(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2011 年 3 月 3 日(03.03.2011)

PCT

(10) 国際公開番号
WO 2011/024737 A1

(51) 国際特許分類:
C07F 15/00 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2010/064140

(22) 国際出願日: 2010 年 8 月 23 日(23.08.2010)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2009-196405 2009 年 8 月 27 日(27.08.2009) JP

(71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): 独立行政法人産業技術総合研究所(**NATIONAL INSTITUTE OF ADVANCED INDUSTRIAL SCIENCE AND TECHNOLOGY**) [JP/JP]; 〒1008921 東京都千代田区霞が関１丁目３番１号 Tokyo (JP).

(72) 発明者; および

(75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 今野 英雄 (**KONNO Hideo**) [JP/JP]; 〒3058565 茨城県つくば市東１－１－１ 中央第５ 独立行政法人産業技術総合研究所内 Ibaraki (JP).

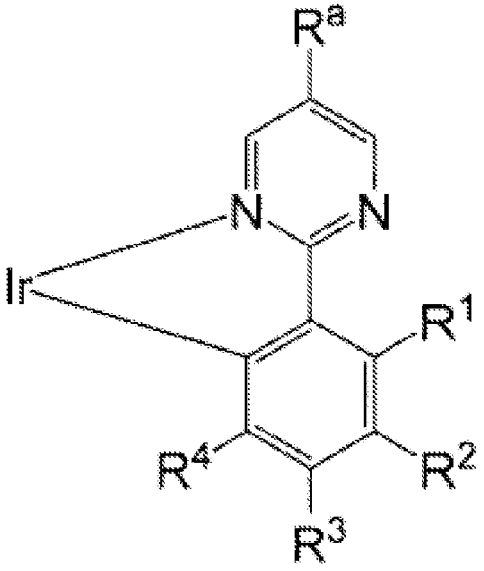
(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, RO, RS, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

[続葉有]

(54) **Title**: IRIDIUM COMPLEX AND LIGHT EMITTING MATERIAL FORMED FROM SAME

(54) 発明の名称 : イリジウム錯体ならびに該化合物からなる発光材料



(1)

(57) **Abstract**: Disclosed is an iridium complex which is a light-emitting element material having excellent durability and which is capable of emitting high luminance light in a highly efficient manner. The iridium complex can be used in a light-emitting element or the like and comprises a substructure represented by general formula (1). (Within general formula (1) Ra represents an optionally substituted alkyl group having 2-30 carbon atoms and the other symbols are as defined in the description.)

(57) 要約: 高輝度・高効率で発光が可能で耐久性に優れた発光素子材料であり、発光素子等に使用できる、下記一般式（１）で表される部分構造を有するイリジウム錯体を提供する。（一般式（１）中、Ｒａは置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキル基を表す。その他の記号は明細書において定義されるとおりである。）

WO 2011/024737 A1

添付公開書類:

— 国際調査報告（条約第 21 条(3)）

明　細　書

発明の名称 ： イリジウム錯体ならびに該化合物からなる発光材料

技術分野

[0001] 本発明は、有機電界発光素子用材料、エレクトロケミルミネッセンス（ＥＣＬ）素子材料、発光センサー、酸素センサー、光増感剤、ディスプレイ、写真用材料、レーザー色素、カラーフィルター用染料、光通信、色変換フィルター、バックライト、照明、光増感色素、細胞イメージング用発光プローブ、各種光源などに有用なイリジウム錯体ならびに該化合物からなる発光材料に関するものである。

背景技術

[0002] 有機電界発光素子は次世代のディスプレイ素子として注目されており、近年になって発光素子に用いられる各種有機材料の開発が活発に進められるようになってきた。特に発光効率向上の観点から、発光材料として、励起三重項状態からの発光を利用する燐光材料に注目が集まっている。

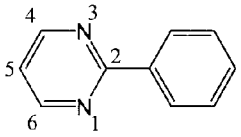
[0003] 励起一重項状態からの発光を用いる場合、一重項励起子と三重項励起子の生成比が１：３であるため発光性励起種の生成確率が２５％であることと、光の取り出し効率が約２０％であるため、外部取り出し量子効率の限界は５％とされている。一方で、これに励起三重項状態をも利用できると、内部量子効率の上限が１００％となるため、励起一重項の場合に比べて原理的に発光効率が４倍となることから、燐光材料の開発が活発に行われている。これまで代表的な燐光材料として、２－フェニルピリジン系配位子を有するイリジウム錯体が注目されているが、今後はさらなる発光効率および耐久性の改善を目指し、新しい燐光材料の開発が望まれている。

[0004] 特許文献１～７および非特許文献１～３には、本発明化合物と類似の２－フェニルピリミジン系配位子を有するイリジウム錯体が記載されている。しかし、発光効率や耐久性など解決すべき課題が未だ残されており、より熱的に安定で高い発光効率を示す材料が望まれている。また本発明者の知見によ

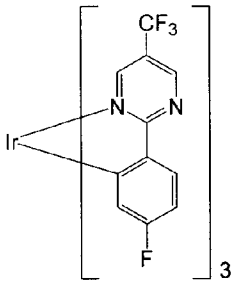
ると、２－フェニルピリミジン系配位子を有するイリジウム錯体については、２－フェニルピリジン系イリジウム錯体と比較すると、溶媒に対する溶解性が低く、加工性および操作性が著しく悪いという問題点があった。

[0005] 非特許文献１には、２－フェニルピリミジン配位子のピリミジン環の５位（下図参照）にトリフルオロメチル基が導入されたイリジウム錯体（式（Ａ））が開示されているが、その熱的安定性は低く（［０１７１］参照）、しかもその発光は緑色（λｍａｘ＝５２５ｎｍ）に限定されてしまう。

[化4]



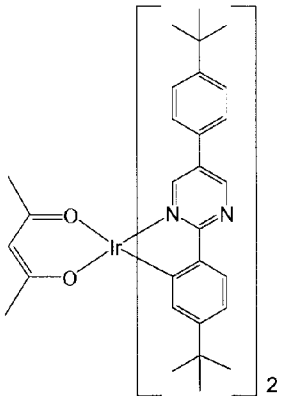
[化5]



（Ａ）

[0006] 非特許文献２には、２－フェニルピリミジン配位子のピリミジン環の５位にフェニル基やチエニル基が導入されたイリジウム錯体（例えば、式（Ｂ））が開示されている。しかしこれらイリジウム錯体の発光波長は５２２～５５８ｎｍであり、その発光色は緑色～橙色領域に限定される。特に非特許文献２に記載の骨格のイリジウム錯体では青色領域に発光させることは困難である。また非特許文献２によれば、これらイリジウム錯体のトルエン中での発光量子収率は０．０５２～０．３４であり、未だ低い問題がある。

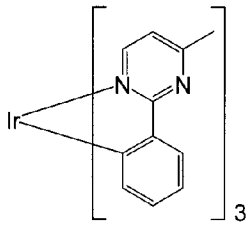
[化6]



(B)

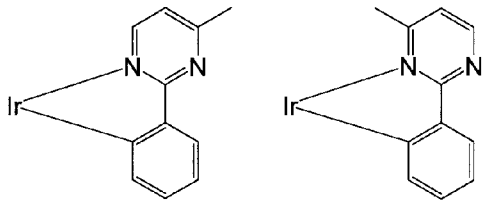
[0007] 特許文献７には、２－フェニルピリミジン配位子のピリミジン環の４位にメチル基が導入されたイリジウム錯体（式（Ｃ））が開示されている。しかし、このタイプの配位子を用いると、イリジウムへの配位様式（下図参照）により、異性体が生成する可能性があり、目的とするイリジウム錯体を高純度に合成することは難しい問題がある。また様々な異性体の混入は発光素子に悪影響を与える可能性がある。

[化7]



(C)

[化8]



配位パターン(1) 配位パターン(2)

[0008] また有機電解発光素子などの固体デバイスにおいては、固体状態において高い発光量子収率を示す燐光材料が好ましく、さらに、これらの燐光材料を塗布法で製膜する場合は、溶媒に対して溶解性の高い燐光材料が強く求めら

れている。これまで述べてきたように、特許文献１～７および非特許文献１～３に記載の２－フェニルピリミジン系イリジウム錯体は、上記の観点から依然として改良の余地が残されている。このような技術背景がある中で、新しい燐光材料の探索が行われてきたが、２－フェニルピリミジン配位子のピリミジン環の５位に置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキル基が導入されたイリジウム錯体の発光特性やそれを用いた発光素子の特性については全く記載がない。

先行技術文献

特許文献

[0009] 特許文献1：特許公開２００１－２４７８５９号

特許文献2：特許公開２００３－８１９８８号

特許文献3：特許公開２００６－８６８８号

特許文献4：特許公開２００８－７４９２１号

特許文献5：特許公表２００４－５０３０５９号

特許文献6：特許公表２００５－５１６０４０号

特許文献7：特許公開２００９－４０７２８号

非特許文献

[0010] 非特許文献1：Ｃｈｅｍｉｃａｌ Ｃｏｍｍｕｎｉｃａｔｉｏｎｓ，２００１年，１４９４頁

非特許文献2：Ｊ．Ｏｒｇａｎｏｍｅｔ． Ｃｈｅｍ．，２００９年，６９４巻，２７５７頁

非特許文献3：Ｓｙｎｔｈｅｔｉｃ Ｍｅｔａｌｓ，２００９年，１５９巻，１１７８頁

発明の開示

発明が解決しようとする課題

[0011] 本発明の目的は、高輝度・高効率発光が可能で耐久性に優れた発光素子、ならびに該発光素子に使用でき、有機電界発光素子材料、エレクトロケミル

ミネッセンス（ＥＣＬ）素子材料、発光センサー、酸素センサー、光増感剤、ディスプレイ、写真用材料、レーザー色素、カラーフィルター用染料、光通信、色変換フィルター、バックライト、照明、光増感色素、細胞イメージング用発光プローブ、各種光源等にも適用できる新規イリジウム錯体を提供することである。

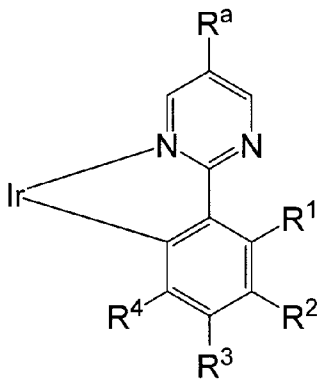
課題を解決するための手段

[0012] 本発明者らは上記実状に鑑み、鋭意研究を重ねた結果、一般式（１）または（２）で表される新規イリジウム錯体が、Ｒ^{a}に置換基が導入されていない従来化合物と比べて熱的に非常に安定で、かつ可視光領域において特に固体状態で優れた発光特性を有し、さらに溶媒に対する溶解性が高く加工性に優れており、各種用途の発光材料として有用であることを見出し、本発明を完成するに至った。

[0013] すなわち、この出願によれば、以下の発明が提供される。

〈１〉下記一般式（１）で表される部分構造を有するイリジウム錯体。

[化1]



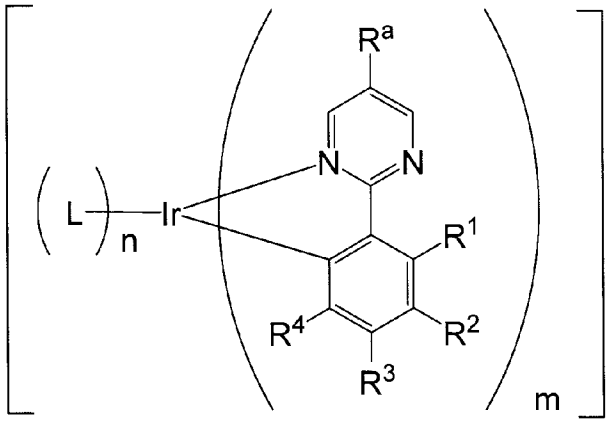
（１）

（一般式（１）中、Ｎは窒素原子を表す。Ｒ^{a}は置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキル基を表す。Ｒ^{1}～Ｒ^{4}は、各々独立に、水素原子または置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキル基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリール基、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルケニル基、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキニル基、置換基を有しても良い炭素数０～３０のアミノ基、置換基を有しても良い炭素数１～６

０のヘテロ環基、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルコキシ基、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキルチオ基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリールオキシ基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリールチオ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環オキシ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環チオ基、アシル基、アシルオキシ基、アミド基、酸イミド基、イミン残基、置換シリル基、置換シリルオキシ基、置換シリルチオ基、置換シリルアミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、カルボキシル基、またはトリフルオロメチル基を表す。また、隣接する置換基は結合して環構造を形成してもよい。）

〈２〉下記一般式（２）で表されるイリジウム錯体。

[化2]



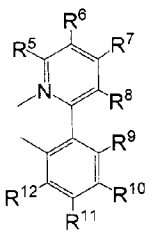
（２）

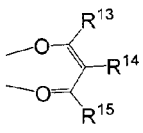
（一般式（２）中、Ｎは窒素原子を表す。ｍは１～３の整数を表す。ｎは０～２の整数を表す。ｍ＋ｎ＝３である。Ｒ^{a}は置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキル基を表す。Ｒ^{1}～Ｒ^{4}は、各々独立に、水素原子または置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキル基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリール基、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルケニル基、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキニル基、置換基を有しても良い炭素数０～３０のアミノ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環基、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルコキシ基、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキルチオ基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリールオキシ基、置換基を有しても良い炭素数６～６０

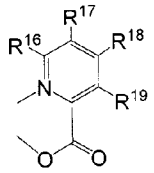
のアリールチオ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環オキシ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環チオ基、アシル基、アシルオキシ基、アミド基、酸イミド基、イミン残基、置換シリル基、置換シリルオキシ基、置換シリルチオ基、置換シリルアミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、カルボキシル基、またはトリフルオロメチル基を表す。Ｑはカウンターイオンを表す。ｋは０～２の整数を表す。Ｌは２座配位子を表す。また、隣接する置換基は結合して環構造を形成してもよい。）

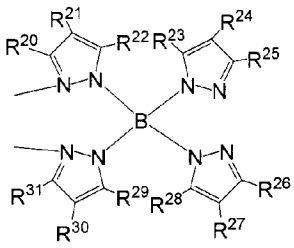
〈３〉Ｌが一般式（３）～（１１）の何れかで表される前記２に記載のイリジウム錯体。

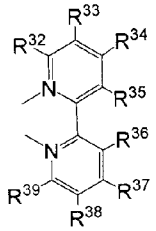
[化3]

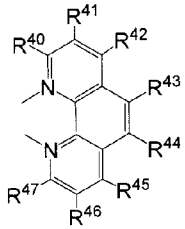

(3)

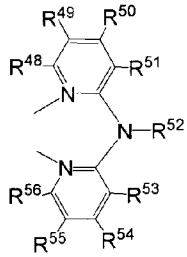

(4)

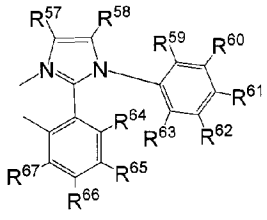

(5)

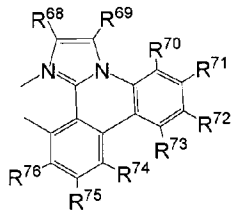

(6)


(7)


(8)


(9)


(10)


(11)

（一般式（３）～（１１）中、Ｒ[5]～Ｒ[76]は、各々独立に、水素原子または置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキル基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリール基、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルケ

ニル基、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキニル基、置換基を有しても良い炭素数０～３０のアミノ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環基、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルコキシ基、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキルチオ基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリールオキシ基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリールチオ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環オキシ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環チオ基、アシル基、アシルオキシ基、アミド基、酸イミド基、イミン残基、置換シリル基、置換シリルオキシ基、置換シリルチオ基、置換シリルアミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、カルボキシル基またはトリフルオロメチル基を表す。また、隣接する置換基は結合して環構造を形成してもよい。）

〈４〉 R^1が、水素原子またはフッ素原子である前記１から３何れかに記載のイリジウム錯体。

〈５〉 R^2が、水素原子、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキル基、または置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリール基である前記１から４何れかに記載のイリジウム錯体。

〈６〉 R^2がトリフルオロメチル基である前記１から４何れかに記載のイリジウム錯体。

〈７〉 R^3が、水素原子、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキル基、または置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリール基である前記１から６何れかに記載のイリジウム錯体。

〈８〉 R^3がフッ素原子である前記１から６何れかに記載のイリジウム錯体。

〈９〉 R^1～R^4のいずれかが、少なくとも１個のデンドロンによって置換されていることを特徴とする前記１から８何れかに記載のイリジウム錯体。

〈１０〉 R^aが炭素数２～３０のアルキル基である前記１から９何れかに記載のイリジウム錯体。

〈１１〉 R^aがｎ－デシル基である前記１から９何れかに記載のイリジウム錯体。

〈１２〉ｍ＝３かつｎ＝０である前記２、および、４から１１何れかに記載のイリジウム錯体。

〈１３〉ｍ＝２かつｎ＝１である前記２から１１何れかに記載のイリジウム錯体。

〈１４〉ｍ＝１かつｎ＝２である前記２から１１何れかに記載のイリジウム錯体。

〈１５〉前記１から１４何れかに記載のイリジウム錯体からなる発光材料。

〈１６〉前記１５に記載の発光材料を用いた発光素子。

発明の効果

[0014] 本発明の新規なイリジウム錯体は、低消費電力で効率よく、可視光領域に高輝度発光を示すことから、該化合物を用いた発光素子は、表示素子、ディスプレイ、バックライト、電子写真、照明光源、記録光源、露光光源、読み取り光源、標識、看板、インテリア等の分野に好適である。また、本発明のイリジウム錯体は、医療用途、酸素センサー、写真用材料、ＵＶ吸収材料、レーザー色素、カラーフィルター用染料、色変換フィルター、細胞イメージング用発光プローブ、光通信等にも適用可能である。

図面の簡単な説明

[0015] [図1]本発明化合物（４３）のアルゴン雰囲気下、室温ＴＨＦ中での発光スペクトル。励起光は３５０ｎｍである。

[図2]本発明化合物（５３）のアルゴン雰囲気下、室温ＴＨＦ中での発光スペクトル。励起光は３５０ｎｍである。

[図3]本発明化合物（８２）のアルゴン雰囲気下、室温ＴＨＦ中での発光スペクトル。励起光は３５０ｎｍである。

発明を実施するための最良の形態

[0016] 本発明に係るイリジウム錯体は、一般式（１）で表される部分構造を有し、好ましくは一般式（２）で表され、これらイリジウム錯体を発光素子の発光層もしくは発光層を含む複数の有機化合物層に含有させることで、可視光領域に優れた発光を示す発光素子が得られる。

[0017] 以下、本発明を更に詳細に説明する。

[0018] 本発明に係るイリジウム錯体は、特定構造の２－フェニルピリミジン系配位子を有することを特徴としている。本発明者は、一般式（１）または（２）に記載のＲ^{a}へ、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキル基を導入すると、該イリジウム錯体の熱的安定性と、特に固体状態における発光量子収率が大きく向上することを見出した。

[0019] ２－フェニルピリミジン系配位子と中心金属であるイリジウムとが結合を形成すると、重原子効果により、励起１重項状態から励起３重項状態への項間交差が促進され、その結果として、本発明のイリジウム錯体は、可視光領域に効率よく燐光発光を示す。

[0020] 本発明に係るイリジウム錯体は、異性体（例えば、フェイシャル体、メリジオナル体、特開２００６－２７８７８１号、または、特開２００８－２８８２５４号に記載の異性体など）を含有しても良い。

[0021] また本発明に係るイリジウム錯体は中性またはイオン性であり、より好ましくは中性またはカチオン性であり、特に好ましくは中性のイリジウム錯体である。

[0022] 本発明に係るイリジウム錯体の中でも、室温溶液中（空気下、不活性ガス雰囲気下または脱気下、好ましくは不活性ガス雰囲気下または脱気下）での発光量子収率が、０．０１以上のものが好ましく、０．１以上のものがより好ましく、０．４以上のものが特に好ましく、０．５以上のものが最も好ましい。また、本発明のイリジウム錯体の中でも、固体状態での発光量子収率が、０．０１以上のものが好ましく、０．０５以上のものがより好ましく、０．１以上のものが特に好ましく、０．３以上のものが最も好ましい。ここで、固体状態での発光量子収率については、ホスト材料等にドープせず、固体状態のイリジウム錯体へ直接励起光を照射し、発光を測定した値である。

[0023] 溶液中の発光量子収率の測定は、溶存酸素を取り除くため、イリジウム錯体が溶解した溶液に不活性ガス（アルゴンガス、窒素ガス）を通気した後に行うか、または、イリジウム錯体が溶解した溶液を凍結脱気した後に行うの

が良い。発光量子収率の測定法としては、絶対法または相対法のどちらを用いても良い。相対法においては、標準物質（キニン硫酸塩など）との発光スペクトルの比較により、発光量子収率を測定することができる。絶対法においては、市販の装置（浜松ホトニクス株式会社製、絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０））を用いることで溶液中もしくは固体状態での発光量子収率の測定が可能である。溶液中での発光量子収率は種々の溶媒を用いて測定できるが、本発明に係わるイリジウム錯体は、任意の溶媒のいずれかにおいて上記発光量子収率が達成されれば良い。

[0024] 本発明のイリジウム錯体の中でも、溶液中または固体状態での発光スペクトルの発光極大波長は、３００ｎｍ～９００ｎｍの範囲のものが好ましく、４００ｎｍ～８００ｎｍの範囲のものがより好ましい。

[0025] イリジウムの価数については、３価または４価が好ましく、３価がより好ましい。

[0026] 前記一般式（１）～（１１）に記載した記号（ｍ、ｎ、Ｑ、ｋ、Ｌ、R^aおよびR^1～R^{76}）について以下に説明する。

[0027] ｍは１～３の整数を表し、ｎは０～２の整数を表し、ｍ＋ｎ＝３である。ｍ＝２または３が好ましく、ｎ＝０または１が好ましい。ｍ＝３でｎ＝０の時は、幾何異性体としてフェイシャル体とメリジオナル体があるが、フェイシャル体が好ましい。

[0028] Ｑはカウンターイオンを表す。カウンターイオンとしては特に制限はないが、例えば、アルカリ金属イオン、アルカリ土類金属イオン、ハロゲンイオン、パークロレイトイオン、PF_6イオン、アンモニウムイオン、$CF_3CF_2CF_2COO$イオン、SbF_6イオン、ジシアンアミドイオン、ビス（トリフルオロメタンスルホニル）アミドイオン、ボレートイオン、トリフルオロ酢酸イオン、トリフルオロメタンスルホネートイオン、ホスホニウムイオンまたは、テトラキス[３，５-ビス(トリフルオロメチル)フェニル]ボレートイオンであり、好ましくはハロゲンイオン、パークロレイトイオン、PF_6イオン、$CF_3CF_2CF_2COO$イオン、SbF_6イオン、ジシアンアミドイオン、

ビス（トリフルオロメタンスルホニル）アミドイオン、ボレートイオン、トリフルオロ酢酸イオン、トリフルオロメタンスルホネートイオン、または、テトラキス[３，５-ビス（トリフルオロメチル）フェニル]ボレートイオンである。

[0029] ｋは０～２の整数を表す。ｋは０または１が好ましく、０がより好ましい。

[0030] Ｌは２座配位子であり、中性２座配位子またはアニオン性２座配位子が好ましく、アニオン性２座配位子がより好ましく、モノアニオン性２座配位子が特に好ましい。

[0031] またＬは、Ｉｒ―窒素結合およびＩｒ―炭素結合を形成する２座配位子、Ｉｒ―窒素結合およびＩｒ―酸素結合を形成する２座配位子、Ｉｒ―酸素結合を２つ形成する２座配位子、または、Ｉｒ―窒素結合を２つ形成する２座配位子であることが好ましい。

[0032] Ｉｒ―窒素結合およびＩｒ―炭素結合を形成する２座配位子とは、例えば、２－フェニルピリジン誘導体、２－フェニルピリミジン誘導体、２－フェニルキノリン誘導体、１－フェニルイソキノリン誘導体、３－フェニルイソキノリン誘導体、２－（２－ベンゾチオフェニル）ピリジン誘導体、２－チエニルピリジン誘導体、１－フェニルピラゾール誘導体、１－フェニル－１Ｈ－インダゾール誘導体、２－フェニルベンゾチアゾール誘導体、２－フェニルチアゾール誘導体、２－フェニルベンゾオキサゾール誘導体、２－フェニルオキサゾール誘導体、２－フラニルピリジン誘導体、２－（２－ベンゾフラニル）ピリジン誘導体、７，８－ベンゾキノリン誘導体、７，８－ベンゾキノキサリン誘導体、ジベンゾ［ｆ，ｈ］キノリン誘導体、ジベンゾ［ｆ，ｈ］キノキサリン誘導体、ベンゾ［ｈ］－５，６－ジヒドロキノリン誘導体、９－（２－ピリジル）カルバゾール誘導体、１－（２－ピリジル）インドール誘導体、１－（１－ナフチル）イソキノリン誘導体、１－（２－ナフチル）イソキノリン誘導体、２－（２－ナフチル）キノリン誘導体、２－（１－ナフチル）キノリン誘導体、３－（１－ナフチル）イソキノリン誘導体

