

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第6500891号
(P6500891)

(45) 発行日 平成31年4月17日(2019.4.17)

(24) 登録日 平成31年3月29日(2019.3.29)

(51) Int.Cl.	F I
C O 8 G 61/00 (2006.01)	C O 8 G 61/00
C O 8 G 61/12 (2006.01)	C O 8 G 61/12
C O 8 L 65/00 (2006.01)	C O 8 L 65/00
C O 7 F 5/02 (2006.01)	C O 7 F 5/02 C S P
C O 7 C 25/22 (2006.01)	C O 7 C 25/22 C S P
請求項の数 8 (全 68 頁) 最終頁に続く	

(21) 出願番号	特願2016-509902 (P2016-509902)	(73) 特許権者	000002093
(86) (22) 出願日	平成26年11月21日(2014.11.21)		住友化学株式会社
(86) 国際出願番号	PCT/JP2014/081668		東京都中央区新川二丁目27番1号
(87) 国際公開番号	W02015/145871	(74) 代理人	100113000
(87) 国際公開日	平成27年10月1日(2015.10.1)		弁理士 中山 亨
審査請求日	平成29年8月3日(2017.8.3)	(74) 代理人	100151909
(31) 優先権主張番号	特願2014-61357 (P2014-61357)		弁理士 坂元 徹
(32) 優先日	平成26年3月25日(2014.3.25)	(72) 発明者	吉田 大泰
(33) 優先権主張国	日本国(JP)		茨城県つくば市北原6 住友化学株式会社 内
		(72) 発明者	白鳥 美桜
			茨城県つくば市北原6 住友化学株式会社 内
		審査官	工藤 友紀
			最終頁に続く

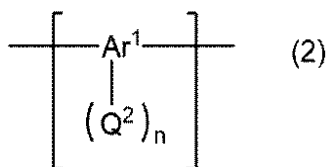
(54) 【発明の名称】 高分子化合物およびそれを用いた発光素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記式(2)で表される構成単位、下記式(X)で表される構成単位及び下記式(Y)で表される構成単位からなる高分子化合物。

【化1】



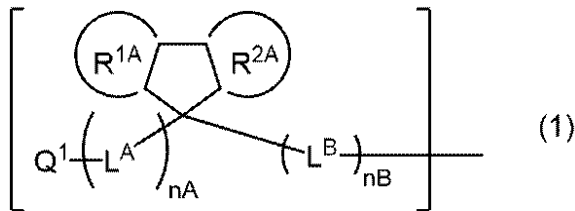
[式中、

Ar¹は、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

nは1～4の整数を表す。

Q²は、下記式(1)で表される基を表す。Q²が複数個存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

【化 2】



[式中、

環 $\text{R}^{1\text{A}}$ および環 $\text{R}^{2\text{A}}$ は、それぞれ独立に、芳香族炭化水素環または複素環を表し、これらの環は置換基を有していてもよい。

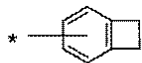
10

$n\text{A}$ は 0 ～ 5 の整数を表し、 $n\text{B}$ は 1 ～ 5 の整数を表す。

L^{A} および L^{B} は、それぞれ独立に、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2 価の複素環基、 $-\text{NR}'-$ で表される基、酸素原子または硫黄原子を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 R' は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 L^{A} および L^{B} が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。

Q^1 は、下記式 (XL-17) で表される架橋基を表す。]

【化 3】

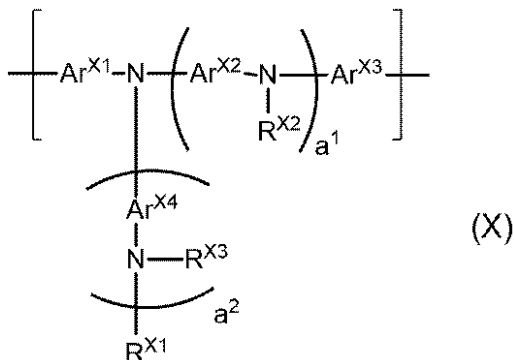


(XL-17)

20

[式中、* は結合位置を表す。この架橋基は置換基を有していてもよい。]

【化 4】



30

[式中、

a^1 および a^2 は、それぞれ独立に、0 以上の整数を表す。

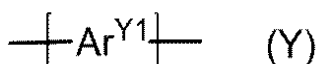
$\text{Ar}^{\text{X}1}$ および $\text{Ar}^{\text{X}3}$ は、それぞれ独立に、アリーレン基または 2 価の芳香族複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

$\text{Ar}^{\text{X}2}$ および $\text{Ar}^{\text{X}4}$ は、それぞれ独立に、アリーレン基、2 価の芳香族複素環基、または、少なくとも 1 種のアリーレン基と少なくとも 1 種の 2 価の複素環基とが直接結合した 2 価の基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

40

$\text{R}^{\text{X}1}$ 、 $\text{R}^{\text{X}2}$ および $\text{R}^{\text{X}3}$ は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

【化 5】



[式中、 $\text{Ar}^{\text{Y}1}$ は、アリーレン基、2 価の芳香族複素環基、または、少なくとも 1 種のアリーレン基と少なくとも 1 種の 2 価の芳香族複素環基とが直接結合した 2 価の基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

【請求項 2】

50

前記の環 R^{1A} および環 R^{2A} が、置換基を有していてもよいベンゼン環である、請求項 1 に記載の高分子化合物。

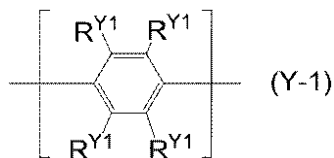
【請求項 3】

前記 Ar^1 が、置換基を有していてもよいベンゼン環、置換基を有していてもよいフルオレン環、置換基を有していてもよいナフタレン環、置換基を有していてもよいフェナントレン環、または、置換基を有していてもよいジヒドロフェナントレン環から、環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子 ($2+n$) 個を除いた基である、請求項 1 又は 2 に記載の高分子化合物。

【請求項 4】

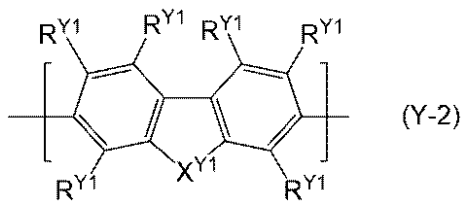
前記式 (Y) で表される構成単位が、下記式 (Y-1) で表される構成単位または下記式 (Y-2) で表される構成単位である、請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に記載の高分子化合物。

【化 6】



[式中、 R^{Y1} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{Y1} は、同一でも異なってもよく、隣接する R^{Y1} 同士は互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子と共に環を形成していてもよい。]

【化 7】



[式中、 R^{Y1} は前記と同じ意味を表す。 X^{Y1} は、 $-C(R^{Y2})_2-$ 、 $-C(R^{Y2})=C(R^{Y2})-$ または $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ で表される基を表す。 R^{Y2} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{Y2} は、同一でも異なってもよく、 R^{Y2} 同士は互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子と共に環を形成していてもよい。]

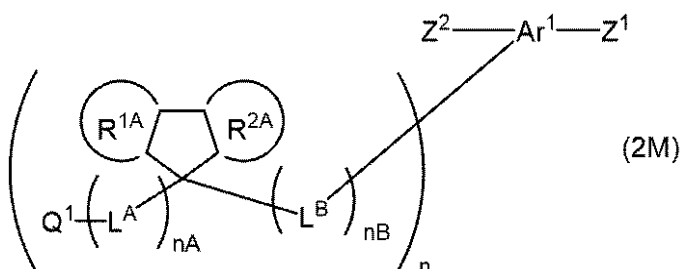
【請求項 5】

前記式 (2) で表される構成単位の含有量が、高分子化合物に含まれる構成単位の合計含有量に対して、3 ~ 90 モル%である、請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の高分子化合物。

【請求項 6】

下記式 (2M) で表される化合物。

【化 8】



10

20

30

40

50

[式中、

環 R^{1A} および環 R^{2A} は、それぞれ独立に、芳香族炭化水素環または複素環を表し、これらの環は置換基を有していてもよい。

nA は 0 ～ 5 の整数を表し、 nB は 1 ～ 5 の整数を表す。

L^A および L^B は、それぞれ独立に、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2 価の複素環基、 $-NR'$ で表される基、酸素原子または硫黄原子を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 R' は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 L^A および L^B が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。

Q^1 は、下記式 (XL-17) で表される架橋基を表す。

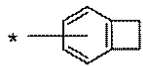
10

Ar^1 は、芳香族炭化水素基または複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

n は 1 ～ 4 の整数を表す。

Z^1 および Z^2 は、それぞれ独立に、下記の置換基 A 群または置換基 B 群から選ばれる基を表す。]

【化 9】



(XL-17)

20

[式中、* は結合位置を表す。この架橋基は置換基を有していてもよい。]

<置換基 A 群>

塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、 $-O-S(=O)_2R^{C1}$ (式中、 R^{C1} は、アルキル基、シクロアルキル基またはアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。) で表される基。

<置換基 B 群>

$-B(OR^{C2})_2$ (式中、 R^{C2} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基またはアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{C2} は同一でも異なってもよく、互いに連結して、それぞれが結合する酸素原子とともに環構造を形成していてもよい。) で表される基；

30

$-BF_3Q'$ (式中、 Q' は、リチウム原子、ナトリウム原子、カリウム原子、ルビジウム原子またはセシウム原子を表す。) で表される基；

$-MgY'$ (式中、 Y' は、塩素原子、臭素原子またはヨウ素原子を表す。) で表される基；

$-ZnY''$ (式中、 Y'' は、塩素原子、臭素原子またはヨウ素原子を表す。) で表される基；および、

$-Sn(R^{C3})_3$ (式中、 R^{C3} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基またはアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{C3} は同一でも異なってもよく、互いに連結して、それぞれが結合するスズ原子とともに環構造を形成していてもよい。) で表される基。

40

【請求項 7】

請求項 1 ～ 5 のいずれか一項に記載の高分子化合物と、

正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤および溶媒からなる群より選ばれる少なくとも 1 種の材料とを含有する組成物。

【請求項 8】

請求項 1 ～ 5 のいずれか一項に記載の高分子化合物を用いて得られる発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

50

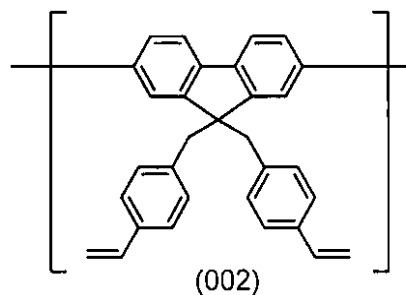
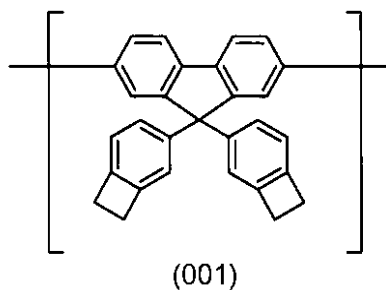
本発明は、高分子化合物およびそれを用いた発光素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機エレクトロルミネッセンス素子等の発光素子は、発光効率が高く、駆動電圧が低いことから、ディスプレイの用途に好適に使用することが可能であり、近年注目されている。発光素子は、発光層、電荷輸送層等の有機層を備える。高分子化合物を用いることで、インクジェット印刷法に代表される塗布法により有機層を形成することができるため、発光素子の製造に用いる高分子化合物が検討されている。

フルオレンは、発光素子の有機層に用いる材料の骨格として有用であり、フルオレンから誘導された構成単位を含む高分子化合物は、発光素子の発光層および正孔輸送層に用いる材料として特に有用であることが知られている。例えば、特許文献1には、アリールアミンから誘導された構成単位と、ベンゾシクロブタン構造を有するフルオレンから誘導された下記式(001)で表される構成単位とを含む高分子化合物を、発光素子の正孔輸送層に用いることが記載されている。ベンゾシクロブタンは架橋基として機能する。特許文献2には、アリールアミンから誘導された構成単位と、スチレン構造を有するフルオレンから誘導された下記式(002)で表される構成単位とを含む高分子化合物を、発光素子の正孔輸送層に用いることが記載されている。スチレンは架橋基として機能する。そのため、塗布法により高分子化合物を成膜後、加熱等によりベンゾシクロブタンまたはスチレンを架橋させることにより、溶媒に対して実質的に不溶な正孔輸送層を形成することが可能である。そして、該正孔輸送層には、発光層等を塗布法により積層することが可能である。



【先行技術文献】

【特許文献】

【0003】

【特許文献1】特開2008-106241号公報

【特許文献2】特表2007-528916号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

しかしながら、上記のフルオレンから誘導された構成単位を含む高分子化合物を用いて製造される発光素子は、その発光効率が必ずしも十分ではなかった。

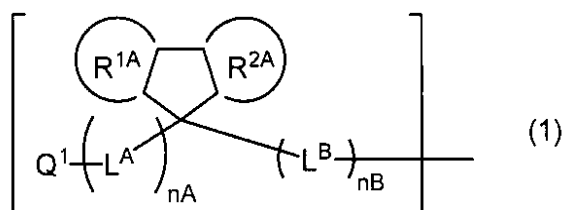
そこで、本発明は、発光効率に優れる発光素子の製造に有用な高分子化合物を提供することを目的とする。本発明はまた、該高分子化合物を含有する組成物、および、該高分子化合物を用いて得られる発光素子を提供することを目的とする。本発明は更に、該高分子化合物の製造に有用な化合物を提供することを目的とする。

【課題を解決するための手段】

【0005】

本発明は、以下の[1]～[11]を提供する。

[1] 下記式(1)で表される基を有する構成単位を含む高分子化合物。



[式中、

環 R^{1A} および環 R^{2A} は、それぞれ独立に、芳香族炭化水素環または複素環を表し、これらの環は置換基を有していてもよい。

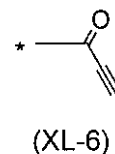
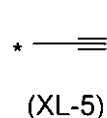
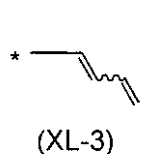
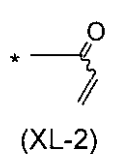
nA は 0 ～ 5 の整数を表し、 nB は 1 ～ 5 の整数を表す。

10

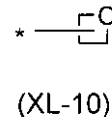
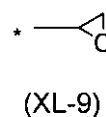
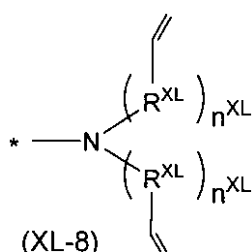
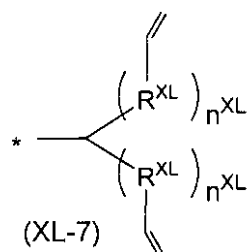
L^A および L^B は、それぞれ独立に、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2 価の複素環基、 $-NR'$ で表される基、酸素原子または硫黄原子を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 R' は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 L^A および L^B が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。

Q^1 は、下記架橋基 A' 群から選ばれる架橋基を表す。]

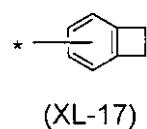
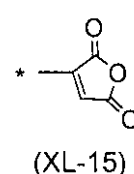
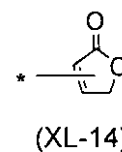
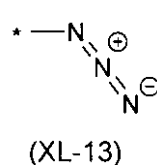
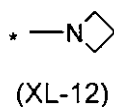
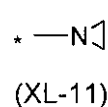
(架橋基 A' 群)



20



30



40

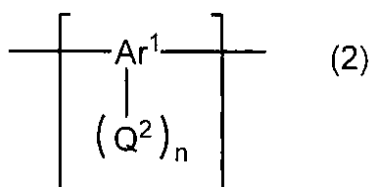
[式中、

R^{XL} は、メチレン基、酸素原子または硫黄原子を表し、 n^{XL} は、0 ～ 5 の整数を表す。 R^{XL} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、 n^{XL} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

*は結合位置を表す。

これらの架橋基は置換基を有していてもよい。]

[2] 前記式 (1) で表される基を有する構成単位が、下記式 (2) で表される構成単位である、[1] に記載の高分子化合物。



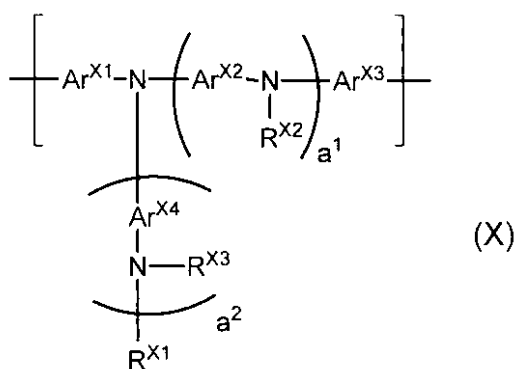
[式中、

Ar^1 は、芳香族炭化水素基または複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

n は 1 ～ 4 の整数を表す。

Q^2 は、前記式 (1) で表される基を表す。 Q^2 が複数個存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

[3] 更に、下記式 (X) で表される構成単位を含む、[1] または [2] に記載の高分子化合物。



[式中、

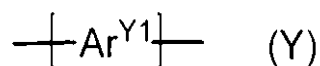
a^1 および a^2 は、それぞれ独立に、0 以上の整数を表す。

$\text{Ar}^{\text{X}1}$ および $\text{Ar}^{\text{X}3}$ は、それぞれ独立に、アリーレン基または 2 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

$\text{Ar}^{\text{X}2}$ および $\text{Ar}^{\text{X}4}$ は、それぞれ独立に、アリーレン基、2 価の複素環基、または、少なくとも 1 種のアリーレン基と少なくとも 1 種の 2 価の複素環基とが直接結合した 2 価の基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

$\text{R}^{\text{X}1}$ 、 $\text{R}^{\text{X}2}$ および $\text{R}^{\text{X}3}$ は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

[4] 更に、下記式 (Y) で表される構成単位を含む、[1] ～ [3] のいずれか一項に記載の高分子化合物。



[式中、 $\text{Ar}^{\text{Y}1}$ は、アリーレン基、2 価の複素環基、または、少なくとも 1 種のアリーレン基と少なくとも 1 種の 2 価の複素環基とが直接結合した 2 価の基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

[5] 前記の環 R^1 および環 R^2 が、置換基を有していてもよいベンゼン環である、[1] ～ [4] のいずれか一項に記載の高分子化合物。

[6] 前記 Ar^1 が、置換基を有していてもよいベンゼン環、置換基を有していてもよいフルオレン環、置換基を有していてもよいナフタレン環、置換基を有していてもよいフェナントレン環、または、置換基を有していてもよいジヒドロフェナントレン環から、環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子 ($2 + n$) 個を除いた基である、[2] ～ [5] のいずれか一項に記載の高分子化合物。

[7] 前記式 (Y) で表される構成単位が、下記式 (Y-1) で表される構成単位また

10

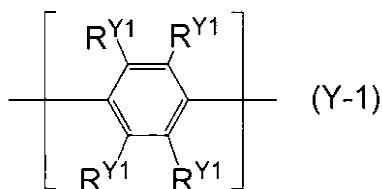
20

30

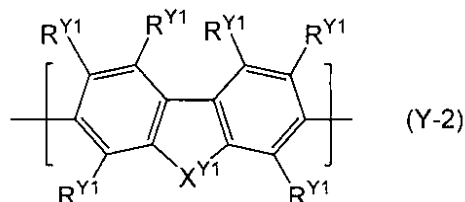
40

50

は下記式（Y-2）で表される構成単位である、〔4〕～〔6〕のいずれか一項に記載の高分子化合物。



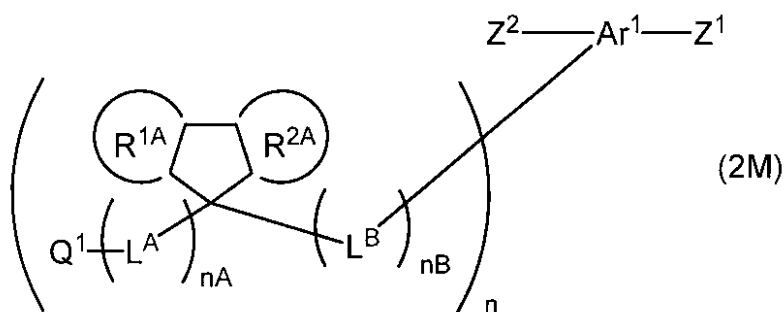
〔式中、 R^{Y1} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基または1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{Y1} は、同一でも異なってもよく、隣接する R^{Y1} 同士は互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子と共に環を形成していてもよい。〕



〔式中、 R^{Y1} は前記と同じ意味を表す。 X^{Y1} は、 $-C(R^{Y2})_2-$ 、 $-C(R^{Y2})=C(R^{Y2})-$ または $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ で表される基を表す。 R^{Y2} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基または1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{Y2} は、同一でも異なってもよく、 R^{Y2} 同士は互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子と共に環を形成していてもよい。〕

〔8〕 前記式（2）で表される構成単位の含有量が、高分子化合物に含まれる構成単位の合計含有量に対して、3～90モル％である、〔2〕～〔7〕のいずれか一項に記載の高分子化合物。

〔9〕 下記式（2M）で表される化合物。



〔式中、

環 R^{1A} 、環 R^{2A} 、 nA 、 nB 、 L^A 、 L^B および Q^1 は、前記と同じ意味を表す。

Ar^1 は、芳香族炭化水素基または複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

n は1～4の整数を表す。

Z^1 および Z^2 は、それぞれ独立に、下記の置換基A群または置換基B群から選ばれる基を表す。〕

<置換基A群>

塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、 $-O-S(=O)_2R^{C1}$ （式中、 R^{C1} は、アルキル基、シクロアルキル基またはアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。）で表される基。

<置換基B群>

$-B(OR^{C2})_2$ （式中、 R^{C2} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基また

10

20

30

40

50

はアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{C2} は同一でも異なってもよく、互いに連結して、それぞれが結合する酸素原子とともに環構造を形成していてもよい。) で表される基；

— $B F_3 Q'$ (式中、 Q' は、リチウム原子、ナトリウム原子、カリウム原子、ルビジウム原子またはセシウム原子を表す。) で表される基；

— $M g Y'$ (式中、 Y' は、塩素原子、臭素原子またはヨウ素原子を表す。) で表される基；

— $Z n Y''$ (式中、 Y'' は、塩素原子、臭素原子またはヨウ素原子を表す。) で表される基；および、

— $S n (R^{C3})_3$ (式中、 R^{C3} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基またはアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{C3} は同一でも異なってもよく、互いに連結して、それぞれが結合するスズ原子とともに環構造を形成していてもよい。) で表される基。

[10] [1] ~ [8] のいずれか一項に記載の高分子化合物と、

正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤および溶媒からなる群より選ばれる少なくとも1種の材料とを含有する組成物。

[11] [1] ~ [8] のいずれか一項に記載の高分子化合物を用いて得られる発光素子。

【発明の効果】

【0006】

本発明によれば、発光効率に優れる発光素子の製造に有用な高分子化合物を提供することができる。また、本発明によれば、該高分子化合物を含有する組成物、および、該高分子化合物を用いて得られる発光素子を提供することができる。更に、本発明によれば、該高分子化合物の製造に有用な化合物を提供することができる。

【発明を実施するための形態】

【0007】

以下、本発明の好適な実施形態について詳細に説明する。

<共通する用語の説明>

本明細書で共通して用いられる用語は、特記しない限り、以下の意味である。

Me はメチル基、 Et はエチル基、 Bu はブチル基、 $i-Pr$ はイソプロピル基、 $t-Bu$ は $tert$ -ブチル基を表す。

水素原子は、重水素原子であっても、軽水素原子であってもよい。

金属錯体を表す式中、中心金属との結合を表す実線は、共有結合または配位結合を意味する。

「高分子化合物」とは、分子量分布を有し、ポリスチレン換算の数平均分子量が $1 \times 10^3 \sim 1 \times 10^8$ である重合体を意味する。

「低分子化合物」とは、分子量分布を有さず、分子量が 1×10^4 以下の化合物を意味する。

「構成単位」とは、高分子化合物中に1個以上存在する単位を意味する。

「アルキル基」は、直鎖および分岐のいずれでもよい。直鎖のアルキル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常1~50であり、好ましくは3~30であり、より好ましくは4~20である。分岐のアルキル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3~50であり、好ましくは3~30であり、より好ましくは4~20である。

アルキル基は、置換基を有していてもよく、例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、イソブチル基、 $tert$ -ブチル基、ペンチル基、イソアミル基、2-エチルブチル基、ヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、2-エチルヘキシル基、3-プロピルヘプチル基、デシル基、3, 7-ジメチルオクチル基、2-エチルオクチル基、2-ヘキシルーデシル基、ドデシル基、および、これらの基における水素原子が、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、フッ素原子等

で置換された基が挙げられ、例えば、トリフルオロメチル基、ペンタフルオロエチル基、パーフルオロブチル基、パーフルオロヘキシル基、パーフルオロオクチル基、3-フェニルプロピル基、3-(4-メチルフェニル)プロピル基、3-(3,5-ジヘキシルフェニル)プロピル基、6-エチルオキシヘキシル基が挙げられる。

「シクロアルキル基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3～50であり、好ましくは3～30であり、より好ましくは4～20である。

シクロアルキル基は、置換基を有していてもよく、例えば、シクロヘキシル基、シクロヘキシルメチル基、シクロヘキシルエチル基が挙げられる。

「アリール基」は、芳香族炭化水素から環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子1個を除いた残りの原子団を意味する。アリール基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常6～60であり、好ましくは6～20であり、より好ましくは6～10である。

10

アリール基は、置換基を有していてもよく、例えば、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントラセニル基、2-アントラセニル基、9-アントラセニル基、1-ピレニル基、2-ピレニル基、4-ピレニル基、2-フルオレニル基、3-フルオレニル基、4-フルオレニル基、2-フェニルフェニル基、3-フェニルフェニル基、4-フェニルフェニル基、および、これらの基における水素原子が、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、フッ素原子等で置換された基が挙げられる。

「アルコキシ基」は、直鎖および分岐のいずれでもよい。直鎖のアルコキシ基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常1～40であり、好ましくは4～10である。分岐のアルコキシ基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3～40であり、好ましくは4～10である。

20

アルコキシ基は、置換基を有していてもよく、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロピルオキシ基、イソプロピルオキシ基、ブチルオキシ基、イソブチルオキシ基、tert-ブチルオキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、ヘプチルオキシ基、オクチルオキシ基、2-エチルヘキシルオキシ基、ノニルオキシ基、デシルオキシ基、3,7-ジメチルオクチルオキシ基、ラウリルオキシ基、および、これらの基における水素原子が、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、フッ素原子等で置換された基が挙げられる。

30

「シクロアルコキシ基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3～40であり、好ましくは4～10である。

シクロアルコキシ基は、置換基を有していてもよく、例えば、シクロヘキシルオキシ基が挙げられる。

「アリールオキシ基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常6～60であり、好ましくは7～48である。

アリールオキシ基は、置換基を有していてもよく、例えば、フェノキシ基、1-ナフチルオキシ基、2-ナフチルオキシ基、1-アントラセニルオキシ基、9-アントラセニルオキシ基、1-ピレニルオキシ基、および、これらの基における水素原子が、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、フッ素原子等で置換された基が挙げられる。

40

「p 価の複素環基」(p は、1 以上の整数を表す。)とは、複素環式化合物から、環を構成する炭素原子またはヘテロ原子に直接結合している水素原子のうち p 個の水素原子を除いた残りの原子団を意味する。p 価の複素環基の中でも、芳香族複素環式化合物から、環を構成する炭素原子またはヘテロ原子に直接結合している水素原子のうち p 個の水素原子を除いた残りの原子団である「p 価の芳香族複素環基」が好ましい。

「芳香族複素環式化合物」は、オキサジアゾール、チアジアゾール、チアゾール、オキサゾール、チオフェン、ピロール、ホスホール、フラン、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、トリアジン、ピリダジン、キノリン、イソキノリン、カルバゾール、ジベンゾシロール、ジベンゾホスホール等の複素環自体が芳香族性を示す化合物、および、フェノキサジ

50

ン、フェノチアジン、ジベンゾボロール、ジベンゾシロール、ベンゾピラン等の複素環自体は芳香族性を示さなくとも、複素環に芳香環が縮環されている化合物を意味する。

1 価の複素環基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常、2～60であり、好ましくは4～20である。

1 価の複素環基は、置換基を有していてもよく、例えば、チエニル基、ピロリル基、フリル基、ピリジル基、ピペリジル基、キノリル基、イソキノリル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、および、これらの基における水素原子が、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基等で置換された基が挙げられる。

「ハロゲン原子」とは、フッ素原子、塩素原子、臭素原子またはヨウ素原子を示す。

「アミノ基」は、置換基を有していてもよく、置換アミノ基が好ましい。アミノ基が有する置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基または1 価の複素環基が好ましい。

10

置換アミノ基としては、例えば、ジアルキルアミノ基、ジシクロアルキルアミノ基およびジアリールアミノ基が挙げられる。

アミノ基としては、例えば、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジフェニルアミノ基、ビス(4-メチルフェニル)アミノ基、ビス(4-tert-ブチルフェニル)アミノ基、ビス(3, 5-ジ-tert-ブチルフェニル)アミノ基が挙げられる。

「アルケニル基」は、直鎖および分岐のいずれでもよい。直鎖のアルケニル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常2～30であり、好ましくは3～20である。分岐のアルケニル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3～30であり、好ましくは4～20である。

20

「シクロアルケニル基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3～30であり、好ましくは4～20である。

アルケニル基およびシクロアルケニル基は、置換基を有していてもよく、例えば、ビニル基、1-プロペニル基、2-プロペニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、3-ペンテニル基、4-ペンテニル基、1-ヘキセニル基、5-ヘキセニル基、7-オクテニル基、および、これらの基が置換基を有する基が挙げられる。

「アルキニル基」は、直鎖および分岐のいずれでもよい。アルキニル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常2～20であり、好ましくは3～20である。分岐のアルキニル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常4～30であり、好ましくは4～20である。

