

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第4829722号  
(P4829722)

(45) 発行日 平成23年12月7日(2011.12.7)

(24) 登録日 平成23年9月22日(2011.9.22)

(51) Int.Cl.

F I

<b>H01L 51/50</b>	<b>(2006.01)</b>	H05B 33/14	B
<b>C09K 11/06</b>	<b>(2006.01)</b>	C09K 11/06	635
<b>C07D 307/91</b>	<b>(2006.01)</b>	C07D 307/91	CSP
<b>C07D 333/76</b>	<b>(2006.01)</b>	C07D 333/76	
<b>C07D 409/04</b>	<b>(2006.01)</b>	C07D 409/04	

請求項の数 8 (全 61 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2006-236184 (P2006-236184)  
 (22) 出願日 平成18年8月31日(2006.8.31)  
 (65) 公開番号 特開2008-60379 (P2008-60379A)  
 (43) 公開日 平成20年3月13日(2008.3.13)  
 審査請求日 平成20年7月14日(2008.7.14)

(73) 特許権者 000005887  
 三井化学株式会社  
 東京都港区東新橋一丁目5番2号  
 (74) 代理人 100105050  
 弁理士 鷺田 公一  
 (72) 発明者 田辺 良満  
 千葉県袖ヶ浦市長浦580-32 三井化学株式会社内  
 (72) 発明者 齋藤 靖典  
 千葉県袖ヶ浦市長浦580-32 三井化学株式会社内  
 (72) 発明者 戸谷 由之  
 千葉県袖ヶ浦市長浦580-32 三井化学株式会社内

最終頁に続く

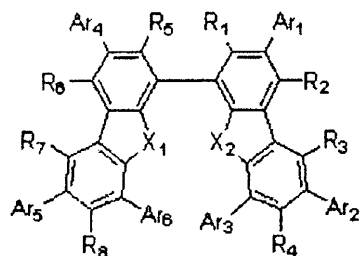
(54) 【発明の名称】 有機電界発光素子および芳香族化合物

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

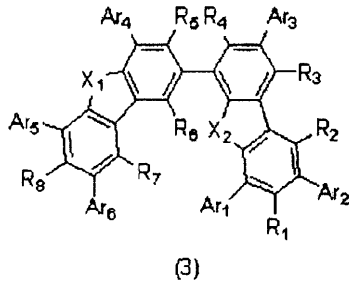
一対の電極間に、一般式(1)または一般式(3)で表される芳香族化合物を少なくとも一種含有する層を少なくとも一層挟持してなる有機電界発光素子。

【化1】



(1)

## 【化2】



〔式中、 $R_1 \sim R_8$  は、それぞれ独立に水素原子またはハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、エステル基、直鎖、分岐または環状のアルキル基、直鎖、分岐または環状のアルコキシ基、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換のアラルキル基、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換のアラルキルオキシ基、直鎖、分岐または環状のアルケニル基、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換のアリール基、あるいは、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換のアリールオキシ基を表し、

10

$Ar_1 \sim Ar_6$  はそれぞれ独立に、水素原子、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換の芳香族炭化水素基、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換のアミノ基、炭素数 1 ~ 24 の直鎖、分岐鎖または環状のアルキル基、炭素数 1 ~ 24 の直鎖、分岐または環状のアルコキシ基、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換のアリールオキシ基、あるいは下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換の芳香族複素環基を表し、

20

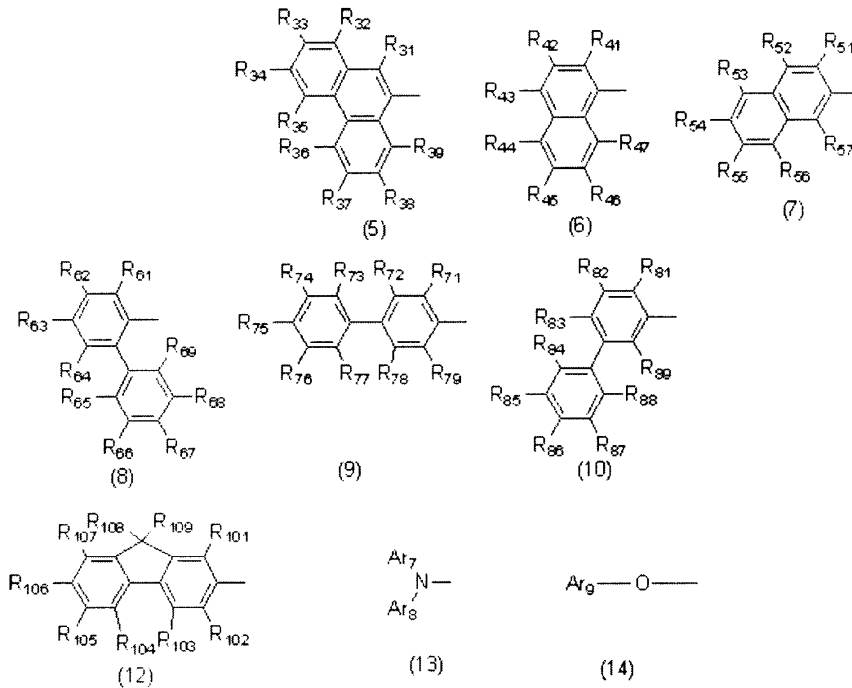
前記  $Ar_1 \sim Ar_6$  の少なくともひとつがそれぞれ独立に、下記の一般式 (5) ~ (10)、及び (12) ~ (14) のいずれかを表し、

$X_1$  および  $X_2$  はそれぞれ独立に酸素原子または硫黄原子を表す。

(置換基群：炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、炭素数 2 ~ 20 のアルキル基、炭素数 7 ~ 20 のアラルキル基、炭素数 4 ~ 20 のアリール基、炭素数 1 ~ 10 のアルコキシ基、炭素数 2 ~ 20 のアルケニルオキシ基、炭素数 7 ~ 20 のアラルキルオキシ基、炭素数 4 ~ 20 のアリールオキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、炭素数 1 ~ 20 のジアルキルアミノ基、炭素数 4 ~ 20 のアリールアルキルアミノ基、および炭素数 4 ~ 20 のジアリールアミノ基)

30

## 【化3】



10

20

(式中、R<sub>31</sub> ~ R<sub>39</sub>、R<sub>41</sub> ~ R<sub>47</sub>、R<sub>51</sub> ~ R<sub>57</sub>、R<sub>61</sub> ~ R<sub>69</sub>、R<sub>71</sub> ~ R<sub>79</sub>、R<sub>81</sub> ~ R<sub>89</sub>、およびR<sub>101</sub> ~ R<sub>109</sub>はそれぞれ独立に、水素原子または前記置換基群から選ばれる置換基を表し、Ar<sub>7</sub>、Ar<sub>8</sub>およびAr<sub>9</sub>はそれぞれ独立に、水素原子、前記置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換の芳香族炭化水素基、あるいは前記置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換の芳香族複素環基を表す)

## 【請求項2】

一般式(1)または一般式(3)で表される芳香族化合物を含有する層が、発光層である請求項1記載の有機電界発光素子。

## 【請求項3】

一般式(1)または一般式(3)で表される芳香族化合物を含有する層が、正孔注入輸送層である請求項1記載の有機電界発光素子。

## 【請求項4】

発光層がホスト材料とドーパント材料より形成され、一般式(1)または一般式(3)で表される芳香族化合物が発光層ホスト材料として含有されている請求項1記載の有機電界発光素子。

## 【請求項5】

一对の電極間に、さらに、正孔注入輸送層を有する請求項1~4のいずれか一項に記載の有機電界発光素子。

## 【請求項6】

一对の電極間に、さらに、電子注入輸送層を有する請求項1~5のいずれか一項に記載の有機電界発光素子。

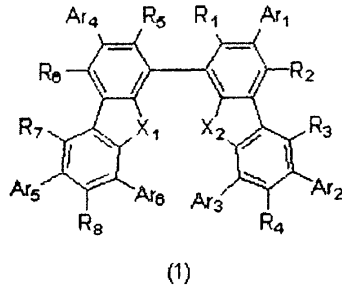
## 【請求項7】

一般式(1)または一般式(3)で表される芳香族化合物。

30

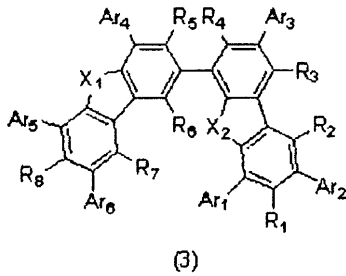
40

## 【化4】



## 【化5】

10



〔式中、 $R_1 \sim R_8$ は、それぞれ独立に水素原子またはハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、エステル基、直鎖、分岐または環状のアルキル基、直鎖、分岐または環状のアルコキシ基、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換のアラルキル基、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換のアラルキルオキシ基、直鎖、分岐または環状のアルケニル基、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換のアリール基、あるいは、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換のアリールオキシ基を表し（ただし、 $R_1 \sim R_8$ はいずれもリン原子を含まない）、

20

$Ar_1 \sim Ar_6$ はそれぞれ独立に、水素原子、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換の芳香族炭化水素基、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換のアミノ基、炭素数1～24の直鎖、分岐鎖または環状のアルキル基、炭素数1～24の直鎖、分岐または環状のアルコキシ基、下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換のアリールオキシ基、あるいは下記の置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換の芳香族複素環基を表し、

30

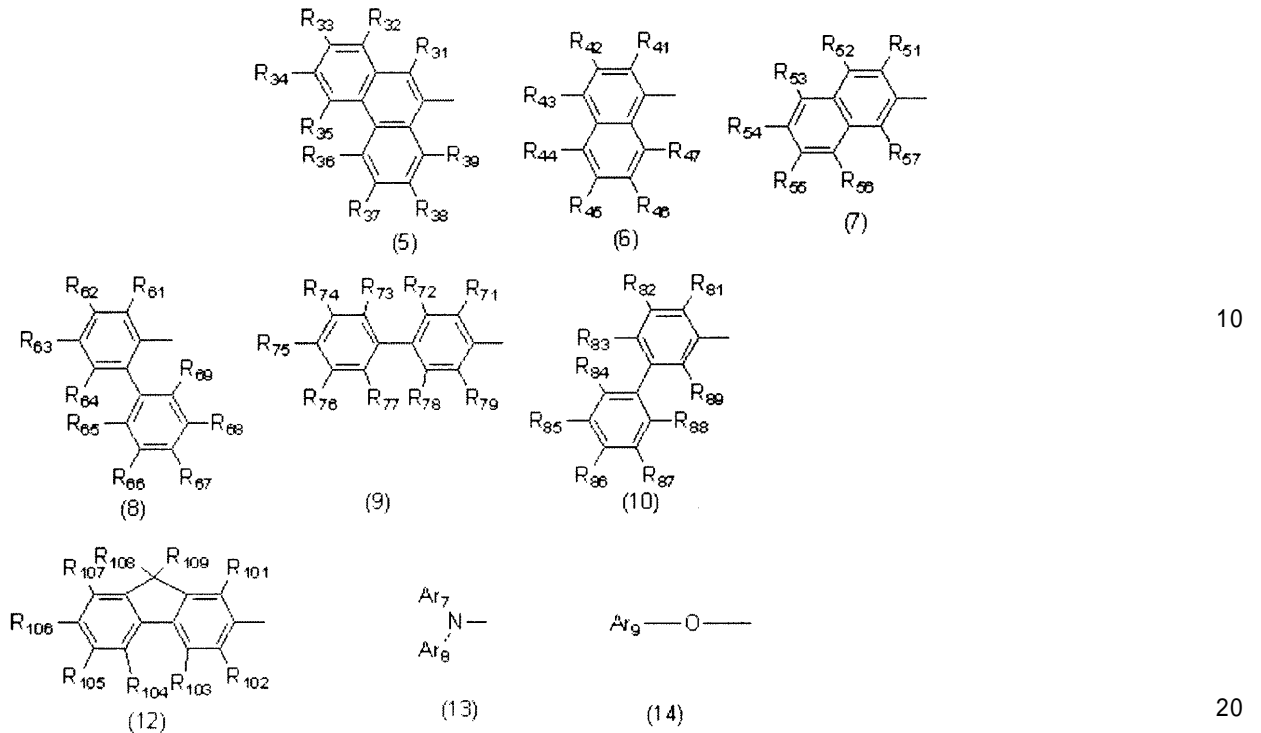
前記 $Ar_1 \sim Ar_6$ の少なくともひとつがそれぞれ独立に、下記の一般式(5)～(10)、及び(12)～(14)のいずれかを表し、

$X_1$ および $X_2$ はそれぞれ独立に酸素原子または硫黄原子を表す。

(置換基群：炭素数1～10のアルキル基、炭素数2～20のアルキル基、炭素数7～20のアラルキル基、炭素数4～20のアリール基、炭素数1～10のアルコキシ基、炭素数2～20のアルケニルオキシ基、炭素数7～20のアラルキルオキシ基、炭素数4～20のアリールオキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、炭素数1～20のジアルキルアミノ基、炭素数4～20のアリールアルキルアミノ基、および炭素数4～20のジアリールアミノ基)

40

## 【化6】



(式中、 $R_{31} \sim R_{39}$ 、 $R_{41} \sim R_{47}$ 、 $R_{51} \sim R_{57}$ 、 $R_{61} \sim R_{69}$ 、 $R_{71} \sim R_{79}$ 、 $R_{81} \sim R_{89}$ 、および $R_{101} \sim R_{109}$ はそれぞれ独立に、水素原子または前記置換基群から選ばれる置換基を表し、 $Ar_7$ 、 $Ar_8$ および $Ar_9$ はそれぞれ独立に、水素原子、前記置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換の芳香族炭化水素基、あるいは前記置換基群から選ばれる置換基で置換または未置換の芳香族複素環基を表す)

## 【請求項8】

請求項7に記載の芳香族化合物を含む有機電界発光素子材料。

30

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0001】

本発明は、新規な芳香族化合物および該芳香族化合物を含有してなる有機電界発光素子に関する。

## 【背景技術】

## 【0002】

従来、無機電界発光素子は、例えば、バックライトなどのパネル型光源として使用されてきたが、該発光素子を駆動させるには、交流の高電圧が必要である。最近になり、発光材料に有機材料を用いた有機電界発光素子（有機エレクトロルミネッセンス素子：有機EL素子）が開発された（例えば、非特許文献1参照）。

40

## 【0003】

有機電界発光素子は蛍光性有機化合物を含む薄膜を、陽極と陰極間に挟持した構造を有し、該薄膜に電子および正孔（ホール）を注入して、再結合させることにより励起子（エキシトン）を生成させ、この励起子が失活する際に放出される光を利用して発光する素子である。有機電界発光素子は、数V～数十V程度の直流の低電圧で発光が可能であり、また、蛍光性有機化合物の種類を選択することにより、種々の色（例えば、赤色、青色、緑色）の発光が可能である。このような特徴を有する有機電界発光素子は種々の発光素子、表示素子等への応用が期待されている。しかしながら、一般に、発光輝度が低く、実用上充分ではない。

50

## 【 0 0 0 4 】

発光輝度を向上させる方法として、発光層に、ホスト材料としてトリス（８ - キノリノラート）アルミニウム等を使用し、ゲスト化合物（ドーパント）としてクマリン誘導体、ピラン誘導体を使用した有機電界発光素子が提案されている[非特許文献 2 参照]。また、発光層の材料として、アントラセン誘導体を用いた有機電界発光素子が提案されている（例えば、特許文献 1、特許文献 2 参照）。また、発光層のゲスト化合物として、アントラセン誘導体を使用した有機電界発光素子が提案されている（例えば、特許文献 3、特許文献 4、特許文献 5 参照）。

## 【 0 0 0 5 】

しかしながら、これらの発光素子も十分な発光輝度、発光寿命を有しているとはいえない。

10

現在では、さらなる高輝度化、長寿命化が望まれていおり、高輝度発光する発光材料および輝度の減衰が少ない発光材料が望まれている。

【非特許文献 1】Appl. Phys. Lett., 51, 913 (1987)

【非特許文献 2】J. Appl. Phys., 65, 3610 (1989)

【非特許文献 3】J. Am. Chem. Soc., 124, 11576 (2002)

【特許文献 1】特開平 8 - 1 2 6 0 0 号公報

【特許文献 2】特開平 1 1 - 1 1 1 4 5 8 号公報

【特許文献 3】特開平 1 0 - 3 6 8 3 2 号公報

【特許文献 4】特開平 1 0 - 2 9 4 1 7 9 号公報

20

【特許文献 5】特開平 0 8 - 0 1 2 6 0 0 号公報

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

## 【 0 0 0 6 】

本発明の課題は、新規な芳香族化合物を提供することである。さらに詳しくは、例えば、有機電界発光素子の発光材料として、好適に使用することができる芳香族化合物を提供することである。

【課題を解決するための手段】

## 【 0 0 0 7 】

本発明者らは、上記課題を解決するために、種々の芳香族化合物、特に、有機電界発光素子の発光材料に好適に使用できる芳香族化合物に関して鋭意検討を行った結果、本発明を完成させるに至った。すなわち、本発明は、

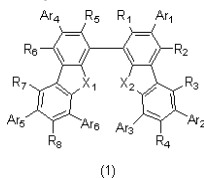
30

1) : 一対の電極間に、ビスジベンゾフラン骨格を有する化合物を少なくとも一種含有する層を少なくとも一層挟持してなる有機電界発光素子、

2) : 一般式 (1)、一般式 (2) または一般式 (3) で表される芳香族化合物、

## 【 0 0 0 8 】

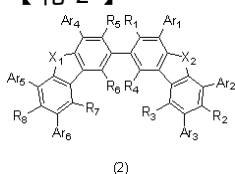
## 【化 1】



40

## 【 0 0 0 9 】

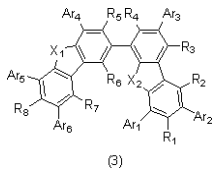
## 【化 2】



50

## 【 0 0 1 0 】

## 【 化 3 】



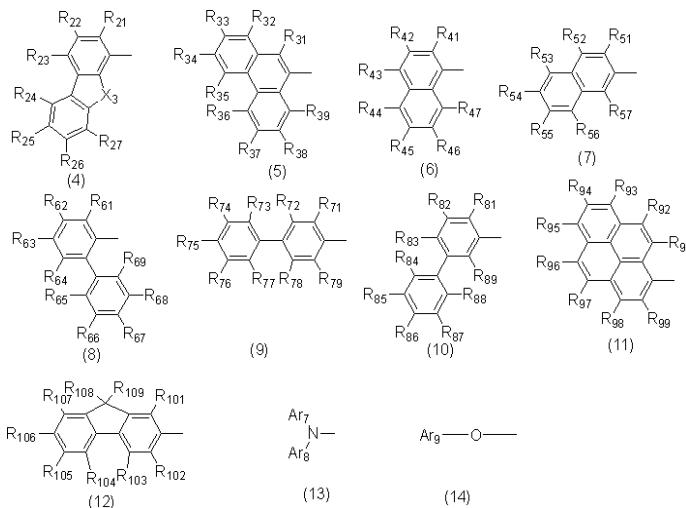
## 【 0 0 1 1 】

〔式中、 $R_1 \sim R_8$  は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表し、 $Ar_1 \sim Ar_6$  はそれぞれ独立に、水素原子、置換または無置換の芳香族炭化水素基、置換または未置換のアミノ基、炭素数 1 ~ 24 の直鎖、分岐または環状のアルキル基、炭素数 1 ~ 24 の直鎖、分岐または環状のアルコキシ基、置換または未置換のアリールオキシ基、あるいは、置換または無置換の芳香族複素環基を表し、 $Ar_1 \sim Ar_6$  の少なくとも一つは置換または無置換の芳香族炭化水素基、置換または未置換のアミノ基、置換または未置換のアリールオキシ基、あるいは、置換または無置換の芳香族複素環基を表し、 $X_1$  はおよび  $X_2$  は酸素原子または硫黄原子を表す〕

3) : 一般式 (1)、一般式 (2) および / または一般式 (3) で表される芳香族化合物において、 $Ar_1 \sim Ar_6$  少なくとも一つがそれぞれ独立に、一般式 (4) ~ (14) で表される 2) 記載の芳香族化合物、

## 【 0 0 1 2 】

## 【 化 4 】



## 【 0 0 1 3 】

〔式中、 $R_{21} \sim R_{27}$ 、 $R_{31} \sim R_{39}$ 、 $R_{41} \sim R_{47}$ 、 $R_{51} \sim R_{57}$ 、 $R_{61} \sim R_{69}$ 、 $R_{71} \sim R_{79}$ 、 $R_{81} \sim R_{89}$ 、 $R_{91} \sim R_{99}$  および  $R_{101} \sim R_{109}$  はそれぞれ独立に水素原子または置換基を表し、 $X_3$  は酸素原子または硫黄原子を表し、 $Ar_7$ 、 $Ar_8$  および  $Ar_9$  はそれぞれ独立に水素原子、置換または未置換の芳香族炭化水素基、あるいは置換または未置換の芳香族複素環基を表す〕

4) : 一对の電極間に、一般式 (1)、一般式 (2) または一般式 (3) で表される芳香族化合物を少なくとも 1 種含有する層を少なくとも一層挟持してなる 1) 記載の有機電界発光素子、

5) : 一般式 (1)、一般式 (2) または一般式 (3) で表される芳香族化合物を含有する層が、発光層である 4) 記載の有機電界発光素子、

6) : 一般式 (1)、一般式 (2) または一般式 (3) で表される芳香族化合物を含有する層が、正孔注入輸送層である 4) 記載の有機電界発光素子、

7) : 発光層がホスト材料とドーパント材料より形成され、一般式 (1)、一般式 (2) または一般式 (3) で表される芳香族化合物が発光層ホスト材料として含有されている 4) 記載の有機電界発光素子、

10

20

30

40

50

8) : 一对の電極間に、さらに、正孔注入輸送層を有する4)、5)、6)または7)に記載の有機電界発光素子、

9) : 一对の電極間に、さらに、電子注入輸送層を有する4)~8)のいずれかに記載の有機電界発光素子、  
に関するものである。

【発明の効果】

【0014】

本発明により、新規な芳香族化合物、および発光寿命が長く、耐久性に優れ、発光効率が高い有機電界発光素子を提供することが可能になる。

【発明を実施するための最良の形態】

【0015】

以下、本発明に関し詳細に説明する。

本発明は、一对の電極間に、ビスベンゾフラン骨格を有する化合物を少なくとも一種含有する層を少なくとも一層挟持してなる有機電界発光素子に関するものである。一对の電極とは、好ましくは、少なくとも一方が透明または半透明の電極を表し、より好ましくは、ITO(インジウム・チン・オキサイド)、IZO(インジウム・ジnk・オキサイド)等からなる陽極と、低い仕事関数を有する金属からなる陰極を表す。

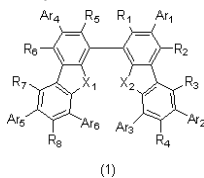
【0016】

ビスベンゾフラン骨格を有する化合物とは、好ましくは、4,4'-ビスベンゾフラン、2,4'-ビスベンゾフラン、あるいは2,2'-ビスベンゾフランを表し、より好ましくは、4,4'-ビスベンゾフランを表す。ビスベンゾフラン骨格を有する化合物を少なくとも一種含有する層とは、好ましくは発光層、正孔注入輸送層、あるいは電子輸送層を表し、より好ましくは発光層あるいは正孔注入輸送層を表す。

本発明に係るビスベンゾフラン骨格を有する芳香族化合物は好ましくは、一般式(1)、一般式(2)または一般式(3)で表される化合物である。

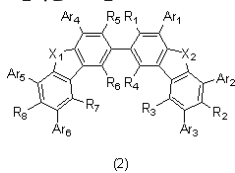
【0017】

【化5】



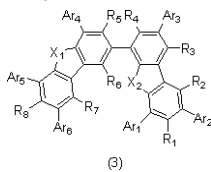
【0018】

【化6】



【0019】

【化7】



【0020】

〔式中、 $R_1 \sim R_8$  は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表し、 $Ar_1 \sim Ar_6$  はそれぞれ独立に、水素原子、置換または未置換の芳香族炭化水素基、あるいは、置換または未置換の芳香族複素環基を表し、 $Ar_1 \sim Ar_6$  の少なくとも一つは、置換または無置

10

20

30

40

50

換の芳香族炭化水素基、置換または未置換のアミノ基、置換または未置換のアリールオキシ基、あるいは、置換または無置換の芳香族複素環基を表し、 $X_1$  および  $X_2$  は酸素原子または硫黄原子を表す]

一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物において、 $R_1 \sim R_8$ は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表す。ここで、「置換基」とは、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、エステル基、直鎖、分岐または環状のアルキル基、直鎖、分岐または環状のアルコキシ基、置換または未置換のアラルキル基、置換または未置換のアラルキルオキシ基、直鎖、分岐または環状のアルケニル基、置換または未置換のアリール基、あるいは、置換または未置換のアリールオキシ基を表す。 $R_1 \sim R_8$ は、好ましくは、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換または未置換のアミノ基、エステル基、炭素数1~10の直鎖、分岐または環状のアルキル基、炭素数1~10の直鎖、分岐または環状のアルコキシ基、炭素数7~20の置換または未置換のアラルキル基、炭素数7~20の置換または未置換のアラルキルオキシ基、炭素数2~20の置換または未置換の直鎖、分岐または環状のアルケニル基、炭素数4~20の置換または未置換のアリール基または炭素数4~20の置換または未置換のアリールオキシ基を表し、より好ましくは、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換または未置換のアミノ基、炭素数1~8の直鎖、分岐または環状のアルキル基、炭素数1~8の直鎖、分岐または環状のアルコキシ基、炭素数7~16の置換または未置換のアラルキル基、炭素数7~16の置換または未置換のアラルキルオキシ基、炭素数2~10の置換または未置換の直鎖、分岐または環状のアルケニル基、炭素数4~16の置換または未置換のアリール基または炭素数4~16の置換または未置換のアリールオキシ基を表す。

#### 【0021】

なお、本願明細書中の「置換または未置換」とは、「アルキル基、アルケニル基、アラルキル基、アリール基、アルコキシ基、アルケニルオキシ基、アラルキルオキシ基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ジアルキルアミノ基、アリールアルキルアミノ基、およびジアリールアミノ基から選ばれる置換基で置換された、または、未置換」を表し、好ましくは「炭素数1~10のアルキル基、炭素数2~20のアルキル基、炭素数7~20のアラルキル基、炭素数4~20のアリール基、炭素数1~10のアルコキシ基、炭素数2~20のアルケニルオキシ基、炭素数7~20のアラルキルオキシ基、炭素数4~20のアリールオキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、炭素数1~20のジアルキルアミノ基、炭素数4~20のアリールアルキルアミノ基、および炭素数4~20のジアリールアミノ基から選ばれる置換基で置換された、または未置換」を表す。

また、 $R_1 \sim R_8$ の隣合う基は、それぞれ隣接する基と共に環を形成していてもよい。

#### 【0022】

$R_1 \sim R_8$ のハロゲン原子の具体例としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子等を挙げることができる。

$R_1 \sim R_8$ の置換または未置換のアミノ基の具体例としては、例えば、アミノ基、N-メチルアミノ基、N-エチルアミノ基、N-n-プロピルアミノ基、N-iso-プロピルアミノ基、N-n-ブチルアミノ基、N-iso-ブチルアミノ基、N-sec-ブチルアミノ基、N-tert-ブチルアミノ基、N-n-ペンチルアミノ基、N-シクロペンチルアミノ基、N-n-ヘキシルアミノ基、N-シクロヘキシルアミノ基、N-ベンジルアミノ基、N-フェネチルアミノ基、N-フェニルアミノ基、N-(1-ナフチル)アミノ基、N-(2-ナフチル)アミノ基、N-(4-フェニルフェニル)アミノ基、N-(3-フェニルフェニル)アミノ基、N-(2-フェニルフェニル)アミノ基、N-(4-メチルフェニル)アミノ基、N-(2-メチルフェニル)アミノ基、N-(2-アントラニル)アミノ基、N-(9-アントラニル)アミノ基、N,N-ジメチルアミノ基、N,N-ジエチルアミノ基、N,N-ジ-n-プロピルアミノ基、N,N-ジ-iso-プロピルアミノ基、N,N-ジ-n-ブチルアミノ基、N,N-ジ-iso-ブチルアミノ基、N,N-ジ-sec-ブチルアミノ基、N,N-ジ-n-ペンチルアミノ基、N,N-ジシクロペンチルアミノ基、

