

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第5317471号  
(P5317471)

(45) 発行日 平成25年10月16日(2013.10.16)

(24) 登録日 平成25年7月19日(2013.7.19)

(51) Int. Cl.

F I

H O 1 L 51/50	(2006.01)	H O 5 B 33/14	B
C O 9 K 11/06	(2006.01)	H O 5 B 33/22	A
C O 7 D 405/14	(2006.01)	C O 9 K 11/06	6 9 0
C O 7 D 403/14	(2006.01)	C O 9 K 11/06	6 6 0
		C O 7 D 405/14	

請求項の数 14 (全 50 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2007-337967 (P2007-337967)  
 (22) 出願日 平成19年12月27日(2007.12.27)  
 (65) 公開番号 特開2009-155300 (P2009-155300A)  
 (43) 公開日 平成21年7月16日(2009.7.16)  
 審査請求日 平成22年10月5日(2010.10.5)

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

審査官 富永 保

最終頁に続く

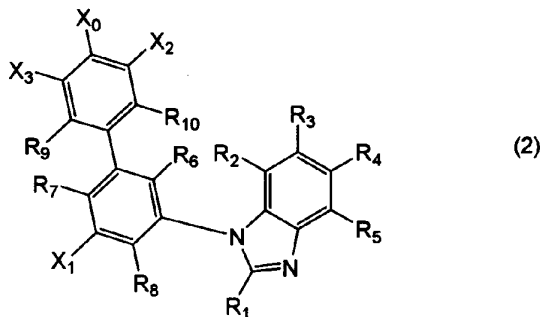
(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス素子用材料及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記式(2)で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【化1】



〔式(2)において、 $R_1$ は、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核炭素数6~40の非縮合アリール基、または、置換基を有してもよい核炭素数10~12の縮合アリール基である。〕

$R_2 \sim R_{10}$ 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3~40のシクロアルキル基、置換基を有してもよい核原子数5~20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核炭素数6~40の非縮合アリール基、置換基を

有してもよい核炭素数 10 ~ 12 の縮合アリール基、置換基を有してもよい核炭素数 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 5 ~ 20 のヘテロアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数 2 ~ 40 のアルケニル基、置換基を有してもよい核炭素数 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 のケトアリール基、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。

$X_0 \sim X_3$  はそれぞれ独立に、水素原子、置換基を有してもよい核炭素数 6 ~ 40 の非縮合アリール基、置換基を有してもよい核炭素数 10 ~ 12 の縮合アリール基、ベンゾイミダゾリル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、または、ジベンゾチオフェニル基である。

ただし、 $X_0 \sim X_3$  の少なくとも一つは、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、または、ジベンゾチオフェニル基である。]

【請求項 2】

前記式 (2) 中の  $R_1$  が、置換基を有してもよい核炭素数 6 ~ 40 の非縮合アリール基である、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。

【請求項 3】

前記式 (2) 中の  $R_1$  が、置換基を有してもよいフェニル基である、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。

【請求項 4】

前記式 (2) 中の  $X_0 \sim X_3$  の少なくとも一つは、カルバゾリル基、または、ジベンゾフラニル基である、請求項 1 ~ 3 のいずれか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 5】

前記式 (2) 中の  $X_0 \sim X_3$  が、それぞれ独立に、水素原子、カルバゾリル基、または、ジベンゾフラニル基である、請求項 1 ~ 4 のいずれか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 6】

3 重項のエネルギーギャップが  $2.2 \sim 3.2$  eV である請求項 1 ~ 5 のいずれか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】

りん光発光性材料と共に用いるホスト材料またはりん光発光性材料と共に用いる電子輸送材料である請求項 6 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、発光層を含む一層以上の有機薄膜層を有し、前記有機薄膜層の少なくとも一層が、請求項 1 ~ 7 のいずれか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、前記有機エレクトロルミネッセンス素子用材料をホスト材料として含有する請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 10】

前記発光層がりん光発光性材料であるイリジウム (Ir)、オスミウム (Os) および白金 (Pt) から選ばれる金属を含有する化合物を有する請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 11】

前記発光層が、最高発光輝度の波長が 500 nm 以下である青色系金属錯体を含有する請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 12】

前記発光層と陰極との間に電子注入層を有し、該電子注入層が含窒素環誘導体を主成分として含有する請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

20

30

40

50

## 【請求項 13】

前記発光層と陰極との間に電子輸送層を有し、該電子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 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

## 【請求項 14】

前記陰極と前記有機薄膜層との界面領域に還元性ドーパントを有する請求項 8 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0001】

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

10

## 【背景技術】

## 【0002】

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

20

## 【0003】

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

30

また、近年、有機 EL 素子の発光層に蛍光材料の他に、りん光発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発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、りん光発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、ジベンゾフラン骨格、ジベンゾチオフェン骨格を有するホスト材が知られている。

## 【0005】

特許文献 1 には、2 つのベンゾイミダゾール骨格をパラフェニレン、メタフェニレン、パラピフェニレン等の連結基で結合させた化合物が記載されている。しかしながら本願のようにりん光発光性材料とともに用いるホスト材料または電子輸送材料としての該化合物

50

の有効性はなんら記載されていない。

【0006】

特許文献2には、ベンゾイミダゾール骨格を連結基を介してカルバゾリル基を含むアミノ基に結合させた化合物が記載されている。しかし特許文献2には蛍光型有機EL素子の発光層に該化合物を用いた場合が記載されているに過ぎず、本願のようにりん光発光性材料とともに用いるホスト材料または電子輸送材料としての該化合物の有効性はなんら記載されていない。

【0007】

特許文献3には、3つのベンゾイミダゾール骨格がその窒素原子を介してメタ-ターフェニレン化合物に結合している化合物が記載されている。しかしながらりん光発光性材料とともに用いるホスト材料または電子輸送材料としての有効性を示すデータは記載されていない。

10

【0008】

特許文献4には、2つのベンゾイミダゾールの窒素原子同士を2価の直鎖アルキル基、アラルキル基、アリール基を介して連結させた化合物が記載されている。しかし、本願のようにりん光発光性材料とともに用いるホスト材料または電子輸送材料としての有効性はなんら記載されていない。

【0009】

特許文献5には、ベンゾイミダゾール骨格を有する化合物が電子輸送材料として機能することが記載されている。しかしこれらの化合物はアントラセン骨格を有することが特徴である。エネルギーレベルの高いりん光素子においては、アントラセン骨格を有する化合物は3重項エネルギーギャップが小さく、発光層からの励起エネルギーの漏洩が起こりやすい為、高い発光効率を得られにくい。

20

【0010】

特許文献6には、ベンゾイミダゾールがアントラセン骨格と連結基を介して、または直接結合した化合物が記載されている。しかしこれらの化合物はアントラセン骨格を有することが特徴である。エネルギーレベルの高いりん光素子においては、アントラセン骨格を有する化合物は3重項エネルギーギャップが小さく、発光層からの励起エネルギーの漏洩が起こりやすい為、高い発光効率を得られにくい。また、りん光発光性材料とともに用いるホスト材料または電子輸送材料としての該化合物の有効性もなんら記載されていない。

30

【0011】

【特許文献1】特開2000-95766号公報

【特許文献2】特開2001-247858号公報

【特許文献3】特開2005-68068号公報

【特許文献4】特開2000-323278号公報

【特許文献5】WO2007/111262

【特許文献6】WO2003/060956

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0012】

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。

40

【課題を解決するための手段】

【0013】

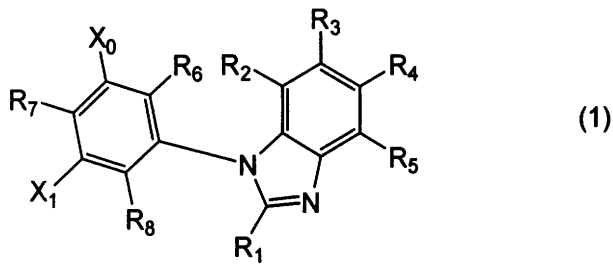
本発明者らは、前記目的を達成するために鋭意研究を重ねた結果、下記式(1)~(3)のいずれかで表される化合物を有機EL素子用材料として用いることにより、画素欠陥が無く、高効率、高耐熱かつ長寿命である有機EL素子が得られることを見出し、本発明を解決するに至った。

【0014】

50

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

【化1】



10

〔式(1)において、 $R_1 \sim R_8$ 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3~40のシクロアルキル基、置換基を有してもよい核原子数5~20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核炭素数6~40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい核炭素数10~12の縮合アリール基、置換基を有してもよい核炭素数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5~20のヘテロアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数2~40のアルケニル基、置換基を有してもよい核炭素数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1~40のハロゲン化アルキル基、または、シアノ基である。

20

$X_0$ および $X_1$ はそれぞれ独立に、水素原子、置換基を有してもよい核炭素数6~40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい核炭素数10~12の縮合アリール基、ベンゾイミダゾリル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、または、ジベンゾチオフェニル基である。

ただし、 $X_0$ および $X_1$ の少なくとも一つは、ベンゾイミダゾリル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、または、ジベンゾチオフェニル基であり、

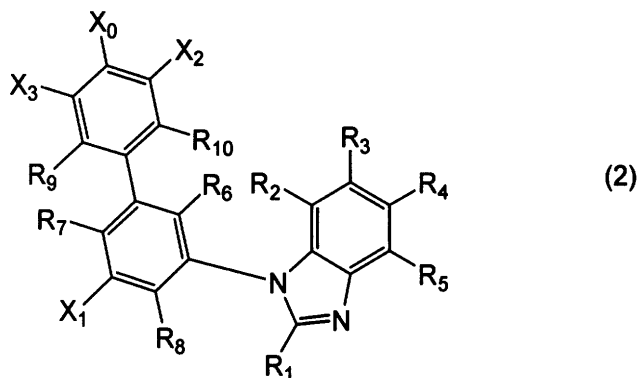
$X_0$ と $X_1$ が同時にベンゾイミダゾリル基である場合はない。]

30

【0015】

また、本発明は、下記式(2)で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料である。

【化2】



40

〔式(2)において、 $R_1 \sim R_{10}$ は、前記式(1)の $R_1 \sim R_8$ と同じである。

$X_0 \sim X_3$ は、前記式(1)の $X_0$ 、 $X_1$ と同じであり、

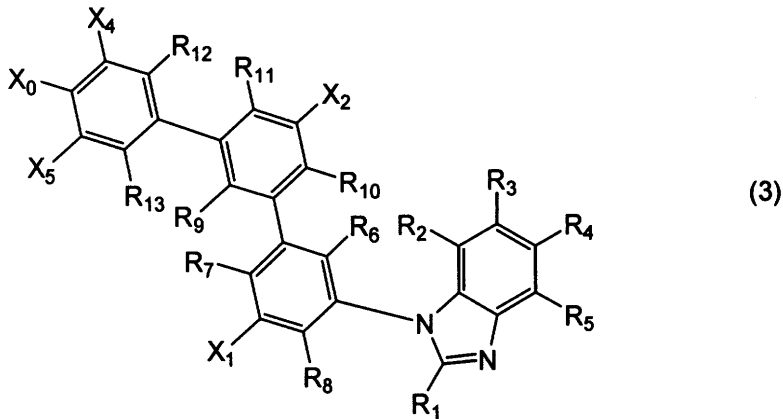
$X_0 \sim X_3$ の少なくとも一つは、ベンゾイミダゾリル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、または、ジベンゾチオフェニル基である。]

【0016】

50

また、本発明は、下記式(3)で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料である。

【化3】



10

【式(3)において、 $R_1 \sim R_{13}$ は、前記式(1)の $R_1 \sim R_8$ と同じである。

$X_0 \sim X_2$ および $X_4 \sim X_5$ は、前記式(1)の $X_0$ 、 $X_1$ と同じであり、

$X_0 \sim X_2$ および $X_4 \sim X_5$ の少なくとも一つは、ベンゾイミダゾリル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、または、ジベンゾチオフェニル基である。

ただし、 $X_2$ と $X_4$ または $X_2$ と $X_5$ が同時にベンゾイミダゾリル基になる場合はない。】

20

【0017】

さらに、本発明は、陰極と陽極間に、発光層を含む一層以上の有機薄膜層を有し、前記有機薄膜層の少なくとも一層が、上記式(1)~(3)で表されるいずれか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である。

【発明の効果】

【0018】

本発明によれば、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ができる。

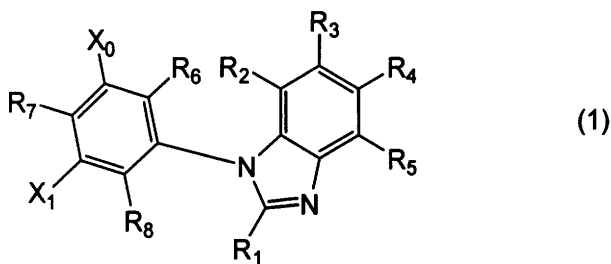
【発明を実施するための最良の形態】

【0019】

本発明の一態様において、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料は下記式(1)で表される。

30

【化4】



40

【0020】

式(1)において、 $R_1 \sim R_8$ 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3~40のシクロアルキル基、置換基を有してもよい核原子数5~20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核炭素数6~40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい核炭素数10~12の縮合アリール基、置換基を有してもよい核炭素数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5~20のヘテロアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数2~40のアルケニル基、置換基を有してもよい核炭素数6~40のアリー

50

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 のケトアリアル基、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。