30

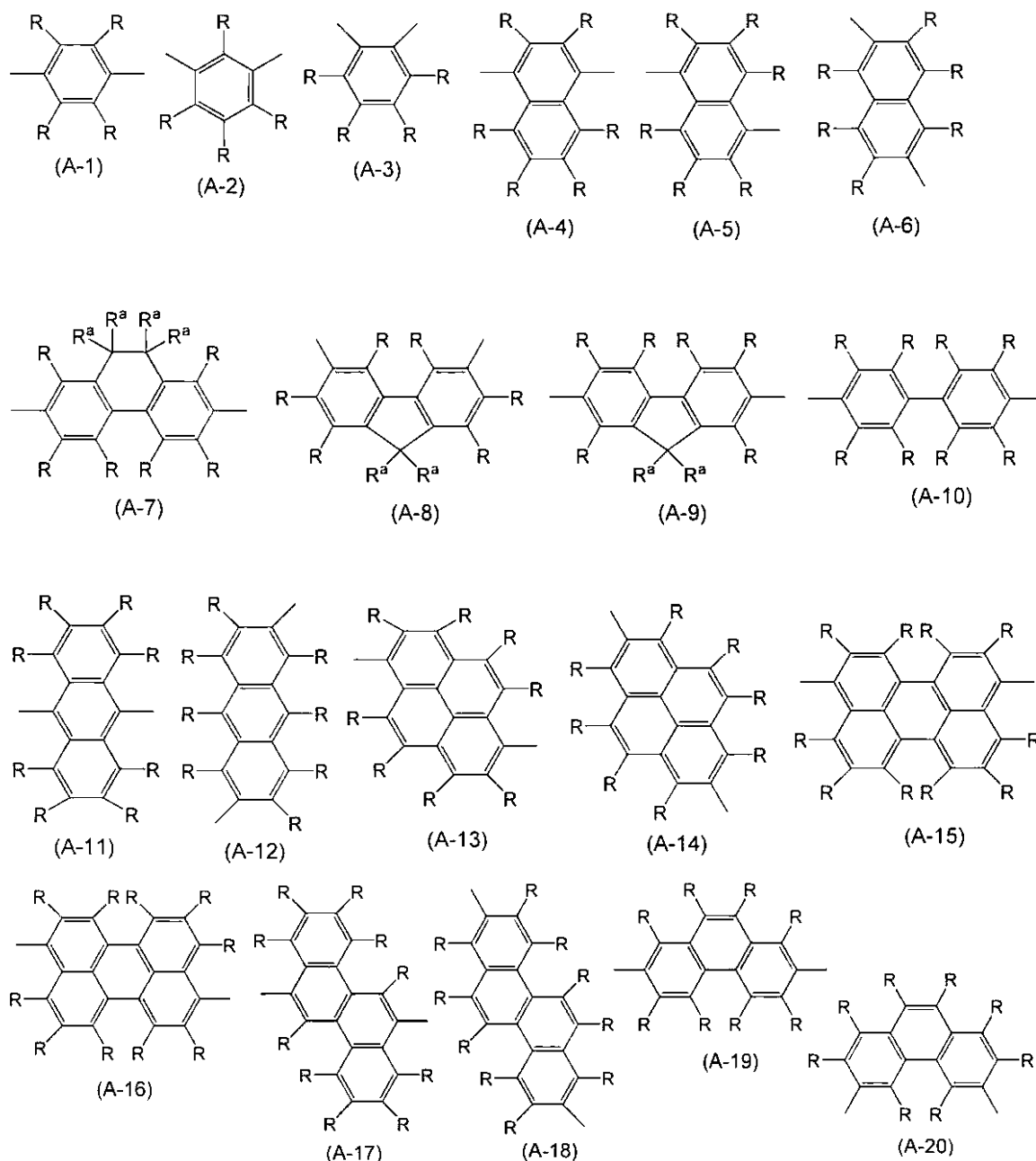
「シクロアルキニル基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常4～30であり、好ましくは4～20である。

アルキニル基およびシクロアルキニル基は、置換基を有していてもよく、例えば、エチニル基、1-プロピニル基、2-プロピニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、3-ペンチニル基、4-ペンチニル基、1-ヘキシニル基、5-ヘキシニル基、および、これらの基が置換基を有する基が挙げられる。

「アリーレン基」は、芳香族炭化水素から環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子2個を除いた残りの原子団を意味する。アリーレン基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常、6～60であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

40

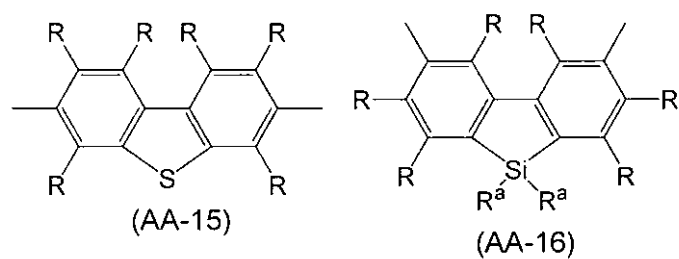
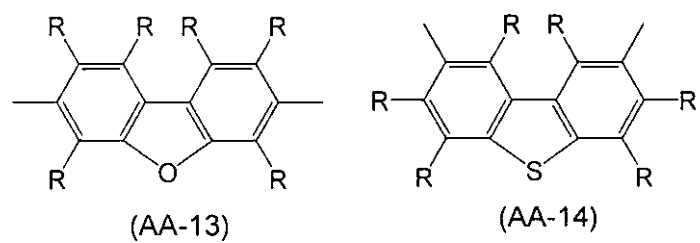
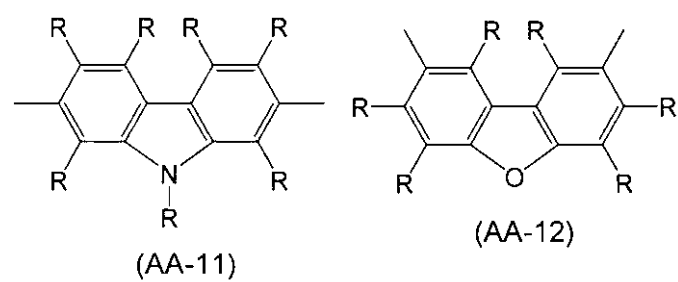
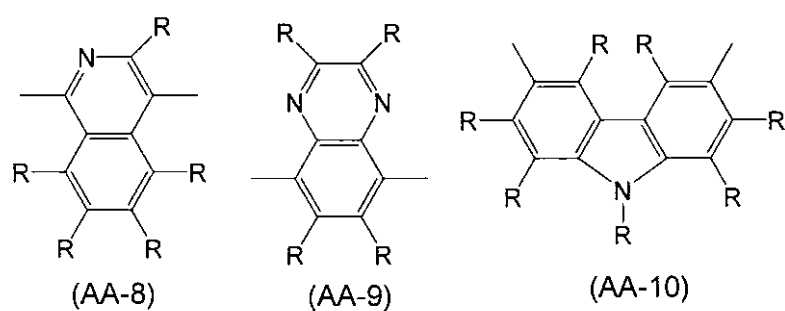
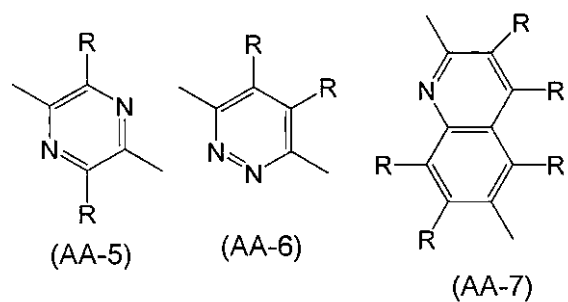
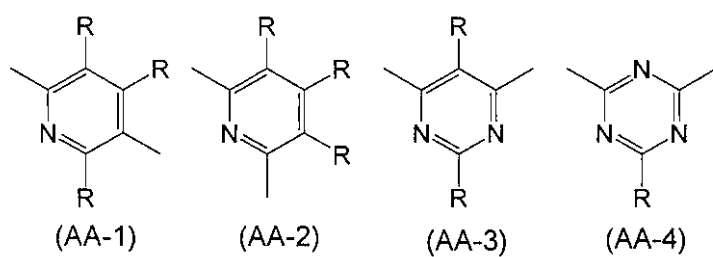
アリーレン基は、置換基を有していてもよく、例えば、フェニレン基、ナフタレンジイル基、アントラセンジイル基、フェナントレンジイル基、ジヒドロフェナントレンジイル基、ナフタセンジイル基、フルオレンジイル基、ピレンジイル基、ペリレンジイル基、クリセンジイル基、および、これらの基が置換基を有する基が挙げられ、好ましくは、式(A-1)～式(A-20)で表される基である。アリーレン基は、これらの基が複数結合した基を含む。



[式中、Rおよび R^a は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基または1価の複素環基を表す。複数存在するRおよび R^a は、各々、同一でも異なってもよく、 R^a 同士は互いに結合して、それぞれが結合する原子と共に環を形成していてもよい。]

2価の複素環基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常、2～60であり、好ましくは、3～20であり、より好ましくは、4～15である。

2価の複素環基は、置換基を有していてもよく、例えば、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、アザナフタレン、ジアザナフタレン、カルバゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ジベンゾシロール、フェノキサジン、フェノチアジン、アクリジン、ジヒドロアクリジン、フラン、チオフェン、アゾール、ジアゾール、トリアゾールから、環を構成する炭素原子またはヘテロ原子に直接結合している水素原子のうち2個の水素原子を除いた2価の基が挙げられ、好ましくは、式(AA-1)～式(AA-34)で表される基である。2価の複素環基は、これらの基が複数結合した基を含む。

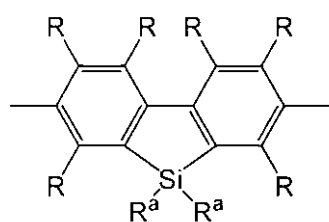


10

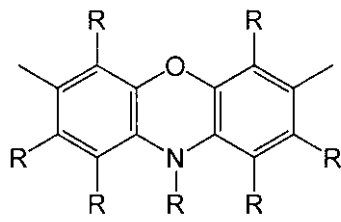
20

30

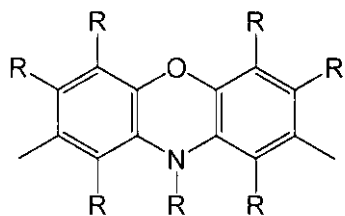
40



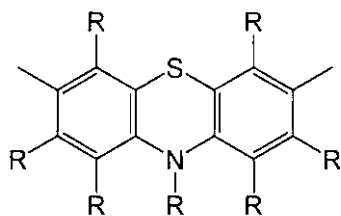
(AA-17)



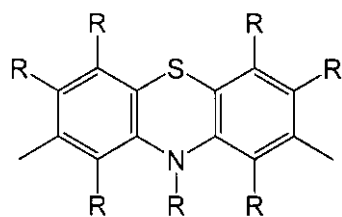
(AA-18)



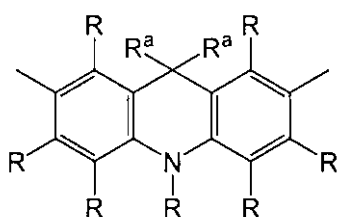
(AA-19)



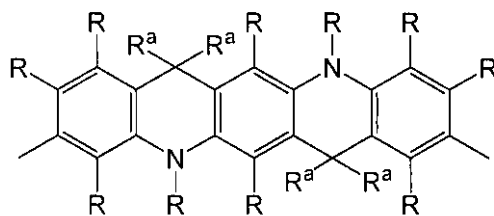
(AA-20)



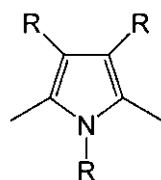
(AA-21)



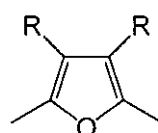
(AA-22)



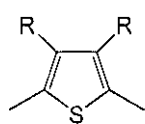
(AA-23)



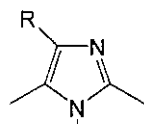
(AA-24)



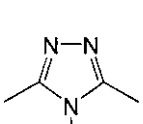
(AA-25)



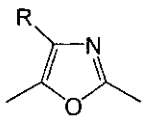
(AA-26)



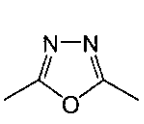
(AA-27)



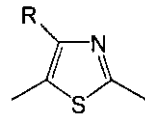
(AA-28)



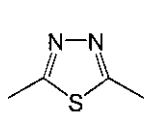
(AA-29)



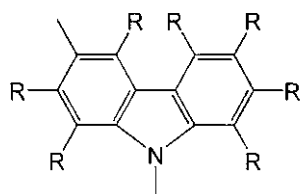
(AA-30)



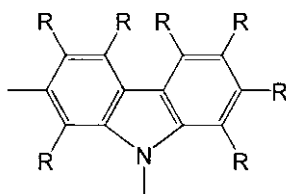
(AA-31)



(AA-32)



(AA-33)



(AA-34)

[式中、RおよびR^aは、前記と同じ意味を表す。]

「架橋基」とは、加熱処理、紫外線照射処理、ラジカル反応等に供することにより、新たな結合を生成することが可能な基であり、好ましくは、架橋基A群の式(XL-1)～

10

20

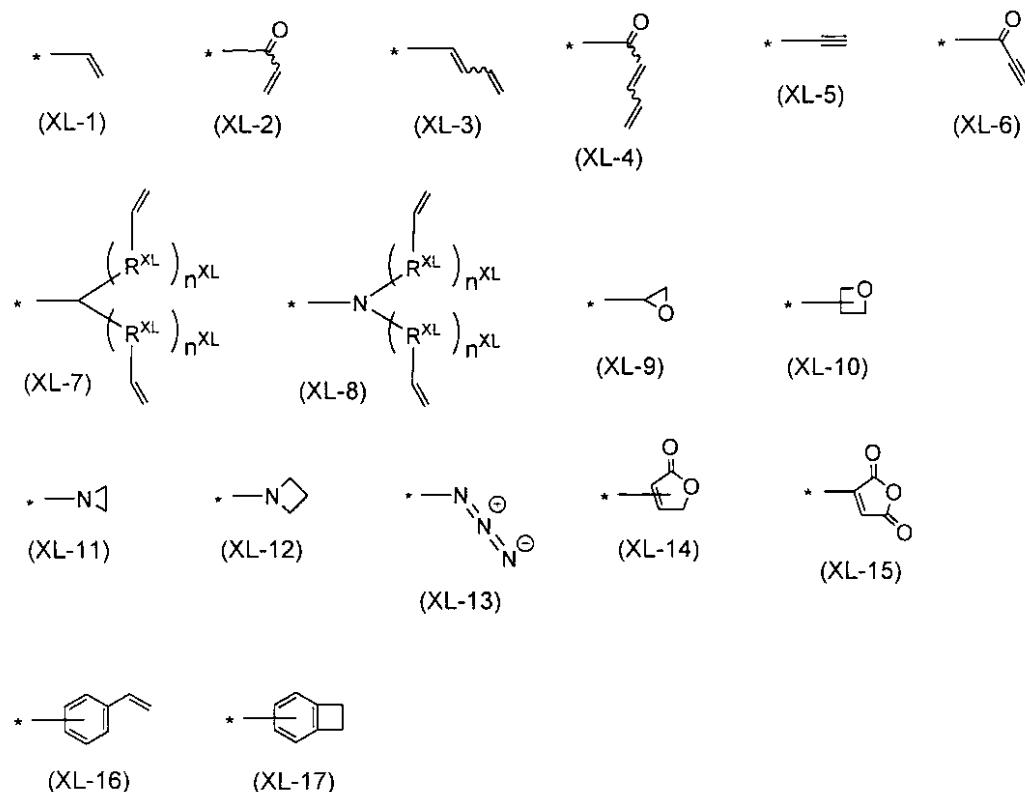
30

40

50

(XL-17) で表される架橋基である。

(架橋基 A 群)



10

20

[式中、

R^{XL} は、メチレン基、酸素原子または硫黄原子を表し、 n^{XL} は、0～5の整数を表す。 R^{XL} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよく、 n^{XL} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

*は結合位置を表す。

これらの架橋基は置換基を有していてもよい。]

「置換基」とは、ハロゲン原子、シアノ基、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1価の複素環基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリールオキシ基、アミノ基、置換アミノ基、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基またはシクロアルキニル基を表す。置換基は架橋基であってもよい。

30

<高分子化合物>

[式(1)で表される基]

本発明の高分子化合物は、式(1)で表される基を有する構成単位を含む。

環 R^{1A} および環 R^{2A} は、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは置換基を有していてもよい芳香族炭化水素環である。

環 R^{1A} および環 R^{2A} で表される芳香族炭化水素環としては、好ましくは6員環の芳香族炭化水素環であり、より好ましくはベンゼン環、ナフタレン環またはフルオレン環であり、更に好ましくはベンゼン環であり、これらの環は置換基を有していてもよい。

40

環 R^{1A} および環 R^{2A} で表される複素環としては、好ましくは5員環または6員環の芳香族複素環であり、より好ましくはチオフェン環、フラン環、ピロール環、ジベンゾチオフェン環、ジベンゾフラン環、カルバゾール環、ピリジン環またはピリミジン環であり、更に好ましくはチオフェン環、カルバゾール環またはピリジン環であり、これらの環は置換基を有していてもよい。

環 R^{1A} および環 R^{2A} で表される環が有していてもよい置換基は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基またはアリール基である。

環 R^{1A} および環 R^{2A} は、本発明の高分子化合物の製造が容易になるので、好ましくは同一の環である。

50

式(1)で表される基を有する構成単位の含有量は、高分子化合物に含まれる構成単位の合計含有量に対して、3～90モル%であることが好ましく、3～70モル%であることがより好ましく、3～50モル%であることが更に好ましい。

環 R^1A および環 R^2A は、特に好ましくは、置換基を有していてもよいベンゼン環である。

nA は、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは0～3の整数であり、より好ましくは0または1であり、更に好ましくは0である。

nB は、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは1～3の整数であり、より好ましくは1または2であり、更に好ましくは1である。

L^A および L^B は、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくはアルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基または2価の複素環基であり、より好ましくはアルキレン基またはアリーレン基であり、更に好ましくはアルキレン基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

L^A および L^B で表されるアルキレン基は、置換基の炭素原子数を含めなくて、通常1～10であり、好ましくは1～8であり、より好ましくは1～6である。 L^A および L^B で表されるシクロアルキレン基は、置換基の炭素原子数を含めなくて、通常3～10である。

アルキレン基およびシクロアルキレン基は、置換基を有していてもよく、例えば、メチレン基、エチレン基、プロピレン基、ブチレン基、ヘキシレン基、シクロヘキシレン基、オクチレン基が挙げられる。

L^A および L^B で表されるアリーレン基は、置換基を有していてもよく、例えば、*o*-フェニレン基、*m*-フェニレン基、*p*-フェニレン基が挙げられる。

L^A および L^B で表される基が有していてもよい置換基は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基またはアリール基である。

L^A が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよいが、本発明の高分子化合物の製造が容易になるので、好ましくは同一の基または原子である。

L^B が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよいが、本発明の高分子化合物の製造が容易になるので、好ましくは同一の基または原子である。

L^A が複数存在する場合、2個以上の L^A が $-NR'$ で表される基であってもよいが、 $-NR'$ で表される基は隣り合わないことが好ましい。

L^B が複数存在する場合、2個以上の L^B が $-NR'$ で表される基であってもよいが、 $-NR'$ で表される基は隣り合わないことが好ましい。

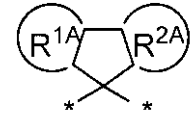
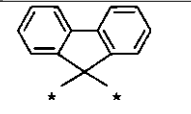
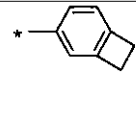
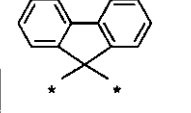
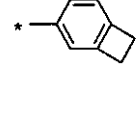
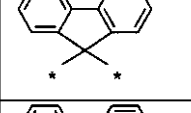
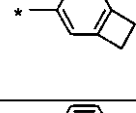
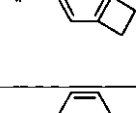
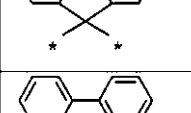
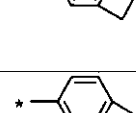
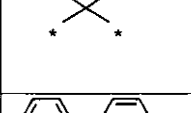
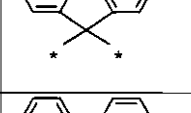
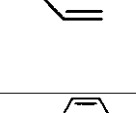
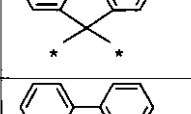
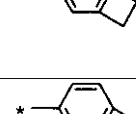
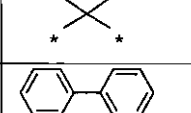
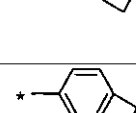
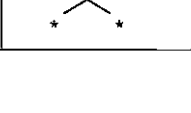
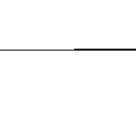
L^A が複数存在する場合、2個以上の L^A が酸素原子または硫黄原子であってもよいが、これらの原子は隣り合わないことが好ましい。

L^B が複数存在する場合、2個以上の L^B が酸素原子または硫黄原子であってもよいが、これらの原子は隣り合わないことが好ましい。

Q^1 は、通常、架橋基A群から選ばれる架橋基であり、本発明の高分子化合物の架橋性が優れるので、好ましくは架橋基A'群から選ばれる架橋基であり、より好ましくは式(XL-1)、式(XL-3)、式(XL-5)、式(XL-7)、式(XL-16)または式(XL-17)で表される架橋基であり、更に好ましくは式(XL-3)、式(XL-5)、式(XL-7)または式(XL-17)で表される架橋基であり、特に好ましくは式(XL-17)で表される架橋基である。

式(1)で表される基としては、例えば、式(1-1)～式(1-22)で表される基が挙げられ、好ましくは、式(1-1)～式(1-14)または式(1-19)～式(1-21)で表される構成単位であり、より好ましくは、式(1-1)～式(1-6)、式(1-19)または式(1-20)で表される基である。

【表 1】

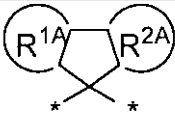
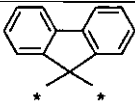
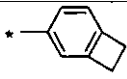
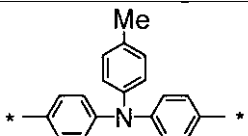
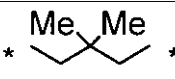
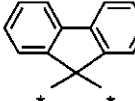
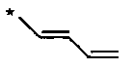
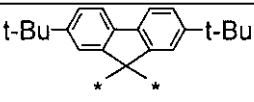
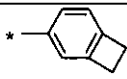
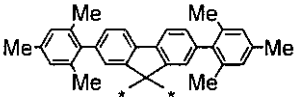
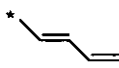
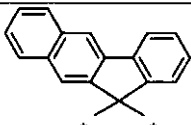
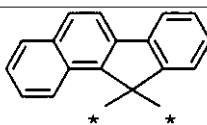
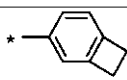
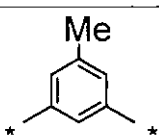
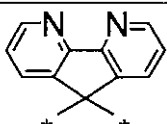
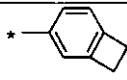
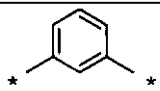
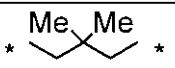
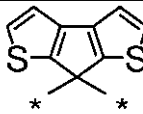
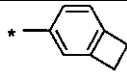
式		Q^1	$(L^A)_{nA}$	$(L^B)_{nB}$
(1-1)			なし	$*-(CH_2)_3^*$
(1-2)			なし	$*-\text{Me}-\text{Me}-^*$
(1-3)			$*-\text{C}_6\text{H}_4-^*$	$*-(CH_2)_6^*$
(1-4)			$*-\text{C}_6\text{H}_3-^*$	$*-(CH_2)_6^*$
(1-5)			$*-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}_6\text{H}_4-^*$	$*-(CH_2)_6^*$
(1-6)			$*-\text{C}_6\text{H}_3-\text{C}_6\text{H}_3-^*$	$*-\text{Me}-\text{C}_6\text{H}_3-^*$
(1-7)			$*-(CH_2)_4^*$	$*-\text{Me}-\text{C}_6\text{H}_3-^*$
(1-8)			なし	$*-\text{C}_6\text{H}_4-\text{O}-\text{C}_6\text{H}_4-^*$
(1-9)			なし	$*-(CH_2)_3^*$
(1-10)			$*-\text{C}_6\text{H}_4-\text{O}-\text{C}_6\text{H}_4-^*$	$*-(CH_2)_3^*$

10

20

30

【表 2】

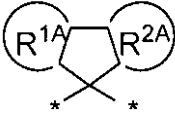
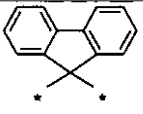
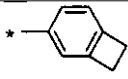
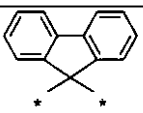
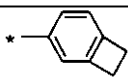
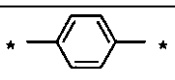
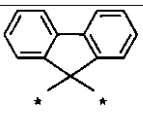
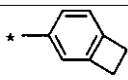
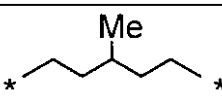
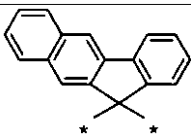
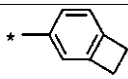
式		Q^1	$(L^A)_{nA}$	$(L^B)_{nB}$
(1-11)				
(1-12)			$*(CH_2)_2^*$	$*(CH_2)_3^*$
(1-13)			なし	$*(CH_2)_6^*$
(1-14)			$*(CH_2)_2^*$	$*(CH_2)_3^*$
(1-15)			$*(CH_2)_4^*$	$*(CH_2)_3^*$
(1-16)			なし	
(1-17)				
(1-18)			なし	$*(CH_2)_4^*$

10

20

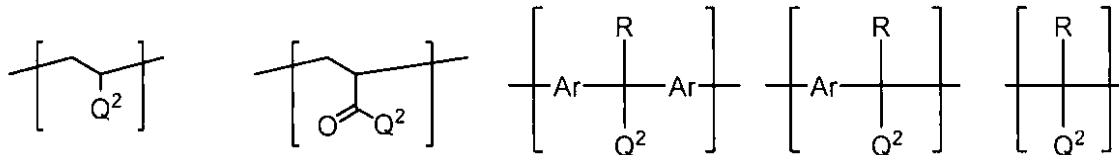
30

【表 3】

式		Q^1	$(L^A)_{nA}$	$(L^B)_{nB}$
(1-19)			なし	$*(CH_2)_6*$
(1-20)				$*(CH_2)_3*$
(1-21)			$*(CH_2)_4*$	
(1-22)			$*(CH_2)_4*$	$*(CH_2)_3*$

[式中、*は結合位置を表す。]

式(1)で表される基を有する構成単位は、後述する式(2)で表される構成単位であることが好ましいが、下記式で表される構成単位であってもよい。



[式中、 Q^2 は、前記式(1)で表される基を表す。Arは前記式Ar^{X1}と同じ意味を表し、Rは前記と同じ意味を表す。]

式(1)で表される基を有する構成単位は、高分子化合物中に、1種のみ含まれていてもよく、2種以上含まれていてもよい。

[式(2)で表される構成単位]

式(1)で表される基を有する構成単位は、本発明の発光素子の発光効率がより優れるので、式(2)で表される構成単位であることが好ましい。

Ar¹は、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは置換基を有していてもよい芳香族炭化水素基である。

Ar¹で表される芳香族炭化水素基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常6~60であり、好ましくは6~30であり、より好ましくは6~18である。

Ar¹で表される芳香族炭化水素基のn個の置換基を除いたアリーレン基部分としては、好ましくは、式(A-1)~式(A-20)で表される基であり、より好ましくは、式(A-1)、式(A-2)、式(A-6)~式(A-10)、式(A-19)または式(A-20)で表される基であり、更に好ましくは、式(A-1)、式(A-2)、または式(A-9)で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

Ar¹で表される複素環基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常6~60であり、好ましくは6~30であり、より好ましくは6~18である。

Ar¹で表される複素環基のn個の置換基を除いた2価の複素環基部分としては、好ましくは、式(AA-1)~式(AA-34)で表される基である。

Ar¹は、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の発光効率が優れるので、好ましくは、置換基を有していてもよいベンゼン環、置換基を有していてもよいフルオレン環、置

10

20

30

40

50

置換基を有していてもよいナフタレン環、置換基を有していてもよいフェナントレン環、または、置換基を有していてもよいジヒドロフェナントレン環から、環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子（ $2+n$ ）個を除いた基であり、より好ましくは、置換基を有していてもよいベンゼン環、置換基を有していてもよいフルオレン環、置換基を有していてもよいナフタレン環、置換基を有していてもよいフェナントレン環、または、置換基を有していてもよいジヒドロフェナントレン環から、環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子（ $2+n$ ）個を除いた基であり、更に好ましくは、置換基を有していてもよいベンゼン環から、環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子（ $2+n$ ）個を除いた基である。

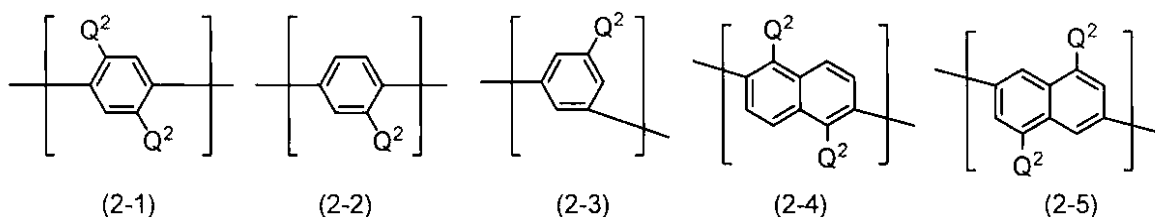
Ar^1 で表される芳香族炭化水素基および複素環基は置換基を有していてもよく、置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、1 価の複素環基およびシアノ基が挙げられる。

n は、本発明の高分子化合物の合成が容易になるので、かつ、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは 1 または 2 である。

