

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2012-94801

(P2012-94801A)

(43) 公開日 平成24年5月17日(2012.5.17)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/22 D	3K107
C09K 11/06 (2006.01)	H05B 33/14 B	4H006
C07F 15/00 (2006.01)	C09K 11/06 690	4H050
C07C 15/20 (2006.01)	C09K 11/06 660	
C07C 43/20 (2006.01)	C07F 15/00 F	
審査請求 未請求 請求項の数 11 O L (全 62 頁) 最終頁に続く		

(21) 出願番号	特願2010-282450 (P2010-282450)	(71) 出願人	306037311
(22) 出願日	平成22年12月17日 (2010.12.17)		富士フイルム株式会社
(31) 優先権主張番号	特願2010-223258 (P2010-223258)		東京都港区西麻布2丁目26番30号
(32) 優先日	平成22年9月30日 (2010.9.30)	(74) 代理人	100115107
(33) 優先権主張国	日本国 (JP)		弁理士 高松 猛
		(72) 発明者	高田 早
			神奈川県足柄上郡開成町牛島577番地
			富士フイルム株式会社内
		Fターム(参考)	3K107 AA01 BB01 BB02 CC04 CC22
			CC33 CC42 DD53 DD58 DD66
			DD67 DD68 DD70 DD71 DD78
			DD87 FF14 FF15 GG06
			4H006 AA03 AB92
			4H050 AA03 AB92 WB11 WB13 WB14
			WB21

(54) 【発明の名称】 有機電界発光素子用材料、並びにそれを含有する膜、及び有機電界発光素子

(57) 【要約】

【課題】本発明によれば、従来における前記諸問題を解決し、前記目的を達成することができ、面内方向の輝度ムラを抑制した有機電界発光素子用材料、並びにそれを用いた膜及び有機電界発光素子を提供することができる。

【解決手段】分子アスペクト比が3以上の添加剤を254nmにおけるHPLC吸収面積に基づき0.01%以上1%以下含み、有機電界発光素子用材料中の254nmにおけるHPLC吸収面積が98%以上を占める化合物を含む有機電界発光素子用材料。基板上に、陽極及び陰極を含む一对の電極と、該電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、該陽極と該発光層との間の少なくとも一層の有機層に、該有機電界発光素子用材料を含有する有機電界発光素子。

【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

分子アスペクト比が 3 以上の添加剤を 254 nm における HPLC 吸収面積に基づき 0.01% 以上 1% 以下含み、有機電界発光素子用材料中の 254 nm における HPLC 吸収面積が 98% 以上を占める化合物を含む有機電界発光素子用材料。

【請求項 2】

前記添加剤が前記化合物を合成した際の反応副生成物又は原料である請求項 1 に記載の有機電界発光素子用材料。

【請求項 3】

前記添加剤が平板状化合物である請求項 1 又は 2 に記載の有機電界発光素子用材料。

10

【請求項 4】

前記化合物、及び添加剤のいずれもが、トリフェニレン誘導体、ピレン誘導体、トリアジン誘導体のいずれかより選択される化合物である請求項 1～3 のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料。

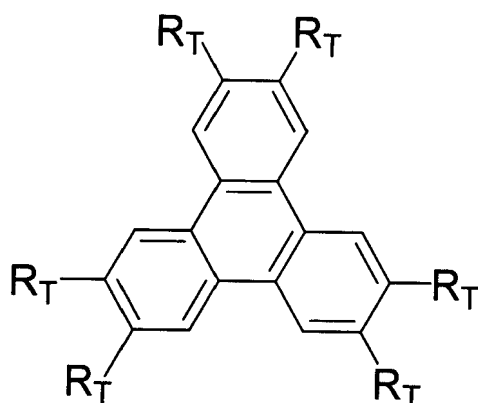
【請求項 5】

前記化合物が下記一般式 (T-1) で表されるトリフェニレン誘導体であり、前記添加剤が下記一般式 (MT-1) で表されるトリフェニレン誘導体である請求項 1～4 のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料。

【化 1】

20

一般式 (T-1)



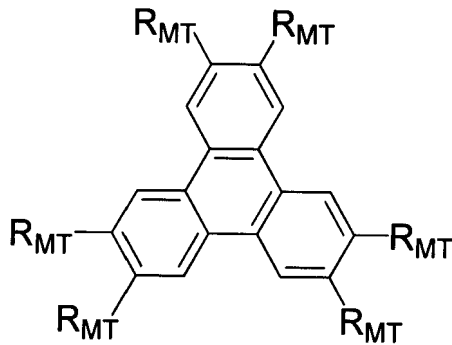
30

上記一般式 (T-1) において、 R_T は、 R_T^2- 、 R_T^2-O- 、 $R_T^2-O-R_T^3-$ 、 $R_T^2-O-R_T^3-O-$ 、 $R_T^2-O-Ph-COO-$ 、 $R_T^2-(O-R_T^3)_{n_T}-O-Ph-COO-$ 、 $R_T^2-O-Ph-CH=CH-COO-$ 、又は $CH_2=CH-COO-R_T^3-O-Ph-COO-$ を表す。ここで、 R_T^2 は重合性基を有していてもよいアルキル基を表し、 R_T^3 はアルキレン基を表し、 Ph は置換基を有していてもよいフェニレン基を表し、 n_T は $-(O-R_T^3)-$ の繰り返し数であり、1 以上の整数を表す。

40

【化 2】

一般式 (MT-I)



10

上記一般式 (MT-I) において、 R_{MT} は、前記一般式 (T-1) における R_T と同義であるが、6つの R_{MT} のうち少なくとも一つは前記一般式 (T-1) における R_T と異なる置換基を表す。

【請求項 6】

更に発光材料を含む、請求項 1～5 のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料。

【請求項 7】

前記発光材料が燐光発光材料である、請求項 6 に記載の有機電界発光素子用材料。

20

【請求項 8】

基板上に、陽極及び陰極を含む一对の電極と、該電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、該陽極と該発光層との間の少なくとも一層の有機層に、請求項 1～7 のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料を含有する有機電界発光素子。

【請求項 9】

請求項 1～7 のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料を発光層に含有する、請求項 8 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 10】

請求項 1～7 のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料を含有する層を湿式法にて作製する、請求項 8 又は 9 に記載の有機電界発光素子。

30

【請求項 11】

請求項 1～7 のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料を含有する膜。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機電界発光素子用材料、並びにそれを含有する膜、及び有機電界発光素子（以下、「有機エレクトロルミネッセンス素子」、「有機 EL 素子」と称することもある）、及び有機電界発光素子の製造方法に関する。

40

【背景技術】

【0002】

有機電界発光素子は、自発光型の表示装置であり、ディスプレイや照明の用途に用いられる。有機電界発光素子を用いたディスプレイは、従来の CRT や LCD と比較して視認性が高い、視野角依存性が少ないといった表示性能の利点を有する。また、ディスプレイを軽量化、薄層化できるといった利点もある。

有機電界発光素子は、軽量化、薄層化という利点に加え、フレキシブル基板を用いることで、これまで実現できなかった形状の照明を実現できる可能性を持っている。

【0003】

近年は、有機電界発光素子多様な用途に適用可能な、より発光効率に優れた有機電界発

50

光素子が求められており、さまざまな検討が成されている。

【0004】

特許文献1には少なくとも1つの有機化合物層を不純物濃度が1000ppm未満の有機化合物材料で形成した有機エレクトロルミネッセンス素子についての開示がある。該有機エレクトロルミネッセンス素子は、有機化合物材料の不純物を一定量以下に低減させることで耐久性が向上する旨の記載がある。

【0005】

また、液晶性のホスト材料を用いることで発光性化合物そのものの形状や発光性化合物の配向を制御することで光取り出し効率を向上させる方法が提案されている（非特許文献1）。

また、分子の形状に異方性を有する材料として液晶性の材料を素子用材料として用いる手段が開示されている（非特許文献2）。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0006】

【特許文献1】国際公開第2004/41443号パンフレット

【非特許文献】

【0007】

【非特許文献1】Polymers For Advanced Technologies, 9, 443-460 (1998)

【非特許文献2】Jpn, J. Appl. Phys. 46, L826 (2007)

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0008】

しかしながら、特許文献1には特定の化合物における検討がされているのみであり、不純物として含有されている化合物の形状や性質によってその素子性能が改善される旨についての開示はない。

非特許文献1、2の材料は主成分として液晶性を有する材料を用いることでその配向性を利用したものであり、添加剤としての用途や効果についての開示はない。

また、上記の文献に記載の素子又は材料は、素子面内での輝度ムラについて改善が行われた記載はない。特に大面積素子が想定される照明分野では、面内に輝度のムラが生じることが課題とされている。この輝度ムラは電極材料そのものの抵抗など駆動方法に起因するものと、有機膜が部分的に異なる抵抗値を持つことに起因するものであると推測される。

本発明は、従来における前記諸問題を解決し、以下の目的を達成することを課題とする。即ち、本発明は、高い発光効率を示す有機電界発光素子用材料、並びにそれを用いた膜及び有機電界発光素子を提供することを目的とする。

【課題を解決するための手段】

【0009】

前記課題を解決するための手段としては、以下の通りである。即ち、

〔1〕

分子アスペクト比が3以上の添加剤を254nmにおけるHPLC吸収面積に基づき0.01%以上1%以下含み、有機電界発光素子用材料中の254nmにおけるHPLC吸収面積が98%以上を占める化合物を含む有機電界発光素子用材料。

〔2〕

前記添加剤が前記化合物を合成した際の反応副生成物又は原料である〔1〕に記載の有機電界発光素子用材料。

〔3〕

前記添加剤が平板状化合物である〔1〕又は〔2〕に記載の有機電界発光素子用材料。

〔4〕

10

20

30

40

50

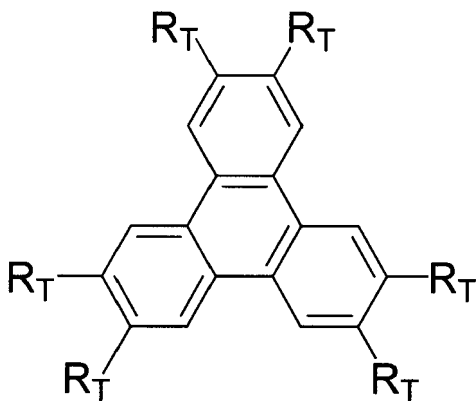
前記化合物、及び添加剤のいずれもが、トリフェニレン誘導体、ピレン誘導体、トリアジン誘導体のいずれかより選択される化合物である〔１〕～〔３〕のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料。

〔５〕

前記化合物が下記一般式（Ｔ－１）で表されるトリフェニレン誘導体であり、前記添加剤が下記一般式（ＭＴ－１）で表されるトリフェニレン誘導体である〔１〕～〔４〕のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料。

【化１】

一般式（Ｔ－１）



10

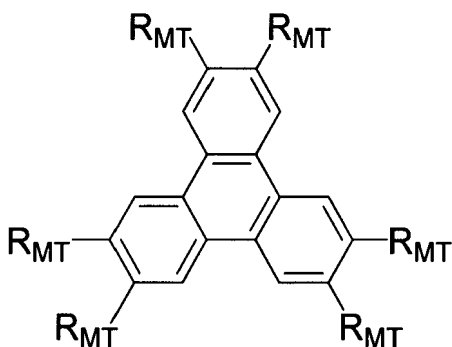
20

上記一般式（Ｔ－１）において、 R_T は、 R_T^2- 、 R_T^2-O- 、 $R_T^2-O-R_T^3-$ 、 $R_T^2-O-R_T^3-O-$ 、 $R_T^2-O-Ph-COO-$ 、 $R_T^2-(O-R_T^3)_n-O-Ph-COO-$ 、 $R_T^2-O-Ph-CH=CH-COO-$ 、又は $CH_2=CH-COO-R_T^3-O-Ph-COO-$ を表す。ここで、 R_T^2 は重合性を有していてもよいアルキル基を表し、 R_T^3 はアルキレン基を表し、 Ph は置換基を有していてもよいフェニレン基を表し、 n_T は $-(O-R_T^3)-$ の繰り返し数であり、１以上の整数を表す。

【化２】

30

一般式（ＭＴ－１）



40

上記一般式（ＭＴ－１）において、 R_{MT} は、前記一般式（Ｔ－１）における R_T と同義であるが、６つの R_{MT} のうち少なくとも一つは前記一般式（Ｔ－１）における R_T と異なる置換基を表す。

〔６〕

更に発光材料を含む、〔１〕～〔５〕のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料。
〔７〕

前記発光材料が燐光発光材料である、〔６〕に記載の有機電界発光素子用材料。

50

〔 8 〕

基板上に、陽極及び陰極を含む一对の電極と、該電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、該陽極と該発光層との間の少なくとも一層の有機層に、〔 1 〕～〔 7 〕のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料を含有する有機電界発光素子。

〔 9 〕

〔 1 〕～〔 7 〕のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料を発光層に含有する、〔 8 〕に記載の有機電界発光素子。

〔 1 0 〕

〔 1 〕～〔 7 〕のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料を含有する層を湿式法にて作製する、〔 8 〕又は〔 9 〕に記載の有機電界発光素子。

10

〔 1 1 〕

〔 1 〕～〔 7 〕のいずれか一項に記載の有機電界発光素子用材料を含有する膜。

【発明の効果】

【 0 0 1 0 〕

本発明によれば、従来における前記諸問題を解決し、前記目的を達成することができ、面内方向の輝度ムラを抑制した有機電界発光素子用材料、並びにそれを用いた膜及び有機電界発光素子を提供することができる。

【図面の簡単な説明】

【 0 0 1 1 〕

20

【図 1】図 1 は、本発明の有機電界発光素子の層構成の一例を示す概略図である。

【発明を実施するための形態】

【 0 0 1 2 〕

本発明において、置換基群 A、置換基群 B を下記のように定義する。

（置換基群 A）

アルキル基（好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～20、特に好ましくは炭素数 1～10 であり、例えばメチル、エチル、イソプロピル、tert-ブチル、n-オクチル、n-デシル、n-ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシルなどが挙げられる。）、アルケニル基（好ましくは炭素数 2～30、より好ましくは炭素数 2～20、特に好ましくは炭素数 2～10 であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニルなどが挙げられる。）、アルキニル基（好ましくは炭素数 2～30、より好ましくは炭素数 2～20、特に好ましくは炭素数 2～10 であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニルなどが挙げられる。）、アリール基（好ましくは炭素数 6～30、より好ましくは炭素数 6～20、特に好ましくは炭素数 6～12 であり、例えばフェニル、p-メチルフェニル、ナフチル、アントラニルなどが挙げられる。）、アミノ基（好ましくは炭素数 0～30、より好ましくは炭素数 0～20、特に好ましくは炭素数 0～10 であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノなどが挙げられる。）、アルコキシ基（好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～20、特に好ましくは炭素数 1～10 であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2-エチルヘキシロキシなどが挙げられる。）、アリーロキシ基（好ましくは炭素数 6～30、より好ましくは炭素数 6～20、特に好ましくは炭素数 6～12 であり、例えばフェニロキシ、1-ナフチロキシ、2-ナフチロキシなどが挙げられる。）、ヘテロ環オキシ基（好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～20、特に好ましくは炭素数 1～12 であり、例えばピリジロキシ、ピラジロキシ、ピリミジロキシ、キノリロキシなどが挙げられる。）、アシル基（好ましくは炭素数 2～30、より好ましくは炭素数 2～20、特に好ましくは炭素数 2～12 であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、ピバロイルなどが挙げられる。）、アルコキシカルボニル基（好ましくは炭素数 2～30、より好ましくは炭素数 2～20、特に好ましくは炭素数 2～12 であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。）、アリーロキシカルボニル基（好ましく

30

40

50

は炭素数 7～30、より好ましくは炭素数 7～20、特に好ましくは炭素数 7～12 であり、例えばフェニルオキシカルボニルなどが挙げられる。)、アシルオキシ基(好ましくは炭素数 2～30、より好ましくは炭素数 2～20、特に好ましくは炭素数 2～10 であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。)、アシルアミノ基(好ましくは炭素数 2～30、より好ましくは炭素数 2～20、特に好ましくは炭素数 2～10 であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数 2～30、より好ましくは炭素数 2～20、特に好ましくは炭素数 2～12 であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、アリーロキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数 7～30、より好ましくは炭素数 7～20、特に好ましくは炭素数 7～12 であり、例えばフェニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、スルホニルアミノ基(好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～20、特に好ましくは炭素数 1～12 であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。)、スルファモイル基(好ましくは炭素数 0～30、より好ましくは炭素数 0～20、特に好ましくは炭素数 0～12 であり、例えばスルファモイル、メチルスルファモイル、ジメチルスルファモイル、フェニルスルファモイルなどが挙げられる。)、カルバモイル基(好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～20、特に好ましくは炭素数 1～12 であり、例えばカルバモイル、メチルカルバモイル、ジエチルカルバモイル、フェニルカルバモイルなどが挙げられる。)、アルキルチオ基(好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～20、特に好ましくは炭素数 1～12 であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。)、アリールチオ基(好ましくは炭素数 6～30、より好ましくは炭素数 6～20、特に好ましくは炭素数 6～12 であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロ環チオ基(好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～20、特に好ましくは炭素数 1～12 であり、例えばピリジルチオ、2-ベンゾイミゾリルチオ、2-ベンゾオキサゾリルチオ、2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、スルホニル基(好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～20、特に好ましくは炭素数 1～12 であり、例えばメシル、トシルなどが挙げられる。)、スルフィニル基(好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～20、特に好ましくは炭素数 1～12 であり、例えばメタンスルフィニル、ベンゼンスルフィニルなどが挙げられる。)、ウレイド基(好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～20、特に好ましくは炭素数 1～12 であり、例えばウレイド、メチルウレイド、フェニルウレイドなどが挙げられる。)、リン酸アミド基(好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～20、特に好ましくは炭素数 1～12 であり、例えばジエチルリン酸アミド、フェニルリン酸アミドなどが挙げられる。)、ヒドロキシ基、メルカプト基、ハロゲン原子(例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子)、シアノ基、スルホ基、カルボキシ基、ニトロ基、ヒドロキサム酸基、スルフィノ基、ヒドラジノ基、イミノ基、ヘテロ環基(芳香族ヘテロ環基も包含し、好ましくは炭素数 1～30、より好ましくは炭素数 1～12 であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子、リン原子、ケイ素原子、セレン原子、テルル原子であり、具体的にはピリジル、ピラジニル、ピリミジル、ピリダジニル、ピロリル、ピラゾリル、トリアゾリル、イミダゾリル、オキサゾリル、チアゾリル、イソキサゾリル、イソチアゾリル、キノリル、フリル、チエニル、セレノフェニル、テルロフェニル、ピペリジル、ピペリジノ、モルホリノ、ピロリジル、ピロリジノ、ベンゾオキサゾリル、ベンゾイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル基、アゼピニル基、シロリル基などが挙げられる。)、シリル基(好ましくは炭素数 3～40、より好ましくは炭素数 3～30、特に好ましくは炭素数 3～24 であり、例えばトリメチルシリル、トリフェニルシリルなどが挙げられる。)、シリルオキシ基(好ましくは炭素数 3～40、より好ましくは炭素数 3～30、特に好ましくは炭素数 3～24 であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。)、ホスホリル基(例えばジフェニルホスホリル基、ジメチルホスホリル基などが挙げられる。)が挙げられる。これらの置換基は更に置換されてもよく、更なる置換基としては、以上に説明した置換基群 A

10

20

30

40

50

から選択される基を挙げることができる。

(置換基群 B)

アルキル基 (好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメチル、エチル、イソプロピル、tert-ブチル、n-オクチル、n-デシル、n-ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシルなどが挙げられる。)、アルケニル基 (好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニルなどが挙げられる。)、アルキニル基 (好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニルなどが挙げられる。)、アリール基 (好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニル、p-メチルフェニル、ナフチル、アントラニルなどが挙げられる。)、シアノ基、ヘテロ環基 (芳香族ヘテロ環基も包含し、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子、リン原子、ケイ素原子、セレン原子、テルル原子であり、具体的にはピリジル、ピラジニル、ピリミジル、ピリダジニル、ピロリル、ピラゾリル、トリアゾリル、イミダゾリル、オキサゾリル、チアゾリル、イソキサゾリル、イソチアゾリル、キノリル、フリル、チエニル、セレノフェニル、テルロフェニル、ペペリジル、ペペリジノ、モルホリノ、ピロリジル、ピロリジノ、ベンゾオキサゾリル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾチアゾリル、カルバゾリル基、アゼピニル基、シロリル基などが挙げられる。) これらの置換基は更に置換されてもよく、更なる置換基としては、前記置換基群 A から選択される基を挙げることができる。

10

20

【0013】

以下、本発明について詳細に説明する。なお、本明細書において「~」はその前後に記載される数値をそれぞれ最小値及び最大値として含む範囲を示す。

【0014】

(有機電界発光素子用材料)

本発明の有機電界発光素子用材料は、分子アスペクト比が 5 以上の添加剤を 254 nm における HPLC 吸収面積に基づき 0.01% 以上 1% 以下含み、有機電界発光素子用材料中の 254 nm における HPLC 吸収面積が 98% 以上を占める化合物を含む有機電界発光素子用材料である。

30

【0015】

本発明における HPLC 吸収面積は、以下に記載の分析条件において、高速液体クロマトグラフィー (HPLC) により求めることができる。

(HPLC による分析条件)

HPLC 装置：島津製作所製 HPLC (LC-10ADVP ポンプ、CTO-10ACV P カラムオープン、SIL-10ADVP オートサンプラー、RID-10A 示差屈折検出器、CLASS-V P 解析ソフト)

カラム：東ソー TSK gel ODS-100Z

移動層、流速：60% テトラヒドロフラン (THF) 水溶液、1.0 ml/min

40

カラム温度：40℃

【0016】

本発明においては、254 nm における吸収強度の面積比から算出された数値を、添加剤及び化合物の「含有量」として用いる。以下の記載において、特に断りが無ければ、不純物の「含有量」は、前述の方法により算出された数値を意味する。

【0017】

有機電界発光素子の層を構成する膜は、結晶化させることなくムラなく配向したアモルファス膜であることが好ましい。しかし、アモルファス膜といっても材料によってその内部構造は完全にランダムではないことが観測されている。本願の効果が発現するメカニズムは明らかではないが、アスペクト比の高い化合物を少量添加することによって、局所的

50

な規則的ドメイン構造の構築を抑制するものとする。すなわち、分子アスペクト比が3以上の添加剤を0.01%以上1%以下、好ましくは0.05%以上1%以下、より好ましくは0.1%以上0.5%以下含むことで、これにより膜の面内方向での局所的な移動度の変化が小さくなり、面内方向の輝度ムラを抑制し得るという本発明の効果が得られるものと考えられる。本発明は面内方向の輝度ムラが特に問題とされる照明分野に特に有効である。また、塗布プロセスで膜を形成した時により顕著な効果が見られる。

有機電界発光素子用材料は、分子アスペクト比が5以上の添加剤及び上記化合物以外に、例えば、反応中間体や原料、金属試薬などを含有する場合がある。分子アスペクト比が3以上の添加剤及び上記化合物の合計が254nmにおけるHPLC吸収面積に基づき100%であることが好ましい。

10

【0018】

〔254nmにおけるHPLC吸収面積が98%以上である化合物〕

本発明の有機電界発光素子用材料は、254nmにおけるHPLC吸収面積が98%以上である化合物を含む。すなわち、有機電界発光素子用材料に主成分として含まれる化合物は254nmにおけるHPLC吸収面積が98%以上、好ましくは98.5%以上である。該化合物は平面性の高いホスト材料であることが好ましく、該ホスト材料は平板状化合物であることがより好ましい。平板状とは、分子計算モデルにおいて、共役平面を共有する部分をコア部と呼び、コア部の最も長い部分がx軸上にあると仮定したときのx軸方向のコア部長さを L_x とし、その状態でy軸方向のコア部長さが最大になるようにy軸を規定した場合のコア部長さを L_y とし、z軸方向のコア部長さを L_z としたとき、 L_x/L_y が1~1.5の間にあり、なおかつ L_x/L_z が5以上であるものである。

