

(19) 日本国特許庁(JP)

再 公 表 特 許(A1)

(11) 国際公開番号

WO2007/111176

発行日 平成21年8月13日(2009.8.13)

(43) 国際公開日 平成19年10月4日(2007.10.4)

(51) Int. Cl.	F I	テーマコード (参考)
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/14 B	3K107
C07D 333/76 (2006.01)	H05B 33/22 B	4C037
C07D 307/91 (2006.01)	H05B 33/22 D	4C063
C07D 409/14 (2006.01)	C07D 333/76	4H049
C09K 11/06 (2006.01)	C07D 307/91	
審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 54 頁) 最終頁に続く		

出願番号	特願2008-507439 (P2008-507439)	(71) 出願人	000183646
(21) 国際出願番号	PCT/JP2007/055478		出光興産株式会社
(22) 国際出願日	平成19年3月19日(2007.3.19)		東京都千代田区丸の内3丁目1番1号
(31) 優先権主張番号	11/392,604	(74) 代理人	100078732
(32) 優先日	平成18年3月30日(2006.3.30)		弁理士 大谷 保
(33) 優先権主張国	米国 (US)	(74) 代理人	100081765
(31) 優先権主張番号	特願2006-82792 (P2006-82792)		弁理士 東平 正道
(32) 優先日	平成18年3月24日(2006.3.24)	(72) 発明者	中野 裕基
(33) 優先権主張国	日本国 (JP)		千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
		(72) 発明者	岩隈 俊裕
			千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
		(72) 発明者	松浦 正英
			千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
		(72) 発明者	池田 秀嗣
			千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
			最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス素子用材料及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子

(57) 【要約】

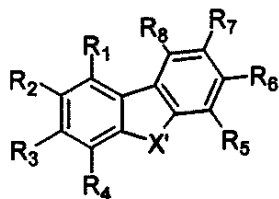
特定構造の化合物からなる有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、及び、陰極と陽極間に少なくとも発光層を有する一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている有機エレクトロルミネッセンス素子において、該有機薄膜層の少なくとも一層が、前記有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有することによって、発光効率が高く、画素欠陥が無く、耐熱性に優れ、長寿命である有機エレクトロルミネッセンス素子用材料及び有機エレクトロルミネッセンス素子を提供する。

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記一般式（１）で表される化合物からなる有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【化 1】



10

（１）

〔式中、 $R_1 \sim R_8$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数 3 ～ 20 のピリジン環でない複素環基、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 40 の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 12 の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 12 ～ 40 の縮合非縮合混合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 20 のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数 7 ～ 20 のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数 2 ～ 40 のアルケニル基、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数 7 ～ 60 のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数 3 ～ 20 のアルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数 8 ～ 40 のアリールシリル基、置換基を有してもよい炭素数 8 ～ 40 のアラルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数 3 ～ 20 のアルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数 8 ～ 40 のアリールゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数 8 ～ 40 のアラルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数 7 ～ 40 のケトアリール基、置換基を有してもよい炭素数 1 ～ 40 のハロゲン化アルキル基又はシアノ基である。〕

20

X' は硫黄原子、酸素原子、又は Ge 、 R_c 、 R_d で表される置換ゲルマニウム基を表し、 R_c 及び R_d はそれぞれ独立に、炭素数 1 ～ 40 のアルキル基又は炭素数 6 ～ 20 のアリール基を表す。

30

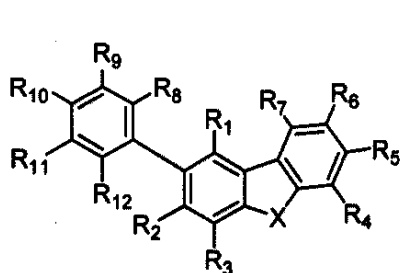
ただし、 R_2 及び R_7 のうち少なくとも 1 つは、それぞれ独立に、置換基を有してもよい炭素数 6 ～ 40 の非縮合芳香族環、置換基を有してもよいナフチル基、置換基を有してもよい炭素数 3 ～ 20 のアルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数 8 ～ 40 のアリールシリル基、置換基を有してもよい炭素数 8 ～ 40 のアラルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数 3 ～ 20 のアルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数 8 ～ 40 のアリールゲルマニウム基又は置換基を有してもよい炭素数 8 ～ 40 のアラルキルゲルマニウム基である。また、 R_2 及び R_7 はアミノ基ではない。〕

【請求項 2】

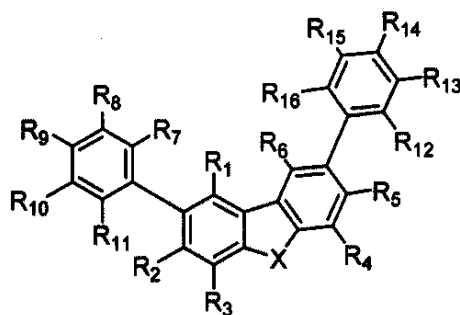
40

下記一般式（２）又は（３）で表される化合物からなる有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【化2】



(2)



(3)

10

[式中、 $R_1 \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～20の複素環基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～12の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数12～40の縮合非縮合混合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数2～40のアルケニル基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～60のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数7～40のケトアリール基、置換基を有してもよい炭素数1～40のハロゲン化アルキル基又はシアノ基である。

Xは硫黄原子、酸素原子、Si $R_a R_b$ で表される置換珪素原子、又はGe $R_c R_d$ で表される置換ゲルマニウム基を表し、 R_a 、 R_b 、 R_c 及び R_d はそれぞれ独立に、炭素数1～40のアルキル基又は炭素数6～20のアリール基を表す。

ただし、一般式(2)における R_{10} 、及び一般式(3)における R_9 及び R_{14} はアミノ基でない。また、一般式(2)における R_8 及び R_{12} のうち少なくとも1つは水素原子である。]

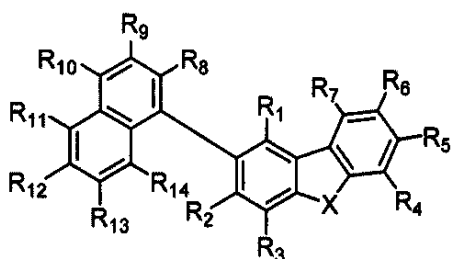
20

30

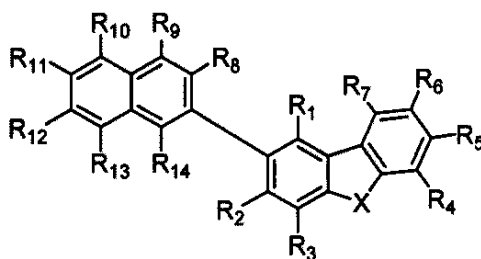
【請求項3】

下記一般式(4)又は(5)で表される化合物からなる請求項2記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【化3】



(4)



(5)

40

[式中、 $R_1 \sim R_{14}$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～20の複素環基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～12の縮合アリール基、置換基を

50

有しても良い炭素数12～40の縮合非縮合混合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基、置換基を有しても良い炭素数7～20のアラルキル基、置換基を有しても良い炭素数2～40のアルケニル基、置換基を有しても良い炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有しても良い炭素数7～60のアラルキルアミノ基、置換基を有しても良い炭素数3～20のアルキルシリル基、置換基を有しても良い炭素数8～40のアリールシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルシリル基、置換基を有しても良い炭素数3～20のアルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルゲルマニウム基、置換基を有しても良い炭素数7～40のケトアリール基、置換基を有しても良い炭素数1～40のハロゲン化アルキル基又はシアノ基である。

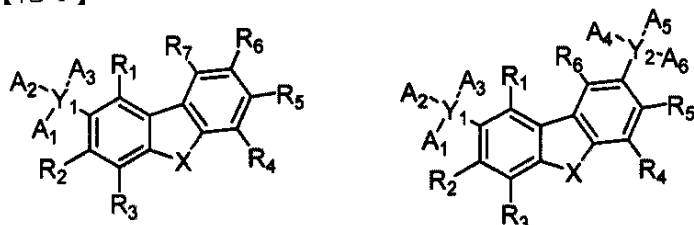
10

Xは硫黄原子、酸素原子、Si R_a R_bで表される置換珪素原子、又はGe R_c R_dで表される置換ゲルマニウム基を表し、R_a、R_b、R_c及びR_dはそれぞれ独立に、炭素数1～40のアルキル基又は炭素数6～20のアリール基を表す。]

【請求項4】

下記一般式(6)又は(7)で表される化合物からなる有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【化4】



20

(6)

(7)

[式中、R₁～R₇は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～20の複素環基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～12の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数12～40の縮合非縮合混合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数2～40のアルケニル基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～60のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数7～40のケトアリール基、置換基を有してもよい炭素数1～40のハロゲン化アルキル基又はシアノ基である。

30

Xは硫黄原子、酸素原子、Si R_a R_bで表される置換珪素原子、又はGe R_c R_dで表される置換ゲルマニウム基を表し、R_a、R_b、R_c及びR_dはそれぞれ独立に、炭素数1～40のアルキル基又は炭素数6～20のアリール基を表す。

40

Y₁及びY₂は、それぞれ独立に珪素原子又はゲルマニウム原子を表す。A₁～A₆は、それぞれ独立に、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基を表す。]

【請求項5】

一般式(1)においてR₁～R₈のうち少なくとも一つがジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、カルバゾール、シラフルオレン、ゲルマフルオレン、又はフルオレンから導かれる一価の基である化合物からなる請求項1記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材

50

料。

【請求項 6】

一般式 (1) において R_1 及び $\diagup$ 又は R_7 がジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、カルバゾール、シラフルオレン、ゲルマフルオレン、又はフルオレンから導かれる一価の基である化合物からなる請求項 1 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 7】

陰極と陽極間に少なくとも発光層を有する一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている有機エレクトロルミネッセンス素子において、該有機薄膜層の少なくとも一層が請求項 1 ～ 6 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【請求項 8】

前記発光層がホスト材料とりん光性の発光材料を含有し、該ホスト材料が請求項 1 ～ 6 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料からなる請求項 7 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 9】

前記発光層がホスト材料とりん光性の発光材料を含有し、該りん光性の発光材料が Ir 、 Os 又は Pt 金属を含有する化合物である請求項 7 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 10】

前記発光層がホスト材料とりん光性の発光材料を含有し、該りん光性の発光材料が金属一カルベン炭素結合を有する発光材料である請求項 7 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

【請求項 11】

前記有機エレクトロルミネッセンス素子用材料が、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層に含まれるホスト材料である請求項 7 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 12】

前記有機エレクトロルミネッセンス素子が正孔輸送層を有し、前記有機エレクトロルミネッセンス素子用材料が、該正孔輸送層に含まれる材料である請求項 7 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

【請求項 13】

前記有機エレクトロルミネッセンス素子が電子輸送層又は正孔障壁層を有し、前記有機エレクトロルミネッセンス素子用材料が、該電子輸送層又は正孔障壁層に含まれる材料である請求項 7 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 14】

陰極と有機薄膜層との界面領域に還元性ドーパントが添加されてなる請求項 7 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 15】

前記発光層と陰極との間に電子注入層を有し、該電子注入層が含窒素環誘導体を主成分として含有する請求項 7 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【請求項 16】

最高発光輝度の波長が 500 nm 以下である青色系金属錯体を、前記発光層に含有する請求項 7 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子に関し、特に、発光効率が高く、画素欠陥が無く、耐熱性に優れ、長寿命である有機エレクトロルミネッセンス素子用材料及び有機エレクトロルミネッセンス素子に関するものである。

