

(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
2019年1月3日(03.01.2019)



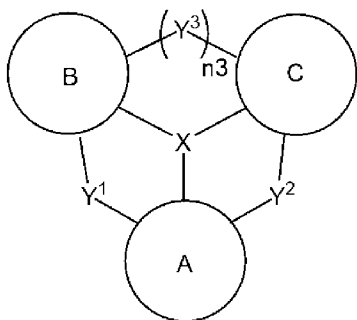
(10) 国際公開番号

WO 2019/004248 A1

- (51) 国際特許分類:
C08G 61/12 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2018/024289
- (22) 国際出願日: 2018年6月27日(27.06.2018)
- (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 2017-128629 2017年6月30日(30.06.2017) 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).
- (72) 発明者: 松本 龍二 (MATSUMOTO, Ryuji); 〒3003294 茨城県つくば市北原6番住友化学株式会社内 Ibaraki (JP). 廣井 結希 (HIROI, Yuki); 〒3003294 茨城県つくば市北原6番住友化学株式会社内 Ibaraki (JP). 吉田 大泰 (YOSHIDA, Tomoyasu); 〒3003294 茨城県つくば市北原6番住友化学株式会社内 Ibaraki (JP). 福島 大介 (FUKUSHIMA, Daisuke); 〒3003294 茨城県つくば市北原6番住友化学株式会社内 Ibaraki (JP).
- (74) 代理人: 中山 亨, 外 (NAKAYAMA, Tohru et al.); 〒5418550 大阪府大阪市中央区北浜四丁目5番33号住友化学株式会社内 Osaka (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, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT,

(54) Title: MACROMOLECULAR COMPOUND AND LIGHT-EMITTING ELEMENT USING SAME

(54) 発明の名称: 高分子化合物及びそれを用いた発光素子



(1)

(57) Abstract: Provided is a macromolecular compound useful for production of a light-emitting element having a long luminance lifetime. This macromolecular compound includes a constituent unit having a residue of a compound represented by formula (1), and a constituent unit not having a residue of a compound represented by formula (1) (in the formula: ring A, ring B, and ring C each represent an aromatic hydrocarbon ring or the like; X represents a boron atom or the like; Y¹, Y², and Y³ each represent N-Ry, a sulfur atom, or a selenium atom; Ry represents a hydrogen atom, an aryl group, a monovalent heterocyclic group, or an alkyl group; n₃ represents 0 or 1; and, in the case where n₃ is 0, -Y³- is absent).

(57) 要約: 輝度寿命に優れる発光素子の製造に有用な高分子化合物を提供する。式(1)で表される化合物の残基を有する構成単位と、前記式(1)で表される化合物の残基を有さない構成単位を含む、高分子化合物。[式中、A環、B環及びC環は、芳香族炭化水素環等を表す。Xは、ホウ素原子等を表す。Y¹、Y²及びY³は、N-Ry、硫黄原子又はセレン原子を表す。Ryは、水素原子、アリール基、1価の複素環基、又はアルキル基を表す。n₃は、0又は1である。n₃が0である場合、-Y³-は存在しない。]



QA, RO, RS, RU, RW, SA, 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, ST, SZ, TZ, UG, ZM,
ZW), ユーラシア (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, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告(条約第21条(3))

明 細 書

発明の名称： 高分子化合物及びそれを用いた発光素子

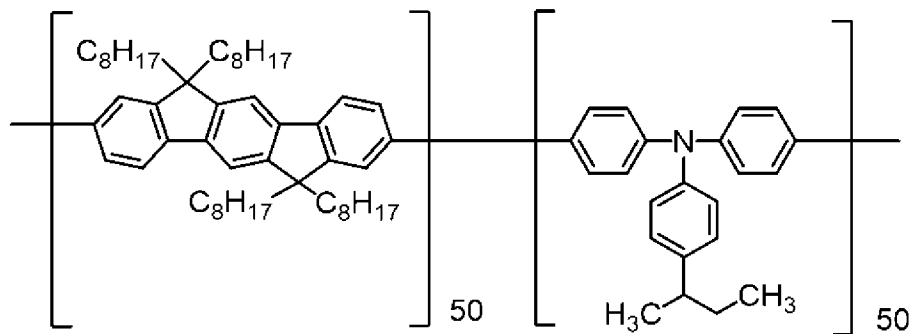
技術分野

[0001] 本発明は、高分子化合物及びそれを用いた発光素子に関する。

背景技術

[0002] 発光素子に用いられる発光材料としては、例えば、下記式で表される高分子化合物が検討されている（特許文献1）。

[0003] [化1]



先行技術文献

特許文献

[0004] 特許文献1：国際公開公報第2013/013753号

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0005] しかしながら、上記の高分子化合物を用いて製造される発光素子は、輝度寿命が必ずしも十分ではない。

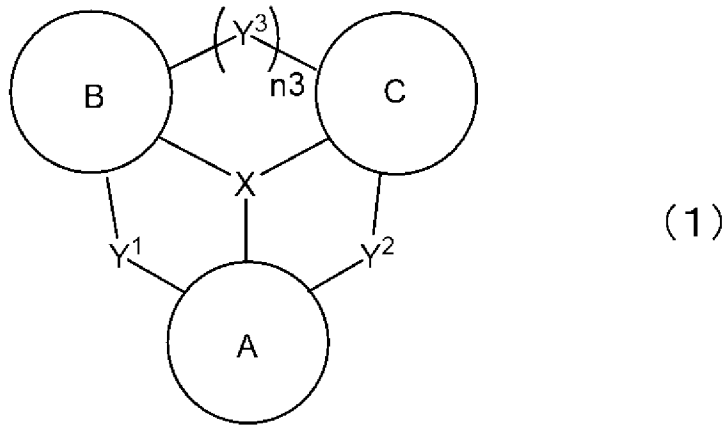
そこで、本発明は、輝度寿命に優れる発光素子の製造に有用な高分子化合物を提供することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0006] 本発明は、以下の[1]～[15]を提供する。

[0007] [1]式(1)で表される化合物の残基を有する構成単位と、前記式(1)で表される化合物の残基を有さない構成単位とを含む、高分子化合物。

[化2]



[式中、

A環、B環及びC環は、それぞれ独立に、芳香族炭化水素環又は芳香族複素環を表し、これらの環は置換基を有していてもよい。

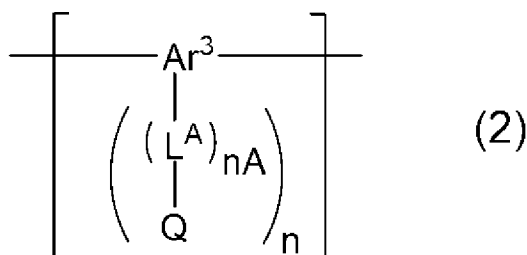
Xは、ホウ素原子、リン原子、P=O、P=S、アルミニウム原子、ガリウム原子、ヒ素原子、Si-R_x又はGe-R_xを表す。R_xは、アリール基又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

Y¹は、N-R_y、硫黄原子又はセレン原子を表す。Y²及びY³は、それぞれ独立に、酸素原子、N-R_y、硫黄原子又はセレン原子を表す。R_yは、水素原子、アリール基、1価の複素環基、又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。R_yが複数存在する場合、同一であっても異なってもよい。R_yは、直接又は連結基を介して、前記A環、前記B環又は前記C環と結合していてもよい。

n₃は、0又は1である。n₃が0である場合、-Y³-は存在しない。]

[2] 前記式(1)で表される化合物の残基を有する構成単位が、式(2)又は式(2')で表される構成単位である、[1]に記載の高分子化合物。

[化3]



[式中、

$n A$ は、0～5の整数である。

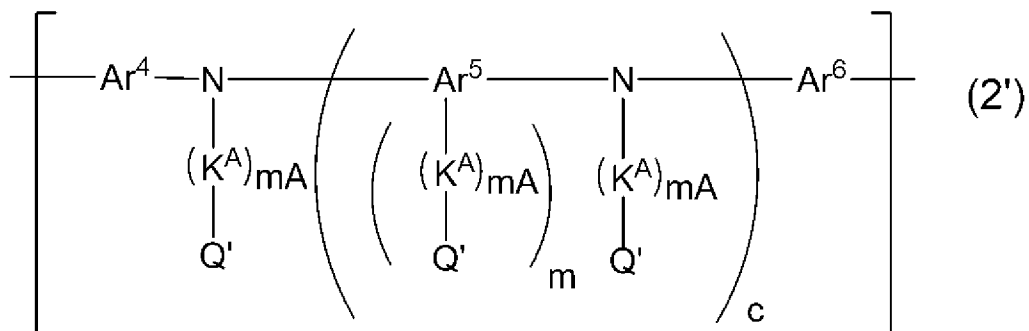
n は、1又は2である。

$A r^3$ は、芳香族炭化水素基又は複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

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

Q は、前記式(1)で表される化合物の残基を表す。]

[化4]



[式中、

m は1～4の整数である。

$m A$ は0～5の整数である。 $m A$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

c は0又は1である。

$A r^4$ 及び $A r^6$ は、それぞれ独立に、アリーレン基又は2価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

$A r^5$ は、芳香族炭化水素基、複素環基、又は、少なくとも1種の芳香族炭化水素環と少なくとも1種の複素環とが結合した基を表し、これらの基は置

換基を有していてもよい。

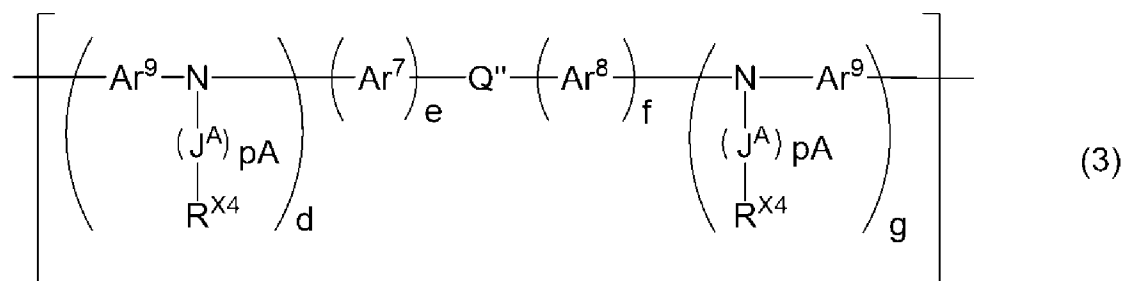
Ar^4 、 Ar^5 及び Ar^6 は、それぞれ、該基が結合している窒素原子に結合している該基以外の基と、直接結合して、又は、酸素原子若しくは硫黄原子を介して結合して、環を形成していてもよい。

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

Q' は、前記式(1)で表される化合物の残基、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 Q' が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。但し、少なくとも1つの Q' は、前記式(1)で表される化合物の残基である。]

[3] 前記式(1)で表される化合物の残基を有する構成単位が、式(3)で表される構成単位である、[1]に記載の高分子化合物。

[化5]



[式中、

d 、 e 、 f 及び g は、それぞれ独立に、0~2の整数である。

pA は、0~5の整数である。 pA が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

J^A は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2価の複素環

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

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価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 Ar^7 、 Ar^8 及び Ar^9 が複数存在する場合、それらは各々同一でも異なってもよい。

R^{x4} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 R^{x4} が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

Q'' は、前記式(1)で表される化合物の残基を表す。]

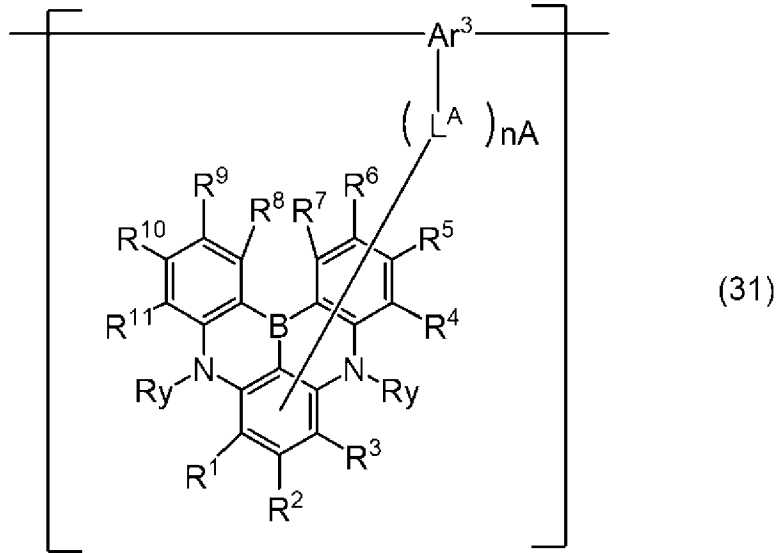
[4] 前記Xがホウ素原子である、[1]～[3]のいずれかに記載の高分子化合物。

[5] 前記 Y^1 、 Y^2 及び Y^3 が $N-R_y$ である、[1]～[4]のいずれかに記載の高分子化合物。

[6] 前記 n_3 が0である、[1]～[5]のいずれかに記載の高分子化合物。

[7] 前記式(2)で表される構成単位が式(31)で表される構成単位である、[2]に記載の高分子化合物。

[化6]



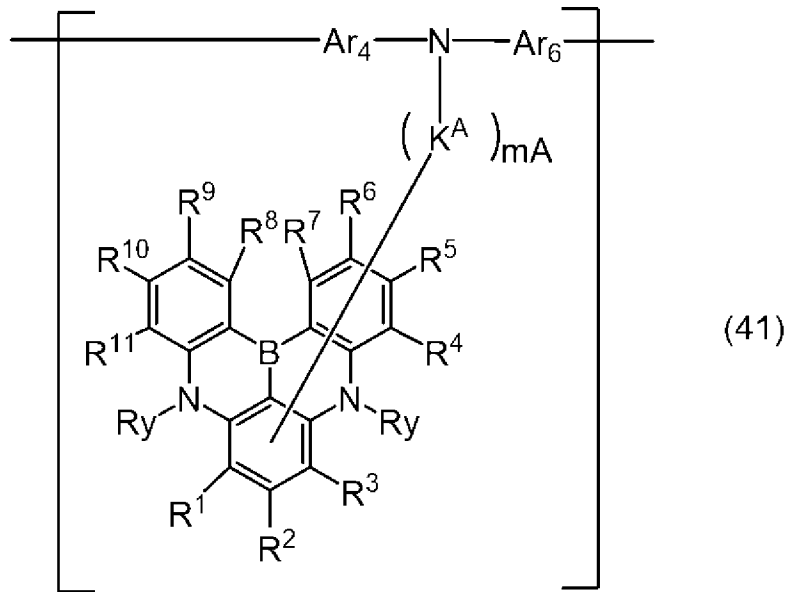
[式中、

R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰及びR¹¹は、それぞれ独立に、結合手、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。但し、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰及びR¹¹のうちの1つは結合手である。

R_y、A r³、L^A及びn Aは、前記と同じ意味を表す。]

[8] 前記式(2')で表される構成単位が式(41)で表される構成単位である、[2]に記載の高分子化合物。

[化7]



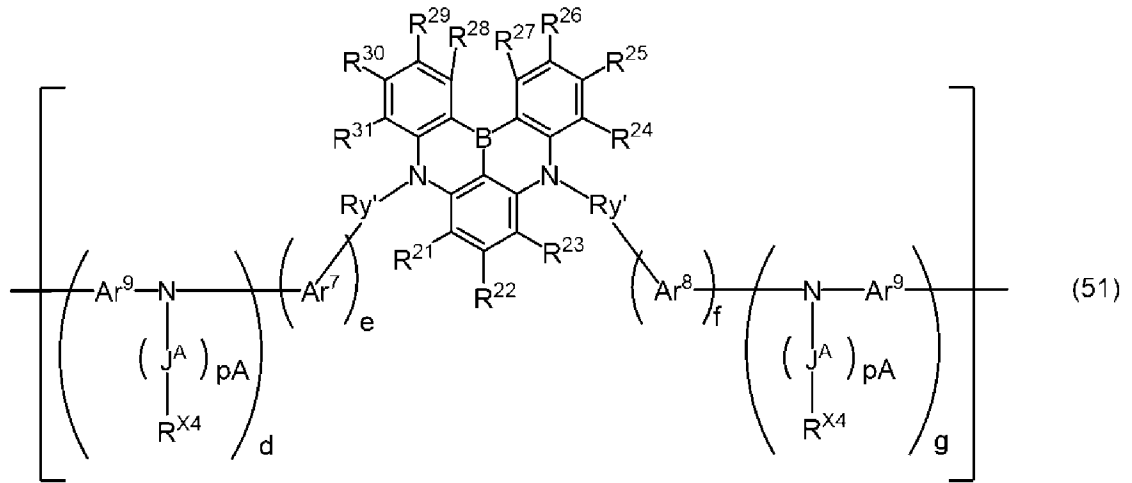
[式中、

R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰及びR¹¹は、それぞれ独立に、結合手、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、又は、置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。但し、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰及びR¹¹のうちの1つは結合手である。

R_y、A r⁴、A r⁶、K^A及びm Aは、前記と同じ意味を表す。]

[9] 前記式(3)で表される構成単位が式(51)で表される構成単位である、[3]に記載の高分子化合物

[化8]



[式中、

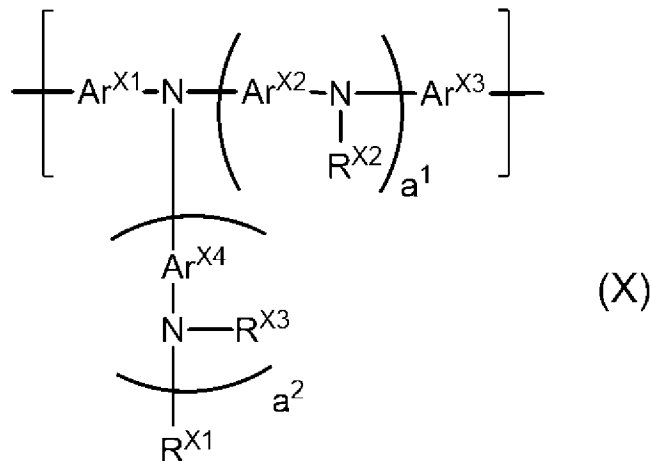
R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 、 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 及び R^{31} は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリーロキシ基、1価の複素環基、又は、置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

Ry' は、直接結合、アリーレン基、2価の複素環基、又はアルキレン基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する Ry' は、同一でも異なってもよい。

Ar^7 、 Ar^8 、 Ar^9 、 R^{X4} 、 J^A 、 pA 、 d 、 e 、 f 及び g は、前記と同じ意味を表す。]

[10] 前記式(1)で表される化合物の残基を有さない構成単位が、式(X)で表される構成単位及び式(Y)で表される構成単位からなる群から選ばれる少なくとも1種の構成単位である、[1]～[9]のいずれかに記載の高分子化合物。

[化9]



[式中、

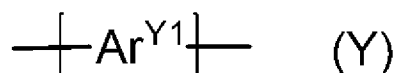
a^1 及び a^2 は、それぞれ独立に、0～2の整数である。

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

$\text{Ar}^{\text{X}2}$ 及び $\text{Ar}^{\text{X}4}$ は、それぞれ独立に、アリーレン基、2価の複素環基、又は、少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが結合した2価の基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 $\text{Ar}^{\text{X}2}$ 及び $\text{Ar}^{\text{X}4}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

$\text{R}^{\text{X}1}$ 、 $\text{R}^{\text{X}2}$ 及び $\text{R}^{\text{X}3}$ は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 $\text{R}^{\text{X}2}$ 及び $\text{R}^{\text{X}3}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

[化10]

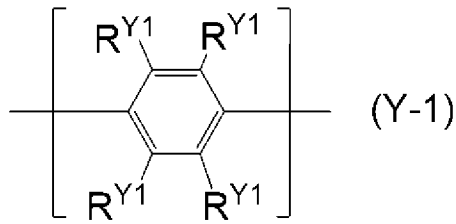


[式中、 $\text{Ar}^{\text{Y}1}$ は、アリーレン基、2価の複素環基、又は、少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが結合した2価の基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

[11] 前記式(Y)で表される構成単位が、式(Y-1)で表される構成単位又は式(Y-2)で表される構成単位である、[10]に記載の高分子

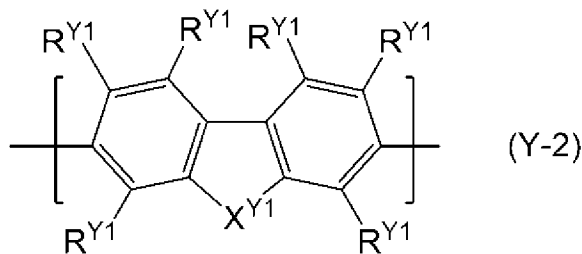
化合物。

[化11]



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

[化12]



[式中、

R^{Y1} は前記と同じ意味を表す。

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

[12] 前記式(2)で表される構成単位、及び式(2')で表される構成単位の合計量が、高分子化合物に含まれる全構成単位の合計量に対して、0.1～50モル%である、[2]、[4]～[8]、[10]及び[11]のい

ずれかに記載の高分子化合物。

[13] 前記式(3)で表される構成単位の合計量が、高分子化合物に含まれる全構成単位の合計量に対して、0.1～50モル%である、[3]～[6]及び[9]～[11]のいずれかに記載の高分子化合物。

[14] 正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤及び溶媒からなる群より選ばれる少なくとも1種の材料と、[1]～[13]のいずれかに記載の高分子化合物と、を含有する組成物。

[15] [1]～[13]のいずれかに記載の高分子化合物を含有する有機層を備えた発光素子。

発明の効果

[0008] 本発明によれば、輝度寿命に優れる発光素子の製造に有用な高分子化合物を提供することができる。また、本発明によれば、この高分子化合物を含有する組成物及びこの高分子化合物を含有する発光素子を提供することができる。

発明を実施するための形態

[0009] 以下、本発明の好適な実施形態について詳細に説明する。

[0010] <共通する用語の説明>

本明細書で共通して用いられる用語は、特記しない限り、以下の意味である。

[0011] Meはメチル基、Etはエチル基、Buはブチル基、i-Prはイソプロピル基、t-Buはtert-ブチル基を表す。

[0012] 水素原子は、重水素原子であっても、軽水素原子であってもよい。

[0013] 金属錯体を表す式中、中心金属との結合を表す実線は、共有結合又は配位結合を意味する。

[0014] 「高分子化合物」とは、分子量分布を有し、ポリスチレン換算の数平均分子量が $1 \times 10^3 \sim 1 \times 10^8$ である重合体を意味する。

[0015] 「低分子化合物」とは、分子量分布を有さず、分子量が 1×10^4 以下の化合

物を意味する。

[0016] 「構成単位」とは、高分子化合物中に1個以上存在する単位を意味する。

[0017] 「アルキル基」は、直鎖及び分岐のいずれでもよい。直鎖のアルキル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常1～50であり、好ましくは3～30であり、より好ましくは4～20である。分岐のアルキル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3～50であり、好ましくは3～30であり、より好ましくは4～20である。

[0018] アルキル基は、置換基を有していてもよく、例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、2-ブチル基、イソブチル基、tert-ブチル基、ペンチル基、イソアミル基、2-エチルブチル基、ヘキシル基、ヘプチル基、オクチル基、2-エチルヘキシル基、3-プロピルヘプチル基、デシル基、3,7-ジメチルオクチル基、2-エチルオクチル基、2-ヘキシルデシル基、ドデシル基、及び、これらの基における水素原子が、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、フッ素原子等で置換された基（例えば、トリフルオロメチル基、ペンタフルオロエチル基、パーフルオロブチル基、パーフルオロヘキシル基、パーフルオロオクチル基、3-フェニルプロピル基、3-(4-メチルフェニル)プロピル基、3-(3,5-ジ-ヘキシルフェニル)プロピル基、6-エチルオキシヘキシル基)が挙げられる。

[0019] 「シクロアルキル基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3～50であり、好ましくは3～30であり、より好ましくは4～20である。

[0020] シクロアルキル基は、置換基を有していてもよく、例えば、シクロヘキシル基、シクロヘキシルメチル基、シクロヘキシルエチル基が挙げられる。

[0021] 「アリール基」は、芳香族炭化水素から環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子1個を除いた残りの原子団を意味する。アリール基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常6～60であり、好ましくは6～20であり、より好ましくは6～10である。

[0022] アリール基は、置換基を有していてもよく、例えば、フェニル基、1-ナフ

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

[0023] 「アルコキシ基」は、直鎖及び分岐のいずれでもよい。直鎖のアルコキシ基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常1~40であり、好ましくは4~10である。分岐のアルコキシ基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3~40であり、好ましくは4~10である。

[0024] アルコキシ基は、置換基を有していてもよく、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロピルオキシ基、イソプロピルオキシ基、ブチルオキシ基、イソブチルオキシ基、tert-ブチルオキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、ヘプチルオキシ基、オクチルオキシ基、2-エチルヘキシルオキシ基、ノニルオキシ基、デシルオキシ基、3,7-ジメチルオクチルオキシ基、ラウリルオキシ基、及び、これらの基における水素原子が、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、フッ素原子等で置換された基が挙げられる。

[0025] 「シクロアルコキシ基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3~40であり、好ましくは4~10である。

[0026] シクロアルコキシ基は、置換基を有していてもよく、例えば、シクロヘキシルオキシ基が挙げられる。

[0027] 「アリールオキシ基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常6~60であり、好ましくは6~48である。

[0028] アリールオキシ基は、置換基を有していてもよく、例えば、フェノキシ基、1-ナフチルオキシ基、2-ナフチルオキシ基、1-アントラセニルオキシ基、9-アントラセニルオキシ基、1-ピレニルオキシ基、及び、これらの基における水素原子が、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコ

キシ基、フッ素原子等で置換された基が挙げられる。

[0029] 「 p 価の複素環基」 (p は、1 以上の整数を表す。) とは、複素環式化合物から、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合している水素原子のうち p 個の水素原子を除いた残りの原子団を意味する。 p 価の複素環基の中でも、芳香族複素環式化合物から、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合している水素原子のうち p 個の水素原子を除いた残りの原子団である「 p 価の芳香族複素環基」が好ましい。

[0030] 「芳香族複素環式化合物」は、オキサジアゾール、チアジアゾール、チアゾール、オキサゾール、チオフェン、ピロール、ホスホール、フラン、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、トリアジン、ピリダジン、キノリン、イソキノリン、カルバゾール、ジベンゾホスホール等の複素環自体が芳香族性を示す化合物、及び、フェノキサジン、フェノチアジン、ジベンゾボロール、ジベンゾシロール、ベンゾピラン等の複素環自体は芳香族性を示さなくとも、複素環に芳香環が縮環されている化合物を意味する。

[0031] 1 価の複素環基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常、2~60であり、好ましくは4~20である。

[0032] 1 価の複素環基は、置換基を有していてもよく、例えば、チエニル基、ピロリル基、フリル基、ピリジル基、ペペリジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、及び、これらの基における水素原子が、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基等で置換された基が挙げられる。

[0033] 「ハロゲン原子」とは、フッ素原子、塩素原子、臭素原子又はヨウ素原子を示す。

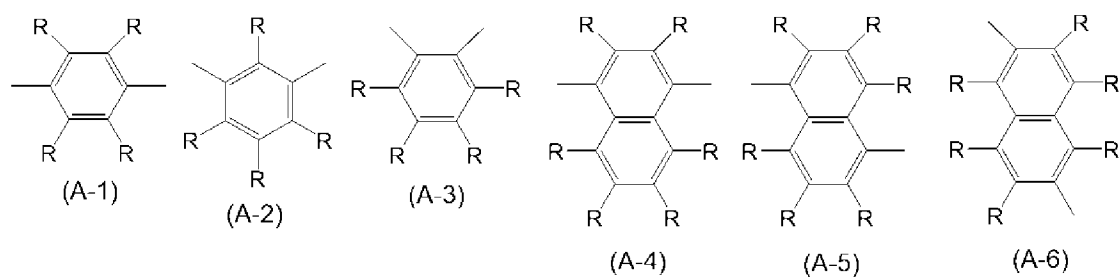
[0034] 「アミノ基」は、置換基を有していてもよく、置換アミノ基が好ましい。アミノ基が有する置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1 価の複素環基が好ましい。

[0035] 置換アミノ基としては、例えば、ジアルキルアミノ基、ジシクロアルキルアミノ基及びジアリールアミノ基が挙げられる。

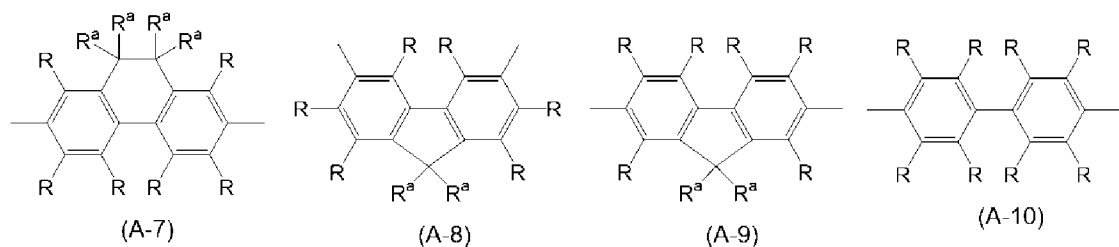
- [0036] アミノ基としては、例えば、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジフェニルアミノ基、ビス(4-メチルフェニル)アミノ基、ビス(4-tert-ブチルフェニル)アミノ基、ビス(3,5-ジ-tert-ブチルフェニル)アミノ基が挙げられる。
- [0037] 「アルケニル基」は、直鎖及び分岐のいずれでもよい。直鎖のアルケニル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常2～30であり、好ましくは3～20である。分岐のアルケニル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3～30であり、好ましくは4～20である。
- [0038] 「シクロアルケニル基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常3～30であり、好ましくは4～20である。
- [0039] アルケニル基及びシクロアルケニル基は、置換基を有していてもよく、例えば、ビニル基、1-プロペニル基、2-プロペニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、3-ペンテニル基、4-ペンテニル基、1-ヘキセニル基、5-ヘキセニル基、7-オクテニル基、及び、これらの基が置換基を有する基が挙げられる。
- [0040] 「アルキニル基」は、直鎖及び分岐のいずれでもよい。アルキニル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常2～20であり、好ましくは3～20である。分岐のアルキニル基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常4～30であり、好ましくは4～20である。
- [0041] 「シクロアルキニル基」の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常4～30であり、好ましくは4～20である。
- [0042] アルキニル基及びシクロアルキニル基は、置換基を有していてもよく、例えば、エチニル基、1-プロピニル基、2-プロピニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、3-ペンチニル基、4-ペンチニル基、1-ヘキシニル基、5-ヘキシニル基、及び、これらの基が置換基を有する基が挙げられる。
- [0043] 「アリーレン基」は、芳香族炭化水素から環を構成する炭素原子に直接結合する水素原子2個を除いた残りの原子団を意味する。アリーレン基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常、6～60であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

[0044] アリーレン基は、置換基を有していてもよく、例えば、フェニレン基、ナフタレンジイル基、アントラセンジイル基、フェナントレンジイル基、ジヒドロフェナントレンジイル基、ナフタセンジイル基、フルオレンジイル基、ピレンジイル基、ペリレンジイル基、クリセンジイル基、及び、これらの基が置換基を有する基が挙げられ、好ましくは、式(A-1)～式(A-20)で表される基である。アリーレン基は、これらの基が複数結合した基を含む。

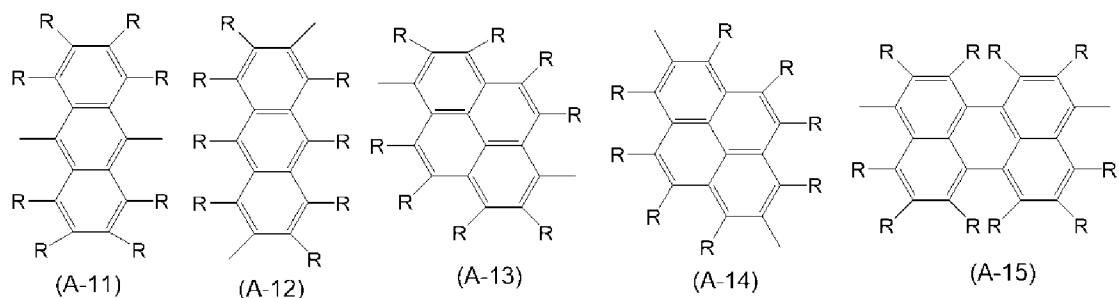
[0045] [化13]



[0046] [化14]

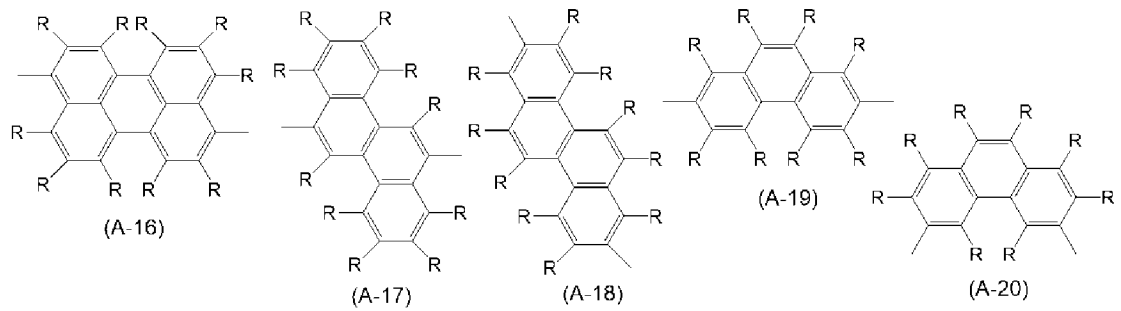


[0047] [化15]



[0048]

[化16]

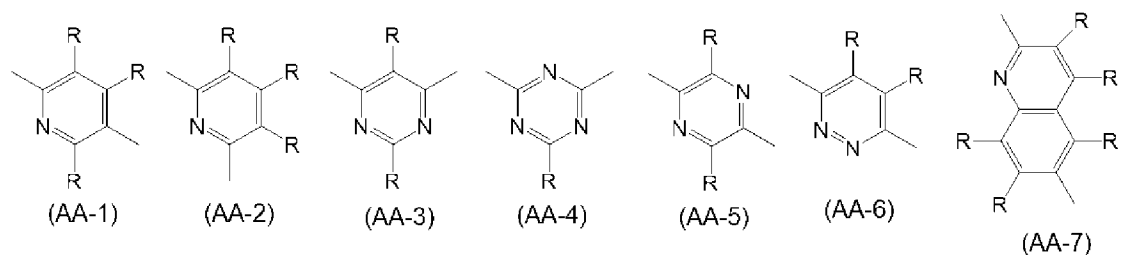


[式中、R及びR^aは、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基を表す。複数存在するR及びR^aは、各々、同一でも異なってもよく、R^a同士は互いに結合して、それぞれが結合する原子と共に環を形成していてもよい。]

[0049] 2価の複素環基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常、2~60であり、好ましくは、3~20であり、より好ましくは、4~15である。

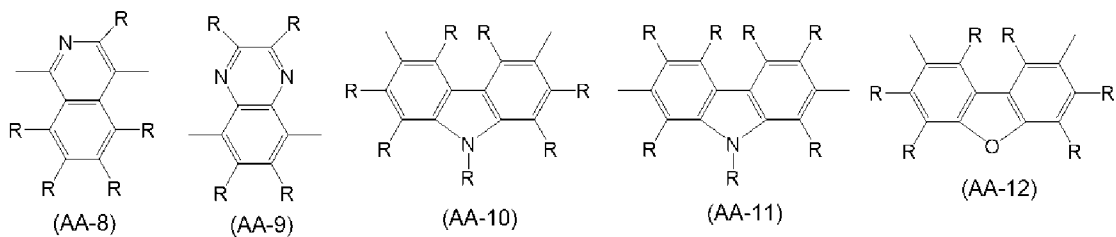
[0050] 2価の複素環基は、置換基を有していてもよく、例えば、ピリジン、ジアザベンゼン、トリアジン、アザナフタレン、ジアザナフタレン、カルバゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ジベンゾシロール、フェノキサジン、フェノチアジン、アクリジン、ジヒドロアクリジン、フラン、チオフェン、アゾール、ジアゾール、トリアゾールから、環を構成する炭素原子又はヘテロ原子に直接結合している水素原子のうち2個の水素原子を除いた2価の基が挙げられ、好ましくは、式(AA-1)~式(AA-34)で表される基である。2価の複素環基は、これらの基が複数結合した基を含む。

[0051] [化17]

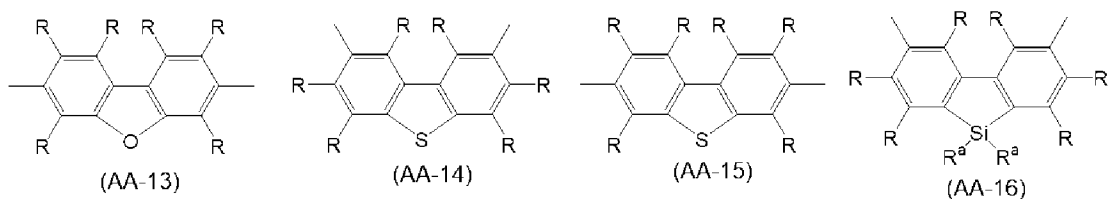


[0052]

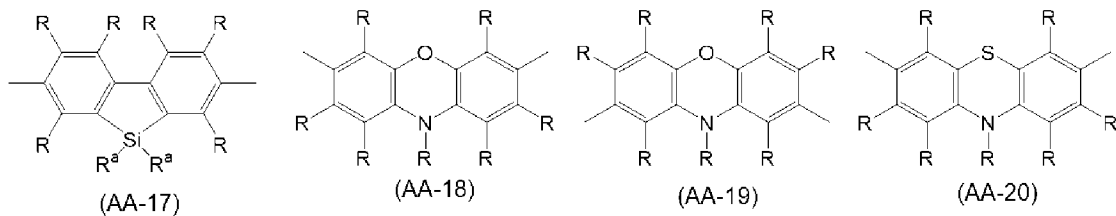
[化18]



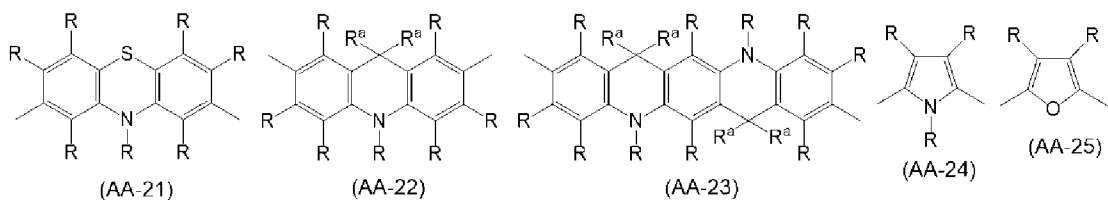
[0053] [化19]