20

更に、本発明の発光層に使用されるホスト材料としては、平板状ホスト化合物の中でも以下に対応するディスコティック液晶性ホスト化合物が好ましい。

【0019】

〔ディスコティック液晶性ホスト化合物〕

前記ディスコティック液晶性ホスト材料は、平面性の高い円盤状の分子からなる液晶相を形成する。

【0020】

前記ディスコティック液晶性ホスト化合物としては、分子中心の母核に対して、直鎖のアルキル基、アルコキシ基、置換ベンゾイルオキシ基が母核の側鎖として放射線状に置換した構造の化合物も含まれる。分子又は分子の集合体が、回転対称性を有し、一定の配向を付与できる化合物であることが好ましい。

30

【0021】

〔ディスコティック液晶性トリフェニレン誘導体〕

液晶性を示すトリフェニレン誘導体としては、従来から知られているディスコティック液晶性のトリフェニレン誘導体であれば使用できるが、例えば下記一般式(T-I)で表されるトリフェニレン誘導体を挙げることができる。

以下、254nmにおけるHPLC吸収面積が98%以上である化合物を「ホスト材料」、「主成分化合物」と称する場合がある。

平面性の高いホスト材料としては、トリフェニレン誘導体、ピレン誘導体、トリアジン誘導体、カルバゾール誘導体が挙げられるが素子駆動時の化学的安定性の観点からトリフェニレン誘導体であることが好ましい。

40

【0022】

〔分子アスペクト比が5以上の添加剤〕

アスペクト比とは、添加剤の分子直径と分子厚みとの比(分子直径/分子厚み)である。

配向性の観点から、本発明に用いるホスト材料はアスペクト比が3以上であり、アスペクト比が3.8以上であることが好ましい。

ここで、分子直径とは最も長い分子長を意味し、理論計算により下記のように規定される。ここでいう理論計算は、密度汎関数法を用いて行い、具体的には、Gaussian

50

03 (米ガウシアン社)を用いて、基底関数: $6-31G^*$ 、交換相関汎関数: B3LYP/LANL2DZにて、構造最適化計算を行う。構造最適化計算により得られた最適化構造を用い、最も長い分子長のボール&スティック表示における長さを宿主材料の分子直径と定義する。

また、分子厚みとは、上記分子直径をx軸と仮定し、その状態でy軸方向の分子長さが最大となるようにy軸をとり、該x及びy軸と直交する方向をz軸としたときの、該z軸方向の分子の厚みを意味する。分子厚みについても、分子直径と同様の手法で求められ、ボール&スティック表示における分子の厚み方向の長さを分子厚みと定義する。

【0023】

前記添加剤が前記化合物を合成した際の反応副生成物又は原料であることが好ましい。また、前記添加剤が円盤状化合物であることが好ましい。前記化合物、及び添加剤のいずれもが、トリフェニレン誘導体、ピレン誘導体、トリアジン誘導体、カルバゾール誘導体のいずれかより選択されることが好ましく、トリフェニレン誘導体、ピレン誘導体、トリアジン誘導体のいずれかより選択されることがより好ましい。

10

【0024】

〔トリフェニレン誘導体〕

前記化合物が下記一般式(T-1)で表されるトリフェニレン誘導体であり、前記添加剤が下記一般式(MT-1)で表されるトリフェニレン誘導体であることが好ましい。

一般式(T-1)で表される化合物の中でも、液晶性を発現可能な化合物がより好ましい。液晶性を発現可能な化合物を宿主材料として用いることで、液晶性宿主材料が配向し、これにより発光材料の配向性も向上させることができ、光取り出し率が向上するためである。

20

【0025】

ディスコティック液晶性材料としては、分子中心の母核に対して、直鎖のアルキル基、アルコキシ基、置換ベンゾイルオキシ基が母核の側鎖として放射線状に置換した構造の化合物も含まれる。分子又は分子の集合体が、回転対称性を有し、一定の配向を付与できる化合物であることが好ましい。

ディスコティック液晶性材料は、最終的に有機電界発光素子に含まれる化合物が液晶性を示す必要はなく、例えば、低分子のディスコティック液晶性分子が熱や光で反応する基を有しており、結果的に熱、光で反応により重合又は架橋し、高分子化し液晶性を失った化合物も含まれる。ディスコティック液晶性材料の好ましい例としては、特開平8-50206号公報に記載されている。また、ディスコティック液晶性材料の重合については、特開平8-27284号公報に記載がある。

30

【0026】

ディスコティック液晶性材料のディスコティックネマティック液晶相-等方相転移温度は、50~300℃が好ましく、70~300℃がより好ましく、100℃~300℃が特に好ましい。

【0027】

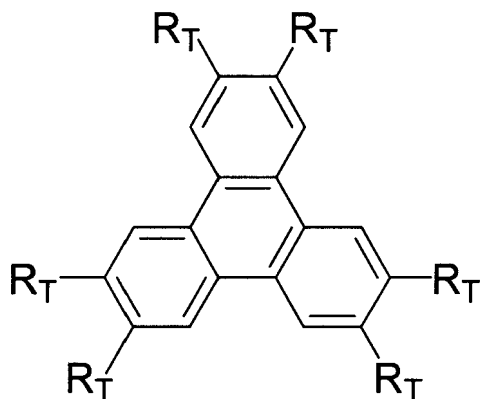
〔一般式(T-1)で表される化合物〕

【0028】

40

【化 3】

一般式 (T-I)



10

【0029】

上記一般式 (T-I) において、 R_T は、 R_T^1 -、 R_T^1 - O -、 R_T^1 - COO - 又は R_T^1 - O - COO - を意味する。これら基を持つ化合物が全てディスコティック液晶性ではないが、公知技術等に基づきディスコティック液晶性となる適切な基を選択して使用することが出来る。 R_T^1 としては、アルキル基、アルキル基にフェニレン基やシクロヘキシレン基等の環が組み合わされたもの、アルキル基の炭素-炭素間に酸素原子が配置されたもの等がある。

20

【0030】

R_T としては、具体的には、 R_T^2 -、 R_T^2 - O -、 R_T^2 - O - R_T^3 -、 R_T^2 - O - R_T^3 - O -、 R_T^2 - O - Ph - COO -、 R_T^2 - (O - R_T^3) n_T - O - Ph - COO -、 R_T^2 - O - Ph - CH = CH - COO -、 CH_2 = CH - COO - R_T^3 - O - Ph - COO - が挙げられる。ここで、 R_T^2 は重合性基を有していてもよいアルキル基を表し、 R_T^3 はアルキレン基を表し、Ph は置換基を有していてもよいフェニレン基を表し、 n_T は - (O - R_T^3) - の繰り返し数であり、1 以上の整数を表す。

30

【0031】

R_T^2 は重合性基を有していてもよいアルキル基を表し、重合性基を有する場合、アルキル基の最末端に重合性基を有することが N_D 相の発現性の観点で好ましい。重合性基としては、アクリル酸エステル基、メタクリル酸エステル基、クロトン酸エステル基、エポキシ基等が挙げられ、重合の速度、合成の容易性及びコストの点で、アクリル酸エステル基、メタクリル酸エステル基が好ましく、アクリル酸エステル基がより好ましい。

R_T^2 で表される重合性基を有していてもよいアルキル基におけるアルキル基部分の炭素数は、好ましくは 1 ~ 20 の範囲であり、より好ましくは 1 ~ 15 の範囲であり、更に好ましくは 3 ~ 10 の範囲である。

R_T^3 で表されるアルキレン基の炭素数は、好ましくは 1 ~ 20 の範囲であり、より好ましくは 1 ~ 15 の範囲であり、更に好ましくは 3 ~ 10 の範囲である。

40

Ph は置換基を有していてもよいフェニレン基を表し、有していてもよい置換基としてはフッ素原子などのハロゲン原子、アルキル基、アルコキシ基などが挙げられ、 N_D 相の発現性の観点で、アルキル基が好ましい。置換基としてのアルキル基、アルコキシ基の炭素数は、好ましくは 1 ~ 20 の範囲であり、より好ましくは 1 ~ 10 の範囲であり、更に好ましくは 1 ~ 6 の範囲である。

n_T は、- (O - R_T^3) - の繰り返し数であり、1 以上の整数を表す。 n_T は好ましくは 1 ~ 10 の整数であり、より好ましくは 1 ~ 6 の整数であり、更に好ましくは 1 ~ 3 の整数である。

【0032】

R_T としては、 N_D 相の発現性の観点で、 R_T^2 - O - Ph - COO -、 R_T^2 - (O

50

$-R_T^3) n_T-O-Ph-COO-$ 、 $R_T^2-O-Ph-CH=CH-COO-$ が好ましく、 $R_T^2-O-Ph-COO-$ が更に好ましい。

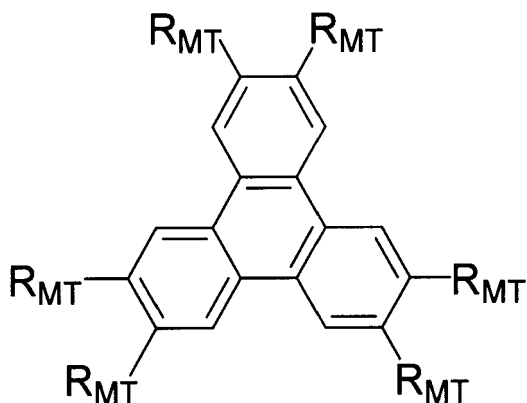
【0033】

〔一般式(MT-I)で表される化合物〕

【0034】

【化4】

一般式(MT-I)



10

20

【0035】

上記一般式(MT-I)において、 R_{MT} は、前記一般式(T-I)における R_T と同義であるが、6つの R_{MT} のうち少なくとも一つは前記一般式(T-I)における R_T と異なる置換基を表す。

【0036】

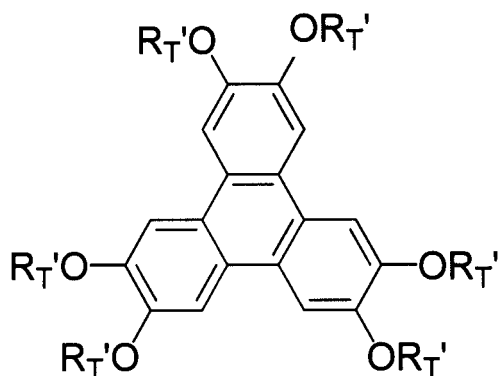
上記一般式(T-I)で表されるトリフェニレン誘導体は、 N_D 相を発現するという点で、下記一般式(T-II)で表されるトリフェニレン誘導体であることが好ましい。また、上記一般式(MT-I)で表されるトリフェニレン誘導体は、下記一般式(MT-II)で表されるトリフェニレン誘導体であることが好ましい。

【0037】

【化5】

30

一般式(T-II)



40

【0038】

上記一般式(T-II)において、 R_T' は、 $R_T^2-O-Ph-CO-$ 、 $R_T^2-(O-R_T^3) n_T-O-Ph-CO-$ 、又は $R_T^2-O-Ph-CH=CH-CO-$ を表す。 R_T^2 、 Ph 、 R_T^3 、及び n_T の定義は、前記一般式(T-I)における R_T^2 、 Ph 、 R_T^3 、及び n_T と同義である。また上記一般式(T-II)における R_T^2 、 Ph 、 R_T^3 、及び n_T の具体例及び好ましい範囲も、前記一般式(T-I)におけるもの

50

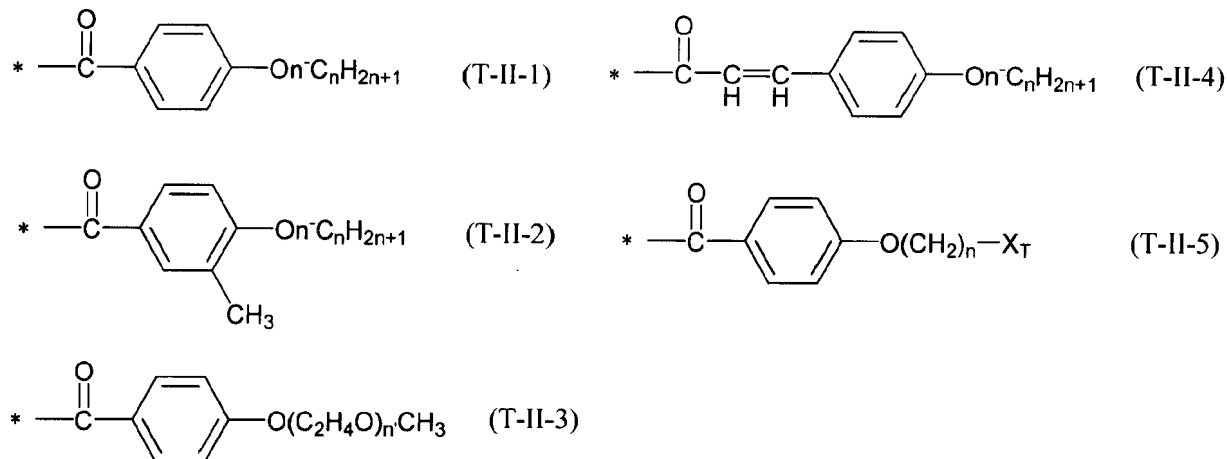
と同様である。

【0039】

R_T' は、 N_D 相の発現が良好であることから、以下の一般式 (T-II-1) ~ (T-II-5) のいずれかで表されることがより好ましい。

【0040】

【化6】



10

20

【0041】

上記一般式 (T-II-1) ~ (T-II-5) 中、 n 及び n' はそれぞれ独立に、1以上の整数を表す。

X_T は、重合性基を表す。

【0042】

n は、1以上の整数を表す。 n は、好ましくは1~20の整数であり、より好ましくは1~15の整数であり、更に好ましくは3~10の整数である。

n' は、1以上の整数を表す。 n' は、好ましくは1~10の整数であり、より好ましくは1~6の整数であり、更に好ましくは1~3の整数である。

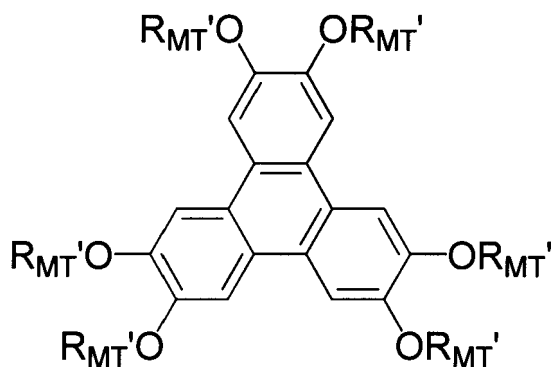
X_T は、重合性基を表し、その具体例及び好ましい範囲は、前記一般式 (T-I) において R_T^2 で表されるアルキル基が有していてもよい重合性基の具体例及び好ましい範囲と同様である。

30

【0043】

【化7】

一般式 (MT-II)



40

【0044】

上記一般式 (MT-II) において、 R_{MT}' は、上記一般式 (T-II) における R_T' と同義であるが、6つの R_{MT}' のうち少なくとも一つは前記一般式 (T-II) に

50

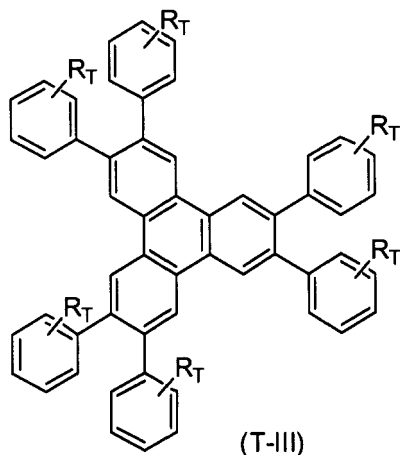
おける R_T ' と異なる置換基を表す。

【0045】

上記一般式 (T-I) で表されるトリフェニレン誘導体は、電氣的酸化に強いという点で、下記一般式 (T-III) で表されるトリフェニレン誘導体であることもまた好ましい。

【0046】

【化8】



10

20

【0047】

上記一般式 (T-III) において、 R_T は、 R_T^1 -、 R_T^1 -O-、 R_T^1 -CO-O-又は R_T^1 -O-CO-を意味する。 R_T^1 としては、アルキル基、アリール基、アルキル基にフェニレン基やシクロヘキシレン基等の環が組み合わされたもの、アルキル基の炭素-炭素間に酸素原子が配置されたもの等がある。 R_T^2 、Ph、 R_T^3 、及び n_T の定義は、前記一般式 (T-I) における R_T^2 、Ph、 R_T^3 、及び n_T と同義である。また上記一般式 (T-III) における R_T^2 、Ph、 R_T^3 、及び n_T の具体例及び好ましい範囲も、前記一般式 (T-I) におけるものと同様である。

【0048】

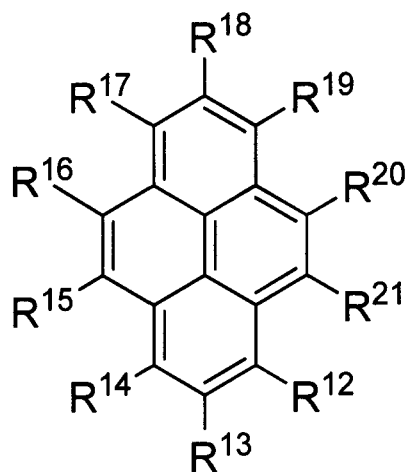
〔ピレン誘導体〕

30

前記ピレン誘導体としては、下記一般式 (P-1) で表されるピレン誘導体を挙げることができ、その場合の前記添加剤としては下記一般式 (MP-1) で表されるピレン誘導体を挙げることができる。

【0049】

【化 9】



(P-1)

10

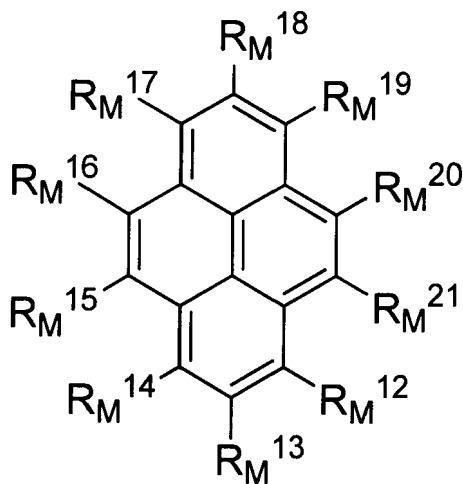
【0050】

(一般式 (P-1) において、R¹² ~ R²¹ はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基又はアルキル基、フェニル基、フルオレニル基、ナフチル基、トリフェニレニル基、フェナントリル基、又はこれらを組み合わせてなる基を表す。ただし、R¹² ~ R²¹ の全てが水素原子になることはない。R¹² ~ R²¹ はそれぞれ互いに結合して環を形成してもよい。)

20

【0051】

【化 10】



(MP-1)

30

【0052】

上記一般式 (MP-1) において、R_M¹² ~ R_M²¹ は、上記一般式 (P-1) における R¹² ~ R²¹ と同義であるが、R_M¹² ~ R_M²¹ のうち少なくとも一つは前記一般式 (P-1) における R¹² ~ R²¹ と異なる置換基を表す。

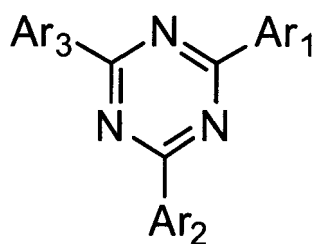
40

【0053】

〔トリアジン誘導体〕前記トリアジン誘導体としては、下記一般式 (I V) で表されるトリアジン誘導体を挙げることができ、その場合の前記添加剤としては下記一般式 (M I V) で表されるトリアジン誘導体を挙げることができる。

【0054】

【化 1 1】



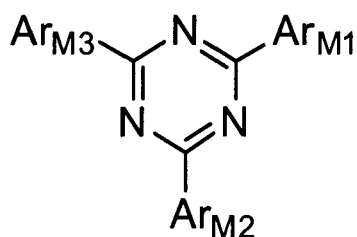
【0055】

10

(一般式 (I V) において、 $Ar^1 \sim Ar^3$ はそれぞれ独立に、アルキル基、アルコキシ基、アルキルカルボニルオキシ基で置換されていてもよい 5 員又は 6 員のヘテロアリール基、フェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、トリフェニレニル基、フェナントリル基を表す。

【0056】

【化 1 2】



20

【0057】

(一般式 (M I V) において、 $Ar_{M1} \sim Ar_{M3}$ の定義及び好ましい範囲は $Ar^1 \sim Ar^3$ と同様である。

【0058】

〔カルバゾール誘導体〕

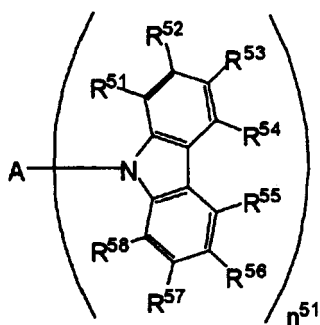
前記カルバゾール誘導体としては、下記一般式 (V) で表されるカルバゾール誘導体を挙げることができ、その場合の前記添加剤としては下記一般式 (M V) で表されるカルバゾール誘導体を挙げることができる。

30

【0059】

【化 1 3】

一般式 (V)



40

【0060】

(一般式 (V) 中、 $R^{51} \sim R^{58}$ はそれぞれ独立に水素原子、重水素原子、若しくは、置換基であり、 $R^{51} \sim R^{58}$ は隣接する置換基どうしで縮合環を形成しても良い。A は連結基を表し、 n^{51} は 2 ～ 6 の整数を表す。)

【0061】

50

$R^{51} \sim R^{58}$ で表される置換基としては特に限定されないが、例えば、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、ヘテロアリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、ヘテロ環オキシ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アシルオキシ基、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、アリールオキシカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、スルファモイル基、カルバモイル基、アルキルチオ基、アリールチオ基、ヘテロ環チオ基、スルホニル基、スルフィニル基、ウレイド基、リン酸アミド基、ヒドロキシ基、メルカプト基、ハロゲン原子、シアノ基、スルホ基、カルボキシ基、ニトロ基、ヒドロキサム酸基、スルフィノ基、ヒドラジノ基、イミノ基、ヘテロ環基、シリル基、シリルオキシ基などが挙げられる。これらの置換基は、更に他の置換基によって置換されてもよく、また、これらの置換基同士が結合し、環を形成していてもよい。

10

【0062】

$R^{51} \sim R^{58}$ として好ましくは水素原子、重水素原子、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、ハロゲン基、シアノ基、シリル基であり、より好ましくは水素原子、重水素原子、アルキル基、ヘテロアリール基、ハロゲン基、シアノ基、シリル基であり、特に好ましくは水素原子、重水素原子、アルキル基、ヘテロアリール基、シリル基である。 $R^{51} \sim R^{58}$ は、更に他の置換基によって置換されてもよく、また、これらの置換基同士が結合し、環を形成していてもよい。

【0063】

$R^{51} \sim R^{58}$ のアルキル基として好ましくはメチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、*tert*-ブチル、*n*-オクチル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシル、1-アダマンチル、トリフルオロメチルであり、より好ましくはメチル、イソプロピル、*tert*-ブチル、*n*-オクチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、1-アダマンチル、トリフルオロメチルであり、特に好ましくは*tert*-ブチル、シクロヘキシル、1-アダマンチル、トリフルオロメチルである。これらの置換基は、更に他の置換基によって置換されてもよく、また、これらの置換基同士が結合し、環を形成していてもよい。