50

【背景技術】

【0002】

有機エレクトロルミネッセンス素子（以下エレクトロルミネッセンスをELと略記することがある）は、電界を印加することより、陽極より注入された正孔と陰極より注入された電子の再結合エネルギーにより蛍光性物質が発光する原理を利用した自発光素子である。イーストマン・コダック社のC. W. Tangらによる積層型素子による低電圧駆動有機EL素子の報告（C.W. Tang, S.A. Vanslyke, アプライドフィジックスレターズ（Applied Physics Letters）, 51巻、913頁、1987年等）がなされて以来、有機材料を構成材料とする有機EL素子に関する研究が盛んに行われている。Tangらは、トリス（8-キノリノラト）アルミニウムを発光層に、トリフェニルジアミン誘導体を正孔輸送層に用いている。積層構造の利点としては、発光層への正孔の注入効率を高めること、陰極より注入された電子をブロックして再結合により生成する励起子の生成効率を高めること、発光層内で生成した励起子を閉じ込めること等が挙げられる。この例のように有機EL素子の素子構造としては、正孔輸送（注入）層、電子輸送発光層の2層型、又は正孔輸送（注入）層、発光層、電子輸送（注入）層の3層型等がよく知られている。こうした積層型構造素子では注入された正孔と電子の再結合効率を高めるため、素子構造や形成方法の工夫がなされている。

10

【0003】

有機EL素子の発光材料としてはトリス（8-キノリノラト）アルミニウム錯体等のキレート錯体、クマリン誘導体、テトラフェニルブタジエン誘導体、ジスチリルアアリーレン誘導体、オキサジアゾール誘導体等の発光材料が知られており、それらからは青色から赤色までの可視領域の発光が得られることが報告されており、カラー表示素子の実現が期待されている（例えば、特許文献1、特許文献2、特許文献3等参照）。

20

また、近年、有機EL素子の発光層に蛍光材料の他に、りん光材料を利用することも提案されている（例えば、非特許文献1、非特許文献2参照）。このように有機EL素子の発光層において有機りん光材料の励起状態の一重項状態と三重項状態とを利用し、高い発光効率が達成されている。有機EL素子内で電子と正孔が再結合する際にはスピン多重度の違いから一重項励起子と三重項励起子とが1：3の割合で生成すると考えられているので、りん光性の発光材料を用いれば蛍光のみを使った素子に比べて3～4倍の発光効率の達成が考えられる。

30

【0004】

このような有機EL素子においては、3重項の励起状態又は3重項の励起子が消光しないように順次、陽極、正孔輸送層、有機発光層、電子輸送層（正孔阻止層）、電子輸送層、陰極のように層を積層する構成が用いられ、有機発光層にホスト化合物とりん光発光性の化合物が用いられてきた（例えば、特許文献4）。ここにはジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン骨格を有するホスト材が記載されている。しかしながら、他のカルバゾリル骨格と比較して素子性能で優位性が示されてはならず、また、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェンの2, 8位の置換体に関する記載は無く、2, 8位の置換基が3重項エネルギーギャップの大きさを損なわず、りん光素子用ホスト材料若しくはその他輸送材料として高い優位性を有することはなんら記載がない。

40

【0005】

また蛍光性ベンゾフラン化合物及びジベンゾフラン化合物を有する素子が開示されている（特許文献5）。しかし、ベンゾフランの7位及びジベンゾフランの2位又は8位の置換体に関する記載は無く、その優位性についての記載もない。

【0006】

さらにアントラセン骨格が必須であるベンゾチオフェン骨格を有する化合物が記載されている（特許文献6）。しかしりん光素子への適用は3重項エネルギーギャップの狭いアントラセン骨格を含んでいるので適用が難しいと考えられる。またピレン骨格に結合したベンゾフラン化合物も示されている（特許文献7）が、ピレン骨格も3重項エネルギーギャップが狭いので、りん光型有機EL素子への適用は困難と思われる上、その実施例も記

50

載されていない。

さらにジベンゾチオフェン及びジベンゾフランの2位がフェニル基で置換された化合物が記載されている（特許文献8）。しかし、りん光素子での実施例はなく、2及び8位の置換基が3重項エネルギーギャップの大きさを損なわず、りん光素子用ホスト材料若しくはその他輸送材料として、特にELの発光波長が520nmより短波長である発光素子用材料として高い優位性を有することはなんら記載がない。

【0007】

また、アリールシリル基等の置換基を有する化合物が記載されている（特許文献9、特許文献10）。しかしながら本発明に関わる化合物群の記載は無く、3重項のエネルギーギャップを広く保てる等、EL素子用材料特に青色系りん光素子用材料として有用な効果も記載されていない。 10

また、アリールシラン、アリールゲルマン系化合物が記載されている（特許文献11、特許文献12、特許文献13、特許文献14、特許文献15、特許文献16、特許文献17）。青色系りん光素子のホスト材料として実施例が開示されているが、本発明に関わる化合物群に関しては記載が無く、効果も不明である。

【0008】

【特許文献1】特開平8-239655号公報

【特許文献2】特開平7-138561号公報

【特許文献3】特開平3-200889号公報

【特許文献4】国際公開WO05/101912号公報 20

【特許文献5】特開平5-109485号公報

【特許文献6】特開2004-002351号公報

【特許文献7】国際公開WO04/096945号公報

【特許文献8】特開2002-308837号公報

【特許文献9】特開2003-138251号公報

【特許文献10】特開2000-351966号公報

【特許文献11】国際公開WO2004/095598号公報

【特許文献12】US2004/209115号公開公報

【特許文献13】特開2004-103463号公報

【特許文献14】特開2005-183303号公報 30

【特許文献15】特開2005-317275号公報

【特許文献16】特開2004-200104号公報

【特許文献17】特開2003-243178号公報

【非特許文献1】D. F. O'Brien and M. A. Baldo et al. "Improved energy transfer in electrophosphorescent devices" Applied Physics letters Vol. 74 No.3, pp442-444, January 18, 1999

【非特許文献2】M. A. Baldo et al. "Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence" Applied Physics letters Vol. 75 No. 1, pp4-6, July 5, 1999

【発明の開示】 40

【発明が解決しようとする課題】

【0009】

本発明は、前記の課題を解決するためになされたもので、発光効率が高く、画素欠陥が無く、耐熱性に優れ、長寿命である有機EL素子用材料及びそれを用いた有機EL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】

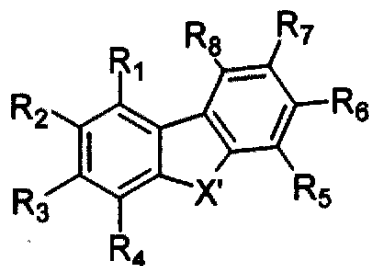
【0010】

本発明者らは、前記目的を達成するために鋭意研究を重ねた結果、下記一般式（1）で記載される化合物を有機EL素子材料に用いることにより、高効率、高耐熱かつ長寿命である有機EL素子が得られることを見出し、本発明を解決するに至った。 50

【0011】

すなわち、本発明は、下記一般式（1）で表される化合物からなる有機EL素子用材料を提供するものである。

【化1】



10

(1)

式中、 $R_1 \sim R_8$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～20のピリジン環でない複素環基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～12の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数12～40の縮合非縮合混合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数2～40のアルケニル基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～60のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数7～40のケトアリール基、置換基を有してもよい炭素数1～40のハロゲン化アルキル基又はシアノ基である。

20

30

X' は硫黄原子、酸素原子、又はGe、R_c、R_dで表される置換ゲルマニウム基を表し、R_c及びR_dはそれぞれ独立に、炭素数1～40のアルキル基又は炭素数6～20のアリール基を表す。

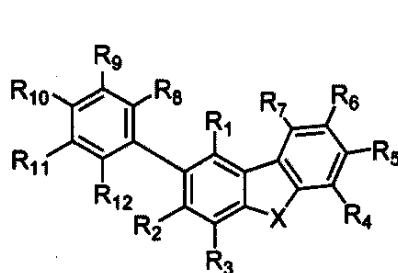
ただし、 R_2 及び R_7 のうち少なくとも1つは、それぞれ独立に、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合芳香族環、置換基を有してもよいナフチル基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールゲルマニウム基又は置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルゲルマニウム基である。また、 R_2 及び R_7 はアミノ基ではない。

40

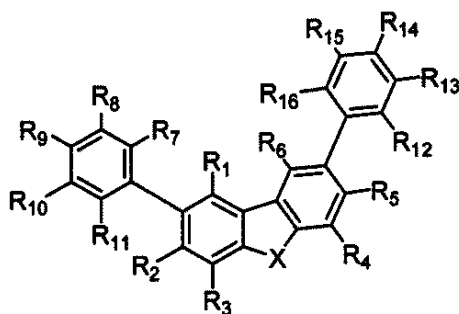
【0012】

また、本発明は、下記一般式（2）又は（3）で表される化合物からなる有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を提供する。

【化2】



(2)



(3)

10

式中、 $R_1 \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～20の複素環基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～12の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数12～40の縮合非縮合混合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数2～40のアルケニル基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～60のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数7～40のケトアリール基、置換基を有してもよい炭素数1～40のハロゲン化アルキル基又はシアノ基である。

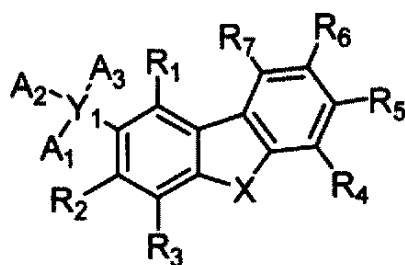
Xは硫黄原子、酸素原子、Si $R_a R_b$ で表される置換珪素原子、又はGe $R_c R_d$ で表される置換ゲルマニウム基を表し、 R_a 、 R_b 、 R_c 及び R_d はそれぞれ独立に、炭素数1～40のアルキル基又は炭素数6～20のアリール基を表す。

ただし、一般式(2)における R_{10} 、及び一般式(3)における R_9 及び R_{14} はアミノ基でない。また、一般式(2)における R_8 及び R_{12} のうち少なくとも1つは水素原子である。

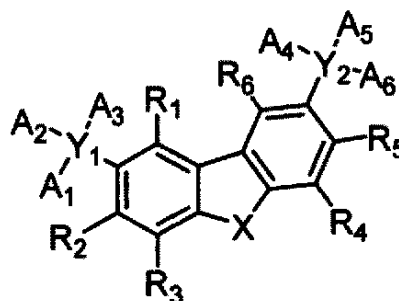
【0013】

さらに、本発明は、下記一般式(6)又は(7)で表される化合物からなる有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を提供する。

【化3】



(6)



(7)

式中、 $R_1 \sim R_7$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～20の複素環基、置換基

40

50

を有してもよい炭素数 1～40 のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数 6～40 の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 6～12 の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 12～40 の縮合非縮合混合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 6～20 のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数 7～20 のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数 2～40 のアルケニル基、置換基を有してもよい炭素数 1～40 のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数 7～60 のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数 3～20 のアルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数 8～40 のアリールシリル基、置換基を有してもよい炭素数 8～40 のアラルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数 3～20 のアルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数 8～40 のアリールゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数 8～40 のアラルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数 7～40 のケトアリール基、置換基を有してもよい炭素数 1～40 のハロゲン化アルキル基又はシアノ基である。

X は硫黄原子、酸素原子、Si、R_a、R_b で表される置換珪素原子、又は Ge、R_c、R_d で表される置換ゲルマニウム基を表し、R_a、R_b、R_c 及び R_d はそれぞれ独立に、炭素数 1～40 のアルキル基又は炭素数 6～20 のアリール基を表す。

Y₁ 及び Y₂ は、それぞれ独立に珪素原子又はゲルマニウム原子を表す。A₁～A₆ は、それぞれ独立に、置換基を有してもよい炭素数 1～40 のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数 6～40 のアリール基又は置換基を有してもよい炭素数 7～20 のアラルキル基を表す。

また、本発明は、陰極と陽極間に少なくとも発光層を有する一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている有機 EL 素子において、該有機薄膜層の少なくとも一層が、前記有機 EL 素子用材料を含有する有機 EL 素子を提供するものである。

【発明の効果】

【0014】

本発明の一般式 (1) で表される化合物からなる有機 EL 素子用材料を利用すると、発光効率が高く、画素欠陥がなく、耐熱性に優れ、かつ寿命の長い有機 EL 素子が得られる。