Q^2 は、前記式（1）で表される基を表す。 Q^2 が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよいが、本発明の高分子化合物の製造が容易になるので、好ましくは同一の基である。

式（2）で表される構成単位の含有量は、本発明の高分子化合物の安定性が優れるので、高分子化合物に含まれる構成単位の合計含有量に対して、好ましくは 3～90 モル%であり、より好ましくは 3～70 モル%であり、更に好ましくは 3～50 モル%である。

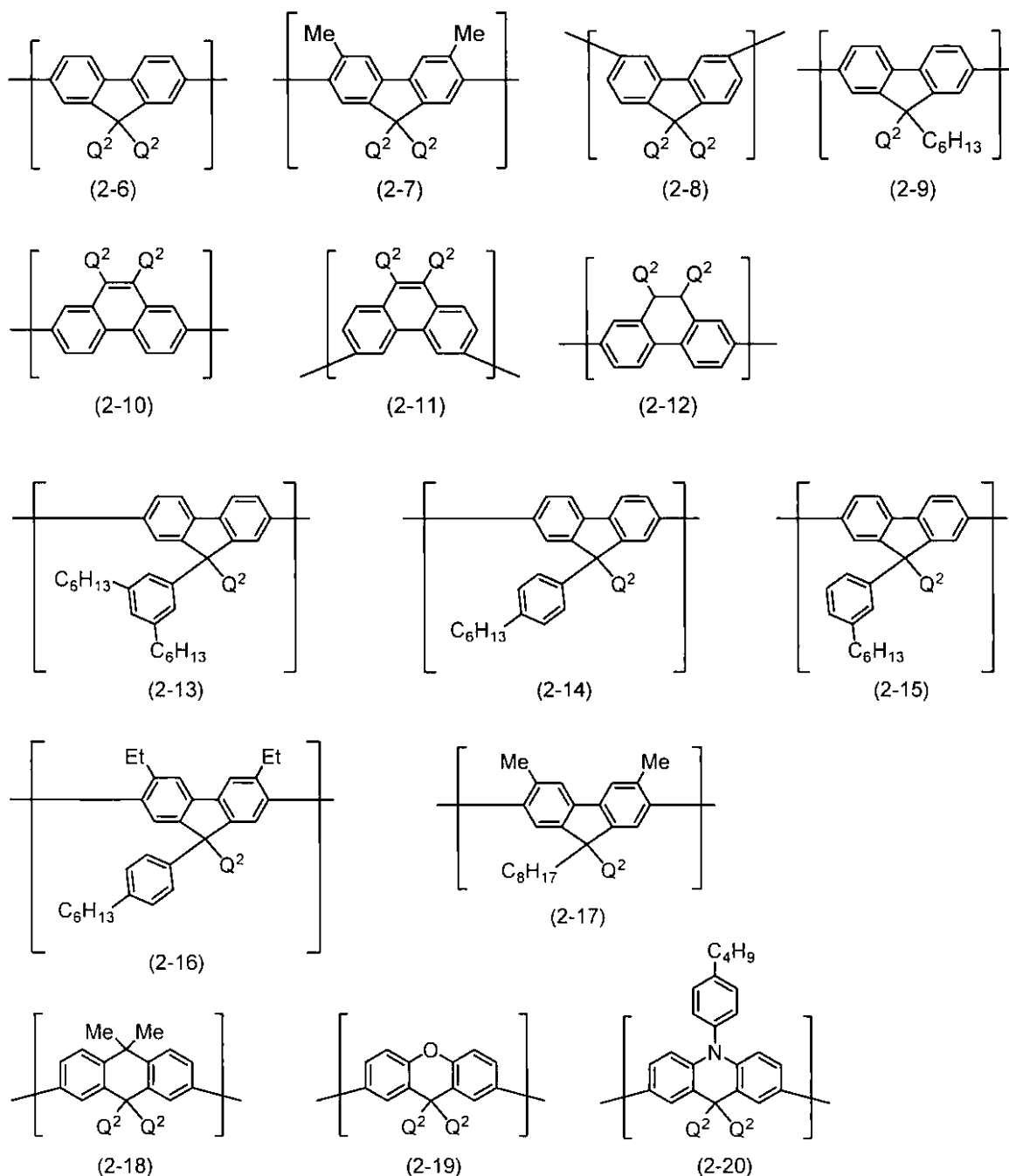
式（2）で表される構成単位としては、例えば、式（2-1）～式（2-20）で表される構成単位が挙げられ、好ましくは式（2-1）～式（2-9）または式（2-13）～式（2-18）で表される構成単位であり、より好ましくは、式（2-1）～式（2-3）または式（2-13）～式（2-17）で表される構成単位であり、更に好ましくは、式（2-1）または式（2-13）～式（2-17）で表される構成単位である。



10

20

30



10

20

30

[式中、 Q^2 は前記と同じ意味を表す。]

式(2)で表される構成単位は、高分子化合物中に、1種のみ含まれていてもよく、2種以上含まれていてもよい。

[その他の構成単位]

本発明の高分子化合物は、正孔輸送性が優れるので、更に、式(X)で表される構成単位を含むことが好ましい。

a^{X1} は、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の輝度寿命が優れるので、好ましくは0～2の整数(2以下)であり、より好ましくは1である。

a^{X2} は、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の輝度寿命が優れるので、好ましくは0～2の整数(2以下)であり、より好ましくは0である。

R^{X1} 、 R^{X2} および R^{X3} は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基、アリール基または1価の複素環基であり、より好ましくはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

Ar^{X1} および Ar^{X3} で表されるアリーレン基は、より好ましくは式(A-1) また

40

50

は式 (A-9) で表される基であり、更に好ましくは式 (A-1) で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

$A r^{X1}$ および $A r^{X3}$ で表される 2 価の複素環基は、より好ましくは式 (AA-1)、式 (AA-2) または式 (AA-7) ~ 式 (AA-26) で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

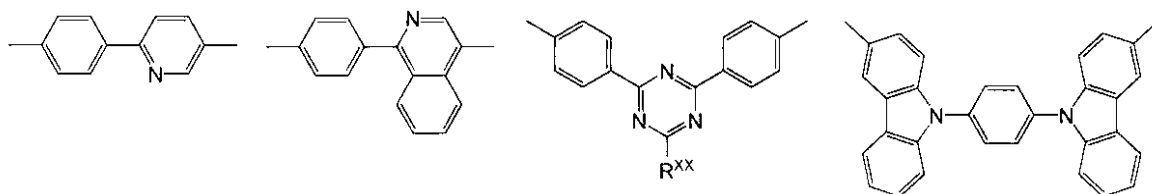
$A r^{X1}$ および $A r^{X3}$ は、好ましくは置換基を有していてもよいアリーレン基である。

$A r^{X2}$ および $A r^{X4}$ で表されるアリーレン基は、より好ましくは式 (A-1)、式 (A-6)、式 (A-7)、式 (A-9) ~ 式 (A-11) または式 (A-19) で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

$A r^{X2}$ および $A r^{X4}$ で表される 2 価の複素環基のより好ましい範囲は、 $A r^{X1}$ および $A r^{X3}$ で表される 2 価の複素環基のより好ましい範囲と同じである。

$A r^{X2}$ および $A r^{X4}$ で表される少なくとも 1 種のアリーレン基と少なくとも 1 種の 2 価の複素環基とが直接結合した 2 価の基における、アリーレン基および 2 価の複素環基のより好ましい範囲、更に好ましい範囲は、それぞれ、 $A r^{X1}$ および $A r^{X3}$ で表されるアリーレン基および 2 価の複素環基のより好ましい範囲、更に好ましい範囲と同じである。

$A r^{X2}$ および $A r^{X4}$ で表される少なくとも 1 種のアリーレン基と少なくとも 1 種の 2 価の複素環基とが直接結合した 2 価の基としては、例えば、下記式で表される基が挙げられ、これらは置換基を有していてもよい。



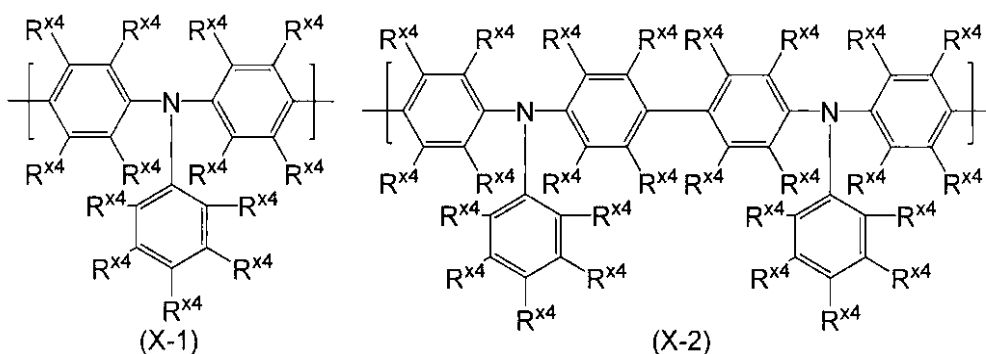
[式中、 R^{XX} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

R^{XX} は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基またはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

$A r^{X2}$ および $A r^{X4}$ は、好ましくは置換基を有していてもよいアリーレン基である。

$A r^{X1}$ ~ $A r^{X4}$ および R^{X1} ~ R^{X3} で表される基が有してもよい置換基としては、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基またはアリール基であり、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

式 (X) で表される構成単位としては、好ましくは式 (X-1) ~ (X-7) で表される構成単位であり、より好ましくは式 (X-3) ~ (X-7) で表される構成単位であり、更に好ましくは式 (X-3) ~ (X-6) で表される構成単位である。

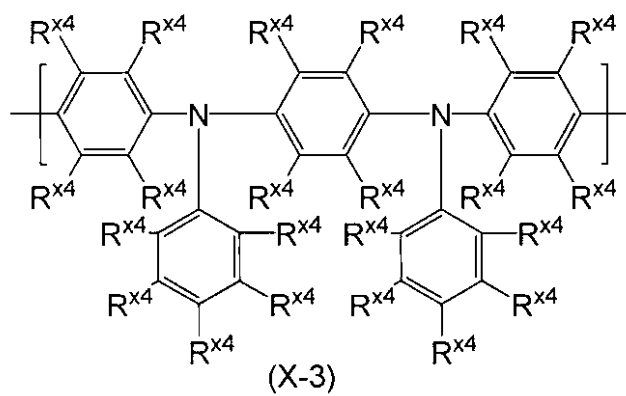


10

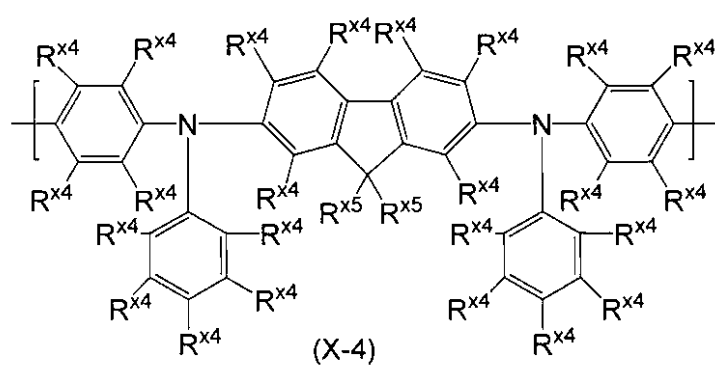
20

30

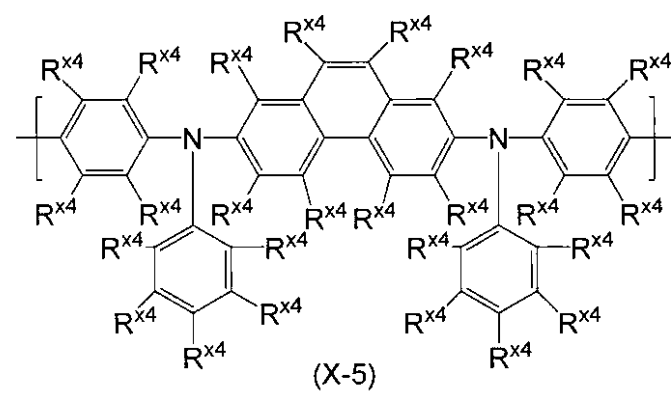
40



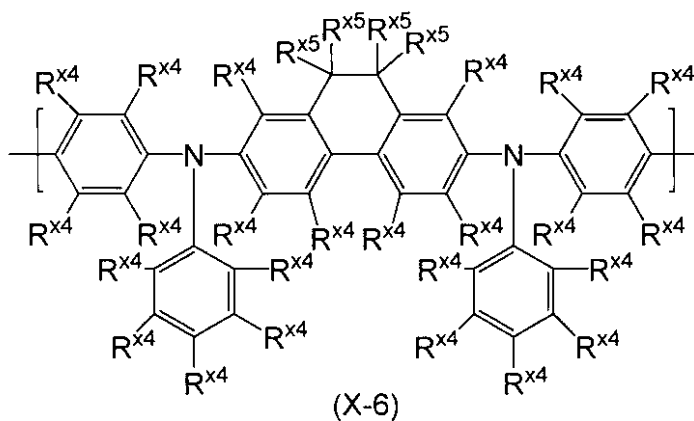
10



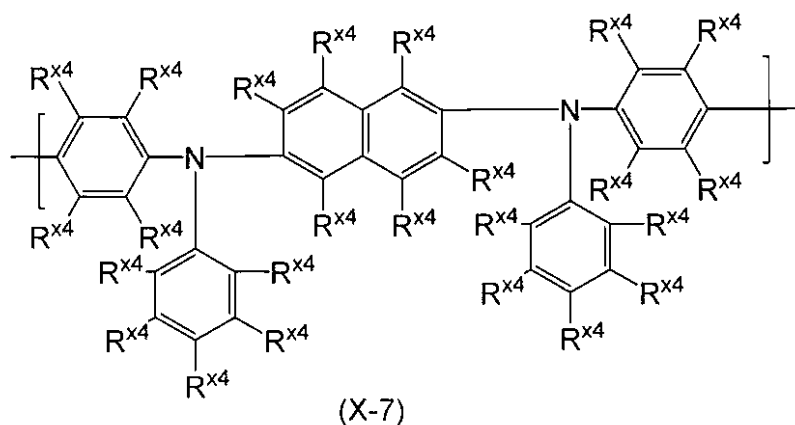
20



30



10



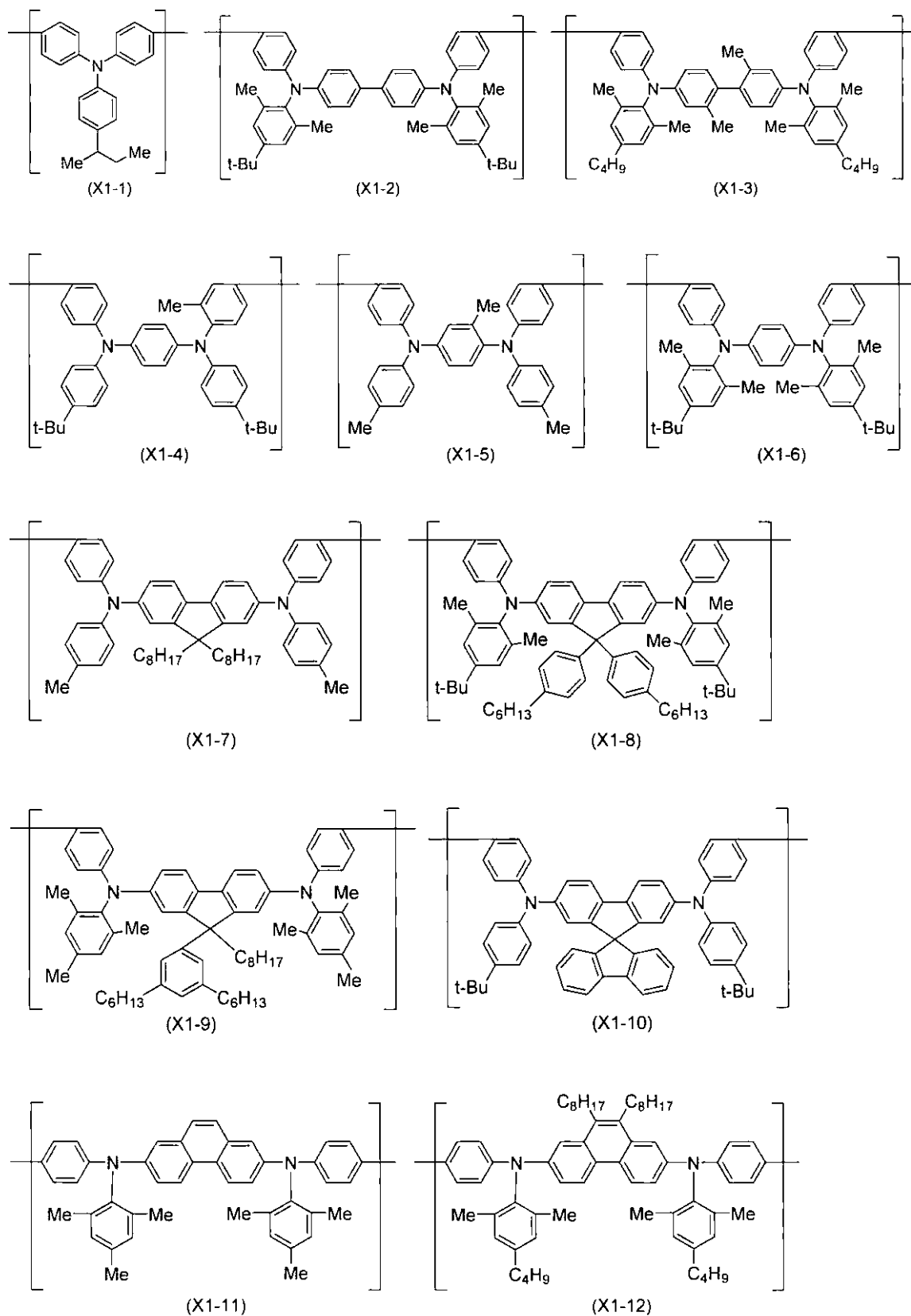
20

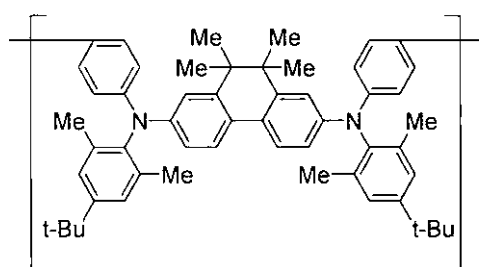
[式中、 R^{x4} および R^{x5} は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、1価の複素環基またはシアノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{x4} は、同一でも異なってもよい。複数存在する R^{x5} は、同一でも異なってもよく、隣接する R^{x5} 同士は互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子と共に環を形成していてもよい。]

式(X)で表される構成単位の含有量は、正孔輸送性が優れるので、高分子化合物に含まれる構成単位の合計含有量に対して、好ましくは0.1～90モル%であり、より好ましくは1～70モル%であり、更に好ましくは5～50モル%である。

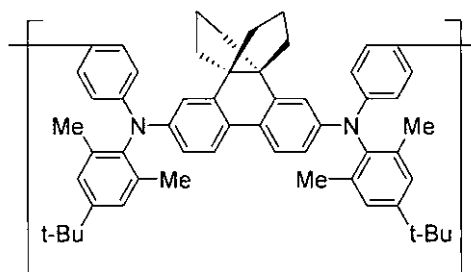
30

式(X)で表される構成単位としては、例えば、式(X1-1)～(X1-19)で表される構成単位が挙げられ、好ましくは式(X1-6)～(X1-14)で表される構成単位である。

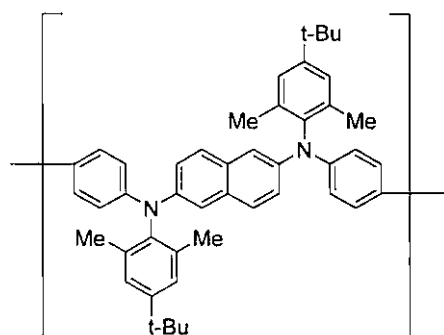




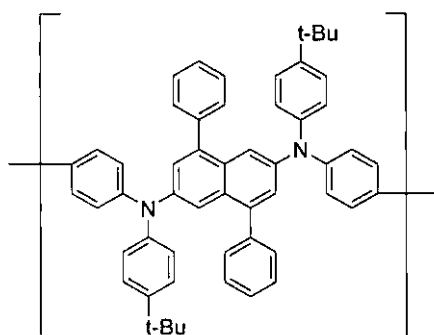
(X1-13)



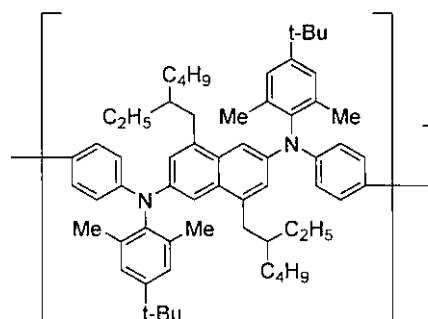
(X1-14)



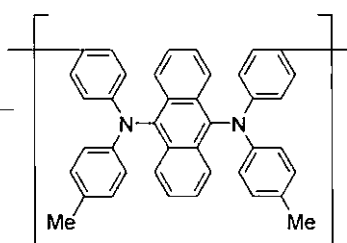
(X1-15)



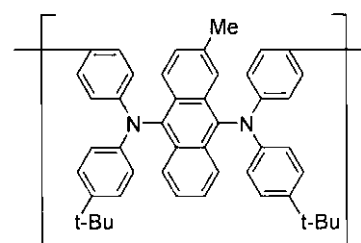
(X1-16)



(X1-17)



(X1-18)



(X1-19)

本発明の高分子化合物において、式（X）で表される構成単位は、1種のみ含まれていても、2種以上含まれていてもよい。

本発明の高分子化合物は、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の輝度寿命が優れるので、更に、式（Y）で表される構成単位を含むことが好ましい。

本発明の高分子化合物は、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の発光効率がより優れるので、更に、式（X）で表される構成単位および式（Y）で表される構成単位を含むことが好ましい。

Ar^{Y1} で表されるアリーレン基は、より好ましくは式（A-1）、式（A-6）、式（A-7）、式（A-9）～式（A-11）、式（A-13）または式（A-19）で表される基であり、更に好ましくは式（A-1）、式（A-7）、式（A-9）または式（A-19）で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

Ar^{Y1} で表される2価の複素環基は、より好ましくは式（AA-4）、式（AA-10）、式（AA-13）、式（AA-15）、式（AA-18）または式（AA-20）で表される基であり、更に好ましくは式（AA-4）、式（AA-10）、式（AA-18）または式（AA-20）で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

Ar^{Y1} で表される少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが直接結合した2価の基における、アリーレン基および2価の複素環基のより好ましい範囲、更に好ましい範囲は、それぞれ、前述の Ar^{Y1} で表されるアリーレン基および2価の複素環基のより好ましい範囲、更に好ましい範囲と同様である。

Ar^{Y1} で表される少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが直接結合した2価の基としては、式(X)の Ar^{X2} および Ar^{X4} で表される少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが直接結合した2価の基と同様のものが挙げられる。

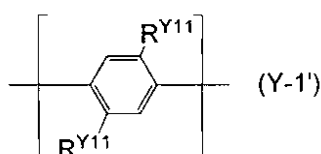
Ar^{Y1} で表される基が有してもよい置換基は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基またはアリール基であり、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

式(Y)で表される構成単位としては、例えば、式(Y-1)~(Y-7)で表される構成単位が挙げられ、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の輝度寿命の観点からは、好ましくは式(Y-1)または(Y-2)で表される構成単位であり、電子輸送性の観点からは、好ましくは式(Y-3)または(Y-4)で表される構成単位であり、正孔輸送性の観点からは、好ましくは式(Y-5)~(Y-7)で表される構成単位である。

10

R^{Y1} は、好ましくは水素原子、アルキル基、シクロアルキル基またはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

式(Y-1)で表される構成単位は、好ましくは、式(Y-1')で表される構成単位である。



20

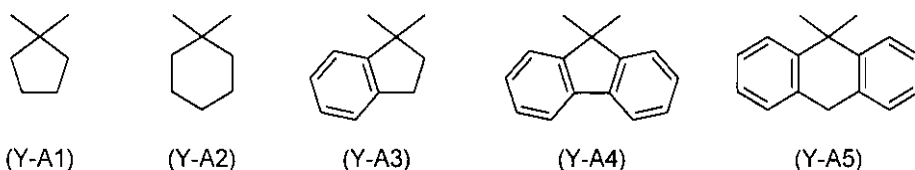
[式中、 R^{Y11} は、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基または1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{Y1} は、同一でも異なってもよい。]

R^{Y11} は、好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基またはアリール基であり、より好ましくは、アルキル基またはシクロアルキル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

R^{Y2} は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基、アリール基または1価の複素環基であり、より好ましくはアルキル基、シクロアルキル基またはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

X^{Y1} において、 $-C(R^{Y2})_2-$ で表される基中の2個の R^{Y2} の組み合わせは、好ましくは双方がアルキル基もしくはシクロアルキル基、双方がアリール基、双方が1価の複素環基、または、一方がアルキル基もしくはシクロアルキル基で他方がアリール基もしくは1価の複素環基であり、より好ましくは一方がアルキル基もしくはシクロアルキル基で他方がアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。2個存在する R^{Y2} は互いに結合して、それぞれが結合する原子と共に環を形成していてもよく、 R^{Y2} が環を形成する場合、 $-C(R^{Y2})_2-$ で表される基としては、好ましくは式(Y-A1)~(Y-A5)で表される基であり、より好ましくは式(Y-A4)で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

30



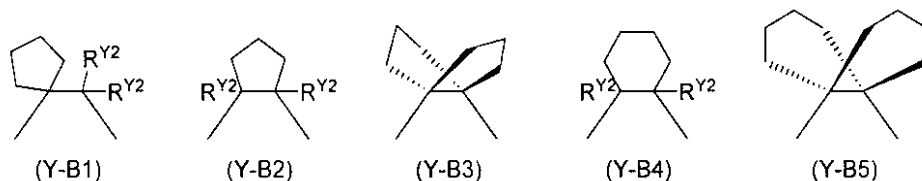
40

X^{Y1} において、 $-C(R^{Y2})=C(R^{Y2})-$ で表される基中の2個の R^{Y2} の組み合わせは、好ましくは双方がアルキル基もしくはシクロアルキル基、または、一方がアルキル基もしくはシクロアルキル基で他方がアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

X^{Y1} において、 $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ で表される基中の4個の R^{Y2} は、好ましくは置換基を有していてもよいアルキル基またはシクロアルキル基である。複数ある R^{Y2} は互いに結合して、それぞれが結合する原子と共に環を形成していてもよく

50

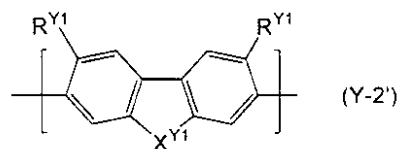
、 R^{Y2} が環を形成する場合、 $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ で表される基は、好ましくは式 (Y-B1) ~ (Y-B5) で表される基であり、より好ましくは式 (Y-B3) で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。



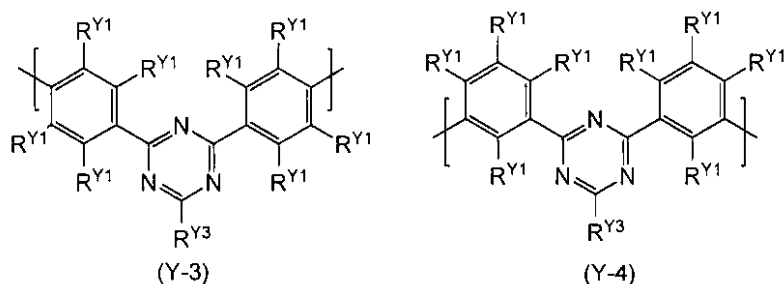
[式中、 R^{Y2} は前記と同じ意味を表す。]

10

式 (Y-2) で表される構成単位は、式 (Y-2') で表される構成単位であることが好ましい。



[式中、 R^{Y1} および X^{Y1} は前記と同じ意味を表す。]

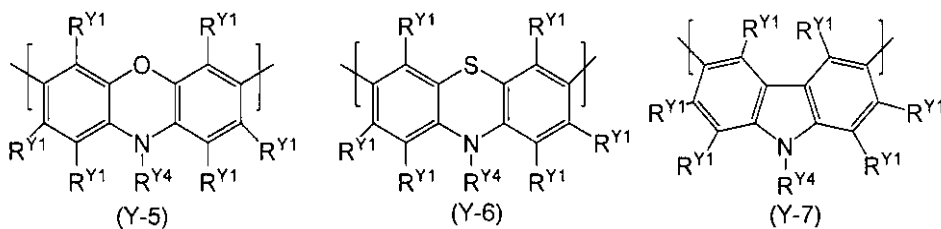


20

[式中、 R^{Y1} は前記と同じ意味を表す。 R^{Y3} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基または1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

R^{Y3} は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基または1価の複素環基であり、より好ましくはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

30

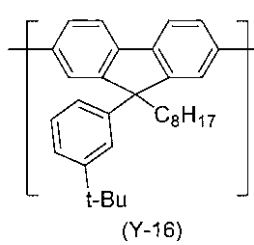
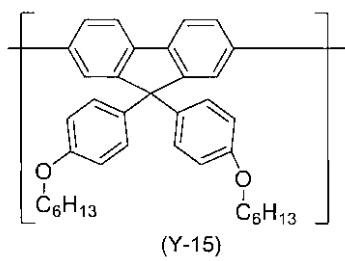
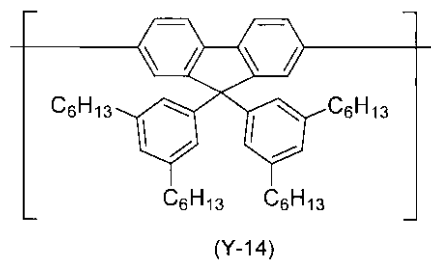
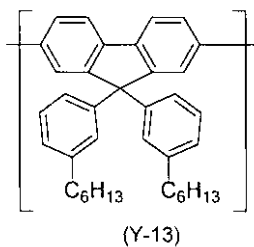
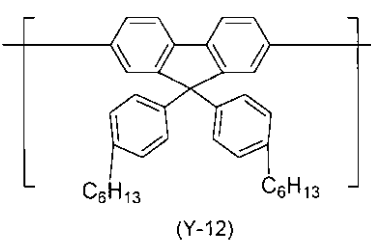
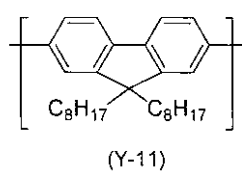