$X_0$  および  $X_1$  はそれぞれ独立に、水素原子、置換基を有してもよい核炭素数 6 ~ 40 の非縮合アリアル基、置換基を有してもよい核炭素数 10 ~ 12 の縮合アリアル基、ベンゾイミダゾリル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、または、ジベンゾチオフェニル基である。ただし、 $X_0$  および  $X_1$  の少なくとも一つは、ベンゾイミダゾリル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、または、ジベンゾチオフェニル基であり、 $X_0$  と  $X_1$  が同時にベンゾイミダゾリル基である場合はない。

10

#### 【0021】

本発明において、“核炭素”とは飽和環、不飽和環または芳香環を構成する炭素原子を意味し、“核原子”とはヘテロ環（飽和環、不飽和環および芳香環を含む）を構成する炭素原子およびヘテロ原子を意味する。

#### 【0022】

式(1)の  $R_1 \sim R_8$  が表す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。

#### 【0023】

式(1)の  $R_1 \sim R_8$  が表す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*-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、プロモメチル基、1-プロモエチル基、2-プロモエチル基、2-プロモイソブチル基、1, 2-ジプロモエチル基、1, 3-ジプロモイソプロピル基、2, 3-ジプロモ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリプロモプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2-ジヨードエチル基、1, 3-ジヨードイソプロピル基、2, 3-ジヨード-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1-アミノエチル基、2-アミノエチル基、2-アミノイソブチル基、1, 2-ジアミノエチル基、1, 3-ジアミノイソプロピル基、2, 3-ジアミノ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1, 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロエチル基、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る。

20

30

40

#### 【0024】

これらの中でも好ましくは、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

50

ルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、または、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基である。

【0025】

式(1)の $R_1 \sim R_8$ が表す置換基を有してもよい炭素数3~40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、3,5-テトラメチルシクロヘキシル基等が挙げられ、シクロヘキシル基、シクロオクチル基、および、3,5-テトラメチルシクロヘキシル基が好ましい。

【0026】

式(1)の $R_1 \sim R_8$ が表す置換基を有してもよい核原子数5~20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、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

10

20

30

40

50

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 - 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、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、各種アザカルバゾリル基 (窒素原子数 : 2 ~ 5) 等が挙げられる。

10

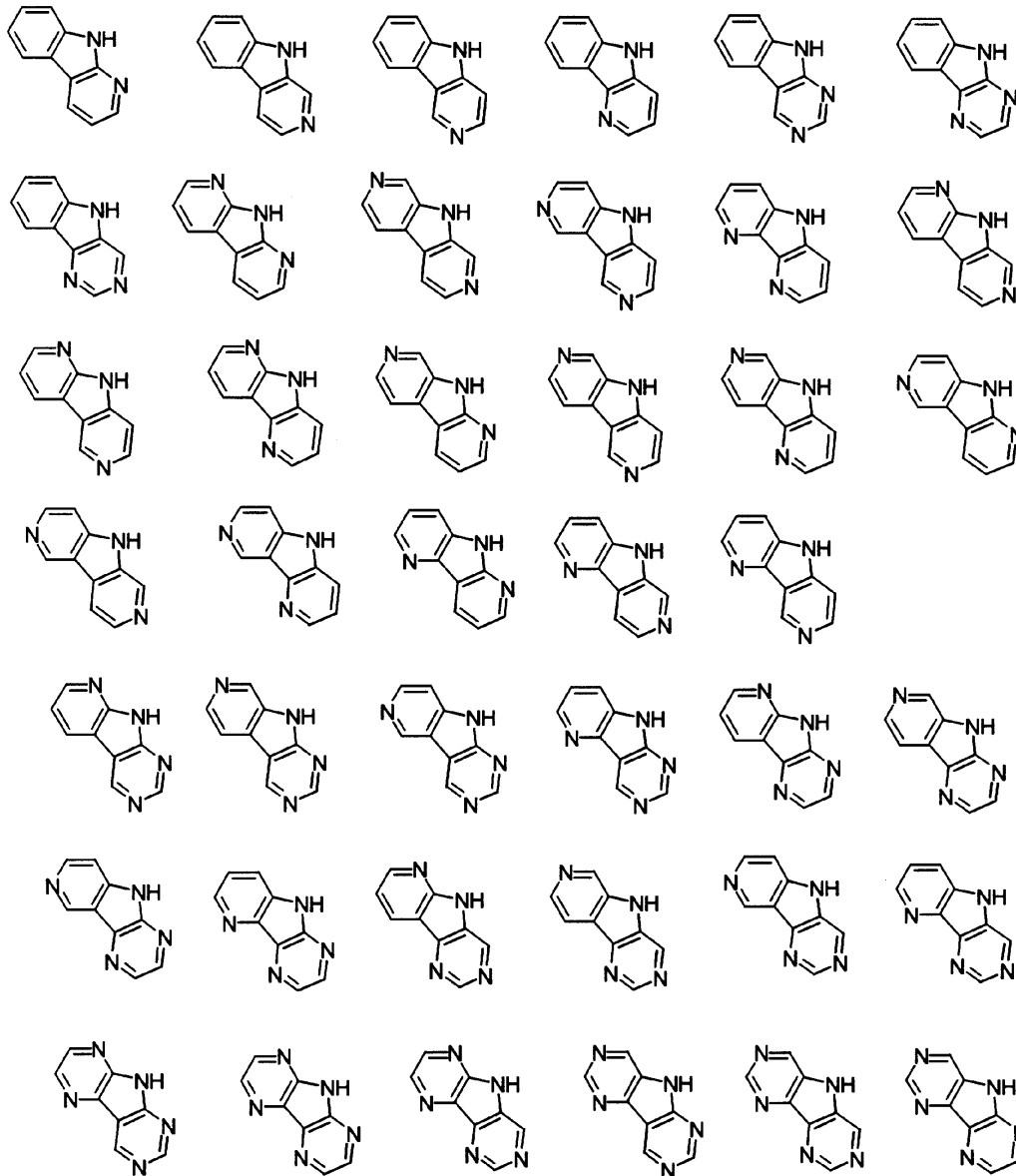
20

## 【0027】

前記 2 ~ 5 個の窒素原子を含むアザカルバゾリル基としては、下記アザカルバゾールから誘導される 1 価の基が挙げられる。結合手はいずれの窒素原子、いずれの炭素原子上に存在していてもよく、また、置換されていてもよい。

30

## 【化5】



## 【0028】

上記複素環基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、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-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、または、各種アザカルバゾリル基である。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 2 9 】

式(1)の $R_1 \sim R_8$ が表す置換基を有してもよい炭素数1~40のアルコキシ基は-OYと表される基である。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。

## 【 0 0 3 0 】

式(1)の $R_1 \sim R_8$ が表す置換基を有してもよい核炭素数6~40の非縮合アリール基としては、例えば、フェニル基、ビフェニル-2-イル基、ビフェニル-3-イル基、ビフェニル-4-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、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、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、および、m-クウォーターフェニル基等が挙げられる。

10

## 【 0 0 3 1 】

これらの中でも好ましくは、フェニル基、ビフェニル-2-イル基、ビフェニル-3-イル基、ビフェニル-4-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-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。

## 【 0 0 3 2 】

式(1)の $R_1 \sim R_8$ が表す置換基を有してもよい核炭素数10~12の縮合アリール基としては、例えば、1-ナフチル基、2-ナフチル基が挙げられる。

20

## 【 0 0 3 3 】

式(1)の $R_1 \sim R_8$ が表す置換基を有してもよい核炭素数6~20のアリールオキシ基は-OArと表される基である。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。

## 【 0 0 3 4 】

式(1)の $R_1 \sim R_8$ が表す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-t-ブチル基、-ナフチルメチル基、1--ナフチルエチル基、2--ナフチルエチル基、1--ナフチルイソプロピル基、2--ナフチルイソプロピル基、-ナフチルメチル基、1--ナフチルエチル基、2--ナフチルエチル基、1--ナフチルイソプロピル基、2--ナフチルイソプロピル基、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-プロモベンジル基、m-プロモベンジル基、o-プロモベンジル基、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。

30

40

## 【 0 0 3 5 】

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。

## 【 0 0 3 6 】

式(1)の $R_1 \sim R_8$ が表す置換基を有してもよい炭素数5~20のヘテロアラルキル基としては、例えば、1-ピロリルメチル基、2-(1-ピロリル)エチル基等が挙げられる。

50

## 【 0 0 3 7 】

式(1)の $R_1 \sim R_8$ が表す置換基を有してもよい炭素数2~40のアルケニル基としては、例えば、ビニル基、アリル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、1,3-ブタンジエニル基、1-メチルビニル基、スチリル基、2,2-ジフェニルビニル基、1,2-ジフェニルビニル基、1-メチルアリル基、1,1-ジメチルアリル基、2-メチルアリル基、1-フェニルアリル基、2-フェニルアリル基、3-フェニルアリル基、3,3-ジフェニルアリル基、1,2-ジメチルアリル基、1-フェニル-1-ブテニル基、3-フェニル-1-ブテニル基等が挙げられ、好ましくは、スチリル基、2,2-ジフェニルビニル基、1,2-ジフェニルビニル基等が挙げられる。

## 【 0 0 3 8 】

式(1)の $R_1 \sim R_8$ が表す置換基を有してもよい核炭素数6~40のアリールアミノ基は $-NAr_1Ar_2$ と表され、 $Ar_1$ および $Ar_2$ の具体例としては、それぞれ独立に前記非縮合アリール基および縮合アリールで説明した基と同様である。 $Ar_1$ および $Ar_2$ の一方は水素原子であってもよい。

## 【 0 0 3 9 】

式(1)の $R_1 \sim R_8$ が表す置換基を有してもよい炭素数1~40のアルキルアミノ基および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 $-NQ_1Q_2$ と表される。 $Q_1$ 及び $Q_2$ 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。 $Q_1$ および $Q_2$ の一方は水素原子であってもよい。

## 【 0 0 4 0 】

式(1)の $R_1 \sim R_8$ が表す置換基を有してもよい炭素数7~40のケトアリール基(アリールカルボニル基)は $-COAr_2$ と表される。 $Ar_2$ の具体例としては、前記非縮合アリール基および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。

## 【 0 0 4 1 】

式(1)の $R_1 \sim R_8$ が表す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フッ素、塩素、臭素、ヨウ素等のハロゲン原子で置換したものが挙げられ、好ましい例も同様である。

## 【 0 0 4 2 】

式(1)の $X_0$ および $X_1$ が表す置換基を有してもよい核炭素数6~40の非縮合アリール基および置換基を有してもよい核炭素数10~12の縮合アリール基は $R_1 \sim R_8$ に関して説明したとおりである。

## 【 0 0 4 3 】

$X_0$ および $X_1$ の少なくとも一つは、ベンゾイミダゾリル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、または、ジベンゾチオフェニル基である。ただし、 $X_0$ と $X_1$ が同時にベンゾイミダゾリル基である場合はない。アザカルバゾリル基は $R_1 \sim R_8$ に関して説明したとおりである。ベンゾイミダゾリル基、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は置換されていてもよく、また、その結合手はいずれの炭素原子、いずれのヘテロ原子上にあってもよい。

## 【 0 0 4 4 】

本発明の他の態様において、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料は下記式(2)で表される。

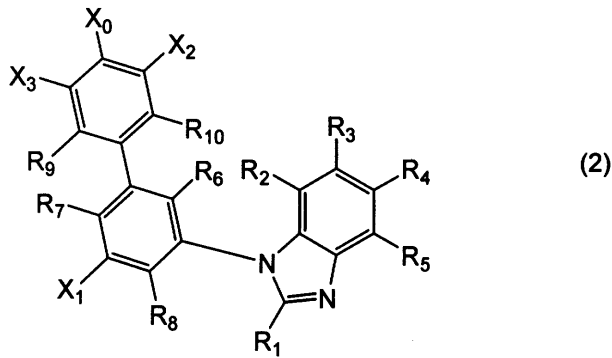
10

20

30

40

## 【化6】



10

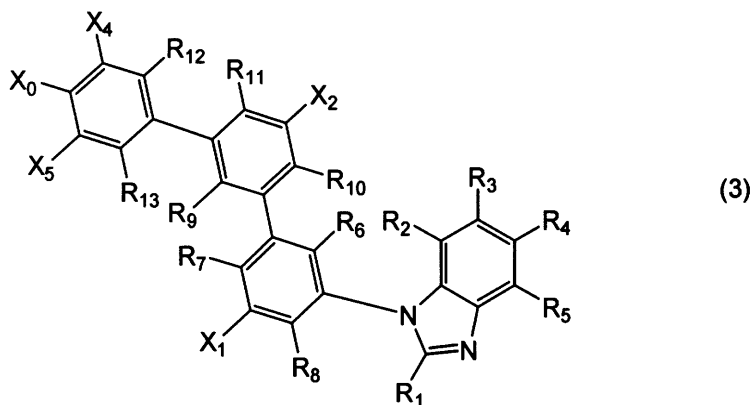
## 【0045】

式(2)の $R_1 \sim R_{10}$ は、前記式(1)の $R_1 \sim R_8$ と同じであり、式(2)の $X_0 \sim X_3$ は、前記式(1)の $X_0, X_1$ (但し書きの条件は除く)と同じである。式(2)の $X_0 \sim X_3$ の少なくとも一つは、ベンゾイミダゾリル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、または、ジベンゾチオフェニル基である。

## 【0046】

本発明のさらに他の態様において、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料は下記式(3)で表される。

## 【化7】



20

30

## 【0047】

式(3)の $R_1 \sim R_{13}$ は、前記式(1)の $R_1 \sim R_8$ と同じであり、式(3)の $X_0 \sim X_2$ および $X_4 \sim X_5$ は、前記式(1)の $X_0, X_1$ (但し書きの条件は除く)と同じである。式(3)の $X_0 \sim X_2$ および $X_4 \sim X_5$ の少なくとも一つは、ベンゾイミダゾリル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、または、ジベンゾチオフェニル基である。ただし、 $X_2$ と $X_4$ または $X_2$ と $X_5$ が同時にベンゾイミダゾリル基になる場合はない。

