(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2013 年 7 月 25 日(25.07.2013)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2013/108700 A1

(51) 国際特許分類:
C07F 15/00 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
C08K 5/3472 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C08L 101/12 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2013/050268

(22) 国際出願日: 2013 年 1 月 10 日(10.01.2013)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2012-008188 2012 年 1 月 18 日(18.01.2012) JP

(71) 出願人: 住友化学株式会社(SUMITOMO CHEMICAL COMPANY, LIMITED) [JP/JP]; 〒1048260 東京都中央区新川二丁目２７番１号 Tokyo (JP). 独立行政法人産業技術総合研究所(NATIONAL INSTITUTE OF ADVANCED INDUSTRIAL SCIENCE AND TECHNOLOGY) [JP/JP]; 〒1008921 東京都千代田区霞が関１丁目３番１号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 秋野 喜彦(AKINO, Nobuhiko); 〒3003294 茨城県つくば市北原６ 住友化学株式会社内 Ibaraki (JP). 安倍 太一(ABE, Taichi); 〒3003294 茨城県つくば市北原６ 住友化学株式会社内 Ibaraki (JP). 今野 英雄(KONNO, Hideo); 〒3058565 茨城県つくば市東１－１－１ 独立行政法人産業技術総合研究所つくばセンター内 Ibaraki (JP). 島田 茂(SHIMADA, Shigeru); 〒3058565 茨城県つくば市東１－１－１ 独立行政法人産業技術総合研究所つくばセンター内 Ibaraki (JP). 佐藤 一彦(SATO, Kazuhiko); 〒3058565 茨城県つくば市東１－１－１ 独立行政法人産業技術総合研究所つくばセンター内 Ibaraki (JP).

(74) 代理人: 酒井 宏明, 外(SAKAI, Hiroaki et al.); 〒1006020 東京都千代田区霞が関三丁目２番５号 霞が関ビルディング 酒井国際特許事務所 Tokyo (JP).

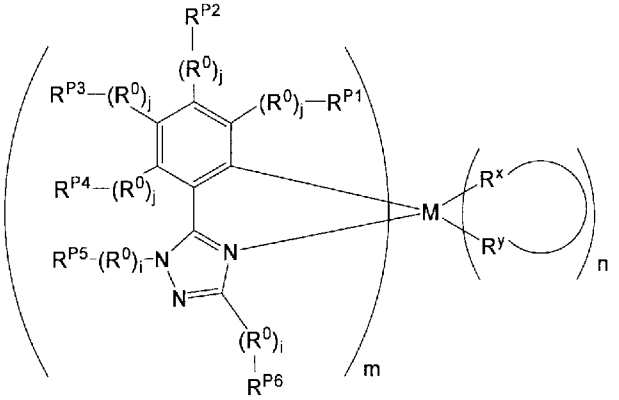
(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG,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

(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシ

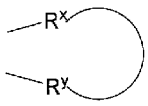
[続葉有]

(54) **Title**: METAL COMPLEX, AND LIGHT-EMITTING ELEMENT INCLUDING SAME

(54) 発明の名称 : 金属錯体及び該金属錯体を含む発光素子



(1)



(2)

(57) **Abstract**: The present invention provides a highly stable metal complex which is useful in the production of a light-emitting element exhibiting excellent longevity particularly with respect to the blue region. More specifically, the present invention provides a metal complex represented by formula (1) (in formula (1): M is a metal atom; Each R^0 independently represents a divalent linking group; i and j each independently represent either 0 or 1; R^{P1}, R^{P2}, R^{P3}, R^{P4}, R^{P5}, and R^{P6} each independently represent a hydrogen atom or the like, on condition that at least one of R^{P1}, R^{P2}, R^{P3}, R^{P4}, R^{P5}, and R^{P6} is a dendron; m is an integer in the range of 1-3, n is an integer in the range of 0-2, and m+n equals either 2 or 3; and the moiety represented by formula (2) is a bidentate ligand (in formula (2), R^x and R^y are atoms bonded to the metal atom (M), each independently representing carbon atoms or the like)).

(57) 要約: 本発明は、特に青色領域において、寿命特性に優れた発光素子の製造に有用な安定性の高い金属錯体を提供する。具体的には、本発明は、下記式（１）で表される金属錯体を提供する。［式（１）中、 Mは、金属原子である。 R

[続葉有]

WO 2013/108700 A1

ア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告（条約第 21 条(3)）

[0]は、それぞれ独立に、２価の連結基である。　ｉ及びｊは、それぞれ独立に、０又は１を表す。　R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}は、それぞれ独立に、水素原子等を表す。ただし、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}の少なくとも一つはデンドロンである。　ｍは１～３の整数であり、ｎは０～２の整数であり、ｍ＋ｎは２又は３である。　下記式（２）で表される部分は、２座配位子を表す。］［式（２）中、R^{x}及びR^{y}は、金属原子Ｍに結合する原子であり、それぞれ独立に、炭素原子等を表す。］］

明　細　書

発明の名称 ： 金属錯体及び該金属錯体を含む発光素子

技術分野

[0001] 本発明は、金属錯体及び該金属錯体を含む発光素子に関する。

背景技術

[0002] 有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、「発光素子」ということがある。）の発光層に用いる発光材料として、三重項励起状態からの発光を示す金属錯体は、一重項励起状態からの発光を示す蛍光材料よりも高発光効率が期待できる。三重項励起状態からの発光（燐光発光）を示す青色発光金属錯体としては、例えば、金属原子としてイリジウム原子を有する金属錯体であるＦＩｒｐｉｃ（特許文献１）及びトリアゾール環を含む配位子を有する金属錯体（特許文献２）が知られている。

先行技術文献

特許文献

[0003] 特許文献1：ＷＯ２００２／１５６４５

特許文献2：ＷＯ２００４／１０１７０７

発明の概要

発明が解決しようとする課題

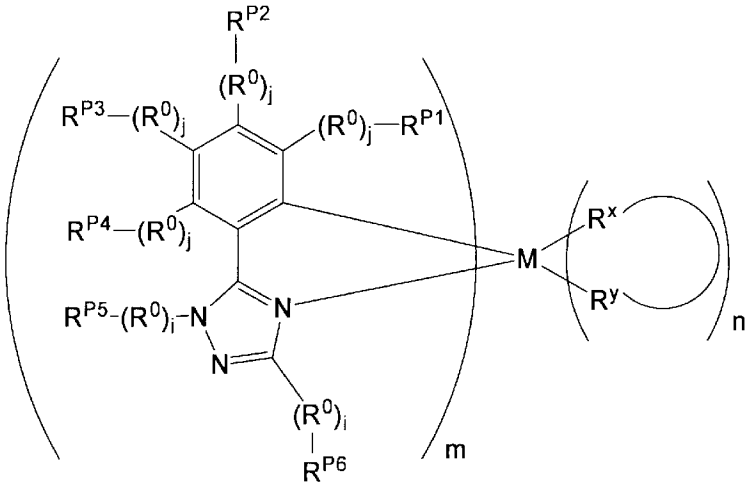
[0004] しかし、金属錯体を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子への実用化には、赤色・緑色・青色の三原色において、発光効率や寿命特性等に優れた発光素子の製造に有用な金属錯体の開発が望まれている。赤色や緑色と比較して、特に青色領域において、寿命特性に優れた発光素子の製造に有用な安定性の高い金属錯体の開発が望まれている。

そこで、本発明は、特に青色領域において、寿命特性に優れた発光素子の製造に有用な安定性の高い金属錯体を提供することを目的とする。また、本発明は、当該金属錯体を用いた発光素子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] 本発明は第一に、下記式（１）で表される金属錯体を提供する。

[化1]



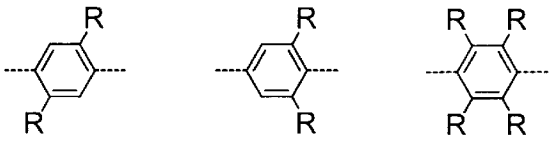
(1)

[式中、

Mは、ルテニウム原子、ロジウム原子、パラジウム原子、オスミウム原子、イリジウム原子及び白金原子からなる群から選ばれる金属原子である。

R^0は、それぞれ独立に、式（Ｌ－１）で表される基、式（Ｌ－２）で表される基、及び、式（Ｌ－３）で表される基からなる群から選ばれる２価の連結基である。

[化2]



(L-1) (L-2) (L-3)

[式中、Ｒは、それぞれ独立に、アルキル基を表す。]

ｉは、それぞれ独立に、０又は１を表す。

ｊは、それぞれ独立に、０又は１を表す。

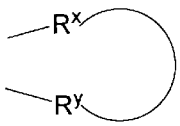
R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アシル基、アシルオキシ基、

カルバモイル基、アミド基、酸イミド基、イミン残基、置換アミノ基、置換シリル基、置換シリルオキシ基、置換シリルチオ基、置換シリルアミノ基、１価の複素環基、ヘテロアリールオキシ基、ヘテロアリールチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、置換カルボキシル基又はシアノ基を表す。なお、R^{P1}とR^{P2}は結合して環構造を形成していてもよく、R^{P2}とR^{P3}は結合して環構造を形成していてもよく、R^{P3}とR^{P4}は結合して環構造を形成していてもよい。ただし、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}の少なくとも一つはデンドロンであり、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}又はR^{P4}がデンドロンである場合、該デンドロンに連結した連結基R^{0}の数を表すｊは１である。

ｍは１～３の整数であり、ｎは０～２の整数であり、ｍ＋ｎは２又は３である。

下記式（２）で表される部分は、２座配位子を表す。

[化3]



(2)

［式中、R^{x}及びR^{y}は、金属原子Ｍに結合する原子であり、それぞれ独立に、炭素原子、酸素原子又は窒素原子を表す。］］

本発明は第二に、前記金属錯体と、電荷輸送性化合物と、を含む組成物を提供する。

本発明は第三に、前記金属錯体と、溶媒又は分散媒と、を含む組成物を提供する。

本発明は第四に、前記金属錯体を含む膜を提供する。

本発明は第五に、陽極及び陰極からなる電極と、該電極間に設けられた、前記金属錯体を含む層と、を有する（備える）発光素子を提供する。

本発明は第六に、前記発光素子を有する（備える）面状光源及び照明を提供する。

発明の効果

[0006] 本発明の金属錯体は、安定性に優れる。したがって、本発明の金属錯体は、発光素子の製造に特に有用である。

発明を実施するための形態

[0007] 以下、本発明を詳細に説明する。

[0008] ＜金属錯体＞

まず、本発明の金属錯体について説明する。

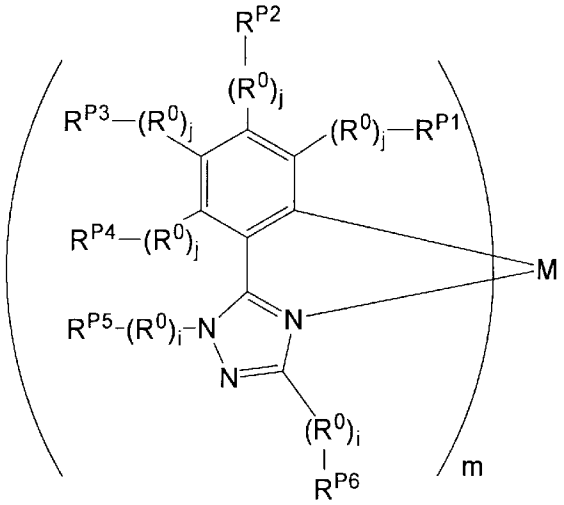
本発明の金属錯体は、フェニル環及びトリアゾール環から構成されるｍ個の配位子を有する金属錯体であり、具体的には前記式（１）で表される金属錯体である。

[0009] 前記式（１）で表される金属錯体は、添え字ｍでその数を定義されている配位子と、添え字ｎでその数を定義されている前記式（２）で表される２座配位子から構成されている。なお、以下において、単に「配位子」という場合には、前記添え字ｍでその数を定義されている配位子と、添え字ｎでその数を定義されている２座配位子の両方を意味する。

[0010] 前記式（１）中、ｍは１～３の整数であり、ｎは０～２の整数であり、好ましくはｎは０又は１であり、より好ましくはｎは０である。ただし、金属原子Ｍに結合できる配位子の合計数であるｍ＋ｎは、金属原子Ｍの価数を満たす。例えば、金属原子がイリジウム原子の場合、ｍは１、２又は３であり、ｎは０、１又は２であり、かつ、ｍ＋ｎは３である。好ましくは、ｍ＝３かつｎ＝０、又は、ｍ＝２かつｎ＝１であり、より好ましくは、ｍ＝３かつｎ＝０である。なお、金属原子Ｍは、トリアゾール環の窒素原子と配位結合が可能であり、かつ、ベンゼン環の炭素原子と共有結合が可能であり、Ｍから伸びている実線は、このような結合を示す（以下同様。）。

[0011] 前記式（１）で表される金属錯体は、好ましくは、下記式（３）で表される金属錯体（即ち、ｎ＝０）である。

[化4]



(3)

[式中、M、R^0、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}、R^{P6}、i、j及びmは、前記と同じ意味を表す。]

[0012] 本発明の金属錯体において、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アシル基、アシルオキシ基、カルバモイル基、アミド基、酸イミド基、イミン残基、置換アミノ基、置換シリル基、置換シリルオキシ基、置換シリルチオ基、置換シリルアミノ基、1価の複素環基、ヘテロアリールオキシ基、ヘテロアリールチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、置換カルボキシル基又はシアノ基を表す。なお、R^{P1}とR^{P2}は結合して環構造を形成していてもよく、R^{P2}とR^{P3}は結合して環構造を形成していてもよく、R^{P3}とR^{P4}が結合して環構造を形成していてもよい。ただし、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}の少なくとも一つは後述のデンドロンであり、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}又はR^{P4}がデンドロンである場合、該デンドロンに連結した連結基R^{0}の数を表すjは1である。

好ましくは、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}は、それぞれ独立に、ハロゲン原子、アルキル基、アルキルオキシ基、アリール基又は1価の複素環基であり、より好ましくは、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P}

^{P6}のうち少なくとも一つが、ハロゲン原子、アルキル基、アルキルオキシ基、アリール基又は１価の複素環基である。

[0013] 本発明の金属錯体は、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}の少なくとも一つは、溶解性の向上、塗布成膜性の向上、及び、更なる機能性（例えば、電荷輸送性）の導入、の少なくとも一種を達成するため、デンドロンである。

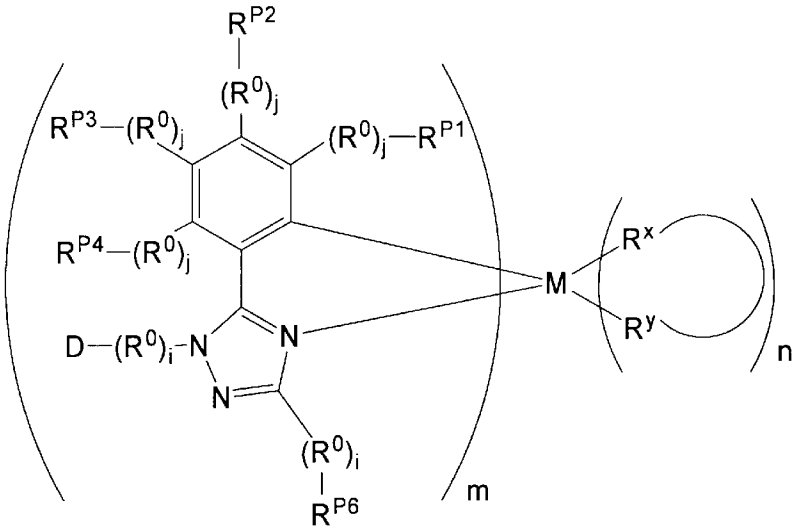
デンドロンは分枝構造（ｂｒａｎｃｈｉｎｇ　ｓｔｒｕｃｔｕｒｅ）を有する基であり、金属錯体に種々の機能を付与することを可能にする。デンドロンを有する高度に枝分かれした巨大分子は、デンドリマーと呼ばれることがあり、例えば、ＷＯ０２／０６６５７５、ＷＯ０２／０６６５５２、ＷＯ０２／０６７３４３等において紹介されており、金属錯体に種々の機能を付与することを目的として設計及び合成がされている。

具体的には、デンドロンは、置換基を有することに起因する分岐構造を有する基であり、好ましくは、２個以上の置換基を有するアリール基及び２個以上の置換基を有する１価の複素環基であり、より好ましくは、２個以上の置換基を有するアリール基であり、さらに好ましくは２個以上の置換基を有するフェニル基である。デンドロンであるアリール基、１価の複素環基及びフェニル基が有する置換基としては、アルキル基又はアルキルオキシ基が好ましく、アルキル基がより好ましい。なお、アリール基及び１価の複素環基の詳細は、後述する。また、デンドロンであるアリール基、１価の複素環基及びフェニル基が有する置換基の詳細は、後述する。

[0014] 本発明の金属錯体は、配位子が一つ以上のデンドロンで置換されている。配位子のフェニル環側におけるデンドロンの置換位置については、前記R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}及びR^{P4}のいずれであってもよいが、R^{P2}又はR^{P3}が好ましく、R^{P3}がさらに好ましい。配位子のトリアゾール環側におけるデンドロンの置換位置については、前記R^{P5}及びR^{P6}のいずれであってもよいが、好ましくはR^{P5}である。金属錯体としては、下記式（３－１）で表されるR^{P5}がデンドロンである金属錯体、及び、下記式（３－２）で表されるR^{P3}がデンド

ロンである金属錯体が好ましく、R^{P3}及びR^{P5}がデンドロンである金属錯体がより好ましい。

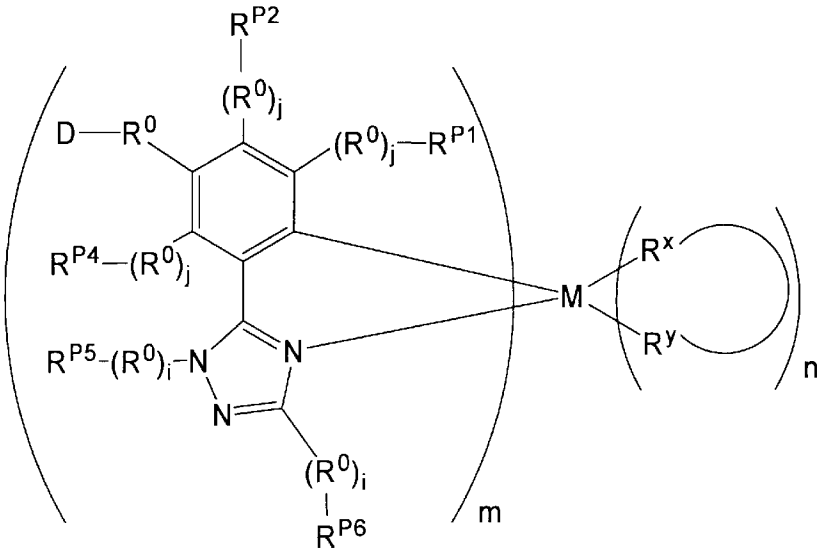
[0015] [化5]



(3-1)

[式中、M、R^0、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P6}、式（２）で表される部分、R^x、R^y、ｉ、ｊ、ｍ及びｎは、前記と同じ意味を表し、Ｄはデンドロンを表す。]

[0016] [化6]



(3-2)

[式中、M、R^0、R^{P1}、R^{P2}、R^{P4}、R^{P5}、R^{P6}、式（２）で表される部分、R^x、R^y、ｉ、ｊ、ｍ及びｎは、前記と同じ意味を表し、Ｄはデンドロンを表す。]

[0017] 本発明の金属錯体の発光スペクトルのピーク波長は、限定されないが、好ましくは４３０ｎｍ～６３０ｎｍであり、より好ましくは４３０ｎｍ～５８０ｎｍであり、さらに好ましくは４３０ｎｍ～５３０ｎｍであり、特に好ましくは４３０ｎｍ～５１０ｎｍである。

[0018] 本発明の金属錯体の発光スペクトルピークは、例えば、該金属錯体を、キシレン、トルエン、クロロホルム、テトラヒドロフラン等の有機溶媒に溶解させ、希薄溶液（有機溶媒中の金属錯体の濃度は、例えば、１×１０$^{-6}$～１×１０$^{-7}$ｍｏｌ／Ｌの範囲）を調製し、該希薄溶液のＰＬスペクトルを測定することで、評価し得る。

[0019] 本発明の金属錯体の金属原子となる金属原子Ｍは、ルテニウム原子、ロジウム原子、パラジウム原子、オスミウム原子、イリジウム原子及び白金原子からなる群から選ばれる金属原子である。これらの金属原子は、金属錯体にスピン－軌道相互作用を及ぼし、一重項状態と三重項状態間の系間交差を起こし得る。金属原子Ｍは、好ましくはオスミウム原子、イリジウム原子又は白金原子であり、さらに好ましくはイリジウム原子又は白金原子であり、特に好ましくはイリジウム原子である。

[0020] 前記Ｒ^{0}は、配位子とＲ^{P1}、Ｒ^{P2}、Ｒ^{P3}、Ｒ^{P4}、Ｒ^{P5}及びＲ^{P6}で表される基との間の２価の連結基であり、それぞれ独立に、前記式（Ｌ－１）で表される基、前記式（Ｌ－２）で表される基、又は、前記式（Ｌ－３）で表される基から選ばれる。該２価の連結基は、好ましくは、前記式（Ｌ－１）で表される基、又は、前記式（Ｌ－２）で表される基であり、さらに好ましくは、前記式（Ｌ－２）で表される基である。

連結基であるＲ^{0}の数を表すｊは、それぞれ０又は１であるが、Ｒ^{P1}、Ｒ^{P2}、Ｒ^{P3}又はＲ^{P4}がデンドロンである場合は、該デンドロンに連結した連結基Ｒ^{0}の数を表すｊは１である。連結基Ｒ^{0}の数を表すｊは、好ましくは１である。