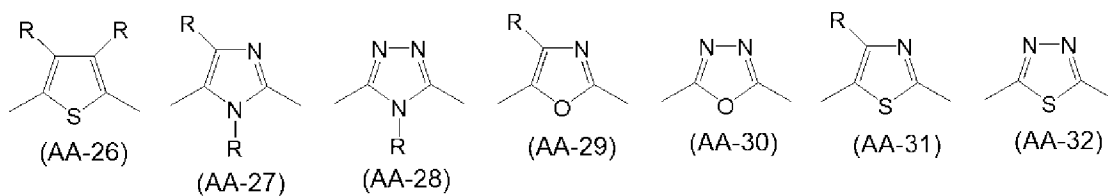
[0054] [化20]



[0055] [化21]

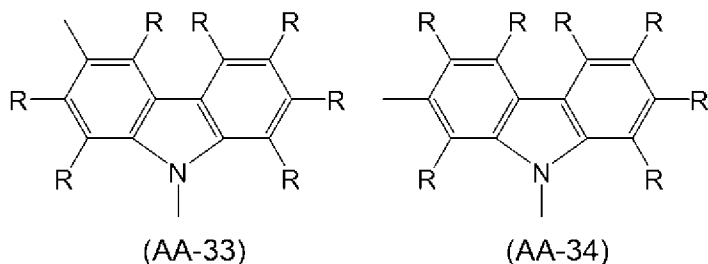


[0056] [化22]



[0057]

[化23]

[式中、R及びR^aは、前記と同じ意味を表す。]

[0058] 「置換基」とは、ハロゲン原子、シアノ基、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、1価の複素環基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリーロキシ基、アミノ基、置換アミノ基、アルケニル基、シクロアルケニル基、アルキニル基又はシクロアルキニル基を表す。

[0059] <高分子化合物>

本発明の高分子化合物は、前記式(1)で表される化合物の残基を有する構成単位と、前記式(1)で表される化合物の残基を有さない構成単位とを含む。式(1)で表される化合物の残基とは、式(1)で表される化合物の骨格構造(即ち、置換基以外の部分)から水素原子を1個又は2個以上除いた基である。式(1)で表される化合物の残基は、高分子化合物の主鎖、側鎖及び末端のいずれに存在していてもよい。式(1)で表される化合物の残基を有する構成単位及び式(1)で表される化合物の残基を有さない構成単位は、各々、高分子化合物中に、1種のみ含まれていても2種以上含まれていてもよい。

[0060] [式(1)で表される化合物]

A環、B環及びC環で表される芳香族炭化水素環の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めなくて、通常、6~60であり、好ましくは6~18であり、より好ましくは6~10であり、特に好ましくは6である。芳香族炭化水素環としては、例えば、ベンゼン、フルオレン、ナフタレン、アントラセン、フェナントレンが挙げられ、好ましくはベンゼンである。

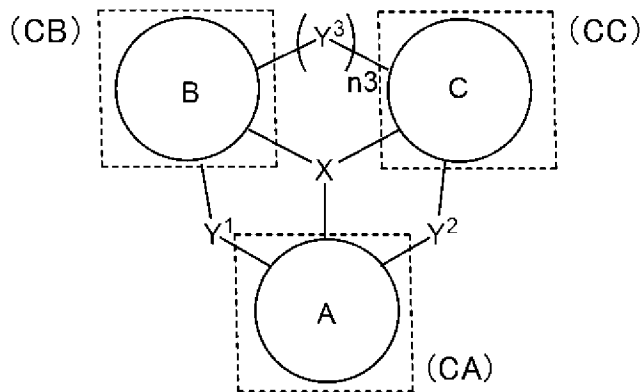
[0061] A環、B環及びC環で表される芳香族複素環の炭素原子数は、置換基の炭

素原子数を含めないで、通常、2～60であり、好ましくは3～20であり、より好ましくは4～15である。芳香族複素環としては、例えば、ピリジン、ジアザベンゼン、アザナフタレン、ジアザナフタレン、カルバゾール、インドロカルバゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ジベンゾシロール、フェノキサジン、フェノチアジン、アクリジン、ジヒドロアクリジン、フラン、チオフェンが挙げられる。

[0062] A環、B環、及びC環が有していてもよい置換基としては、本発明の発光素子の輝度寿命が優れるので、好ましくは、アルキル基、アリール基、1価の複素環基、又は置換アミノ基であり、より好ましくは、アルキル基、アリール基、又は置換アミノ基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0063] 次に、A環、B環及びC環のより詳しい構造（CA、CB及びCC）を説明する。

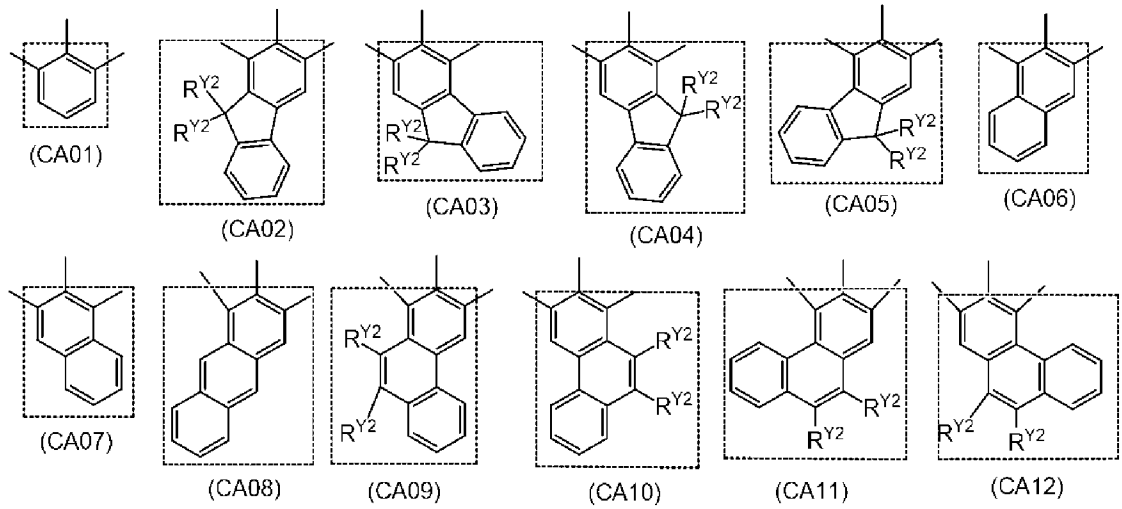
[0064] [化24]



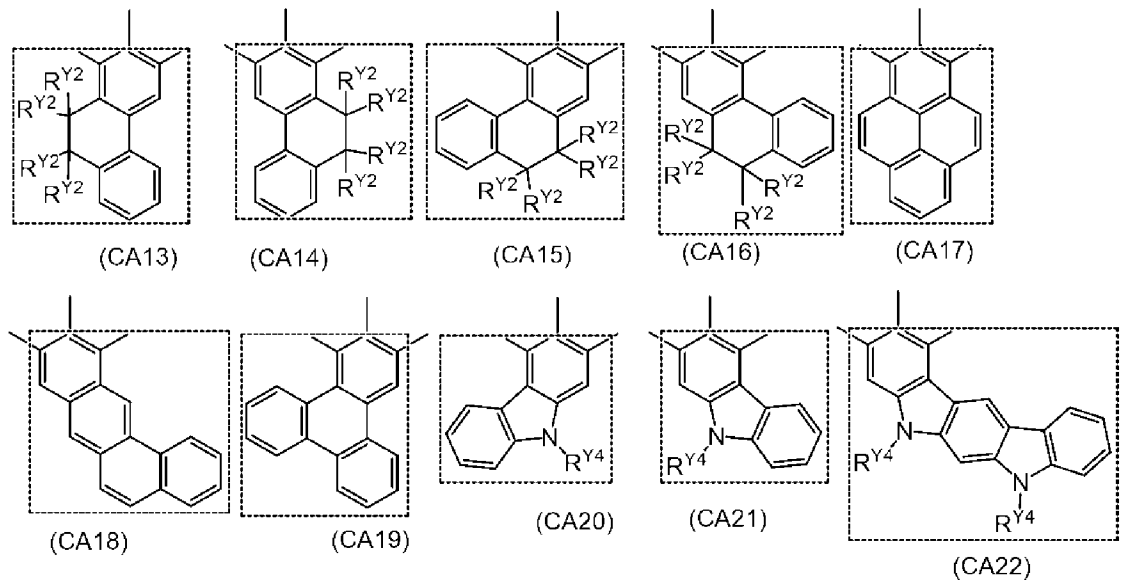
[0065] A環の詳しい構造（CA）としては、例えば、式(CA01)～式(CA38)で表される構造が挙げられ、本発明の発光素子の輝度寿命が優れるので、好ましくは、式(CA01)～式(CA19)で表される構造であり、より好ましくは、式(CA01)～式(CA05)で表される構造であり、更に好ましくは、式(CA01)で表される構造である。

[0066]

[化25]

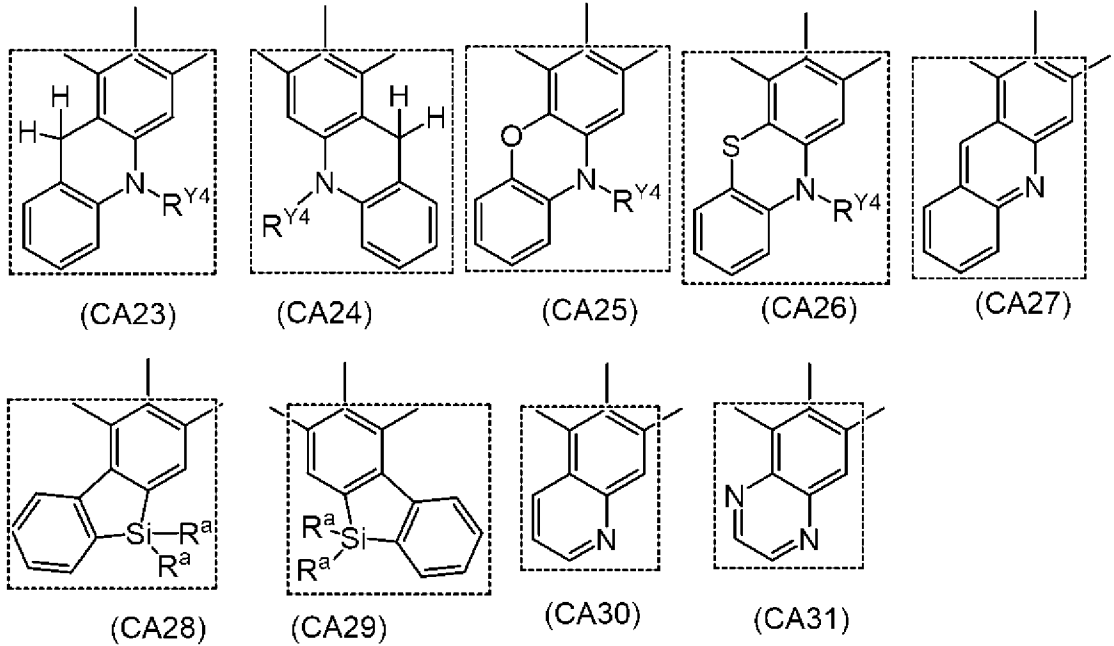


[0067] [化26]

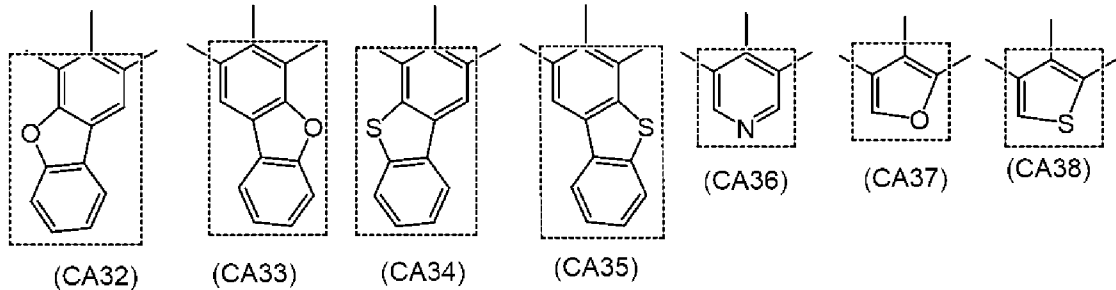


[0068]

[化27]



[0069] [化28]



[式中、

R^a は、前記と同じ意味を表す。

水素原子は、A環が有していてもよい置換基に置き換わっていてもよい。

R^{Y2} は、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 $-C(R^{Y2})_2-$ 、 $-CR^{Y2}=CR^{Y2}-$ 、又は $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ で表される基において、複数存在する R^{Y2} のうち、2個の R^{Y2} が互いに結合して環を形成していてもよい。複数存在する R^{Y2} は、同一でも異なっていてもよい。

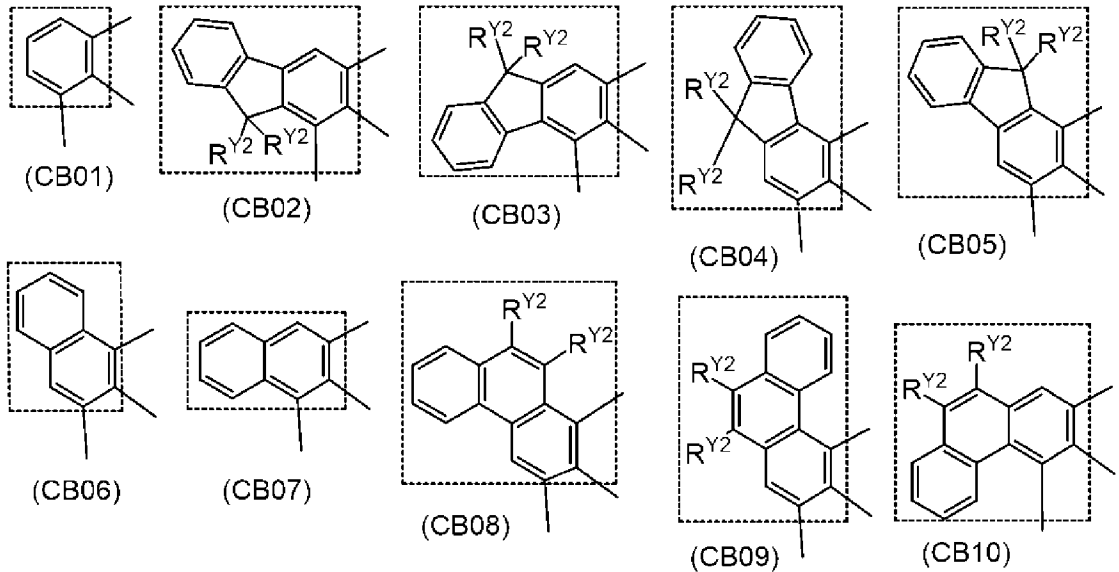
R^{Y4} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基

を有していてもよい。R^{Y4}が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

[0070] R^{Y2}は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

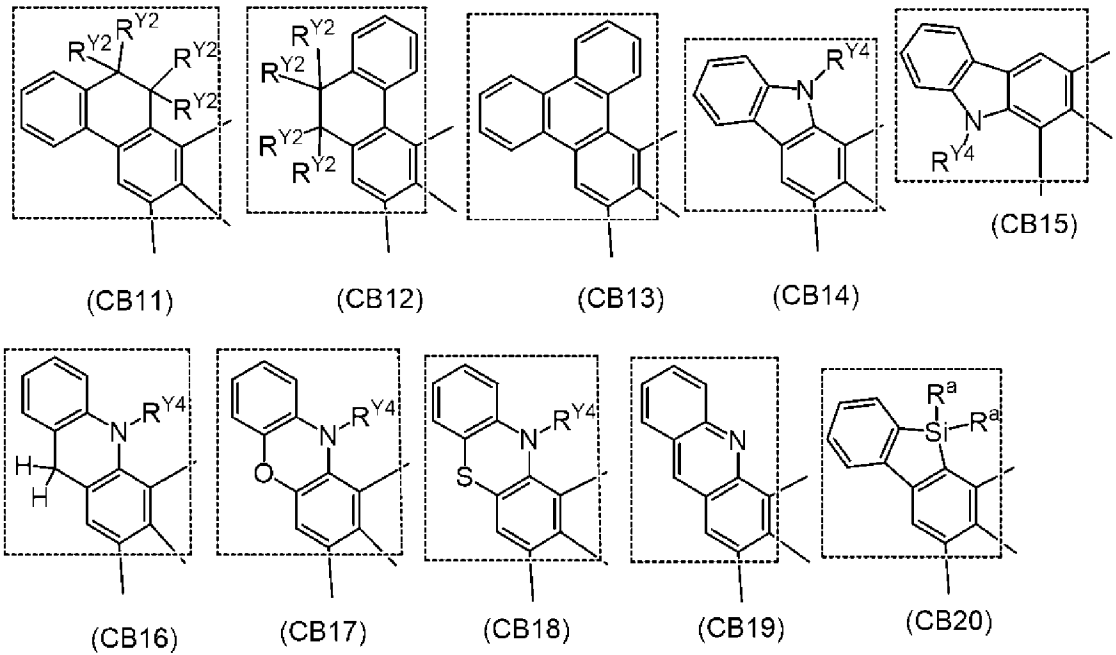
[0071] B環の詳しい構造 (CB) としては、例えば、式(CB01)~式(CB24)で表される構造が挙げられ、素子寿命が優れるので、好ましくは、式(CB01)~式(CB13)で表される構造であり、より好ましくは、式(CB01)~式(CB05)で表される構造であり、特に好ましくは、式(CB01)で表される構造である。

[0072] [化29]

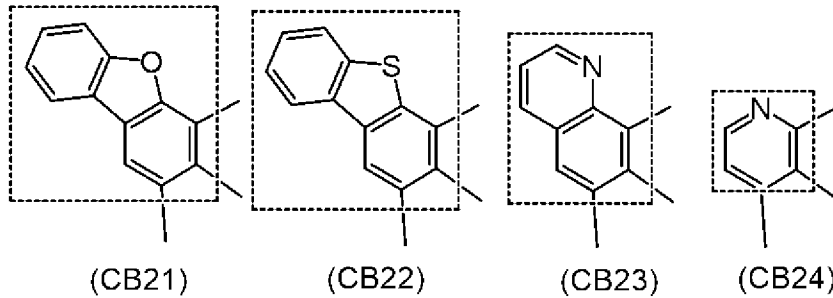


[0073]

[化30]



[0074] [化31]

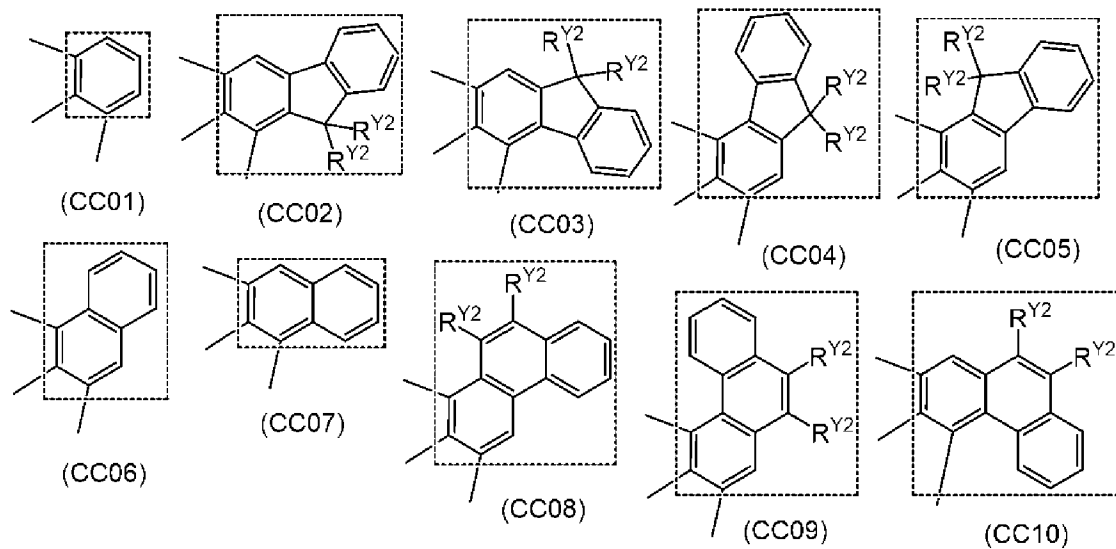


[式中、R^{Y2}、R^{Y4}及びR^aは、前記と同じ意味を表す。水素原子は、B環が有していてもよい置換基に置き換わっていてもよい。]

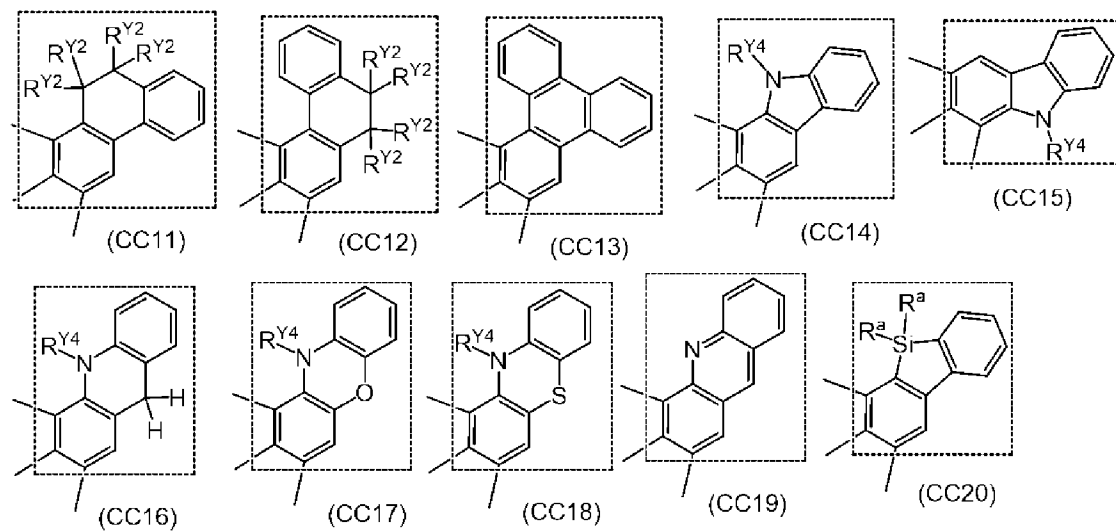
[0075] C環の詳しい構造(CC)としては、例えば、式(CC01)~式(CC24)で表される構造が挙げられ、好ましくは、式(CC01)~式(CC13)で表される構造であり、より好ましくは、式(CC01)~式(CC05)で表される構造であり、更に好ましくは、式(CC01)で表される構造である。

[0076]

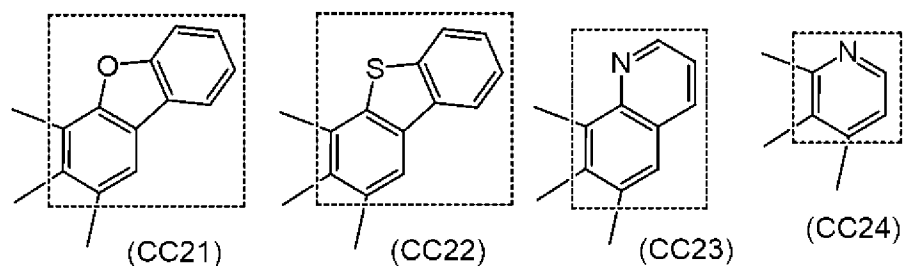
[化32]



[0077] [化33]



[0078] [化34]



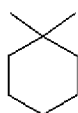
[式中、 R^{Y2} 、 R^{Y4} 及び R^a は、前記と同じ意味を表す。水素原子は、C環が有している場合でもよい置換基に置き換わっていてもよい。]

[0079] 式 (CA02) ~ 式 (CA05)、式 (CB02) ~ 式 (CB05)、及び式 (CC02) ~ 式 (CC05) において、 $-C(R^{Y2})_2-$ で表される基中の 2 個の R^{Y2} の組み合わせは、好ましくは両方がアルキル基若しくはシクロアルキル基、両方がアリール基、両方が 1 価の複素環基、又は、一方がアルキル基若しくはシクロアルキル基で他方がアリール基若しくは 1 価の複素環基であり、より好ましくは一方がアルキル基若しくはシクロアルキル基で他方がアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。 $-C(R^{Y2})_2-$ で表される基における 2 個の R^{Y2} が互いに結合して、該炭素原子と共に環を形成する場合、 $-C(R^{Y2})_2-$ で表される基としては、好ましくは式 (Y-A1) ~ 式 (Y-A5) で表される基であり、より好ましくは式 (Y-A4) で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

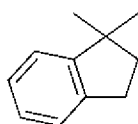
[0080] [化35]



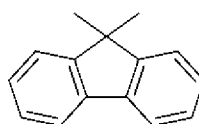
(Y-A1)



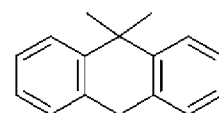
(Y-A2)



(Y-A3)



(Y-A4)

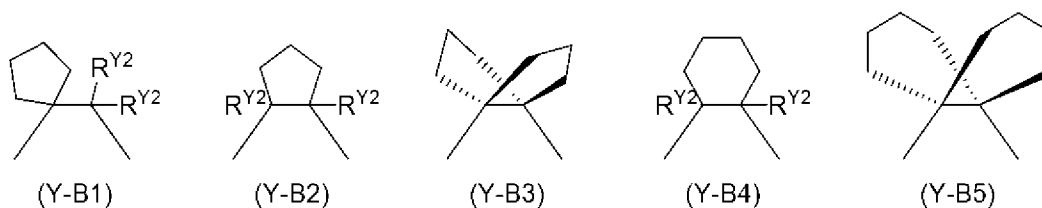


(Y-A5)

[0081] 式 (CA09) ~ 式 (CA12)、式 (CB08) ~ 式 (CB10)、及び式 (CC08) ~ 式 (CC10) において、 $-C(R^{Y2})=C(R^{Y2})-$ で表される基中の 2 個の R^{Y2} の組み合わせは、好ましくは両方がアルキル基若しくはシクロアルキル基、又は、一方がアルキル基若しくはシクロアルキル基で他方がアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0082] 式 (CA13) ~ 式 (CA16)、式 (CB11)、式 (CB12)、式 (CC11)、及び式 (CC12) において、 $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ で表される基中の 4 個の R^{Y2} は、好ましくは置換基を有していてもよいアルキル基又は置換基を有していてもよいシクロアルキル基である。複数ある R^{Y2} は互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子と共に環を形成していてもよく、 R^{Y2} が環を形成する場合、 $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ で表される基は、好ましくは式 (Y-B1) ~ 式 (Y-B5) で表される基であり、より好ましくは式 (Y-B3) で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0083] [化36]



[式中、 R^{Y2} は前記と同じ意味を表す。]

[0084] 式(CA20)～式(CA26)、式(CB14)～式(CB18)、及び式(CC14)～式(CC18)において、 R^{Y4} は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基又は1価の複素環基であり、より好ましくはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0085] 本発明の高分子化合物において、A環、B環及びC環の組み合わせとしては、本発明の発光素子の輝度寿命が優れるので、好ましくは、A環が式(CA01)～式(CA05)で表される構造であり、B環が式(CB01)～式(CB05)で表される構造であり、且つ、C環が式(CC01)～式(CC05)で表される構造であり、より好ましくは、A環が式(CA01)で表される構造であり、B環が式(CB01)～式(CB05)で表される構造であり、且つ、C環が式(CC01)～式(CC05)で表される構造であり、更に好ましくは、A環が式(CA01)で表される構造であり、B環が式(CB01)で表される構造であり、且つ、C環が式(CC01)で表される構造である。

[0086] 式(1)中、Xは、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは、ホウ素原子、リン原子、 $P=O$ 、又はアルミニウム原子であり、より好ましくは、ホウ素原子、又は $P=O$ であり、更に好ましくはホウ素原子である。

[0087] n は、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは0である。

[0088] 式(1)中、 Y^1 、 Y^2 及び Y^3 は、本発明の高分子化合物の安定性が良好になるので、好ましくは、 $N-R_y$ 、又は硫黄原子であり、より好ましくは、N

—R_yである。

[0089] 式(1)中、Y¹、Y²及びY³の少なくとも一つは、本発明の高分子化合物の安定性が良好になるので、N—R_yであることが好ましく、Y¹、Y²及びY³の全てがN—R_yであることがより好ましい。但し、n₃が0である場合、Y¹及びY²の双方がN—R_yである。

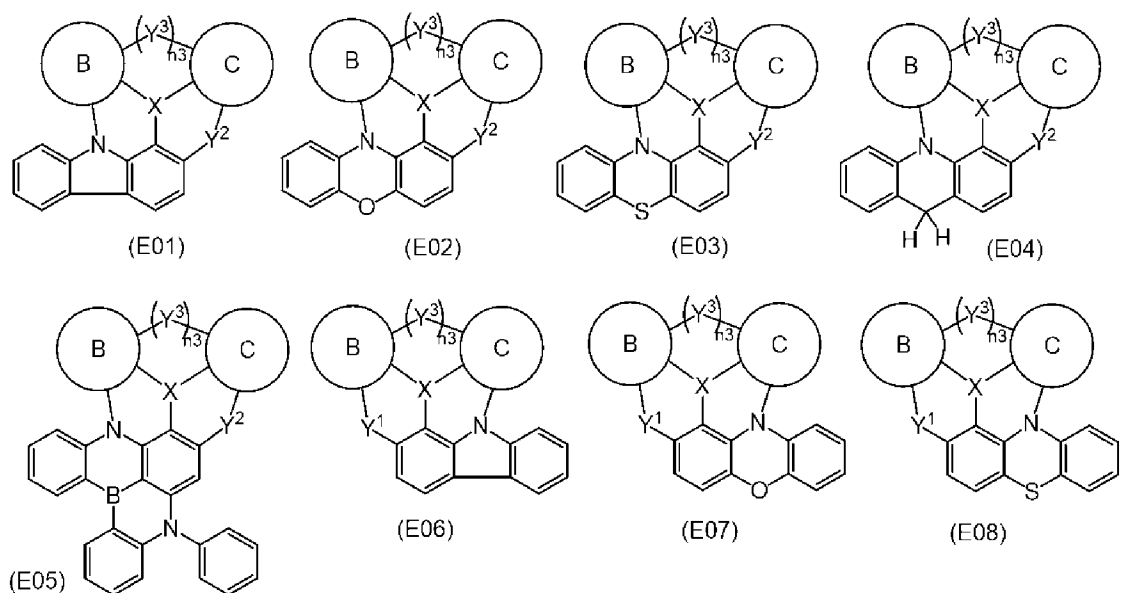
[0090] R_yは、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは、水素原子、置換基を有していてもよいアリール基、又は、置換基を有していてもよい1価の複素環基であり、より好ましくは、水素原子、又は、置換基を有していてもよいアリール基であり、更に好ましくは、置換基を有していてもよいアリール基である。

[0091] R_yが連結基を介して、A環、B環又はC環と結合している場合、連結基としては、例えば、—O—、—S—、—CH₂—等の2価の基、ホウ素原子等の3価の基が挙げられる。

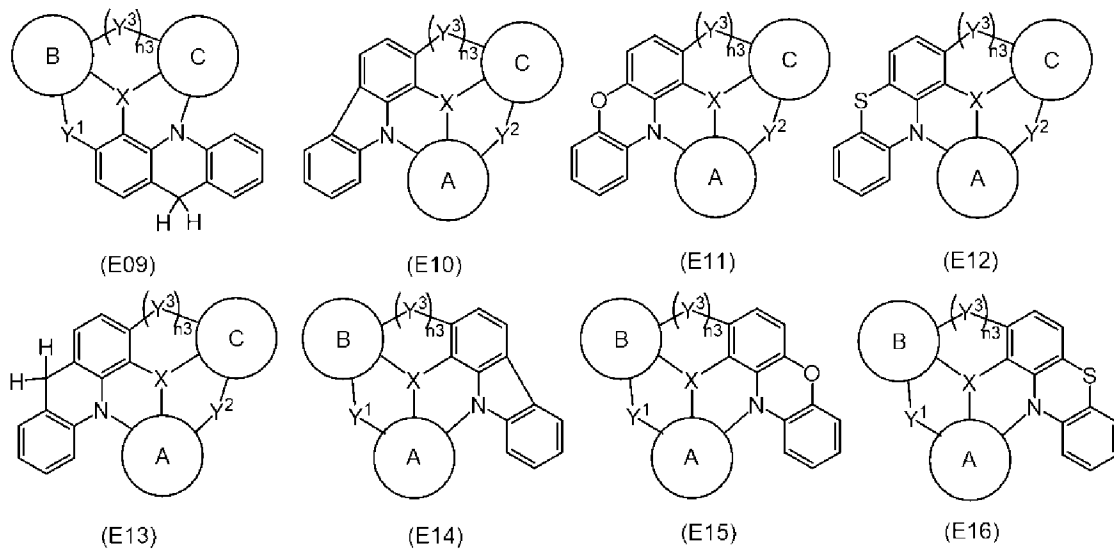
[0092] R_yが3価の基を介してA環、B環又はC環と結合する場合、通常、A環とA環上の置換基と連結するか、B環とB環上の置換基と連結するか、C環とC環上の置換基と連結する。

[0093] R_yが直接又は連結基を介してA環、B環又はC環と結合した構造としては、例えば、式(E01)～式(E16)で表される構造が挙げられる。

[0094] [化37]



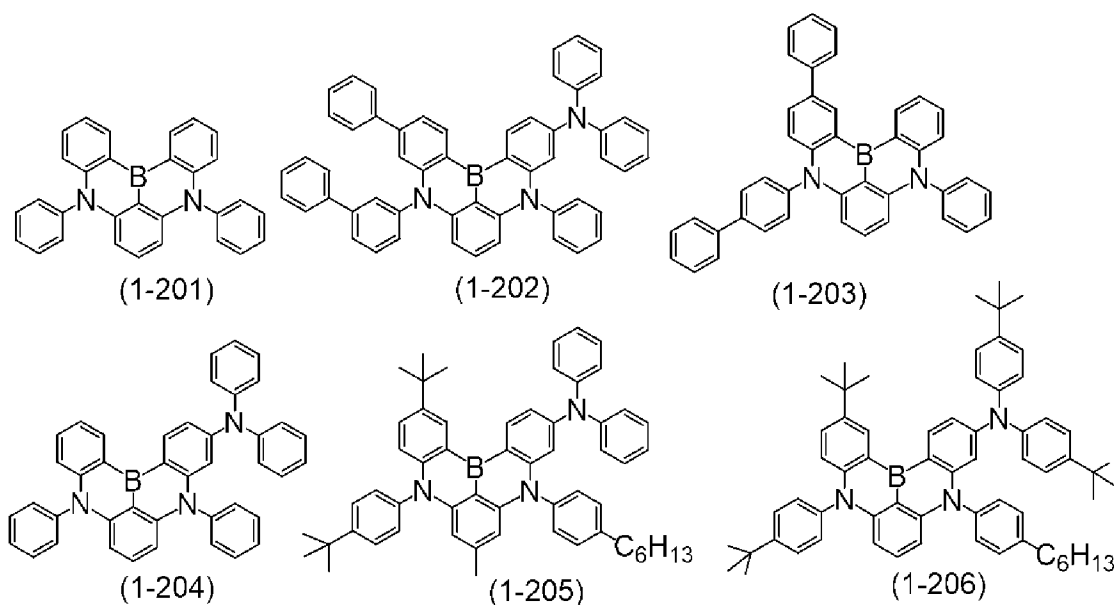
[0095] [化38]



[式中、A環、B環、C環、X、Y²、Y³、及びn₃は、前記と同じ意味を表す。]

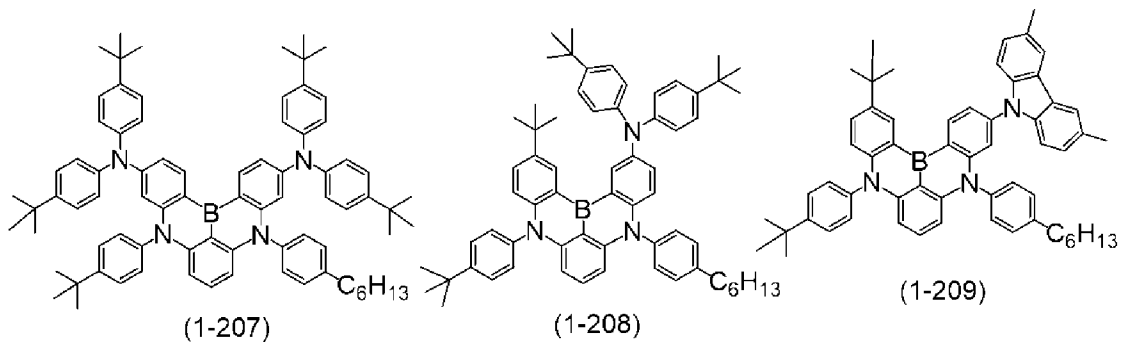
[0096] 式(1)で表される化合物としては、式(1-201)~式(1-220)、式(1-301)~式(1-305)、及び、式(1-401)~式(1-432)で表される化合物が挙げられる。

[0097] [化39]

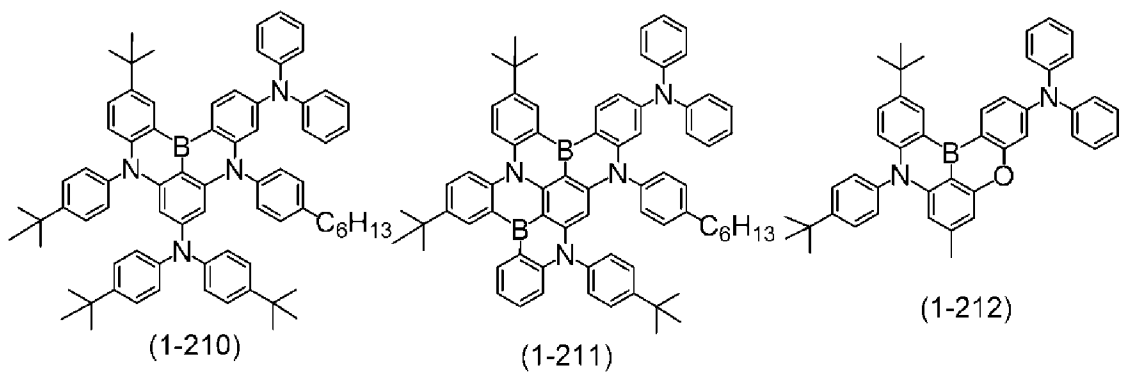


[0098]