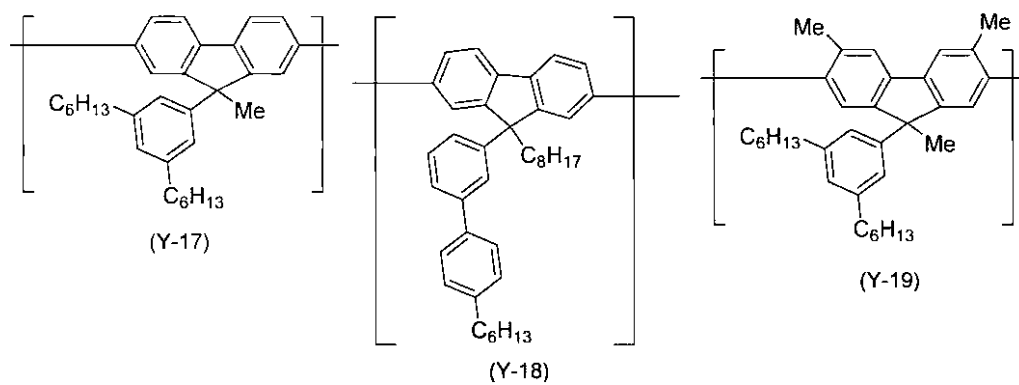
[式中、 R^{Y1} は前記と同じ意味を表す。 R^{Y4} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基または1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

40

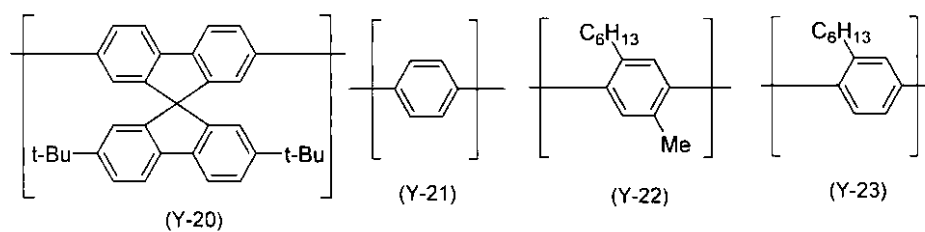
R^{Y4} は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基または1価の複素環基であり、より好ましくはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

式 (Y) で表される構成単位としては、例えば、式 (Y-11) ~ (Y-55) で表される構成単位が挙げられる。

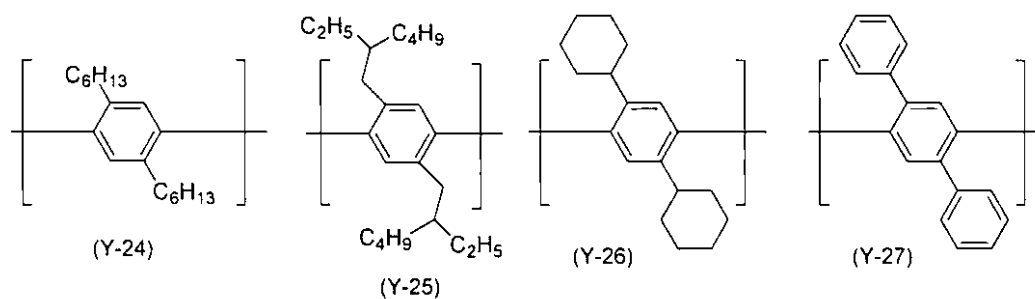




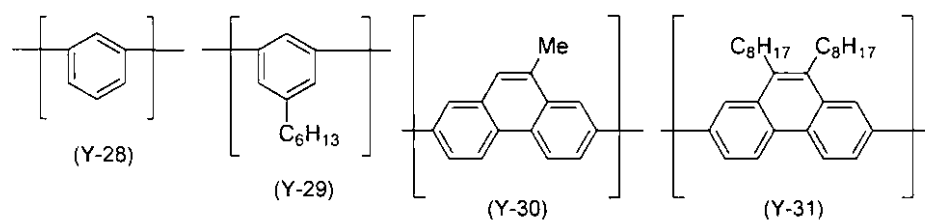
10



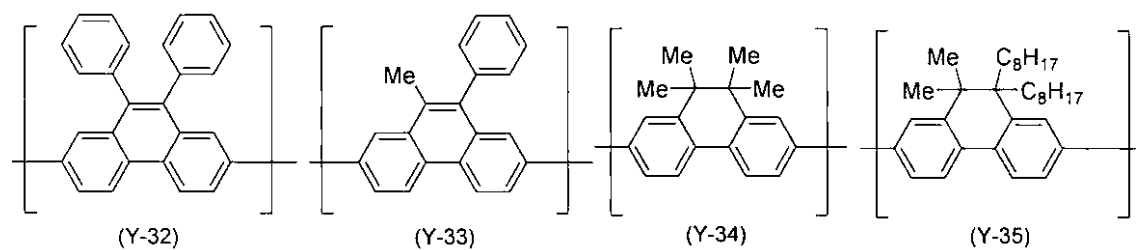
20

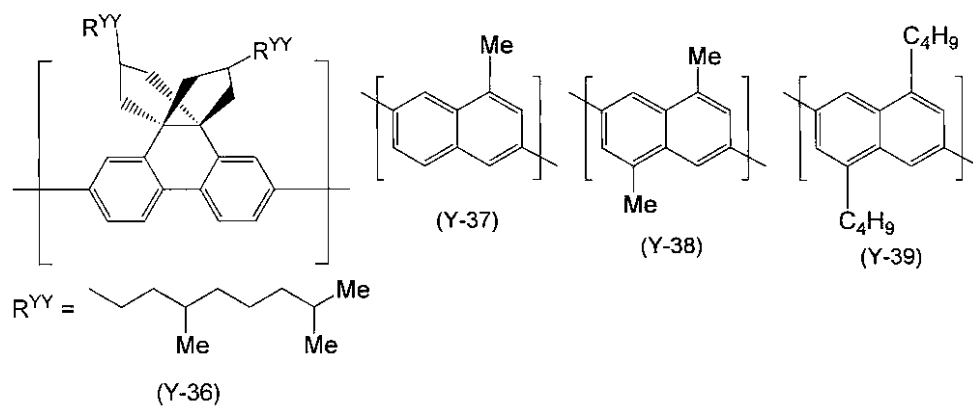


30

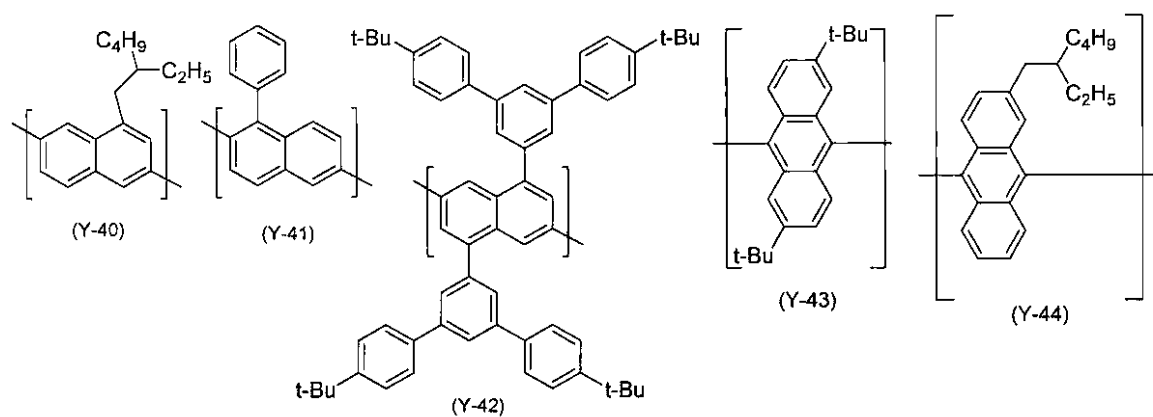


40

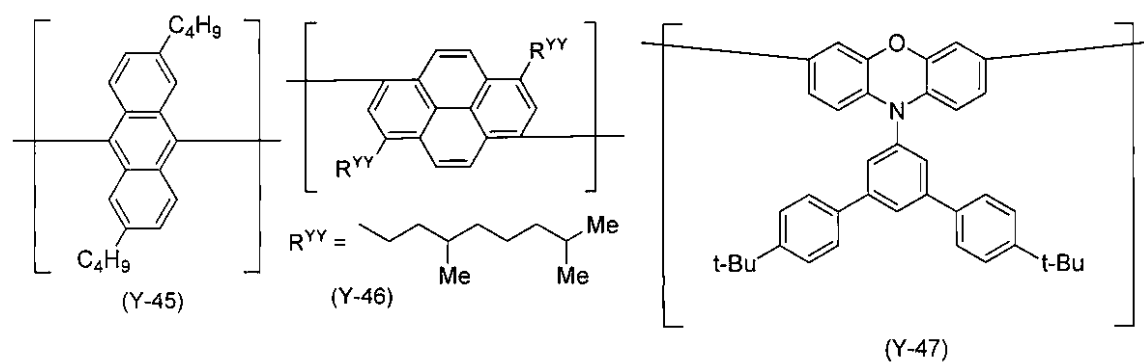




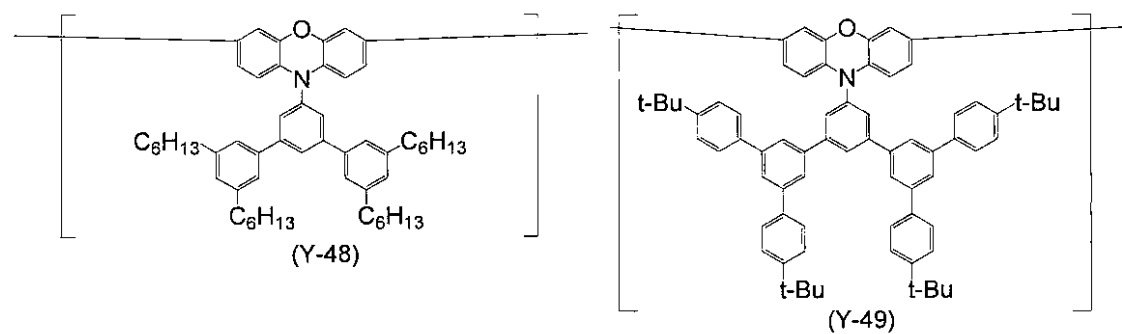
10



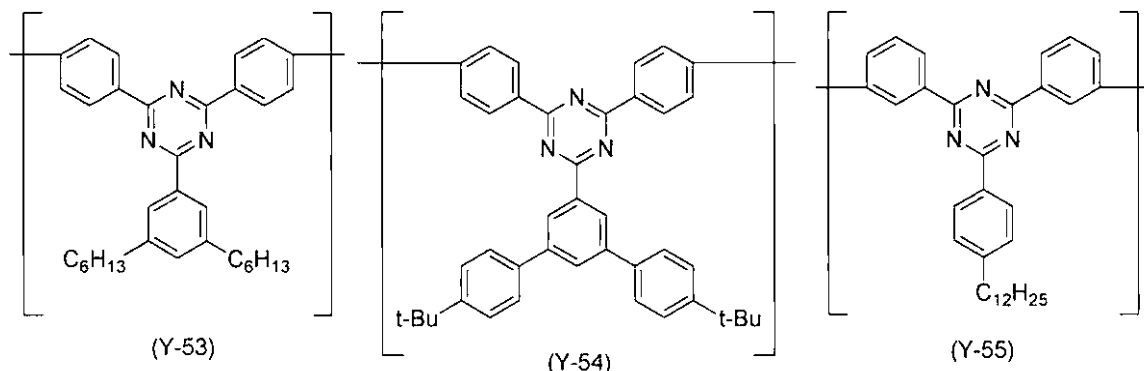
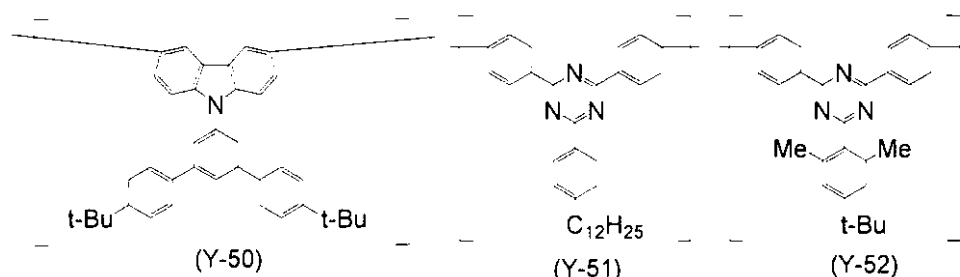
20



30



40



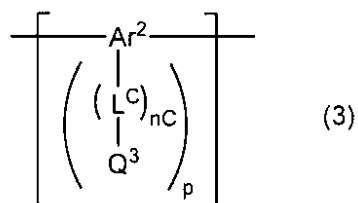
式 (Y) で表される構成単位であって、 Ar^{Y1} がアリーレン基である構成単位の含有量は、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の輝度寿命が優れるので、高分子化合物に含まれる構成単位の合計含有量に対して、好ましくは 0.5 ~ 80 モル% であり、より好ましくは 30 ~ 60 モル% である。

式 (Y) で表される構成単位であって、 Ar^{Y1} が 2 価の複素環基、または、少なくとも 1 種のアリーレン基と少なくとも 1 種の 2 価の複素環基とが直接結合した 2 価の基である構成単位の含有量は、本発明の高分子化合物を用いた発光素子の電荷輸送性が優れるので、高分子化合物に含まれる構成単位の合計含有量に対して、好ましくは 0.5 ~ 30 モル% であり、より好ましくは 3 ~ 40 モル% である。

式 (Y) で表される構成単位は、高分子化合物中に、1 種のみ含まれていてもよく、2 種以上含まれていてもよい。

本発明の高分子化合物は、架橋性が優れるので、更に、式 (3) で表される構成単位および式 (3') で表される構成単位からなる群から選ばれる少なくとも 1 種の構成単位を含むことが好ましい。

[式 (3) で表される構成単位]



[式中、

n は 0 ~ 5 の整数を表し、 p は 1 または 2 の整数を表す。

Ar^2 は、芳香族炭化水素基または複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

L^c は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2 価の複素環基、 $-NR'$ で表される基、酸素原子または硫黄原子を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 R' は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 L^c が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

Q^3 は、架橋基 A 群から選ばれる架橋基を表す。 Q^3 が複数存在する場合、それらは同

一でも異なっているてもよい。]

nC は、本発明の発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは0または1であり、より好ましくは0である。

p は、本発明の発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは1または2であり、より好ましくは2である。

Ar^2 は、本発明の発光素子の発光効率がより優れるので、好ましくは置換基を有しているてもよい芳香族炭化水素基である。

Ar^2 で表される芳香族炭化水素基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常6～60であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

Ar^2 で表される芳香族炭化水素基の p 個の置換基を除いたアリーレン基部分としては、好ましくは、式(A-1)～式(A-20)で表される基であり、より好ましくは、式(A-1)、式(A-2)、式(A-6)～式(A-10)、式(A-19)または式(A-20)で表される基であり、更に好ましくは、式(A-1)、式(A-2)、式(A-7)、式(A-9)または式(A-19)で表される基であり、これらの基は置換基を有しているてもよい。

10

Ar^2 で表される複素環基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常6～60であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

Ar^2 で表される複素環基の p 個の置換基を除いた2価の複素環基部分としては、好ましくは、式(AA-1)～式(AA-34)で表される基である。

Ar^2 で表される芳香族炭化水素基および複素環基は置換基を有しているてもよく、置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、1価の複素環基およびシアノ基が挙げられる。

20

L^C で表されるアルキレン基は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常1～10であり、好ましくは1～5であり、より好ましくは1～3である。 L^C で表されるシクロアルキレン基は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3～10である。

アルキレン基およびシクロアルキレン基は、置換基を有しているてもよく、例えば、メチレン基、エチレン基、プロピレン基、ブチレン基、ヘキシレン基、シクロヘキシレン基、オクチレン基が挙げられる。

L^C で表されるアルキレン基およびシクロアルキレン基は、置換基を有しているてもよい。アルキレン基およびシクロアルキレン基が有しているてもよい置換基としては、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ハロゲン原子およびシアノ基が挙げられる。

30

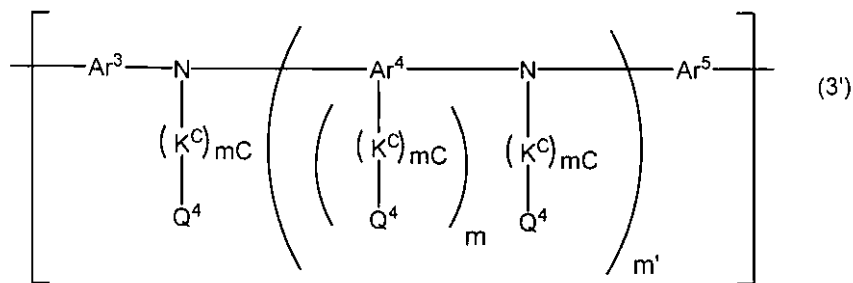
L^C で表されるアリーレン基は、置換基を有しているてもよい。アリーレン基としては、*o*-フェニレン、*m*-フェニレン、*p*-フェニレンが挙げられる。アリール基が有しているてもよい置換基としては、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、ハロゲン原子、シアノ基および架橋基A群から選ばれる架橋基が挙げられる。

L^C は、本発明の高分子化合物の製造が容易になるため、好ましくはフェニレン基またはアルキレン基であり、これらの基は置換基を有しているてもよい。

40

Q^3 で表される架橋基としては、本発明の高分子化合物の架橋性が優れるので、好ましくは式(XL-1)、(XL-3)、(XL-5)または(XL-7)で表される架橋基であり、より好ましくは式(XL-1)で表される架橋基である。

式(3)で表される構成単位の含有量は、本発明の高分子化合物の安定性および架橋性が優れるので、高分子化合物に含まれる構成単位の合計含有量に対して、好ましくは0.5～50モル%であり、より好ましくは3～30モル%であり、更に好ましくは3～20モル%である。



[式中、

$m\text{C}$ は 0 ～ 5 の整数を表し、 m は 1 ～ 4 の整数を表し、 m' は 0 または 1 を表す。 $m\text{C}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

Ar^4 は、芳香族炭化水素基、複素環基、または、少なくとも 1 種の芳香族炭化水素環と少なくとも 1 種の複素環が直接結合した基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

Ar^3 および Ar^5 は、それぞれ独立に、アリーレン基または 2 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

Ar^3 、 Ar^4 および Ar^5 はそれぞれ、当該基が結合している窒素原子に結合している当該基以外の基と、直接または酸素原子もしくは硫黄原子を介して結合して、環を形成していてもよい。

K^{C} は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2 価の複素環基、 $-\text{NR}'$ で表される基、酸素原子または硫黄原子を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 R' は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリアル基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 K^{C} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

Q^4 は、架橋基 A 群から選ばれる架橋基、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリアル基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。但し、少なくとも 1 つの Q^4 は、架橋基 A 群から選ばれる架橋基である。]

$m\text{C}$ は、本発明の発光素子の発光効率がより優れるため、0 または 1 であることが好ましく、0 であることがより好ましい。

m は、本発明の発光素子の発光効率がより優れるので、2 であることが好ましい。

m' は、本発明の高分子化合物の合成が容易となり、かつ、本発明の発光素子の発光効率がより優れるため、0 であることが好ましい。

Ar^4 は、本発明の発光素子の発光効率がより優れるので、芳香族炭化水素基であることが好ましい。

Ar^4 で表される芳香族炭化水素基の m 個の置換基を除いたアリーレン基部分の定義や例は、前述の式 (X) における $\text{Ar}^{\text{X}2}$ で表されるアリーレン基の定義や例と同じである。

Ar^4 で表される複素環基の m 個の置換基を除いた 2 価の複素環基部分の定義や例は、前述の式 (X) における $\text{Ar}^{\text{X}2}$ で表される 2 価の複素環基部分の定義や例と同じである。

Ar^5 で表される少なくとも 1 種の芳香族炭化水素環と少なくとも 1 種の複素環が直接結合した基の m 個の置換基を除いた 2 価の基の定義や例は、前述の式 (X) における $\text{Ar}^{\text{X}2}$ で表される少なくとも 1 種のアリーレン基と少なくとも 1 種の 2 価の複素環基とが直接結合した 2 価の基の定義や例と同じである。

Ar^3 および Ar^5 は、本発明の発光素子の発光効率がより優れるので、アリーレン基であることが好ましい。

Ar^3 および Ar^5 で表されるアリーレン基の定義や例は、前述の式 (X) における $\text{Ar}^{\text{X}1}$ および $\text{Ar}^{\text{X}3}$ で表されるアリーレン基の定義や例と同じである。

Ar^3 および Ar^5 で表される 2 価の複素環基の定義や例は、前述の式 (X) における $\text{Ar}^{\text{X}1}$ および $\text{Ar}^{\text{X}3}$ で表される 2 価の複素環基の定義や例と同じである。

Ar^3 、 Ar^4 および Ar^5 で表される基は置換基を有していてもよく、置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、1 価の複素環基およびシアノ基が挙げられる。

K^C で表されるアルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2 価の複素環基の定義や例は、それぞれ、 L^C で表されるアルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2 価の複素環基の定義や例と同じである。

K^C は、本発明の高分子化合物の合成が容易となるため、フェニレン基またはメチレン基であることが好ましい。

Q^4 で表される架橋基としては、本発明の高分子化合物の架橋性が優れるので、好ましくは式 (XL-1)、式 (XL-3)、式 (XL-5)、式 (XL-7)、式 (XL-16) または式 (XL-17) で表される架橋基であり、より好ましくは式 (XL-17) で表される架橋基である。

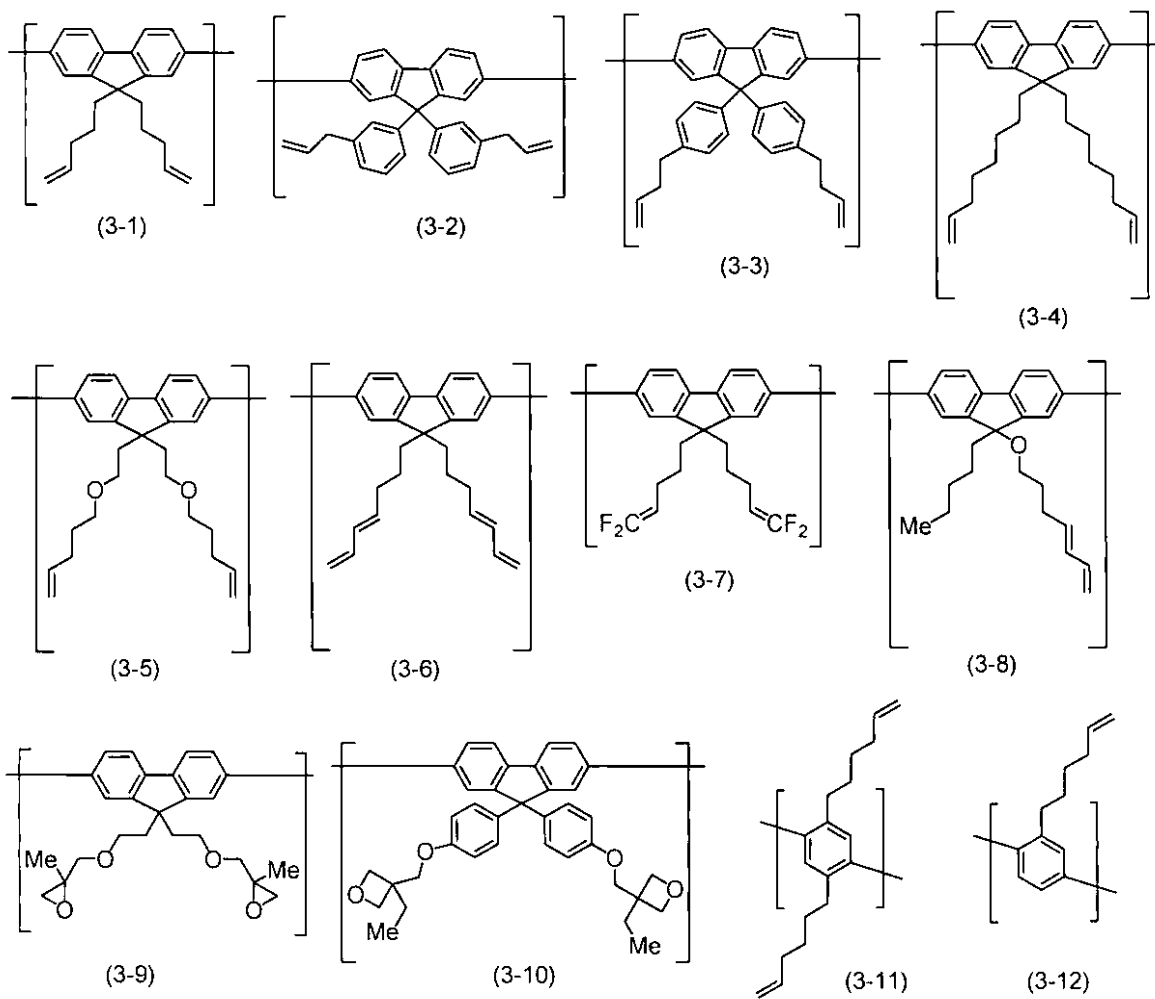
10

式 (3') で表される構成単位の含有量は、本発明の高分子化合物の安定性および架橋性が優れるので、高分子化合物に含まれる構成単位の合計含有量に対して、0.5~50 モル%であることが好ましく、3~30 モル%であることがより好ましく、3~20 モル%であることが更に好ましい。

式 (3) で表される構成単位および式 (3') で表される構成単位は、それぞれ、高分子化合物中に、1 種のみ含まれていてもよく、2 種以上含まれていてもよい。

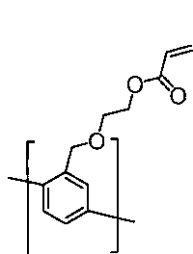
式 (3) で表される構成単位としては、例えば、式 (3-1)~式 (3-20) で表される構成単位が挙げられ、式 (3') で表される構成単位としては、例えば、式 (3'-1)~式 (3'-13) で表される構成単位が挙げられる。これらの中でも、本発明の高分子化合物の架橋性が優れるので、好ましくは、式 (3-1)~式 (3-7)、式 (3-11)、式 (3-12) または式 (3-15)~式 (3-20) で表される構成単位であり、より好ましくは、式 (3-1)~式 (3-4)、式 (3-7)、式 (3-11)、式 (3-12)、式 (3-15) または式 (3-17) で表される構成単位であり、更に好ましくは、式 (3-1)~式 (3-4)、式 (3-11) または式 (3-15) で表される構成単位である。

20

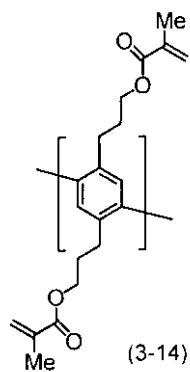


10

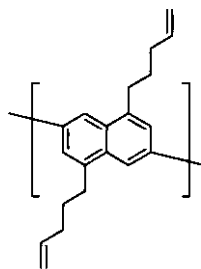
20



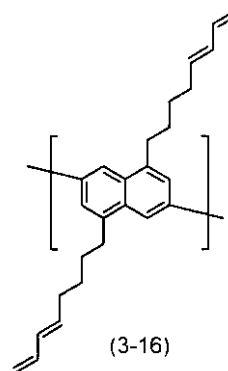
(3-13)



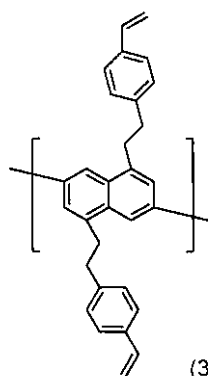
(3-14)



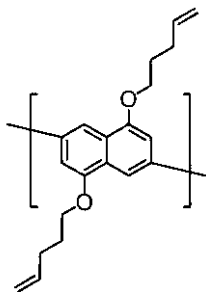
(3-15)



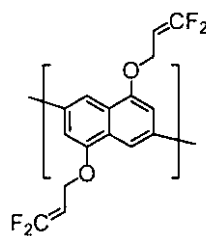
(3-16)



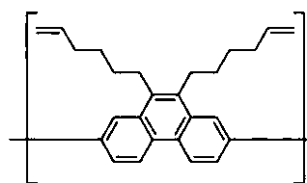
(3-17)



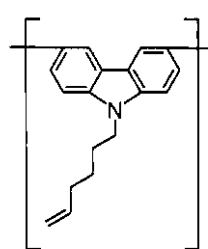
(3-18)



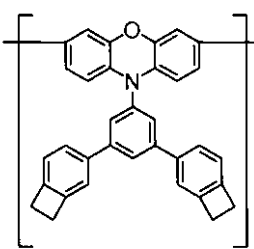
(3-19)



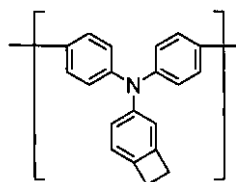
(3-20)



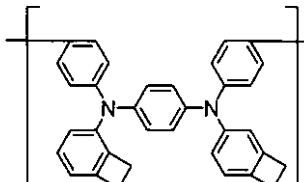
(3'-1)



