

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第7部門第2区分

【発行日】平成25年4月11日(2013.4.11)

【公開番号】特開2012-28634(P2012-28634A)

【公開日】平成24年2月9日(2012.2.9)

【年通号数】公開・登録公報2012-006

【出願番号】特願2010-167319(P2010-167319)

【国際特許分類】

H 01 L 51/50 (2006.01)

C 07 D 209/86 (2006.01)

C 07 D 405/04 (2006.01)

C 09 K 11/06 (2006.01)

【F I】

H 05 B 33/14 B

H 05 B 33/22 B

H 05 B 33/22 A

C 07 D 209/86

C 07 D 405/04

C 09 K 11/06 6 9 0

【手続補正書】

【提出日】平成25年2月22日(2013.2.22)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】請求項1

【補正方法】変更

【補正の内容】

【請求項1】

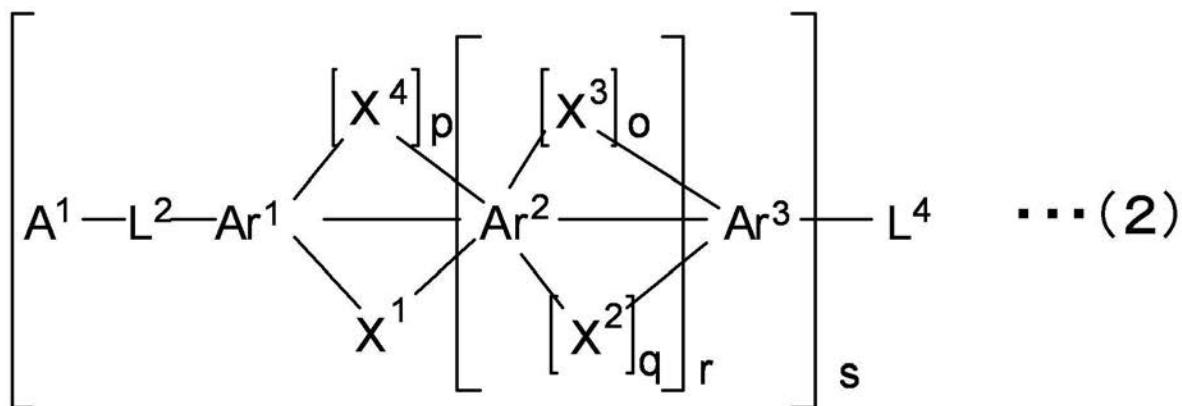
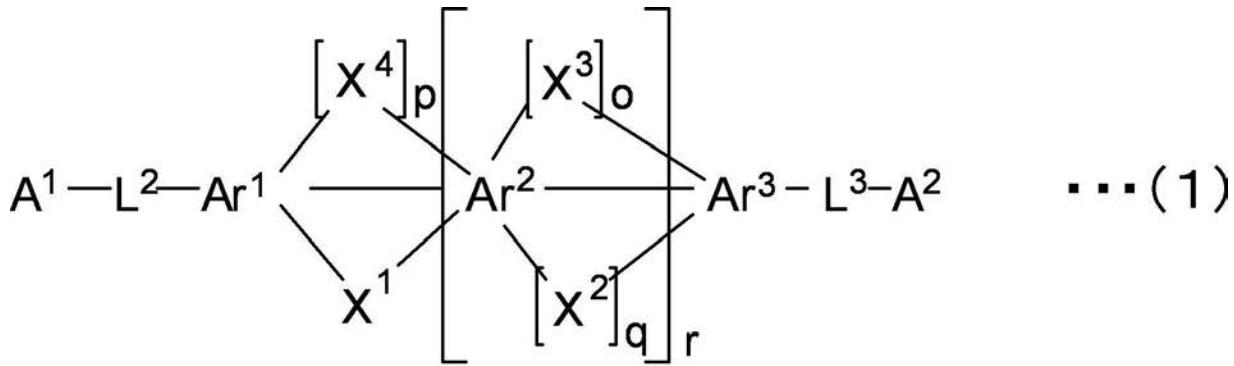
陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に設けられた有機薄膜層と、を備えた有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

前記有機薄膜層は、少なくとも第1のホストと、第2のホストと、発光を示すドーパントと、を含む発光層を備え、

前記第1のホストは、同一分子内に1個以上のカルバゾリル基と1個以上の含窒素複素環基を有する化合物であり、

前記第2のホストは、下記式(1)または(2)で表される化合物であることを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化1】