20

【0064】

$R^{51} \sim R^{58}$ のヘテロアリール基として好ましくはイミダゾリル、ピラゾリル、ピリジル、キノリル、イソキノリニル、ピロリル、インドリル、フリル、チエニル、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル、アゼピニルであり、より好ましくはイミダゾリル、ピラゾリル、キノリル、インドリル、フリル、チエニル、ベンズイミダゾリル、カルバゾリル、アゼピニルであり、特に好ましくはインドリル、フリル、チエニル、ベンズイミダゾリル、カルバゾリル、アゼピニルである。これらの置換基は、更に他の置換基によって置換されてもよく、縮環構造を形成していてもよく、また、これらの置換基同士が結合し、環を形成していてもよい。

30

【0065】

$R^{51} \sim R^{58}$ のシリル基として好ましくはトリメチルシリル、トリエチルシリル、トリイソプロピルシリル、メチルジフェニルシリル、ジメチル-*tert*-ブチルシリル、ジメチルフェニルシリル、ジフェニル-*tert*-ブチルシリル、トリフェニルシリルであり、より好ましくはトリメチルシリル、トリイソプロピルシリル、ジメチル-*tert*-ブチルシリル、ジフェニル-*tert*-ブチルシリル、トリフェニルシリルであり、特に好ましくはトリメチルシリル、ジメチル-*tert*-ブチルシリル、トリフェニルシリルである。これらの置換基は、更に他の置換基によって置換されてもよく、また、これらの置換基同士が結合し、環を形成していてもよい。

40

【0066】

n^{51} として好ましくは、2~4であり、より好ましくは、2~3であり、特に好ましくは2である。

【0067】

Aで表される連結基としては、好ましくは、アルキレン、アリーレン、ヘテロアリーレ

50

ン、シリレンであり、より好ましくは、アリーレン、ヘテロアリーレンであり、特に好ましくは、アリーレンであり、これらの連結基は、例えば、前述の $R^{51} \sim R^{58}$ で表される置換基により、更に置換されていても良い。

【0068】

アリーレンとして好ましくは、フェニレン、ナフチレン、ビフェニレン、ターフェニレンであり、より好ましくは、フェニレン、ビフェニレンであり、特に好ましくは、フェニレンである。

【0069】

フェニレンとして好ましくは、1, 2, 3, 4, 5, 6 - 六置換フェニレン、1, 2, 4, 5 - 四置換フェニレン、1, 3, 5 - 三置換フェニレン、1, 2 - 二置換フェニレン、1, 3 - 二置換フェニレン、1, 4 - 二置換フェニレンであり、より好ましくは、1, 2 - 二置換フェニレン、1, 3 - 二置換フェニレン、1, 4 - 二置換フェニレンであり、特に好ましくは、1, 3 - 二置換フェニレン、1, 4 - 二置換フェニレンである。

10

【0070】

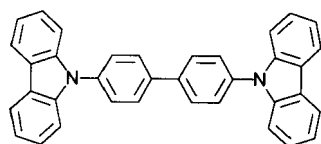
ヘテロアリーレンとして好ましくは、二置換ピリジレン、二置換N-フェニルカルバゾリレンであり、より好ましくは、2, 6 - 二置換ピリジレン、3, 5 - 二置換ピリジレン、3, 6 - 二置換N-フェニルカルバゾリレンであり、特に好ましくは、3, 6 - 二置換N-フェニルカルバゾリレンである。

カルバゾール基を有する化合物としては、例えば以下に示す化合物が挙げられる。

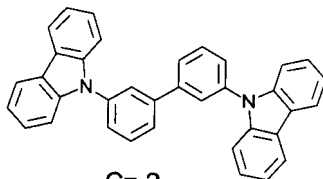
【0071】

20

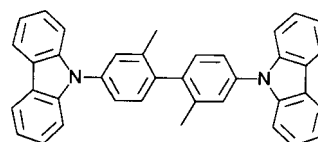
【化 1 4】



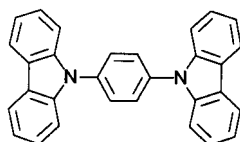
Cz-1



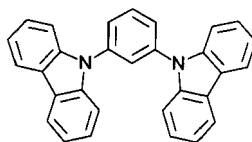
Cz-2



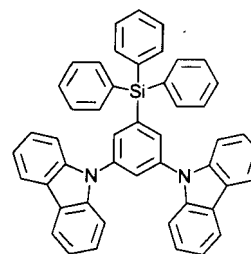
Cz-3



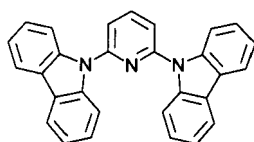
Cz-4



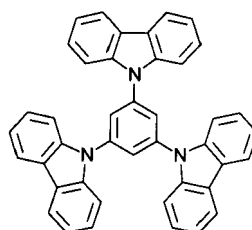
Cz-5



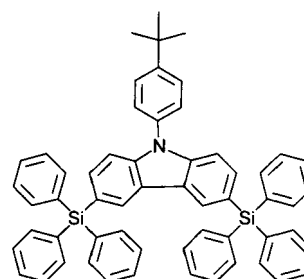
Cz-6



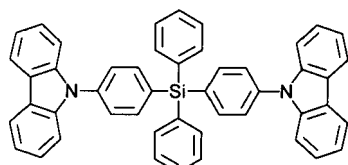
Cz-7



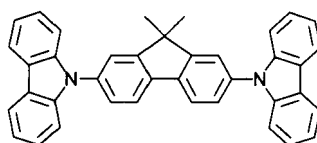
Cz-8



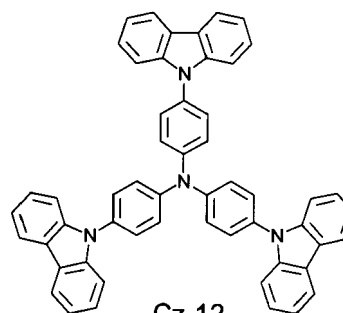
Cz-9



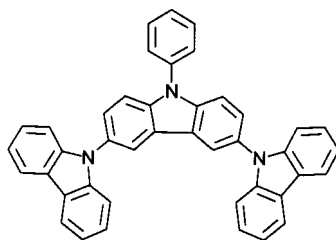
Cz-10



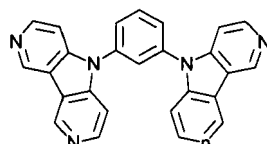
Cz-11



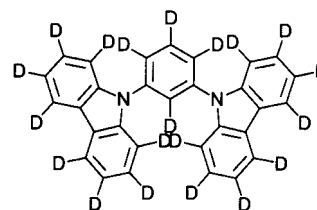
Cz-12



Cz-13



Cz-14



Cz-15

10

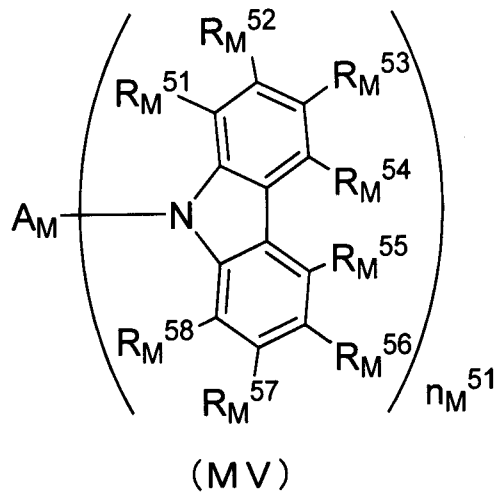
20

30

40

【 0 0 7 2 】

【化 1 5】



10

【0073】

上記一般式 (MV) において、 $R_M^{51} \sim R_M^{58}$ 、 A_M 及び n_M^{51} は、上記一般式 (V) における $R^{51} \sim R^{58}$ 、 A 及び n^{51} と同義であるが、 $R_M^{51} \sim R_M^{58}$ 、 A_M のうち少なくとも一つは前記一般式 (V) における $R^{51} \sim R^{58}$ 、 A と異なる置換基又は連結基を表す。

20

【0074】

発光層形成用の塗布液中におけるホスト材料の含有量は、全固形分に対して 70 質量%～99.9 質量%が好ましく、75 質量%～99 質量%がより好ましく、80 質量%～95 質量%が特に好ましい。

【0075】

また、発光材料とホスト材料の少なくとも一方が液晶性を有することが好ましく、ホスト材料と発光材料の両方が液晶性を有することがより好ましい。

【0076】

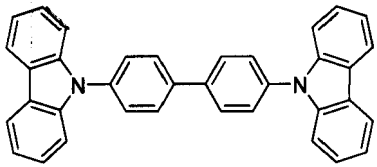
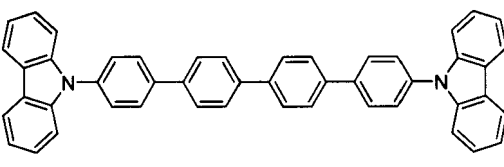
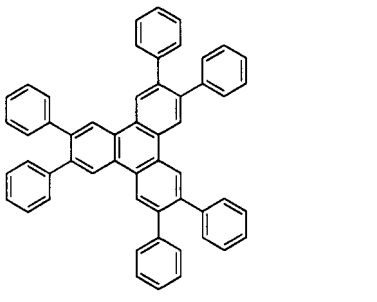
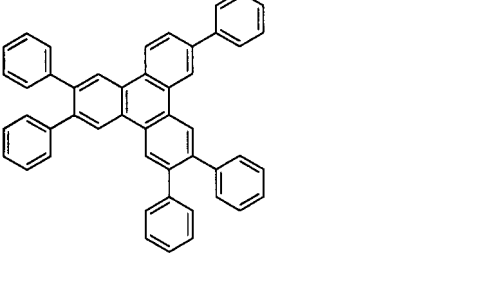
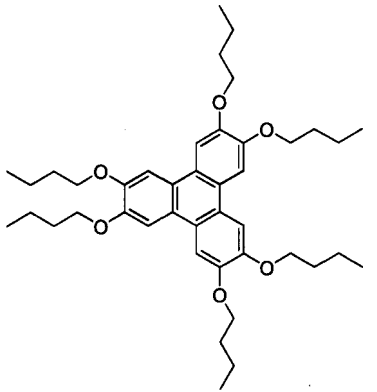
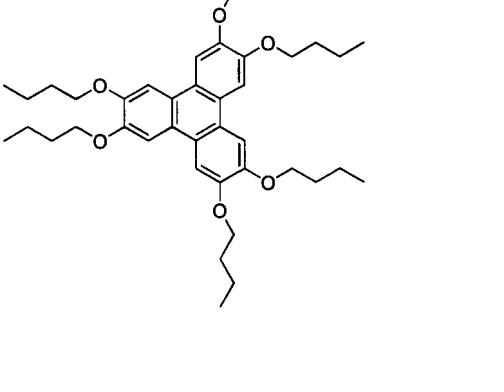
一般式 (T-I) と一般式 (MT-I) の組み合わせ、一般式 (P-1) と一般式 (MP-1) の組み合わせ、一般式 (V) と一般式 (MV) の組み合わせ、一般式 (IV) と一般式 (MIV) の組み合わせとして好ましくは、例えば、下記の表 1 を挙げることができる。

30

【0077】

【表 1】

表 1

主成分化合物	添加剤
	
	
	

10

20

30

【0078】

< 発光材料 >

発光材料としては、前記化合物（ホスト材料）の配向を乱さないで自身の配向性を向上させる観点から、前記発光材料の分子コア直径と分子コア厚みとのアスペクト比（分子コア直径／分子コア厚み）としては、少なくとも3であり、3～30がより好ましく、4～20が特に好ましい。

前記アスペクト比が、3未満であると、分子揺らぎが大きくなり、配向性が低下することがあり、30を超えると、ホスト材料への溶解性が極端に低下したり、配向性が低下することがある。

【0079】

前記分子コア直径とは、クロモフォア（共役系でつながった発色団、発光骨格）の最も長い分子長を意味する。

前記分子コア直径としては、理論計算により下記のように規定される。ここでいう理論計算は、密度汎関数法を用いて行い、具体的には、Gaussian 03（米ガウシアン社）を用いて、基底関数：6-31G*、交換相関汎関数：B3LYP／LANL2DZにて、構造最適化計算を行う。構造最適化計算により得られた最適化構造を用い、最も長い分子長のボール&スティック表示における長さを前記燐光発光性化合物の分子コア直径と定義する。

【0080】

前記分子コア厚みとは、前記クロモフォアを平面としたときの分子の厚みを意味する。

40

50

前記分子コア厚みについても、前記分子コア直径と同様の手法で求められ、ボール&スティック表示における分子の厚み方向の長さを分子コア厚みと定義する。

【0081】

前記発光材料の分子半径としては、0.4 nm～3 nmが好ましく、0.8 nm～2.5 nmがより好ましく、1.2 nm～2 nmが特に好ましい。

前記分子半径が、0.4 nm以上であれば、液晶中での配向性低下、発光強度の低下及び可視域に発光波長を制御しやすく、3 nm以下であれば、成膜時の配向性低下や液晶への相溶性低下が抑制し得る。

発光材料の分子半径は、側鎖を含む分子全体を円盤としたときの半径と定義する。

【0082】

前記分子半径としては、前記分子コア直径と同様に、理論計算により下記のように規定される。ここでいう理論計算は、密度汎関数法を用いて行い、具体的には、Gaussian 03（米ガウシアン社）を用いて、基底関数：6-31G*、交換相関汎関数：B3LYP/LANL2DZにて構造最適化計算を行う。前記構造最適化計算により得られた最適化構造を用い、前記発光材料の分子半径を求める。

【0083】

発光材料の分子半径とホスト材料の分子半径とのサイズ比（発光材料の分子半径／液晶性ホスト材料の分子半径）としては、0.8～1.2であり、0.85～1.15がより好ましく、0.9～1.1が特に好ましい。前記サイズ比がこの範囲であると、有機電界発光素子の正面方向の輝度が上昇する。これは、ホスト材料に発光材料を混合しても、ホスト材料の配向秩序度（オーダーパラメーター）を低下させないため、成膜後、モノドメインかつ分子全体の平均が水平配向となり、発光材料分子の配向方向が均一になるためと推測している。なお、有機電界発光素子の正面方向とは、有機電界発光素子を立てて配置し、基板側から前記発光層へ垂線を引き、この方向から見た方向のことをいう。

【0084】

前記発光材料としては、前記アスペクト比を満たすものであれば、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができ、蛍光発光材料でも燐光発光材料でもよい。

発光材料としては、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができるが、燐光発光材料が好ましい。

【0085】

〔蛍光発光材料〕

蛍光発光材料としては平面性の高い化合物であることが好ましい。平面性の高い蛍光発光材料としてはピレン誘導体、アントラセン誘導体等が挙げられ、ピレン誘導体が分子形状の観点で好ましい。また、該ピレン誘導体は液晶性を発現することが好ましい。

【0086】

〔燐光発光材料〕

燐光発光材料としては、例えば遷移金属原子、ランタノイド原子を含む錯体などが挙げられる。これらは、1種単独で使用してもよく、2種以上を併用してもよい。

前記錯体は、化合物中に遷移金属原子を1つ有してもよいし、また、2つ以上有するいわゆる複核錯体であってもよい。異種の金属原子を同時に含有していてもよい。

【0087】

錯体の配位子としては、例えば、G. Wilkinson等著、Comprehensive Coordination Chemistry, Pergamon Press社1987年発行、H. Yersin著、「Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds」Springer-Verlag社1987年発行、山本明夫著「有機金属化学－基礎と応用－」裳華房社、1982年発行等に記載の配位子などが挙げられる。

配位子としては、例えば、ハロゲン配位子、芳香族炭素環配位子、含窒素ヘテロ環配位子、ジケトン配位子、カルボン酸配位子、アルコラト配位子、一酸化炭素配位子、イソニトリル配位子、シアノ配位子などが挙げられる。これらの中でも、含窒素ヘテロ環配位子

10

20

30

40

50

が特に好ましい。

ハロゲン配位子としては、例えば、塩素配位子などが挙げられる。

芳香族炭素環配位子としては、例えば、シクロペンタジエニルアニオン、ベンゼンアニオン、又はナフチルアニオンなどが挙げられる。

含窒素ヘテロ環配位子としては、例えば、フェニルピリジン、ベンゾキノリン、キノリノール、ビピリジル、フェナントロリンなどが挙げられる。

ジケトン配位子としては、例えば、アセチルアセトンなどが挙げられる。

カルボン酸配位子としては、例えば、酢酸配位子などが挙げられる。

アルコラト配位子としては、例えば、フェノラト配位子などが挙げられる。

【0088】

10

遷移金属原子としては、例えばルテニウム、ロジウム、パラジウム、タングステン、レニウム、オスミウム、イリジウム、白金などが挙げられる。これらの中でも、前記アスペクト比が3以上となる点で、平面状の配位構造である4座となる白金（白金錯体）が好ましく、サレン系、ポルフィリン系骨格の白金錯体がより好ましい。

【0089】

〔金属錯体〕

本発明において、発光材料は金属錯体であることが好ましい。

金属錯体としては、例えば遷移金属原子、ランタノイド原子を含む錯体などが挙げられる。これらは、1種単独で使用してもよく、2種以上を併用してもよい。

前記錯体は、化合物中に遷移金属原子を1つ有してもよいし、また、2つ以上有するいわゆる複核錯体であってもよい。異種の金属原子を同時に含有していてもよい。

20

前記金属錯体の配位子としては、例えば、G. Wilkinson等著、Comprehensive Coordination Chemistry, Pergamon Press社1987年発行、H. Yersin著、「Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds」Springer-Verlag社1987年発行、山本明夫著「有機金属化学—基礎と応用—」裳華房社、1982年発行等に記載の配位子などが挙げられる。

前記配位子としては、例えば、ハロゲン配位子、芳香族炭素環配位子、含窒素ヘテロ環配位子、ジケトン配位子、カルボン酸配位子、アルコラト配位子、一酸化炭素配位子、イソニトリル配位子、シアノ配位子などが挙げられる。これらの中でも、含窒素ヘテロ環配位子が特に好ましい。

30

前記ハロゲン配位子としては、例えば、塩素配位子などが挙げられる。

前記芳香族炭素環配位子としては、例えば、シクロペンタジエニルアニオン、ベンゼンアニオン、又はナフチルアニオンなどが挙げられる。

前記含窒素ヘテロ環配位子としては、例えば、フェニルピリジン、ベンゾキノリン、キノリノール、ビピリジル、フェナントロリンなどが挙げられる。

前記ジケトン配位子としては、例えば、アセチルアセトンなどが挙げられる。

前記カルボン酸配位子としては、例えば、酢酸配位子などが挙げられる。

前記アルコラト配位子としては、例えば、フェノラト配位子などが挙げられる。

【0090】

40

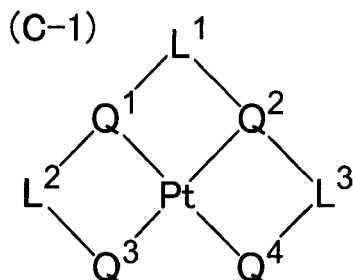
前記遷移金属原子としては、例えばルテニウム、ロジウム、パラジウム、タングステン、レニウム、オスミウム、イリジウム、白金などが挙げられる。これらの中でも、前記アスペクト比が3以上となる点で、平面状の配位構造である4座となる白金（白金錯体）が好ましく、サレン系、ポルフィリン系骨格の白金錯体がより好ましい。

【0091】

白金錯体として好ましくは、下記一般式（C-1）で表される白金錯体である。

【0092】

【化 1 6】



【0093】

10

(式中、 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 はそれぞれ独立に Pt に配位する配位子を表す。 L^1 、 L^2 及び L^3 はそれぞれ独立に単結合又は二価の連結基を表す。)

【0094】

一般式 (C-1) について説明する。 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 はそれぞれ独立に Pt に配位する配位子を表す。この時、 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 と Pt の結合は、共有結合、イオン結合、配位結合などいずれであっても良い。 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 中の Pt に結合する原子としては、炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、リン原子が好ましく、 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 中の Pt に結合する原子の内、少なくとも一つが炭素原子であることが好ましく、二つが炭素原子であることがより好ましく、二つが炭素原子で、二つが窒素原子であることが特に好ましい。

20

炭素原子で Pt に結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 としては、アニオン性の配位子でも中性の配位子でもよく、アニオン性の配位子としてはビニル配位子、芳香族炭化水素環配位子 (例えばベンゼン配位子、ナフタレン配位子、アントラセン配位子、フェナントレン配位子など)、ヘテロ環配位子 (例えばフラン配位子、チオフエン配位子、ピリジン配位子、ピラジン配位子、ピリミジン配位子、ピリダジン配位子、トリアジン配位子、チアゾール配位子、オキサゾール配位子、ピロール配位子、イミダゾール配位子、ピラゾール配位子、トリアゾール配位子及び、それらを含む縮環体 (例えばキノリン配位子、ベンゾチアゾール配位子など)) が挙げられる。中性の配位子としてはカルベン配位子が挙げられる。

窒素原子で Pt に結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 としては、中性の配位子でもアニオン性の配位子でもよく、中性の配位子としては含窒素芳香族ヘテロ環配位子 (ピリジン配位子、ピラジン配位子、ピリミジン配位子、ピリダジン配位子、トリアジン配位子、イミダゾール配位子、ピラゾール配位子、トリアゾール配位子、オキサゾール配位子、チアゾール配位子及びそれらを含む縮環体 (例えばキノリン配位子、ベンゾイミダゾール配位子など))、アミン配位子、ニトリル配位子、イミン配位子が挙げられる。アニオン性の配位子としては、アミノ配位子、イミノ配位子、含窒素芳香族ヘテロ環配位子 (ピロール配位子、イミダゾール配位子、トリアゾール配位子及びそれらを含む縮環体 (例えばインドール配位子、ベンゾイミダゾール配位子など)) が挙げられる。

30

酸素原子で Pt に結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 としては、中性の配位子でもアニオン性の配位子でもよく、中性の配位子としてはエーテル配位子、ケトン配位子、エステル配位子、アミド配位子、含酸素ヘテロ環配位子 (フラン配位子、オキサゾール配位子及びそれらを含む縮環体 (ベンゾオキサゾール配位子など)) が挙げられる。アニオン性の配位子としては、アルコキシ配位子、アリーールオキシ配位子、ヘテロアリーールオキシ配位子、アシルオキシ配位子、シリルオキシ配位子などが挙げられる。

40

硫黄原子で Pt に結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 としては、中性の配位子でもアニオン性の配位子でもよく、中性の配位子としてはチオエーテル配位子、チオケトン配位子、チオエステル配位子、チオアミド配位子、含硫黄ヘテロ環配位子 (チオフエン配位子、チアゾール配位子及びそれらを含む縮環体 (ベンゾチアゾール配位子など)) が挙げられる。アニオン性の配位子としては、アルキルメルカプト配位子、アリーールメルカプト配位子、ヘテロアリーールメルカプト配位子などが挙げられる。

50

リン原子で P t に結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 としては、中性の配位子でもアニオン性の配位子でもよく、中性の配位子としてはホスフィン配位子、リン酸エステル配位子、亜リン酸エステル配位子、含リンヘテロ環配位子（ホスフィニン配位子など）が挙げられ、アニオン性の配位子としては、ホスフィノ配位子、ホスフィニル配位子、ホスホリル配位子などが挙げられる。

Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 で表される基は、置換基を有していてもよく、置換基としては前記置換基群 A として挙げたものが適宜適用できる。また置換基同士が連結していても良い（ Q^3 と Q^4 が連結した場合、環状四座配位子の P t 錯体になる）。

【0095】

Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 で表される基として好ましくは、炭素原子で P t に結合する芳香族炭化水素環配位子、炭素原子で P t に結合する芳香族ヘテロ環配位子、窒素原子で P t に結合する含窒素芳香族ヘテロ環配位子、アシルオキシ配位子、アルキルオキシ配位子、アリールオキシ配位子、ヘテロアリールオキシ配位子、シリルオキシ配位子であり、より好ましくは、炭素原子で P t に結合する芳香族炭化水素環配位子、炭素原子で P t に結合する芳香族ヘテロ環配位子、窒素原子で P t に結合する含窒素芳香族ヘテロ環配位子、アシルオキシ配位子、アリールオキシ配位子であり、更に好ましくは炭素原子で P t に結合する芳香族炭化水素環配位子、炭素原子で P t に結合する芳香族ヘテロ環配位子、窒素原子で P t に結合する含窒素芳香族ヘテロ環配位子、アシルオキシ配位子である。