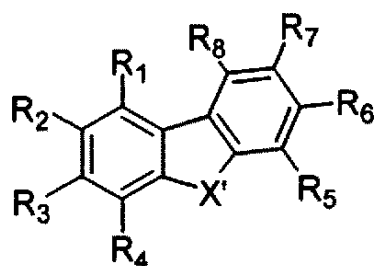
このため、本発明の有機 EL 素子は、各種電子機器の光源等として極めて有用である。

【発明を実施するための最良の形態】

【0015】

本発明は、下記一般式 (1) で表される化合物からなる有機 EL 素子用材料を提供するものである。

【化 4】



(1)

式中、R₁～R₈ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数 1～40 のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数 3～20 のピリジン環でない複素環基、置換基を有してもよい炭素数 1～40 のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数 6～40 の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 6～12 の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数 12～40 の縮合非縮合混合アリール基、置換基を有

してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数2～40のアルケニル基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～60のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数7～40のケトアリール基、置換基を有してもよい炭素数1～40のハロゲン化アルキル基又はシアノ基である。

10

X'は硫黄原子、酸素原子、又はGe、R_c、R_dで表される置換ゲルマニウム基を表し、R_c及びR_dはそれぞれ独立に、炭素数1～40のアルキル基又は炭素数6～20のアリール基を表す。

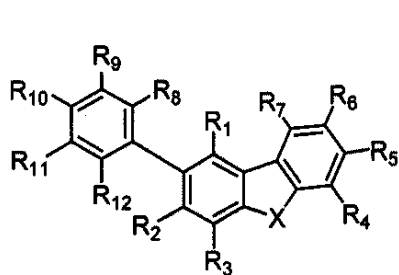
ただし、R₂及びR₇のうち少なくとも1つは、それぞれ独立に、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合芳香族環、置換基を有してもよいナフチル基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールゲルマニウム基又は置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルゲルマニウム基である。また、R₂及びR₇はアミノ基ではない。

20

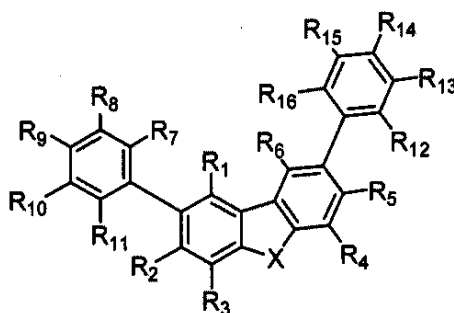
【0016】

本発明は、下記一般式(2)又は(3)で表される有機EL素子用材料を提供する。

【化5】



(2)



(3)

30

一般式(2)及び(3)におけるR₁～R₁₆は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数3～20の複素環基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルコキシ基、置換基を有してもよい炭素数6～40の非縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～12の縮合アリール基、置換基を有してもよい炭素数12～40の縮合非縮合混合アリール基、置換基を有してもよい炭素数6～20のアリールオキシ基、置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基、置換基を有してもよい炭素数2～40のアルケニル基、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数7～60のアラルキルアミノ基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールシリル基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルシリル基、置換基を有してもよい炭素数3～20のアルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアリールゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルゲルマニウム基、置換基を有してもよい炭素数7～40のケトアリール基、置換基を有してもよい炭素数1～40のハロゲン化アルキル基又はシアノ基である。

40

一般式(2)及び(3)におけるXは、硫黄原子、酸素原子、Si、R_a、R_bで表される置

50

換珪素原子、又はGe、R_c、R_dで表される置換ゲルマニウム基を表し、R_a、R_b、R_c及びR_dはそれぞれ独立に、炭素数1～40のアルキル基又は炭素数6～20のアリール基を表す。

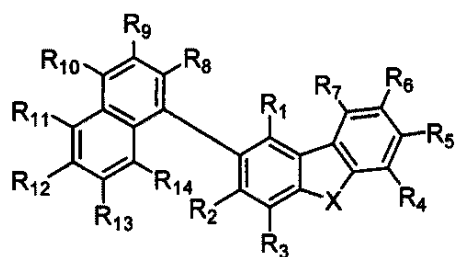
ただし、一般式(2)におけるR₁₀、及び一般式(3)におけるR₉及びR₁₄はアミノ基でない。また、一般式(2)におけるR₈及びR₁₂のうち少なくとも1つは水素原子である。

【0017】

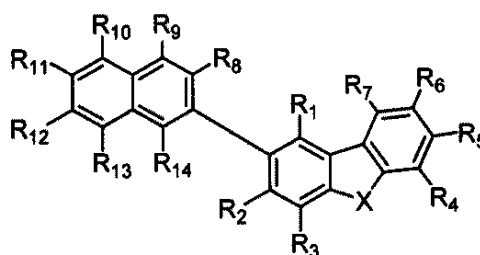
前記一般式(2)で表される有機EL素子用材料が、下記一般式(4)又は(5)で表される化合物であると好ましい。

【化6】

10



(4)



(5)

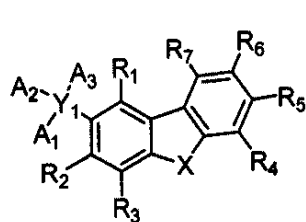
20

一般式(4)及び(5)におけるR₁～R₁₄はそれぞれ独立に、前記一般式(2)及び(3)におけるR₁～R₁₆と同じである。また、一般式(4)及び(5)におけるXも前記一般式(2)におけるものと同じである。

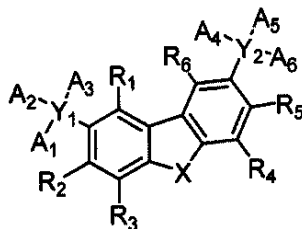
【0018】

本発明は、下記一般式(6)又は(7)で表される有機EL素子用材料を提供する。

【化7】



(6)



(7)

30

一般式(6)及び(7)におけるR₁～R₇はそれぞれ独立に、前記一般式(2)及び(3)におけるR₁～R₁₆と同じである。また、一般式(6)及び(7)におけるXも前記一般式(2)及び(3)におけるものと同じである。

一般式(6)及び(7)におけるY₁及びY₂は、それぞれ独立に珪素原子又はゲルマニウム原子を表す。A₁～A₆は、それぞれ独立に、置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基、置換基を有してもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有してもよい炭素数7～20のアラルキル基を表す。

40

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料は、一般式(1)においてR₁～R₈のうち少なくとも一つがジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、カルバゾール、シラフルオレン、ゲルマフルオレン又はフルオレンから導かれる一価の基である化合物からなると好ましい。

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料は、一般式(1)においてR₁及び/又はR₇がジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、カルバゾール、シラフルオレン、ゲルマフルオレン又はフルオレンから導かれる一価の基である化合物からなると好ましい。

【0019】

50

一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ のハロゲン原子としては、例えば、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素等が挙げられる。

$R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有してもよい炭素数1～40のアルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*s*-ブチル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、*n*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、*n*-ノニル基、*n*-デシル基、*n*-ウンデシル基、*n*-ドデシル基、*n*-トリデシル基、*n*-テトラデシル基、*n*-ペンタデシル基、*n*-ヘキサデシル基、*n*-ヘプタデシル基、*n*-オクタデシル基、ネオペンチル基、1-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基、3-メチルペンチル基、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1, 2-ジヒドロキシエチル基、1, 3-ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3-ジヒドロキシ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1, 2-ジクロロエチル基、1, 3-ジクロロイソプロピル基、2, 3-ジクロロ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリクロロプロピル基、ブロモメチル基、1-ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブromo-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2-ジヨードエチル基、1, 3-ジヨードイソプロピル基、2, 3-ジヨード-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1-アミノエチル基、2-アミノエチル基、2-アミノイソブチル基、1, 2-ジアミノエチル基、1, 3-ジアミノイソプロピル基、2, 3-ジアミノ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1, 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロエチル基、1, 2-ジニトロエチル基、2, 3-ジニトロ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリニトロプロピル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロオクチル基、3, 5-テトラメチルシクロヘキシル基等が挙げられる。

【0020】

これらの中でも好ましくは、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*s*-ブチル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、*n*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、*n*-ノニル基、*n*-デシル基、*n*-ウンデシル基、*n*-ドデシル基、*n*-トリデシル基、*n*-テトラデシル基、*n*-ペンタデシル基、*n*-ヘキサデシル基、*n*-ヘプタデシル基、*n*-オクタデシル基、ネオペンチル基、1-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基、シクロヘキシル基、シクロオクチル基、3, 5-テトラメチルシクロヘキシル基等が挙げられる。

【0021】

一般式(2)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有してもよい炭素数3～20の複素環基としては、例えば、1-ピロリル基、2-ピロリル基、3-ピロリル基、ピラジニル基、2-ピリジニル基、1-イミダゾリル基、2-イミダゾリル基、1-ピラゾリル基、1-インドリジニル基、2-インドリジニル基、3-インドリジニル基、5-インドリジニル基、6-インドリジニル基、7-インドリジニル基、8-インドリジニル基、2-イミダゾピリジニル基、3-イミダゾピリジニル基、5-イミダゾピリジニル基、6-イミダゾピリジニル基、7-イミダゾピリジニル基、8-イミダゾピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、1-インドリル基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インドリル基、5-インドリル基、6-インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、2-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル基、2-フリル基

、3-フリル基、2-ベンゾフラニル基、3-ベンゾフラニル基、4-ベンゾフラニル基、5-ベンゾフラニル基、6-ベンゾフラニル基、7-ベンゾフラニル基、1-イソベンゾフラニル基、3-イソベンゾフラニル基、4-イソベンゾフラニル基、5-イソベンゾフラニル基、6-イソベンゾフラニル基、7-イソベンゾフラニル基、2-キノリル基、3-キノリル基、4-キノリル基、5-キノリル基、6-キノリル基、7-キノリル基、8-キノリル基、1-イソキノリル基、3-イソキノリル基、4-イソキノリル基、5-イソキノリル基、6-イソキノリル基、7-イソキノリル基、8-イソキノリル基、2-キノキサリニル基、5-キノキサリニル基、6-キノキサリニル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、9-カルバゾリル基、 β -カルボリン-1-イル、 β -カルボリン-3-イル、 β -カルボリン-4-イル、 β -カルボリン-5-イル、 β -カルボリン-6-イル、 β -カルボリン-7-イル、 β -カルボリン-8-イル、 β -カルボリン-9-イル、1-フェナントリジニル基、2-フェナントリジニル基、3-フェナントリジニル基、4-フェナントリジニル基、6-フェナントリジニル基、7-フェナントリジニル基、8-フェナントリジニル基、9-フェナントリジニル基、10-フェナントリジニル基、1-アクリジニル基、2-アクリジニル基、3-アクリジニル基、4-アクリジニル基、9-アクリジニル基、1, 7-フェナントロリン-2-イル基、1, 7-フェナントロリン-3-イル基、1, 7-フェナントロリン-4-イル基、1, 7-フェナントロリン-5-イル基、1, 7-フェナントロリン-6-イル基、1, 7-フェナントロリン-8-イル基、1, 7-フェナントロリン-9-イル基、1, 7-フェナントロリン-10-イル基、1, 8-フェナントロリン-2-イル基、1, 8-フェナントロリン-3-イル基、1, 8-フェナントロリン-4-イル基、1, 8-フェナントロリン-5-イル基、1, 8-フェナントロリン-6-イル基、1, 8-フェナントロリン-7-イル基、1, 8-フェナントロリン-9-イル基、1, 8-フェナントロリン-10-イル基、1, 9-フェナントロリン-2-イル基、1, 9-フェナントロリン-3-イル基、1, 9-フェナントロリン-4-イル基、1, 9-フェナントロリン-5-イル基、1, 9-フェナントロリン-6-イル基、1, 9-フェナントロリン-7-イル基、1, 9-フェナントロリン-8-イル基、1, 9-フェナントロリン-10-イル基、1, 10-フェナントロリン-2-イル基、1, 10-フェナントロリン-3-イル基、1, 10-フェナントロリン-4-イル基、1, 10-フェナントロリン-5-イル基、2, 9-フェナントロリン-1-イル基、2, 9-フェナントロリン-3-イル基、2, 9-フェナントロリン-4-イル基、2, 9-フェナントロリン-5-イル基、2, 9-フェナントロリン-6-イル基、2, 9-フェナントロリン-7-イル基、2, 9-フェナントロリン-8-イル基、2, 9-フェナントロリン-10-イル基、2, 8-フェナントロリン-1-イル基、2, 8-フェナントロリン-3-イル基、2, 8-フェナントロリン-4-イル基、2, 8-フェナントロリン-5-イル基、2, 8-フェナントロリン-6-イル基、2, 8-フェナントロリン-7-イル基、2, 8-フェナントロリン-9-イル基、2, 8-フェナントロリン-10-イル基、2, 7-フェナントロリン-1-イル基、2, 7-フェナントロリン-3-イル基、2, 7-フェナントロリン-4-イル基、2, 7-フェナントロリン-5-イル基、2, 7-フェナントロリン-6-イル基、2, 7-フェナントロリン-8-イル基、2, 7-フェナントロリン-9-イル基、2, 7-フェナントロリン-10-イル基、1-フェナジニル基、2-フェナジニル基、1-フェノチアジニル基、2-フェノチアジニル基、3-フェノチアジニル基、4-フェノチアジニル基、10-フェノチアジニル基、1-フェノキサジニル基、2-フェノキサジニル基、3-フェノキサジニル基、4-フェノキサジニル基、10-フェノキサジニル基、2-オキサゾリル基、4-オキサゾリル基、5-オキサゾリル基、2-オキサジアゾリル基、5-オキサジアゾリル基、3-フラザニル基、2-チエニル基、3-チエニル基、2-メチルピロール-1-イル基、2-メチルピロール-3-イル基、2-メチルピロール-4-イル基、2-メチルピロール-5-イル基、3-メチルピロール-1-イル基、3-メチルピロール-2-イル基、3-メチルピロール-4-イル基、3-メチルピロール-5-イル基、2-*t*-ブチルピロール-4-イル基、3-