[式(1)および(2)において、 Ar^1 、 Ar^2 および Ar^3 は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6の芳香族炭化水素基、または置換もしくは無置換の環形成原子数6の芳香族複素環基を表す。但し、 Ar^1 、 Ar^2 および Ar^3 は置換基Yを一個または複数個有していてもよく、複数個の場合はそれぞれ異なっていてもよい。]

Yは炭素数1～20のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、

炭素数1～20のアルコキシ基、

炭素数7～24のアラルキル基、

シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)および(2)において、 X^1 、 X^2 、 X^3 および X^4 は、それぞれ独立に、酸素(O)、硫黄(S)、N-R¹またはCR²R³を表す。

前記R¹、R²およびR³は、それぞれ独立に、

炭素数1～20のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、

炭素数7～24のアラルキル基、

シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または置換もしくは無置換の環形成炭素数3～24の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

但し、 X^1 と X^2 が共にN-R¹でo、pが0、qが1の場合、

または、 X^1 と X^3 が共に $N - R^1$ で p 、 q が 0、 o が 1 の場合は、
 R^1 の少なくとも 1 つは置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 24 である 1 値の縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)および(2)において、 o 、 p および q は 0 または 1 を表す。 s は 1、2、3 又は 4 を表し、それぞれ L^4 を連結基とした 1 量体、2 量体、3 量体、4 量体である。

r は 1、2、3 または 4 を表す。

式(1)および(2)において、 L^2 は単結合、

炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、

2 値のシリル基もしくは炭素数 2 ~ 20 の 2 値の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 24 の 2 値の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数 3 ~ 24 の置換もしくは無置換の 1 値あるいは 2 値の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)において、 L^3 は単結合、

炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、

2 値のシリル基もしくは炭素数 2 ~ 20 の 2 值の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 24 の 2 値の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数 3 ~ 24 の置換もしくは無置換の 2 値の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(2)において、 L^4 は、

s が 2 の場合、

単結合、

炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、

2 値のシリル基もしくは炭素数 2 ~ 20 の 2 値の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 24 の 2 値の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数 3 ~ 24 の置換もしくは無置換の 2 値の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

s が 3 の場合、

炭素数 1 ~ 20 の 3 値の飽和炭化水素基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 の 3 値の環状飽和炭化水素基、

3 値のシリル基もしくは炭素数 1 ~ 20 の 3 値の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 24 の 3 値の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数 3 ~ 24 の置換もしくは無置換の 3 値の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

s が 4 の場合、

炭素数 1 ~ 20 の 4 値の飽和炭化水素基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 の 4 値の環状飽和炭化水素基、

ケイ素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 24 の 4 値の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数 3 ~ 24 の置換もしくは無置換の 4 值の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)および(2)において、 A^1 は、

水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、
 シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)において、 A^2 は、

水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、

シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。]

【手続補正2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0013

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0013】

[前記式(1)および(2)において、 A^r_1 、 A^r_2 および A^r_3 は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6の芳香族炭化水素基、

または置換もしくは無置換の環形成原子数6の芳香族複素環基を表す。

但し、 A^r_1 、 A^r_2 および A^r_3 は置換基Yを一個または複数個有していてもよく、複数個の場合はそれぞれ異なっていてもよい。

Yは炭素数1～20のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、

炭素数1～20のアルコキシ基、

炭素数7～24のアラルキル基、

シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)および(2)において、 X^1 、 X^2 、 X^3 および X^4 は、それぞれ独立に、酸素(O)、硫黄(S)、N-R¹またはCR²R³を表す。

前記R¹、R²およびR³は、それぞれ独立に、

炭素数1～20のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、

炭素数7～24のアラルキル基、

シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または置換もしくは無置換の環形成炭素数3～24の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

但し、 X^1 と X^2 が共にN-R¹でo、pが0、qが1の場合、

または、 X^1 と X^3 が共にN-R¹でp、qが0、oが1の場合は、

R¹の少なくとも1つは置換もしくは無置換の環形成原子数8～24である1価の縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)および(2)において、o、pおよびqは0または1を表す。sは1、2、3又は4を表し、それぞれL⁴を連結基とした1量体、2量体、3量体、4量体である。

rは1、2、3または4を表す。

式(1)および(2)において、L²は単結合、

炭素数1～20のアルキレン基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、

2価のシリル基もしくは炭素数2～20の2価の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の1価あるいは2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)において、L³は単結合、