、３－（２－ナフチル）イソキノリン誘導体、２－（１－ナフチル）ピリジン誘導体、２－（２－ナフチル）ピリジン誘導体、６－フェニルフェナントリジン誘導体、６－（１－ナフチル）フェナントリジン誘導体、６－（２－ナフチル）フェナントリジン誘導体、ベンゾ［ｃ］アクリジン誘導体、ベンゾ［ｃ］フェナジン誘導体、ジベンゾ［ａ，ｃ］アクリジン誘導体、ジベンゾ［ａ，ｃ］フェナジン誘導体、２－フェニルキノキサリン誘導体、２，３－ジフェニルキノキサリン誘導体、２－ベンジルピリジン誘導体、２－フェニルベンゾイミダゾール誘導体、３－フェニルピラゾール誘導体、４－フェニルイミダゾール誘導体、１－フェニルイミダゾール誘導体、４－フェニルトリアゾール誘導体、５－フェニルテトラゾール誘導体、２－アルケニルピリジン誘導体、５－フェニル－１，２，４－トリアゾール誘導体、イミダゾ［１，２－ｆ］フェナントリジン誘導体、［１，２，４］トリアゾロ［１，５－ｆ］フェナントリジン誘導体、［１，２，４］トリアゾロ［４，３－ｆ］フェナントリジン誘導体、１，２－ジフェニルイミダゾール誘導体、１，５－ジフェニル－１，２，４－トリアゾール誘導体、または、３，４－ジフェニル－１，２，４－トリアゾール誘導体であり、好ましくは、２－フェニルピリジン誘導体、２－フェニルピリミジン誘導体、２－フェニルキノリン誘導体、１－フェニルイソキノリン誘導体、１－フェニルイミダゾール誘導体、５－フェニル－１，２，４－トリアゾール誘導体、イミダゾ［１，２－ｆ］フェナントリジン誘導体、［１，２，４］トリアゾロ［１，５－ｆ］フェナントリジン誘導体、［１，２，４］トリアゾロ［４，３－ｆ］フェナントリジン誘導体、１，２－ジフェニルイミダゾール誘導体、１，５－ジフェニル－１，２，４－トリアゾール誘導体、または、３，４－ジフェニル－１，２，４－トリアゾール誘導体であり、より好ましくは、２－フェニルピリジン誘導体、２－フェニルピリミジン誘導体、２－フェニルキノリン誘導体、１－フェニルイソキノリン誘導体、イミダゾ［１，２－ｆ］フェナントリジン誘導体、または、１，２－ジフェニルイミダゾール誘導体である。

［0033］ 具体的には、国際公開ＷＯ２００４－０８５４５０号、国際公開ＷＯ２０

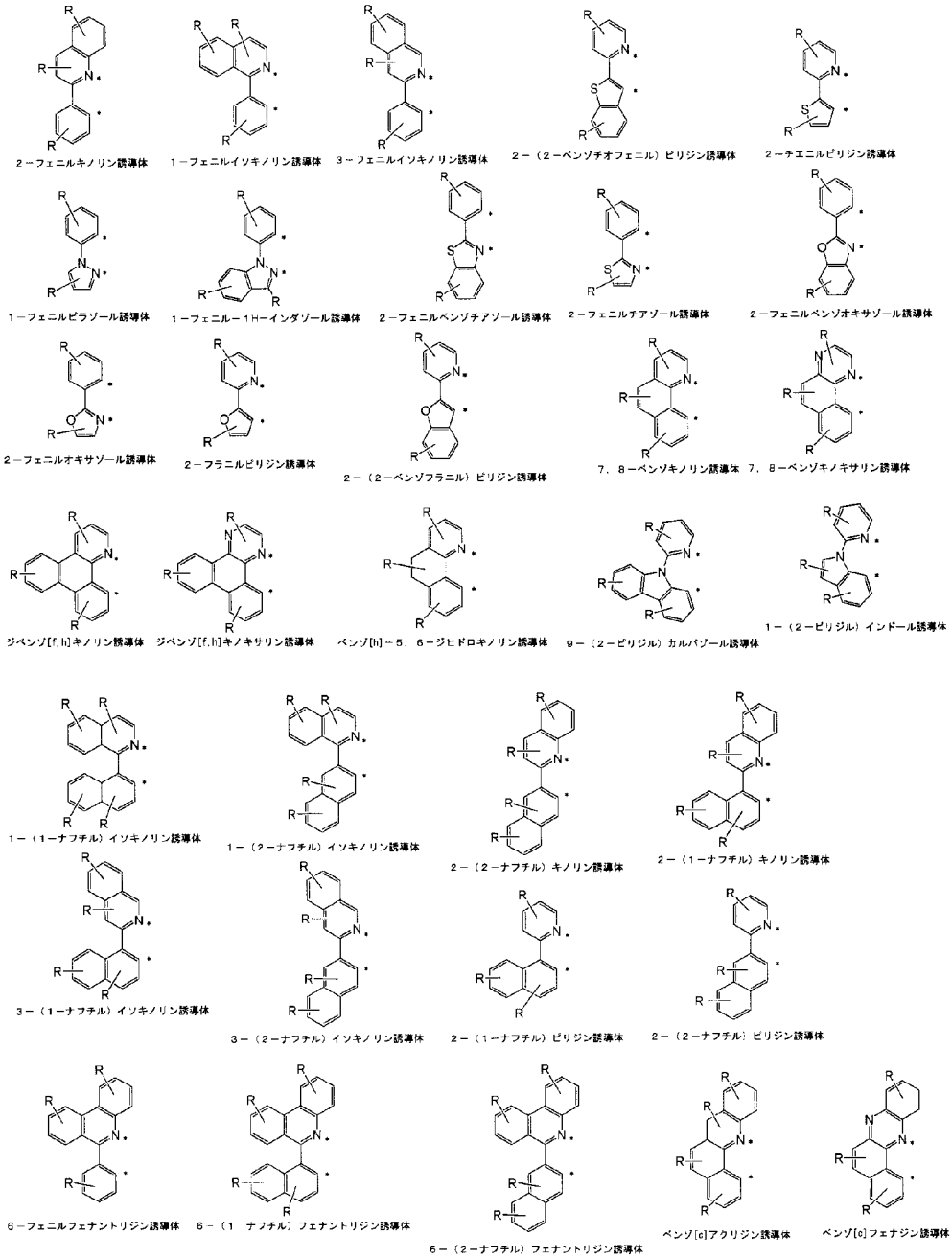
０６－０７５９０５号、国際公開ＷＯ２００２－４４１８９号、国際公開ＷＯ２００２－４５４６６号、国際公開ＷＯ２００６－０４６９８０号、国際公開ＷＯ２００６－０５９７５８号、特許公開２００６－１８２７７２号、特許公開２００６－１５１８８８号、特許公開２００６－１５１８８７号、特許公開２００６－９３６６５号、特許公開２００６－１００３９３号、国際公開ＷＯ２００４－１０１７０７号、国際公開ＷＯ２００５－０７３３３９号、国際公開ＷＯ２００５－０５６７１９号、国際公開ＷＯ２００５－０５６７１６号、国際公開ＷＯ２００５－０５６７１５号、国際公開ＷＯ２００５－０４８３１５号、国際公開ＷＯ２００５－０３３２４４号、国際公開ＷＯ２００４－０８１０１９号、国際公開ＷＯ２００４－０４５０００号、国際公開ＷＯ２００４－０４４０８９号、国際公開ＷＯ２００４－０２６８８６号、特許公開２００２－２３４８９４号、特許公開２００２－２２６４９５号、特許公開２００３－５９６６７号、特許公開２００１－３４５１８３号、特許公開２００１－２４７８５９号、特許公開２００３－７４６９号、特許公開２００３－７３３８８号、特許公開２００３－１０９７５８号、特許公開２００３－１２３９８２号、特許公開２００３－１３３０７４号、特許公開２００３－１３１４６４号、特許公開２００３－１３１４６３号、特許公開２００４－１０７４４１号、特許公開２００４－６７６５８号、特許公開２００３－３４２２８４号、特許公開２００５－２９７８４号、特許公開２００５－２９７８３号、特許公開２００５－２９７８２号、特許公開２００５－２３０７２号、特許公開２００５－２３０７１号、特許公開２００５－２３０７０号、特許公開２００５－２１０１号、特許公開２００５－２０５３号、特許公開２００５－７８９９６号、特許公開２００５－６８１１０号、特許公開２００５－６０３７４号、特許公開２００５－４４８０２号、特許公開２００５－２９７８５号、特許公開２００５－１０４８４３号、特許公開２００５－９７５４９号、特許公開２００５－２２０１３６号、特許公開２００５－２１３４８号、特許公開２００５－１７０８５１号、特許公開２００５－１６３０３６号、特許公開２００５－１５４３９６号、

特許公開２００５－２７２４１１号、特許公開２００５－３２７５２６号、特許公開２００５－３２５０４８号、特許公開２００５－３１４６６３号、特許公開２００６－１３２２２号、特許公開２００６－８６８８号、特許公開２００６－８０４１９号、特許公開２００６－７６９６９号、国際公開ＷＯ２００２－１５６４５号、国際公開ＷＯ２００２－０２７１４号、国際公開ＷＯ２００２－０６４７００号、国際公開ＷＯ２００３－０３３６１７号、国際公開ＷＯ２００３－０００６６１号、国際公開ＷＯ２００２－０８１４８８号、米国特許公開２００６－０２５１９２３号、特許公開２００７－１３７８７２号、国際公開ＷＯ２０１０－０６１９８９号、国際公開ＷＯ２００８－１５６８７９号、国際公開ＷＯ２０１０－０６８８７６号、国際公開ＷＯ２００９－０６１９２６号、国際公開ＷＯ２００８－０５４５８４号、国際公開ＷＯ２００６－０４６９８０号などに記載がある。

[0034] Ｉｒ―窒素結合およびＩｒ―炭素結合を形成する２座配位子の構造式の例を、表１～表２に示すが、本発明はこれに限定されるわけではない。表１～表２中のＲは水素原子又は置換基であり、望ましい範囲は後述の$Ｒ^{1}$～$Ｒ^{76}$と同様である。表１および表２の＊はイリジウムとの結合部位を表す。

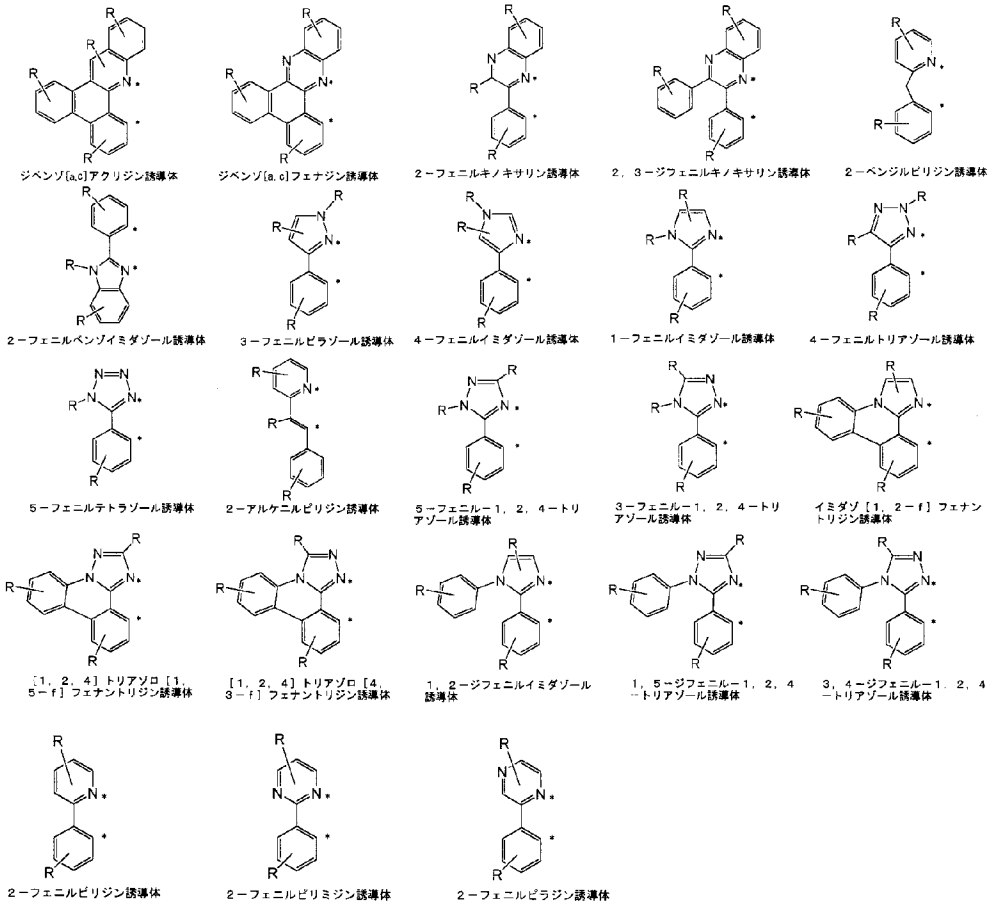
[0035]

[表1]


2－フェニルキノリン誘導体
1－フェニルイソキノリン誘導体
3－フェニルイソキノリン誘導体
2－（2－ベンゾチオフェニル）ピリジン誘導体
2－チエニルピリジン誘導体
1－フェニルピラゾール誘導体
1－フェニル－1H－インダゾール誘導体
2－フェニルベンゾチアゾール誘導体
2－フェニルチアゾール誘導体
2－フェニルベンゾオキサゾール誘導体
2－フェニルオキサゾール誘導体
2－フラニルピリジン誘導体
2－（2－ベンゾフラニル）ピリジン誘導体
7，8－ベンゾキノリン誘導体
7，8－ベンゾキノキサリン誘導体
ジベンゾ[f,h]キノリン誘導体
ジベンゾ[f,h]キノキサリン誘導体
ベンゾ[h]－5，6－ジヒドロキノリン誘導体
9－（2－ピリジル）カルバゾール誘導体
1－（2－ピリジル）インドール誘導体
1－（1－ナフチル）イソキノリン誘導体
1－（2－ナフチル）イソキノリン誘導体
2－（2－ナフチル）キノリン誘導体
2－（1－ナフチル）キノリン誘導体
3－（1－ナフチル）イソキノリン誘導体
3－（2－ナフチル）イソキノリン誘導体
2－（1－ナフチル）ピリジン誘導体
2－（2－ナフチル）ピリジン誘導体
6－フェニルフェナントリジン誘導体
6－（1－ナフチル）フェナントリジン誘導体
5－（2－ナフチル）フェナントリジン誘導体
ベンゾ[c]アクリジン誘導体
ベンゾ[c]フェナジン誘導体

[0036]

[表2]



[0037] Ｉｒ―窒素結合およびＩｒ―酸素結合を形成する２座配位子とは、例えば、ピコリン酸誘導体、ピリジンスルホン酸誘導体、キノリンスルホン酸誘導体、キノリンカルボン酸誘導体であり、ピコリン酸誘導体が好ましい。具体的には、特許公開２００６－１６３９４号、特許公開２００６－３０７２１０号、特許公開２００６－２９８９００号、国際公開ＷＯ２００６－０２８２２４号、国際公開ＷＯ２００６－０９７７１７号、特許公開２００４－１１３７９号、特許公開２００５－２９７８５号などに記載がある。

[0038] Ｉｒ―酸素結合を２つ形成する２座配位子とは、例えば、β―ジケトン誘導体、カルボン酸誘導体、トロポロン誘導体であり、β―ジケトン誘導体が好ましい。具体的には、特許公開２００５－３５９０２号、特許公開２００４－３４９２２４号、特許公開２００６－２８１０１号、特許公開２００５

－２９７８５号などに記載がある。

[0039] Ｉｒ―窒素結合を２つ形成する２座配位子とは、例えば、２，２’－ビピリジン誘導体、１，１０－フェナントロリン誘導体、２，２’－ビキノリン誘導体、２，２’－ジピリジルアミン誘導体、イミダゾール誘導体、ピラゾリルボレート誘導体、ピラゾール誘導体である。具体的には、特許公開２００５－２９８４８３号、特許公開２００６－２１３７２０号、特開２００３－１３３０７４号などに記載がある。

[0040] Ｌとして特に好ましい構造は、一般式（３）～（１１）に示される。すなわち、モノアニオン性２座配位子は（３）～（６）、（１０）、（１１）であり、中性２座配位子は（７）～（９）である。

[0041] Ｒ^{a}は置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキル基（好ましくは炭素数２～２０、より好ましくは炭素数３～２０、特に好ましくは炭素数５～２０であり、最も好ましくは炭素数１０～２０である）である。

[0042] Ｒ^{a}に置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキル基が導入されると、本発明化合物であるイリジウム錯体の溶媒（ジクロロメタン、クロロホルム、トルエン、ＴＨＦ、キシレンなど）に対する溶解性が大きく向上するので、合成や精製の操作性を向上させるので好ましく、特に塗布プロセスを用いた発光素子作製の観点からも非常に好ましい。

[0043] 以下にＲ^{a}を具体的に説明する。置換基を有しても良いアルキル基とは、例えば、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ｎ－ブチル基、ｓ－ブチル基、イソブチル基、ｔ－ブチル基、ｎ－ペンチル基、ｎ－ヘキシル基、ｎ－ヘプチル基、ｎ－オクチル基、ｎ－ノニル基、ｎ－デシル基、ｎ－ウンデシル基、ｎ－ドデシル基、ｎ－トリデシル基、ｎ－テトラデシル基、ｎ－ペンタデシル基、ｎ－ヘキサデシル基、ｎ－ヘプタデシル基、ｎ－オクタデシル基、ネオペンチル基、１－メチルペンチル基、２－メチルペンチル基、１－ペンチルヘキシル基、１－ブチルペンチル基、１－ヘプチルオクチル基、３－メチルペンチル基、ベンジル基、１－ヒドロキシエチル基、２－ヒドロキシエチル基、２－ヒドロキシイソブチル基、１，２－ジヒドロキシエチル基、

１，３－ジヒドロキシイソプロピル基、２，３－ジヒドロキシ－ｔ－ブチル基、１，２，３－トリヒドロキシプロピル基、１－クロロエチル基、２－クロロエチル基、２－クロロイソブチル基、１，２－ジクロロエチル基、１，３－ジクロロイソプロピル基、２，３－ジクロロ－ｔ－ブチル基、１，２，３－トリクロロプロピル基、１－ブロモエチル基、２－ブロモエチル基、２－ブロモイソブチル基、１，２－ジブロモエチル基、１，３－ジブロモイソプロピル基、２，３－ジブロモ－ｔ－ブチル基、１，２，３－トリブロモプロピル基、１－ヨードエチル基、２－ヨードエチル基、２－ヨードイソブチル基、１，２－ジヨードエチル基、１，３－ジヨードイソプロピル基、２，３－ジヨード－ｔ－ブチル基、１，２，３－トリヨードプロピル基、１－アミノエチル基、２－アミノエチル基、２－アミノイソブチル基、１，２－ジアミノエチル基、１，３－ジアミノイソプロピル基、２，３－ジアミノ－ｔ－ブチル基、１，２，３－トリアミノプロピル基、１－シアノエチル基、２－シアノエチル基、２－シアノイソブチル基、１，２－ジシアノエチル基、１，３－ジシアノイソプロピル基、２，３－ジシアノ－ｔ－ブチル基、１，２，３－トリシアノプロピル基、１－ニトロエチル基、２－ニトロエチル基、１，２－ジニトロエチル基、２，３－ジニトロ－ｔ－ブチル基、１，２，３－トリニトロプロピル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロオクチル基、３，５－テトラメチルシクロヘキシル基等が挙げられる。これらの中でも好ましくは、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ｎ－ブチル基、ｓ－ブチル基、イソブチル基、ｔ－ブチル基、ｎ－ペンチル基、ｎ－ヘキシル基、ｎ－ヘプチル基、ｎ－オクチル基、ｎ－ノニル基、ｎ－デシル基、ｎ－ウンデシル基、ｎ－ドデシル基、ｎ－トリデシル基、ｎ－テトラデシル基、ｎ－ペンタデシル基、ｎ－ヘキサデシル基、ｎ－ヘプタデシル基、ｎ－オクタデシル基、ネオペンチル基、１－メチルペンチル基、１－ペンチルヘキシル基、１－ブチルペンチル基、１－ヘプチルオクチル基、シクロヘキシル基、シクロオクチル基、３，５－テトラメチルシクロヘキシル基が挙げられる。

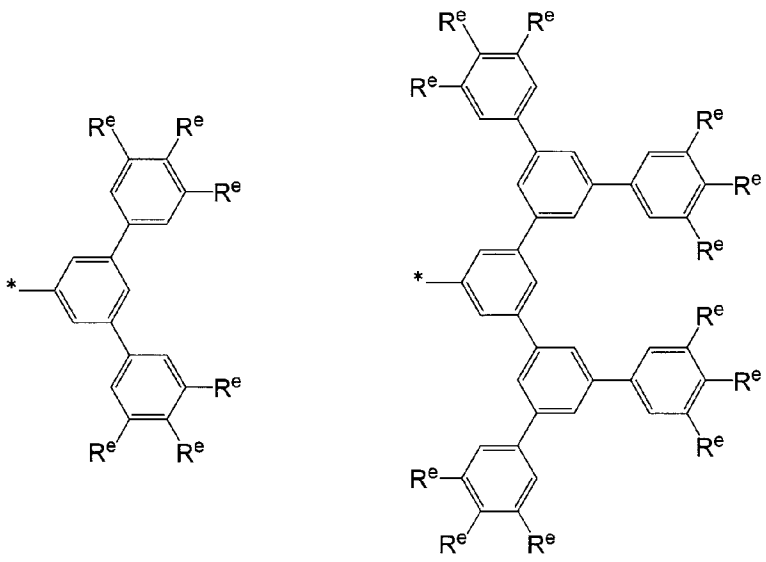
[0044] Ｒ[1]～Ｒ[76]は、各々独立に、水素原子または置換基を有しても良い炭素数１

～３０のアルキル基（好ましくは炭素数１～２０、より好ましくは炭素数１～１５、特に好ましくは炭素数１～１０であり、最も好ましくは炭素数１～５である）、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリール基（好ましくは炭素数６～３０、より好ましくは炭素数６～２０、特に好ましくは炭素数６～１５であり、最も好ましくは炭素数６～１２である）、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルケニル基（好ましくは炭素数２～３０、より好ましくは炭素数２～２０、特に好ましくは炭素数２～１５であり、最も好ましくは炭素数２～１０である）、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキニル基（好ましくは炭素数２～３０、より好ましくは炭素数２～２０、特に好ましくは炭素数２～１０である）、置換基を有しても良い炭素数０～３０のアミノ基（好ましくは炭素数０～３０、より好ましくは炭素数０～２０、特に好ましくは炭素数０～１０である）、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環基（好ましくは炭素数１～３０、より好ましくは炭素数１～２０であり、特に好ましくは炭素数１～１２である）、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルコキシ基もしくはアルキルチオ基（好ましくは炭素数１～３０、より好ましくは炭素数１～２０、特に好ましくは炭素数１～１０である）、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリールオキシ基もしくはアリールチオ基（好ましくは炭素数６～３０、より好ましくは炭素数６～２０、特に好ましくは炭素数６～１５であり、最も好ましくは炭素数６～１２である）、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環オキシ基もしくはヘテロ環チオ基（好ましくは炭素数１～３０、より好ましくは炭素数１～２０であり、特に好ましくは炭素数１～１２である）、アシル基、アシルオキシ基、アミド基、酸イミド基、イミン残基、置換シリル基、置換シリルオキシ基、置換シリルチオ基、置換シリルアミノ基、ハロゲン原子（好ましくは塩素原子、臭素原子、またはフッ素原子、より好ましくはフッ素原子）、シアノ基、カルボキシル基またはトリフルオロメチル基を表す。