(2-フェニルプロピル)ピロール-1-イル基、2-メチル-1-インドリル基、4-メチル-1-インドリル基、2-メチル-3-インドリル基、4-メチル-3-インドリル基、2-*t*-ブチル-1-インドリル基、4-*t*-ブチル-1-インドリル基、2-*t*-ブチル-3-インドリル基、4-*t*-ブチル-3-インドリル基、1-ジベンゾフラニル基、2-ジベンゾフラニル基、3-ジベンゾフラニル基、4-ジベンゾフラニル基、1-ジベンゾチオフェニル基、2-ジベンゾチオフェニル基、3-ジベンゾチオフェニル基、4-ジベンゾチオフェニル基、1-シラフルオレニル基、2-シラフルオレニル基、3-シラフルオレニル基、4-シラフルオレニル基、1-ゲルマフルオレニル基、2-ゲルマフルオレニル基、3-ゲルマフルオレニル基、4-ゲルマフルオレニル基等が挙げられる。

【0022】

10

これらの中でも好ましくは、2-ピリジニル基、1-インドリジニル基、2-インドリジニル基、3-インドリジニル基、5-インドリジニル基、6-インドリジニル基、7-インドリジニル基、8-インドリジニル基、2-イミダゾピリジニル基、3-イミダゾピリジニル基、5-イミダゾピリジニル基、6-イミダゾピリジニル基、7-イミダゾピリジニル基、8-イミダゾピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、1-インドリル基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インドリル基、5-インドリル基、6-インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、2-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、9-カルバゾリル基、1-ジベンゾフラニル基、2-ジベンゾフラニル基、3-ジベンゾフラニル基、4-ジベンゾフラニル基、1-ジベンゾチオフェニル基、2-ジベンゾチオフェニル基、3-ジベンゾチオフェニル基、4-ジベンゾチオフェニル基、1-シラフルオレニル基、2-シラフルオレニル基、3-シラフルオレニル基、4-シラフルオレニル基、1-ゲルマフルオレニル基、2-ゲルマフルオレニル基、3-ゲルマフルオレニル基、4-ゲルマフルオレニル基等が挙げられる。

20

一般式(1)における $R_1 \sim R_8$ である置換基を有しても良い炭素数3~20のピリジン環でない複素環基としては、前記複素環基の例から2-ピリジニル基、3-ピリジニル基及び4-ピリジニル基を除いたものであり、好ましい例も同様である。

【0023】

一般式(1)~(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有してもよい炭素数1~40のア

30

【0024】

一般式(1)~(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有しても良い炭素数6~40の非縮合アリール基としては、例えば、フェニル基、2-ビフェニルイル基、3-ビフェニルイル基、4-ビフェニルイル基、*p*-ターフェニル-4-イル基、*p*-ターフェニル-3-イル基、*p*-ターフェニル-2-イル基、*m*-ターフェニル-4-イル基、*m*-ターフェニル-3-イル基、*m*-ターフェニル-2-イル基、*o*-トリル基、*m*-トリル基、*p*-トリル基、*p*-*t*-ブチルフェニル基、*p*-(2-フェニルプロピル)フェニル基、4'-メチルビフェニルイル基、4''-*t*-ブチル-*p*-ターフェニル-4-イル基、*o*-クメニル基、*m*-クメニル基、*p*-クメニル基、2,3-キシリル基、3,4-キシリル基、2,5-キシリル基、メシチル基、*m*-クウォーターフェニル基等が挙げられる。

40

これらの中でも好ましくは、フェニル基、2-ビフェニルイル基、3-ビフェニルイル基、4-ビフェニルイル基、*m*-ターフェニル-4-イル基、*m*-ターフェニル-3-イル基、*m*-ターフェニル-2-イル基、*p*-トリル基、3,4-キシリル基、*m*-クウォーターフェニル-2-イル基等が挙げられる。

一般式(1)~(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有しても良い炭素数6~12の縮合アリール基の例としては、1-ナフチル基、2-ナフチル基が挙げられる。

一般式(1)~(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有しても良い炭素数12~40の縮合非縮合混合アリール基としては前記置換基を有しても良い炭素数6~12の縮合アリ

50

ール基と前記置換基を有しても良い炭素数6～40の非縮合アリール基との組合せによる基が挙げられる。

【0025】

一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有しても良い炭素数6～20のアリールオキシ基は $-OAr$ と表される基であり、 Ar の具体例としては、前記非縮合アリール基で説明したものと同様のものが挙げられ、好ましい例も同様である。

【0026】

一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有しても良い炭素数7～20のアラルキル基としては、例えば、ベンジル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-*t*-ブチル基、 α -ナフチルメチル基、1- α -ナフチルエチル基、2- α -ナフチルエチル基、1- α -ナフチルイソプロピル基、2- α -ナフチルイソプロピル基、 β -ナフチルメチル基、1- β -ナフチルエチル基、2- β -ナフチルエチル基、1- β -ナフチルイソプロピル基、2- β -ナフチルイソプロピル基、1-ピロリルメチル基、2-(1-ピロリル)エチル基、*p*-メチルベンジル基、*m*-メチルベンジル基、*o*-メチルベンジル基、*p*-クロロベンジル基、*m*-クロロベンジル基、*o*-クロロベンジル基、*p*-ブロモベンジル基、*m*-ブロモベンジル基、*o*-ブロモベンジル基、*p*-ヨードベンジル基、*m*-ヨードベンジル基、*o*-ヨードベンジル基、*p*-ヒドロキシベンジル基、*m*-ヒドロキシベンジル基、*o*-ヒドロキシベンジル基、*p*-アミノベンジル基、*m*-アミノベンジル基、*o*-アミノベンジル基、*p*-ニトロベンジル基、*m*-ニトロベンジル基、*o*-ニトロベンジル基、*p*-シアノベンジル基、*m*-シアノベンジル基、*o*-シアノベンジル基、1-ヒドロキシ-2-フェニルイソプロピル基、1-クロロ-2-フェニルイソプロピル基等が挙げられる。

これらの中でも好ましくは、ベンジル基、*p*-シアノベンジル基、*m*-シアノベンジル基、*o*-シアノベンジル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基等が挙げられる。

【0027】

一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有しても良い炭素数2～40のアルケニル基としては、例えば、ビニル基、アリル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、1,3-ブタンジエニル基、1-メチルビニル基、スチリル基、2,2-ジフェニルビニル基、1,2-ジフェニルビニル基、1-メチルアリル基、1,1-ジメチルアリル基、2-メチルアリル基、1-フェニルアリル基、2-フェニルアリル基、3-フェニルアリル基、3,3-ジフェニルアリル基、1,2-ジメチルアリル基、1-フェニル-1-ブテニル基、3-フェニル-1-ブテニル基等が挙げられ、好ましくは、スチリル基、2,2-ジフェニルビニル基、1,2-ジフェニルビニル基等が挙げられる。

【0028】

一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有しても良い1～40のアルキルアミノ基、及び置換基を有しても良い炭素数7～60のアラルキルアミノ基は、 $-NQ_1Q_2$ と表され、 Q_1 及び Q_2 の具体例としては、それぞれ独立に、前記アルキル基、前記アリール基、前記アラルキル基で説明したものと同様のものが挙げられ、好ましい例も同様である。

一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有しても良い炭素数3～20のアルキルシリル基としては、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、*t*-ブチルジメチルシリル基、ビニルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基等が挙げられる。

一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有しても良い炭素数8～40のアリールシリル基としては、トリフェニルシリル基、トリピフェニルシリル基、ジターフェニル-フェニルシリル基、フェニルジメチルシリル基、*t*-ブチルジフェニルシリル基等が挙げられる。

一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有してもよい炭素数8～40のア

ラルキシル基としては、トリベンジルシリル基、ベンジルジメチルシリル基、*t*-ブチルジベンジルシリル基等が挙げられる。

一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有しても良い炭素数3～20のアシルゲルマニウム基としては、トリメチルゲルマニウム基、トリエチルゲルマニウム基、*t*-ブチルジメチルゲルマニウム基、ビニルジメチルゲルマニウム基、プロピルジメチルゲルマニウム基等が挙げられる。

一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有しても良い炭素数8～40のアリールゲルマニウム基としては、トリフェニルゲルマニウム基、トリビフェニルゲルマニウム基、ジターフェニルフェニルゲルマニウム基、フェニルジメチルゲルマニウム基、*t*-ブチルジフェニルゲルマニウム基等が挙げられる。 10

一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有してもよい炭素数8～40のアラルキルゲルマニウム基としては、トリベンジルゲルマニウム基、ベンジルジメチルゲルマニウム基、*t*-ブチルジベンジルゲルマニウム基等が挙げられる。

一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有しても良い炭素数7～40のケトアリール基は $-COAr_2$ と表され、 Ar_2 の具体例としては、前記アリール基で説明したものと同様のものが挙げられ、好ましい例も同様である。

一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ の置換基を有しても良い炭素数1～40のハロゲン化アルキル基としては、例えば、前記アルキル基の少なくとも一個の水素原子をハロゲン原子で置換したものが挙げられ、好ましい例も同様である。

また、一般式(1)～(7)における $R_1 \sim R_{16}$ が複数あった場合に形成される環状構造としては、ベンゼン環等の不飽和6員環の他、飽和もしくは不飽和の5員環又は7員環構造等が挙げられる。 20