式（Ｌ－１）、（Ｌ－２）及び（Ｌ－３）におけるＲは、アルキル基を表し、該アルキル基は、直鎖、分岐又は環状のいずれでもよいが、直鎖又は分

岐であることが好ましく、直鎖であることがより好ましい。直鎖のアルキル基における炭素数は、通常１～１０であり、好ましくは１～６であり、より好ましくは１～３であり、さらに好ましくは１である。また、分岐及び環状のアルキル基における炭素数は、通常３～１０であり、好ましくは３～６である。

[0021] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子等が挙げられ、フッ素原子であることが好ましい。

[0022] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアルキル基は、直鎖、分岐又は環状のいずれでもよい。直鎖のアルキル基の炭素数は、通常１～１２であり、好ましくは３～１０である。また、分岐及び環状のアルキル基における炭素数は、通常３～１２であり、好ましくは３～１０である。なお、アルキル基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなアルキル基の例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、ｉｓｏ－プロピル基、ブチル基、ｉｓｏ－ブチル基、ｔｅｒｔ－ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、シクロヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、２－エチルヘキシル基、ノニル基、デシル基、３，７－ジメチルオクチル基、ラウリル基、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が挙げられ、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、２－エチルヘキシル基、デシル基、３，７－ジメチルオクチル基が好ましい。

[0023] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアルキルオキシ基は、直鎖、分岐又は環状のいずれでもよい。直鎖のアルキルオキシ基の炭素数は、通常１～１２であり、好ましくは３～１０である。また、分岐及び環状のアルキルオキシ基の炭素数は、通常３～１２であり、好ましくは３～１０である。アルキルオキシ基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなアルキルオキシ基の例としては、メチルオキシ基、エチルオキシ基、プロピルオキシ基、ｉｓｏ－プロピルオキシ基、ブチルオキシ基、ｉｓｏ－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、シクロヘキシルオキシ基、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、トリフルオロメチルオキシ基、ペンタフルオロエチルオキシ基、パーフルオロブチルオキシ基、パーフルオロヘキシルオキシ基、パーフルオロオクチルオキシ基、メチルオキシメチルオキシ基、２－メチルオキシエチルオキシ基が挙げられ、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、オクチルオキシ基、２－エチルヘキシルオキシ基、デシルオキシ基、３，７－ジメチルオクチルオキシ基が好ましい。

[0024] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアルキルチオ基は、直鎖、分岐又は環状のいずれでもよい。直鎖のアルキルチオ基の炭素数は、通常１～１２であり、好ましくは３～１０である。また、分岐及び環状のアルキルチオ基の炭素数は、通常３～１２であり、好ましくは３～１０である。アルキルチオ基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなアルキルチオ基の例としては、メチルチオ基、エチルチオ基、プロピルチオ基、ｉｓｏ－プロピルチオ基、ブチルチオ基、ｉｓｏ－ブチルチオ基、ｔｅｒｔ－ブチルチオ基、ペンチルチオ基、ヘキシルチオ基、シクロヘキシルチオ基、ヘプチルチオ基、オクチルチオ基、２－エチルヘキシルチオ基、ノニルチオ基、デシルチオ基、３，７－ジメチルオクチルチオ基、ラウリルチオ基、トリフルオロメチルチオ基が挙げられ、ペンチルチオ基、ヘキシルチオ基、オクチルチオ基、２－エチルヘキシルチオ基、デシルチオ基、３，７－ジメチルオクチルチオ基が好ましい。

[0025] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアリール基は、炭素数が、通常６～６０であり、好ましくは７～４８である。アリール基は、置

換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなアリール基の例としては、フェニル基、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル基（「C_1～C_{12}アルキルオキシ」は、アルキルオキシ部分の炭素数が１～１２であることを意味する。以下、同様である。）、C_1～C_{12}アルキルフェニル基（「C_1～C_{12}アルキル」は、アルキル部分の炭素数が１～１２であることを意味する。以下、同様である。）、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、ペンタフルオロフェニル基が挙げられ、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル基、C_1～C_{12}アルキルフェニル基が好ましい。ここで、アリール基とは、芳香族炭化水素から水素原子１個を除いた原子団である。この芳香族炭化水素としては、縮合環をもつ化合物、独立したベンゼン環及び／又は縮合環から選ばれる２個以上が直接又はビニレン基等を介して結合した化合物が含まれる。

[0026] 上述のC_1～C_{12}アルキルは、炭素数１～１２のアルキルであり、前記アルキル基で説明し、例示したものと同様である。したがって、前記基におけるC_1～C_{12}アルキルオキシとしては、例えば、メチルオキシ、エチルオキシ、プロピルオキシ、ｉｓｏ－プロピルオキシ、ブチルオキシ、ｉｓｏ－ブチルオキシ、ｔｅｒｔ－ブチルオキシ、ペンチルオキシ、ヘキシルオキシ、シクロヘキシルオキシ、ヘプチルオキシ、オクチルオキシ、２－エチルヘキシルオキシ、ノニルオキシ、デシルオキシ、３，７－ジメチルオクチルオキシ、ラウリルオキシが挙げられる。また、前記基におけるC_1～C_{12}アルキルフェニルとしては、例えば、メチルフェニル、エチルフェニル、ジメチルフェニル、プロピルフェニル、メシチル、メチルエチルフェニル、ｉｓｏ－プロピルフェニル、ブチルフェニル、ｉｓｏ－ブチルフェニル、ｔｅｒｔ－ブチルフェニル、ペンチルフェニル、イソアミルフェニル、ヘキシルフェニル、ヘプチルフェニル、オクチルフェニル、ノニルフェニル、デシルフェニル、ドデシルフェニルが挙げられる。以下同様である。

[0027] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアリールオキシ基は、炭素数が、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いが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなアリールオキシ基の例としては、フェニルオキシ基、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニルオキシ基、C_1～C_{12}アルキルフェニルオキシ基、１－ナフチルオキシ基、２－ナフチルオキシ基、ペンタフルオロフェニルオキシ基が挙げられ、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニルオキシ基、C_1～C_{12}アルキルフェニルオキシ基が好ましい。

[0028] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアリールチオ基は、炭素数が、通常６～６０であり、好ましくは７～４８である。アリールチオ基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなアリールチオ基の例としては、フェニルチオ基、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニルチオ基、C_1～C_{12}アルキルフェニルチオ基、１－ナフチルチオ基、２－ナフチルチオ基、ペンタフルオロフェニルチオ基が挙げられ、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニルチオ基、C_1～C_{12}アルキルフェニルチオ基が好ましい。

[0029] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアリールアルキル基は、炭素数が、通常７～６０であり、好ましくは７～４８である。アリールアルキル基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなアリールアルキル基の例としては、フェニル－C_1～C_{12}アルキル基、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル－C_1～C_{12}アルキル基、C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_1～C_{12}アルキル基、１－ナフチル－C_1～C_{12}アルキル基、２－ナフチル－C_1～C_{12}アルキル基が挙げられ、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル－C_1～C_{12}アルキル基、C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_1～C_{12}アルキル基が好ましい。

[0030] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアリールアルキルオキシ基は、炭素数が、通常７～６０であり、好ましくは７～４８である。アリールアルキルオキシ基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなアリールアルキルオキシ基の例としては、フェニルメチルオキシ基、フェニルエチルオキシ基、フェニルブチルオキシ基、フェニルペンチルオキシ基、フェニルヘキシルオキシ基、フェニルヘプチルオキシ基、フェニルオクチルオキシ基等のフェニル－C_1～C_{12}アルキルオキシ基、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル－C_1～C_{12}アルキルオキシ基、C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_1～C_{12}アルキルオキシ基、１－ナフチル－C_1～C_{12}アルキルオキシ基、２－ナフチル－C_1～C_{12}アルキルオキシ基が挙げられ、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル－C_1～C_{12}アルキルオキシ基、C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_1～C_{12}アルキルオキシ基が好ましい。

[0031] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアリールアルキルチオ基は、炭素数が、通常７～６０であり、好ましくは７～４８である。アリールアルキルチオ基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなアリールアルキルチオ基の例としては、フェニル－C_1～C_{12}アルキルチオ基、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル－C_1～C_{12}アルキルチオ基、C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_1～C_{12}アルキルチオ基、１－ナフチル－C_1～C_{12}アルキルチオ基、２－ナフチル－C_1～C_{12}アルキルチオ基が挙げられ、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル－C_1～C_{12}アルキルチオ基、C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_1～C_{12}アルキルチオ基が好ましい。

[0032] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアシル基は、炭素数が、通常２～２０であり、好ましくは２～１８である。アシル基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなアシル基の例としては、アセチル基、プロピオニル基、ブチリル基、イソブチリル基、ピバロイル基、ベンゾイル基、トリフルオロアセチ

ル基、ペンタフルオロベンゾイル基が挙げられる。

[0033] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアシルオキシ基は、炭素数が、通常２～２０であり、好ましくは２～１８である。アシルオキシ基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなアシルオキシ基の例としては、アセトキシ基、プロピオニルオキシ基、ブチリルオキシ基、イソブチリルオキシ基、ピバロイルオキシ基、ベンゾイルオキシ基、トリフルオロアセチルオキシ基、ペンタフルオロベンゾイルオキシ基が挙げられる。

[0034] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるカルバモイル基は、置換基を有していてもよく、置換基の炭素数を含めた炭素数が、通常１～２０であり、好ましくは２～１８である（即ち、一般式：NR^aR^b-CO-で表され、R^a及びR^bは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す。）。

このようなカルバモイル基の例としては、アミノカルボニル基、メチルアミノカルボニル基、ジメチルアミノカルボニル基、エチルアミノカルボニル基、プロピルアミノカルボニル基、ブチルアミノカルボニル基が挙げられる。

[0035] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアミド基は、置換基を有していてもよく、置換基の炭素数を含めた炭素数が、通常１～２０であり、好ましくは２～１８である（即ち、一般式：$R^c-CO-NR^d-$で表され、R^c及びR^dは、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表す）。

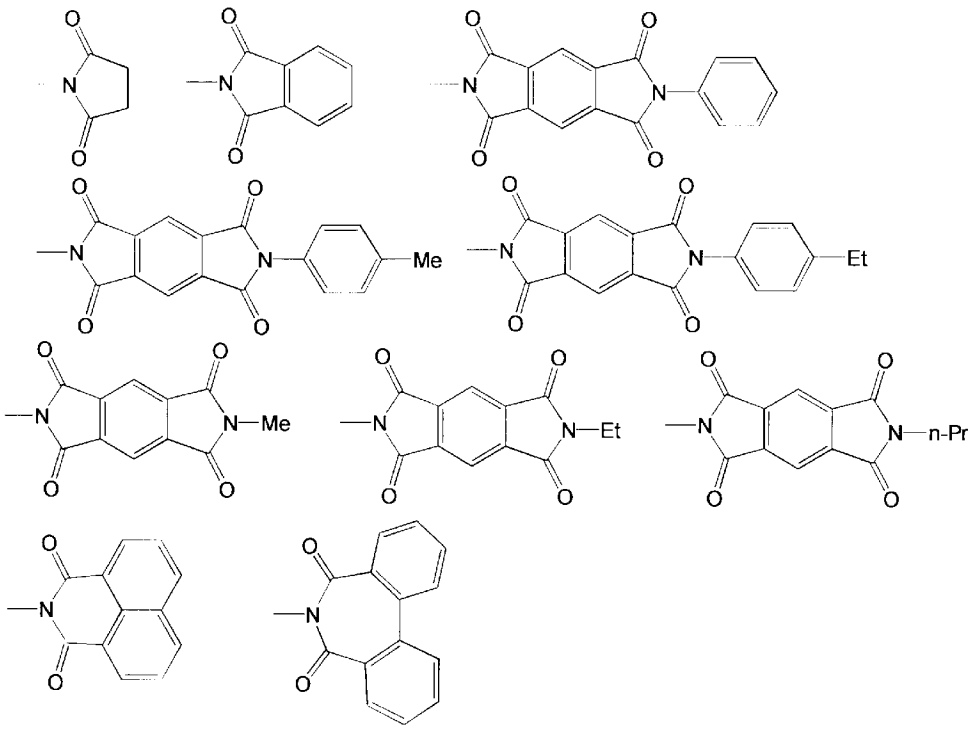
このようなアミド基の例としては、ホルムアミド基、アセトアミド基、プロピオアミド基、ブチロアミド基、ベンズアミド基、トリフルオロアセトアミド基、ペンタフルオロベンズアミド基、ジホルムアミド基、ジアセトアミド基、ジプロピオアミド基、ジブチロアミド基、ジベンズアミド基、ジトリフルオロアセトアミド基、ジペンタフルオロベンズアミド基が挙げられる。

[0036] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表される酸イミド基とは、酸イミドからその窒素原子に結合した水素原子を１個除いて得られる１価の残

基を意味する。この酸イミド基は、炭素数が、通常２～６０であり、好ましくは２～４８である。酸イミド基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このような酸イミド基の例としては、以下の構造式で示される基が挙げられる。

[化7]



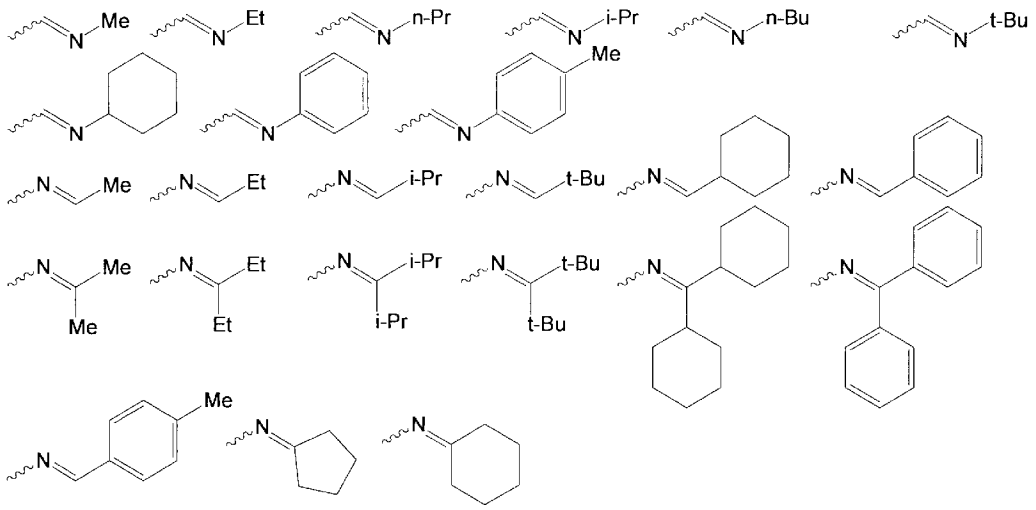
[式中、窒素原子から延びた線は結合手を表し、Ｍｅはメチル基、Ｅｔはエチル基、ｎ－Ｐｒはｎ－プロピル基を表す。以下、同様である。]

[0037] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるイミン残基とは、イミン化合物（即ち、分子内に－Ｎ＝Ｃ－を持つ有機化合物である。その例としては、アルジミン、ケチミン、及び、これらの分子中の窒素原子に結合した水素原子が、アルキル基等で置換された化合物が挙げられる。）から水素原子１個を除いた１価の残基を意味する。このイミン残基は、炭素数が、通常２～２０であり、好ましくは２～１８である。イミン残基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなイミン残基の例としては、以下の構造式で示される基が挙げら

れる。

[化8]



[式中、ｉ－Ｐｒはｉｓｏ－プロピル基、ｎ－ＢｕはＮ－ブチル基、ｔ－Ｂｕはｔｅｒｔ－ブチル基を表す。波線で示した結合は、「楔形で表される結合」及び／又は「破線で表される結合」であることを意味する。ここで、「楔形で表される結合」とは、紙面からこちら側に向かって出ている結合を意味し、「破線で表される結合」とは、紙面の向こう側に出ている結合を意味する。]

[0038] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表される置換アミノ基は、アミノ基における水素原子の１個又は２個が、アルキル基、アリール基、アリールアルキル基及び１価の複素環基からなる群から選ばれる１個又は２個の基で置換されたアミノ基を意味する。アルキル基、アリール基、アリールアルキル基及び１価の複素環基は、置換基を有していてもよいが、該置換基の炭素数は、置換アミノ基の炭素数に含まれない。置換アミノ基の炭素数は、通常１～６０であり、好ましくは２～４８である。

このような置換アミノ基の例としては、メチルアミノ基、ジメチルアミノ基、エチルアミノ基、ジエチルアミノ基、プロピルアミノ基、ジプロピルアミノ基、ｉｓｏ－プロピルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基、ブチルアミノ基、ｉｓｏ－ブチルアミノ基、ｔｅｒｔ－ブチルアミノ基、ペンチルアミ

ノ基、ヘキシルアミノ基、シクロヘキシルアミノ基、ヘプチルアミノ基、オクチルアミノ基、２－エチルヘキシルアミノ基、ノニルアミノ基、デシルアミノ基、３，７－ジメチルオクチルアミノ基、ラウリルアミノ基、シクロペンチルアミノ基、ジシクロペンチルアミノ基、シクロヘキシルアミノ基、ジシクロヘキシルアミノ基、ピロリジル基、ピペリジル基、ジトリフルオロメチルアミノ基フェニルアミノ基、ジフェニルアミノ基、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニルアミノ基、ジ（C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル）アミノ基、ジ（C_1～C_{12}アルキルフェニル）アミノ基、１－ナフチルアミノ基、２－ナフチルアミノ基、ペンタフルオロフェニルアミノ基、ピリジルアミノ基、ピリダジニルアミノ基、ピリミジルアミノ基、ピラジルアミノ基、トリアジルアミノ基フェニル－C_1～C_{12}アルキルアミノ基、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル－C_1～C_{12}アルキルアミノ基、C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_1～C_{12}アルキルアミノ基、ジ（C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル－C_1～C_{12}アルキル）アミノ基、ジ（C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_1～C_{12}アルキル）アミノ基、１－ナフチル－C_1～C_{12}アルキルアミノ基、２－ナフチル－C_1～C_{12}アルキルアミノ基が挙げられる。

[0039] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表される置換シリル基は、シリル基における水素原子の１、２又は３個が、アルキル基、アリール基、アリールアルキル基及び１価の複素環基からなる群から選ばれる１、２又は３個の基で置換されたシリル基を意味する。アルキル基、アリール基、アリールアルキル基及び１価の複素環基は置換基を有していてもよいが、該置換基の炭素数は、置換シリル基の炭素数に含まれない。置換シリル基の炭素数は、通常１～６０であり、好ましくは３～４８である。

このような置換シリル基の例としては、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリプロピルシリル基、トリ－ｉｓｏ－プロピルシリル基、ジメチル－ｉｓｏ－プロピルシリル基、ジエチル－ｉｓｏ－プロピルシリル基、ｔｅｒｔ－ブチルシリルジメチルシリル基、ペンチルジメチルシリル基、ヘキシルジメチルシリル基、ヘプチルジメチルシリル基、オクチルジメチルシ

リル基、２－エチルヘキシルージメチルシリル基、ノニルジメチルシリル基、デシルジメチルシリル基、３，７－ジメチルオクチルージメチルシリル基、ラウリルジメチルシリル基、フェニルーC_1～C_{12}アルキルシリル基、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニルーC_1～C_{12}アルキルシリル基、C_1～C_{12}アルキルフェニルーC_1～C_{12}アルキルシリル基、１－ナフチルーC_1～C_{12}アルキルシリル基、２－ナフチルーC_1～C_{12}アルキルシリル基、フェニルーC_1～C_{12}アルキルジメチルシリル基、トリフェニルシリル基、トリーｐ－キシリルシリル基、トリベンジルシリル基、ジフェニルメチルシリル基、ｔｅｒｔ－ブチルジフェニルシリル基、ジメチルフェニルシリル基が挙げられる。

[0040] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表される置換シリルオキシ基は、シリルオキシ基における水素原子の１、２又は３個が、アルキル基、アリール基、アリールアルキル基及び１価の複素環基からなる群から選ばれる１、２又は３個の基で置換されたシリルオキシ基を意味する。アルキル基、アリール基、アリールアルキル基及び１価の複素環基は置換基を有していてもよいが、該置換基の炭素数は、置換シリルオキシ基の炭素数に含まれない。置換シリルオキシ基の炭素数は、通常１～６０であり、好ましくは３～４８である。

このような置換シリルオキシ基の例としては、トリメチルシリルオキシ基、トリエチルシリルオキシ基、トリプロピルシリルオキシ基、トリーｉｓｏ－プロピルシリルオキシ基、ジメチルーｉｓｏ－プロピルシリルオキシ基、ジエチルーｉｓｏ－プロピルシリルオキシ基、ｔｅｒｔ－ブチルシリルジメチルシリルオキシ基、ペンチルジメチルシリルオキシ基、ヘキシルジメチルシリルオキシ基、ヘプチルジメチルシリルオキシ基、オクチルジメチルシリルオキシ基、２－エチルヘキシルージメチルシリルオキシ基、ノニルジメチルシリルオキシ基、デシルジメチルシリルオキシ基、３，７－ジメチルオクチルージメチルシリルオキシ基、ラウリルジメチルシリルオキシ基、フェニルーC_1～C_{12}アルキルシリルオキシ基、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニルーC_1～C_{12}アルキルシリルオキシ基、C_1～C_{12}アルキルフェニルーC_1～

C_{12}アルキルシリルオキシ基、１－ナフチル－C_1～C_{12}アルキルシリルオキシ基、２－ナフチル－C_1～C_{12}アルキルシリルオキシ基、フェニル－C_1～C_{12}アルキルジメチルシリルオキシ基、トリフェニルシリルオキシ基、トリ－ｐ－キシリルシリルオキシ基、トリベンジルシリルオキシ基、ジフェニルメチルシリルオキシ基、ｔｅｒｔ－ブチルジフェニルシリルオキシ基、ジメチルフェニルシリルオキシ基が挙げられる。