## 【0048】

式(1)~(3)の各基に置換してもよい置換基としては、例えば、炭素数1~10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、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1,2-ジヒドロキシエチル基、1,3-ジヒドロキシイソプロピル基、2,3-ジヒドロキシ-*t*-ブチル基、1,2,3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1,2-ジクロロエチル基、1,3-ジクロロイソプロピル基、2,3-ジクロロ-*t*-ブチル基、1,2,3-トリクロロプロピル基、プロモメチル基、1-プロモエチル基、2-プロモエチル基、2-プロモイソブチル基、1,2-ジプロモエチ

40

50

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)、核炭素数 3 ~ 40 のシクロアルキル基 (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 - 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、i - 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、ヘキシルオキシ基等)、核炭素数 3 ~ 10 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)、核炭素数 6 ~ 40 のアリール基、核炭素数 6 ~ 40 のアリール基で置換されたアミノ基、核炭素数 6 ~ 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、ハロゲン原子等が挙げられる。

10

20

## 【0049】

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料は、りん光発光性材料と共に用いるホスト材料またはりん光発光性材料と共に用いる電子輸送材料であることが好ましい。また、3重項のエネルギーギャップが  $2.2 \sim 3.2 \text{ eV}$  であることが好ましく、 $2.5 \sim 3.2 \text{ eV}$  であることがより好ましい。

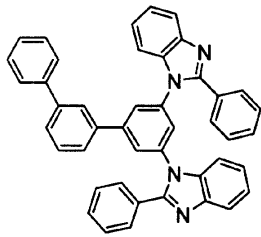
## 【0050】

本発明の式(1)~(3)のいずれかで表される有機EL素子用材料の具体例を以下に示すが、本発明は、これら例示化合物に限定されるものではない。

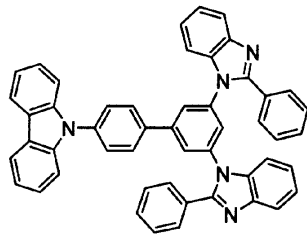
## 【0051】

30

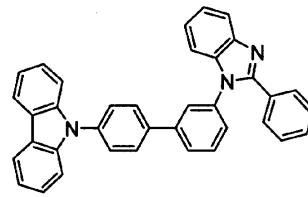
【化8】



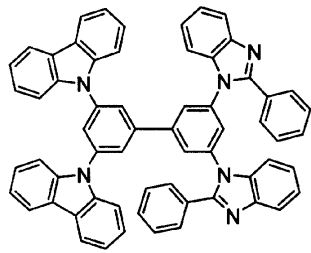
No.1



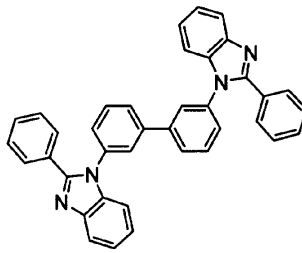
No.2



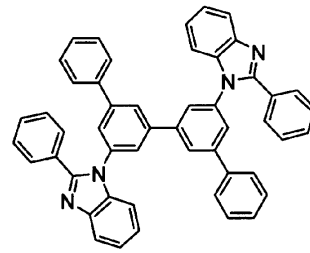
No.3



No.4

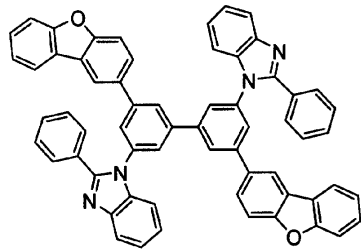


No.5

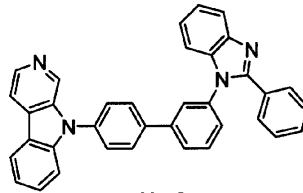


No.6

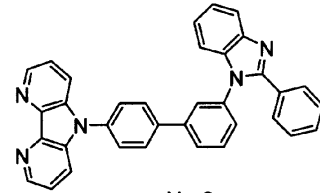
10



No.7

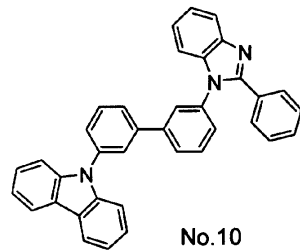


No.8

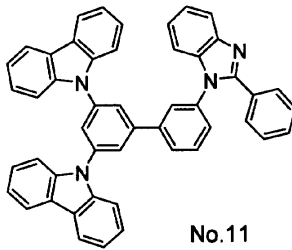


No.9

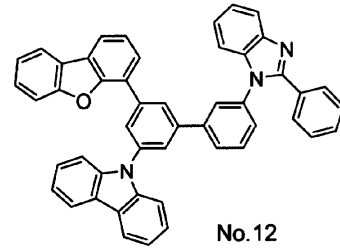
20



No.10

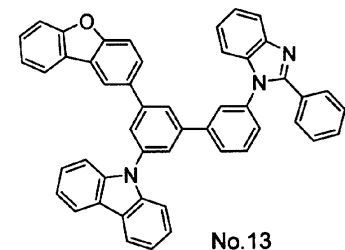


No.11

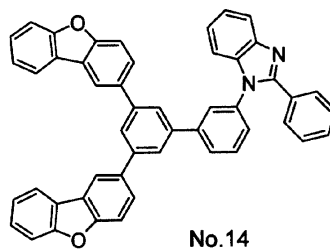


No.12

30



No.13



No.14

40

【0052】

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

【0053】

次に、本発明の有機EL素子について説明する。

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

多層型の有機EL素子の構造としては、例えば、陽極/正孔輸送層(正孔注入層)/発

光層 / 陰極、陽極 / 発光層 / 電子輸送層 (電子注入層) / 陰極、陽極 / 正孔輸送層 (正孔注入層) / 発光層 / 電子輸送層 (電子注入層) / 陰極、陽極 / 正孔輸送層 (正孔注入層) / 発光層 / 正孔障壁層 / 電子輸送層 (電子注入層) / 陰極等が挙げられる。

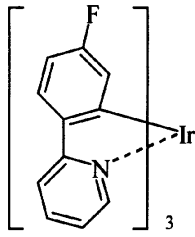
【 0 0 5 4 】

本発明の有機 E L 素子において、前記発光層が、本発明の有機 E L 素子用材料を宿主材料として含有すると好ましい。また、前記発光層が、宿主材料とりん光発光性材料からなり、該宿主材料が前記有機 E L 素子用材料であると好ましい。

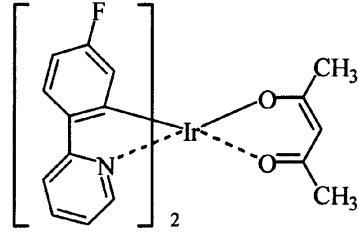
りん光発光性材料としては、りん光量子収率が高く、発光素子の外部量子効率をより向上させることができるという点で、イリジウム ( I r ) , オスミウム ( O s ) および白金 ( P t ) から選ばれる金属を含有する化合物であると好ましく、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等の金属錯体であるとさらに好ましく、中でもイリジウム錯体及び白金錯体がより好ましく、オルトメタル化イリジウム錯体が最も好ましい。オルトメタル化金属錯体のさらに好ましい形態としては、以下に示すイリジウム錯体が挙げられる。

## 【化9】

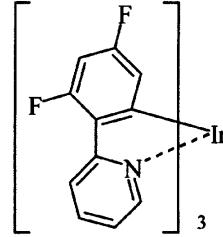
(K-1)



(K-2)

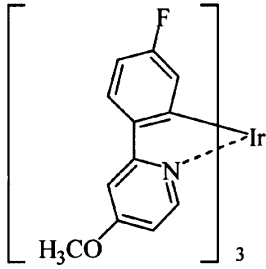


(K-3)

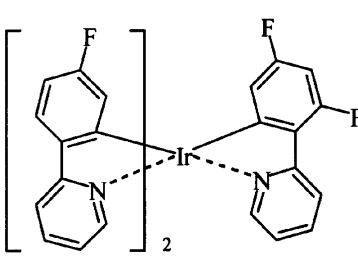


10

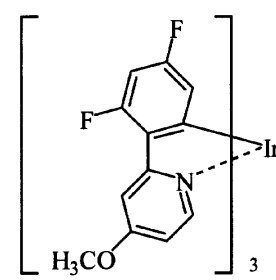
(K-4)



(K-5)

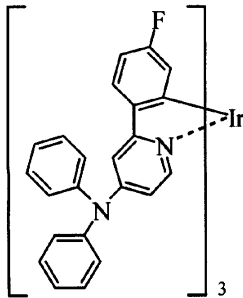


(K-6)

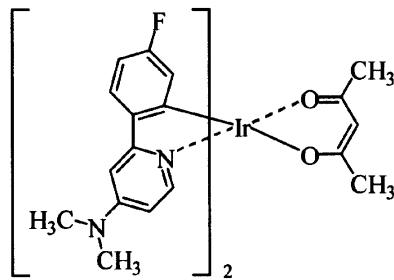


20

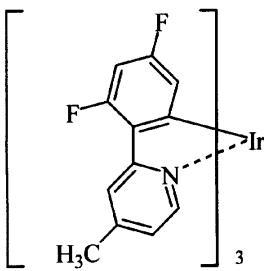
(K-7)



(K-8)



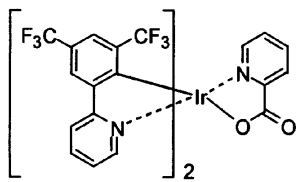
(K-9)



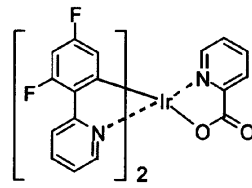
30

## 【化 1 0】

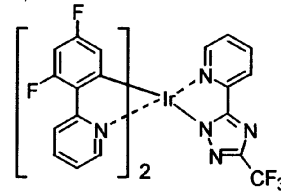
(K-10)



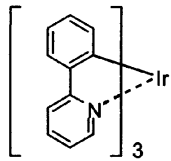
(K-11)



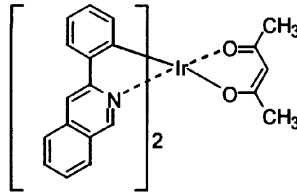
(K-12)



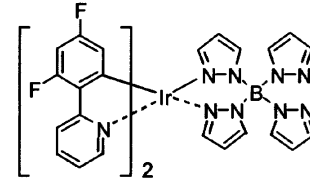
(K-13)



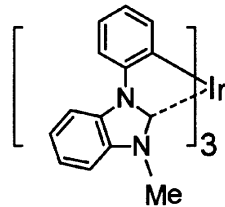
(K-14)



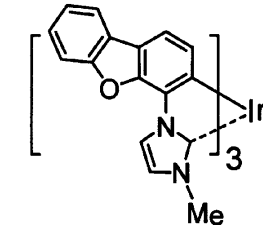
(K-15)



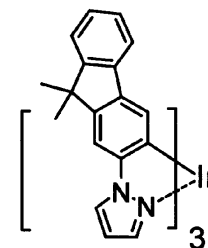
(K-16)



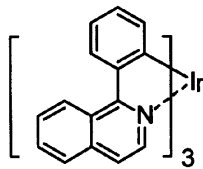
(K-17)



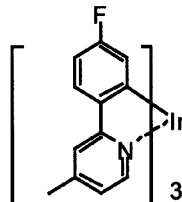
(K-18)



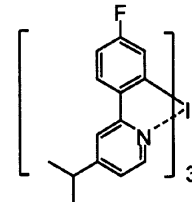
(K-19)



(K-20)



(K-21)



## 【0055】

また、本発明の有機EL素子は、前記発光層がホスト材料とりん光発光性材料を含有し、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と好ましい。このような青色系金属錯体としては、例えば、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。

本発明の有機EL素子は、正孔輸送層（正孔注入層）を有し、該正孔輸送層（正孔注入層）が本発明の有機EL素子用材料を含有しても好ましく、本発明の有機EL素子が電子輸送層及び/又は正孔障壁層を有し、該電子輸送層及び/又は正孔障壁層が、本発明の有機EL素子用材料を含有しても好ましい。

## 【0056】

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

## 【0057】

アルカリ金属としては、Na（仕事関数：2.36eV）、K（仕事関数：2.28eV）、Rb（仕事関数：2.16eV）、Cs（仕事関数：1.95eV）等が挙げられ

10

20

30

40

50

、仕事関数が2.9 eV以下のものが特に好ましい。これらのうち好ましくはK、Rb、Cs、さらに好ましくはRb又はCsであり、最も好ましくはCsである。

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

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

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

#### 【0058】

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合物等が挙げられ、LiF、Li<sub>2</sub>O、NaFが好ましい。

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。

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。

#### 【0059】

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、-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。

#### 【0060】

還元性ドーパントの添加形態としては、界面領域に層状又は島状に形成すると好ましい。形成方法としては、抵抗加熱蒸着法により還元性ドーパントを蒸着しながら、界面領域を形成する発光材料や電子注入材料である有機物を同時に蒸着させ、有機物中に還元ドーパントを分散する方法が好ましい。分散濃度はモル比で有機物：還元性ドーパント = 100 : 1 ~ 1 : 100、好ましくは5 : 1 ~ 1 : 5である。

還元性ドーパントを層状に形成する場合は、界面の有機層である発光材料や電子注入材料を層状に形成した後に、還元ドーパントを単独で抵抗加熱蒸着法により蒸着し、好ましくは層の厚み0.1 ~ 15 nmで形成する。