N, N - ジシクロヘキシルアミノ基、N, N - ジベンジルアミノ基、N, N - ジフェネチルアミノ基、N - メチル - N - エチルアミノ基、N - メチル - N - n - プロピルアミノ基、N - メチル - N - iso-プロピルアミノ基、N - メチル - N - n - ブチルアミノ基、N - メチル - N - tert-ブチルアミノ基、N - メチル - N - シクロペンチルアミノ基、N - メチル - N - シクロヘキシルアミノ基、N - メチル - N - ベンジルアミノ基、N - メチル - N - フェネチルアミノ基、N - エチル - N - tert-ブチルアミノ基、N - エチル - N - シクロヘキシルアミノ基、N - エチル - N - ベンジルアミノ基、N - iso-プロピル - N - シクロペンチルアミノ基、N - iso-プロピル - N - シクロヘキシルアミノ基、N - iso-プロピル - N - ベンジルアミノ基、N - tert-ブチル - N - シクロヘキシルアミノ基、N - tert-ブチル - N - ベンジルアミノ基、N - シクロペンチル - N - ベンジルアミノ基、N - シクロヘキシル - N - ベンジルアミノ基、N - メチル - N - フェニルアミノ基、N - エチル - N - フェニルアミノ基、N - シクロヘキシル - N - フェニルアミノ基、N, N - ジフェニルアミノ基、N, N - ジ(1 - ナフチル)アミノ基、N, N - ジ(2 - ナフチル)アミノ基、N, N - ジ(4 - フェニルフェニル)アミノ基、N, N - (4 - メチルフェニル)アミノ基、N, N - ジ(3 - メチルフェニル)アミノ基、N - フェニル - N - (1 - ナフチル)アミノ基、N - フェニル - N - (2 - ナフチル)アミノ基、N - フェニル - N - (4 - フェニルフェニル)アミノ基、N - フェニル - N - (4 - メチルフェニル)アミノ基、N - (1 - ナフチル) - N - (4' - フェニルフェニル)アミノ基、N - フェニル - N - (4 - tert-ブチルフェニル)アミノ基、N - フェニル - N - (3 - tert-ブチルフェニル)基を挙げることができる。

10

20

R<sub>1</sub> ~ R<sub>8</sub>のエステル基としては、例えば、メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基、n - プロピルオキシカルボニル基、iso-プロピルオキシカルボニル基、n - ブチルオキシカルボニル基、iso-ブチルオキシカルボニル基、tert-ブチルオキシカルボニル基、n - ペンチルオキシカルボニル基、シクロペンチルオキシカルボニル基、シクロヘキシルオキシカルボニル基、ベンジルオキシカルボニル基、フェニルオキシカルボニル基、1 - ナフチルオキシカルボニル基、2 - ナフチルオキシカルボニル基、アセチルオキシ基、エチルカルボニルオキシ基、n - プロピルカルボニルオキシ基、n - ブチルカルボニルオキシ基、tert-ブチルカルボニルオキシ基、シクロヘキシルカルボニルオキシ基、ベンジルカルボニルオキシ基、フェニルカルボニルオキシ基、1 - ナフチルカルボニルオキシ基、2 - ナフチルカルボニルオキシ基を挙げることができる。

30

#### 【0023】

R<sub>1</sub> ~ R<sub>8</sub>の直鎖、分岐または環状のアルキル基の具体例としては、メチル基、エチル基、n - プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、イソブチル基、sec-ブチル基、tert-ブチル基、n - ペンチル基、イソペンチル基、ネオペンチル基、tert-ペンチル基、n - ヘキシル基、1 - メチルペンチル基、4 - メチル - 2 - ペンチル基、2 - エチルブチル基、n - ヘプチル基、1 - メチルヘキシル基、n - オクチル基、1 - メチルヘプチル基、2 - エチルヘキシル基、2 - プロピルペンチル基、n - ノニル基、2, 2 - ジメチルヘプチル基、2, 6 - ジメチル - 4 - ヘプチル基、3, 5, 5 - トリメチルヘキシル基、n - デシル基、1 - エチルオクチル基、n - ウンデシル基、1 - メチルデシル基、n - ドデシル基、n - トリデシル基、1 - ヘキシルヘプチル基、n - テトラデシル基、n - ペンタデシル基、1 - ヘプチルオクチル基、n - ヘキサデシル基、n - ヘプタデシル基、1 - オクチルノニル基、n - オクタデシル基、1 - ノニルデシル基、1 - デシルウンデシル基、n - エイコシル基、n - ドコシル基、n - テトラコシル基、シクロヘキシルメチル基、(1 - イソプロピルシクロヘキシル)メチル基、2 - シクロヘキシルエチル基、ボルネル基、イソボルネル基、1 - ノルボルニル基、2 - ノルボルナンメチル基、1 - ビシクロ〔2, 2, 2〕オクチル基、1 - アダマンチル基、3 - ノルアダマンチル基、1 - アダマンチルメチル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、1 - メチルシクロペンチル基、シクロヘキシル基、4 - メチルシクロヘキシル基、3 - メチルシクロヘキシル基、2 - メチルシクロヘキシル基、2, 3 - ジメチルシクロヘキシル基、2, 5 - ジメチルシクロヘキシル基、2, 6 - ジメチルシクロヘキシル基、3, 4 - ジメチルシクロヘキシル基、3, 5 -

40

50

ジメチルシクロヘキシル基、2, 4, 6 - トリメチルシクロヘキシル基、3, 3, 5 - トリメチルシクロヘキシル基、2, 6 - ジイソプロピルシクロヘキシル基、4 - tert - ブチルシクロヘキシル基、3 - tert - ブチルシクロヘキシル基、4 - フェニルシクロヘキシル基、2 - フェニルシクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、シクロデシル基、シクロドデシル基、シクロテトラデシル基、

【0024】

メトキシメチル基、エトキシメチル基、n - ブトキシメチル基、n - ヘキシルオキシメチル基、(2 - エチルブチルオキシ)メチル基、n - オクチルオキシメチル基、n - デシルオキシメチル基、2 - メトキシエチル基、2 - エトキシエチル基、2 - n - プロポキシエチル基、2 - イソプロポキシエチル基、2 - n - ブトキシエチル基、2 - n - ペンチルオキシエチル基、2 - n - ヘキシルオキシエチル基、2 - (2' - エチルブチルオキシ)エチル基、2 - n - ヘプチルオキシエチル基、2 - n - オクチルオキシエチル基、2 - (2' - エチルヘキシルオキシ)エチル基、2 - n - デシルオキシエチル基、2 - n - ドデシルオキシエチル基、2 - n - テトラデシルオキシエチル基、2 - シクロヘキシルオキシエチル基、2 - メトキシプロピル基、3 - メトキシプロピル基、3 - エトキシプロピル基、3 - n - プロポキシプロピル基、3 - イソプロポキシプロピル基、3 - (n - ブトキシ)プロピル基、3 - (n - ペンチルオキシ)プロピル基、3 - (n - ヘキシルオキシ)プロピル基、3 - (2' - エチルブトキシ)プロピル基、3 - (n - オクチルオキシ)プロピル基、3 - (2' - エチルヘキシルオキシ)プロピル基、3 - (n - デシルオキシ)プロピル基、3 - (n - ドデシルオキシ)プロピル基、3 - (n - テトラデシルオキシ)プロピル基、3 - シクロヘキシルオキシプロピル基、4 - メトキシブチル基、4 - エトキシブチル基、4 - n - プロポキシブチル基、4 - イソプロポキシブチル基、4 - n - ブトキシブチル基、4 - n - ヘキシルオキシブチル基、4 - n - オクチルオキシブチル基、4 - n - デシルオキシブチル基、4 - n - ドデシルオキシブチル基、5 - メトキシペンチル基、5 - エトキシペンチル基、5 - n - プロポキシペンチル基、6 - エトキシヘキシル基、6 - イソプロポキシヘキシル基、6 - n - ブトキシヘキシル基、6 - n - ヘキシルオキシヘキシル基、6 - n - デシルオキシヘキシル基、4 - メトキシシクロヘキシル基、7 - エトキシヘプチル基、7 - イソプロポキシヘプチル基、8 - メトキシオクチル基、10 - メトキシデシル基、10 - n - ブトキシデシル基、12 - エトキシドデシル基、12 - イソプロポキシドデシル基、テトラヒドロフルフリル基、

【0025】

2 - (2' - メトキシエトキシ)エチル基、2 - (2' - エトキシエトキシ)エチル基、2 - (2' - n - ブトキシエトキシ)エチル基、3 - (2' - エトキシエトキシ)プロピル基、2 - アリルオキシエチル基、2 - (4' - ペンテニルオキシ)エチル基、3 - アリルオキシプロピル基、3 - (2' - ヘキセニルオキシ)プロピル基、3 - (2' - ヘプテニルオキシ)プロピル基、3 - (1' - シクロヘキセニルオキシ)プロピル基、4 - アリルオキシブチル基、

【0026】

ベンジルオキシメチル基、2 - ベンジルオキシエチル基、2 - フェネチルオキシエチル基、2 - (4' - メチルベンジルオキシ)エチル基、2 - (2' - メチルベンジルオキシ)エチル基、2 - (4' - フルオロベンジルオキシ)エチル基、2 - (4' - クロロベンジルオキシ)エチル基、3 - ベンジルオキシプロピル基、3 - (4' - メトキシベンジルオキシ)プロピル基、4 - ベンジルオキシブチル基、2 - (ベンジルオキシメトキシ)エチル基、2 - (4' - メチルベンジルオキシメトキシ)エチル基、

【0027】

フェニルオキシメチル基、4 - メチルフェニルオキシメチル基、3 - メチルフェニルオキシメチル基、2 - メチルフェニルオキシメチル基、4 - メトキシフェニルオキシメチル基、4 - フルオロフェニルオキシメチル基、4 - クロロフェニルオキシメチル基、2 - クロロフェニルオキシメチル基、2 - フェニルオキシエチル基、2 - (4' - メチルフェニルオキシ)エチル基、2 - (4' - エチルフェニルオキシ)エチル基、2 - (4' - メト

10

20

30

40

50

キシフェニルオキシ)エチル基、2-(4'-クロロフェニルオキシ)エチル基、2-(4'-プロモフェニルオキシ)エチル基、2-(1'-ナフチルオキシ)エチル基、2-(2'-ナフチルオキシ)エチル基、3-フェニルオキシプロピル基、3-(2'-ナフチルオキシ)プロピル基、4-フェニルオキシブチル基、4-(2'-エチルフェニルオキシ)ブチル基、5-(4'-tert-ブチルフェニルオキシ)ペンチル基、6-(2'-クロロフェニルオキシ)ヘキシル基、8-フェニルオキシオクチル基、10-フェニルオキシデシル基、10-(3'-クロロフェニルオキシ)デシル基、2-(2'-フェニルオキシエトキシ)エチル基、3-(2'-フェニルオキシエトキシ)プロピル基、4-(2'-フェニルオキシエトキシ)ブチル基、

【0028】

n-ブチルチオメチル基、n-ヘキシルチオメチル基、2-メチルチオエチル基、2-エチルチオエチル基、2-n-ブチルチオエチル基、2-n-ヘキシルチオエチル基、2-n-オクチルチオエチル基、2-n-デシルチオエチル基、3-メチルチオプロピル基、3-エチルチオプロピル基、3-n-ブチルチオプロピル基、4-エチルチオブチル基、4-n-プロピルチオブチル基、4-n-ブチルチオブチル基、5-エチルチオペンチル基、6-メチルチオヘキシル基、6-エチルチオヘキシル基、6-n-ブチルチオヘキシル基、8-メチルチオオクチル基、2-(2'-メトキシエチルチオ)エチル基、4-(3'-エトキシプロピルチオ)ブチル基、2-(2'-エチルチオエチルチオ)エチル基、2-アリルチオエチル基、2-ベンジルチオエチル基、3-(4'-メチルベンジルチオ)プロピル基、4-ベンジルチオブチル基、2-(2'-ベンジルオキシエチルチオ)エチル基、3-(3'-ベンジルチオプロピルチオ)プロピル基、2-フェニルチオエチル基、2-(4'-メトキシフェニルチオ)エチル基、2-(2'-フェニルオキシエチルチオ)エチル基、3-(2'-フェニルチオエチルチオ)プロピル基、

【0029】

2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシプロピル基、3-ヒドロキシプロピル基、3-ヒドロキシブチル基、4-ヒドロキシブチル基、6-ヒドロキシヘキシル基、5-ヒドロキシヘプチル基、8-ヒドロキシオクチル基、10-ヒドロキシデシル基、12-ヒドロキシドデシル基、2-ヒドロキシシクロヘキシル基などの直鎖、分岐または環状のアルキル基を挙げることができる。

【0030】

R<sub>1</sub>~R<sub>8</sub>の直鎖、分岐または環状のアルコキシ基の具体例としては、例えば、上記の直鎖、分岐または環状のアルキル基から誘導される直鎖、分岐または環状のアルコキシ基を挙げることができる。

R<sub>1</sub>~R<sub>8</sub>の置換または未置換のアラルキル基の具体例としては、ベンジル基、-メチルベンジル基、-エチルベンジル基、フェネチル基、-メチルフェネチル基、-メチルフェネチル基、-ジメチルベンジル基、-ジメチルフェネチル基、4-メチルフェネチル基、4-メチルベンジル基、3-メチルベンジル基、2-メチルベンジル基、4-エチルベンジル基、2-エチルベンジル基、4-イソプロピルベンジル基、4-tert-ブチルベンジル基、2-tert-ブチルベンジル基、4-tert-ペンチルベンジル基、4-シクロヘキシルベンジル基、4-n-オクチルベンジル基、4-tert-オクチルベンジル基、4-アリルベンジル基、4-ベンジルベンジル基、4-フェネチルベンジル基、4-フェニルベンジル基、4-(4'-メチルフェニル)ベンジル基、4-メトキシベンジル基、2-メトキシベンジル基、2-エトキシベンジル基、4-n-プトキシベンジル基、4-n-ヘプチルオキシベンジル基、4-n-デシルオキシベンジル基、4-n-テトラデシルオキシベンジル基、4-n-ヘプタデシルオキシベンジル基、

3,4-ジメトキシベンジル基、4-メトキシメチルベンジル基、4-イソプトキシメチルベンジル基、4-アリルオキシベンジル基、4-ビニルオキシメチルベンジル基、4-ベンジルオキシベンジル基、4-フェネチルオキシベンジル基、4-フェニルオキシベ

10

20

30

40

50

ンジル基、3 - フェニルオキシベンジル基、  
 4 - ヒドロキシベンジル基、3 - ヒドロキシベンジル基、2 - ヒドロキシベンジル基、4  
 - ヒドロキシ - 3 - メトキシベンジル基、4 - フルオロベンジル基、2 - フルオロベンジ  
 ル基、4 - クロロベンジル基、3 - クロロベンジル基、2 - クロロベンジル基、3, 4 -  
 ジクロロベンジル基、2 - フルフリル基、ジフェニルメチル基、1 - ナフチルメチル基、  
 2 - ナフチルメチル基などの置換基を有していてもよいアラルキル基を挙げることができ  
 る。

【0031】

R<sub>1</sub> ~ R<sub>8</sub> の置換または未置換のアラルキルオキシ基の具体例としては、例えば、上記  
 の置換または未置換のアラルキル基から誘導される置換または未置換のアラルキルオキシ  
 基を挙げることができる。

10

【0032】

R<sub>1</sub> ~ R<sub>8</sub> の置換または未置換の直鎖、分岐または環状のアルケニル基の具体例として  
 は、ビニル基、2 - フェニルビニル基、2, 2 - ジフェニルビニル基、2, 2, 1 - トリ  
 フェニルビニル基、2 - (4' - N, N - ジメチルアミノフェニル) ビニル基、2, 2 -  
 ビス(4' - N, N - ジメチルアミノフェニル) ビニル基、2 - (4' - N, N - ジフェ  
 ニルアミノフェニル) ビニル基、2 - (4' - メトキシフェニル) ビニル基、2 - (4'  
 - メチルフェニル) ビニル基、2 - (3' - メチルフェニル) ビニル基、2 - n - プロペ  
 ニル基、2 - n - ブテニル基、2 - メチル - 2 - ヘキセニル基、1 - シクロヘキセニル基  
 などの置換または未置換の直鎖、分岐鎖または環状のアルケニル基を挙げることができ  
 る。

20

【0033】

R<sub>1</sub> ~ R<sub>8</sub> の置換または未置換のアリール基の具体例としては、フェニル基、1 - ナフ  
 チル基、2 - ナフチル基、2 - アントラセニル基、9 - アントラセニル基、フルオレニル  
 基、4 - キノリル基、5 - ピリジル基、4 - ピリジル基、3 - ピリジル基、2 - ピリジル  
 基、2 - ピリミジル基、4 - ピリミジン基、5 - ピリミジル基、2 - ピリダジニル基、2  
 - ピラジニル基、3 - フリル基、2 - フリル基、3 - チエニル基、2 - チエニル基、2 -  
 オキサゾリル基、2 - チアゾリル基、2 - ベンゾチオフェニル基、2 - ベンゾフリル基、  
 2 - ベンゾオキサゾリル基、2 - ベンゾチアゾリル基、2 - ベンゾイミダゾリル基、

4 - メチルフェニル基、3 - メチルフェニル基、2 - メチルフェニル基、4 - エチルフ  
 ェニル基、3 - エチルフェニル基、2 - エチルフェニル基、4 - n - プロピルフェニル基  
 、4 - イソプロピルフェニル基、2 - イソプロピルフェニル基、4 - n - ブチルフェニル  
 基、4 - イソブチルフェニル基、4 - sec - ブチルフェニル基、2 - sec - ブチルフェ  
 ニル基、4 - tert - ブチルフェニル基、3 - tert - ブチルフェニル基、2 - tert - ブチルフ  
 ェニル基、4 - n - ペンチルフェニル基、4 - イソペンチルフェニル基、4 - tert - ペン  
 チルフェニル基、4 - n - ヘキシルフェニル基、4 - n - ヘプチルフェニル基、4 - n -  
 オクチルフェニル基、4 - (2' - エチルヘキシル) フェニル基、4 - tert - オクチルフ  
 ェニル基、4 - n - ノニルフェニル基、4 - n - デシルフェニル基、4 - n - ドデシルフ  
 ェニル基、4 - n - テトラデシルフェニル基、4 - n - ヘキサデシルフェニル基、4 - n  
 - オクタデシルフェニル基、4 - シクロペンチルフェニル基、4 - シクロヘキシルフェ  
 ニル基、4 - (4' - tert - ブチルシクロヘキシル) フェニル基、4 - (4' - メチルシク  
 ロヘキシル) フェニル基、3 - シクロヘキシルフェニル基、2 - シクロヘキシルフェ  
 ニル基、

30

40

4 - エチル - 1 - ナフチル基、6 - n - ブチル - 2 - ナフチル基、

【0034】

2, 3 - ジメチルフェニル基、2, 4 - ジメチルフェニル基、2, 5 - ジメチルフェ  
 ニル基、3, 4 - ジメチルフェニル基、3, 5 - ジメチルフェニル基、2, 6 - ジメチルフ  
 ェニル基、2, 3, 5 - トリメチルフェニル基、3, 4, 5 - トリメチルフェニル基、2  
 , 4 - ジエチルフェニル基、2, 3, 6 - トリメチルフェニル基、2, 4, 6 - トリメチ  
 ルフェニル基、2, 6 - ジエチルフェニル基、2, 6 - ジイソプロピルフェニル基、2,

50

6 - ジイソブチルフェニル基、2, 4 - ジ - tert - ブチルフェニル基、2, 5 - ジ - tert - ブチルフェニル基、3, 5 - ジ - tert - ブチルフェニル基、2, 4 - ジネオペンチルフェニル基、2, 5 - ジ - tert - ペンチルフェニル基、4, 6 - ジ - tert - ブチル - 2 - メチルフェニル基、5 - tert - ブチル - 2 - メチルフェニル基、4 - tert - ブチル - 2, 6 - ジメチルフェニル基、2, 3, 5, 6 - テトラメチルフェニル基、5 - インダニル基、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロ - 5 - ナフチル基、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロ - 6 - ナフチル基、

## 【0035】

4 - メトキシフェニル基、3 - メトキシフェニル基、2 - メトキシフェニル基、4 - エトキシフェニル基、2 - エトキシフェニル基、3 - n - プロポキシフェニル基、4 - イソプロポキシフェニル基、2 - イソプロポキシフェニル基、4 - n - ブトキシフェニル基、4 - イソブトキシフェニル基、2 - イソブトキシフェニル基、2 - sec - ブトキシフェニル基、4 - n - ペンチルオキシフェニル基、4 - イソペンチルオキシフェニル基、2 - イソペンチルオキシフェニル基、2 - ネオペンチルオキシフェニル基、4 - n - ヘキシルオキシフェニル基、2 - (2' - エチルブチル) オキシフェニル基、4 - n - オクチルオキシフェニル基、4 - n - デシルオキシフェニル基、4 - n - ドデシルオキシフェニル基、4 - n - テトラデシルオキシフェニル基、4 - n - ヘキサデシルオキシフェニル基、4 - n - オクタデシルオキシフェニル基、4 - シクロヘキシルオキシフェニル基、2 - シクロヘキシルオキシフェニル基、

2 - メトキシ - 1 - ナフチル基、4 - メトキシ - 1 - ナフチル基、4 - n - ブトキシ - 1 - ナフチル基、5 - エトキシ - 1 - ナフチル基、6 - エトキシ - 2 - ナフチル基、6 - n - ブトキシ - 2 - ナフチル基、6 - n - ヘキシルオキシ - 2 - ナフチル基、7 - メトキシ - 2 - ナフチル基、7 - n - ブトキシ - 2 - ナフチル基、

## 【0036】

2, 3 - ジメトキシフェニル基、2, 4 - ジメトキシフェニル基、2, 5 - ジメトキシフェニル基、2, 6 - ジメトキシフェニル基、3, 4 - ジメトキシフェニル基、3, 5 - ジメトキシフェニル基、3, 5 - ジエトキシフェニル基、3, 5 - ジ - n - ブトキシフェニル基、2 - メトキシ - 4 - メチルフェニル基、2 - メトキシ - 5 - メチルフェニル基、2 - メチル - 4 - メトキシフェニル基、3 - メチル - 4 - メトキシフェニル基、3 - メチル - 5 - メトキシフェニル基、3 - エチル - 5 - メトキシフェニル基、2 - メトキシ - 4 - エトキシフェニル基、2 - メトキシ - 6 - エトキシフェニル基、3, 4, 5 - トリメトキシフェニル基、

## 【0037】

4 - フルオロフェニル基、3 - フルオロフェニル基、2 - フルオロフェニル基、4 - クロロフェニル基、3 - クロロフェニル基、2 - クロロフェニル基、4 - プロモフェニル基、2 - プロモフェニル基、4 - クロロ - 1 - ナフチル基、4 - クロロ - 2 - ナフチル基、6 - プロモ - 2 - ナフチル基、2, 3 - ジフルオロフェニル基、2, 4 - ジフルオロフェニル基、2, 5 - ジフルオロフェニル基、2, 6 - ジフルオロフェニル基、3, 4 - ジフルオロフェニル基、3, 5 - ジフルオロフェニル基、2, 3 - ジクロロフェニル基、2, 4 - ジクロロフェニル基、2, 5 - ジクロロフェニル基、2, 6 - ジクロロフェニル基、3, 4 - ジクロロフェニル基、3, 5 - ジクロロフェニル基、2, 5 - ジプロモフェニル基、2, 4, 6 - トリクロロフェニル基、2, 3, 6 - トリプロモフェニル基、3, 4, 5 - トリフルオロフェニル基、2, 4 - ジクロロ - 1 - ナフチル基、1, 6 - ジクロロ - 2 - ナフチル基、

## 【0038】

2 - フルオロ - 4 - メチルフェニル基、2 - フルオロ - 5 - メチルフェニル基、3 - フルオロ - 2 - メチルフェニル基、3 - フルオロ - 4 - メチルフェニル基、4 - フルオロ - 2 - メチルフェニル基、5 - フルオロ - 2 - メチルフェニル基、2 - クロロ - 4 - メチルフェニル基、2 - クロロ - 5 - メチルフェニル基、2 - クロロ - 6 - メチルフェニル基、3 - クロロ - 2 - メチルフェニル基、4 - クロロ - 2 - メチルフェニル基、4 - クロロ -

10

20

30

40

50

3 - メチルフェニル基、2 - クロロ - 4 , 6 - ジメチルフェニル基、2 - フルオロ - 4 -  
 メトキシフェニル基、2 - フルオロ - 6 - メトキシフェニル基、3 - フルオロ - 4 - エト  
 キシフェニル基、5 - クロロ - 2 - メトキシフェニル基、6 - クロロ - 3 - メトキシフェ  
 ニル基、5 - クロロ - 2 , 4 - ジメトキシフェニル基、2 - クロロ - 4 - ニトロフェニル  
 基、4 - クロロ - 2 - ニトロフェニル基、

4 - トリフルオロメチルフェニル基、3 - トリフルオロメチルフェニル基、2 - トリフル  
 オロメチルフェニル基、3 , 5 - ビス(トリフルオロメチル)フェニル基、

4 - トリフルオロメチルオキシフェニル基、

【0039】

4 - アリルフェニル基、2 - アリルフェニル基、2 - イソプロペニルフェニル基、4 -  
 ベンジルフェニル基、2 - ベンジルフェニル基、4 - (4' - メチルベンジル)フェニル  
 基、4 - クミルフェニル基、4 - (4' - メトキシクミル)フェニル基、

4 - フェニルフェニル基、3 - フェニルフェニル基、2 - フェニルフェニル基、4 - (4'  
 ' - メチルフェニル)フェニル基、4 - (4' - エチルフェニル)フェニル基、4 - (4'  
 ' - イソプロピルフェニル)フェニル基、4 - (4' - tert - ブチルフェニル)フェニル  
 基、4 - (4' - n - ヘキシルフェニル)フェニル基、4 - (4' - n - オクチルフェニ  
 ル)フェニル基、

4 - (4' - メトキシフェニル)フェニル基、4 - (4' - エトキシフェニル)フェニル  
 基、4 - (4' - n - ブトキシフェニル)フェニル基、2 - (2' - メトキシフェニル)  
 フェニル基、4 - (4' - フルオロフェニル)フェニル基、4 - (4' - クロロフェニル)  
 )フェニル基、3 - メチル - 4 - フェニル基、2 - メトキシ - 5 - フェニルフェニル基、  
 3 - メトキシ - 4 - フェニルフェニル基、

【0040】

4 - メトキシメチルフェニル基、4 - エトキシメチルフェニル基、4 - n - ブトキシメ  
 チルフェニル基、3 - メトキシメチルフェニル基、4 - (2' - メトキシエチル)フェニ  
 ル基、4 - (2' - エトキシエチルオキシ)フェニル基、4 - (2' - n - ブトキシエチ  
 ルオキシ)フェニル基、4 - (3' - エトキシプロピルオキシ)フェニル基、4 - ビニル  
 オキシフェニル基、4 - アリルオキシフェニル基、3 - アリルオキシフェニル基、4 - (4'  
 ' - ペンテニルオキシ)フェニル基、4 - アリルオキシ - 1 - ナフチル基、

4 - アリルオキシメチルフェニル基、4 - (2' - アリルオキシエチルオキシ)フェニル  
 基、

【0041】

4 - ベンジルオキシフェニル基、2 - ベンジルオキシフェニル基、4 - フェネチルオキ  
 シフェニル基、4 - (4' - クロロベンジルオキシ)フェニル基、4 - (4' - メチルベ  
 ンジルオキシ)フェニル基、4 - (4' - メトキシベンジルオキシ)フェニル基、4 - (3'  
 ' - エトキシベンジルオキシ)フェニル基、4 - ベンジルオキシ - 1 - ナフチル基、5  
 - (4' - メチルベンジルオキシ) - 1 - ナフチル基、6 - ベンジルオキシ - 2 - ナフチ  
 ル基、6 - (4' - メチルベンジルオキシ) - 2 - ナフチル基、7 - ベンジルオキシ - 2  
 - ナフチル基、4 - (ベンジルオキシメチル)フェニル基、4 - (2' - ベンジルオキシ  
 エチルオキシ)フェニル基、

【0042】

4 - フェニルオキシフェニル基、3 - フェニルオキシフェニル基、2 - フェニルオキシ  
 フェニル基、4 - (4' - メチルフェニルオキシ)フェニル基、4 - (4' - メトキシフ  
 エニルオキシ)フェニル基、4 - (4' - クロロフェニルオキシ)フェニル基、4 - フェ  
 ニルオキシ - 1 - ナフチル基、6 - フェニルオキシ - 2 - ナフチル基、7 - フェニルオキ  
 シ - 2 - ナフチル基、4 - フェニルオキシメチルフェニル基、4 - (2' - フェニルオキ  
 シエチルオキシ)フェニル基、4 - [2' - (4' - メチルフェニルオキシ)エチルオキ  
 シ]フェニル基、4 - [2' - (4' - メトキシフェニルオキシ)エチルオキシ]フェニ  
 ル基、4 - [2' - (4' - クロロフェニルオキシ)エチルオキシ]フェニル基、