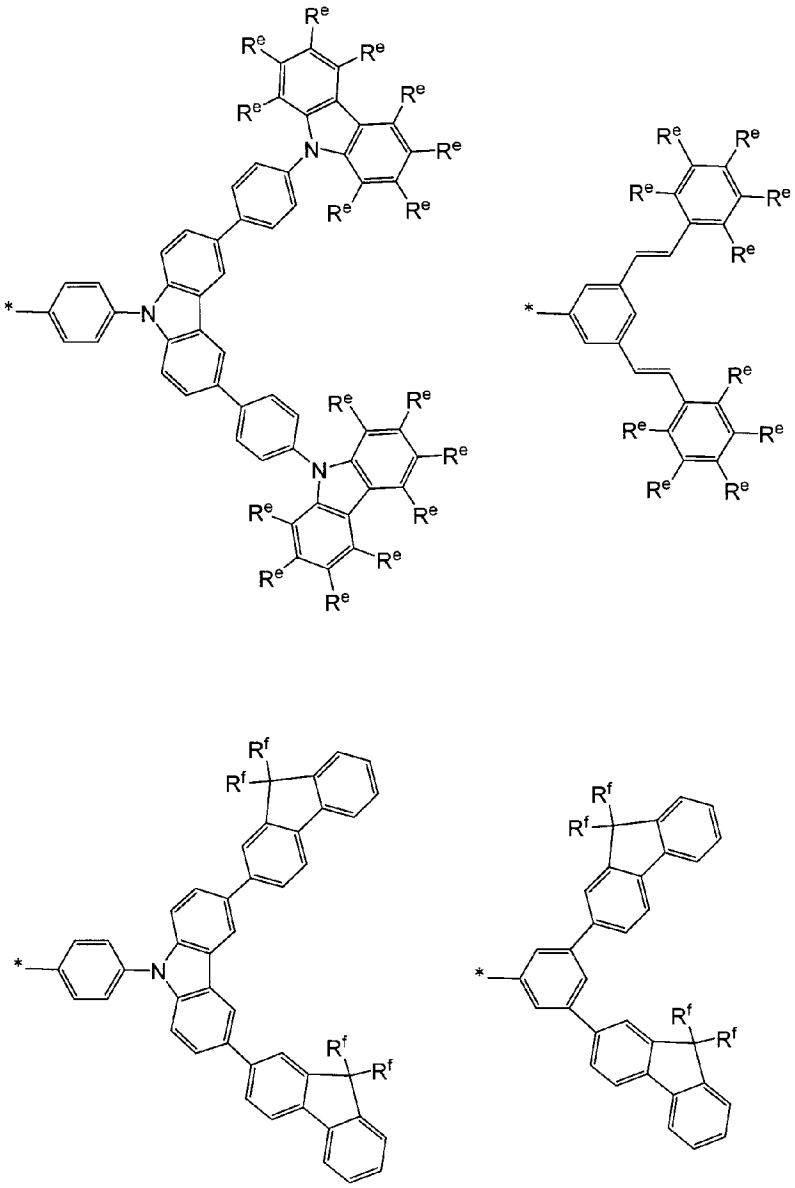
[0045] 置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキル基としては、置換基を有しても良いメチル基及びR^aの説明において例示された置換基を有しても良い

炭素数２～３０のアルキル基等が挙げられる。置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリール基としては、例えば、フェニル基、ビフェニルー２ーイル基、ビフェニルー３ーイル基、ビフェニルー４ーイル基、ｐーターフェニルー４ーイル基、ｐーターフェニルー３ーイル基、ｐーターフェニルー２ーイル基、ｍーターフェニルー４ーイル基、ｍーターフェニルー３ーイル基、ｍーターフェニルー２ーイル基、ｏートリル基、ｍートリル基、ｐートリル基、ｐーｔーブチルフェニル基、ｐー(２ーフェニルプロピル)フェニル基、４’ーメチルビフェニルイル基、４”ーｔーブチルーｐーターフェニルー４ーイル基、ｏークメニル基、ｍークメニル基、ｐークメニル基、２，３ーキシリル基、３，４ーキシリル基、２，５ーキシリル基、メシチル基、ｍークウォーターフェニル基、１ーナフチル基、２ーナフチル基等が挙げられる。これらの中でも好ましくは、フェニル基、ビフェニルー２ーイル基、ビフェニルー３ーイル基、ビフェニルー４ーイル基、ｍーターフェニルー４ーイル基、ｍーターフェニルー３ーイル基、ｍーターフェニルー２ーイル基、ｐートリル基、３，４ーキシリル基、ｍークウォーターフェニルー２ーイル基、特に好ましくはフェニル基であり、これらのアリール基は置換基を有しても良い。その他、例えば特開２００９－１４９６１７号に記載された以下の式のデンドロン残基等が挙げられる。

[化09]



[化10]



上記式中、R^eは、水素原子、炭素数１～１０のアルキル基または炭素数１～１０のアルコキシ基を表し、これらの置換基の一部の水素原子はハロゲン原子で置換されていてもよい。複数存在するR^eは同一であっても異なっていてもよいが、R^eのうちの少なくとも１つは炭素数１～１０のアルキル基または炭素数１～１０のアルコキシ基である。また、R^fは直鎖状または分岐状の炭素数１～１０のアルキル基を表す。複数存在するR^fは同一であっても異なっていてもよい。*は前記R^1～R^{76}との結合部位を表す。

[0046] 置換基を有しても良いアルケニル基とは、例えば、ビニル基、アリル基、１－ブテニル基、２－ブテニル基、３－ブテニル基、１，３－ブタンジエニル基、１－メチルビニル基、スチリル基、２，２－ジフェニルビニル基、１，２－ジフェニルビニル基、１－メチルアリル基、１，１－ジメチルアリル基、２－メチルアリル基、１－フェニルアリル基、２－フェニルアリル基、３－フェニルアリル基、３，３－ジフェニルアリル基、１，２－ジメチルアリル基、１－フェニル－１－ブテニル基、３－フェニル－１－ブテニル基等が挙げられ、好ましくは、スチリル基、２，２－ジフェニルビニル基、１，２－ジフェニルビニル基等が挙げられる。

[0047] 置換基を有しても良いアルキニル基とは、例えばプロパルギル、３－ペンチニル、エチニル基、メチルエチニル基、１－プロピニル基、２－プロピレニル基、ヘプチニル基、シクロヘキシルエチニル基、２－プロピニル基、１－ブチニル基、２－ブチニル基、１－ペンチニル基、２－ペンチニル基、１－ヘキシニル基、２－ヘキシニル基、１－オクチニル基などが挙げられる。このようなアルキニル基には、１，３－ブタジイニル基等のジイニル基も含まれる。

[0048] 置換基を有しても良いアミノ基とは、例えばアミノ基、ジベンジルアミノ基、ジトリルアミノ基、メチルアミノ基、ジメチルアミノ基、エチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ｎ－プロピルアミノ基、ジｎ－プロピルアミノ基、イソプロピルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基、ｎ－ブチルアミノ基、ｓ－ブチルアミノ基、イソブチルアミノ基、ｔ－ブチルアミノ基、ｎ－ペンチルアミノ基、ｎ－ヘキシルアミノ基、シクロヘキシルアミノ基、ｎ－ヘプチルアミノ基、ｎ－オクチルアミノ基、２－エチルヘキシルアミノ基、ｎ－ノニルアミノ基、ｎ－デシルアミノ基、３，７－ジメチルオクチルアミノ基、ｎ－ラウリルアミノ基、シクロペンチルアミノ基、ジシクロペンチルアミノ基、シクロヘキシルアミノ基、ジシクロヘキシルアミノ基、ピロリジニル基、ピペリジニル基、ジトリフルオロメチルアミノ基フェニルアミノ基、ジフェニルアミノ基、C_1～C_{12}アルコキシフェニルアミノ基、ジ（C_1～C_{12}アルコ

キシフェニル）アミノ基、ジ（C_1～C_{12}アルキルフェニル）アミノ基、１－ナフチルアミノ基、２－ナフチルアミノ基、ペンタフルオロフェニルアミノ基、ピリジニルアミノ基、ピリダジニルアミノ基、ピリミジニルアミノ基、ピラジニルアミノ基、トリアジニルアミノ基フェニル－C_1～C_{12}アルキルアミノ基、C_1～C_{12}アルコキシフェニル－C_1～C_{12}アルキルアミノ基、C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_1～C_{12}アルキルアミノ基、ジ（C_1～C_{12}アルコキシフェニル－C_1～C_{12}アルキル）アミノ基、ジ（C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_1～C_{12}アルキル）アミノ基、１－ナフチル－C_1～C_{12}アルキルアミノ基、２－ナフチル－C_1～C_{12}アルキルアミノ基等が挙げられる。

[0049] 置換基を有しても良いヘテロ環基とは、例えば、１－ピロリル基、２－ピロリル基、３－ピロリル基、ピラジニル基、２－ピリジニル基、１－イミダゾリル基、２－イミダゾリル基、１－ピラゾリル基、１－インドリジニル基、２－インドリジニル基、３－インドリジニル基、５－インドリジニル基、６－インドリジニル基、７－インドリジニル基、８－インドリジニル基、２－イミダゾピリジニル基、３－イミダゾピリジニル基、５－イミダゾピリジニル基、６－イミダゾピリジニル基、７－イミダゾピリジニル基、８－イミダゾピリジニル基、３－ピリジニル基、４－ピリジニル基、１－インドリル基、２－インドリル基、３－インドリル基、４－インドリル基、５－インドリル基、６－インドリル基、７－インドリル基、１－イソインドリル基、２－イソインドリル基、３－イソインドリル基、４－イソインドリル基、５－イソインドリル基、６－イソインドリル基、７－イソインドリル基、２－フリル基、３－フリル基、２－ベンゾフラニル基、３－ベンゾフラニル基、４－ベンゾフラニル基、５－ベンゾフラニル基、６－ベンゾフラニル基、７－ベンゾフラニル基、１－イソベンゾフラニル基、３－イソベンゾフラニル基、４－イソベンゾフラニル基、５－イソベンゾフラニル基、６－イソベンゾフラニル基、７－イソベンゾフラニル基、２－キノリル基、３－キノリル基、４－キノリル基、５－キノリル基、６－キノリル基、７－キノリル基、８－キノリル基、１－イソキノリル基、３－イソキノリル基、４－イソキノリ

ル基、５－イソキノリル基、６－イソキノリル基、７－イソキノリル基、８－イソキノリル基、２－キノキサリニル基、５－キノキサリニル基、６－キノキサリニル基、１－カルバゾリル基、２－カルバゾリル基、３－カルバゾリル基、４－カルバゾリル基、９－カルバゾリル基、β－カルボリン－１－イル、β－カルボリン－３－イル、β－カルボリン－４－イル、β－カルボリン－５－イル、β－カルボリン－６－イル、β－カルボリン－７－イル、β－カルボリン－６－イル、β－カルボリン－９－イル、１－フェナントリジニル基、２－フェナントリジニル基、３－フェナントリジニル基、４－フェナントリジニル基、６－フェナントリジニル基、７－フェナントリジニル基、８－フェナントリジニル基、９－フェナントリジニル基、１０－フェナントリジニル基、１－アクリジニル基、２－アクリジニル基、３－アクリジニル基、４－アクリジニル基、９－アクリジニル基、１，７－フェナントロリン－２－イル基、１，７－フェナントロリン－３－イル基、１，７－フェナントロリン－４－イル基、１，７－フェナントロリン－５－イル基、１，７－フェナントロリン－６－イル基、１，７－フェナントロリン－８－イル基、１，７－フェナントロリン－９－イル基、１，７－フェナントロリン－１０－イル基、１，８－フェナントロリン－２－イル基、１，８－フェナントロリン－３－イル基、１，８－フェナントロリン－４－イル基、１，８－フェナントロリン－５－イル基、１，８－フェナントロリン－６－イル基、１，８－フェナントロリン－７－イル基、１，８－フェナントロリン－９－イル基、１，８－フェナントロリン－１０－イル基、１，９－フェナントロリン－２－イル基、１，９－フェナントロリン－３－イル基、１，９－フェナントロリン－４－イル基、１，９－フェナントロリン－５－イル基、１，９－フェナントロリン－６－イル基、１，９－フェナントロリン－７－イル基、１，９－フェナントロリン－８－イル基、１，９－フェナントロリン－１０－イル基、１，１０－フェナントロリン－２－イル基、１，１０－フェナントロリン－３－イル基、１，１０－フェナントロリン－４－イル基、１，１０－フェナントロリン－５－イル基、２，９－フェナントロリン－１－イル基、２，９－フェナントロリン－

３－イル基、２，９－フェナントロリン－４－イル基、２，９－フェナントロリン－５－イル基、２，９－フェナントロリン－６－イル基、２，９－フェナントロリン－７－イル基、２，９－フェナントロリン－８－イル基、２，９－フェナントロリン－１０－イル基、２，８－フェナントロリン－１－イル基、２，８－フェナントロリン－３－イル基、２，８－フェナントロリン－４－イル基、２，８－フェナントロリン－５－イル基、２，８－フェナントロリン－６－イル基、２，８－フェナントロリン－７－イル基、２，８－フェナントロリン－９－イル基、２，８－フェナントロリン－１０－イル基、２，７－フェナントロリン－１－イル基、２，７－フェナントロリン－３－イル基、２，７－フェナントロリン－４－イル基、２，７－フェナントロリン－５－イル基、２，７－フェナントロリン－６－イル基、２，７－フェナントロリン－８－イル基、２，７－フェナントロリン－９－イル基、２，７－フェナントロリン－１０－イル基、１－フェナジニル基、２－フェナジニル基、１－フェノチアジニル基、２－フェノチアジニル基、３－フェノチアジニル基、４－フェノチアジニル基、１０－フェノチアジニル基、１－フェノキサジニル基、２－フェノキサジニル基、３－フェノキサジニル基、４－フェノキサジニル基、１０－フェノキサジニル基、２－オキサゾリル基、４－オキサゾリル基、５－オキサゾリル基、２－オキサジアゾリル基、５－オキサジアゾリル基、３－フラザニル基、２－チエニル基、３－チエニル基、２－メチルピロール－１－イル基、２－メチルピロール－３－イル基、２－メチルピロール－４－イル基、２－メチルピロール－５－イル基、３－メチルピロール－１－イル基、３－メチルピロール－２－イル基、３－メチルピロール－４－イル基、３－メチルピロール－５－イル基、２－ｔ－ブチルピロール－４－イル基、３－（２－フェニルプロピル）ピロール－１－イル基、２－メチル－１－インドリル基、４－メチル－１－インドリル基、２－メチル－３－インドリル基、４－メチル－３－インドリル基、２－ｔ－ブチル－１－インドリル基、４－ｔ－ブチル－１－インドリル基、２－ｔ－ブチル－３－インドリル基、４－ｔ－ブチル－３－インドリル基、１－ジベンゾフラニル基、２－ジベンゾ

フラニル基、３－ジベンゾフラニル基、４－ジベンゾフラニル基、１－ジベンゾチオフェニル基、２－ジベンゾチオフェニル基、３－ジベンゾチオフェニル基、４－ジベンゾチオフェニル基、１－シラフルオレニル基、２－シラフルオレニル基、３－シラフルオレニル基、４－シラフルオレニル基、１－ゲルマフルオレニル基、２－ゲルマフルオレニル基、３－ゲルマフルオレニル基、４－ゲルマフルオレニル基等が挙げられる。これらの中でも好ましくは、２－ピリジニル基、１－インドリジニル基、２－インドリジニル基、３－インドリジニル基、５－インドリジニル基、６－インドリジニル基、７－インドリジニル基、８－インドリジニル基、２－イミダゾピリジニル基、３－イミダゾピリジニル基、５－イミダゾピリジニル基、６－イミダゾピリジニル基、７－イミダゾピリジニル基、８－イミダゾピリジニル基、３－ピリジニル基、４－ピリジニル基、１－インドリル基、２－インドリル基、３－インドリル基、４－インドリル基、５－インドリル基、６－インドリル基、７－インドリル基、１－イソインドリル基、２－イソインドリル基、３－イソインドリル基、４－イソインドリル基、５－イソインドリル基、６－イソインドリル基、７－イソインドリル基、１－カルバゾリル基、２－カルバゾリル基、３－カルバゾリル基、４－カルバゾリル基、９－カルバゾリル基、１－ジベンゾフラニル基、２－ジベンゾフラニル基、３－ジベンゾフラニル基、４－ジベンゾフラニル基、１－ジベンゾチオフェニル基、２－ジベンゾチオフェニル基、３－ジベンゾチオフェニル基、４－ジベンゾチオフェニル基、１－シラフルオレニル基、２－シラフルオレニル基、３－シラフルオレニル基、４－シラフルオレニル基、１－ゲルマフルオレニル基、２－ゲルマフルオレニル基、３－ゲルマフルオレニル基、４－ゲルマフルオレニル基等が挙げられる。

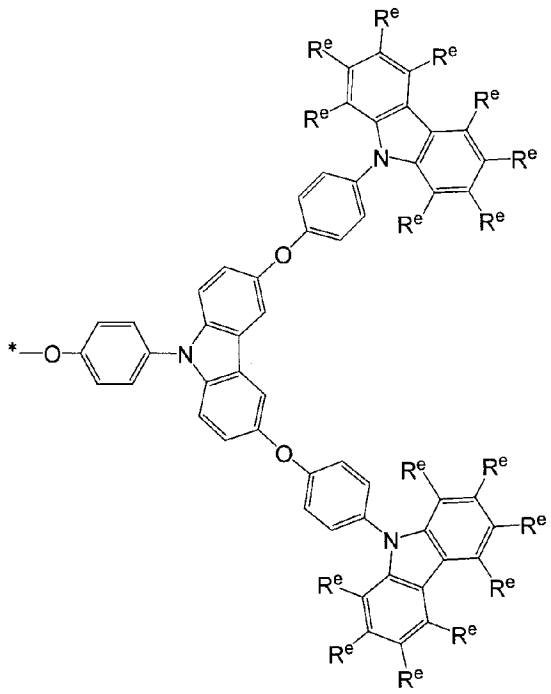
[0050] 置換基を有しても良いアルコキシ基もしくはアルキルチオ基とは、－ＯＹもしくは－ＳＹで表される基であり、Ｙの例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ｎ－ブチル基、ｓ－ブチル基、イソブチル基、ｔ－ブチル基、ｎ－ペンチル基、ｎ－ヘキシル基、ｎ－ヘプチル基、ｎ

ーオクチル基、ヒドロキシメチル基、１ーヒドロキシエチル基、２ーヒドロキシエチル基、２ーヒドロキシイソブチル基、１，２ージヒドロキシエチル基、１，３ージヒドロキシイソプロピル基、２，３ージヒドロキシーｔーブチル基、１，２，３ートリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、１ークロロエチル基、２ークロロエチル基、２ークロロイソブチル基、１，２ージクロロエチル基、１，３ージクロロイソプロピル基、２，３ージクロローｔーブチル基、１，２，３ートリクロロプロピル基、ブロモメチル基、１ーブロモエチル基、２ーブロモエチル基、２ーブロモイソブチル基、１，２ージブロモエチル基、１，３ージブロモイソプロピル基、２，３ージブロモーｔーブチル基、１，２，３ートリブロモプロピル基、ヨードメチル基、１ーヨードエチル基、２ーヨードエチル基、２ーヨードイソブチル基、１，２ージヨードエチル基、１，３ージヨードイソプロピル基、２，３ージヨードーｔーブチル基、１，２，３ートリヨードプロピル基、アミノメチル基、１ーアミノエチル基、２ーアミノエチル基、２ーアミノイソブチル基、１，２ージアミノエチル基、１，３ージアミノイソプロピル基、２，３ージアミノーｔーブチル基、１，２，３ートリアミノプロピル基、シアノメチル基、１ーシアノエチル基、２ーシアノエチル基、２ーシアノイソブチル基、１，２ージシアノエチル基、１，３ージシアノイソプロピル基、２，３ージシアノーｔーブチル基、１，２，３ートリシアノプロピル基、ニトロメチル基、１ーニトロエチル基、２ーニトロエチル基、２ーニトロイソブチル基、１，２ージニトロエチル基、１，３ージニトロイソプロピル基、２，３ージニトローｔーブチル基、１，２，３ートリニトロプロピル基等が挙げられる。

[0051] 置換基を有しても良いアリールオキシ基もしくはアリールチオ基とは、－ＯＺもしくは－ＳＺで表される基であり、Ｚの例としては、フェニル基、$Ｃ_{1}$～$Ｃ_{12}$アルコキシフェニル基、$Ｃ_{1}$～$Ｃ_{12}$アルキルフェニル基、１ーナフチル基、２ーナフチル基、およびペンタフルオロフェニル基が挙げられる。

置換基を有しても良いアリールオキシ基の一例として、特開２００９－１４９６１７号に記載された以下の式のデンドロン残基が挙げられる。

[化11]



上記式中、R^eは、水素原子、炭素数１～１０のアルキル基または炭素数１～１０のアルコキシ基を表し、これらの置換基の一部の水素原子はハロゲン原子で置換されていてもよい。複数存在するR^eは同一であっても異なっていてもよいが、R^eのうちの少なくとも１つは炭素数１～１０のアルキル基または炭素数１～１０のアルコキシ基である。*は前記R^1～R^{76}との結合部位を表す。

[0052] 置換基を有しても良いヘテロ環オキシ基もしくはヘテロ環チオ基とは、－ＯＨｅｔもしくは－ＳＨｅｔで表される基であり、Ｈｅｔの例としては、チエニル基、C_1～C_{12}アルコキシチエニル基、C_1～C_{12}アルキルチエニル基、ピロリル基、C_1～C_{12}アルコキシピロリル基、C_1～C_{12}アルキルピロリル基、フリル基、C_1～C_{12}アルコキシフリル基、およびC_1～C_{12}アルキルフリル基、ピリジニル基、C_1～C_{12}アルコキシピリジニル基、C_1～C_{12}アルキルピリジニル基、ピペリジニル基、C_1～C_{12}アルコキシピペリジニル基、C_1～C_{12}アルキルピペリジニル基、キノリル基、イソキノリル基などが挙げられる。これらのうち、C_1～C_{12}アルコキシピリジニル基およびC_1～C_1

$_2$アルキルピリジニル基が好ましい。

[0053] 上記アシル基の炭素数は通常２～２０程度であり、２～１８であることが好ましい。具体的なアシル基としては、アセチル基、プロピオニル基、ブチリル基、イソブチリル基、ピバロイル基、ベンゾイル基、トリフルオロアセチル基、およびペンタフルオロベンゾイル基などが挙げられる。

[0054] 上記アシルオキシ基の炭素数は通常２～２０程度であり、２～１８であることが好ましい。具体的なアシルオキシ基としては、アセトキシ基、プロピオニルオキシ基、ブチリルオキシ基、イソブチリルオキシ基、ピバロイルオキシ基、ベンゾイルオキシ基、トリフルオロアセチルオキシ基、およびペンタフルオロベンゾイルオキシ基などが挙げられる。

[0055] 上記置換シリル基、置換シリルオキシ基、置換シリルチオ基、および、置換シリルアミノ基としては、例えば、その置換シリルの部分が、トリエチルシリル基、トリイソプロピルシリル基、ｔ－ブチルジメチルシリル基、ｔ－ブチルジフェニルシリル基等であるものが挙げられる。

[0056] 上記R^aのアルキル基、並びに、R^1～R^{76}のアルキル基、アリール基、アルケニル基、アルキニル基、アミノ基、ヘテロ環基、アルコキシ基、アルキルチオ基、アリールオキシ基、アリールチオ基、ヘテロ環オキシ基、および、ヘテロ環チオ基が有してもよい置換基としては、上述したものに加え、更に、メチル基、エチル基、プロピル基、ｔ－ブチル基等のアルキル基、ベンジル基、フェネチル基等のアラルキル基、メトキシル基、エトキシル基、プロポキシル基等のアルコキシル基、フェニル基、ビフェニル基等のアリール基、チエニル基、ピロリル基、ピリジニル基等のヘテロ環基、フェノキシル基等のアリールオキシル基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジベンジルアミノ基、ジフェニルアミノ基、ジトリルアミノ基、ジアニソリルアミノ基等のアミノ基、シアノ基等が挙げられる。

[0057] 以下に、R^1～R^{76}をさらに具体的に説明する。

[0058] R^1としては、上記の中でも水素原子、ハロゲン原子、置換基を有しても良い炭素数６～３０のアリール基、または置換基を有しても良い炭素数１～２

０のアルキル基がより好ましく、水素原子、フッ素原子、置換基を有しても良い炭素数６～１２のアリール基、または置換基を有しても良い炭素数１～１０のアルキル基が特に好ましく、水素原子またはフッ素原子が最も好ましい。

[0059] Ｒ[2]としては、上記の中でも水素原子、ハロゲン原子、トリフルオロメチル基、シアノ基、置換基を有しても良い炭素数６～３０のアリール基、または置換基を有しても良い炭素数１～２０のアルキル基がより好ましく、水素原子、トリフルオロメチル基、置換基を有しても良い炭素数６～１２のアリール基、または置換基を有しても良い炭素数１～１０のアルキル基が特に好ましい。

[0060] Ｒ[3]としては、上記の中でも水素原子、ハロゲン原子、置換基を有しても良い炭素数６～３０のアリール基、または置換基を有しても良い炭素数１～２０のアルキル基がより好ましく、水素原子、フッ素原子、置換基を有しても良い炭素数６～１２のアリール基、または置換基を有しても良い炭素数１～１０のアルキル基が特に好ましい。

[0061] Ｒ[4]としては、上記の中でも水素原子、トリフルオロメチル基、または置換基を有しても良い炭素数１～１０のアルキル基がより好ましく、水素原子、または置換基を有しても良い炭素数１～５のアルキル基が特に好ましく、水素原子が最も好ましい。

[0062] Ｒ[13]とＲ[15]としては、上記の中でもトリフルオロメチル基、置換基を有しても良い炭素数６～１２のアリール基、置換基を有しても良い炭素数１～１０のアルキル基がより好ましく、置換基を有しても良い炭素数１～５のアルキル基が特に好ましく、置換基を有しても良い炭素数１～３のアルキル基が最も好ましい。