[0041] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表される置換シリルチオ基は、シリルチオ基における水素原子の１、２又は３個が、アルキル基、アリール基、アリールアルキル基及び１価の複素環基からなる群から選ばれる１、２又は３個の基で置換されたシリルチオ基を意味する。アルキル基、アリール基、アリールアルキル基及び１価の複素環基は置換基を有していてもよいが、該置換基の炭素数は、置換シリルチオ基の炭素数に含まれない。置換シリルチオ基の炭素数は、通常１～６０であり、好ましくは３～４８である。

このような置換シリルチオ基の例としては、トリメチルシリルチオ基、トリエチルシリルチオ基、トリプロピルシリルチオ基、トリ－ｉｓｏ－プロピルシリルチオ基、ジメチル－ｉｓｏ－プロピルシリルチオ基、ジエチル－ｉｓｏ－プロピルシリルチオ基、ｔｅｒｔ－ブチルシリルジメチルシリルチオ基、ペンチルジメチルシリルチオ基、ヘキシルジメチルシリルチオ基、ヘプチルジメチルシリルチオ基、オクチルジメチルシリルチオ基、２－エチルヘキシル－ジメチルシリルチオ基、ノニルジメチルシリルチオ基、デシルジメチルシリルチオ基、３，７－ジメチルオクチル－ジメチルシリルチオ基、ラウリルジメチルシリルチオ基、フェニル－C_1～C_{12}アルキルシリルチオ基、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル－C_1～C_{12}アルキルシリルチオ基、C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_1～C_{12}アルキルシリルチオ基、１－ナフチル－C_1～C_{12}アルキルシリルチオ基、２－ナフチル－C_1～C_{12}アルキルシリルチオ基、フェニル－C_1～C_{12}アルキルジメチルシリルチオ基、トリフェニルシリルチオ基、トリ－ｐ－キシリルシリルチオ基、トリベンジルシリルチオ基、ジフェニルメチルシリルチオ基、ｔｅｒｔ－ブチルジフェニルシリルチ

オ基、ジメチルフェニルシリルチオ基が挙げられる。

[0042] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表される置換シリルアミノ基は、シリルアミノ基における水素原子の１、２又は３個が、アルキル基、アリール基、アリールアルキル基及び１価の複素環基からなる群から選ばれる１、２又は３個の基で置換されたシリルアミノ基を意味する。アルキル基、アリール基、アリールアルキル基及び１価の複素環基は置換基を有していてもよいが、該置換基の炭素数は、置換シリルアミノ基の炭素数に含まれない。置換シリルアミノ基の炭素数は、通常、１～６０であり、好ましくは３～４８である。

このような置換シリルアミノ基の例としては、トリメチルシリルアミノ基、トリエチルシリルアミノ基、トリプロピルシリルアミノ基、トリーｉｓｏープロピルシリルアミノ基、ジメチルーｉｓｏープロピルシリルアミノ基、ジエチルーｉｓｏープロピルシリルアミノ基、ｔｅｒｔーブチルシリルジメチルシリルアミノ基、ペンチルジメチルシリルアミノ基、ヘキシルジメチルシリルアミノ基、ヘプチルジメチルシリルアミノ基、オクチルジメチルシリルアミノ基、２ーエチルヘキシルージメチルシリルアミノ基、ノニルジメチルシリルアミノ基、デシルジメチルシリルアミノ基、３，７ージメチルオクチルージメチルシリルアミノ基、ラウリルジメチルシリルアミノ基、フェニルーC_1～C_{12}アルキルシリルアミノ基、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニルーC_1～C_{12}アルキルシリルアミノ基、C_1～C_{12}アルキルフェニルーC_1～C_{12}アルキルシリルアミノ基、１ーナフチルーC_1～C_{12}アルキルシリルアミノ基、２ーナフチルーC_1～C_{12}アルキルシリルアミノ基、フェニルーC_1～C_{12}アルキルジメチルシリルアミノ基、トリフェニルシリルアミノ基、トリーｐーキシリルシリルアミノ基、トリベンジルシリルアミノ基、ジフェニルメチルシリルアミノ基、ｔｅｒｔーブチルジフェニルシリルオアミノ基、ジメチルフェニルシリルアミノ基が挙げられる。

[0043] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表される１価の複素環基とは、複素環式化合物から水素原子１個を除いた残りの原子団を意味する。１価

の複素環基の炭素数は、通常４～６０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いが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。ここで、複素環式化合物とは、環式構造を持つ有機化合物のうち、環を構成する元素が炭素原子だけでなく、酸素原子、硫黄原子、窒素原子、燐原子、硼素原子等のヘテロ原子を含む化合物をいう。

このような１価の複素環基の例としては、チエニル基、C_1～C_{12}アルキルチエニル基、ピロリル基、フリル基、ピリジル基、C_1～C_{12}アルキルピリジル基、ピペリジル基、キノリル基、イソキノリル基が挙げられ、チエニル基、C_1～C_{12}アルキルチエニル基、ピリジル基、C_1～C_{12}アルキルピリジル基が好ましい。

[0044] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるヘテロアリールオキシ基は、炭素数が、通常６～６０であり、好ましくは７～４８である。ヘテロアリールオキシ基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなヘテロアリールオキシ基の例としては、チエニルオキシ基、C_1～C_{12}アルキルオキシチエニルオキシ基、C_1～C_{12}アルキルチエニルオキシ基、ピリジルオキシ基、C_1～C_{12}アルキルオキシピリジルオキシ基、C_1～C_{12}アルキルピリジルオキシ基、イソキノリルオキシ基が挙げられ、C_1～C_{12}アルキルオキシピリジルオキシ基、C_1～C_{12}アルキルピリジルオキシ基が好ましい。

[0045] 上述のC_1～C_{12}アルキルピリジルオキシ基の例としては、メチルピリジルオキシ基、エチルピリジルオキシ基、ジメチルピリジルオキシ基、プロピルピリジルオキシ基、１，３，５－トリメチルピリジルオキシ基、メチルエチルピリジルオキシ基、ｉｓｏ－プロピルピリジルオキシ基、ブチルピリジルオキシ基、ｉｓｏ－ブチルピリジルオキシ基、ｔｅｒｔ－ブチルピリジルオキシ基、ペンチルピリジルオキシ基、イソアミルピリジルオキシ基、ヘキシルピリジルオキシ基、ヘプチルピリジルオキシ基、オクチルピリジルオキシ基、ノニルピリジルオキシ基、デシルピリジルオキシ基、ドデシルピリジル

オキシ基が挙げられる。

[0046] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるヘテロアリールチオ基は、炭素数が、通常６～６０であり、好ましくは７～４８である。ヘテロアリールチオ基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなヘテロアリールチオ基の例としては、ピリジルチオ基、C_1～C_{12}アルキルオキシピリジルチオ基、C_1～C_{12}アルキルピリジルチオ基、イソキノリルチオ基が挙げられ、C_1～C_{12}アルキルオキシピリジルチオ基、C_1～C_{12}アルキルピリジルチオ基が好ましい。

[0047] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアリールアルケニル基は、炭素数が、通常７～６０であり、好ましくは７～４８である。アリールアルケニル基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなアリールアルケニル基の例としては、フェニル－C_2～C_{12}アルケニル基（「C_2～C_{12}アルケニル」は、アルケニル部分の炭素数が２～１２であることを意味する。以下、同様である。）、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル－C_2～C_{12}アルケニル基、C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_2～C_{12}アルケニル基、１－ナフチル－C_2～C_{12}アルケニル基、２－ナフチル－C_2～C_{12}アルケニル基が挙げられ、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル－C_2～C_{12}アルケニル基、C_2～C_{12}アルキルフェニル－C_1～C_{12}アルケニル基が好ましい。

[0048] 上述のC_2～C_{12}アルケニルの例としては、エテニル、１－プロペニル、２－プロペニル、２－メチル－１－プロペニル、１－ブテニル、２－ブテニル、３－ブテニル、３－メチル－２－ブテニル、１－ペンテニル、２－ペンテニル、３－ペンテニル、４－ペンテニル、４－メチル－３－ペンテニル、１－ヘキセニル、３－ヘキセニル、５－ヘキセニルが挙げられる。

[0049] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表されるアリールアルキニル基は、炭素数が、通常７～６０であり、好ましくは７～４８である。アリー

ルアルキニル基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記の炭素数には含まれない。

このようなアリールアルキニル基の例としては、フェニル－C_2～C_{12}アルキニル基（「C_2～C_{12}アルキニル」は、アルキニル部分の炭素数が２～１２であることを意味する。以下、同様である。）、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル－C_2～C_{12}アルキニル基、C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_2～C_{12}アルキニル基、１－ナフチル－C_2～C_{12}アルキニル基、２－ナフチル－C_2～C_{12}アルキニル基が挙げられ、C_1～C_{12}アルキルオキシフェニル－C_2～C_{12}アルキニル基、C_1～C_{12}アルキルフェニル－C_2～C_{12}アルキニル基が好ましい。

[0050] 上述のC_2～C_{12}アルキニルの例としては、エチニル、１－プロピニル、２－プロピニル、１－ブチニル、２－ブチニル、３－ブチニル、１－ペンチニル、２－ペンチニル、３－ペンチニル、４－ペンチニル、１－ヘキシニル、２－ヘキシニル、３－ヘキシニル、４－ヘキシニル、５－ヘキシニル、１－ヘプチニル、１－オクチニルが挙げられる。

[0051] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}で表される置換カルボキシル基（一般式：R^e－Ｏ－ＣＯ－で表され、R^eはアルキル基、アリール基、アリールアルキル基又は１価の複素環基を表す。）は、炭素数が、通常１～６０であり、好ましくは２～４８であり、カルボキシル基における水素原子が、アルキル基、アリール基、アリールアルキル基又は１価の複素環基で置換されたカルボキシル基を意味する。該アルキル基、アリール基、アリールアルキル基又は１価の複素環基は、置換基を有していてもよいが、置換基の炭素数は上記炭素数には含まれない。

このような置換カルボキシル基の例としては、メチルオキシカルボニル基、エチルオキシカルボニル基、プロピルオキシカルボニル基、ｉｓｏ－プロピルオキシカルボニル基、ブチルオキシカルボニル基、ｉｓｏ－ブチルオキシカルボニル基、ｔｅｒｔ－ブチルオキシカルボニル基、ペンチルオキシカルボニル基、ヘキシルオキシカルボニル基、シクロヘキシルオキシカルボニ

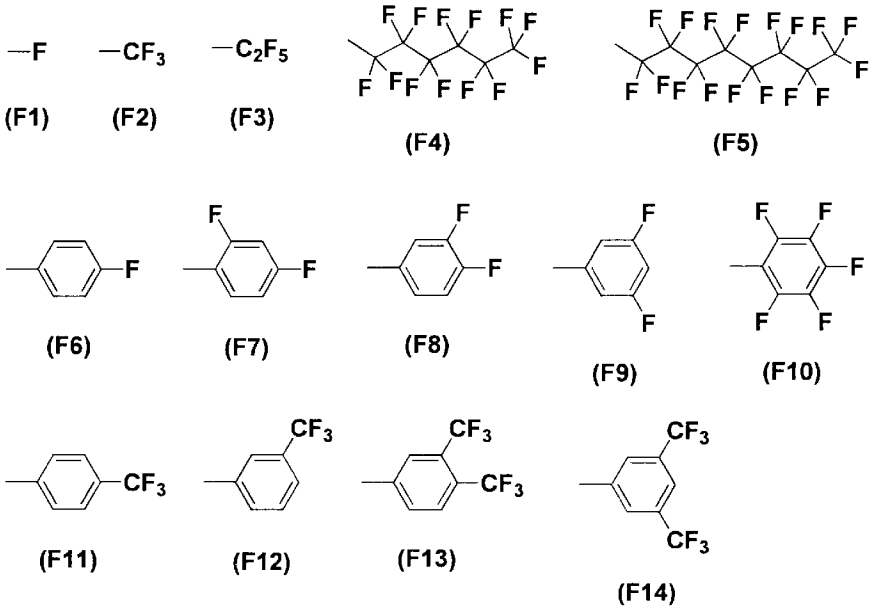
ル基、ヘプチルオキシカルボニル基、オクチルオキシカルボニル基、２－エチルヘキシルオキシカルボニル基、ノニルオキシカルボニル基、デシルオキシカルボニル基、３，７－ジメチルオクチルオキシカルボニル基、ドデシルオキシカルボニル基、トリフルオロメチルオキシカルボニル基、ペンタフルオロエチルオキシカルボニル基、パーフルオロブチルオキシカルボニル基、パーフルオロヘキシルオキシカルボニル基、パーフルオロオクチルオキシカルボニル基、ピリジルオキシカルボニル基、ナフチルオキシカルボニル基、ピリジルオキシカルボニル基が挙げられる。

[0052] 上述した基が置換基を有する場合、置換基の例としては、ハロゲン原子、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アシル基、アシルオキシ基、カルバモイル基、アミド基、酸イミド基、イミン残基、置換アミノ基、置換シリル基、置換シリルオキシ基、置換シリルチオ基、置換シリルアミノ基、１価の複素環基、ヘテロアリールオキシ基、ヘテロアリールチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、置換カルボキシル基又はシアノ基が挙げられる。これらの基の詳細は、前記で説明し、例示したものと同様である。置換基として好ましくは、ハロゲン原子、アルキル基、アルキルオキシ基、アリール基又は１価の複素環基であり、より好ましくはアルキル基、アリール基又は１価の複素環基である。上述した基が置換基を有する場合、置換基の個数は、通常、１～３個であり、好ましくは１～２個であり、より好ましくは１個である。

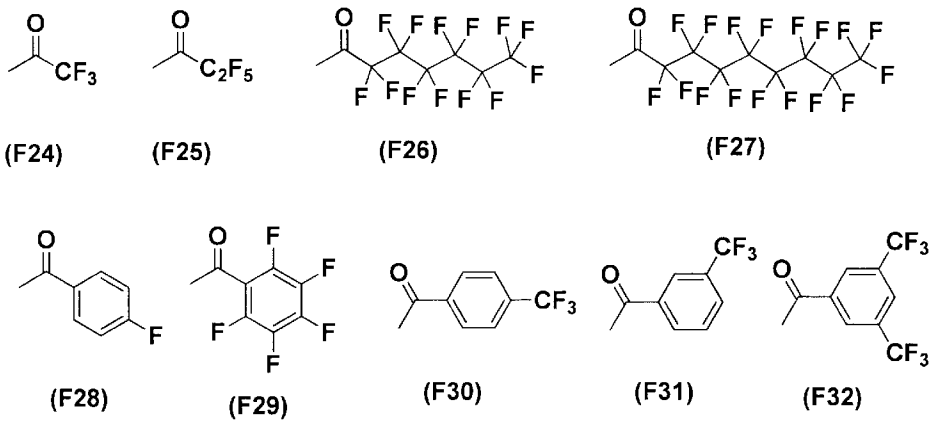
[0053] 本発明の金属錯体は、前記R^{P1}～R^{P4}の少なくとも一つが、電子吸引性の性質を有する置換基であることが好ましく、フッ素原子又はフッ素原子を含有する置換基であることがさらに好ましい。本発明におけるフッ素原子又はフッ素原子を含有する置換基は、$C_pF_qH_rO_s$で示される１価の基を表す。ここで、ｐは１～１０から選ばれる整数を表し、ｑは１～（２ｐ＋１）から選ばれる整数を表し、ｒは０～（２ｐ＋１）から選ばれる整数を表し、ｓは

０又は１であり、下記式（Ｆ１）～（Ｆ１４）及び下記式（Ｆ２４）～（Ｆ３２）で示される基を例示することができる。

[化9]



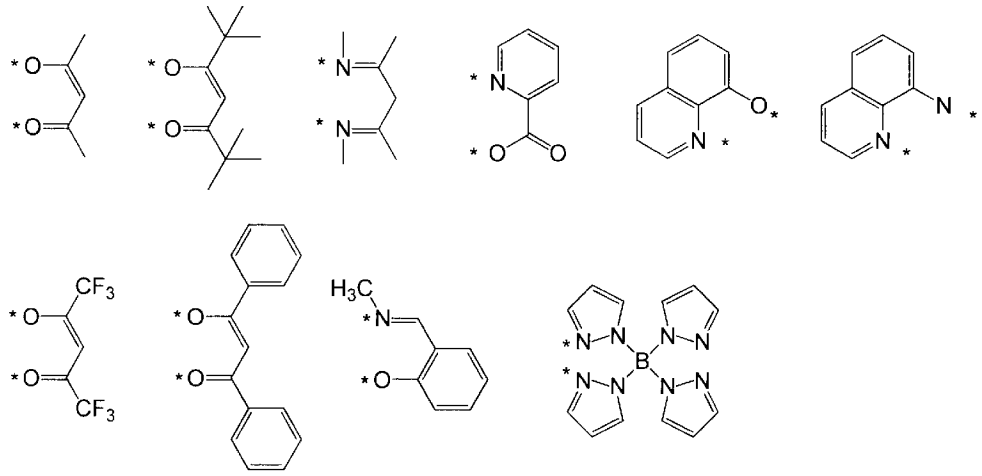
[化10]



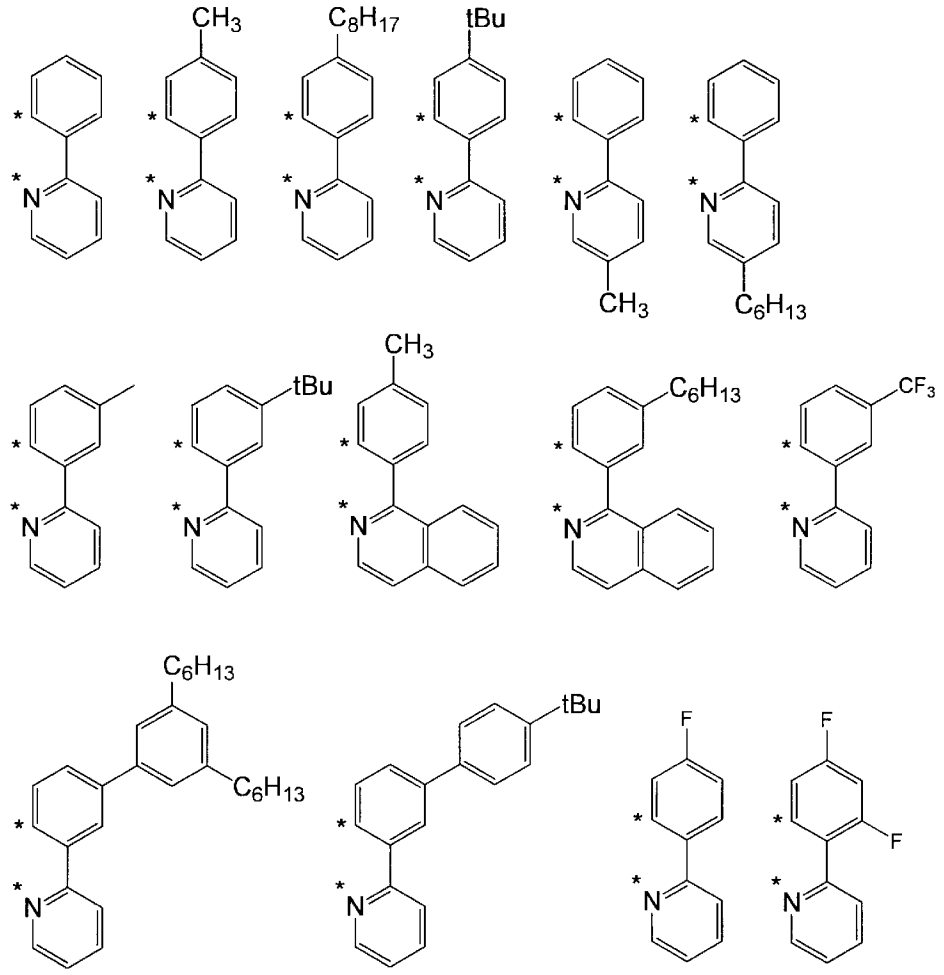
[0054] 本発明の金属錯体の化学的安定性の観点から、上記の$C_pF_qH_rO_s$で示される１価の基において、ｓは０であることが好ましく、上記式（Ｆ１）～（Ｆ１４）で示される基であることが好ましい。

[0055] 前記式（２）で表される部分である２座配位子としては、限定されないが、本発明の金属錯体が中性であるようにモノアニオン性であることが好ましい。例えば、以下の構造が挙げられる。

[化11]