4 - アセチルフェニル基、3 - アセチルフェニル基、2 - アセチルフェニル基、4 - エチ

10

20

30

40

50

ルカルボニルフェニル基、2 - エチルカルボニルフェニル基、4 - n - ブチルカルボニルフェニル基、4 - n - ヘキシルカルボニルフェニル基、4 - n - オクチルカルボニルフェニル基、4 - シクロヘキシルカルボニルフェニル基、4 - アセチル - 1 - ナフチル基、6 - アセチル - 2 - ナフチル基、6 - n - ブチルカルボニル - 2 - ナフチル基、4 - アリルカルボニルフェニル基、4 - ベンジルカルボニルフェニル基、4 - ( 4' - メチルベンジル ) カルボニルフェニル基、4 - フェニルカルボニルフェニル基、4 - ( 4' - メチルフェニル ) カルボニルフェニル基、4 - ( 4' - クロロフェニル ) カルボニルフェニル基、4 - フェニルカルボニル - 1 - ナフチル基、

【 0 0 4 3 】

4 - メトキシカルボニルフェニル基、2 - メトキシカルボニルフェニル基、4 - エトキシカルボニルフェニル基、3 - エトキシカルボニルフェニル基、4 - n - プロポキシカルボニルフェニル基、4 - n - ブトキシカルボニルフェニル基、4 - n - ヘキシルオキシカルボニルフェニル基、4 - n - デシロキシカルボニルフェニル基、4 - シクロヘキシルオキシカルボニルフェニル基、4 - エトキシカルボニル - 1 - ナフチル基、6 - メトキシカルボニル - 2 - ナフチル基、6 - n - ブトキシカルボニル - 2 - ナフチル基、4 - アリルオキシカルボニルフェニル基、4 - ベンジロキシカルボニルフェニル基、4 - ( 4' - クロロベンジル ) オキシカルボニルフェニル基、4 - フェネチロキシカルボニルフェニル基、6 - ベンジロキシカルボニル - 2 - ナフチル基、4 - フェニロキシカルボニルフェニル基、4 - ( 4' - エチルフェニル ) オキシカルボニルフェニル基、4 - ( 4' - クロロフェニル ) オキシカルボニルフェニル基、4 - ( 4' - エトキシフェニル ) オキシカルボニルフェニル基、6 - フェニロキシカルボニル - 2 - ナフチル基、

【 0 0 4 4 】

4 - アセチロキシフェニル基、3 - アセチロキシフェニル基、2 - アセチロキシフェニル基、4 - エチルカルボニロキシフェニル基、2 - エチルカルボニロキシフェニル基、4 - n - プロピルカルボニロキシフェニル基、4 - n - ペンチルカルボニロキシフェニル基、4 - n - オクチルカルボニロキシフェニル基、4 - シクロヘキシルカルボニロキシフェニル基、3 - シクロヘキシルカルボニロキシフェニル基、4 - アセチロキシ - 1 - ナフチル基、4 - n - ブチルカルボニロキシ - 1 - ナフチル基、5 - アセチロキシ - 1 - ナフチル基、6 - エチルカルボニロキシ - 2 - ナフチル基、7 - アセチロキシ - 2 - ナフチル基、4 - アリルカルボニロキシフェニル基、4 - ベンジルカルボニロキシフェニル基、4 - フェネチルカルボニロキシフェニル基、6 - ベンジルカルボニロキシ - 2 - ナフチル基、

4 - フェニルカルボニロキシフェニル基、4 - ( 4' - メチルフェニル ) カルボニロキシフェニル基、4 - ( 2' - メチルフェニル ) カルボニロキシフェニル基、4 - ( 4' - クロロフェニル ) カルボニロキシフェニル基、4 - ( 2' - クロロフェニル ) カルボニロキシフェニル基、4 - フェニルカルボニロキシ - 1 - ナフチル基、6 - フェニルカルボニロキシ - 2 - ナフチル基、7 - フェニルカルボニロキシ - 2 - ナフチル基、

【 0 0 4 5 】

4 - メチルチオフェニル基、2 - メチルチオフェニル基、2 - エチルチオフェニル基、3 - エチルチオフェニル基、4 - n - プロピルチオフェニル基、2 - イソプロピルチオフェニル基、4 - n - ブチルチオフェニル基、2 - イソブチルチオフェニル基、2 - ネオペンチルチオフェニル基、4 - n - ヘキシルチオフェニル基、4 - n - オクチルチオフェニル基、4 - シクロヘキシルチオフェニル基、

4 - ベンジルチオフェニル基、3 - ベンジルチオフェニル基、2 - ベンジルチオフェニル基、4 - ( 4' - クロロベンジルチオ ) フェニル基、4 - フェニルチオフェニル基、3 - フェニルチオフェニル基、2 - フェニルチオフェニル基、4 - ( 4' - メチルフェニルチオ ) フェニル基、4 - ( 3' - メチルフェニルチオ ) フェニル基、4 - ( 4' - メトキシフェニルチオ ) フェニル基、4 - ( 4' - クロロフェニルチオ ) フェニル基、2 - エチルチオ - 1 - ナフチル基、4 - メチルチオ - 1 - ナフチル基、6 - エチルチオ - 2 - ナフチ

10

20

30

40

50

ル基、6 - フェニルチオ - 2 - ナフチル基、

【0046】

4 - ニトロフェニル基、3 - ニトロフェニル基、2 - ニトロフェニル基、3, 5 - ジニトロフェニル基、4 - ニトロ - 1 - ナフチル基、4 - ホルミルフェニル基、3 - ホルミルフェニル基、2 - ホルミルフェニル基、4 - ホルミル - 1 - ナフチル基、1 - ホルミル - 2 - ナフチル基、

4 - ピロリジノフェニル基、4 - ピペリジノフェニル基、4 - モルフォリノフェニル基、4 - (N - エチルピペラジノ)フェニル基、4 - ピロリジノ - 1 - ナフチル基、

【0047】

4 - アミノフェニル基、3 - アミノフェニル基、2 - アミノフェニル基、  
4 - (N - メチルアミノ)フェニル基、3 - (N - メチルアミノ)フェニル基、4 - (N - エチルアミノ)フェニル基、2 - (N - イソプロピルアミノ)フェニル基、4 - (N - n - プチルアミノ)フェニル基、2 - (N - n - プチルアミノ)フェニル基、4 - (N - n - オクチルアミノ)フェニル基、4 - (N - n - ドデシルアミノ)フェニル基、4 - (N - ベンジルアミノ)フェニル基、4 - (N - フェニルアミノ)フェニル基、2 - (N - フェニルアミノ)フェニル基、

4 - (N, N - ジメチルアミノ)フェニル基、3 - (N, N - ジメチルアミノ)フェニル基、4 - (N, N - ジエチルアミノ)フェニル基、2 - (N, N - ジメチルアミノ)フェニル基、2 - (N, N - ジエチルアミノ)フェニル基、4 - (N, N - ジ - n - プチルアミノ)フェニル基、4 - (N, N - ジ - n - ヘキシルアミノ)フェニル基、4 - (N - シクロヘキシル - N - メチルアミノ)フェニル基、4 - (N, N - ジエチルアミノ) - 1 - ナフチル基、4 - (N - ベンジル - N - フェニルアミノ)フェニル基、4 - (N, N - ジフェニルアミノ)フェニル基、4 - [N - フェニル - N - (4 - メチルフェニル)アミノ]フェニル基、4 - [N, N - ジ(3' - メチルフェニル)アミノ]フェニル基、4 - [N, N - ジ(4' - メチルフェニル)アミノ]フェニル基、4 - [N, N - ジ(4' - メトキシフェニル)アミノ]フェニル基、2 - (N, N - ジフェニルアミノ)フェニル基、

【0048】

4 - ヒドロキシフェニル基、3 - ヒドロキシフェニル基、2 - ヒドロキシフェニル基、4 - メチル - 3 - ヒドロキシフェニル基、6 - メチル - 3 - ヒドロキシフェニル基、2 - ヒドロキシ - 1 - ナフチル基、8 - ヒドロキシ - 1 - ナフチル基、4 - ヒドロキシ - 1 - ナフチル基、1 - ヒドロキシ - 2 - ナフチル基、6 - ヒドロキシ - 2 - ナフチル基、4 - シアノフェニル基、2 - シアノフェニル基、4 - シアノ - 1 - ナフチル基、6 - シアノ - 2 - ナフチル基などの置換または未置換のアリール基を挙げることができる。

【0049】

$R_1 \sim R_8$  の置換または未置換のアリールオキシ基の具体例としては、例えば、上記のアリール基から誘導される置換または未置換のアリールオキシ基を挙げることができる。

一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物において、 $Ar_1 \sim Ar_6$  はそれぞれ独立に、水素原子、置換または未置換の芳香族炭化水素基、置換または未置換のアミノ基、炭素数1~24の直鎖、分岐または環状のアルキル基、炭素数1~24の直鎖、分岐または環状のアルコキシ基、置換または未置換のアリールオキシ基、あるいは置換または未置換の芳香族複素環基を表し、 $Ar_1 \sim Ar_6$  の少なくとも一つは、置換または未置換の芳香族炭化水素基、置換または未置換のアミノ基、置換または未置換のアリールオキシ基、あるいは置換または未置換の芳香族複素環基を表す。

$Ar_1 \sim Ar_6$  は、好ましくは、核炭素数6~20の置換または未置換の芳香族炭化水素基、核炭素数6~20の芳香族炭化水素基で単置換または二置換されたアミノ基、核炭素数2~20の置換または未置換のアリールオキシ基、あるいは核炭素数2~20の芳香族複素環基を表し、より好ましくは、核炭素数6~18の置換または未置換の芳香族炭化水素基、あるいは、核炭素数2~18の置換または未置換の芳香族複素環基を表す。

【0050】

10

20

30

40

50

$Ar_1 \sim Ar_6$  の置換または未置換の芳香族炭化水素基の具体例としては、例えば、 $R_1 \sim R_8$  の置換または未置換のアリール基の具体例として挙げた置換または未置換の芳香族炭化水素基を挙げることができる。

また、 $Ar_1 \sim Ar_6$  の置換または未置換のアミノ基の具体例としては、例えば、 $R_1 \sim R_8$  の具体例として挙げた、置換または未置換のアミノ基を挙げることができる。

$Ar_1 \sim Ar_6$  の炭素数 1 ~ 12 の直鎖、分岐または環状のアルキル基の具体例としては、例えば、 $R_1 \sim R_8$  の具体例として挙げた直鎖、分岐または環状のアルキル基を上げることができる。

$Ar_1 \sim Ar_6$  の炭素数 1 ~ 24 の直鎖、分岐または環状のアルコキシ基の具体例としては、例えば、 $R_1 \sim R_8$  の具体例として挙げた直鎖、分岐または環状のアルコキシ基を挙げることができる。

10

$Ar_1 \sim Ar_6$  の置換または未置換のアリールオキシ基の具体例としては、例えば、 $R_1 \sim R_8$  の具体例として挙げた、置換または未置換のアリールオキシ基を挙げることができる。

$Ar_1 \sim Ar_6$  の置換または未置換の芳香族複素環基の具体例としては、 $R_1 \sim R_8$  の置換または未置換のアリール基の具体例として挙げた、置換または未置換の芳香族複素環基を挙げることができる。

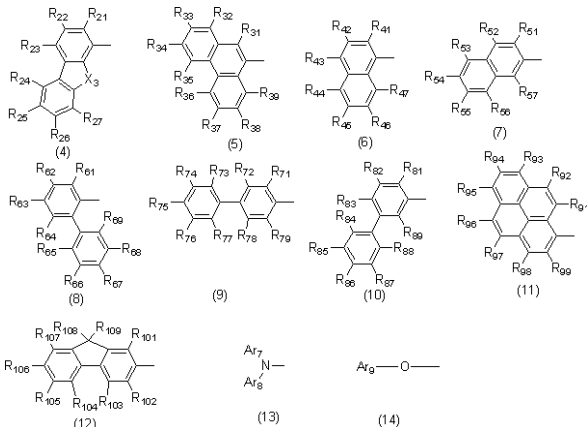
#### 【0051】

一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物において、 $Ar_1 \sim Ar_6$  の少なくともひとつはそれぞれ独立に、好ましくは、以下の一般式(4)~(14)で表される基を表す。

20

#### 【0052】

#### 【化8】



30

#### 【0053】

〔式中  $R_{21} \sim R_{27}$ 、 $R_{31} \sim R_{39}$ 、 $R_{41} \sim R_{47}$ 、 $R_{51} \sim R_{57}$ 、 $R_{61} \sim R_{69}$ 、 $R_{71} \sim R_{79}$ 、 $R_{81} \sim R_{89}$ 、 $R_{91} \sim R_{99}$  および  $R_{101} \sim R_{109}$  はそれぞれ独立に、水素原子または置換基を表し、 $X_3$  は酸素原子または硫黄原子を表し、 $Ar_7$ 、 $Ar_8$  および  $Ar_9$  はそれぞれ独立に、水素原子、置換または未置換の芳香族炭化水素基、あるいは置換または未置換の芳香族複素環基を表す。〕

40

#### 【0054】

一般式(4)~(14)で表される基において、 $R_{21} \sim R_{27}$ 、 $R_{31} \sim R_{39}$ 、 $R_{41} \sim R_{47}$ 、 $R_{51} \sim R_{57}$ 、 $R_{61} \sim R_{69}$ 、 $R_{71} \sim R_{79}$ 、 $R_{81} \sim R_{89}$ 、 $R_{91} \sim R_{99}$  および  $R_{101} \sim R_{109}$  は、それぞれ独立に水素原子または置換基を表し、好ましくは、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、置換または未置換のアミノ基、エステル基、炭素数 1 ~ 10 の直鎖、分岐または環状のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 の直鎖、分岐または環状のアルコキシ基、炭素数 7 ~ 20 の置換または未置換のアラルキル基、炭素数 7 ~ 20 の置換または未置換のアラルキルオキシ基、炭素数 2 ~ 20 の置換または未置換の直鎖、分岐または環状のアルケニル基、炭素数 4 ~ 20 の置換または未置換のアリール基または炭素数 4 ~ 20 の置換または未置換のアリールオキシ基を表し、

50

これらの置換基の具体例としては、 $R_1 \sim R_8$ の具体例として挙げた置換基を挙げる事ができる。

【0055】

一般式(13)および(14)で表される基において、 $Ar_7$ 、 $Ar_8$ および $Ar_9$ はそれぞれ独立に、水素原子、置換または未置換の芳香族炭化水素基、あるいは置換または未置換の芳香族複素環基を表す

$Ar_7$ 、 $Ar_8$ および $Ar_9$ の置換または未置換の芳香族炭化水素基の具体例としては、例えば、 $R_1 \sim R_8$ の置換または未置換のアリール基の具体例として挙げた置換または未置換の芳香族炭化水素基を挙げる事ができる。

$Ar_7$ 、 $Ar_8$ および $Ar_9$ の置換または未置換の芳香族複素環基の具体例としては、 $R_1 \sim R_8$ の置換または未置換のアリール基の具体例として挙げた、置換または未置換の芳香族複素環基を挙げる事ができる。

また、一般式(4)において、 $X_3$ は酸素原子または硫黄原子を表す。

【0056】

一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物において、 $Ar_1 \sim Ar_6$ の少なくともひとつはそれぞれ独立に、好ましくは、一般式(4)~(14)で表される基であり、より好ましくは、一般式(6)、(7)、(8)、(10)および/または(13)で表される基である。

【0057】

本発明に係る一般式(1)、一般式(2)および一般式(3)で表される芳香族化合物は好ましくは、蒸着または、塗布により有機電界発光素子材料として使用される。蒸着により使用される場合、本発明の一般式(1)で表される化合物の分子量は、好ましくは、5000以下であり、より好ましくは、3000以下、さらに好ましくは、2000以下である。分子量が5000を大幅に超えると、蒸着温度が高温となり、蒸着工程で分解反応を生じることもあるため、蒸着工程で分解反応が生じない温度で蒸着可能な分子量であることが好ましい。また、塗布により使用される場合、その分子量に関して特に制限はないが、所望の有機溶媒に溶解可能な分子量であることが好ましい。

【0058】

本発明の一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物の具体例としては、例えば、以下に示す化合物(化9~化24)を挙げる事ができるが、本発明はこれらの具体例に限定されるものではない。

