2007/108459 A1 (コニカミノルタホールディングス株式会社) 2007.09.27、<br>段落【0139】(例示化合物H-36)<br>(ファミリーなし)                         | 1、8-13、15                                                                                                                                                                                                                      |         |
| <input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。                                                                                                                     |                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                |         |
| * 引用文献のカテゴリー<br>「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの<br>「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの<br>「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)<br>「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献<br>「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願 |                                                                                                                 | の日の後に公表された文献<br>「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの<br>「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの<br>「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの<br>「&」 同一パテントファミリー文献 |         |
| 国際調査を完了した日<br>23.01.2008                                                                                                                                                                                                |                                                                                                                 | 国際調査報告の発送日<br>05.02.2008                                                                                                                                                                                                       |         |
| 国際調査機関の名称及びあて先<br>日本国特許庁 (ISA/J P)<br>郵便番号100-8915<br>東京都千代田区霞が関三丁目4番3号                                                                                                                                                 |                                                                                                                 | 特許庁審査官 (権限のある職員)<br>笹野 秀生                                                                                                                                                                                                      | 20 3911 |
|                                                                                                                                                                                                                         |                                                                                                                 | 電話番号 03-3581-1101                                                                                                                                                                                                              | 内線 3271 |

様式PCT/ISA/210 (第2ページ) (2007年4月)

| 国際調査報告                |                                                                                                                                                                    | 国際出願番号 PCT/J P 2 0 0 7 / 0 7 2 5 8 6 |
|-----------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------|
| C (続き) . 関連すると認められる文献 |                                                                                                                                                                    |                                      |
| 引用文献の<br>カテゴリー*       | 引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示                                                                                                                                  | 関連する<br>請求の範囲の番号                     |
| A                     | J P 2 0 0 2 - 3 0 8 8 3 7 A (富士写真フイルム株式会社)<br>2 0 0 2 . 1 0 . 2 3、段落【0 0 0 1】、【0 0 2 4】(例示化合物<br>HT-8、HT-10)、【0 0 5 2】<br>(ファミリーなし)                                | 1-15                                 |
| A                     | WO 2 0 0 6 / 1 2 8 8 0 0 A 1<br>(CIBA SPECIALTY CHEMICALS HOLDING INC.)<br>2 0 0 6 . 1 2 . 0 7、page45 line11-page49 line3,<br>page90 (compounds B-4、B-5) (ファミリーなし) | 1-15                                 |
| A                     | J P 2 0 0 5 - 1 1 2 7 6 5 A (三井化学株式会社)<br>2 0 0 5 . 0 4 . 2 8、段落【0 0 2 4】(例示化合物5)、【0 0 2<br>9】(例示化合物25)、【0 0 9 0】<br>(ファミリーなし)                                     | 1-15                                 |

フロントページの続き

(51)Int.Cl.

F I

テーマコード (参考)

C 0 7 D 405/14 C S P

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

(72)発明者 沼田 真樹

千葉県袖ヶ浦市上泉 1 2 8 0 番地

(72)発明者 福岡 賢一

千葉県袖ヶ浦市上泉 1 2 8 0 番地

F ターム (参考) 3K107 AA01 CC04 CC07 CC21 CC24 DD53 DD59 DD64 DD67 DD68

DD69 DD71 DD74 DD78 FF13 FF20

4C063 AA03 AA05 BB06 CC76 DD08 EE10

(注) この公表は、国際事務局 (W I P O) により国際公開された公報を基に作成したものである。なおこの公表に係る日本語特許出願 (日本語実用新案登録出願) の国際公開の効果は、特許法第 1 8 4 条の 1 0 第 1 項 (実用新案法第 4 8 条の 1 3 第 2 項) により生ずるものであり、本掲載とは関係ありません。

|                |                                                                                                                                                                                                                                                                   |         |            |
|----------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|------------|
| 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="#">JPWO2009008100A1</a>                                                                                                                                                                                                                                  | 公开(公告)日 | 2010-09-02 |
| 申请号            | JP2009522494                                                                                                                                                                                                                                                      | 申请日     | 2007-11-21 |
| [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                                                                                                                                                                                                                                                          |         |            |
| [标]发明人         | 岩隈俊裕<br>遠藤潤<br>沼田真樹<br>福岡賢一                                                                                                                                                                                                                                       |         |            |
| 发明人            | 岩隈 俊裕<br>遠藤 潤<br>沼田 真樹<br>福岡 賢一                                                                                                                                                                                                                                   |         |            |
| IPC分类号         | H01L51/50 C09K11/06 C07D405/14                                                                                                                                                                                                                                    |         |            |
| CPC分类号         | H01L51/0072 C07D405/14 C09K11/06 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/1059 C09K2211/1074 C09K2211/1088 C09K2211/185 C09K2211/186 H01L51/0059 H01L51/006 H01L51/0061 H01L51/0067 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/0081 H01L51/5016 H01L51/5088 H05B33/14 Y10S428/917 |         |            |
| FI分类号          | H05B33/14.B H05B33/22.B H05B33/22.D C09K11/06.660 C09K11/06.690 C07D405/14.CSP                                                                                                                                                                                    |         |            |
| F-TERM分类号      | 3K107/AA01 3K107/CC04 3K107/CC07 3K107/CC21 3K107/CC24 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD64 3K107/DD67 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/DD71 3K107/DD74 3K107/DD78 3K107/FF13 3K107/FF20 4C063/AA03 4C063/AA05 4C063/BB06 4C063/CC76 4C063/DD08 4C063/EE10                 |         |            |
| 代理人(译)         | 片岡誠<br>平澤健一                                                                                                                                                                                                                                                       |         |            |
| 优先权            | 2007181142 2007-07-10 JP                                                                                                                                                                                                                                          |         |            |
| 其他公开文献         | JP5619418B2                                                                                                                                                                                                                                                       |         |            |
| 外部链接           | <a href="#">Espacenet</a>                                                                                                                                                                                                                                         |         |            |

#### 摘要(译)

用于与至少一种磷光金属配合物组合使用的本发明的有机电致发光装置的材料具有特定的杂环结构。用于有机电致发光器件的材料用作主体材料或空穴传输材料。本发明提供一种有机电致发光元件，其具有阳极，阴极和夹在阳极与阴极之间的具有1层以上的有机薄膜层，至少1层有机薄膜层含有有机电致发光元件用材料，发光效率高，像素缺陷少，耐热性优异，寿命长。