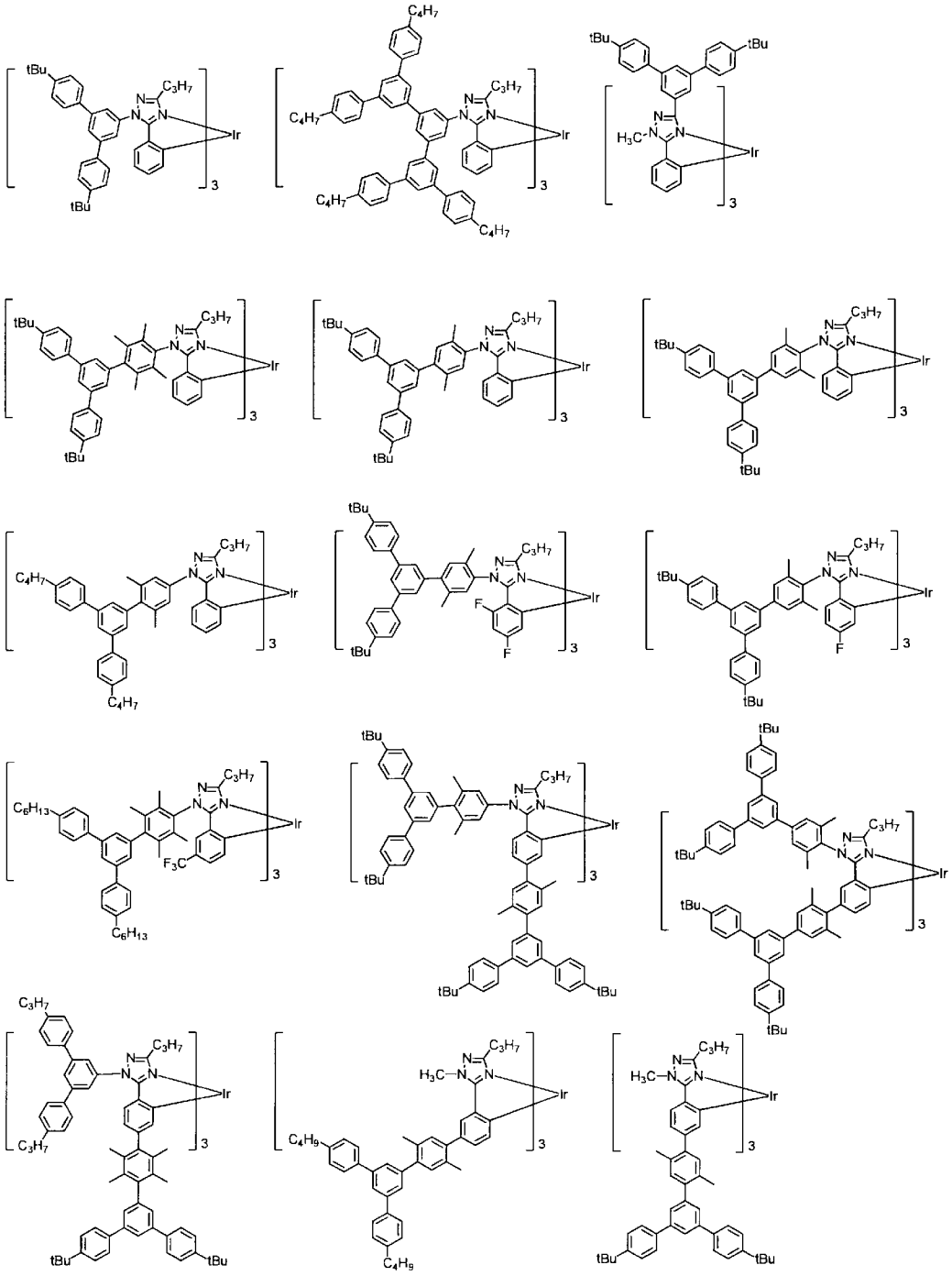
[化12]



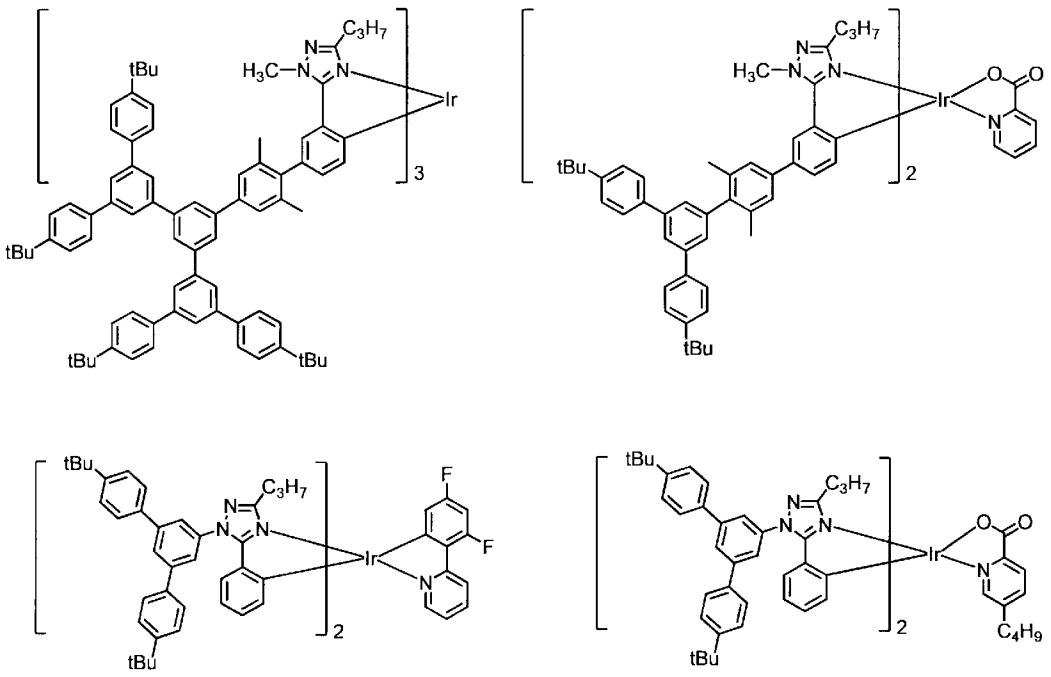
（式中、＊は金属原子Ｍと結合する部位を示す。）

[0056] 本発明の金属錯体の例としては、下記式で表される構造が挙げられる。

[化13]



[化14]



[0057] －金属錯体の製造方法－

次に、本発明の金属錯体の合成方法を説明する。

本発明の金属錯体は、例えば、配位子となる化合物と金属化合物とを溶媒中で反応させることにより合成することができる。必要に応じて、反応系中に塩基、塩化銀化合物等が存在していてもよい。また、５－フェニル－１，２，４－トリアゾール誘導体を配位子に有する金属錯体と芳香族複素環式化合物とのカップリング反応により、本発明の金属錯体を合成することができる。

[0058] 錯体化の方法（即ち、配位子となる化合物と金属化合物とを溶液中で反応させる方法）としては、イリジウム原子を有する錯体の場合、Ｊ．Ａｍ．Ｃｈｅｍ．Ｓｏｃ．１９８４，１０６，６６４７；Ｉｎｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．１９９１，３０，１６８５；Ｉｎｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．１９９４，３３，５４５；Ｉｎｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．２００１，４０，１７０４；Ｃｈｅｍ．Ｌｅｔｔ．，２００３，３２，２５２等に記載の方法が挙げられ、白金原子を有する錯体の場合、Ｉｎｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．，１９８４，２３，４２４９；Ｃｈｅｍ．Ｍａｔｅｒ．１９９９，１１，３７０９；Ｏｒｇａｎｏｍｅｔａｌｌｉ

ｃｓ，１９９９，１８，１８０１等に記載の方法が挙げられ、パラジウム原子を有する錯体の場合、Ｊ．Ｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．，１９８７，５２，７３等に記載の方法が挙げられる。

[0059] 錯体化の反応温度は、限定されないが、通常、溶媒の融点から沸点の間であり、－７８℃～溶媒の沸点が好ましい。反応時間は、限定されないが、通常、３０分間から３０時間である。ただし、錯体化反応においてマイクロウェーブ反応装置を使用する場合、溶媒の沸点以上で反応させることもでき、反応時間は、限定されないが、数分から数時間である。

[0060] 前記配位子となる化合物は、例えば、５－フェニル－１，２，４－トリアゾールと芳香族複素環式化合物とのＳｕｚｕｋｉカップリング、Ｇｒｉｇｎａｒｄカップリング、Ｓｔｉｌｌｅカップリング等により合成することができる。必要に応じて有機溶媒に溶解し、例えば、塩基、適切な触媒等を用い、有機溶媒の融点以上沸点以下の温度で反応させることにより合成することができる。この合成には、例えば、“オルガニック シンセシス（Ｏｒｇａｎｉｃ Ｓｙｎｔｈｅｓｅｓ）”、コレクティブ第６巻（Ｃｏｌｌｅｃｔｉｖｅ Ｖｏｌｕｍｅ ＶＩ）、４０７－４１１頁、ジョンワイリー アンドサンズ（Ｊｏｈｎ Ｗｉｌｅｙ＆Ｓｏｎｓ，Ｉｎｃ．）、１９８８年；ケミカル レビュー（Ｃｈｅｍ．Ｒｅｖ．）、第１０６巻、２６５１頁（２００６年）；ケミカル レビュー（Ｃｈｅｍ．Ｒｅｖ．）、第１０２巻、１３５９頁（２００２年）；ケミカル レビュー（Ｃｈｅｍ．Ｒｅｖ．）、第９５巻、２４５７頁（１９９５年）；ジャーナル オブ オルガノメタリックケミストリー（Ｊ．Ｏｒｇａｎｏｍｅｔ．Ｃｈｅｍ．）、第５７６巻、１４７頁（１９９９年）等に記載の方法を用いることができる。

[0061] 前記芳香族複素環式化合物は、“ＨＯＵＢＥＮ－ＷＥＹＬ ＭＥＴＨＯＤＳ ＯＦ ＯＲＧＡＮＩＣ ＣＨＥＭＩＳＴＲＹ ４ＴＨ ＥＤＩＴＩＯＮ”，第Ｅ９ｂ巻、１頁、ＧＥＯＲＧ ＴＨＩＥＭＥ ＶＥＲＬＡＧ ＳＴＵＴＧＡＲＴ；ＨＯＵＢＥＮ－ＷＥＹＬ ＭＥＴＨＯＤＳ ＯＦ ＯＲＧＡＮＩＣ ＣＨＥＭＩＳＴＲＹ ４ＴＨ ＥＤＩＴＩＯＮ，第Ｅ９ｃ巻、６６７頁

、ＧＥＯＲＧ　ＴＨＩＥＭＥ　ＶＥＲＬＡＧ　ＳＴＵＴＴＧＡＲＴ等に記載の方法で合成することができる。

[0062] 得られた化合物の同定・分析は、ＣＨＮ元素分析、ＮＭＲ分析、ＭＳ分析及びＸ線結晶構造解析により行うことができる。

[0063] ＜組成物＞

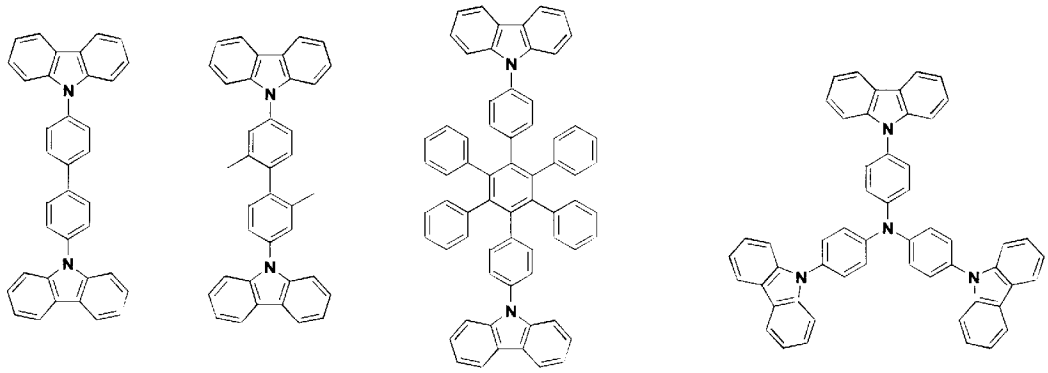
本発明の組成物は、本発明の金属錯体と電荷輸送性化合物（即ち、電荷輸送材料）を含むものであり、発光材料を更に含んでいてもよい。

[0064] 前記電荷輸送材料は、正孔輸送材料と電子輸送材料に分類され、具体的には有機化合物（低分子化合物及び／又は高分子化合物）を用いることができる。前記電荷輸送材料は、高分子化合物であることが好ましい。

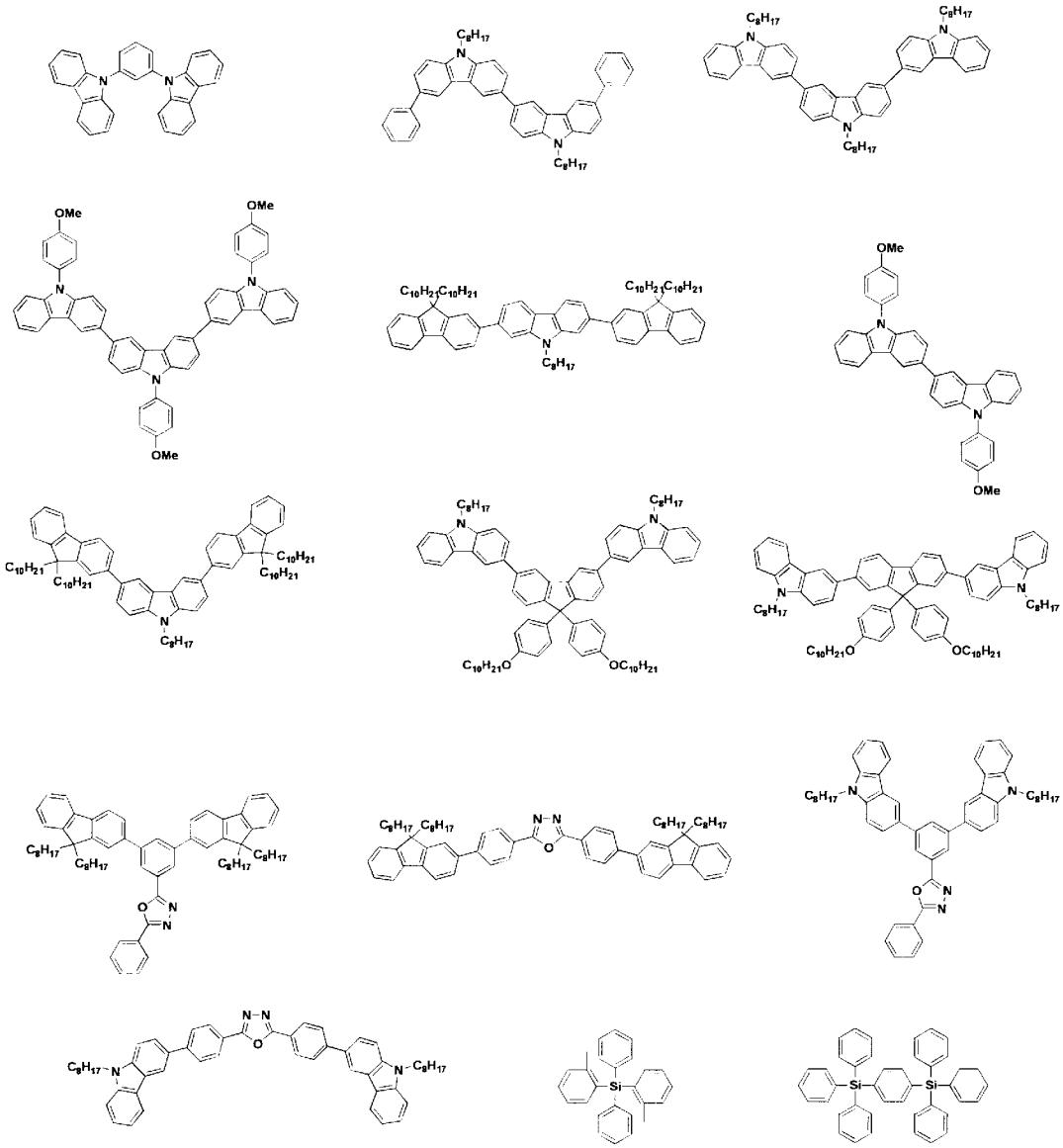
[0065] 前記正孔輸送材料としては、芳香族アミン、カルバゾール誘導体、ポリパラフェニレン誘導体等、有機エレクトロルミネッセンス素子の正孔輸送材料として公知の化合物が挙げられる。前記電子輸送材料としては、有機エレクトロルミネッセンス素子に電子輸送材料として公知の化合物、例えば、オキサジアゾール誘導体アントラキノジメタン及びその誘導体、ベンゾキノン及びその誘導体、ナフトキノン及びその誘導体、アントラキノン及びその誘導体、テトラシアノアントラキノジメタン及びその誘導体、フルオレノン誘導体、ジフェニルジシアノエチレン及びその誘導体、ジフェノキノン誘導体、８－ヒドロキシキノリン及びその誘導体の金属錯体が挙げられる。前記電荷輸送材料の低分子化合物とは、低分子有機エレクトロルミネッセンス素子に用いられるホスト化合物、電荷輸送化合物を意味し、具体的には、例えば、「有機ＥＬディスプレイ」（時任静士、安達千波矢、村田英幸共著、オーム社）１０７頁、月刊ディスプレイ（ｖｏｌ９、Ｎｏ９、２００３年２６－３０頁）、特開２００４－２４４４００号公報、特開２００４－２７７３７７号公報等に記載の化合物が挙げられる。これら電荷輸送材料の種類にもよるが、一般的には、金属錯体からの良好な発光を得るためには、これら電荷輸送材料の最低三重項励起エネルギーが、金属錯体の最低三重項励起エネルギーよりも大きいことが好ましい。

[0066] 前記電荷輸送材料の低分子化合物としては、具体的には、下記化合物を挙げることができる。

[化15]



[化16]



[0067] 前記電荷輸送材料の高分子化合物としては、例えば、非共役系高分子化合物、共役系高分子化合物が挙げられる。非共役系高分子化合物としては、例えば、ポリビニルカルバゾールが挙げられる。共役系高分子化合物としては、主鎖に芳香環を含む高分子化合物が例示でき、置換基を有していてもよいフェニレン基、置換基を有していてもよいフルオレンジイル基、置換基を有していてもよいジベンゾチオフェンジイル基、置換基を有していてもよいジベンゾフランジイル基、置換基を有していてもよいジベンゾシロールジイル基等を繰り返し単位として主鎖に含むものや、これらの基同士の共重合体が

挙げられる。具体的には、置換基を有していてもよいベンゼン環を繰り返し単位の部分構造として有する高分子化合物が挙げられる。その他にも、例えば、特開２００３－２３１７４１号公報、特開２００４－０５９８９９号公報、特開２００４－００２６５４号公報、特開２００４－２９２５４６号公報、ＵＳ５７０８１３０、ＷＯ９９／５４３８５、ＷＯ００／４６３２１、ＷＯ０２／０７７０６０、「有機ＥＬディスプレイ」（時任静士、安達千波矢、村田英幸　共著、オーム社）１１１頁、月刊ディスプレイ（ｖｏｌ．９、Ｎｏ．９、２００２年）４７－５１頁等に記載の高分子化合物が挙げられる。

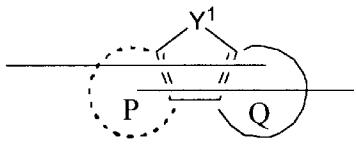
[0068] 前記電荷輸送材料の高分子化合物としては、下記式（Ｉ）で表される基を含む高分子化合物が好ましい。

－Ａｒ－　　（Ｉ）

（式中、Ａｒは、アリーレン基、２価の複素環基又は２価の芳香族アミン残基を表す。これらの基は、置換基を有していてもよい。）

[0069] 前記式（Ｉ）中、Ａｒで表されるアリーレン基としては、例えば、置換基を有していてもよいフェニレン基、置換基を有していてもよいナフチレン基又は下記式（４ａ）で表される２価の基が挙げられる。

[化17]



(4a)

（式中、

Ｐ環及びＱ環は、それぞれ独立に、芳香環を示すが、Ｐ環は存在してもしなくてもよい。２本の結合手は、Ｐ環が存在する場合には、Ｐ環上若しくはＱ環上に２本存在するか、又は、Ｐ環上及びＱ環上に１本ずつ存在し、Ｐ環が存在しない場合には、Y^1を含む５員環上（６員環の場合もある。）若しくはＱ環上に２本存在するか、又は、Y^1を含む５員環上（６員環の場合もある。）及びＱ環上に１本ずつ存在する。Ｐ環、Ｑ環及びY^1を含む５員環（６員

環の場合もある。）は、それぞれ独立に、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、アミノ基、置換アミノ基、シリル基、置換シリル基、ハロゲン原子、アシル基、アシルオキシ基、イミン残基、カルバモイル基、アミド基、酸イミド基、１価の複素環基、カルボキシル基、置換カルボキシル基及びシアノ基からなる群から選ばれる少なくとも一種の置換基を有していてもよい。

Y^1は、－C（R^{11}）（R^{12}）－、－C（R^{14}）（R^{15}）－C（R^{16}）（R^{17}）－、－C（R^{32}）＝C（R^{33}）－を表す。R^{11}、R^{12}、R^{14}～R^{17}、R^{32}及びR^{33}は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、アミノ基、置換アミノ基、シリル基、置換シリル基、シリルオキシ基、置換シリルオキシ基、１価の複素環基又はハロゲン原子を表す。）

[0070] 前記式（Ｉ）中、Ｐ環、Ｑ環、及びY^1を含む５員環（６員環の場合もある。）が有していてもよい置換基であるアルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、アミノ基、置換アミノ基、シリル基、置換シリル基、ハロゲン原子、アシル基、アシルオキシ基、イミン残基、カルバモイル基、アミド基、酸イミド基、１価の複素環基、カルボキシル基、置換カルボキシル基及びシアノ基は、前記Ｒで表される基及び原子として説明し例示した基及び原子と同じである。

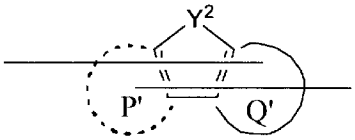
[0071] 前記式（Ｉ）中、R^{11}、R^{12}、R^{14}～R^{17}、R^{32}及びR^{33}で表されるアルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、

アリールアルキルチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、アミノ基、置換アミノ基、シリル基、置換シリル基、シリルオキシ基、置換シリルオキシ基、１価の複素環基及びハロゲン原子は、前記Ｒで表される基及び原子として説明し例示した基及び原子と同じである。