還元性ドーパントを島状に形成する場合は、界面の有機層である発光材料や電子注入材料を島状に形成した後に、還元ドーパントを単独で抵抗加熱蒸着法により蒸着し、好ましくは島の厚み0.05 ~ 1 nmで形成する。

また、本発明の有機EL素子における、主成分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。

#### 【0061】

本発明の有機EL素子は、発光層と陰極との間に電子注入層を有し、該電子注入層が含窒素環誘導体を主成分として含有すると好ましい。

電子注入層に用いる電子輸送材料としては、分子内にヘテロ原子を1個以上含有する芳香族ヘテロ環化合物が好ましく用いられ、特に含窒素環誘導体が好ましい。

#### 【0062】

10

20

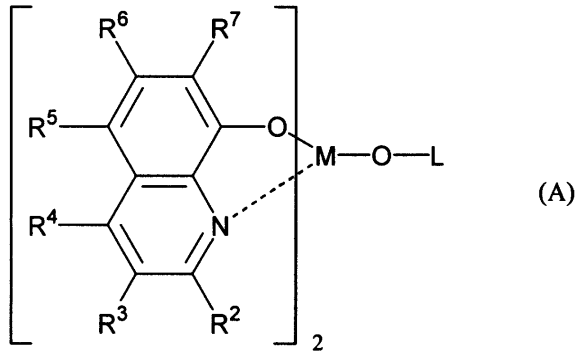
30

40

50

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

【化11】



10

【0063】

$R^2 \sim R^7$ 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、炭素数1~40の炭化水素基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アルコシカルボニル基、または、複素環基であり、これらは置換されていてもよい。

ハロゲン原子の例としては、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。

20

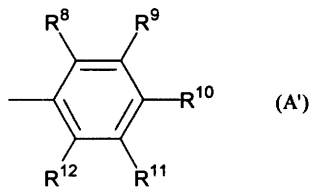
炭素数1~40の炭化水素基としては、置換もしくは無置換のアルキル基、アルケニル基、シクロアルキル基、アリール基、アラルキル基等が挙げられる。アルキル基、アルケニル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、アリール基、複素環基、アラルキル基、アリールオキシ基の例としては、前記と同様のものが挙げられ、アルコシカルボニル基は  $-COOY'$  と表され、 $Y'$  の例としては前記アルキル基と同様のものが挙げられる。

【0064】

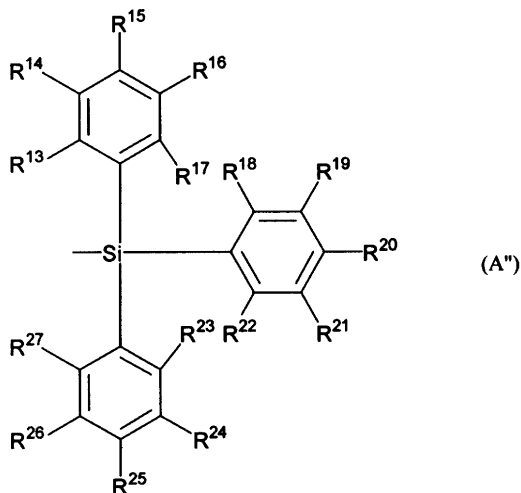
Mは、アルミニウム(A1)、ガリウム(Ga)又はインジウム(In)であり、Inであると好ましい。

式(A)のLは、下記式(A')又は(A'')で表される基である。

【化12】



又は



40

50

## 【0065】

(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。)

## 【0066】

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

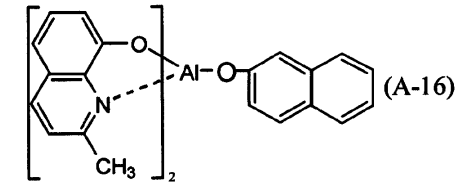
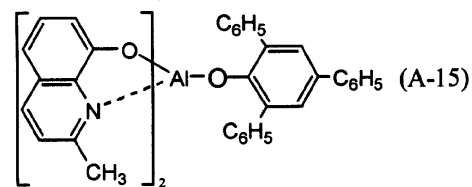
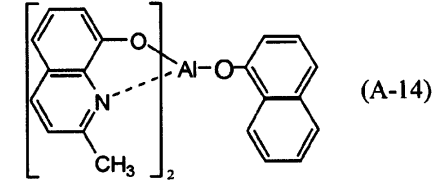
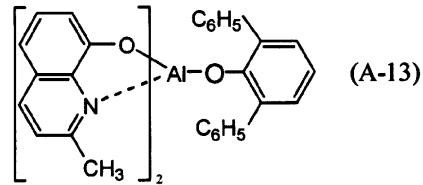
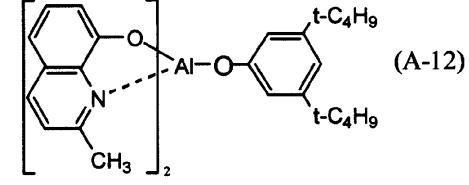
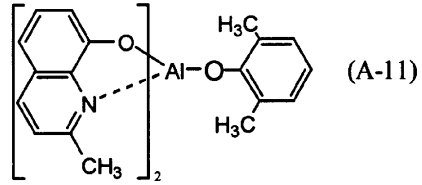
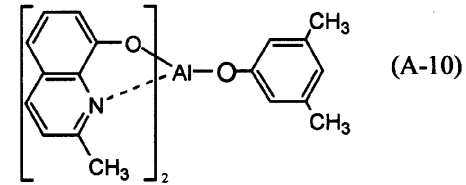
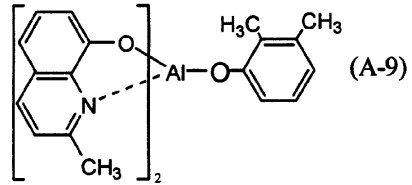
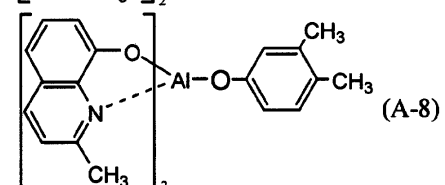
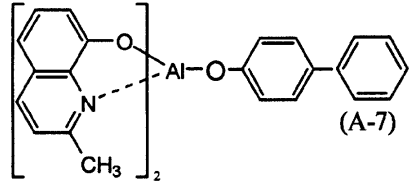
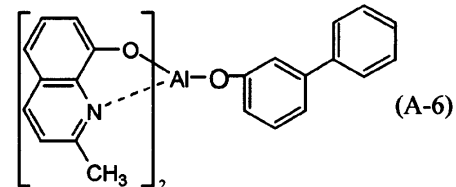
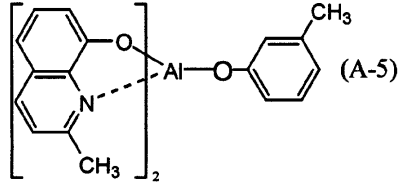
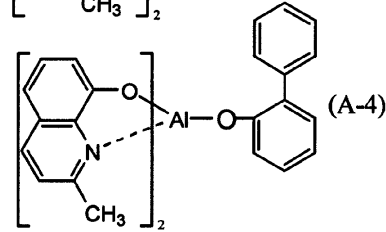
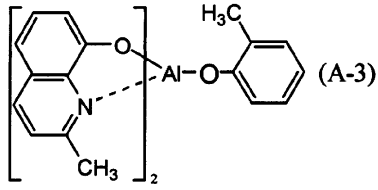
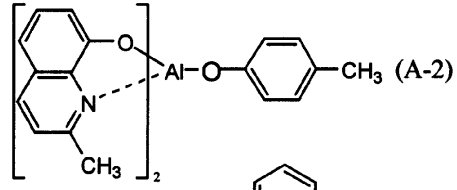
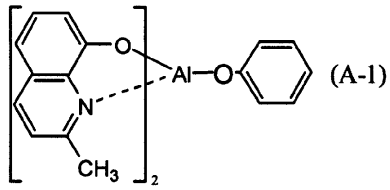
また、 $R^8 \sim R^{12}$ 及び $R^{13} \sim R^{27}$ の互いに隣接する基が環状構造を形成した場合の2価の基としては、テトラメチレン基、ペンタメチレン基、ヘキサメチレン基、ジフェニルメタン-2, 2'-ジイル基、ジフェニルエタン-3, 3'-ジイル基、ジフェニルプロパン-4, 4'-ジイル基等が挙げられる。

10

## 【0067】

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 1 3】



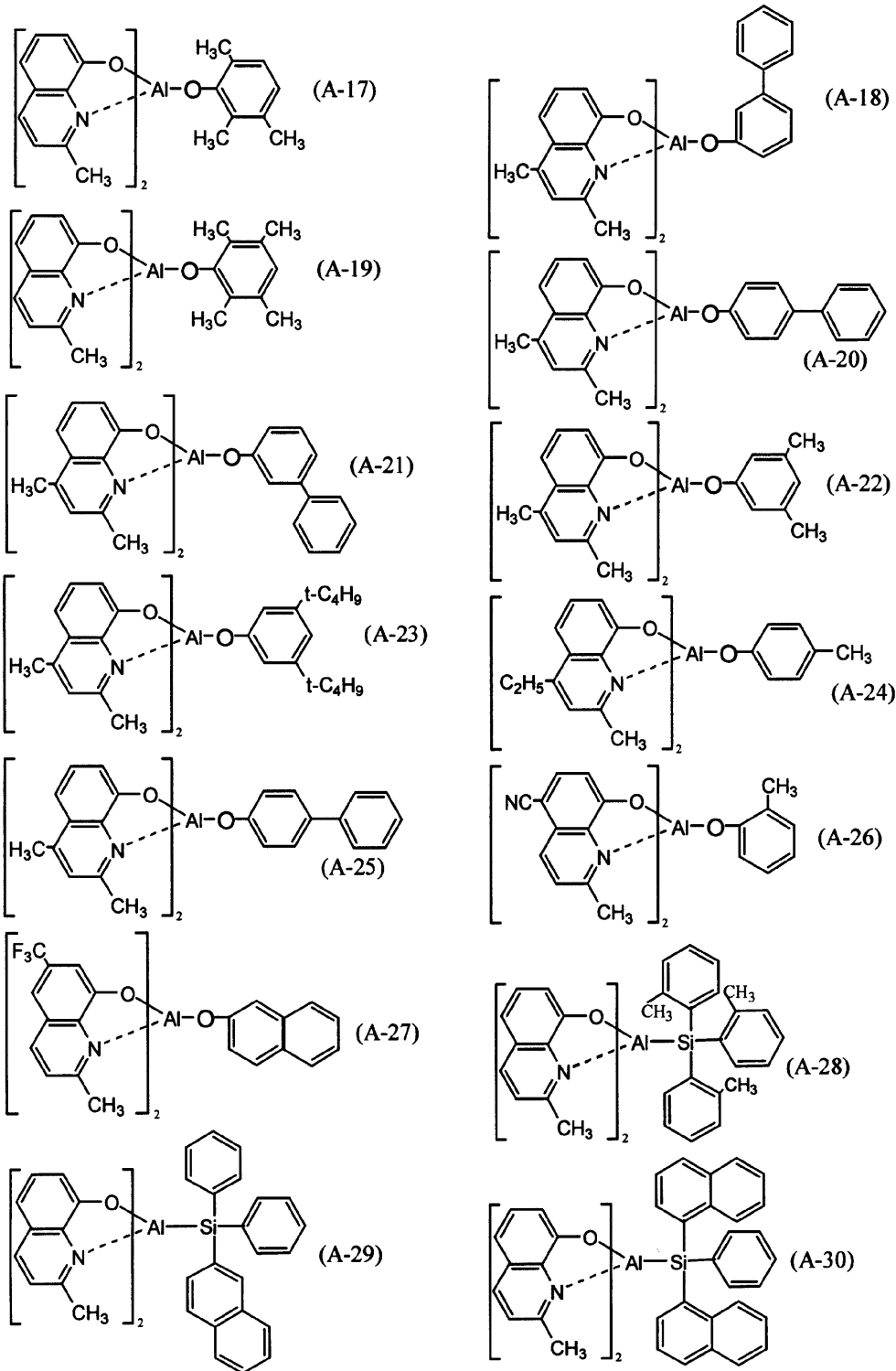
10

20

30

40

## 【化 1 4】



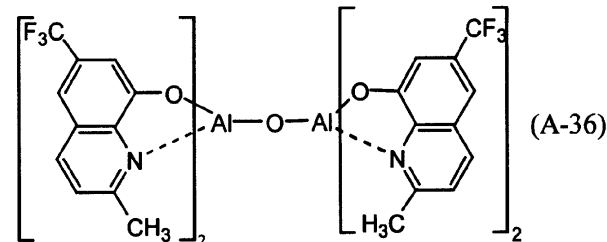
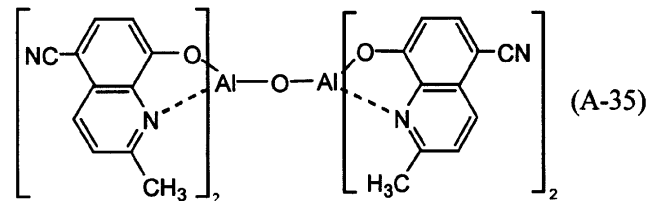
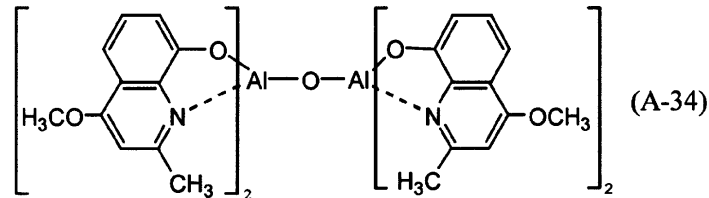
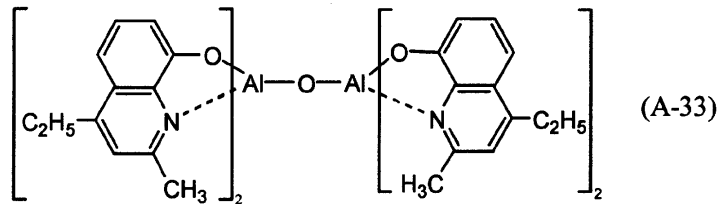
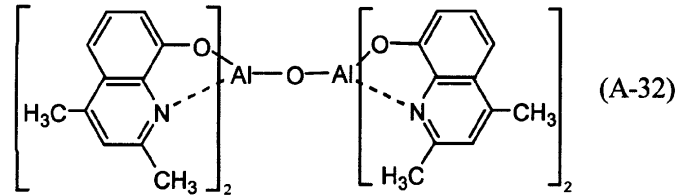
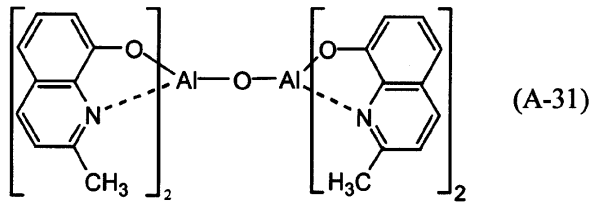
10