炭素数1～20のアルキレン基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、

2価のシリル基もしくは炭素数2～20の2価の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(2)において、L⁴は、sが2の場合、

単結合、

炭素数1～20のアルキレン基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、

2価のシリル基もしくは炭素数2～20の2価の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

sが3の場合、

炭素数1～20の3価の飽和炭化水素基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の3価の環状飽和炭化水素基、

3価のシリル基もしくは炭素数1～20の3価の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の3価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の3価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

sが4の場合、

炭素数1～20の4価の飽和炭化水素基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の4価の環状飽和炭化水素基、

ケイ素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の4価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の4価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)および(2)において、A¹は、

水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、

シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数 3 ~ 2 4 の置換もしくは無置換の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)において、 A^2 は、

水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 2 0 のシクロアルキル基、

シリル基もしくは炭素数 3 ~ 2 0 の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 2 4 の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数 3 ~ 2 4 の置換もしくは無置換の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。]

【手続補正3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0053

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0053】

炭素数 6 ~ 3 0 の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基としては、例えば、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アントラニル基、フェナンスリル基、ピレニル基、クリセニル基、フルオランテニル基、パーフルオロアリール基等が挙げられ、これらのうちフェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、パーフルオロアリール基が好ましい。

炭素数 5 ~ 3 0 のシクロアルキレン基としては、例えばシクロペンチレン基、シクロヘキシレン基、シクロヘプチレン基などが挙げられ、これらのうちシクロヘキシレン基が好ましい。

【手続補正4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0063

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0063】

以上のような、一般式(7)、(8)及び(A)の結合様式、並びに各基の例示の組み合わせにおいて、下記[1]~[4]で表される化合物であることが好ましい。

[1] 前記一般式(7)において $a = 1$ 、かつ前記一般式(A)において $c = 1$, $d = 0$ であり、

一般式(7)式中、 C_z は、置換もしくは無置換のアリールカルバゾリル基又はカルバゾリルアリール基であり、

一般式(A)式中、 M^1 は、置換もしくは無置換の環を形成する炭素数 4 ~ 5 の窒素含有ヘテロ 6 員環又は 7 員環、置換もしくは無置換の環を形成する炭素数 2 ~ 4 の窒素含有ヘテロ 5 員環、置換もしくは無置換の環を形成する炭素数 8 ~ 1 1 の窒素含有ヘテロ環、置換もしくは無置換のイミダゾピリジニル環であり、 L^5 は、置換もしくは無置換の炭素数 6 ~ 3 0 のアリール基もしくは芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 3 0 の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基である。

[2] 前記一般式(7)において $a = 2$ 、かつ前記一般式(A)において $c = 1$, $e = 0$ であり、

一般式(7)式中、 C_z は、置換もしくは無置換のアリールカルバゾリル基又はカルバゾリルアリール基であり、

一般式(A)式中、 M^1 は、置換もしくは無置換の環を形成する炭素数 4 ~ 5 の窒素含有ヘテロ 6 員環又は 7 員環、置換もしくは無置換の環を形成する炭素数 2 ~ 4 の窒素含有ヘテロ 5 員環、置換もしくは無置換の環を形成する炭素数 8 ~ 1 1 の窒素含有ヘテロ環、置換もしくは無置換のイミダゾピリジニル環であり、 L^5 は、置換もしくは無置換の炭素

数 6 ~ 3 0 のアリール基もしくは芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 3 0 の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基である。

【手続補正 5】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 6 4

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 6 4】

[3] 前記一般式 (7) において $a = 1$ 、かつ前記一般式 (A) において $c = 2$, $e = 0$ であり、

一般式 (7) 式中、 C_z は、置換もしくは無置換のアリールカルバゾリル基又はカルバゾリルアリール基であり、

一般式 (A) 式中、 M^1 は、置換もしくは無置換の環を形成する炭素数 4 ~ 5 の窒素含有ヘテロ 6 員環又は 7 員環、置換もしくは無置換の環を形成する炭素数 2 ~ 4 の窒素含有ヘテロ 5 員環、置換もしくは無置換の環を形成する炭素数 8 ~ 11 の窒素含有ヘテロ環、置換もしくは無置換のイミダゾピリジニル環であり、 L^5 は、置換もしくは無置換の炭素数 6 ~ 3 0 のアリール基もしくは芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 3 0 の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基である。