[0072] 前記式（Ｉ）中、Ａｒで表される２価の複素環基とは、複素環式化合物から水素原子２個を除いた残りの原子団をいい、該基は置換基を有していてもよい。複素環式化合物とは、環式構造を持つ有機化合物のうち、環を構成する元素が炭素原子だけでなく、酸素原子、窒素原子、ケイ素原子、ゲルマニウム原子、スズ原子、リン原子、ホウ素原子、硫黄原子、セレン原子及びテルル原子からなる群から選ばれる原子を一種以上有する化合物をいう。２価の複素環基の中では、２価の芳香族複素環基が好ましい。２価の複素環基の置換基を除いた部分の炭素数は、通常、３～６０である。２価の複素環基の置換基を含めた全炭素数は、通常、３～１００である。

[0073] 前記式（Ｉ）中、Ａｒで表される２価の複素環基としては、例えば、下記式（４ｂ）で表される２価の基が挙げられる。

[化18]



(4b)

（式中、

Ｐ’環及びＱ’環は、それぞれ独立に、芳香環を示すが、Ｐ’環は存在してもしなくてもよい。２本の結合手は、Ｐ’環が存在する場合には、Ｐ’環上若しくはＱ’環上に２本存在するか、又は、Ｐ’環上及びＱ環上に１本ずつ存在し、Ｐ’環が存在しない場合には、Y^2を含む５員環上（６員環の場合もある。）若しくはＱ’環上に２本存在するか、又は、Y^2を含む５員環上（６員環の場合もある。）及びＱ’環上に１本ずつ存在する。Ｐ’環、Ｑ’環及びY^2を含む５員環（６員環の場合もある。）は、それぞれ独立に、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基

、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、アミノ基、置換アミノ基、シリル基、置換シリル基、ハロゲン原子、アシル基、アシルオキシ基、イミン残基、カルバモイル基、アミド基、酸イミド基、１価の複素環基、カルボキシル基、置換カルボキシル基及びシアノ基からなる群から選ばれる少なくとも一種の置換基を有していてもよい。

Y^2は、－Ｏ－、－Ｓ－、－Ｓｅ－、－Ｂ（R^6）－、－Ｓｉ（R^7）（R^8）－、－Ｐ（R^9）－、－ＰＲ^{10}（＝Ｏ）－、－Ｎ（R^{13}）－、－Ｏ－Ｃ（R^{18}）（R^{19}）－、－Ｓ－Ｃ（R^{20}）（R^{21}）－、－Ｎ－Ｃ（R^{22}）（R^{23}）－、－Ｓｉ（R^{24}）（R^{25}）－Ｃ（R^{26}）（R^{27}）－、－Ｓｉ（R^{28}）（R^{29}）－Ｓｉ（R^{30}）（R^{31}）－、－Ｎ＝Ｃ（R^{34}）－又は－Ｓｉ（R^{35}）＝Ｃ（R^{36}）－を表す。R^6～R^{10}、R^{13}、R^{18}～R^{31}及びR^{34}～R^{36}は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、アミノ基、置換アミノ基、シリル基、置換シリル基、シリルオキシ基、置換シリルオキシ基、１価の複素環基又はハロゲン原子を表す。）

[0074] 前記式中、Ｐ’環、Ｑ’環及びY^2を含む５員環（６員環の場合もある。）が有してもよい置換基であるアルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、アミノ基、置換アミノ基、シリル基、置換シリル基、ハロゲン原子、アシル基、アシルオキシ基、イミン残基、カルバモイル基、アミド基、酸イミド基、１価の複素環基、カルボキシル基、置換カルボキシル基及びシアノ基は、前記Ｒで表される基及び原子として説明し例示した基及び原子と同じである。

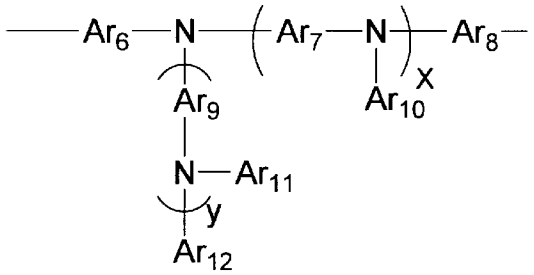
[0075] 前記式中、R^6～R^{10}、R^{13}、R^{18}～R^{31}及びR^{34}～R^{36}で表されるアル

キル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、アミノ基、置換アミノ基、シリル基、置換シリル基、シリルオキシ基、置換シリルオキシ基、１価の複素環基及びハロゲン原子は、前記Ｒで表される基及び原子として説明し例示した基及び原子と同じである。

[0076] 前記式（Ｉ）中、Ａｒで表される２価の芳香族アミン残基とは、芳香族アミンから水素原子２個を除いた残りの原子団を意味する。２価の芳香族アミン残基の炭素数は、通常、５～１００であり、好ましくは１５～６０である。なお、２価の芳香族アミン残基の炭素数には、置換基の炭素数は含まれない。

[0077] 前記式（Ｉ）中、Ａｒで表される２価の芳香族アミン残基としては、例えば、下記式（６）で表される２価の基が挙げられる。

[化19]



(6)

（式中、

Ar_6、Ar_7、Ar_8及びAr_9は、それぞれ独立に、アリーレン基又は２価の複素環基を表す。Ar_{10}、Ar_{11}及びAr_{12}は、それぞれ独立に、アリール基又は１価の複素環基を表す。Ar_6～Ar_{12}は置換基を有していてもよい。

ｘ及びｙは、それぞれ独立に、０又は１である。）

[0078] 前記式（６）中、Ar_6～Ar_9で表されるアリーレン基は、芳香族炭化水素から水素原子２個を除いた原子団であり、縮合環を持つ基、独立したベンゼン環及び縮合環から選ばれる２個以上が直接又はビニレン基等を介して結

合した基も含まれる。該アリーレン基は置換基を有していてもよい。アリーレン基における置換基を除いた部分の炭素数は、通常６～６０であり、好ましくは６～２０である。アリーレン基の置換基を含めた全炭素数は、通常６～１００である。

[0079] 前記式（６）中、Ar_6～Ar_9で表される２価の複素環基は、前記Ａｒで表される２価の複素環基として説明し例示した基と同じである。

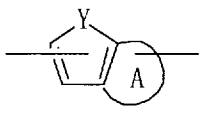
[0080] 前記式（６）中、Ar_{10}～Ar_{12}で表されるアリール基及び１価の複素環基は、前記Ｒで表されるアリール基及び１価の複素環基として説明し例示した基と同じである。

[0081] 前記式（６）中、アリーレン基、２価の複素環基、アリール基及び１価の複素環基が有してもよい置換基としては、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、アミノ基、置換アミノ基、シリル基、置換シリル基、ハロゲン原子、アシル基、アシルオキシ基、イミン残基、カルバモイル基、アミド基、酸イミド基、１価の複素環基、カルボキシル基、置換カルボキシル基、シアノ基及びニトロ基が挙げられる。これらの置換基は、前記Ｒで表される基及び原子として説明し例示した基及び原子と同じである。

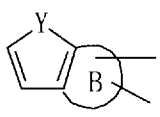
[0082] 前記式（４ａ）及び前記式（４ｂ）で表される基としては、例えば、

下記式（４－１）、下記式（４－２）又は下記式（４－３）で表される基、及び、

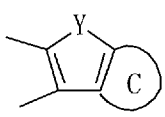
[化20]



式（4-1）



式（4-2）



式（4-3）

〔式中、

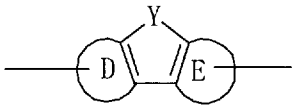
Ａ環、Ｂ環及びＣ環は、それぞれ独立に、芳香環を表す。

Ｙは、前記Ｙ[1]と同じ意味を表すか、又は、前記Ｙ[2]と同じ意味を表す。

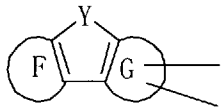
Ａ環、Ｂ環、Ｃ環及びＹを含む５員環（６員環の場合もある。）は、それぞれ独立に、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、アミノ基、置換アミノ基、シリル基、置換シリル基、ハロゲン原子、アシル基、アシルオキシ基、イミン残基、カルバモイル基、アミド基、酸イミド基、１価の複素環基、カルボキシル基、置換カルボキシル基及びシアノ基からなる群から選ばれる１個以上の置換基を有していてもよい。〕

下記式（４－４）又は下記式（４－５）で表される基、

[化21]



式（4-4）



式（4-5）

〔式中、

Ｄ環、Ｅ環、Ｆ環及びＧ環は、それぞれ独立に、芳香環を表す。

Ｙは、前記Ｙ[1]と同じ意味を表すか、又は、前記Ｙ[2]と同じ意味を表す。

Ｄ環、Ｅ環、Ｆ環、Ｇ環及びＹを含む５員環（６員環の場合もある。）は、それぞれ独立に、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、アミノ基、置換アミノ基、シリル基、置換シリル基、ハロゲン原子、アシル基、アシルオキシ基、イミン残基、カルバモイル基、アミド基、酸イミド基、１価の複素環基、カルボキシル基、置換カルボキシル基及びシアノ基からなる群から選ばれる１個以上の置換基を有していてもよい。〕

が挙げられ、これらの中でも、式（４－４）又は式（４－５）で表される基

が好ましい。

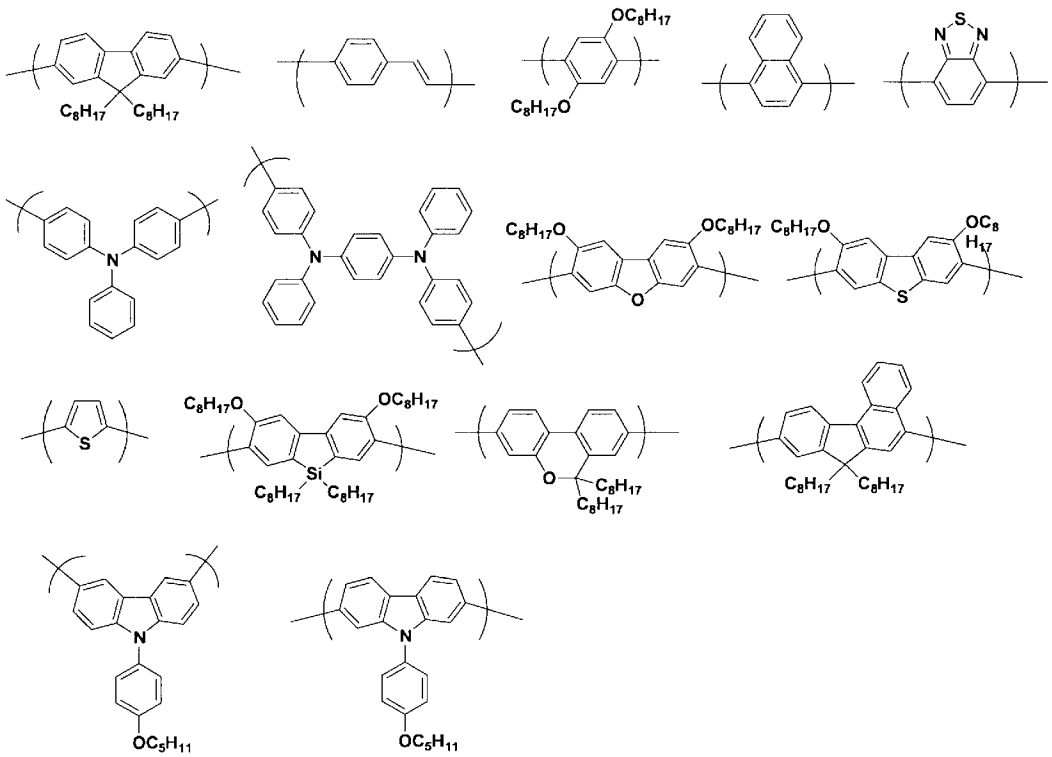
[0083] 前記式（４－１）～式（４－５）中、Ｙは、本発明の組成物を用いて製造される発光素子の発光効率の観点から、好ましくはＮ、－Ｏ－、－Ｃ（Ｒ^{11}）（Ｒ^{12}）－又は－Ｎ（Ｒ^{13}）－であり、さらに好ましくは－Ｓ－、－Ｏ－又は－Ｎ（Ｒ^{13}）－である。

[0084] 前記式（４－１）～（４－５）における芳香環としては、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、テトラセン環、ペンタセン環、ピレン環、フェナントレン環等の芳香環；ピリジン環、ビピリジン環、フェナントロリン環、キノリン環、イソキノリン環、チオフェン環、フラン環、ピロール環等の芳香族複素環が挙げられる。

[0085] 前記式（４－１）～（４－５）で表される基が有してもよい置換基としては、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールアルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、アミノ基、置換アミノ基、シリル基、置換シリル基、アシルオキシ基、イミン残基、カルバモイル基、アミド基、酸イミド基、１価の複素環基、カルボキシル基又は置換カルボキシル基が好ましく、アルキル基、アルキルオキシ基、アリール基、又は１価の複素環基がより好ましい。

[0086] 前記電荷輸送材料の高分子化合物としては、例えば、下記の基（即ち、下記の例示において、括弧を除いた基）を含む高分子化合物、特に、下記の基を繰り返し単位として含む高分子化合物が好ましい。

[化22]



[0087] 前記電荷輸送材料の低分子化合物又は高分子化合物の最低三重項励起エネルギー（ＴＨ）と、本発明の金属錯体の最低三重項励起エネルギー（ＴＭ）とは、

ＴＨ＞ＴＭ－０．１（ｅＶ）

の関係を満たすことが好ましく、

ＴＨ＞ＴＭ

の関係を満たすことがより好ましく、

ＴＨ＞ＴＭ＋０．１（ｅＶ）

の関係を満たすことがさらに好ましい。

[0088] 前記電荷輸送材料の高分子化合物を用いる場合、該高分子化合物のポリスチレン換算の数平均分子量は、好ましくは10^3～10^8、さらに好ましくは10^4～10^6である。また、該高分子化合物のポリスチレン換算の重量平均分子量は、好ましくは10^3～10^8であり、さらに好ましくは5×10^4～5×10^6である。

[0089] 前記発光材料としては、公知の発光材料が使用でき、例えば、ナフタレン

誘導体、アントラセン及びその誘導体、ペリレン及びその誘導体、ポリメチン系、キサンテン系、クマリン系、シアニン系等の色素類、８－ヒドロキシキノリン及びその誘導体の金属錯体、芳香族アミン、テトラフェニルシクロペンタジエン及びその誘導体、テトラフェニルブタジエン及びその誘導体等の低分子発光材料が挙げられる。

[0090] 本発明の組成物における本発明の金属錯体の配合量は、本発明の組成物の全体量を１００重量部としたとき、通常０．１～８０重量部であり、好ましくは０．１～６０重量部、より好ましくは０．１～４０重量部である。本発明の金属錯体は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

[0091] ＜発光素子＞

本発明の発光素子の一実施形態は、陽極と陰極からなる一対の電極と、該電極間に少なくとも発光層を有する一層（単層型）又は複数層（多層型）からなる薄膜が挟持されている素子である。該薄膜層の少なくとも１層は、本発明の金属錯体を含有する。前記薄膜中の本発明の金属錯体の含有量は、発光層全体の重量に対して、通常０．１～１００重量％であり、０．１～８０重量％であることが好ましく、０．１～６０重量％であることがより好ましく、０．１～４０重量％であることがさらに好ましい。本発明の発光素子は、前記発光層が、本発明の金属錯体を発光材料として含有することが好ましい。

[0092] 本発明の発光素子が前記単層型である場合には、前記薄膜が発光層であり、この発光層が本発明の金属錯体を含有する。また、本発明の発光素子が単層型又は多層型である場合には、例えば、以下の層構成をとる。

ａ）陽極／発光層／陰極

ｂ）陽極／正孔輸送層／発光層／陰極

ｃ）陽極／発光層／電子輸送層／陰極

ｄ）陽極／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／陰極

ｅ）陽極／電荷注入層／発光層／陰極

ｆ）陽極／発光層／電荷注入層／陰極

ｇ）陽極／電荷注入層／発光層／電荷注入層／陰極

ｈ）陽極／電荷注入層／正孔輸送層／発光層／陰極

ｉ）陽極／正孔輸送層／発光層／電荷注入層／陰極

ｊ）陽極／電荷注入層／正孔輸送層／発光層／電荷注入層／陰極

ｋ）陽極／電荷注入層／発光層／電荷輸送層／陰極

ｌ）陽極／発光層／電子輸送層／電荷注入層／陰極

ｍ）陽極／電荷注入層／発光層／電子輸送層／電荷注入層／陰極

ｎ）陽極／電荷注入層／正孔輸送層／発光層／電荷輸送層／陰極

ｏ）陽極／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／電荷注入層／陰極

ｐ）陽極／電荷注入層／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／電荷注入層／陰極

（ここで、／は各層が隣接して積層されていることを示す。以下同じ。）

[0093] 本発明の発光素子の陽極は、正孔注入層、正孔輸送層、発光層等に正孔を供給する電極であり、４．５ｅＶ以上の仕事関数を有することが効果的である。陽極の材料には、金属、合金、金属酸化物、電気伝導性化合物、これらの混合物等を用いることができる。具体的には、酸化スズ、酸化亜鉛、酸化インジウム、酸化インジウムスズ（ＩＴＯ）等の導電性金属酸化物、金、銀、クロム、ニッケル等の金属、さらにこれらの導電性金属酸化物と金属との混合物又は積層物、ヨウ化銅、硫化銅等の無機導電性物質、ポリアニリン類、ポリチオフェン類（ＰＥＤＯＴ等）、ポリピロール等の有機導電性材料、これらとＩＴＯとの積層物等が挙げられる。

[0094] 本発明の発光素子の陰極は、電子注入層、電子輸送層、発光層等に電子を供給する電極である。陰極の材料としては、金属、合金、金属ハロゲン化物、金属酸化物、電気伝導性化合物又はこれらの混合物を用いることができる。陰極の材料の例としては、アルカリ金属（リチウム、ナトリウム、カリウム等）並びにそのフッ化物及び酸化物、アルカリ土類金属（マグネシウム、カルシウム、バリウム、セシウム等）並びにそのフッ化物及び酸化物、金、銀、鉛、アルミニウム、合金及び混合金属類（ナトリウムーカリウム合金、

ナトリウムーカリウム混合金属、リチウムーアルミニウム合金、リチウムーアルミニウム混合金属、マグネシウムー銀合金、マグネシウムー銀混合金属等）、希土類金属（インジウム、イッテルビウム等）が挙げられる。

[0095] 本発明の発光素子の正孔注入層及び正孔輸送層は、陽極から正孔を注入する機能、正孔を輸送する機能、陰極から注入された電子を障壁する機能のいずれかを有している層であればよい。これらの層の材料には、公知の材料を適宜選択して使用できるが、例えば、カルバゾール誘導体、トリアゾール誘導体、オキサゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、ポリアリールアルカン誘導体、ピラゾリン誘導体、ピラゾロン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、アリールアミン誘導体、アミノ置換カルコン誘導体、スチリルアントラセン誘導体、フルオレノン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、シラザン誘導体、芳香族第三級アミン化合物、スチリルアミン化合物、芳香族ジメチリディン系化合物、ポルフィリン系化合物、ポリシラン系化合物、ポリ（Ｎービニルカルバゾール）誘導体、有機シラン誘導体、本発明の金属錯体等、これらを含む重合体が挙げられる。その他にも、アニリン系共重合体、チオフェンオリゴマー、ポリチオフェン等の導電性高分子オリゴマーが挙げられる。これらの材料は１成分単独であっても複数の成分が併用されていてもよい。また、前記正孔注入層及び前記正孔輸送層は、前記材料の１種又は２種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

[0096] 本発明の発光素子の電子注入層及び電子輸送層は、陰極から電子を注入する機能、電子を輸送する機能、陽極から注入された正孔を障壁する機能のいずれかを有している層であればよい。これらの層の材料は、公知の材料を適宜選択して使用できるが、例えば、トリアゾール誘導体、オキサゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、フルオレノン誘導体、アントラキノジメタン誘導体、アントロン誘導体、ジフェニルキノン誘導体、チオピランジオキシド誘導体、カルボジイミド誘導体、フルオレニリデンメタン誘導体、ジスチリルピラジン誘導体、ナフタレン、ペリレン等の芳香

環テトラカルボン酸無水物、フタロシアニン誘導体、８－キノリノール誘導体の金属錯体やメタルフタロシアニン、ベンゾオキサゾールやベンゾチアゾールを配位子とする金属錯体に代表される各種金属錯体、有機シラン誘導体、本発明の金属錯体が挙げられる。また、前記電子注入層及び前記電子輸送層は、前記材料の１種又は２種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

[0097] 本発明の発光素子において、電子注入層、電子輸送層の材料としては、絶縁体又は半導体の無機化合物も使用することもできる。電子注入層、電子輸送層が絶縁体や半導体で構成されていれば、電流のリークを有効に防止して、電子注入性を向上させることができる。このような絶縁体としては、アルカリ金属カルコゲニド、アルカリ土類金属カルコゲニド、アルカリ金属のハロゲン化物及びアルカリ土類金属のハロゲン化物からなる群から選ばれる少なくとも一つの金属化合物を使用できる。好ましいアルカリ金属カルコゲニドの例としては、ＣａＯ、ＢａＯ、ＳｒＯ、ＢｅＯ、ＢａＳ、ＣａＳｅが挙げられる。また、電子注入層、電子輸送層を構成する半導体としては、Ｂａ、Ｃａ、Ｓｒ、Ｙｂ、Ａｌ、Ｇａ、Ｉｎ、Ｌｉ、Ｎａ、Ｃｄ、Ｍｇ、Ｓｉ、Ｔａ、Ｓｂ及びＺｎからなる群から選ばれる少なくとも一つの元素を含む酸化物、窒化物又は酸化窒化物等が挙げられる。これら酸化物、窒化物及び酸化窒化物は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

[0098] 本発明において、陰極と接する薄膜との界面領域に還元性ドーパントが添加されていてもよい。還元性ドーパントとしては、アルカリ金属、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属の酸化物、アルカリ金属のハロゲン化物、アルカリ土類金属の酸化物、アルカリ土類金属のハロゲン化物、希土類金属の酸化物、希土類金属のハロゲン化物、アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体及び希土類金属錯体からなる群から選ばれる少なくとも一つの化合物が好ましい。