[0063] Ｒ[14]、Ｒ[20]～Ｒ[31]としては、上記の中でも水素原子または置換基を有しても良い炭素数１～１０のアルキル基がより好ましく、水素原子または置換基を有しても良い炭素数１～５のアルキル基が特に好ましく、水素原子が最も好ましい。

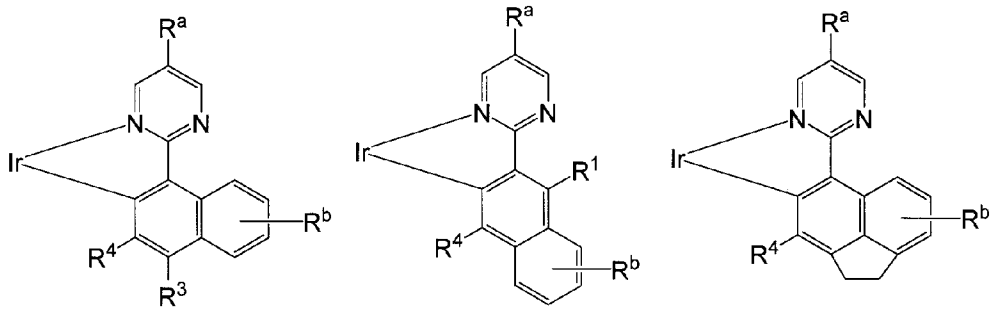
[0064] R^{52}としては、上記の中でも水素原子、置換基を有しても良い炭素数１～２０のアルキル基、置換基を有しても良い炭素数６～３０のアリール基、または置換基を有しても良い炭素数１～２０のヘテロ環基がより好ましく、水素原子、置換基を有しても良い炭素数１～１０のアルキル基、または置換基を有しても良い炭素数６～１２のアリール基が特に好ましい。

[0065] R^{5}～R^{12}、R^{16}～R^{19}、R^{32}～R^{51}、R^{53}～R^{58}、R^{60}～R^{62}、R^{64}～R^{76}としては、上記の中でも水素原子、ハロゲン原子、トリフルオロメチル基、シアノ基、カルボキシル基、置換基を有しても良い炭素数１～２０のアルキル基、置換基を有しても良い炭素数６～３０のアリール基、または置換基を有しても良い炭素数１～２０のヘテロ環基がより好ましく、水素原子、置換基を有しても良い炭素数１～１０のアルキル基、または置換基を有しても良い炭素数６～１２のアリール基が特に好ましい。

[0066] R^{59}およびR^{63}としては、上記の中でも水素原子、ハロゲン原子、トリフルオロメチル基、シアノ基、カルボキシル基、置換基を有しても良い炭素数１～２０のアルキル基、置換基を有しても良い炭素数６～３０のアリール基、または置換基を有しても良い炭素数１～２０のヘテロ環基がより好ましく、水素原子、置換基を有しても良い炭素数１～１０のアルキル基、または置換基を有しても良い炭素数６～１２のアリール基が特に好ましく、置換基を有しても良い炭素数１～５のアルキル基が最も好ましい。

[0067] さらに、隣接する２つ以上のR^{1}～R^{76}は、互いに結合して飽和または不飽和の炭素環、飽和または不飽和のヘテロ環を形成するのも好ましい。特に、イリジウム錯体の発光を長波長側にシフトさせるという観点からは、R^{1}～R^{3}が結合し、下式のようにナフタレン骨格またはアセナフテン骨格を形成することが好ましい。ここで、R^{b}は水素原子または置換基であり、R^{1}～R^{76}と望ましい範囲も同様である。

[化12]



[0068] Ｒ[2]が置換基を有しても良いアリール基である場合、特許公表２００５－５２１２１０号、特許公表２００５－５３７３２１号、特許公表２００５－５３７３５４号、特開２００８－１７４４９９号、特許公表２００８－５３８７４２号、特開２００９－１４９６１７号などに記載のようなデンドリマー構造をとることも好ましい。

[0069] 本発明に係るイリジウム錯体については、特に固体状態において高い発光量子収率を示すことが明らかになった。その理由について、発明者は、Ｒ[a]という特定位置に置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキル基が導入されたことにより、濃度消光の影響が減少し、固体状態でも強く発光することになったと推測している。

[0070] また、本発明に係るイリジウム錯体については、Ｌを変えることにより、発光波長を調整することが可能である。当該分野において、Ｌは金属錯体の発光特性に直接寄与するのではなく、発光特性を若干変えうると考えられており、補助配位子と呼ばれている（例えば、特許公表２００６－５１３２７８号参照）。

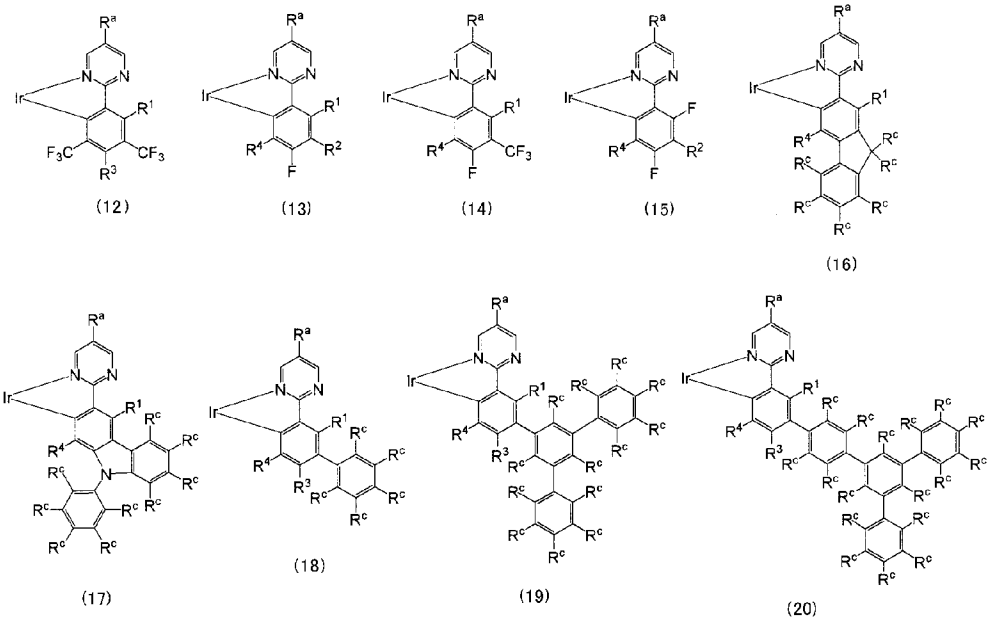
[0071] 一方で、一般式（１）又は（２）に記載した２－フェニルピリミジン系配位子は、前述したように本発明のイリジウム錯体の発光特性に主に寄与していると考えられる。したがって、当該２座配位子と、過去の文献に記載されている従来公知の補助配位子を組み合わせることにより、その発光波長を、用途に応じて変化させることができる。

[0072] また、Ｒ[1]～Ｒ[4]へ置換基を導入する方法により、本発明の金属錯体の発光

波長を制御することも可能である。例えば、Ｒ[1]またはＲ[3]へフッ素原子を導入すると発光は短波長シフトする。また、Ｒ[2]またはＲ[4]へトリフルオロメチル基を導入すると発光は短波長シフトする。これらのイリジウム錯体は青色発光材料として好適に用いることができる。一方、Ｒ[2]またはＲ[3]へアリール基を導入すると発光は長波長シフトする。

[0073] 前記一般式（１）で表わされるイリジウム錯体の中でも、特に一般式（１２）～（２０）で表わされるイリジウム錯体が好ましい。また一般式（２）で表わされるイリジウム錯体についても一般式（１２）～（２０）で表わされるイリジウム錯体を部分構造として有していることが好ましい。ここで、Ｒ[c]は水素原子または置換基であり、Ｒ[1]～Ｒ[76]と望ましい範囲も同様である。

[化13]



[0074] 前記一般式（１）又は（２）で示される本発明化合物を製造するには、公知文献（特開２００２－１０５０５５号、特開２００４－１６８７５５号、特表２００３－５１５８９７号、特表２００４－５２６７００号など）を参考に合成できる。具体的には、３塩化イリジウムやイリジウムトリスアセチルアセトナートと２－フェニルピリミジン系配位子とを反応させる１段階の

方法や、３塩化イリジウムと、２－フェニルピリミジン系配位子とを反応させることで、まず塩素架橋ダイマーを合成し、これと配位子Ｌを反応させる２段階の方法などがある。上記反応は、窒素雰囲気下、アルゴン雰囲気下で反応を行うのも好ましい。また、加熱手段は特に制約されないが、反応を円滑するために、マイクロ波を照射することも好ましい。マイクロ波の波長に特に制限はないが、２０００～３０００ＭＨｚ、好ましくは２４００～２５００ＭＨｚである。マイクロ波発振装置としては、市販されている有機合成用反応装置などすべて適用できる。また、加熱手段として、オイルバス、マントルヒーター等を用いても良い。

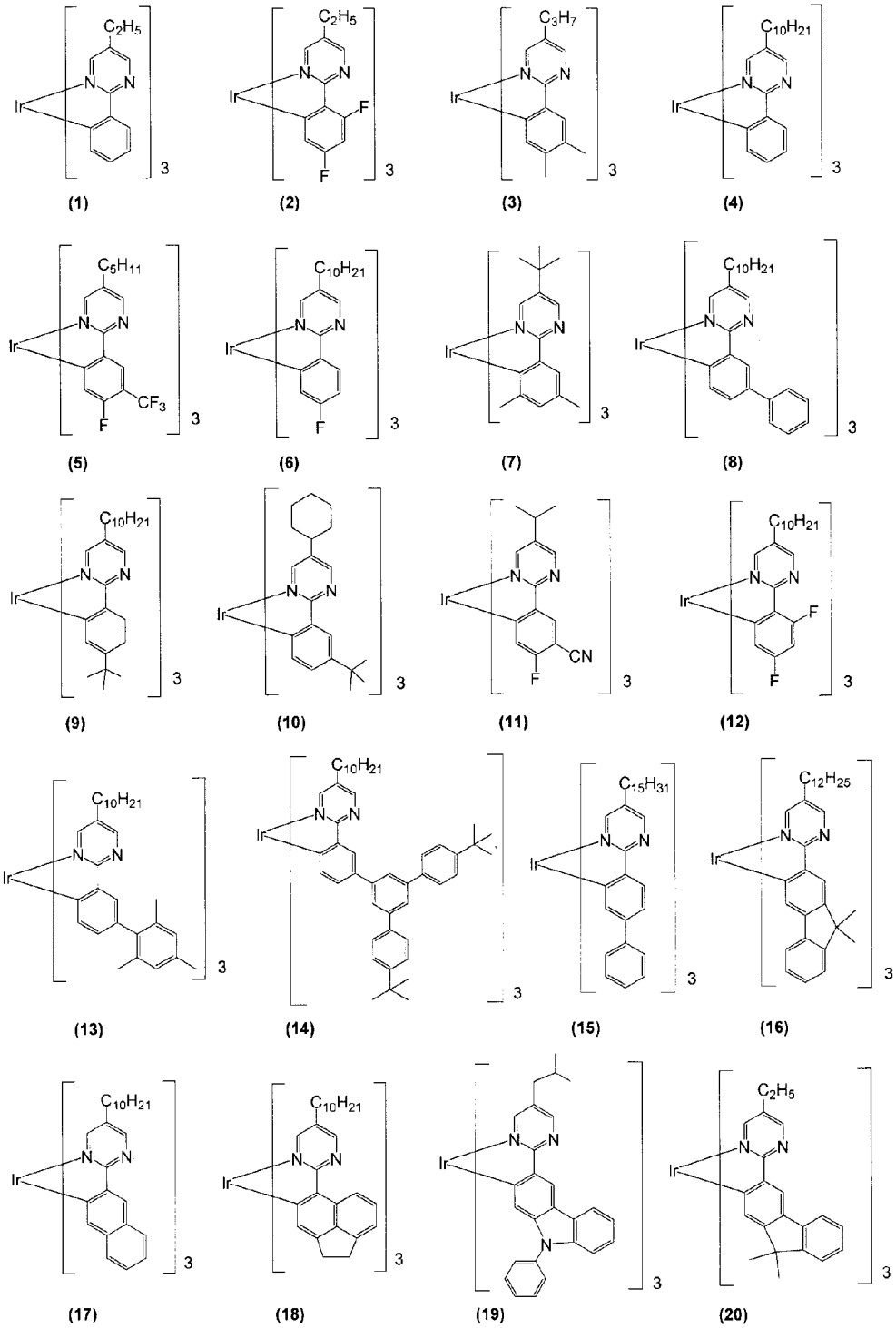
[0075] また、本発明に係るイリジウム錯体を合成する反応を更に円滑に進めるために、反応溶媒を用いることが望ましい。このような溶媒としては特に制限はないが、アルコール系溶媒、プロトン性溶媒、非プロトン性溶媒、ニトリル系溶媒などが好ましく用いられる。反応温度、反応圧力、反応時間は、使用する原料、溶媒などによって異なるが、通常、反応温度は４０～２５０℃、好ましくは５０～２３０℃、より好ましくは６０～２２０℃であり、反応圧力は１～３０ａｔｍ、好ましくは１～５ａｔｍである。

[0076] 本発明に係るイリジウム錯体は、通常の合成反応の後処理に従って処理した後、必要があれば精製してあるいは精製せずに供することができる。後処理の方法としては、例えば、抽出、冷却、水または有機溶媒を添加することによる晶析、反応混合物からの溶媒を留去する操作等を単独あるいは組み合わせて行うことができる。精製の方法としては再結晶、蒸留、昇華あるいはカラムクロマトグラフィー等を単独あるいは組み合わせて行うことができる。

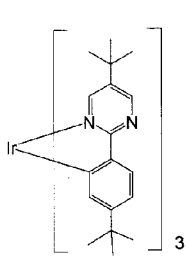
[0077] 以下に、本発明に係る、前記一般式（１）又は（２）で示されるイリジウム錯体の代表例を示すが、本発明はこれらに限定されない。表３～表１２に記載の、—C_3H_7、—C_4H_9、—C_5H_{11}、—C_7H_{15}、—C_8H_{17}、—C_9H_{19}、—$C_{10}H_{21}$、—$C_{12}H_{25}$、—$C_{15}H_{31}$、—$C_{18}H_{37}$は各々直鎖状のアルキル基を表し、—OC_6H_{13}、—OC_7H_{15}は各々直鎖状のアルコキシ基

を表す。

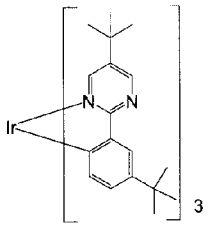
[表3]



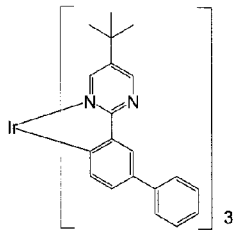
[表4]



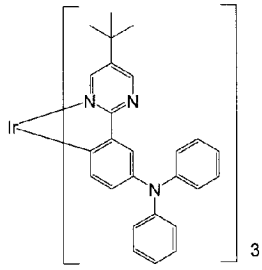
(21)



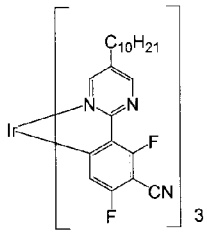
(22)



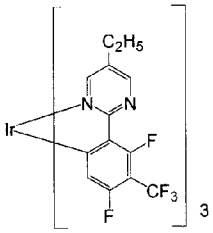
(23)



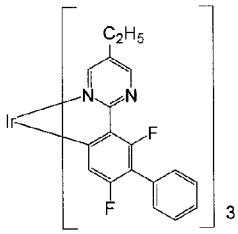
(24)



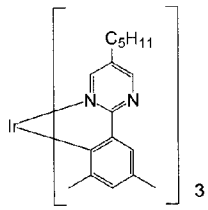
(25)



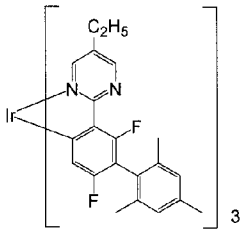
(26)



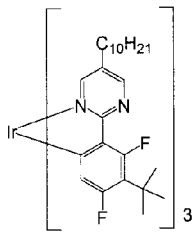
(27)



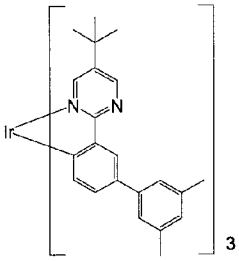
(28)



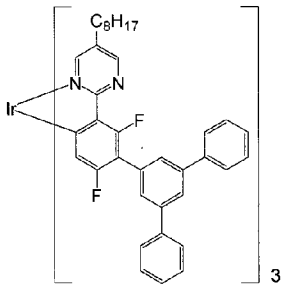
(29)



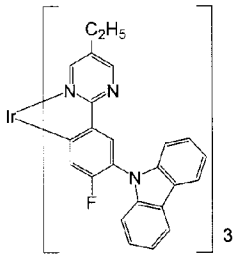
(30)



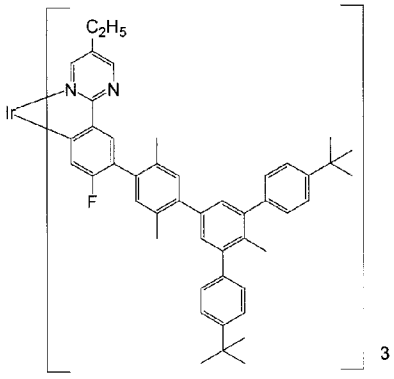
(31)



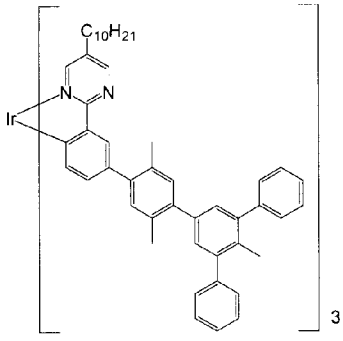
(32)



(33)

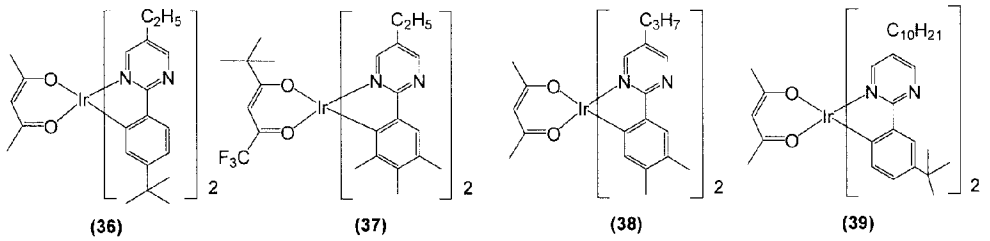


(34)



(35)

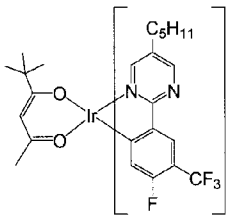
[表5]

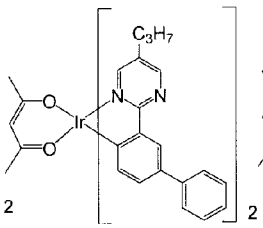

(36)

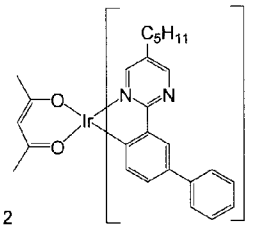
(37)

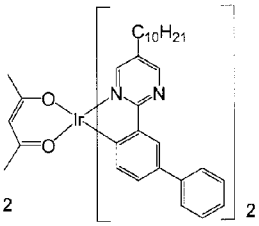
(38)

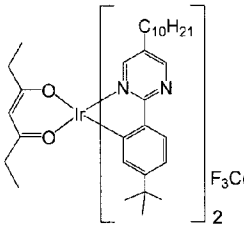
(39)

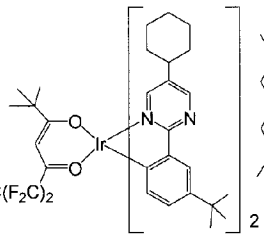

(40)

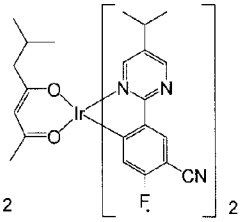

(41)

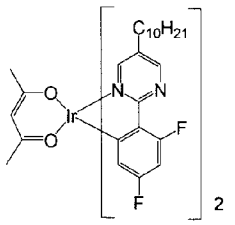

(42)

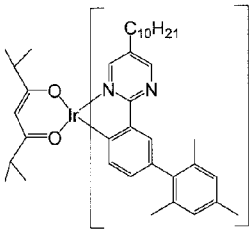

(43)

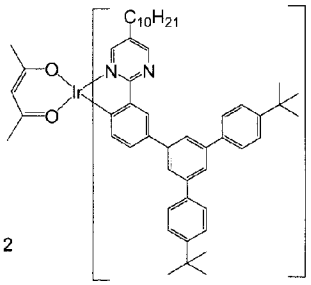

(44)

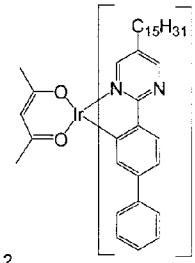

(45)

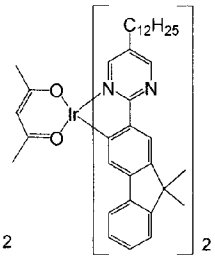

(46)

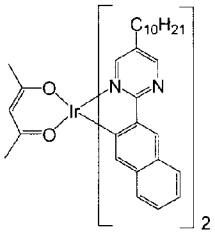

(47)

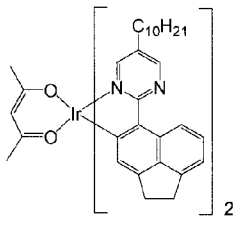

(48)

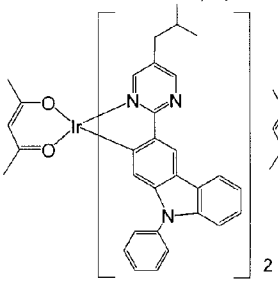

(49)

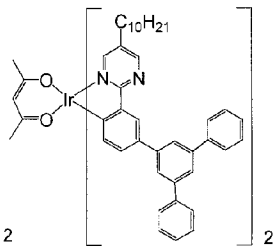

(50)


(51)

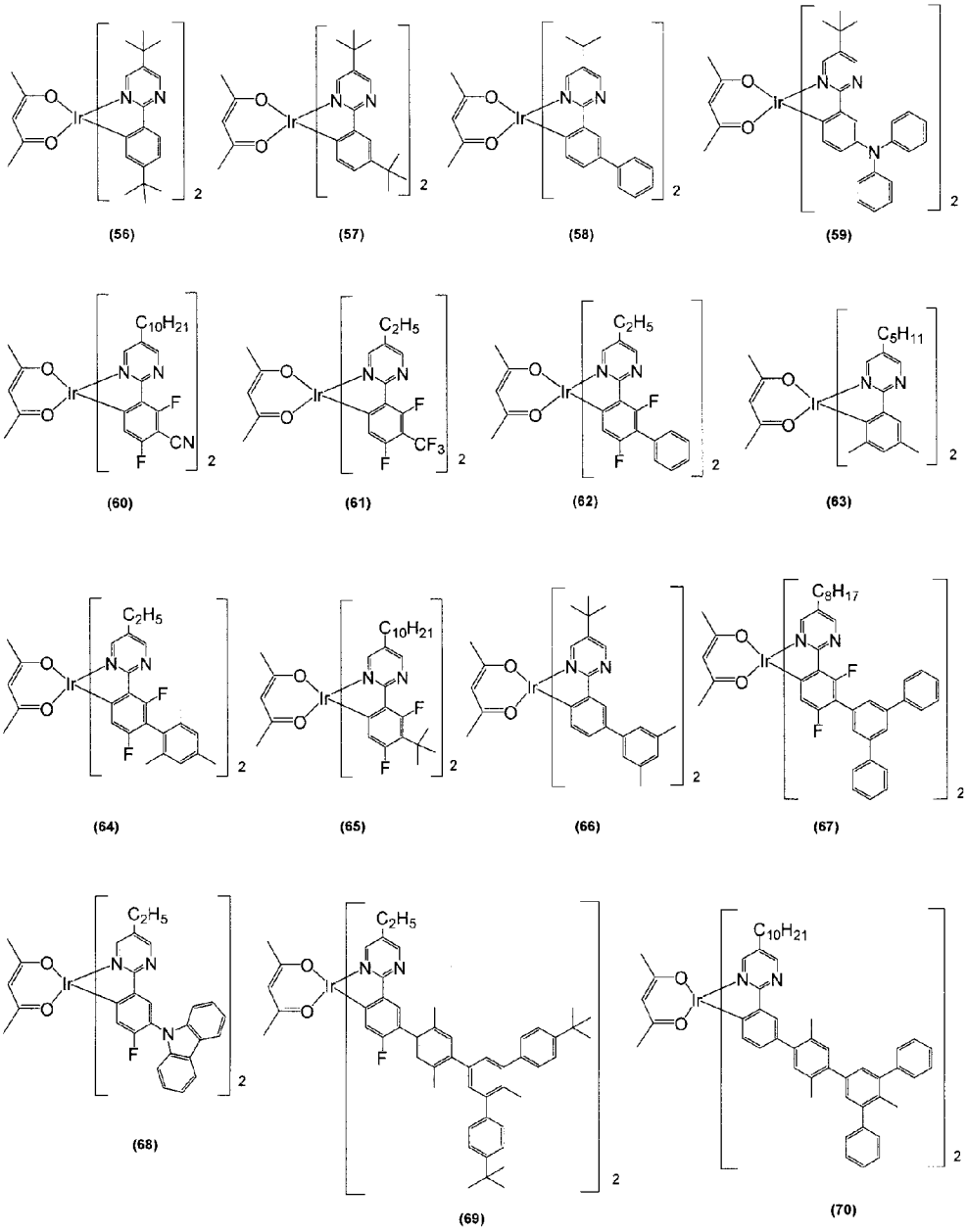

(52)