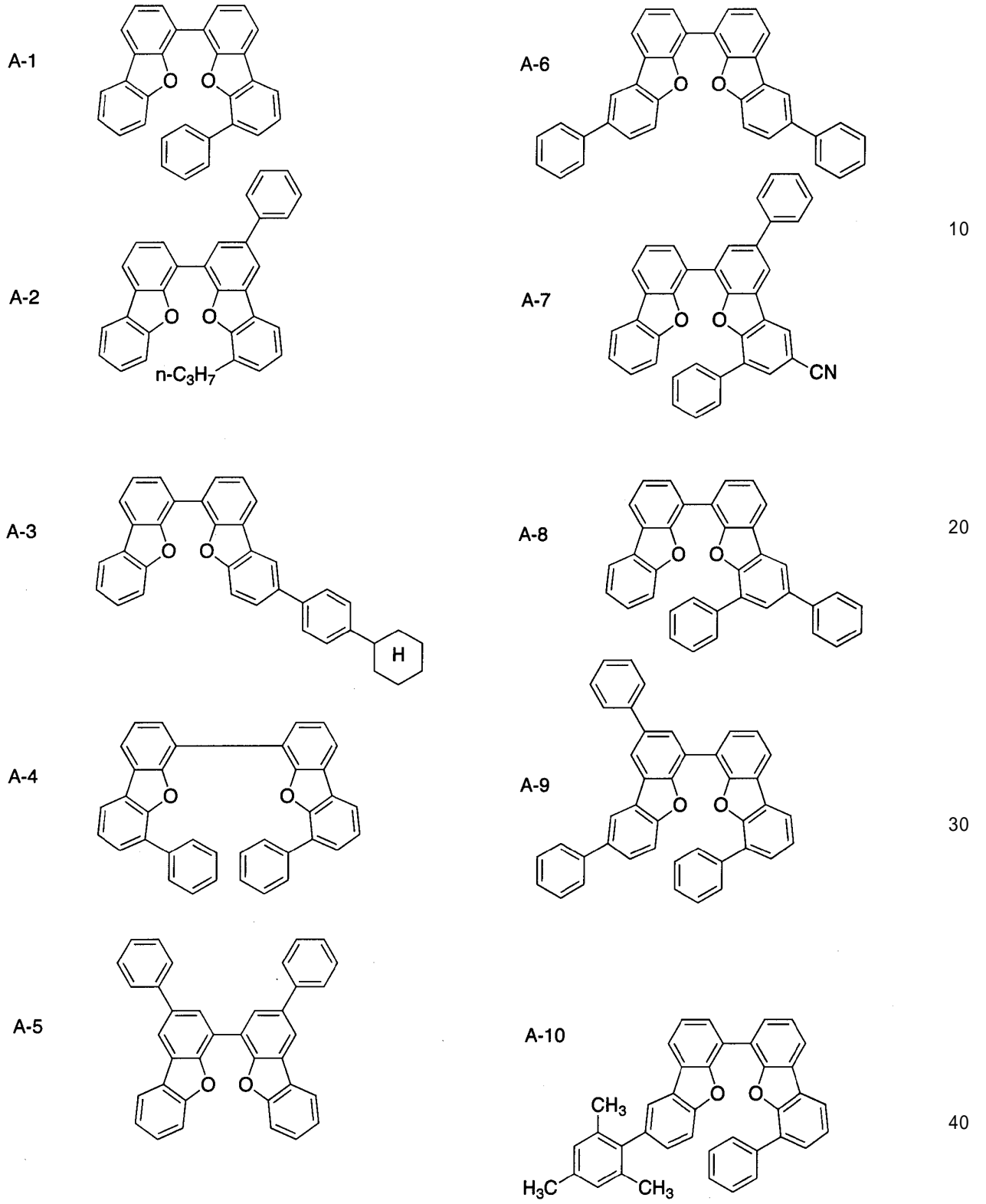
【0059】

10

20

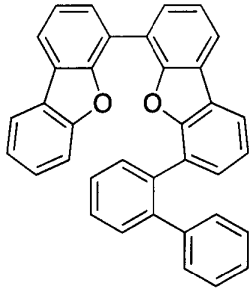
30

【化9】

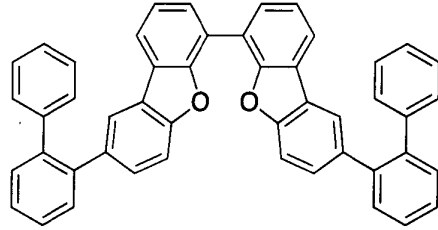


【化 1 0】

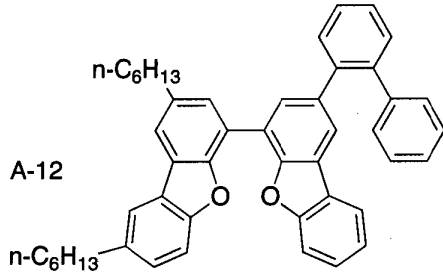
A-11



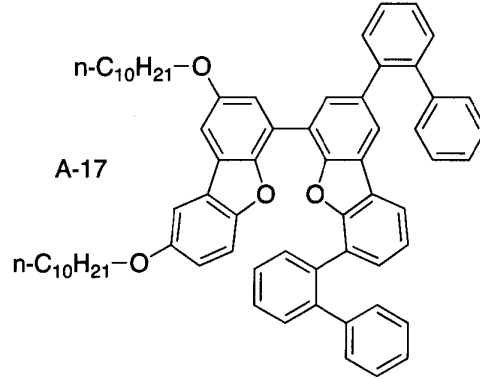
A-16



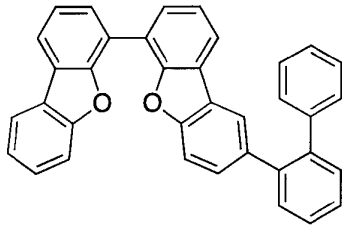
A-12



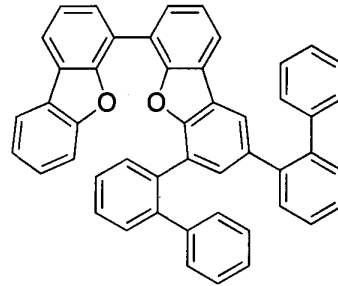
A-17



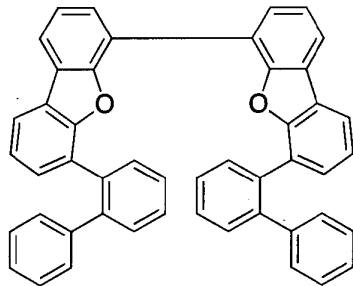
A-13



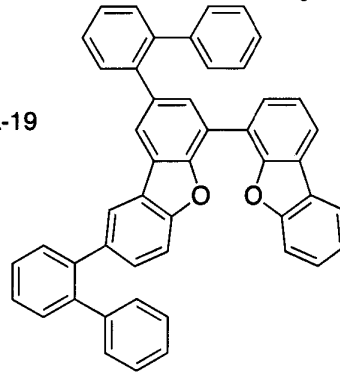
A-18



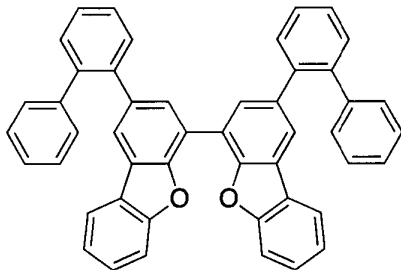
A-14



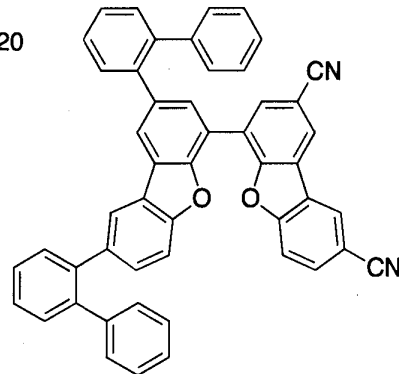
A-19



A-15



A-20



10

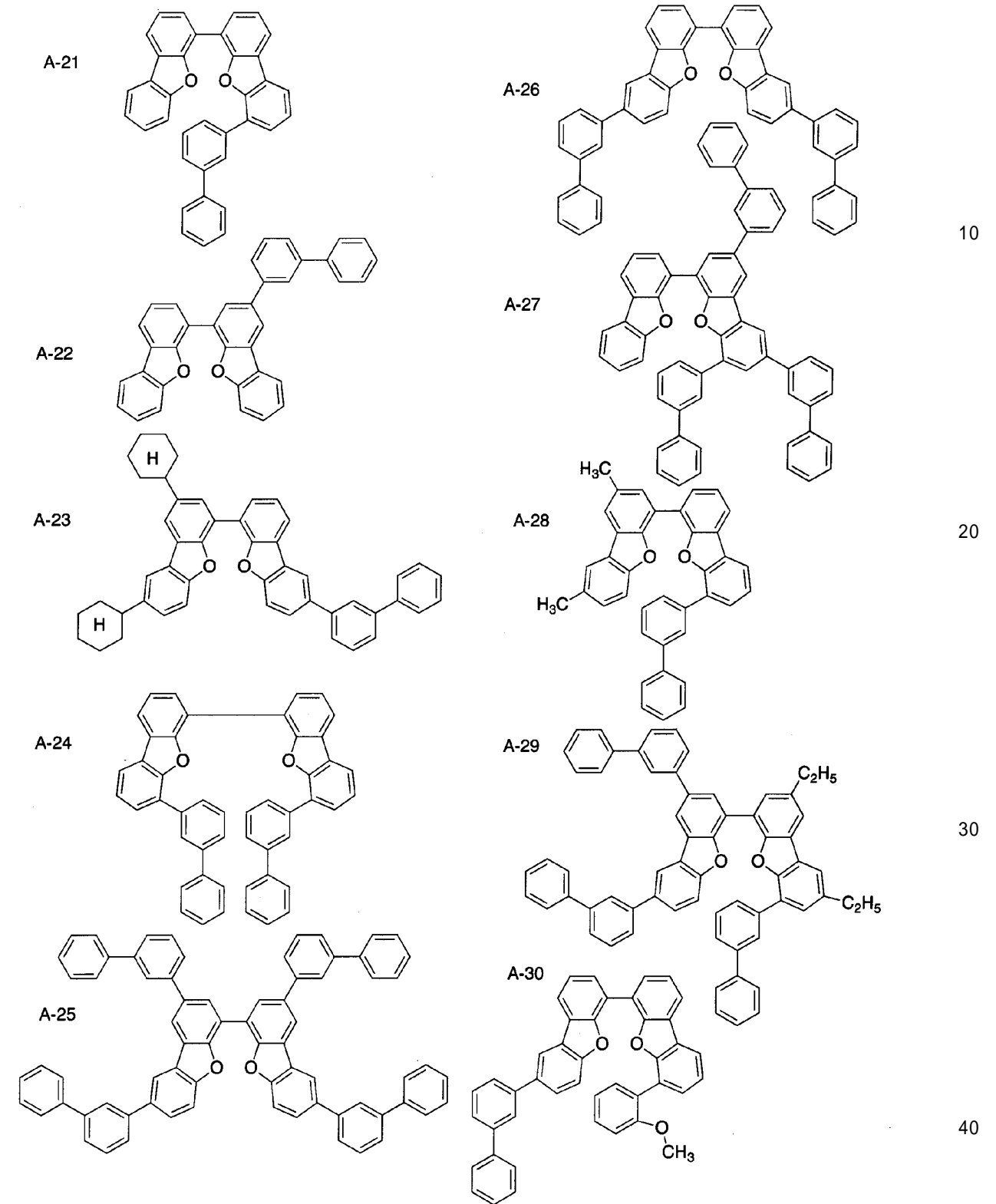
20

30

40

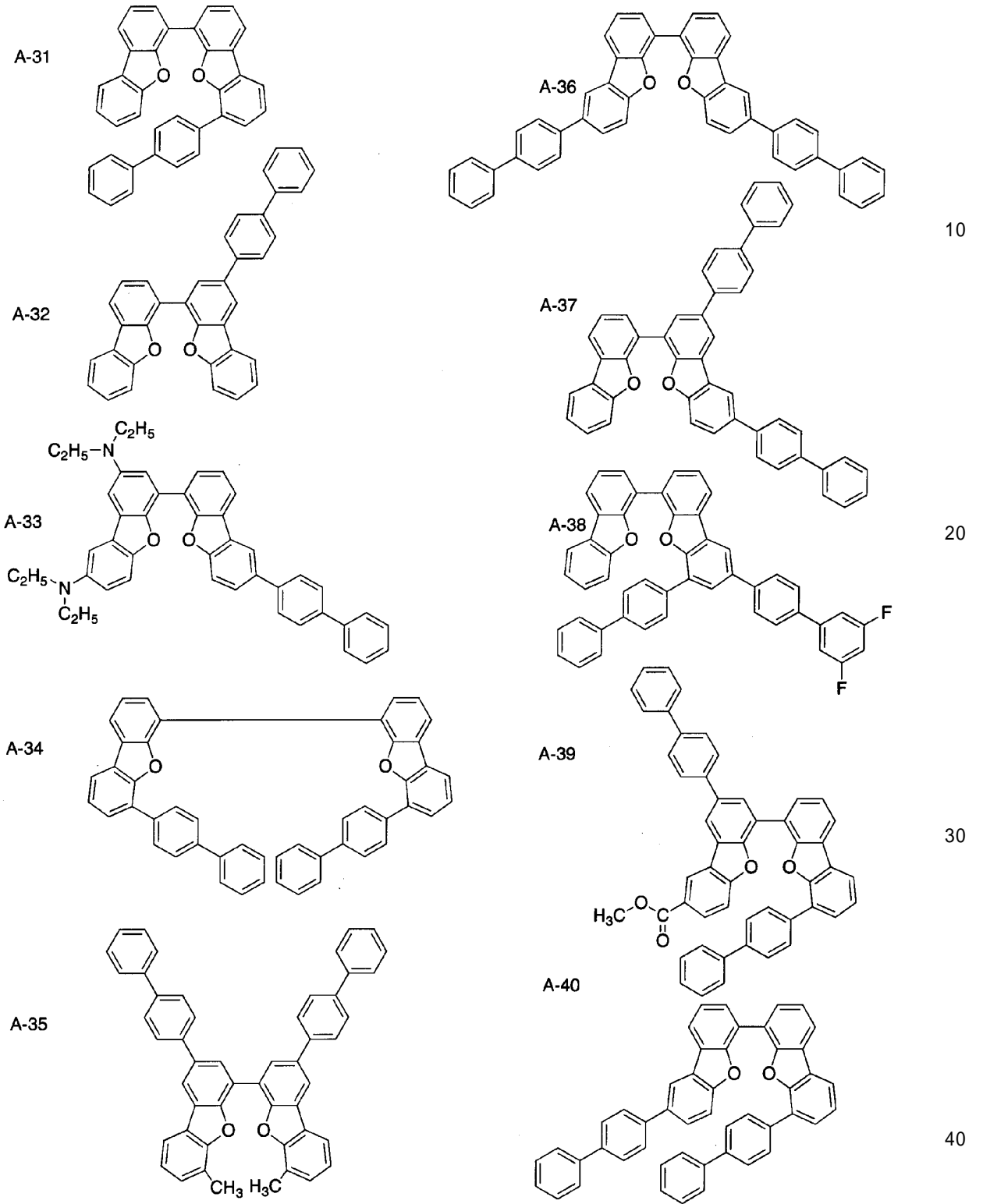
【 0 0 6 1 】

【化 1 1】



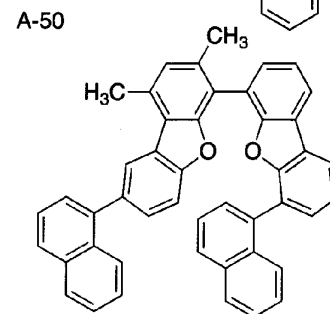
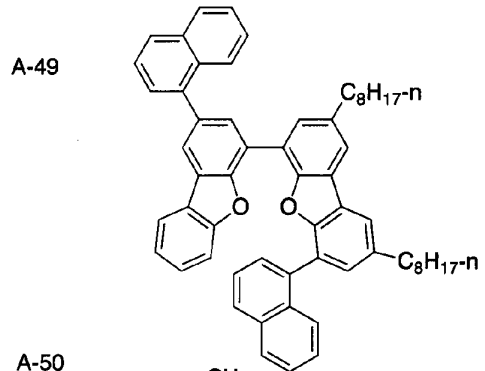
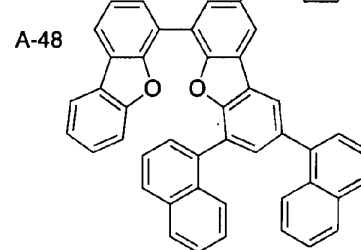
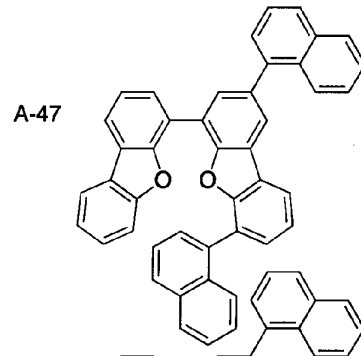
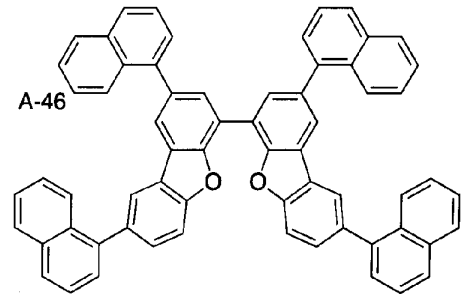
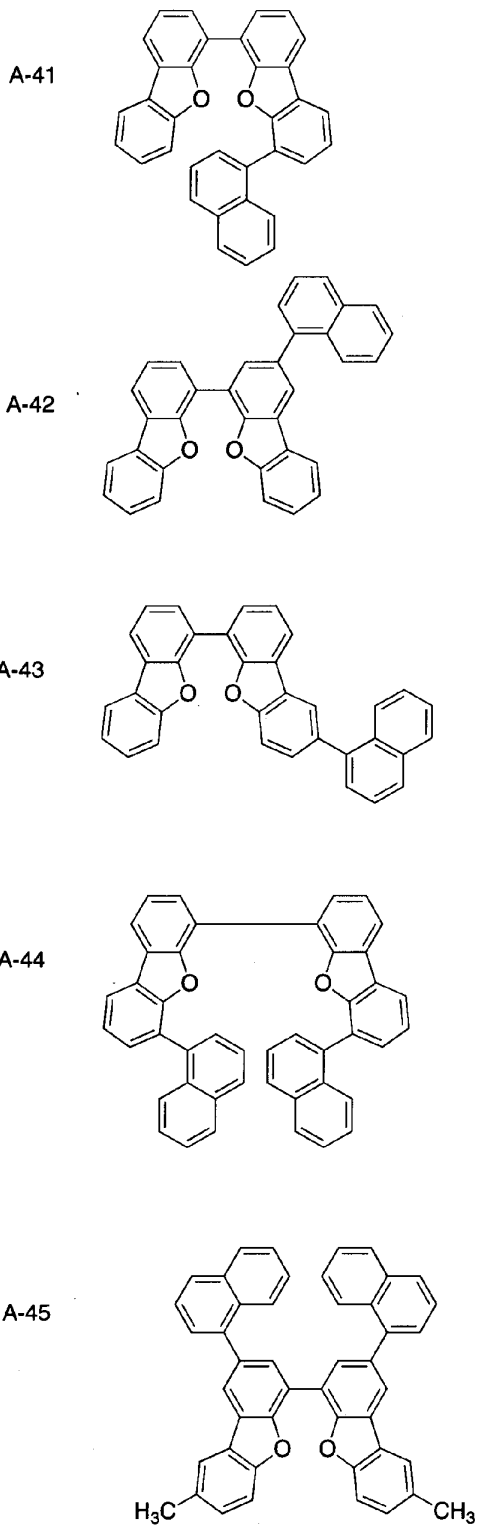
【 0 0 6 2 】

【化 1 2】



【 0 0 6 3 】

【化 1 3】



10

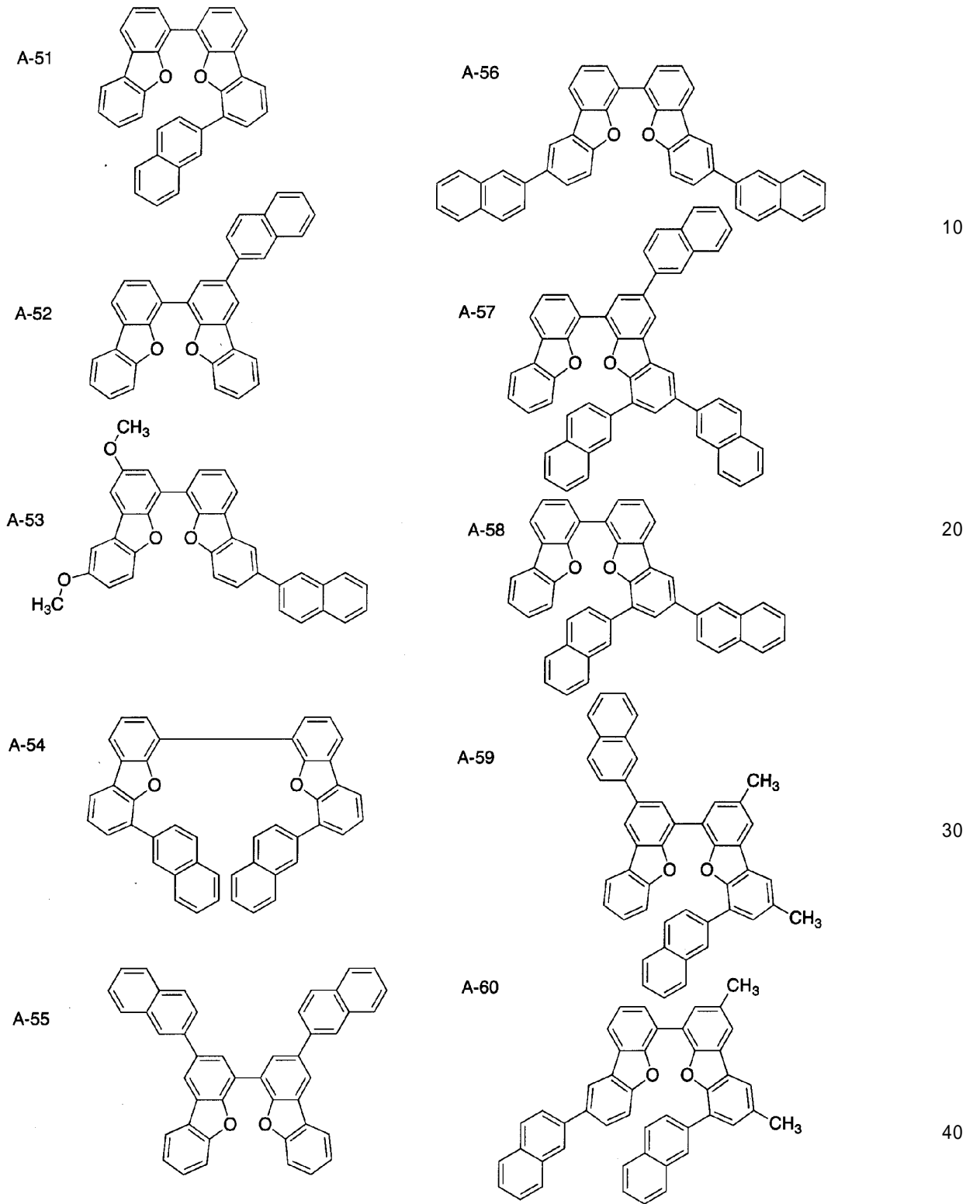
20

30

40

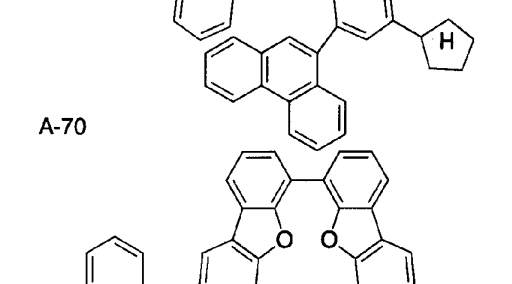
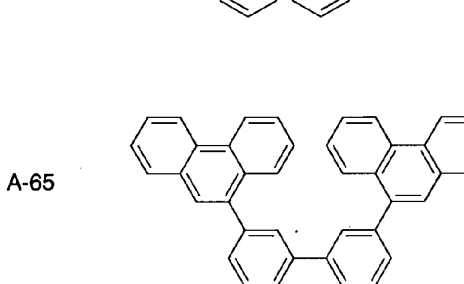
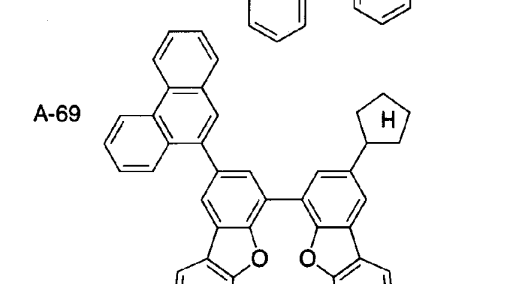
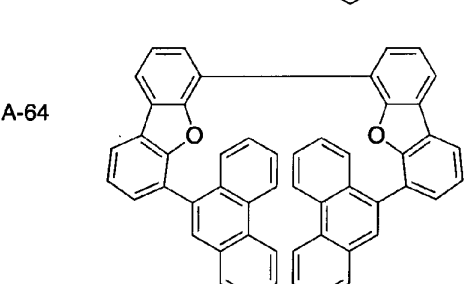
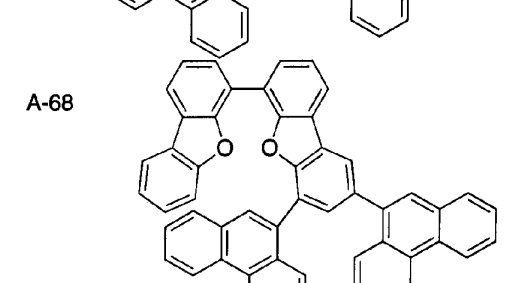
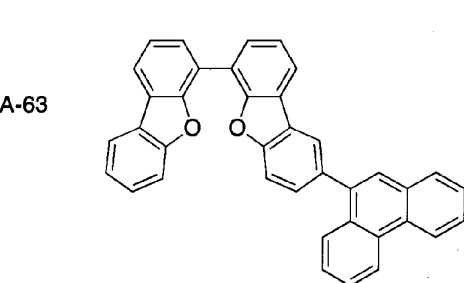
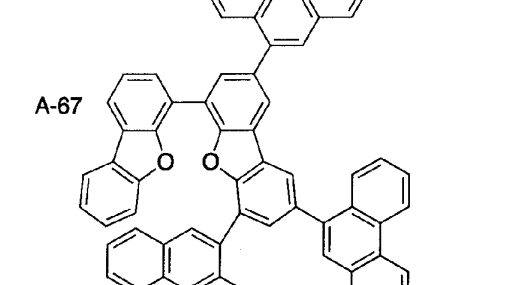
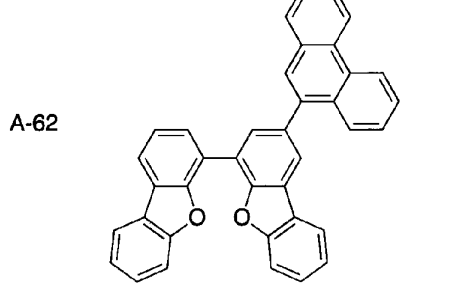
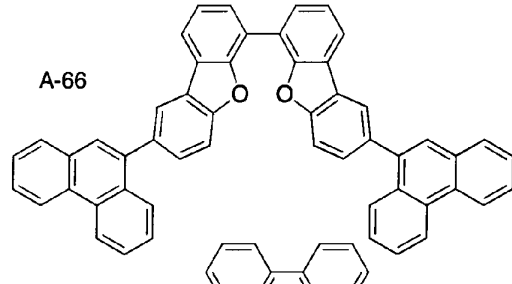
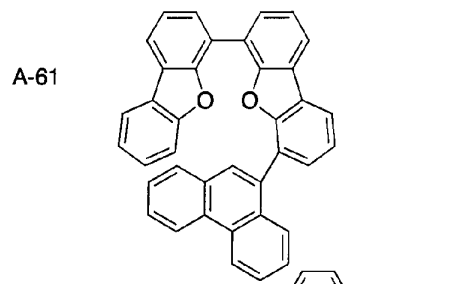
【 0 0 6 4 】

【化 1 4】



【 0 0 6 5 】

【化 1 5】



10

20

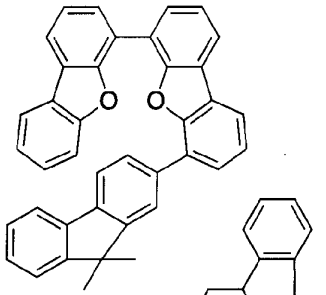
30

40

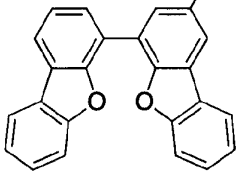
【 0 0 6 6 】

【化 1 6】

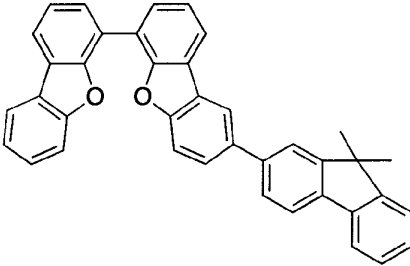
A-71



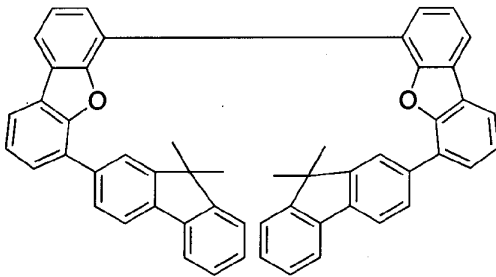
A-72



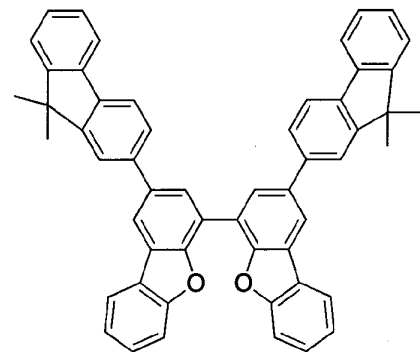
A-73



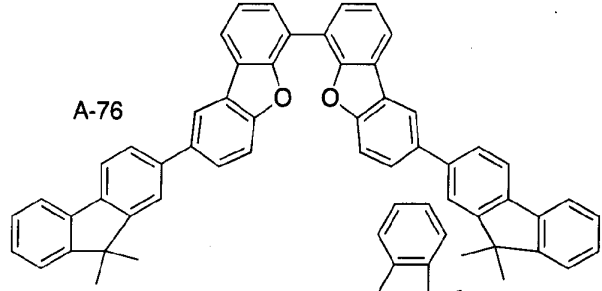
A-74



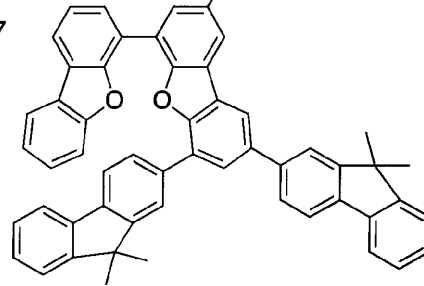
A-75



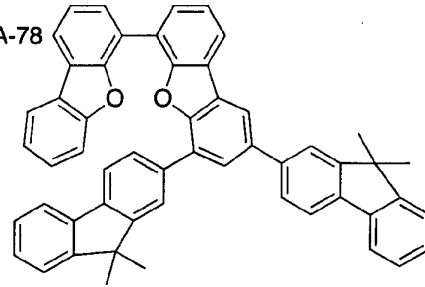
A-76



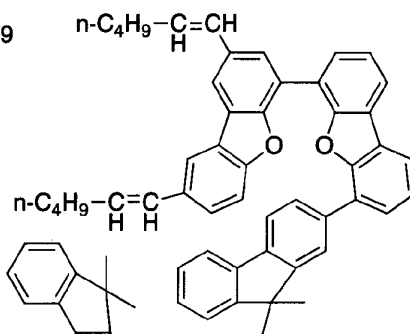
A-77



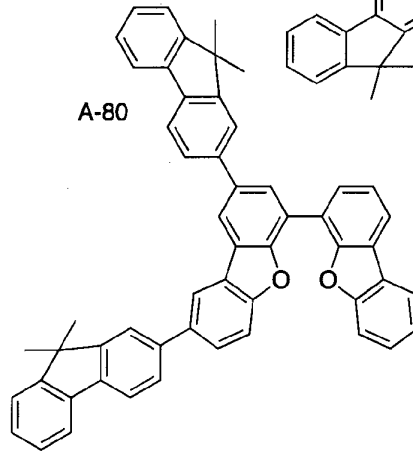
A-78



A-79



A-80



10

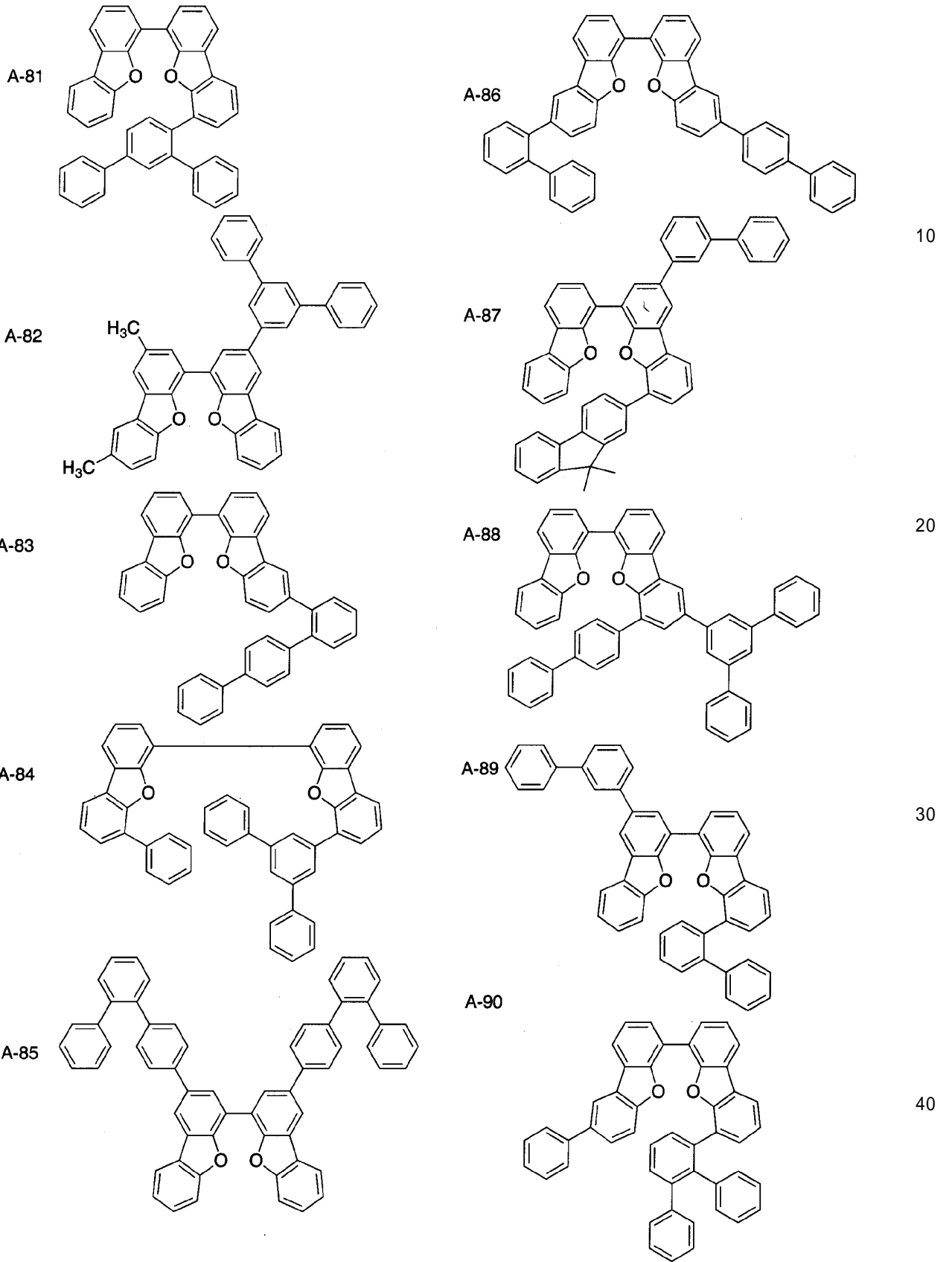
20

30

40

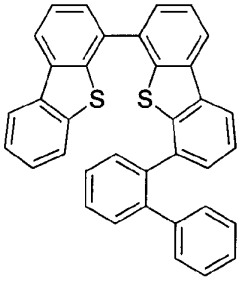
【 0 0 6 7 】

【化 1 7】

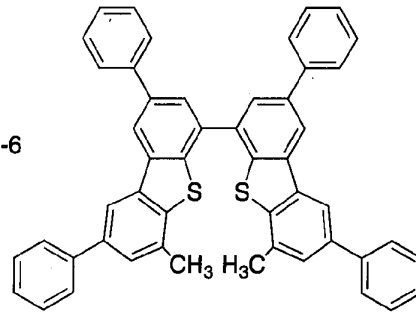


【化 1 8】

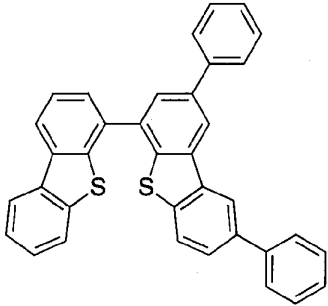
B-1



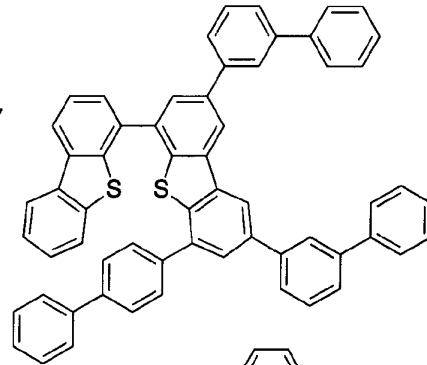
B-6



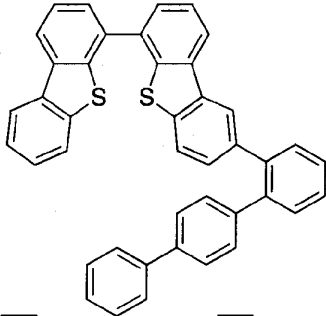
B-2



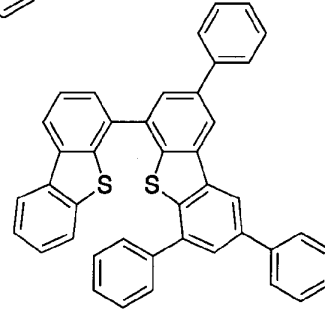
B-7



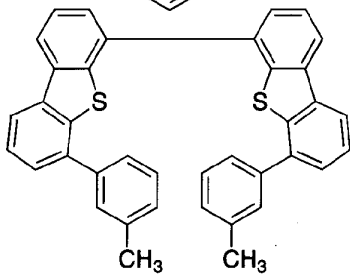
B-3



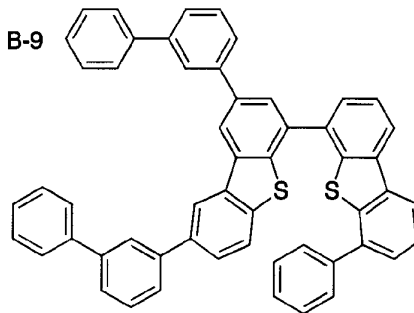
B-8



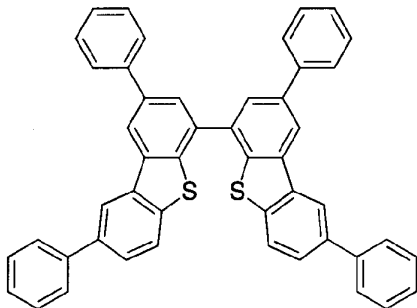
B-4



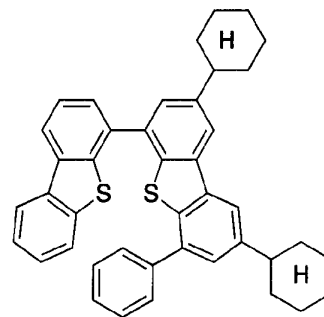
B-9



B-5



B-10



10

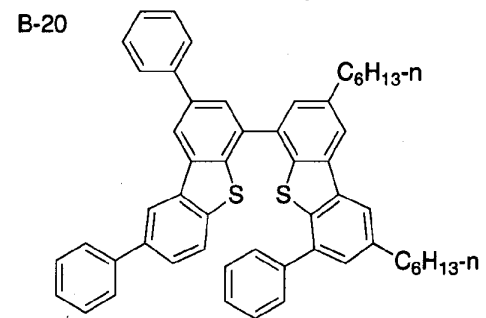
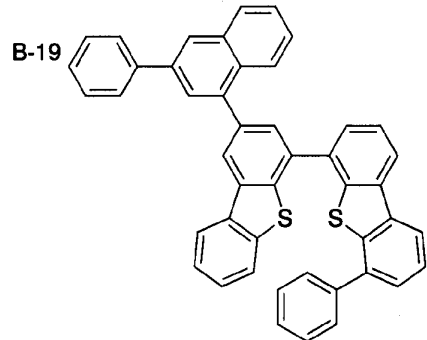
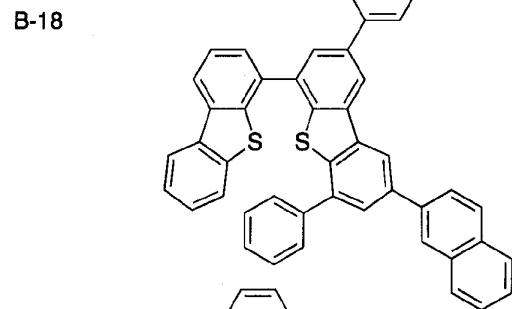
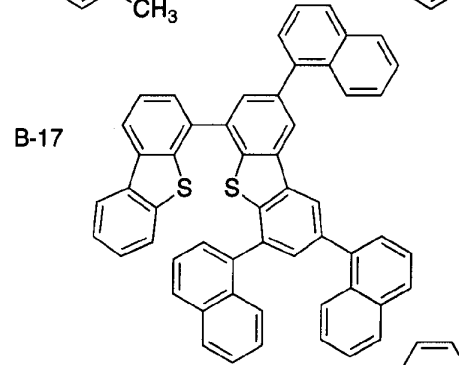
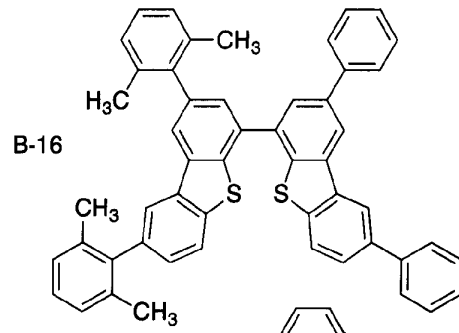
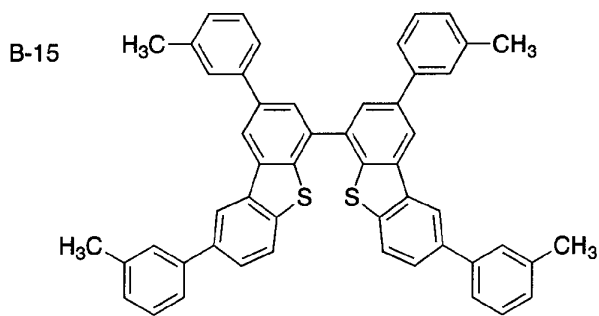
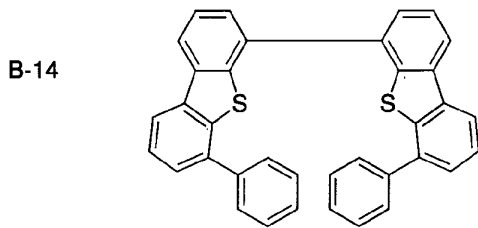
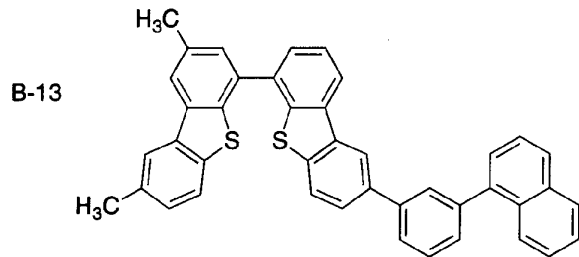
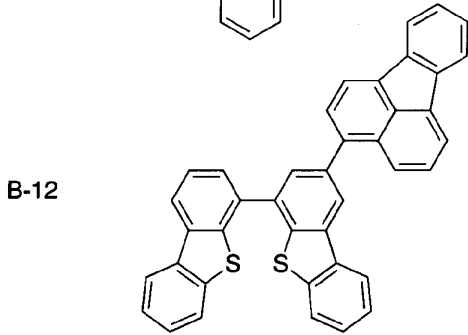
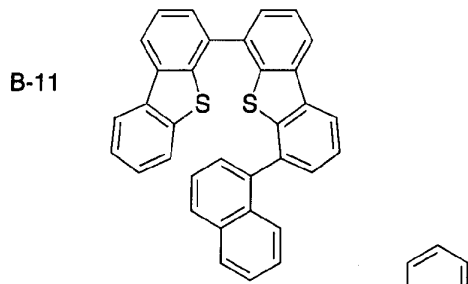
20