[4] 前記一般式 (8) において $b = 2$ 、かつ前記一般式 (A) において $c = d = 1$ であり、

一般式 (8) 式中、 C_z は、置換もしくは無置換のアリールカルバゾリル基又はカルバゾリルアリール基であり、

一般式 (A) 式中、 M^1 は、置換もしくは無置換の環を形成する炭素数 4 ~ 5 の窒素含有ヘテロ 6 員環又は 7 員環、置換もしくは無置換の環を形成する炭素数 2 ~ 4 の窒素含有ヘテロ 5 員環、置換もしくは無置換の環を形成する炭素数 8 ~ 11 の窒素含有ヘテロ環、置換もしくは無置換のイミダゾピリジニル環であり、 L^5 は、置換もしくは無置換の炭素数 6 ~ 3 0 のアリール基もしくは芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 3 0 の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基である。

【手続補正 6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 1 0 5

【補正方法】変更

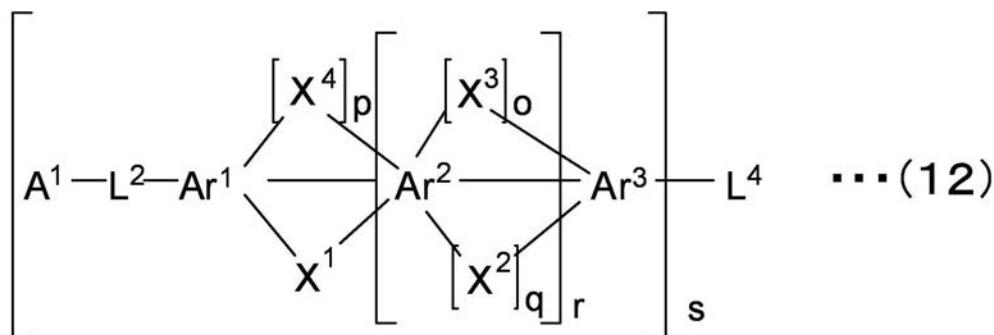
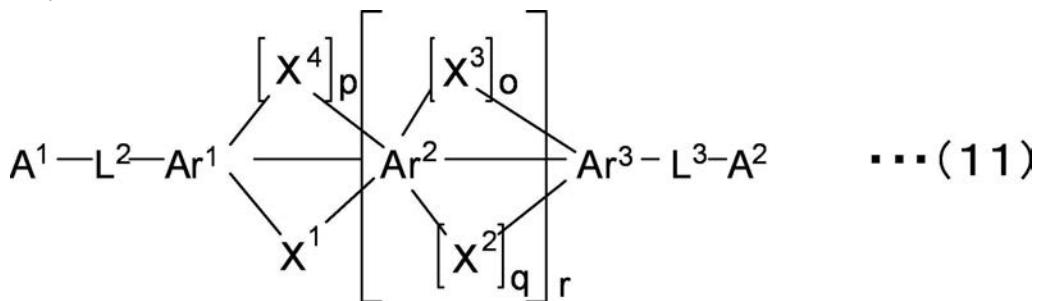
【補正の内容】

【0 1 0 5】

(第 2 のホスト)

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、第 2 のホストとして、下記式 (11) または (12) のいずれかで表される化合物を含む。

【化33】



[前記式(11)および(12)において、 Ar^1 、 Ar^2 および Ar^3 は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6の芳香族炭化水素基、

または置換もしくは無置換の環形成原子数6の芳香族複素環基を表す。

但し、 Ar^1 、 Ar^2 および Ar^3 は置換基Yを一個または複数個有していてもよく、複数個の場合はそれぞれ異なっていてもよい。

Yは炭素数1～20のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、

炭素数1～20のアルコキシ基、

炭素数7～24のアラルキル基、

シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)および(2)において、 X^1 、 X^2 、 X^3 および X^4 は、それぞれ独立に、酸素(O)、硫黄(S)、N-R¹またはCR²R³を表す。

前記R¹、R²およびR³は、それぞれ独立に、

炭素数1～20のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、

炭素数7～24のアラルキル基、

シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または置換もしくは無置換の環形成炭素数3～24の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

但し、 X^1 と X^2 が共にN-R¹でo、pが0、qが1の場合、

または、 X^1 と X^3 が共にN-R¹でp、qが0、oが1の場合は、

R¹の少なくとも1つは置換もしくは無置換の環形成原子数8～24である1価の縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)および(2)において、o、pおよびqは0または1を表す。sは1、2、3又は4を表し、それぞれL⁴を連結基とした1量体、2量体、3量体、4量体である。

rは1、2、3または4を表す。

式(1)および(2)において、L²は単結合、

炭素数1～20のアルキレン基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、

2価のシリル基もしくは炭素数2～20の2価の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の1価あるいは2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)において、L³は単結合、