(53)

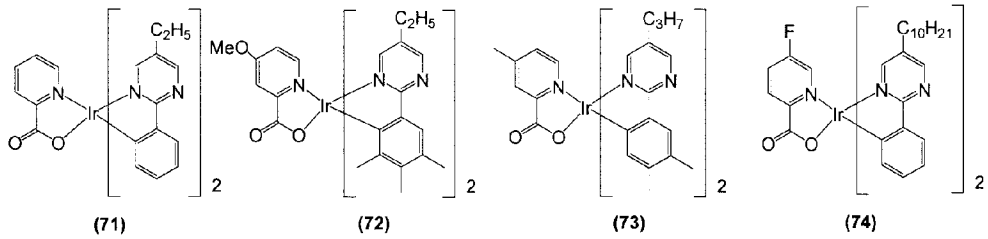

(54)


(55)

[表6]



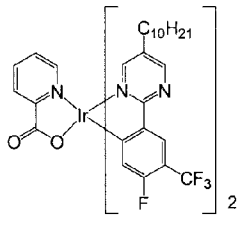
[表7]

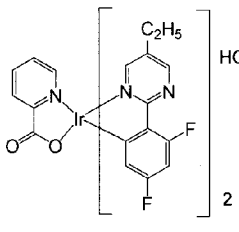

(71)

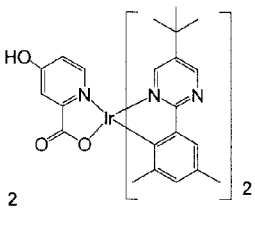
(72)

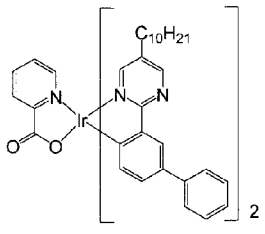
(73)

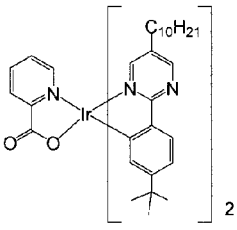
(74)

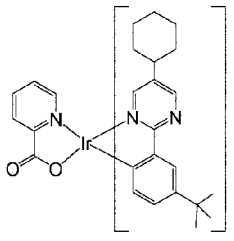

(75)

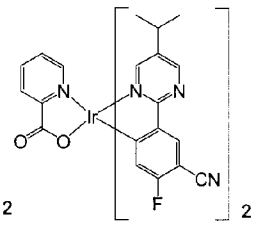

(76)

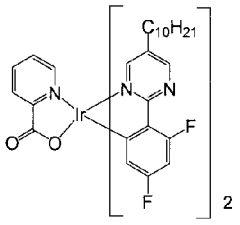

(77)

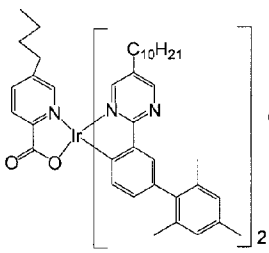

(78)

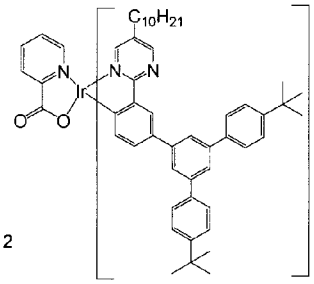

(79)

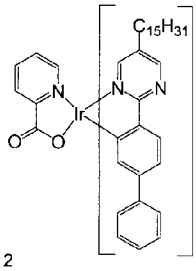

(80)

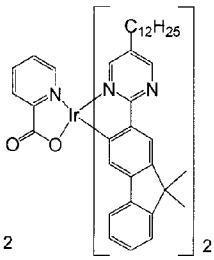

(81)

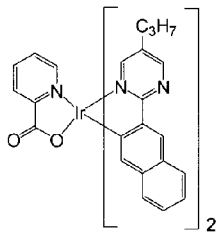

(82)

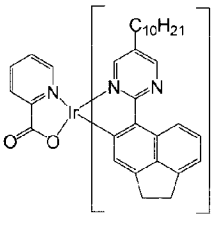

(83)

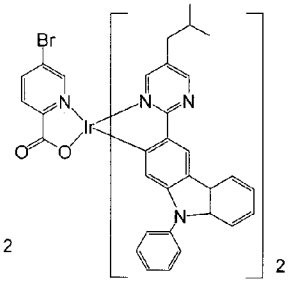

(84)

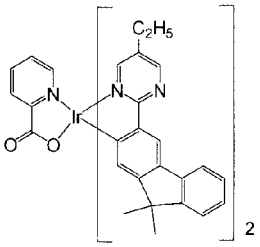

(85)


(86)

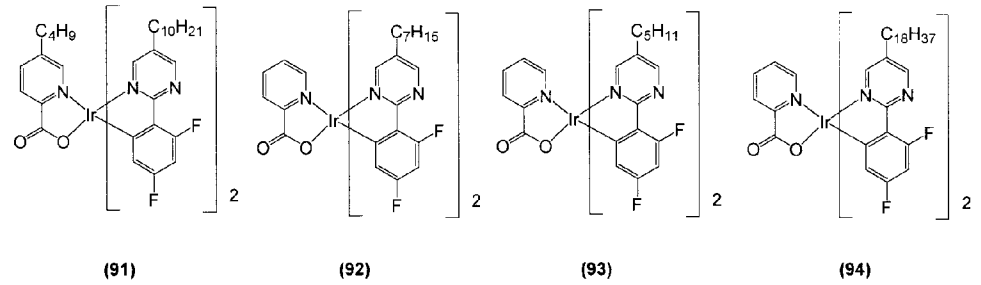

(87)


(88)

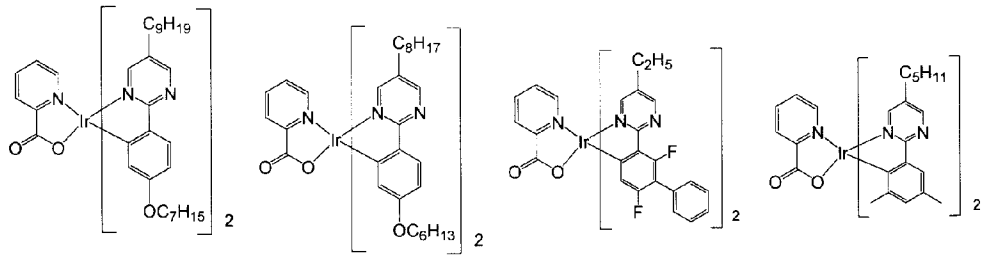

(89)


(90)

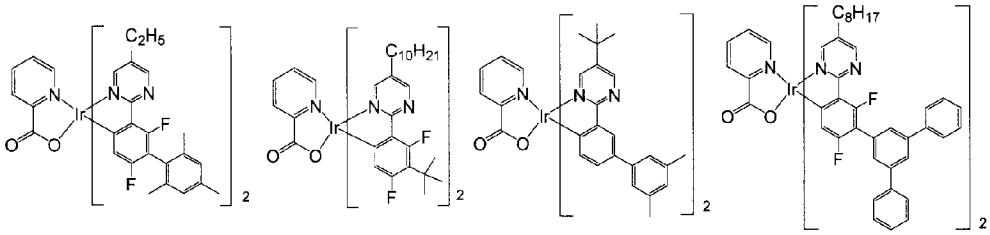
[表8]



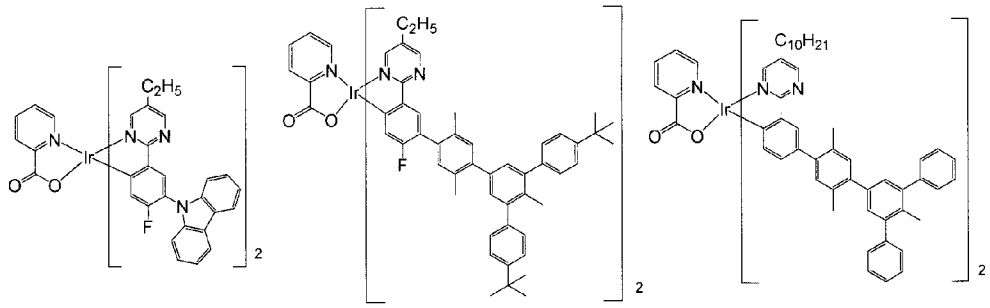
(91) (92) (93) (94)



(95) (96) (97) (98)

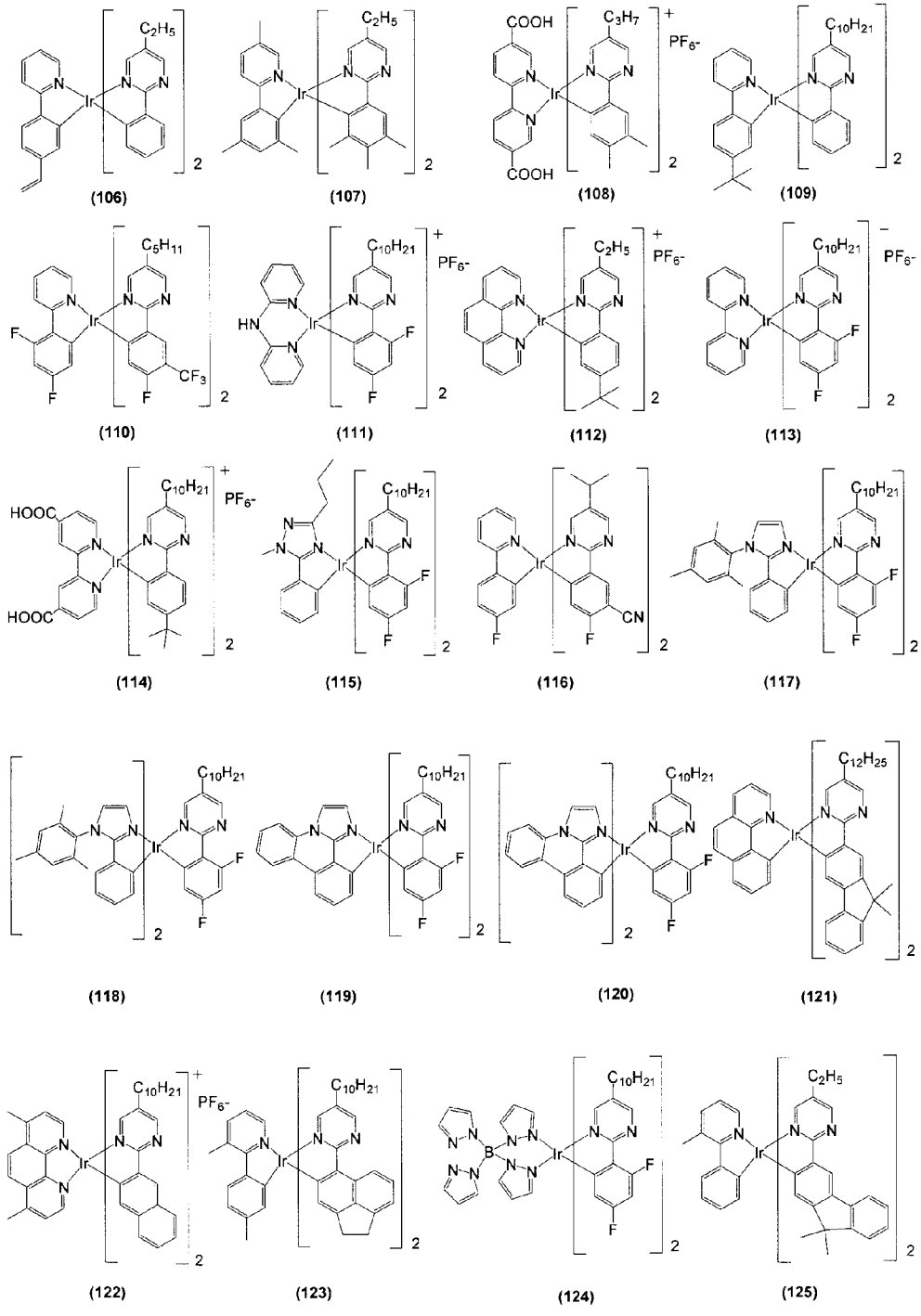


(99) (100) (101) (102)

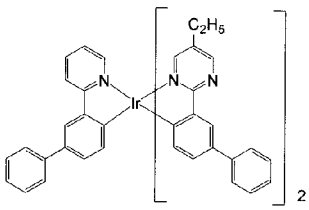


(103) (104) (105)

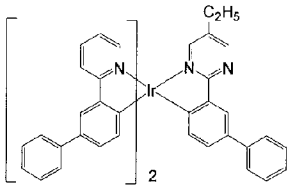
[表9]


(106)
(107)
(108)
(109)
(110)
(111)
(112)
(113)
(114)
(115)
(116)
(117)
(118)
(119)
(120)
(121)
(122)
(123)
(124)
(125)

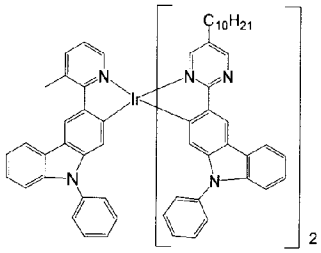
[表10]



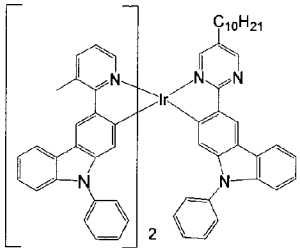
(126)



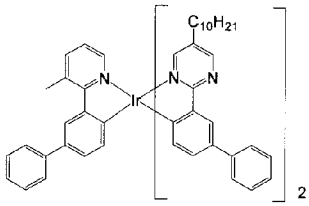
(127)



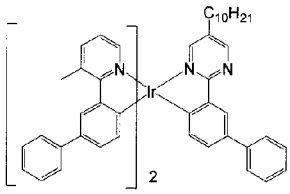
(128)



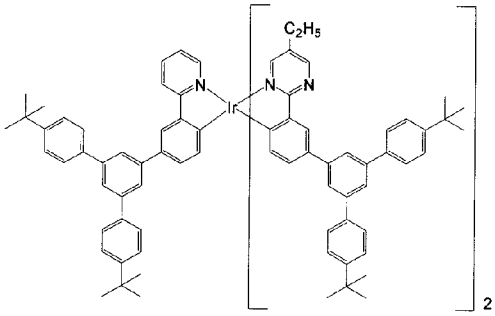
(129)



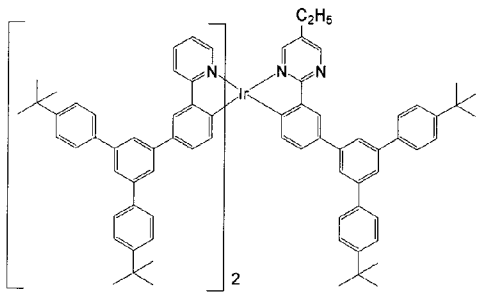
(130)



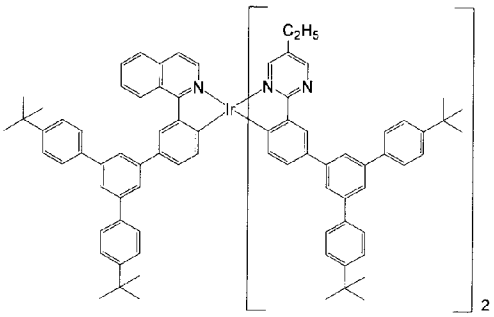
(131)



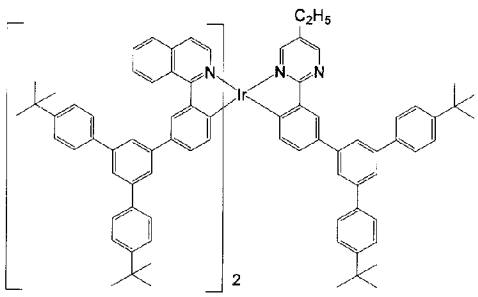
(132)



(133)



(134)



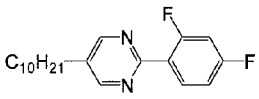
(135)

実施例

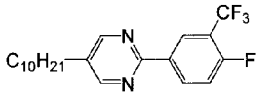
[0078] 次に、本発明を実施例により詳細に説明するが、本発明はこれに限定されない。また、実施例に記載されている化合物（Ａ）～（Ｐ）、（Ａ－１）～

（Ｐ－１）を表１１と表１２に示す。

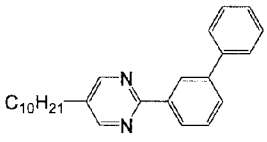
[表11]



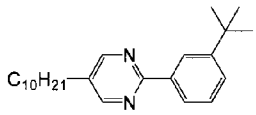
化合物（Ａ）



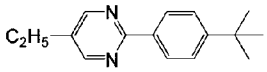
化合物（Ｂ）



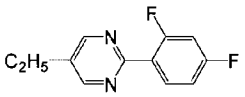
化合物（Ｃ）



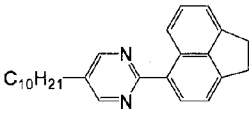
化合物（Ｄ）



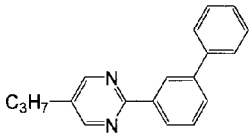
化合物（Ｅ）



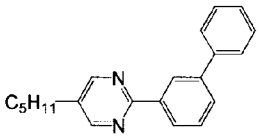
化合物（Ｆ）



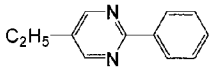
化合物（Ｇ）



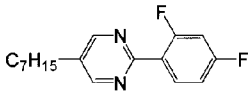
化合物（Ｈ）



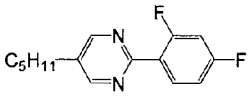
化合物（Ｉ）



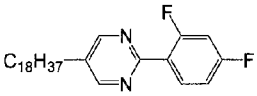
化合物（Ｊ）



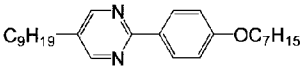
化合物（Ｋ）



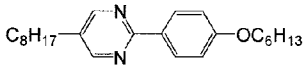
化合物（Ｌ）



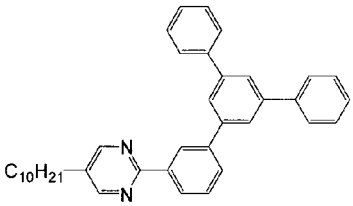
化合物（Ｍ）



化合物（Ｎ）

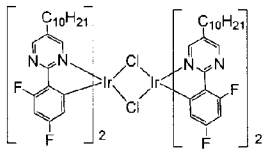


化合物（Ｏ）

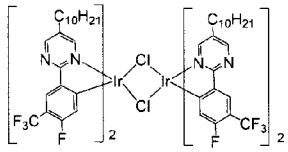


化合物（Ｐ）

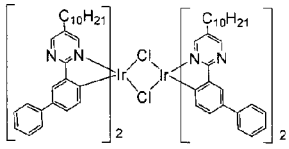
[表12]



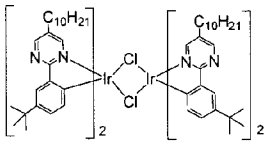
化合物（Ａ－１）



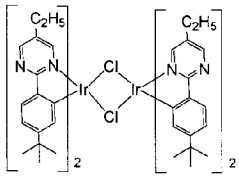
化合物（Ｂ－１）



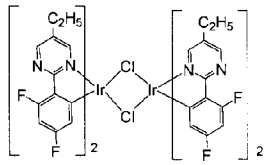
化合物（Ｃ－１）



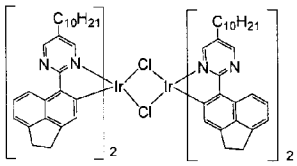
化合物（Ｄ－１）



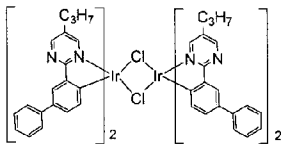
化合物（Ｅ－１）



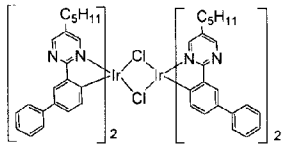
化合物（Ｆ－１）



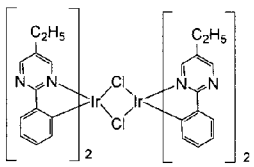
化合物（Ｇ－１）



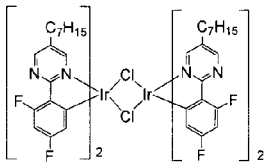
化合物（Ｈ－１）



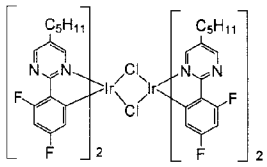
化合物（Ｉ－１）



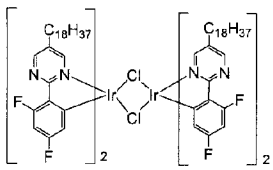
化合物（Ｊ－１）



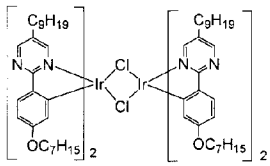
化合物（Ｋ－１）



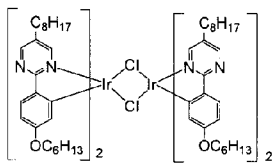
化合物（Ｌ－１）



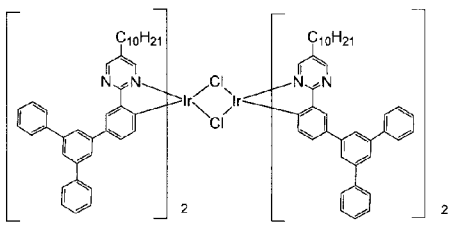
化合物（Ｍ－１）



化合物（Ｎ－１）



化合物（Ｏ－１）



化合物（Ｐ－１）

[0079] 実施例１（本発明化合物（４７）の合成）

＜ステップ１　化合物Ａの合成＞

２－クロロ－５－ｎ－デシルピリミジンを３．８９ｇ、２，４－ジフルオ

ロフェニルボロン酸を２．６５ｇ、１，２－ジメトキシエタンを３５ｍＬ、炭酸カリウムの２Ｍ水溶液４２ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン（０）パラジウム錯体を０．８８ｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で１６時間加熱還流した。有機層を分離回収しシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Ａを４．１ｇ得た。化合物Ａの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）

：δ　８．６６（ｓ，２Ｈ），８．０８－８．１５（ｍ，１Ｈ），６．９１－７．００（ｍ，２Ｈ），２．６３（ｔ，２Ｈ），１．１８－１．６８（ｍ，１６Ｈ），０．８８（ｔ，３Ｈ）．

[0080] ＜ステップ２　化合物（Ａ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を８００ｍｇ、化合物Ａを１．５８ｇ、２－エトキシエタノールを６４ｍｌ、水２２ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１４時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過して化合物（Ａ－１）を得た。単離収率は５７％であった。化合物（Ａ－１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　９．０３（ｓ，４Ｈ），８．７９（ｓ，４Ｈ），６．４２（ｔ，４Ｈ），５．２５（ｄ，４Ｈ），２．５２（ｍ，４Ｈ），２．１１（ｍ，４Ｈ），１．１８－１．７０（ｍ，６４Ｈ），０．８７（ｔ，１２Ｈ）．

[0081] ＜ステップ３　本発明化合物（４７）の合成＞

化合物（Ａ－１）を２５０ｍｇ、アセチルアセトンを７０．３ｍｇ、炭酸ナトリウムを１４９ｍｇ、２－エトキシエタノール５０ｍｌをナスフラスコに入れ、アルゴン雰囲気下でマイクロ波（２４５０ＭＨｚ）を３０分間照射した。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサン

の混合溶媒）により分離精製することで、本発明化合物（４７）を単離収率４８％で得た。本発明化合物（４７）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．７３（ｄ，２Ｈ），８．３８（ｄ，２Ｈ），６．４０（ｄｄ，２Ｈ），５．７１（ｄ，２Ｈ），５．２６（ｓ，１Ｈ），２．６９（ｔ，４Ｈ），１．１８－１．８２（ｍ，３８Ｈ），０．８８（ｔ，６Ｈ）．