30

40

【 0 0 6 9】

【化 1 9】



10

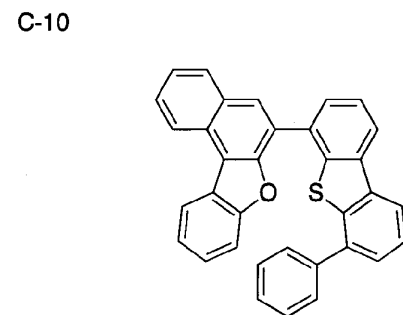
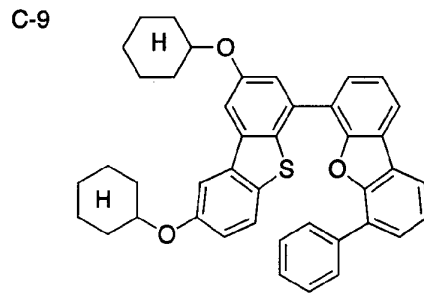
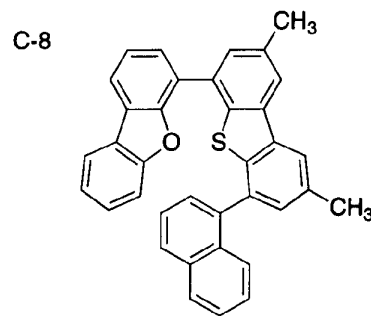
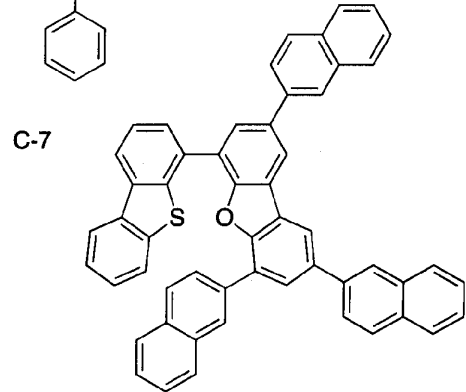
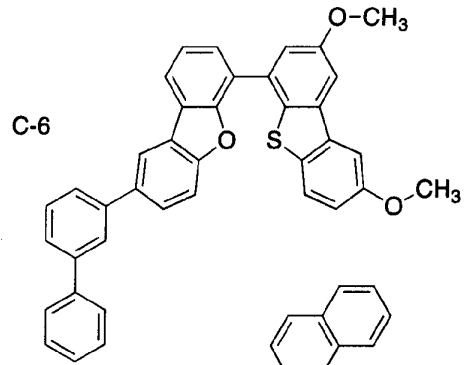
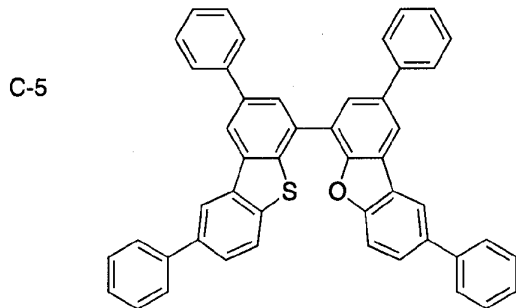
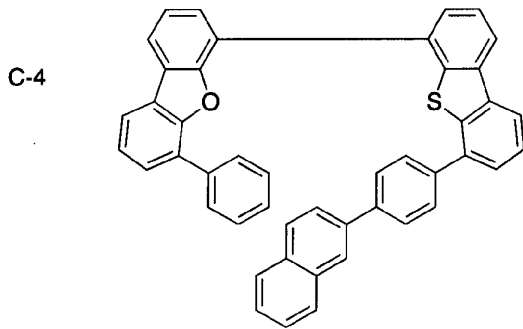
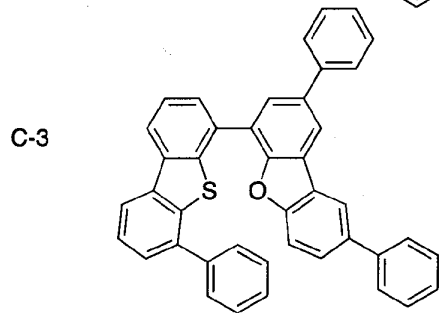
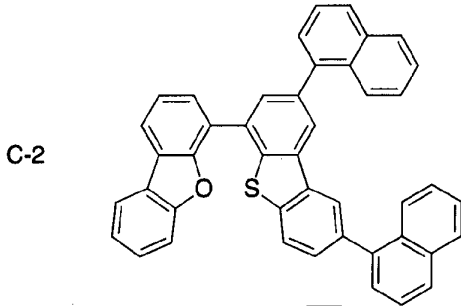
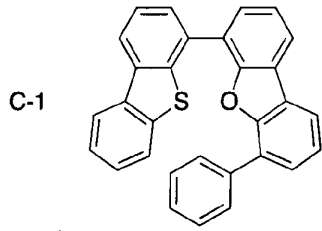
20

30

40

【 0 0 7 0 】

【化 2 0】



10

20

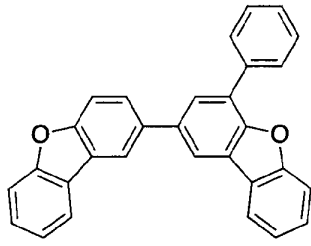
30

40

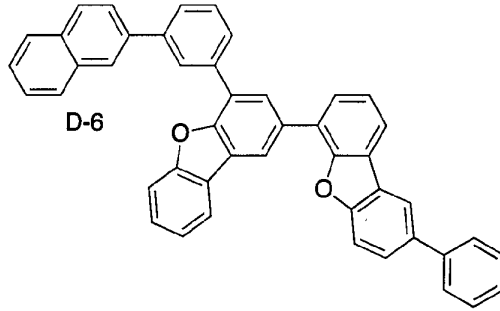
【 0 0 7 1】

【化 2 1】

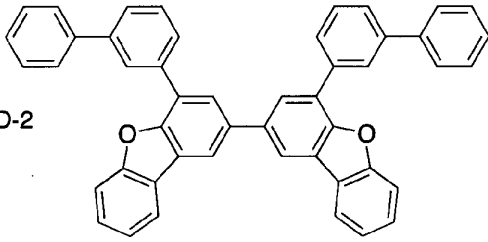
D-1



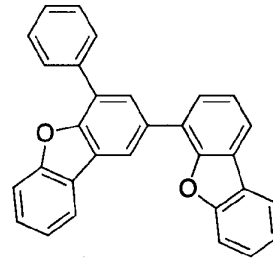
D-6



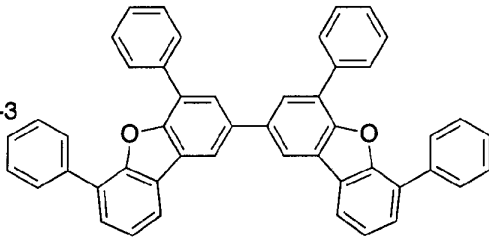
D-2



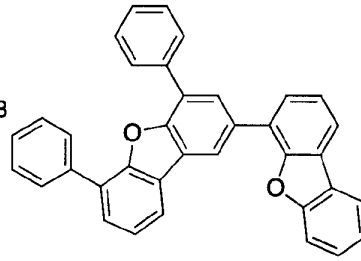
D-7



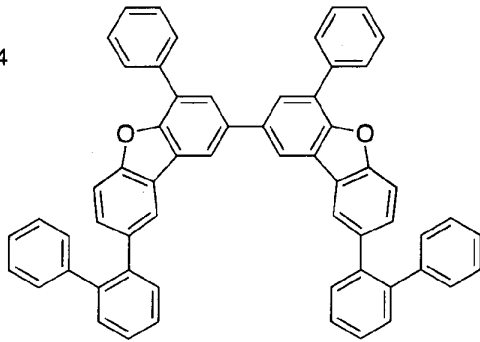
D-3



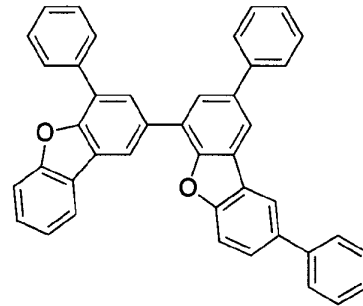
D-8



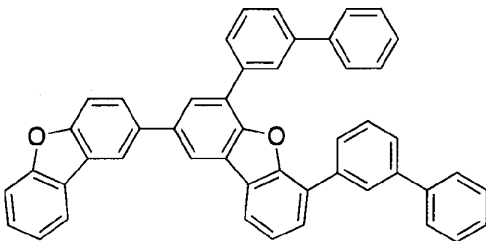
D-4



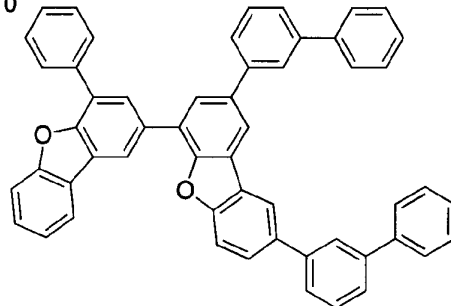
D-9



D-5



D-10



10

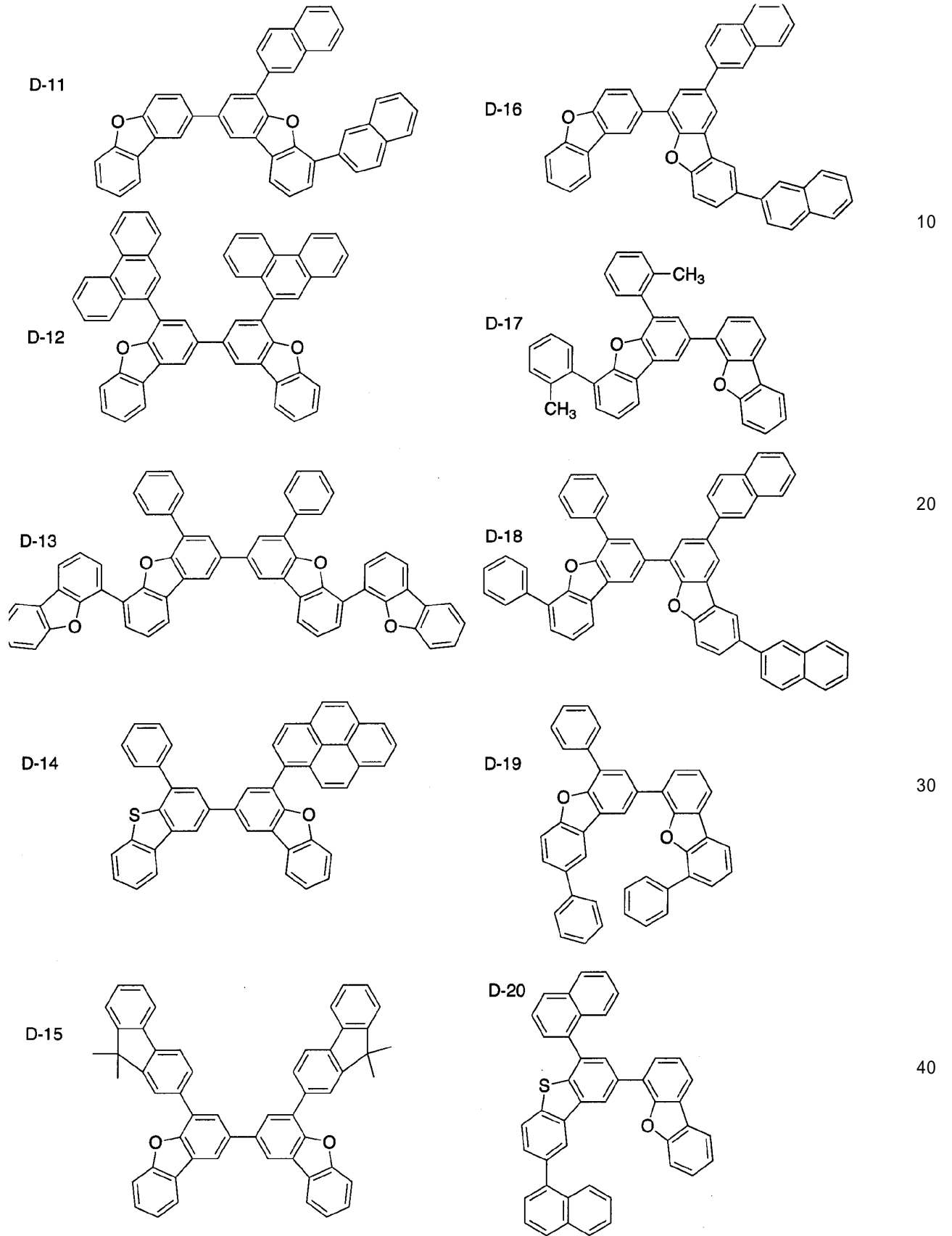
20

30

40

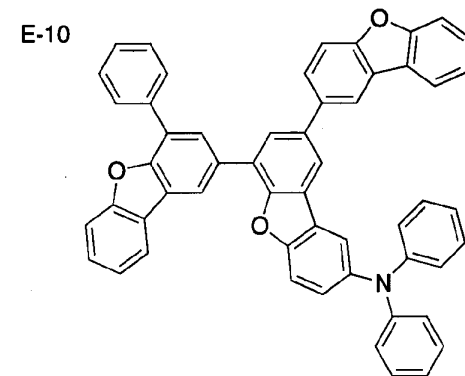
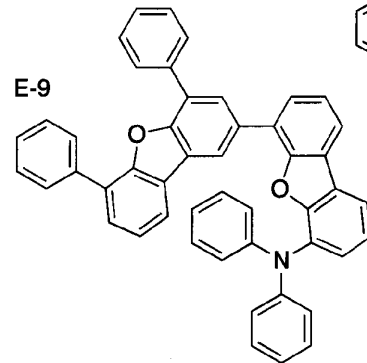
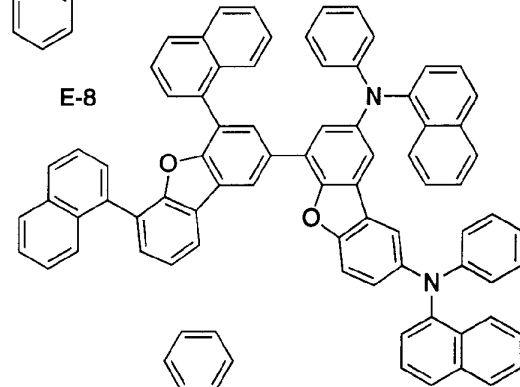
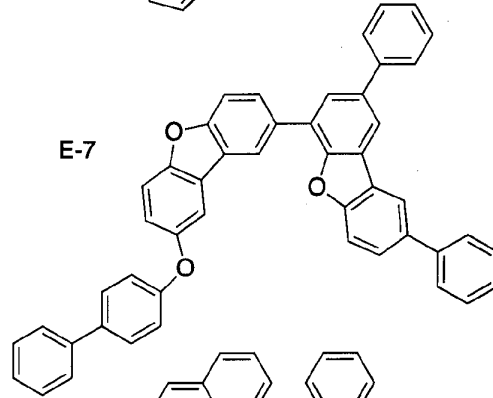
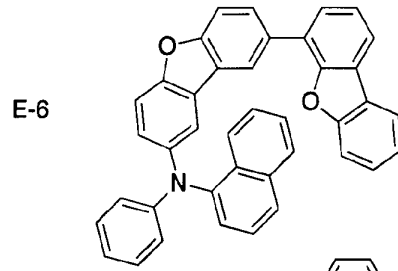
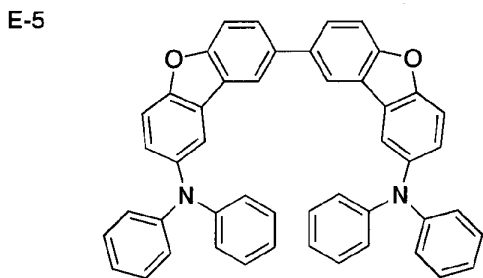
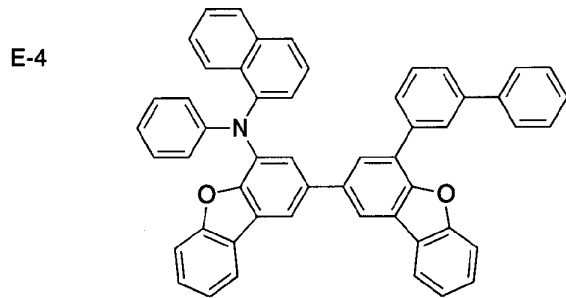
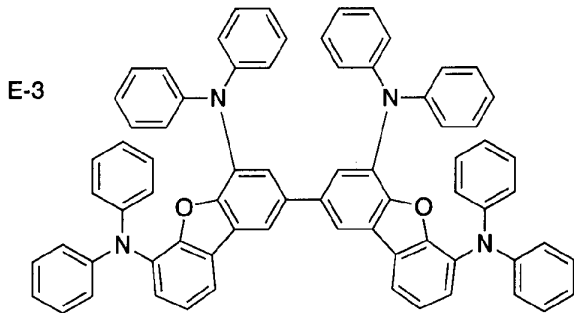
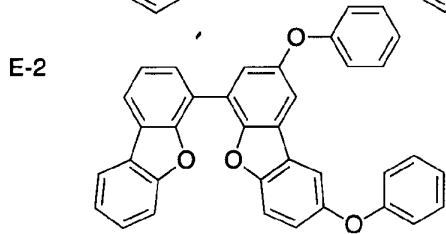
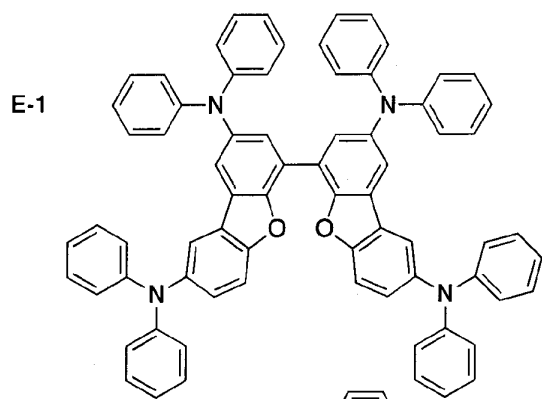
【 0 0 7 2 】

【化 2 2】



【 0 0 7 3 】

【化 2 3】



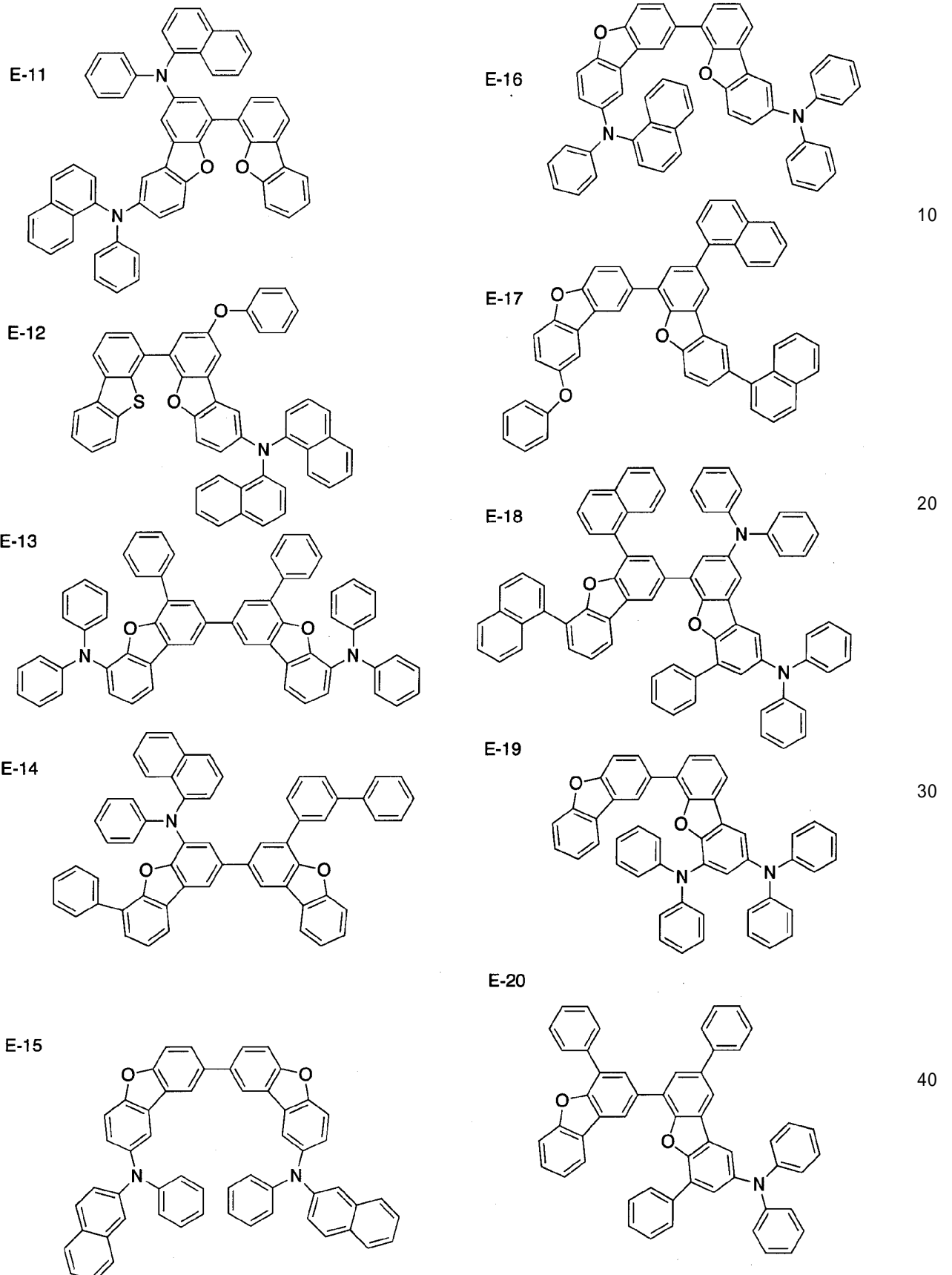
10

20

30

40

## 【化 2 4】

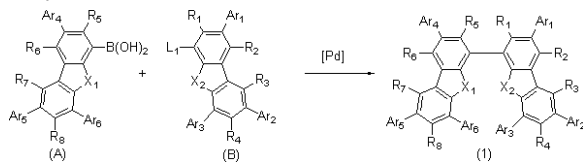


本発明の一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物は例えば、以下に示す工程により製造することができる。一般式(1)で表される芳香族化合物を例として、以下に製造方法を例示する。

一般式(1)で表される芳香族化合物の製造(化25)

【0075】

【化25】



【0076】

〔式中、 $R_1 \sim R_6$ 、 $Ar_1 \sim Ar_6$ 、 $X_1$ 、 $X_2$ は一般式(1)と同様の意味を示し、 $L_1$ はハロゲン原子またはトリフルオロメタンスルホニルオキシ基等の脱離基を示す〕  
すなわち、一般式(A)で表される化合物と一般式(B)で表される化合物をパラジウム触媒〔例えば、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム、トリtert-ブチルホスフィン/酢酸パラジウム〕および塩基〔例えば、炭酸ナトリウム、炭酸カリウム等の無機塩基、トリエチルアミン、ピリジン等の有機塩基〕の存在下に反応させることで一般式(1)で表される化合物を製造することができる。

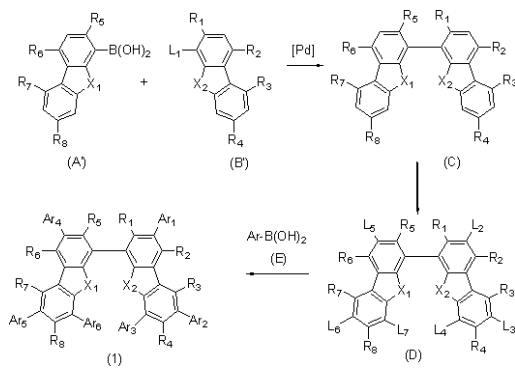
10

【0077】

また、一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物は、例えば以下の工程(化26)に従い製造することもできる。

【0078】

【化26】



20

30

【0079】

〔式中、 $R_1 \sim R_8$ 、 $Ar_1 \sim Ar_6$ 、 $X_1$ 、 $X_2$ は一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)と同様の意味を表し、 $L_1$ はハロゲン原子またはトリフルオロメタンスルホニルオキシ基等の脱離基を表し、 $L_2 \sim L_7$ はハロゲン原子または水素原子を表し、 $Ar$ は $Ar_1 \sim Ar_6$ に対応する基を表す。〕

すなわち、一般式(A')で表される化合物と、一般式(B')で表される化合物をパラジウム触媒〔例えば、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム、トリtert-ブチルホスフィン/酢酸パラジウム〕および塩基〔例えば、炭酸ナトリウム、炭酸カリウム等の無機塩基、トリエチルアミン、ピリジン等の有機塩基〕の存在下に反応させることで、一般式(C)で表される化合物を製造する。その後、一般式(C)で表される化合物に、ハロゲン化剤〔例えば、臭素、N-ブロモスクシンイミド、1,3-ジブromo-5,5-ジメチルヒダントイン、n-ブチルチリウム/ジブromoエタン〕を作用させ、一般式(D)で表される化合物を製造してさらに、一般式(E)で表される化合物を反応させることにより、一般式(1)で表される化合物を製造することができる。