20

30

40

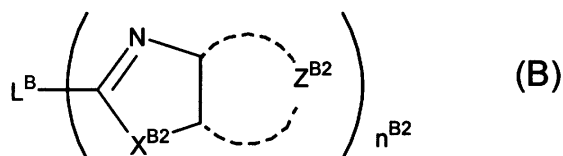
## 【化15】



## 【0068】

含窒素環誘導体としては、含窒素5員環誘導体も好ましい。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、含窒素5員環誘導体としては、ベンゾイミダゾール環、ベンゾトリアゾール環、ピリジノイミダゾール環、ピリミジノイミダゾール環、ピリダジノイミダゾール環であり、特に好ましくは、下記式(B)で表されるものである。

## 【化16】



10

20

30

40

50

## 【 0 0 6 9 】

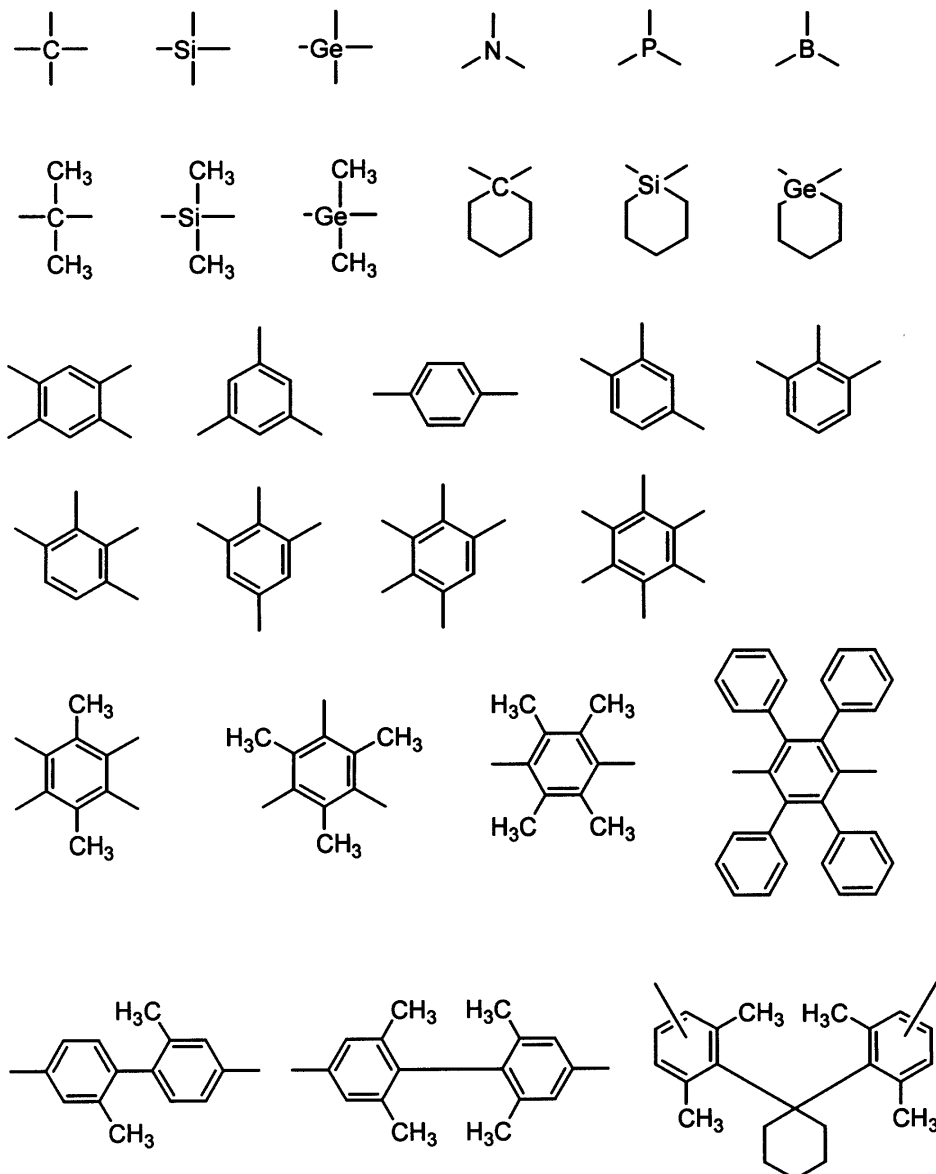
式 ( B ) 中、 $L^B$  は二価以上の連結基を表し、例えば、炭素、ケイ素、窒素、ホウ素、酸素、硫黄、金属 (例えば、バリウム、ベリリウム)、芳香族炭化水素環、芳香族複素環等が挙げられ、これらのうち炭素、窒素、ケイ素、ホウ素、酸素、硫黄、アリール基、芳香族複素環基が好ましく、炭素、ケイ素、アリール基、芳香族複素環基がさらに好ましい。

$L^B$  のアリール基及び芳香族複素環基は置換基を有していてもよく、置換基として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 7 0 】

$L^B$  の具体例としては、以下に示すものが挙げられる。

## 【化 1 7】



10

20

30

40

50

## 【 0 0 7 1 】

式 ( B ) における  $X^{B^2}$  は、 - O - 、 - S - 又は - N (  $R^{B^2}$  ) - を表す。  $R^{B^2}$  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。

$R^{B^2}$  の脂肪族炭化水素基は、直鎖または分岐アルキル基 ( 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*-ヘキサデシル等が挙げられる。 )、シクロアルキル基 ( 好ましくは核炭素数 3 ~ 10 であり、例えば、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。

10

## 【 0 0 7 2 】

$R^{B^2}$  のアリール基は、単環又は縮合環であり、好ましくは核炭素数 6 ~ 30、より好ましくは核炭素数 6 ~ 20、さらに好ましくは核炭素数 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。

## 【 0 0 7 3 】

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

20

30

## 【 0 0 7 4 】

$R^{B^2}$  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。

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

40

$X^{B^2}$  として好ましくは - O - または - N (  $R^{B^2}$  ) - であり、より好ましくは - N (  $R^{B^2}$  ) - である。

## 【 0 0 7 5 】

$Z^{B^2}$  は、芳香族環を形成するために必要な原子群を表す。  $Z^{B^2}$  で形成される芳香族環は芳香族炭化水素環、芳香族複素環のいずれでもよく、具体例としては、例えば、ベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環、ピロール環

50

、フラン環、チオフェン環、セレンフェン環、テルロフェン環、イミダゾール環、チアゾール環、セリナゾール環、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。

【0076】

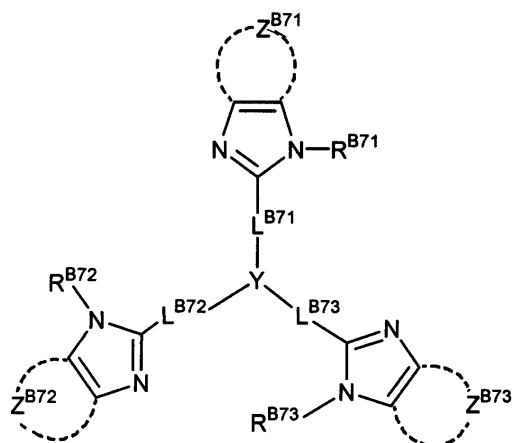
Z<sup>B2</sup>で形成される芳香族環は、さらに他の環と縮合環を形成してもよく、置換基を有していてもよい。置換基としては前記L<sup>B</sup>で表される基の置換基として挙げたものと同様であり、好ましくはアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アシルオキシ基、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、アリールオキシカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、スルファモイル基、カルバモイル基、アルキルチオ基、アリールチオ基、スルホニル基、ハロゲン原子、シアノ基、複素環基であり、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<sup>B2</sup>は、1～4の整数であり、2～3であると好ましい。

【0077】

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

【化18】



(B')

【0078】

式(B')中、R<sup>B71</sup>、R<sup>B72</sup>及びR<sup>B73</sup>は、それぞれ式(B)におけるR<sup>B2</sup>と同様であり、また好ましい範囲も同様である。

Z<sup>B71</sup>、Z<sup>B72</sup>及びZ<sup>B73</sup>は、それぞれ式(B)におけるZ<sup>B2</sup>と同様であり、また好ましい範囲も同様である。

L<sup>B71</sup>、L<sup>B72</sup>及びL<sup>B73</sup>は、それぞれ連結基を表し、式(B)におけるL<sup>B</sup>の例を二価としたものが挙げられ、好ましくは、単結合、二価の芳香族炭化水素環基、二価の芳香族複素環基、及びこれらの組み合わせからなる連結基であり、より好ましくは単結合である。L<sup>B71</sup>、L<sup>B72</sup>及びL<sup>B73</sup>は置換基を有していてもよく、置換基としては前記式(B)におけるL<sup>B</sup>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。

10

20

30

40

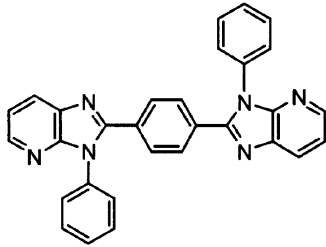
50

## 【 0 0 7 9 】

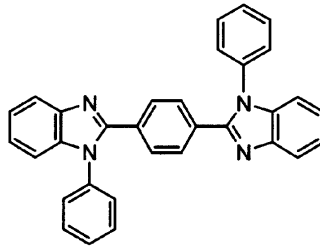
式 ( B ) 又は式 ( B ' ) で表される含窒素 5 員環誘導体の具体例を以下に示すが、これら例示化合物に限定されるものではない。

## 【 化 1 9 】

( B - 1 )

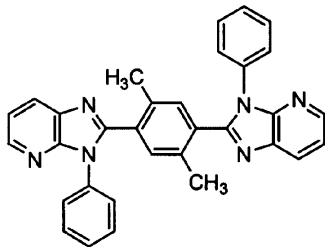


( B - 5 )

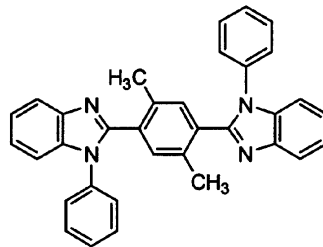


10

( B - 2 )

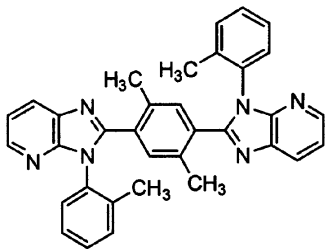


( B - 6 )

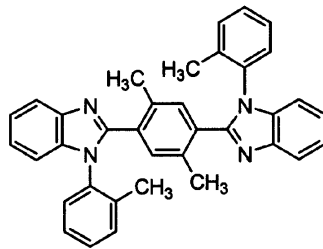


20

( B - 3 )

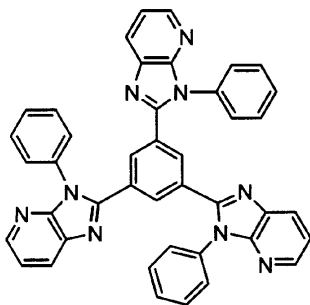


( B - 7 )

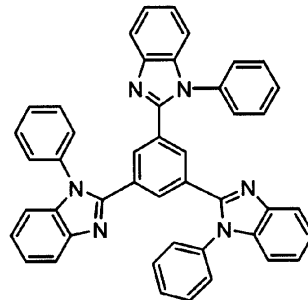


30

( B - 4 )



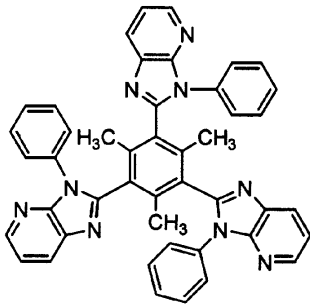
( B - 8 )



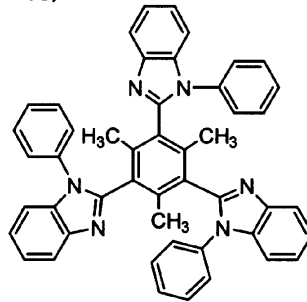
40

## 【化20】

(B-9)

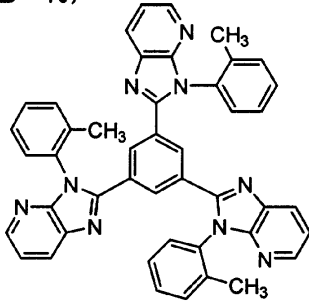


(B-13)