炭素数1～20のアルキレン基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、

2価のシリル基もしくは炭素数2～20の2価の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(2)において、L⁴は、

sが2の場合、

単結合、

炭素数1～20のアルキレン基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、

2価のシリル基もしくは炭素数2～20の2価の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

sが3の場合、

炭素数1～20の3価の飽和炭化水素基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の3価の環状飽和炭化水素基、

3価のシリル基もしくは炭素数1～20の3価の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の3価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の3価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

sが4の場合、

炭素数1～20の4価の飽和炭化水素基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の4価の環状飽和炭化水素基、

ケイ素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の4価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数3～24の置換もしくは無置換の4価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)および(2)において、A¹は、

水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、

シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水

素基、

または環形成炭素数 3 ~ 2 4 の置換もしくは無置換の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(1)において、A²は、

水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 2 0 のシクロアルキル基、

シリル基もしくは炭素数 3 ~ 2 0 の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 2 4 の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、

または環形成炭素数 3 ~ 2 4 の置換もしくは無置換の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。】

【手続補正7】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0108

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0108】

前記式(13)～(16)において、X⁵およびX⁶は、それぞれ独立に、酸素(O)、硫黄(S)、N-R¹またはCR²R³を表す。

前記R¹、R²およびR³は、それぞれ独立に、炭素数1～20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、炭素数7～24のアラルキル基、シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または置換もしくは無置換の環形成炭素数3～24の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。但し、X⁵とX⁶が共にN-R¹の場合は、R¹の少なくとも1つは置換もしくは無置換の環形成原子数8～24である1価の縮合芳香族複素環基を表す。

式(14)および(16)において、sは2、3または4を表し、それぞれL⁴を連結基とした2量体、3量体、4量体である。

式(13)～(16)において、L²は単結合、炭素数1～20のアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、2価のシリル基もしくは炭素数2～20の2価のシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成炭素数3～24のベンゼン環aと連結する置換もしくは無置換の2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(13)および(15)において、L³は単結合、炭素数1～20のアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、2価のシリル基もしくは炭素数2～20の2価の置換シリル基、置換もしくは無置換である環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成炭素数3～24のベンゼン環cと連結する置換もしくは無置換の2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(14)および(16)において、L⁴は、sが2の場合、単結合、炭素数1～20のアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、2価のシリル基もしくは炭素数2～20の2価の置換シリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成炭素数3～24でベンゼン環cと連結する置換もしくは無置換の2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表し、sが3の場合、炭素数1～20の3価の飽和炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の3価の環状飽和炭化水素基、3価のシリル基もしくは炭素数1～20の3価の置換シリル基、置換もしくは無置換で環形成炭素数6～24の3価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または原子数3～24でベンゼン環cと連結する置換もしくは無置換の3価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基

を表し、 s が 4 の場合、炭素数 1 ~ 20 の 4 値の飽和炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 の 4 値の環状飽和炭化水素基、ケイ素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 24 の 4 値の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成炭素数 3 ~ 24 でベンゼン環 c と連結する置換もしくは無置換の 4 値の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(13)～(16)において、 A^1 は、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、炭素数 3 ~ 20 のシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 24 の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成炭素数 3 ~ 24 の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(13)および(15)において、 A^2 は、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、シリル基もしくは炭素数 3 ~ 20 の置換シリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 24 の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成炭素数 3 ~ 24 の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(13)～(16)において、 Y^5 、 Y^6 および Y^7 は、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、炭素数 7 ~ 24 のアラルキル基、シリル基もしくは炭素数 3 ~ 20 の置換シリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 24 の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 24 でベンゼン環 a、b、c と連結する芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。j、1 は 0、1、2 または 3、k は 0、1 または 2 である。

式(13)～(16)において、 A^1 、 A^2 、 L^2 、 L^3 および L^4 は、カルボニル基を含まない。】

【手続補正 8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0115

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0115】

[式(21)～(26)において、 X^7 、 X^8 、 X^9 、 X^{10} 、 X^{11} および X^{12} は、それぞれ独立に、酸素(O)、硫黄(S)、N-R¹ または CR²R³ を表す。