40

【0080】

本発明の一般式(2)および一般式(3)で表される芳香族化合物は、一般式(1)で表される化合物と同様に、例えば、ハロゲン化ジベンゾフラン誘導体とジベンゾフランボロン酸誘導体から製造することができる。

【0081】

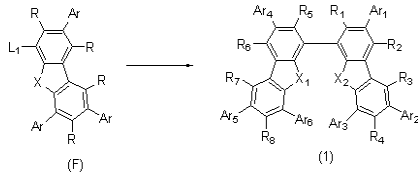
また、本発明の一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香

50

芳香族化合物の一部の化合物は、下記の工程（化 27）に従っても製造することができる。以下に一般式（1）の場合を例に示す。

【0082】

【化 27】



【0083】

（式中、式中、R、Ar、Xはそれぞれ一般式（1）のR<sub>1</sub>～R<sub>6</sub>、Ar<sub>1</sub>～Ar<sub>6</sub>、X<sub>1</sub>、X<sub>2</sub>に対応する基を表し、L<sub>1</sub>はハロゲン原子またはトリフルオロメタンスルニルオキシ基等の脱離基を表す）

すなわち、一般式（F）で表されるハロゲン化ジベンゾフラン誘導体を、ニッケル触媒〔例えば、ビス（シクロオクタジエノ）ニッケル〕などの触媒を用いて、直接カップリングさせることで製造することができる。

【0084】

次に本発明の有機電界発光素子について説明する。本発明の有機電界発光素子は、一对の電極間に、一般式（1）、一般式（2）および/または一般式（3）で表される芳香族化合物を少なくとも1種含有する層を少なくとも一層挟持してなるものである。有機電界発光素子は、通常一对の電極間に少なくとも1種の発光成分を含有する発光層を少なくとも一層挟持してなるものである。発光層に使用する化合物の正孔注入および正孔輸送、電子注入および電子輸送の各機能レベルを考慮し、所望に応じて、正孔注入成分を含有する正孔注入輸送層および/または電子注入輸送成分を含有する電子注入輸送層を設けることもできる。

例えば、発光層に使用する化合物の正孔注入機能、正孔輸送機能および/または電子注入機能、電子輸送機能が良好な場合には、発光層が正孔注入輸送層および/または電子注入輸送層を兼ねた型の素子構成として一層型の素子構成とすることができる。また、発光層が正孔注入機能および/または正孔輸送機能に乏しい場合には発光層の陽極側に正孔注入輸送層を設けた二層型の素子構成、発光層が電子注入機能および/または電子輸送機能に乏しい場合には発光層の陰極側に電子注入輸送層を設けた二層型の素子構成とすることができる。さらには発光層を正孔注入輸送層と電子注入輸送層で挟み込んだ構成の三層型の素子構成とすることも可能である。

【0085】

また、正孔注入輸送層、電子注入輸送層および発光層のそれぞれの層は、一層構造であっても多層構造であってもよく、正孔注入輸送層および電子注入輸送層は、それぞれの層において、注入機能を有する層と輸送機能を有する層を別々に設けて構成することもできる。

【0086】

本発明の有機電界発光素子において、一般式（1）、一般式（2）および/または一般式（3）で表される芳香族化合物は、正孔注入輸送層および/または発光層の構成成分として使用することが好ましく、発光層の構成成分として使用することがより好ましい。本発明の有機電界発光素子において、一般式（1）、一般式（2）および/または一般式（3）で表される芳香族化合物は、単独で使用してもよく、また複数併用してもよい。

【0087】

本発明の有機電界発光素子の構成としては、特に限定されるものではないが、例えば、（EL-1）陽極/正孔注入輸送層/発光層/電子注入輸送層/陰極型素子（図1）、（EL-2）陽極/正孔注入輸送層/発光層/陰極型素子（図2）、（EL-3）陽極/発光層/電子注入輸送層/陰極型素子（図3）、（EL-4）陽極/発光層/陰極型素子（図4）、などを挙げるることができる。さらには、発光層を電子注入輸送層で挟み込んだ形

10

20

30

40

50

の(EL-5)陽極/正孔注入輸送層/電子注入輸送層/発光層/電子注入輸送層/陰極型素子(図5)とすることもできる。また、(EL-4)の型の素子構成としては、発光層として発光成分を一層形態で一对の電極間に挟持させた型の素子、(EL-6)発光層として正孔注入輸送成分、発光成分および電子注入輸送成分を混合させた一層形態で一对の電極間に挟持させた型の素子(図6)、(EL-7)発光層として正孔注入輸送成分および発光成分を混合させた一層形態で一对の電極間に挟持させた型の素子(図7)、(EL-8)発光層として発光成分および電子注入輸送成分を混合させた一層形態で一对の電極間に挟持させた型の素子(図8)のいずれであってもよい。

#### 【0088】

本発明の有機電界発光素子は、これらの素子構成に限定されるものではなく、それぞれの型の素子において、正孔注入輸送層、発光層、電子注入輸送層を複数設けることも可能である。また、それぞれの型の素子において、正孔注入輸送層を発光層との間に、正孔注入輸送成分と発光成分の混合層および/または発光層と電子注入輸送層との間に、発光成分と電子注入輸送成分の混合層を設けることもできる。

好ましい有機電界発光素子の構成は、(EL-1)型素子、(EL-2)型素子、(EL-5)型素子、(EL-6)型素子または(EL-7)型素子であり、より好ましくは、(EL-1)型素子、(EL-2)型素子または(EL-7)型素子である。

#### 【0089】

以下、本発明の有機電界発光素子の構成要素に関し、詳細に説明する。なお、例として(図1)に示す(EL-1)陽極/正孔注入輸送層/発光層/電子注入輸送層/陰極型素子を取り上げて説明する。

(図1)において、1は基板、2は陽極、3は正孔注入輸送層、4は発光層、5は電子注入輸送層、6は陰極、7は電源を示す。

#### 【0090】

本発明の有機電界発光素子は基板1に支持されていることが好ましく、基板としては、特に限定されるものではないが、透明ないし半透明である基板が好ましく、材質としては、ソーダライムガラス、ポロシリケートガラス等のガラスおよびポリエステル、ポリカーボネート、ポリスルホン、ポリエーテルスルホン、ポリアクリレート、ポリメチルメタクリレート、ポリプロピレン、ポリエチレン等の透明性高分子が挙げられる。また、半透明プラスチックシート、石英、透明セラミックスあるいはこれらを組み合わせた複合シートからなる基板を使用することもできる。さらに、基板に、例えば、カラーフィルター膜、色変換膜、誘電体反射膜を組み合わせて、発光色をコントロールすることもできる。

陽極2としては、仕事関数の比較的大きい金属、合金または導電性化合物を電極材料として使用することが好ましい。陽極に使用する電極材料としては、例えば、金、白金、銀、銅、コバルト、ニッケル、パラジウム、バナジウム、タングステン、酸化インジウム( $\text{In}_2\text{O}_3$ )、酸化錫( $\text{SnO}_2$ )、酸化亜鉛、ITO(インジウム・チン・オキサイド: Indium Tin Oxide)、ポリチオフェン、ポリピロールなどを挙げることができる。これらの電極材料は単独で使用してもよく、あるいは複数併用してもよい。

陽極は、これらの電極材料を、例えば、蒸着法、スパッタリング法等の方法により、基板の上に形成することができる。

また、陽極は一層構造であってもよく、あるいは多層構造であってもよい。陽極のシート電気抵抗は、好ましくは、数百 / 以下、より好ましくは、5 ~ 50 / 程度に設定する。

陽極の厚みは使用する電極材料の材質にもよるが、一般に、5 ~ 1000 nm程度、より好ましくは、10 ~ 500 nm程度に設定する。

#### 【0091】

正孔注入輸送層3は、陽極からの正孔(ホール)の注入を容易にする機能、および注入された正孔を輸送する機能を有する化合物を含有する層である。

正孔注入輸送層は、一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物、または他の正孔注入輸送機能を有する化合物(例えば、フタロシアニン誘

10

20

30

40

50

導体、トリアリールアミン誘導体、トリアリールメタン誘導体、オキサゾール誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、ピラゾリン誘導体、ポリシラン誘導体、ポリフェニレンビニレンおよびその誘導体、ポリチオフエンおよびその誘導体、ポリ-N-ビニルカルバゾールなどを少なくとも1種使用して形成することができる。

正孔注入輸送機能を有する化合物は、単独で使用してもよく、または複数併用してもよい。

#### 【0092】

本発明の有機電界発光素子は、好ましくは、正孔注入輸送層に一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物を含有する。本発明の有機電界発光素子において使用することができる本発明の一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物以外の正孔注入輸送機能を有する化合物としては、トリアリールアミン誘導体(例えば、4,4'-ビス[N-フェニル-N-(4"-メチルフェニル)アミノ]ビフェニル、4,4'-ビス[N-フェニル-N-(3"-メチルフェニル)アミノ]ビフェニル、4,4'-ビス[N-フェニル-N-(3"-メトキシフェニル)アミノ]ビフェニル、4,4'-ビス[N-フェニル-N-(1"-ナフチル)アミノ]ビフェニル、3,3'-ジメチル-4,4'-ビス[N-フェニル-N-(3"-メチルフェニル)アミノ]ビフェニル、1,1'-ビス[4'-[N,N-ジ(4"-メチルフェニル)アミノ]フェニル]シクロヘキサン、9,10-ビス[N-(4'-メチルフェニル)-N-(4"-n-ブチルフェニル)アミノ]フェナントレン、3,8-ビス(N,N-ジフェニルアミノ)-6-フェニルフェナントリジン、4-メチル-N,N-ビス[4"-4"-'-ビス[N',N'-ジ(4-メチルフェニル)アミノ]ビフェニル-4-イル]アニリン、N,N'-ビス[4-(ジフェニルアミノ)フェニル]-N,N'-ジフェニル-1,3-ジアミノベンゼン、N,N'-ビス[4-(ジフェニルアミノ)フェニル]-N,N'-ジフェニル-1,4-ジアミノベンゼン、5,5"-ビス[4-(ビス[4-メチルフェニル]アミノ)フェニル-2,2':5',2"-ターチオフエン、1,3,5-トリス(ジフェニルアミノ)ベンゼン、4,4',4"-トリス(N-カルバゾリル)トリフェニルアミン、4,4',4"-トリス[N,N-ビス(4"-'-tert-ブチルビフェニル-4"-"-イル)アミノ]トリフェニルアミン、1,3,5-トリス[N-(4'-ジフェニルアミノ)ベンゼンなど、ポリチオフエンおよびその誘導体、ポリ-N-ビニルカルバゾールおよびその誘導体がより好ましい。

#### 【0093】

一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物と他の正孔注入機能を有する化合物を併用する場合、正孔注入輸送層中に占める一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物の含有量は、好ましくは、0.1重量%以上、より好ましくは、0.5~99.9重量%、さらに好ましくは3~97重量%である。

#### 【0094】

発光層4は、正孔および電子の注入機能、それらの輸送機能、正孔と電子の再結合により励起子を生成させる機能を有する化合物を含有する層である。

発光層は、一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物を宿主材料として、一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物以外の発光機能を有する化合物を少なくとも1種ゲスト材料として使用して形成することができ、また、一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物以外の発光機能を有する化合物を少なくとも1種宿主材料として、一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物をゲスト材料として使用して形成することもできる。

#### 【0095】

一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物以外の発光機能を有する化合物(ゲスト材料・宿主材料)としては、例えば、アクリドン誘導体、キナクリドン誘導体、ジケトピロロピロール誘導体、多環芳香族化合物(例えば、

10

20

30

40

50

ルブレン、アントラセン、テトラセン、ピレン、ペリレン、クリセン、デカサイクレン、コロネン、テトラフェニルシクロペンタジエン、ペンタフェニルシクロペンタジエン、9,10-ジフェニルアントラセン、9,10-ビス(フェニルエチニル)アントラセン、1,4-ビス(9'-エチニルアントセニル)ベンゼン、4,4'-ビス(9"-エチニルアントセニル)ビフェニル、ジベンゾ[f,f]ジインデノ[1,2,3-cd:1',2',3'-lm]ペリレン誘導体)、トリアリールアミン誘導体(例えば、正孔注入輸送機能を有する化合物として前述した化合物を挙げることができる)、有機金属錯体〔例えば、トリス(8-キノリノラート)アルミニウム、ビス(10-ベンゾ[h]キノリノラート)ベリリウム、2-(2'-ヒドロキシフェニル)ベンゾチアゾールの亜鉛塩、4-ヒドロキシアクリジンの亜鉛塩、3-ヒドロキシフラボンの亜鉛塩、5-ヒドロキシフラボンのベリリウム塩、5-ヒドロキシフラボンのアルミニウム塩〕、燐光系有機金属錯体〔例えば、フェニルピリジン系イリジウム錯体、フッ素置換フェニルピリジン系イリジウム錯体、テトラアザポルフィリン系白金錯体〕スチルベン誘導体〔例えば、1,1,4,4-テトラフェニル-1,3-ブタジエン、4,4'-ビス(2,2-ジフェニルビニル)ビフェニル、4,4'-ビス[(1,1,2-トリフェニル)エチニル]ビフェニル〕、クマリン誘導体(例えば、クマリン1、クマリン6、クマリン7、クマリン30、クマリン106、クマリン138、クマリン151、クマリン152、クマリン153、クマリン307、クマリン311、クマリン314、クマリン334、クマリン338、クマリン343、クマリン500)、ピラン誘導体(例えば、DCM1、DCM2)、オキサゾン誘導体(例えば、ナイルレッド)、ベンゾチアゾール誘導体、ベンゾオキサゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、ピラジン誘導体、ケイ皮酸エステル誘導体、ポリ-N-ビニルカルバゾールおよびその誘導体、ポリチオフエンおよびその誘導体、ポリフェニレンおよびその誘導体、ポリフルオレンおよびその誘導体、ポリフェニレンビニレンおよびその誘導体、ポリビフェニレンビニレンおよびその誘導体、ポリターフェニレンビニレンおよびその誘導体、ポリナフチレンビニレンおよびその誘導体、ポリチエニレンビニレンおよびその誘導体等を挙げることができる。一般式(1)で表される芳香族化合物以外の発光機能を有する化合物(ゲスト材料・ホスト材料)としては、アクリドン誘導体、キナクリドン誘導体、多環芳香族化合物、トリアリールアミン誘導体、有機金属錯体およびスチルベン誘導体が好ましく、多環芳香族化合物、有機金属錯体がより好ましい。

#### 【0096】

本発明の有機電界発光素子は、好ましくは、発光層に一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物をホスト材料として含有する。

一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物をホスト材料として、他の発光機能を有する化合物(ゲスト材料)と併用する場合、発光層中に占める一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物の含有率は、好ましくは、99.9~80重量%であり、より好ましくは、99.9~90重量%である。

ホスト材料は、単独で使用してもよく、複数併用してもよい。

また、ゲスト材料は単独で使用してもよく、複数併用してもよい。

ホスト材料を複数併用する場合、本発明の一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物のホスト材料全体に占める割合は、好ましくは、99~10重量%であり、より好ましくは90~20重量%である。

#### 【0097】

電子注入輸送層5は、陰極からの電子の注入を容易にする機能および/または注入された電子を輸送する機能を有する化合物を含有する層である。

電子注入輸送層に使用される電子注入輸送機能を有する化合物としては、例えば、有機金属錯体、オキサジアゾール誘導体、トリアゾール誘導体、トリアジン誘導体、ペリレン誘導体、キノリン誘導体、キノキサリン誘導体、ジフェニルキノロン誘導体、フェナントロリン誘導体、ニトロ置換フルオレノン誘導体、チオピランジオキサイド誘導体などを挙げることができる。また、有機金属錯体としては、例えば、トリス(8-キノリノラート)ア

10

20

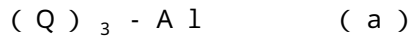
30

40

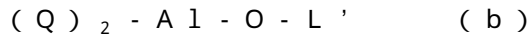
50

ルミニウム等の有機アルミニウム錯体、ビス(10-ベンゾ[h]キノリノラート)ベリリウム等の有機ベリリウム錯体、5-ヒドロキシフラボンのベリリウム塩、5-ヒドロキシフラボンのアルミニウム塩等を挙げることができる。好ましくは、有機アルミニウム錯体であり、より好ましくは、置換または未置換の8-キノリノラート配位子を有する有機アルミニウム錯体である。置換または未置換の8-キノリノラート配位子を有する有機アルミニウム錯体としては、例えば、一般式(a)~一般式(c)で表される化合物を挙げることができる。

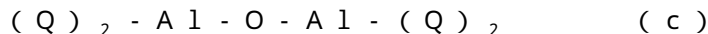
【0098】



(式中、Qは置換または未置換の8-キノリノラート配位子を表す)



(式中、Qは置換または未置換の8-キノリノラート配位子を表し、O-L'はフェノラート配位子を表し、L'はフェニル基を有する炭素数6~24の炭化水素基を表す)



(式中、Qは置換または未置換の8-キノリノラート配位子を表す)

【0099】

置換または未置換の8-キノリノラート配位子を有する有機アルミニウム錯体の具体例としては、例えば、トリス(8-キノリノラート)アルミニウム、トリス(4-メチル-8-キノリノラート)アルミニウム、トリス(5-メチル-8-キノリノラート)アルミニウム、トリス(3,4-ジメチル-8-キノリノラート)アルミニウム、トリス(4,5-ジメチル-8-キノリノラート)アルミニウム、トリス(4,6-ジメチル-8-キノリノラート)アルミニウム、

ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(フェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(2-メチルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(3-メチルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(4-メチルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(2-フェニルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(3-フェニルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(4-フェニルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(2,3-ジメチルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(2,6-ジメチルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(3,4-ジメチルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(3,5-ジメチルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(3,5-ジ-tert-ブチルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(2,6-ジフェニルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(2,4,6-トリフェニルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(2,4,6-トリメチルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(2,4,5,6-テトラメチルフェノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(1-ナフトラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-8-キノリノラート)(2-ナフトラート)アルミニウム、ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラート)(2-フェニルフェノラート)アルミニウム、ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラート)(3-フェニルフェノラート)アルミニウム、ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラート)(4-フェニルフェノラート)アルミニウム、ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラート)(3,5-ジメチルフェノラート)アルミニウム、ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラート)(3,5-ジ-tert-ブチルフェノラート)アルミニウム、

ビス(2-メチル-8-キノリノラート)アルミニウム-μ-オキソ-ビス(2-メチル-8-キノリノラート)アルミニウム、ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラート)アルミニウム-μ-オキソ-ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラート)アルミニウム

10

20

30

40

50

ム、ビス(2-メチル-4-エチル-8-キノリノラート)アルミニウム- $\mu$ -オキソ-ビス(2-メチル-4-エチル-8-キノリノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-4-メトキシ-8-キノリノラート)アルミニウム- $\mu$ -オキソ-ビス(2-メチル-4-メトキシ-8-キノリノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-5-シアノ-8-キノリノラート)アルミニウム- $\mu$ -オキソ-ビス(2-メチル-5-シアノ-8-キノリノラート)アルミニウム、ビス(2-メチル-5-トリフルオロメチル-8-キノリノラート)アルミニウム- $\mu$ -オキソ-ビス(2-メチル-5-トリフルオロメチル-8-キノリノラート)アルミニウムを挙げることができる。

電子注入輸送機能を有する化合物は単独で使用してもよく、また複数併用してもよい。

#### 【0100】

陰極6としては、比較的仕事関数の小さい金属、合金または導電性化合物を電極材料として使用することが好ましい。陰極に使用する電極材料としては、例えば、リチウム、リチウム-インジウム合金、ナトリウム、ナトリウム-カリウム合金、カルシウム、マグネシウム、マグネシウム-銀合金、マグネシウム-インジウム合金、インジウム、ルテニウム、チタニウム、マンガン、イットリウム、アルミニウム、アルミニウム-リチウム合金、アルミニウム-カルシウム合金、アルミニウム-マグネシウム合金、グラファイト薄を挙げることができる。これらの電極材料は単独で使用してもよく、また複数併用してもよい。

また、電子注入効率を向上させる、またはリークやショートによる欠陥を防止する目的で、陰極と電子注入輸送層との間に絶縁性薄膜層を挿入することも可能である。

絶縁層材料に用いられる材料としては、例えば、フッ化リチウム、酸化リチウム、フッ化セシウム、酸化セシウム、フッ化マグネシウム、フッ化カルシウム、酸化カルシウム、酸化アルミニウム、窒化アルミニウム、酸化チタン、酸化珪素、酸化ゲルマニウム、窒化珪素、窒化硼素、酸化モリブデン、酸化ルテニウム、酸化バナジウム等が挙げられ、これらは単独で使用してもよく、複数混合系や、積層系で使用してもよい。

陰極はこれらの電極材料を、例えば、蒸着法、スパッタリング法、イオン蒸着法、イオンプレーティング法、クラスターイオンビーム法により電子注入輸送層の上に形成することができる。

#### 【0101】

また、陰極は一層構造であってもよく、多層構造であってもよい。陰極のシート電気抵抗は数百  $\Omega$  /  $\square$  以下とするのが好ましい。陰極の厚みは、使用する電極材料にもよるが、通常5~1000nm、好ましくは、10~500nmとする。本発明の有機電界発光素子の発光を高率よく取り出すために、陽極または陰極の少なくとも一方の電極は、透明ないし半透明であることが好ましく、一般に、発光光の透過率が70%以上となるように陽極または陰極の材料、厚みを設定することが好ましい。

#### 【0102】

また、本発明の有機電界発光素子は、正孔注入輸送層、発光層および電子注入輸送層の少なくとも一層中に、一重項酸素クエンチャーを含有していてもよい。一重項酸素クエンチャーとしては、特に限定されるものではないが、例えば、ルブレン、ニッケル錯体、ジフェニルイソベンゾフランが挙げられ、好ましくは、ルブレンである。

一重項酸素クエンチャーが含有されている層としては、特に限定されるものではないが、好ましくは、発光層または正孔注入輸送層であり、より好ましくは、正孔注入輸送層である。尚、正孔注入輸送層に一重項酸素クエンチャーを含有させる場合、正孔注入輸送層中に均一に含有させてもよく、正孔注入輸送層と隣接する層(例えば、発光層、発光機能を有する電子注入輸送層)の近傍に含有させてもよい。

一重項酸素クエンチャーの含有量としては、含有される層(例えば、正孔注入輸送層)を構成する全体量の0.01~50重量%、好ましくは、0.05~30重量%、より好ましくは、0.1~20重量%である。

#### 【0103】

正孔注入輸送層、発光層、電子注入輸送層の形成方法に関しては、特に限定されるもの

ではなく、例えば、真空蒸着法、イオン化蒸着法、溶液塗布法（例えば、スピンコート法、キャスト法、ディップコート法、パーコート法、ロールコート法、ラングミュア・プロジェクト法、インクジェット法）を使用することができる。真空蒸着法により正孔注入輸送層、発光層、電子注入輸送層等の各層を形成する場合、真空蒸着の条件は、特に限定されるものではないが、通常、 $10^{-4}$  Pa程度以下の真空下で、50～500程度のポート温度（蒸着源温度）、-50～300程度の基板温度で、0.005～50 nm/sec程度の蒸着速度で実施することが好ましい。この場合、正孔注入輸送層、発光層、電子注入輸送層等の各層は、真空下で、連続して形成することが好ましい。連続で形成することにより諸特性に優れた有機電界発光素子を製造することが可能となる。真空蒸着法により、正孔注入輸送層、発光層、電子注入輸送層等の各層を、複数の化合物を使用して形成する場合、化合物を入れた各ポートを個別に温度制御して、共蒸着することが好ましい。

10

#### 【0104】

溶液塗布法により各層を形成する場合、各層を形成する成分あるいはその成分とバインダー樹脂等とを、溶媒に溶解または分散させて塗布液とする。溶媒としては、例えば、有機溶媒（ヘキサン、オクタン、デカン、トルエン、キシレン、エチルベンゼン、1-メチルナフタレン等の炭化水素系溶媒、アセトン、メチルエチルケトン、メチルイソブチルケトン、シクロヘキサノン等のケトン系溶媒、ジクロロメタン、クロロホルム、テトラクロロメタン、ジクロロエタン、トリクロロエタン、テトラクロロエタン、クロロベンゼン、ジクロロベンゼン、クロロトルエン等のハロゲン炭化水素系溶媒、酢酸エチル、酢酸ブチル、酢酸アミル、乳酸エチル等のエステル系溶媒、メタノール、プロパノール、ブタノール、ペンタノール、ヘキサノール、シクロヘキサノール、メチルセロソルブ、エチルセロソルブ、エチレングリコール等のアルコール系溶媒、ジブチルエーテル、テトラヒドロフラン、ジオキサン、ジメトキシエタン、アニソール等のエーテル系溶媒、N,N-ジメチルホルムアミド、N,N-ジメチルアセトアミド、1-メチル-2-ピロリドン、1,3-ジメチル-2-イミダゾリジノン、ジメチルスルホキシド等の極性溶媒）、水を挙げることができる。溶媒は単独で使用してもよく、また複数併用してもよい。正孔注入輸送層、発光層、電子注入輸送層の各層の成分を溶媒に分散させる場合には、分散方法として、例えば、ボールミル、サンドミル、ペイントシェーカー、アトライター、ホモジナイザー等を使用して微粒子状に分散する方法を使用することができる。

20

30

また、正孔注入輸送層、発光層、電子注入輸送層等の各層に使用しうるバインダー樹脂としては、ポリ-N-ビニルカルバゾール、ポリアリーレート、ポリスチレン、ポリエステル、ポリシロキサン、ポリメチルメタクリレート、ポリメチルアクリレート、ポリエーテル、ポリカーボネート、ポリアミド、ポリイミド、ポリアミドイミド、ポリパラキシレン、ポリエチレン、ポリフェニレンオキサイド、ポリエーテルスルホン、ポリアニリンおよびその誘導体、ポリチオフェンおよびその誘導体、ポリフェニレンビニレンおよびその誘導体、ポリフルオレンおよびその誘導体、ポリチエニレンビニレンおよびその誘導体などの高分子化合物を挙げることができる。バインダー樹脂は単独で使用してもよく、また、複数併用してもよい。塗布液の濃度は、特に限定されるものではないが、実施する塗布法により所望の厚みを作製するに適した濃度範囲に設定することができ、通常、0.1～50重量%、好ましくは、1～30重量%に設定する。バインダー樹脂を使用する場合、その使用量は特に限定されるものではないが、通常、正孔注入輸送層、発光層、電子注入輸送層等の各層を形成する成分とバインダー樹脂の総量に対してバインダー樹脂の含有率が（一層型の素子を形成する場合には各成分の総量に対して）、5～99.9重量%、好ましくは、10～99重量%となるように使用する。

40

#### 【0105】

正孔注入輸送層、発光層、電子注入輸送層等の各層の膜厚は、特に限定されるものではないが、通常、5 nm～5 μmとする。また、上記の条件で作製した本発明の有機電界発光素子は、酸素や水分等との接触を防止する目的で、保護層（封止層）を設けたり、また、素子を不活性物質中（例えば、パラフ

50

イン、流動パラフィン、シリコンオイル、フルオロカーボン油、ゼオライト含有フルオロカーボン油)に封入して保護することができる。保護層に使用する材料としては、例えば、有機高分子材料(例えば、フッ素樹脂、エポキシ樹脂、シリコン樹脂、エポキシシリコン樹脂、ポリスチレン、ポリエステル、ポリカーボネート、ポリアミド、ポリイミド、ポリアミドイミド、ポリパラキシレン、ポリエチレン、ポリフェニレンオキサイド)、無機材料(例えば、ダイヤモンド薄膜、アモルファスシリカ、電気絶縁性ガラス、金属酸化物、金属窒化物、金属炭化物、金属硫化物)、さらには、光硬化性樹脂を挙げることができる。保護層に使用する材料は単独で使用してもよく、また複数併用してもよい。保護層は一層構造であってもよく、また多層構造であってもよい。

#### 【0106】

本発明の有機電界発光素子は、陽極の表面に界面層(中間層)を設けることもできる。界面層の材質としては、有機リン化合物、ポリシラン、芳香族アミン誘導体、フタロシアニン誘導体、フルオロカーボン系ポリマー等を挙げることができる。

さらに、電極、例えば、陽極はその表面を、酸、アンモニア/過酸化水素、UVオゾン、あるいはプラズマで処理して使用することもできる。

#### 【0107】

本発明の有機電界発光素子は、通常、直流駆動型の素子として使用することができるが、交流駆動型の素子としても使用することができる。また、本発明の有機電界発光素子は、セグメント型、単純マトリック駆動型等のパッシブ駆動型であってもよく、TFT(薄膜トランジスタ)型、MIM(メタル-インスレーター-メタル)型等のアクティブ駆動型であってもよい。駆動電圧は通常、2~30Vである。本発明の有機電界発光素子は、パネル型光源(例えば、時計、液晶パネル等のバックライト)、各種の発光素子(例えば、LED等の発光素子の代替)、各種の表示素子(例えば、情報表示素子(パソコンモニター、携帯電話・携帯端末用表示素子))、各種の標識、各種のセンサーなどに使用することができる。