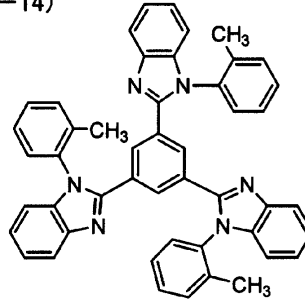


10

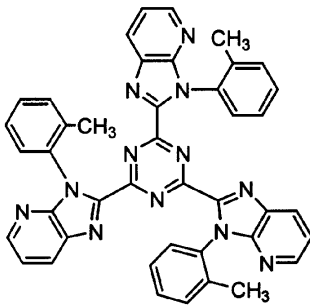
(B-10)



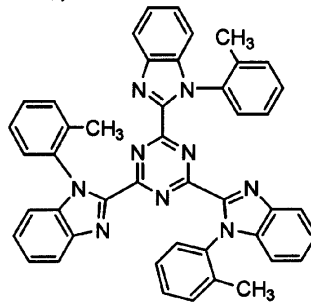
(B-14)



(B-11)

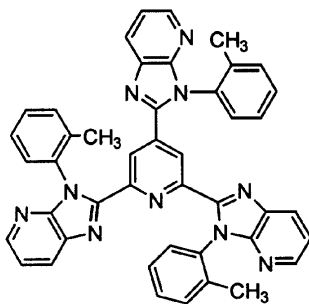


(B-15)

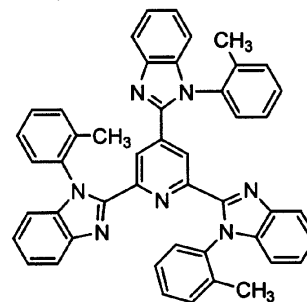


20

(B-12)



(B-16)



30

## 【0080】

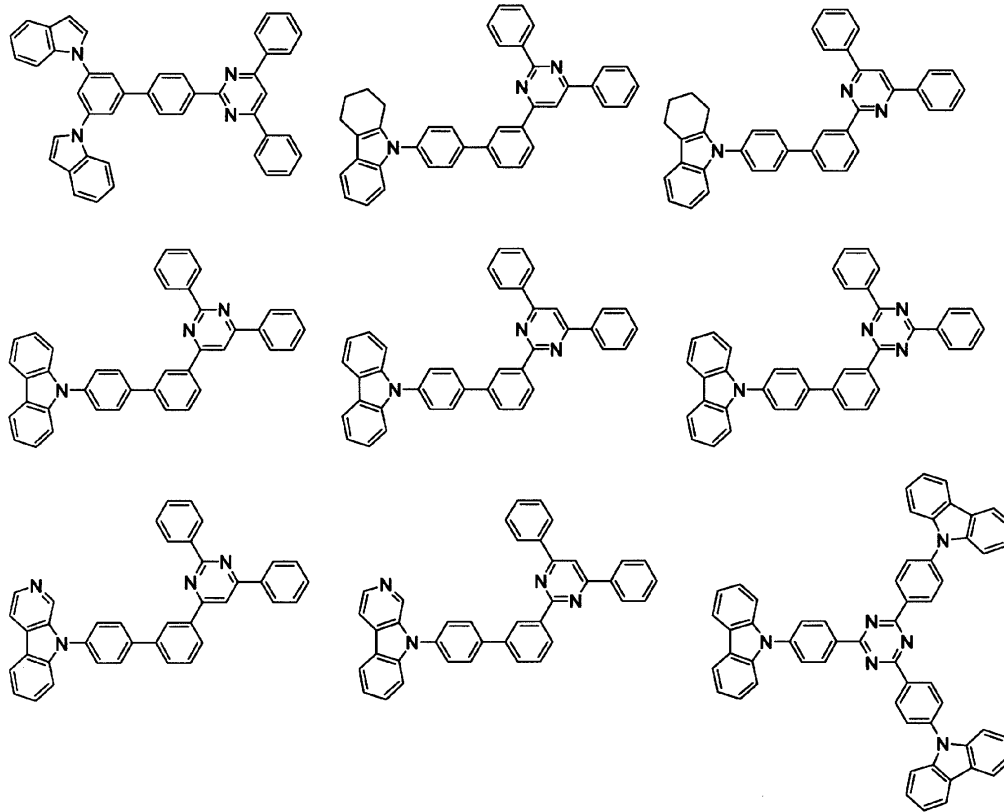
電子注入層及び電子輸送層を構成する化合物としては、本発明の有機EL素子用材料の他、電子欠乏性含窒素5員環または電子欠乏性含窒素6員環骨格と、置換又は無置換のインドール骨格、置換又は無置換のカルバゾール骨格、置換又は無置換のアザカルバゾール骨格を組み合わせた構造を有する化合物等も挙げられる。また、好適な電子欠乏性含窒素5員環または電子欠乏性含窒素6員環骨格としては、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、トリアゾール、オキサジアゾール、ピラゾール、イミダゾール、キノキサリン、ピロール骨格及び、それらがお互いに縮合したベンズイミダゾール、イミダゾピリジン等の分子骨格が挙げられる。これらの組み合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

40

電子輸送性化合物の具体例を以下に示す。

50

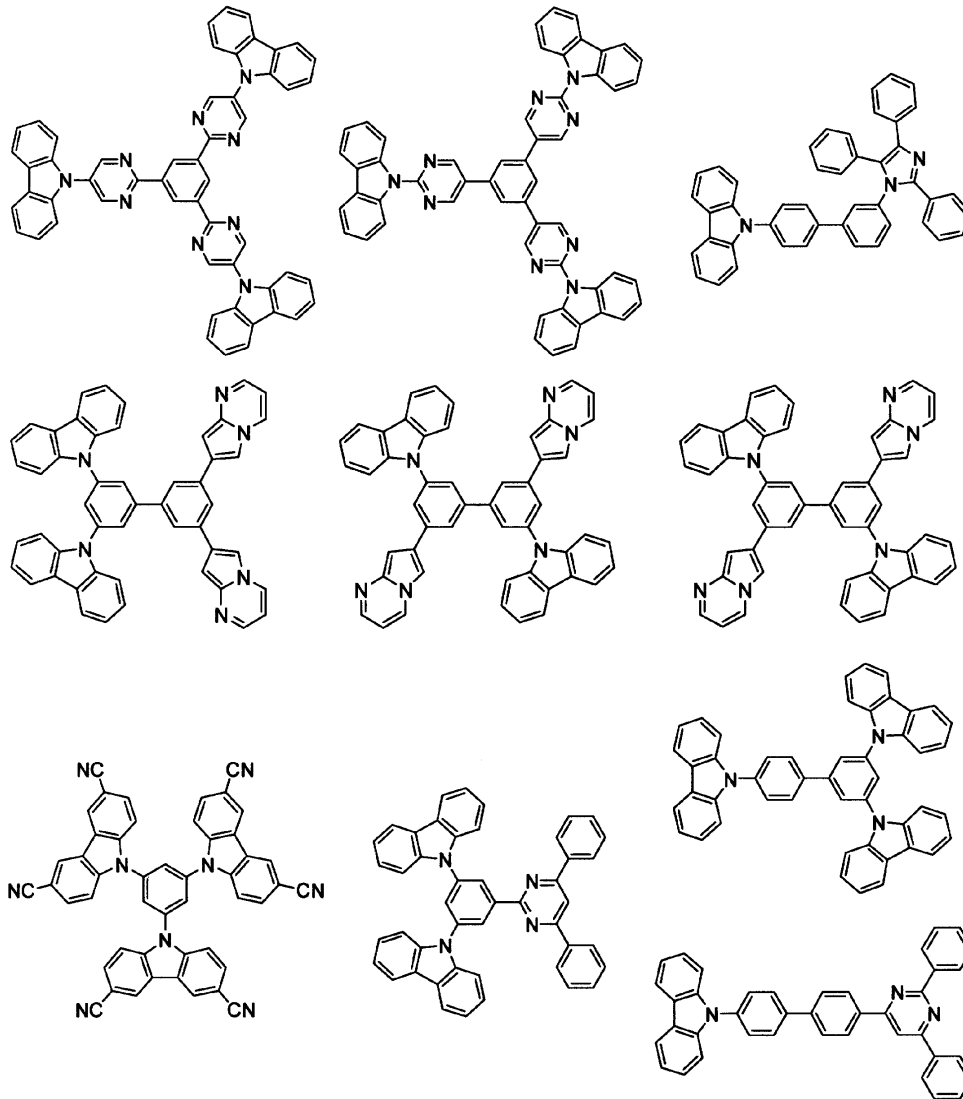
【化 2 1】



10

20

## 【化 2 2】



10

20

30

## 【0081】

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

## 【0082】

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

このような絶縁体としては、アルカリ金属カルコゲニド、アルカリ土類金属カルコゲニド、アルカリ金属のハロゲン化物及びアルカリ土類金属のハロゲン化物からなる群から選択される少なくとも一つの金属化合物を使用するのが好ましい。電子注入層がこれらのアルカリ金属カルコゲニド等で構成されていれば、電子注入性をさらに向上させることができる点で好ましい。具体的に、好ましいアルカリ金属カルコゲニドとしては、例えば、 $\text{Li}_2\text{O}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$ 、 $\text{Na}_2\text{S}$ 、 $\text{Na}_2\text{Se}$ 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の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 $\text{NaCl}$ 等が挙げられる。また、好ましいアルカリ土類金属のハロゲン化物としては、例えば、 $\text{CaF}_2$ 、 $\text{BaF}_2$ 、 $\text{SrF}_2$ 、 $\text{MgF}_2$ 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。

40

50

また、半導体としては、Ba、Ca、Sr、Yb、Al、Ga、In、Li、Na、Cd、Mg、Si、Ta、Sb及びZnの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一種単独又は二種以上の組み合わせが挙げられる。また、電子注入層を構成する無機化合物が、微結晶又は非晶質の絶縁性薄膜であることが好ましい。電子注入層がこれらの絶縁性薄膜で構成されていれば、より均質な薄膜が形成されるために、ダークスポット等の画素欠陥を減少させることができる。なお、このような無機化合物としては、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。

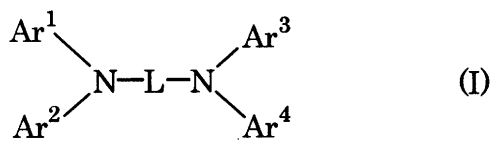
また、本発明における電子注入層は、前述の還元性ドーパントを含有していても好ましい。

10

## 【0083】

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

## 【化23】



## 【0084】

一般式（I）において、Ar<sup>1</sup>～Ar<sup>4</sup>は置換もしくは無置換の核炭素数6～50のアリール基または置換もしくは無置換の核原子数5～50のヘテロアリール基を表す。

20

## 【0085】

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

30

## 【0086】

置換もしくは無置換の核原子数5～50のヘテロアリール基としては、例えば、1-ピロリル基、2-ピロリル基、3-ピロリル基、ピラジニル基、2-ピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、1-インドリル基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インドリル基、5-インドリル基、6-インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、2-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル基、2-フリル基、3-フリル基、2-ベンゾフラニル基、3-ベンゾフラニル基、4-ベンゾフラニル基、5-ベンゾフラニル基、6-ベンゾフラニル基、7-ベンゾフラニル基、1-イソベンゾフラニル基、3-イソベンゾフラニル基、4-イソベンゾフラニル基、5-イソベンゾフラニル基、6-イソベンゾフラニル基、7-イソベンゾフラニル基、キノリル基、3-キノリル基、4-キノリル基、5-キノリル基、6-キノリル基、7-キノリル基、8-キノリル基、1-イソキノリル基、3-イソキノリル基、4-イソキノリル基、5-イソキノリル基、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、

40

50

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

【0087】

Lは連結基である。具体的には置換もしくは無置換の核炭素数6～50のアリーレン基、置換もしくは無置換の核原子数5～50のヘテロアリーレン基、または、2個以上のアリーレン基もしくはヘテロアリーレン基を単結合、エーテル結合、チオエーテル結合、炭

10

20

30

40

50

素数 1 ~ 20 のアルキレン基、炭素数 2 ~ 20 のアルケニレン基、アミノ基で結合して得られる 2 価の基である。核炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基としては、例えば、1, 4 - フェニレン基、1, 2 - フェニレン基、1, 3 - フェニレン基、1, 4 - ナフチレン基、2, 6 - ナフチレン基、1, 5 - ナフチレン基、9, 10 - アントラニレン基、9, 10 - フェナントレニレン基、3, 6 - フェナントレニレン基、1, 6 - ピレニレン基、2, 7 - ピレニレン基、6, 12 - クリセニレン基、4, 4' - ビフェニレン基、3, 3' - ビフェニレン基、2, 2' - ビフェニレン基、2, 7 - フルオレニレン基等が挙げられる。核原子数 5 ~ 50 のアリーレン基としては、例えば、2, 5 - チオフェニレン基、2, 5 - シローリレン基、2, 5 - オキサジアゾーリレン基等が挙げられる。好ましくは 1, 4 - フェニレン基、1, 2 - フェニレン基、1, 3 - フェニレン基、1, 4 - ナフチレン基、9, 10 - アントラニレン基、6, 12 - クリセニレン基、4, 4' - ビフェニレン基、3, 3' - ビフェニレン基、2, 2' - ビフェニレン基、2, 7 - フルオレニレン基である。

10

## 【0088】

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

## 【0089】

20

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

30

## 【0090】

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

40

## 【0091】

置換もしくは無置換の核原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基の例としては、1 - ピロリル基、2 - ピロリル基、3 - ピロリル基、ピラジニル基、2 - ピリジニル基、3 - ピリジニル基、4 - ピリジニル基、1 - インドリル基、2 - インドリル基、3 - インドリル基、4 - 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、