前記 R¹、R² および R³ は、それぞれ独立に、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、炭素数 7 ~ 24 のアラルキル基、シリル基もしくは炭素数 3 ~ 20 の置換シリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 24 の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ~ 24 の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。但し、 X^7 と X^8 、 X^9 と X^{10} 、または X^{11} と X^{12} が共に N-R¹ の場合は、R¹ の少なくとも 1 つは置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ~ 24 である 1 値の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(24)～(26)において、 s は 2、3 または 4 を表し、それぞれ L⁴ を連結基とした 2 量体、3 量体、4 量体である。

式(21)～(26)において、 L^2 は単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、2 値のシリル基もしくは炭素数 2 ~ 20 の 2 値のシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 24 の 2 値の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成原子数 3 ~ 24 のベンゼン環 a と炭素 - 炭素結合で連結する置換もしくは無置換の 1 値あるいは 2 値の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(21)～(23)において、 L^3 は単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、2 値のシリル基もしくは炭素数 2 ~ 20 の 2 値のシリル基、置換もしくは無置換である環形成炭素数 6 ~ 24 の 1 値あるいは 2 値の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成原子数 3 ~

24のベンゼン環cと炭素-炭素結合で連結する置換もしくは無置換の2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。但し、 X^7 と X^8 、 X^9 と X^{10} 、または X^{11} と X^{12} が共にCR₂R₃であり、かつL²、L³が共に置換もしくは無置換である環形成炭素数6～24の1価あるいは2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基である場合、L²、L³は同時にベンゼン環bに対してパラ位置に連結する場合は無い。

式(24)～(26)において、L⁴は、sが2の場合、単結合、炭素数1～20のアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、2価のシリル基もしくは炭素数2～20の2価の置換シリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成原子数3～24でベンゼン環cと炭素-炭素結合で連結する置換もしくは無置換の2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表し、sが3の場合、炭素数1～20の3価の飽和炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の3価の環状飽和炭化水素基、3価のシリル基もしくは炭素数1～20の3価の置換シリル基、置換もしくは無置換で環形成炭素数6～24の3価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または原子数3～24でベンゼン環cと炭素-炭素結合で連結する置換もしくは無置換の3価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表し、sが4の場合、炭素数1～20の4価の飽和炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の4価の環状飽和炭化水素基、ケイ素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の4価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成原子数3～24でベンゼン環cと炭素-炭素結合で連結する置換もしくは無置換の4価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。但し、 X^7 と X^8 、 X^9 と X^{10} 、または X^{11} と X^{12} が共にCR₂R₃であり、かつL²、L⁴が共に置換もしくは無置換である環形成炭素数6～24の2価、3価あるいは4価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基である場合、L²、L⁴は同時にベンゼン環bに対してパラ位置に連結する場合は無い。

式(21)～(26)において、A¹は、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成原子数3～24でL²と炭素-炭素結合で連結する芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。但し、L²が炭素数1～20のアルキレン基である場合、A¹は水素原子である場合はない。

式(21)～(23)において、A²は、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成原子数3～24でL³と炭素-炭素結合で連結する芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。但し、L³が炭素数1～20のアルキレン基である場合、A²は水素原子である場合はない。

式(21)～(26)において、Y⁵、Y⁶およびY⁷は、炭素数1～20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、炭素数1～20のアルコキシ基、炭素数7～24のアラルキル基、シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または置換もしくは無置換の環形成原子数3～24でベンゼン環a、b、cと炭素-炭素結合で連結する芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。j、lは0、1、2または3、kは0、1または2である。但し、 X^7 と X^8 、 X^9 と X^{10} 、または X^{11} と X^{12} が、酸素(O)、硫黄(S)、もしくはCR₂R₃であり、L²、L³が共に単結合であり、かつA¹とA²が共に水素原子である場合、ベンゼン環bはY⁶を一個または二個有し、Y⁶がメチル基または無置換のフェニル基である場合は無い。

式(21)～(26)において、A¹、A²、L²、L³およびL⁴は、カルボニル基を含まない。

【手続補正9】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】 0 1 1 7

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【0 1 1 7】

[式(27)および(28)において、 $X^{1\sim 3}$ 、 $X^{1\sim 4}$ は、それぞれ独立に、酸素(O)、硫黄(S)、N-R₁またはCR₂R₃を表す。]