【0096】

L^1 、 L^2 及び L^3 は、単結合又は二価の連結基を表す。 L^1 、 L^2 及び L^3 で表される二価の連結基としては、アルキレン基（メチレン、エチレン、プロピレンなど）、アリーレン基（フェニレン、ナフタレンジイル）、ヘテロアリーレン基（ピリジンジイル、チオフェンジイルなど）、イミノ基（ $-NR-$ ）（フェニルイミノ基など）、オキシ基（ $-O-$ ）、チオ基（ $-S-$ ）、ホスフィニデン基（ $-PR-$ ）（フェニルホスフィニデン基など）、シリレン基（ $-SiRR'-$ ）（ジメチルシリレン基、ジフェニルシリレン基など）、又はこれらを組み合わせたものが挙げられる。これらの連結基は、更に置換基を有していてもよい。

錯体の安定性及び発光量子収率の観点から、 L^2 及び L^3 として好ましくは単結合、アルキレン基、アリーレン基、ヘテロアリーレン基、イミノ基、オキシ基、チオ基、シリレン基であり、より好ましくは単結合、アルキレン基、アリーレン基、イミノ基であり、更に好ましくは単結合、アルキレン基、アリーレン基であり、更に好ましくは、単結合、メチレン基、フェニレン基であり、更に好ましくは単結合、ジ置換のメチレン基であり、更に好ましくは単結合、ジメチルメチレン基、ジエチルメチレン基、ジイソブチルメチレン基、ジベンジルメチレン基、エチルメチルメチレン基、メチルプロピルメチレン基、イソブチルメチルメチレン基、ジフェニルメチレン基、メチルフェニルメチレン基、シクロヘキサンジイル基、シクロペンタンジイル基、フルオレンジイル基、フルオロメチルメチレン基であり、特に好ましくは単結合、ジメチルメチレン基、ジフェニルメチレン基、シクロヘキサンジイル基であり、最も好ましくは単結合である。

【0097】

L^1 として好ましくはアルキレン基、アリーレン基、ヘテロアリーレン基、イミノ基、オキシ基、チオ基、シリレン基であり、より好ましくはアルキレン基、アリーレン基、イミノ基であり、更に好ましくはアルキレン基、イミノ基であり、更に好ましくはメチレン基、イミノ基である。これらは置換基を有していてもよく、該置換基としては前記置換基群 A として挙げたものが適用できる。

L^1 として更に好ましくは単結合、ジ置換のメチレン基、アリールイミノ基であり、更に好ましくはジメチルメチレン基、ジエチルメチレン基、ジイソブチルメチレン基、ジベンジルメチレン基、エチルメチルメチレン基、メチルプロピルメチレン基、イソブチルメチルメチレン基、ジフェニルメチレン基、メチルフェニルメチレン基、シクロヘキサンジイル基、シクロペンタンジイル基、フルオレンジイル基、フルオロメチルメチレン基、フェニルイミノ基、4-tert-ブチルフェニルイミノ基、3, 5-ジtert-ブチルフェニルイ

10

20

30

40

50

ミノ基であり、特に好ましくはジメチルメチレン基、ジフェニルメチレン基、シクロヘキサンジイル基、3, 5-ジ-tert-ブチルフェニルイミノ基である。

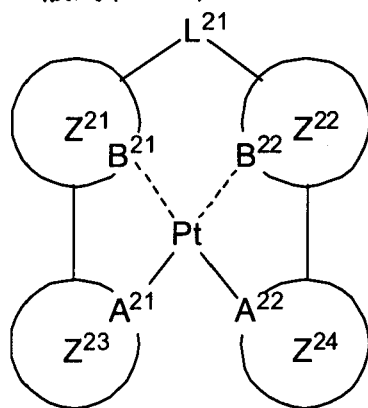
【0098】

一般式(C-1)で表される白金錯体のうち、より好ましくは下記一般式(C-2)で表される白金錯体である。

【0099】

【化17】

一般式(C-2)



10

20

【0100】

(式中、 L^{21} は単結合又は二価の連結基を表す。 A^{21} 、 A^{22} 、 B^{21} 、 B^{22} はそれぞれ独立に炭素原子又は窒素原子を表すが、2つ以上が窒素原子を表す。 Z^{21} 、 Z^{22} はそれぞれ独立にベンゼン環又は含窒素芳香族ヘテロ環を表す。 Z^{23} 、 Z^{24} はそれぞれ独立にベンゼン環又は含窒素芳香族ヘテロ環を表す。)

【0101】

一般式(C-2)について説明する。 L^{21} は、前記一般式(C-1)中の L^1 と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0102】

A^{21} 、 A^{22} 、 B^{21} 、 B^{22} はそれぞれ独立に炭素原子又は窒素原子を表すが、2つ以上が窒素原子を表し、2つ又は3つが窒素原子を表すことが好ましく、2つが窒素原子を表すことがより好ましい。錯体の安定性の観点から A^{21} 及び A^{22} 窒素原子を表す、又は B^{21} 及び B^{22} が窒素原子であることを表すことが好ましい。

30

【0103】

Z^{21} 、 Z^{22} 、 Z^{23} 、 Z^{24} は、それぞれ独立にベンゼン環又は含窒素芳香族ヘテロ環を表す。 Z^{21} 、 Z^{22} 、 Z^{23} 、 Z^{24} で表される含窒素芳香族ヘテロ環としては、ピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、ピリダジン環、トリアジン環、イミダゾール環、ピラゾール環、オキサゾール環、チアゾール環、トリアゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、などが挙げられる。錯体の安定性、発光波長制御及び発光量子収率の観点から Z^{23} 、 Z^{24} で表される環として好ましくは、ベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、イミダゾール環、ピラゾール環、チオフェン環であり、より好ましくはベンゼン環、ピリジン環、ピラゾール環であり、更に好ましくはベンゼン環、ピリジン環である。

40

【0104】

前記 Z^{21} 、 Z^{22} 、 Z^{23} 、 Z^{24} で表されるベンゼン環、含窒素芳香族ヘテロ環は置換基を有していてもよく、炭素原子上の置換基としては前記置換基群Aが、窒素原子上の置換基としては前記置換基群Bが適用できる。

【0105】

炭素上の置換基として好ましくはアルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、ヘテロ環基、ジアルキルアミノ基、ジアリールアミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ

50

基、シリル基、シアノ基、又はハロゲン原子であり、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、ヘテロ環基、ジアリールアミノ基、アルコキシ基、シアノ基、又はハロゲン原子がより好ましく、アルキル基、アルコキシ基、フッ素原子、又はシアノ基が更に好ましい。

【0106】

前記アルキル基としては、炭素数1～20の置換又は無置換のアルキル基を表し、直鎖、分岐、環状いずれの構造であってもよい。前記アルキル基としては、炭素数1～12が好ましく、例えば、メチル基、オクチル基、デシル基、ドデシル基、*n*-ブチル基、*t*-アミル基、*s*-ブチル基などが挙げられる。

前記アリール基としては、炭素数6～10の置換又は無置換のアリール基を表し、縮環していてもよく、例えば、フェニル基、トルイル基、ナフチル基などが挙げられる。

前記トリフルオロアルキル基としては、トリフルオロメチル基が好ましい。

前記アルコキシ基としては、炭素数1～20の置換又は無置換のアルコキシ基を表し、直鎖、分岐、環状いずれの構造であってもよい。前記アルコキシ基としては、炭素数1～12が好ましく、例えば、メトキシ基、ブチルオキシ基、オクチルオキシ基、デシルオキシ基、ドデシルオキシ基、*s*-オクチルオキシ基、ベンジルオキシ基などが挙げられる。

前記ヘテロ環基としては、炭素数6～10の置換又は無置換の含窒素芳香族ヘテロ環基を表し、縮環していてもよく、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環、カルバゾール環などが挙げられ、カルバゾール環が好ましい。

前記ジアリールアミノ基としては、炭素数6～10の置換又は無置換のジアリールアミノ基を表し、縮環していてもよく、ジフェニルアミノ基、ジトルイルアミノ基、ジナフチルアミノ基などが挙げられる。

前記ジアルキルアミノ基としては、炭素数1～20の置換又は無置換のアルキル基を表し、直鎖、分岐、環状いずれの構造であってもよい。前記ジアルキルアミノ基としては、炭素数1～12が好ましく、具体的には、例えば、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジオクチルアミノ基、ジデシルアミノ基、ジドデシルアミノ基、ジ*n*-ブチルアミノ基、ジ*t*-アミルアミノ基、ジ*s*-ブチルアミノ基などが挙げられる。

前記アリールオキシ基としては、炭素数6～10の置換又は無置換のアリールオキシ基を表し、縮環していてもよく、フェニルオキシ基、トルイルオキシ基、ナフチルオキシ基などが挙げられる。

前記シリル基としては、炭素数3～24の炭素原子で置換されたシリル基を表し、トリアルキルシリル基、アリールジアルキルシリル基、アルキルジアリールシリル基、トリアリールシリル基のいずれであってもよい。前記シリル基としては、炭素数3～18が好ましく、具体的には、例えば、トリメチルシリル基、*n*-ブチルジメチルシリル基、トリフェニルシリル基、*n*-ブチルジフェニルシリル基などが挙げられる。

ハロゲン原子としては、フッ素原子が好ましい。

【0107】

これらの中でも、アスペクト比の観点で、直鎖状アルキル基及び直鎖状アルキル基を置換基として有する前記置換基が好ましい。

置換基は発光波長や電位の制御のために適宜選択されるが、長波長化させる場合には電子供与性基、芳香環基が好ましく、例えばアルキル基、ジアルキルアミノ基、アルコキシ基、アリール基、芳香族ヘテロ環基などが選択される。また短波長化させる場合には電子求引性基が好ましく、例えばフッ素基、シアノ基、トリフルオロアルキル基などが選択される。

【0108】

窒素原子上の置換基として好ましくは、アルキル基、アリール基、又は芳香族ヘテロ環基であり、錯体の安定性の観点からアルキル基、又はアリール基が好ましい。

【0109】

前記置換基同士は連結して縮合環を形成していてもよく、形成される環としては、ベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、イミダゾール環、オキ

10

20

30

40

50

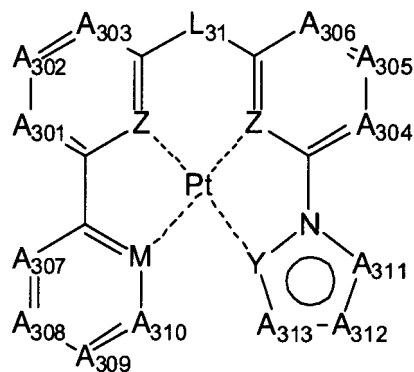
サゾール環、チアゾール環、ピラゾール環、チオフェン環、フラン環などが挙げられる。

【0110】

一般式（C-2）で表される白金錯体のうち、より好ましい態様の一つは下記一般式（C-3）で表される白金錯体である。

【0111】

【化18】



10

【0112】

（式中、 $A^{301} \sim A^{313}$ は、それぞれ独立に、C-R又は窒素原子を表す。Rは水素原子又は置換基を表す。 L^{31} は単結合又は二価の連結基を表す。Y、Z、Mは、炭素原子又は窒素原子を表し、ZとYのいずれか一方が、窒素原子である。）

20

【0113】

一般式（C-3）について説明する。

L^{31} は一般式（C-2）における L^{21} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0114】

$A^{301} \sim A^{306}$ はそれぞれ独立にC-R又は窒素原子を表す。Rは水素原子又は置換基を表す。Rで表される置換基としては、前記置換基群Aとして挙げたものが適用できる。

$A^{301} \sim A^{306}$ として好ましくはC-Rであり、R同士が互いに連結して環を形成していても良い。 $A^{301} \sim A^{306}$ がC-Rである場合に、 A^{302} 、 A^{305} のRとして好ましくは水素原子、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、ヘテロ環基、ジアルキルアミノ基、ジアリールアミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、シリル基、シアノ基、又はハロゲン原子であり、水素原子、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、ヘテロ環基、ジアリールアミノ基、アルコキシ基、シアノ基、又はハロゲン原子がより好ましく、水素原子、アルキル基、アルコキシ基、又はシアノ基が更に好ましく、水素原子が特に好ましい。該アルキル基、及びアリール基は更に置換基を有しても良く、該置換基としてはアルキル基、アリール基、シアノ基、アミノ基、ハロゲン原子、フルオロアルキル基が挙げられ、好ましくは炭素数1～6のアルキル基、シアノ基、アミノ基、ハロゲン原子、フルオロアルキル基（好ましくはトリフルオロメチル基）であり、更に好ましくは炭素数1～6のアルキル基、ハロゲン原子（好ましくはフッ素原子）である。 A^{302} 、 A^{305} がC-Rである場合、該 A^{302} 、 A^{305} のRとしては、素子の耐久性向上の観点からはアリール基が好ましく、発光波長が短いという観点では水素原子、アルキル基、アミノ基、アルコキシ基、フッ素基、シアノ基が好ましい。

30

40

A^{301} 、 A^{303} 、 A^{304} 、 A^{306} のRとして好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素基、シアノ基であり、より好ましくは水素原子、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素基であり、特に好ましくは水素原子である。

【0115】

A^{307} 、 A^{308} 、 A^{309} 及び A^{310} は、それぞれ独立に、C-R又は窒素原子

50

を表す。Rは水素原子又は置換基を表す。Rで表される置換基としては、前記置換基群Aとして挙げたものが適用できる。 A^{307} 、 A^{308} 、 A^{309} 及び A^{310} がC-Rである場合に、Rとして好ましくは水素原子、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、ジアルキルアミノ基、ジアリールアミノ基、アルキルオキシ基、シアノ基、ハロゲン原子であり、より好ましくは、水素原子、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、ジアルキルアミノ基、シアノ基、フッ素原子、更に好ましくは、水素原子、アルキル基、トリフルオロメチル基、フッ素原子である。また可能な場合は置換基同士が連結して縮環構造を形成してもよい。発光波長を短波長側にシフトさせる場合、 A^{308} が窒素原子であることが好ましい。

【0116】

一般式(C-3)において2つの炭素原子と A^{307} 、 A^{308} 、 A^{309} 及び A^{310} から形成される6員環としては、ベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環が挙げられ、より好ましくは、ベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環であり、特に好ましくはベンゼン環、ピリジン環である。前記6員環が、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環(特に好ましくはピリジン環)であることにより、ベンゼン環と比較して、金属-炭素結合を形成する位置に存在する水素原子の酸性度が向上する為、より金属錯体を形成しやすくなる点で有利である。

【0117】

A^{311} 、 A^{312} 及び A^{313} は、それぞれ独立に、C-R又は窒素原子を表す。Rは水素原子又は置換基を表す。Rで表される置換基としては、前記置換基群Aとして挙げたものが適用できる。 A^{311} 、 A^{312} 及び A^{313} がC-Rである場合に、Rとして好ましくは水素原子、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、ヘテロ環基、ジアルキルアミノ基、ジアリールアミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、シアノ基、ハロゲン原子であり、より好ましくは、水素原子、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、ジアルキルアミノ基、シアノ基、フッ素原子、更に好ましくは、水素原子、アルキル基、トリフルオロメチル基、フッ素原子である。また可能な場合は置換基同士が連結して、縮環構造を形成してもよい。

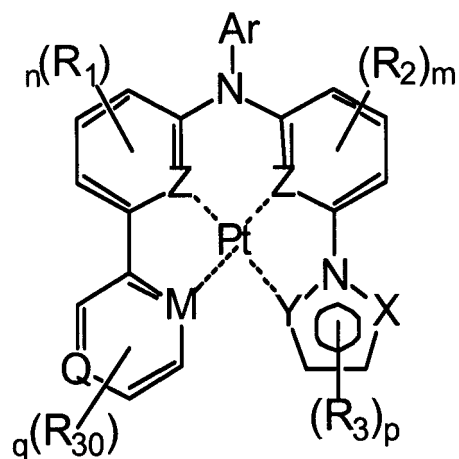
A^{311} 、 A^{312} 及び A^{313} のうち少なくとも一つは窒素原子であることが好ましく、特に A^{311} が窒素原子であることが好ましい。

【0118】

一般式(C-3)で表される白金錯体のうち、より好ましい態様の一つは下記一般式(C-3-1)で表される白金錯体である。

【0119】

【化19】



(C-3-1)

【0120】

(一般式(C-3-1)中、X、Y、Z、Mはそれぞれ独立に、炭素原子又は窒素原子

を表し、ZとYのいずれか一方が、窒素原子であり、Yが窒素原子のときは、Xは、炭素原子である。m、n、p、qは、それぞれ独立に0～3の整数を表す。Arは置換又は無置換のアリール基を表す。R₁～R₃及びR₃₀はそれぞれ独立に、アルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素原子、シアノ基、シリル基、ヘテロ環基を表し、m、n、p、qが2以上の場合、各々隣同士で互いに連結して環状構造を形成してもよい。Qはそれぞれ独立に、炭素原子又は窒素原子である。)

【0121】

一般式(C-3-1)について説明する。

m、n、p、qは、それぞれ独立に0～3の整数を表す。これらの中でも、mは、0～2が好ましく、0～1がより好ましく、0が更に好ましい。nは、0～2が好ましく、0～1がより好ましく、0が更に好ましい。pは、0～2が好ましく、1～2がより好ましい。qは、0～2が好ましく、0～1がより好ましい。

Arが表すアリール基としては、フェニル基、ナフチル基を挙げることができ、フェニル基であることが好ましい。Arが表すアリール基は更に置換基を有しても良く、該置換基としてはアルキル基、アリール基、シアノ基、アミノ基、ハロゲン原子、フルオロアルキル基が挙げられ、好ましくは炭素数1～6のアルキル基、シアノ基、アミノ基、ハロゲン原子、フルオロアルキル基（好ましくはトリフルオロメチル基）であり、更に好ましくは炭素数1～6のアルキル基、ハロゲン原子（好ましくはフッ素原子）である。これらの中でも、アスペクト比の観点で、直鎖状アルキル基及びアルキル基を置換基として有する前記置換基が好ましい。Arとしてより好ましくは、フェニル基、4-tert-ブチルフェニル基、3, 5-ジ-tert-ブチルフェニル基を挙げることができる。

R₁～R₃及びR₃₀として好ましくは、一般式(C-3)におけるRと同様のものを挙げることができ、好ましくは、R₁～R₂は、アルキル基、アリール基、フッ素原子、シアノ基、シリル基を表す。R₃は、トリフルオロアルキル基、シアノ基、又はハロゲン原子が好ましく、トリフルオロアルキル基が更に好ましい。R₃₀はトリフルオロアルキル基、シアノ基、又はハロゲン原子が好ましく、ハロゲン原子が更に好ましく、フッ素原子が特に好ましい。

m、n、p、q、が2以上の場合、各々隣同士で互いに連結して環状構造を形成してもよい。

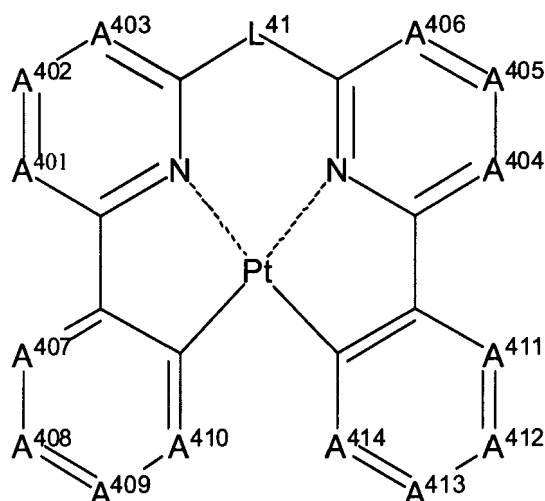
【0122】

一般式(C-2)で表される白金錯体のうち、より好ましい態様の一つは下記一般式(C-4)で表される白金錯体である。

【0123】

【化20】

一般式(C-4)



【0124】

(一般式 (C-4) 中、 $A^{401} \sim A^{414}$ はそれぞれ独立に C-R 又は N を表す。R は水素原子又は置換基を表す。 L^{41} は単結合又は二価の連結基を表す。)

【0125】

一般式 (C-4) について説明する。

$A^{401} \sim A^{414}$ はそれぞれ独立に C-R 又は N を表す。R は水素原子又は置換基を表す。

又は R で表される置換基としては、前記置換基群 A として挙げたものが適用できる。

$A^{401} \sim A^{406}$ として好ましくは C-R であり、R 同士が互いに連結して環を形成していても良い。 $A^{401} \sim A^{406}$ が C-R である場合に、 A^{402} 、 A^{405} の R として好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素基、シアノ基であり、より好ましくは水素原子、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素基であり、特に好ましくは水素原子、フッ素基である。 A^{401} 、 A^{403} 、 A^{404} 、 A^{406} の R として好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素基、シアノ基であり、より好ましくは水素原子、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素基であり、特に好ましくは水素原子である。

L^{41} は、前記一般式 (C-1) 中の L^1 と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0126】

$A^{407} \sim A^{414}$ としては、 $A^{407} \sim A^{410}$ と $A^{411} \sim A^{414}$ のそれぞれにおいて、N (窒素原子) の数は、0~2 が好ましく、0~1 がより好ましい。発光波長を短波長側にシフトさせる場合、 A^{408} 及び A^{412} のいずれかが N 原子であることが好ましく、 A^{408} と A^{412} が共に N 原子であることが更に好ましい。

$A^{407} \sim A^{414}$ が C-R を表す場合に、 A^{408} 、 A^{412} の R として好ましくは水素原子、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素基、シアノ基であり、より好ましくは水素原子、トリフルオロアルキル基、アルキル基、アリール基、フッ素基、シアノ基であり、特に好ましくは、水素原子、フェニル基、トリフルオロアルキル基、シアノ基である。 A^{407} 、 A^{409} 、 A^{411} 、 A^{413} の R として好ましくは水素原子、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素基、シアノ基であり、より好ましくは水素原子、トリフルオロアルキル基、フッ素基、シアノ基であり、特に好ましくは水素原子、フェニル基、フッ素基である。 A^{410} 、 A^{414} の R として好ましくは水素原子、フッ素基であり、より好ましくは水素原子である。 $A^{407} \sim A^{409}$ 、 $A^{411} \sim A^{413}$ のいずれかが C-R を表す場合に、R 同士が互いに連結して環を形成していても良い。

【0127】

一般式 (C-2) で表される白金錯体のうち、より好ましい態様の一つは下記一般式 (C-5) で表される白金錯体である。

【0128】

10

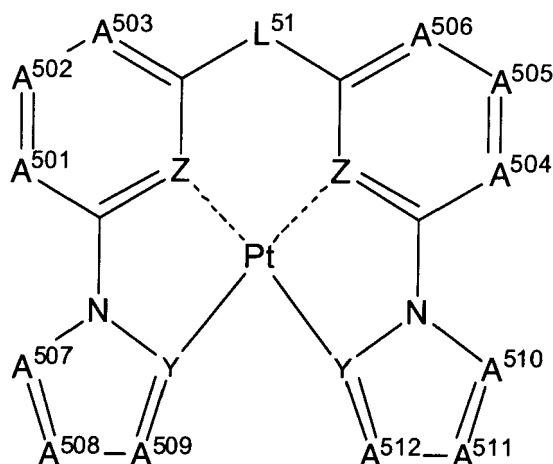
20

30

40

【化 2 1】

(C-5)