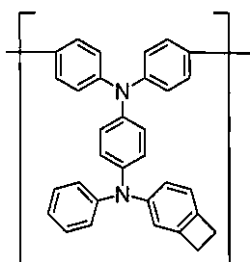
(3'-2)



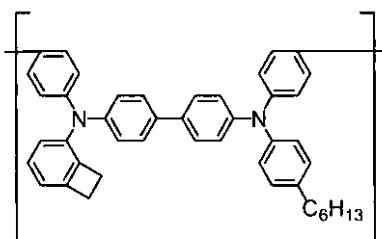
(3'-3)



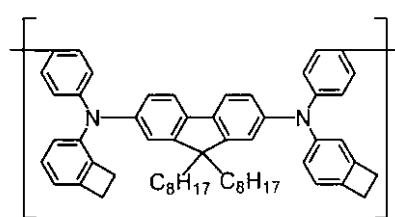
(3'-4)



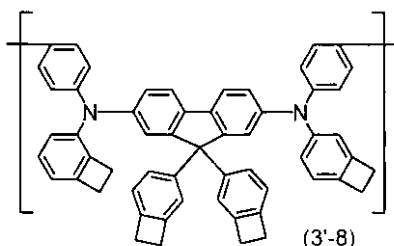
(3'-5)



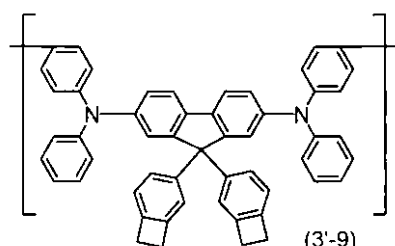
(3'-6)



(3'-7)



(3'-8)



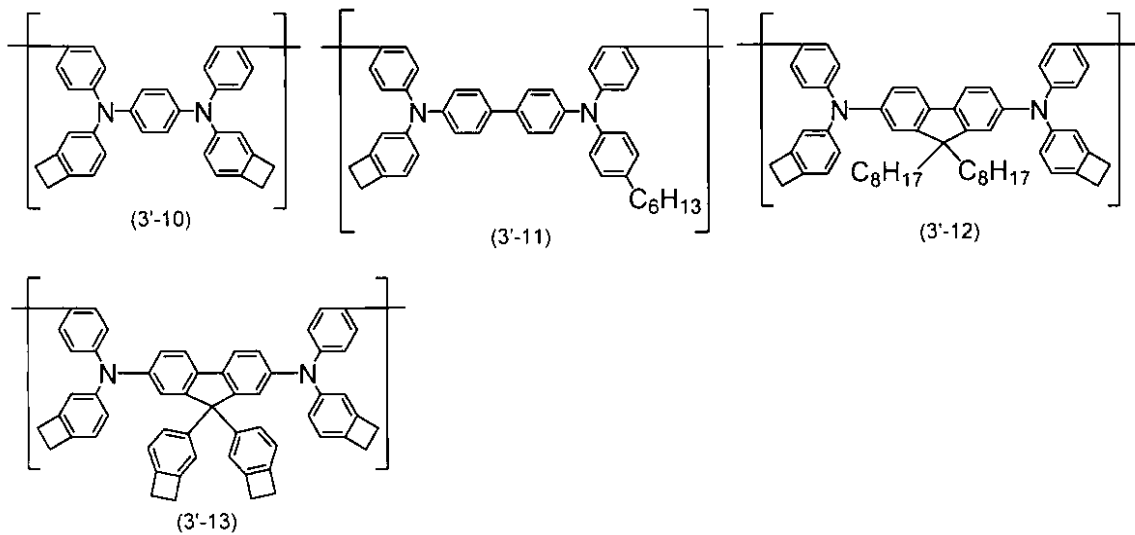
(3'-9)

10

20

30

40



10

本発明の高分子化合物としては、例えば、表４に示す高分子化合物P-1～P-10が挙げられる。ここで、「その他の構成単位」とは、式(2)、式(X)、式(Y)、式(3)および式(3')で表される構成単位以外の構成単位を意味する。

【表４】

20

高分子化合物	構成単位のモル比					
	式(2)	式(X)	式(Y)	式(3)	式(3')	その他
	q	r	s	t	u	v
P-1	0.1～99.9	0.1～99.9	0	0	0	0～30
P-2	0.1～99.9	0	0	0	0.1～99.9	0～30
P-3	0.1～99.8	0.1～99.8	0.1～99.8	0	0	0～30
P-4	0.1～99.8	0.1～99.8	0	0.1～99.8	0	0～30
P-5	0.1～99.8	0	0.1～99.8	0	0.1～99.8	0～30
P-6	0.1～99.8	0	0	0.1～99.8	0.1～99.8	0～30
P-7	0.1～99.8	0.1～99.8	0	0	0.1～99.8	0～30
P-8	0.1～99.7	0.1～99.7	0.1～99.7	0.1～99.7	0	0～30
P-9	0.1～99.7	0	0.1～99.7	0.1～99.7	0.1～99.7	0～30
P-10	0.1～99.6	0.1～99.6	0.1～99.6	0.1～99.6	0.1～99.6	0～30

30

40

[表中、q、r、s、t、uおよびvは、各構成単位のモル比率を表す。q + r + s + t + u + v = 100であり、かつ、70 ≤ q + r + s + t + v ≤ 100である。]

高分子化合物P-1～P-10における、式(2)、式(X)、式(Y)、式(3)および式(3')で表される構成単位の例および好ましい範囲は、上述のとおりである。

本発明の高分子化合物の末端基は、重合活性基がそのまま残っていると、高分子化合物を発光素子の作製に用いた場合に発光特性や輝度寿命が低下する可能性があるため、好ましくは安定な基である。この末端基としては、主鎖と共役結合している基が好ましく、炭

50

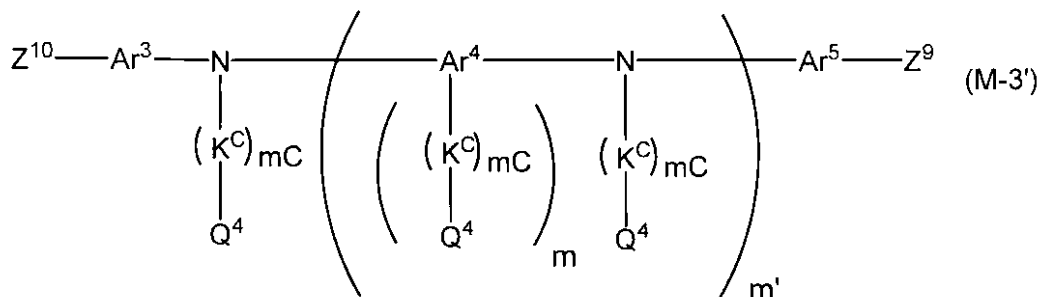
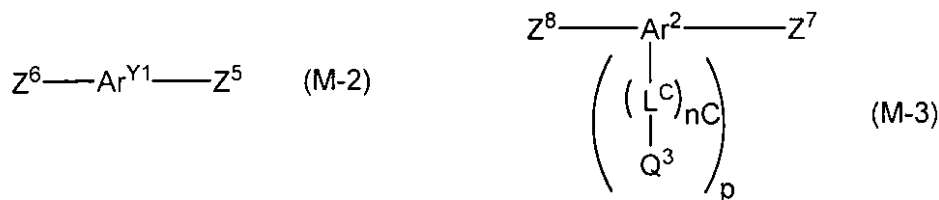
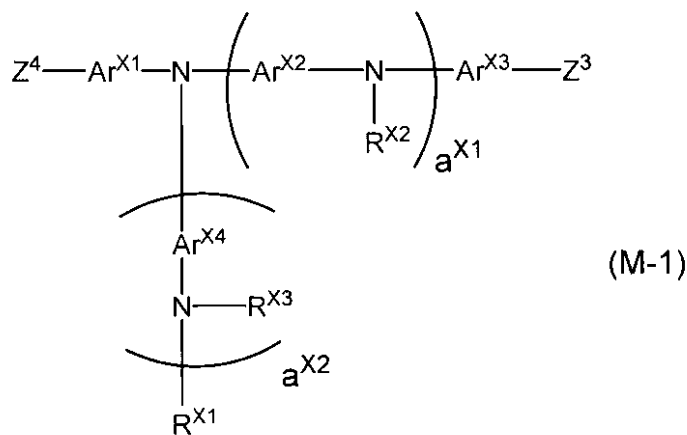
素-炭素結合を介してアリール基または1価の複素環基と結合している基が挙げられる。

本発明の高分子化合物は、ブロック共重合体、ランダム共重合体、交互共重合体、グラフト共重合体のいずれであってもよいし、その他の態様であってもよいが、複数種の原料モノマーを共重合してなる共重合体であることが好ましい。

<高分子化合物の製造方法>

次に、本発明の高分子化合物の製造方法について説明する。

本発明の高分子化合物は、例えば、式(2M)で表される化合物を縮合重合させることにより、あるいは、式(2M)で表される化合物と、式(M-1)で表される化合物および/または式(M-2)で表される化合物と、他の化合物(例えば、式(M-3)および/または式(3'))で表される化合物)を縮合重合させることにより製造することができる。本明細書において、本発明の高分子化合物の製造に使用される化合物を総称して、「原料モノマー」ということがある。



[式中、

$\text{a}^{\text{X}1}$ 、 $\text{a}^{\text{X}2}$ 、 $\text{Ar}^{\text{X}1} \sim \text{Ar}^{\text{X}4}$ 、 $\text{R}^{\text{X}1} \sim \text{R}^{\text{X}3}$ 、 $\text{Ar}^{\text{Y}1}$ 、 nC 、 p 、 L^{C} 、 Q^3 、 Ar^2 、 Ar^3 、 Ar^4 、 Ar^5 、 K^{C} 、 Q^4 、 m 、 m' および mC は、前記と同じ意味を表す。

$\text{Z}^3 \sim \text{Z}^{10}$ は、それぞれ独立に、置換基A群および置換基B群からなる群から選ばれる基を表す。]

例えば、 Z^1 、 Z^2 、 Z^5 および Z^6 が置換基A群から選ばれる基である場合、 Z^3 、 Z^4 、 Z^7 、 Z^8 、 Z^9 および Z^{10} は、置換基B群から選ばれる基を選択する。

例えば、 Z^1 、 Z^2 、 Z^5 および Z^6 が置換基B群から選ばれる基である場合、 Z^3 、

10

20

30

40

50

＜置換基 A 群＞

＜置換基 B 群＞

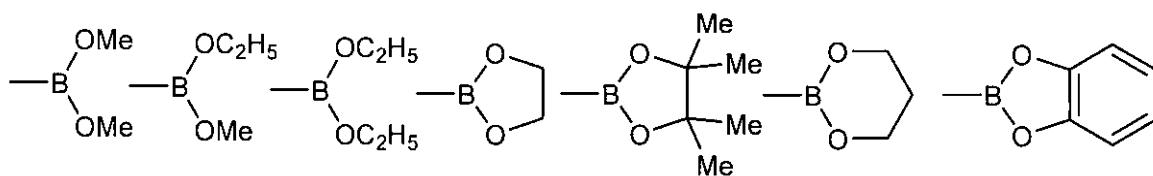
10

—MgY'（式中、Y'は、塩素原子、臭素原子またはヨウ素原子を表す。）で表される基；

—ZnY' ' (式中、Y' ' は、塩素原子、臭素原子またはヨウ素原子を表す。) で表される基; および、

20

—B (OR^C 2) ₂ で表される基としては、下記式で表される基が例示される。



30

縮合重合は、通常、触媒、塩基および溶媒の存在下で行なわれるが、必要に応じて、相間移動触媒を共存させて行ってもよい。

40

触媒の使用量は、原料モノマーのモル数の合計に対する遷移金属の量として、通常、0.00001～3モル当量である。

50

アンモニウム、臭化テトラブチルアンモニウム等の相間移動触媒が挙げられる。塩基および相間移動触媒は、それぞれ、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

塩基および相間移動触媒の使用量は、それぞれ、原料モノマーの合計モル数に対して、通常0.001～100モル当量である。

溶媒としては、例えば、トルエン、キシレン、メシチレン、テトラヒドロフラン、1,4-ジオキサン、ジメトキシエタン、N,N-ジメチルアセトアミド、N,N-ジメチルホルムアミド等の有機溶媒、水が挙げられる。溶媒は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

溶媒の使用量は、通常、原料モノマーの合計100重量部に対して、10～10000重量部である。

縮合重合の反応温度は、通常-100～200℃である。縮合重合の反応時間は、通常1時間以上である。

重合反応の後処理は、公知の方法、例えば、分液により水溶性不純物を除去する方法、メタノール等の低級アルコールに重合反応後の反応液を加えて、析出させた沈殿を濾過した後、乾燥させる方法等を単独、または組み合わせて行う。高分子化合物の純度が低い場合、例えば、再結晶、再沈殿、ソックスレー抽出器による連続抽出、カラムクロマトグラフィー等の通常の方法にて精製することができる。

[式(2M)で表される化合物]

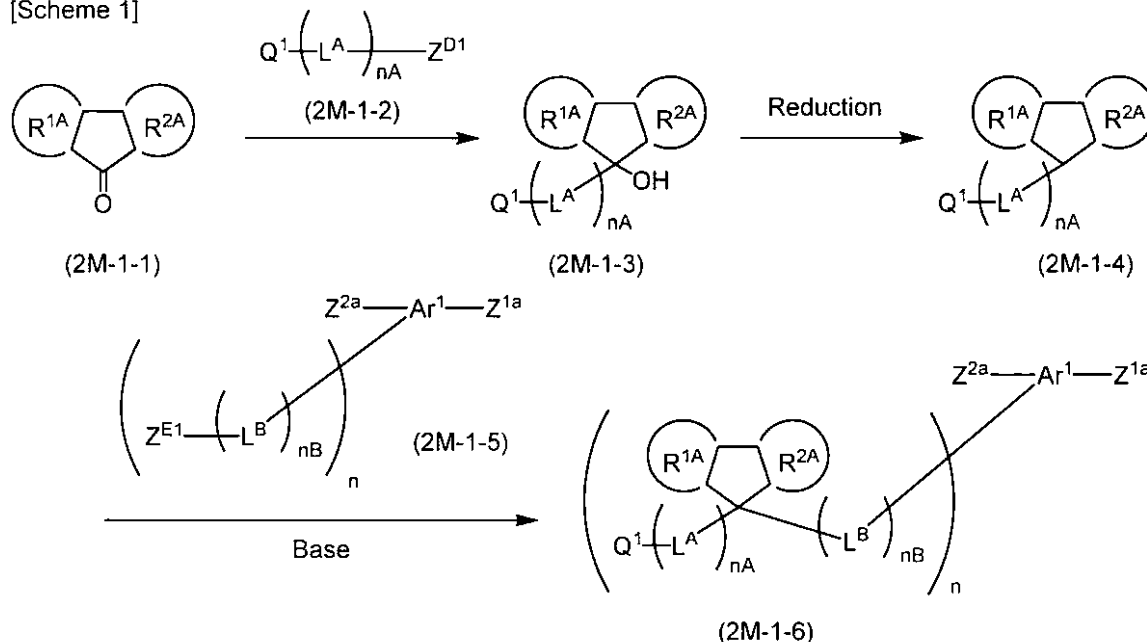
本発明の化合物は、式(2M)で表される化合物であり、上記の本発明の高分子化合物の製造方法において、好適に使用することができる。

Z¹およびZ²は、本発明の化合物の製造が容易になるので、好ましくは同一の基である。

[式(2M)で表される化合物の製造方法]

式(2M)で表される化合物は、例えば、下記スキーム1～5に記載の方法で製造することができる。

[Scheme 1]



スキーム1中、

R^{1A}、R^{2A}、Q¹、L^A、n_A、Ar¹、L^B、n_Bおよびnは、前記を同じ意味を表す。

Z^{D1}は、アルカリ金属原子、または、-M¹⁰Z^{1H}で表される基を表す。M¹⁰は、マグネシウム原子または亜鉛原子を表し、Z^{1H}は、ハロゲン原子を表す。

Z^{E1}は、置換基A群から選ばれる基を表す。

Z^{1a}およびZ^{2a}は、それぞれ独立に、水素原子または置換基A群から選ばれる基を

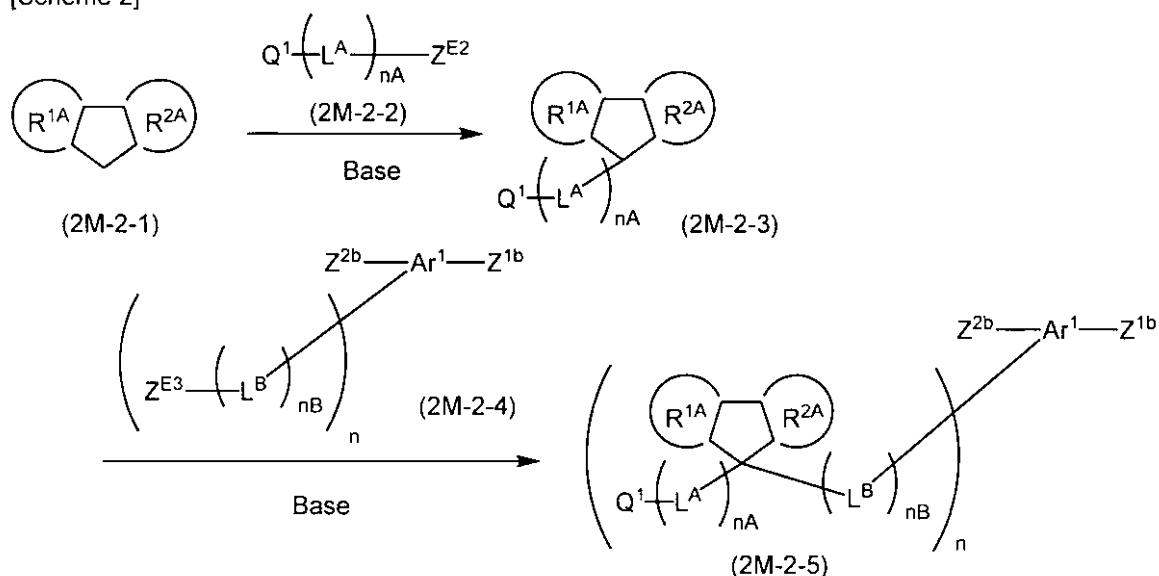
表す。

Z^{D1} で表されるアルカリ金属原子としては、リチウム原子、カリウム原子が挙げられる。

Z^{1H} で表されるハロゲン原子としては、塩素原子、臭素原子またはヨウ素原子が挙げられる。

スキーム 1 において、まず、式 (2M-1-1) で表される化合物と、式 (2M-1-2) で表される化合物とを求核付加反応させることにより、式 (2M-1-3) で表される化合物を合成する。次に、式 (2M-1-3) で表される化合物を、水素添加反応、トリエチルシランを使用した還元反応等の公知の反応により水酸基を水素原子に変換することで、式 (2M-1-4) で表される化合物を合成する。次に、塩基の存在下において、式 (2M-1-5) で表される化合物と、式 (2M-1-4) で表される化合物とを求核置換反応させることにより、式 (2M-1-6) で表される化合物を合成することができる。

[Scheme 2]



スキーム 2 中、

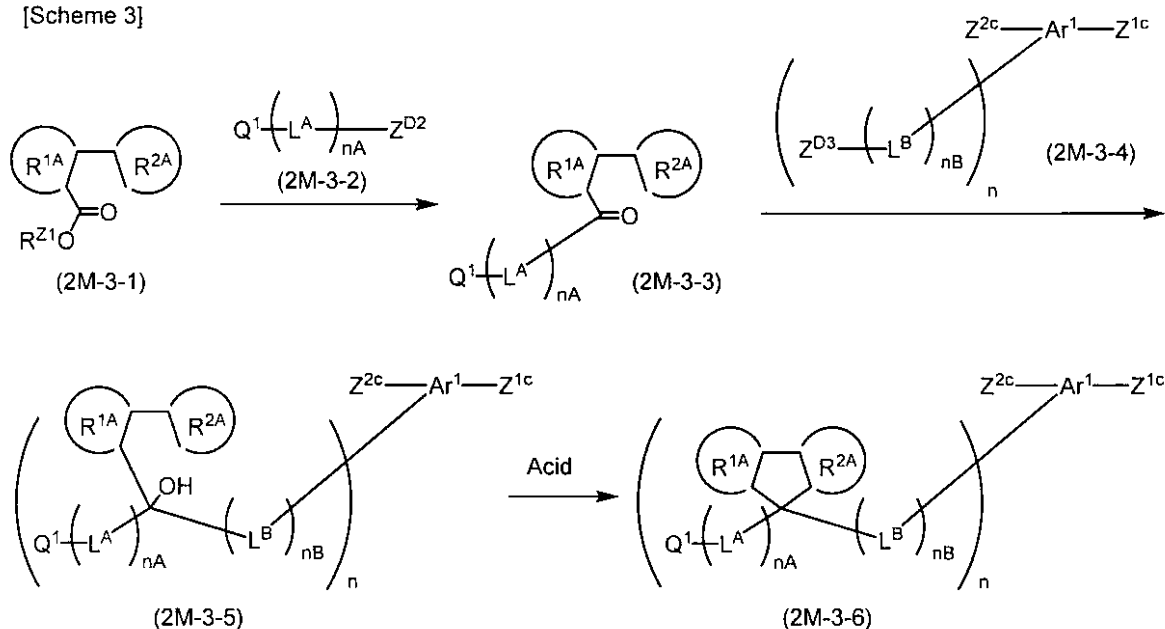
R^{1A} 、 R^{2A} 、 Q^1 、 L^A 、 nA 、 Ar^1 、 L^B 、 nB および n は、前記と同じ意味を表す。

Z^{E2} および Z^{E3} は、それぞれ独立に、置換基 A 群から選ばれる基を表す。

Z^{1b} および Z^{2b} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基 A 群から選ばれる基を表す。

スキーム 2 において、まず、塩基の存在下において、式 (2M-2-1) で表される化合物と、式 (2M-2-2) で表される化合物とを求核置換反応させることにより、式 (2M-2-3) で表される化合物を合成する。次に、塩基の存在下において、式 (2M-2-4) で表される化合物と、式 (2M-2-3) で表される化合物とを求核置換反応させることにより、式 (2M-2-5) で表される化合物を合成することができる。

[Scheme 3]



スキーム 3 中、

R^{1A} 、 R^{2A} 、 Q^1 、 L^A 、 nA 、 Ar^1 、 L^B 、 nB および n は前記と同じ意味を表す。

R^{Z1} は、アルキル基またはシクロアルキル基を表し、この基は置換基を有していてもよい。

Z^{D2} および Z^{D3} は、それぞれ独立に、アルカリ金属原子、または、 $-M^{11}Z^{2H}$ で表される基を表す。 M^{11} は、マグネシウム原子または亜鉛原子を表し、 Z^{2H} は、ハロゲン原子を表す。

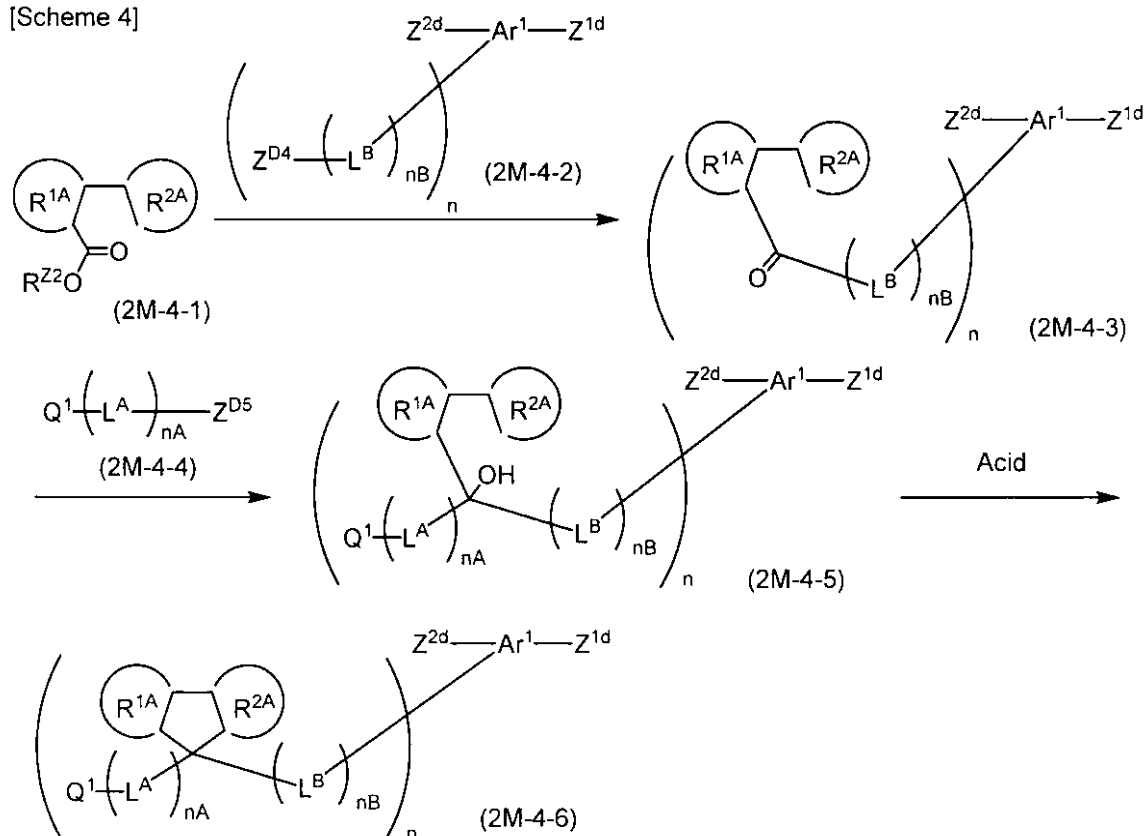
Z^{1c} および Z^{2c} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基 A 群から選ばれる基を表す。

Z^{D2} および Z^{D3} で表されるアルカリ金属原子としては、リチウム原子、カリウム原子が挙げられる。

Z^{2H} で表されるハロゲン原子としては、塩素原子、臭素原子またはヨウ素原子が挙げられる。

スキーム 3 において、まず、式 (2M-3-1) で表される化合物と、式 (2M-3-2) で表される化合物とを求核置換反応させることにより、式 (2M-3-3) で表される化合物を合成する。次に、式 (2M-3-3) で表される化合物と、式 (2M-3-4) で表される化合物とを求核付加反応させることにより、式 (2M-3-5) で表される化合物を合成する。次に、式 (2M-3-5) で表される化合物を、酸存在下においてカチオンを発生させ分子内閉環させる等の公知の反応により閉環反応させることで、式 (2M-3-6) で表される化合物を合成することができる。

[Scheme 4]



スキーム 4 中、
 R^{1A} 、 R^{2A} 、 Q^1 、 L^A 、 nA 、 Ar^1 、 L^B 、 nB および n は、前記と同じ意味を表す。

R^{Z2} は、アルキル基またはシクロアルキル基を表し、この基は置換基を有していてもよい。

Z^{D4} および Z^{D5} は、それぞれ独立に、アルカリ金属原子、または、 $-M^{12}Z^{3H}$ で表される基を表す。 M^{12} は、マグネシウム原子または亜鉛原子を表し、 Z^{3H} は、ハロゲン原子を表す。

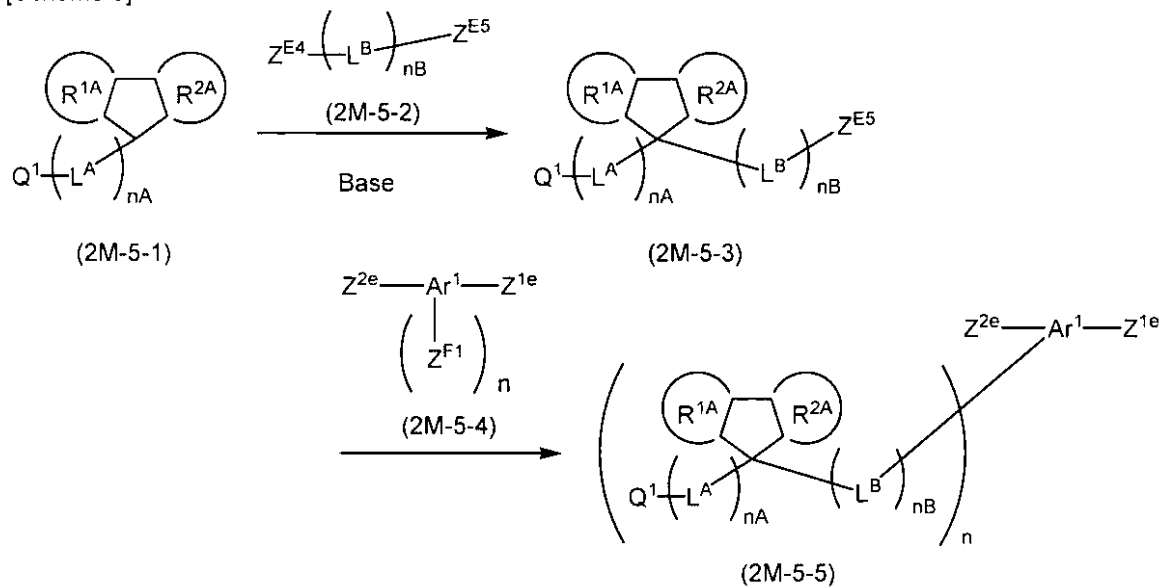
Z^{1d} および Z^{2d} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基 A 群から選ばれる基を表す。

Z^{D4} および Z^{D5} で表されるアルカリ金属原子としては、リチウム原子、カリウム原子が挙げられる。

Z^{3H} で表されるハロゲン原子としては、塩素原子、臭素原子またはヨウ素原子が挙げられる。

スキーム 4 において、まず、式 (2M-4-1) で表される化合物と、式 (2M-4-2) で表される化合物とを求核置換反応させることにより、式 (2M-4-3) で表される化合物を合成する。次に、式 (2M-4-3) で表される化合物と、式 (2M-4-4) で表される化合物とを求核付加反応させることにより、式 (2M-4-5) で表される化合物を合成する。次に、式 (2M-4-5) で表される化合物を、酸存在下においてカチオンを発生させ分子内閉環させる等の公知の反応により閉環反応させることで、式 (2M-4-6) で表される化合物を合成することができる。