前記R¹、R²およびR³は、それぞれ独立に、炭素数1～20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、炭素数7～24のアラルキル基、シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または置換もしくは無置換の環形成原子数3～24の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。但し、X^{1~3}とX^{1~4}が共にN-R¹の場合は、R₁の少なくとも1つは置換もしくは無置換の環形成原子数3～24である1価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(28)において、sは2、3または4を表し、それぞれL⁴を連結基とした2量体、3量体、4量体である。

式(27)および(28)において、L²は単結合、炭素数1～20のアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、2価のシリル基もしくは炭素数2～20の2価のシリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成原子数3～24のベンゼン環aと炭素-炭素結合で連結する置換もしくは無置換の2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。

式(27)において、L³は単結合、炭素数1～20のアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、2価のシリル基もしくは炭素数2～20の2価の置換シリル基、置換もしくは無置換である環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成原子数3～24のベンゼン環cと炭素-炭素結合で連結する置換もしくは無置換の2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。但し、X^{1~3}とX^{1~4}が共にCR₂R₃であり、かつL²、L³が共に置換もしくは無置換である環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基である場合、L²、L³は同時にベンゼン環bに対してパラ位置に連結する場合は無い。

式(28)において、L⁴は、sが2の場合、単結合、炭素数1～20のアルキレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、2価のシリル基もしくは炭素数2～20の2価の置換シリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の2価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成原子数3～24でベンゼン環cと炭素-炭素結合で連結する置換もしくは無置換の2価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表し、sが3の場合、炭素数1～20の3価の飽和炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の3価の環状飽和炭化水素基、3価のシリル基もしくは炭素数1～20の3価の置換シリル基、置換もしくは無置換で環形成炭素数6～24の3価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または原子数3～24でベンゼン環cと炭素-炭素結合で連結する置換もしくは無置換の3価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表し、sが4の場合、炭素数1～20の4価の飽和炭化水素基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20の4価の環状飽和炭化水素基、ケイ素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の4価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成原子数3～24でベンゼン環cと炭素-炭素結合で連結する置換もしくは無置換の4価の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。但し、X^{1~3}とX^{1~4}が共にCR₂R₃であり、かつL²、L⁴が共に置換もしくは無置換である環形成炭素数6～24の2価、3価あるいは4価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基である場合、L²、L⁴は同時にベンゼン環bに対してパラ位置に連結する場合は無い。

式(27)および(28)において、A¹は、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成原子数3～24でL²と炭素-炭素結合で連結する芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。但し、L²が炭素数1～20のアルキレン基である場合、A¹は水素原子である場合はない。

式(27)において、A²は、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または環形成原子数3～24でL³と炭素-炭素結合で連結する芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。但し、L³が炭素数1～20のアルキレン基である場合、A²は水素原子である場合はない。

式(27)および(28)において、Y⁵、Y⁶およびY⁷は、炭素数1～20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、炭素数1～20のアルコキシ基、炭素数7～24のアラルキル基、シリル基もしくは炭素数3～20の置換シリル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、または置換もしくは無置換の環形成原子数3～24でベンゼン環a、b、cと炭素-炭素結合で連結する芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基を表す。j、lは0、1、2または3、kは0、1または2である。但し、X¹³とX¹⁴が、酸素(O)、硫黄(S)、もしくはCR²R³であり、L²、L³が共に単結合であり、かつA¹とA²が共に水素原子である場合、ベンゼン環bはY⁶を一個または二個有し、Y⁶がメチル基または無置換のフェニル基である場合は無い。

式(27)および(28)において、A¹、A²、L²、L³およびL⁴は、カルボニル基を含まない。】

【手続補正10】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0118

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0118】

前記式(11)から(28)において、各基の示す具体例を以下に説明する。

A_r¹～A_r³の示す置換もしくは無置換の環形成炭素数6の芳香族炭化水素基としては、例えば、置換もしくは無置換のベンゼン等が挙げられ、Y、Y⁵～Y⁷、R¹～R³、L²～L⁴およびA¹～A²の示す置換もしくは無置換の環形成炭素数6～24の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基としては、例えば、置換もしくは無置換のベンゼン、ナフタレン、ビフェニル、ターフェニル、フルオレン、フェナントレン、トリフェニレン、ペリレン、クリセン、フルオランテン、ベンゾフルオレン、ベンゾトリフェニレン、ベンゾクリセン、アントラセン等の対応する価数の残基が挙げられ、ベンゼン、ナフタレン、ビフェニル、ターフェニル、フルオレン、フェナントレンが好ましい。