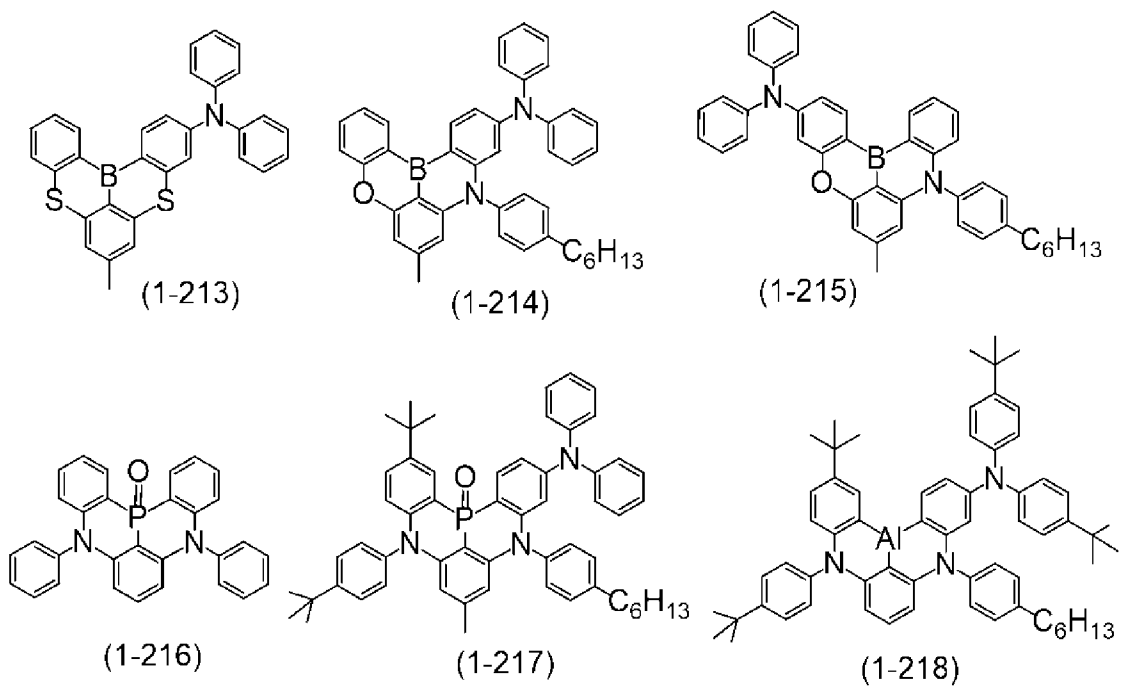
[化40]



[0099] [化41]

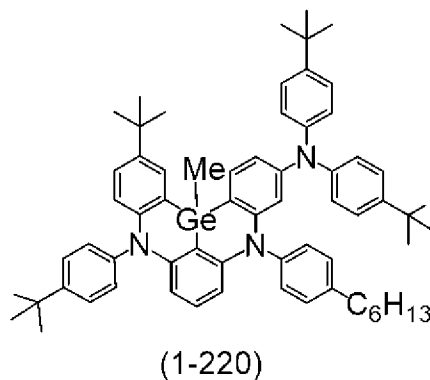
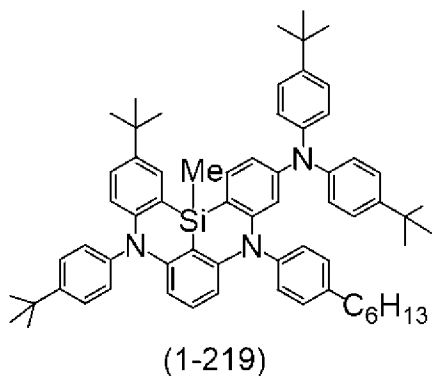


[0100] [化42]

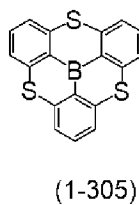
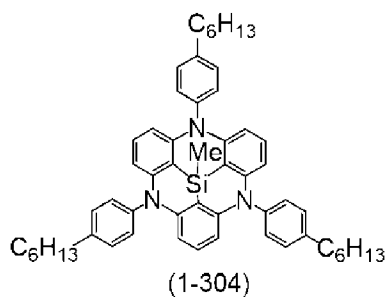
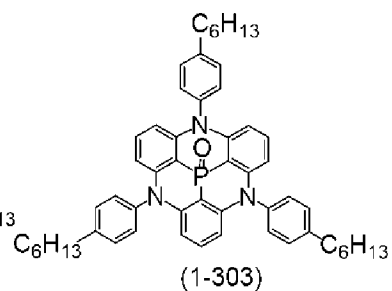
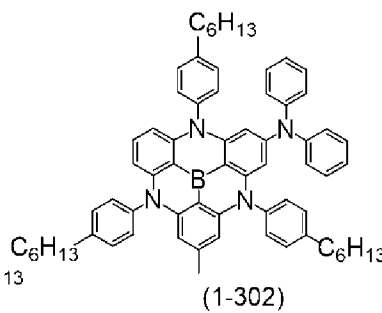
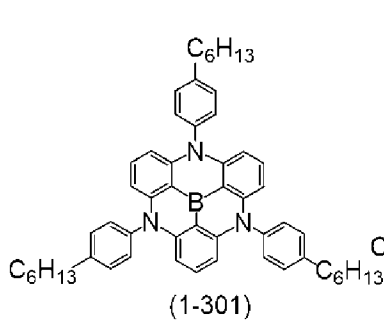


[0101]

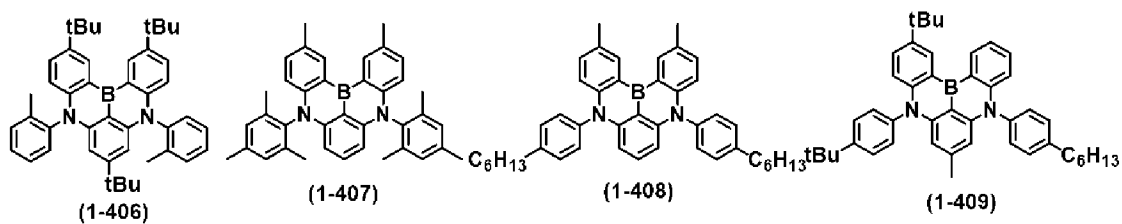
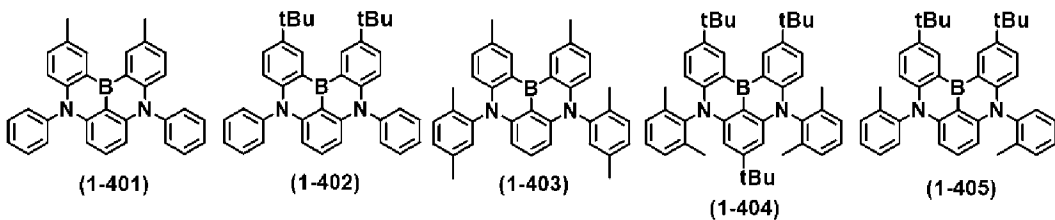
[化43]



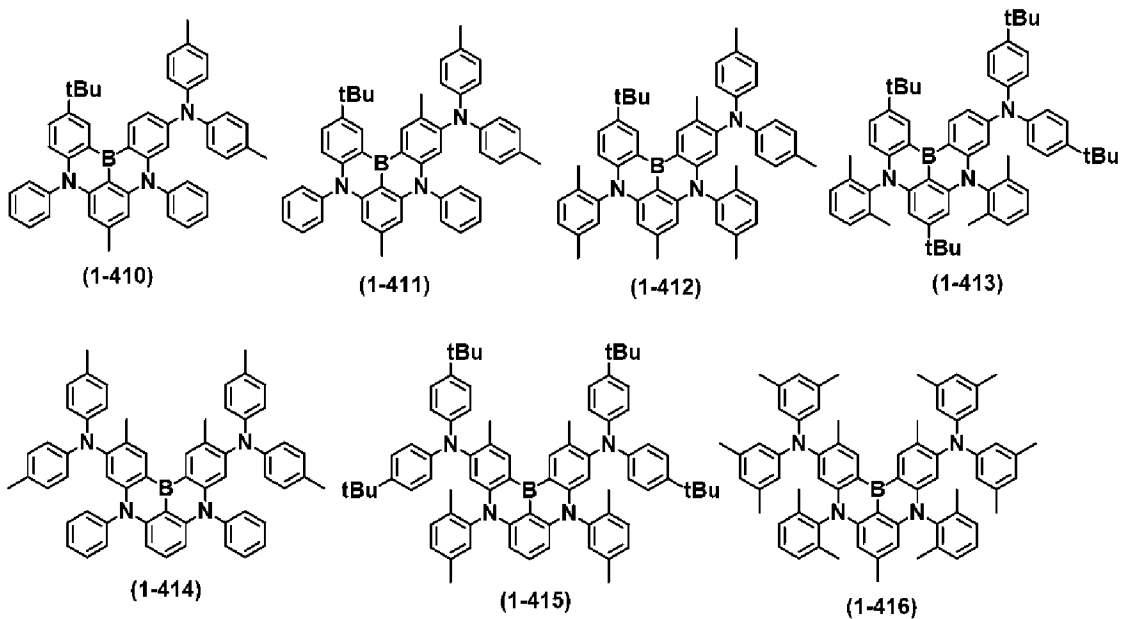
[0102] [化44]



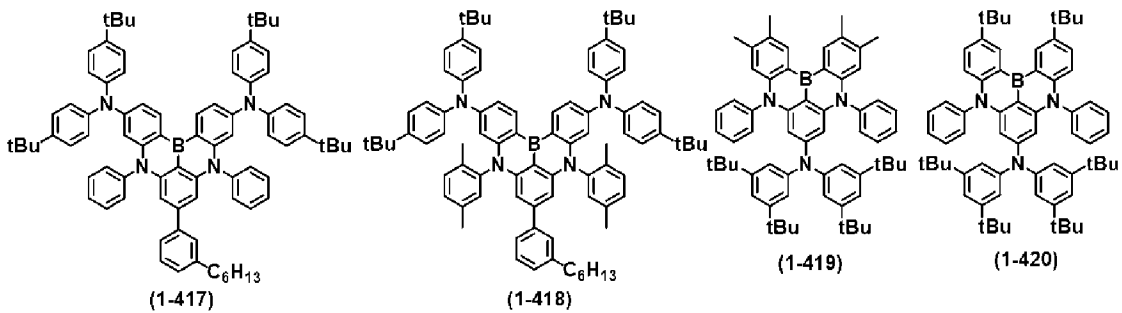
[0103] [化45]



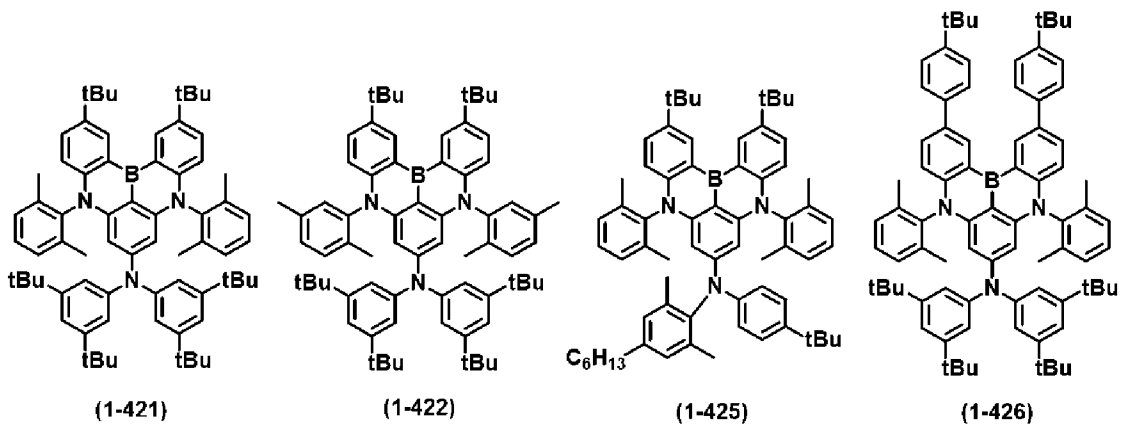
[0104] [化46]



[0105] [化47]

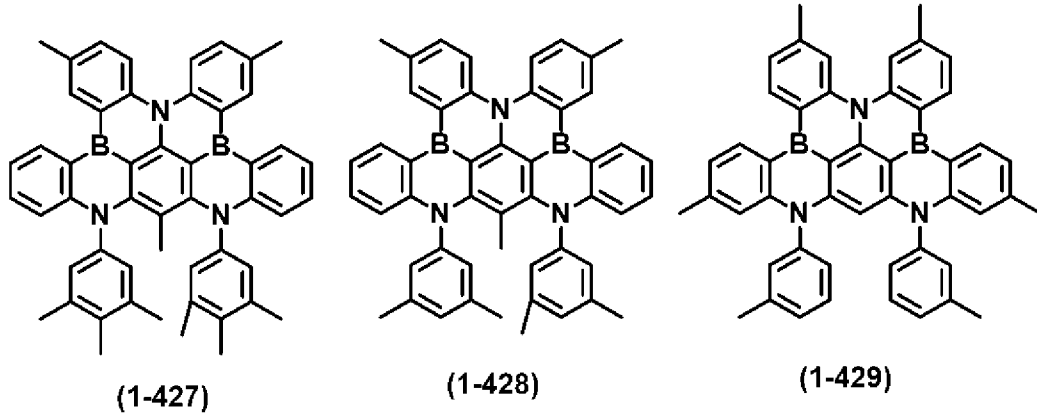


[0106] [化48]

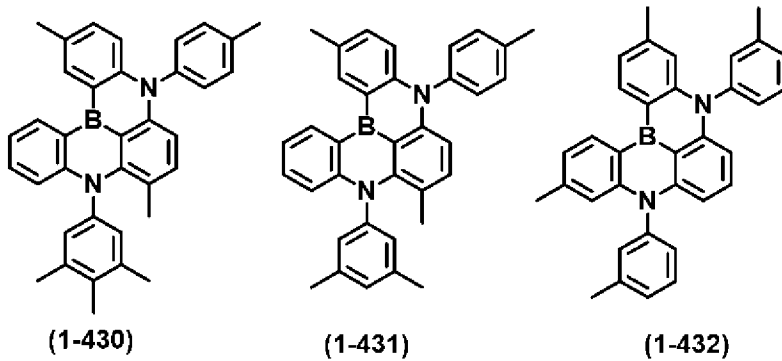


[0107]

[化49]



[0108] [化50]



[0109] 式(1)で表される化合物の残基を有する構成単位は、式(2)、式(2')又は式(3)で表される構成単位であることが好ましい。

[0110] [式(2)で表される構成単位]

nA は、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは0又は1であり、より好ましくは0である。

[0111] n は、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは1である。

[0112] Ar^3 は、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは置換基を有していてもよい芳香族炭化水素基である。

[0113] Ar^3 で表される芳香族炭化水素基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めなくて、通常6~60であり、好ましくは6~30であり、より好ましくは6~18である。

[0114] Ar^3 で表される芳香族炭化水素基の n 個の置換基を除いたアリーレン基部

分としては、好ましくは、式(A-1)～式(A-20)で表される基であり、より好ましくは、式(A-1)、式(A-2)、式(A-6)～式(A-10)、式(A-19)又は式(A-20)で表される基であり、更に好ましくは、式(A-1)、式(A-2)、式(A-7)、式(A-9)又は式(A-19)で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0115] $A r^3$ で表される複素環基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないので、通常2～60であり、好ましくは3～30であり、より好ましくは4～18である。

[0116] $A r^3$ で表される複素環基のn個の置換基を除いた2価の複素環基部分としては、好ましくは、式(AA-1)～式(AA-34)で表される基である。

[0117] $A r^3$ で表される芳香族炭化水素基及び複素環基は置換基を有していてもよく、置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、1価の複素環基及びシアノ基が挙げられる。

[0118] L^A で表されるアルキレン基は、置換基の炭素原子数を含めないので、通常1～20であり、好ましくは1～15であり、より好ましくは1～10である。 L^A で表されるシクロアルキレン基は、置換基の炭素原子数を含めないので、通常3～20である。

[0119] アルキレン基及びシクロアルキレン基は、置換基を有していてもよく、例えば、メチレン基、エチレン基、プロピレン基、ブチレン基、ヘキシレン基、シクロヘキシレン基、オクチレン基が挙げられる。アルキレン基及びシクロアルキレン基が有していてもよい置換基としては、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ハロゲン原子及びシアノ基が挙げられる。

[0120] L^A で表されるアリーレン基は、置換基を有していてもよい。アリーレン基としては、o-フェニレン、m-フェニレン、p-フェニレンが挙げられる。アリーレン基が有していてもよい置換基としては、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、ハロゲン原子、シアノ基が挙げられる。

- [0121] R' で表されるアリール基としては、フェニル基、ナフチル基、及びフルオレニル基が挙げられる。該アリール基が有してもよい置換基としては、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、ハロゲン原子、シアノ基が挙げられる。
- [0122] Qで表される式(1)で表される化合物の残基の定義、好ましい範囲及び例は、上述した式(1)で表される化合物の残基の定義、好ましい範囲及び例と同様である。
- [0123] 式(2)で表される構成単位は、高分子化合物中に、1種のみ含まれていても2種以上含まれていてもよい。
- [0124] [式(2')]で表される構成単位]
m Aは、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは0又は1であり、より好ましくは0である。
- [0125] mは、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは2である。
- [0126] cは、本発明の高分子化合物の製造が容易になり、かつ、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは0である。
- [0127] A r⁵は、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは置換基を有していてもよい芳香族炭化水素基である。
- [0128] A r⁵で表される芳香族炭化水素基のm個の置換基を除いたアリーレン基部分の定義や例は、後述する式(X)におけるA r^{X2}で表されるアリーレン基の定義や例と同じである。
- [0129] A r⁵で表される複素環基のm個の置換基を除いた2価の複素環基部分の定義や例は、後述する式(X)におけるA r^{X2}で表される2価の複素環基部分の定義や例と同じである。
- [0130] A r⁵で表される少なくとも1種の芳香族炭化水素環と少なくとも1種の複素環が直接結合した基のm個の置換基を除いた2価の基の定義や例は、後述する式(X)におけるA r^{X2}で表される少なくとも1種のアリーレン基と少な

くとも1種の2価の複素環基とが直接結合した2価の基の定義や例と同じである。

[0131] $A r^4$ 及び $A r^6$ は、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは置換基を有していてもよいアリーレン基である。

[0132] $A r^4$ 及び $A r^6$ で表されるアリーレン基及び2価の複素環基の定義や例は、各々、後述する式(X)における $A r^{X1}$ 及び $A r^{X3}$ で表されるアリーレン基及び2価の複素環基の定義や例と同じである。

[0133] $A r^4$ 、 $A r^5$ 及び $A r^6$ で表される基は置換基を有していてもよく、置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、1価の複素環基及びシアノ基が挙げられる。

[0134] K^A で表されるアルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2価の複素環基の定義や例は、それぞれ、 L^A で表されるアルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2価の複素環基の定義や例と同じである。

[0135] K^A は、本発明の高分子化合物の製造が容易になるので、好ましくはアルキレン基、アリーレン基、又は $-NR'$ で表される基であり、更に好ましくは、フェニレン基、アルキレン基又は $-N(C_6H_5)-$ であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0136] Q' で表される式(1)で表される化合物の残基の定義、好ましい範囲及び例は、上述した式(1)で表される化合物の残基の定義、好ましい範囲及び例と同様である。

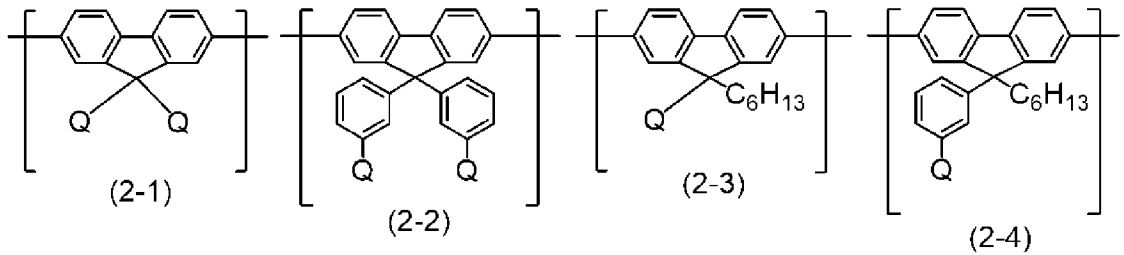
[0137] 式(2')で表される構成単位は、高分子化合物中に、1種のみ含まれていても2種以上含まれていてもよい。

[0138] 本発明の高分子化合物に含まれる式(2)で表される構成単位、及び式(2')で表される構成単位の合計量は、高分子化合物の安定性が優れるので、高分子化合物に含まれる全構成単位の合計量に対して、好ましくは0.1~50モル%であり、より好ましくは0.1~30モル%であり、更に好ましくは0.1~10モル%であり、特に好ましくは0.5~5モル%である。

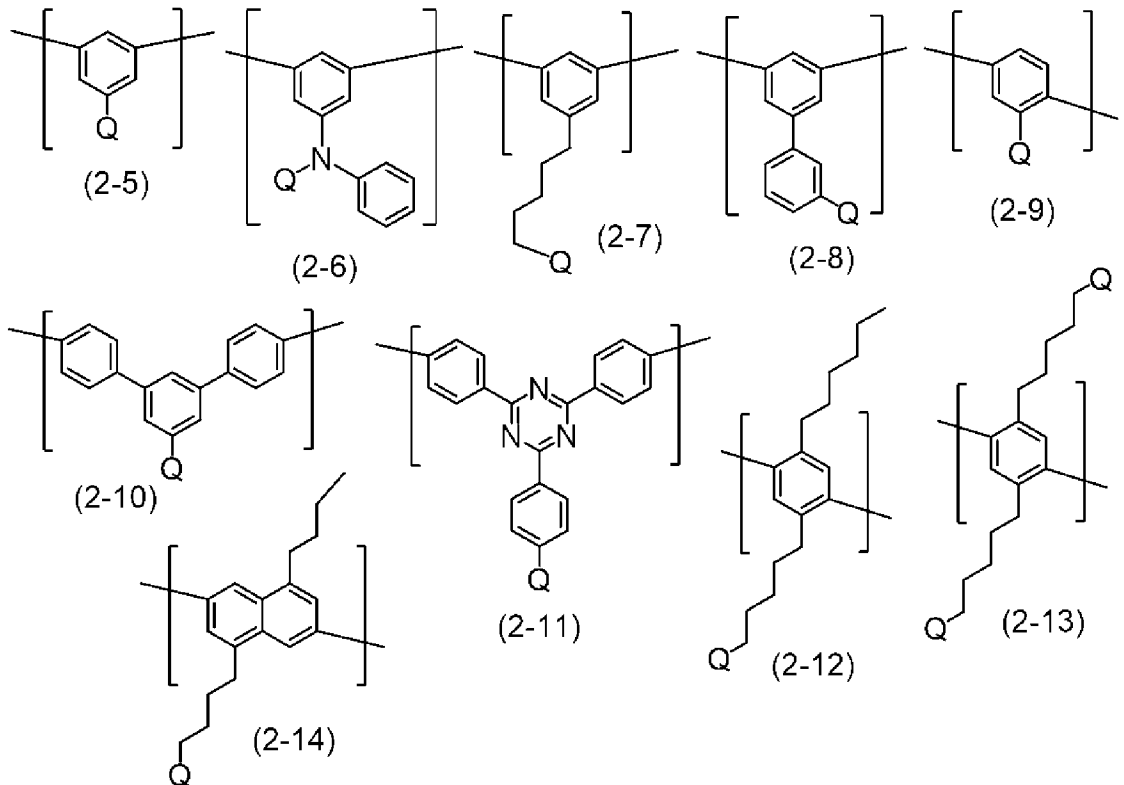
[0139] [式(2)又は式(2')で表される構成単位の好ましい態様]

式(2)で表される構成単位としては、例えば、式(2-1)～式(2-17)で表される構成単位が挙げられる。式(2')で表される構成単位としては、例えば、式(2'-1)～式(2'-14)で表される構成単位が挙げられる。これらの中でも、本発明の発光素子の輝度寿命が優れるので、好ましくは式(2-1)～式(2-14)、又は式(2'-1)～式(2'-9)で表される構成単位であり、より好ましくは式(2-5)～式(2-14)、又は式(2'-1)～式(2'-6)で表される構成単位であり、更に好ましくは式(2-5)～式(2-10)、又は式(2'-1)～式(2'-3)で表される構成単位である。

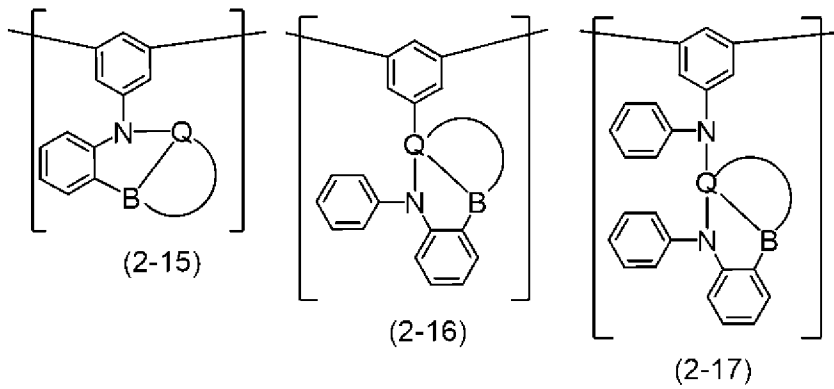
[0140] [化51]



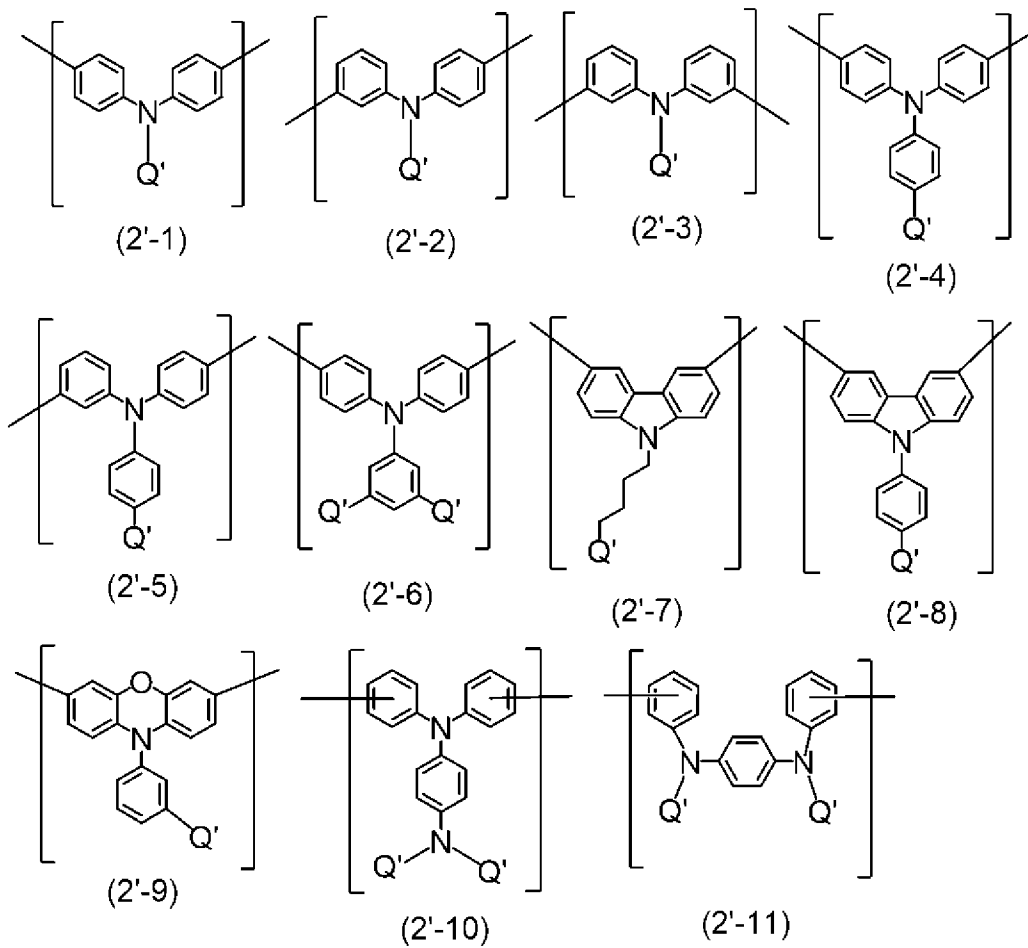
[0141] [化52]



[0142] [化53]

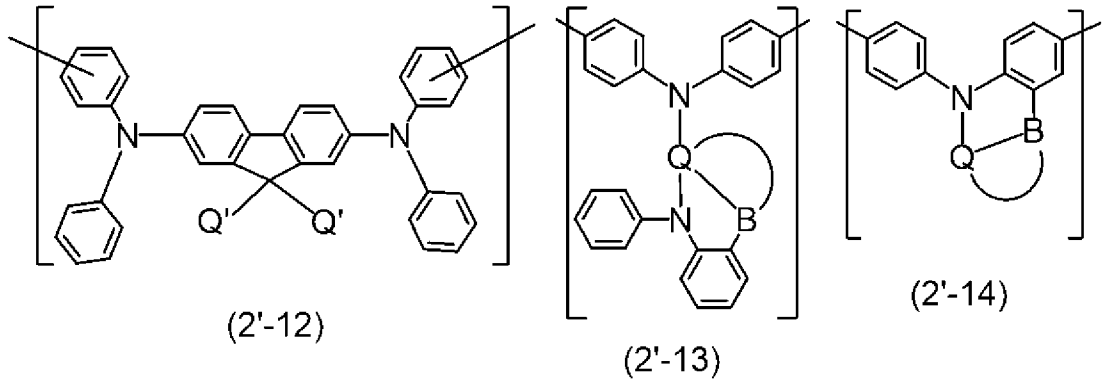


[0143] [化54]



[0144]

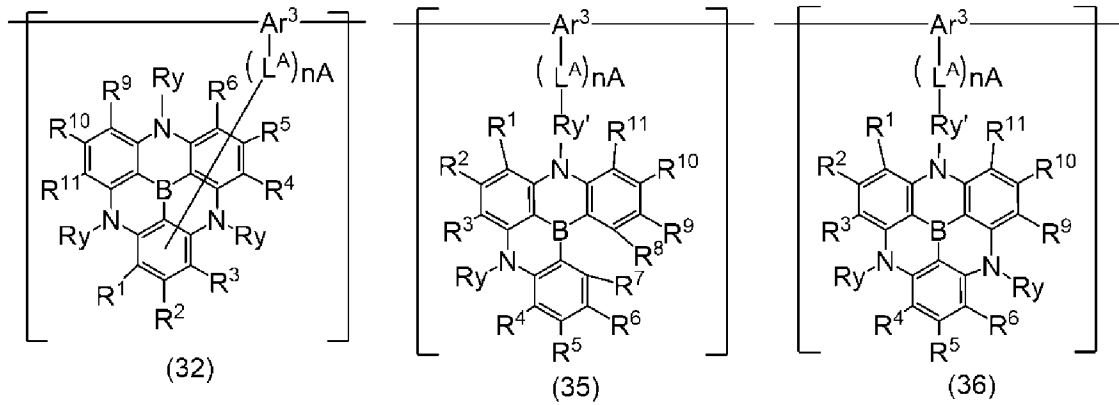
[化55]



[式中、Q及びQ'は、前記と同じ意味を表す。円弧は直接結合を表す。]

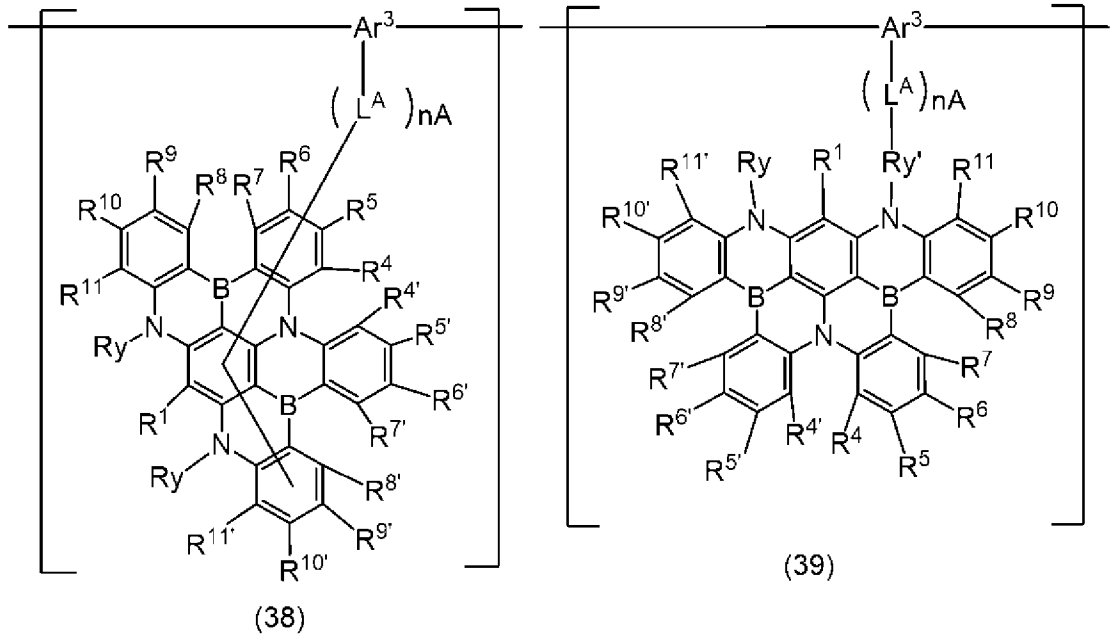
[0145] 式(2)で表される構成単位としては、例えば、前記式(31)で表される構成単位と、式(32)、式(35)、式(36)、式(38)及び式(39)で表される構成単位とが挙げられ、好ましくは、式(31)又は式(32)で表される構成単位であり、より好ましくは、式(31)で表される構成単位である。

[0146] [化56]



[0147]

[化57]



[式中、

R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰、R¹¹、R_y、R_y'、A、R³、L^A、及びnAは、前記と同じ意味を表す。

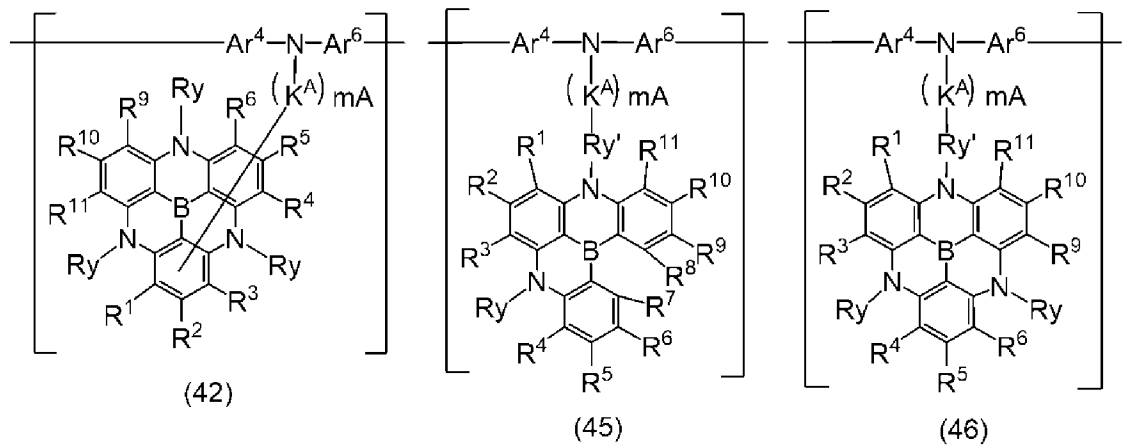
R^{4'}、R^{5'}、R^{6'}、R^{7'}、R^{8'}、R^{9'}、R^{10'}及びR^{11'}は、それぞれ独立に、結合手、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

但し、式(32)において、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰及びR¹¹のうちの1つは結合手であり、式(38)において、R¹、R⁴、R⁵、R⁶、R⁹、R¹⁰、R¹¹、R^{4'}、R^{5'}、R^{6'}、R^{7'}、R^{8'}、R^{9'}、R^{10'}及びR^{11'}のうちの1つは結合手である。]

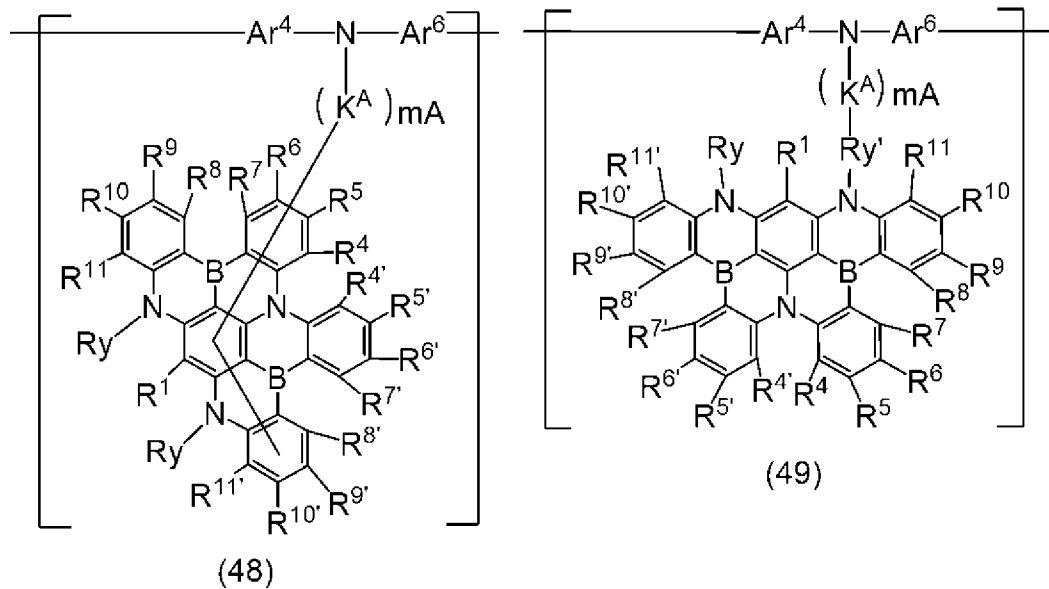
[0148] 式(31)、式(32)及び式(39)で表される構成単位において、結合手ではないR¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰、R¹¹、R^{4'}、R^{5'}、R^{6'}、R^{7'}、R^{8'}、R^{9'}、R^{10'}及びR^{11'}の好ましい範囲は、水素原子であるか、A環、B環、及びC環が有していてもよい置換基の好ましい範囲と同じである。