【0029】

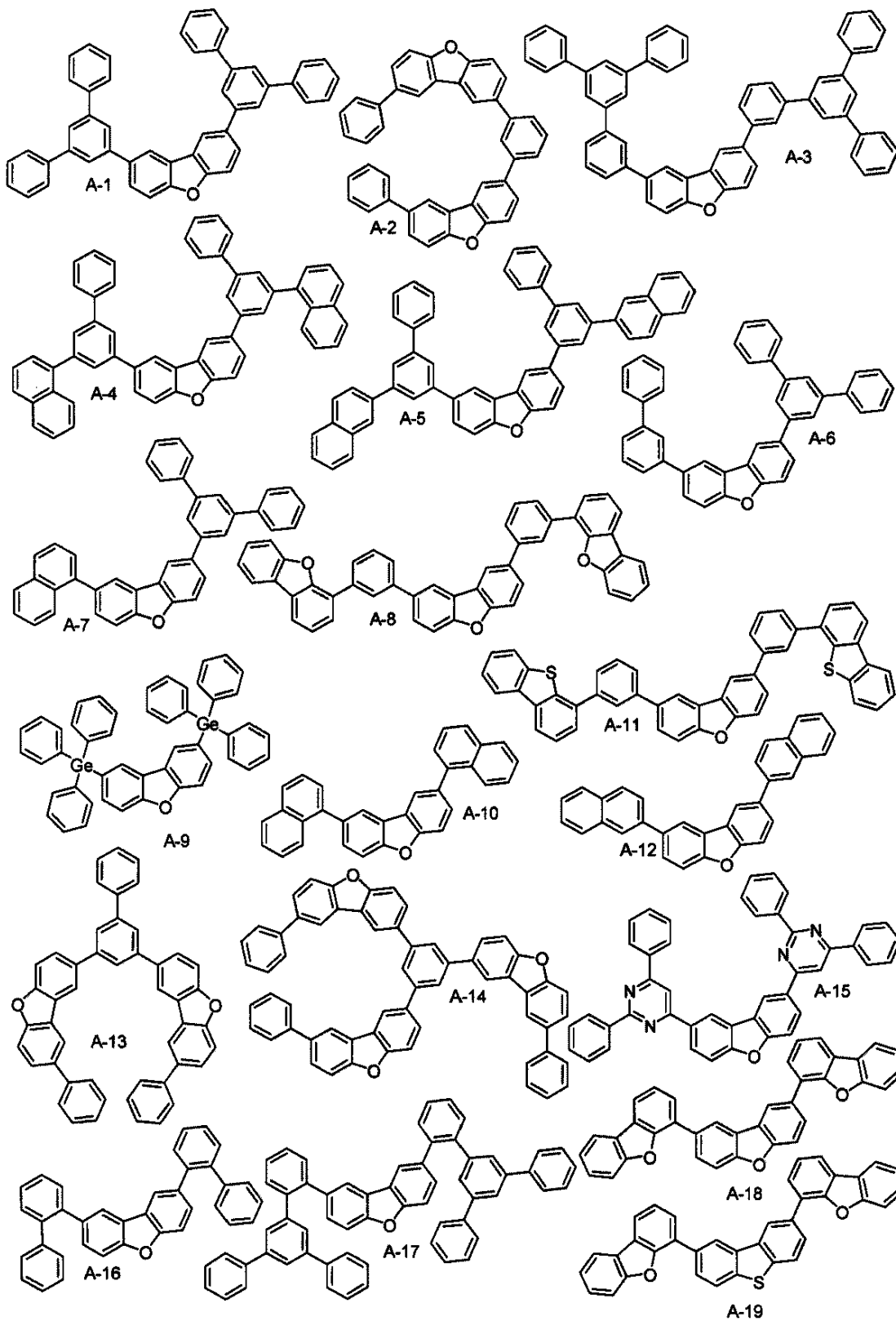
一般式(1)～(7)におけるXである置換珪素原子 SiR_aR_b 及び置換ゲルマニウム GeR_cR_d における R_a 、 R_b 、 R_c 及び R_d である炭素数1～40のアルキル基の例としては、前記アルキル基と同じものが挙げられ、好ましくはメチル基、エチル基、プロピル基及びブチル基である。また、 R_a 、 R_b 、 R_c 及び R_d の炭素数6～20のアリール基としては前記非縮合アリール基と同じものが挙げられ、好ましくはフェニル基、*p*-トリル基、4-ビフェニル基である。

【0030】

本発明の前記一般式(1)～(7)のいずれかで表される化合物からなる有機EL素子用材料の具体例を以下に示すが、これら例示化合物に限定されるものではない。ここで、Meはメチル基を表す。