A_r¹～A_r³の示す置換もしくは無置換の環形成原子数6の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基としては、例えば、置換もしくは無置換のピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、1,3,5-トリアジン等が挙げられ、Y、Y⁵～Y⁷、R¹～R³、L²～L⁴およびA¹～A²の示す置換もしくは無置換の環形成炭素数3～24の芳香族複素環基又は縮合芳香族複素環基としては、例えば、置換もしくは無置換のピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、1,3,5-トリアジン、カルバゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、フェノキサジン、フェノチアジン、ジヒドロアクリジンの対応する価数の残基が挙げられ、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、カルバゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、フェノキサジン、ジヒドロアクリジンが好ましい。また、R¹の示す少なくとも1つの置換もしくは無置換の環形成原子数8～24である1価の縮合芳香族複素環基としては、芳香族複素環基の例の中から縮合構造を有する例が挙げられる。

Y、Y⁵～Y⁷、R¹～R³およびL²～L⁴の示す炭素数1～20のアルキル基、ア

ルキレン基、3価あるいは4価の飽和炭化水素基としては、例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、s-ブチル基、t-ブチル基、イソブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基、n-ノニル基、n-デシル基、n-ウンデシル基、n-ドデシル基、n-トリデシル基、n-テトラデシル基、n-ペントデシル基、n-ヘキサデシル基、n-ヘプタデシル基、n-オクタデシル基、ネオペンチル基、1-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基、3-メチルペンチル基等またはこれらを2~4価とした基が挙げられ、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、s-ブチル基、イソブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基、n-ノニル基、n-デシル基、n-ウンデシル基、n-ドデシル基、n-トリデシル基、n-テトラデシル基、n-ペントデシル基、n-ヘキサデシル基、n-ヘプタデシル基、n-オクタデシル基、ネオペンチル基、1-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基が好ましい。

Y、Y⁵~Y⁷、R¹~R³、L²~L⁴およびA¹~A²の示す置換もしくは無置換の環形成炭素数3~20のシクロアルキル基、シクロアルキレン基、3価あるいは4価の環状飽和炭化水素基としては、例えば、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等またはこれらを2~4価とした基が挙げられ、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基が好ましい。

Y、Y⁵~Y⁷の示す炭素数1~20のアルコキシ基としては、例えば、メトキシ基、エトキシ基、i-プロポキシ基、n-プロポキシ基、n-ブトキシ基、s-ブトキシ基、t-ブトキシ基等が挙げられ、メトキシ基、エトキシ基、i-プロポキシ基、n-プロポキシ基が好ましい。

Y、Y⁵~Y⁷、R¹~R³、L²~L⁴およびA¹~A²の示す炭素数1~20の置換シリル基としては、例えば、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリブチルシリル基、トリオクチルシリル基、トリイソブチルシリル基、ジメチルエチルシリル基、ジメチルイソプロピルシリル基、ジメチルプロピルシリル基、ジメチルブチルシリル基、ジメチルターシャリーブチルシリル基、ジエチルイソプロピルシリル基、フェニルジメチルシリル基、ジフェニルメチルシリル基、ジフェニルターシャリーブチル基、トリフェニルシリル基等またはこれらを2~3価とした基が挙げられ、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリブチルシリル基が好ましい。

Y、Y⁵~Y⁷およびR¹~R³の示す炭素数7~24のアラルキル基としては、例えば、ベンジル基、フェネチル基、フェニルプロピル基等が挙げられる。

【手続補正11】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0124

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0124】

式(11)~(28)において、X¹とX²、X³とX⁴、X⁵とX⁶、X⁷とX⁸、X⁹とX¹⁰、X¹¹とX¹²の少なくとも1つが酸素原子であると好ましく、式(13)~(20)においては、X⁵とX⁶のうち少なくとも一方が酸素原子であって、化合物がベンゾフラン構造を有すると好ましい。さらに、X⁵とX⁶が共に酸素原子であって、化合物がベンゾフラノジベンゾフラン構造を有すると特に好ましい。酸素原子は、電気陰性度が高く、電子輸送性を向上させることができ、これにより素子の低電圧化を図ることができ、特に、ホスト材料又は電子輸送材料として好適に用いることができる。また、共に酸素原子である場合には、三重項エネルギーを広げることができるので、発光効率を向上させることができる。また、式(11)~(28)において、A¹、A²、L²、L³およびL⁴がカルボニル基を含まない、すなわち末端構造がカルボニル基を含まないことにより、寿命が短くなるのを抑制される。