[0149] 式(2')で表される構成単位としては、例えば、前記式(41)で表される構成単位と、式(42)、式(45)、式(46)、式(48)及び式(49)で表される構成単位とが挙げられ、好ましくは式(41)又は式(42)で表される構成単位であり、より好ましくは式(41)で表される構成単位である。

[0150] [化58]



[0151] [化59]



[式中、

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 Ry 、 Ry' 、 Ar^4 、 Ar^6 、 K^A 、及び mA は、前記と同じ意味を表す。

$R^{4'}$ 、 $R^{5'}$ 、 $R^{6'}$ 、 $R^{7'}$ 、 $R^{8'}$ 、 $R^{9'}$ 、 $R^{10'}$ 及び $R^{11'}$ は、前記と同じ意味を

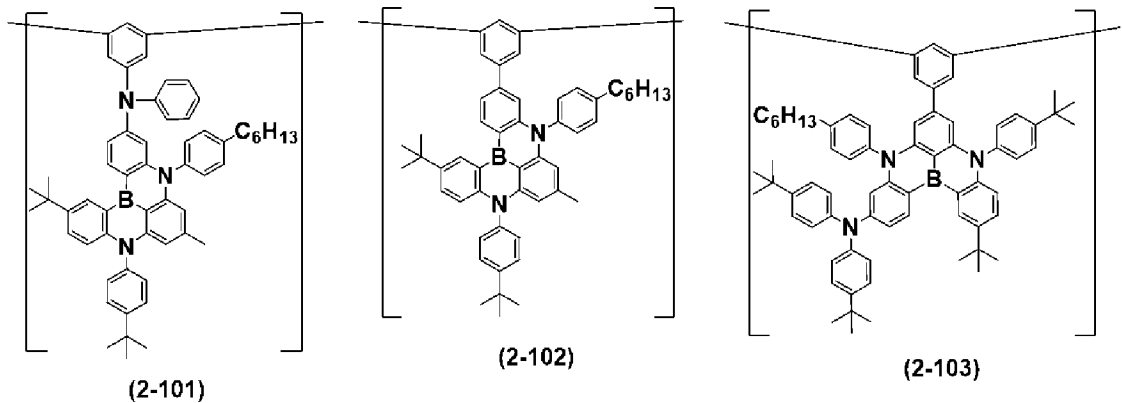
表す。

但し、式(42)において、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 及び R^{11} のうちの一つは結合手であり、式(48)において、 R^1 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 $R^{4'}$ 、 $R^{5'}$ 、 $R^{6'}$ 、 $R^{7'}$ 、 $R^{8'}$ 、 $R^{9'}$ 、 $R^{10'}$ 及び $R^{11'}$ のうちの一つは結合手である。]

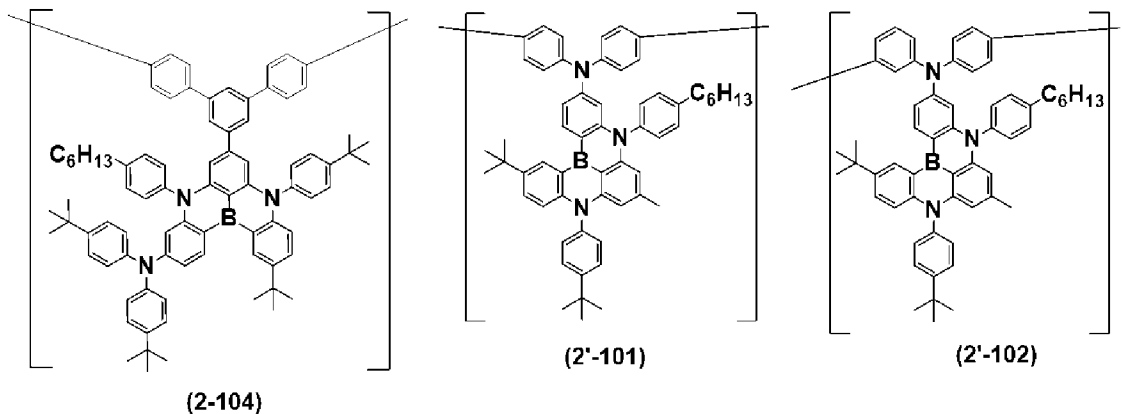
[0152] 式(41)、式(42)及び式(48)で表される構成単位において、結合手ではない R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 、 R^{11} 、 $R^{4'}$ 、 $R^{5'}$ 、 $R^{6'}$ 、 $R^{7'}$ 、 $R^{8'}$ 、 $R^{9'}$ 、 $R^{10'}$ 及び $R^{11'}$ の好ましい範囲は、水素原子であるか、A環、B環、及びC環が有していてもよい置換基の好ましい範囲と同じである。

[0153] 式(2)及び式(2')で表される構成単位としては、例えば、式(2-101)～式(2-104)、及び式(2'-101)～式(2'-104)で表される構成単位が挙げられる。

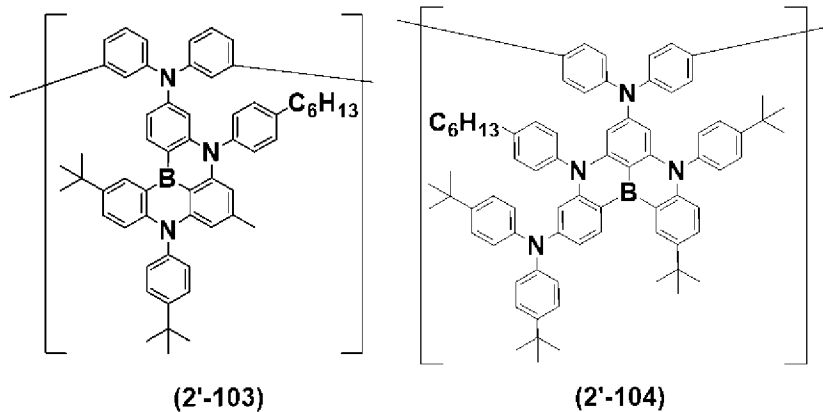
[0154] [化60]



[0155] [化61]



[0156] [化62]



[0157] [式(3)で表される構成単位]

d、e、f 及び g は、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは、0 又は 1 であり、より好ましくは 0 である。

[0158] p A は、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは 0 又は 1 であり、より好ましくは 0 である。

[0159] J^Aで表されるアルキレン基は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常 1～20 であり、好ましくは 1～15 であり、より好ましくは 1～10 である。J^Aで表されるシクロアルキレン基は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常 3～20 である。

[0160] アルキレン基及びシクロアルキレン基は、置換基を有していてもよく、例えば、メチレン基、エチレン基、プロピレン基、ブチレン基、ヘキシレン基、シクロヘキシレン基、オクチレン基が挙げられる。アルキレン基及びシクロアルキレン基が有していてもよい置換基としては、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、ハロゲン原子及びシアノ基が挙げられる。

[0161] J^Aで表されるアリーレン基は、置換基を有していてもよい。アリーレン基としては、例えば、o-フェニレン基、m-フェニレン基、p-フェニレン基が挙げられる。アリーレン基が有していてもよい置換基としては、例えば、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、1 価の複素環基、ハロゲン原子、シアノ基が挙げ

られる。

[0162] $A r^7$ 、 $A r^8$ 及び $A r^9$ は、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは置換基を有していてもよいアリーレン基である。

[0163] $A r^7$ 、 $A r^8$ 及び $A r^9$ で表されるアリーレン基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常6～60であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

[0164] $A r^7$ 、 $A r^8$ 及び $A r^9$ で表されるアリーレン基としては、好ましくは、式(A-1)～式(A-20)で表される基であり、より好ましくは、式(A-1)、式(A-2)、式(A-6)～式(A-10)、式(A-19)又は式(A-20)で表される基であり、更に好ましくは、式(A-1)、式(A-2)、式(A-7)、式(A-9)又は式(A-19)で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0165] $A r^7$ 、 $A r^8$ 及び $A r^9$ で表される2価の複素環基の炭素原子数は、置換基の炭素原子数を含めないで、通常2～60であり、好ましくは3～30であり、より好ましくは4～18である。

[0166] $A r^7$ 、 $A r^8$ 及び $A r^9$ で表される2価の複素環基としては、好ましくは、式(AA-1)～式(AA-34)で表される基である。

[0167] $A r^7$ 、 $A r^8$ 及び $A r^9$ で表されるアリーレン基及び2価の複素環基は置換基を有していてもよく、置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、1価の複素環基及びシアノ基が挙げられる。

[0168] R^{x4} は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基であり、より好ましくはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

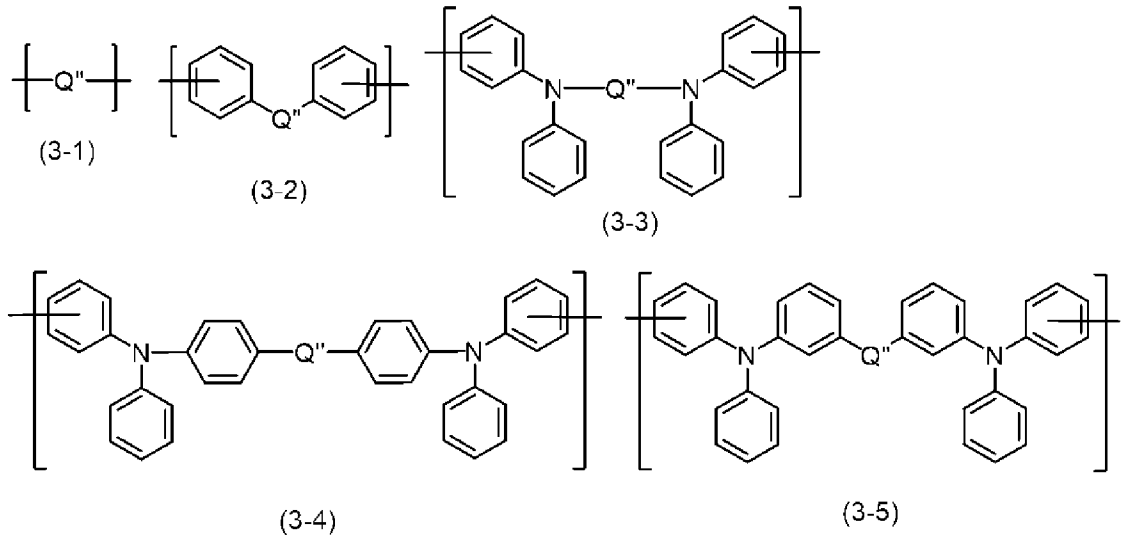
[0169] Q' で表される式(1)で表される化合物の残基の定義、好ましい範囲及び例は、上述した式(1)で表される化合物の残基の定義、好ましい範囲及び例と同様である。

[0170] [式(3)で表される構成単位の好ましい態様]

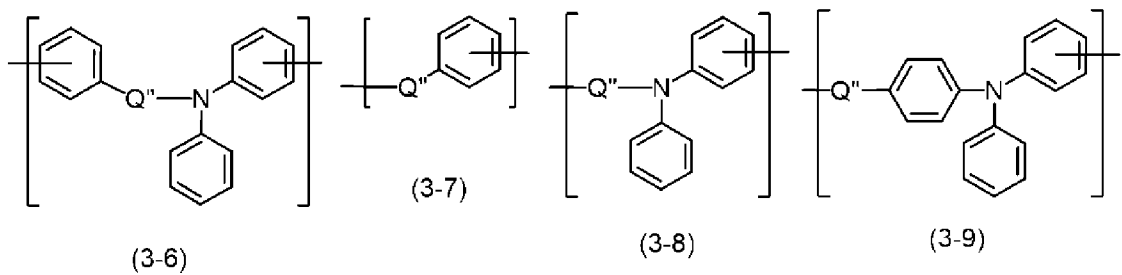
式(3)で表される構成単位としては、例えば、式(3-1)～式(3-12)で表され

る構成単位が挙げられる。これらの中でも、本発明の発光素子の輝度寿命が優れるので、好ましくは、式(3-1)~式(3-6)で表される構成単位であり、より好ましくは、式(3-1)~式(3-3)で表される構成単位であり、更に好ましくは、式(3-1)で表される構成単位である。

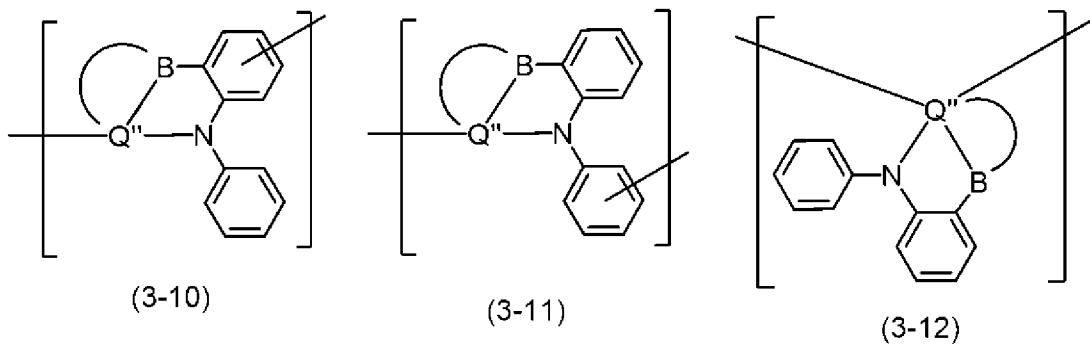
[0171] [化63]



[0172] [化64]



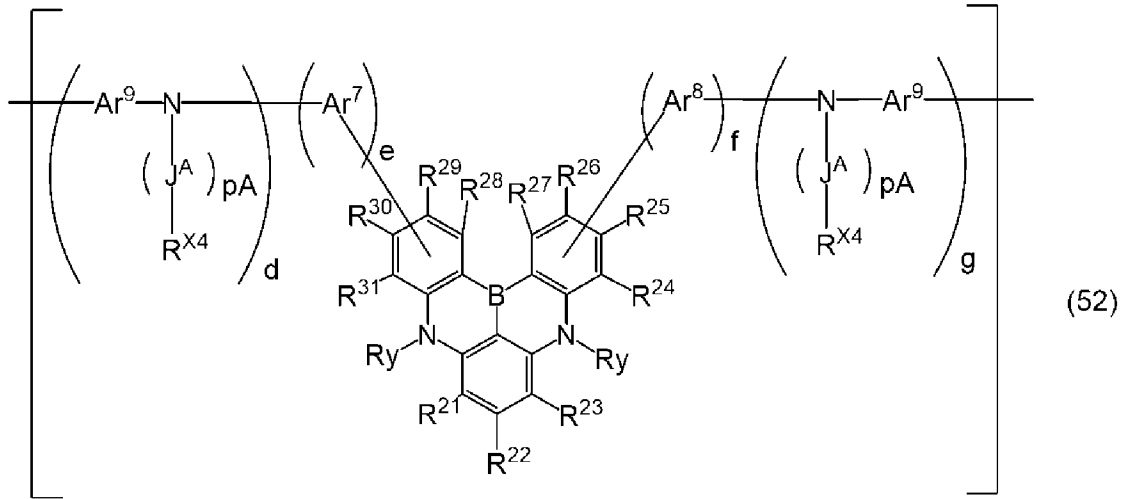
[0173] [化65]



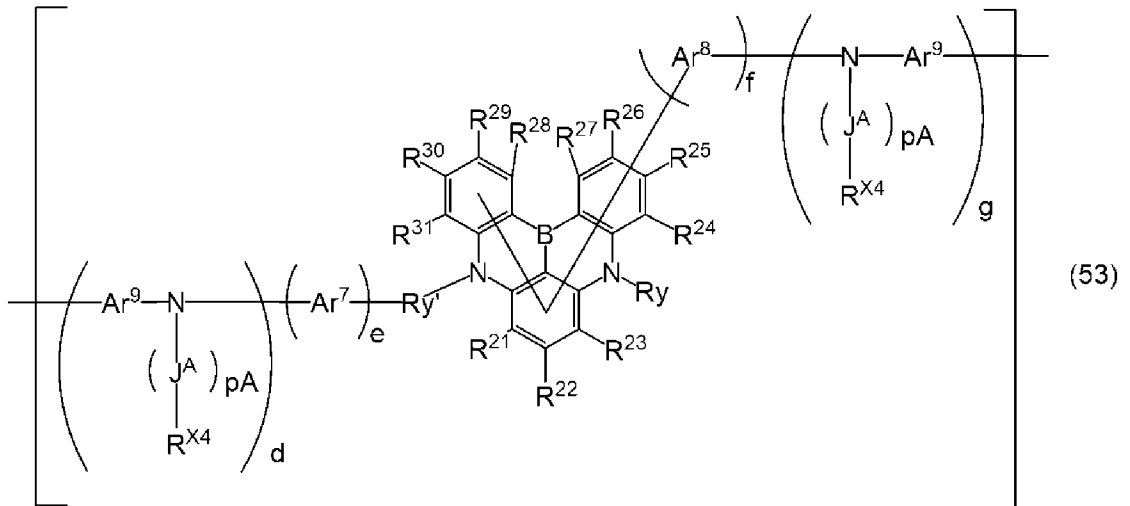
[式中、Q' ' 及び円弧は、前記と同じ意味を表す。]

[0174] 式(3)で表される構成単位としては、例えば、前記式(51)で表される構成単位と、式(52)～式(55)で表される構成単位とが挙げられ、好ましくは、式(51)で表される構成単位又は式(53)で表される構成単位であり、より好ましくは、式(51)で表される構成単位である。

[0175] [化66]

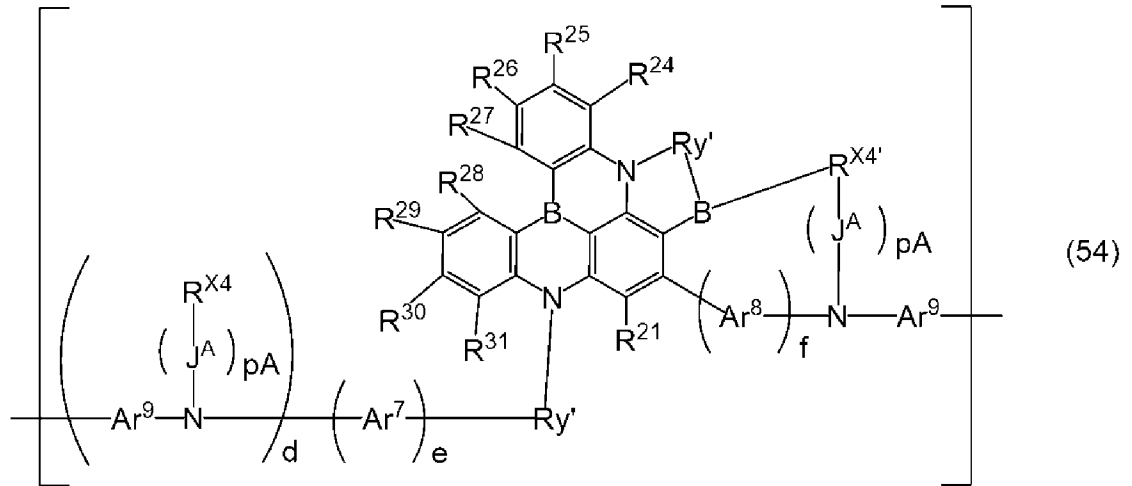


[0176] [化67]

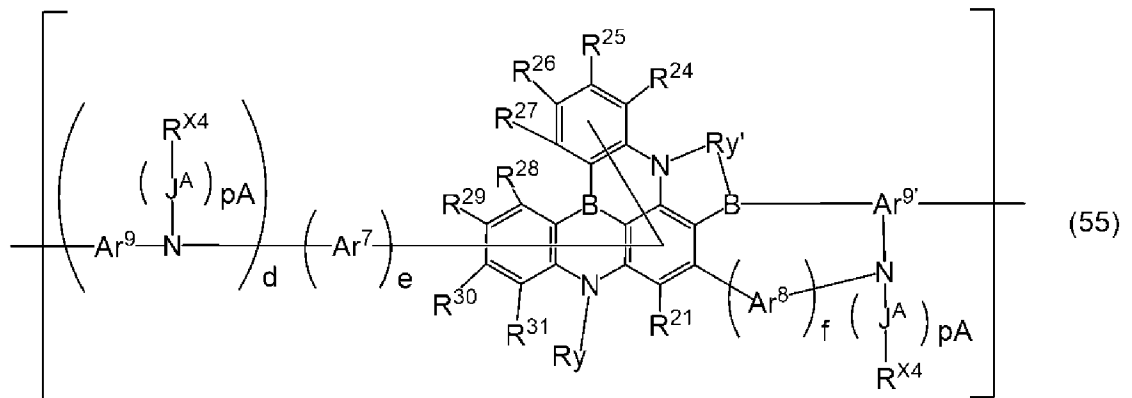


[0177]

[化68]



[0178] [化69]



[式中、

R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 、 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 、 R^{31} 、 R_y 、 $R_{y'}$ 、 Ar^7 、 Ar^8 、 Ar^9 、 J^A 、 R^{X4} 、 pA 、 d 、 e 、 f 及び g は、前記と同じ意味を表す。

$R^{X4'}$ は、直接結合、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基又は2価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

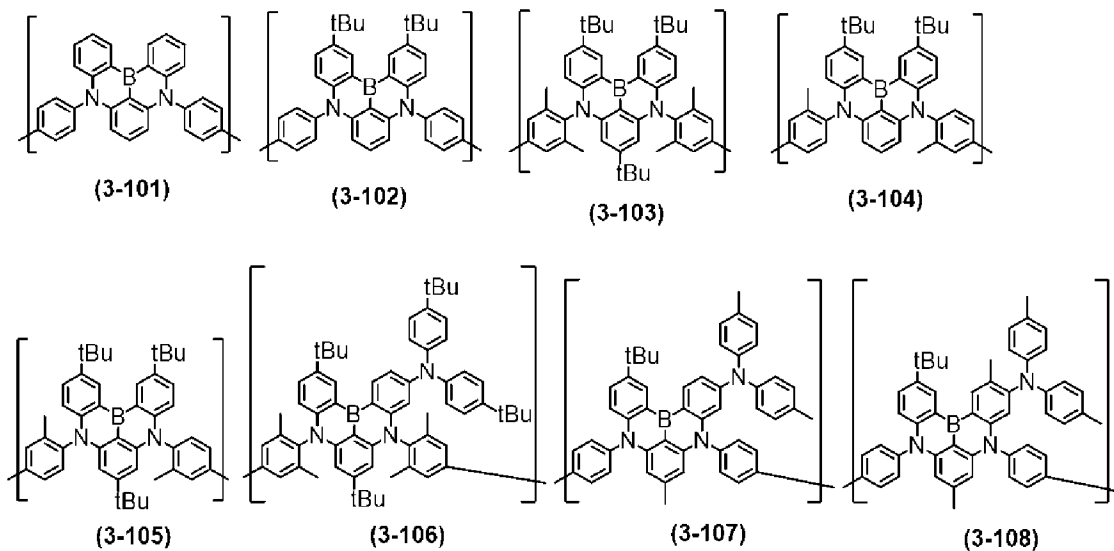
$Ar^{9'}$ は、3価の芳香族炭化水素基または3価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

但し、式(52)において、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 及び R^{27} のうちの1つは結合手であり、且つ、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 及び R^{31} のうちの1つは結合手であり、式(53)において、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 、 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{30} 及び R

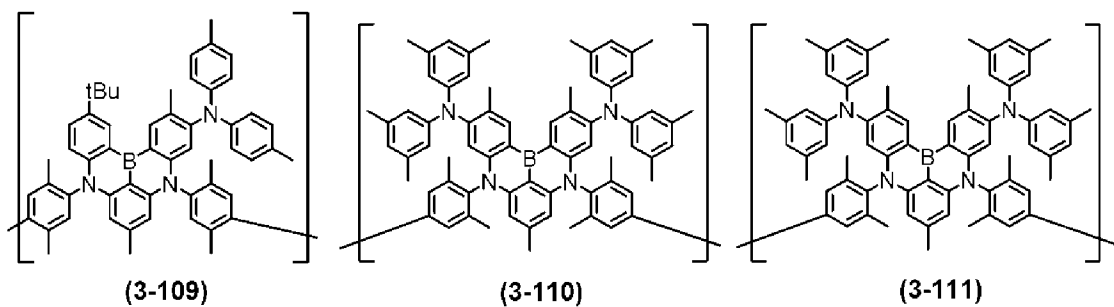
³¹のうちの1つは結合手であり、式(55)において、R²¹、R²⁴、R²⁵、R²⁶、R²⁷、R²⁸、R²⁹、R³⁰、及びR³¹のうちの1つは結合手である。]

[0179] 式(3)で表される構成単位としては、例えば、式(3-101)~式(3-129)で表される構成単位が挙げられる。

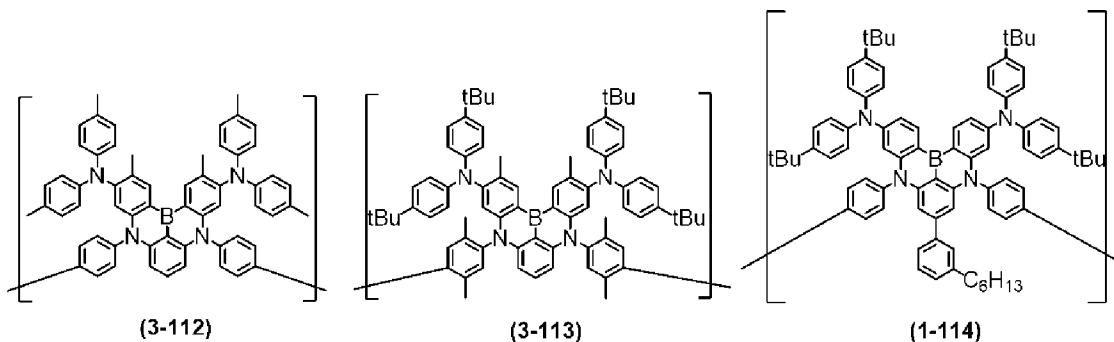
[0180] [化70]



[0181] [化71]

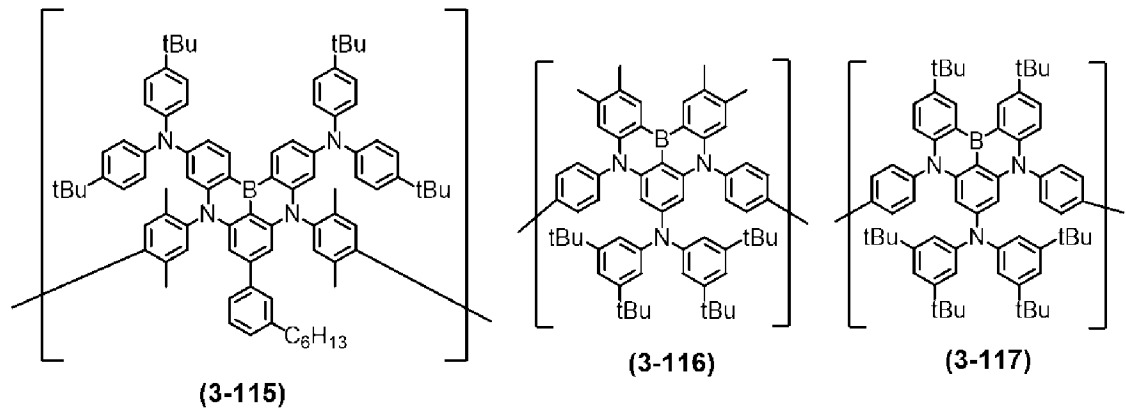


[0182] [化72]

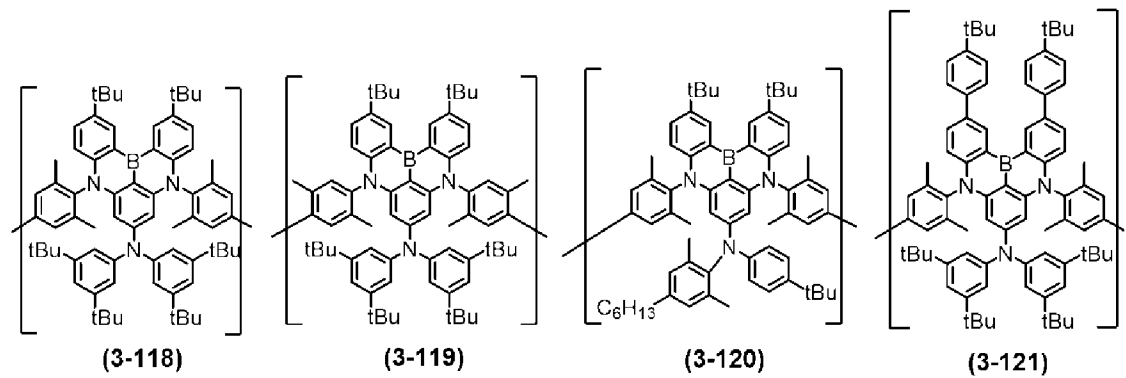


[0183]

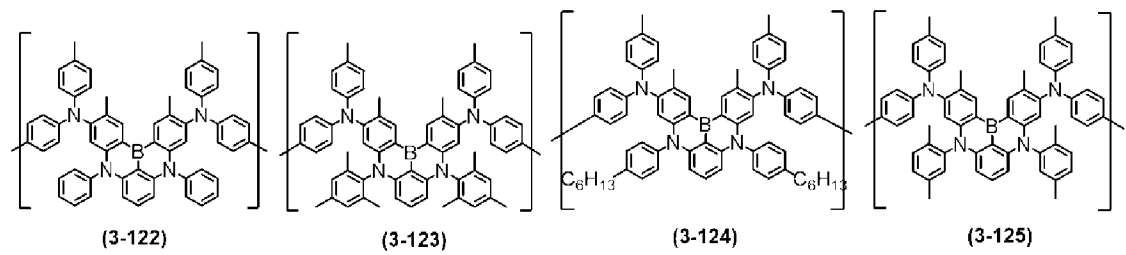
[化73]



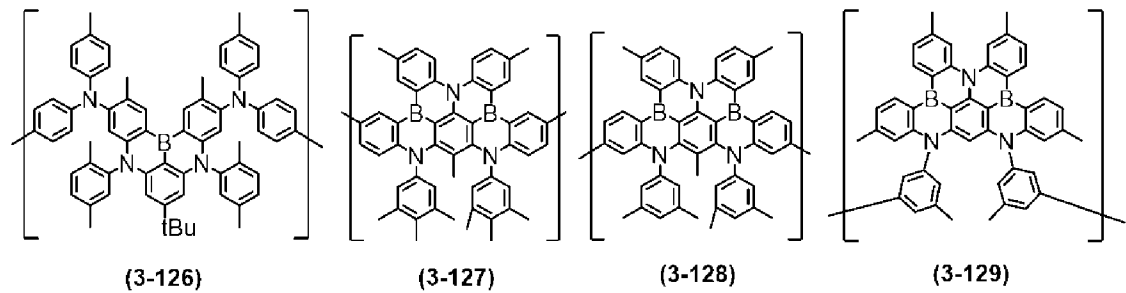
[0184] [化74]



[0185] [化75]



[0186] [化76]



[0187] 式(3)で表される構成単位の合計量は、本発明の高分子化合物の安定性が優

れるので、高分子化合物に含まれる全構成単位の合計量に対して、好ましくは0.1~50モル%であり、より好ましくは0.1~30モル%であり、更に好ましくは0.1~10モル%であり、特に好ましくは0.5~5モル%である。

[0188] [式(1)で表される化合物の残基を有さない構成単位]

式(1)で表される化合物の残基を有さない構成単位としては、例えば、式(X)で表される構成単位及び式(Y)で表される構成単位が挙げられる。

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

[0189] ・式(X)で表される構成単位

a^1 は、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは1である。

[0190] a^2 は、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、好ましくは0である。

[0191] R^{X1} 、 R^{X2} 及び R^{X3} は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基であり、より好ましくはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0192] $A r^{X1}$ 及び $A r^{X3}$ で表されるアリーレン基は、より好ましくは式(A-1)又は式(A-9)で表される基であり、更に好ましくは式(A-1)で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0193] $A r^{X1}$ 及び $A r^{X3}$ で表される2価の複素環基は、より好ましくは式(AA-1)、式(AA-2)又は式(AA-7)~式(AA-26)で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0194] $A r^{X1}$ 及び $A r^{X3}$ は、好ましくは置換基を有していてもよいアリーレン基である。

[0195] $A r^{X2}$ 及び $A r^{X4}$ で表されるアリーレン基は、より好ましくは式(A-1)、式(A-6)、式(A-7)、式(A-9)~式(A-11)又は式(A-19)で表される基であり、これら

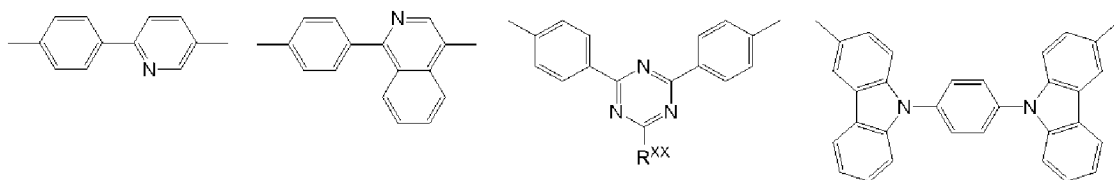
の基は置換基を有していてもよい。

[0196] $A r^{X2}$ 及び $A r^{X4}$ で表される2価の複素環基のより好ましい範囲は、 $A r^{X1}$ 及び $A r^{X3}$ で表される2価の複素環基のより好ましい範囲と同じである。

[0197] $A r^{X2}$ 及び $A r^{X4}$ で表される少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが直接結合した2価の基における、アリーレン基及び2価の複素環基のより好ましい範囲、更に好ましい範囲は、それぞれ、 $A r^{X1}$ 及び $A r^{X3}$ で表されるアリーレン基及び2価の複素環基のより好ましい範囲、更に好ましい範囲と同じである。

[0198] $A r^{X2}$ 及び $A r^{X4}$ で表される少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが直接結合した2価の基としては、例えば、下記式で表される基が挙げられ、これらは置換基を有していてもよい。

[0199] [化77]



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

[0200] R^{XX} は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基又はアリーール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

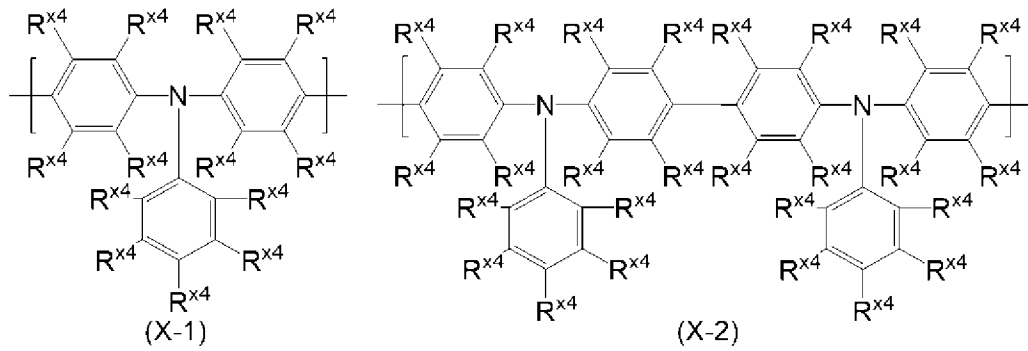
[0201] $A r^{X2}$ 及び $A r^{X4}$ は、好ましくは置換基を有していてもよいアリーレン基である。

[0202] $A r^{X1}$ ～ $A r^{X4}$ 及び R^{X1} ～ R^{X3} で表される基が有してもよい置換基としては、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基又はアリーール基であり、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

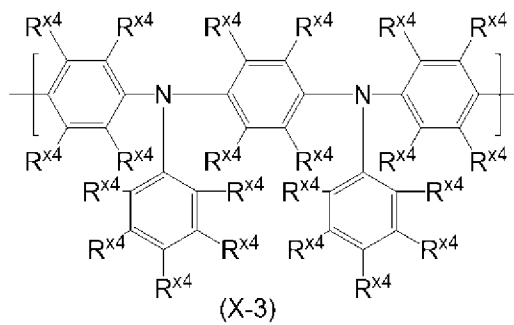
[0203] 式(X)で表される構成単位としては、好ましくは式(X-1)～式(X-7)で表される構成単位であり、より好ましくは式(X-3)～式(X-7)で表される構成単位であり、更に好ましくは式(X-3)～式(X-6)で表される構成単位である。

[0204]

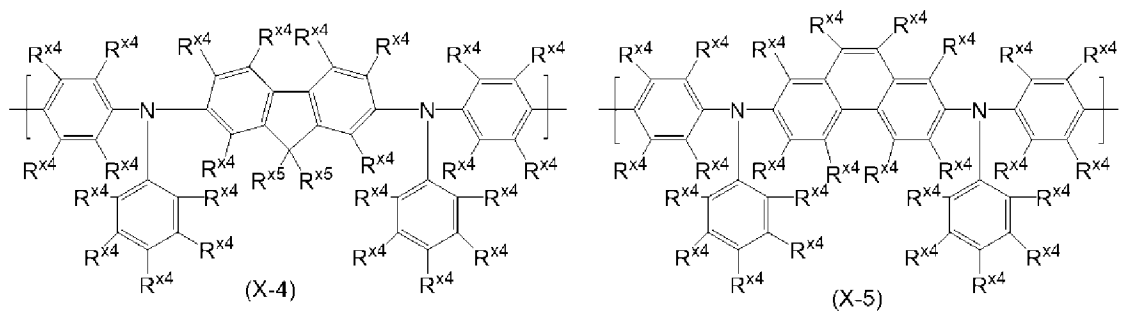
[化78]



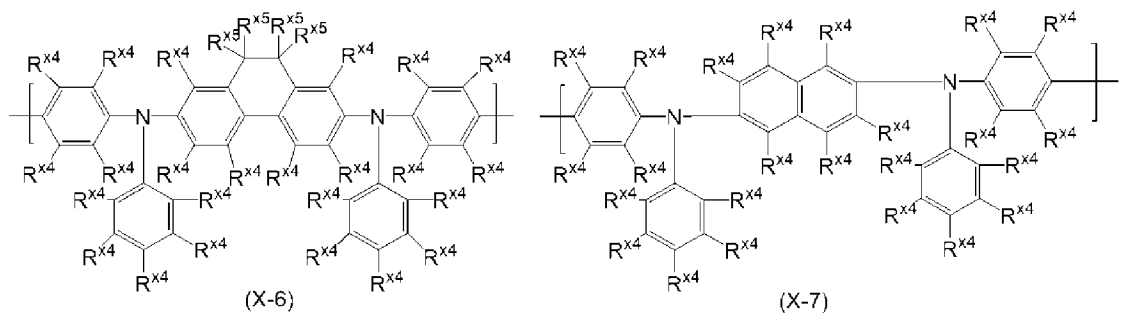
[0205] [化79]