10

【0 1 2 9】

(一般式 (C-5) 中、 $A^{501} \sim A^{512}$ は、それぞれ独立に、C-R 又は N を表す。R は水素原子又は置換基を表す。 L^{51} は単結合又は二価の連結基を表す。Y 及び Z はそれぞれ独立に、炭素原子又は窒素原子を表し、Z 又は Y が、窒素原子である)

20

【0 1 3 0】

一般式 (C-5) について説明する。 $A^{501} \sim A^{506}$ 及び L^{51} は、前記一般式 (C-4) における $A^{401} \sim A^{406}$ 及び L^{41} と同義であり、好ましい範囲も同様である。

【0 1 3 1】

A^{507} 、 A^{508} 、 A^{509} 、 A^{510} 、 A^{511} 及び A^{512} は、それぞれ独立に、C-R 又は N を表す。R は水素原子又は置換基を表す。R で表される置換基としては、前記置換基群 A として挙げたものが適用できる。 A^{507} 、 A^{508} 、 A^{509} 、 A^{510} 、 A^{511} 及び A^{512} が C-R である場合に、R として好ましくは水素原子、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、ジアルキルアミノ基、ジアリールアミノ基、アルキルオキシ基、シアノ基、ハロゲン原子であり、より好ましくは、水素原子、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、ジアルキルアミノ基、シアノ基、フッ素原子、更に好ましくは、水素原子、アルキル基、トリフルオロメチル基、フッ素原子である。また可能な場合は置換基同士が連結して、縮環構造を形成してもよい。 A^{507} 、 A^{508} 、 A^{509} 、 A^{510} 、 A^{511} 及び A^{512} のうち少なくとも一つは N であることが好ましく、特に A^{510} 又は A^{507} が N であることが好ましい。

30

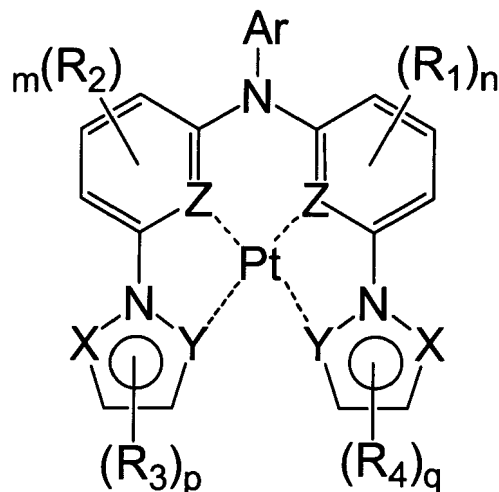
【0 1 3 2】

一般式 (C-5) で表される白金錯体のうち、より好ましい態様の一つは下記一般式 (C-5-1) で表される白金錯体である。

40

【0 1 3 3】

【化 2 2】



10

【0134】

(一般式 (C-5-1) 中、X、Y、及び Z はそれぞれ独立に、炭素原子又は窒素原子を表し、Z と Y のいずれか一方が、窒素原子であり、Y が窒素原子のときは、X は、炭素原子である。m、n、p 及び、q は、それぞれ独立に 0～3 の整数を表す。Ar は置換又は無置換のアリール基を表す。R₁～R₄ はそれぞれ独立に、アルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素原子、シアノ基、シリル基、ヘテロ環基を表し、m、n、p、及び q が 2 以上の場合、各々隣同士で互いに連結して環状構造を形成してもよい。)

20

【0135】

R₁ 及び R₂ は、前記一般式 (C-4) における A⁴⁰¹～A⁴⁰⁶ 及び L⁴¹ と同義であり、好ましい範囲も同様である。

R₃ 及び R₄ として好ましくは、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、ジアルキルアミノ基、ジアリールアミノ基、アルキルオキシ基、シアノ基、ハロゲン原子であり、より好ましくは、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、ジアルキルアミノ基、シアノ基、フッ素原子、更に好ましくは、アルキル基、トリフルオロメチル基、フッ素原子である。また可能な場合は置換基同士が連結して、縮環構造を形成してもよい。

30

Ar は一般式 (C-3-1) における Ar と同義であり好ましいものも同様である。

m、n、p、q は、それぞれ独立に 0～3 の整数を表す。これらの中でも、m は、0～2 が好ましく、0～1 がより好ましく、0 が更に好ましい。n は、0～2 が好ましく、0～1 がより好ましく、0 が更に好ましい。p は、0～2 が好ましく、1 がより好ましい。q は、0～2 が好ましく、1 がより好ましい。

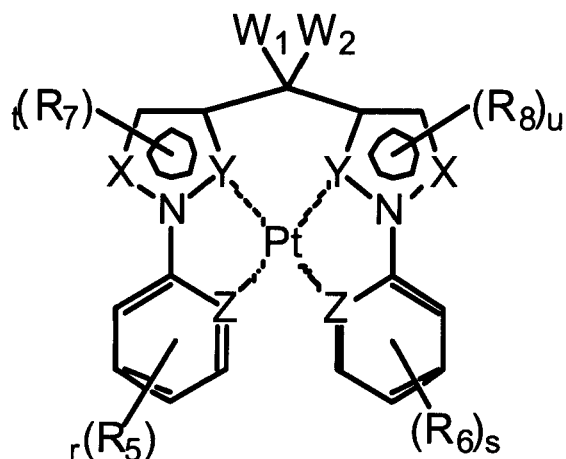
【0136】

一般式 (C-2) で表される白金錯体のうち、より好ましい態様の一つは下記一般式 (C-6) で表される白金錯体である。

40

【0137】

【化 2 3】



10

【0138】

(一般式 (C-6) 中、X、Y、及び Z はそれぞれ独立に、炭素原子又は窒素原子を表し、Z と Y のいずれか一方が、窒素原子であり、Y が窒素原子のときは、X は、炭素原子である。r、s、t、及び u は、それぞれ独立に 0 ～ 3 の整数を表す。R₅ ～ R₈ はそれぞれ独立に、アルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素原子、シアノ基、シリル基、ヘテロ環基を表し、r、s、t、及び u が 2 以上の場合、各々隣同士で互いに連結して環状構造を形成してもよい。W₁ 及び W₂ はそれぞれ独立に、アルキル基を表し、互いに結合して環状構造を形成してもよい。)

20

【0139】

r、s、t、u は、それぞれ独立に 0 ～ 3 の整数を表す。これらの中でも、r は、0 ～ 2 が好ましく、0 又は 1 がより好ましい。s は、0 ～ 2 が好ましく、0 又は 1 がより好ましい。t は、0 又は 1 が好ましく、u は、0 又は 1 が好ましい。

R₅ 及び R₆ として好ましくは、アルキル基、アルコキシ基、アリール基、トリフルオロアルキル基、ハロゲン原子であり、該アリール基はアルキル基を置換基として有していてもよい。

R₇ 及び R₈ として好ましくは、アルキル基、トリフルオロアルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、ジアルキルアミノ基、ジアリールアミノ基、アルキルオキシ基、シアノ基、ハロゲン原子であり、アリール基が好ましく、該アリール基はアルキル基を置換基として有していてもよい。

30

W₁ 及び W₂ として好ましくは、炭素数 1 ～ 6 のアルキル基であり、例えば、メチル基、エチル基、イソプロピル基、n-プロピル基、t-ブチル基等を挙げることができ、メチル基が好ましい。また、該アルキル基は、互いに連結して環状構造（例えば、シクロペンタン、シクロヘキサン、シクロヘプタン、好ましくはシクロプロパン）を形成してもよい。

【0140】

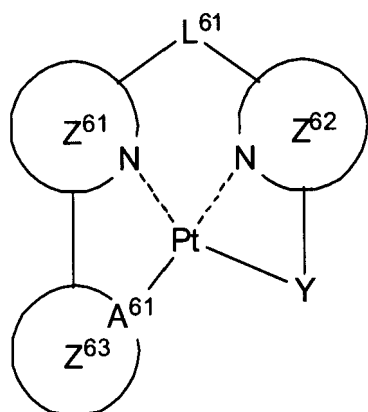
一般式 (C-1) で表される白金錯体のうち、より好ましい別の態様は下記一般式 (C-7) で表される白金錯体である。

40

【0141】

【化 2 4】

一般式(C-7)



10

【0142】

(式中、 L^{61} は単結合又は二価の連結基を表す。 A^{61} はC-R又はNを表す。Rは水素原子又は置換基を表す。 Z^{61} 、 Z^{62} はそれぞれ独立に含窒素芳香族ヘテロ環を表す。 Z^{63} はベンゼン環又は芳香族ヘテロ環を表す。YはPtに結合するアニオン性の非環状配位子である。)

【0143】

20

一般式(C-7)について説明する。 L^{61} は、前記一般式(C-1)中の L^1 と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0144】

A^{61} は炭素原子又は窒素原子を表す。錯体の安定性の観点及び錯体の発光量子収率の観点から A^{61} は炭素原子であることが好ましい。

【0145】

Z^{61} 、 Z^{62} は、それぞれ前記一般式(C-2)における Z^{21} 、 Z^{22} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 Z^{63} は、前記一般式(C-2)における Z^{23} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0146】

30

YはPtに結合するアニオン性の非環状配位子である。非環状配位子とはPtに結合する原子が配位子の状態では環を形成していないものである。Y中のPtに結合する原子としては、炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子が好ましく、窒素原子、酸素原子がより好ましく、酸素原子が最も好ましい。

炭素原子でPtに結合するYとしてはビニル配位子が挙げられる。窒素原子でPtに結合するYとしてはアミノ配位子、イミノ配位子が挙げられる。酸素原子でPtに結合するYとしては、アルコキシ配位子、アリールオキシ配位子、ヘテロアリールオキシ配位子、アシルオキシ配位子、シリルオキシ配位子、カルボキシル配位子、リン酸配位子、スルホン酸配位子などが挙げられる。硫黄原子でPtに結合するYとしては、アルキルメルカプト配位子、アリールメルカプト配位子、ヘテロアリールメルカプト配位子、チオカルボン酸配位子などが挙げられる。

40

Yで表される配位子は、置換基を有していてもよく、置換基としては前記置換基群Aとして挙げたものが適宜適用できる。また置換基同士が連結していても良い。

【0147】

Yで表される配位子として好ましくは酸素原子でPtに結合する配位子であり、より好ましくはアシルオキシ配位子、アルキルオキシ配位子、アリールオキシ配位子、ヘテロアリールオキシ配位子、シリルオキシ配位子であり、更に好ましくはアシルオキシ配位子である。

【0148】

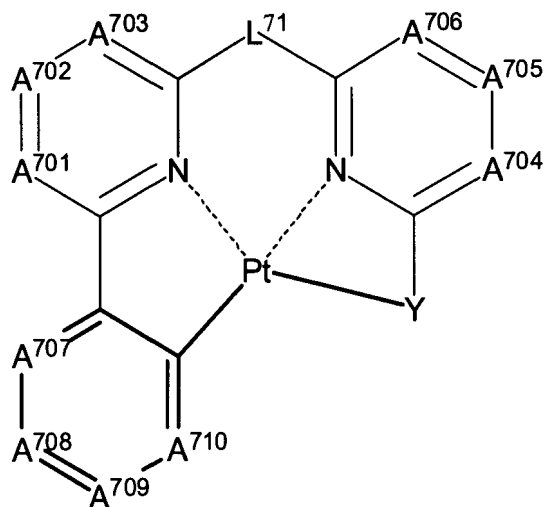
一般式(C-7)で表される白金錯体のうち、より好ましい態様の一つは下記一般式(

50

C-8) で表される白金錯体である。

【0149】

【化25】



(C-8)

10

【0150】

(一般式 (C-8) 中、 $A^{701} \sim A^{710}$ は、それぞれ独立に、C-R 又は N を表す。R は水素原子又は置換基を表す。 L^{71} は単結合又は二価の連結基を表す。Y は Pt に結合するアニオン性の非環状配位子である。)

20

【0151】

一般式 (C-8) について説明する。 L^{71} は、前記一般式 (C-6) 中の L^{61} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 $A^{701} \sim A^{710}$ は一般式 (C-4) における $A^{401} \sim A^{410}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。Y は一般式 (C-6) におけるそれと同義であり、また好ましい範囲も同様である。

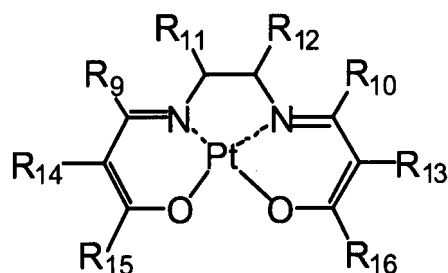
【0152】

一般式 (C-1) で表される白金錯体のうち、別の好ましい態様の 1 つとして下記一般式 (C-9) で表される白金錯体が挙げられる。

30

【0153】

【化26】



(C-9)

40

【0154】

(一般式 (C-9) 中、 $R_9 \sim R_{16}$ はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アリール基、シリル基、ヘテロ環基を表し、 R_9 と R_{11} 、 R_{11} と R_{12} 、 R_{12} と R_{10} 、 R_{14} と R_{15} 、 R_{13} と R_{16} はそれぞれ独立に、互いに結合して環状構造を形成してもよい。)

【0155】

R_9 と R_{11} 、 R_{11} と R_{12} 、 R_{12} と R_{10} 、 R_{14} と R_{15} 、 R_{13} と R_{16} はそれぞれ独立に、互いに結合して環状構造を形成することが好ましい。 R_9 と R_{11} 、 R_{12} と R_{10} 、 R_{14} と R_{15} 、及び R_{13} と R_{16} がそれぞれ独立に、互いに結合して環状構造を形成することがより好ましい。

50

R_9 と R_{11} 、 R_{11} と R_{12} 、 R_{12} と R_{10} 、 R_{14} と R_{15} 、 R_{13} と R_{16} が、互いに結合して形成する環状構造としては、ベンゼン環、ナフタレン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環が挙げられ、より好ましくは、ベンゼン環、又はナフタレン環である。

また、 R_{14} と R_{15} 、 R_{11} と R_{12} 、 R_{13} と R_{16} が互いに結合して環状構造を形成することが好ましい。

該環状構造は更に置換基を有していてもよく、更なる置換基としては、前記置換基群 A として挙げたものが適用でき、アルキル基、アルコキシ基が好ましく、炭素数 1～20 のアルキル基、炭素数 1～20 のアルコキシ基がより好ましく、炭素数 5～15 のアルキル基、炭素数 5～15 のアルコキシ基が更に好ましい。

10

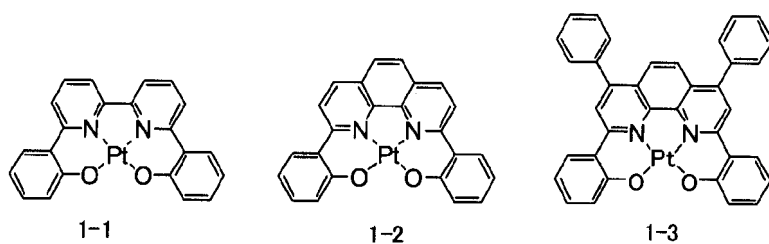
【0156】

一般式 (C-1) で表される白金錯体として具体的には、特開 2005-310733 号公報の〔0143〕～〔0152〕、〔0157〕～〔0158〕、〔0162〕～〔0168〕に記載の化合物、特開 2006-256999 号公報の〔0065〕～〔0083〕に記載の化合物、特開 2006-93542 号公報の〔0065〕～〔0090〕に記載の化合物、特開 2007-73891 号公報の〔0063〕～〔0071〕に記載の化合物、特開 2007-324309 号公報の〔0079〕～〔0083〕に記載の化合物、特開 2006-93542 号公報の〔0065〕～〔0090〕に記載の化合物、特開 2007-96255 号公報の〔0055〕～〔0071〕に記載の化合物、特開 2006-313796 号公報の〔0043〕～〔0046〕が挙げられ、その他以下に例示する白金錯体が挙げられる。なお、例示化合物におけるアルキル基及びアルキル基は直鎖アルキル基、分岐アルキル基、シクロアルキル基を含むものとし、好ましくは直鎖アルキル基である。