【0031】

【化 8】



10

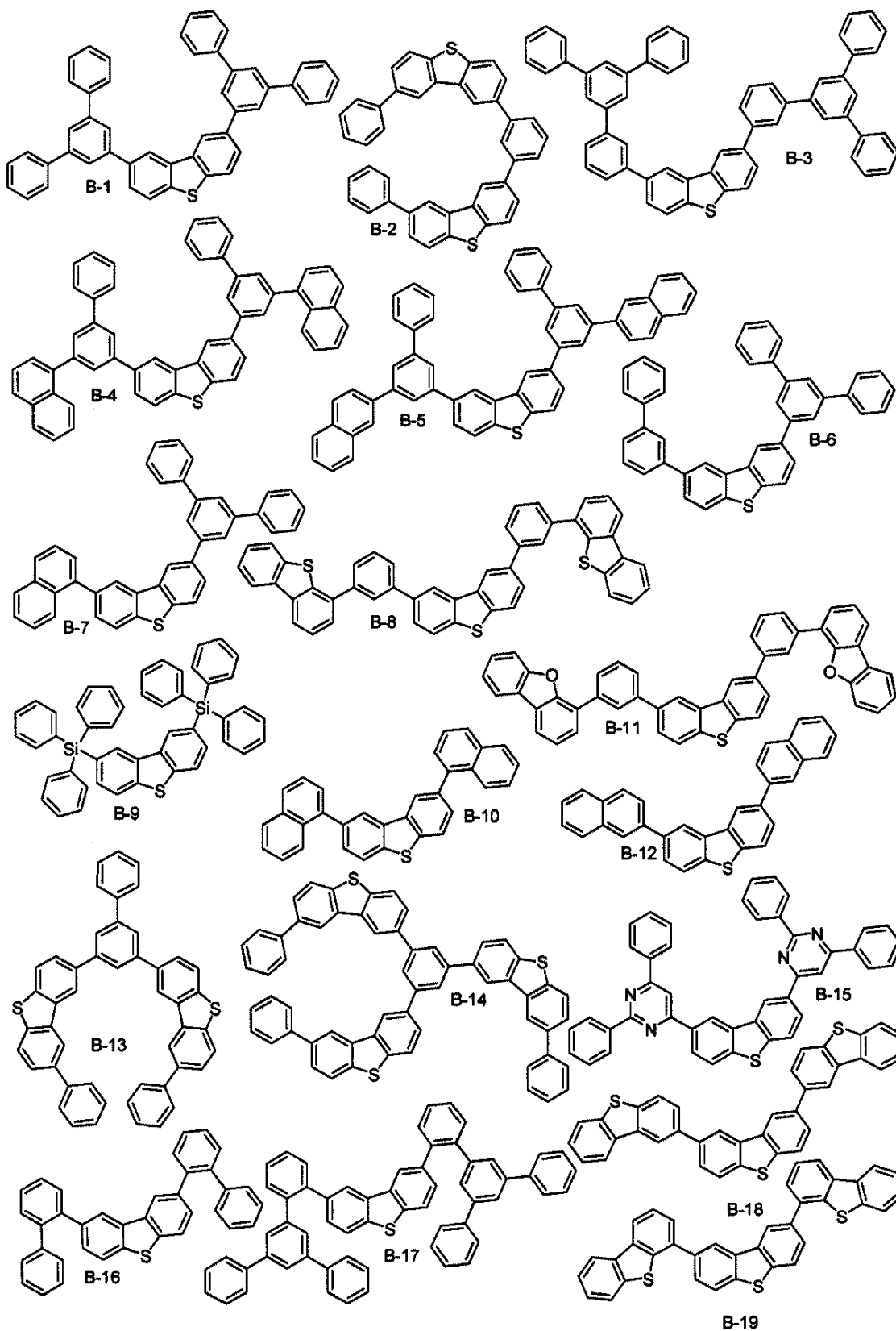
20

30

40

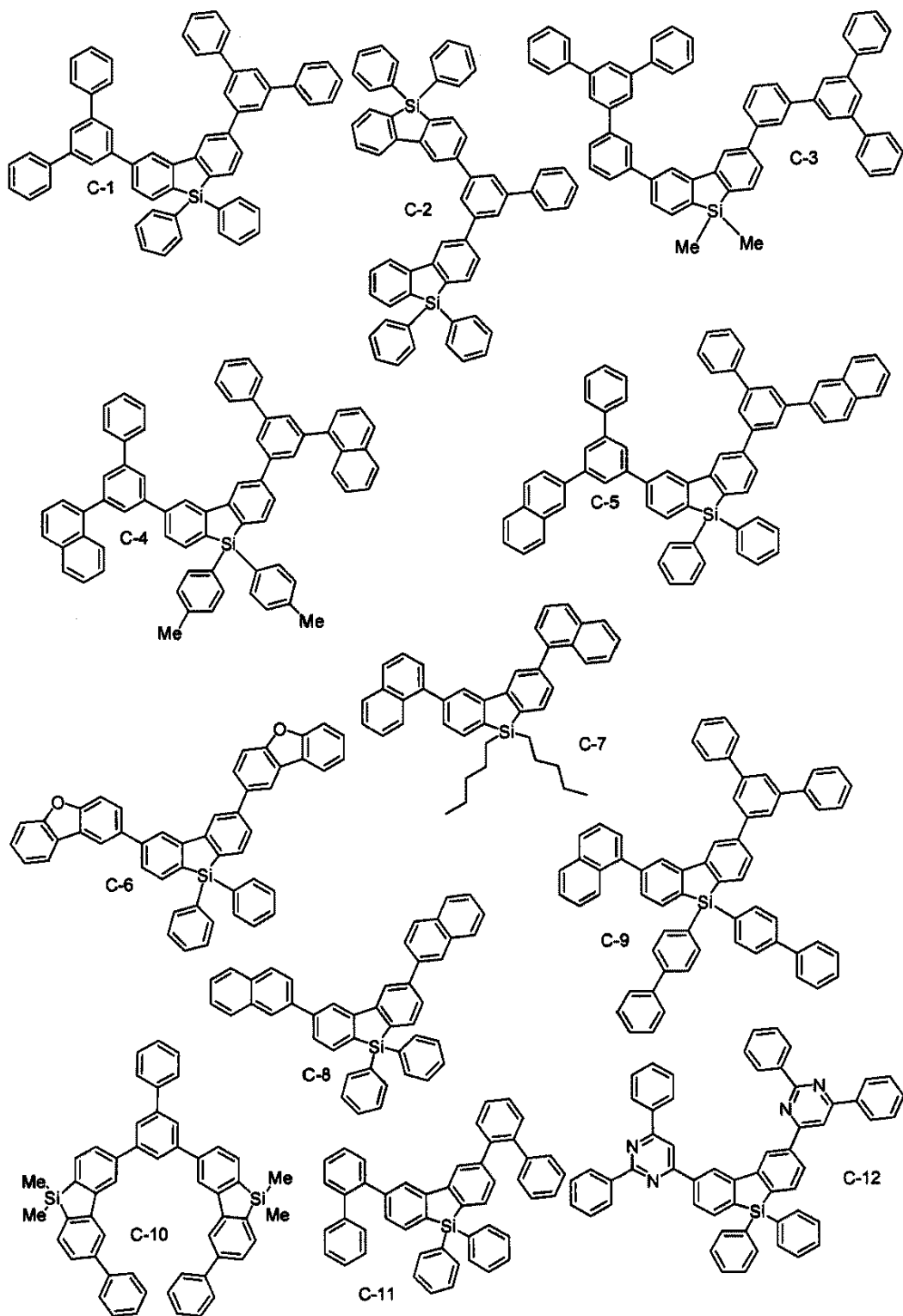
【 0 0 3 2 】

【化 9】



【 0 0 3 3 】

【化 1 0】



10

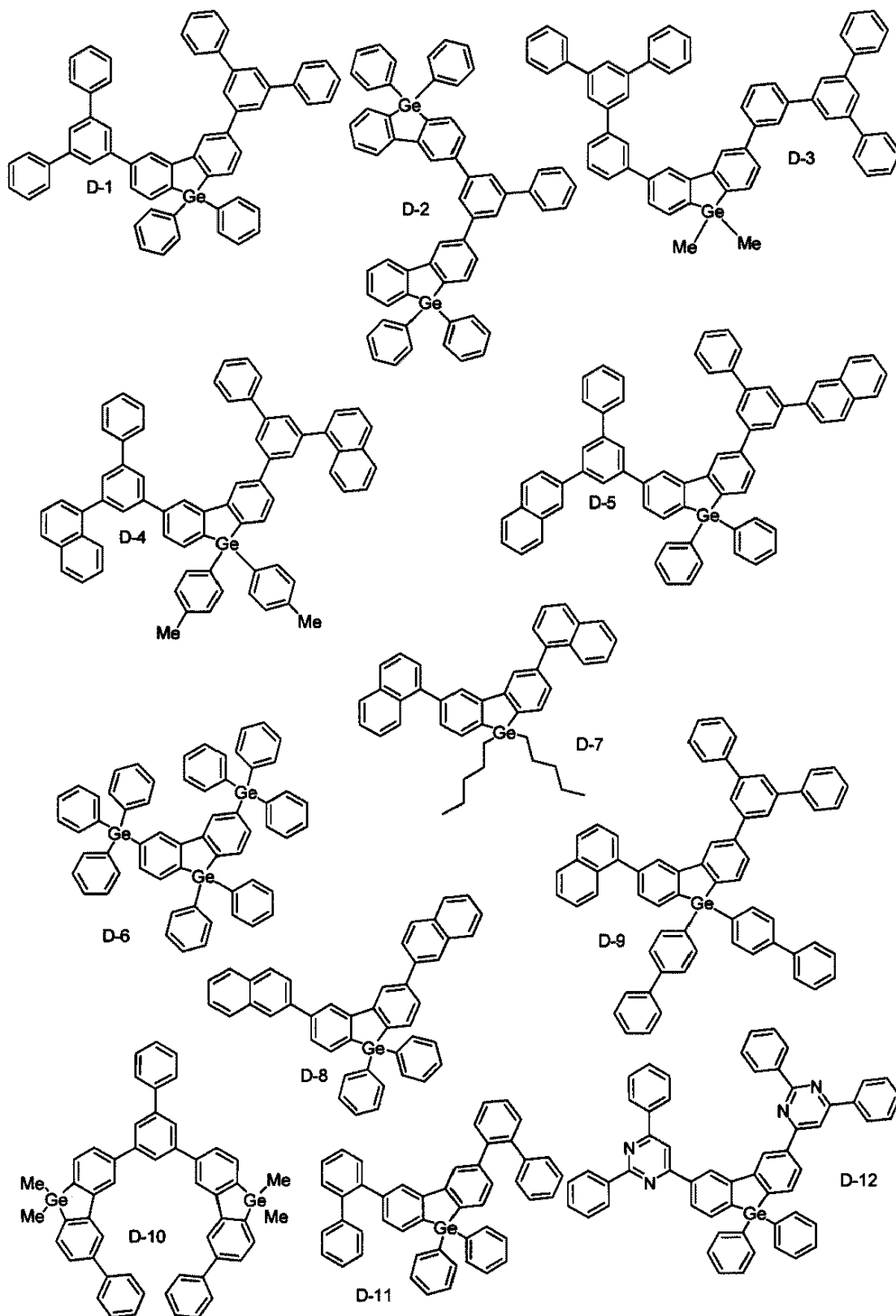
20

30

40

【 0 0 3 4 】

【化 1 1】



10

20

30

40

【0035】

また、本発明の有機EL素子用材料は、有機EL素子の発光層に含まれるホスト材料であると好ましい。

【0036】

50

次に、本発明の有機EL素子について説明する。

本発明の有機EL素子は、陰極と陽極間に少なくとも発光層を有する一層又は複数層からなる有機薄膜層が挟持されている有機EL素子において、該有機薄膜層の少なくとも一層が、本発明の有機EL素子用材料を含有する。

多層型の有機EL素子の構造としては、例えば、陽極／正孔輸送層（正孔注入層）／発光層／陰極、陽極／発光層／電子輸送層（電子注入層）／陰極、陽極／正孔輸送層（正孔注入層）／発光層／電子輸送層（電子注入層）／陰極、陽極／正孔輸送層（正孔注入層）／発光層／正孔障壁層／電子輸送層（電子注入層）／陰極、等の多層構成で積層したものが挙げられる。

【0037】

10

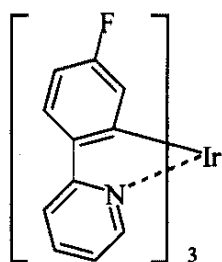
前記発光層は、ホスト材料とりん光性の発光材料からなり、該ホスト材料が前記有機EL素子用材料からなると好ましい。

りん光性の発光材料としては、りん光量子収率が高く、発光素子の外部量子効率をより向上させることができるという点で、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等の金属錯体が好ましく、イリジウム錯体及び白金錯体がより好ましく、オルトメタル化イリジウム錯体が最も好ましい。オルトメタル化金属錯体のさらに好ましい形態としては、以下に示すイリジウム錯体が好ましい。

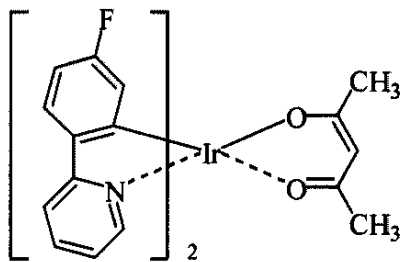
【0038】

【化 1 2】

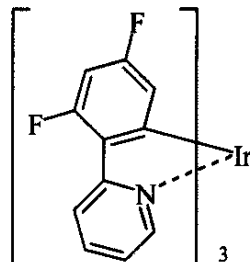
(K-1)



(K-2)

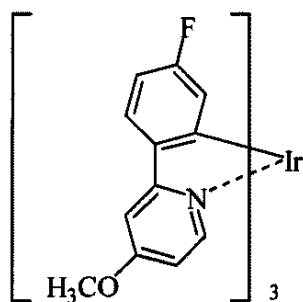


(K-3)

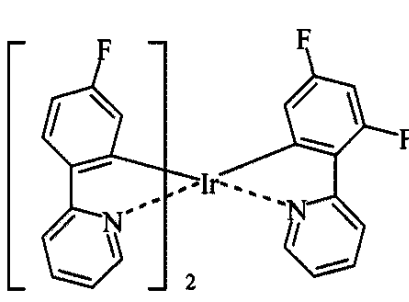


10

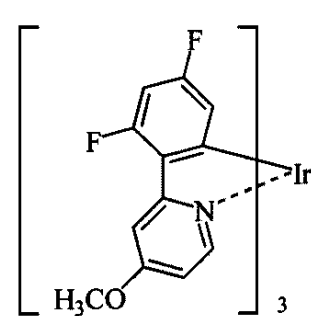
(K-4)



(K-5)

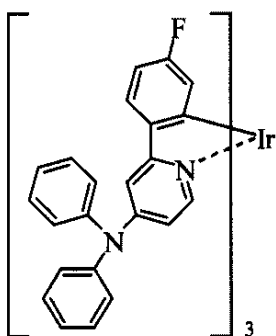


(K-6)

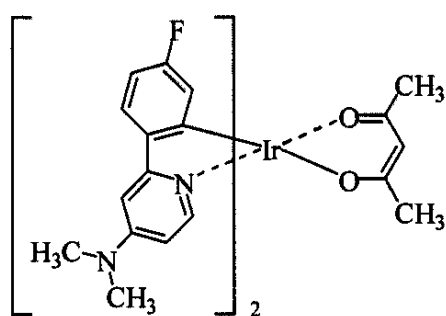


20

(K-7)

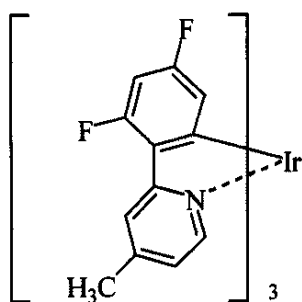


(K-8)



30

(K-9)

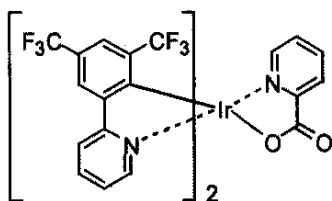


40

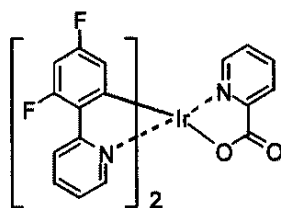
【 0 0 3 9】

【化 1 3】

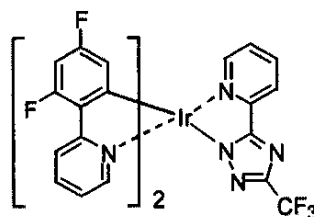
(K-10)



(K-11)

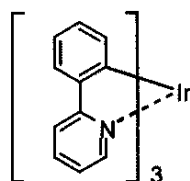


(K-12)

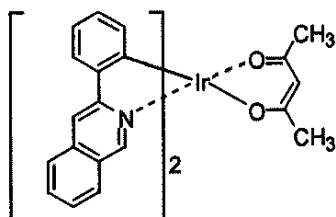


10

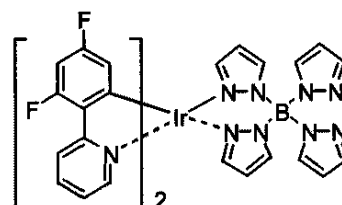
(K-13)



(K-14)



(K-15)

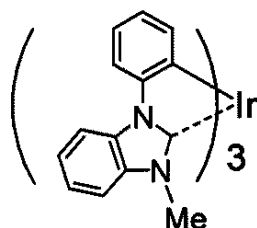


20

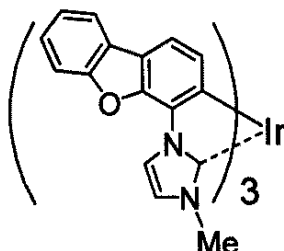
【 0 0 4 0】

【化 1 4】

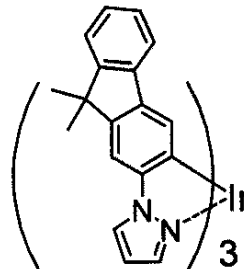
(K-16)



(K-17)

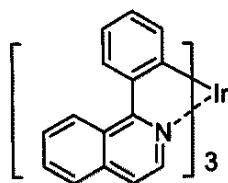


(K-18)



30

(K-19)



【 0 0 4 1】

本発明の有機EL素子は、前記発光層がホスト材料とりん光性の発光材料を含有し、りん光性の発光材料が金属—カルベン炭素結合を有する発光材料であると好ましい。 40

本発明の有機EL素子は、前記有機EL素子用材料が、有機EL素子の発光層に含まれるホスト材料であると好ましい。

本発明の有機EL素子は、前記有機EL素子用材料が、有機EL素子の正孔輸送層に含まれる材料であると好ましい。

本発明の有機EL素子は、前記有機EL素子用材料が、有機EL素子の電子輸送層又は正孔障壁層に含まれる材料であると好ましい。

【 0 0 4 2】

本発明の有機EL素子は、陰極と有機薄膜層との界面領域に還元性ドーパントが添加されてなると好ましい。 50

前記還元性ドーパントとしては、アルカリ金属、アルカリ金属錯体、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属錯体、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属錯体、及び希土類金属化合物等から選ばれた少なくとも一種類が挙げられる。

【0043】

前記アルカリ金属としては、Na（仕事関数：2.36 eV）、K（仕事関数：2.28 eV）、Rb（仕事関数：2.16 eV）、Cs（仕事関数：1.95 eV）等が挙げられ、仕事関数が2.9 eV以下のものが特に好ましい。これらのうち好ましくはK、Rb、Cs、さらに好ましくはRb又はCsであり、最も好ましくはCsである。

前記アルカリ土類金属としては、Ca（仕事関数：2.9 eV）、Sr（仕事関数：2.0～2.5 eV）、Ba（仕事関数：2.52 eV）等が挙げられ、仕事関数が2.9 eV以下のものが特に好ましい。