[0082] 実施例２（本発明化合物（７５）の合成）

＜ステップ１　化合物Ｂの合成＞

２－クロロ－５－ｎ－デシルピリミジンを２．５ｇ、４－フルオロ－３－（トリフルオロメチル）フェニルボロン酸を２．２４ｇ、１，２－ジメトキシエタンを２２ｍＬ、炭酸カリウムの２Ｍ水溶液２６ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン（０）パラジウム錯体を０．５７ｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で１４時間加熱還流した。有機層を分離回収しシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Ｂを２．５０ｇ得た。化合物Ｂの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．７３（ｄ，１Ｈ），８．６１－８．６５（ｍ，３Ｈ），７．３０（ｄ，１Ｈ），２．６４（ｔ，２Ｈ），１．１８－１．７０（ｍ，１６Ｈ），０．８８（ｔ，３Ｈ）．

[0083] ＜ステップ２　化合物（Ｂ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を１ｇ、化合物Ｂを２．２８ｇ、２－エトキシエタノールを８０ｍｌ、水２８ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１４時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過して化合物（Ｂ－１）を得た。単離収率は５５％であった。化合物（Ｂ－１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　９．０７（ｓ，４Ｈ），８．７９（ｓ，４Ｈ），８．２９（ｄ，４Ｈ），５．６４（ｄ，４Ｈ），２．５９（

m，４Ｈ），２．１７（m,４Ｈ），１．１８－１．７０（m,６４Ｈ），０．８７（ｔ，１２Ｈ）．

[0084] ＜ステップ３　本発明化合物（７５）の合成＞

化合物（Ｂ－１）を２００ｍｇ、ピコリン酸ナトリウムを２４６ｍｇ、２－エトキシエタノール１００ｍｌをナスフラスコに入れ、アルゴン雰囲気下でマイクロ波（２４５０ＭＨｚ）を１０分間照射した。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をジクロロメタン－ヘキサンで再結晶し、本発明化合物（７５）を得た。単離収率は５６％であった。本発明化合物（７５）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．６５－８．７０（m,３Ｈ），８．３７（d,１Ｈ），８．２９（d，１Ｈ），８．２７（d，１Ｈ），８．０２（ｔ，１Ｈ），７．８０（d，１Ｈ），７．５２（ｔ，１Ｈ），７．２６（d，１Ｈ），６．１５（d，１Ｈ），５．９２（d，１Ｈ），２．６３－２．６７（m，２Ｈ），２．４５－２．４９（m，２Ｈ），１．２５－１．６３（m，３２Ｈ），０．８８（ｔ，６Ｈ）．

[0085] 実施例３（本発明化合物（４３）の合成）

＜ステップ１　化合物Ｃの合成＞

２－クロロ－５－ｎ－デシルピリミジンを２．５ｇ、３－ビフェニルボロン酸を２．１４ｇ、１，２－ジメトキシエタンを２２ｍＬ、炭酸カリウムの２Ｍ水溶液２７ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン（０）パラジウム錯体を０．５７ｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で１４時間加熱還流した。有機層を分離回収しシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Ｃを２．５２ｇ得た。化合物Ｃの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．６９（ｓ，１Ｈ），８．６４（ｓ，２Ｈ），８．４０（d，１Ｈ），７．７１（d，３Ｈ），７．５５（ｔ

，１Ｈ），７．４６（ｔ，２Ｈ），７．３６（ｔ，１Ｈ），２．６２（ｔ，２Ｈ），１．１８－１．７０（ｍ，１６Ｈ），０．８８（ｔ，３Ｈ）．

[0086] ＜ステップ２　化合物（Ｃ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を１ｇ、化合物Ｃを２．２１ｇ、２－エトキシエタノールを８０ｍｌ、水２８ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１４時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過して化合物（Ｃ－１）を得た。単離収率は６０％であった。化合物（Ｃ－１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　９．２５（ｄ，４Ｈ），８．７１（ｄ，４Ｈ），８．１８（ｄ，４Ｈ），７．５０（ｄ，８Ｈ），７．３２（ｔ，８Ｈ），７．２３（ｔ，４Ｈ），６．９８（ｄ，４Ｈ），６．０４（ｄ，４Ｈ），２．５４（ｍ，４Ｈ），２．１９（ｍ，４Ｈ），１．１８－１．７０（ｍ，６４Ｈ），０．８６（ｔ，１２Ｈ）．

[0087] ＜ステップ３　本発明化合物（４３）の合成＞

化合物（Ｃ－１）を６００ｍｇ、アセチルアセトンを３１０ｍｇ、炭酸ナトリウムを３２８ｍｇ、２－エトキシエタノール３００ｍｌを、アルゴン雰囲気下１００℃で１６時間反応させた。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、本発明化合物（４３）を単離収率２３％で得た。本発明化合物（４３）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　８．６５（ｄ，２Ｈ），８．５２（ｄ，２Ｈ），８．２１（ｄ，２Ｈ），７．５７（ｄ，４Ｈ），７．３４（ｔ，４Ｈ），７．２３（ｔ，２Ｈ），７．０８（ｄ，２Ｈ），６．４３（ｄ，２Ｈ），５．２５（ｓ，１Ｈ），２．７１（ｔ，４Ｈ），１．１８－１．８３（ｍ，３８Ｈ），０．８７（ｔ，６Ｈ）．

[0088] 実施例４（本発明化合物（３９）の合成）

＜ステップ１　化合物Ｄの合成＞

２－クロロ－５－ｎ－デシルピリミジンを１．５ｇ、ｍ－ｔ－ブチルフェニルボロン酸を１．１５ｇ、１，２－ジメトキシエタンを１３ｍＬ、炭酸カリウムの２Ｍ水溶液１６ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン(０)パラジウム錯体を０．４５ｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で１４時間加熱還流した。有機層を分離回収しシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Ｄを１．５８ｇ得た。化合物Ｄの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ(４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$)：δ　８．６２（ｓ，２Ｈ），８．４７（ｓ，１Ｈ），８．２２（ｄ，１Ｈ），７．５１（ｄ，１Ｈ），７．４２（ｔ，１Ｈ），２．６２（ｔ，２Ｈ），１．１８－１．７０（ｍ，２５Ｈ），０．８８（ｔ，３Ｈ）．

[0089] ＜ステップ２　化合物（Ｄ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を５００ｍｇ、化合物Ｄを１．０５ｇ、２－エトキシエタノールを４０ｍｌ、水１４ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１４時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過して化合物（Ｄ－１）を得た。単離収率は７３％であった。化合物（Ｄ－１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ(４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$)：δ　９．０９（ｄ，４Ｈ），８．６３（ｄ，４Ｈ），７．９０（ｄ，４Ｈ），６．７３（ｄ，４Ｈ），５．８９（ｄ，４Ｈ），２．４９（ｍ，４Ｈ），２．１５（ｍ，４Ｈ），１．１８－１．７０（ｍ，１００Ｈ），０．８６（ｔ，１２Ｈ）．

[0090] ＜ステップ３　本発明化合物（３９）の合成＞

化合物（Ｄ－１）を３００ｍｇ、アセチルアセトンを１６１ｍｇ、炭酸ナトリウムを１７１ｍｇ、２－エトキシエタノール１５０ｍｌをアルゴン雰囲気下１００℃で１６時間反応させた。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をシリカゲルクロマトグラフィー（溶離

液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、本発明化合物（３９）を単離収率４６％で得た。本発明化合物（３９）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　８．５８（ｄ，２Ｈ），８．４８（ｄ，２Ｈ），７．９７（ｄ，２Ｈ），６．８８（ｄ，２Ｈ），６．２８（ｄ，２Ｈ），５．１９（ｓ，１Ｈ），２．６５（ｔ，４Ｈ），１．１８－１．７８（ｍ，５６Ｈ），０．８８（ｔ，６Ｈ）．

[0091] 実施例５（本発明化合物（３６）の合成）

＜ステップ１　化合物Ｅの合成＞

２－クロロ－５－エチルピリミジンを５ｇ、４－ｔｅｒｔ－ブチルフェニルボロン酸を６．８７ｇ、１，２－ジメトキシエタンを４０ｍＬ、炭酸カリウムの２Ｍ水溶液４８ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン（０）パラジウム錯体を２．０ｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で１６時間加熱還流した。有機層を分離回収しシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Ｅを４．３ｇ得た。化合物Ｅの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　８．６３（ｓ，２Ｈ），８．３３（ｄ，２Ｈ），７．５０（ｄ，２Ｈ），２．６６（ｑ，２Ｈ），１．３７（ｓ，９Ｈ），１．３０（ｔ，３Ｈ）．

[0092] ＜ステップ２　化合物（Ｅ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を１ｇ、化合物Ｅを１．４４ｇ、２－エトキシエタノールを８０ｍｌ、水２８ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１４時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過して化合物（Ｅ－１）を得た。単離収率は９２％であった。化合物（Ｅ－１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　９．２８（ｄ，４Ｈ），８．６

５（ｄ，４Ｈ），７．７８（ｄ，４Ｈ），６．８９（ｄ，４Ｈ），５．９７（ｄ，４Ｈ），２．５０（ｍ，４Ｈ），２．２０（ｍ，４Ｈ），１．２４（ｔ，１２Ｈ），０．９７（ｓ，３６Ｈ）．

[0093] ＜ステップ３　本発明化合物（３６）の合成＞

化合物（Ｅ－１）を３００ｍｇ、アセチルアセトンを２１２ｍｇ、炭酸ナトリウムを２２５ｍｇ、２－エトキシエタノール１２０ｍｌをアルゴン雰囲気下１００℃で１６時間反応させた。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、本発明化合物（３６）を単離収率３７％で得た。本発明化合物（３６）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　８．５９（ｄ，２Ｈ），８．５０（ｄ，２Ｈ），７．７９（ｄ，２Ｈ），６．９１（ｄ，２Ｈ），６．２３（ｄ，２Ｈ），５．２０（ｓ，１Ｈ），２．６６－２．７８（ｍ，４Ｈ），１．８１（ｓ，６Ｈ），１．３３（ｔ，６Ｈ），１．０７（ｓ，１８Ｈ）．

[0094] 実施例６（本発明化合物（７６）の合成）

＜ステップ１　化合物Ｆの合成＞

２－クロロ－５－エチルピリミジンを１０ｇ、２，４－ジフルオロフェニルボロン酸を１２．２ｇ、１，２－ジメトキシエタンを８０ｍＬ、炭酸カリウムの２Ｍ水溶液９６ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン(０)パラジウム錯体を４．１ｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で１６時間加熱還流した。有機層を分離回収し溶媒を減圧留去した後に得られた固体をシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Ｆを１３．３ｇ得た。化合物Ｆの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　８．７０（ｓ，２Ｈ），８．０８（ｍ，１Ｈ），６．９２－７．０１（ｍ，２Ｈ），２．７０（ｑ，２Ｈ），１

．３２（ｔ，３Ｈ）．

[0095] ＜ステップ２　化合物（Ｆ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を１ｇ、化合物Ｆを１．３１ｇ、２－エトキシエタノールを８０ｍｌ、水２８ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１４時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過して化合物（Ｆ－１）を得た。単離収率は８７％であった。化合物（Ｆ－１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　９．１０（ｄ，４Ｈ），８．８３（ｄ，４Ｈ），６．４３（ｄｄ，４Ｈ），５．２４（ｄ，４Ｈ），２．４８－２．５８（ｍ，４Ｈ），２．２３－２．３３（ｍ，４Ｈ），１．２５（ｔ，１２Ｈ）．

[0096] ＜ステップ３　本発明化合物（７６）の合成＞

化合物（Ｆ－１）を２００ｍｇ、ピコリン酸ナトリウムを１０９ｍｇ、２－エトキシエタノール８０ｍｌをナスフラスコに入れ、アルゴン雰囲気下でマイクロ波（２４５０ＭＨｚ）を１０分間照射した。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をジクロロメタン－ヘキサンで再結晶し、本発明化合物（７６）を得た。単離収率は９４％であった。本発明化合物（７６）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　８．７２－８．７５（ｍ，３Ｈ），８．３７（ｄ，１Ｈ），８．０２（ｔ，１Ｈ），７．８４（ｄ，１Ｈ），７．５０（ｄｄ，１Ｈ），７．２８（ｄ，１Ｈ），６．５４（ｄｄ，１Ｈ），６．４７（ｄｄ，１Ｈ），５．８４（ｄ，１Ｈ），５．６０（ｄ，１Ｈ），２．６７－２．７４（ｍ，２Ｈ），２．４９－２．５５（ｍ，２Ｈ），１．２８（ｔ，３Ｈ），１．１２（ｔ，３Ｈ）．

[0097] 実施例７（本発明化合物（５３）の合成）

＜ステップ１　化合物Ｇの合成＞

２－クロロ－５－ｎ－デシルピリミジンを１．５ｇ、アセナフテン－５－ボロン酸を１．２８ｇ、１，２－ジメトキシエタンを１３ｍＬ、炭酸カリウ

ムの２M水溶液１６ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン(０)パラジウム錯体を０．３４ｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で１２時間加熱還流した。有機層を分離回収しシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Ｇを得た。単離収率は６７%であった。化合物Ｇの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}H—NMR(４００MHｚ／ＣＤＣＬ$_3$)：δ　８．７７（ｓ，１Ｈ），８．６６（ｓ，２Ｈ），８．３３（ｄ，１Ｈ），７．５１（ｄｄ，１Ｈ），７．３４（ｄ，１Ｈ），７．２７（ｄ，１Ｈ），３．３４（ｓ，４Ｈ），２．５３（ｔ，２Ｈ），１．２５－１．６４（ｍ，１６Ｈ），０．８７（ｔ，３Ｈ）．

[0098] ＜ステップ２　化合物（Ｇ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を５００ｍｇ、化合物Ｇを１．１１ｇ、２－エトキシエタノールを４０ｍｌ、水１４ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１２時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過して化合物（Ｇ－１）を得た。単離収率は７４%であった。

[0099] ＜ステップ３　本発明化合物（５３）の合成＞

化合物（Ｇ－１）を５００ｍｇ、アセチルアセトンを２５８ｍｇ、炭酸ナトリウムを２７３ｍｇ、２－エトキシエタノール２００ｍｌを、アルゴン雰囲気下１００℃で１２時間反応させた。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、本発明化合物（５３）を単離収率２４%で得た。本発明化合物（５３）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}H—NMR(４００MHｚ／ＣＤＣＬ$_3$)：δ　９．２９（ｄ，２Ｈ），８．７３（ｓ，２Ｈ），８．４８（ｓ，２Ｈ），７．４７（ｔ，２Ｈ），７．０９（ｔ，２Ｈ），６．４１（ｓ，２Ｈ），５．２３（ｓ，１Ｈ），２．９９－３

．１８（ｍ、８Ｈ），２．６６（ｔ，４Ｈ），１．２６－１．７８（ｍ，３８Ｈ），０．８８（ｔ，６Ｈ）．

[0100] 実施例８（本発明化合物（１２）の合成）

化合物（Ａ－１）を５００ｍｇ、ＡｇＣＦ$_3$ＳＯ$_3$を１５２ｍｇ、アセトニトリル２５０ｍｌを、アルゴン雰囲気下で１６時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、セライト層を通してろ過し、ろ液を減圧濃縮し、ＮＨ$_4$ＰＦ$_6$飽和水溶液を加えた。析出した固体をろ過し中間体を得た。引き続きこの中間体を２５０ｍｇ、化合物（Ａ）を１５４ｍｇ、エチレングリコール１０ｍｌを、アルゴン雰囲気下、１９０℃で１６時間加熱反応させた。析出した固体をシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、本発明化合物（１２）を単離収率４０％で得た。メリジオナル体とフェイシャル体が得られた。本発明化合物（１２）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

（メリジオナル体のＮＭＲデータ）

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．６８（ｄ，１Ｈ），８．５８（ｓ，２Ｈ），７．９６（ｄ，１Ｈ），７．８１（ｄ，１Ｈ），７．４２（ｄ，１Ｈ），６．４７－６．５５（ｍ，３Ｈ），６．３９（ｄ，１Ｈ），５．９９（ｄ，１Ｈ），５．７８（ｄ，１Ｈ），２．４０－２．４８（ｍ，６Ｈ），１．２０－１．４７（ｍ，４８Ｈ），０．８８（ｔ，９Ｈ）．

（フェイシャル体のＮＭＲデータ）

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．６７（ｄ，３Ｈ），７．４２（ｄ，３Ｈ），６．４６（ｄｄ，３Ｈ），６．２７（ｄ，３Ｈ），２．４０－２．４８（ｍ，６Ｈ），０．８７－１．４６（ｍ，５７Ｈ）．

また溶媒（クロロホルム、トルエン）に対する溶解性を確認するために、０．１ｗｔ％の溶液を作製し、目視により確認したところ、完全に溶解することがわかった。

[0101] 実施例９（本発明化合物（８２）の合成）

化合物（Ａ－１）を１１１ｍｇ、ピコリン酸ナトリウムを４５ｍｇ、２－

エトキシエタノール４０ｍｌをナスフラスコに入れ、アルゴン雰囲気下でマイクロ波（２４５０ＭＨｚ）を１０分間照射した。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をジクロロメタンーヘキサンで再結晶し、本発明化合物（８２）を得た。単離収率は７４％であった。本発明化合物（８２）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．６８－８．７２（ｍ，３Ｈ），８．３６（ｄ，１Ｈ），８．０１（ｔ，１Ｈ），７．８３（ｄ，１Ｈ），７．４９（ｄｄ，１Ｈ），７．２６（ｄ，１Ｈ），６．５４（ｄｄ，１Ｈ），６．４７（ｄｄ，１Ｈ），５．８３（ｄ，１Ｈ），５．６０（ｄ，１Ｈ），２．６０－２．６７（ｍ，２Ｈ），２．３９－２．４８（ｍ，２Ｈ），１．２３－１．６０（ｍ，３２Ｈ），０．８８（ｔ，６Ｈ）．

[0102] 実施例１０（本発明化合物（１１１）の合成）

化合物（Ａ－１）を９０ｍｇ、２，２’－ジピリジルアミンを２９ｍｇ、２－エトキシエタノール３０ｍｌをナスフラスコに入れ、アルゴン雰囲気下でマイクロ波（２４５０ＭＨｚ）を５分間照射した。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し、ＮＨ$_4$ＰＦ$_6$飽和水溶液を添加し固体を得た。この固体をジクロロメタンとヘキサンで再結晶し、本発明化合物（１１１）を単離収率６９％で得た。

[0103] 実施例１１（本発明化合物（１１３）の合成）

化合物（Ａ－１）を９０ｍｇ、２，２’－ビピリジンを２６ｍｇ、２－エトキシエタノール３０ｍｌをナスフラスコに入れ、アルゴン雰囲気下でマイクロ波（２４５０ＭＨｚ）を５分間照射した。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し、ＮＨ$_4$ＰＦ$_6$飽和水溶液を添加し固体を得た。この固体をジクロロメタンとヘキサンで再結晶し、本発明化合物（１１３）を単離収率７２％で得た。本発明化合物（１１３）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　９．０５（ｄ，２Ｈ），８．７３（ｓ，２Ｈ），８．２９（ｔ，２Ｈ），７．９６（ｄ，２Ｈ），７．５４（ｔ

，２Ｈ），７．４３（ｓ，２Ｈ），６．６３（ｔ，２Ｈ），５．７１（ｄ，２Ｈ），２．４９（ｔ，４Ｈ），１．２１－１．５９（ｍ，３２Ｈ），０．８８（ｔ，６Ｈ）．

[0104] 実施例１２（本発明化合物（４１）の合成）

＜ステップ１　化合物Ｈの合成＞

２－クロロ－５－ｎ－プロピルピリミジンを３ｇ、３－ビフェニルボロン酸を４．１７ｇ、１，２－ジメトキシエタンを１９ｍＬ、炭酸カリウムの２Ｍ水溶液２３ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン（０）パラジウム錯体を１．１１ｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で１４時間加熱還流した。有機層を分離回収しシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Ｈを３．８１ｇ得た。化合物Ｈの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　８．６８（ｓ，１Ｈ），８．６５（ｓ，２Ｈ），８．４０（ｄ，１Ｈ），７．７１（ｄ，３Ｈ），７．５６（ｔ，１Ｈ），７．４６（ｔ，２Ｈ），７．３６（ｔ，１Ｈ），２．６１（ｔ，２Ｈ），１．７０（ｍ，２Ｈ），１．００（ｔ，３Ｈ）．

[0105] ＜ステップ２　化合物（Ｈ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を５００ｍｇ、化合物Ｈを８７１ｍｇ、２－エトキシエタノールを４０ｍｌ、水１４ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１４時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過して化合物（Ｈ－１）を得た。単離収率は６８％であった。化合物（Ｈ－１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　９．２６（ｄ，４Ｈ），８．７２（ｄ，４Ｈ），８．１９（ｄ，４Ｈ），７．５１（ｄ，８Ｈ），７．３３（ｔ，８Ｈ），７．２４（ｔ，４Ｈ），６．９８（ｄ，４Ｈ），６．０５（ｄ，４Ｈ），２．５４（ｍ，４Ｈ），２．１７（ｍ，４Ｈ），１．６７（ｍ，８Ｈ），１．０３（ｔ，１２Ｈ）．

[0106] ＜ステップ３　本発明化合物（４１）の合成＞

化合物（Ｈ－１）を３９０ｍｇ、アセチルアセトンを２５２ｍｇ、炭酸ナトリウムを２６７ｍｇ、２－エトキシエタノール１５０ｍｌをアルゴン雰囲気下１００℃で１６時間反応させた。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、本発明化合物（４１）を単離収率５３％で得た。本発明化合物（４１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．６５（ｄ，２Ｈ），８．５２（ｄ，２Ｈ），８．２１（ｄ，２Ｈ），７．５７（ｄ，４Ｈ），７．３４（ｔ，４Ｈ），７．２２（ｔ，２Ｈ），７．０９（ｄ，２Ｈ），６．４３（ｄ，２Ｈ），５．２６（ｓ，１Ｈ），２．７０（ｔ，４Ｈ），１．６７－１．８３（ｍ，１０Ｈ），１．０３（ｔ，６Ｈ）．

[0107] 実施例１３（本発明化合物（４２）の合成）

＜ステップ１　化合物Ｉの合成＞

２－クロロ－５－ｎ－ペンチルピリミジンを３ｇ、３－ビフェニルボロン酸を３．５４ｇ、１，２－ジメトキシエタンを１９ｍＬ、炭酸カリウムの２Ｍ水溶液２３ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン（０）パラジウム錯体を０．９３９ｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で１４時間加熱還流した。有機層を分離回収しシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Ｉを３．６５ｇ得た。化合物Ｉの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．６９（ｓ，１Ｈ），８．６４（ｓ，２Ｈ），８．４０（ｄ，１Ｈ），７．７１（ｄ，３Ｈ），７．５５（ｔ，１Ｈ），７．４６（ｔ，２Ｈ），７．３６（ｔ，１Ｈ），２．６２（ｔ，２Ｈ），１．３１－１．７０（ｍ，６Ｈ），０．９０（ｔ，３Ｈ）．

[0108] ＜ステップ２　化合物（Ｉ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を５００ｍｇ、化合物Ｉを９０１ｍｇ、２－エトキシエタノールを４０ｍｌ、水１４ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１４時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過して化合物（Ｉ－１）を得た。単離収率は７２％であった。化合物（Ｉ－１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　９．２６（ｄ，４Ｈ），８．７１（ｄ，４Ｈ），８．１９（ｄ，４Ｈ），７．５０（ｄ，８Ｈ），７．３３（ｔ，８Ｈ），７．２３（ｄ，４Ｈ），６．９８（ｄ，４Ｈ），６．０５（ｄ，４Ｈ），２．５４（ｍ，４Ｈ），２．１９（ｍ，４Ｈ），１．３６－１．６３（ｍ，２４Ｈ），０．８６（ｔ，１２Ｈ）．

[0109] ＜ステップ３　本発明化合物（４２）の合成＞

化合物（Ｉ－１）を３７８ｍｇ、アセチルアセトンを２２８ｍｇ、炭酸ナトリウムを２４１ｍｇ、２－エトキシエタノール１５０ｍｌを、アルゴン雰囲気下１００℃で１６時間反応させた。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、本発明化合物（４２）を単離収率４８％で得た。本発明化合物（４２）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　８．６５（ｄ，２Ｈ），８．５２（ｄ，２Ｈ），８．２１（ｄ，２Ｈ），７．５７（ｄ，４Ｈ），７．３４（ｔ，４Ｈ），７．２３（ｔ，２Ｈ），７．０８（ｄ，２Ｈ），６．４３（ｄ，２Ｈ），５．２５（ｓ，１Ｈ），２．７１（ｔ，４Ｈ），１．３５－１．８３（ｍ，１８Ｈ），０．９３（ｔ，６Ｈ）．

[0110] 実施例１４（本発明化合物（１２４）の合成）

化合物（Ａ－１）を５００ｍｇ、ＡｇＣＦ$_{3}$ＳＯ$_{3}$を１５２ｍｇ、アセトニトリル２５０ｍｌを、アルゴン雰囲気下で１６時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、セライト層を通してろ過し、ろ液を減圧濃縮し、Ｎ