[0099] 本発明の発光素子の発光層は、電界印加時に陽極、正孔注入層又は正孔輸送層より正孔を注入することができ、陰極、電子注入層又は電子輸送層より

電子を注入することができる機能、注入した電荷（電子と正孔）を電界の力で移動させる機能、電子と正孔の再結合の場を提供し、これを発光につなげる機能を有する層である。本発明の発光素子の発光層は、本発明の金属錯体を含有することが好ましく、該金属錯体をゲスト材料とするホスト材料を含有させてもよい。ホスト材料としては、上述の電荷輸送材料等が挙げられる。また、前記ホスト材料と前記金属錯体等の発光材料とを混合して塗布するか、或いは共蒸着することによって、前記発光材料が前記ホスト材料にドープされた発光層を形成することができる。

[0100] 本発明の発光素子では、前記各層の形成方法は特に限定されず公知の方法を使用できる。具体的には、真空蒸着法（抵抗加熱蒸着法、電子ビーム法等）、スパッタリング法、ＬＢ法、分子積層法、塗布法（キャスティング法、スピンコート法、バーコート法、ブレードコート法、ロールコート法、グラビア印刷法、スクリーン印刷法、インクジェット法等）等が挙げられる。これらの中では、製造プロセスを簡略化できる点で、塗布法で成膜することが好ましい。前記塗布法では、本発明の金属錯体を溶媒に溶解して塗布液を調製し、該塗布液を所望の層（又は電極）上に、塗布・乾燥することによって、各層を形成することができる。該塗布液中には、ホスト材料及び／又はバインダーとして樹脂を含有させてもよく、該樹脂は溶媒に溶解状態とすることも、分散状態とすることもできる。前記樹脂としては、例えば、ポリ塩化ビニル、ポリカーボネート、ポリスチレン、ポリメチルメタクリレート、ポリブチルメタクリレート、ポリエステル、ポリスルホン、ポリフェニレンオキシド、ポリブタジエン、ポリ（Ｎ－ビニルカルバゾール）、炭化水素樹脂、ケトン樹脂、フェニルオキシ樹脂、ポリアミド、エチルセルロース、酢酸ビニル、ＡＢＳ樹脂、ポリウレタン、メラミン樹脂、不飽和ポリエステル樹脂、アルキド樹脂、エポキシ樹脂、シリコン樹脂等から目的に応じて選択できる。溶液は目的に応じて、任意成分として、酸化防止剤、粘度調整剤等を含有してもよい。

[0101] ＜光電素子＞

本発明の金属錯体は、光電素子の製造に用いることもできる。

[0102] 光電素子としては、例えば、光電変換素子があり、具体的には、少なくとも一方が透明又は半透明な二個の電極間に、本発明の金属錯体を含む層が設けられた素子や、基板上に成膜した本発明の金属錯体を含む層上に形成した櫛型電極を有する素子等が挙げられる。特性を向上するために、フラーレンやカーボンナノチューブ等を混合してもよい。

[0103] 光電変換素子の製造方法としては、特許第３１４６２９６号公報に記載の方法が挙げられる。具体的には、第一の電極を有する基板上に本発明の金属錯体を含む層（薄膜）を形成し、その上に第二の電極を形成する方法、基板上に形成した一組の櫛型電極の上に本発明の金属錯体を含む層（薄膜）を形成する方法が挙げられる。第一又は第二の電極のうち一方が透明又は半透明である。

[0104] 本発明の金属錯体を含む層（薄膜）の形成方法やフラーレンやカーボンナノチューブを混合する方法については特に制限はないが、発光素子で例示したものが好適に利用できる。

[0105] ＜液状組成物＞

本発明の液状組成物は、本発明の金属錯体と、溶媒又は分散媒を含む。本発明の液状組成物に用いられる溶媒、分散媒としては、薄膜の成分を均一に溶解又は分散し安定なものを公知の溶媒から適宜選択して使用できる。このような溶媒としては、塩素系溶媒（クロロホルム、塩化メチレン、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）、エーテル系溶媒（テトラヒドロフラン、ジオキサン等）、芳香族炭化水素系溶媒（ベンゼン、トルエン、キシレン等）、脂肪族炭化水素系溶媒（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－デカン等）、ケトン系溶媒（アセトン、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン等）、エステル系溶媒（酢酸エチル、酢酸ブチル、エチルセルソルブアセテート等）、多価アルコール及びその誘導体（エチレングリコール、エチレングリコー

ルモノブチルエーテル、エチレングリコールモノエチルエーテル、エチレングリコールモノメチルエーテル、ジ（メチルオキシ）エタン、プロピレングリコール、ジ（エチルオキシ）メタン、トリエチレングリコールモノエチルエーテル、グリセリン、１，２－ヘキサンジオール等）、アルコール系溶媒（メタノール、エタノール、プロパノール、イソプロパノール、シクロヘキサノール等）、スルホキシド系溶媒（ジメチルスルホキシド等）、アミド系溶媒（Ｎ－メチル－２－ピロリドン、Ｎ，Ｎ－ジメチルホルムアミド等）等が挙げられる。これらの溶媒は、一種単独で用いても二種以上を併用してもよい。

[0106] 前記液状組成物をインクジェット法に適用する場合には、該液状組成物の吐出性及びその再現性を良好にするために、該液状組成物は公知の添加剤を含有していてもよい。この公知の添加剤としては、ノズルからの蒸発を押さえるために高沸点の溶媒（アニソール、ビシクロヘキシルベンゼン等）等が挙げられる。そして、この公知の添加剤を含有してなる液状組成物は、２５℃における粘度が１～１００ｍＰａ・ｓであることが好ましい。

[0107] 本発明の発光素子の各層の好ましい厚さは、材料の種類や層構成によって異なり特に限定されないが、一般的には層の厚さが薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、逆に厚すぎると高い印加電圧が必要となり発光効率が悪くなるため、通常、数ｎｍ～１μｍが好ましい。

[0108] 本発明の発光素子の用途としては、特に制限されないが、面状光源、照明用光源（あるいは、光源）、サイン用光源、バックライト用光源、ディスプレイ装置、プリンターヘッド等が挙げられる。前記ディスプレイ装置としては、公知の駆動技術、駆動回路等を用い、セグメント型、ドットマトリクス型等の構成を選択することができる。

[0109] ＜その他の用途＞

本発明の金属錯体は、発光素子の作製に有用であるだけではなく、例えば、有機半導体材料等の半導体材料、発光材料、光学材料、導電性材料（例えば、ドーピングにより適用する）等としても用いることができる。したがっ

て、該金属錯体を用いて、発光性膜、導電性膜、有機半導体膜等の膜（即ち、前記金属錯体を含む膜）を作製することができる。

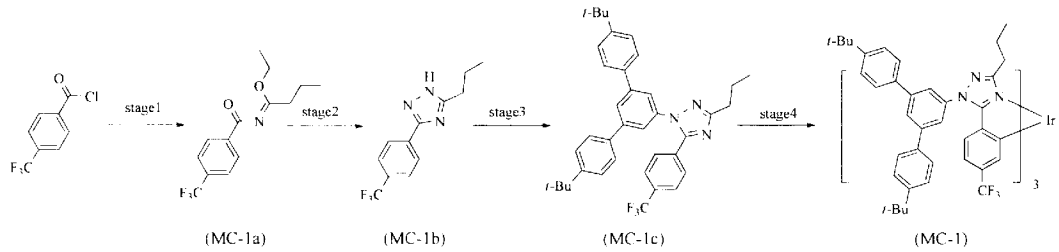
[0110] 本発明の金属錯体は、前記発光素子の発光層に用いられる発光性膜の作製方法と同様の方法で、導電性薄膜及び半導体薄膜を成膜することができる。半導体薄膜は、電子移動度又は正孔移動度のいずれか大きいほうが、１０$^{-5}$ｃｍ^{2}／Ｖ／秒以上であることが好ましい。該有機半導体膜は、有機太陽電池、有機トランジスタ等に好適に用いることができる。

実施例

[0111] 以下、本発明をより詳細に説明するために実施例を示すが、本発明はこれらに限定されるものではない。

[0112] ＜実施例１：化合物（ＭＣ－１）の合成＞

[化23]



＜ｓｔａｇｅ１＞

塩化－４－トリフルオロメチルベンゾイル６．２ｇ（３０ｍｍｏｌ）とブチルイミド酸エチル塩酸塩４．５ｇ（３０ｍｍｏｌ）を秤量し、クロロホルム３００ｍＬに溶解させて窒素雰囲気下に置いた。その後、トリエチルアミン８．４ｍＬ（６０ｍｍｏｌ）のクロロホルム溶液２５ｍＬを滴下し、室温窒素雰囲気下で撹拌した。１５時間後、溶媒のクロロホルムを濃縮してから水２００ｍＬに懸濁させて、これをジクロロメタンで抽出した。得られた溶液を減圧濃縮し、淡黄色の液体として化合物（ＭＣ－１ａ）８．０ｇ（２８ｍｍｏｌ）を得た。

[0113] ＜ｓｔａｇｅ２＞

化合物（ＭＣ－１ａ）３．０ｇ（１０ｍｍｏｌ）をクロロホルム６０ｍＬ

に溶解させて窒素雰囲気下に置いた。そこへ、ヒドラジン水和物０．５５ｍＬ（１１ｍｍｏｌ）を室温窒素雰囲気下で滴下した。滴下後、室温窒素雰囲気下で１７時間撹拌し、水５０ｍＬを加えて反応を止めた。分液ロートに反応液を移し、水洗後、油層を回収して濃縮した。得られた粗生成物をトルエンーヘキサンの混合溶媒で再結晶し、白色固体として化合物（ＭＣ－１ｂ）を２．１ｇ、収率８２％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣｌ$_3$）：δ（ｐｐｍ）　８．１５（ｄ，２Ｈ）、７．６６（ｄ，２Ｈ）、２．７８（ｔ，２Ｈ）、１．８２（ｈｅｘ，２Ｈ）、０．９４（ｔ，３Ｈ）．

[0114] ＜ｓｔａｇｅ３＞

化合物（ＭＣ－１ｂ）２０ｇ（８０ｍｍｏｌ）、３，５－ジ（４－ｔｅｒｔ－ブチルフェニル）フェニルボロン酸４１ｇ（１０７ｍｍｏｌ）、酢酸銅（ＩＩ）２４．４ｇ（１３５ｍｍｏｌ）と３Ａモレキュラーシーブス（和光純薬社製）５０ｇを秤量し、ジクロロメタン１Ｌとピリジン５０ｍＬを加えて、６０時間室温で撹拌した。６０時間後、懸濁液を吸引ろ過し、ジクロロメタン５００ｍＬで洗浄した。ろ液を濃縮してからジクロロメタンに溶解させ、水３００ｍＬで数回水洗した。油層を乾燥後、シリカゲルカラムに通し、ジクロロメタンーヘキサンの混合溶媒で分離精製した。得られた化合物をメタノールーテトラヒドロフランの混合溶媒で再結晶し、化合物（ＭＣ－１ｃ）を黄白色粉末として２．２ｇ（３．７ｍｍｏｌ）得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／（ＣＤ$_3$）$_2$ＣＯ）：δ（ｐｐｍ）　７．９９（ｔ，１Ｈ）、７．８６（ｄ，２Ｈ）、７．７９（ｄ，２Ｈ）、７．６２（ｄ，２Ｈ）、７．６０（ｄｄｄ，４Ｈ）、７．５０（ｄｄｄ，４Ｈ）、２．７８（ｔ，２Ｈ）、１．８７（ｔｄ，２Ｈ）、１．３４（ｓ，１８Ｈ）、１．０６（ｔ，３Ｈ）．

[0115] ＜ｓｔａｇｅ４＞

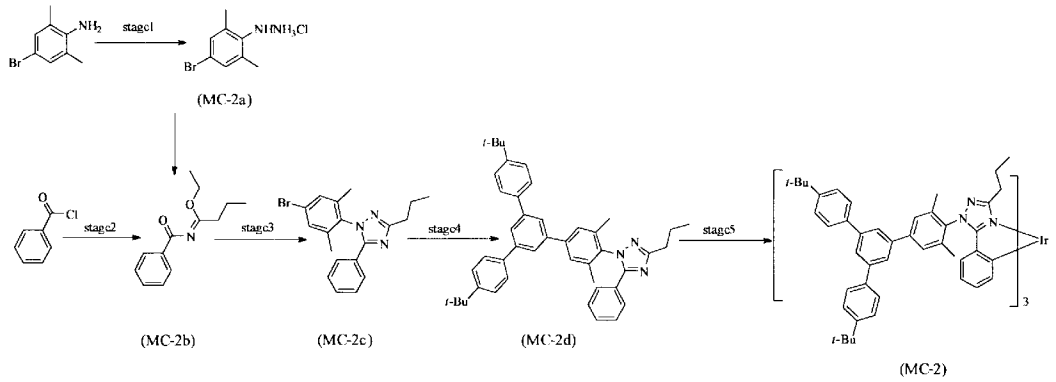
塩化イリジウム１４０ｍｇ（０．４ｍｍｏｌ）と化合物（ＭＣ－１ｃ）６

００ｍｇ（１．０ｍｍｏｌ）を量りとり、水３ｍＬと２－ブトキシエタノール９ｍＬを加えてアルゴン雰囲気下、１５時間加熱し還流した。放冷後、反応液を減圧濃縮し、残渣をジクロロメタンに溶解させて水洗した。油層を濃縮、乾燥し、ジクロロメタンーヘキサンの混合溶媒で再結晶した。粉末状黄色固体として６８０ｍｇを得た。この粉末状黄色固体６８０ｍｇと化合物（ＭＣ－１ｃ）１．２３ｇ（２．１ｍｍｏｌ）を秤量し、アルゴン雰囲気下でトリフルオロメタンスルホン酸銀１２０ｍｇ（０．４７ｍｍｏｌ）を加えてから、ジエチレングリコールジメチルエステル３ｍＬを注いだ。その後、アルゴン雰囲気下で２４時間加熱し還流した後、放冷した。反応混合物にジクロロメタン２０ｍＬを注ぎ吸引ろ過後、ろ液を濃縮、乾燥した。得られた粗生成物をシリカゲルカラムに通して、ジクロロメタンーヘキサンの混合溶媒を用いて分離精製した。溶離液を濃縮後、メタノールーテトラヒドロフランの混合溶媒で再結晶し、次いでジクロロメタンーヘキサンの混合溶媒で再結晶した。淡黄色結晶として、化合物（ＭＣ－１）［ｆａｃ－トリス（１－（３，５－ジ（４－ｔｅｒｔ－ブチルフェニル）フェニル）－３－プロピル－５－（４－トリフルオロメチルフェニル）－１Ｈ－［１，２，４］－トリアゾラト－Ｎ，Ｃ２’）イリジウム（ＩＩＩ）］を７１０ｍｇ（０．３６ｍｍｏｌ）、収率９０％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣｌ$_{3}$）：δ（ｐｐｍ） ８．０４（ｄｄ，３Ｈ）、７．６５（ｄ，６Ｈ）、７．６１（ｄ，１２Ｈ）、７．５０（ｄ，１２Ｈ）、７．０７（ｄ，３Ｈ）、６．９４（ｄ，３Ｈ）、６．８４（ｓ，３Ｈ）、２．４９（ｈｅｐ，３Ｈ）、２．２７（ｈｅｐ，３Ｈ）、１．６９－１．５６（ｍ，３Ｈ）、１．５２－１．３８（ｍ，３Ｈ）、１．３７（ｓ，５４Ｈ）、０．８８（ｔ，９Ｈ）．

［0116］＜実施例２：化合物（ＭＣ－２）の合成＞

[化24]



＜ｓｔａｇｅ１＞

亜硝酸ナトリウム１．３８ｇ（２０ｍｍｏｌ）を窒素雰囲気下、０℃の水１１ｍＬに溶解させた。４－ブロモ２，６－ジメチルアニリン４．０ｇ（２０ｍｍｏｌ）を３３ｍＬの濃塩酸（和光純薬社製、塩酸濃度３５～３７％）に懸濁させて、５℃を超えない範囲で亜硝酸水溶液に滴下した。０℃で１５分撹拌した後、塩化スズ（ＩＩ）５．３１ｇ（２８ｍｍｏｌ）の濃塩酸溶液１５ｍＬを反応液に加えてから室温に戻し、６時間撹拌した。得られた懸濁液を吸引ろ過し、濃塩酸と冷水で洗浄し、真空乾燥した。乳白色の固体として化合物（ＭＣ－２ａ）を４．９８ｇ得た。

[0117] ＜ｓｔａｇｅ２＞

塩化ベンゾイル３ｍＬ（２６ｍｍｏｌ）とブチルイミド酸エチル塩酸塩３．９ｇ（２６ｍｍｏｌ）を秤量し、クロロホルム３００ｍＬに溶解させて窒素雰囲気下に置いた。その後、トリエチルアミン７．２ｍＬ（５２ｍｍｏｌ）のクロロホルム溶液２５ｍＬを滴下し、室温窒素雰囲気下で撹拌した。１５時間後、溶媒のクロロホルムを濃縮してから水２００ｍＬに懸濁させ、これをジクロロメタンで抽出した。得られた溶液を減圧濃縮し、淡黄色の液体として化合物（ＭＣ－２ｂ）５．３ｇ（２４ｍｍｏｌ）を得た。

[0118] ＜ｓｔａｇｅ３＞

化合物（ＭＣ－２ａ）２．４ｇ（９．６ｍｍｏｌ）、化合物（ＭＣ－２ｂ）２．２ｇ（１０ｍｍｏｌ）と酢酸ナトリウム８００ｍｇ（９．７ｍｍｏｌ

）を秤量し、酢酸とジオキサンを１５ｍＬずつ加えてから窒素雰囲気下に置いた。反応混合物を９０℃で１５時間加熱した後、放冷した。その後、水と酢酸エチルを加えて、水洗した後、油層を回収した。得られた粗生成物をシリカゲルカラムに通し、ヘキサン－酢酸エチルの混合溶媒を用いて分離精製した。淡黄色固体として化合物（ＭＣ－２ｃ）を１．２ｇ（３．２ｍｍｏｌ）、収率３３％で得た。

[0119] ＜ｓｔａｇｅ４＞

化合物（ＭＣ－２ｃ）１．２ｇ（３．２ｍｍｏｌ）、３，５－ジ（４－ｔｅｒｔブチルフェニル）フェニルボロン酸ピナコールエステル１．７ｇ（３．６ｍｍｏｌ）、炭酸ナトリウム６９０ｍｇ（６．５ｍｍｏｌ）、及び、テトラキストリフェニルフォスフィノパラジウム（０）１９０ｍｇを秤量し、水８ｍＬ及びジオキサン８ｍＬを加えて窒素雰囲気下に置いた。反応混合物を１０時間加熱し還流した後、放冷した。反応液を濃縮後、水及びジクロロメタンを加えて水洗し、次いで、油層を回収し、濃縮した。メタノール－ジクロロメタンの混合溶媒で再結晶し、白色粉末として化合物（ＭＣ－２ｄ）を１．１ｇ（１．７ｍｍｏｌ）、収率５１％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／（ＣＤ$_{3}$）$_{2}$ＣＯ）：δ（ｐｐｍ） ７．９２（ｄ，２Ｈ）、７．８９（ｔｔ，１Ｈ）、７．７５－７．７４（ｍ，６Ｈ）、７．５８－７．５２（ｍ，６Ｈ）、７．４０－７．３１（ｍ，３Ｈ）、２．７６（ｔ，２Ｈ）、２．０４（ｓ，６Ｈ）、１．８５（ｔｄ，２Ｈ）、１．３６（ｓ，１８Ｈ）、１．０１（ｔ，３Ｈ）．

[0120] ＜ｓｔａｇｅ５＞

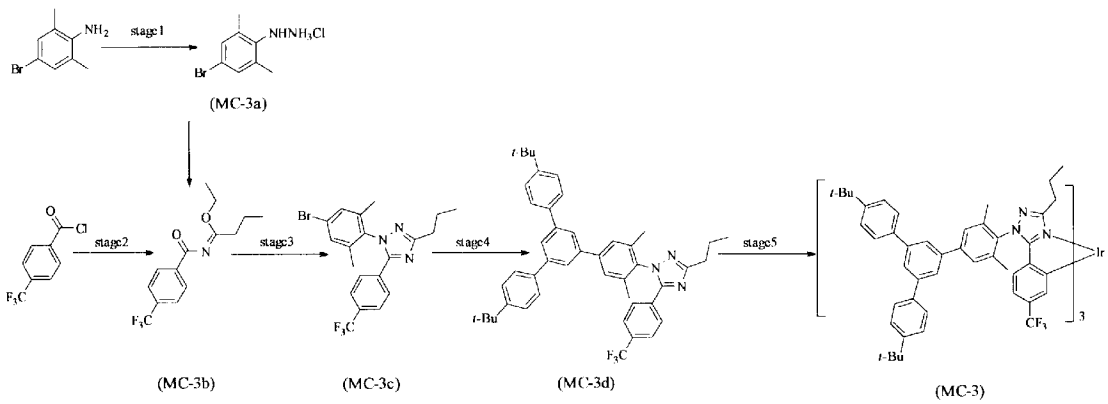
塩化イリジウム８８ｍｇ（０．２５ｍｍｏｌ）と化合物（ＭＣ－２ｄ）３９０ｍｇ（０．６３ｍｍｏｌ）に水４ｍＬ、２－ブトキシエタノール８ｍＬを加えて、窒素雰囲気下に置いた。混合物を１５時間加熱還流した後、放冷した。反応液を濃縮した後、ジクロロメタン及び水を加えて水洗した。油層を回収し、濃縮したところ、褐色固体４３０ｍｇを得た。この褐色固体４３