[Scheme 5]



スキーム 5 中、
 R^{1A} 、 R^{2A} 、 Q^1 、 L^A 、 nA 、 Ar^1 、 L^B 、 nB および n は、前記と同じ意味を表す。

Z^{E4} および Z^{E5} は、それぞれ独立に、置換基 A 群から選ばれる基を表す。

Z^{F1} は、置換基 A 群から選ばれる基、または、置換基 B 群から選ばれる基を表す。

Z^{1e} および Z^{2e} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基 A 群から選ばれる基を表す。

スキーム 5 において、まず、式 (2M-5-1) で表される化合物と、式 (2M-5-2) で表される化合物とを、塩基の存在下において、求核置換反応させることにより、式 (2M-5-3) で表される化合物を合成する。次に、式 (2M-5-3) で表される化合物と、式 (2M-5-4) で表される化合物とを、アルキル化反応、鈴木反応に代表されるクロスカップリング反応等の公知の反応により反応させることで、式 (2M-5-5) で表される化合物を合成することができる。

なお、式 (2M-5-1) で表される化合物は、式 (2M-1-4) で表される化合物および式 (2M-2-3) で表される化合物と同様の方法で合成することができる。

Z^{1a} および Z^{2a} が水素原子である式 (2M-1-6) で表される化合物、 Z^{1b} および Z^{2b} が水素原子である式 (2M-2-5) で表される化合物、 Z^{1c} および Z^{2c} が水素原子である式 (2M-3-6) で表される化合物、 Z^{1d} および Z^{2d} が水素原子である式 (2M-4-6) で表される化合物、並びに、 Z^{1e} および Z^{2e} が水素原子である式 (2M-5-5) で表される化合物は、ブロモ化反応等の反応により、水素原子を置換基 A 群から選ばれる基に変換することができる。

Z^{1a} および Z^{2a} が置換基 A 群から選ばれる基である式 (2M-1-6) で表される化合物、 Z^{1b} および Z^{2b} が置換基 A 群から選ばれる基である式 (2M-2-5) で表される化合物、 Z^{1c} および Z^{2c} が置換基 A 群から選ばれる基である式 (2M-3-6) で表される化合物、 Z^{1d} および Z^{2d} が置換基 A 群から選ばれる基である式 (2M-4-6) で表される化合物、並びに、 Z^{1e} および Z^{2e} が置換基 A 群から選ばれる基である式 (2M-5-5) で表される化合物は、ビスピナコラートジボロンや 2-アルコキシ-4, 4, 5, 5-テトラメチル-1, 3, 2-ジオキサボロランを使用したボロン酸エステル化等の公知の反応により、置換基 A 群から選ばれる基を置換基 B 群から選ばれる基に変換することができる。

< 組成物 >

本発明の組成物は、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤および溶媒からなる群から選ばれる少なくとも 1 種の材料と、本発明の

高分子化合物とを含有する。

本発明の高分子化合物および溶媒を含有する組成物（以下、「インク」ということがある。）は、インクジェットプリント法、ノズルプリント法等の印刷法を用いた発光素子の作製に好適である。

インクの粘度は、印刷法の種類によって調整すればよいが、インクジェットプリント法等の溶液が吐出装置を経由する印刷法に適用する場合には、吐出時の目づまりと飛行曲がり防止のために、好ましくは25℃において1～20 mPa・sである。

インクに含まれる溶媒は、該インク中の固形分を溶解または均一に分散できる溶媒が好ましい。溶媒としては、例えば、1, 2-ジクロロエタン、1, 1, 2-トリクロロエタン、クロロベンゼン、o-ジクロロベンゼン等の塩素系溶媒；テトラヒドロフラン、ジオキサン、アニソール、4-メチルアニソール等のエーテル系溶媒；トルエン、キシレン、メシチレン、エチルベンゼン、n-ヘキシルベンゼン、シクロヘキシルベンゼン等の芳香族炭化水素系溶媒；シクロヘキサン、メチルシクロヘキサン、n-ペンタン、n-ヘキサン、n-ヘプタン、n-オクタン、n-ノナン、n-デカン、n-ドデカン、ビスシクロヘキシル等の脂肪族炭化水素系溶媒；アセトン、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン、アセトフェノン等のケトン系溶媒；酢酸エチル、酢酸ブチル、エチルセルソルブアセテート、安息香酸メチル、酢酸フェニル等のエステル系溶媒；エチレングリコール、グリセリン、1, 2-ヘキサジオール等の多価アルコール系溶媒；イソプロピルアルコール、シクロヘキサノール等のアルコール系溶媒；ジメチルスルホキシド等のスルホキシド系溶媒；N-メチル-2-ピロリドン、N, N-ジメチルホルムアミド等のアミド系溶媒が挙げられる。溶媒は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

インクにおいて、溶媒の配合量は、本発明の高分子化合物100重量部に対して、通常、1000～10000重量部であり、好ましくは2000～20000重量部である。

〔正孔輸送材料〕

正孔輸送材料は、低分子化合物と高分子化合物とに分類され、高分子化合物が好ましく、架橋基を有する高分子化合物がより好ましい。

高分子化合物としては、例えば、ポリビニルカルバゾールおよびその誘導体；側鎖または主鎖に芳香族アミン構造を有するポリアリーレンおよびその誘導体が挙げられる。高分子化合物は、電子受容性部位が結合された化合物でもよい。電子受容性部位としては、例えば、フラーレン、テトラフルオロテトラシアノキノジメタン、テトラシアノエチレン、トリニトロフルオレノンが挙げられ、好ましくはフラーレンである。

本発明の組成物において、正孔輸送材料の配合量は、本発明の高分子化合物100重量部に対して、通常、1～400重量部であり、好ましくは5～150重量部である。

正孔輸送材料は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

〔電子輸送材料〕

電子輸送材料は、低分子化合物と高分子化合物とに分類される。電子輸送材料は、架橋基を有していてもよい。

低分子化合物としては、例えば、8-ヒドロキシキノリンを配位子とする金属錯体、オキサジアゾール、アントラキノジメタン、ベンゾキノン、ナフトキノン、アントラキノン、テトラシアノアントラキノジメタン、フルオレノン、ジフェニルジシアノエチレン、および、ジフェノキノン、並びに、これらの誘導体が挙げられる。

高分子化合物としては、例えば、ポリフェニレン、ポリフルオレン、および、これらの誘導体が挙げられる。高分子化合物は、金属でドーピングされていてもよい。

本発明の組成物において、電子輸送材料の配合量は、本発明の高分子化合物100重量部に対して、通常、1～400重量部であり、好ましくは5～150重量部である。

電子輸送材料は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

〔正孔注入材料および電子注入材料〕

正孔注入材料および電子注入材料は、各々、低分子化合物と高分子化合物とに分類される。正孔注入材料および電子注入材料は、架橋基を有していてもよい。

低分子化合物としては、例えば、銅フタロシアニン等の金属フタロシアニン；カーボン；モリブデン、タングステン等の金属酸化物；フッ化リチウム、フッ化ナトリウム、フッ化セシウム、フッ化カリウム等の金属フッ化物が挙げられる。

高分子化合物としては、例えば、ポリアニリン、ポリチオフェン、ポリピロール、ポリフェニレンビニレン、ポリチエニレンビニレン、ポリキノリン、および、ポリキノキサリン、並びに、これらの誘導体；芳香族アミン構造を主鎖または側鎖に含む重合体等の導電性高分子が挙げられる。

本発明の組成物において、正孔注入材料および電子注入材料の配合量は、各々、本発明の高分子化合物 100 重量部に対して、通常、1～400 重量部であり、好ましくは 5～150 重量部である。

正孔注入材料および電子注入材料は、各々、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

〔イオンドープ〕

正孔注入材料または電子注入材料が導電性高分子を含む場合、導電性高分子の電気伝導度は、好ましくは、 $1 \times 10^{-5} \text{ S/cm} \sim 1 \times 10^3 \text{ S/cm}$ である。導電性高分子の電気伝導度をかかえる範囲とするために、導電性高分子に適量のイオンをドープすることができる。

ドープするイオンの種類は、正孔注入材料であればアニオン、電子注入材料であればカチオンである。アニオンとしては、例えば、ポリスチレンスルホン酸イオン、アルキルベンゼンスルホン酸イオン、樟脳スルホン酸イオンが挙げられる。カチオンとしては、例えば、リチウムイオン、ナトリウムイオン、カリウムイオン、テトラブチルアンモニウムイオンが挙げられる。

ドープするイオンは、一種のみでも二種以上でもよい。

〔発光材料〕

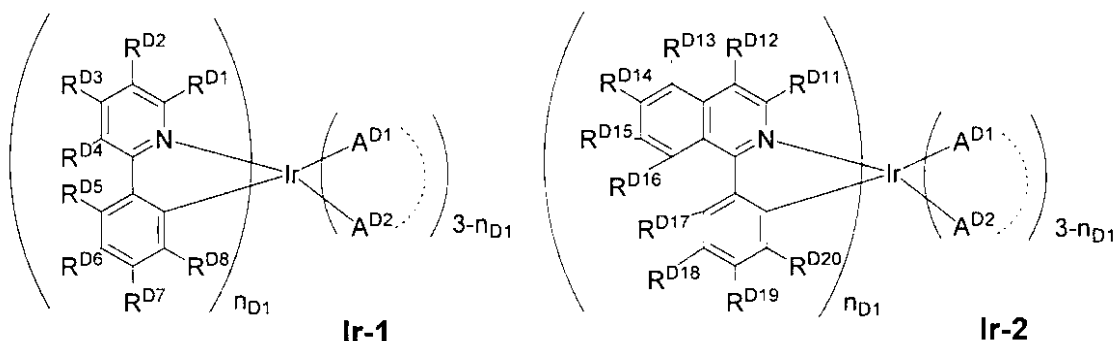
発光材料は、低分子化合物と高分子化合物とに分類される。発光材料は、架橋基を有していてもよい。

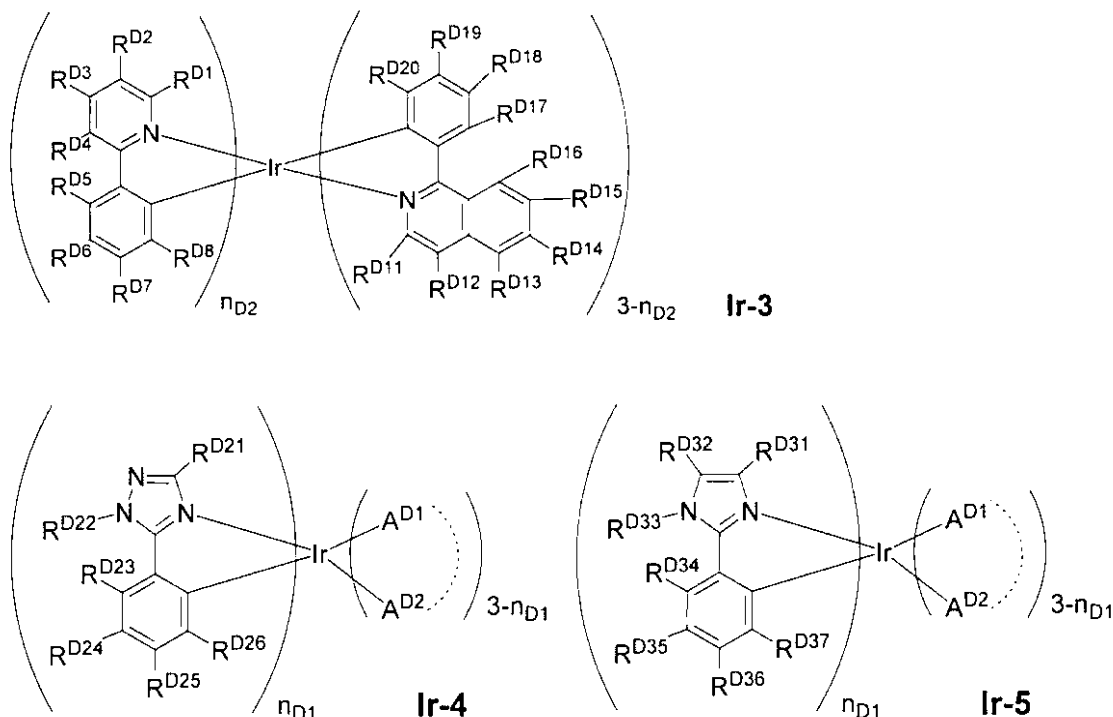
低分子化合物としては、例えば、ナフタレンおよびその誘導体、アントラセンおよびその誘導体、ペリレンおよびその誘導体、並びに、イリジウム、白金またはユーロピウムを中心金属とする三重項発光錯体が挙げられる。

高分子化合物としては、例えば、フェニレン基、ナフタレンジイル基、アントラセンジイル基、フルオレンジイル基、フェナントレンジイル基、ジヒドロフェナントレンジイル基、式 (X) で表される基、カルバゾールジイル基、フェノキサジンジイル基、フェノチアジンジイル基、ピレンジイル基等を含む高分子化合物が挙げられる。

発光材料は、低分子化合物および高分子化合物を含んでもよく、好ましくは、三重項発光錯体および高分子化合物を含む。

三重項発光錯体としては、式 Ir-1～Ir-5 で表される金属錯体等のイリジウム錯体が好ましい。





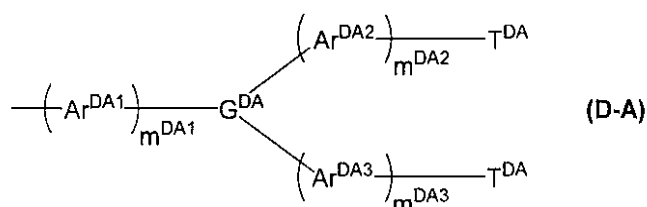
[式中、

$R^{D1} \sim R^{D8}$ 、 $R^{D11} \sim R^{D20}$ 、 $R^{D21} \sim R^{D26}$ および $R^{D31} \sim R^{D37}$ は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、1 価の複素環基またはハロゲン原子を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 $R^{D1} \sim R^{D8}$ 、 $R^{D11} \sim R^{D20}$ 、 $R^{D21} \sim R^{D26}$ および $R^{D31} \sim R^{D37}$ が複数存在する場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。

— A^{D1} — — A^{D2} — は、アニオン性の 2 座配位子を表し、 A^{D1} および A^{D2} は、それぞれ独立に、イリジウム原子と結合する炭素原子、酸素原子または窒素原子を表し、これらの原子は環を構成する原子であってもよい。— A^{D1} — — A^{D2} — が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

n_{D1} は、1、2 または 3 を表し、 n_{D2} は、1 または 2 を表す。]

式 Ir-1 で表される三重項発光錯体において、 $R^{D1} \sim R^{D8}$ の少なくとも 1 つは、好ましくは、式 (D-A) で表される基である。



[式中、

m^{DA1} 、 m^{DA2} および m^{DA3} は、それぞれ独立に、0 以上の整数を表す。

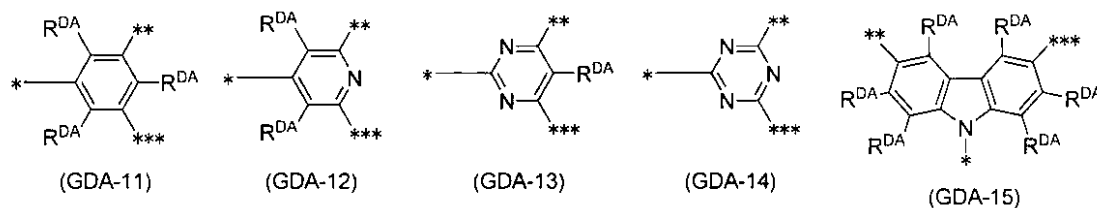
G^{DA} は、窒素原子、芳香族炭化水素基または複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

Ar^{DA1} 、 Ar^{DA2} および Ar^{DA3} は、それぞれ独立に、アリーレン基または 2 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 Ar^{DA1} 、 Ar^{DA2} および Ar^{DA3} が複数ある場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。

T^{DA} は、アリール基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数ある T^{DA} は、同一でも異なってもよい。]

m^{DA1} 、 m^{DA2} および m^{DA3} は、通常 10 以下の整数であり、好ましくは 5 以下の整数であり、より好ましくは 0 または 1 である。 m^{DA1} 、 m^{DA2} および m^{DA3} は、同一の整数であることが好ましい。

G^{DA} は、好ましくは式 (GDA-11) ~ (GDA-15) で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。



10

[式中、

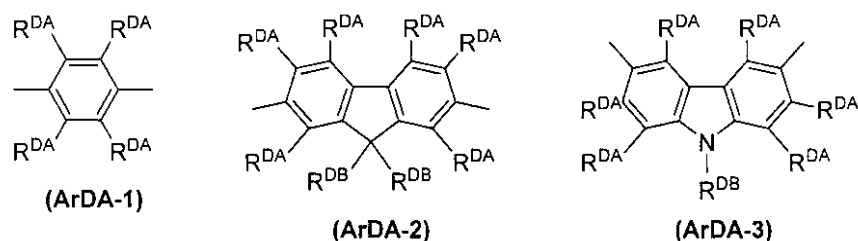
*、**および***は、各々、 Ar^{DA1} 、 Ar^{DA2} 、 Ar^{DA3} との結合を表す。

R^{DA} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は更に置換基を有していてもよい。 R^{DA} が複数ある場合、それらは同一でも異なってもよい。]

R^{DA} は、好ましくは水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基またはシクロアルコキシ基であり、より好ましくは水素原子、アルキル基またはシクロアルキル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

20

Ar^{DA1} 、 Ar^{DA2} および Ar^{DA3} は、好ましくは式 (ArDA-1) ~ (ArDA-3) で表される基である。

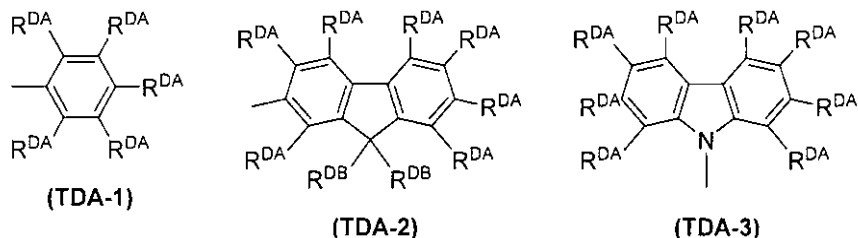


[式中、

R^{DA} は前記と同じ意味を表す。

R^{DB} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基または 1 価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 R^{DB} が複数ある場合、それらは同一でも異なってもよい。]

T^{DA} は、好ましくは式 (TDA-1) ~ (TDA-3) で表される基である。



40

[式中、 R^{DA} および R^{DB} は前記と同じ意味を表す。]

式 Ir-2 において、好ましくは $R^{D11} \sim R^{D20}$ の少なくとも 1 つは式 (D-A) で表される基である。

式 Ir-3 において、好ましくは $R^{D1} \sim R^{D8}$ および $R^{D11} \sim R^{D20}$ の少なくとも 1 つは式 (D-A) で表される基である。

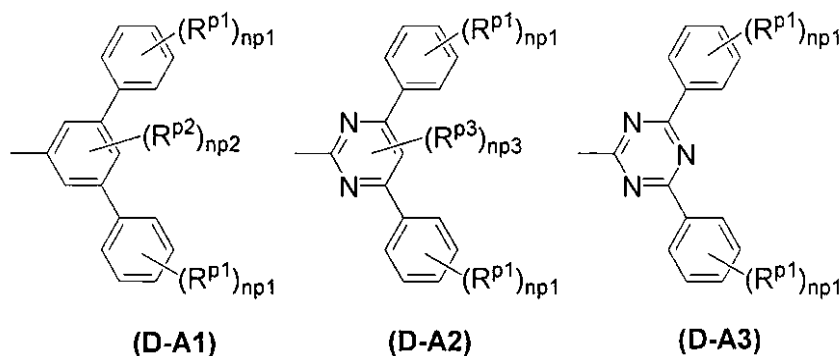
式 Ir-4 において、好ましくは $R^{21} \sim R^{D26}$ の少なくとも 1 つは式 (D-A) で表される基である。

式 Ir-5 において、好ましくは $R^{D31} \sim R^{D37}$ の少なくとも 1 つは式 (D-A)

50

で表される基である。

式 (D-A) で表される基は、好ましくは式 (D-A1) ~ (D-A3) で表される基である。



10

[式中、

R^{p1} 、 R^{p2} および R^{p3} は、それぞれ独立に、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基またはハロゲン原子を表す。 R^{p1} および R^{p2} が複数ある場合、それらはそれぞれ同一であっても異なってもよい。

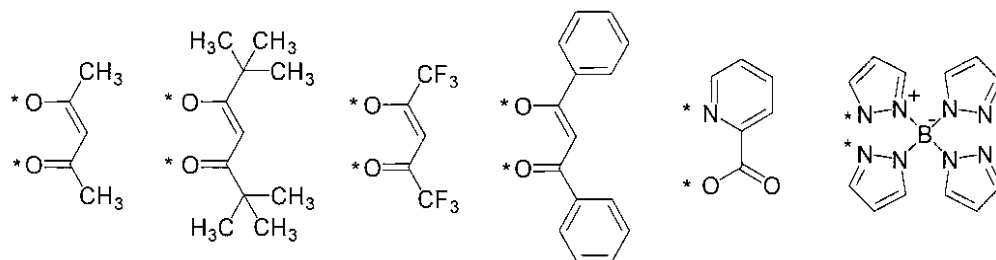
$np1$ は、0 ~ 5 の整数を表し、 $np2$ は 0 ~ 3 の整数を表し、 $np3$ は 0 または 1 を表す。複数ある $np1$ は、同一でも異なってもよい。]

$np1$ は、好ましくは 0 または 1 であり、より好ましくは 1 である。 $np2$ は、好ましくは 0 または 1 であり、より好ましくは 0 である。 $np3$ は好ましくは 0 である。

20

R^{p1} 、 R^{p2} および R^{p3} は、好ましくはアルキル基またはシクロアルキル基である。

—A^{D1}— —A^{D2}— で表されるアニオン性の 2 座配位子としては、例えば、下記式で表される配位子が挙げられる。

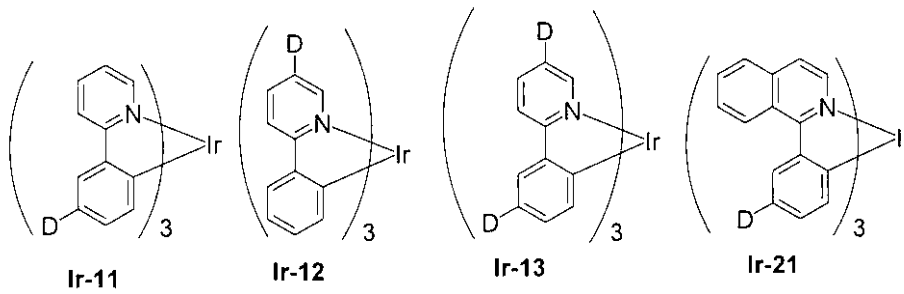


30

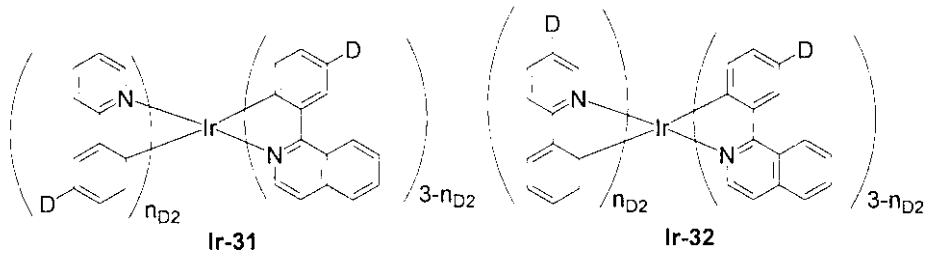
[式中、*は、Ir と結合する部位を表す。]

式 Ir-1 で表される金属錯体としては、好ましくは式 Ir-11 ~ Ir-13 で表される金属錯体である。式 Ir-2 で表される金属錯体としては、好ましくは式 Ir-21 で表される金属錯体である。式 Ir-3 で表される金属錯体としては、好ましくは式 Ir-31 ~ Ir-33 で表される金属錯体である。式 Ir-4 で表される金属錯体としては、好ましくは式 Ir-41 ~ Ir-43 で表されるイリジウム錯体である。式 Ir-5 で表される金属錯体としては、好ましくは式 Ir-51 ~ Ir-53 で表されるイリジウム錯体である。

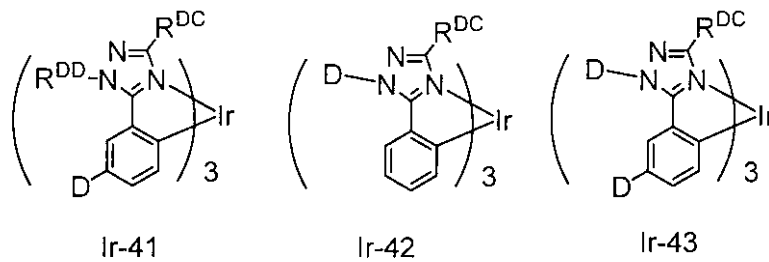
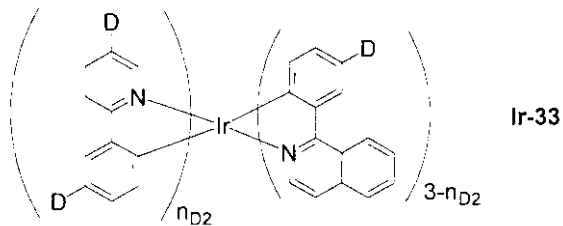
40



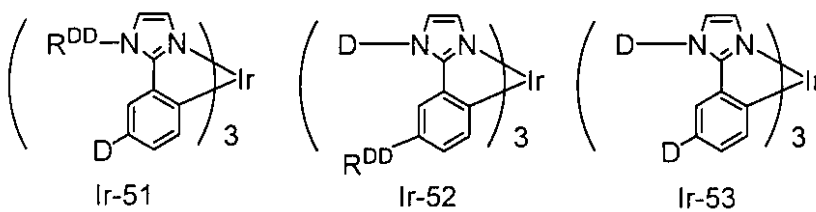
10



20



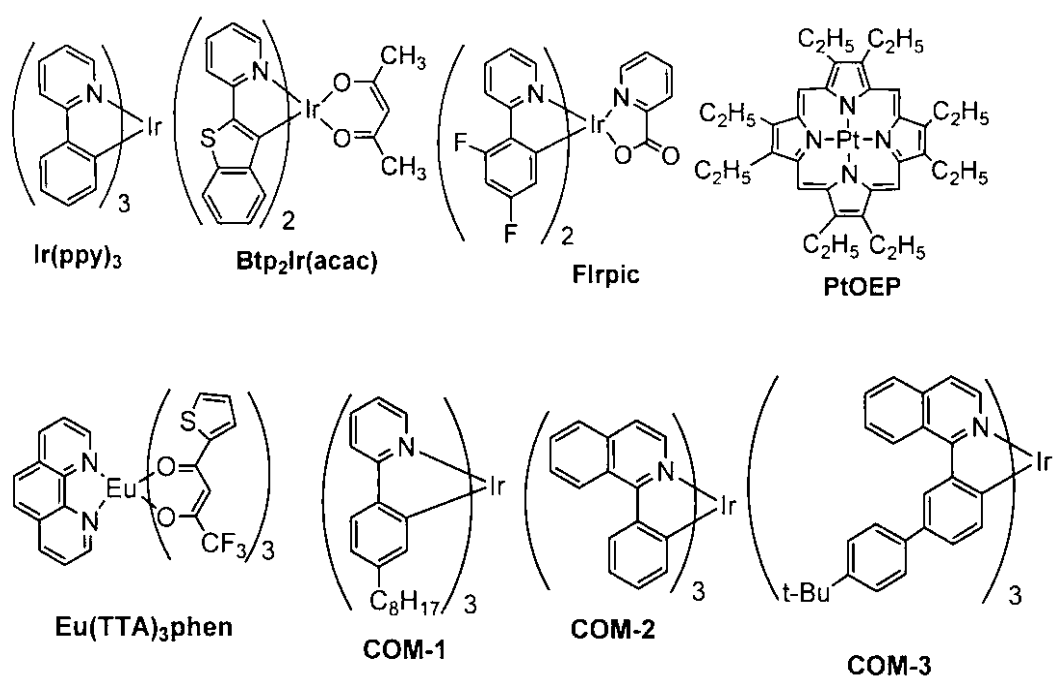
30

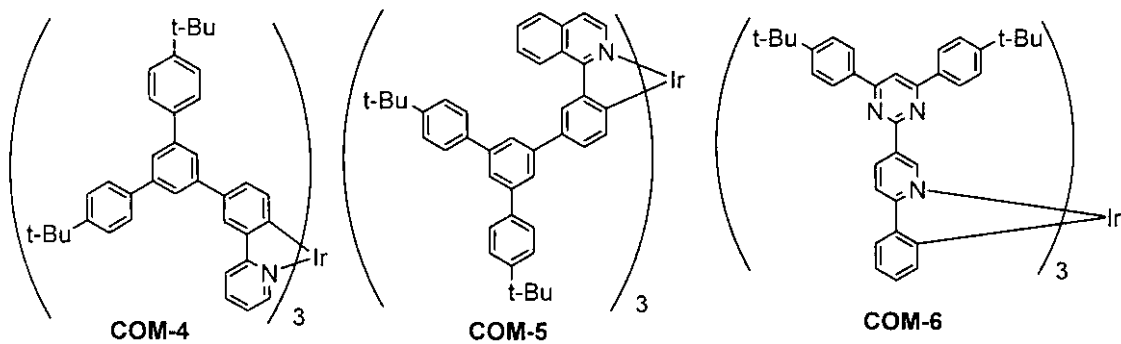


〔式中、Dは、式(D-A)で表される基を表す。複数存在するDは、同一でも異なってもよい。n_{D2}は、1または2を表す。R^{DC}は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基または1個の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在するR^{DC}は、同一でも異なってもよい。R^{DD}は、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基または1個の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在するR^{DD}は、同一でも異なってもよい。〕