H_4PF_6飽和水溶液を加えた。析出した固体をろ過し中間体を得た。引き続きこの中間体を４５０ｍｇ、テトラキス（１－ピラゾリル）ボレートのカリウム塩を２６５ｍｇ、アセトニトリル１５０ｍｌを、アルゴン雰囲気下、７２時間加熱還流させた。反応後の溶液から析出した固体をシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとメタノールの混合溶媒）により分離精製することで、本発明化合物（１２４）を単離収率４０%で得た。本発明化合物（１２４）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．５５（ｓ，２Ｈ），７．６６（ｓ，２Ｈ），７．１４－７．１７（ｍ，４Ｈ），６．９９（ｓ，２Ｈ），６．５３（ｄｄ，２Ｈ），６．２７（ｓ，２Ｈ），６．１７（ｓ，２Ｈ），６．０３（ｓ，２Ｈ），５．６１（ｄ，２Ｈ），２．３４－２．４９（ｍ，４Ｈ），１．２３－１．６３（ｍ，３２Ｈ），０．８８（ｔ，６Ｈ）．

[0111] 実施例１５（本発明化合物（１）の合成）

＜ステップ１　化合物Ｊの合成＞

２－クロロ－５－エチルピリミジンを３ｇ、フェニルボロン酸を２．８２ｇ、１，２－ジメトキシエタンを３０ｍＬ、炭酸カリウムの２Ｍ水溶液２５ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン（０）パラジウム錯体を１．２２ｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で５２．５時間加熱還流した。有機層を分離回収しシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Ｊを２．８７ｇ得た。化合物Ｊの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．５９（ｓ，２Ｈ），８．４３（ｄ，２Ｈ），７．４１－７．５０（ｍ，３Ｈ），２．５８（ｑ，２Ｈ），１．２３（ｔ，３Ｈ）．

[0112] ＜ステップ２　化合物（Ｊ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を３００ｍｇ、化合物Ｊを３２８ｍｇ、２－エトキシエタノールを２０ｍｌ、水７ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰

囲気下で１７時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過して化合物（Ｊ－１）を得た。単離収率は８６％であった。化合物（Ｊ－１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　９．２５（ｓ，４Ｈ），８．６８（ｓ，４Ｈ），７．８８（ｄ，４Ｈ），６．８３（ｔ，４Ｈ），６．６８（ｔ，４Ｈ），５．８７（ｄ，４Ｈ），２．２３－２．５６（ｍ，８Ｈ），１．２５（ｔ，１２Ｈ）．

[0113] ＜ステップ３　本発明化合物（１）の合成＞

化合物（Ｊ－１）を１３９ｍｇ、ＡｇＣＦ$_3$ＳＯ$_3$を６０ｍｇ、化合物Ｊを２１５ｍｇ、アルゴン雰囲気下で４１時間加熱還流した。室温まで冷却した後、ジクロロメタン５０ｍｌを加え、セライト層を通してろ過することで不溶物を取り除いた。その後、ろ液を減圧濃縮することで得られた固体をシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンと酢酸エチルの混合溶媒）により分離精製することで、本発明化合物（１）を単離収率２０％で得た。本発明化合物（１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．５７（ｓ，３Ｈ），８．０５（ｄ，３Ｈ），７．５２（ｓ，３Ｈ），６．９９（ｔ，３Ｈ），６．９２（ｔ，３Ｈ），６．８１（ｄ，３Ｈ），２．４９（ｑ，６Ｈ），１．１３（ｔ，９Ｈ）．

[0114] 実施例１６（本発明化合物（９１）の合成）

化合物（Ａ－１）を３００ｍｇ、５－ブチルピコリン酸を１５１ｍｇ、炭酸ナトリウムを１７８ｍｇ、２－エトキシエタノール１００ｍｌをナスフラスコに入れ、アルゴン雰囲気下でマイクロ波（２４５０ＭＨｚ）を１０分間照射した。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をジクロロメタン－ヘキサンで再結晶し、本発明化合物（９１）を得た。単離収率は７０％であった。本発明化合物（９１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．６８－８．７２（ｍ，３Ｈ

），８．２５（ｄ，１Ｈ），７．７９（ｄ，１Ｈ），７．５５（ｓ，１Ｈ），７．２４（ｓ，１Ｈ），６．５５（ｔ，１Ｈ），６．４６（ｔ，１Ｈ），５．８３（ｄ，１Ｈ），５．６０（ｄ，１Ｈ），２．６２－２．６５（ｍ，２Ｈ），２．５５－２．５９（ｍ，２Ｈ），２．３９－２．４９（ｍ，２Ｈ），１．２３－１．６１（ｍ，３８Ｈ），０．８８（ｍ，９Ｈ）．

[0115] 実施例１７（本発明化合物（９２）の合成）

＜ステップ１　化合物Ｋの合成＞

２－クロロ－５－ｎ－ヘプチルピリミジンを５ｇ、２，４－ジフルオロフェニルボロン酸を４．０８ｇ、１，２－ジメトキシエタンを５３ｍＬ、炭酸カリウムの２Ｍ水溶液６４ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン(０)パラジウム錯体を１．３６ｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で１６時間加熱還流した。有機層を分離回収しシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Ｋを５．５７ｇ得た。化合物Ｋの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　８．６８（ｓ，２Ｈ），８．０５－８．１１（ｍ，１Ｈ），６．９２－７．０２（ｍ，２Ｈ），２．６４（ｔ，２Ｈ），１．６３－１．７１（ｍ，２Ｈ），１．２６－１．３９（ｍ，８Ｈ），０．８９（ｔ，３Ｈ）．

[0116] ＜ステップ２　化合物（Ｋ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を５００ｍｇ、化合物Ｋを８６５ｍｇ、２－エトキシエタノールを２０ｍｌ、水７ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１２．５時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過し、ジクロロメタン－ヘキサンで再結晶し、化合物（Ｋ－１）を得た。単離収率は７１％であった。化合物（Ｋ－１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　９．０３（ｓ，４Ｈ），８．８

０（ｓ，４Ｈ），６．４３（ｔ，４Ｈ），５．２５（ｄ，４Ｈ），２．４９－２．５６（ｍ，４Ｈ），２．０７－２．１５（ｍ，４Ｈ），１．２６－１．５６（ｍ，４０Ｈ）．０．８６（ｔ，１２Ｈ）．

[0117] ＜ステップ３　本発明化合物（９２）の合成＞

化合物（Ｋ－１）を５００ｍｇ、ピコリン酸ナトリウムを２２５ｍｇ、２－エトキシエタノール１２０ｍｌをナスフラスコに入れ、アルゴン雰囲気下でマイクロ波（２４５０ＭＨｚ）を１０分間照射した。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をジクロロメタン－ヘキサンで再結晶し、本発明化合物（９２）を得た。単離収率は８１％であった。本発明化合物（９２）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．６８－８．７３（ｍ，３Ｈ），８．３６（ｄ，１Ｈ），８．０１（ｔ，１Ｈ），７．８３（ｄ、，１Ｈ），７．５０（ｄｄ，１Ｈ），７．２８（ｄ，１Ｈ），６．５４（ｔ，１Ｈ），６．４７（ｔ，１Ｈ），５．８３（ｄ，１Ｈ），５．６０（ｄ，１Ｈ），２．６２－２．６６（ｍ，２Ｈ），２．４０－２．４９（ｍ，２Ｈ），１．２３－１．６０（ｍ，２０Ｈ），０．８５－０．９０（ｍ，６Ｈ）．

[0118] 実施例１８（本発明化合物（９３）の合成）

＜ステップ１　化合物Ｌの合成＞

２－クロロ－５－ｎ－ペンチルピリミジンを２ｇ、２，４－ジフルオロフェニルボロン酸を１．８８ｇ、１，２－ジメトキシエタンを２５ｍＬ、炭酸カリウムの２Ｍ水溶液３０ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン（０）パラジウム錯体を６２５ｍｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で１６時間加熱還流した。有機層を分離回収しシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Ｌを２．５７ｇ得た。化合物Ｌの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．７１（ｓ，２Ｈ），８．０

５－８．１１（ｍ，１Ｈ），６．９２－７．０１（ｍ，２Ｈ），２．６４（ｔ，２Ｈ），１．６４－１．７１（ｍ，２Ｈ），１．３２－１．４３（ｍ，４Ｈ），０．９３（ｔ，３Ｈ）．

[0119] ＜ステップ２　化合物（Ｌ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を５００ｍｇ、化合物Ｌを０．８１３ｇ、２－エトキシエタノールを２０ｍｌ、水７ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１２．５時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過し、ジクロロメタン－ヘキサンで再結晶し、化合物（Ｌ－１）を得た。単離収率は７９％であった。化合物（Ｌ－１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　９．０３（ｓ，４Ｈ），８．８０（ｓ，４Ｈ），６．４３（ｔ，４Ｈ），５．２６（ｄ，４Ｈ），２．５０－２．５７（ｍ，４Ｈ），２．０７－２．１５（ｍ，４Ｈ），１．２７－１．６５（ｍ，２４Ｈ）．０．８８（ｔ，１２Ｈ）．

[0120] ＜ステップ３　本発明化合物（９３）の合成＞

化合物（Ｌ－１）を３００ｍｇ、ピコリン酸ナトリウムを８３０ｍｇ、２－エトキシエタノール４０ｍｌをナスフラスコに入れ、アルゴン雰囲気下でマイクロ波（２４５０ＭＨｚ）を１０分間照射した。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をジクロロメタン－ヘキサンで再結晶し、本発明化合物（９３）を得た。単離収率は７４％であった。本発明化合物（９３）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　８．６９－８．７３（ｍ，３Ｈ），８．３６（ｄ，１Ｈ），８．０２（ｔ，１Ｈ），７．８３（ｄ，１Ｈ），７．５１（ｄｄ，１Ｈ），７．２８（ｄ，１Ｈ），６．５４（ｔ，１Ｈ），６．４７（ｔ，１Ｈ），５．８４（ｄ，１Ｈ），５．６１（ｄ，１Ｈ），２．６２－２．６６（ｍ，２Ｈ），２．４３－２．４７（ｍ，２Ｈ），１．１９－１．６４（ｍ，１２Ｈ），０．８４－０．９０（ｍ，６Ｈ）．

[0121] 実施例１９（本発明化合物（９４）の合成）

＜ステップ１　化合物Mの合成＞

５－ブロモ－２－クロロピリミジンを３ｇ、オクタデシルボロン酸を４．６３ｇ、トルエンを３５ｍｌ、水を１２ｍｌ、K_3PO_4を７．６３ｇ、Pd_2（ｄｂａ）$_3$を２８４ｍｇ、２－ジシクロヘキシルホスフィノ－２’，６’－ジメトキシビフェニル５０．９ｍｇを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１３時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、セライト層を通してろ過した。ろ液を濃縮して得られた固体を、シリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、中間体を１．０８ｇ得た。上記操作で得られた中間体を１ｇ、２，４－ジフルオロフェニルボロン酸を４７．３ｍｇ、１，２－ジメトキシエタンを１０ｍＬ、炭酸カリウムの２M水溶液９ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン(０)パラジウム錯体を１５．８ｍｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で１５．５時間加熱還流した。有機層を分離回収しシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Mを２５１ｍｇ得た。化合物Mの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．６７（ｓ，２Ｈ），８．０６－８．１３（m，１Ｈ），６．９２－７．０１（m，２Ｈ），２．６４（ｔ，２Ｈ），１．２６－１．７０（m，３２Ｈ），０．８８（ｔ，３Ｈ）．

[0122] ＜ステップ２　化合物（Ｍ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を９０ｍｇ、化合物Mを２３８ｍｇ、２－エトキシエタノールを５．４ｍｌ、水１．８ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１６時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過して化合物（Ｍ－１）を得た。単離収率は５９％であった。化合物（Ｍ－１）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　９．０３（ｓ，４Ｈ），８．８０（ｓ，４Ｈ），６．４２（ｔ，４Ｈ），５．２６（ｄ，４Ｈ），２．４８－

２．５５（m,４H），２．０７－２．１５（m,４H），１．２５－１．６０（m,１２８H），０．８７（ｔ，１２H）．

[0123] ＜ステップ３　本発明化合物（９４）の合成＞

化合物（Ｍ－１）を１７１ｍｇ、ピコリン酸ナトリウムを９３ｍｇ、２－エトキシエタノール１８ｍｌをナスフラスコに入れ、アルゴン雰囲気下でマイクロ波（２４５０ＭＨｚ）を１０分間照射した。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタン）により分離精製することで、本発明化合物（９４）を単離収率６５%で得た。本発明化合物（９４）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　８．６８－８．７２（m,３H），８．３６（d,１H），８．０１（ｔ，１H），７．８３（ｄ，１H），７．５０（ｄｄ，１H），７．２８（ｄ，１H），６．５４（ｄｄ，１H），６．４７（ｄｄ，１H），５．８３（ｄ，１H），５．６０（ｄ，１H），２．６２－２．６６（m，２H），２．４０－２．４９（m，２H），１．２２－１．６７（m，６４H），０．８８（ｔ，６H）．

[0124] 実施例２０（本発明化合物（９５）の合成）

３塩化イリジウムｎ水和物を５００ｍｇ、２－（４－ヘプチルオキシフェニル）－５－ノニルピリジン（化合物Ｎ）を１．４ｇ、２－エトキシエタノールを２０ｍｌ、水７ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１４．５時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過し、ジクロロメタン－ヘキサンで再結晶し、化合物（Ｎ－１）を得た。引き続き、上記操作で得られた化合物（Ｎ－１）に、ピコリン酸ナトリウムを５１４ｍｇ、２－エトキシエタノール１７５ｍｌをナスフラスコに入れ、アルゴン雰囲気下でマイクロ波（２４５０ＭＨｚ）を１０分間照射した。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をジクロロメタン－ヘキサンで再結晶し、本発明化合物（９５）を得た。単離収率は６７%であった。本発明化合物（９５）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以

下に示す。

^{1}H—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．６７（ｓ，１Ｈ），８．５１（ｓ，１Ｈ），８．４８（ｓ，１Ｈ），８．３２（ｄ，１Ｈ），７．８７－７．９３（ｍ，３Ｈ），７．８５（ｄ，１Ｈ）、７．３８（ｔ，１Ｈ），７．２３（ｓ，１Ｈ），６．５７（ｄ、１Ｈ），６．５０（ｄ，１Ｈ），５．９０（ｓ，１Ｈ），５．７３（ｓ，１Ｈ），３．６８－３．７７（ｍ，４Ｈ），２．３６－２．５８（ｍ，４Ｈ），１．２３－１．６４（ｍ，４８Ｈ）、０．８８（ｍ、１２Ｈ）．

[0125] 実施例２１（本発明化合物（９６）の合成）

３塩化イリジウムｎ水和物を５００ｍｇ、２－（４－ヘキシルオキシフェニル）－５－オクチルピリジン（化合物Ｏ）を１．１９ｇ、２－エトキシエタノールを２０ｍｌ、水７ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１７．５時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過し、ジクロロメタン－ヘキサンで再結晶し、化合物（Ｏ－１）を得た。引き続き、上記操作で得られた化合物（Ｏ－１）に、ピコリン酸ナトリウムを５１４ｍｇ、２－エトキシエタノール１６５ｍｌをナスフラスコに入れ、アルゴン雰囲気下でマイクロ波（２４５０ＭＨｚ）を１０分間照射した。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をジクロロメタン－ヘキサンで再結晶し、本発明化合物（９６）を得た。単離収率は６４％であった。本発明化合物（９６）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}H—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．６７（ｓ，１Ｈ），８．５１（ｓ，１Ｈ），８．４８（ｓ，１Ｈ），８．３２（ｄ，１Ｈ），７．８８－７．９３（ｍ，３Ｈ），７．８５（ｄ，１Ｈ），７．３９（ｔ，１Ｈ），７．２３（ｓ，１Ｈ），６．５７（ｄ，１Ｈ），６．５０（ｄ，１Ｈ），５．９０（ｓ，１Ｈ），５．７３（ｓ，１Ｈ），３．６８－３．７７（ｍ，４Ｈ），２．３６－２．５８（ｍ，４Ｈ），１．２３－１．６４（ｍ，４０Ｈ），０．８８（ｍ，１２Ｈ）．

[0126] 実施例２２（本発明化合物（５５）の合成）

＜ステップ１　化合物Ｐの合成＞

５－ブロモ－２－クロロピリミジンを２．５ｇ、３－クロロフェニルボロン酸１．６８７ｇ、１，２－ジメトキシエタンを２５ｍＬ、炭酸カリウムの２Ｍ水溶液２１ｍｌを二口フラスコに入れた。この溶液にアルゴンガスを２０分間通気した後、テトラキストリフェニルホスフィン(０)パラジウム錯体を５６７ｍｇ入れた。この溶液を、オイルバスを用いてアルゴン雰囲気下で１５．５時間加熱還流した。有機層を分離回収しシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、中間体を２．１３ｇ得た。上記操作で得られた中間体を２．１３ｇ、（３，５－ジフェニルフェニル）ボロン酸を３．５３ｇ、トルエンを３４ｍｌ、K_3PO_4を３．１６ｇ、Pd_2（ｄｂａ）$_3$を１１８ｍｇ、２－ジシクロヘキシルホスフィノ－２’，６’－ジメトキシビフェニルを２１２ｍｇ、を二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１７時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、セライト層を通してろ過した。ろ液を濃縮して得られた固体を、シリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、化合物Ｐを０．８１ｇ得た。化合物Ｐの^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_3$）：δ　８．７９（ｓ，１Ｈ），８．６４（ｓ，２Ｈ），８．４５（ｄ，１Ｈ），７．８９（ｓ，２Ｈ），７．８０－７．８２（ｍ，２Ｈ），７．７３（ｄ，４Ｈ），７．５９（ｔ，１Ｈ），７．４８（ｔ，４Ｈ），７．４０（ｄｄ，２Ｈ），２．６２（ｔ，２Ｈ），１．２６－１．６６（ｍ，１６Ｈ），０．８７（ｔ，３Ｈ）．

[0127] ＜ステップ２　化合物（Ｐ－１）の合成＞

３塩化イリジウムｎ水和物を５５ｍｇ、化合物Ｐを１６５ｍｇ、２－エトキシエタノールを４．５ｍｌ、水１．２ｍｌを二口フラスコに入れ、アルゴン雰囲気下で１５時間加熱還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、水を加え生成した固体をろ過して化合物（Ｐ－１）を得た。単離収率は６１％で

あった。

[0128] ＜ステップ３　本発明化合物（５５）の合成＞

化合物（Ｐ－１）を２０６ｍｇ、アセチルアセトンを８０ｍｇ、炭酸ナトリウムを８５．５ｍｇ、２－エトキシエタノール５０ｍｌをアルゴン雰囲気下１００℃で１３．５時間反応させた。反応溶液を室温まで冷却した後、溶媒を減圧濃縮し固体を得た。この固体をシリカゲルクロマトグラフィー（溶離液：ジクロロメタンとヘキサンの混合溶媒）により分離精製することで、本発明化合物（５５）を単離収率３５％で得た。本発明化合物（５５）の^{1}Ｈ－ＮＭＲデータを以下に示す。

^{1}Ｈ—ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣＬ$_{3}$）：δ　８．６６（ｓ，２Ｈ），８．５４（ｓ，２Ｈ），８．３１（ｓ，２Ｈ），７．７７（ｄ，４Ｈ），７．６５－７．６９（ｍ，１０Ｈ），７．４４（ｔ，８Ｈ），７．３５（ｔ，４Ｈ），７．２０（ｄ，２Ｈ），６．４８（ｄ，２Ｈ），５．２７（ｓ，１Ｈ），２．７２（ｔ，４Ｈ），１．２６－１．８５（ｍ，３８Ｈ），０．８６（ｔ，６Ｈ）．

[0129] 次に本発明化合物の発光特性を以下に示す。

[0130] 実施例２３（本発明化合物（１２）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（１２）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０ｎｍ）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：４９７ｎｍ）を示した。発光量子収率は０．７２であった。

[0131] 実施例２４（本発明化合物（３６）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（３６）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０ｎｍ）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：５３２ｎｍ）を示した。発光量子収率は０．６７であった。

[0132] 実施例２５（本発明化合物（３９）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（３９）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：５３９nm）を示した。発光量子収率は０．７３であった。

[0133] 実施例２６（本発明化合物（４３）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（４３）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：５３５nm）を示した。発光量子収率は０．７６であった。

[0134] 実施例２７（本発明化合物（４７）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（４７）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：４８９nm）を示した。発光量子収率は０．５３であった。

[0135] 実施例２８（本発明化合物（５３）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（５３）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：５６７nm）を示した。発光量子収率は０．６８であった。

[0136] 実施例２９（本発明化合物（７５）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（７５）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、

強い発光（発光極大波長：４７０nm）を示した。発光量子収率は０．７４であった。

[0137] 実施例３０（本発明化合物（７６）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（７６）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：４７７nm）を示した。発光量子収率は０．８１であった。

[0138] 実施例３１（本発明化合物（８２）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（８２）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：４７５nm）を示した。発光量子収率は０．８４であった。

[0139] 実施例３２（本発明化合物（１１１）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（１１１）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：４６１nm）を示した。発光量子収率は０．６６であった。

[0140] 実施例３３（本発明化合物（１１３）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（１１３）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：５２３nm）を示した。発光量子収率は０．７１であった。

[0141] 実施例３４（本発明化合物（４１）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（４１）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、

浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：５４０nm）を示した。発光量子収率は０．７６であった。

[0142] 実施例３５（本発明化合物（４２）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（４２）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：５４０nm）を示した。発光量子収率は０．７７であった。

[0143] 実施例３６（本発明化合物（１２４）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（１２４）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：４６３nm）を示した。発光量子収率は０．８８であった。

[0144] 実施例３７（本発明化合物（９１）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（９１）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：４７８nm）を示した。発光量子収率は０．８５であった。

[0145] 実施例３８（本発明化合物（９２）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（９２）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：４７８nm）を示した。発光量子収率は０．８４であった。

[0146] 実施例３９（本発明化合物（９３）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（９３）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：４７６nm）を示した。発光量子収率は０．８４であった。

[0147] 実施例４０（本発明化合物（９４）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（９４）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：４７８nm）を示した。発光量子収率は０．８６であった。

[0148] 実施例４１（本発明化合物（９５）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（９５）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：４９６nm）を示した。発光量子収率は０．６８であった。

[0149] 実施例４２（本発明化合物（９６）のＴＨＦ中での発光）

本発明化合物（９６）をＴＨＦに溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０nm）を測定したところ、強い発光（発光極大波長：４９６nm）を示した。発光量子収率は０．６５であった。

[0150] 実施例４３（本発明化合物（１２）の固体発光）

浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、本発明化合物（１２）について、室温固体状態での発光量子収率（励起波長：３５０nm）を測定したところ、発光量子収率は０．１４であった

。

[0151] 実施例４４（本発明化合物（４７）の固体発光）

浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、本発明化合物（４７）の室温固体状態での発光量子収率（励起波長：３５０nm）を測定したところ、発光量子収率は０．１２であった。

[0152] 実施例４５（本発明化合物（７５）の固体発光）

浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、本発明化合物（７５）の室温固体状態での発光量子収率（励起波長：３５０nm）を測定したところ、発光量子収率は０．２２であった。

[0153] 実施例４６（本発明化合物（７６）の固体発光）

浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、本発明化合物（７６）の室温固体状態での発光量子収率（励起波長：３５０nm）を測定したところ、発光量子収率は０．１８であった。

[0154] 実施例４７（本発明化合物（８２）の固体発光）

浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、本発明化合物（８２）の室温固体状態での発光量子収率（励起波長：３５０nm）を測定したところ、発光量子収率は０．３４であった。

[0155] 実施例４８（本発明化合物（１２４）の固体発光）

浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、本発明化合物（１２４）の室温固体状態での発光量子収率（励起波長：３５０nm）を測定したところ、発光量子収率は０．５１であった。

[0156] 実施例４９（本発明化合物（９２）の固体発光）

浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、本発明化合物（９２）の室温固体状態での発光量子収率（励起波長：３５０nm）を測定したところ、発光量子収率は０．２８であった。

[0157] 実施例５０（本発明化合物（１）の固体発光）

浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、本発明化合物（１）の室温固体状態での発光量子収率（励起波長：３

５０nm）を測定したところ、発光量子収率は０．０４であった。

[0158] 次に本発明化合物のＴＧ測定結果を以下に示す。

[0159] 実施例５１（本発明化合物（２）の熱的安定性）

本発明化合物（２）の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、３８１℃にて５％の重量減少が見られ、５０％の重量減少温度は４５０℃以上であった。本発明化合物（２）は非常に良好な耐熱性を示すことがわかった。

[0160] 実施例５２（本発明化合物（１２）の熱的安定性）

本発明化合物（１２）の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、４００℃にて５％の重量減少が見られ、５０％の重量減少温度は４５０℃以上であった。本発明化合物（１２）は非常に良好な耐熱性を示すことがわかった。

[0161] 実施例５３（本発明化合物（３９）の熱的安定性）

本発明化合物（３９）の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、３２４℃にて５％の重量減少が見られ、５０％の重量減少温度は３９０℃であった。本発明化合物（３９）は非常に良好な耐熱性を示すことがわかった。