０ｍｇ、化合物（ＭＣ－２ｄ）６７０ｍｇ（１．１ｍｍｏｌ）、及び、トリフルオロメタンスルホン酸銀６４ｍｇ（０．２５ｍｍｏｌ）を秤量し、ジエチレングリコールジメチルエステル１ｍＬを加えて、アルゴン雰囲気下、１５時間加熱し還流した。放冷後、ジクロロメタンを加えてから吸引ろ過し、ろ液を濃縮、乾燥した。得られた粗生成物をジクロロメタンに溶解させ、シリカゲルカラムに通し、ジクロロメタン－ヘキサンの混合溶媒を用いて分離精製した。得られた溶離液を濃縮し、ジクロロメタン－ヘキサンの混合溶媒で再結晶した。次いで、ジクロロメタン－エタノールの混合溶媒で再結晶し、淡黄色粉末として化合物（ＭＣ－２）［ｆａｃ－トリス（１－（４－（３，５－ジ（４－ｔｅｒｔ－ブチルフェニル）フェニル）－２，６－ジメチルフェニル）－３－プロピル－５－フェニル－１Ｈ－［１，２，４］－トリアゾラト－Ｎ，Ｃ２’）イリジウム（ＩＩＩ）］を、３２０ｍｇ（０．１５ｍｍｏｌ）、収率６１％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／CD_2Cl_2）：δ（ｐｐｍ）　７．７９（ｄ，６Ｈ）、７．７７（ｔ，３Ｈ）、７．６２（ｄｔ，１２Ｈ）、７．５９（ｓ，３Ｈ）、７．５１（ｓ，３Ｈ）、７．４７－７．４４（ｍ，１２Ｈ）、６．６１－６．４７（ｍ，１２Ｈ）、２．４３（ｄｔ，３Ｈ）、２．３０－２．２２（ｍ，１２Ｈ）、１．８２（ｓ，９Ｈ）、１．６５（ｔｄ，６Ｈ）、１．３０（ｓ，５４Ｈ）、０．８０（ｔ，９Ｈ）．

[0121] ＜実施例３：化合物（ＭＣ－３）の合成＞

[化25]



＜ｓｔａｇｅ１＞

亜硝酸ナトリウム１．３８ｇ（２０ｍｍｏｌ）を窒素雰囲気下、水１１ｍＬに溶解させ、氷浴上に静置して、０℃に冷却した。４－ブロモ－２，６－ジメチルアニリン４．０ｇ（２０ｍｍｏｌ）を３３ｍＬの濃塩酸（和光純薬社製、塩酸濃度３５～３７％）に懸濁させて、５℃を超えない範囲で亜硝酸水溶液に滴下した。０℃で１５分撹拌した後、塩化スズ（ＩＩ）５．３１ｇ（２８ｍｍｏｌ）の濃塩酸溶液１５ｍＬを反応液に加えてから室温に戻し、６時間撹拌した。得られた懸濁液を吸引ろ過し、濃塩酸と冷水で洗浄し、真空乾燥することにより、乳白色の固体として化合物（ＭＣ－３ａ）を４．９８ｇ得た。

[0122] ＜ｓｔａｇｅ２＞

塩化－４－トリフルオロメチルベンゾイル６．２ｇ（３０ｍｍｏｌ）とブチルイミド酸エチル塩酸塩４．５ｇ（３０ｍｍｏｌ）を秤量し、クロロホルム３００ｍＬに溶解させて窒素雰囲気下に置いた。その後、トリエチルアミン８．４ｍＬ（６０ｍｍｏｌ）のクロロホルム溶液２５ｍＬを滴下し、室温窒素雰囲気下で撹拌した。１５時間後、溶媒のクロロホルムを濃縮してから水２００ｍＬに懸濁させて、これをジクロロメタンで抽出した。得られた溶液を減圧濃縮し、淡黄色の液体として化合物（ＭＣ－３ｂ）８．０ｇ（２８ｍｍｏｌ）を得た。

[0123] ＜ｓｔａｇｅ３＞

化合物（ＭＣ－３ａ）２．６５ｇ（１０．６ｍｍｏｌ）、化合物（ＭＣ－３ｂ）２．５ｇ（８．８ｍｍｏｌ）、及び、酢酸ナトリウム８７０ｍｇ（１０．６ｍｍｏｌ）を秤量し、酢酸とジオキサンを１５ｍＬずつ加えてから窒素雰囲気下に置いた。反応混合物を７０℃で１５時間加熱した後、放冷した。水と酢酸エチルを加えて、水洗した後、油層を回収した。得られた粗生成物をシリカゲルカラムに通し、ヘキサン－酢酸エチルの混合溶媒を用いて分離精製した。淡黄色固体として化合物（ＭＣ－３ｃ）を１．４ｇ（３．２ｍｍｏｌ）、収率３６％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣｌ$_3$）：δ（ｐｐｍ）　７．６１－７．５６（ｍ，４Ｈ）、７．３５（ｓ，２Ｈ）、２．８３（ｔ，２Ｈ）、１．９７（ｄ，６Ｈ）、１．８８（ｑ，２Ｈ）、１．０３（ｔ，３Ｈ）．

[0124] ＜ｓｔａｇｅ４＞

化合物（ＭＣ－３ｃ）１．３ｇ（３．０ｍｍｏｌ）、３，５－ジ（４－ｔｅｒｔブチルフェニル）フェニルボロン酸ピナコールエステル１．５ｇ（３．３ｍｍｏｌ）、及び、炭酸ナトリウム９５０ｍｇ（９．０ｍｍｏｌ）を秤量し、水６ｍＬ、ジオキサン１５ｍＬを加えて窒素雰囲気下に置いた。そこへ、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム（０）７０ｍｇ（０．０６ｍｍｏｌ）を加えてから、窒素雰囲気下で５時間加熱し還流した。放冷後、水、トルエンを加えて水洗し、油層を回収後、濃縮した。得られた粗生成物をシリカゲルカラムに通し、ヘキサン－クロロホルム－酢酸エチルの混合溶媒を用いて分離精製した。淡黄色粉末として、化合物（ＭＣ－３ｄ）を２．０ｇ（２．９ｍｍｏｌ）、収率９７％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／（ＣＤ$_3$）$_2$ＣＯ）：δ（ｐｐｍ）　７．９２（ｄ，２Ｈ）、７．８９（ｔｔ，１Ｈ）、７．７７（ｄ，４Ｈ）、７．７４（ｄ，４Ｈ）、７．７０（ｄ，２Ｈ）、７．５３（ｄｔ，４Ｈ）、２．７８（ｔ，２Ｈ）、２．０４（ｓ，６Ｈ）、１．８５（ｔｄ，２Ｈ）、１．３４（ｓ，１８Ｈ）、１．００（ｔ，３Ｈ）．

[0125] ＜ｓｔａｇｅ５＞

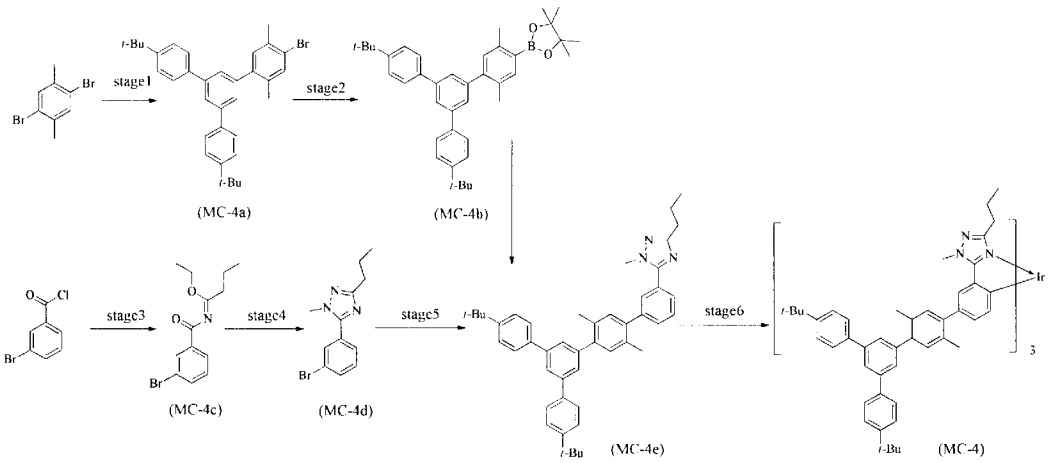
塩化イリジウム１８０ｍｇ（０．５ｍｍｏｌ）と化合物（ＭＣ－３ｄ）７７０ｍｇ（１．１ｍｍｏｌ）を量りとり、水４ｍＬと２－エチルオキシエタノール１２ｍＬを加え、アルゴン雰囲気下で７時間加熱し還流した。放冷後、水とメタノールを注ぎ、析出した沈殿を吸引ろ過した。メタノールで洗浄し、黄色粉末を９００ｍｇ得た。この黄色粉末９００ｍｇ、化合物（ＭＣ－３ｄ）１．２ｇ（１．７ｍｍｏｌ）、及び、トリフルオロメタンスルホンサン銀１３０ｍｇ（０．５ｍｍｏｌ）を秤量し、ジエチレングリコールジメチ

ルエステル５ｍＬを加えて、アルゴン雰囲気下、１１時間加熱還流した。放冷後、トルエンを加えて吸引ろ過した。ろ液に水を加えて水洗し、油層を回収、濃縮した。粗生成物をトルエンに溶解させ、シリカゲルカラムに通し、トルエンーヘキサンの混合溶媒で分離精製した。溶離液を濃縮後、ジエチルエーテルーヘキサンの混合溶媒で再結晶した。粉末状の黄色固体として、化合物（ＭＣ－３）［ｆａｃ－トリス（１－（４－（３，５－ジ（４－ｔｅｒｔ－ブチルフェニル）フェニル）－２，６－ジメチル）フェニル－３－プロピル－５－（４－トリフルオロメチルフェニル）－１Ｈ－［１，２，４］－トリアゾラトーＮ，Ｃ２’）イリジウム（ＩＩＩ）］として７６０ｍｇ（０．３３ｍｍｏｌ）、収率６６％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣｌ$_{3}$）：δ（ｐｐｍ）　７．８５－７．８１（ｍ，９Ｈ）、７．６９－７．６５（ｍ，１２Ｈ）、７．６２（ｓ，３Ｈ）、７．５８（ｓ，３Ｈ）、７．５５－７．５１（ｍ，１２Ｈ）、６．９５（ｄｄ，３Ｈ）、６．７８（ｄ，３Ｈ）、６．６８（ｄ，３Ｈ）、２．５２－２．２８（ｍ，１５Ｈ）、１．８６（ｓ，９Ｈ）、１．３６（ｈｅｐ，６Ｈ）、１．１９（ｓ，５４Ｈ）、０．８９（ｔ，９Ｈ）．

[0126] ＜実施例４：化合物（ＭＣ－４）の合成＞

[化26]



[0127] ＜ｓｔａｇｅ１＞

２，５－ジブロモキシレン５．２８ｇ（２０ｍｍｏｌ）と３，５－ジ（４－ｔｅｒｔブチルフェニル）フェニルボロン酸ピナコールエステル９．３６ｇ（２０ｍｍｏｌ）を秤量し、テトラエチルアンモニウムヒドロキシド３０ｇ（４０ｍｍｏｌ）を加えて、そこへテトラキストリフェニルホスフィノパラジウム（０）９２０ｍｇ（０．８ｍｍｏｌ）とジオキサン１００ｍＬを加えて、窒素バブリングした。その後、８０℃で４時間加熱した。放冷後、反応液をセライト層に通してから濃縮した。得られた油状物質に水とトルエンを加えた後、分液ロートへ移し、水洗した。油層を無水硫酸ナトリウムで乾燥した後に濃縮した。得られた淡黄色のオイルをヘキサン－トルエン（体積比でヘキサン：トルエン＝９：１）に溶解させ、シリカゲルカラムに通し精製した。粉末状の白色固体として、化合物（ＭＣ－４ａ）を６．０ｇ（１０．５ｍｍｏｌ）、収率５２％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣｌ$_{3}$）：δ（ｐｐｍ）　７．７８（ｔ，１Ｈ），７．６０（ｄｄｄ，４Ｈ），７．４９（ｍ，５Ｈ），７．４６（ｄ，２Ｈ），７．２０（ｓ，１Ｈ），２．４０（ｓ，３Ｈ），２．２９（ｓ，３Ｈ），１．３７（ｓ，１８Ｈ）．

[0128] ＜ｓｔａｇｅ２＞

化合物（ＭＣ－４ａ）５．２７ｇ（１０ｍｍｏｌ）と、ビス（ピナコラト）ジボロン３．８１ｇ（１５ｍｍｏｌ）と、ジクロロビス（ジフェニルホスフィノ）フェロセニルパラジウム（ＩＩ）ジクロロメタン錯体１６３ｍｇ（０．２ｍｍｏｌ）と、酢酸カリウム２．９４ｇ（３０ｍｍｏｌ）を秤量し、ジオキサン５０ｍｌを注いで、１５分間窒素バブリングした。その後、窒素雰囲気下で５時間加熱し還流した。放冷後、反応液をセライト層に通し、ろ過した後、ろ液を濃縮した。得られた残渣をヘキサン－トルエン（体積比でヘキサン：トルエン＝７：３）の混合溶媒に溶解させて、シリカゲルカラムに通して精製した。粉末状の白色固体として、化合物（ＭＣ－４ｂ）を５．３９ｇ（９．４ｍｍｏｌ）、収率９４％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣｌ$_3$）：δ（ｐｐｍ）　７．７７（ｔ，１Ｈ），７．７２（ｓ，１Ｈ），７．６１（ｄ，４Ｈ），７．５０－７．４７（ｍ，６Ｈ），７．１７（ｓ，１Ｈ），２．５５（ｓ，３Ｈ），２．３３（ｓ，３Ｈ），１．３７（ｓ，１８Ｈ），１．２６（ｓ，１２Ｈ）．

[0129] ＜ｓｔａｇｅ３＞

塩化－３－ブロモベンソイル６．９２ｇ（３１．５ｍｍｏｌ）とブチルイミド酸塩酸塩４．９５ｇ（３２．６ｍｍｏｌ）を秤量し、３００ｍＬのクロロホルム１５０ｍｌに溶解させて窒素雰囲気下に置いた。その後、トリエチルアミン８ｍｌ（６０ｍｍｏｌ）のクロロホルム溶液３０ｍＬを滴下して、室温窒素雰囲気下で攪拌した。１５時間後、溶媒のクロロホルムを濃縮してから水２００ｍＬに懸濁させて、これをジクロロメタンで抽出した。無水硫酸ナトリウムで乾燥後油層を濃縮し、無色の液体として、化合物（ＭＣ－４ｃ）を９．４７ｇ、収率１００％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣｌ$_3$）：δ（ｐｐｍ）　８．１４（ｔ，１Ｈ），７．９３（ｄｄ，１Ｈ），７．６５－７．６３（ｍ，１Ｈ），７．３１（ｔ，１Ｈ），４．２９（ｑ，２Ｈ），２．３６（ｔ，２Ｈ），１．６０（ｔｄ，２Ｈ），１．３７（ｔ，３Ｈ），０．８８（ｔ，３Ｈ）．

[0130] ＜ｓｔａｇｅ４＞

無水メチルヒドラジン１．５２ｇ（３３ｍｍｏｌ）と脱水クロロホルム１５ｍＬを滴下ロートに入れ、水５９４ｍｇ加えて、アルゴンバブリングを行い、メチルヒドラジン溶液を調製した。化合物（ＭＣ－４ｃ）９．０ｇをクロロホルム１００ｍＬに溶解させて、アルゴン雰囲気下、メチルヒドラジン溶液を滴下した。滴下終了後、アルゴン雰囲気下で７時間室温撹拌した。得られた溶液へ水１００ｍｌを注ぎ、反応を止めてから油層を回収し、濃縮した。その後、シリカゲルのカラムに通してヒドラジンを除去した。次いで、得られた溶液をシリカゲルカラムに通し、ジクロロメタン－酢酸エチル（体積比でジクロロメタン：酢酸エチル＝７：３）の展開溶媒にて分離精製し、

化合物（ＭＣ－４ｄ）を５．８ｇ、収率６３％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣｌ$_3$）：δ（ｐｐｍ）７．８５（ｄ，１Ｈ），７．６３－７．５７（ｍ，２Ｈ），７．３７（１Ｈ，ｄｄ），３．９３（ｓ，３Ｈ），２．７２（ｔ，２Ｈ），１．８１（ｍ，２Ｈ），１．０１（ｔ，３Ｈ）．

[0131] ＜ｓｔａｇｅ５＞

化合物（ＭＣ－４ｄ）１．１２ｇ（４ｍｍｏｌ）、化合物（ＭＣ－４ｂ）２．２９ｇ（４ｍｍｏｌ）、テトラキストリフェニルホスフィノパラジウム（０）４６ｍｇ（０．０４ｍｍｏｌ）、及び、炭酸ナトリウム１．２７ｇ（１２ｍｍｏｌ）を秤量し、水１０ｍｌとＴＨＦ２０ｍｌを加えて、窒素雰囲気下で４時間加熱し還流した。放冷後、反応液を濃縮してから水とトルエンを加えて洗浄した。油層を硫酸マグネシウムで乾燥させた後に濃縮し、クロロホルム－酢酸エチル（体積比でクロロホルム：酢酸エチル＝１０：１）の混合溶媒に溶解させた。シリカゲルカラムに通して分離精製を行い、粉末状の白色固体として、化合物（ＭＣ－４ｅ）を２．０ｇ（３．１ｍｍｏｌ）、収率７７％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣｌ$_3$）：δ（ｐｐｍ）７．８０（ｔ，１Ｈ），７．６７－７．６２（ｍ，６Ｈ），７．５９－７．５４（ｍ，３Ｈ），７．５２（ｔ，１Ｈ），７．４９（ｄｄｄ，４Ｈ），７．２８（ｓ，１Ｈ），７．２１（ｓ，１Ｈ），３．９７（ｓ，３Ｈ），２．７４（ｔ，２Ｈ），２．３７（ｓ，３Ｈ），２．３０（ｓ，３Ｈ），１．８３（ｄｔ，２Ｈ），１．３８（ｓ，１８Ｈ），１．０３（ｔ，３Ｈ）．

[0132] ＜ｓｔａｇｅ６＞

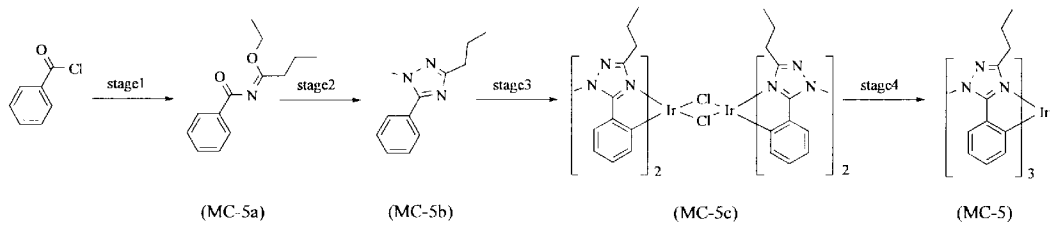
塩化イリジウム水和物１７６ｍｇ（０．５ｍｍｏｌ）と化合物（ＭＣ－４ｅ）７１０ｍｇ（１．１ｍｍｏｌ）を秤量し、３０ｍｌの三口フラスコへ入れた後、水４ｍｌと２－エトキシエタノール１２ｍｌを加え、アルゴン雰囲気下で７時間加熱還流を行った。その後、水とメタノールを加えて析出した

沈殿物を吸引ろ過した。得られた黄色粉末８５０ｍｇ、化合物（ＭＣ－４ｅ）１．２５ｇ（１．９ｍｍｏｌ）、及び、トリフルオロメタンスルホン酸銀１３０ｍｇ（０．５ｍｍｏｌ）を秤量し、ジエチレングリコールジメチルエステル６ｍＬを加え、窒素雰囲気下で８時間加熱し還流した。放冷後、トルエンを加えてから、セライト層に通してろ過した。ろ液を濃縮した後に残渣をヘキサン－トルエン－酢酸エチル（体積比で、ヘキサン：トルエン：酢酸エチル＝３：２：１）の混合溶媒に溶解させて、シリカゲルカラムに通し、分離精製した。粉末状の淡黄色固体として、化合物（ＭＣ－４）を６８０ｍｇ（０．３２ｍｍｏｌ）、収率６４％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣｌ$_3$）：δ（ｐｐｍ） ７．７９（ｔ，３Ｈ），７．６４（ｄｄｄ，１２Ｈ），７．５８（ｄ，３Ｈ），７．５６（ｓ，６Ｈ），７．５０（ｄｄｄ，１２Ｈ），７．２６（ｄ，６Ｈ），６．９０（ｄｄ，３Ｈ），６．８２（ｄ，３Ｈ），４．２２（ｓ，９Ｈ），２．３７（ｓ，９Ｈ），２．３５（ｓ，９Ｈ），２．２８（ｄｄｄ，３Ｈ），１．９５（ｄｄｄ，３Ｈ），１．４４－１．３９（ｍ，３Ｈ），１．３６（ｓ，５４Ｈ），１．３１－１．１８（ｍ，３Ｈ），０．７３（ｔ，９Ｈ）．

[0133] ＜比較例１：化合物（ＭＣ－５）の合成＞

[化27]



＜ｓｔａｇｅ１＞

塩化ベンゾイル３ｍＬ（２６ｍｍｏｌ）とブチルイミド酸エチル塩酸塩３．９ｇ（２６ｍｍｏｌ）を秤量し、クロロホルム３００ｍＬに溶解させて窒素雰囲気下に置いた。その後、トリエチルアミン７．２ｍＬ（５２ｍｍｏｌ）のクロロホルム溶液２５ｍＬを滴下し、室温窒素雰囲気下で撹拌した。１