前記希土類金属としては、Sc、Y、Ce、Tb、Yb等が挙げられ、仕事関数が2.9 eV以下のものが特に好ましい。

以上の金属のうち好ましい金属は、特に還元能力が高く、電子注入域への比較的少量の添加により、有機EL素子における発光輝度の向上や長寿命化が可能である。

【0044】

前記アルカリ金属化合物としては、 Li_2O 、 Cs_2O 、 K_2O 等のアルカリ酸化物、LiF、NaF、CsF、KF等のアルカリハロゲン化物等が挙げられ、LiF、 Li_2O 、NaFのアルカリ酸化物又はアルカリフッ化物が好ましい。

前記アルカリ土類金属化合物としては、 BaO 、 SrO 、 CaO 及びこれらを混合した $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ （ $0 < x < 1$ ）や、 $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ （ $0 < x < 1$ ）等が挙げられ、 BaO 、 SrO 、 CaO が好ましい。

前記希土類金属化合物としては、 YbF_3 、 ScF_3 、 ScO_3 、 Y_2O_3 、 Ce_2O_3 、 GdF_3 、 TbF_3 等が挙げられ、 YbF_3 、 ScF_3 、 TbF_3 が好ましい。

【0045】

前記アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体、希土類金属錯体としては、それぞれ金属イオンとしてアルカリ金属イオン、アルカリ土類金属イオン、希土類金属イオンの少なくとも一つ含有するものであれば特に限定はない。また、配位子にはキノリノール、ベンゾキノリノール、アクリジノール、フェナントリジノール、ヒドロキシフェニルオキサゾール、ヒドロキシフェニルチアゾール、ヒドロキシジアリールオキサジアゾール、ヒドロキシジアリールチアジアゾール、ヒドロキシフェニルピリジン、ヒドロキシフェニルベンゾイミダゾール、ヒドロキシベンゾトリアゾール、ヒドロキシフルボラン、ビピリジル、フェナントロリン、フタロシアニン、ポルフィリン、シクロペンタジエン、 β -ジケトン類、アゾメチン類、及びそれらの誘導体などが好ましいが、これらに限定されるものではない。

【0046】

還元性ドーパントの添加形態としては、前記界面領域に層状又は島状に形成すると好ましい。形成方法としては、抵抗加熱蒸着法により還元性ドーパントを蒸着しながら、界面領域を形成する発光材料や電子注入材料である有機物を同時に蒸着させ、有機物中に還元ドーパントを分散する方法が好ましい。分散濃度としてはモル比で有機物：還元性ドーパント＝100：1～1：100、好ましくは5：1～1：5である。

還元性ドーパントを層状に形成する場合は、界面の有機層である発光材料や電子注入材料を層状に形成した後に、還元ドーパントを単独で抵抗加熱蒸着法により蒸着し、好ましくは層の厚み0.1～15 nmで形成する。

還元性ドーパントを島状に形成する場合は、界面の有機層である発光材料や電子注入材料を島状に形成した後に、還元ドーパントを単独で抵抗加熱蒸着法により蒸着し、好ましくは島の厚み0.05～1 nmで形成する。

また、本発明の有機EL素子における、主成分と還元性ドーパントの割合としては、モル比で主成分：還元性ドーパント＝5：1～1：5であると好ましく、2：1～1：2であるとさらに好ましい。

【0047】

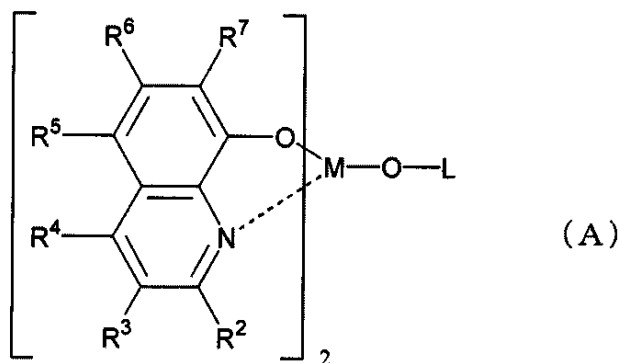
本発明の有機EL素子は、前記発光層と陰極との間に電子注入層を有し、該電子注入層が含窒素環誘導体を主成分として含有すると好ましい。

前記電子注入層に用いる電子輸送材料としては、分子内にヘテロ原子を1個以上含有する芳香族ヘテロ環化合物が好ましく用いられ、特に含窒素環誘導体が好ましい。

【0048】

この含窒素環誘導体としては、例えば、一般式(A)で表されるものが好ましい。

【化15】



10

【0049】

20

$R^2 \sim R^7$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、オキシ基、アミノ基、又は炭素数1～40の炭化水素基であり、これらは置換されていてもよい。

このハロゲン原子の例としては、前記と同様のものが挙げられる。また、置換されていても良いアミノ基の例としては、前記アルキルアミノ基、アリールアミノ基、アラルキルアミノ基と同様のものが挙げられる。

炭素数1～40の炭化水素基としては、置換もしくは無置換のアルキル基、アルケニル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、アリール基、複素環基、アラルキル基、アリールオキシ基、アルコキシカルボニル基等が挙げられる。このアルキル基、アルケニル基、シクロアルキル基、アルコキシ基、アリール基、複素環基、アラルキル基、アリールオキシ基の例としては、前記と同様のものが挙げられ、アルコキシカルボニル基は $-COOY'$ と表され、 Y' の例としては前記アルキル基と同様のものが挙げられる。

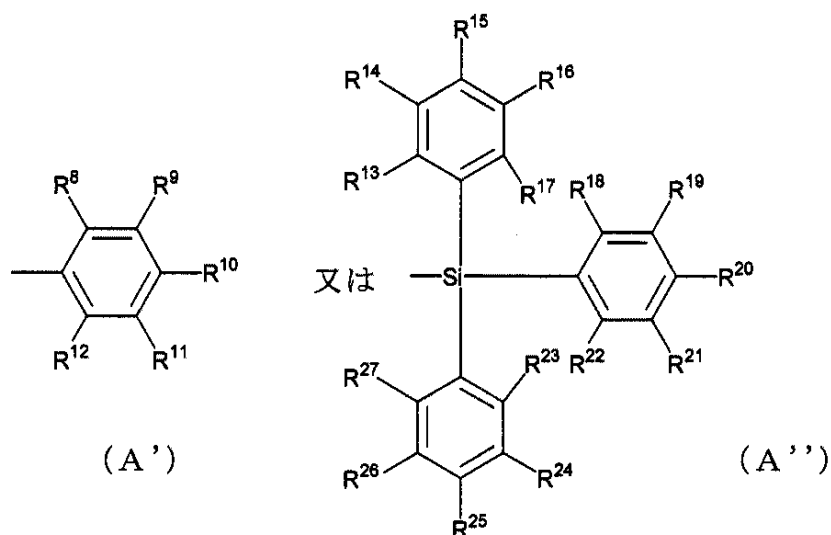
30

【0050】

Mは、アルミニウム(Al)、ガリウム(Ga)又はインジウム(In)であり、Inであると好ましい。

一般式(A)のLは、下記一般式(A')又は(A'')で表される基である。

【化 1 6】



10

(式中、R⁸～R¹²は、それぞれ独立に、水素原子又は置換もしくは無置換の炭素数1～40の炭化水素基であり、互いに隣接する基が環状構造を形成していてもよい。また、R¹³～R²⁷は、それぞれ独立に、水素原子又は置換もしくは無置換の炭素数1～40の炭化水素基であり、互いに隣接する基が環状構造を形成していてもよい。)

【0051】

一般式(A')及び(A'')のR⁸～R¹²及びR¹³～R²⁷が示す炭素数1～40の炭化水素基としては、前記R²～R⁷の具体例と同様のものが挙げられる。

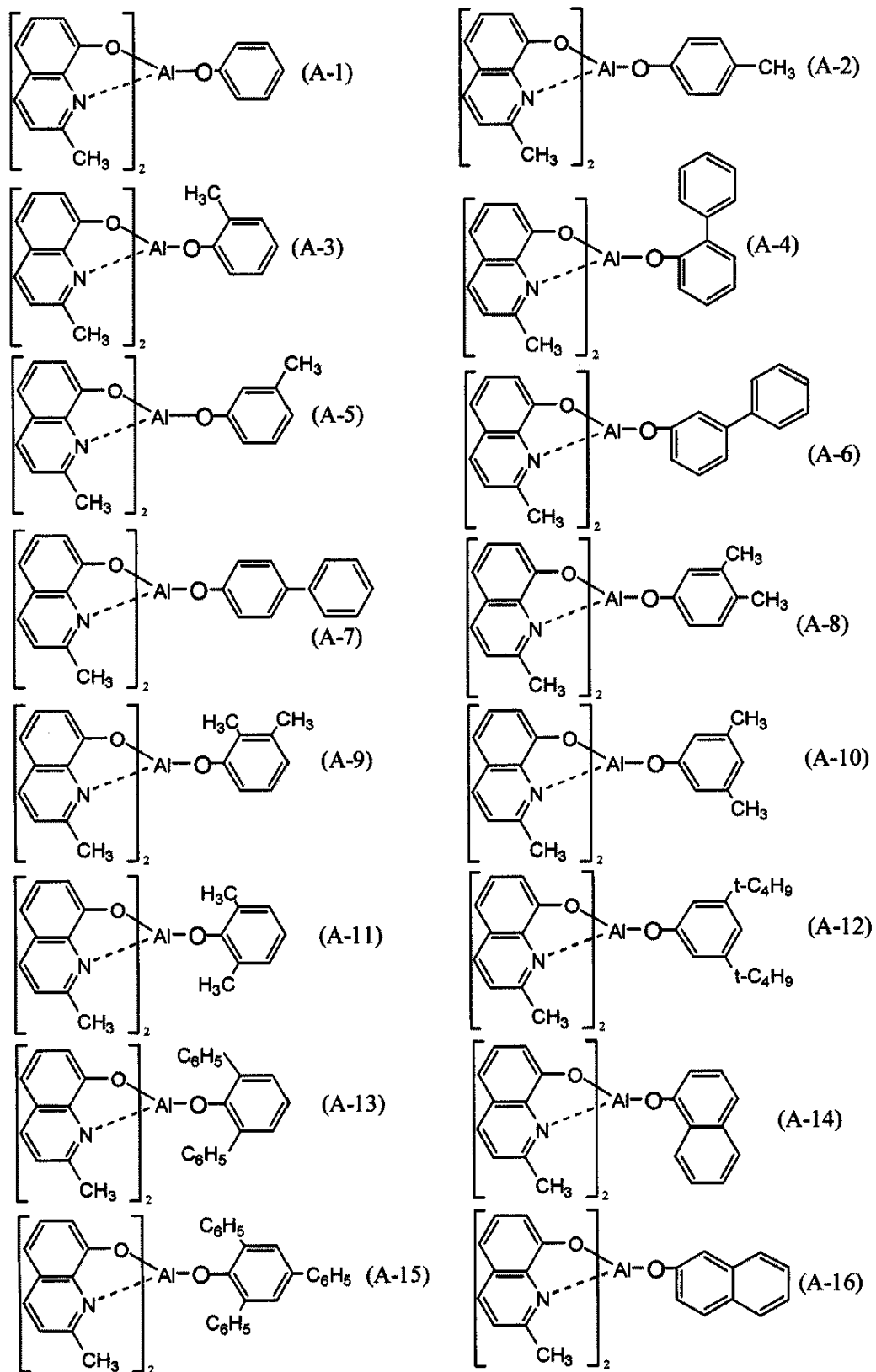
また、前記R⁸～R¹²及びR¹³～R²⁷の互いに隣接する基が環状構造を形成した場合の2価の基としては、テトラメチレン基、ペンタメチレン基、ヘキサメチレン基、ジフェニルメタン-2, 2'-ジイル基、ジフェニルエタン-3, 3'-ジイル基、ジフェニルプロパン-4, 4'-ジイル基等が挙げられる。