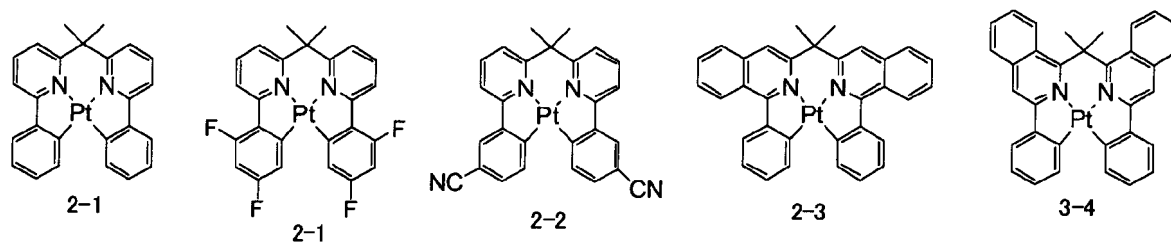
20

【0157】

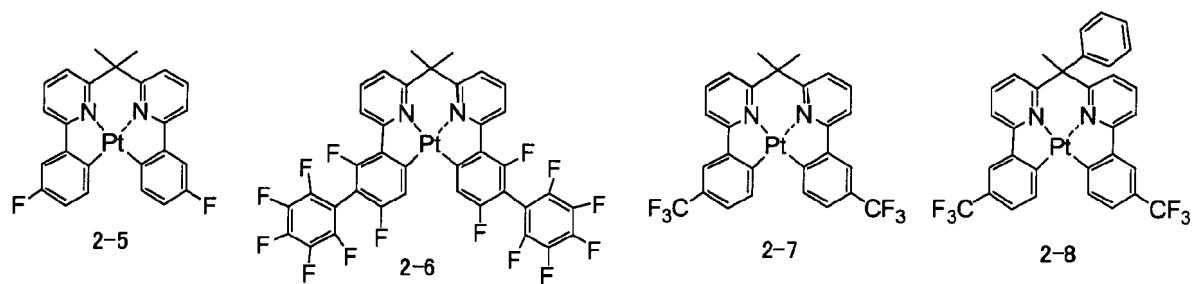
【化 27】



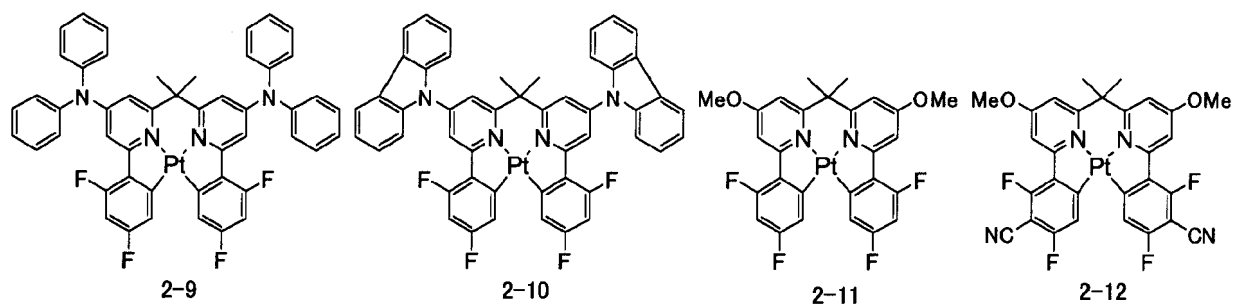
10



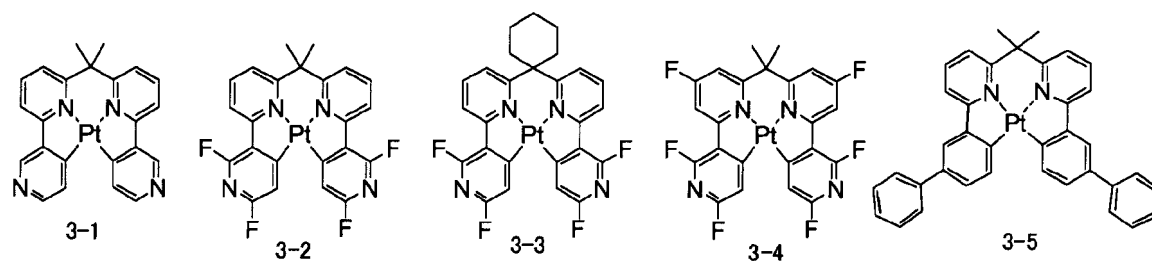
20



30

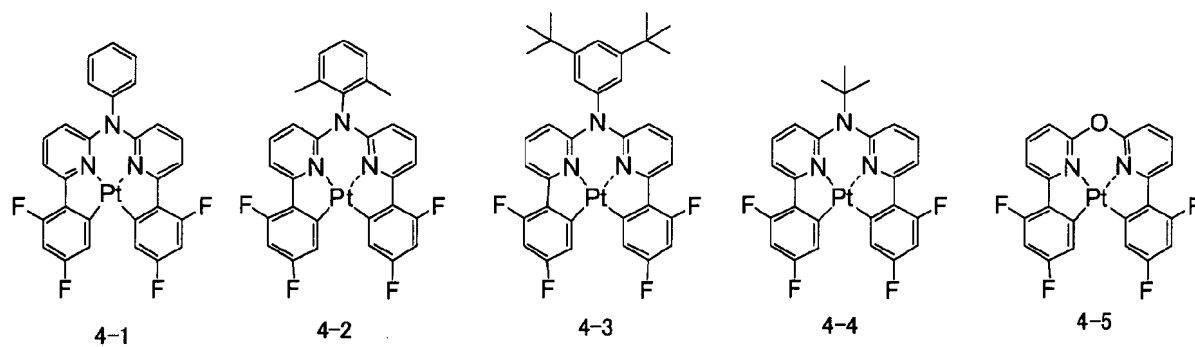


40

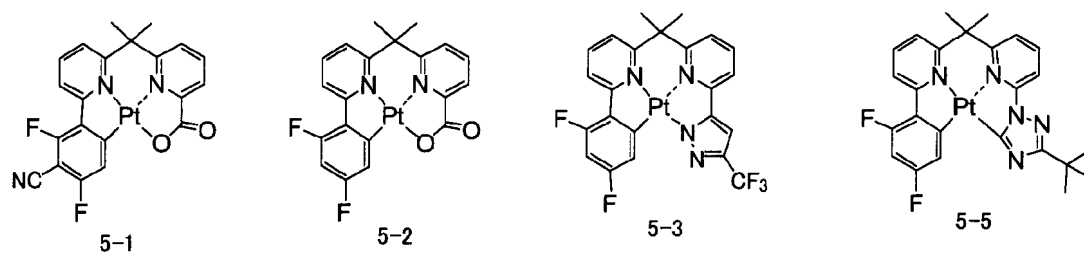


【 0 1 5 8 】

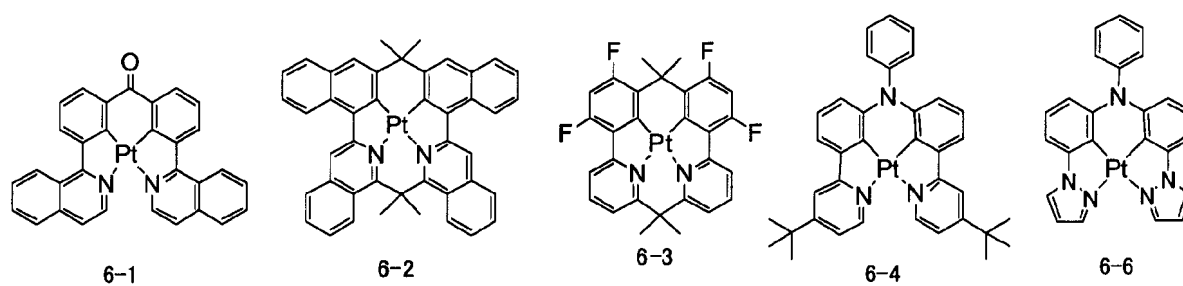
【化 28】



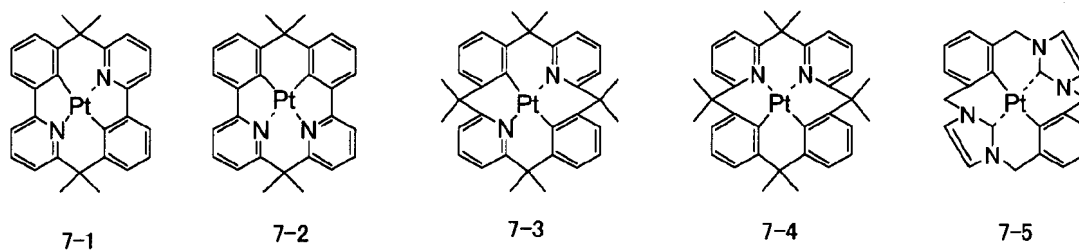
10



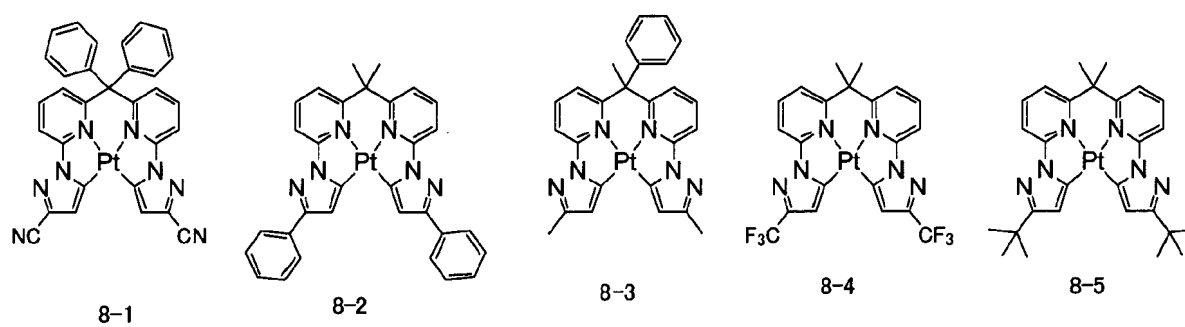
20



30

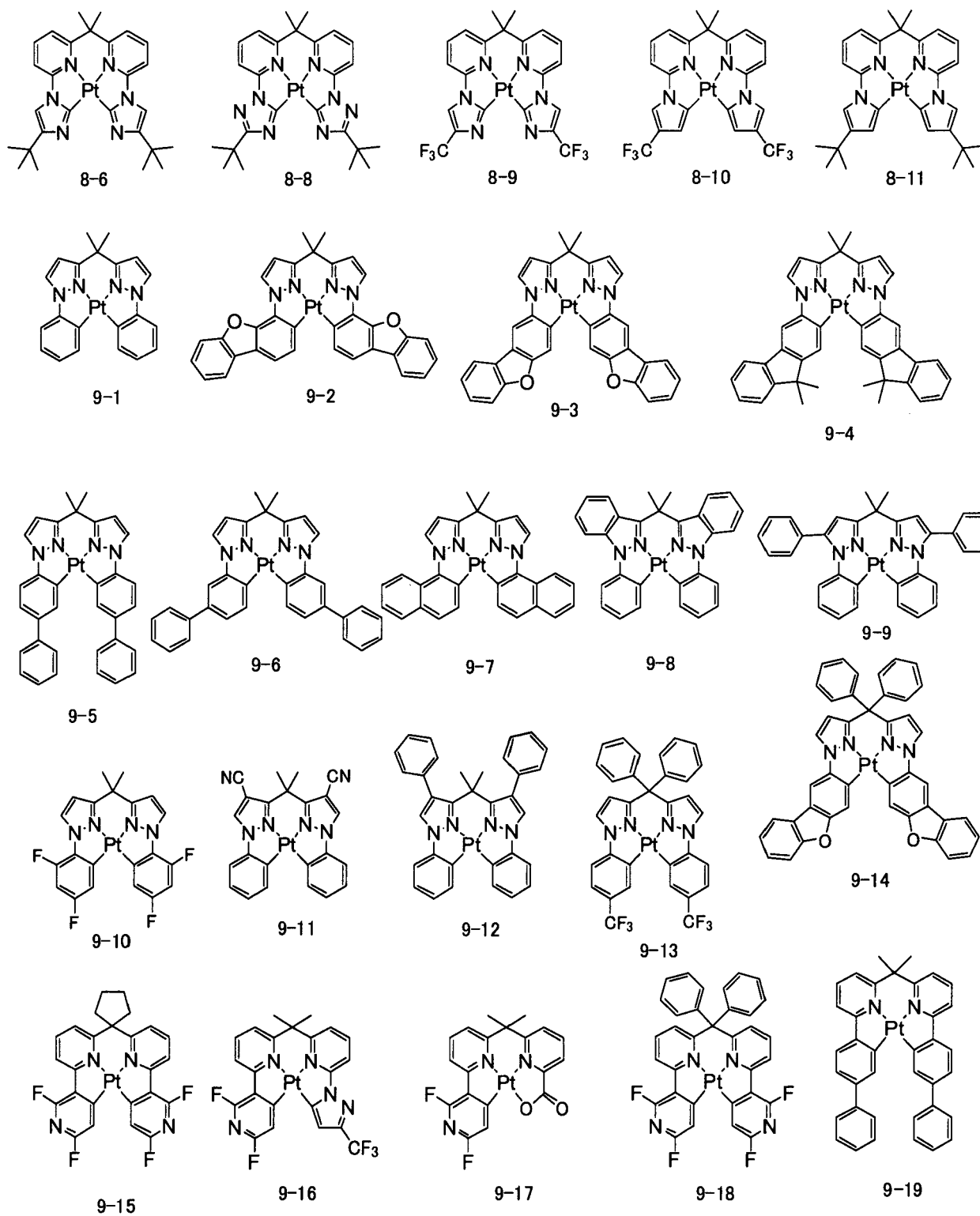


40



【0159】

【化 29】



10

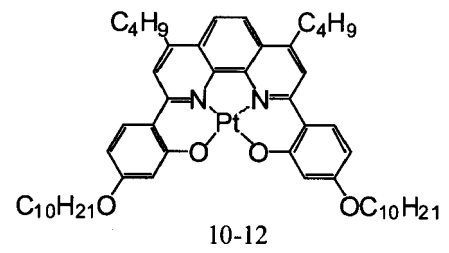
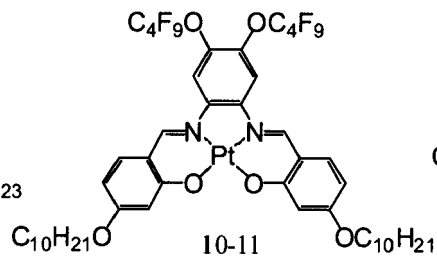
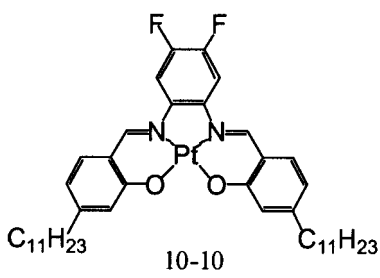
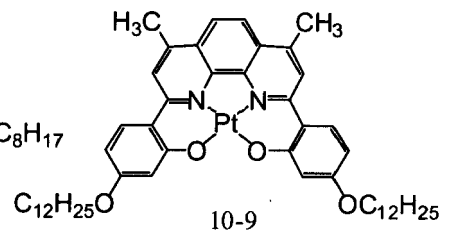
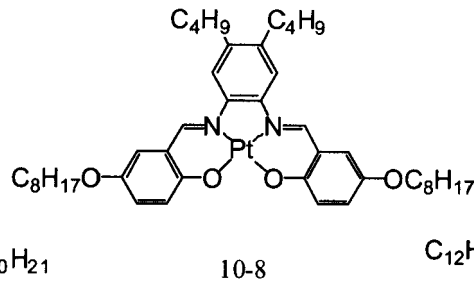
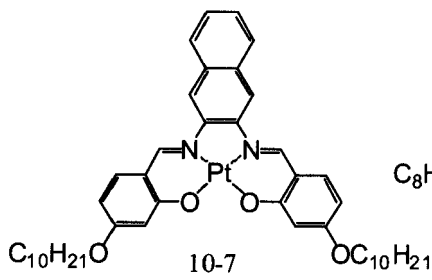
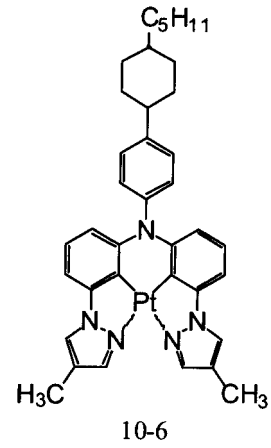
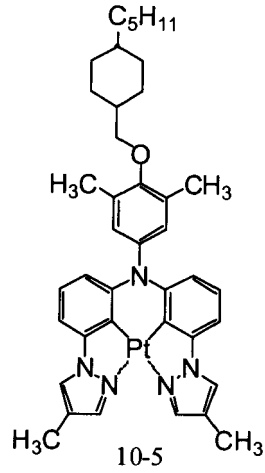
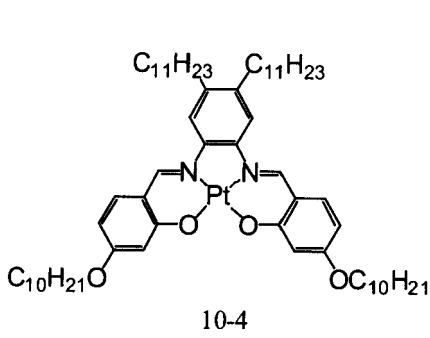
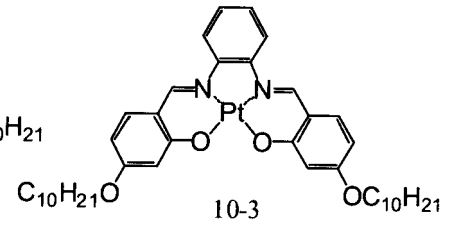
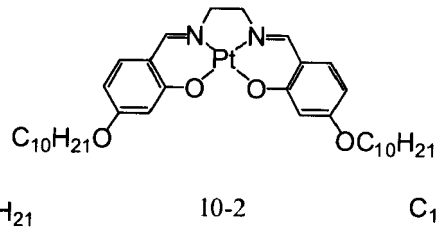
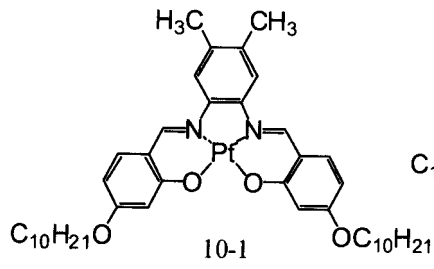
20

30

40

【0160】

【化 3 0】



【 0 1 6 1】

10

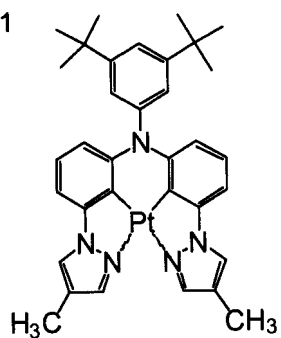
20

30

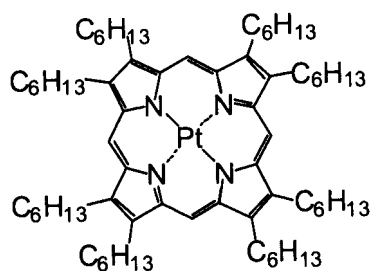
40

【化 3 1】

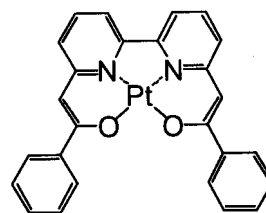
11-1



11-2

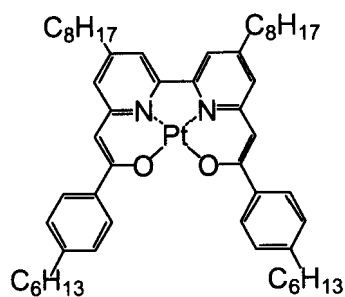


11-3

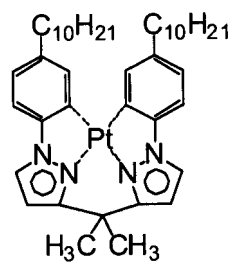


10

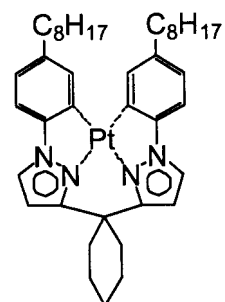
11-4



11-5

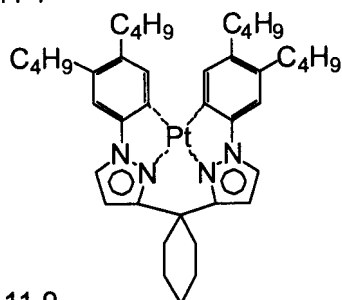


11-6

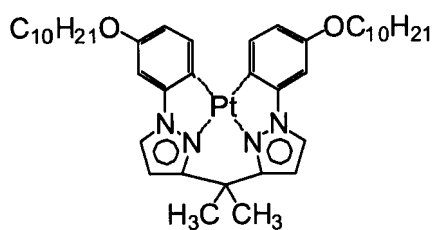


20

11-7

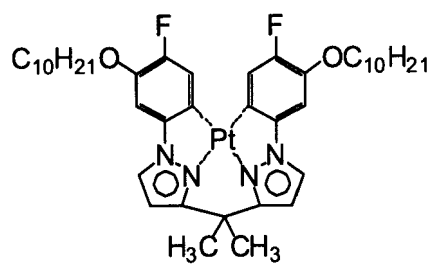


11-8

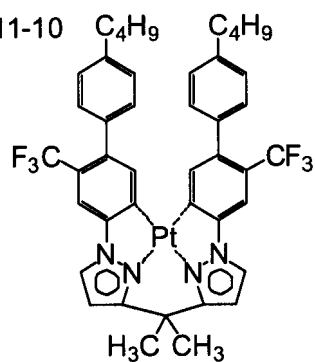


30

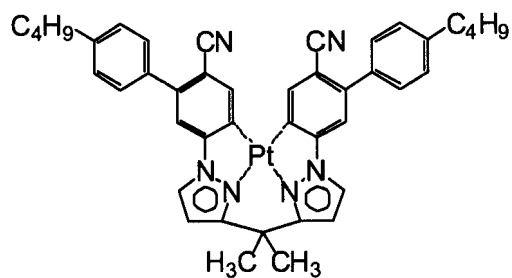
11-9



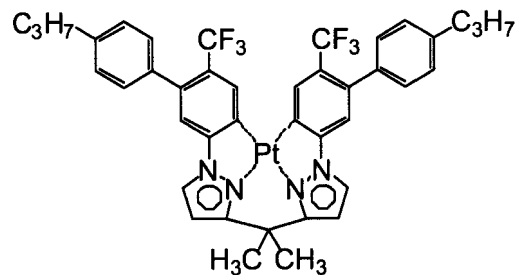
11-10



11-11



11-12

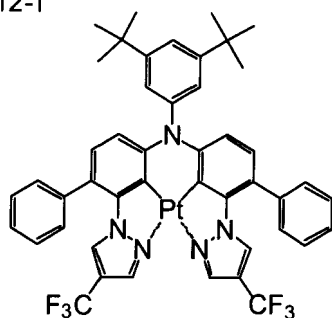


40

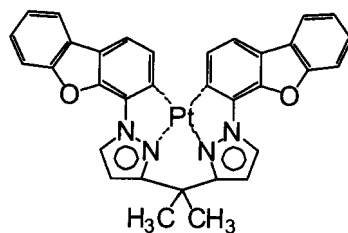
【 0 1 6 2】

【化 3 2】

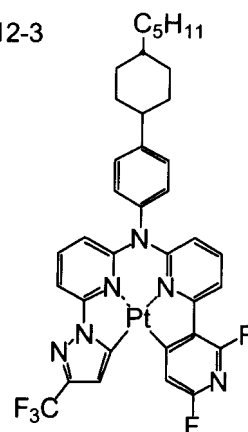
12-1



12-2

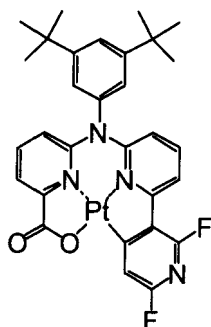


12-3

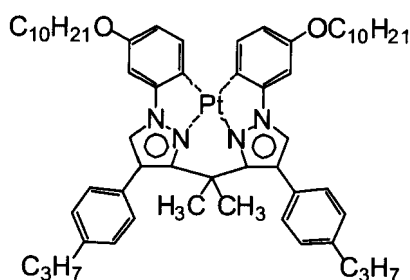


10

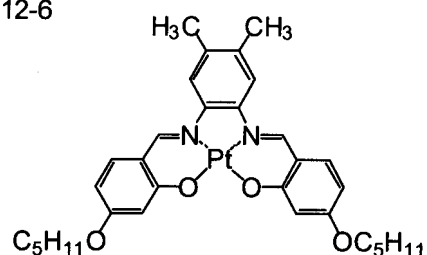
12-4



12-5



12-6



20

【0163】

一般式 (C-1) で表される白金錯体化合物は、例えば、Journal of Organic Chemistry 53, 786, (1988)、G. R. Newkome et al.) の、789頁、左段53行～右7行に記載の方法、790頁、左段18行～38行に記載の方法、790頁、右段19行～30行に記載の方法及びその組み合わせ、Chemische Berichte 113, 2749 (1980)、H. Lexyほか) の、2752頁、26行～35行に記載の方法等、種々の手法で合成できる。

30

例えば、配位子、又はその解離体と金属化合物を溶媒（例えば、ハロゲン系溶媒、アルコール系溶媒、エーテル系溶媒、エステル系溶媒、ケトン系溶媒、ニトリル系溶媒、アミド系溶媒、スルホン系溶媒、スルホキサイド系溶媒、水などが挙げられる）の存在下、若しくは、溶媒非存在下、塩基の存在下（無機、有機の種々の塩基、例えば、ナトリウムメトキシド、t-ブトキシカリウム、トリエチルアミン、炭酸カリウムなどが挙げられる）、若しくは、塩基非存在下、室温以下、若しくは加熱し（通常の加熱以外にもマイクロウェーブで加熱する手法も有効である）得ることができる。

【0164】

本発明の発光層における一般式 (C-1) で表される化合物の含有量は発光層中1～30質量%であることが好ましく、3～25質量%であることがより好ましく、5～20質量%であることが更に好ましい。

40

【0165】

前記燐光発光性化合物の含有量としては、前記有機電界発光素子用材料の質量における含有量が、0.1質量%～30質量%が好ましく、1質量%～25質量%がより好ましく、5質量%～20質量%が特に好ましい。

前記含有量が、0.1質量%以上であると、十分な発光輝度が得られ、30質量%以下であれば、ホスト材料への相溶性の低下、会合や濃度消光による発光効率の低下を抑制し得る。

【0166】

50

前記燐光発光性化合物の分子半径と前記ホスト材料の分子半径とのサイズ比（燐光発光性化合物の分子半径／ホスト材料の分子半径）としては、0.8～1.2であり、0.85～1.15がより好ましく、0.9～1.1が特に好ましい。

前記サイズ比が、0.8未満、又は1.2を超えると、有機電界発光素子の正面方向の輝度が減少する。これは、燐光発光性化合物を混合することにより、ホスト材料の秩序度（オーダーパラメーター）が低下するため、成膜後、モノドメインかつ分子全体の平均が水平配向となっていて、個々の分子の配向方向にばらつきがでるためであると推測している。なお、有機電界発光素子の正面方向とは、有機電界発光素子を立てて配置し、基板側から前記発光層へ垂線を引き、この方向から見た方向のことをいう。

【0167】

10

〔溶媒〕

本発明の有電界発光素子に含まれる層を、湿式法により成膜する場合、該層に含まれる各成分を溶解させて組成物を調製する際に使用することができる溶媒としては、例えば、水、芳香族炭化水素系溶媒、アルコール系溶媒、ケトン系溶媒、脂肪族炭化水素系溶媒、アミド系溶媒等の公知の有機溶媒を挙げることができる。

【0168】

芳香族炭化水素系溶媒としては、例えば、ベンゼン、トルエン、キシレン、トリメチルベンゼン、テトラメチルベンゼン、クメンエチルベンゼン、メチルプロピルベンゼン、メチルイソプロピルベンゼン、等が挙げられ、トルエン、キシレン、クメン、トリメチルベンゼンがより好ましい。芳香族炭化水素系溶媒の比誘電率は通常、3以下である。

20

【0169】

アルコール系溶媒としては、メタノール、エタノール、ブタノール、ベンジルアルコール、シクロヘキサノール等が挙げられ、ブタノール、ベンジルアルコール、シクロヘキサノールがより好ましい。アルコール系溶媒の比誘電率は通常、10～40である。

ケトン系溶媒としては、1-オクタノン、2-オクタノン、1-ノナノン、2-ノナノン、アセトン、4-ヘプタノン、1-ヘキサノン、2-ヘキサノン、2-ブタノン、ジイソブチルケトン、シクロヘキサノン、メチルシクロヘキサノン、フェニルアセトン、メチルエチルケトン、メチルイソブチルケトン、アセチルアセトン、アセトニルアセトン、イオノン、ジアセトニルアルコール、アセチルカービノール、アセトフェノン、メチルナフチルケトン、イソホロン、プロピレンカーボネート等が挙げられ、2-ブタノン、メチルイソブチルケトン、プロピレンカーボネートが好ましい。ケトン系溶媒の比誘電率は通常、10～90である。

30

脂肪族炭化水素系溶媒としては、ペンタン、ヘキサン、オクタン、デカン等が挙げられ、オクタン、デカンが好ましい。脂肪族炭化水素系溶媒の比誘電率は通常、1.5～2.0である。

アミド系溶媒としては、N-メチル-2-ピロリドン、N-エチル-2-ピロリドン、N,N-ジメチルアセトアミド、N,N-ジメチルホルムアミド、1,3-ジメチル-2-イミダゾリジノン等が挙げられ、N-メチル-2-ピロリドン、1,3-ジメチル-2-イミダゾリジノンが好ましい。アミド系溶媒の比誘電率は通常、30～40である。

40

本発明に於いては、上記溶剤を単独で使用してもよいし、2種類以上を併用してもよい。

【0170】

本発明においては、芳香族炭化水素系溶媒（以下、“第一の溶媒”ともいう）と、第一の溶媒より比誘電率の高い第二の溶媒とを混合して使用してもよい。このような混合溶媒を使用することで、アルコキシシランの加水分解が促進され、縮合の反応性が向上する。

第二の溶媒としては、アルコール系溶媒、アミド系溶媒、ケトン系溶媒を使用することが好ましく、アルコール系溶媒を使用することがより好ましい。

第一の溶媒と第二の溶媒との混合比（質量）は、1/99～99/1、好ましくは10/90～90/10、更に好ましくは20/80～70/30である。

【0171】

50

<有機電界発光素子>

本発明の有機電界発光素子は、基板上に、陽極及び陰極を含む一对の電極と、該電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、該陽極と該発光層との間の少なくとも一層の有機層に、本発明の有機電界発光素子用材料を含有する。

【0172】

<有機層の構成>

前記有機層の層構成としては、特に制限はなく、有機電界発光素子の用途、目的に応じて適宜選択することができるが、前記透明電極上に又は前記背面電極上に形成されるのが好ましい。この場合、有機層は、前記透明電極又は前記背面電極上の前面又は一面に形成される。

有機層の形状、大きさ、及び厚み等については、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができる。

【0173】

具体的な層構成として、下記が挙げられるが本発明はこれらの構成に限定されるものではない。

- ・陽極／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／電子注入層／陰極、
- ・陽極／正孔輸送層／発光層／ブロック層／電子輸送層／電子注入層／陰極、
- ・陽極／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／電子注入層／陰極。
- ・陽極／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／ブロック層／電子輸送層／電子注入層／陰極。
- ・陽極／正孔注入層／正孔輸送層／励起子ブロック層／発光層／電子輸送層／電子注入層／陰極。