また、本発明の一般式(1)、一般式(2)および/または一般式(3)で表される芳香族化合物は、有機電界発光素子のみならず、有機半導体として、例えば、電池材料、太陽電池、非線形光学材料、有機トランジスタ、アクチュエータ、センサ、ガス分離膜、分子配線、帯電防止剤、防食材料、熱電変換素子、メモリー素子等の、有機エレクトロニクス分野での使用が可能である。

#### 【0108】

以下、実施例を挙げて本発明をさらに詳細に説明するが、本発明は、以下の実施例に限定されるものではない。

#### 【実施例1】

#### 【0109】

例示化合物A-1の製造。

#### (1) 4-プロモジベンゾフランの製造

ジベンゾフラン67.3g(0.4mol)およびテトラヒドロフラン700mlよりなる混合物を、アルゴン気流下で、-40℃に冷却し、n-ブチルリチウムのn-ヘキサン溶液(2.4mol/l)180mlを添加した。反応混合物を室温まで昇温し、同温度で5時間放置した。次に、混合物を-78℃に冷却し、1,2-ジプロモエタン159g(0.85mol)とテトラヒドロフラン50mlからなる溶液を攪拌下、緩やかに滴下した。混合物を室温まで昇温し、同温度で2時間攪拌した。その後テトラヒドロフランおよびn-ヘキサンを減圧下に留去して、残渣をジクロロメタンに溶解し、1規定塩酸水および純水で洗浄を行った。有機層からジクロロメタンを減圧下に留去し、残渣をトルエンから再結晶して、4-プロモジベンゾフランを75g得た。

(2) 4-プロモジベンゾフラン12.35g(50mmol)、フェニルボロン酸6.1g(50mmol)、炭酸ナトリウム10.6g(100mmol)、トルエン300mlおよび水200mlよりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム500mgを添加して、90℃で6時間加熱攪拌した。その後、

10

20

30

40

50

反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をメチルセロソルブから再結晶して、4 - フェニルジベンゾフラン 11.8 g を得た。

【0110】

(3) 4 - フェニルジベンゾフラン 9.88 g (40 mmol) およびテトラヒドロフラン 70 ml よりなる混合物をアルゴン気流下、 $-40^{\circ}\text{C}$  に冷却し、n - ブチルリチウムの n - ヘキサン溶液 (2.4 mol/l) 18 ml を添加した。その後、反応混合物を室温まで昇温し、同温度で4時間放置した。次に反応混合物を $-78^{\circ}\text{C}$  に冷却し、1, 2 - ジプロモエタン 15.9 g (85 mmol) とテトラヒドロフラン 5 ml からなる溶液を攪拌下、緩やかに滴下した。混合物を室温まで昇温し、同温度で2時間攪拌した。その後、テトラヒドロフランおよび n - ヘキサンを減圧下に留去して、残渣をジクロロメタンに溶解し、1規定塩酸水および純水で洗浄を行った。有機層からジクロロメタンを減圧下に留去し、残渣をトルエンから再結晶して4 - プロモ - 5 - フェニルジベンゾフラン 9.56 g を得た。

10

(4) 4 - プロモ - 5 - フェニルジベンゾフラン 3.23 g (10 mmol)、4 - ジベンゾフランボロン酸 2.12 g (10 mmol)、炭酸ナトリウム 2.12 g (20 mmol)、トルエン 60 ml および水 50 ml よりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 25 mg を添加して、 $90^{\circ}\text{C}$  で8時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶して、目的とする例示化合物 A - 1 の化合物を無色の結晶として 2.29 g 得た。

20

さらにこの化合物を、 $350 \sim 7 \times 10^{-4} \text{ Pa}$  で昇華精製した。

FD - MS : 410 ( $\text{M}^+$ )

元素分析 : 計算値 (%) ; C, 87.78 ; H, 4.42

分析値 (%) ; C, 87.8 ; H, 4.4

【実施例 2】

【0111】

例示化合物 A - 4 の製造

実施例 1 の (4) において、4 - ジベンゾフランボロン酸 2.12 g (10 mmol) を使用する代わりに、5 - フェニル - 4 - ジベンゾフランボロン酸 2.88 g (10 mmol) を使用した以外は、実施例 1 の (4) に記載の操作に従い、例示化合物 A - 4 の化合物を無色の結晶として 2.02 g 得た。

30

さらにこの化合物を、 $360 \sim 2 \times 10^{-4} \text{ Pa}$  で昇華精製した。

FD - MS : 486 ( $\text{M}^+$ )

元素分析 : 計算値 (%) ; C, 88.87 ; H, 4.56

分析値 (%) ; C, 88.9 ; H 4.6

【実施例 3】

【0112】

例示化合物 A - 9 の製造

(1) ジベンゾフラン 67.3 g (0.4 mol) およびジクロロエタン 500 ml よりなる混合物に、臭素 128 g およびジクロロエタン 100 ml よりなる混合物を滴下した。室温で10時間攪拌し、析出した固体をろ別した。ろ液をチオ硫酸ナトリウム水溶液で洗浄し、その後水洗して、ジクロロエタン層よりジクロロエタンを留去した。また、ろ別した固体をチオ硫酸ナトリウム水溶液中でスラッジした後、水洗した。ろ液よりクロホルムを留去した残渣と、固体を合わせ、イソプロパノール/トルエンより再結晶し、無色針状結晶として、2, 7 - プロモジベンゾフラン 101.7 g を得た。

40

(2) 2, 7 - ジプロモジベンゾフラン 16.3 g (50 mmol)、フェニルボロン酸 12.2 g (0.1 mol)、炭酸ナトリウム 21.2 g (0.2 mol)、トルエン 120 ml および水 100 ml よりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 1.1 g を添加し、 $90^{\circ}\text{C}$  で18時間加熱攪拌した。その後

50

、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶し、2,7-ジフェニルジベンゾフラン 13.4 g を得た。

【0113】

(3) 2,7-ジフェニルジベンゾフラン 12.00 g (40 mmol) およびテトラヒドロフラン 70 ml よりなる混合物をアルゴン気流下、-40 に冷却し、n-ブチルリチウムのn-ヘキサン溶液(2.4 mol/l) 18 ml を添加した。その後、反応混合物を室温まで昇温し、同温度で4時間放置した。次に反応混合物を-78 に冷却し、1,2-ジブromoエタン 15.9 g (85 mmol) とテトラヒドロフラン 5 ml からなる溶液を攪拌下、緩やかに滴下した。混合物を室温まで昇温し、同温度で2時間攪拌した。その後、テトラヒドロフランおよびn-ヘキサンを減圧下に留去して、残渣をジクロロメタンに溶解し、1規定塩酸水および純水で洗浄を行った。有機層からジクロロメタンを減圧下に留去し、残渣をトルエンから再結晶して、4-ブromo-2,7-ジフェニルジベンゾフラン 9.56 g を得た。

10

(4) 4-ブromo-2,7-ジフェニルジベンゾフラン 3.79 g (10 mmol)、5-フェニル-4-ジベンゾフランボロン酸 2.88 g (10 mmol)、炭酸ナトリウム 2.12 g (20 mmol)、トルエン 60 ml および水 50 ml よりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 25 mg を添加して、90 で8時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶して、目的とする例示化合物 A-9 の化合物を無色の結晶として 2.29 g 得た。

20

さらにこの化合物を、 $360 \times 10^{-4} \text{ Pa}$  で昇華精製した。

FD-MS: 562 ( $M^+$ )

元素分析: 計算値(%); C 89.66, ; H 4.66,

分析値(%); C 89.7, ; H 4.7,

【実施例4】

【0114】

例示化合物 A-15 の製造

(1) ジベンゾフラン 67.3 g (0.4 mol) およびジクロロエタン 500 ml よりなる混合物に、臭素 64 g およびジクロロエタン 100 ml よりなる混合物を滴下した。室温で10時間攪拌し、析出した固体をろ別した。ろ液をチオ硫酸ナトリウム水溶液で洗浄し、その後水洗して、ジクロロエタン層よりジクロロエタンを留去した。また、ろ別した固体をチオ硫酸ナトリウム水溶液中でスラッジした後、水洗した。ろ液よりクロホルムを留去した残渣と、固体を合わせ、イソプロパノール/トルエンより再結晶し、無色針状結晶として、2-ブromoジベンゾフラン 80.8 g を得た。

30

(2) 2-ブromoジベンゾフラン 12.4 g (50 mmol)、o-ビフェニルボロン酸 9.9 g (0.1 mol)、炭酸ナトリウム 10.6 g (0.1 mol)、トルエン 60 ml および水 50 ml よりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 500 mg を添加し、90 で8時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶し、2-o-ビフェニルジベンゾフラン 14.5 g を得た。

40

【0115】

(3) 2-o-ビフェニルジベンゾフラン 12.8 g (40 mmol) およびテトラヒドロフラン 70 ml よりなる混合物をアルゴン気流下、-40 に冷却し、n-ブチルリチウムのn-ヘキサン溶液(2.4 mol/l) 18 ml を添加した。その後、反応混合物を室温まで昇温し、同温度で4時間放置した。次に反応混合物を-78 に冷却し、1,2-ジブromoエタン 15.9 g (85 mmol) とテトラヒドロフラン 5 ml からなる溶液を攪拌下、緩やかに滴下した。混合物を室温まで昇温し、同温度で2時間攪拌した。その後、テトラヒドロフランおよびn-ヘキサンを減圧下に留去して、残渣をジクロロメタンに溶解し、1規定塩酸水および純水で洗浄を行った。有機層からジクロロメタンを減圧

50

下に留去し、残渣をシリカゲルカルムクロマトグラフィーにより精製し、さらにトルエンから再結晶して、4 - プロモ - 2 - o - ビフェニルジベンゾフラン 4 . 23 g を得た。

(4) 4 - プロモ - 2 - o - ビフェニルジベンゾフラン 3 . 99 g ( 10 mmol ) および N , N - ジメチルホルムアミド 100 ml よりなる混合物にビス ( 1 , 5 - シクロオクタジエン ) ニッケル 1 . 65 g ( 6 mmol ) を添加して、60 で 5 時間加熱攪拌を行った。その後、反応混合物を室温に冷却し、トルエンおよび希塩酸を添加して、トルエン相を分離、水洗した。その後、トルエン相から、トルエンを減圧下に留去し、残渣をメチルセロソルブから再結晶して、目的とする例示化合物 A - 15 を無色の結晶として 1 . 42 g 得た。さらにこの化合物を  $410$ 、 $4 \times 10^{-4}$  Pa で昇華精製した。

FD - MS : 638 ( M<sup>+</sup> )

元素分析 : 計算値 ( % ) ; C 90 . 26 , ; H 4 . 73 ,  
分析値 ( % ) ; C 90 . 3 , ; H 4 . 7 ,

#### 【実施例 5】

##### 【0116】

例示化合物 A - 21 の製造

実施例 1 の ( 4 ) において、4 - プロモ - 5 - フェニルジベンゾフラン 3 . 23 g ( 10 mmol ) を使用する代わりに、4 - プロモ - 5 - m - ビフェニルジベンゾフラン 3 . 99 g ( 10 mmol ) を使用した以外は、実施例 1 の ( 4 ) に記載の操作に従い、例示化合物 A - 21 の化合物を無色の結晶として 1 . 14 g 得た。さらにこの化合物を  $400$ 、 $4 \times 10^{-4}$  Pa で昇華精製した。

FD - MS : 486 ( M<sup>+</sup> )

元素分析 : 計算値 ( % ) ; C 88 . 87 , ; H 4 . 56 ,  
分析値 ( % ) ; C 88 . 9 , ; H 4 . 6 ,

#### 【実施例 6】

##### 【0117】

例示化合物 A - 25 の製造

実施例 3 の ( 4 ) において、4 - プロモ - 2 , 7 - ジフェニルジベンゾフラン 3 . 79 g ( 10 mmol ) を使用する代わりに、4 - プロモ - 2 , 7 - ビス ( m - ビフェル ) ジベンゾフラン 5 . 50 g ( 10 mmol ) を使用した以外は、実施例 3 の ( 4 ) に記載の操作に従い、例示化合物 A - 25 の化合物を無色の結晶として 1 . 63 g 得た。さらにこの化合物を  $450$ 、 $2 \times 10^{-4}$  Pa で昇華精製した。

FD - MS : 942 ( M<sup>+</sup> )

元素分析 : 計算値 ( % ) ; C 91 . 69 , ; H 4 . 92 ,  
分析値 ( % ) ; C 91 . 7 , ; H 4 . 9 ,

#### 【実施例 7】

##### 【0118】

例示化合物 A - 37 の製造

実施例 1 の ( 4 ) において、4 - プロモ - 5 - フェニルジベンゾフラン 3 . 23 g ( 10 mmol ) を使用する代わりに、4 - プロモ - 2 , 7 - ビス ( p - ビフェニル ) ジベンゾフラン 5 . 50 g ( 10 mmol ) を使用した以外は、実施例 1 の ( 4 ) に記載の操作に従い、例示化合物 A - 37 の化合物を無色の結晶として 1 . 12 g 得た。さらにこの化合物を  $450$ 、 $1 \times 10^{-4}$  Pa で昇華精製した。

FD - MS : 638 ( M<sup>+</sup> )

元素分析 : 計算値 ( % ) ; C 90 . 26 , ; H 4 . 73 ,  
分析値 ( % ) ; C 90 . 3 , ; H 4 . 7 ,

#### 【実施例 8】

##### 【0119】

例示化合物 A - 41 の製造

実施例 1 の ( 4 ) において、4 - プロモ - 5 - フェニルジベンゾフラン 3 . 23 g ( 10 mmol ) を使用する代わりに、4 - プロモ - 5 - ( 1' - ナフチル ) ジベンゾフラン 3

10

20

30

40

50

．72 g (10 mmol) を使用した以外は実施例 1 の (4) に記載の操作に従い、例示化合物 A - 41 の化合物を無色の結晶として 2.06 g 得た。さらにこの化合物を 390、 $1 \times 10^{-4}$  Pa で昇華精製した。

FD - MS : 460 (M<sup>+</sup>)

元素分析 : 計算値 (%) ; C 88.67, ; H 4.38,  
分析値 (%) ; C 88.7, ; H 4.4,

【実施例 9】

【0120】

例示化合物 A - 46 の製造

(1) 2,7-ジブロモジベンゾフラン 16.3 g (50 mmol)、1-ナフタレンボロン酸 17.2 g (0.1 mol)、炭酸ナトリウム 21.2 g (0.2 mol)、トルエン 120 ml および水 100 ml よりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 1.1 g を添加し、90 で 7 時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶し、2,7-ビス(1'-ナフチル)ジベンゾフラン 18.3 g を得た。

(2) 2,7-ビス(1'-ナフチル)ジベンゾフラン 16.80 g (40 mmol) およびテトラヒドロフラン 70 ml よりなる混合物をアルゴン気流下、-40 に冷却し、n-ブチルリチウムの n-ヘキサン溶液 (2.4 mol/l) 18 ml を添加した。その後、反応混合物を室温まで昇温し、同温度で 4 時間放置した。次に反応混合物を -78 に冷却し、1,2-ジブロモエタン 15.9 g (85 mmol) とテトラヒドロフラン 5 ml からなる溶液を攪拌下、緩やかに滴下した。混合物を室温まで昇温し、同温度で 2 時間攪拌した。その後、テトラヒドロフランおよび n-ヘキサンを減圧下に留去して、残渣をジクロロメタンに溶解し、1 規定塩酸水および純水で洗浄を行った。有機層からジクロロメタンを減圧下に留去し、残渣をトルエンから再結晶して、4-プロモ-2,7-ビス(1'-ナフチル)ジベンゾフラン 13.3 g を得た。

(3) 4-プロモ-2,7-ビス(1'-ナフチル)ジベンゾフラン 4.98 g (10 mmol) および N,N-ジメチルホルムアミド 100 ml よりなる混合物にビス(1,5-シクロオクタジエン)ニッケル 1.65 g (6 mmol) を添加して、60 で 5 時間加熱攪拌を行った。その後、反応混合物を室温に冷却し、トルエンおよび希塩酸を添加して、トルエン相を分離、水洗した。その後、トルエン相から、トルエンを減圧下に留去し、残渣をメチルセロソルブから再結晶して、目的とする例示化合物 A - 46 を無色の結晶として 3.29 g 得た。さらにこの化合物を 480、 $2 \times 10^{-4}$  Pa で昇華精製した。

FD - MS : 838 (M<sup>+</sup>)

元素分析 : 計算値 (%) ; C 91.62, ; H 4.57,  
分析値 (%) ; C 91.6, ; H 4.6,

【実施例 10】

【0121】

例示化合物 A - 51 の製造

実施例 1 の (4) において、4-プロモ-5-フェニルジベンゾフラン 3.23 g (10 mmol) を使用する代わりに、4-プロモ-5-(2'-ナフチル)ジベンゾフラン 3.72 g (10 mmol) を使用した以外は実施例 1 の (4) に記載の操作に従い、例示化合物 A - 51 の化合物を無色の結晶として 1.88 g 得た。さらにこの化合物を 390、 $3 \times 10^{-4}$  Pa で昇華精製した。

FD - MS : 460 M<sup>+</sup>

元素分析 : 計算値 (%) ; C 88.67, ; H 4.38,  
分析値 (%) ; C 88.7, ; H 4.4,

【実施例 11】

【0122】

10

20

30

40

50

(1) 2,7-ジブロモジベンゾフラン 16.3 g (50 mmol)、2-ナフタレンボロン酸 17.2 g (0.1 mol)、炭酸ナトリウム 21.2 g (0.2 mol)、トルエン 120 ml および水 100 ml よりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 1.1 g を添加し、90 で7時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶し、2,7-ビス(2'-ナフチル)ジベンゾフラン 18.7 g を得た。

(2) 2,7-ビス(2'-ナフチル)ジベンゾフラン 16.80 g (40 mmol) およびテトラヒドロフラン 70 ml よりなる混合物をアルゴン気流下、-40 に冷却し、n-ブチルリチウムのn-ヘキサン溶液(2.4 mol/l) 18 ml を添加した。その後、反応混合物を室温まで昇温し、同温度で4時間放置した。次に反応混合物を-78 に冷却し、1,2-ジブロモエタン 15.9 g (85 mmol) とテトラヒドロフラン 5 ml からなる溶液を攪拌下、緩やかに滴下した。混合物を室温まで昇温し、同温度で2時間攪拌した。その後、テトラヒドロフランおよびn-ヘキサンを減圧下に留去して、残渣をジクロロメタンに溶解し、1規定塩酸水および純水で洗浄を行った。有機層からジクロロメタンを減圧下に留去し、残渣をトルエンから再結晶して、4-プロモ-2,7-ビス(2'-ナフチル)ジベンゾフラン 14.6 g を得た。

#### 【0123】

(3) 4-プロモ-2,7-ビス(2'-ナフチル)ジベンゾフラン 9.96 g (20 mmol)、2-ナフタレンボロン酸 3.44 g (20 mmol)、炭酸ナトリウム 4.24 g (40 mmol)、トルエン 60 ml および水 50 ml よりなる混合物にアルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 0.5 g を添加し、90 で8時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離し、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶し、2,4,7-トリス(2'-ナフチル)ジベンゾフラン 9.2 g を得た。

(4) 2,4,7-トリス(2'-ナフチル)ジベンゾフラン 8.19 g (15 mmol) およびテトラヒドロフラン 30 ml よりなる混合物をアルゴン気流下、-40 に冷却し、n-ブチルリチウムのn-ヘキサン溶液(2.4 mol/l) 6.8 ml を添加した。その後、反応混合物を室温まで昇温し、同温度で4時間放置した。次に反応混合物を-78 に冷却し、1,2-ジブロモエタン 6.0 g (32 mmol) とテトラヒドロフラン 5 ml からなる溶液を攪拌下、緩やかに滴下した。混合物を室温まで昇温し、同温度で2時間攪拌した。その後、テトラヒドロフランおよびn-ヘキサンを減圧下に留去して、残渣をジクロロメタンに溶解し、1規定塩酸水および純水で洗浄を行った。有機層からジクロロメタンを減圧下に留去し、残渣をトルエンから再結晶して、4-プロモ-2,5,7-トリス(2'-ナフチル)ジベンゾフラン 6.85 g を得た。

(5) 4-プロモ-2,5,7-トリス(2'-ナフチル)ジベンゾフラン 6.25 g (10 mmol)、4-ジベンゾフランボロン酸 2.12 g (10 mmol)、炭酸ナトリウム 2.12 g (20 mmol)、トルエン 60 ml および水 50 ml よりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 25 mg を添加して、90 で8時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶して、目的とする例示化合物 A-57 の化合物を無色の結晶として 2.29 g 得た。

さらにこの化合物を、480  $3 \times 10^{-4}$  Pa で昇華精製した。

FD-MS: 712 ( $M^+$ )

元素分析: 計算値(%); C, 90.99; H, 4.52

分析値(%); C, 91.0; H, 4.5

#### 【実施例12】

##### 【0124】

例示化合物 A-61 の製造

実施例1の(4)において、4-プロモ-5-フェニルジベンゾフラン 3.23 g (10

10

20

30

40

50

mmol) を使用する代わりに、4-ブロモ-5-(9'-フェナントリル)ジベンゾフラン 4.23 g (10 mmol) を使用した以外は、実施例 1 の (4) に記載の操作に従い、例示化合物 A-61 の化合物を無色の結晶として 2.12 g 得た。さらにこの化合物を  $420$ 、 $1 \times 10^{-4}$  Pa で昇華精製した。

FD-MS: 510 ( $M^+$ )

元素分析: 計算値 (%); C 89.39, ; H 4.34,

分析値 (%); C 89.4, ; H 4.3,

【実施例 13】

【0125】

例示化合物 A-71 の製造

実施例 1 の (4) において、4-ブロモ-5-フェニルジベンゾフラン 3.23 g (10 mmol) を使用する代わりに、4-ブロモ-5-(9', 9'-ジメチル-9'H-フルオレン-2'-イル)ジベンゾフラン 4.39 g (10 mmol) を使用した以外は、実施例 1 の (4) に記載の操作に従い、例示化合物 A-71 の化合物を無色の結晶として 1.98 g 得た。さらにこの化合物を  $440$ 、 $5 \times 10^{-4}$  Pa で昇華精製した。

FD-MS: 526 ( $M^+$ )

元素分析: 計算値 (%); C 88.95, ; H 4.98,

分析値 (%); C 89.0, ; H 5.0,

【実施例 14】

【0126】

例示化合物 A-72 と A-73 の混合物の製造

(1) 2-ブロモジベンゾフラン 12.4 g (50 mmol)、9, 9-ジメチル-9'H-フルオレン-2-ボロン酸 11.9 g (0.1 mol)、炭酸ナトリウム 10.6 g (0.1 mol)、トルエン 60 ml および水 50 ml よりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 500 mg を添加し、 $90$  で 8 時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶し、2-(9', 9'-ジメチル-9'H-フルオレン-2'-イル)ジベンゾフラン 16.2 g を得た。

(2) 2-(9', 9'-ジメチル-9'H-フルオレン-2'-イル)ジベンゾフラン 14.4 g (40 mmol) およびテトラヒドロフラン 70 ml よりなる混合物をアルゴン気流下、 $-40$  に冷却し、n-ブチルリチウムの n-ヘキサン溶液 (2.4 mol/l) 18 ml を添加した。その後、反応混合物を室温まで昇温し、同温度で 4 時間放置した。次に反応混合物を  $-78$  に冷却し、1, 2-ジプロモエタン 15.9 g (85 mmol) とテトラヒドロフラン 5 ml からなる溶液を攪拌下、緩やかに滴下した。混合物を室温まで昇温し、同温度で 2 時間攪拌した。その後、テトラヒドロフランおよび n-ヘキサンを減圧下に留去して、残渣をジクロロメタンに溶解し、1 規定塩酸水および純水で洗浄を行った。有機層からジクロロメタンを減圧下に留去し、残渣をトルエンから再結晶して、4-ブromo-2-(9', 9'-ジメチル-9'H-フルオレン-2'-イル)ジベンゾフランと 5-ブromo-2-(9', 9'-ジメチル-9'H-フルオレン-2'-イル)ジベンゾフランの混合物を 11.9 g を得た。

(3) 4-ブromo-2-(9', 9'-ジメチル-9'H-フルオレン-2'-イル)ジベンゾフランと 5-ブromo-2-(9', 9'-ジメチル-9'H-フルオレン-2'-イル)ジベンゾフランの混合物 4.39 g (10 mmol)、4-ジベンゾフランボロン酸 2.12 g (10 mmol)、炭酸ナトリウム 2.12 g (20 mmol)、トルエン 60 ml および水 50 ml よりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 25 mg を添加して、 $90$  で 8 時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶して、目的とする例示化合物 A-72 と A-73 の混合物を無色の結晶として 2.33 g 得た。さらにこの化合物を  $460$ 、 $2 \times 10^{-4}$  Pa で昇華精製した。

10

20

30

40

50

FD - MS : 526 (M<sup>+</sup>)

元素分析 : 計算値 (%) ; C 88.95 , ; H 4.98 ,

分析値 (%) ; C 89.0 , ; H 5.0 ,

【実施例 15】

【0127】

例示化合物 A - 80 の製造

(1) 2,7-ジブロモジベンゾフラン 16.3 g (50 mmol)、9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-ボロン酸 23.8 g (0.1 mol)、炭酸ナトリウム 21.2 g (0.2 mol)、トルエン 120 ml および水 100 ml よりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 1.1 g を添加し、90 で7時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶し、2,7-ビス(9',9'-9'H-フルオレン-2'-イル)ジベンゾフラン 23.8 g を得た。

(2) 2,7-ビス(9',9'-ジメチル-9'H-フルオレン-2'-イル)ジベンゾフラン 22.12 g (40 mmol) およびテトラヒドロフラン 70 ml よりなる混合物をアルゴン気流下、-40 に冷却し、n-ブチルリチウムのn-ヘキサン溶液(2.4 mol/l) 18 ml を添加した。その後、反応混合物を室温まで昇温し、同温度で4時間放置した。次に反応混合物を-78 に冷却し、1,2-ジブロモエタン 15.9 g (85 mmol) とテトラヒドロフラン 5 ml からなる溶液を攪拌下、緩やかに滴下した。混合物を室温まで昇温し、同温度で2時間攪拌した。その後、テトラヒドロフランおよびn-ヘキサンを減圧下に留去して、残渣をジクロロメタンに溶解し、1規定塩酸水および純水で洗浄を行った。有機層からジクロロメタンを減圧下に留去し、残渣をトルエンから再結晶して、4-プロモ-2,7-ビス(9',9'-ジメチル-9'H-フルオレン-2'-イル)ジベンゾフラン 19.2 g を得た。

(3) 4-プロモ-2,7-ビス(9',9'-ジメチル-9'H-フルオレン-2'-イル)ジベンゾフラン 6.31 g (10 mmol)、4-ジベンゾフランボロン酸 2.12 g (10 mmol)、炭酸ナトリウム 2.12 g (20 mmol)、トルエン 60 ml および水 50 ml よりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 25 mg を添加して、90 で8時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶して、目的とする例示化合物 A - 80 を無色の結晶として 1.73 g 得た。さらにこの化合物を 450、 $2 \times 10^{-4}$  Pa で昇華精製した。

FD - MS : 718 (M<sup>+</sup>)

元素分析 : 計算値 (%) ; C 90.22 , ; H 5.33 ,

分析値 (%) ; C 90.2 , ; H 5.3 ,

【実施例 16】

【0128】

例示化合物 B - 5 の製造

(1) 2,7-ジブロモジベンゾチオフェン 17.1 g (50 mmol)、フェニルボロン酸 12.2 g (0.1 mol)、炭酸ナトリウム 21.2 g (0.2 mol)、トルエン 120 ml および水 100 ml よりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 1.1 g を添加し、90 で7時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶し、2,7-ジフェニルジベンゾチオフェン 13.8 g を得た。

(2) 2,7-ジフェニルジベンゾチオフェン 13.44 g (40 mmol) およびテトラヒドロフラン 70 ml よりなる混合物をアルゴン気流下、-40 に冷却し、n-ブチルリチウムのn-ヘキサン溶液(2.4 mol/l) 18 ml を添加した。その後、反応混合物を室温まで昇温し、同温度で4時間放置した。次に反応混合物を-78 に冷却し、1,2-ジブロモエタン 15.9 g (85 mmol) とテトラヒドロフラン 5 ml から

なる溶液を攪拌下、緩やかに滴下した。混合物を室温まで昇温し、同温度で2時間攪拌した。その後、テトラヒドロフランおよびn-ヘキサンを減圧下に留去して、残渣をジクロロメタンに溶解し、1規定塩酸水および純水で洗浄を行った。有機層からジクロロメタンを減圧下に留去し、残渣をトルエンから再結晶して、4-プロモ-2,7-ジフェニルジベンゾチオフェン10.9gを得た。