５時間後、溶媒のクロロホルムを濃縮してから水２００ｍＬに懸濁させて、これをジクロロメタンで抽出した。得られた溶液を減圧濃縮し、淡黄色の液体として化合物（ＭＣ－５ａ）５．３ｇ（２４ｍｍｏｌ）を得た。

[0134] ＜ｓｔａｇｅ２＞

化合物（ＭＣ－５ａ）５．３ｇ（２４ｍｍｏｌ）をクロロホルム２００ｍＬに溶解させて窒素雰囲気下に置いた。そこへ、メチルヒドラジン１．２ｍＬ（２６ｍｍｏｌ）と水０．５ｍＬを含むクロロホルム溶液２５ｍＬを室温窒素雰囲気下で滴下した。滴下後、室温窒素雰囲気下で１５時間撹拌し、水１００ｍＬを加えて反応を止めた。その後、分液ロートに反応液を移し、水洗後、油層を回収して濃縮した。シリカゲルカラムに粗生成物を通し、ジクロロメタン－酢酸エチルの混合溶媒で精製した。溶離液を濃縮することにより、無色の液体として化合物（ＭＣ－５ｂ）を２．９ｇ、収率６０％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣｌ$_{3}$）：δ（ｐｐｍ） ７．７５（ｍ，３Ｈ）、７．６６（ｍ，２Ｈ）、３．９３（ｓ，３Ｈ）、２．７３（ｔ，２Ｈ）、１．８２（ｈｅｘ，２Ｈ）、１．０２（ｔ，３Ｈ）．

[0135] ＜ｓｔａｇｅ３＞

塩化イリジウム３５０ｍｇ（１．０ｍｍｏｌ）と化合物（ＭＣ－５ｂ）４４０ｍｇ（２．２ｍｍｏｌ）を秤量し、２－エチルオキシエタノール１０ｍＬと水５ｍＬを加えてから窒素雰囲気下に置き、１５時間加熱還流した。放冷後、反応液を濃縮し、残渣に水とジクロロメタンを加えて油層を水洗した。油層を回収し、濃縮乾燥後、黄色油状物質として化合物（ＭＣ－５ｃ）を６６０ｍｇ得た。

[0136] ＜ｓｔａｇｅ４＞

化合物（ＭＣ－５ｃ）と化合物（ＭＣ－５ｃ）１．０ｇ（５．０ｍｍｏｌ）を秤量し、トリフルオロメタンスルホン酸銀２６０ｍｇを加えて反応系内をアルゴン置換した。１６５℃で１５時間加熱し反応させてから放冷し、ジクロロメタン１５ｍＬを注いだ。懸濁液を吸引ろ過した後、シリカゲルカラ

ムに通してジクロロメタン－酢酸エチルの混合溶媒で分離精製した。黄色粉末として、化合物（ＭＣ－５）［ｆａｃ－トリス（１－メチル－３－プロピル－５－フェニル－１Ｈ－［１，２，４］－トリアゾラト－Ｎ，Ｃ２’）イリジウム（ＩＩＩ）］６３０ｍｇを収率８０％で得た。^{1}Ｈ－ＮＭＲ分析の結果を以下に示す。

^{1}Ｈ－ＮＭＲ（４００ＭＨｚ／ＣＤＣｌ$_{3}$）：δ（ｐｐｍ）　７．５０（ｄ，３Ｈ）、６．８８（ｔ，３Ｈ）、６．８０（ｔ，３Ｈ）、６．６３（ｄ，３Ｈ）、４．１１（ｓ，９Ｈ）、２．１８（ｈｅｐ，３Ｈ）、１．８７（ｈｅｐ，３Ｈ）、１．３８－１．３０（ｍ，３Ｈ）、１．１８－１．１０（ｍ，３Ｈ）、０．６８（ｔ，９Ｈ）．

［0137］＜試験実施例１：化合物ＭＣ－１の安定性評価＞

キシレン溶媒中に２．２重量％で溶解させたＦｌｕｋａ社製のポリスチレン（重量平均分子量Ｍｗ＝６００００）の溶液と、キシレン溶媒中に２．２重量％で溶解させた化合物ＭＣ－１の溶液とを、ポリスチレン溶液と化合物ＭＣ－１溶液とが７０重量％と３０重量％となるように混合して、液状組成物１を調製した。

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、液状組成物１をスピンコート法により厚さ１００ｎｍに成膜した。これを酸素濃度及び水分濃度が１０ｐｐｍ以下（重量基準）の窒素雰囲気下において、１３０℃で１０分間乾燥した後、陰極としてアルミニウムを約８０ｎｍ蒸着した。アルミニウムを蒸着後、ガラス基板を用いて封止を行うことで、発光素子１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。

得られた発光素子１に、Ｈｅ－Ｃｄレーザーを用いて、３２５ｎｍの励起波長で紫外線照射を行い、発光輝度をトプコンテクノハウス社製のＢＭ－９を用いて測定した。励起光の強度は１．８ｍＷ（照射面積は約４ｍｍ^{2}）に設定した。発光素子１に、上記紫外線照射を行うことで、初期に４７７ｃｄ／ｍ^{2}で発光し、初期の発光輝度が３０％減少するまでの時間は７１．６時間で

あったため、輝度半減時間は７１．６時間より長時間である。

[0138] ＜試験実施例２：化合物ＭＣ－２の安定性評価＞

キシレン溶媒中に２．２重量％で溶解させたＦｌｕｋａ社製のポリスチレン（重量平均分子量Ｍｗ＝６００００）の溶液と、キシレン溶媒中に２．２重量％で溶解させた化合物ＭＣ－２の溶液とを、ポリスチレン溶液と化合物ＭＣ－２溶液とが７０重量％と３０重量％となるように混合して、液状組成物２を調製した。

試験実施例１の液状組成物１の代わりに液状組成物２を用いた以外は、試験実施例１と同様にして、発光素子２を作製した。

得られた発光素子２に、試験実施例１と同様に紫外線照射を行うことで、初期に４５６ｃｄ／ｍ^{2}で発光し、輝度半減時間は２７．３時間であった。

[0139] ＜試験実施例３：化合物ＭＣ－３の安定性評価＞

キシレン溶媒中に２．２重量％で溶解させたＦｌｕｋａ社製のポリスチレン（重量平均分子量Ｍｗ＝６００００）の溶液と、キシレン溶媒中に２．２重量％で溶解させた化合物ＭＣ－３の溶液とを、ポリスチレン溶液と化合物ＭＣ－３溶液とが７０重量％と３０重量％となるように混合して、液状組成物３を調製した。

試験実施例１の液状組成物１の代わりに液状組成物３を用いた以外は、試験実施例１と同様にして、発光素子３を作製した。

得られた発光素子３に試験実施例１と同様に紫外線照射を行いうことで、初期に７３０ｃｄ／ｍ^{2}で発光し、輝度半減時間は３７．９時間であった。

[0140] ＜試験実施例４：化合物ＭＣ－４の安定性評価＞

キシレン溶媒中に２．２重量％で溶解させたＦｌｕｋａ社製のポリスチレン（重量平均分子量Ｍｗ＝６００００）の溶液と、キシレン溶媒中に２．２重量％で溶解させた化合物ＭＣ－４の溶液とを、ポリスチレン溶液と化合物ＭＣ－４溶液とが７０重量％と３０重量％となるように混合して、液状組成物４を調製した。

試験実施例１の液状組成物１の代わりに液状組成物４を用いた以外は、試

験実施例１と同様にして、発光素子４を作製した。

得られた発光素子４に試験実施例１と同様に紫外線照射を行うことで、初期に１５７１．５ｃｄ／ｍ²の輝度で発光し、輝度半減時間は８．３時間であった。

[0141] ＜試験比較例１：化合物ＭＣ－５の安定性評価＞

キシレン溶媒中に２．２重量％で溶解させたＦｌｕｋａ社製のポリスチレン（重量平均分子量Ｍｗ＝６００００）の溶液と、キシレン溶媒中に２．２重量％で溶解させた化合物ＭＣ－５の溶液とを、ポリスチレン溶液と化合物ＭＣ－５溶液とが７０重量％と３０重量％となるように混合して、液状組成物５を調製した。

試験実施例１の液状組成物１の代わりに液状組成物５を用いた以外は、試験実施例１と同様にして、発光素子５を作製した。

得られた発光素子５に試験実施例１と同様に紫外線照射を行うことで、初期に６８６．５ｃｄ／ｍ²の輝度で発光し、輝度半減時間は０．７９時間であった。

[0142] 上記の安定性試験の結果を表１に示す。安定性試験の結果から、本発明の金属錯体は、安定性に優れ、発光素子の材料として有用であることがわかった。

[0143] [表1]

表１．

	化合物	紫外線照射における輝度半減時間（時間）	発光スペクトルピーク波長@７７Ｋ（ｎｍ）	発光スペクトルピーク波長@ＲＴ（ｎｍ）
試験実施例１	ＭＣ－１	７１．６(輝度７０％)	４７７	４９５
試験実施例２	ＭＣ－２	２７．３	４５０	４５９
試験実施例３	ＭＣ－３	３７．９	４６５	４７１
試験実施例４	ＭＣ－４	８．３	４５４	４６１
試験比較例１	ＭＣ－５	０．７９	４４３	４５３

[0144] ＜室温での発光スペクトル測定＞

ＴＨＦ（関東化学株式会社製：分光分析用グレード）に化合物ＭＣ－１～ＭＣ－５が１×１０$^{-6}$ｍｏｌ／Ｌになるように溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（型番：Ｃ９９２０）を用いて、室温での発光スペクトル（励起波長：３５０ｎｍ）を測定した。

[0145] ＜７７Ｋでの発光スペクトル測定＞

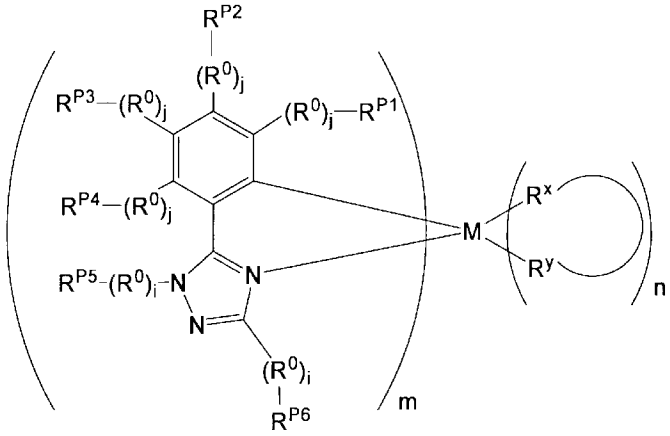
２－ＭｅＴＨＦ（アルドリッチ製：無水、阻害剤フリー）に化合物ＭＣ－１～ＭＣ－５が１×１０$^{-6}$ｍｏｌ／Ｌになるように溶解させ、アルゴンガスを通気した後、浜松ホトニクス株式会社製の絶対ＰＬ量子収率測定装置（型番：Ｃ９９２０）を用いて、７７Ｋでの発光スペクトル（励起波長：３５０ｎｍ）を測定した。

[0146] 室温での発光スペクトル測定及び７７Ｋでの発光スペクトル測定の結果得られた発光波長を表１に示す。発光スペクトル測定の結果から、本発明の金属錯体は、青色領域で発光することがわかった。

請求の範囲

［請求項1］　下記式（１）で表される金属錯体。

［化1］



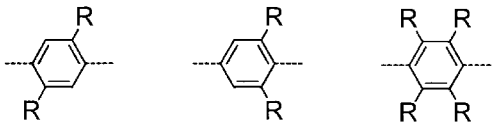
(1)

［式中、

Ｍは、ルテニウム原子、ロジウム原子、パラジウム原子、オスミウム原子、イリジウム原子及び白金原子からなる群から選ばれる金属原子である。

Ｒ０は、それぞれ独立に、式（Ｌ－１）で表される基、式（Ｌ－２）で表される基、及び、式（Ｌ－３）で表される基からなる群から選ばれる２価の連結基である。

［化2］



(L-1)　(L-2)　(L-3)

［式中、Ｒは、それぞれ独立に、アルキル基を表す。］

ｉは、それぞれ独立に、０又は１を表す。

ｊは、それぞれ独立に、０又は１を表す。

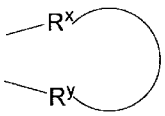
ＲＰ１、ＲＰ２、ＲＰ３、ＲＰ４、ＲＰ５及びＲＰ６は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アルキルオキシ基、アルキルチオ基、アリール基、アリールオキシ基、アリールチオ基、アリールア

ルキル基、アリールアルキルオキシ基、アリールアルキルチオ基、アシル基、アシルオキシ基、カルバモイル基、アミド基、酸イミド基、イミン残基、置換アミノ基、置換シリル基、置換シリルオキシ基、置換シリルチオ基、置換シリルアミノ基、１価の複素環基、ヘテロアリールオキシ基、ヘテロアリールチオ基、アリールアルケニル基、アリールアルキニル基、置換カルボキシル基又はシアノ基を表す。なお、R^{P1}とR^{P2}は結合して環構造を形成していてもよく、R^{P2}とR^{P3}は結合して環構造を形成していてもよく、R^{P3}とR^{P4}は結合して環構造を形成していてもよい。ただし、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P5}及びR^{P6}の少なくとも一つはデンドロンであり、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}又はR^{P4}がデンドロンである場合、該デンドロンに連結した連結基R^{0}の数を表すｊは１である。

ｍは１～３の整数であり、ｎは０～２の整数であり、ｍ＋ｎは２又は３である。

下記式（２）で表される部分は、２座配位子を表す。

[化3]



(2)

[式中、R^{x}及びR^{y}は、金属原子Ｍに結合する原子であり、それぞれ独立に、炭素原子、酸素原子又は窒素原子を表す。]]

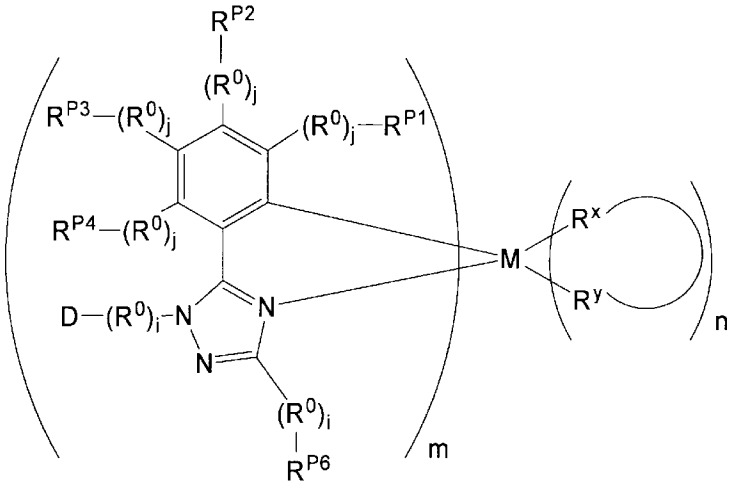
[請求項2] ｎ＝０である、請求項１に記載の金属錯体。

[請求項3] R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}及びR^{P4}の少なくとも一つが電子吸引性の置換基である、請求項１又は２に記載の金属錯体。

[請求項4] 電子吸引性の置換基がフッ素原子又はフッ素原子を含有する置換基である、請求項３に記載の金属錯体。

[請求項5] 下記式（３－１）で表される、請求項１～４のいずれか一項に記載の金属錯体。

[化4]

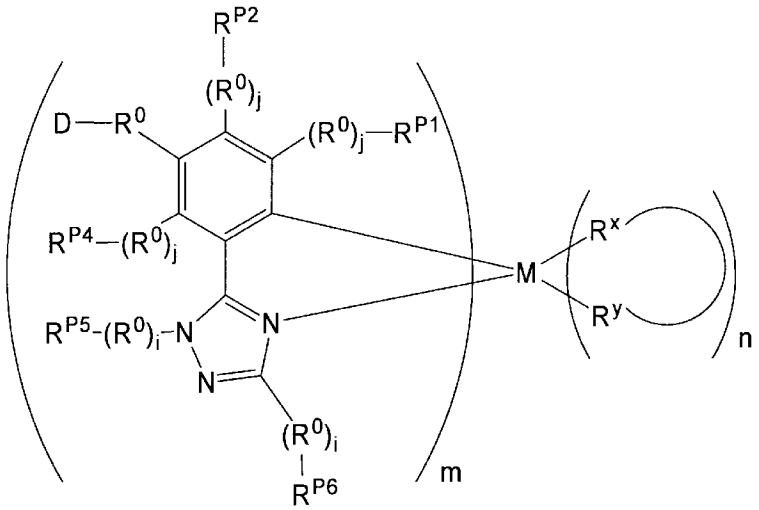


(3-1)

[式中、M、R^0、R^{P1}、R^{P2}、R^{P3}、R^{P4}、R^{P6}、式（２）で表される部分、R^x、R^y、ｉ、ｊ、ｍ及びｎは、前記と同じ意味を表し、Ｄはデンドロンを表す。]

[請求項6] 下記式（３－２）で表される、請求項１～５のいずれか一項に記載の金属錯体。

[化5]



(3-2)

[式中、M、R^0、R^{P1}、R^{P2}、R^{P4}、R^{P5}、R^{P6}、式（２）で表される部分、R^x、R^y、ｉ、ｊ、ｍ及びｎは、前記と同じ意味を表し、Ｄはデンドロンを表す。]

[請求項7] Ｍが白金原子又はイリジウム原子である、請求項１～６のいずれか

一項に記載の金属錯体。

[請求項8] 発光スペクトルのピーク波長が４３０ｎｍ～６３０ｎｍである、請求項１～７のいずれか一項に記載の金属錯体。

[請求項9] （ａ）請求項１～８のいずれか一項に記載の金属錯体と、（ｂ）電荷輸送性化合物と、を含む組成物。

[請求項10] 電荷輸送性化合物が高分子化合物である、請求項９に記載の組成物。

[請求項11] （ａ）請求項１～８のいずれか一項に記載の金属錯体と、（ｂ）溶媒又は分散媒と、を含む組成物。

[請求項12] 請求項１～８のいずれか一項に記載の金属錯体を含む膜。

[請求項13] （ａ）陽極及び陰極からなる電極と、

（ｂ）該電極間に設けられた、請求項１～８のいずれか一項に記載の金属錯体を含む層と、を有する発光素子。

[請求項14] 請求項１３に記載の発光素子を有する面状光源。

[請求項15] 請求項１３に記載の発光素子を有する照明。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2013/050268

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
C07F15/00(2006.01)i, *C08K5/3472*(2006.01)i, *C08L101/12*(2006.01)i, *C09K11/06*(2006.01)i, *H01L51/50*(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
C07F15/00, C08K5/00, C08L101/00, C09K11/00, H01L51/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2013
Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2013 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2013

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

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	LO, Shih-Chun et al., Solution-processible phosphorescent blue dendrimers based on biphenyl-dendrons and Fac-tris(phenyltriazolyl) iridium(III) cores, Advanced Functional Materials, 2008, 18(19), p.3080-3090	1-8
X	JP 2007-504272 A (Isis Innovation Ltd.), 01 March 2007 (01.03.2007), page 4, formula II; pages 9 to 10, paragraph [0021]; page 27, compound P-3 & US 2007/0009759 A1 & EP 1636322 A1 & WO 2004/101707 A1	1-15

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

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

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
18 March, 2013 (18.03.13)	02 April, 2013 (02.04.13)
Name and mailing address of the ISA/ Japanese Patent Office Facsimile No.	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2013/050268

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	LEVELL, Jack W. et al., Efficient Phosphorescence by Reducing Intrachain Chromophore Interactions in Dendrimer-Containing Polymers, Journal of Physical Chemistry C, 2011, 115(51), p.25464-25469	1-15
A	LAI, Wen-Yong et al., A Phosphorescent Poly (dendrimer) Containing Iridium(III) Complexes: Synthesis and Light-Emitting Properties, Macromolecules, 2010, 43(17), p.6986-6994	1-15

国際調査報告

国際出願番号　ＰＣＴ／ＪＰ２０１３／０５０２６８

Ａ．　発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　C07F15/00(2006.01)i, C08K5/3472(2006.01)i, C08L101/12(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i

Ｂ．　調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　C07F15/00, C08K5/00, C08L101/00, C09K11/00, H01L51/00

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報　１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報　１９７１－２０１３年
日本国実用新案登録公報　１９９６－２０１３年
日本国登録実用新案公報　１９９４－２０１３年

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

CA/REGISTRY(STN)

Ｃ．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X	LO, Shih-Chun et al., Solution-processible phosphorescent blue dendrimers based on biphenyl-dendrons and Fac-tris(phenyltriazolyl)iridium(III) cores, Advanced Functional Materials, 2008, 18(19), p.3080-3090	1-8
X	JP 2007-504272 A（イシス　イノベイション　リミテッド）2007.03.01,第４頁の式II、第９－１０頁の［００２１］、第２７頁の化合物Ｐ－３ & US 2007/0009759 A1 & EP 1636322 A1 & WO 2004/101707 A1	1-15

☑　Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。　　☐　パテントファミリーに関する別紙を参照。

＊　引用文献のカテゴリー
「Ａ」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
「Ｅ」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「Ｌ」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
「Ｏ」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
「Ｐ」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
「Ｔ」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
「Ｘ」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
「Ｙ」特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
「＆」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
１８．０３．２０１３	０２．０４．２０１３

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

特許庁審査官（権限のある職員）　４Ｈ　８３１８
前田　憲彦
電話番号　０３－３５８１－１１０１　内線　３４４３

Ｃ（続き）．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
A	LEVELL, Jack W. et al., Efficient Phosphorescence by Reducing Intrachain Chromophore Interactions in Dendrimer-Containing Polymers, Journal of Physical Chemistry C, 2011, 115(51), p.25464-25469	1-15
A	LAI, Wen-Yong et al., A Phosphorescent Poly(dendrimer) Containing Iridium(III) Complexes: Synthesis and Light-Emitting Properties, Macromolecules, 2010, 43(17), p.6986-6994	1-15