有機電界発光素子の基板、陰極及び陽極については、例えば、特開2008-270736号公報に詳述されており、該公報に記載の事項を本発明に適用することができる。

【0174】

<基板>

本発明で使用する基板としては、有機層から発せられる光を散乱又は減衰させない基板であることが好ましい。有機材料の場合には、耐熱性、寸法安定性、耐溶剤性、電気絶縁性、及び加工性に優れていることが好ましい。

【0175】

<陽極>

前記陽極としては、前記発光層に正孔を供給する電極としての機能を有していれば特に制限されない。本発明の有機電界発光素子の性質上、前記陽極及び前記陰極のうち少なくとも一方は透明であることが好ましい。

前記陽極としては、その形状、構造、大きさ等については特に制限はなく、有機電界発光素子の用途、目的に応じて公知の電極材料の中から適宜選択することができる。

前記陽極を構成する材料としては、例えば、導電性金属酸化物、金属、これらの金属と導電性金属酸化物との混合物又は積層物、無機導電性物質、有機導電性材料、これらとITOとの積層物などが挙げられる。

前記導電性金属酸化物としては、例えば、アンチモン、フッ素等をドーブした酸化錫（ATO、FTO）、酸化錫、酸化亜鉛、酸化インジウム、酸化インジウム錫（ITO）、酸化亜鉛インジウム（IZO）などが挙げられる。

前記金属としては、例えば、金、銀、クロム、ニッケルなどが挙げられる。

前記無機導電性物質としては、例えば、ヨウ化銅、硫化銅などが挙げられる。

前記有機導電性材料としては、例えば、ポリアニリン、ポリチオフェン、ポリピロールなどが挙げられる。

【0176】

前記陽極の形成方法としては、特に制限はなく、公知の方法に従って行うことができ、例えば、湿式方式、化学的方式、物理的方式などが挙げられる。

前記湿式方式としては、例えば、印刷方式、コーティング方式などが挙げられる。

前記化学的方式としては、例えば、CVD、プラズマCVD法などが挙げられる。

前記物理的方式としては、例えば、真空蒸着法、スパッタリング法、イオンプレーティング法などが挙げられる。

【0177】

なお、前記陽極を形成する際にパターニングを行う場合は、フォトリソグラフィ等による化学的エッチングによって行ってもよいし、レーザー等による物理的エッチングによって行ってもよく、また、マスクを重ねて真空蒸着やスパッタ等をして行ってもよいし、リフトオフ法や印刷法によって行ってもよい。

【0178】

前記陽極の厚みとしては、特に制限はなく、材料により適宜選択可能であるが、 $10\text{ nm} \sim 10\text{ }\mu\text{m}$ が好ましく、 $50\text{ nm} \sim 5\text{ }\mu\text{m}$ がより好ましい。前記厚みは、例えば、水晶振動子(QCM)や触針式膜厚計を用いて測定することができる。

【0179】

前記陽極の抵抗値としては、発光層などに確実に正孔を供給するために、 $10^3\text{ }\Omega/\square$ 以下が好ましく、 $10^2\text{ }\Omega/\square$ 以下がより好ましい。

【0180】

<陰極>

前記陰極としては、前記発光層に電子を注入する電極としての機能を有していれば特に制限されない。

前記陰極としては、その形状、構造、大きさ等については特に制限はなく、有機電界発光素子の用途、目的に応じて公知の電極材料の中から適宜選択することができる。

前記陰極を構成する材料としては、例えば、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、その他の金属、これらの金属の合金などが挙げられる。これらは、1種単独で使用してもよいが、安定性と電子注入性とを両立させる観点からは、2種以上を好適に併用することが好ましい。

前記アルカリ金属としては、例えば、リチウム、ナトリウムなどが挙げられる。

前記アルカリ土類金属としては、マグネシウム、カルシウムなどが挙げられる。

前記その他の材料としては、例えば、金、銀、鉛、アルミニウムなどが挙げられる。

前記希土類金属としては、例えば、インジウム、イットルビウムなどが挙げられる。

前記合金としては、例えば、ナトリウム-カリウム合金、リチウム-アルミニウム合金、マグネシウム-銀合金などが挙げられる。

これらの中でも、電子注入性の点で、アルカリ金属、アルカリ土類金属が好ましく、保存安定性に優れる点で、アルミニウムを含有する材料が特に好ましい。前記アルミニウムを含有する材料とは、アルミニウム単独、アルミニウムと0.01質量%~10質量%のアルカリ金属又はアルカリ土類金属との合金若しくはこれらの混合物(例えば、リチウム-アルミニウム合金、マグネシウム-アルミニウム合金など)を意味する。

【0181】

前記陰極の形成方法としては、特に制限はなく、公知の方法に従って行うことができ、例えば、湿式方式、化学的方式、物理的方式などが挙げられる。

前記湿式方式としては、例えば、印刷方式、コーティング方式などが挙げられる。

前記化学的方式としては、例えば、CVD、プラズマCVD法などが挙げられる。

前記物理的方式としては、例えば、真空蒸着法、スパッタリング法、イオンプレーティング法などが挙げられる。

【0182】

なお、前記陰極を形成する際にパターニングを行う場合は、フォトリソグラフィなどによる化学的エッチングによって行ってもよいし、レーザーなどによる物理的エッチングによって行ってもよく、また、マスクを重ねて真空蒸着やスパッタなどをして行ってもよいし、リフトオフ法や印刷法によって行ってもよい。

【0183】

前記陰極の厚みとしては、10 nm～1,000 nmが好ましく、20 nm～500 nmがより好ましく、50 nm～100 nmが特に好ましい。

前記厚みが、50 nm未満であると、酸化して劣化することがあり、1,000 nmを超えると、成膜時に放射熱を得ることで劣化することがある。前記厚みは、触針式段差計で測定することができる。

【0184】

<有機層>

本発明における有機層について説明する。

【0185】

〔有機層の形成〕

本発明の有機電界発光素子において、各有機層は、真空蒸着法やスパッタリング法等の乾式成膜法、溶液塗布プロセス（湿式法）のいずれによっても好適に形成することができる。

【0186】

本発明の有機電界発光素子において、有機層のいずれか一層は湿式法により成膜することが好ましく、少なくとも発光層が湿式法により成膜されることが好ましく、発光層に加え、正孔注入層及び正孔輸送層の少なくとも一方も湿式法により成膜されることがより好ましく、これら両方が湿式法により成膜されることが更に好ましい。

また、上記以外の他の層については乾式法又は湿式法を適宜選択して成膜することができる。湿式法を用いると有機層を容易に大面積化することができ、高輝度で発光効率に優れた発光素子が低コストで効率よく得られ、好ましい。乾式法としては真空蒸着法、スパッタリング法等が使用でき、湿式法としてはディッピング法、スピンコート法、ディップコート法、キャスト法、ダイコート法、ロールコート法、バーコート法、グラビアコート法、スプレーコート法、インクジェット法等が使用可能である。これらの成膜法は有機層の材料に応じて適宜選択できる。湿式法により製膜した場合は製膜した後に乾燥してよい。乾燥は塗布層が損傷しないように温度、圧力等の条件を選択して行う。

【0187】

上記湿式製膜法（塗布プロセス）で用いる塗布液は通常、有機層の材料と、それを溶解又は分散するための溶剤からなる。溶剤は特に限定されず、有機層に用いる材料に応じて選択すればよい。溶剤の具体例としては、ハロゲン系溶剤（クロロホルム、四塩化炭素、ジクロロメタン、1,2-ジクロロエタン、クロロベンゼン等）、ケトン系溶剤（アセトン、メチルエチルケトン、ジエチルケトン、n-プロピルメチルケトン、2-ブタノン、シクロヘキサノン等）、芳香族系溶剤（ベンゼン、トルエン、キシレン等）、エステル系溶剤（酢酸エチル、酢酸n-プロピル、酢酸n-ブチル、プロピオン酸メチル、プロピオン酸エチル、γ-ブチロラクトン、炭酸ジエチル等）、エーテル系溶剤（テトラヒドロフラン、ジオキサン等）、アミド系溶剤（ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド等）、ジメチルスルホキシド、アルコール系溶剤（メタノール、プロパノール、ブタノールなど）、水等が挙げられる。

なお、塗布液中の溶剤に対する固形分量は特に制限はなく、塗布液の粘度も製膜方法に応じて任意に選択することができる。

【0188】

<発光層>

本発明の膜は、本発明の有機電界発光素子用材料を含み、更に、必要に応じてその他の材料を含む。なお、前記有機電界発光素子用材料の詳細については、上述した通りである。

また、前記発光層は、本発明の有機電界発光素子用材料を含み、更に、必要に応じてその他の材料を含む。なお、前記有機電界発光素子用材料の詳細については、上述した通りである。

【0189】

前記有機電界発光素子用材料に含まれる燐光発光性化合物の遷移双極子モーメントとし

10

20

30

40

50

ては、前記陽極に対して水平に配向されていることが好ましい。水平に配向されることで、陽極に対して垂直方向への発光成分が増加する点で有利である。

【0190】

遷移双極子モーメントの方向としては、理論計算により下記のように規定される。ここでいう理論計算は、Gaussian 03（米ガウシアン社）を用いて行う。計算に使用する分子構造は、構造最適化計算を行って生成エネルギーが最小となる構造を用い、遷移双極子モーメントの方向を求める。

【0191】

前記発光層の形成方法（製造方法）としては、溶液プロセスにて形成することが好ましい。

10

【0192】

前記発光層の厚みとしては、10 nm～100 nmが好ましく、15 nm～50 nmがより好ましく、20 nm～40 nmが特に好ましい。

前記厚みが、10 nm未満であると、正孔と電子の再結合が発光層で起こりにくくなるため、発光効率が低下することがあり、100 nmを超えると、駆動電圧が高くなることがある。前記厚みは、例えば、水晶振動子（QCM）や触針式膜厚計を用いて測定することができる。

【0193】

前記発光層の形成方法としては、必要に応じて、溶液プロセスによって成膜された発光層用膜に光を照射することでディスコティック液晶性ホスト化合物の少なくとも一部を一軸配向させて、発光層を形成させるようにしてもよい。前記照射する光としては、一方向に直線偏光した紫外線、又は電子線などが挙げられる。これらの中でも、紫外線が好適に用いられる。

20

【0194】

前記光照射の照射エネルギーとしては、 $20 \text{ mJ/cm}^2 \sim 50 \text{ J/cm}^2$ が好ましく、 $20 \sim 5,000 \text{ mJ/cm}^2$ がより好ましく、 $100 \text{ mJ/cm}^2 \sim 800 \text{ mJ/cm}^2$ が特に好ましい。また、光重合反応を促進するため、加熱条件下で光照射を実施してもよい。

【0195】

<その他の層>

30

前記その他の層としては、正孔輸送層、正孔注入層、電子輸送層、電子注入層、基板などが挙げられる。

【0196】

ー正孔注入層、正孔輸送層ー

前記正孔注入層及び正孔輸送層は、陽極又は陽極側から正孔を受け取り陰極側に輸送する機能を有する層である。該正孔注入層及び正孔輸送層は、単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

これらの層に用いられる正孔注入材料又は正孔輸送材料としては、低分子化合物であっても高分子化合物であってもよく、また、無機化合物であってもよい。

前記正孔注入材料及び正孔輸送材料としては、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができ、例えば、ピロール誘導体、カルバゾール誘導体、トリアゾール誘導体、オキサゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、ポリアリーラルカン誘導体、ピラゾリン誘導体、ピラズロン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、アリーラルアミン誘導体、アミノ置換カルコン誘導体、スチリルアントラセン誘導体、フルオレノン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、シラザン誘導体、芳香族第三級アミン化合物、スチリルアミン化合物、芳香族ジメチリデン系化合物、フタロシアニン系化合物、ポルフィリン系化合物、イリジウム錯体、チオフエン誘導体、有機シラン誘導体、カーボン、三酸化モリブデンなどが挙げられる。これらは、1種単独で使用してもよいし、2種以上を併用してもよい。

40

これらの中でも、アリルアミン誘導体、カルバゾール誘導体、イリジウム錯体、三酸化

50

モリブデンが好ましい。

【0197】

前記正孔注入層及び正孔輸送層としては、電子受容性ドーパントを含有させることができる。

前記電子受容性ドーパントとしては、電子受容性で有機化合物を酸化する性質を有すれば、無機化合物であってもよく、有機化合物であってもよい。

前記無機化合物としては、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができ、例えば、ハロゲン化金属、金属酸化物などが挙げられる。

前記ハロゲン化金属としては、例えば、塩化第二鉄、塩化アルミニウム、塩化ガリウム、塩化インジウム、五塩化アンチモンなどが挙げられる。

前記金属酸化物としては、例えば、五酸化バナジウム、三酸化モリブデンなどが挙げられる。

前記有機化合物としては、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができ、例えば置換基としてニトロ基、ハロゲン、シアノ基、トリフルオロメチル基等を有する化合物、キノン系化合物、酸無水物系化合物、フラーレンなどが挙げられる。

これらの電子受容性ドーパントは、1種単独で用いてもよいし、2種以上を併用してもよい。

【0198】

前記電子受容性ドーパントの使用量としては、材料の種類によって異なるが、正孔輸送材料又は正孔注入材料に対して0.01質量%～50質量%が好ましく、0.05質量%～50質量%がより好ましく、0.1質量%～30質量%が特に好ましい。

【0199】

前記正孔注入層及び正孔輸送層の平均厚みとしては、1nm～500nmが好ましく、5nm～200nmがより好ましく、10nm～100nmが特に好ましい。

【0200】

－電子輸送層－

前記電子輸送層は、陰極又は陰極側から電子を受け取り陽極側に輸送する機能を有する層であり、上述したように、前記電子輸送層の三重項エネルギーは、陰極側隣接層の三重項エネルギーよりも大きいことが好ましい。

【0201】

前記電子輸送層の材料としては、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができ、例えば、キノリン誘導体、オキサジアゾール誘導体、トリアゾール誘導体、フェナントロリン誘導体、ペリレン誘導体、ピリジン誘導体、ピリミジン誘導体、キノキサリン誘導体、ジフェニルキノン誘導体、ニトロ置換フルオレン誘導体、ベンゾニトリル系化合物、イミダゾピリジン誘導体などが挙げられる。

前記キノリン誘導体としては、例えば、2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン（バソクプロイン；BCP）、BCPにLiをドーブしたものの、トリス（8-キノリノラト）アルミニウム（Alq）などの8-キノリノール又はその誘導体を配位子とする有機金属錯体、BA1q（ビス-（2-メチル-8-キノリノラト）-4-（フェニル-フェノラト）-アルミニウム（III））などが挙げられる。これらの中でも、BCPにLiをドーブしたものの、BA1qが特に好ましい。

【0202】

前記電子輸送層の形成方法としては、例えば、蒸着法、湿式製膜法、電子ビーム法、スパッタリング法、反応性スパッタリング法、MBE（分子線エピタキシー）法、クラスターイオンビーム法、イオンプレーティング法、プラズマ重合法（高周波励起イオンプレーティング法）、分子積層法、LB法、印刷法、転写法などの上述した方法により好適に形成することができる。

【0203】

前記電子輸送層の厚みとしては、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができ、例えば、1nm～500nmが好ましく、10nm～50nmがより好ましい。

前記電子輸送層は、単層構造であってもよいし、積層構造であってもよい。

【0204】

－電子注入層－

前記電子注入層は、陰極又は陰極側から電子を受け取り陽極側に輸送する機能を有する層である。

前記電子注入層は、1種又は2種以上の材料からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

前記電子注入層の厚みとしては、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができ、0.1 nm～200 nmが好ましく、0.2 nm～100 nmがより好ましく、0.5 nm～50 nmが特に好ましい。

10

【0205】

－電子ブロック層－

前記電子ブロック層は、陰極側から発光層に輸送された電子が陽極側に通り抜けることを防止する機能を有する層であり、通常、発光層と陽極側で隣接する有機化合物層として設けられる。

前記電子ブロック層を構成する化合物としては、例えば前述の正孔輸送性ホスト材料として挙げたものが利用できる。また、前記電子ブロック層は、上述した材料の1種又は2種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

前記電子ブロック層の形成方法としては、特に制限はなく、公知の方法に従って形成することができるが、例えば、蒸着法、スパッタ法等の乾式製膜法、湿式塗布法、転写法、印刷法、インクジェット方式、などにより好適に形成することができる。

20

前記電子ブロック層の厚みとしては、1 nm～200 nmが好ましく、1 nm～50 nmがより好ましく、3 nm～10 nmが特に好ましい。

【0206】

－保護層－

本発明の有機電界発光素子は、保護層によって全体が保護されていてもよい。

前記保護層に含まれる材料としては、水分や酸素等の素子劣化を促進するものが素子内に入ることを抑止する機能を有しているものであれば特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができ、例えば、In、Sn、Pb、Au、Cu、Ag、Al、Ti、Ni、MgO、SiO、SiO₂、Al₂O₃、GeO、NiO、CaO、BaO、Fe₂O₃、Y₂O₃、TiO₂、SiNx、SiNxOy、MgF₂、LiF、AlF₃、CaF₂、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリメチルメタクリレート、ポリイミド、ポリウレア、ポリテトラフルオロエチレン、ポリクロロトリフルオロエチレン、ポリジクロロジフルオロエチレン、クロロトリフルオロエチレンとジクロロジフルオロエチレンとの共重合体、テトラフルオロエチレンと少なくとも1種のコモノマーとを含むモノマー混合物を共重合させて得られる共重合体、共重合主鎖に環状構造を有する含フッ素共重合体、吸水率1%以上の吸水性物質、吸水率0.1%以下の防湿性物質などが挙げられる。

30

【0207】

前記保護層の形成方法としては、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができ、例えば、真空蒸着法、スパッタリング法、反応性スパッタリング法、MBE（分子線エピタキシー）法、クラスターイオンビーム法、イオンプレーティング法、プラズマ重合法（高周波励起イオンプレーティング法）、プラズマCVD法、レーザーCVD法、熱CVD法、ガスソースCVD法、コーティング法、印刷法、転写法などが挙げられる。

40

【0208】

－封止容器－

本発明の有機電界発光素子としては、封止容器を用いて全体が封止されていてもよい。更に、前記封止容器と有機電界発光素子の間の空間には、水分吸収剤又は不活性液体を封入してもよい。

前記水分吸収剤としては、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができ、例

50

例えば酸化バリウム、酸化ナトリウム、酸化カリウム、酸化カルシウム、硫酸ナトリウム、硫酸カルシウム、硫酸マグネシウム、五酸化リン、塩化カルシウム、塩化マグネシウム、塩化銅、フッ化セシウム、フッ化ニオブ、臭化カルシウム、臭化バナジウム、モレキュラーシープ、ゼオライト、酸化マグネシウムなどが挙げられる。

前記不活性液体としては、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができ、例えばパラフィン類、流動パラフィン類、フッ素系溶剤、塩素系溶剤、シリコンオイル類などが挙げられる。

【0209】

ー樹脂封止層ー

本発明の有機電界発光素子としては、大気からの酸素や水分による素子性能劣化を樹脂封止層により封止することで抑制するようにしてもよい。

前記樹脂封止層の樹脂素材としては、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができ、例えばアクリル樹脂、エポキシ樹脂、フッ素系樹脂、シリコン系樹脂、ゴム系樹脂、エステル系樹脂などが挙げられる。これらの中でも、水分防止機能の点からエポキシ樹脂が特に好ましい。前記エポキシ樹脂の中でも熱硬化型エポキシ樹脂、又は光硬化型エポキシ樹脂が好ましい。

【0210】

前記樹脂封止層の形成方法としては、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができ、例えば、樹脂溶液を塗布する方法、樹脂シートを圧着又は熱圧着する方法、蒸着やスパッタリング等により乾式重合する方法などが挙げられる。

【0211】

(有機電界発光素子の層構成)

図1は、本発明の有機電界発光素子の層構成の一例を示す概略図である。有機電界発光素子10としては、基板2上に形成された陽極3と、正孔注入層4と、正孔輸送層5と、発光層6と、電子輸送層7と、電子注入層8と、陰極9とをこの順に積層してなる。なお、陽極3と陰極9とは電源を介して互いに接続されている。

【0212】

(用途)

本発明の有機電界発光素子としては、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができるが、表示素子、ディスプレイ、バックライト、電子写真、照明光源、記録光源、露光光源、読み取り光源、標識、看板、インテリア、光通信などに好適に利用できる。

前記有機ELディスプレイをフルカラータイプのものとする方法としては、例えば「月刊ディスプレイ」、2000年9月号、33～37ページに記載されているように、色の3原色(青色(B)、緑色(G)、赤色(R))に対応する光をそれぞれ発光する有機電界発光素子を基板上に配置する3色発光法、白色発光用の有機電界発光素子による白色発光をカラーフィルターを通して3原色に分ける白色法、青色発光用の有機電界発光素子による青色発光を蛍光色素層を通して赤色(R)及び緑色(G)に変換する色変換法などが知られている。

【0213】

また、本発明の有機電界発光素子としては、前記燐光発光性化合物などにより得られる異なる発光色を複数組み合わせることで、所望の発光色を得ることができる。例えば、青色、緑色及び赤色用の有機電界発光素子とする場合、所望の波長付近に発光ピークを有する燐光発光性化合物を有機電界発光素子用材料又は発光層に含有させればよい。

また、例えば、白色用の有機電界発光素子とする場合、燐光発光性化合物として、420nm～500nmに発光ピークを有する青色燐光発光性化合物、500nm～570nmに発光ピークを有する緑色燐光発光性化合物、及び570nm～650nmに発光ピークを有する赤色燐光発光性化合物を含有させるようにしてもよい。

【実施例】

【0214】

以下に実施例を挙げて本発明を更に具体的に説明する。以下の実施例に示す材料、試薬、物質とその割合、操作等は本発明の主旨から逸脱しない限り適宜変更することができる。従って本発明の範囲は以下の具体例に制限されるものではない。

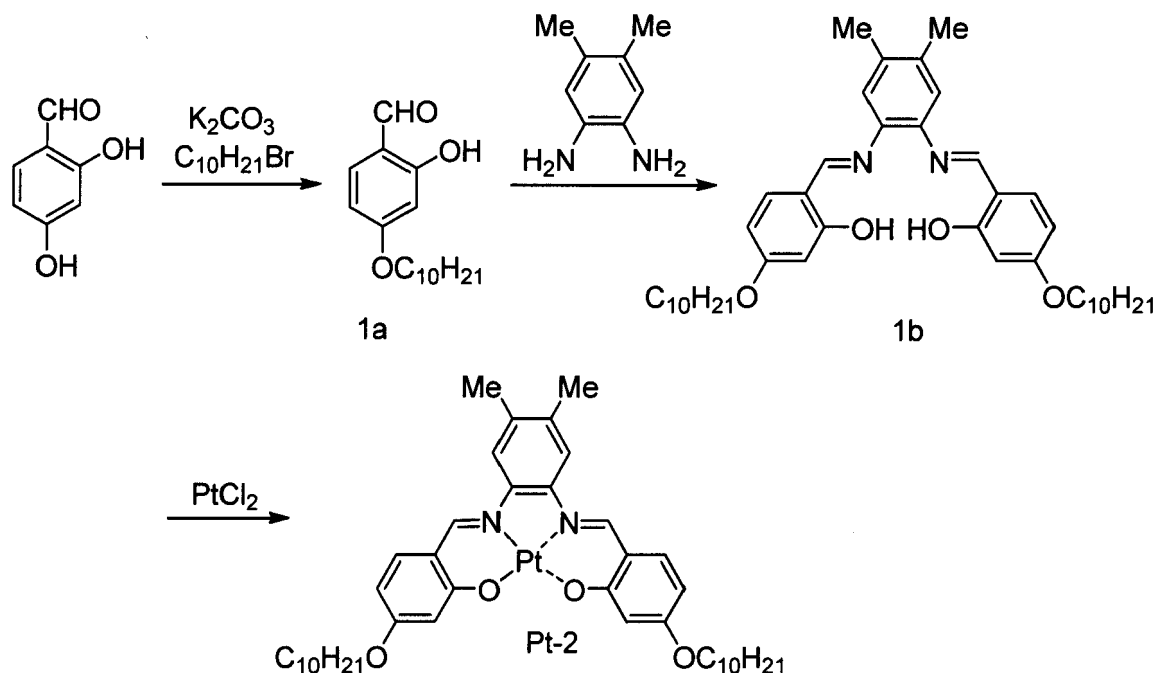
【0215】

(合成例1)