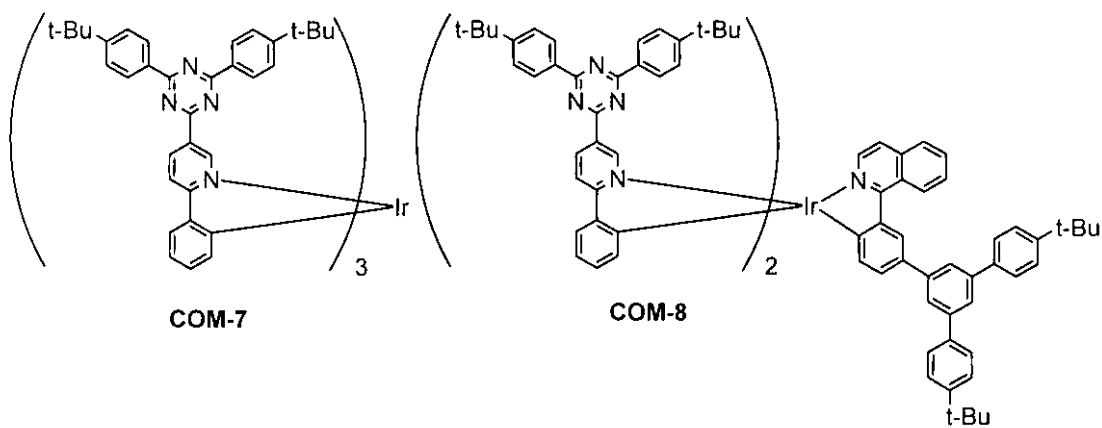
40

三重項発光錯体としては、例えば、以下に示す金属錯体が挙げられ、COM-4が好ましい。

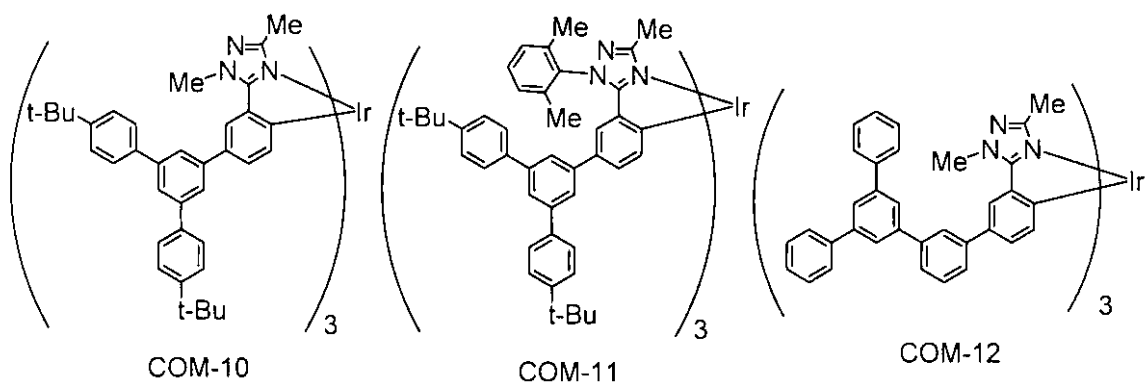




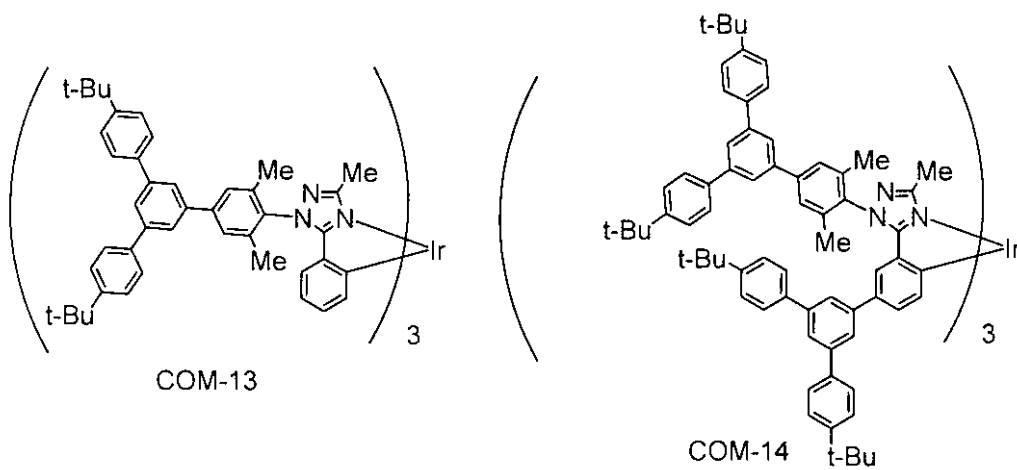
10



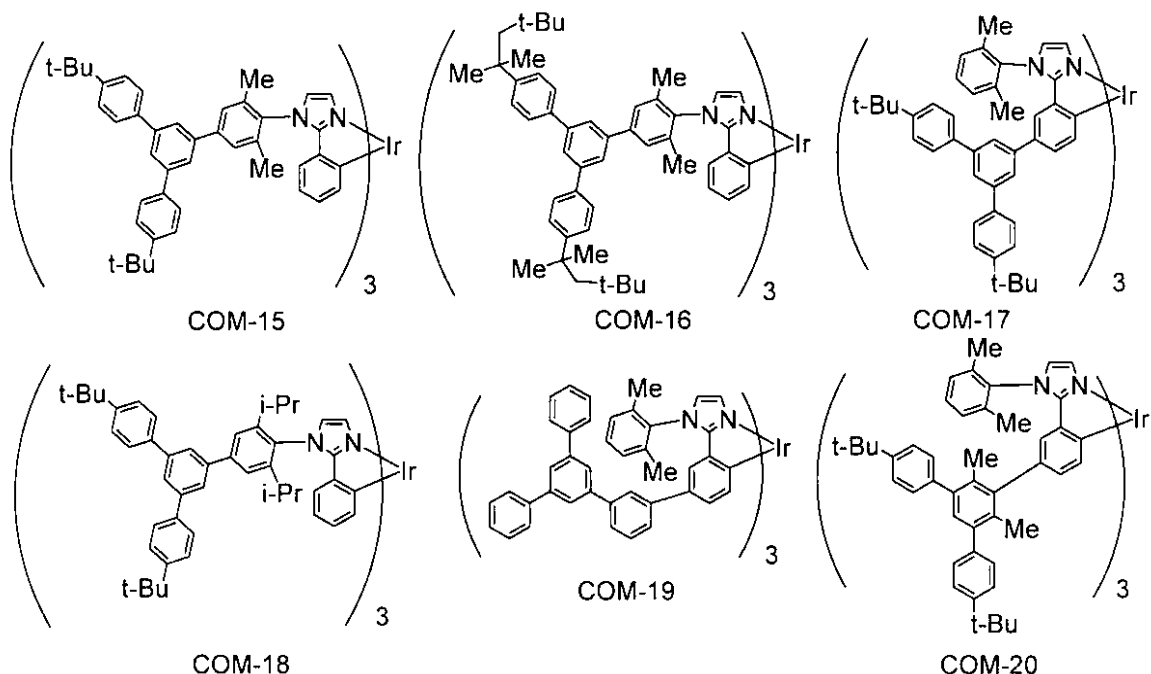
20



30



40



本発明の組成物において、発光材料の含有量とは、本発明の高分子化合物 100 重量部に対して、通常、0.1～400 重量部である。

〔酸化防止剤〕

酸化防止剤は、本発明の高分子化合物と同じ溶媒に可溶であり、発光および電荷輸送を阻害しない化合物であればよく、例えば、フェノール系酸化防止剤、リン系酸化防止剤が挙げられる。

本発明の組成物において、酸化防止剤の配合量は、本発明の高分子化合物 100 重量部に対して、通常、0.001～10 重量部である。

酸化防止剤は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

＜膜＞

膜は、本発明の高分子化合物を含有する膜と、本発明の高分子化合物を架橋により溶媒に対して不溶化させた、不溶化膜とに分類される。不溶化膜は、本発明の高分子化合物を加熱、光照射等の外部刺激により架橋させて得られる膜である。不溶化膜は、溶媒に実質的に不溶であるため、発光素子の積層化に好適に使用することができる。

膜を架橋させるための加熱の温度は、通常、25～300℃であり、発光効率が良好になるので、好ましくは50～250℃であり、より好ましくは150～200℃である。

膜を架橋させるための光照射に用いられる光の種類は、例えば、紫外光、近紫外光、可視光である。

膜は、発光素子における正孔輸送層または正孔注入層として好適である。

膜は、インクを用いて、例えば、スピンコート法、キャスト法、マイクログラビアコート法、グラビアコート法、バーコート法、ロールコート法、ワイヤーバーコート法、ディップコート法、スプレーコート法、スクリーン印刷法、フレキソ印刷法、オフセット印刷法、インクジェット印刷法、キャピラリーコート法、ノズルコート法により作製することができる。

膜の厚さは、通常、1nm～10μmである。

＜発光素子＞

本発明の発光素子は、本発明の高分子化合物を用いて得られる有機エレクトロルミネセンス素子等の発光素子であり、該発光素子には、例えば、本発明の高分子化合物を含む発光素子、本発明の高分子化合物が分子内、分子間、または、それらの両方で架橋した発光素子がある。

本発明の発光素子の構成としては、例えば、陽極および陰極からなる電極と、該電極間に設けられた本発明の高分子化合物を用いて得られる層とを有する。

〔層構成〕

本発明の高分子化合物を用いて得られる層は、通常、発光層、正孔輸送層、正孔注入層、電子輸送層、電子注入層の1種以上の層であり、好ましくは、正孔輸送層である。これらの層は、各々、発光材料、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料を含む。これらの層は、各々、発光材料、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料を、上述した溶媒に溶解させ、インクを調製して用い、上述した膜の作製と同じ方法を用いて形成することができる。

発光素子は、陽極と陰極の間に発光層を有する。本発明の発光素子は、正孔注入性および正孔輸送性の観点からは、陽極と発光層との間に、正孔注入層および正孔輸送層の少なくとも1層を有することが好ましく、電子注入性および電子輸送性の観点からは、陰極と発光層の間に、電子注入層および電子輸送層の少なくとも1層を有することが好ましい。

10

正孔輸送層、電子輸送層、発光層、正孔注入層、および、電子注入層の材料としては、本発明の高分子化合物の他、各々、上述した正孔輸送材料、電子輸送材料、発光材料、正孔注入材料、および、電子注入材料が挙げられる。

正孔輸送層の材料、電子輸送層の材料、および、発光層の材料は、発光素子の作製において、各々、正孔輸送層、電子輸送層、および、発光層に隣接する層の形成時に使用される溶媒に溶解する場合、該溶媒に該材料が溶解することを回避するために、該材料が架橋基を有することが好ましい。架橋基を有する材料を用いて各層を形成した後、該架橋基を架橋させることにより、該層を不溶化させることができる。

本発明の発光素子において、発光層、正孔輸送層、電子輸送層、正孔注入層、電子注入層等の各層の形成方法としては、低分子化合物を用いる場合、例えば、粉末からの真空蒸着法、溶液または熔融状態からの成膜による方法が挙げられ、高分子化合物を用いる場合、例えば、溶液または熔融状態からの成膜による方法が挙げられる。

20

積層する層の順番、数、および、厚さは、発光効率および素子寿命を勘案して調整すればよい。

〔基板／電極〕

発光素子における基板は、電極を形成することができ、かつ、有機層を形成する際に化学的に変化しない基板であればよく、例えば、ガラス、プラスチック、シリコン等の材料からなる基板である。不透明な基板の場合には、基板から最も遠くにある電極が透明または半透明であることが好ましい。

30

陽極の材料としては、例えば、導電性の金属酸化物、半透明の金属が挙げられ、好ましくは、酸化インジウム、酸化亜鉛、酸化スズ；インジウム・スズ・オキシド（ITO）、インジウム・亜鉛・オキシド等の導電性化合物；銀とパラジウムと銅との複合体（APC）；NE SA、金、白金、銀、銅である。

陰極の材料としては、例えば、リチウム、ナトリウム、カリウム、ルビジウム、セシウム、ベリリウム、マグネシウム、カルシウム、ストロンチウム、バリウム、アルミニウム、亜鉛、インジウム等の金属；それらのうち2種以上の合金；それらのうち1種以上と、銀、銅、マンガン、チタン、コバルト、ニッケル、タングステン、錫のうち1種以上との合金；並びに、グラファイトおよびグラファイト層間化合物が挙げられる。合金としては、例えば、マグネシウム－銀合金、マグネシウム－インジウム合金、マグネシウム－アルミニウム合金、インジウム－銀合金、リチウム－アルミニウム合金、リチウム－マグネシウム合金、リチウム－インジウム合金、カルシウム－アルミニウム合金が挙げられる。

40

陽極および陰極は、各々、2層以上の積層構造としてもよい。

〔用途〕

発光素子を用いて面状の発光を得るためには、面状の陽極と陰極が重なり合うように配置すればよい。パターン状の発光を得るためには、面状の発光素子の表面にパターン状の窓を設けたマスクを設置する方法、非発光部にしたい層を極端に厚く形成し実質的に非発光とする方法、陽極もしくは陰極、または両方の電極をパターン状に形成する方法がある。これらのいずれかの方法でパターンを形成し、いくつかの電極を独立にON/OFFできるように配置することにより、数字、文字等を表示できるセグメントタイプの表示装置

50

が得られる。ドットマトリックス表示装置とするためには、陽極と陰極を共にストライプ状に形成して直交するように配置すればよい。複数の種類の発光色の異なる高分子化合物を塗り分ける方法、カラーフィルターまたは蛍光変換フィルターを用いる方法により、部分カラー表示、マルチカラー表示が可能となる。ドットマトリックス表示装置は、パッシブ駆動も可能であるし、TFT等と組み合わせてアクティブ駆動も可能である。これらの表示装置は、コンピュータ、テレビ、携帯端末等のディスプレイに用いることができる。面状の発光素子は、液晶表示装置のバックライト用の面状光源、または、面状の照明用光源として好適に用いることができる。フレキシブルな基板を用いれば、曲面状の光源、および、表示装置としても使用できる。

【実施例】

10

【0008】

以下、実施例によって本発明を更に詳細に説明するが、本発明はこれらの実施例に限定されるものではない。

実施例において、高分子化合物のポリスチレン換算の数平均分子量 (M_n) およびポリスチレン換算の重量平均分子量 (M_w) は、サイズエクスクルージョンクロマトグラフィー (SEC) (島津製作所製、商品名: LC-10Avp) により求めた。なお、SECの測定条件は、次のとおりである。

[測定条件]

測定する高分子化合物を約0.05重量%の濃度でTHFに溶解させ、SECに10 μ L注入した。SECの移動相としてTHFを用い、2.0 mL/分の流量で流した。カラムとして、PLgel MIXED-B (ポリマーラボラトリーズ製) を用いた。検出器にはUV-VIS検出器 (島津製作所製、商品名: SPD-10Avp) を用いた。

20

液体クロマトグラフ質量分析 (LC-MS) は、下記の方法で行った。

測定試料を約2 mg/mLの濃度になるようにクロロホルムまたはTHFに溶解させ、LC-MS (アジレントテクノロジー製、商品名: 1100LCMSD) に約1 μ L注入した。LC-MSの移動相には、アセトニトリルおよびTHFの比率を変化させながら用い、0.2 mL/分の流量で流した。カラムは、LC-column 2 ODS (3 μ m) (化学物質評価研究機構製、内径: 2.1 mm、長さ: 100 mm、粒径3 μ m) を用いた。

NMRの測定は、下記の方法で行った。

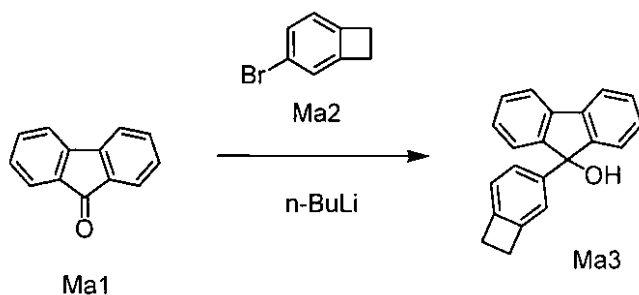
30

5~10 mgの測定試料を約0.5 mLの重クロロホルム ($CDCl_3$)、重テトラヒドロフラン ($THF-d_8$)、重ジメチルスルホキシド ($DMSO-d_6$)、または重塩化メチレン (CD_2Cl_2) に溶解させ、NMR装置 (バリアン (Varian, Inc.) 製、商品名: MERCURY 300) を用いて測定した。

化合物の純度の指標として、高速液体クロマトグラフィー (HPLC) 面積百分率の値を用いた。この値は、特に記載がない限り、HPLC (島津製作所製、商品名: LC-20A) での254 nmにおける値とする。この際、測定する化合物は、0.01~0.2重量%の濃度になるようにTHFまたはクロロホルムに溶解させ、HPLCに、濃度に応じて1~10 μ L注入した。HPLCの移動相には、アセトニトリルおよびTHFを用い、1 mL/分の流速で、アセトニトリル/THF=100/0~0/100 (容積比) のグラジエント分析で流した。カラムは、Kaseisorb LC ODS 2000 (東京化成工業製) または同等の性能を有するODSカラムを用いた。検出器には、フォトダイオードアレイ検出器 (島津製作所製、商品名: SPD-M20A) を用いた。

40

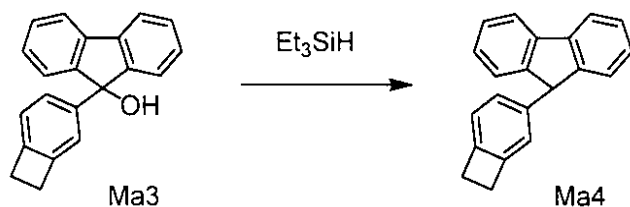
<合成例1> 化合物Ma3の合成



攪拌器を備えたフラスコ内の気体を窒素ガスで置換した後、化合物Ma2（64.6 g）およびテトラヒドロフラン（615 ml）を加え、 -70°C に冷却した。そこへ、 n -ブチルリチウムヘキサン溶液（1.6 M、218 ml）を1時間かけて滴下した後、 -70°C で2時間攪拌した。そこへ、化合物Ma1（42.1 g）を数回に分けて加えた後、 -70°C で2時間攪拌した。そこへ、メタノール（40 ml）を1時間かけて滴下した後、室温まで昇温した。その後、減圧濃縮して溶媒を留去し、トルエンおよび水を加えた。その後、水層を分離し、得られた有機層を水で洗浄した。得られた有機層を減圧濃縮して、得られた残渣をシリカゲルカラム（展開溶媒：ヘキサンと酢酸エチルの混合溶媒）を用いて精製することで、無色油状物として化合物Ma3を71 g得た。化合物Ma3のHPLC面積百分率値（UV 254 nm）は97.5%であった。この操作を繰り返し行うことで、化合物Ma3の必要量を得た。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 300 MHz) δ (ppm): 2.43 (1H, s), 3.07–3.13 (4H, m), 6.95 (1H, d), 7.07 (1H, s), 7.18–7.28 (3H, m), 7.28–7.40 (4H, m), 7.66 (2H, s).

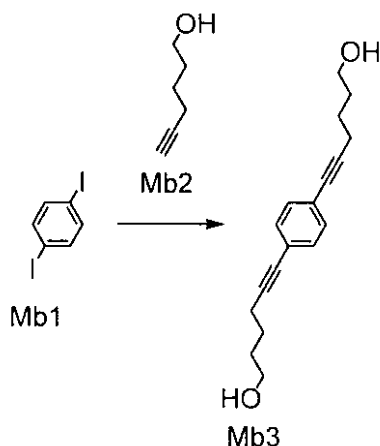
<合成例2> 化合物Ma4の合成



攪拌器を備えたフラスコ内の気体を窒素ガスで置換した後、化合物Ma3（72.3 g）、トルエン（723 ml）およびトリエチルシラン（118.0 g）を加え、 70°C に昇温した。そこへ、メタンスルホン酸（97.7 g）を1.5時間かけて滴下した後、 70°C で0.5時間攪拌した。その後、室温まで冷却し、トルエン（1 L）および水（1 L）を加えた後、水層を分離した。得られた有機層を、水、5重量%炭酸水素ナトリウム水溶液、水の順番で洗浄した。得られた有機層を減圧濃縮して、得られた粗生成物をトルエンおよびエタノールの混合溶液で再結晶することで、白色固体として化合物Ma4を51.8 g得た。化合物Ma4のHPLC面積百分率値（UV 254 nm）は99.5%以上であった。この操作を繰り返し行うことで、化合物Ma4の必要量を得た。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 300 MHz) δ (ppm): 3.03–3.14 (4H, m), 4.99 (1H, s), 6.68 (1H, s), 6.92–7.01 (2H, m), 7.20–7.28 (2H, m), 7.29–7.38 (4H, m), 7.78 (2H, d).

<合成例3> 化合物Mb3の合成



10

攪拌器を備えたフラスコ内の気体を窒素ガスで置換した後、化合物Mb1（185.0 g）、化合物Mb2（121.1 g）、ヨウ化銅（I）（3.2 g）、ジクロロメタン（185 ml）およびトリエチルアミン（2.59 L）を加え、還流温度に昇温した。その後、還流温度で0.5時間攪拌し、室温まで冷却した。そこへ、ジクロロメタン（1.85 L）を加えた後、セライトを敷き詰めたろ過器でろ過した。得られたろ液に10重量%炭酸水素ナトリウム水溶液を加えた後、水層を分離した。得られた有機層を水で2回洗浄し、飽和塩化ナトリウム水溶液で洗浄した後、硫酸マグネシウムを加えた。得られた混合物をろ過し、得られたろ液を減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラム（展開溶媒

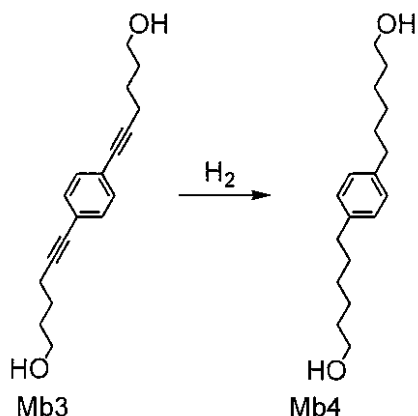
クロロホルムと酢酸エチルの混合溶媒）を用いて精製することで、粗生成物を得た。得られた粗生成物をエタノール（1.4 L）に溶解させた後、活性炭（5 g）を加え、ろ過した。得られたろ液を減圧濃縮して、得られた残渣をヘキサンで再結晶することで、白色固体として化合物Mb3を99.0 g得た。化合物Mb3のHPLC面積百分率値（UV 254 nm）は99.5%以上であった。この操作を繰り返し行うことで、化合物Mb3の必要量を得た。

20

$^1\text{H-NMR}$ （DMSO- d_6 , 300 MHz） δ （ppm）：1.52–1.55（8 H, m），2.42（4 H, t），3.38–3.44（4 H, m），4.39–4.43（2 H, m），7.31（4 H, s）。

<合成例4> 化合物Mb4の合成

30



40

攪拌器を備えたフラスコ内の気体を窒素ガスで置換した後、化合物Mb3（110.0 g）、エタノール（1.65 L）およびパラジウム／炭素（パラジウム重量10%）（11.0 g）を加え、30℃まで昇温した。その後、フラスコ内の気体を水素ガスで置換した。その後、フラスコ内に水素ガスを供給しながら、30℃で3時間攪拌した。その後、フラスコ内の気体を窒素ガスで置換した。得られた混合物をろ過し、得られたろ液を減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラム（展開溶媒 クロロホルムと酢酸エチルの混合溶媒）を用いて精製することで、粗生成物を得た。得られた粗生成物をヘキサンで再結晶することで、白色固体として化合物Mb4を93.4 g得た。化合物Mb4のHPLC

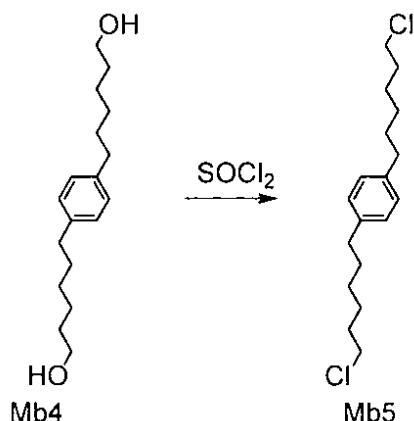
50

面積百分率値 (UV 254 nm) は 98.3% であった。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 300 MHz) δ (ppm): 1.30–1.40 (8H, m), 1.55–1.65 (8H, m), 2.58 (4H, t), 3.64 (4H, t), 7.09 (4H, s).

$^{13}\text{C-NMR}$ (CDCl_3 , 75 MHz) δ (ppm): 25.53, 28.99, 31.39, 32.62, 35.37, 62.90, 128.18, 139.85.

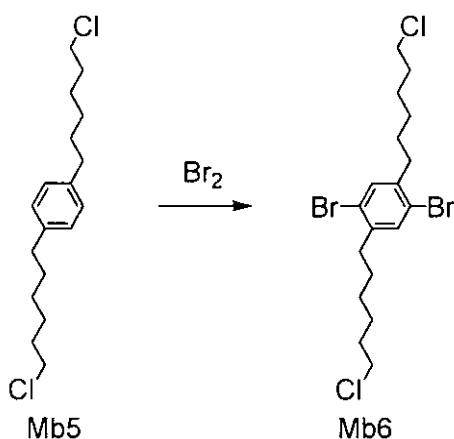
<合成例 5> 化合物 Mb5 の合成



攪拌器を備えたフラスコ内の気体を窒素ガスで置換した後、化合物 Mb4 (61.0 g)、ピリジン (0.9 g) およびトルエン (732 ml) を加え、60℃ に昇温した。そこへ、塩化チオニル (91.4 g) を 1.5 時間かけて滴下した後、60℃ で 5 時間攪拌した。得られた混合物を室温まで冷却した後、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラム (展開溶媒 ヘキサンと酢酸エチルの混合溶媒) を用いて精製することで、無色油状物として化合物 Mb5 を 64.3 g 得た。化合物 Mb5 の HPLC 面積百分率値 (UV 254 nm) は 97.2% であった。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 300 MHz) δ (ppm): 1.35–1.40 (4H, m), 1.41–1.50 (4H, m), 1.60–1.68 (4H, m), 1.75–1.82 (4H, m), 2.60 (4H, t), 3.55 (4H, t), 7.11 (4H, s).

<合成例 6> 化合物 Mb6 の合成

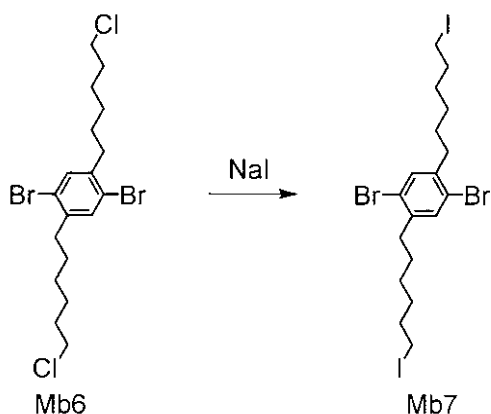


攪拌器を備えたフラスコ内の気体を窒素ガスで置換した後、化合物 Mb5 (42.0 g)、鉄粉 (1.7 g)、ヨウ素 (0.3 g) およびジクロロメタン (800 ml) を加えた。その後、フラスコ全体を遮光し、0～5℃ に冷却した。そこへ、臭素 (44.7 g) およびジクロロメタン (200 ml) の混合液を 1 時間かけて滴下した後、0～5℃ にて一晩攪拌した。得られた混合液を、0～5℃ に冷却した水 (1.2 L) に加えた後、有機層を分離した。得られた有機層を 10 重量% チオ硫酸ナトリウム水溶液で洗浄し、更に、飽和塩化ナトリウム水溶液、水の順番で洗浄した。得られた有機層に硫酸ナトリウムを加

えた後、ろ過し、得られたろ液を減圧濃縮した。得られた残渣を、シリカゲルカラム（展開溶媒ヘキサン）を用いて精製することで、粗生成物を得た。得られた粗生成物をヘキサンで再結晶することで、白色固体として化合物Mb6を47.0g得た。化合物Mb6のHPLC面積百分率値（UV254nm）は98.3%であった。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 300MHz) δ (ppm): 1.38–1.45 (4H, m), 1.47–1.55 (4H, m), 1.57–1.67 (4H, m), 1.77–1.84 (4H, m), 2.66 (4H, t), 3.55 (4H, t), 7.36 (2H, s).