[0206] [化80]



[0207] [化81]



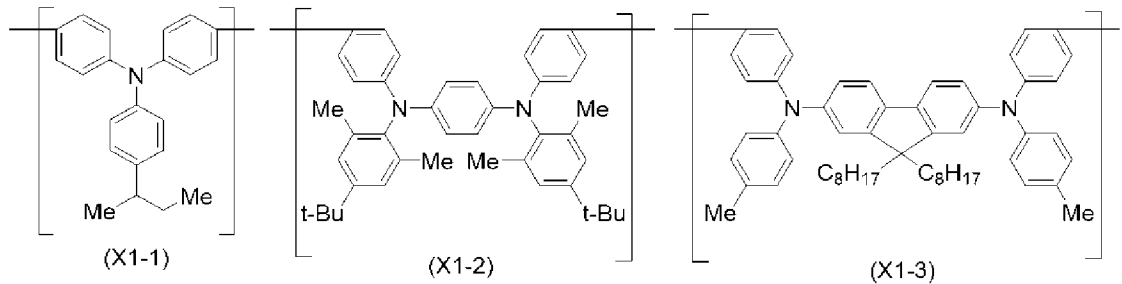
[式中、 R^{x4} 及び R^{x5} は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキ

シ基、ハロゲン原子、1価の複素環基又はシアノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{X4} は、同一でも異なってもよい。複数存在する R^{X5} は、同一でも異なってもよく、隣接する R^{X5} 同士は互いに結合して、それぞれが結合する炭素原子と共に環を形成していてもよい。]

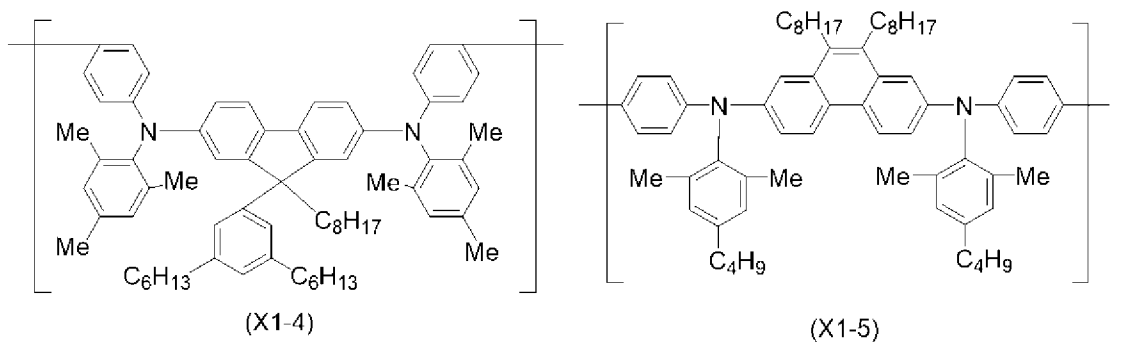
[0208] 式(X)で表される構成単位は、正孔輸送性が優れるので、高分子化合物に含まれる全構成単位の合計量に対して、好ましくは0.1~50モル%であり、より好ましくは0.5~30モル%であり、更に好ましくは1~8モル%であり、特に好ましくは1~5モル%である。

[0209] 式(X)で表される構成単位としては、例えば、式(X1-1)~式(X1-7)で表される構成単位が挙げられ、好ましくは式(X1-1)及び式(X1-5)~式(X1-7)で表される構成単位である。

[0210] [化82]

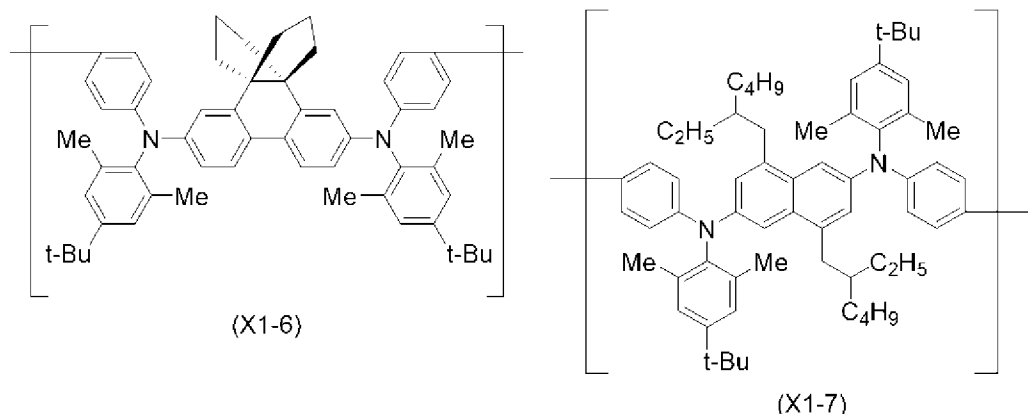


[0211] [化83]



[0212]

[化84]



[0213] ・式(Y)で表される構成単位

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

[0214] A r^{Y1} で表される2価の複素環基は、より好ましくは式(AA-4)、式(AA-10)、式(AA-13)、式(AA-15)、式(AA-18)又は式(AA-20)で表される基であり、更に好ましくは式(AA-4)、式(AA-10)、式(AA-18)又は式(AA-20)で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0215] A r^{Y1} で表される少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが直接結合した2価の基における、アリーレン基及び2価の複素環基のより好ましい範囲、更に好ましい範囲は、それぞれ、前述のA r^{Y1} で表されるアリーレン基及び2価の複素環基のより好ましい範囲、更に好ましい範囲と同様である。

[0216] A r^{Y1} で表される少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが直接結合した2価の基としては、式(X)のA r^{X2} 及びA r^{X4} で表される少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが直接結合した2価の基と同様のものが挙げられる。

[0217] A r^{Y1} で表される基が有してもよい置換基は、好ましくはアルキル基、シク

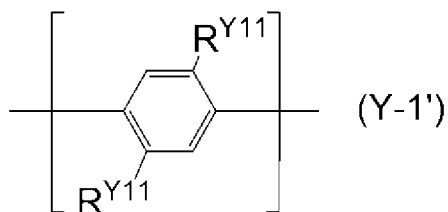
ロアルキル基又はアリール基であり、より好ましくはアルキル基又はアリール基であり、これらの基は更に置換基を有していてもよい。

[0218] 式(Y)で表される構成単位としては、例えば、式(Y-1)~式(Y-7)で表される構成単位が挙げられ、本発明の発光素子の輝度寿命の観点からは、好ましくは式(Y-1)又は式(Y-2)で表される構成単位であり、電子輸送性の観点からは、好ましくは式(Y-3)又は式(Y-4)で表される構成単位であり、正孔輸送性の観点からは、好ましくは式(Y-5)~式(Y-7)で表される構成単位である。

[0219] 式(Y-1)中、 R^{Y11} は、好ましくは水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0220] 式(Y-1)で表される構成単位は、好ましくは、式(Y-1')で表される構成単位である。

[0221] [化85]



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

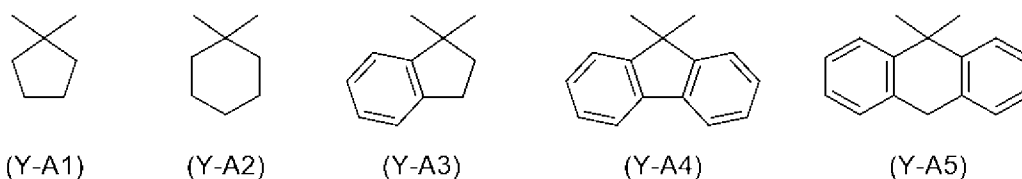
[0222] R^{Y11} は、好ましくは、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であり、より好ましくは、アルキル基又はシクロアルキル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0223] 式(Y-2)中、 R^{Y2} は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基であり、より好ましくはアルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であり、更に好ましくはアルキル基又はアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0224] X^{Y1} において、 $-C(R^{Y2})_2-$ で表される基中の2個の R^{Y2} の組み合わせは、好ましくは両方がアルキル基若しくはシクロアルキル基、両方がアリール基

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

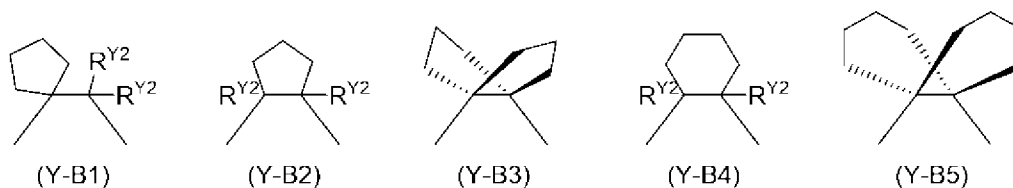
[0225] [化86]



[0226] X^{Y1} において、 $-C(R^{Y2})=C(R^{Y2})-$ で表される基中の2個の R^{Y2} の組み合わせは、好ましくは双方がアルキル基若しくはシクロアルキル基、又は、一方がアルキル基若しくはシクロアルキル基で他方がアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0227] X^{Y1} において、 $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ で表される基中の4個の R^{Y2} は、好ましくは置換基を有していてもよいアルキル基又はシクロアルキル基である。複数ある R^{Y2} は互いに結合して、それぞれが結合する原子と共に環を形成していてもよく、 R^{Y2} が環を形成する場合、 $-C(R^{Y2})_2-C(R^{Y2})_2-$ で表される基は、好ましくは式(Y-B1)～(Y-B5)で表される基であり、より好ましくは式(Y-B3)で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

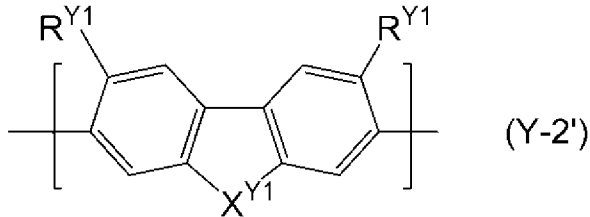
[0228] [化87]



[式中、 R^{Y2} は前記と同じ意味を表す。]

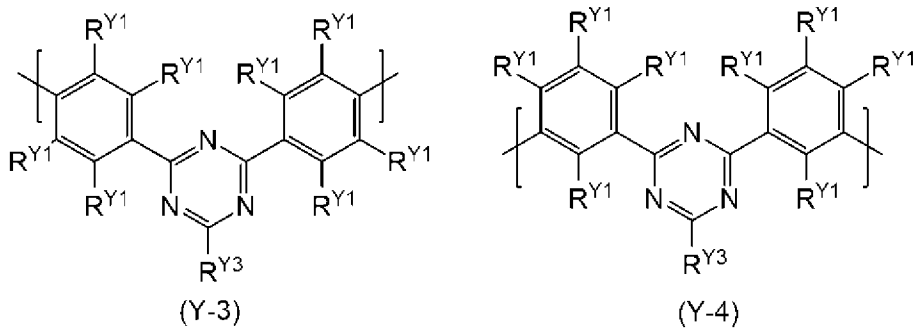
[0229] 式(Y-2)で表される構成単位は、式(Y-2')で表される構成単位であることが好ましい。

[0230] [化88]



[式中、 R^{Y1} 及び X^{Y1} は前記と同じ意味を表す。]

[0231] [化89]



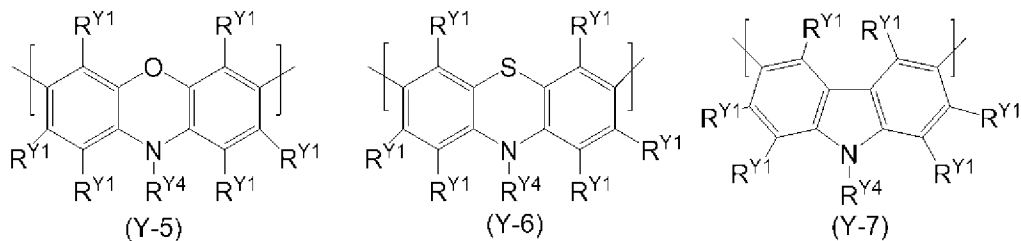
[式中、

R^{Y1} は前記と同じ意味を表す。

R^{Y3} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

[0232] R^{Y3} は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基又は1価の複素環基であり、より好ましくはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0233] [化90]



[式中、

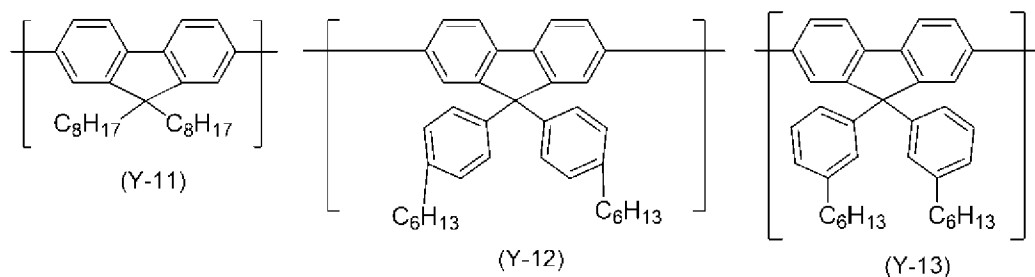
R^{Y1}は前記を同じ意味を表す。

R^{Y4}は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。]

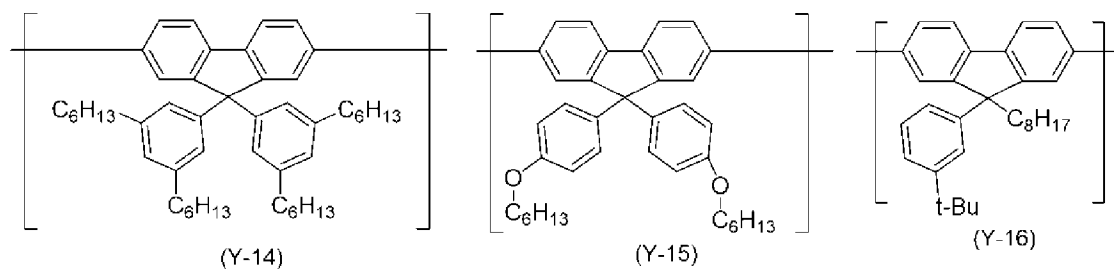
[0234] R^{Y4}は、好ましくはアルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基又は1価の複素環基であり、より好ましくはアリール基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0235] 式(Y)で表される構成単位としては、例えば、式(Y-11)~式(Y-30)で表される構成単位が挙げられる。

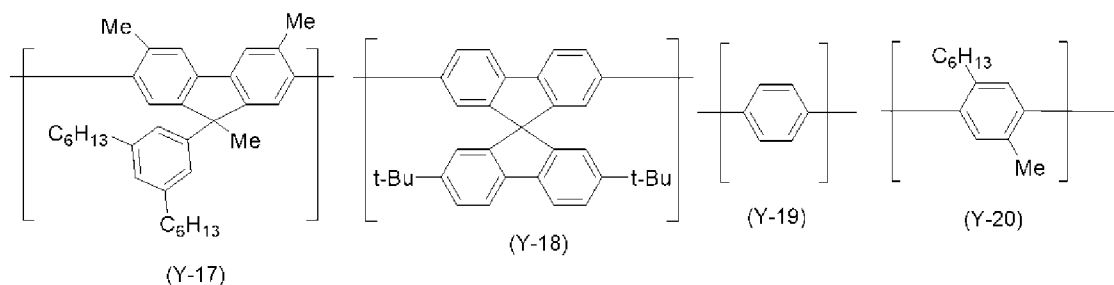
[0236] [化91]



[0237] [化92]

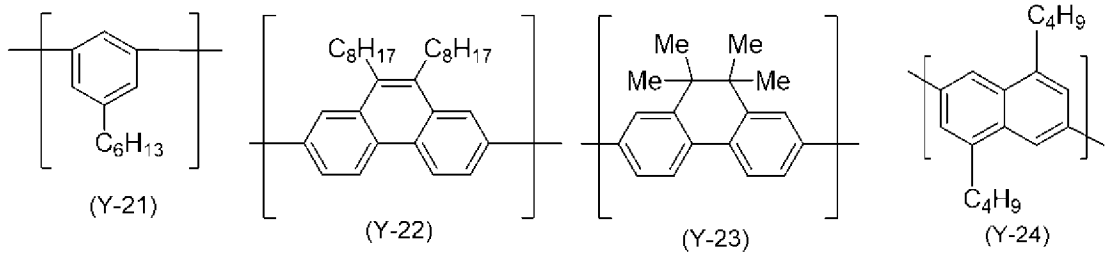


[0238] [化93]

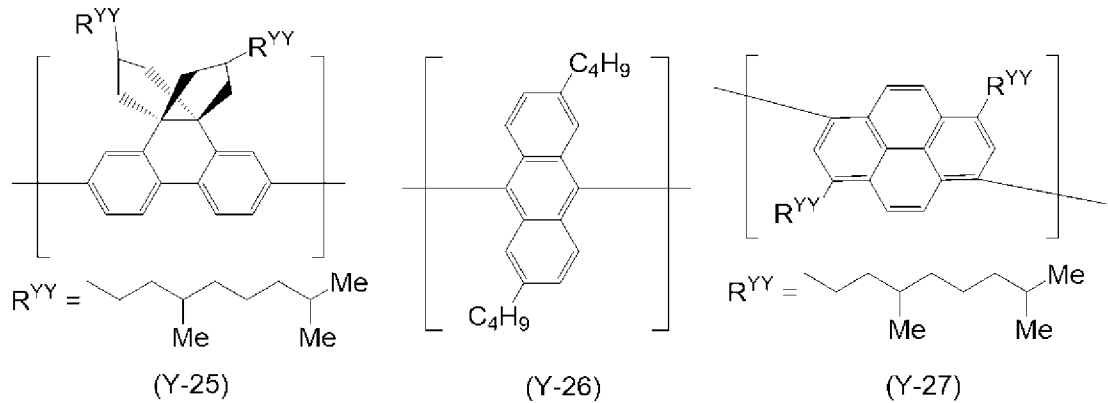


[0239]

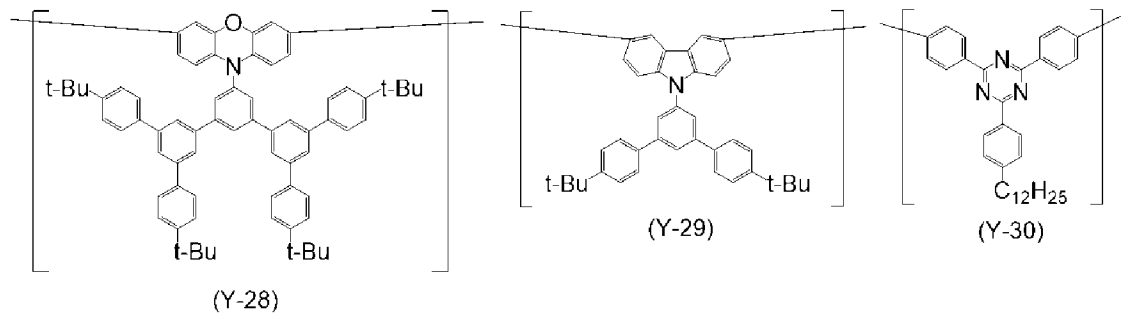
[化94]



[0240] [化95]



[0241] [化96]



[0242] 式(Y)で表される構成単位であって、 $A r^{Y1}$ がアリーレン基である構成単位は、本発明の発光素子の輝度寿命がより優れるので、高分子化合物に含まれる全構成単位の合計量に対して、好ましくは50~99.5モル%であり、より好ましくは70~99.5モル%である。

[0243] 式(Y)で表される構成単位であって、 $A r^{Y1}$ が2価の複素環基、又は、少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが直接結合した2価の基である構成単位は、本発明の発光素子の電荷輸送性が優れるので、高分子化合物に含まれる全構成単位の合計量に対して、好ましくは1~30

モル%であり、より好ましくは1~10モル%である。

[0244] 本発明の高分子化合物としては、例えば、高分子化合物P-1~P-16が挙げられる。ここで、「その他の構成単位」とは、式(1)で表される化合物の残基を含まず、式(2)、式(2')、式(3)、式(X)及び式(Y)で表される構成単位以外の構成単位を意味する。

[0245] [表1]

| 高分子化合物 | 構成単位とそのモル比率 | | | | |
|--------|-------------|----------|----------|----------|----------|
| | 式(2) | 式(2') | 式(X) | 式(Y) | その他 |
| | q | r | s | t | u |
| P-1 | 0.1~99.9 | 0 | 0 | 0 | 0.1~99.9 |
| P-2 | 0.1~99.9 | 0 | 0.1~99.9 | 0 | 0~30 |
| P-3 | 0.1~99.9 | 0 | 0 | 0.1~99.9 | 0~30 |
| P-4 | 0.1~99.8 | 0 | 0.1~99.8 | 0.1~99.8 | 0~30 |
| P-5 | 0 | 0.1~99.9 | 0 | 0 | 0.1~99.9 |
| P-6 | 0 | 0.1~99.9 | 0.1~99.9 | 0 | 0~30 |
| P-7 | 0 | 0.1~99.9 | 0 | 0.1~99.9 | 0~30 |
| P-8 | 0 | 0.1~99.8 | 0.1~99.8 | 0.1~99.8 | 0~30 |
| P-9 | 0.1~99.9 | 0.1~99.9 | 0 | 0 | 0.1~99.8 |
| P-10 | 0.1~99.8 | 0.1~99.8 | 0.1~99.8 | 0 | 0~30 |
| P-11 | 0.1~99.8 | 0.1~99.8 | 0 | 0.1~99.8 | 0~30 |
| P-12 | 0.1~99.7 | 0.1~99.7 | 0.1~99.7 | 0.1~99.7 | 0~30 |

[表中、q、r、s、t及びuは、各構成単位のモル比率を表す。q+r+s+t+u=100であり、かつ、 $70 \leq q+r+s+t \leq 100$ である。]

[0246] [表2]

| 高分子化合物 | 構成単位とそのモル比率 | | | |
|--------|-------------|----------|----------|----------|
| | 式(3) | 式(X) | 式(Y) | その他 |
| | q' | s' | t' | u' |
| P-13 | 0.1~99.9 | 0 | 0 | 0.1~99.9 |
| P-14 | 0.1~99.9 | 0.1~99.9 | 0 | 0~30 |
| P-15 | 0.1~99.9 | 0 | 0.1~99.9 | 0~30 |
| P-16 | 0.1~99.8 | 0.1~99.8 | 0.1~99.8 | 0~30 |

[表中、q'、s'、t'及びu'は、各構成単位のモル比率を表す。q'+s'+t'+u'=100であり、かつ、 $70 \leq q'+s'+t' \leq 100$ である。]

[0247] 本発明の高分子化合物の末端基は、重合活性基がそのまま残っていると、

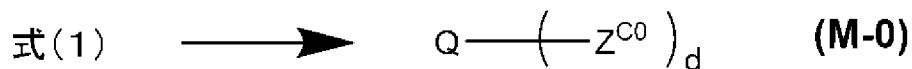
高分子化合物を発光素子の作製に用いた場合に発光特性や輝度寿命が低下する可能性があるため、好ましくは安定な基である。この末端基としては、主鎖と共役結合している基が好ましく、炭素-炭素結合を介してアリール基又は1価の複素環基と結合している基が挙げられる。

[0248] 本発明の高分子化合物は、ブロック共重合体、ランダム共重合体、交互共重合体、グラフト共重合体のいずれであってもよいし、その他の態様であってもよいが、複数種の原料モノマーを共重合してなる共重合体であることが好ましい。

[0249] <高分子化合物の製造方法>

本発明の高分子化合物の製造方法について説明する。式(1)で表される化合物に後述の置換基A群及び置換基B群からなる群から選ばれる基を有する化合物とを反応させることで、縮合重合に用いる原料モノマーが得られる(下記式参照)。この原料モノマーを縮合重合に供することで、式(1)で表される化合物の残基を有する構成単位が誘導される。なお、本明細書において、本発明の高分子化合物の製造に使用される化合物を総称して、「原料モノマー」ということがある。

[0250] [化97]



[式中、

Qは、前記と同じ意味を表す。

dは、1～4の整数を表す。

Z^{C0}は、後述の置換基A群及び置換基B群からなる群から選ばれる基を表す。Z^{C0}が複数存在する場合、それらは同一であっても異なってもよい。]

[0251] また、式(1)で表される化合物と、置換基A群及び置換基B群からなる群から選ばれる基を有する化合物とを反応させても、同様に、縮合重合に用いる原料モノマーとして、式(M-2)又は式(M-3)で表される化合物が得られる。この原料モノマーは、式(1)で表される化合物の残基を有する構成

単位となる。

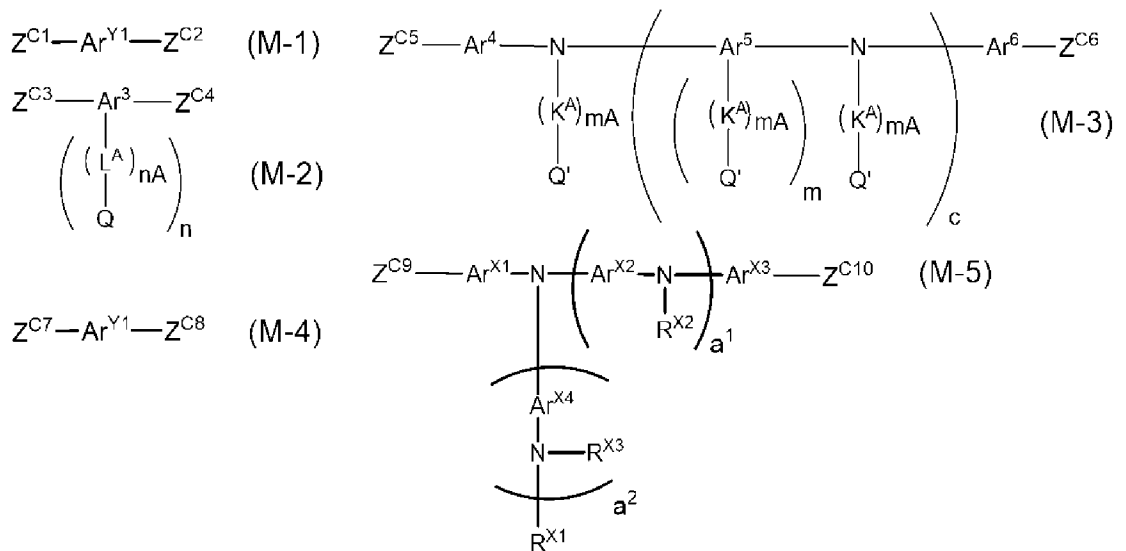
[0252] これらの反応は、通常、触媒、塩基及び溶媒の存在下で行われるが、必要に応じて、相間移動触媒を共存させて行ってもよい。反応で用いる触媒としては、後述する縮合重合で用いる触媒と同様の触媒が利用できる。

[0253] 同様の反応により、縮合重合に用いる原料モノマーとして、例えば、式 (M-1)、式(M-4) 又は式 (M-5) で表される化合物が得られる。この原料モノマーは、式 (1) で表される化合物の残基を有さない構成単位となる。

[0254] 本発明の高分子化合物は、例えば、式(M-1)で表される化合物と、式(M-2)で表される化合物及び／又は式(M-3)で表される化合物と、他の化合物（例えば、式(M-4)で表される化合物及び／又は式(M-5)で表される化合物）とを縮合重合させることにより製造することができる。

[0255] また、本発明の高分子化合物は、例えば、式(M-1)で表される化合物と、式 (M-6)で表される化合物の群から選ばれる少なくとも1種の化合物と、他の化合物（例えば、式(M-4)で表される化合物及び／又は式(M-5)で表される化合物）とを縮合重合させることにより製造することができる。

[0256] [化98]

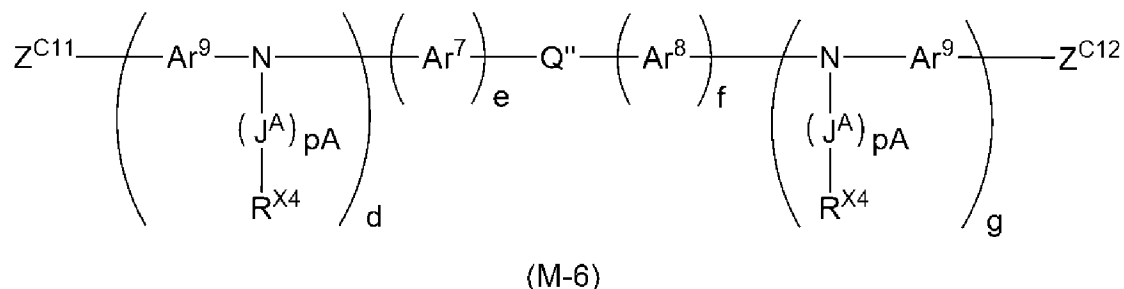


[式中、

nA 、 n 、 Ar^3 、 L^{A} 、 Q 、 mA 、 m 、 c 、 $\text{Ar}^4 \sim \text{Ar}^6$ 、 K^{A} 、 Q' 、 $\text{Ar}^{\text{Y}1}$ 、 a^1 、 a^2 、 $\text{Ar}^{\text{X}1} \sim \text{Ar}^{\text{X}4}$ 、及び $\text{R}^{\text{X}1} \sim \text{R}^{\text{X}3}$ は、前記と同じ意味を表す。

$Z^{C1} \sim Z^{C10}$ は、それぞれ独立に、置換基A群及び置換基B群からなる群から選ばれる基を表す。]

[0257] [化99]



[式中、

pA 、 d 、 e 、 f 、 g 、 J^A 、 R^{X4} 、 $Ar^7 \sim Ar^9$ 、及び Q'' は、前記と同じ意味を表す。

Z^{C11} 及び Z^{C12} は、それぞれ独立に、置換基A群及び置換基B群からなる群から選ばれる基を表す。]

[0258] 例えば、 Z^{C1} 、 Z^{C2} 、 Z^{C3} 、 Z^{C4} 、 Z^{C5} 、 Z^{C6} 、 Z^{C11} 及び Z^{C12} が置換基A群から選ばれる基である場合、 Z^{C7} 、 Z^{C8} 、 Z^{C9} 及び Z^{C10} は、置換基B群から選ばれる基を選択し、 Z^{C1} 、 Z^{C2} 、 Z^{C3} 、 Z^{C4} 、 Z^{C5} 、 Z^{C6} 、 Z^{C11} 及び Z^{C12} が置換基B群から選ばれる基である場合、 Z^{C7} 、 Z^{C8} 、 Z^{C9} 及び Z^{C10} は、置換基A群から選ばれる基を選択する。

[0259] <置換基A群>

塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子、 $-\text{O}-\text{S}(=\text{O})_2\text{R}^{C1}$ (式中、 R^{C1} は、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。) で表される基。

[0260] <置換基B群>

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

$-\text{BF}_3\text{Q}'$ (式中、 Q' は、 Li 、 Na 、 K 、 Rb 又は Cs を表す。) で表

される基；

—MgY' (式中、Y'は、塩素原子、臭素原子又はヨウ素原子を表す。)

で表される基；

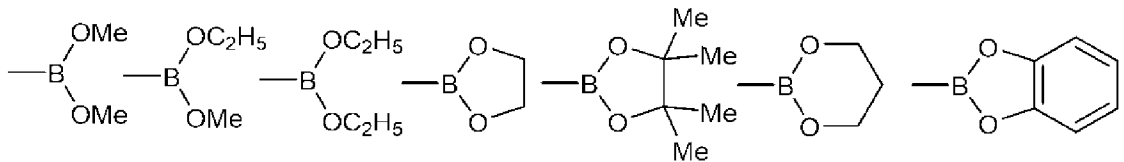
—ZnY'' (式中、Y''は、塩素原子、臭素原子又はヨウ素原子を表す。)

)で表される基；及び、

—Sn(R⁶³)₃ (式中、R⁶³は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在するR⁶³は同一でも異なってもよく、互いに連結して、それぞれが結合するスズ原子とともに環構造を形成していてもよい。)で表される基。

[0261] —B(OR⁶²)₂で表される基としては、下記式で表される基が例示される。

[0262] [化100]



[0263] 置換基A群から選ばれる基を有する化合物と置換基B群から選ばれる基を有する化合物とは、公知のカップリング反応により縮合重合して、置換基A群から選ばれる基及び置換基B群から選ばれる基と結合する炭素原子同士が結合する。そのため、置換基A群から選ばれる基を2個有する化合物と、置換基B群から選ばれる基を2個有する化合物を公知のカップリング反応に供すれば、縮合重合により、これらの化合物の縮合重合体を得ることができる。

[0264] 縮合重合は、通常、触媒、塩基及び溶媒の存在下で行われるが、必要に応じて、相間移動触媒を共存させて行ってもよい。

[0265] 触媒としては、例えば、ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド、ビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)、酢酸パラジウム等のパラジウム錯体、テトラキス(トリフェニルホスフィン)ニッ

ケル(0)、[1,3-ビス(ジフェニルホスフィノ)プロパン]ニッケル(II)ジクロリド、ビス(1,4-シクロオクタジエン)ニッケル(0)等のニッケル錯体等の遷移金属錯体；これらの遷移金属錯体が、更にトリフェニルホスフィン、トリ(tert-ブチル)ホスフィン、トリシクロヘキシルホスフィン、1,3-ビス(ジフェニルホスフィノ)プロパン、ピピリジル等の配位子を有する錯体が挙げられる。触媒は、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0266] 触媒の使用量は、原料モノマーのモル数の合計に対する遷移金属の量として、通常、0.00001~3モル当量である。

[0267] 塩基及び相間移動触媒としては、例えば、炭酸ナトリウム、炭酸カリウム、炭酸セシウム、フッ化カリウム、フッ化セシウム、リン酸三カリウム等の無機塩基；フッ化テトラブチルアンモニウム、水酸化テトラエチルアンモニウム、水酸化テトラブチルアンモニウム等の有機塩基；塩化テトラブチルアンモニウム、臭化テトラブチルアンモニウム等の相間移動触媒が挙げられる。塩基及び相間移動触媒は、それぞれ、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0268] 塩基及び相間移動触媒の使用量は、それぞれ、原料モノマーの合計モル数に対して、通常0.001~100モル当量である。

[0269] 溶媒としては、例えば、トルエン、キシレン、メシチレン、テトラヒドロフラン、1,4-ジオキサン、ジメトキシエタン、N,N-ジメチルアセトアミド、N,N-ジメチルホルムアミド等の有機溶媒、水が挙げられる。溶媒は、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0270] 溶媒の使用量は、通常、原料モノマーの合計100質量部に対して、10~1000質量部である。

[0271] 縮合重合の反応温度は、通常-100~200℃である。縮合重合の反応時間は、通常1時間以上である。

[0272] 重合反応の後処理は、公知の方法、例えば、分液により水溶性不純物を除去する方法、メタノール等の低級アルコールに重合反応後の反応液を加えて

、析出させた沈殿を濾過した後、乾燥させる方法等を単独、又は組み合わせて行う。高分子化合物の純度が低い場合、例えば、晶析、再沈殿、ソックスレー抽出器による連続抽出、カラムクロマトグラフィー等の通常の方法にて精製することができる。

[0273] <組成物>

本発明の組成物は、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤及び溶媒からなる群から選ばれる少なくとも1種の材料と、本発明の高分子化合物とを含有する。

[0274] 本発明の高分子化合物及び溶媒を含有する組成物（以下、「インク」ということがある。）は、インクジェットプリント法、ノズルプリント法等の印刷法を用いた発光素子の作製に好適である。

[0275] インクの粘度は、印刷法の種類によって調整すればよいが、インクジェットプリント法等の溶液が吐出装置を経由する印刷法に適用する場合には、吐出時の目づまりと飛行曲がり防止のために、好ましくは25℃において1～20mPa・sである。

[0276] 溶媒は、該インク中の固形分を溶解又は均一に分散できる溶媒が好ましい。溶媒としては、例えば、1,2-ジクロロエタン、1,1,2-トリクロロエタン、クロロベンゼン、*o*-ジクロロベンゼン等の塩素系溶媒；テトラヒドロフラン、ジオキサン、アニソール、4-メチルアニソール等のエーテル系溶媒；トルエン、キシレン、メシチレン、エチルベンゼン、*n*-ヘキシルベンゼン、シクロヘキシルベンゼン等の芳香族炭化水素系溶媒；シクロヘキサン、メチルシクロヘキサン、*n*-ペンタン、*n*-ヘキサン、*n*-ヘプタン、*n*-オクタン、*n*-ノナン、*n*-デカン、*n*-ドデカン、ビスシクロヘキシル等の脂肪族炭化水素系溶媒；アセトン、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン、アセトフェノン等のケトン系溶媒；酢酸エチル、酢酸ブチル、エチルセルソルブアセテート、安息香酸メチル、酢酸フェニル等のエステル系溶媒；エチレングリコール、グリセリン、1,2-ヘキサジオール等の多価アルコール系溶媒；イソプロピルアルコール、シクロヘキサノール等のアルコール系溶媒；ジメチルスルホキシ

ド等のスルホキシド系溶媒；N-メチル-2-ピロリドン、N,N-ジメチルホルムアミド等のアミド系溶媒が挙げられる。

[0277] 本発明の組成物において、溶媒の配合量は、本発明の高分子化合物100質量部に対して、通常、1000～100000質量部であり、好ましくは2000～20000質量部である。

溶媒は、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0278] [正孔輸送材料]

正孔輸送材料は、低分子化合物と高分子化合物とに分類され、高分子化合物がより好ましい。

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

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

正孔輸送材料は、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0279] [電子輸送材料]

電子輸送材料は、低分子化合物と高分子化合物とに分類される。

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

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

もよい。

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

電子輸送材料は、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0280] [正孔注入材料及び電子注入材料]

正孔注入材料及び電子注入材料は、各々、低分子化合物と高分子化合物とに分類される。

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

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

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

正孔注入材料及び電子注入材料は、各々、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0281] ・イオンドープ

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

ドープするイオンの種類は、正孔注入材料であればアニオン、電子注入材料であればカチオンである。アニオンとしては、例えば、ポリスチレンスル

ホン酸イオン、アルキルベンゼンスルホン酸イオン、樟脳スルホン酸イオンが挙げられる。カチオンとしては、例えば、リチウムイオン、ナトリウムイオン、カリウムイオン、テトラブチルアンモニウムイオンが挙げられる。