50

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

、4 - メチル - 3 - インドリル基、2 - t - ブチル 1 - インドリル基、4 - t - ブチル 1 - インドリル基、2 - t - ブチル 3 - インドリル基、4 - t - ブチル 3 - インドリル基等が挙げられる。

【0092】

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、プロモメチル基、1 - プロモエチル基、2 - プロモエチル基、2 - プロモイソブチル基、1, 2 - ジプロモエチル基、1, 3 - ジプロモイソプロピル基、2, 3 - ジプロモ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリプロモプロピル基、ヨードメチル基、1 - ヨードエチル基、2 - ヨードエチル基、2 - ヨードイソブチル基、1, 2 - ジヨードエチル基、1, 3 - ジヨードイソプロピル基、2, 3 - ジヨード - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1 - アミノエチル基、2 - アミノエチル基、2 - アミノイソブチル基、1, 2 - ジアミノエチル基、1, 3 - ジアミノイソプロピル基、2, 3 - ジアミノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基、2 - シアノイソブチル基、1, 2 - ジシアノエチル基、1, 3 - ジシアノイソプロピル基、2, 3 - ジシアノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1 - ニトロエチル基、2 - ニトロエチル基、2 - ニトロイソブチル基、1, 2 - ジニトロエチル基、1, 3 - ジニトロイソプロピル基、2, 3 - ジニトロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリニトロプロピル基等が挙げられる。

【0093】

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

【0094】

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、プロモメチル基、1 - プロモエチル基、2 - プロモエチル基、2 - プロモイソブチル基、1, 2 - ジプロモエチル基、1, 3 - ジプロモイソプロピル基、2, 3 - ジプロモ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリプロモプロピル基、ヨードメチル基、1 - ヨードエチル基、2 - ヨードエチル基、2 - ヨードイソブチル基、1, 2 - ジヨードエチル基、1, 3 - ジヨードイソプロピル基、2, 3 - ジヨード - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1 - アミノエチル基、2 - アミノエチル基、2 - アミノイソブチル基、1, 2 - ジアミノエチル基、1, 3 - ジアミノイソプロピル基、2, 3 - ジアミノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基、2 - シアノイソブチル基、1, 2 - ジシアノエチル基、1, 3 - ジシアノイソ

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。

## 【0095】

置換又は無置換の炭素数7~50のアラルキル基の例としては、ベンジル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-t-ブチル基、-ナフチルメチル基、1--ナフチルエチル基、2--ナフチルエチル基、1--ナフチルイソプロピル基、2--ナフチルイソプロピル基、-ナフチルメチル基、1--ナフチルエチル基、2--ナフチルエチル基、1--ナフチルイソプロピル基、2--ナフチルイソプロピル基、1-ピロリルメチル基、2-(1-ピロリル)エチル基、p-メチルベンジル基、m-メチルベンジル基、o-メチルベンジル基、p-クロロベンジル基、m-クロロベンジル基、o-クロロベンジル基、p-プロモベンジル基、m-プロモベンジル基、o-プロモベンジル基、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。

## 【0096】

置換又は無置換の核炭素数6~50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-イル基等が挙げられる。

## 【0097】

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

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

【0098】

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

10

20

30

40

50

- (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'-メチルピフェニルイル基、4"-t-ブチル-p-ターフェニル-4-イル基等が挙げられる。

【0099】

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

10

20

30

40

50

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

10

## 【0100】

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

20

30

## 【0101】

置換もしくは無置換の核炭素数 6 ~ 50 のアリール基または置換もしくは無置換の核原子数 5 ~ 50 のヘテロ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фтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニルイル基、4'' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基、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、

40

50

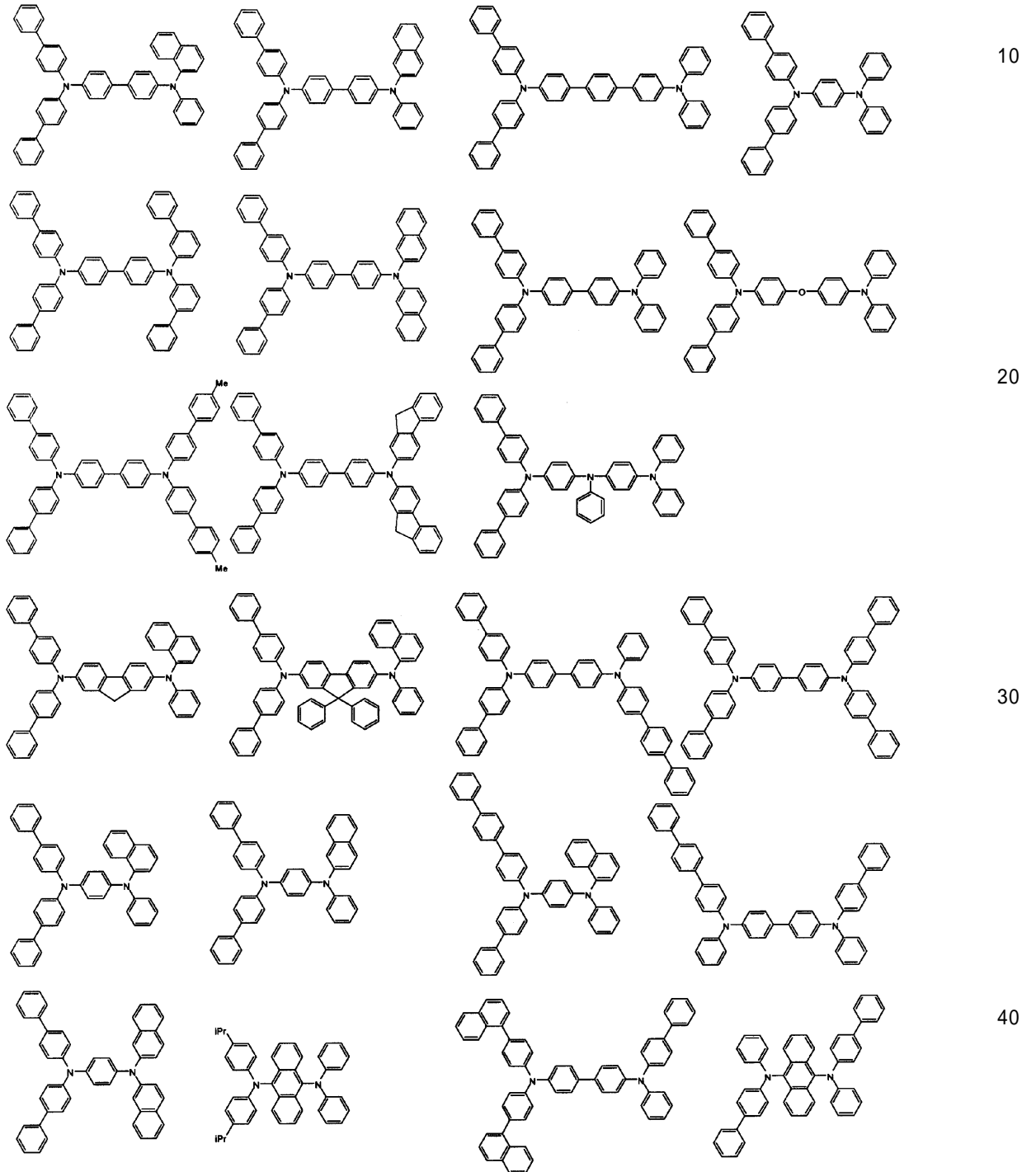
5 - イソインドリル基、6 - イソインドリル基、7 - イソインドリル基、2 - フリル基、  
 3 - フリル基、2 - ベンゾフラニル基、3 - ベンゾフラニル基、4 - ベンゾフラニル基、  
 5 - ベンゾフラニル基、6 - ベンゾフラニル基、7 - ベンゾフラニル基、1 - イソベンゾ  
 フラニル基、3 - イソベンゾフラニル基、4 - イソベンゾフラニル基、5 - イソベンゾ  
 フラニル基、6 - イソベンゾフラニル基、7 - イソベンゾフラニル基、2 - キノリル基、3  
 - キノリル基、4 - キノリル基、5 - キノリル基、6 - キノリル基、7 - キノリル基、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  
 10 基、2 - フェナンスリジニル基、3 - フェナンスリジニル基、4 - フェナンスリジニル  
 基、6 - フェナンスリジニル基、7 - フェナンスリジニル基、8 - フェナンスリジニル基  
 、9 - フェナンスリジニル基、10 - フェナンスリジニル基、1 - アクリジニル基、2 -  
 アクリジニル基、3 - アクリジニル基、4 - アクリジニル基、9 - アクリジニル基、1  
 , 7 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 7 -  
 フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 7 - フェ  
 ナンスロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 7 - フェナ  
 スロリン - 9 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 8 - フェナンス  
 20 スロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 8 - フェナンスロ  
 リン - 4 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン -  
 6 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 9 -  
 イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 2 - イ  
 ル基、1, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基  
 、1, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1  
 , 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 9  
 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 1  
 0 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 1  
 0 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 9 -  
 フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 9 - フェ  
 ナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 9 - フェナ  
 30 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  
 40 スロリン - 7 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 7 - フェ  
 ナンスロリン - 9 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1 - フェ  
 ナジニル基、2 - フェナジニル基、1 - フェノチアジニル基、2 - フェノチアジニル基、  
 3 - フェノチアジニル基、4 - フェノチアジニル基、1 - フェノキサジニル基、2 - フェ  
 ノキサジニル基、3 - フェノキサジニル基、4 - フェノキサジニル基、2 - オキサゾリル  
 基、4 - オキサゾリル基、5 - オキサゾリル基、2 - オキサジアゾリル基、5 - オキサジ  
 アゾリル基、3 - フラザニル基、2 - チエニル基、3 - チエニル基、2 - メチルピロール  
 - 1 - イル基、2 - メチルピロール - 3 - イル基、2 - メチルピロール - 4 - イル基、2  
 - メチルピロール - 5 - イル基、3 - メチルピロール - 1 - イル基、3 - メチルピロール  
 - 2 - イル基、3 - メチルピロール - 4 - イル基、3 - メチルピロール - 5 - イル基、2  
 - t - ブチルピロール - 4 - イル基、3 - (2 - フェニルプロピル)ピロール - 1 - イル  
 50 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。

【 0 1 0 2 】

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。

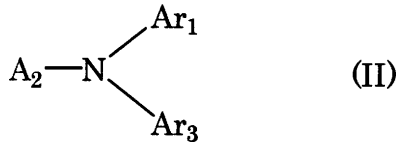
【 化 2 4 】



【 0 1 0 3 】

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

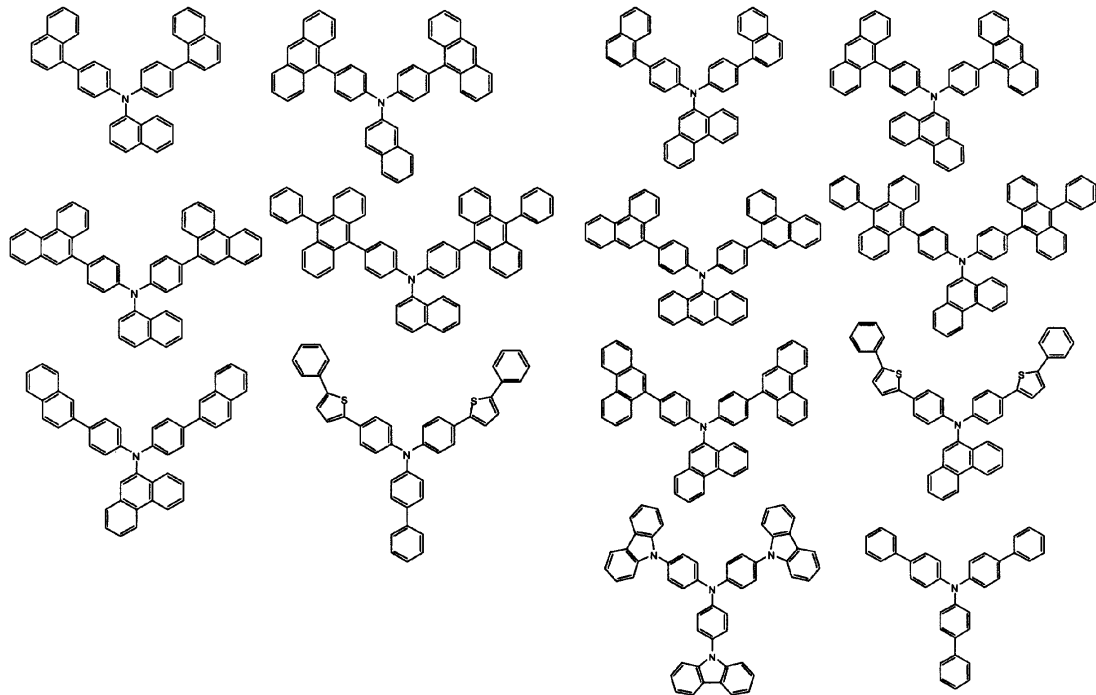
## 【化25】



## 【0104】

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。

## 【化26】



## 【0105】

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

## 【0106】

本発明の有機EL素子の各層の形成方法は特に限定されない。従来公知の真空蒸着法、スピンドーティング法等による形成方法を用いることができる。本発明の有機EL素子に用いる、前記式(1)~(3)のいずれかで表される化合物を含有する有機薄膜層は、真空蒸着法、分子線蒸着法(MBE法)あるいは溶媒に解かした溶液のディッピング法、スピンドーティング法、キャスト法、パーコート法、ロールコート法等の塗布法による公知の方法で形成することができる。