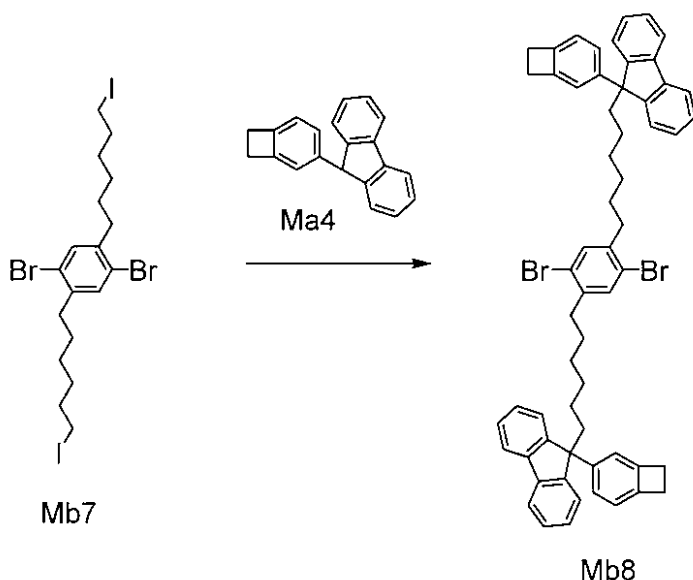
<合成例7> 化合物Mb7の合成



攪拌器を備えたフラスコ内の気体を窒素ガスで置換した後、ヨウ化ナトリウム（152.1g）およびアセトン（600ml）を加え、室温で0.5時間攪拌した。そこへ、化合物Mb6（40.0g）を加えた後、還流温度まで昇温し、還流温度で24時間攪拌した。その後、室温まで冷却し、得られた混合液を水（1.2L）に加えた。析出した固体をろ別した後、水で洗浄することで粗生成物を得た。得られた粗生成物をトルエンおよびメタノールの混合液で再結晶することで、白色固体として化合物Mb7を46.0g得た。化合物Mb7のHPLC面積百分率値（UV254nm）は99.4%であった。この操作を繰り返し行うことで、化合物Mb7の必要量を得た。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 300MHz) δ (ppm): 1.35–1.50 (8H, m), 1.57–1.65 (4H, m), 1.80–1.89 (4H, m), 2.65 (4H, t), 3.20 (4H, t), 7.36 (2H, s).

<実施例1> 化合物Mb8の合成

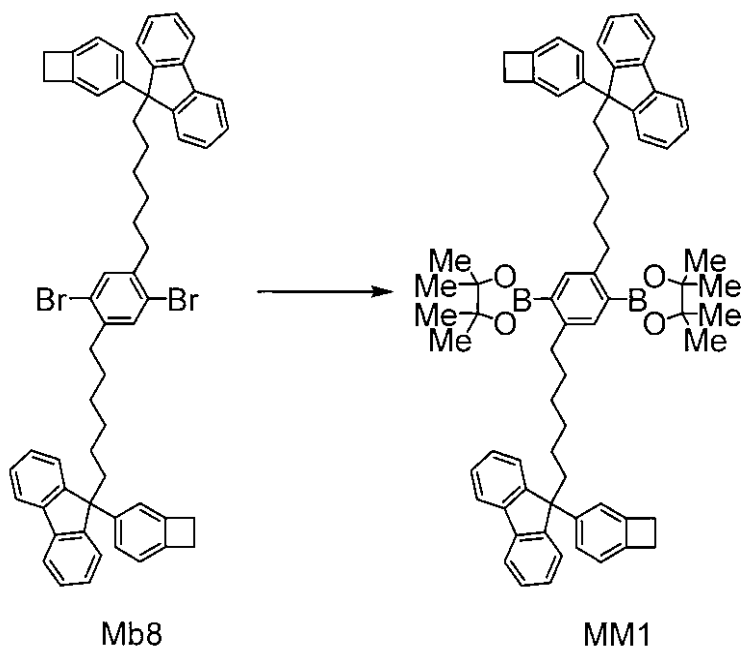


攪拌器を備えたフラスコ内の気体を窒素ガスで置換した後、水素化ナトリウム（60重

量%、流動パラフィンに分散) (9.4 g)、テトラヒドロフラン (110 ml) および化合物Mb7 (63.2 g)を加えた。そこへ、化合物Ma4 (55.0 g)を数回に分けて加えた後、12時間攪拌した。そこへ、トルエン (440 ml) および水 (220 ml)を加えた後、水層を分離した。得られた有機層を水で洗浄した後、硫酸マグネシウムを加えた。得られた混合液をろ過して、得られたろ液を減圧濃縮することで粗生成物を得た。得られた粗生成物をシリカゲルカラム (展開溶媒 ヘキサンとトルエンの混合溶媒)を用いて精製した。その後、ヘプタンで再結晶することで、白色固体として化合物Mb8を84.1 g得た。化合物Mb8のHPLC面積百分率値 (UV254 nm)は99.5%以上であった。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 300 MHz) δ (ppm): 0.70–0.76 (4H, m), 1.10–1.21 (8H, m), 1.32–1.44 (4H, m), 2.39–2.58 (8H, m), 3.00–3.12 (8H, m), 6.82–6.94 (4H, m), 7.00–7.05 (2H, m), 7.17–7.28 (10H, m), 7.30–7.38 (4H, m), 7.71–7.77 (4H, m).

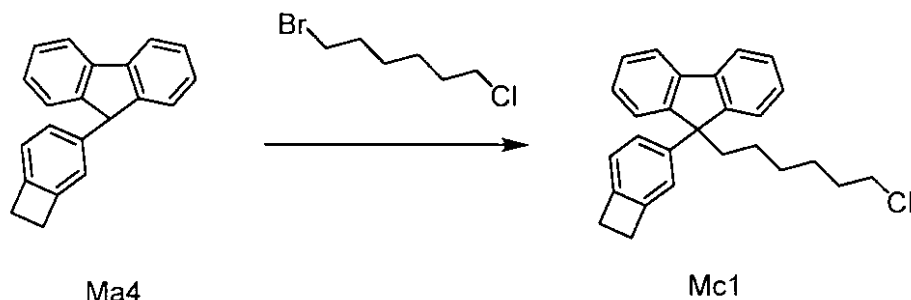
<実施例2> 化合物MM1の合成



攪拌器を備えたフラスコ内の気体を窒素ガスで置換した後、化合物Mb8 (84.0 g)、[1, 1'-ビス (ジフェニルホスフィノ) フェロセン] パラジウム (II) ジクロリド ジクロロメタン付加物 ($\text{PdCl}_2(\text{dppf}) \cdot \text{CH}_2\text{Cl}_2$, 2.2 g)、ビスピナコラートジボロン (68.3 g)、酢酸カリウム (52.8 g) およびシクロペンチルメチルエーテル (840 ml)を加え、還流温度まで昇温した後、還流温度で5時間攪拌した。その後、室温まで冷却し、トルエン (500 ml) および水 (300 ml)を加えた後、水層を分離した。得られた有機層を水で洗浄した後、活性炭 (18.5 g)を加えた。得られた混合液をろ過し、得られたろ液を減圧濃縮することで粗生成物を得た。得られた粗生成物をシリカゲルカラム (展開溶媒 ヘキサンとトルエンの混合溶媒)を用いて精製した。その後、トルエンおよびアセトニトリルの混合液で再結晶する操作を繰り返すことで、白色固体として化合物MM1を45.8 g得た。化合物MM1のHPLC面積百分率値 (UV254 nm)は99.4%であった。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 300 MHz) δ (ppm): 0.70–0.76 (4H, m), 1.24–1.40 (36H, m), 2.39–2.48 (4H, m), 2.66–2.75 (4H, m), 3.00–3.10 (8H, m), 6.76–6.90 (4H, m), 7.00–7.05 (2H, m), 7.19–7.30 (8H, m), 7.30–7.36 (4H, m), 7.43 (2H, s), 7.72 (4H, d).

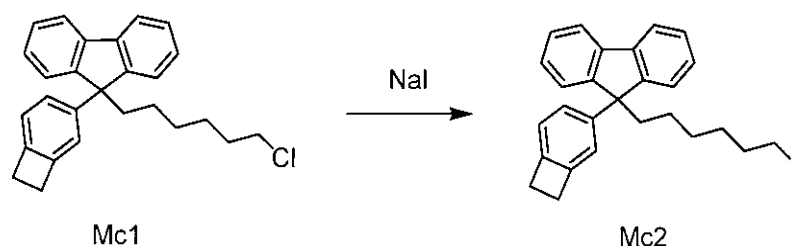
<合成例 8> 化合物Mc1の合成



攪拌器を備えたフラスコ内の気体を窒素ガスで置換した後、水素化ナトリウム（60重量%、流動パラフィンに分散）（10.9g）、テトラヒドロフラン（268ml）および1-ブロモ-6-クロロヘキサン（198.3g）を加えた。その後、フラスコ全体を遮光し、0～5℃に冷却した。そこへ、化合物Ma4（67.0g）およびテトラヒドロフラン（330ml）の混合液を2.5時間かけて加えた後、50℃まで昇温し、50℃で6時間攪拌した。そこへ、ヘプタン（536ml）および水（268ml）を加え、水層を分離した。得られた有機層を水で洗浄した後、硫酸マグネシウムを加えた。得られた混合液をろ過して、得られたろ液を減圧濃縮することで粗生成物を得た。得られた粗生成物をイソプロパノールで再結晶した後、得られた結晶をトルエンおよびヘプタンの混合液に溶解させ、活性炭（9.6g）を加えた。得られた混合液をろ過し、得られたろ液を減圧濃縮した。得られた残渣を、トルエンおよびヘプタンの混合液で再結晶することで、白色固体として化合物Mc1を81.0g得た。化合物Mc1のHPLC面積百分率値（UV254nm）は99.5%であった。この操作を繰り返し行うことで、化合物Mc1の必要量を得た。

¹H-NMR（CD₂Cl₂，300MHz）δ（ppm）：0.71–0.83（2H，m），1.27（4H，t），1.58–1.68（2H，m），2.49–2.54（2H，m），3.08–3.19（4H，m），3.49（2H，t），6.89（1H，s），6.94（1H，d），7.07（1H，d），7.25–7.44（6H，m），7.83（2H，d）。

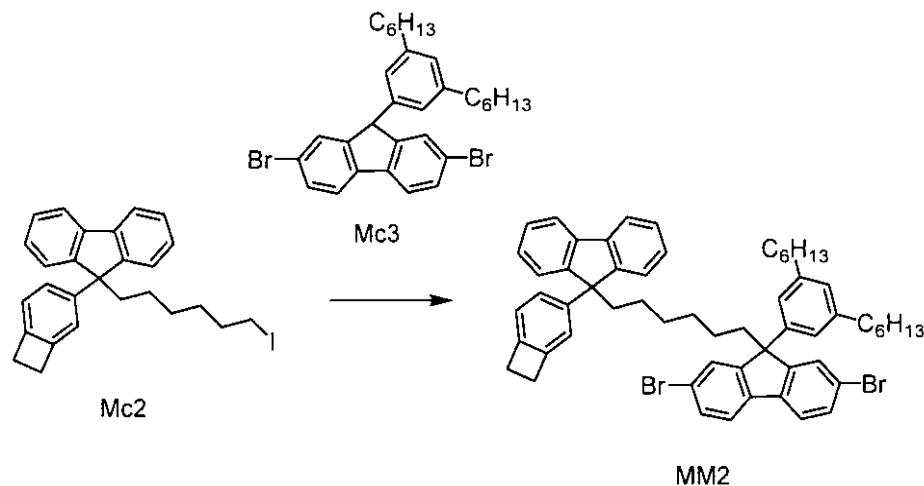
<合成例 9> 化合物Mc2の合成



攪拌器を備えたフラスコ内の気体を窒素ガスで置換した後、化合物Mc1（124.4g）、ヨウ化ナトリウム（385.5g）およびアセトン（786ml）を加えた後、還流温度まで昇温し、還流温度で34時間攪拌した。その後、室温まで冷却し、得られた混合液にヘプタン、トルエンおよび水を加えた後、水層を分離した。得られた有機層を水で洗浄した後、硫酸マグネシウムを加えた。得られた混合液をろ過し、得られたろ液を減圧濃縮することで粗生成物を得た。得られた粗生成物を、ヘプタンおよびイソプロパノールの混合液で再結晶することで、白色固体として化合物Mc2を143g得た。化合物Mc2のHPLC面積百分率値（UV254nm）は99.4%であった。

¹H-NMR（CD₂Cl₂，300MHz）δ（ppm）：0.71–0.83（2H，m），1.20–1.36（4H，m），1.60–1.70（2H，m），2.48–2.54（2H，m），3.13–3.18（6H，m），6.89（1H，s），6.94（1H，d），7.07（1H，d），7.25–7.43（6H，m），7.83（2H，d）。

<実施例 3> 化合物MM 2 の合成



10

攪拌器を備えたフラスコ内の気体を窒素ガスで置換した後、水素化ナトリウム（60重量%、流動パラフィンに分散）（1.0 g）、テトラヒドロフラン（42.5 ml）、N，N-ジメチルホルムアミド（42.5 ml）およびMc 2（10.8 g）を加えた。その後、フラスコ全体を遮光し、0～5℃に冷却した。そこへ、特表2014-506609号公報記載の合成法に従い合成した化合物Mc 3（10.6 g）およびテトラヒドロフラン（42.5 ml）の混合液を1時間かけて加えた後、0～5℃で4時間攪拌した。得られた反応混合物を室温まで昇温した後、トルエン（106 ml）および水（106 ml）を加え、水層を分離した。得られた有機層を水で洗浄した後、硫酸ナトリウムを加えた。得られた混合液を、シリカゲルを敷き詰めたろ過器でろ過し、得られたろ液を減圧濃縮することで粗生成物を得た。得られた粗生成物を、酢酸エチルおよびアセトニトリルの混合液で再結晶する操作を繰り返すことで、白色固体として化合物MM 2を14.3 g得た。化合物MM 2のHPLC面積百分率値（UV254 nm）は99.5%以上であった。

20

LC-MS (positive) m/z: 955 ([M+K]⁺)

¹H-NMR (CD₂Cl₂, 300 MHz) δ (ppm): 0.56–0.65 (4 H, m), 0.90–1.32 (22 H, m), 1.54–1.58 (4 H, m), 2.34–2.42 (4 H, m), 2.52 (4 H, t), 3.12 (4 H, d), 6.74 (2 H, s), 6.85 (1 H, s), 6.92 (2 H, d), 7.00–7.05 (1 H, m), 7.19 (2 H, d), 7.26–7.41 (6 H, m), 7.53 (2 H, d), 7.65 (2 H, d), 7.80 (2 H, d).

30

<合成例 10> 化合物MM 10～MM 17の合成

化合物MM 10は、国際公開第2005/049546号記載の合成法に従い合成した。

化合物MM 11は、特開2010-189630号公報記載の合成法に従い合成した。

化合物MM 12は、特開2010-215886号公報記載の合成法に従い合成した。

化合物MM 13は、国際公開第2013/191088号記載の合成法に従い合成した。

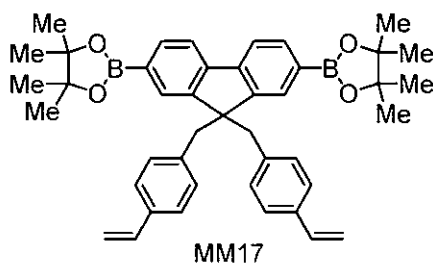
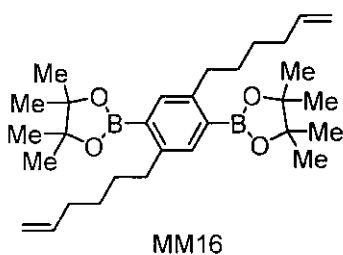
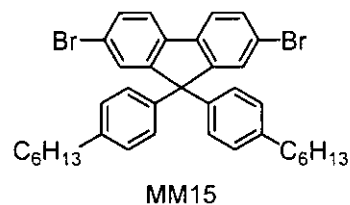
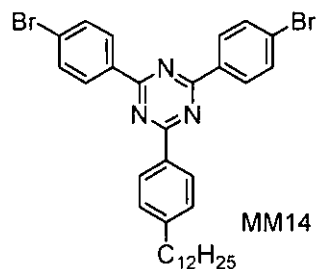
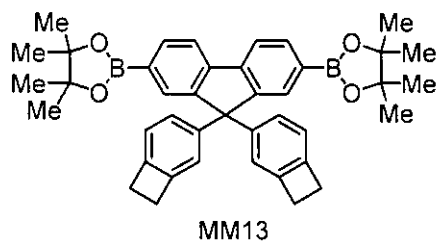
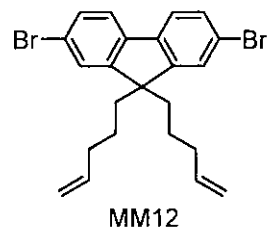
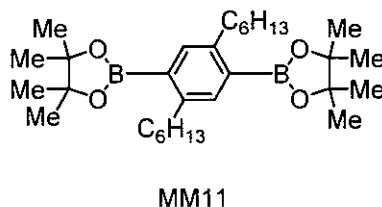
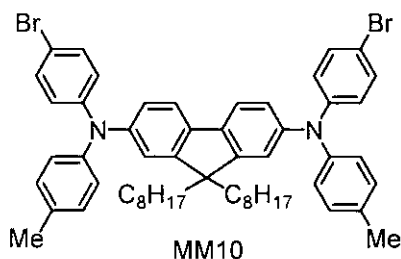
40

化合物MM 14は、特開2010-189630号公報記載の合成法に従い合成した。

化合物MM 15は、国際公開第2009/131255号記載の合成法に従い合成した。

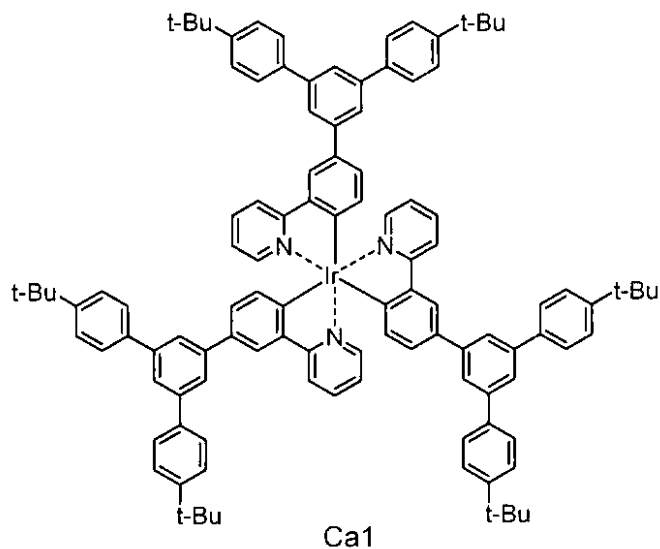
化合物MM 16は、国際公開第2013/146806号記載の合成法に従い合成した。

化合物MM 17は、特表2007-528916号公報記載の合成法に従い合成した。



<合成例 11> 金属錯体 Ca 1 の合成

金属錯体 Ca 1 は、国際公開第 2009/131255 号記載の合成法に従い合成した。



<実施例 4> 高分子化合物 1 の合成

(工程 1) 反応容器内を不活性ガス雰囲気とした後、化合物 MM10 (918.4 mg)、化合物 MM11 (493.3 mg)、化合物 MM12 (115.6 mg)、化合物 MM13 (257.8 mg)、ジクロロビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム (2.6 mg) およびトルエン (71 mL) を加え、105℃に加熱した。

(工程 2) 反応液に、20 重量% 水酸化テトラエチルアンモニウム水溶液 (10 mL) を滴下し、5 時間還流させた。

(工程 3) 反応後、そこに、フェニルボロン酸 (36.6 mg) およびジクロロビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム (2.6 mg) を加え、16.5

10

20

30

40

50

時間還流させた。

(工程4) 反応後、そこに、ジエチルジチアカルバミン酸ナトリウム水溶液を加え、80℃で2時間攪拌した。冷却後、反応液を、水で2回、3重量%酢酸水溶液で2回、水で2回洗浄し、得られた溶液をメタノールに滴下したところ、沈殿が生じた。沈殿物をトルエンに溶解させ、アルミナカラム、シリカゲルカラムの順番で通すことにより精製した。得られた溶液をメタノールに滴下し、攪拌した後、得られた沈殿物をろ取り、乾燥させることにより、高分子化合物1を1.10g得た。高分子化合物1のMnは 3.3×10^4 であり、Mwは 3.2×10^5 であった。

高分子化合物1は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物MM10から誘導される構成単位と、化合物MM11から誘導される構成単位と、化合物MM12から誘導される構成単位と、化合物MM1から誘導される構成単位とを、40:40:10:10のモル比で有する共重合体である。

<合成例12> 高分子化合物2の合成

反応容器内を窒素雰囲気とした後、化合物MM11(822.2mg)、化合物MM15(850.7mg)、化合物MM14(209.7mg)およびトルエン(37ml)を加え、80℃に加熱した。その後、そこへ、酢酸パラジウム(0.41mg)、トリス(2-メトキシフェニル)ホスフィン(2.30mg)および20重量%テトラエチルアンモニウムヒドロキシド水溶液(5.8g)を加え、還流下で4時間攪拌した。その後、そこへ、フェニルボロン酸(40.6mg)を加え、還流下で2時間攪拌した。その後、そこへ、N,N-ジエチルジチオカルバミド酸ナトリウム三水和物(0.46g)をイオン交換水(9ml)に溶解した溶液を加え、85℃で2時間攪拌した。得られた有機層を、3.6重量%塩酸で2回、2.5重量%アンモニア水溶液で2回、イオン交換水で5回、順次洗浄した。得られた有機層をメタノールに滴下したところ沈殿が生じた。得られた沈殿物をろ取り、乾燥した。得られた固体をトルエンに溶解させ、予めトルエンを通液したシリカゲルカラムおよびアルミナカラムに通液した。得られた溶液をメタノールに滴下したところ沈殿が生じた。得られた沈殿物をろ取り、乾燥させることにより、高分子化合物2(1.11g)を得た。高分子化合物2のMnは 8.7×10^4 であり、Mwは 2.3×10^5 であった。

高分子化合物2は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物MM11から誘導される構成単位と、化合物MM14から誘導される構成単位と、化合物MM15から誘導される構成単位とを、50:10:40のモル比で有する共重合体である。

<比較例C1> 高分子化合物3の合成

高分子化合物1の合成における(工程1)を、「反応容器内を不活性ガス雰囲気とした後、化合物MM10(918.4mg)、化合物MM11(491.4mg)、化合物MM12(115.6mg)、化合物MM13(156.9mg)、ジクロロビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(2.6mg)およびトルエン(71mL)を混合し、105℃に加熱した。」とする以外は、高分子化合物1の合成と同様にすることで、高分子化合物3を0.95g得た。高分子化合物3のMnは 3.5×10^4 であり、Mwは 3.4×10^5 であった。

高分子化合物3は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物MM10から誘導される構成単位と、化合物MM11から誘導される構成単位と、化合物MM12から誘導される構成単位と、化合物MM13から誘導される構成単位とを、40:40:10:10のモル比で有する共重合体である。

<実施例5> 高分子化合物4の合成

高分子化合物1の合成における(工程1)を、「反応容器内を不活性ガス雰囲気とした後、化合物MM10(917.2mg)、化合物MM11(499.6mg)、化合物MM1(259.2mg)、化合物MM2(230.1mg)、ジクロロビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(2.6mg)およびトルエン(71mL)を混合し、105℃に加熱した。」とする以外は、高分子化合物1の合成と同様にすることで、高分子化合物4を1.05g得た。高分子化合物4のMnは 4.0×10^4 であり

、 M_w は 2.8×10^5 であった。

高分子化合物4は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物MM10から誘導される構成単位と、化合物MM11から誘導される構成単位と、化合物MM1から誘導される構成単位と、化合物MM2から誘導される構成単位とを、40:40:10:10のモル比で有する共重合体である。

<実施例6> 高分子化合物5の合成

高分子化合物1の合成における(工程1)を、「反応容器内を不活性ガス雰囲気とした後、化合物MM10(917.2mg)、化合物MM16(49.6mg)、化合物MM1(923.0mg)ジクロロビス(トリス-オ-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(2.6mg)およびトルエン(71mL)を混合し、105℃に加熱した。」とする以外は、高分子化合物1の合成と同様にすることで、高分子化合物5を1.23g得た。高分子化合物5の M_n は 2.3×10^4 であり、 M_w は 1.2×10^5 であった。

高分子化合物5は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物MM10から誘導される構成単位と、化合物MM16から誘導される構成単位と、化合物MM1から誘導される構成単位とを、50:5:45のモル比で有する共重合体である。

<実施例7> 高分子化合物6の合成

高分子化合物1の合成における(工程1)を、「反応容器内を不活性ガス雰囲気とした後、化合物MM10(917.2mg)、化合物MM16(49.6mg)、化合物MM11(194.8mg)、化合物MM1(518.5mg)、ジクロロビス(トリス-オ-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(2.6mg)およびトルエン(71mL)を混合し、105℃に加熱した。」とする以外は、高分子化合物1の合成と同様にすることで、高分子化合物6を1.23g得た。高分子化合物6の M_n は 2.5×10^4 であり、 M_w は 3.0×10^5 であった。

高分子化合物6は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物MM10から誘導される構成単位と、化合物MM16から誘導される構成単位と、化合物MM11から誘導される構成単位と、化合物MM1から誘導される構成単位とを、50:5:20:25のモル比で有する共重合体である。

<比較例C2> 高分子化合物7の合成

高分子化合物1の合成における(工程1)を、「反応容器内を不活性ガス雰囲気とした後、化合物MM10(918.4mg)、化合物MM11(502.3mg)、化合物MM12(116.0mg)、化合物MM17(163.9mg)、ジクロロビス(トリス-オ-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(2.6mg)およびトルエン(71mL)を混合し、105℃に加熱した。」とする以外は、高分子化合物1の合成と同様にすることで、高分子化合物7を0.92g得た。高分子化合物7の M_n は 3.3×10^4 であり、 M_w は 2.2×10^5 であった。

高分子化合物7は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物MM10から誘導される構成単位と、化合物MM11から誘導される構成単位と、化合物MM12から誘導される構成単位と、化合物MM17から誘導される構成単位とを、40:40:10:10のモル比で有する共重合体である。

<実施例D1> 発光素子D1の作製と評価

スパッタ法により45nmの厚みでITO膜を付けたガラス基板に、正孔注入材料としてポリチオフェン・スルホン酸系の正孔注入剤であるAQ-1200(Plextronics社製)を用いてスピコートにより65nmの厚さで成膜し、これを大気雰囲気中において、ホットプレート上で170℃、15分間加熱した。

次に、高分子化合物1をキシレンに溶解させ0.7重量%のキシレン溶液を調製した。このキシレン溶液を用いてスピコートにより20nmの厚さで成膜し、これを窒素ガス雰囲気中において、ホットプレート上で180℃、60分間加熱した。

次に、高分子化合物2および金属錯体Ca1をそれぞれキシレンに溶解させ、1.8重量%のキシレン溶液を調製した。次に、高分子化合物2および金属錯体Ca1の固形分の重量比が70:30となるように、高分子化合物2のキシレン溶液と金属錯体Ca1のキ

シレン溶液を混合した。このキシレン溶液を用いてスパインコートにより80 nmの厚さで成膜し、これを窒素ガス雰囲気中において、ホットプレート上で150℃、10分加熱した。その後、陰極としてフッ化ナトリウムを約7 nm、次いでアルミニウムを約120 nm蒸着して、発光素子D1を作製した。なお、真空度が、 1×10^{-4} Pa以下に到達した後に金属の蒸着を開始した。

発光素子D1に電圧を印加したところ、この素子から520 nmにピークを有するEL発光が得られ、最大発光効率 $は81.2 \text{ cd/A}$ であった。

＜実施例D2＞ 発光素子D2の作製と評価

実施例D1における高分子化合物1に代えて高分子化合物4を用い、0.7重量%のキシレン溶液を調製したこと以外は、実施例D1と同様にして発光素子D2を作製した。

10

発光素子D2に電圧を印加したところ、この素子から520 nmにピークを有するEL発光が得られ、最大発光効率 $は83.2 \text{ cd/A}$ であった。

＜実施例D3＞ 発光素子D3の作製と評価

実施例D1における高分子化合物1に代えて高分子化合物5を用い、0.7重量%のキシレン溶液を調製したこと以外は、実施例D1と同様にして発光素子D3を作製した。

発光素子D3に電圧を印加したところ、この素子から520 nmにピークを有するEL発光が得られ、最大発光効率 $は77.0 \text{ cd/A}$ であった。

＜実施例D4＞ 発光素子D4の作製と評価

実施例D1における高分子化合物1に代えて高分子化合物6を用い、0.7重量%のキシレン溶液を調製したこと以外は、実施例D1と同様にして発光素子D4を作製した。

20

発光素子D4に電圧を印加したところ、この素子から520 nmにピークを有するEL発光が得られ、最大発光効率 $は74.9 \text{ cd/A}$ であった。

＜比較例CD1＞ 発光素子CD1の作製と評価

実施例D1における高分子化合物1に代えて高分子化合物3を用い、0.7重量%のキシレン溶液を調製したこと以外は、実施例D1と同様にして発光素子CD1を作製した。

発光素子CD1に電圧を印加したところ、この素子から520 nmにピークを有するEL発光が得られ、最大発光効率 $は66.0 \text{ cd/A}$ であった。

＜比較例CD2＞ 発光素子CD2の作製と評価

実施例D1における高分子化合物1に代えて高分子化合物7を用い、0.7重量%のキシレン溶液を調製したこと以外は、実施例D1と同様にして発光素子CD2を作製した。

30

発光素子CD2に電圧を印加したところ、この素子から520 nmにピークを有するEL発光が得られ、最大発光効率 $は60.3 \text{ cd/A}$ であった。

【産業上の利用可能性】

【0009】

本発明の発光素子は発光効率に優れる。また、本発明の高分子化合物および組成物は、該発光素子の製造に有用である。

フロントページの続き

(51)Int.Cl.			F I		
H 0 1 L	51/50	(2006.01)	H 0 5 B	33/22	B
C 0 9 K	11/06	(2006.01)	H 0 5 B	33/22	D
			H 0 5 B	33/14	B
			C 0 9 K	11/06	6 9 0

(56)参考文献 特開2010-155985 (JP, A)
国際公開第2012/086670 (WO, A1)
特開2013-209300 (JP, A)
特開2010-065213 (JP, A)
特表2014-503673 (JP, A)
特開2007-204635 (JP, A)
中国特許出願公開第102212190 (CN, A)
特開2011-149013 (JP, A)
特開2002-155131 (JP, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
C 0 8 G 6 1 / 0 0 - 6 1 / 1 2
CAplus / REGISTRY (STN)