ドーピングするイオンは、1種のみでも2種以上でもよい。

[0282] [発光材料]

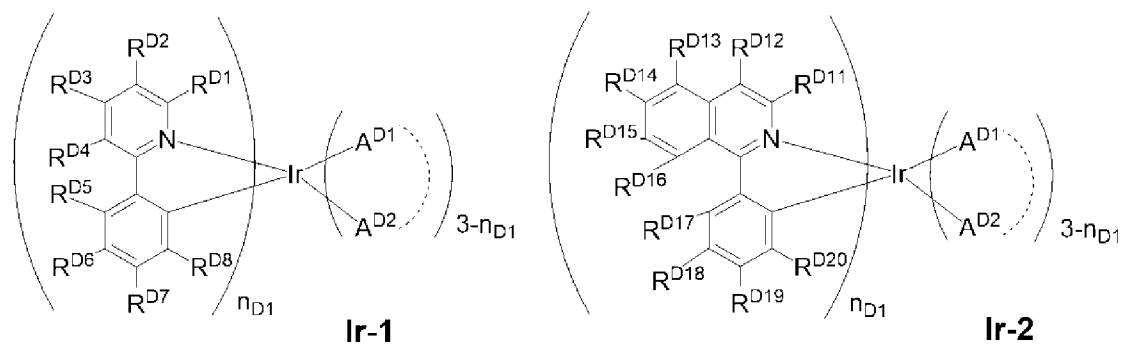
発光材料は、低分子化合物と高分子化合物とに分類される。

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

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

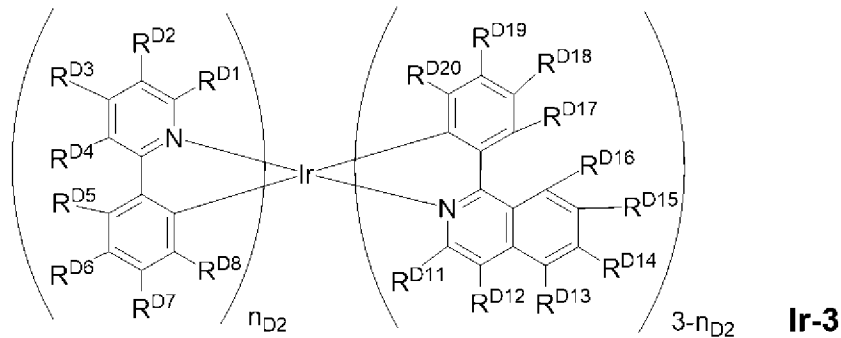
[0283] 発光材料は、低分子化合物及び高分子化合物を含んでいてもよく、好ましくは、三重項発光錯体及び高分子化合物を含む。三重項発光錯体としては、式Ir-1~Ir-5で表される金属錯体等のイリジウム錯体が好ましい。

[0284] [化101]

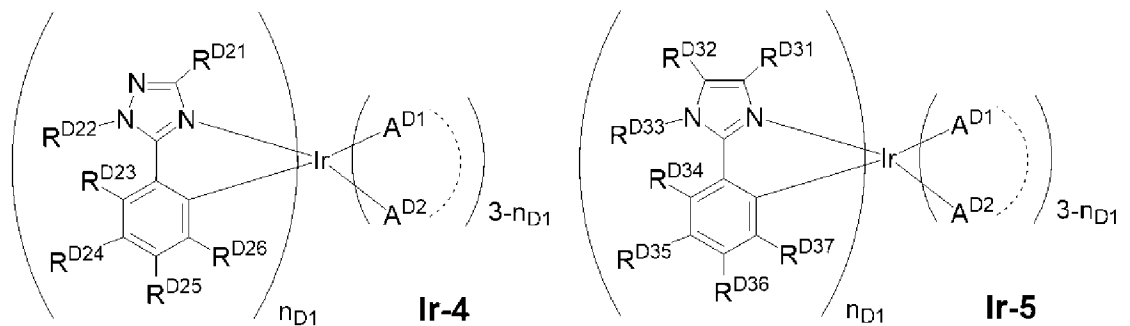


[0285]

[化102]



[0286] [化103]



[式中、

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

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

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

[0287] 式Ir-1で表される金属錯体において、 $R^{D1} \sim R^{D8}$ の少なくとも1つは、好ましくは、式(D-A)で表される基である。

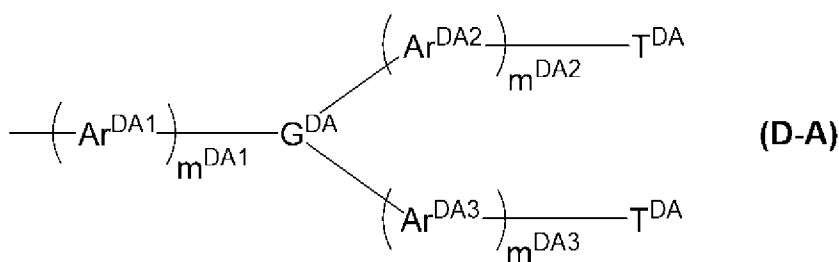
[0288] 式Ir-2で表される金属錯体において、好ましくは $R^{D11} \sim R^{D20}$ の少なくとも1つは式(D-A)で表される基である。

[0289] 式Ir-3で表される金属錯体において、好ましくは $R^{D1} \sim R^{D8}$ 及び $R^{D11} \sim R^{D20}$ の少なくとも1つは式(D-A)で表される基である。

[0290] 式Ir-4で表される金属錯体において、好ましくは $R^{D21} \sim R^{D26}$ の少なくとも1つは式(D-A)で表される基である。

[0291] 式Ir-5で表される金属錯体において、好ましくは $R^{D31} \sim R^{D37}$ の少なくとも1つは式(D-A)で表される基である。

[0292] [化104]



[式中、

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

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

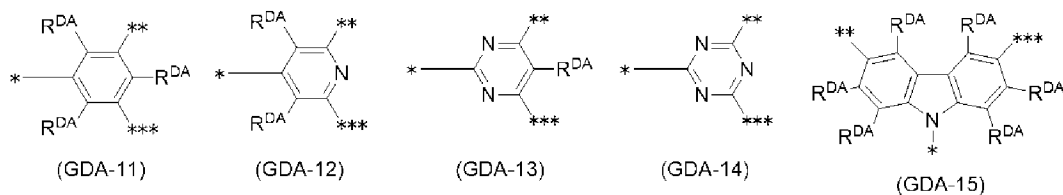
Ar^{DA1} 、 Ar^{DA2} 及び Ar^{DA3} は、それぞれ独立に、アリーレン基又は2価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 Ar^{DA1} 、 Ar^{DA2} 及び Ar^{DA3} が複数ある場合、それらはそれぞれ同一でも異なってもよい。

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

[0293] m^{DA1} 、 m^{DA2} 及び m^{DA3} は、通常10以下の整数であり、好ましくは5以下の整数であり、より好ましくは0又は1である。 m^{DA1} 、 m^{DA2} 及び m^{DA3} は、同一の整数であることが好ましい。

[0294] G^{DA} は、好ましくは式(GDA-11)～式(GDA-15)で表される基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0295] [化105]



[式中、

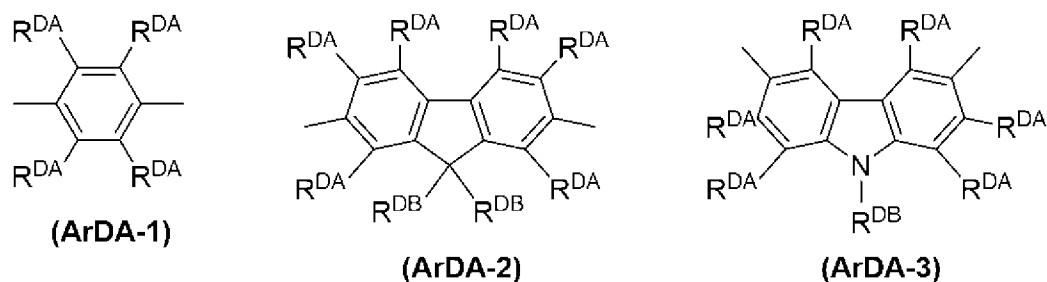
＊、＊＊及び＊＊＊は、各々、 $A r^{DA1}$ 、 $A r^{DA2}$ 、 $A r^{DA3}$ との結合を表す。

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

[0296] R^{DA} は、好ましくは水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基又はシクロアルコキシ基であり、より好ましくは水素原子、アルキル基又はシクロアルキル基であり、これらの基は置換基を有していてもよい。

[0297] $A r^{DA1}$ 、 $A r^{DA2}$ 及び $A r^{DA3}$ は、好ましくは式(ArDA-1)～式(ArDA-3)で表される基である。

[0298] [化106]



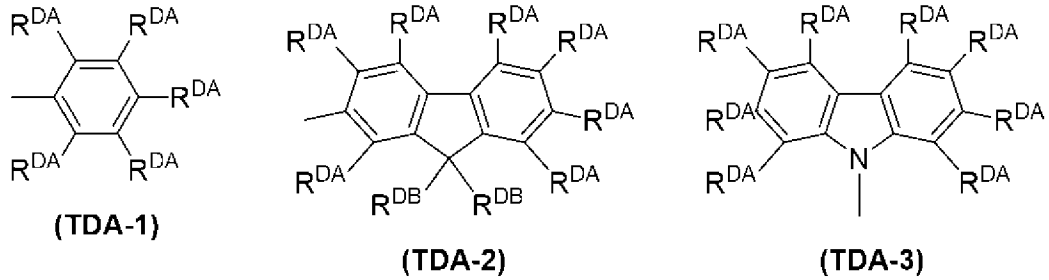
[式中、

R^{DA} は前記と同じ意味を表す。

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

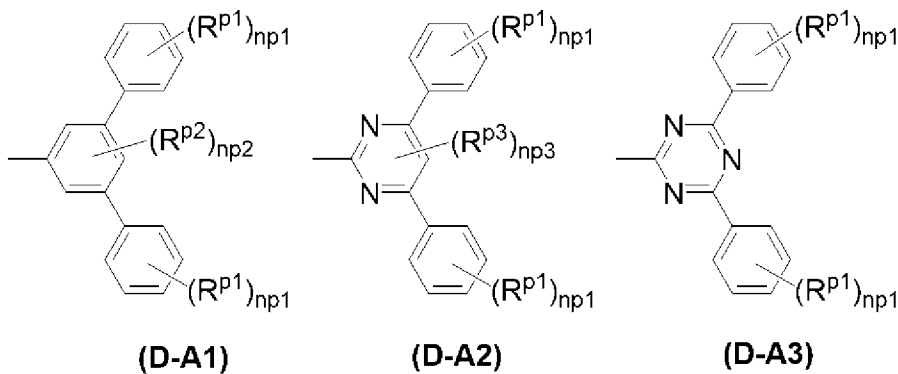
[0299] T^{DA} は、好ましくは式(TDA-1)～式(TDA-3)で表される基である。

[0300] [化107]

[式中、 R^{DA} 及び R^{DB} は前記と同じ意味を表す。]

[0301] 式(D-A)で表される基は、好ましくは式(D-A1)~式(D-A3)で表される基である。

[0302] [化108]



[式中、

R^{P1} 、 R^{P2} 及び R^{P3} は、それぞれ独立に、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基又はハロゲン原子を表す。 R^{P1} 及び R^{P2} が複数ある場合、それらはそれぞれ同一であっても異なってもよい。

n_{p1} は、0~5の整数を表し、 n_{p2} は0~3の整数を表し、 n_{p3} は0又は1を表す。複数ある n_{p1} は、同一でも異なってもよい。]

[0303] n_{p1} は、好ましくは0~3の整数であり、より好ましくは1~3の整数であり、更に好ましくは1である。

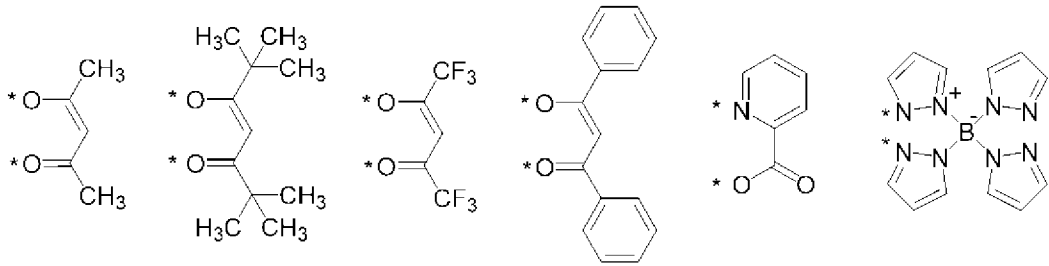
n_{p2} は、好ましくは0又は1であり、より好ましくは0である。

n_{p3} は好ましくは0である。

[0304] R^{P1} 、 R^{P2} 及び R^{P3} は、好ましくはアルキル基又はシクロアルキル基である。

[0305] $-A^{D1}-A^{D2}-$ で表されるアニオン性の2座配位子としては、例えば、下記式で表される配位子が挙げられる。

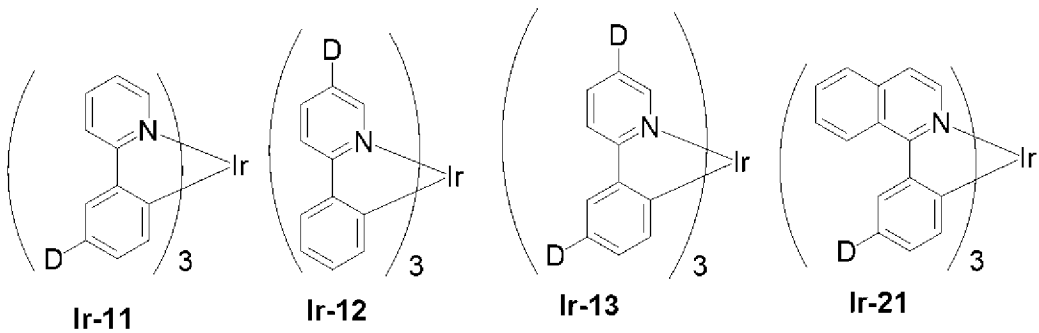
[0306] [化109]



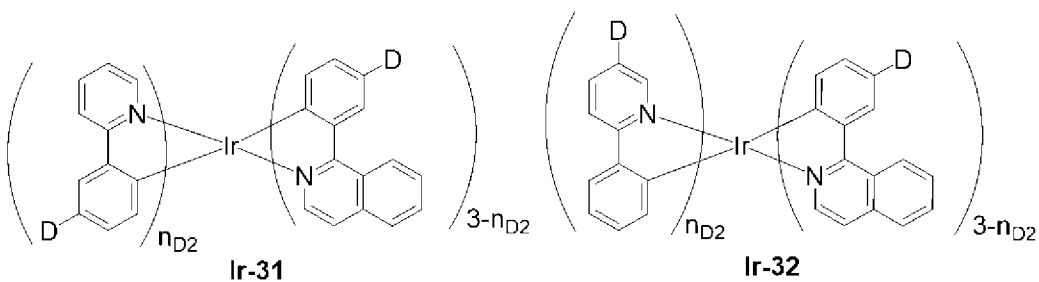
[式中、*は、Irと結合する部位を表す。]

[0307] 式Ir-1で表される金属錯体としては、好ましくは式Ir-11~Ir-13で表される金属錯体である。式Ir-2で表される金属錯体としては、好ましくは式Ir-21で表される金属錯体である。式Ir-3で表される金属錯体としては、好ましくは式Ir-31~Ir-33で表される金属錯体である。式Ir-4で表される金属錯体としては、好ましくは式Ir-41~Ir-43で表される金属錯体である。式Ir-5で表される金属錯体としては、好ましくは式Ir-51~Ir-53で表される金属錯体である。

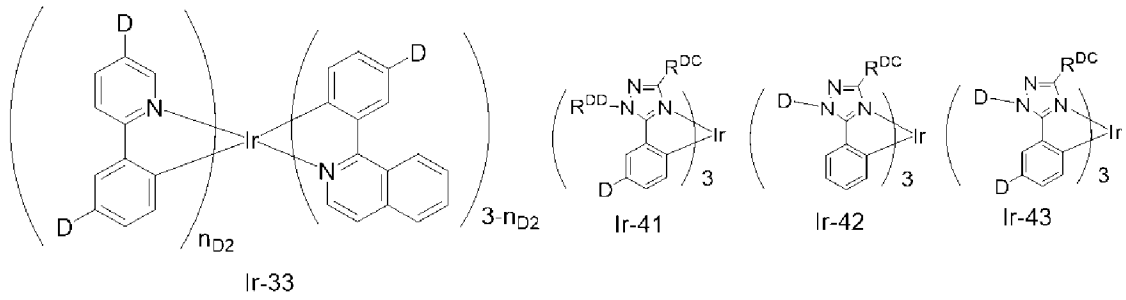
[0308] [化110]



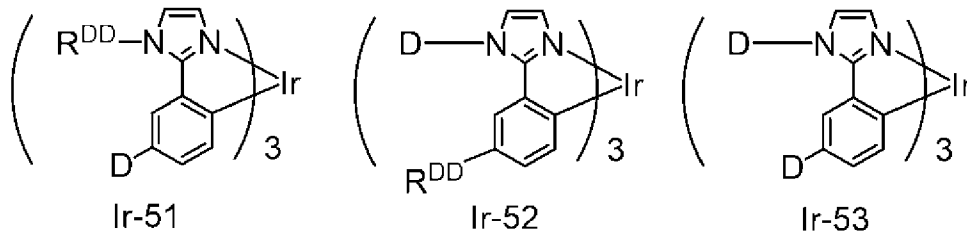
[0309] [化111]



[0310] [化112]



[0311] [化113]



[式中、

n_{D2} は、1又は2を表す。

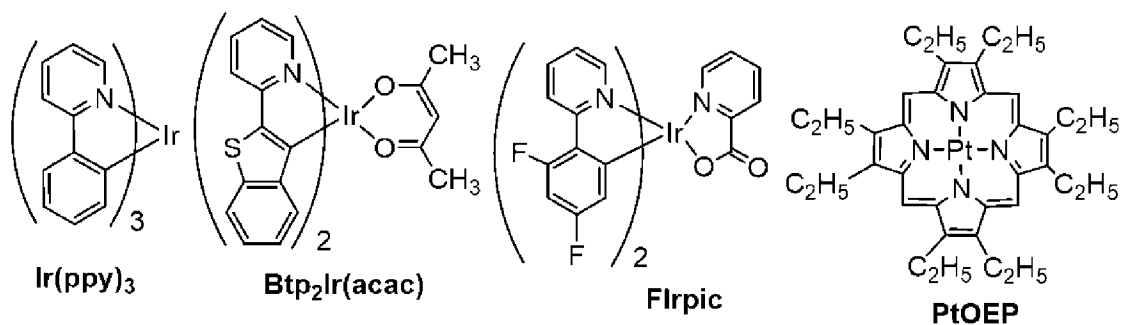
Dは、式(D-A)で表される基を表す。複数存在するDは、同一でも異なってもよい。

R^{DC} は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリアル基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{DC} は、同一でも異なってもよい。

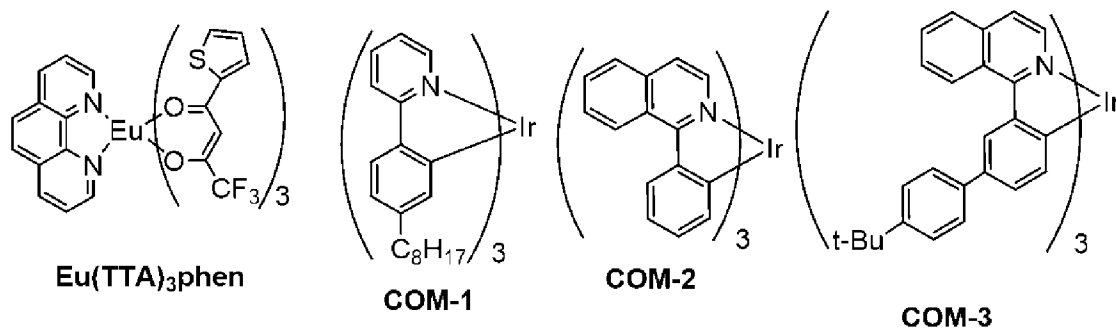
R^{DD} は、アルキル基、シクロアルキル基、アリアル基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在する R^{DD} は、同一でも異なってもよい。]

[0312] 三重項発光錯体としては、例えば、以下に示す金属錯体が挙げられる。

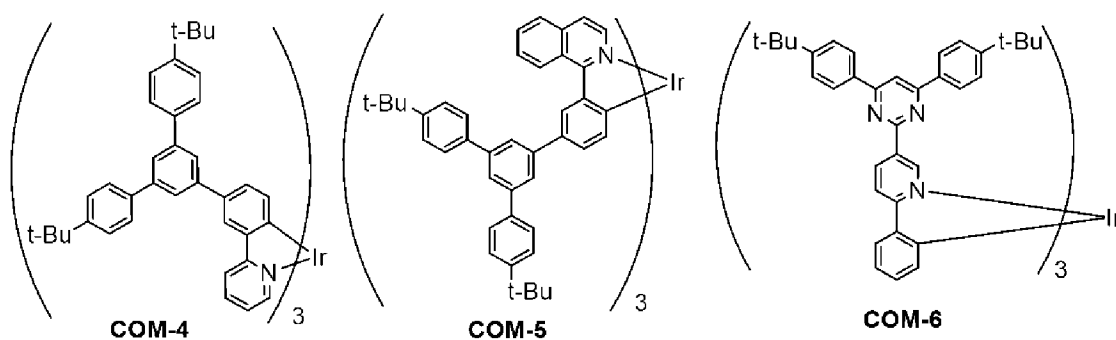
[0313] [化114]



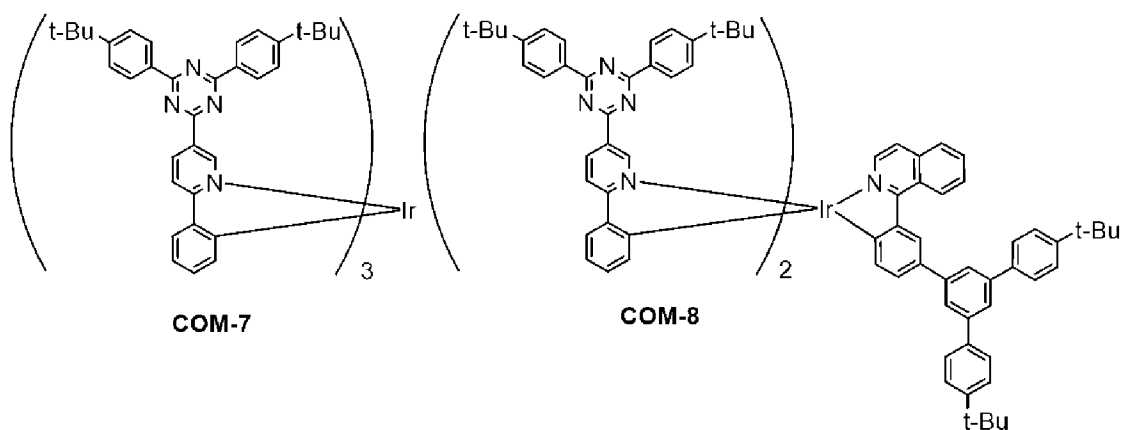
[0314] [化115]



[0315] [化116]



[0316] [化117]



[0317] 本発明の組成物において、発光材料の配合量は、本発明の高分子化合物100質量部に対して、通常、0.1~400質量部である。

発光材料は、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0318] [酸化防止剤]

酸化防止剤は、本発明の高分子化合物と同じ溶媒に可溶であり、発光及び電荷輸送を阻害しない化合物であればよく、例えば、フェノール系酸化防止

剤、リン系酸化防止剤が挙げられる。

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

酸化防止剤は、1種単独で用いても2種以上を併用してもよい。

[0319] <発光素子>

本発明の発光素子は、本発明の高分子化合物を含有する有機層を備えた発光素子である。本発明の発光素子の構成としては、例えば、陽極及び陰極からなる電極と、該電極間に設けられた本発明の高分子化合物を含有する層とを有する。

[0320] [層構成]

本発明の高分子化合物を含有する層は、通常、発光層、正孔輸送層、正孔注入層、電子輸送層、電子注入層の1種以上の層であり、好ましくは、発光層である。これらの層は、各々、発光材料、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料を含有する。これらの層は、各々、発光材料、正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料を、上述した溶媒に溶解させ、インクを調製して用い、例えば、スピコート法、キャスト法、マイクログラビアコート法、グラビアコート法、バーコート法、ロールコート法、ワイヤーバーコート法、ディップコート法、スプレーコート法、スクリーン印刷法、フレキソ印刷法、オフセット印刷法、インクジェット印刷法、キャピラリーコート法、ノズルコート法により形成することができる。

[0321] 発光素子は、陽極と陰極の間に発光層を有する。本発明の発光素子は、正孔注入性及び正孔輸送性の観点からは、陽極と発光層との間に、正孔注入層及び正孔輸送層の少なくとも1層を有することが好ましく、電子注入性及び電子輸送性の観点からは、陰極と発光層の間に、電子注入層及び電子輸送層の少なくとも1層を有することが好ましい。

[0322] 正孔輸送層、電子輸送層、発光層、正孔注入層、及び、電子注入層の材料としては、本発明の高分子化合物の他、各々、上述した正孔輸送材料、電子

輸送材料、発光材料、正孔注入材料、及び、電子注入材料が挙げられる。

[0323] 本発明の発光素子において、発光層、正孔輸送層、電子輸送層、正孔注入層、電子注入層等の各層の形成方法としては、低分子化合物を用いる場合、例えば、粉末からの真空蒸着法、溶液又は熔融状態からの成膜による方法が挙げられ、高分子化合物を用いる場合、例えば、溶液又は熔融状態からの成膜による方法が挙げられる。

[0324] 積層する層の順番、数、及び、厚さは、発光効率及び素子寿命を勘案して調整すればよい。

[0325] [基板/電極]

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

[0326] 陽極の材料としては、例えば、導電性の金属酸化物、半透明の金属が挙げられ、好ましくは、酸化インジウム、酸化亜鉛、酸化スズ；インジウム・スズ・オキサイド(ITO)、インジウム・亜鉛・オキサイド等の導電性化合物；銀とパラジウムと銅との複合体(APC)；NESA、金、白金、銀、銅である。

[0327] 陰極の材料としては、例えば、リチウム、ナトリウム、カリウム、ルビジウム、セシウム、ベリリウム、マグネシウム、カルシウム、ストロンチウム、バリウム、アルミニウム、亜鉛、インジウム等の金属；それらのうち2種以上の合金；それらのうち1種以上と、銀、銅、マンガン、チタン、コバルト、ニッケル、タングステン、錫のうち1種以上との合金；並びに、グラファイト及びグラファイト層間化合物が挙げられる。合金としては、例えば、マグネシウム－銀合金、マグネシウム－インジウム合金、マグネシウム－アルミニウム合金、インジウム－銀合金、リチウム－アルミニウム合金、リチウム－マグネシウム合金、リチウム－インジウム合金、カルシウム－アルミニウム合金が挙げられる。

[0328] 陽極及び陰極は、各々、2層以上の積層構造としてもよい。

[0329] [用途]

発光素子を用いて面状の発光を得るためには、面状の陽極と陰極が重なり合うように配置すればよい。パターン状の発光を得るためには、面状の発光素子の表面にパターン状の窓を設けたマスクを設置する方法、非発光部にしたい層を極端に厚く形成し実質的に非発光とする方法、陽極若しくは陰極、又は両方の電極をパターン状に形成する方法がある。これらのいずれかの方法でパターンを形成し、いくつかの電極を独立にON/OFFできるように配置することにより、数字、文字等を表示できるセグメントタイプの表示装置が得られる。ドットマトリックス表示装置とするためには、陽極と陰極を共にストライプ状に形成して直交するように配置すればよい。複数の種類の発光色の異なる高分子化合物を塗り分ける方法、カラーフィルター又は蛍光変換フィルターを用いる方法により、部分カラー表示、マルチカラー表示が可能となる。ドットマトリックス表示装置は、パッシブ駆動も可能であるし、TFT等と組み合わせてアクティブ駆動も可能である。これらの表示装置は、コンピュータ、テレビ、携帯端末等のディスプレイに用いることができる。面状の発光素子は、液晶表示装置のバックライト用の面状光源、又は、面状の照明用光源として好適に用いることができる。フレキシブルな基板を用いれば、曲面状の光源、及び、表示装置としても使用できる。

実施例

[0330] 以下、実施例によって本発明を更に詳細に説明するが、本発明はこれらの実施例に限定されるものではない。

[0331] 実施例において、高分子化合物のポリスチレン換算の数平均分子量(Mn)及びポリスチレン換算の重量平均分子量(Mw)は、移動相にテトラヒドロフランを用い、下記のサイズエクスクルージョンクロマトグラフィー(SEC)のいずれかにより求めた。なお、SECの各測定条件は、次のとおりである。

[0332] 測定する高分子化合物を約0.05質量%の濃度でテトラヒドロフランに溶解させ、SECに10 μ L注入した。移動相は、1.0mL/分の流量で流した。カラムとして、PLgel MIXED-B (ポリマーラボラトリ

ーズ製)を用いた。検出器にはUV-VIS検出器(東ソー製、商品名:UV-8320GPC)を用いた。

[0333] LC-MSは、下記の方法で測定した。

測定試料を約2mg/mLの濃度になるようにクロロホルム又はテトラヒドロフランに溶解させ、LC-MS(Agilent製、商品名:1290Infinity LC及び6230 TOF LC/MS)に約1 μ L注入した。LC-MSの移動相には、アセトニトリル及びテトラヒドロフランの比率を変化させながら用い、1.0mL/分の流量で流した。カラムは、SUMIPAX ODS Z-CLUE(住化分析センター製、内径:4.6mm、長さ:250mm、粒径3 μ m)を用いた。

[0334] NMRは、下記の方法で測定した。

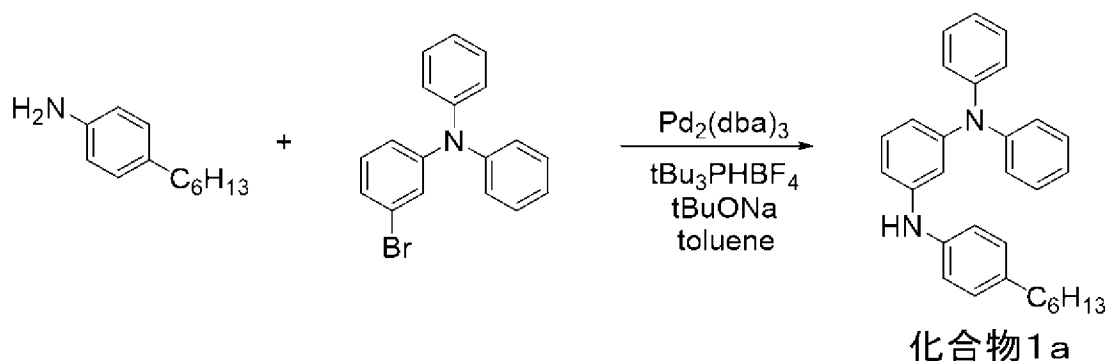
5~10mgの測定試料を約0.5mLの重クロロホルム(CDCI₃)、重テトラヒドロフラン、重ジメチルスルホキシド、重アセトン、重N,N-ジメチルホルムアミド、重トルエン、重メタノール、重エタノール、重2-プロパノール又は重塩化メチレンに溶解させ、NMR装置(Agilent製、商品名:INOVA300、又は、JEOL RESONANCE製、商品名:JNM-ECZ400S/L1)を用いて測定した。

[0335] 化合物の純度の指標として、高速液体クロマトグラフィー(HPLC)面積百分率の値を用いた。この値は、HPLC(島津製作所製、商品名:LC-20A)でのUV=254nmにおける値とする。この際、測定する化合物は、0.01~0.2質量%の濃度になるようにテトラヒドロフラン又はクロロホルムに溶解させ、濃度に応じてHPLCに1~10 μ L注入した。HPLCの移動相には、アセトニトリル/テトラヒドロフランの比率を100/0~0/100(容積比)まで変化させながら用い、1.0mL/分の流量で流した。カラムは、SUMIPAX ODS Z-CLUE(住化分析センター製、内径:4.6mm、長さ:250mm、粒径3 μ m)又は同等の性能を有するODSカラムを用いた。検出器には、フォトダイオードアレイ検出器(島津製作所製、商品名:SPD-M20A)を用いた。

[0336] <合成例 1> 化合物 1 の合成

(化合物 1 a の合成)

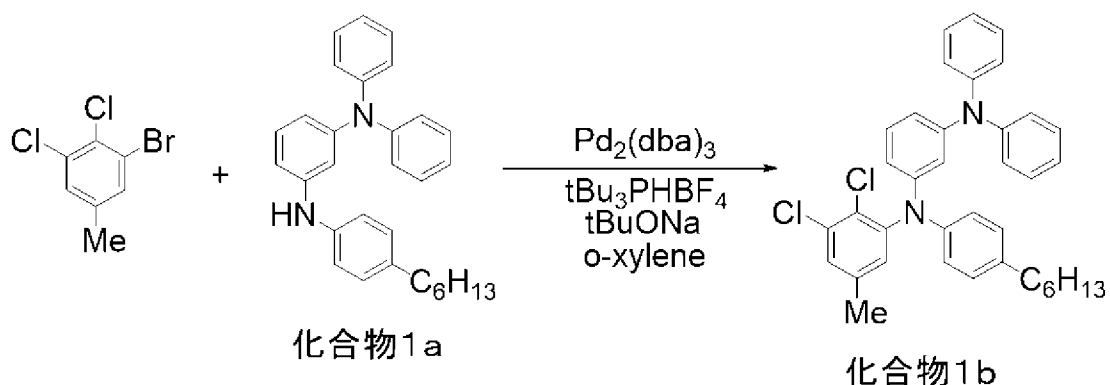
[0337] [化118]



[0338] 反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、4-ヘキシルアニリン(19.2g)、3-ブロモトリフェニルアミン(28.0g)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3(\text{dba})_{0.73}$ (1.45g)、 $\text{t-Bu}_3\text{PHBF}_4$ (0.75g)、 t-BuONa (16.6g)及びトルエン(350mL)を加え、 50°C で2.5時間攪拌した。得られた混合物を室温まで冷却した後、シリカゲルショートカラムでろ過した。得られたろ液を減圧濃縮することにより茶色のオイルを得た。得られたオイルをシリカゲルカラムクロマトグラフィー(ヘキサン及びトルエンの混合溶媒)により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、化合物1a(29.6g、無色オイル)を得た。化合物1aのHPLC面積百分率値は99.2%であった。

[0339] (化合物 1 b の合成)

[0340] [化119]

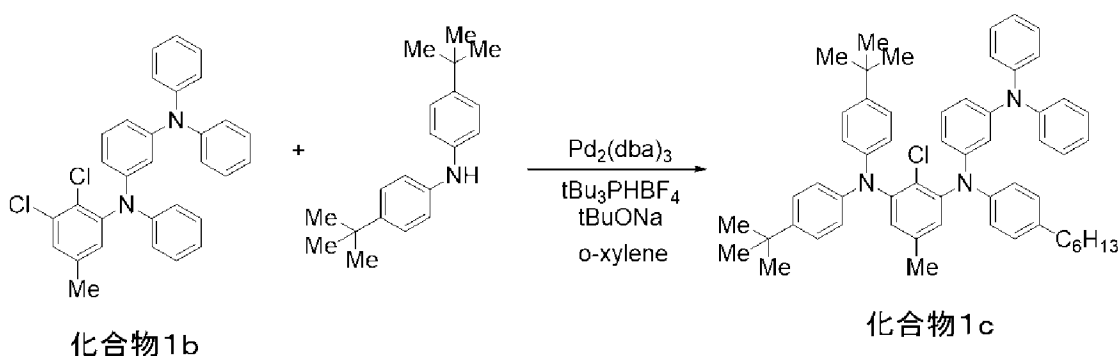


[0341] 反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、3-ブロモ-4,5-ジクロロトルエン(8.2g)、化合物1a(14.8g)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3(\text{dba})_{0.73}$ (0.56g)、 $\text{t-Bu}_3\text{PHBF}_4$ (0.30g)、 t-Bu

ONa(6.6g)及びo-キシレン(130g)を加え、50℃で2.5時間攪拌した。得られた混合物を室温まで冷却した後、シリカゲル・セライトを積層したショートコラムでろ過した。得られたろ液を減圧濃縮することにより茶色のオイルを得た。得られたオイルをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン及びトルエンの混合溶媒）により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、化合物1b(14.9g、無色オイル)を得た。化合物1bのHPLC面積百分率値は99.0%であった。

[0342] (化合物1cの合成)

[0343] [化120]

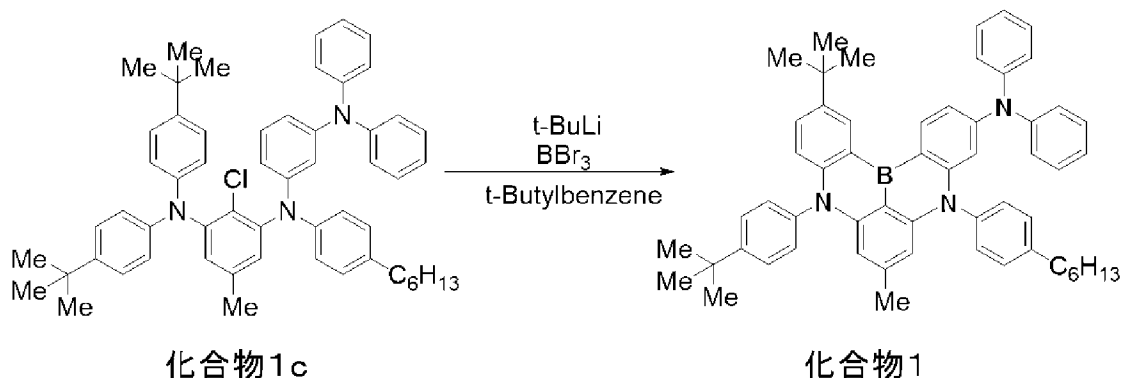


[0344] 反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、ビス(4-tert-ブチルフェニル)アミン(7.0g)、化合物1b(12.5g)、Pd₂(dba)₃(dba)_{0.73}(0.42g)、t-Bu₃PHBF₄(0.23g)、t-BuONa(3.7g)及びo-キシレン(42g)を加え、50℃で10時間攪拌し、次いで、70℃で1時間攪拌した。得られた混合物を室温まで冷却した後、シリカゲル・セライトを積層したショートコラムでろ過した。得られたろ液を減圧濃縮することにより茶色のオイルを得た。得られたオイルをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン及びトルエンの混合溶媒）により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、化合物1c(9.2g、無色オイル)を得た。化合物1cのHPLC面積百分率値は92.2%であった。

[0345] (化合物1の合成)

[0346]

[化121]



[0347] 反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、化合物1c(7.5g)及びtert-ブチルベンゼン(56mL)を加え、0℃に冷却した後、そこに、0℃を維持しながらt-BuLi・ペンタン溶液(1.5M, 9.6mL)をゆっくりと加えた。得られた混合物を60℃で3時間攪拌した後、減圧下でペンタンを留去した。得られた混合物を-50℃まで冷却した後、BBr₃(4.5g)を加え、-50℃で0.5時間攪拌した。得られた混合物を120℃まで昇温し、120℃で3時間反応させた。得られた混合物を室温まで冷却した後、酢酸ナトリウム水溶液及び酢酸エチルを加え、得られた有機層をイオン交換水で洗浄した。得られた有機層を減圧濃縮することにより黄色のオイルを得た。得られたオイルをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン及びトルエンの混合溶媒）により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、黄色の固体を得た。得られた固体をアセトニトリルに分散させた後、ろ過することで、化合物1（1.1g、黄色固体）を得た。化合物1のHPLC面積百分率値は99.4%であった。

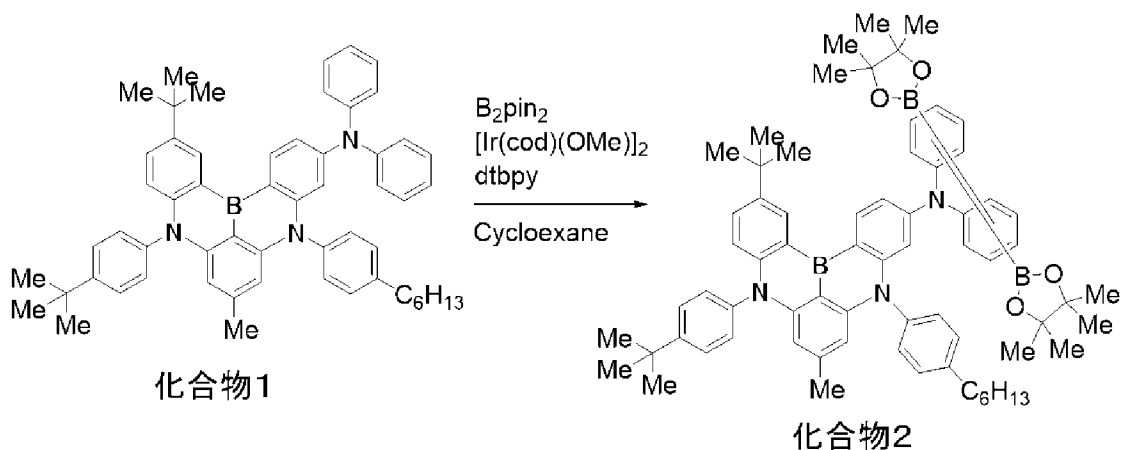
[0348] LC-MS(APCI, positive) : m/z=798.5 [M+H]⁺

¹H-NMR(CD₂Cl₂, 400MHz) δ (ppm) : 0.92(m, 3H), 1.36(m, 6H), 1.39(s, 9H), 1.44(s, 9H), 1.58(m, 2H), 2.08(s, 3H), 2.61(dd, 2H), 5.92(d, 2H), 6.19(d, 1H), 6.61(d, 1H), 6.87(dd, 1H), 7.02(t, 2H), 7.07(m, 6H), 7.2-7.3(m, 8H), 7.42(dd, 1H), 7.68(d, 2H), 8.67(d, 1H), 8.79(d, 1H).