<化合物Pt-2の合成>

【0216】

【化33】



10

20

【0217】

—化合物1aの合成—

2,4-ジヒドロキシベンズアルデヒド (20 g)、n-デシルブロミド (32 g) 及び炭酸カリウム (20 g) を 200 ml の DMAc 中に混合させ、60℃で4時間反応させた。反応液を濾過し、得られた濾液を酢酸エチル／飽和食塩水に注加し、有機層を食塩水で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧にて濃縮した。濃縮残さをシリカゲルカラムクロマト精製 (展開溶媒：酢酸エチル／ヘキサン = 1 / 10 (体積比)) することにより、化合物 1a (20.3 g) を得た。

30

—化合物1bの合成—

化合物 1a (3 g)、4,5-ジメチル-1,2-フェニレンジアミン (0.73 g) のエタノール溶液 (30 ml) に酢酸 5 滴を 1 ml 駒込ピペットで滴下し、80℃で6時間反応させた。析出した固体を濾取し、エタノールで再結晶することにより、化合物 1b (2.7 g) を得た。

40

—燐光発光性化合物1の合成—

化合物 1b (1.5 g)、酢酸ナトリウム (0.19 g) のアセトニトリル溶液 (30 ml) に、 $PtCl_2$ (0.61 g) の DMSO 溶液 (15 ml) を 80℃にて滴下し、7時間反応させた。反応液を減圧にて濃縮し、得られた固体をエタノールで洗浄し、シリカゲルカラムクロマト精製 (展開溶媒：クロロホルム／ヘキサン = 8 / 1 (体積比)) し、酢酸エチルで再結晶することにより、化合物 B1 (0.72 g) を得た。なお、化合物の同定は元素分析、NMR 及び MASS スペクトルにより行った。外観は黄色固体であった。

Pt-2 の分子コア直径、分子コア厚み及び分子半径は、Gaussian 03 (米ガ

50

ウシアン社) にて構造最適化を行うことにより算出した結果、アスペクト比は、12.3であり、分子半径は、1.91 nmであった。

【0218】

[A. 実施例 A-1 ~ A-4 及び比較例 A-1 及び A-2 (緑発光素子の作製)]
(比較例 A-1)

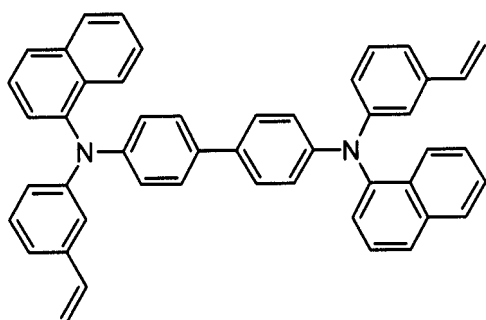
<正孔輸送層形成用塗布液 A の調製>

化合物 A1 を電子工業用キシレンに溶解させ、全固形分濃度 0.4 質量% とし、これを 0.22 μm のポアサイズを有する PTFE フィルターでろ過して、正孔輸送層形成用塗布液 A を調製した。

【0219】

10

【化34】



A1

20

【0220】

<発光層形成用塗布液 A の調製>

95 質量% のホスト化合物 H-1 と、5 質量% の発光材料 Pt-1 とを、メチルエチルケトン (MEK) に溶解させ、固形分濃度 1.0 質量% とし、これを 0.22 μm のポアサイズを有する PTFE フィルターでろ過して、発光層形成用塗布液 A を調製した。

【0221】

<素子作製>

30

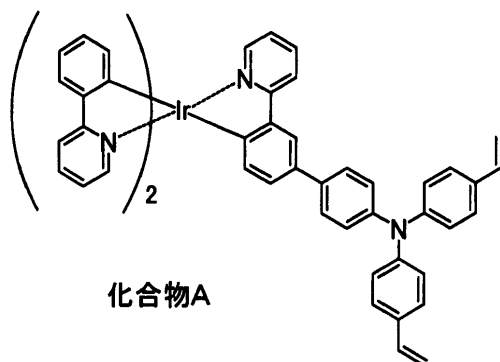
25 mm $\times$ 25 mm $\times$ 0.7 mm のガラス基板の上に ITO を 150 nm の厚みで蒸着し成膜したものを透明支持基板とした。この透明支持基板を洗浄容器に入れ、2-プロパノール中で超音波洗浄した後、30 分間 UV-オゾン処理を行った。

この ITO 付ガラス基板の上に、下記構造式で表される化合物 A (US 2008/0220265 記載) 0.5 質量部をシクロヘキサノン 99.5 質量部に溶解し、厚みが約 5 nm となるようにスピコート (4000 rpm、30 秒間) した後、200 $^{\circ}\text{C}$ で 30 分間乾燥することで、正孔注入層を成膜した。

【0222】

【化35】

40



化合物A

50

【0223】

前記正孔注入層上に、上記のように調整した正孔輸送層形成用塗布液Aを、厚みが約10nmとなるようにスピコート（1500rpm、20秒間）した後、120℃で30分間乾燥させることで、正孔輸送層を成膜した。

【0224】

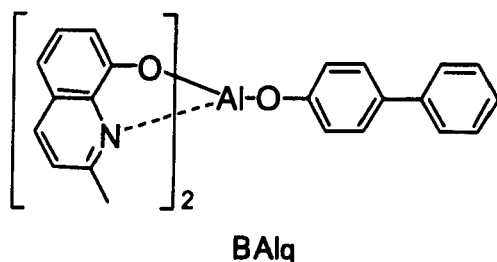
前記正孔輸送層上に上記のように調整した発光層形成用塗布液Aをグローブボックス（露点−68度、酸素濃度10ppm）内で厚みが約30nmとなるようにスピコート（1500rpm、20秒間）し、発光層とした。

次いで、発光層上に、電子輸送層として、下記構造式で表されるBAIq（ビス（2-メチル-8-キノリノラト）-4-（フェニルフェノラト）-アルミニウム（III））を、厚みが40nmとなるように真空蒸着法にて形成した。

10

【0225】

【化36】



20

【0226】

前記電子輸送層上に、電子注入層としてフッ化リチウム（LiF）を、厚みが1nmとなるように真空蒸着法にて形成した。更に金属アルミニウムを70nm蒸着し、陰極とした。

以上により作製した積層体を、アルゴンガスで置換したグローブボックス内に入れ、ステンレス製の封止缶及び紫外線硬化型の接着剤（XNR5516HV、長瀬チバ（株）製）を用いて封止することで、比較例A-1の有機電界発光素子を作製した。

【0227】

30

（実施例A-1～A-4、比較例A-2）

比較例A-1における発光層形成用塗布液Aの調製において、ホスト化合物H-1の代わりに以下の表1に記載のホスト材料を使用した以外は、比較例A-1と同様にして実施例A-1～A-4、比較例A-2の有機電界発光素子を得た。なお、表2中のホスト材料における主成分及び添加剤の含有率は、254nmにおけるHPLC吸収面積より求めた。

【0228】

<素子評価>

（a）

面内輝度ムラの評価

40

作製した素子を電流密度2.5mA/cm²で発光させた際の面内輝度分布をミノルタ製CA-1500を用いて測定し、最も輝度の小さい測定点と最も輝度の高い測定点の輝度の比（最も輝度の高い測定点／最も輝度の小さい測定点（Lmin/Lmax））を面内の輝度ムラ比とした。

【0229】

以上の結果を、表2に示す。

【0230】

【表 2】

表 2

	ホスト材料				発光材料	輝度ムラ比
	主成分	含有率	添加剤	含有率		
比較例 A-1	H-1	99.6%	-	-	Pt-1	1.45
実施例 A-1	H-1	98.2%	MH-1	0.90%	Pt-1	1.03
実施例 A-2	H-1	98.4%	MH-1	0.10%	Pt-1	1.06
実施例 A-3	H-1	99.0%	MH-1	0.05%	Pt-1	1.12
実施例 A-4	H-1	99.4%	MH-1	0.02%	Pt-1	1.13
比較例 A-2	H-1	97.5%	MH-1	1.40%	Pt-1	1.55

10

【0231】

〔B. 実施例 B-1～B-3 及び比較例 B-1～B-3 (赤発光素子の作製)〕

(比較例 B-1)

<発光層形成用塗布液 B の調製>

95質量%のホスト化合物 H-2 と、5質量%の発光材料 Pt-2 とを、メチルエチルケトン (MEK) に溶解させ、固形分濃度 1.0質量%とし、これを 0.22 μm のポアサイズを有する PTFE フィルターでろ過して、発光層形成用塗布液 B を調製した。

20

【0232】

<素子作製>

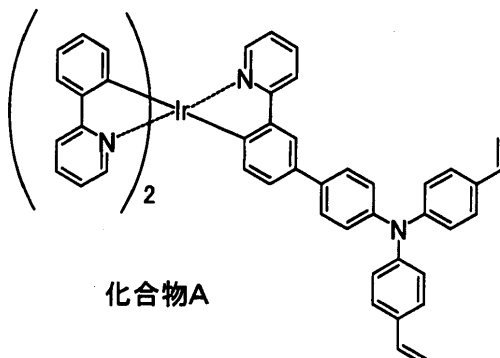
25mm×25mm×0.7mm のガラス基板上に ITO を 150nm の厚みで蒸着し成膜したものを透明支持基板とした。この透明支持基板を洗浄容器に入れ、2-プロパノール中で超音波洗浄した後、30分間 UV-オゾン処理を行った。

この ITO 付ガラス基板上に、下記構造式で表される化合物 A (US2008/0220265 記載) 0.5質量部をシクロヘキサノン 99.5質量部に溶解し、厚みが約 5nm となるようにスピンコート (4000rpm、30秒間) した後、200℃で30分間乾燥することで、正孔注入層を成膜した。

30

【0233】

【化 37】



40

【0234】

前記正孔注入層上に、実施例 A-1 で用いた正孔輸送層形成用塗布液 A を、厚みが約 10nm となるようにスピンコート (1500rpm、20秒間) した後、150℃で20分間乾燥することで、正孔輸送層を成膜した。

【0235】

前記正孔輸送層上に上記のように調整した発光層形成用塗布液 B をグローブボックス (

50

露点−68度、酸素濃度10ppm)内で厚みが約30nmとなるようにスピコート(1500rpm、20秒間)し、発光層とした。

次いで、発光層上に、実施例A-1と同様に、電子輸送層としてBAIq、電子注入層としてフッ化リチウム(LiF)を、陰極として金属アルミニウムを成膜した。

以上により作製した積層体を、アルゴンガスで置換したグローブボックス内に入れ、ステンレス製の封止缶及び紫外線硬化型の接着剤(XNR5516HV、長瀬チバ(株)製)を用いて封止することで、比較例B-1の有機電界発光素子を作製した。

【0236】

(実施例B-1～B-3、比較例B-2及びB-3)

比較例B-1における発光層形成用塗布液Bの調製において、ホスト化合物H-2の代わりに以下の表3に記載のホスト材料を使用した。それ以外は、比較例B-1と同様にして実施例B-1～B-3、比較例B-2及びB-3の有機電界発光素子を得た。なお、表3中のホスト材料における主成分及び添加剤の含有率は、254nmにおけるHPLC吸収面積より求めた。

【0237】

以上のようにして得た各素子を、実施例A-1と同様に評価し、その結果を表3に示す。

【0238】

【表3】

表3

	ホスト材料				発光材料	輝度ムラ比
	主成分	含有率	添加剤	含有率		
比較例B-1	H-2	99.6%	-	-	Pt-2	1.42
実施例B-1	H-2	98.4%	MH-2	0.10%	Pt-2	1.02
比較例B-2	H-3	99.1%	-	-	Pt-2	1.33
実施例B-2	H-3	99.1%	MH-3	0.12%	Pt-2	1.06
比較例B-3	H-4	97.1%	-	-	Pt-2	1.47
実施例B-3	H-4	98.9%	MH-4	0.33%	Pt-2	1.11

【0239】

[C. 実施例C-1、C-2、比較例C-2(青発光素子の作製)]

(比較例C-1)

<正孔輸送層形成用塗布液Cの調製>

正孔輸送材料A1を電子工業用キシレン/ベンジルアルコール(=質量比60/40)に溶解させ、全固形分濃度0.4質量%とし、これを0.22μmのポアサイズを有するPTFEフィルターでろ過して、正孔輸送層形成用塗布液Cを調製した。

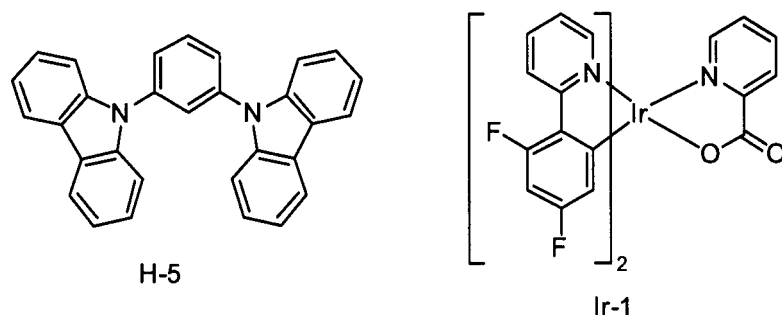
【0240】

<発光層形成用塗布液Cの調製>

85質量%のホスト化合物H-5と、15質量%の発光材料Ir-1とを、メチルエチルケトン(MEK)に溶解させ、固形分濃度1.0質量%とし、これを0.22μmのポアサイズを有するPTFEフィルターでろ過して、発光層形成用塗布液Cを調製した。

【0241】

【化 3 8】



10

【0 2 4 2】

<素子作製>

前記実施例 B-1 と同様に、ITO 付ガラス基板上に、化合物 A を含む正孔注入層を成膜した。

【0 2 4 3】

前記正孔注入層上に、上記のように調整した正孔輸送層形成用塗布液 C を、厚みが約 10 nm となるようにスピコート (1500 rpm、20 秒間) した後、100℃で30分間乾燥と150℃で10分間アニール処理することで、正孔輸送層を成膜した。

【0 2 4 4】

前記正孔輸送層上に上記のように調整した発光層形成用塗布液 C をグローブボックス (露点 -68 度、酸素濃度 10 ppm) 内で厚みが約 30 nm となるようにスピコート (1500 rpm、20 秒間) し、発光層とした。

次いで、発光層上に、正孔ブロック層として化合物 H-2 を厚さが 10 nm になるように真空蒸着法にて形成した。

その後実施例 A-1 と同様に、電子輸送層として BA1q、電子注入層としてフッ化リチウム (LiF) を、陰極として金属アルミニウムを成膜した。

以上により作製した積層体を、アルゴンガスで置換したグローブボックス内に入れ、ステンレス製の封止缶及び紫外線硬化型の接着剤 (XNR5516HV、長瀬チバ (株) 製) を用いて封止することで、比較例 C-1 の有機電界発光素子を作製した。

【0 2 4 5】

(実施例 C-1、C-2、及び比較例 C-2)

比較例 C-1 において、正孔ブロック層として化合物 H-2 の代わりに以下の表 4 に記載の正孔ブロック層材料を使用した以外は、比較例 C-1 と同様にして実施例 C-1、実施例 C-2、比較例 C-2 の有機電界発光素子を得た。なお、表 3 中の正孔ブロック層材料における主成分及び添加剤の含有率は、254 nm における HPLC 吸収面積より求めた。

【0 2 4 6】

以上のようにして得た各素子を、実施例 A-1 と同様に評価し、その結果を表 4 に示す。なお表 3 において、

【0 2 4 7】

30

40

【表 4】

表 4

	正孔ブロック層材料				輝度ムラ比
	主成分	含有率	添加剤	含有率	
比較例 C-1	H-2	99.6%			1.46
実施例 C-1	H-2	98.4%	MH-2	0.10%	1.21
実施例 C-2	H-2	99.10%	MH-2	0.80%	1.19
比較例 C-2	H-2	98.10%	MH-2	1.40%	1.45

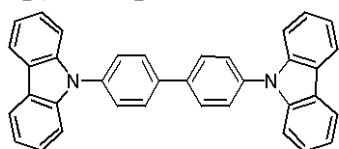
10

【0248】

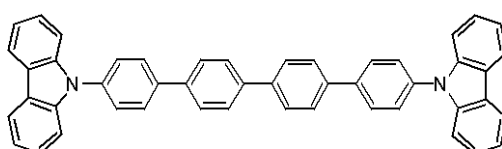
実施例で使用した上記以外の化合物及び添加剤の構造とそのアスペクト比を以下の表 5 に記載する。

【0249】

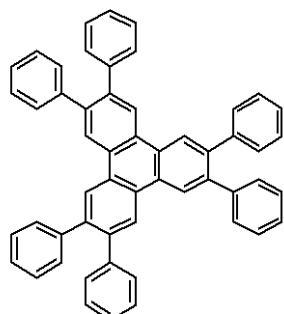
【化 3 9】



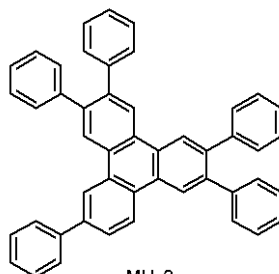
H-1



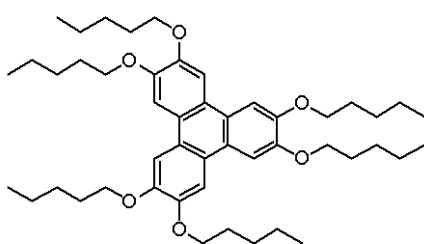
MH-1



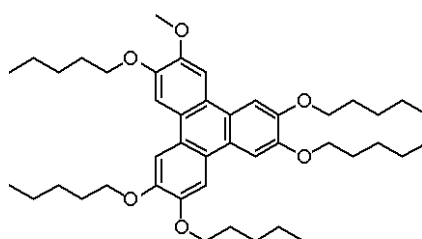
H-2



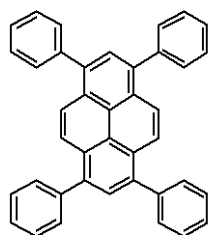
MH-2



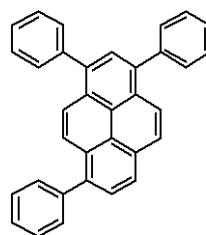
H-3



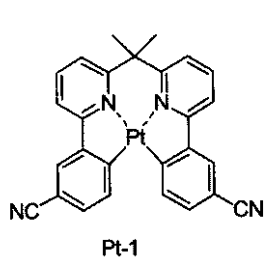
MH-3



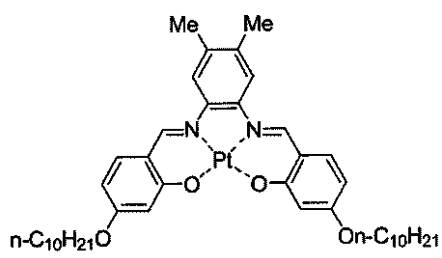
H-4



MH-4



Pt-1



Pt-2

【 0 2 5 0 】

【表 5】

表 5

	アスペクト比
MH-1	4. 1 0
MH-2	4. 2 3
MH-3	4. 1 1
MH-4	3. 6 2

10

20

30

40

50

【0251】

上記表2～表5の結果から明らかなように、分子アスペクト比が3以上の添加剤を254nmにおけるHPLC吸収面積に基づき0.01%以上1%以下含み、有機電界発光素子用材料中の254nmにおけるHPLC吸収面積が98%以上を占める化合物を含む有機電界発光素子用材料を素子内に含む場合、該添加剤を含有しない材料を用いた素子と比較して輝度ムラが抑制できる事が分かる。また、駆動初期の耐久性に優れ、面内の輝度も均一になっている事がわかる。

【産業上の利用可能性】

【0252】

本発明の有機電界発光素子用材料は、高い光取り出し効率、高い発光効率、高い偏光発光比、及び高い発光量子収率を両立することができるので、発光層の材料として使用することで、例えば、表示素子、ディスプレイ、バックライト、電子写真、照明光源、記録光源、露光光源、読み取り光源、標識、看板、インテリア、光通信などに好適に用いられる。

本発明の有機電界発光素子は、前記有機電界発光素子用材料を発光層に含むので、高い光取り出し効率、高い発光効率、高い偏光発光比、及び高い発光量子収率を両立することができ、例えば、表示素子、ディスプレイ、バックライト、電子写真、照明光源、記録光源、露光光源、読み取り光源、標識、看板、インテリア、光通信などに好適に用いられる。

【符号の説明】

【0253】

- 2・・・基板
- 3・・・陽極
- 4・・・正孔注入層
- 5・・・正孔輸送層
- 6・・・発光層
- 7・・・正孔ブロック層
- 8・・・電子輸送層
- 9・・・陰極
- 10・・・有機電界発光素子

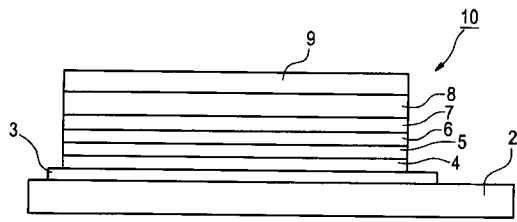
10

20

30

【図 1】

FIG.1



フロントページの続き

(51)Int.Cl.

F I

テーマコード (参考)

C 0 7 C 15/20

C 0 7 C 43/20

D

专利名称(译)	用于有机电致发光元件的材料，包含该材料的膜和有机电致发光元件		
公开(公告)号	JP2012094801A	公开(公告)日	2012-05-17
申请号	JP2010282450	申请日	2010-12-17
[标]申请(专利权)人(译)	富士胶片株式会社		
申请(专利权)人(译)	富士胶片株式会社		
[标]发明人	高田早		
发明人	高田 早		
IPC分类号	H01L51/50 C09K11/06 C07F15/00 C07C15/20 C07C43/20		
FI分类号	H05B33/22.D H05B33/14.B C09K11/06.690 C09K11/06.660 C07F15/00.F C07C15/20 C07C43/20.D		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/CC04 3K107/CC22 3K107/CC33 3K107/CC42 3K107/DD53 3K107/DD58 3K107/DD66 3K107/DD67 3K107/DD68 3K107/DD70 3K107/DD71 3K107/DD78 3K107/DD87 3K107/FF14 3K107/FF15 3K107/GG06 4H006/AA03 4H006/AB92 4H050/AA03 4H050/AB92 4H050/WB11 4H050/WB13 4H050/WB14 4H050/WB21		
优先权	2010223258 2010-09-30 JP		
其他公开文献	JP5632274B2		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

根据本发明，可以解决现有技术中的上述问题并实现上述目的，并且可以抑制面内方向上的亮度不均匀，用于有机电致发光器件的材料以及使用其的膜和膜。可以提供有机电致发光器件。在有机电致发光装置用材料中，基于254nm的HPLC吸收面积含有0.01%以上且1%以下的分子纵横比为3以上，且254nm的HPLC吸收面积为98%以上的添加剂的化合物。用于有机电致发光器件的材料包括。一种有机电致发光器件，其具有在基板上的包括阳极和阴极的一对电极以及在电极之间包括发光层的至少一个有机层，其中在阳极和发光层之间提供至少一层。一种有机电致发光器件，包括在有机层中的有机电致发光器件材料。[选择图]无