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

## 【実施例】

10

20

30

40

50



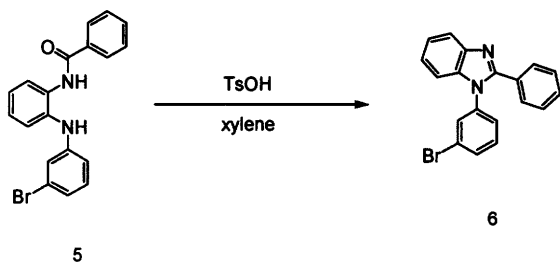
## 【0113】

Ar 雰囲気下で下記操作を行った。まず、三口フラスコ中で化合物 4 (35.0 g, 133 mmol) を NMP (330 mL) に溶解させ、氷水浴にて 0 に冷却した。そこへベンゾイルクロライド (20.57 g, 146.3 mmol) を 10 min かけて滴下し、その後、氷水浴につけたまま 30 min 撹拌を続けた。その後、氷水浴を外し室温で一晩撹拌した。反応終了後、反応生成物を水 (2 L) に注ぎ込み、析出物を吸引ろ過により回収し、水、ヘキサンにて洗浄し、次いで、真空乾燥 (60 , 3 h) して白色の固体 (化合物 5) を得た。収量は 42.8 g、収率は 88% であった。

## 【0114】

(4) 化合物 6 の合成 :

## 【化30】



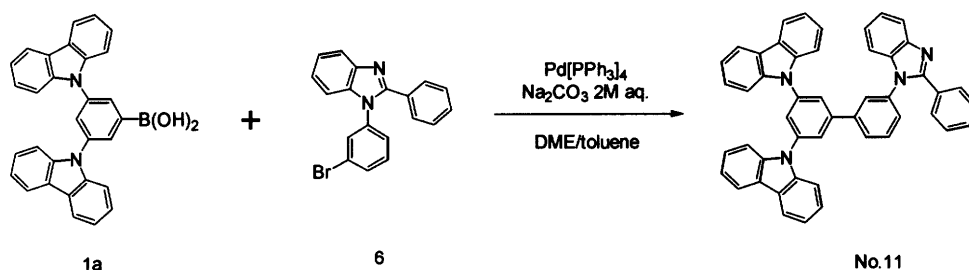
## 【0115】

Ar 雰囲気下で下記操作を行った。まず、ディーンスターク管を取り付けた三口フラスコに化合物 5 (42.8 g, 116.7 mmol)、トルエンスルホン酸一水和物 (2.23 g, 11.7 mmol)、キシレン (585 mL) を入れ、6 h 還流させた。反応終了後、溶液を濃縮し NaOH 水溶液にて pH 9 程度に調整した。分液ロートにて AcOEt で抽出し、抽出液を MgSO<sub>4</sub> で乾燥し、ろ過を行った。このろ液を少量のシリカゲル (30 g) カラムに通し濃縮した。これを MeOH (300 mL) から再結晶し白色の固体 (化合物 6) を得た。収量は 27.77 g、収率は 68% であった。

## 【0116】

(5) 化合物 No. 11 の合成 :

## 【化31】



## 【0117】

Ar 雰囲気下で下記操作を行った。まず、三口フラスコに化合物 1 a (2.99 g, 6.6 mmol)、化合物 6 (2.10 g, 6 mmol)、Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 水溶液 (2 mol/L、6 mL)、DME (18 mL)、トルエン (20 mL)、Pd[PPh<sub>3</sub>]<sub>4</sub> (0.35 g, 0.3 mmol) を入れ、9 h 還流させた。反応終了後、室温まで冷却し分液ロートにて CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> で抽出し、抽出液を MgSO<sub>4</sub> で乾燥し、ろ過、濃縮を行った。これをシリカゲルカラムクロマトグラフィー (CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>: AcOEt = 95:5) で精製し、さらに AcOEt (50 mL) で分散洗浄を行い、ろ取し、真空乾燥 (60 , 5 h) し白色の固体 (化合物 No. 28) を得た。収量は 3.54 g、収率は 87% であった。

FD マス : cal c . C<sub>46</sub>H<sub>32</sub>N<sub>4</sub> = 676 ; f o u n d = 676

## 【0118】

合成例 2 (化合物 No. 14 の合成)

10

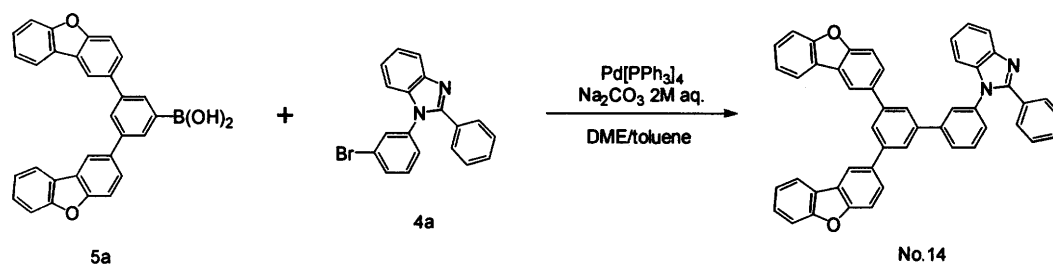
20

30

40

50

## 【化32】



## 【0119】

10

Ar雰囲気下で下記操作を行った。まず、三口フラスコに化合物5a(3.50g, 7.7mmol), 化合物4a(2.44g, 7mmol), Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>水溶液(2mol/L, 7mL), DME/トルエン(14mL/14mL)を入れ、9h還流させた。反応終了後、室温まで冷却し分液ロートにてCH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>で抽出し、MgSO<sub>4</sub>で乾燥し、ろ過、濃縮を行った。これをシリカゲルクロマトグラフィー(CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>:AcOEt=9:1)にて精製し、さらにEtOH(200mL)で2回分散洗浄し、AcOEtから再結晶して白色の固体を得た。収量は3.66g、収率は77%であった。

FD-MS calc C<sub>49</sub>H<sub>30</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>=678; found=678

## 【0120】

なお、上記合成例においてFD-MS(フィールドディソープションマス分析)の測定に用いた装置及び測定条件を以下に示す。

20

装置:HX110(日本電子社製)

条件:加速電圧 8kV

スキャンレンジ m/z=50~1500

エミッタ種:カーボン

エミッタ電流:0mA 2mA/分 40mA(10分保持)

## 【0121】

## 実施例1

(有機EL素子の作製)

25mm×75mm×1.1mm厚のITO透明電極付きガラス基板(ジオマティック社製)をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に、前記透明電極を覆うようにして膜厚80nmのHTM膜(下記構造式HTM1からなる膜)を成膜した。該HTM膜は正孔注入輸送層として機能する。さらに、該正孔注入輸送層の成膜に続けて、この膜上に膜厚30nmで、ホスト化合物として化合物No.11と錯体K-21を抵抗加熱により成膜した。錯体K-21の濃度は7.5wt%であった。この共蒸着膜は発光層として機能する。

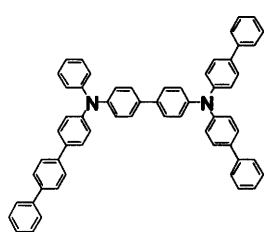
30

引き続き、該発光層上に膜厚10nmのETM1膜(下記構造式ETM1からなる膜)、該ETM1膜上に膜厚20nmのETM2膜(下記構造式ETM2からなる膜)を蒸着により積層成膜した。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。

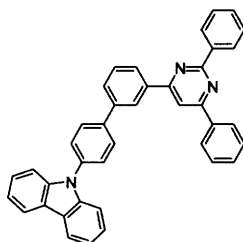
40

次いで、成膜速度0.1オングストローム/minで膜厚0.5nm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150nmの金属陰極を形成し有機EL素子を得た。

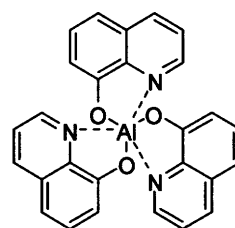
## 【化33】



HTM1



ETM1



ETM2

10

## 【0122】

(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( )、輝度(L), 電流密度(J)を測定し、電流効率(L/J)を求めた。また、電流効率と分光放射輝度計(CS-1000A:コニカミノルタセンシング(株)製)で求めたスペクトル波形から外部量子効率(EQE)を求めた。電流密度1mA/cm<sup>2</sup>時のこれら発光性能評価の結果を下記表1に示す。

## 【0123】

実施例2

化合物No. 11を用いる代わりに、ホスト材料No. 14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下記表1に示す。

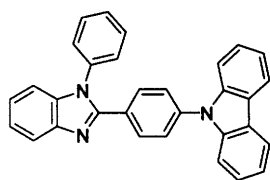
20

## 【0124】

比較例1

ホスト材料として特開2001-247858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34】



X-1

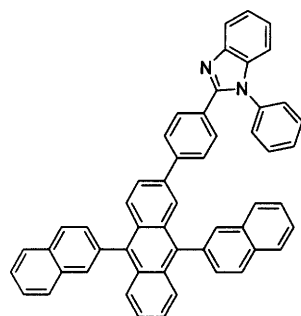
30

## 【0125】

比較例2

ホスト材料として国際公開WO03/060956号公報記載の下記化合物X-2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35】



X-2

40

50

【表 1】

	ホスト化合物 No.	電圧 (V)	輝度 (cd/m <sup>2</sup> )	L/J (cd/A)	EQE (%)	発光波長 (nm)
実施例 1	No. 11	5.4	167	16.5	7.2	480
実施例 2	No. 14	5.2	162	17.5	7.6	481
比較例 1	X-1	6.1	101	10.1	4.4	480
比較例 2	X-2	発光せず				

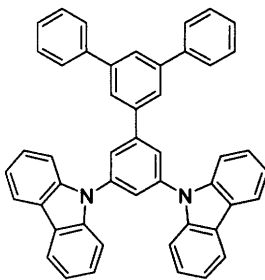
## 【 0 1 2 6 】

## 実施例 3

10

実施例 1 において電子輸送材料として E T M 1 の代わりに化合物 N o . 1 1 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 E L 素子を作製した。発光性能評価結果を下記表 2 に示す。

## 【化 3 6】



H-1

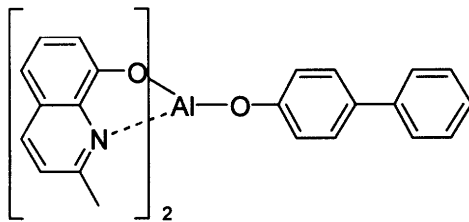
20

## 【 0 1 2 7 】

## 比較例 3

電子輸送性材料として下記構造の B A l q を用いた以外は実施例 3 と同様にして有機 E L 素子を作製した。発光性能評価結果を表 2 に示す。

## 【化 3 7】



BAlq

30

【表 2】

	電子輸送性化 合物	電圧 (V)	輝度 (cd/m <sup>2</sup> )	L/J (cd/A)	EQE (%)	発光波長 (nm)
実施例 3	No. 11	6.3	157	15.7	6.8	481
比較例 3	BAlq	6.5	98	9.8	4.3	480

40

## 【 0 1 2 8 】

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ており、駆動電圧も高かった。

## 【産業上の利用可能性】

## 【 0 1 2 9 】

以上詳細に説明したように、本発明の一般式 ( 1 ) ~ ( 3 ) で表される有機 E L 素子用

50

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、本発明の有機EL素子は、各種電子機器の光源等として極めて有用である。

---

フロントページの続き

- (51) Int.Cl. F I  
C 0 7 D 403/14
- (56) 参考文献 特開 2 0 0 7 - 2 1 7 3 9 7 ( J P , A )  
特開 2 0 0 7 - 2 5 8 6 9 2 ( J P , A )  
国際公開第 2 0 0 5 / 1 1 3 7 0 4 ( W O , A 1 )  
特開 2 0 0 5 - 0 4 4 7 9 0 ( J P , A )  
Inorganic Chemistry (2005), 44(16), 5706-5712
- (58) 調査した分野(Int.Cl. , DB名)  
C A p l u s / R E G I S T R Y ( S T N )

专利名称(译)	用于有机电致发光器件的材料和使用其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">JP5317471B2</a>	公开(公告)日	2013-10-16
申请号	JP2007337967	申请日	2007-12-27
[标]申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
当前申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
[标]发明人	岩隈俊裕 遠藤潤 沼田真樹		
发明人	岩隈 俊裕 遠藤 潤 沼田 真樹		
IPC分类号	H01L51/50 C09K11/06 C07D405/14 C07D403/14		
FI分类号	H05B33/14.B H05B33/22.A C09K11/06.690 C09K11/06.660 C07D405/14 C07D403/14 C07D403/14.CSP		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB02 3K107/CC04 3K107/CC21 3K107/CC24 3K107/CC26 3K107/DD59 3K107/DD64 3K107/DD67 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/DD74 3K107/DD75 3K107/DD76 3K107/DD78 3K107/FF13 3K107/FF19 4C063/AA03 4C063/BB06 4C063/CC26 4C063/CC76 4C063/DD08 4C063/DD26 4C063/EE10		
审查员(译)	Tamotsu富永		
其他公开文献	JP2009155300A		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

要解决的问题：提供具有高发光效率，无像素缺陷，优异的耐热性和长寿命的有机EL元件以及用于实现该有机EL元件的有机EL元件的材料。  
 ŽSOLUTION：用于有机电致发光元件的材料由式(1)表示(其中R<sub>SB</sub> 1-R<sub>8</sub>，X<sub>0</sub>和X<sub>1</sub>均在说明书中定义。有机电致发光元件使用该材料。Ž