[0349] <合成例2> 化合物2の合成

[0350]

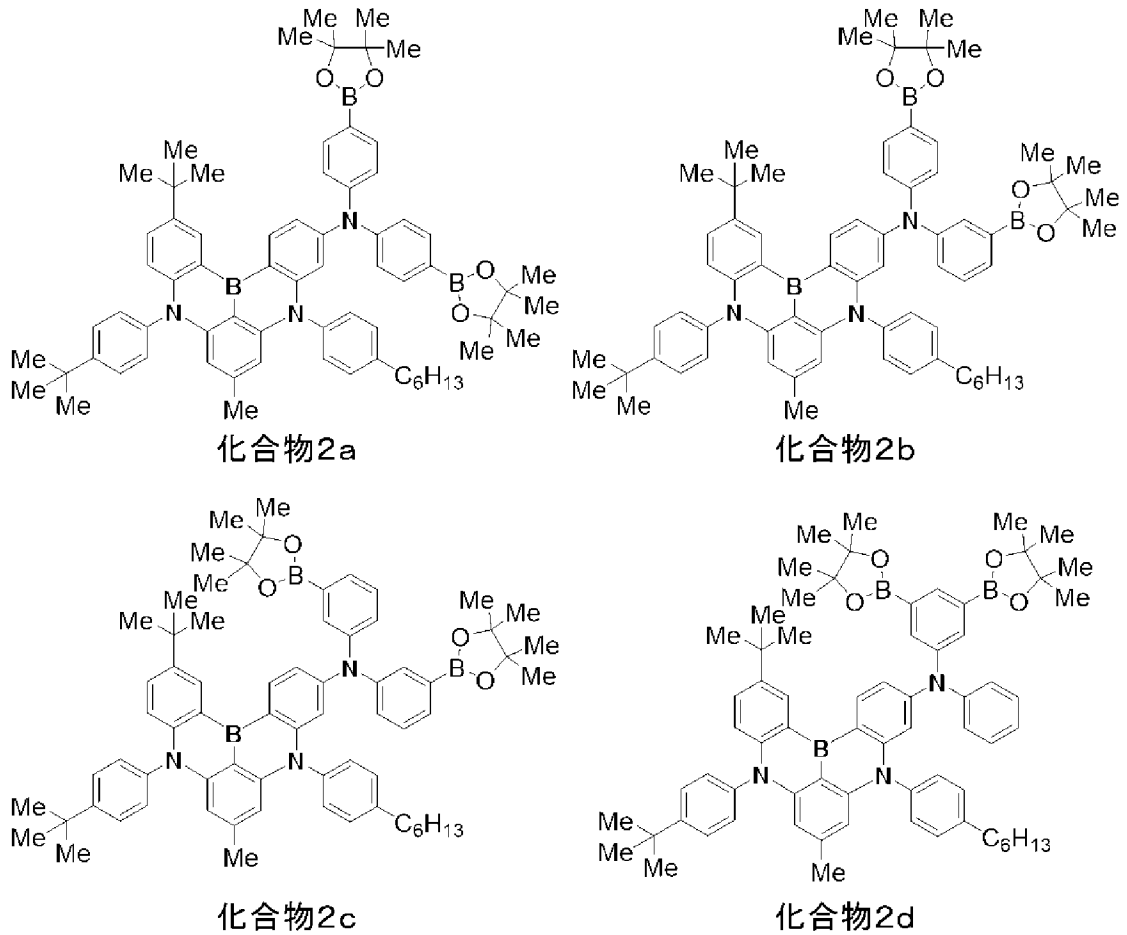
[化122]



[0351] 反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、化合物1 (0.91g)、ビス(ピナコラト)ジボロン(B_2pin_2 ; 0.58g)、4,4'-ジ-tert-ブチル-2,2'-ビピリジル(dtbpy; 0.013g)、(1,5-シクロオクタジエン)(メトキシ)イリジウム(I)ダイマー($[Ir(cod)(OMe)]_2$; 0.0155g)及びシクロヘキサン(23mL)を加え、90°Cで2時間攪拌した。得られた混合物を室温まで冷却した後、得られた有機層をイオン交換水で洗浄した。得られた有機層を分液し、有機層に不溶の固体をろ過して取り除き、得られたろ液を減圧濃縮することにより黄色のオイルを得た。得られたオイルをシリカゲルカラムクロマトグラフィー(ヘキサン及びトルエンの混合溶媒)により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、化合物2 (0.21g、黄色オイル)を得た。化合物2のHPLC面積百分率値は97.4%であった。化合物2は、4種の異性体の混合物として得られ、そのモル比は化合物2a : 化合物2b : 化合物2c : 化合物2d = 7.5 : 37.1 : 43.0 : 12.4であった。

[0352]

[化123]



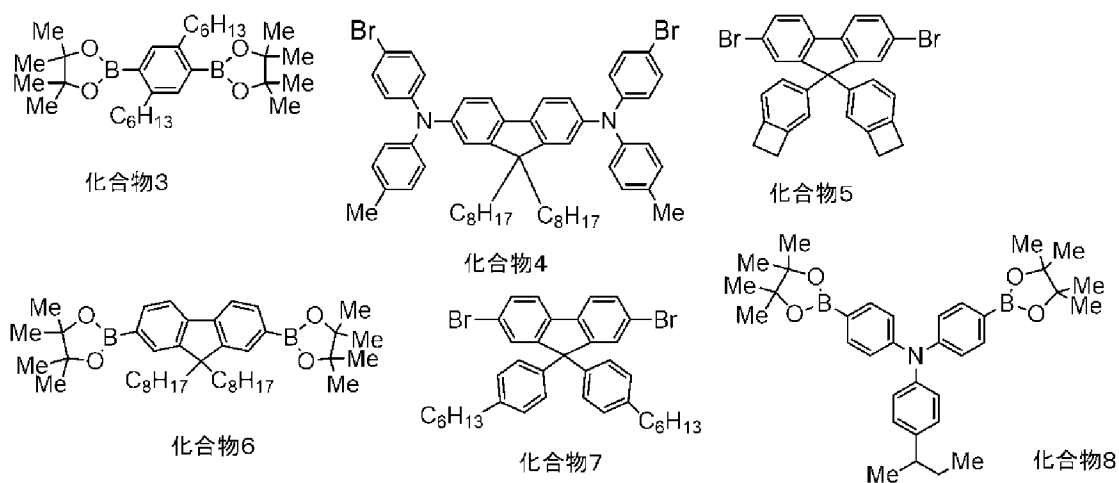
[0353] $^1\text{H-NMR}$ (CD_2Cl_2 , 400MHz) δ (ppm) : 0.92(m, 3H), 1.30, 1.32, 1.38, 1.39, 1.44(s, 計33H), 1.3-1.4(m, (6H)), 1.44(s, 9H), 1.58(m, 2H), 2.08(m, 3H), 2.59(t, 2H), 5.92(m, 2H), 6.09(d, 0.12H:化合物2d), 6.11(d, 0.43H:化合物2c), 6.20(d, 0.37H:化合物2b), 6.26(d, 0.08H:化合物2a), 6.60(d, 0.6H), 6.61(d, 0.4H), 6.80(m, 0.6H), 6.86(m, 0.4H), 7.0-7.1(m, 4.3H), 7.1-7.2(m, 1.2H), 7.2-7.3(m, 5.5H), 7.4-7.5(m, 2.6H), 7.51(m, 0.27H:化合物2d), 7.59(m, 1H), 7.68(d, 2H), 7.83(m, 0.13H:化合物2d), 8.6-8.7(m, 1H), 8.79(m, 1H).

[0354] <合成例3> 化合物3~8及び化合物11~12の合成及び入手
 化合物3は、特開2010-189630号公報に記載の方法に従って合成した。
 化合物4は、特表2007-512249号公報に記載の方法に従って合成した。
 化合物5は、特開2008-106241号公報に記載の方法に従って合成した。
 化合物6は、市販品を用いた。

化合物 7 は、国際公開第2009/131255号に記載の方法に従って合成した。

化合物 8 は、国際公開第2016/031639号に記載の方法に従って合成した。

[0355] [化124]



[0356] <合成例4> 高分子化合物1の合成

(工程1) 反応容器内を不活性ガス雰囲気とした後、化合物3 (3.995g)、化合物4 (6.237g)、化合物5 (0.519g)、ジクロロビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(7.1mg)及びトルエン(190mL)を加え、105°Cに加熱した。

(工程2) その後、そこへ、20質量%水酸化テトラエチルアンモニウム水溶液(28mL)を滴下し、4時間還流させた。その後、そこへ、フェニルボロン酸(97.5mg)、20質量%水酸化テトラエチルアンモニウム水溶液(28mL)及びジクロロビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(7.1mg)を加え、6時間還流させた。得られた反応混合物を冷却した後、水で2回、10質量%塩酸水溶液で2回、3質量%アンモニア水で2回、水で2回洗浄した。得られた溶液をメタノールに滴下し、攪拌したところ、沈澱が生じた。得られた沈澱物をトルエンに溶解させ、アルミナカラム、シリカゲルカラムの順番に通液することにより精製した。得られた溶液をメタノールに滴下し、攪拌したところ、沈澱が生じた。得られた沈澱物をろ取し、乾燥させることにより、高分子化合物1を6.65g得た。高分子化合物1のMnは 2.6×10^4 であり、Mwは 1.4×10^5 であった。

[0357] 高分子化合物 1 は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物 3 から誘導される構成単位と、化合物 4 から誘導される構成単位と、化合物 5 から誘導される構成単位とが、50 : 42.5 : 7.5 のモル比で構成されてなる共重合体である。

[0358] <実施例 1> 高分子化合物 2 の合成

(工程 1) 反応容器内を不活性ガス雰囲気とした後、化合物 2 (0.104g)、化合物 6 (0.502g)、化合物 7 (0.628g)、ジクロロビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(0.86mg)及びトルエン(27mL)を混合し、105°C に加熱した。

(工程 2) その後、そこへ、10 質量%水酸化テトラエチルアンモニウム水溶液(18mL)を滴下し、4 時間還流させた。その後、そこへ、フェニルボロン酸(48.8mg)及びジクロロビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(0.9mg)を加え、6 時間還流させた。得られた反応混合物を冷却した後、水で 2 回、10 質量%塩酸水溶液で 2 回、3 質量%アンモニア水で 2 回、水で 2 回洗浄した。得られた溶液をメタノールに滴下し、攪拌したところ、沈殿が生じた。得られた沈殿物をトルエンに溶解させ、アルミナカラム、シリカゲルカラムの順番に通液することにより精製した。得られた溶液をメタノールに滴下し、攪拌したところ、沈殿が生じた。得られた沈殿物をろ取し、乾燥させることにより、高分子化合物 2 を 0.68 g 得た。高分子化合物 2 の Mn は 4.5×10^4 であり、Mw は 1.1×10^5 であった。

[0359] 高分子化合物 2 は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物 6 から誘導される構成単位と、化合物 7 から誘導される構成単位と、化合物 2 から誘導される構成単位とが、45 : 50 : 5 のモル比で構成されてなる共重合体である。

[0360] <合成例 5> 高分子化合物 3 の合成

実施例 1 において、(工程 1)を、「反応容器内を不活性ガス雰囲気とした後、化合物 8 (0.096g)、化合物 6 (0.916g)、化合物 7 (1.119g)、ジクロロビス(フェニルホスフィン)パラジウム(1.5mg)及びトルエン(47mL)を混合し、10

5°Cに加熱した。」とする以外は、実施例1と同様にして、高分子化合物3を1.1g得た。高分子化合物3のMnは 5.0×10^4 であり、Mwは 1.1×10^5 であった。

[0361] 高分子化合物3は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物6から誘導される構成単位と、化合物7から誘導される構成単位と、化合物8から誘導される構成単位とが、45 : 50 : 5のモル比で構成されてなる共重合体である。

[0362] <実施例D1> 発光素子D1の作製と評価

ガラス基板にスパッタ法により45nmの厚みでITO膜を付けることにより陽極を形成した。陽極上に、正孔注入材料であるND-3202（日産化学工業製）をスピコート法により35nmの厚さで成膜し、大気雰囲気下において、ホットプレート上で240°C、15分間加熱することにより正孔注入層を形成した。

キシレンに、高分子化合物1を0.6質量%の濃度で溶解させた。得られたキシレン溶液を用いて、正孔注入層の上に、スピコート法により20nmの厚さで成膜し、窒素ガス雰囲気下において、ホットプレート上で200°C、30分間加熱することにより正孔輸送層を形成した。

キシレンに、高分子化合物2を1.3質量%の濃度で溶解させた。得られたキシレン溶液を用いて、正孔輸送層の上に、スピコート法により60nmの厚さで成膜し、窒素ガス雰囲気下において、ホットプレート上で150°C、10分間加熱することにより発光層を形成した。

発光層を形成した基板を蒸着機内において、 1×10^{-4} Pa以下にまで減圧した後、陰極として、発光層の上に、フッ化ナトリウムを約7nm、次いで、フッ化ナトリウム層の上に、アルミニウムを約120nm蒸着した。蒸着後、ガラス基板を用いて封止することにより、発光素子D1を作製した。

発光素子D1に電圧を印加することにより、最大外部量子収率は4.1%であり、460nmに発光スペクトルの最大ピーク波長を有するEL発光が観測された。この時のCIE1931色度座標は、(0.142, 0.071)であった。電流密度が10mA/cm²となるように電流値を設定後、定電流密度で駆動させ、輝

度の時間変化を測定した。輝度が初期輝度の60%となるまでの時間は、44時間であった。

[0363] <実施例D 2> 発光素子D 2の作製と評価

実施例D 1において、高分子化合物2に代えて、高分子化合物2と高分子化合物3の質量比で50:50の組成物を用いた以外は、実施例D 1と同様にして、発光素子D 2を作製した。

発光素子D 2に電圧を印加することにより、最大外部量子収率は3.3%であり、460nmに発光スペクトルの最大ピーク波長を有するEL発光が観測された。この時のCIE1931色度座標は、(0.145, 0.067)であった。電流密度が10mA/cm²となるように電流値を設定後、定電流密度で駆動させ、輝度の時間変化を測定した。輝度が初期輝度の60%となるまでの時間は、54時間であった。

[0364] <比較例CD 1> 発光素子CD 1の作製と評価

実施例D 1において、高分子化合物1に代えて、高分子化合物3を用いた以外は、実施例D 1と同様にして、発光素子CD 1を作製した。

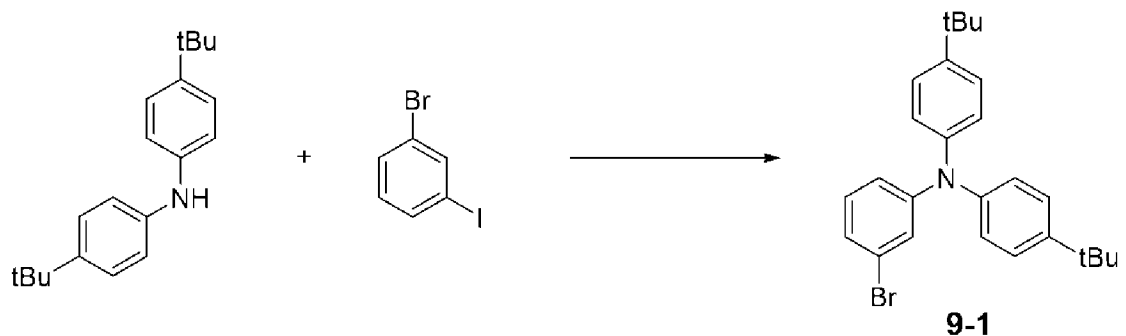
発光素子CD 1に電圧を印加することにより、最大外部量子収率は3.1%であり、440nmに発光スペクトルの最大ピーク波長を有するEL発光が観測された。この時のCIE1931色度座標は、(0.156, 0.063)であった。電流密度が10mA/cm²となるように電流値を設定後、定電流で駆動させ、輝度の時間変化を測定した。輝度が初期輝度の60%となるまでの時間は、38時間であった。

[0365] <合成例6> 化合物9の合成

(化合物9-1の合成)

[0366]

[化125]



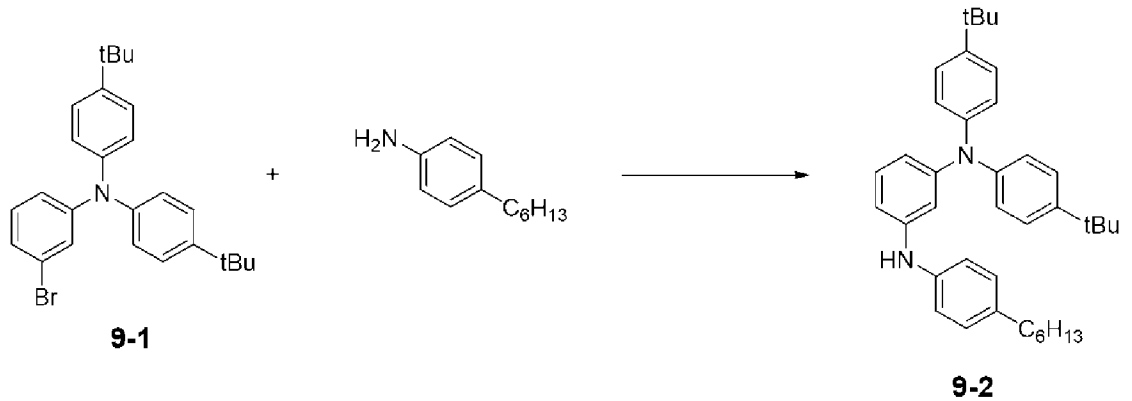
[0367] 反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、ビス(4-tert-ブチルフェニル)アミン(150.59g)、1-ブromo-3-ヨードベンゼン(147g)、酢酸パラジウム(II)(1.11g)、キサントホス(Xantphos)(2.87g)、t-BuONa(72g)及びトルエン(1262mL)を加え、80℃で2時間攪拌した。得られた混合物を室温まで冷却した後、シリカゲル・セライトを積層したショートカラムでろ過した。得られたろ液を減圧濃縮することにより粗生成物を得た。得られた粗生成物をメタノールに分散させた後、加熱還流した。得られた混合物を冷却した後、得られた粗生成物をろ取することで黄土色の粉末を得た。得られた粉末をメタノールに分散させて洗浄し、更にシリカゲルカラムクロマトグラフィー(ヘキサン及びトルエンの混合溶媒)により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、化合物9-1(190.3g、薄黄色固体)を得た。化合物9-1のHPLC面積百分率値は98.5%であった。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 400MHz) δ (ppm) : 7.26(d, 4H), 7.16(m, 1H), 7.03-6.97(m, 3H), 6.91(ddd, 1H), 1.28(s, 18H).

[0368] (化合物9-2の合成)

[0369]

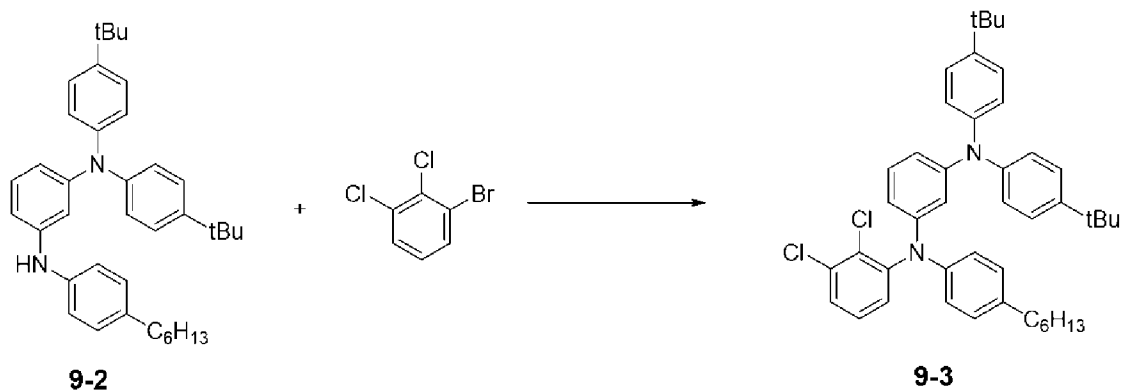
[化126]



[0370] 反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、化合物9-1(169.5g)、4-ヘキシルアニリン(84.8g)、Pd₂(dba)₃(dba)_{0.75}(6.26g)、t-Bu₃PHBF₄(3.33g)、t-BuONa(55.13g)及びトルエン(2117mL)を加え、20℃で1.5時間攪拌した。得られた混合物をシリカゲル・セライトを積層したショートカラムでろ過し、得られたろ液を減圧濃縮することにより粗生成物を得た。得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン及びトルエンの混合溶媒）により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、化合物9-2(181.3g、オイル)を得た。化合物9-2のHPLC面積百分率値は99%であった。これらの操作を繰り返し行うことで、化合物9-2の必要量を得た。

[0371] (化合物9-3の合成)

[0372] [化127]



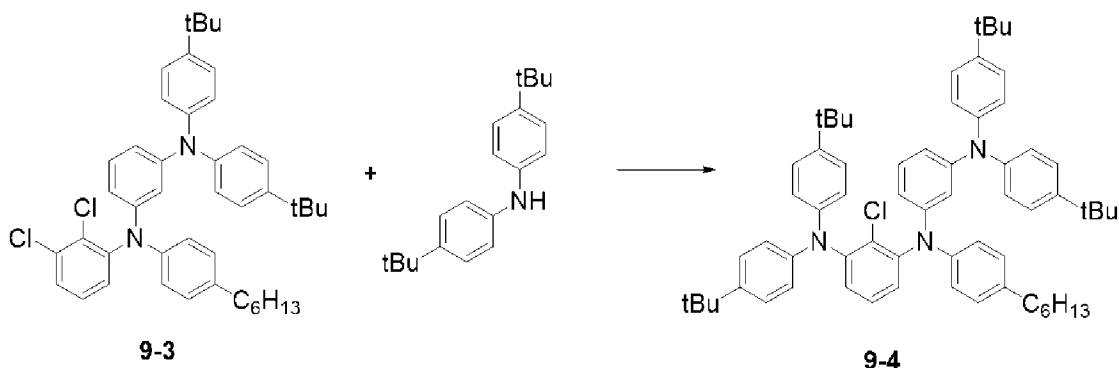
[0373] 反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、1-ブromo-2,3-ジクロロベンゼン(77.2g)、化合物9-2(197.5g)、Pd₂(dba)₃(dba)_{0.75}(6.11g)、t-Bu₃PHBF₄(3.24g)、t-BuONa(53.3g)及びトルエン(1337g)を加え、50℃で4時間攪拌した。得

られた混合物を室温まで冷却した後、シリカゲル・セライトを積層したショートカラムでろ過した。得られたろ液を減圧濃縮することにより粗生成物を得た。得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン及びトルエンの混合溶媒）により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、化合物9-3（220g、白色固体）を得た。化合物9-3のHPLC面積百分率値は99%であった。

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 400MHz) δ (ppm) : 7.24–7.15(m, 6H), 7.08(d, 1H), 7.07(s, 1H), 7.04–6.95(m, 6H), 6.88(d, 2H), 6.58(dd, 1H), 6.52(dd, 1H), 6.45(dd, 1H), 2.50(dd, 2H), 1.57(m, 2H), 1.28(m, 24H), 0.87(t, 3H).

[0374] (化合物9-4の合成)

[0375] [化128]

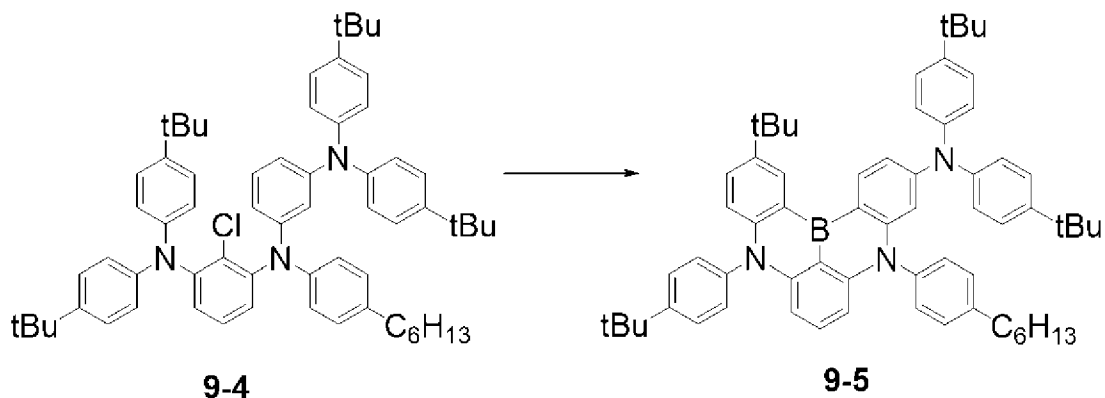


[0376] 反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、ビス(4-tert-ブチルフェニル)アミン(92.0g)、化合物9-3(195.0g)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3(\text{dba})_{0.75}$ (4.38g)、 $\text{t-Bu}_3\text{PHBF}_4$ (2.33g)、 t-BuONa (38.6g)及びトルエン(1323g)を加え、 50°C で5時間攪拌し、次いで、 70°C で1時間攪拌した。得られた混合物を室温まで冷却した後、シリカゲル・セライトを積層したショートカラムでろ過し、得られたろ液を減圧濃縮することにより茶色のオイルを得た。得られたオイルをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン及びトルエンの混合溶媒）により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、化合物9-4（149g、無色オイル）を得た。化合物9-4のHPLC面積百分率値は94.5%であった。

[0377] (化合物9-5の合成)

[0378]

[化129]



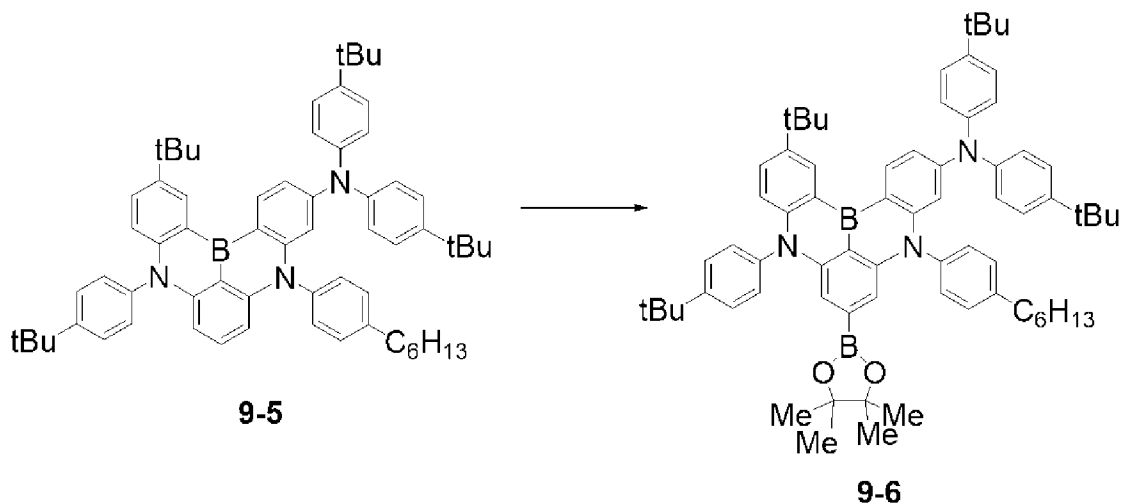
[0379] 反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、化合物9-4(132.4g)及びtert-ブチルベンゼン(811mL)を加え、0℃に冷却した後、t-BuLi・ペンタン溶液(1.5M, 151mL)を加えた。得られた混合物を40℃で1時間攪拌し、次いで、50℃で1時間攪拌した。得られた混合物を-50℃まで冷却した後、BBr₃(27.7mL)を加え、-50℃で0.5時間攪拌した。得られた混合物を0℃まで昇温した後、N,N-ジイソプロピルアミン(48.8mL)を加えた。得られた混合物を60℃まで昇温した後、ペンタンを留去した。得られた混合物を120℃まで昇温した後、3時間反応させた。得られた混合物を室温まで冷却した後、酢酸ナトリウム水溶液及び酢酸エチルを加え、得られた有機層をイオン交換水で洗浄した。得られた有機層を減圧濃縮することにより黄色のオイルを得た。得られたオイルをシリカゲルカラムクロマトグラフィー(ヘキサン及びトルエンの混合溶媒)により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、化合物9-5(16.4g、黄色固体)を得た。化合物9-5のHPLC面積百分率値は96.9%であった。

¹H-NMR(CD₂Cl₂, 400MHz) δ (ppm) : 8.81(d, 1H), 8.66(d, 1H), 7.67(d, 2H), 7.42(d, 1H), 7.30-7.20(m, 8H), 7.12(t, 1H), 7.10(d, 2H), 6.99(d, 4H), 6.84(dd, 1H), 6.66(d, 1H), 6.33(d, 1H), 6.05(d, 1H), 5.99(d, 1H), 2.59(m, 2H), 1.61(m, 2H), 1.43(s, 9H), 1.40(s, 9H), 1.39-1.27(m, 24H), 0.89(t, 3H).

[0380] (化合物9-6の合成)

[0381]

[化130]

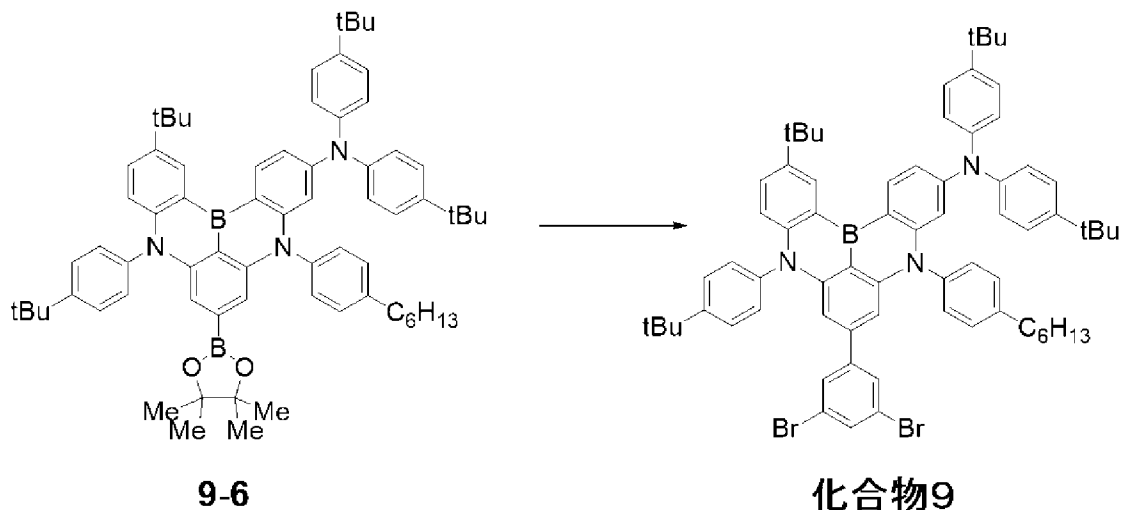


[0382] 反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、化合物9-5(11.60g)、ビス(ピナコラト)ジボロン(B_2pin_2 ;9.86g)、4,4'-ジ-tert-ブチル-2,2'-ビピリジル(dt bpy;0.21g)、(1,5-シクロオクタジエン)(メトキシ)イリジウム(I)ダイマー($[Ir(cod)(OMe)]_2$;0.26g)及びシクロヘキサン(232mL)を加え、90°Cで9.5時間攪拌した。得られた混合物を室温まで冷却した後、メタノールを加えて反応を停止させた。得られた混合物をシリカゲルショートカラムでろ過し、得られたろ液を減圧濃縮することにより黄色のオイルを得た。得られたオイルをヘプタンにより再結晶することにより、淡黄色粉末を得た。得られた粉末を、トルエンとエタノールとの混合液で再結晶した後、乾燥させることにより、化合物9-6(7.56g、黄色粉末)を得た。化合物9-6のHPLC面積百分率値は90.7%であった。

[0383] (化合物9の合成)

[0384]

[化131]



[0385] 反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、1, 3, 5-トリブロモベンゼン(10.4g)、化合物9-6(7.5g)、トルエン(112mL)及びテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)(0.228g)を加え、次いで、12質量%テトラブチルアンモニウムヒドロキシド水溶液(43g)を加え、3時間加熱還流した。得られた混合物を室温まで冷却した後、水層を分離し、得られた有機層を水で2回洗浄した。得られた有機層に硫酸マグネシウムを加えた後、得られた混合物をろ過し、得られたろ液を減圧濃縮することにより粗生成物を得た。得られた粗生成物をシリカゲル/アルミナショートカラムでろ過した。得られた固体をトルエンとアセトニトリルとの混合液で再結晶した後、乾燥させるという工程を3回繰り返すことにより、薄黄色固体として化合物9を6.1g得た。HPLC面積百分率値は99.7%であった。

LC-MS(ESI, positive) : 1128[M+H]⁺

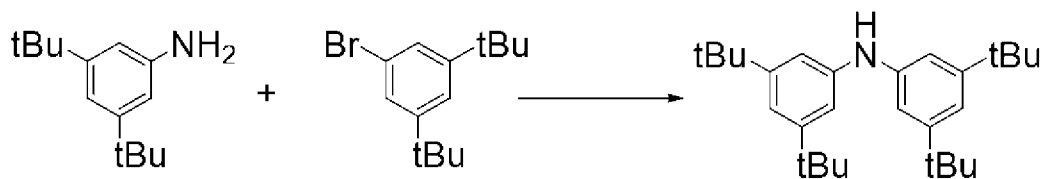
¹H-NMR(CDCl₃, 400MHz) δ (ppm) : 8.87(s, 1H), 8.70(d, 1H), 7.70(d, 2H), 7.46(m, 2H), 7.31-7.18(m, 10H), 7.12(d, 2H), 7.03(d, 4H), 6.95(d, 1H), 6.74(d, 1H), 6.36(d, 1H), 6.09(d, 2H), 2.59(m, 2H), 1.62(m, 2H), 1.44(s, 18H), 1.32(m, 24H), 0.89(t, 3H).