(3) 4-プロモ-2,7-ジフェニルジベンゾチオフェン4.15g(10mmol)およびN,N-ジメチルホルムアミド100mlよりなる混合物にビス(1,5-シクロオクタジエン)ニッケル1.65g(6mmol)を添加して、60℃で5時間加熱攪拌を行った。その後、反応混合物を室温に冷却し、トルエンおよび希塩酸を添加して、トルエン相を分離、水洗した。その後、トルエン相から、トルエンを減圧下に留去し、残渣をメチルセロソルブから再結晶して、目的とする例示化合物B-5を無色の結晶として3.21g得た。さらにこの化合物を460℃、 $1 \times 10^{-4}$  Paで昇華精製した。

FD-MS: 670 ( $M^+$ )

元素分析: 計算値(%); C 85.93, ; H 4.51, ; S 9.56,

分析値(%); C 85.9, ; H 4.5, ; S 9.6

#### 【実施例17】

##### 【0129】

例示化合物C-17の製造

4-プロモ-2,5,7-トリス(2'-ナフチル)ジベンゾフラン6.25g(10mmol)、4-ジベンゾチオフェンボロン酸2.28g(10mmol)、炭酸ナトリウム2.12g(20mmol)、トルエン60mlおよび水50mlよりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム25mgを添加して、90℃で8時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶して、目的とする例示化合物C-17を無色の結晶として1.86g得た。さらにこの化合物を460℃、 $2 \times 10^{-4}$  Paで昇華精製した。

FD-MS: 728 ( $M^+$ )

元素分析: 計算値(%); C 88.98, ; H 4.43, ; S 4.40

分析値(%); C 89.0, ; H 4.4, ; S 4.4

#### 【実施例18】

##### 【0130】

例示化合物D-3の製造

(1) ジベンゾフラン16.8g(0.1mol)およびテトラヒドロフラン170mlよりなる混合物をアルゴン気流下、-40℃に冷却し、n-ブチルリチウムのn-ヘキサン溶液(2.4mol/l)90mlを添加した。その後、反応混合物を室温まで昇温し、同温度で4時間放置した。次に反応混合物を-78℃に冷却し、1,2-ジブロモエタン80.8g(0.43mmol)とテトラヒドロフラン25mlからなる溶液を攪拌下、緩やかに滴下した。混合物を室温まで昇温し、同温度で2時間攪拌した。その後、テトラヒドロフランおよびn-ヘキサンを減圧下に留去して、残渣をジクロロメタンに溶解し、1規定塩酸水および純水で洗浄を行った。有機層からジクロロメタンを減圧下に留去し、残渣をトルエンから再結晶して、4,5-ジブロモジベンゾフラン22.7gを得た。

(2) 4,5-ジブロモジベンゾフラン16.3(50mmol)、フェニルボロン酸12.2g(0.1mol)、炭酸ナトリウム21.2g(0.2mol)、トルエン120mlおよび水100mlよりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム1.1gを添加し、90℃で7時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶し、4,5-ジフェニルジベンゾフラン14.5gを得た。

(3) 4,5-ジフェニルジベンゾフラン12.8g(40mmol)およびジクロロエタン50mlよりなる混合物に、臭素6.4gおよびジクロロエタン10mlよりなる混

10

20

30

40

50

合物を滴下した。室温で8時間攪拌し、析出した固体をろ別した。ろ液をチオ硫酸ナトリウム水溶液で洗浄し、その後水洗して、ジクロロエタン層よりジクロロエタンを留去した。また、ろ別した固体をチオ硫酸ナトリウム水溶液中でスラッジした後、水洗した。ろ液よりクロホルムを留去した残渣と、固体を合わせ、イソプロパノール/トルエンより再結晶し、無色針状結晶として、2-ブロモジ-4,5-ジフェニルジベンゾフラン10.2gを得た。

(4) 2-ブロモ-4,5-ジフェニルジベンゾフラン3.99g(10mmol)およびN,N-ジメチルホルムアミド100mlよりなる混合物にビス(1,5-シクロオクタジエン)ニッケル1.65g(6mmol)を添加して、60℃で5時間加熱攪拌を行った。その後、反応混合物を室温に冷却し、トルエンおよび希塩酸を添加して、トルエン相を分離、水洗した。その後、トルエン相から、トルエンを減圧下に留去し、残渣をメチルセロソルブから再結晶して、目的とする例示化合物D-3を無色の結晶として2.21g得た。さらにこの化合物を460、 $1 \times 10^{-4}$  Paで昇華精製した。

FD-MS: 638 ( $M^+$ )

元素分析: 計算値(%); C 90.26, ; H 4.73,  
分析値(%); C 90.3, ; H 4.7,

#### 【実施例19】

##### 【0131】

例示化合物D-8の製造

実施例1の(4)において、4-ブロモ-5-フェニルジベンゾフラン3.23g(10mmol)を使用する代わりに、2-ブロモ-4,5-ジフェニルジベンゾフラン3.99g(10mmol)を使用した以外は、実施例1の(4)に記載の操作に従い、例示化合物D-8の化合物を無色の結晶として1.64g得た。さらにこの化合物を430、 $4 \times 10^{-4}$  Paで昇華精製した。

FD-MS: 486 ( $M^+$ )

元素分析: 計算値(%); C 88.87, ; H 4.56,  
分析値(%); C 88.9, ; H 4.6,

#### 【実施例20】

##### 【0132】

例示化合物E-1の製造

(1) 4-ブロモジベンゾフラン24.7g(0.1mol)、4-ジベンゾフランボロン酸21.2g(0.1mol)、炭酸ナトリウム21.2g(0.2mol)、トルエン600mlおよび水500mlよりなる混合物に、アルゴン気流下、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム0.25gを添加して、90℃で10時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、有機層を分離、水洗し、有機層からトルエンを減圧下に留去した。残渣をトルエンから再結晶して、4,4'-ビスジベンゾフラン29.7gを得た。

(2) 4,4'-ビスジベンゾフラン16.7g(50mmol)およびジクロロエタン100mlよりなる混合物に、臭素32gおよびジクロロエタン20mlよりなる混合物を滴下した。室温で8時間攪拌し、さらに、60℃に加熱して6時間加熱攪拌した。その後、反応混合物を室温に冷却し、析出した固体をろ別した。ろ液をチオ硫酸ナトリウム水溶液で洗浄し、その後水洗して、ジクロロエタン層よりジクロロエタンを留去した。また、ろ別した固体をチオ硫酸ナトリウム水溶液中でスラッジした後、水洗した。ろ液よりクロホルムを留去した残渣と、固体を合わせ、イソプロパノール/トルエンより再結晶し、無色針状結晶として、2,7,2',7'-テトラブロモ-4,4'-ビスジベンゾフラン21.4gを得た。

(3) 2,7,2',7'-テトラブロモ-4,4'-ビスジベンゾフラン6.49g(10mmol)、N-フェニルアニリン6.76g(40mmol)およびtert-ブトキシナトリウム5.30g(55.2mmol)、酢酸パラジウム90mgおよびトルエン150gよりなる混合物に窒素気流下、トリ-tert-ブチルホスフィン0.24mlを添加

10

20

30

40

50

し、90 に加熱し、さらに同温度で6時間加熱攪拌した。その後、不溶物をろ別し、ろ液を水洗した後、ろ液からトルエンを減圧下に留去した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、さらにメチルセロソルブより再結晶して目的とする例示化合物 E - 1 の化合物を淡黄色結晶として 4.23 g 得た。さらにこの化合物を 430、 $4 \times 10^{-4}$  Pa で昇華精製した。

FD - MS : 1002 ( $M^+$ )

元素分析 : 計算値 (%) ; C 86.20 , ; H 5.02 , ; N 5.58

分析値 (%) ; C 86.2 , ; H 5.0 , ; N 5.6

#### 【実施例 2 1】

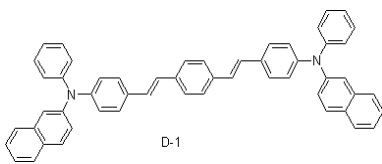
##### 【0133】

有機電界発光素子の作製

厚さ 150 nm の ITO 透明電極 (陽極) を有するガラス基板を、中性洗剤、セミコクレーン (フルウチ化学製)、超純水、アセトン、イソプロパノールを用いて超音波洗浄した。この基板を窒素ガスを用いて乾燥し、さらに UV / オゾン洗浄した後、蒸着装置の基板ホルダーに固定し、蒸着槽を  $1 \times 10^{-5}$  Pa に減圧した。まず、ITO 透明電極上に、銅フタロシアニンを  $0.3 \text{ nm} / \text{sec}$  の蒸着速度で 20 nm の厚さに蒸着し、正孔注入層を形成した。次に、4,4'-ビス (N - フェニル - N - 1'' - ナフチルアミノ) - 1,1' - ビフェニルを蒸着速度  $0.3 \text{ nm} / \text{sec}$  で 20 nm の厚さに蒸着し、正孔輸送層を形成した。次に、正孔注入輸送層の上に発光層として、例示化合物 A - 46 の化合物と下記の化合物 D - 1 を蒸着速度  $0.3 \text{ nm} / \text{sec}$  と  $0.03 \text{ nm} / \text{sec}$  で異なる蒸着源から 30 nm の厚さに共蒸着し発光層を形成した、さらに、発光層の上にトリス (8 - キノリノラート) アルミニウムを蒸着速度  $0.2 \text{ nm} / \text{sec}$  で 15 nm の厚さに蒸着し、電子注入輸送層を形成した。その上に、リチウムフルオライドを蒸着速度  $0.2 \text{ nm} / \text{sec}$  で 0.5 nm の厚さに蒸着し、最後に陰極としてアルミニウムを蒸着速度  $2.0 \text{ nm} / \text{sec}$  で 100 nm の厚さに蒸着して有機電界発光素子を作製した。尚、蒸着は、蒸着槽の減圧状態を保ったまま実施した。作製した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA} / \text{cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は 6.4 V であり、輝度  $6200 \text{ cd} / \text{m}^2$  の青色の発光が確認された。輝度の半減期は 1400 時間であった。

##### 【0134】

##### 【化 2 8】



#### 【実施例 2 2】

##### 【0135】

有機電界発光素子の作成

実施例 2 1 において、発光層の形成に際して例示化合物 A - 46 の化合物を使用する代わりに、例示化合物 A - 57 の化合物を使用した以外は、実施例 2 1 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA} / \text{cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は 5.1 V であり、輝度  $6600 \text{ cd} / \text{m}^2$  の青色の発光が確認された。輝度の半減期は 1240 時間であった。

##### 【0136】

比較例 1 :

有機電界発光素子の作成

比較のため、実施例 2 1 において、発光層の形成に際して例示化合物 A - 46 の化合物を使用する代わりに、下記の化合物 H - 1 を使用した以外は、実施例 2 1 に記載の操作に従

10

20

30

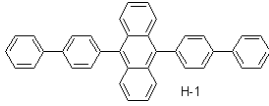
40

50

い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA/cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $5.4 \text{ V}$  であり、輝度  $1800 \text{ cd/m}^2$  の発光が見られたが、発光色は緑色であった。また、連続駆動中 12 時間で短絡が生じ、輝度の半現値を測定することは出来なかった。

【0137】

【化29】



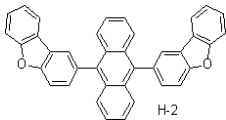
【0138】

比較例 2 :

比較のため、実施例 21 において、発光層の形成に際して例示化合物 A - 46 の化合物を使用する代わりに、下記の化合物 H - 2 を使用した以外は、実施例 21 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA/cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $5.3 \text{ V}$  であり、輝度  $2900 \text{ cd/m}^2$  の青色発光が観察された。輝度の半減値は 24 時間と短かった。

【0139】

【化30】



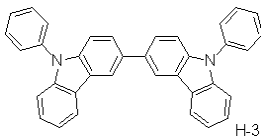
【0140】

比較例 3 :

比較のため、実施例 21 において、発光層の形成に際して例示化合物 A - 46 の化合物を使用する代わりに、下記の化合物 H - 3 を使用した以外は、実施例 21 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA/cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $6.7 \text{ V}$  であり、輝度  $4100 \text{ cd/m}^2$  の青色発光が観察された。輝度の半減値は 520 時間と短かった。

【0141】

【化31】



【実施例 23】

【0142】

有機電界発光素子の作成

実施例 21 において、発光層の形成に際して例示化合物 A - 46 の化合物を使用する代わりに、例示化合物 A - 61 の化合物を使用した以外は、実施例 21 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA/cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $6.1 \text{ V}$  であり、輝度  $5700 \text{ cd/m}^2$  の青色の発光が確認された。輝度の半減期は 1240 時間であった。

【実施例 24】

【0143】

有機電界発光素子の作成

実施例 21 において、発光層の形成に際して例示化合物 A - 46 の化合物を使用する代わ

10

20

30

40

50

りに、例示化合物 A - 37 の化合物を使用した以外は、実施例 21 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA/cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $6.3 \text{ V}$  であり、輝度  $5900 \text{ cd/m}^2$  の青色の発光が確認された。輝度の半減期は  $1380$  時間であった。

【実施例 25】

【0144】

有機電界発光素子の作成

実施例 21 において、発光層の形成に際して例示化合物 A - 46 の化合物を使用する代わりに、例示化合物 A - 9 の化合物を使用した以外は、実施例 21 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA/cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $6.2 \text{ V}$  であり、輝度  $5600 \text{ cd/m}^2$  の青色の発光が確認された。輝度の半減期は  $1130$  時間であった。

10

【実施例 26】

【0145】

有機電界発光素子の作成

実施例 21 において、発光層の形成に際して例示化合物 A - 46 の化合物を使用する代わりに、例示化合物 A - 15 の化合物を使用した以外は、実施例 21 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA/cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $6.2 \text{ V}$  であり、輝度  $5400 \text{ cd/m}^2$  の青色の発光が確認された。輝度の半減期は  $1300$  時間であった。

20

【実施例 27】

【0146】

有機電界発光素子の作成

実施例 21 において、発光層の形成に際して例示化合物 A - 46 の化合物を使用する代わりに、例示化合物 A - 71 の化合物を使用した以外は、実施例 21 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA/cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $6.1 \text{ V}$  であり、輝度  $5400 \text{ cd/m}^2$  の青色の発光が確認された。輝度の半減期は  $1250$  時間であった。

30

【実施例 28】

【0147】

有機電界発光素子の作成

実施例 21 において、発光層の形成に際して例示化合物 A - 46 の化合物を使用する代わりに、例示化合物 D - 3 の化合物を使用した以外は、実施例 21 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA/cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $6.3 \text{ V}$  であり、輝度  $5100 \text{ cd/m}^2$  の青色の発光が確認された。輝度の半減期は  $1160$  時間であった。

40

【実施例 29】

【0148】

有機電界発光素子の作成

実施例 21 において、発光層の形成に際して例示化合物 A - 46 の化合物を使用する代わりに、例示化合物 D - 8 の化合物を使用した以外は、実施例 21 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA/cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $6.5 \text{ V}$  であり、輝度  $5300 \text{ cd/m}^2$  の青色の発光が確認された。輝度の半減期は  $1380$  時間であった。

50

## 【実施例 30】

## 【0149】

## 有機電界発光素子の作製

厚さ150nmのITO透明電極(陽極)を有するガラス基板を、中性洗剤、セミコクレーン(フルウチ化学製)、超純水、アセトン、イソプロパノールを用いて超音波洗浄した。この基板を窒素ガスを用いて乾燥し、さらにUV/オゾン洗浄した後、蒸着装置の基板ホルダーに固定し、蒸着槽を $1 \times 10^{-5}$  Paに減圧した。まず、ITO透明電極上に、4,4',4"-トリス〔N-(3"-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ〕トリフェニルアミンを蒸着速度0.1nm/secで、50nmの厚さに蒸着し、正孔注入層を形成した。次いで、4,4'-ビス〔N-フェニル-N-(1-ナフチル)アミノ〕、蒸着速度0.2nm/secで20nmの厚さに蒸着し、正孔輸送層を形成した。さらに、その上に例示化合物A-1で表される化合物と例示化合物B-5で表される化合物を0.2nm/secおよび0.2nm/secで異なる蒸着源から、40nmの厚さに共蒸着して発光層を形成した。次いで、その上にトリス(8-キノリノラート)アルミニウムを蒸着速度0.2nm/secで50nmの厚さに蒸着し、電子注入輸送層を形成した。さらに、その上に、陰極としてマグネシウムと銀を蒸着速度0.2nm/secで200nmの厚さに共蒸着(重量比10:1)して陰極とし、有機電界発光素子を作製した。作製した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、乾燥雰囲気下、50mA/cm<sup>2</sup>の定電流密度で連続駆動させた。初期には、6.6V、輝度1450cd/m<sup>2</sup>の青色の発光が確認された。輝度の半減期は420時間であった。

10

20

## 【実施例 31】

## 【0150】

厚さ150nmのITO透明電極(陽極)を有するガラス基板を、中性洗剤、セミコクレーン(フルウチ化学製)、超純水、アセトン、イソプロパノールを用いて超音波洗浄した。この基板を窒素ガスにより乾燥し、さらにUV/オゾン洗浄した後、蒸着装置の基板ホルダーに固定し、蒸着槽を $1 \times 10^{-5}$  Paに減圧した。まず、ITO透明電極上にビス〔N-フェニル-N-(1-ナフチル)〕-4,4'-ジアミノ1,1'-ビフェニルを蒸着速度0.1nm/secで蒸着し、膜厚40nmのセ以降輸送層を設けた、次に、例示化合物A-4と、トリス(フェニルピリジル)イリジウム錯体をそれぞれ蒸着速度0.2nm/sec、0.012nm/secで前記正孔輸送層上に蒸着して膜厚40nmの発光層を設けた。さらに、バソキュプロインを蒸着速度0.1nm/sec、で前記発光層の上に蒸着して膜厚10nmの正孔阻止層を設けた、その上に、さらにトリス(8-キノリノラート)アルミニウムを蒸着速度0.1nm/secで前記正孔阻止層の上に蒸着して厚さ40nmの電子輸送層を設けた。なお蒸着時の基板温度は室温であった。引き続き、リチウムフルオライドを蒸着速度0.2nm/secで0.5nmの厚さに蒸着し、最後に陰極としてアルミニウムを蒸着速度2.0nm/secで100nmの厚さに蒸着して有機電界発光素子を作製した。尚、蒸着は、蒸着槽の減圧状態を保ったまま実施した。作製した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、50mA/cm<sup>2</sup>の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は8.3Vであり、輝度1240cd/m<sup>2</sup>の緑色の発光が確認された。輝度の半減期は720時間であった。

30

40

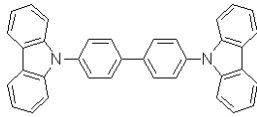
## 【0151】

## 比較例 4

実施例31において、発光層の形成に際して例示化合物A-4の化合物を使用する代わりに、下記のH-4の化合物を使用した以外は、実施例31に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、50mA/cm<sup>2</sup>の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は8.6Vであり、輝度8000cd/m<sup>2</sup>の緑色の発光が確認された。輝度の半減期は320時間であった。

## 【0152】

## 【化 3 2】



H-4

## 【実施例 3 2】

## 【0 1 5 3】

実施例 3 1 において、発光層の形成に際して、例示化合物 A - 4 の化合物を使用する代わりに、下記の H - 2 5 の化合物を使用した以外は、実施例 3 1 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA} / \text{cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $8.1 \text{ V}$  であり、輝度  $12200 \text{ cd} / \text{m}^2$  の緑色の発光が確認された。輝度の半減期は  $710$  時間であった。

10

## 【実施例 3 3】

## 【0 1 5 4】

実施例 3 1 において、発光層の形成に際して、例示化合物 A - 4 の化合物を使用する代わりに、例示化合物 A - 5 1 の化合物を使用した以外は、実施例 3 1 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA} / \text{cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $8.4 \text{ V}$  であり、輝度  $12500 \text{ cd} / \text{m}^2$  の緑色の発光が確認された。輝度の半減期は  $730$  時間であった。

20

## 【実施例 3 4】

## 【0 1 5 5】

実施例 3 1 において、発光層の形成に際して、例示化合物 A - 4 の化合物を使用する代わりに、例示化合物 A - 7 2 の化合物と例示化合物 A - 7 3 の化合物の混合物を使用した以外は、実施例 3 1 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA} / \text{cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $8.4 \text{ V}$  であり、輝度  $12200 \text{ cd} / \text{m}^2$  の緑色の発光が確認された。輝度の半減期は  $810$  時間であった。

## 【実施例 3 5】

30

## 【0 1 5 6】

実施例 3 1 において、発光層の形成に際して、例示化合物 A - 4 の化合物を使用する代わりに、例示化合物 A - 8 0 の化合物を使用した以外は、実施例 3 1 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA} / \text{cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $8.2 \text{ V}$  であり、輝度  $12000 \text{ cd} / \text{m}^2$  の緑色の発光が確認された。輝度の半減期は  $720$  時間であった。

## 【実施例 3 6】

## 【0 1 5 7】

実施例 3 1 において、発光層の形成に際して、例示化合物 A - 4 の化合物を使用する代わりに、例示化合物 C - 7 の化合物を使用した以外は、実施例 3 1 に記載の操作に従い、有機電界発光素子を作成した。作成した有機電界発光素子に直流電圧を印加し、室温、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA} / \text{cm}^2$  の定電流密度で連続駆動させた。初期には、電圧値は  $8.1 \text{ V}$  であり、輝度  $11900 \text{ cd} / \text{m}^2$  の緑色の発光が確認された。輝度の半減期は  $690$  時間であった。

40

## 【実施例 3 7】

## 【0 1 5 8】

有機電界発光素子の作成

厚さ  $150 \text{ nm}$  の ITO 透明電極（陽極）を有するガラス基板を、中性洗剤、セミクリーン（フルウチ化学製）、超純水、アセトン、エタノールを用いて超音波洗浄した。この

50

基板を窒素ガスを用いて乾燥し、さらにUV/オゾン洗浄した後、蒸着装置の基板ホルダーに固定し、蒸着槽を $1 \times 10^{-5}$  Paに減圧した。先ず、ITO透明電極上に、例示化合物E-1の化合物を蒸着速度 $0.1 \text{ nm/sec}$ で、 $20 \text{ nm}$ の厚さに蒸着し、第1正孔注入輸送層を形成した。次いで、例示化合物A-41の化合物とルブレンを、異なる蒸着源から、蒸着速度 $0.2 \text{ nm/sec}$ で $55 \text{ nm}$ の厚さに共蒸着(重量比10:1)し、第2正孔注入輸送層を兼ね備えた発光層を形成した。次に、その上にトリス(8-キノリノラート)アルミニウムを蒸着速度 $0.2 \text{ nm/sec}$ で $50 \text{ nm}$ の厚さに蒸着し、電子注入輸送層を形成した。さらに、その上に、陰極としてマグネシウムと銀を蒸着速度 $0.2 \text{ nm/sec}$ で $200 \text{ nm}$ の厚さに共蒸着(重量比10:1)して陰極とし、有機電界発光素子を作製した。尚、蒸着は、蒸着槽の減圧状態を保ったまま実施した。作製した有機電界発光素子に直流電圧印加し、乾燥雰囲気下、 $50 \text{ mA/cm}^2$ の定電流密度で連続駆動させた。初期には、 $6.1 \text{ V}$ 、輝度 $5400 \text{ cd/m}^2$ の黄色の発光が確認された。この素子は1000時間後でも輝度の低下が10%以下であった。

10

【産業上の利用可能性】

【0159】

本発明により、新規な芳香族化合物、および発光寿命が長く、耐久性に優れ、発光効率が高い有機電界発光素子を提供することが可能になった。

【図面の簡単な説明】

【0160】

【図1】有機電界発光素子の一例の断面概略図である。

20

【図2】有機電界発光素子の一例の断面概略図である。

【図3】有機電界発光素子の一例の断面概略図である。

【図4】有機電界発光素子の一例の断面概略図である。

【図5】有機電界発光素子の一例の断面概略図である。

【図6】有機電界発光素子の一例の断面概略図である。

【図7】有機電界発光素子の一例の断面概略図である。

【図8】有機電界発光素子の一例の断面概略図である。

【符号の説明】

【0161】

1：基板

30

2：陽極

3：正孔注入輸送層

3a：正孔注入輸送成分

4：発光層

4a：発光成分

5：電子注入輸送層

5"：電子注入輸送層

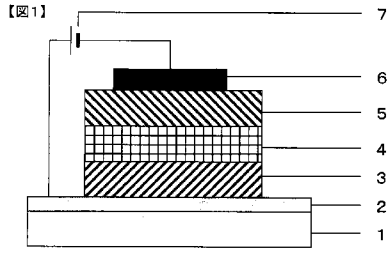
5a：電子注入輸送成分

6：陰極

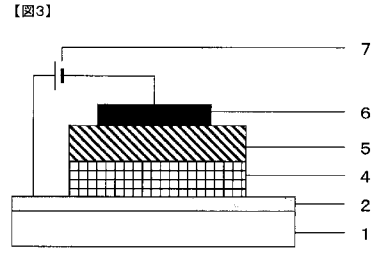
7：電源

40

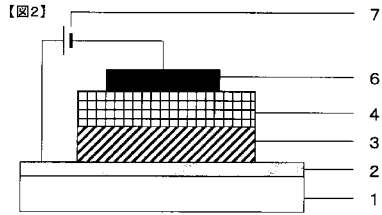
【図1】



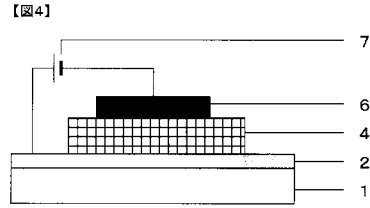
【図3】



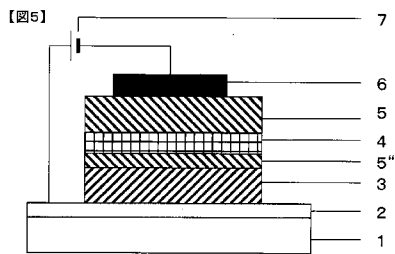
【図2】



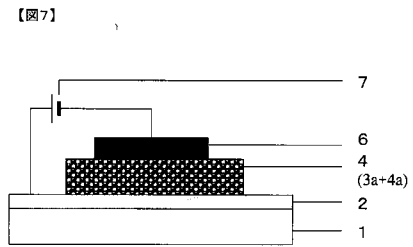
【図4】



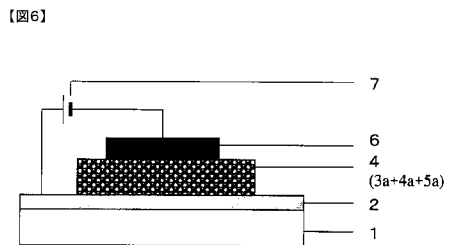
【図5】



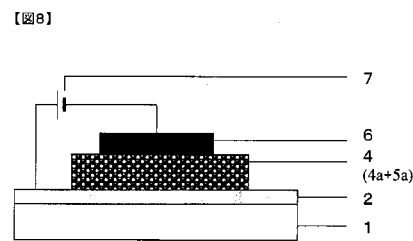
【図7】



【図6】



【図8】



---

フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I  
H 0 5 B 33/22 D

審査官 小川 由美

(56)参考文献 特表2004-513950(JP,A)  
米国特許第03673219(US,A)  
特表2008-545729(JP,A)  
特開2007-214175(JP,A)  
Journal of American Chemical Society, 1992年, 114(27), 10775-10784

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)  
C 0 7 D 3 0 7 / 9 1  
C 0 7 D 3 3 3 / 7 6  
C 0 7 D 4 0 9 / 0 4  
C 0 9 K 1 1 / 0 6  
C A p l u s ( S T N )  
R E G I S T R Y ( S T N )

专利名称(译)	有机电致发光器件和芳族化合物		
公开(公告)号	<a href="#">JP4829722B2</a>	公开(公告)日	2011-12-07
申请号	JP2006236184	申请日	2006-08-31
[标]申请(专利权)人(译)	三井化学株式会社		
申请(专利权)人(译)	三井化学株式会社		
当前申请(专利权)人(译)	三井化学株式会社		
[标]发明人	田边良满 斎藤靖典 戸谷由之		
发明人	田边 良满 斎藤 靖典 戸谷 由之		
IPC分类号	H01L51/50 C09K11/06 C07D307/91 C07D333/76 C07D409/04		
FI分类号	H05B33/14.B C09K11/06.635 C07D307/91.CSP C07D333/76 C07D409/04 H05B33/22.D		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/CC02 3K107/CC04 3K107/CC21 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/DD71 3K107/DD78 4C037/SA01 4C063/AA01 4C063/BB01 4C063/CC94 4C063/DD76 4C063/EE10		
审查员(译)	小川由美		
其他公开文献	JP2008060379A5 JP2008060379A		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

要解决的问题：提供有机电致发光元件和新的芳族化合物，其中发光寿命长，耐久性优异，并且发光效率高。解决方案：有机电致发光元件将至少一层含有至少一种具有双二苯并咪唑骨架的化合物的层夹在一对电极之间（例如，由式（1）表示的一层）。Ž