[0162] 実施例５４（本発明化合物（４１）の熱的安定性）

本発明化合物（４１）の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、３１５℃にて５％の重量減少が見られ、５０％の重量減少温度は４５０℃以上であった。本発明化合物（４１）は非常に良好な耐熱性を示すことがわかった。

[0163] 実施例５５（本発明化合物（４２）の熱的安定性）

本発明化合物（４２）の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社

島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、３２２℃にて５％の重量減少が見られ、５０％の重量減少温度は４５０℃以上であった。本発明化合物（４２）は非常に良好な耐熱性を示すことがわかった。

[0164] 実施例５６（本発明化合物（４３）の熱的安定性）

本発明化合物（４３）の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、３２４℃にて５％の重量減少が見られ、５０％の重量減少温度は４５０℃以上であった。本発明化合物（４３）は非常に良好な耐熱性を示すことがわかった。

[0165] 実施例５７（本発明化合物（４７）の熱的安定性）

本発明化合物（４７）の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、３４７℃にて５％の重量減少が見られ、５０％の重量減少温度は４５０℃以上であった。本発明化合物（４７）は非常に良好な耐熱性を示すことがわかった。

[0166] 実施例５８（本発明化合物（５３）の熱的安定性）

本発明化合物（５３）の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、３４８℃にて５％の重量減少が見られ、５０％の重量減少温度は４５０℃以上であった。本発明化合物（５３）は非常に良好な耐熱性を示すことがわかった。

[0167] 実施例５９（本発明化合物（７５）の熱的安定性）

本発明化合物（７５）の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、３６４℃にて５％の重量減少が見られ、５０％の重量減少温度は４５０℃以上であった。本発明化合物（７５）は非常に良好な耐熱性を示すことがわかった。

[0168] 実施例６０（本発明化合物（７６）の熱的安定性）

本発明化合物（７６）の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、３６１℃にて５％の重量減少が見られ、５０％の重量減少温度は４５０℃以上であった。本発明化合物（７６）は非常に良好な耐熱性を示すことがわかった。

[0169] 実施例６１（本発明化合物（８２）の熱的安定性）

本発明化合物（８２）の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、３６０℃にて５％の重量減少が見られ、５０％の重量減少温度は４５０℃以上であった。本発明化合物（８２）は非常に良好な耐熱性を示すことがわかった。

[0170] 実施例６２（本発明化合物（９２）の熱的安定性）

本発明化合物（９２）の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、３５８℃にて５％の重量減少が見られ、５０％の重量減少温度は４５０℃以上であった。本発明化合物（９２）は非常に良好な耐熱性を示すことがわかった。

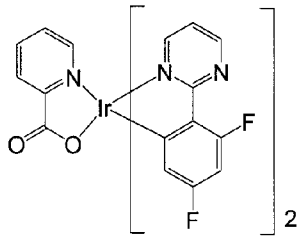
[0171] 一方、前述のイリジウム錯体（式（Ａ））の５０％の重量減少温度については非特許文献１に３７６℃と記載があり、本発明化合物の方が高い熱的安定性を示すことがわかる。

[0172] 比較例１

比較化合物として、前記非特許文献３に記載されている式（Ｄ）で表わされるイリジウム錯体を合成し、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温固体状態での発光量子収率（励起波長：３５０ｎｍ）を測定したところ、発光量子収率は０．１６であった。また、下式（Ｄ）で表わされるイリジウム錯体の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温

速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、３４４℃にて５％の重量減少が見られた。

[化14]

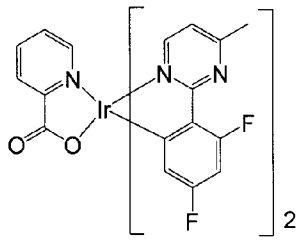


（D）

[0173] 比較例２

比較化合物として、式（Ｅ）で表わされるイリジウム錯体を合成し、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温固体状態での発光量子収率（励起波長：３５０ｎｍ）を測定したところ、発光量子収率は０．１３であった。また、下式（Ｅ）で表わされるイリジウム錯体の分解温度をＴＧ／ＤＴＡ同時測定装置（株式会社島津製作所製、ＤＴＧ－６０）により測定した。昇温速度を１５℃／ｍｉｎに設定し、窒素ガス雰囲気下、常圧にて昇温したところ、３５７℃にて５％の重量減少が見られた。

[化15]

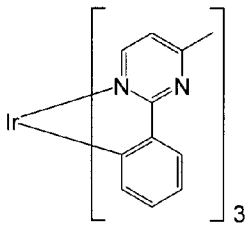


（E）

[0174] 比較例３

比較化合物として、前記特許文献７に記載されている式（Ｃ）で表わされるイリジウム錯体を合成し、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温固体状態での発光量子収率（励起波長：３５０nm）を測定したところ、発光量子収率は０．０１であり、非常に低い値であった。

[化7]

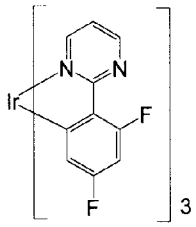


(C)

[0175] 比較例４

比較化合物として、式（Ｆ）で表わされるイリジウム錯体を合成し、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（Ｃ９９２０）を用いて、室温固体状態での発光量子収率（励起波長：３５０nm）を測定したところ、発光量子収率は０．０３であった。また溶媒（クロロホルム、トルエン）に対する溶解性を確認するために、０．１ｗｔ％の溶液を作製し、目視により確認したところ、かなりの溶け残りが生じた。

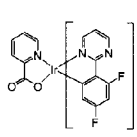
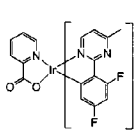
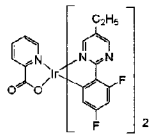
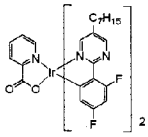
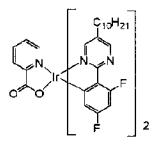
[化16]



(F)

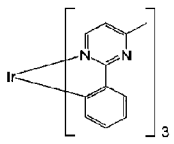
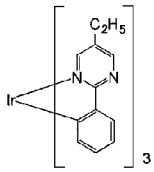
[0176] 本発明化合物（７６）、本発明化合物（８２）、本発明化合物（９２）、比較化合物（式（Ｄ））、比較化合物（式（Ｅ））の分析結果を表１３にまとめた。表１３より、R^aへ炭素数２以上のアルキル基を導入することにより、R^aが無置換の比較化合物（式（Ｄ））と比べて、イリジウム錯体の熱的安定性、すなわち耐熱性が大きく向上したことがわかる。また発光量子収率（固体状態）についても同様に、R^aへ炭素数２以上のアルキル基を導入することにより、大きく向上することが明らかになった。一方、比較化合物（式（Ｅ））については、比較化合物（式（Ｄ））と比べて、熱的安定性は改善しているものの、発光量子収率（固体）については逆に低下することが明らかになった。

[表13]

	 比較化合物(式(D))	 比較化合物(式(E))	 本発明化合物(76)	 本発明化合物(92)	 本発明化合物(82)
５%重量減少温度	344℃	357℃	361℃	358℃	360℃
発光量子収率（固体）	0.16	0.13	0.18	0.28	0.34

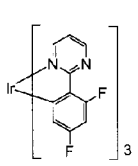
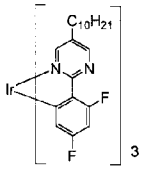
[0177] また、本発明化合物（１）と比較化合物（式（Ｃ））の分析結果を表１４にまとめた。これらの化合物の発光量子収率（固体状態）を比較してみると、それぞれ０．０４と０．０１であり、本発明化合物（１）の方が４倍も高いことがわかる。すなわち、イリジウム錯体の発光量子収率（固体状態）はアルキル基の置換位置に大きく依存し、Ｒ^{a}に炭素数２以上のアルキル基を導入することが、固体発光量子収率の向上に非常に有効に働くことが明らかになった。

[表14]

	 比較化合物(式(C))	 本発明化合物(１)
発光量子収率（固体）	0.01	0.04

[0178] さらに、本発明化合物（１２）、比較化合物（式（Ｆ））の分析結果を表１５にまとめた。表１５より、Ｒ^{a}へｎ－デシル基を導入した本発明化合物（１２）の方が、溶媒に対する溶解性の点で優れていることがわかる。また発光量子収率（固体状態）については、本発明化合物（１２）の方が、約４．５倍も高いことが明らかになった。

[表15]

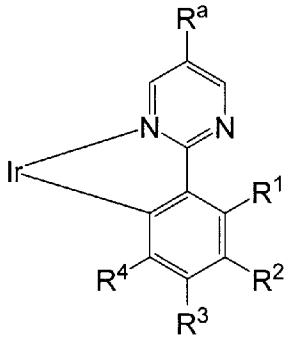
	 比較化合物(式(F)) フェイシャル体	 本発明化合物(12) フェイシャル体
トルエンへの溶解性 (0.1wt%)	溶け残りあり	全て溶解
クロロホルムへの溶解性 (0.1wt%)	溶け残りあり	全て溶解
発光量子収率 (固体)	0.03	0.14

[0179] 以上の実施例より、一般式（１）又は（２）で表される本発明化合物については、R^aへ置換基を導入していないイリジウム錯体と比較して、熱的に非常に安定であり、溶液中または固体状態で高い発光量子収率を示すことが明らかになった。さらに、本発明のイリジウム錯体に各種置換基を導入することにより、また、配位子Ｌを変えることにより、その発光波長を調整できることが明らかになった。したがって、本発明のイリジウム錯体は、有機電界発光素子材料、エレクトロケミルミネッセンス（ECL）素子材料、発光センサー、光増感剤、ディスプレイ、写真用材料、レーザー色素、カラーフィルター用染料、光通信、色変換フィルター、バックライト、照明、光増感色素、細胞イメージング用発光プローブ、各種光源等に適用できる。

請求の範囲

[請求項1] 下記一般式（１）で表される部分構造を有するイリジウム錯体。

[化1]

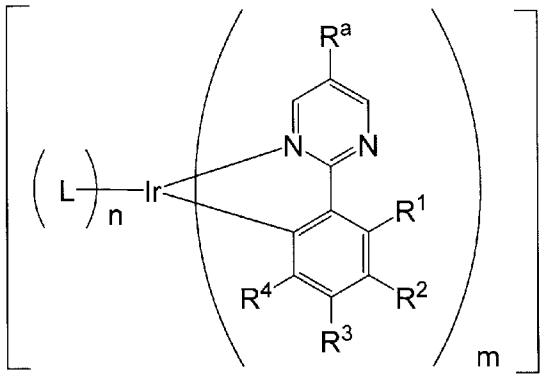


（１）

（一般式（１）中、Ｎは窒素原子を表す。Ｒａは置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキル基を表す。Ｒ１～Ｒ４は、各々独立に、水素原子または置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキル基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリール基、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルケニル基、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキニル基、置換基を有しても良い炭素数０～３０のアミノ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環基、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルコキシ基、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキルチオ基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリールオキシ基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリールチオ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環オキシ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環チオ基、アシル基、アシルオキシ基、アミド基、酸イミド基、イミン残基、置換シリル基、置換シリルオキシ基、置換シリルチオ基、置換シリルアミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、カルボキシル基、またはトリフルオロメチル基を表す。また、隣接する置換基は結合して環構造を形成してもよい。）

[請求項2] 下記一般式（２）で表されるイリジウム錯体。

[化2]



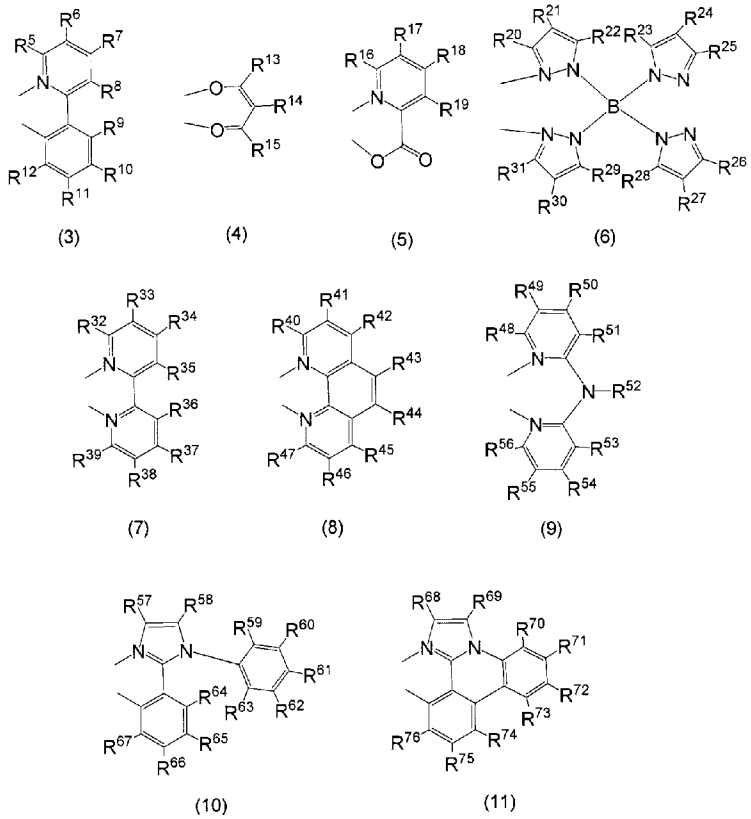
（2）

（一般式（２）中、Ｎは窒素原子を表す。ｍは１～３の整数を表す。ｎは０～２の整数を表す。ｍ＋ｎ＝３である。Ｒ^{a}は置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキル基を表す。Ｒ^{1}～Ｒ^{4}は、各々独立に、水素原子または置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキル基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリール基、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルケニル基、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキニル基、置換基を有しても良い炭素数０～３０のアミノ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環基、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルコキシ基、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキルチオ基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリールオキシ基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリールチオ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環オキシ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環チオ基、アシル基、アシルオキシ基、アミド基、酸イミド基、イミン残基、置換シリル基、置換シリルオキシ基、置換シリルチオ基、置換シリルアミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、カルボキシル基、またはトリフルオロメチル基を表す。Ｑはカウンターイオンを表す。ｋは０～２の整数を表す。Ｌは２座配位子を表す。また、隣接する置換基は結合して環構造を形成してもよい。）

[請求項3] Ｌが一般式（３）～（１１）の何れかで表される請求項２に記載の

イリジウム錯体。

[化3]



（一般式（３）～（１１）中、Ｒ^{5}～Ｒ^{76}は、各々独立に、水素原子または置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキル基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリール基、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルケニル基、置換基を有しても良い炭素数２～３０のアルキニル基、置換基を有しても良い炭素数０～３０のアミノ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環基、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルコキシ基、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキルチオ基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリールオキシ基、置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリールチオ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環オキシ基、置換基を有しても良い炭素数１～６０のヘテロ環チオ基、アシル基、アシルオキシ基、アミド基、酸イミド基、イミン残基、置換シリル基

、置換シリルオキシ基、置換シリルチオ基、置換シリルアミノ基、ハロゲン原子、シアノ基、カルボキシル基またはトリフルオロメチル基を表す。また、隣接する置換基は結合して環構造を形成してもよい。）

[請求項4] R^1が、水素原子またはフッ素原子である請求項１から３何れかに記載のイリジウム錯体。

[請求項5] R^2が、水素原子、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキル基、または置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリール基である請求項１から４何れかに記載のイリジウム錯体。

[請求項6] R^2がトリフルオロメチル基である請求項１から４何れかに記載のイリジウム錯体。

[請求項7] R^3が、水素原子、置換基を有しても良い炭素数１～３０のアルキル基、または置換基を有しても良い炭素数６～６０のアリール基である請求項１から６何れかに記載のイリジウム錯体。

[請求項8] R^3がフッ素原子である請求項１から６何れかに記載のイリジウム錯体。

[請求項9] R^1～R^4のいずれかが、少なくとも１個のデンドロンによって置換されていることを特徴とする請求項１から８何れかに記載のイリジウム錯体。

[請求項10] R^aが炭素数２～３０のアルキル基である請求項１から９何れかに記載のイリジウム錯体。

[請求項11] R^aがｎ－デシル基である請求項１から９何れかに記載のイリジウム錯体。

[請求項12] ｍ＝３かつｎ＝０である請求項２、および、４から１１何れかに記載のイリジウム錯体。

[請求項13] ｍ＝２かつｎ＝１である請求項２から１１何れかに記載のイリジウム錯体。

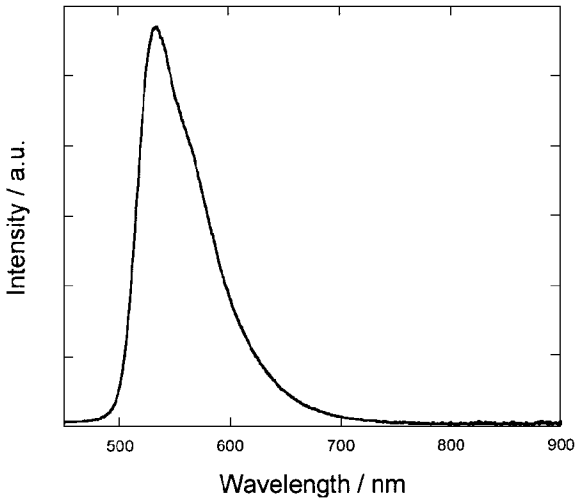
[請求項14] ｍ＝１かつｎ＝２である請求項２から１１何れかに記載のイリジウ

ム錯体。

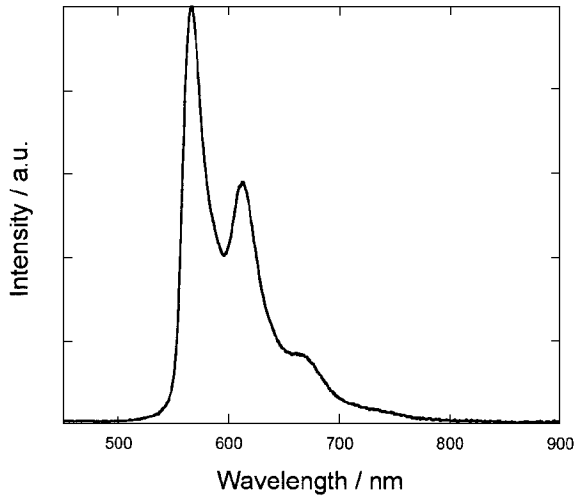
[請求項15] 請求項１から１４何れかに記載のイリジウム錯体からなる発光材料。

[請求項16] 請求項１５に記載の発光材料を用いた発光素子。

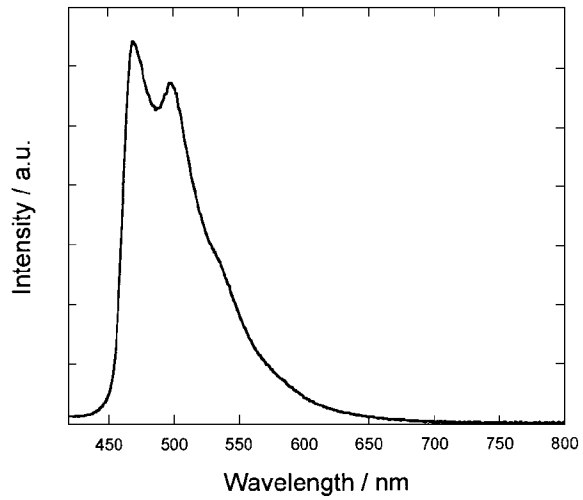
[図1]


Intensity / a.u.
500
600
700
800
900
Wavelength / nm

[図2]


Intensity / a.u.
500
600
700
800
900
Wavelength / nm

[図3]


Intensity / a.u.
450
500
550
600
650
700
750
800
Wavelength / nm

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2010/064140

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
C07F15/00(2006.01)i, *C09K11/06*(2006.01)i, *H01L51/50*(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
C07F15/00, C09K11/06, H01L51/50

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2010
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2010	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2010

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
CAplus(STN), REGISTRY(STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2003-81988 A (Canon Inc.), 19 March 2003 (19.03.2003), claims; paragraphs [0045] to [0055] & US 2002/0063516 A1 & US 2005/0025996 A1 & EP 1191612 A2 & DE 60139845 E	1-16

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
12 October, 2010 (12.10.10)	26 October, 2010 (26.10.10)
Name and mailing address of the ISA/ Japanese Patent Office Facsimile No.	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2010/064140

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2004-503059 A (E.I. Du Pont De Nemours & Co.), 29 January 2004 (29.01.2004), claims; paragraphs [0025] to [0037] & WO 02/02714 A2 & AU 200171550 A & US 2002/0121638 A1 & EP 1295514 A2 & KR 2003011936 A & US 6670645 B2 & CN 1449640 A & US 2003/0197183 A1 & US 2004/0089867 A1 & US 2004/0094769 A1 & US 2004/0106007 A1 & US 2004/0108507 A1 & US 2004/0116696 A1 & US 2004/0188673 A1 & US 2004/0191959 A1 & US 2005/0095457 A1 & US 2005/0165235 A1 & US 2009/0206326 A1 & EP 1424382 A2 & EP 1431288 A2 & EP 1431289 A2 & KR 2004069972 A & TW 593623 A & AU 2001271550 B2 & US 6946688 B2 & US 6979739 B2 & US 7075102 B2 & US 7078725 B2 & US 7129518 B2 & US 7161172 B2 & US 7199392 B2 & US 7276726 B2 & US 7595501 B2 & DE 60121950 E	1-16
A	JP 2009-40728 A (Canon Inc.), 26 February 2009 (26.02.2009), claims; paragraphs [0046] to [0056] & US 2009/0039776 A1	1-16
A	GRUSHIN, V. V. et al., "New, efficient electroluminescent materials based on organometallic Ir complexes", Chem. Commun., 2001, No.16, p.1494-1495, ISSN: 1359-7345	1-16
A	LIN, C.-F. et al., "Synthesis and characterization of cyclometalated iridium(III) complexes containing pyrimidinebased ligands", Journal of Organometallic Chemistry, 1 August 2009, Vol.694, No.17, p.2757-2769, ISSN: 0022-328X	1-16

国際調査報告

国際出願番号　ＰＣＴ／ＪＰ２０１０／０６４１４０

Ａ．　発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　C07F15/00(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i

Ｂ．　調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　C07F15/00, C09K11/06, H01L51/50

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０１０年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０１０年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０１０年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

CAplus(STN),REGISTRY(STN)

Ｃ．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
A	JP 2003-81988 A（キヤノン株式会社）2003.03.19 特許請求の範囲,[0045]-[0055]　& US 2002/0063516 A1 & US 2005/0025996 A1　& EP 1191612 A2　& DE 60139845 E	1-16
A	JP 2004-503059 A（イー・アイ・デュポン・ドウ・ヌムール・アンド・カンパニー）2004.01.29 特許請求の範囲,[0025]-[0037] & WO 02/02714 A2　& AU 200171550 A　& US 2002/0121638 A1 & EP 1295514 A2　& KR 2003011936 A　& US 6670645 B2 & CN 1449640 A　& US 2003/0197183 A1　& US 2004/0089867 A1	1-16

☑　Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。

☐　パテントファミリーに関する別紙を参照。

＊　引用文献のカテゴリー

「Ａ」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの

「Ｅ」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの

「Ｌ」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）

「Ｏ」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

「Ｐ」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献

「Ｔ」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

「Ｘ」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

「Ｙ」特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

「＆」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
１２．１０．２０１０	２６．１０．２０１０

国際調査機関の名称及びあて先
日本国特許庁（ＩＳＡ／ＪＰ）
郵便番号１００－８９１５
東京都千代田区霞が関三丁目４番３号

特許庁審査官（権限のある職員）　４Ｈ　９５４７
爾見　武志
電話番号　０３－３５８１－１１０１　内線　３４４３

Ｃ（続き）．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
	& US 2004/0094769 A1 & US 2004/0106007 A1 & US 2004/0108507 A1 & US 2004/0116696 A1 & US 2004/0188673 A1 & US 2004/0191959 A1 & US 2005/0095457 A1 & US 2005/0165235 A1 & US 2009/0206326 A1 & EP 1424382 A2 & EP 1431288 A2 & EP 1431289 A2 & KR 2004069972 A & TW 593623 A & AU 2001271550 B2 & US 6946688 B2 & US 6979739 B2 & US 7075102 B2 & US 7078725 B2 & US 7129518 B2 & US 7161172 B2 & US 7199392 B2 & US 7276726 B2 & US 7595501 B2 & DE 60121950 E	
A	JP 2009-40728 A（キヤノン株式会社）2009.02.26 特許請求の範囲,[0046]-[0056] & US 2009/0039776 A1	1-16
A	GRUSHIN, V. V. et al., "New, efficient electroluminescent materials based on organometallic Ir complexes", Chem. Commun., 2001, No.16, p.1494-1495, ISSN: 1359-7345	1-16
A	LIN, C.-F. et al., "Synthesis and characterization of cyclometalated iridium(III) complexes containing pyrimidine-based ligands", Journal of Organometallic Chemistry, 1 August 2009, Vol.694, No.17, p.2757-2769, ISSN: 0022-328X	1-16