[0386] <合成例7> 化合物10の合成

(化合物10-1の合成)

[0387]

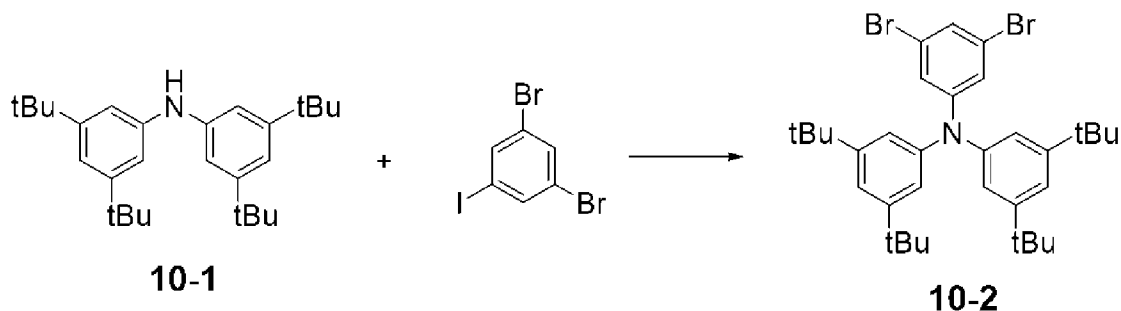
[化132]

**10-1**

[0388] 反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、3,5-ジ-*t*-ブチルアニリン(4.00g)、1-ブromo-3,5-ジ-*t*-ブチルベンゼン(4.77g)、Pd₂(dba)₃(dba)_{0.75}(0.058g)、*t*-Bu₃PHBF₄(0.032g)、*t*-BuONa(2.55g)及びトルエン(143mL)を加え、30°Cで1.5時間攪拌した。得られた混合物をシリカゲル・セライトを積層したショートカラムでろ過し、得られたろ液を減圧濃縮することにより、化合物10-1(9.74g、オイル)を得た。化合物10-1のHPLC面積百分率値は96.9%であった。

[0389] (化合物10-2の合成)

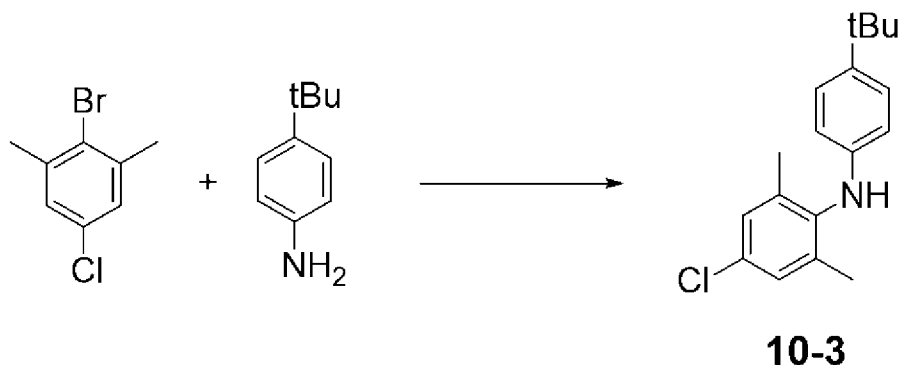
[0390] [化133]

**10-1****10-2**

[0391] 反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、化合物10-1(4.35g)、1,3-ジブromo-5-ヨードベンゼン(4.00g)、酢酸パラジウム(0.113g)、Xantphos(0.320g)、*t*-BuONa(1.45g)及びトルエン(65mL)を加え、60°Cから80°Cまで段階的に昇温しながらで4.5時間攪拌した。得られた混合物をシリカゲル・セライトを積層したショートカラムでろ過し、得られたろ液を減圧濃縮することにより粗生成物を得た。得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(ヘキサン及びトルエンの混合溶媒)により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、化合物10-2(5.26g、薄赤白色粉末)を得た。化合物10-2のHPLC面積百分率値は89.8%であった。

[0392] (化合物10-3の合成)

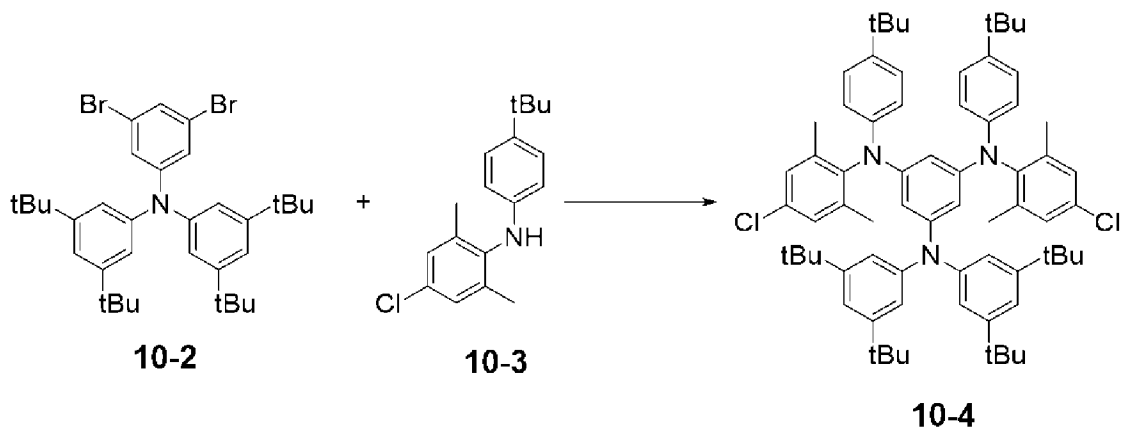
[0393] [化134]



[0394] 反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、2-ブロモ-5-クロロ-m-キシレン(10.00g)、p-t-ブチルアニリン(8.16g)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3(\text{dba})_{0.75}$ (0.746g)、 $\text{t-Bu}_3\text{PHBF}_4$ (0.416g)、 t-BuONa (6.57g)及びトルエン(250mL)を加え、 30°C で1時間攪拌した。得られた混合物をシリカゲル・セライトを積層したショートカラムでろ過し、得られたろ液を減圧濃縮することにより粗生成物を得た。得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(ヘキサン及びトルエンの混合溶媒)により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、化合物10-3(13.16g、淡黄色固体)を得た。化合物10-3のHPLC面積百分率値は99.3%であった。

[0395] (化合物10-4の合成)

[0396] [化135]

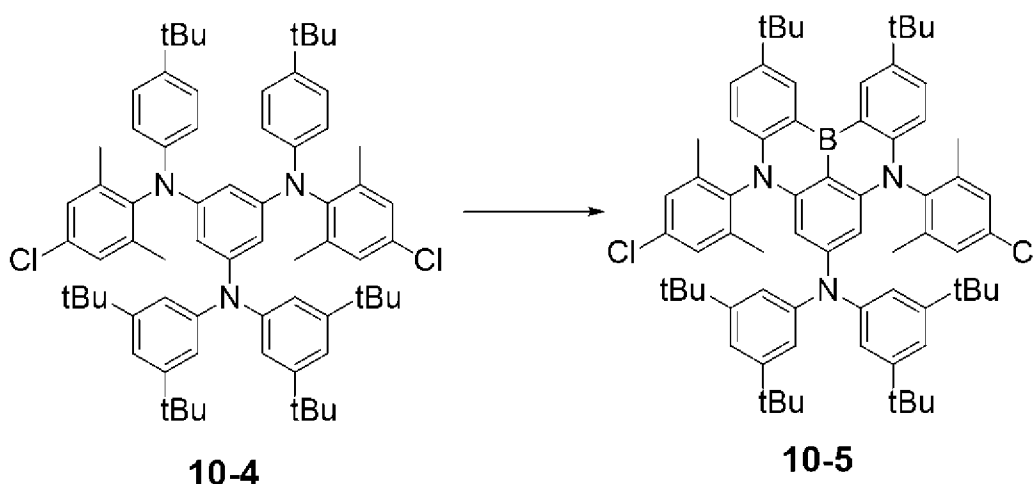


[0397] 反応容器内をアルゴンガス雰囲気とした後、化合物10-2(5.20g)、化合物10

-3(5.25g)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3(\text{dba})_{0.75}$ (0.452g)、 $\text{t-Bu}_3\text{PHBF}_4$ (0.252g)、 t-BuONa (2.39g) 及びトルエン(104mL)を加え、 50°C で2時間攪拌した。得られた混合物を室温まで冷却した後、シリカゲル・セライトを積層したショートカラムでろ過した。得られたろ液を減圧濃縮することにより茶色の固体を得た。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン及びトルエンの混合溶媒）により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより、化合物10-4 (5.69g、白色固体)を得た。化合物10-4のHPLC面積百分率値は98.4%であった。

[0398] (化合物10-5の合成)

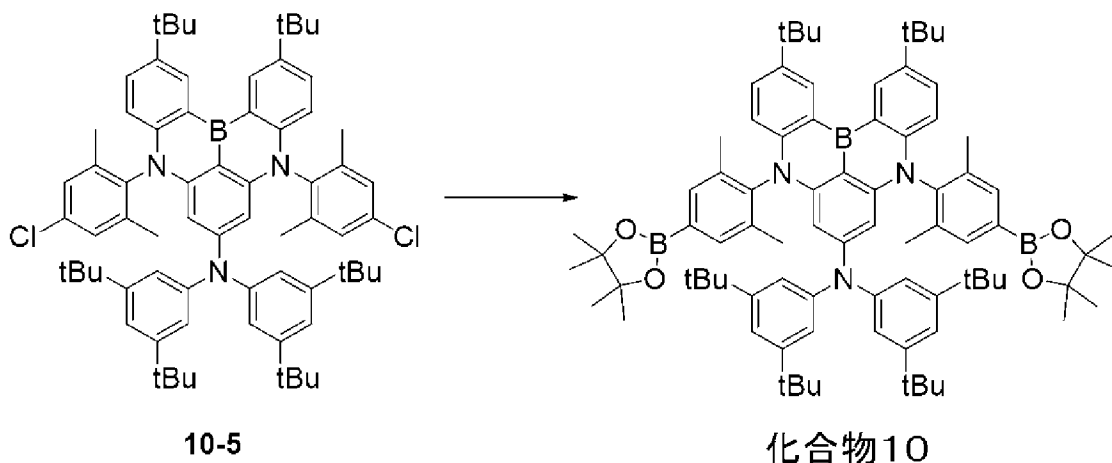
[0399] [化136]



[0400] 反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、化合物10-4(4.60g)、*o*-ジクロロベンゼン(64mL)及び BBr_3 (3.3g)を加え、 140°C で6時間攪拌した。得られた混合物を室温まで冷却した後、トルエン(64mL)及び N,N -ジイソプロピルアミン(7.9mL)を加え、攪拌した。得られた混合物をシリカゲル・セライトを積層したショートカラムでろ過し、得られたろ液を減圧濃縮することにより茶色のオイルを得た。得られたオイルをシリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン及びトルエンの混合溶媒）により精製した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより黄色粉末を得た。得られた粉末をトルエンとアセトニトリルとの混合溶媒で再結晶することにより、化合物10-5 (1.55g、黄色固体)を得た。化合物10-5のHPLC面積百分率値は99.3%であった。これらの操作を繰り返すことにより、化合物10-5の必要量を得た。

[0401] (化合物10の合成)

[0402] [化137]



[0403] 反応容器内を窒素ガス雰囲気とした後、化合物10-5(1.85g)、ビス(ピナコラト)ジボロン(B_2pin_2 ; 1.34g)、 $Pd_2(dba)_3(dba)_{0.75}$ (0.048g)、XPhos(0.089g)、酢酸カリウム(1.03g)、1,2-ジメトキシエタン(18mL)及びトルエン(4mL)を加え、85°Cで12時間攪拌した。得られた混合物を室温まで冷却した後、メタノールを加えて反応を停止させた。得られた混合物をシリカゲル・セライトを積層したショートカラムでろ過し、得られたろ液を減圧濃縮することにより黄色のオイルを得た。得られたオイルをアセトニトリルで再結晶することにより、淡黄色粉末を得た。得られた粉末を、トルエンとヘプタンとの混合溶媒に溶解させた後、活性炭を加えて攪拌した。得られた混合物をセライトを用いてろ過した後、減圧濃縮し、乾燥させることにより黄色粉末を得た。得られた粉末を、トルエンとアセトニトリルとの混合液で再結晶した後、乾燥させるという操作を2回繰り返すことにより、化合物10(1.48g、黄色粉末)を得た。化合物10のHPLC面積百分率値は99.8%であった。

LC-MS(ESI, positive) : 1232.9[M+H]⁺

¹H-NMR(CDCl₃, 400MHz) δ (ppm) : 9.12(s, 2H), 7.67(s, 4H), 7.43(d, 2H), 6.98(s, 2H), 6.82(s, 4H), 6.59(d, 2H), 5.46(br. s, 2H), 1.86(s, 12H), 1.46(s, 18H), 1.36(s, 24H), 1.13(s, 36H).

[0404] <実施例2> 高分子化合物4の合成

反応容器内を不活性ガス雰囲気とした後、化合物6 (0.633g)、化合物8 (0.063g)、化合物7 (0.723g)、化合物9 (0.026g)、ジクロロビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(1.02mg)及びトルエン(24.2g)を混合し、80℃に加熱した。その後、そこへ、10質量%水酸化テトラエチルアンモニウム水溶液(20mL)を滴下し、4.5時間還流させた。その後、そこへ、フェニルボロン酸(55.8mg)及びジクロロビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(1.01mg)を加え、8時間還流させた。得られた反応混合物を冷却した後、反応液を水で1回、10質量%塩酸水溶液で2回、3質量%アンモニア水溶液で2回、水で2回洗浄した。得られた有機層を減圧下で蒸留することにより水分を除いた。得られた溶液を、アルミナとシリカゲルとの混合物を充填したカラムに通すことにより精製した。得られた溶液をメタノールに滴下し、攪拌した後、得られた沈殿物をろ取し、乾燥させることにより、高分子化合物4を0.54g得た。高分子化合物4のMnは 4.5×10^4 であり、Mwは 1.1×10^5 であった。

[0405] 高分子化合物4は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物6から誘導される構成単位と、化合物8から誘導される構成単位と、化合物7から誘導される構成単位と、化合物9から誘導される構成単位とが、45 : 5 : 49 : 1のモル比で構成された共重合体である。

[0406] <実施例3> 高分子化合物5の合成

反応容器内を不活性ガス雰囲気とした後、化合物6(1.267g)、化合物8(0.127g)、化合物10(0.057g)、化合物7(1.486g)、ジクロロビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(2.09mg)及びトルエン(30.5g)を混合し、80℃に加熱した。その後、そこへ、20質量%水酸化テトラエチルアンモニウム水溶液(25mL)を滴下し、3.5時間還流させた。その後、そこへ、フェニルボロン酸(112.2g)及びジクロロビス(トリス-*o*-メトキシフェニルホスフィン)パラジウム(2.13mg)を加え、5時間還流させた。得られた反応混合物を冷却した後、反応液を水で1回、10重量%塩酸水溶液で2回、3重量%アンモニア水溶液で2回、水で2回洗浄した。得られた有機層を減圧下で蒸留

することにより水分を除いた。得られた溶液を、アルミナとシリカゲルとの混合物を充填したカラムに通すことにより精製した。得られた溶液をメタノールに滴下し、攪拌した後、得られた沈殿物をろ取し、乾燥させることにより、高分子化合物高分子化合物5を1.06 g得た。高分子化合物5のMnは 7.7×10^4 であり、Mwは 1.7×10^5 であった。

[0407] 高分子化合物5は、仕込み原料の量から求めた理論値では、化合物6から誘導される構成単位と、化合物8から誘導される構成単位と、化合物10から誘導される構成単位と、化合物7から誘導される構成単位とが、44 : 5 : 1 : 50のモル比で構成されてなる共重合体である。

[0408] <合成例8> 高分子化合物6の合成

高分子化合物6は、国際公開第2014/102543号に記載のポリマー実施例1の方法に従って合成した。

[0409] <実施例D3> 発光素子D3の作製と評価

ガラス基板にスパッタ法により45nmの厚みでITO膜を付けることにより陽極を形成した。陽極上に、正孔注入材料であるND-3202（日産化学工業製）をスピコート法により35nmの厚さで成膜し、大気雰囲気下において、ホットプレート上で240℃、15分間加熱することにより正孔注入層を形成した。

キシレンに、高分子化合物6を0.6質量%の濃度で溶解させた。得られたキシレン溶液を用いて、正孔注入層の上に、スピコート法により20nmの厚さで成膜し、窒素ガス雰囲気下において、ホットプレート上で200℃、30分間加熱することにより正孔輸送層を形成した。

キシレンに、高分子化合物4を1.3質量%の濃度で溶解させた。得られたキシレン溶液を用いて、正孔輸送層の上に、スピコート法により60nmの厚さで成膜し、窒素ガス雰囲気下において、ホットプレート上で150℃、10分間加熱することにより発光層を形成した。

発光層を形成した基板を蒸着機内において、 1×10^{-4} Pa以下にまで減圧した後、陰極として、発光層の上に、フッ化ナトリウムを約7 nm、次いで、フッ

化ナトリウム層の上に、アルミニウムを約120nm蒸着した。蒸着後、ガラス基板を用いて封止することにより、発光素子D3を作製した。

発光素子D3に電圧を印加することにより、最大外部量子収率は8.1%であり、465nmに発光スペクトルの最大ピーク波長を有するEL発光が観測された。この時のCIE1931色度座標は、(0.131, 0.095)であった。電流密度が10mA/cm²となるように電流値を設定後、定電流密度で駆動させ、輝度の時間変化を測定した。輝度が初期輝度の50%となるまでの時間は、42時間であった。

[0410] <実施例D4> 発光素子D4の作製と評価

実施例D3において、高分子化合物4に代えて、高分子化合物5を用いた以外は、実施例D3と同様にして、発光素子D4を作製した。

発光素子D4に電圧を印加することにより、最大外部量子収率は7.8%であり、450nmに発光スペクトルの最大ピーク波長を有するEL発光が観測された。この時のCIE1931色度座標は、(0.149, 0.045)であった。電流密度が10mA/cm²となるように電流値を設定後、定電流密度で駆動させ、輝度の時間変化を測定した。輝度が初期輝度の50%となるまでの時間は、44時間であった。

[0411] <比較例CD2> 発光素子CD2の作製と評価

実施例D3において、高分子化合物4に代えて、高分子化合物3を用いた以外は、実施例D3と同様にして、発光素子CD2を作製した。

発光素子CD2に電圧を印加することにより、最大外部量子収率は7.0%であり、440nmに発光スペクトルの最大ピーク波長を有するEL発光が観測された。この時のCIE1931色度座標は、(0.153, 0.055)であった。電流密度が10mA/cm²となるように電流値を設定後、定電流密度で駆動させ、輝度の時間変化を測定した。輝度が初期輝度の50%となるまでの時間は、21時間であった。

産業上の利用可能性

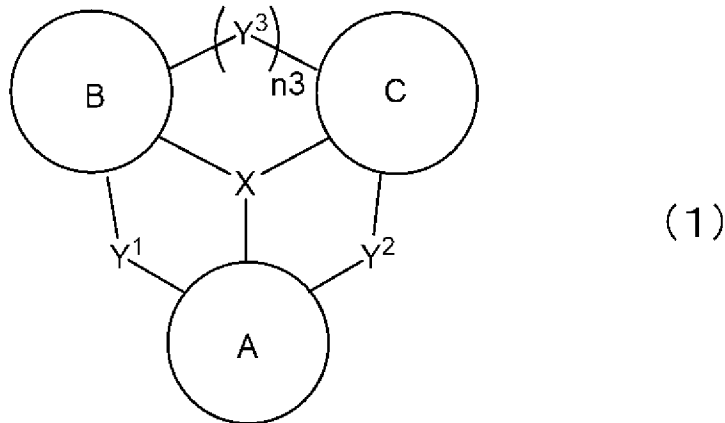
[0412] 本発明によれば、輝度寿命に優れる発光素子の製造に有用な高分子化合物

を提供することができる。また、本発明によれば、この高分子化合物を含有する組成物及びこの高分子化合物を含有する発光素子を提供することができる。

請求の範囲

[請求項1] 式(1)で表される化合物の残基を有する構成単位と、前記式(1)で表される化合物の残基を有さない構成単位とを含む、高分子化合物。

[化1]



[式中、

A環、B環及びC環は、それぞれ独立に、芳香族炭化水素環又は芳香族複素環を表し、これらの環は置換基を有していてもよい。

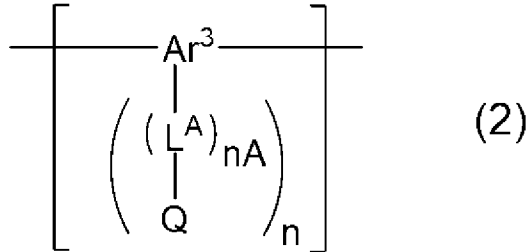
Xは、ホウ素原子、リン原子、P=O、P=S、アルミニウム原子、ガリウム原子、ヒ素原子、Si-R_x又はGe-R_xを表す。R_xは、アリール基又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

Y¹は、N-R_y、硫黄原子又はセレン原子を表す。Y²及びY³は、それぞれ独立に、酸素原子、N-R_y、硫黄原子又はセレン原子を表す。R_yは、水素原子、アリール基、1価の複素環基、又はアルキル基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。R_yが複数存在する場合、同一であっても異なってもよい。R_yは、直接又は連結基を介して、前記A環、前記B環又は前記C環と結合していてもよい。

n₃は、0又は1である。n₃が0である場合、-Y³-は存在しない。]

[請求項2] 前記式(1)で表される化合物の残基を有する構成単位が、式(2)又は式(2')で表される構成単位である、請求項1に記載の高分子化合物。

[化2]



[式中、

nA は、0~5の整数である。

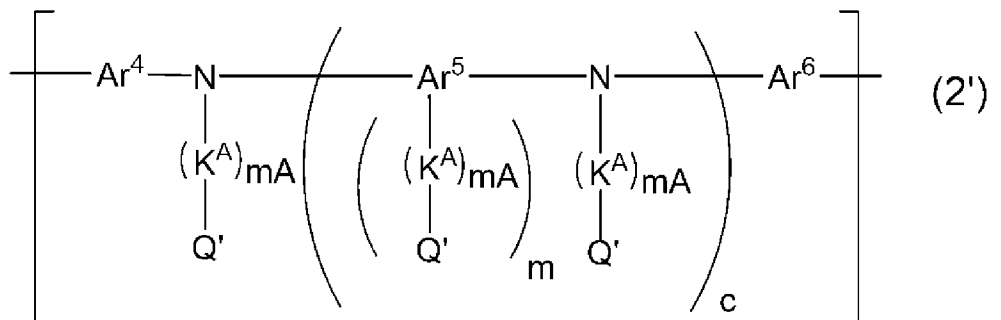
n は、1又は2である。

Ar^3 は、芳香族炭化水素基又は複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

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

Q は、前記式(1)で表される化合物の残基を表す。]

[化3]



[式中、

m は1～4の整数である。

$m A$ は0～5の整数である。 $m A$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

c は0又は1である。

$A r^4$ 及び $A r^6$ は、それぞれ独立に、アリーレン基又は2価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

$A r^5$ は、芳香族炭化水素基、複素環基、又は、少なくとも1種の芳香族炭化水素環と少なくとも1種の複素環とが結合した基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

$A r^4$ 、 $A r^5$ 及び $A r^6$ は、それぞれ、該基が結合している窒素原子に結合している該基以外の基と、直接結合して、又は、酸素原子若しくは硫黄原子を介して結合して、環を形成していてもよい。

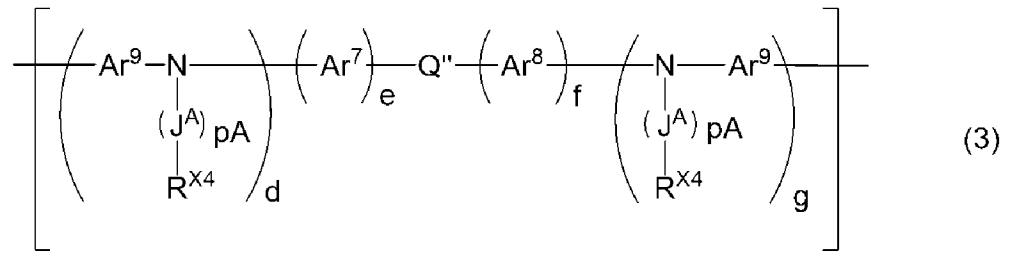
K^A は、アルキレン基、シクロアルキレン基、アリーレン基、2価の複素環基、 $-NR'$ で表される基、酸素原子又は硫黄原子を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 R' は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 K^A が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

Q' は、前記式(1)で表される化合物の残基、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 Q' が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。但し、少なくとも1つの Q' は、前記式(1)で表される化合物の残基である。]

[請求項3]

前記式(1)で表される化合物の残基を有する構成単位が、式(3)で表される構成単位である、請求項1に記載の高分子化合物。

[化4]



[式中、

d、e、f及びgは、それぞれ独立に、0～2の整数である。

pAは、0～5の整数である。pAが複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

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

Ar⁷、Ar⁸及びAr⁹は、それぞれ独立に、アリーレン基又は2価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。Ar⁷、Ar⁸及びAr⁹が複数存在する場合、それらは各々同一でも異なってもよい。

R^{X4}は、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。R^{X4}が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

Q''は、前記式(1)で表される化合物の残基を表す。]

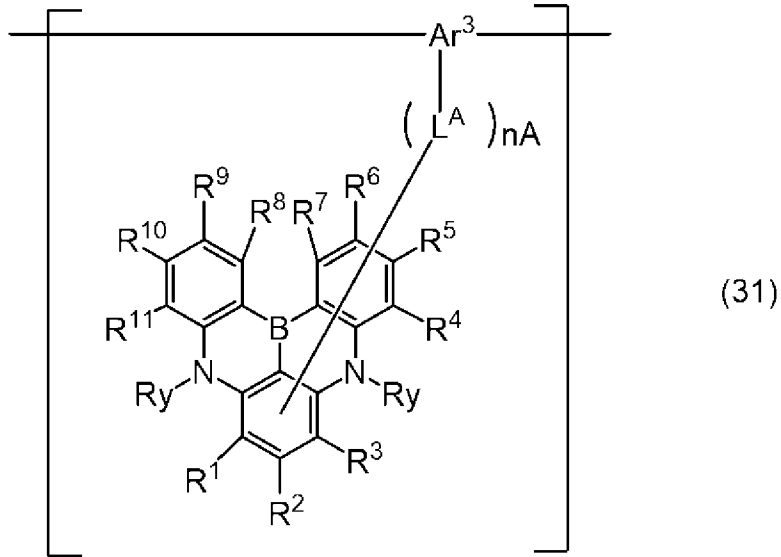
[請求項4] 前記Xがホウ素原子である、請求項1～3のいずれか一項に記載の高分子化合物。

[請求項5] 前記Y¹、Y²及びY³がN-R_yである、請求項1～4のいずれか一項に記載の高分子化合物。

[請求項6] 前記 n 3 が 0 である、請求項 1 ～ 5 のいずれか一項に記載の高分子化合物。

[請求項7] 前記式 (2) で表される構成単位が式 (31) で表される構成単位である、請求項 2 に記載の高分子化合物。

[化5]



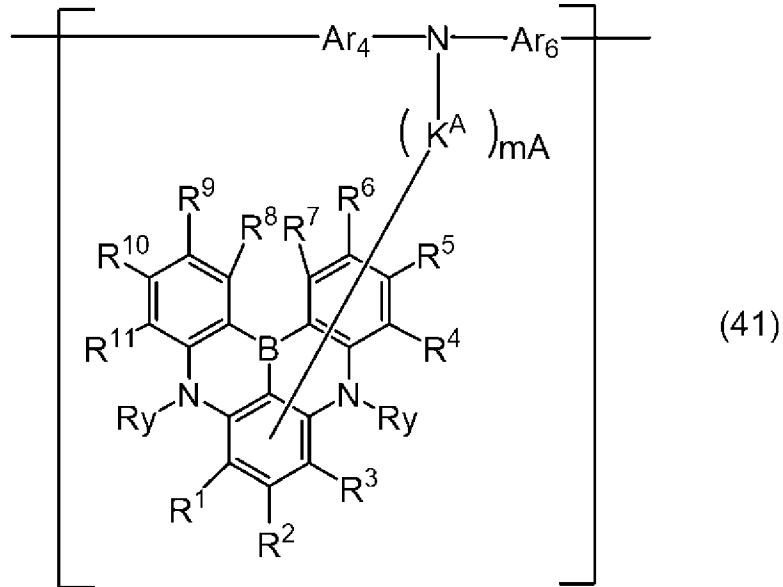
[式中、

R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰及びR¹¹は、それぞれ独立に、結合手、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、又は置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。但し、R¹、R²、R³、R⁴、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸、R⁹、R¹⁰及びR¹¹のうちの1つは結合手である。

R_y、A r³、L^A及びn Aは、前記と同じ意味を表す。]

[請求項8] 前記式 (2') で表される構成単位が式 (41) で表される構成単位である、請求項 2 に記載の高分子化合物。

[化6]



[式中、

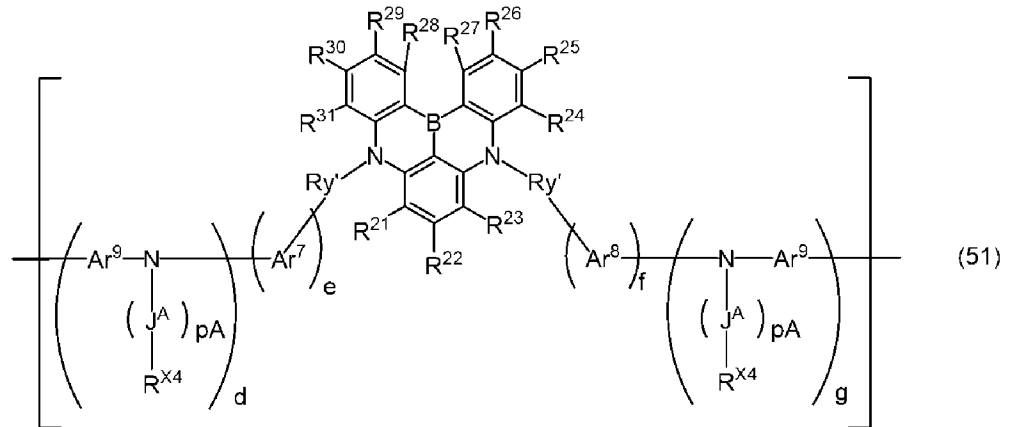
R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 及び R^{11} は、それぞれ独立に、結合手、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、又は、置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。但し、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 R^9 、 R^{10} 及び R^{11} のうちの1つは結合手である。

R_y 、 Ar^4 、 Ar^6 、 K^A 及び $m A$ は、前記と同じ意味を表す。]

[請求項9]

前記式(3)で表される構成単位が式(51)で表される構成単位である、請求項3に記載の高分子化合物

[化7]



[式中、

R²¹、R²²、R²³、R²⁴、R²⁵、R²⁶、R²⁷、R²⁸、R²⁹、R³⁰及びR³¹は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アリール基、アリールオキシ基、1価の複素環基、又は、置換アミノ基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。

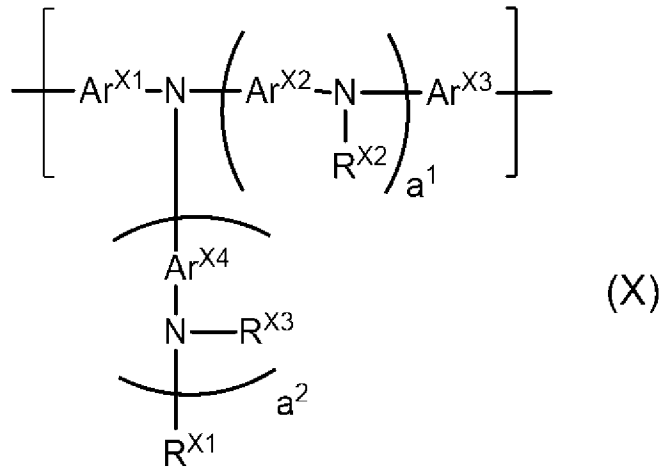
R^{y'} は、直接結合、アリーレン基、2価の複素環基、又はアルキレン基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。複数存在するR^{y'} は、同一でも異なってもよい。

Ar⁷、Ar⁸、Ar⁹、R^{x4}、J^A、pA、d、e、f及びgは、前記と同じ意味を表す。]

[請求項10]

前記式(1)で表される化合物の残基を有さない構成単位が、式(X)で表される構成単位及び式(Y)で表される構成単位からなる群から選ばれる少なくとも1種の構成単位である、請求項1～9のいずれか一項に記載の高分子化合物。

[化8]



[式中、

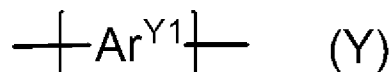
a^1 及び a^2 は、それぞれ独立に、0～2の整数である。

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

$\text{Ar}^{\text{X}2}$ 及び $\text{Ar}^{\text{X}4}$ は、それぞれ独立に、アリーレン基、2価の複素環基、又は、少なくとも1種のアリーレン基と少なくとも1種の2価の複素環基とが結合した2価の基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 $\text{Ar}^{\text{X}2}$ 及び $\text{Ar}^{\text{X}4}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。

$\text{R}^{\text{X}1}$ 、 $\text{R}^{\text{X}2}$ 及び $\text{R}^{\text{X}3}$ は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アリアル基又は1価の複素環基を表し、これらの基は置換基を有していてもよい。 $\text{R}^{\text{X}2}$ 及び $\text{R}^{\text{X}3}$ が複数存在する場合、それらは同一でも異なってもよい。]

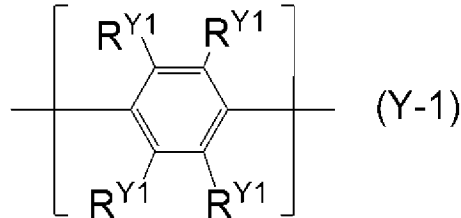
[化9]



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

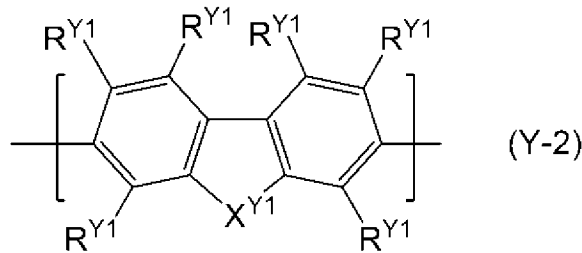
[請求項11] 前記式 (Y) で表される構成単位が、式 (Y-1) で表される構成単位又は式 (Y-2) で表される構成単位である、請求項 10 に記載の高分子化合物。

[化10]



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

[化11]



[式中、

R^{Y1} は前記と同じ意味を表す。

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

- [請求項12] 前記式(2)で表される構成単位、及び式(2')で表される構成単位の合計量が、高分子化合物に含まれる全構成単位の合計量に対して、0.1～50モル%である、請求項2、4～8、10及び11のいずれか一項に記載の高分子化合物。
- [請求項13] 前記式(3)で表される構成単位の合計量が、高分子化合物に含まれる全構成単位の合計量に対して、0.1～50モル%である、請求項3～6及び9～11のいずれか一項に記載の高分子化合物。
- [請求項14] 正孔輸送材料、正孔注入材料、電子輸送材料、電子注入材料、発光材料、酸化防止剤及び溶媒からなる群より選ばれる少なくとも1種の材料と、請求項1～13のいずれか一項に記載の高分子化合物と、を含有する組成物。
- [請求項15] 請求項1～13のいずれか一項に記載の高分子化合物を含有する有機層を備えた発光素子。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2018/024289

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
 Int.Cl. C08G61/12 (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)
 Int.Cl. C08G61/00-61/12, C09K11/06, H01L51/50

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

| | |
|--|-----------|
| Published examined utility model applications of Japan | 1922-1996 |
| Published unexamined utility model applications of Japan | 1971-2018 |
| Registered utility model specifications of Japan | 1996-2018 |
| Published registered utility model applications of Japan | 1994-2018 |

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

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages | Relevant to claim No. |
|-----------|---|-----------------------|
| A | JP 2016-196610 A (SUMITOMO CHEMICAL CO., LTD.) 24 November 2016, entire text (Family: none) | 1-15 |
| A | WO 2016/152544 A1 (KWANSEI GAKUIN EDUCATIONAL FOUNDATION) 29 September 2016, entire text & KR 10-2017-0130434 A & CN 107851724 A & TW 201703305 A | 1-15 |
| A | WO 2017/018326 A1 (KONICA MINOLTA, INC.) 02 February 2017, entire text & KR 10-2018-0010223 A & CN 107925006 A | 1-15 |

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

| | |
|---|--|
| * Special categories of cited documents: | "I" 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 |
| "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance | "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 |
| "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date | "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 |
| "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) | "&" document member of the same patent family |
| "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 | |

| | |
|---|--|
| Date of the actual completion of the international search 12 September 2018 (12.09.2018) | Date of mailing of the international search report 25 September 2018 (25.09.2018) |
|---|--|

| | |
|--|---|
| Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915, Japan | Authorized officer Telephone No. |
|--|---|

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2018/024289

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages | Relevant to claim No. |
|-----------|--|-----------------------|
| A | JP 2017-079267 A (KONICA MINOLTA, INC.) 27 April 2017, entire text (Family: none) | 1-15 |
| P,A | JP 2018-061028 A (SUMITOMO CHEMICAL CO., LTD.) 12 April 2018, entire text (Family: none) | 1-15 |

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))
 Int.Cl. C08G61/12(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. C08G61/00-61/12, C09K11/06, H01L51/50

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの
 日本国実用新案公報 1922-1996年
 日本国公開実用新案公報 1971-2018年
 日本国実用新案登録公報 1996-2018年
 日本国登録実用新案公報 1994-2018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)
 CPlus/REGISTRY (STN)

C. 関連すると認められる文献

| 引用文献の カテゴリー* | 引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示 | 関連する 請求項の番号 |
|-----------------|--|----------------|
| A | JP 2016-196610 A (住友化学株式会社) 2016.11.24, 全文 (ファミリーなし) | 1-15 |
| A | WO 2016/152544 A1 (学校法人関西学院) 2016.09.29, 全文 & KR 10-2017-0130434 A & CN 107851724 A & TW 201703305 A | 1-15 |
| A | WO 2017/018326 A1 (コニカミノルタ株式会社) 2017.02.02, 全文 & KR 10-2018-0010223 A & CN 107925006 A | 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 | の日の後に公表された文献 |
| 「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 | 「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 |
| 「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 | 「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 |
| 「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) | 「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 |
| 「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 | 「&」同一パテントファミリー文献 |
| 「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願 | |

| | |
|--------------------------|--------------------------|
| 国際調査を完了した日 12.09.2018 | 国際調査報告の発送日 25.09.2018 |
|--------------------------|--------------------------|

| | | | |
|--|--|-----|------|
| 国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁 (ISA/J P) 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) 藤井 明子 電話番号 03-3581-1101 内線 3457 | 4 J | 5813 |
|--|--|-----|------|

| 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 | JP 2017-079267 A (コニカミノルタ株式会社) 2017.04.27, 全文 (ファミリーなし) | 1-15 |
| P, A | JP 2018-061028 A (住友化学株式会社) 2018.04.12, 全文 (ファミリーなし) | 1-15 |