【0052】

一般式(A)で表される含窒素環の金属キレート錯体の具体例を以下に示すが、これら例示化合物に限定されるものではない。

30

【化 17】



10

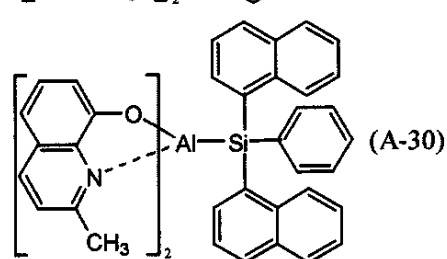
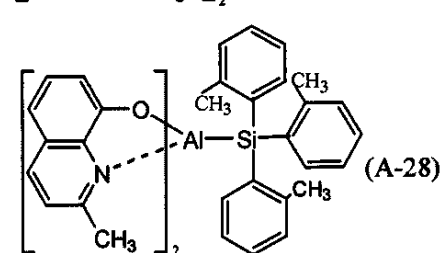
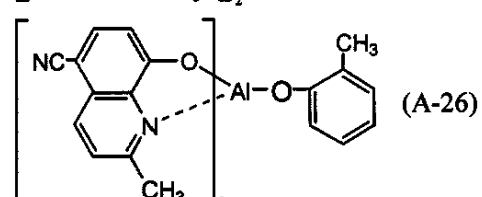
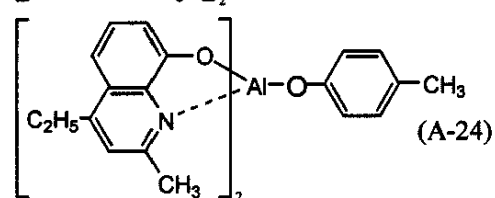
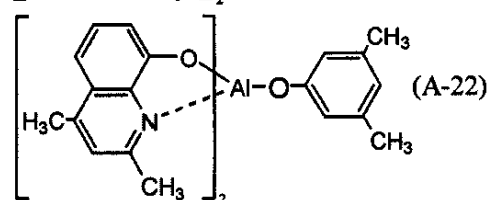
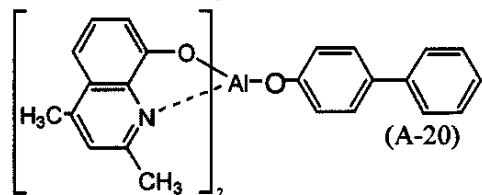
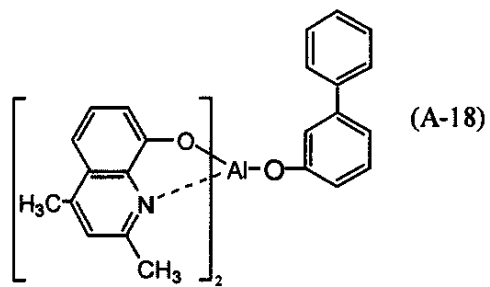
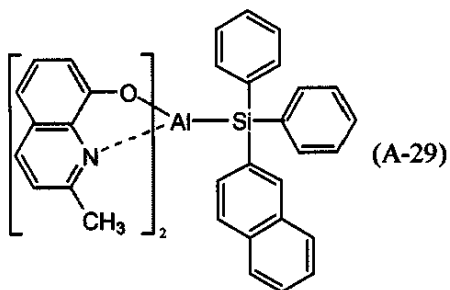
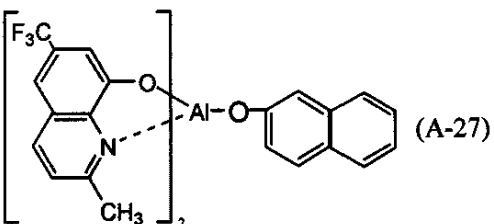
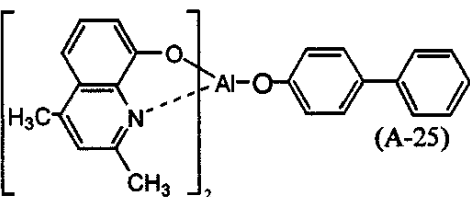
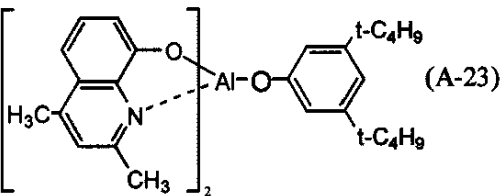
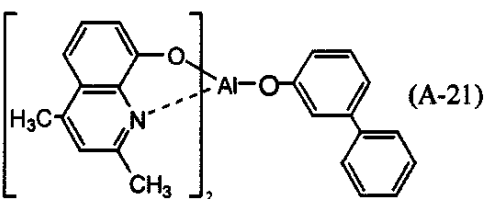
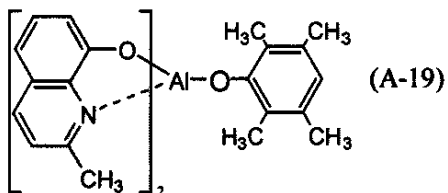
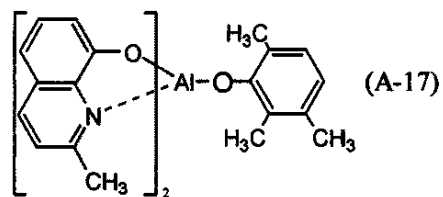
20

30

40

【0053】

【化 1 8】



10

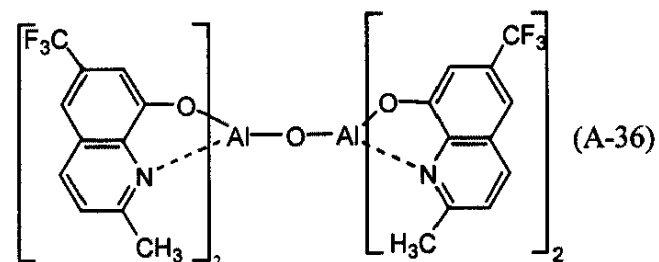
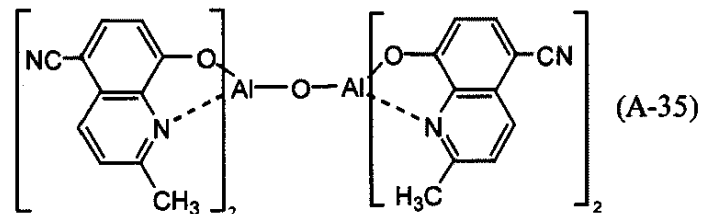
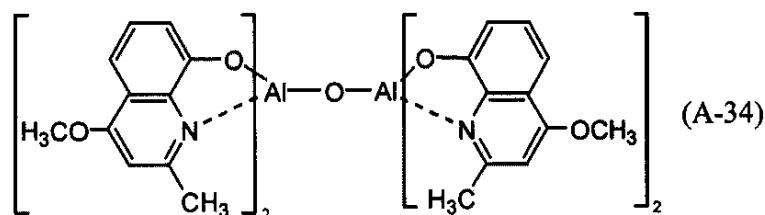
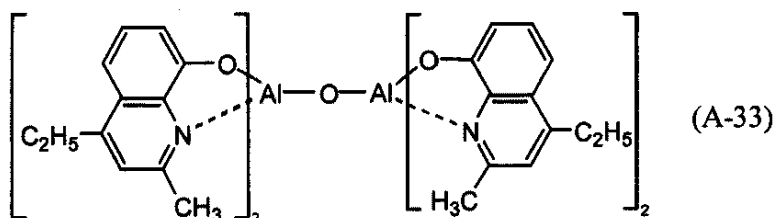
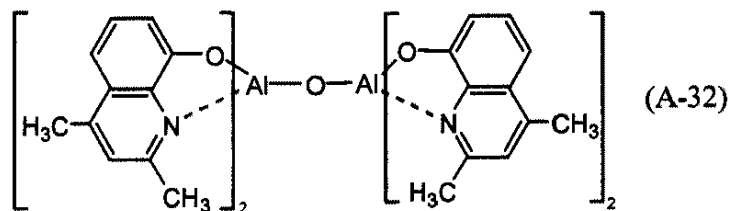
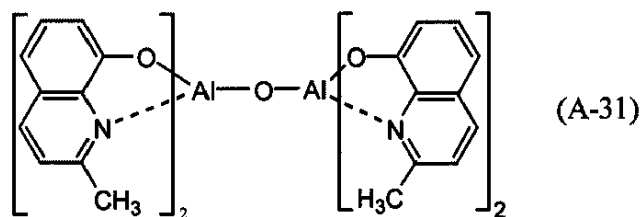
20

30

40

【 0 0 5 4 】

【化 1 9】



【0055】

前記電子注入層の主成分である含窒素環誘導体としては、含窒素5員環誘導体も好ましく、含窒素5員環としては、イミダゾール環、トリアゾール環、テトラゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、オキサトリアゾール環、チアトリアゾール環等が挙げられ、含窒素5員環誘導体としては、ベンゾイミダゾール環、ベンゾトリアゾール環、ピリジノイミダゾール環、ピリミジノイミダゾール環、ピリダジノイミダゾール環であり、特に好ましくは、下記一般式(B)で表されるものである。

【0056】

10

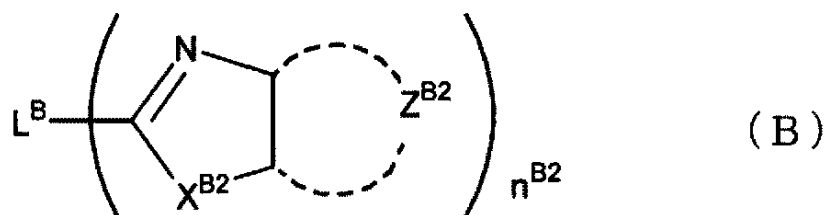
20

30

40

50

【化 2 0】



【0 0 5 7】

10

一般式 (B) 中、 L^B は二価以上の連結基を表し、例えば、炭素、ケイ素、窒素、ホウ素、酸素、硫黄、金属（例えば、バリウム、ベリリウム）、芳香族炭化水素環、芳香族複素環等が挙げられ、これらのうち炭素原子、窒素原子、ケイ素原子、ホウ素原子、酸素原子、硫黄原子、アリール基、芳香族複素環基が好ましく、炭素原子、ケイ素原子、アリール基、芳香族複素環基がさらに好ましい。

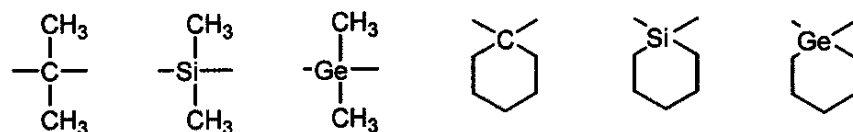
L^B のアリール基及び芳香族複素環基は置換基を有していてもよく、置換基として好ましくはアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アシルオキシ基、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、アリールオキシカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、スルファモイル基、カルバモイル基、アルキルチオ基、アリールチオ基、スルホニル基、ハロゲン原子、シアノ基、芳香族複素環基であり、より好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、芳香族複素環基であり、さらに好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、芳香族複素環基であり、特に好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、芳香族複素環基である。

20

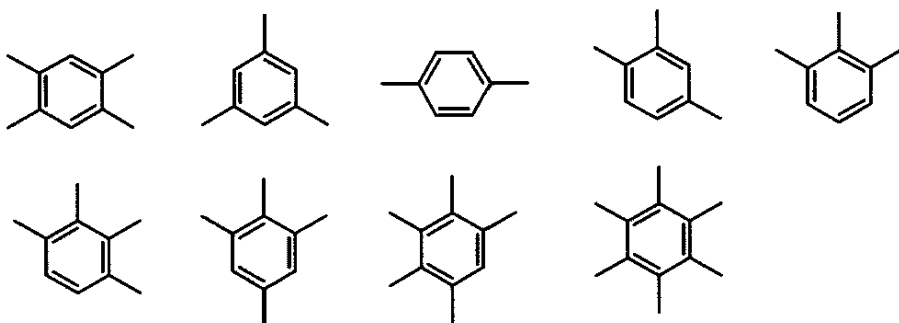
L^B の具体例としては、以下に示すものが挙げられる。

【0 0 5 8】

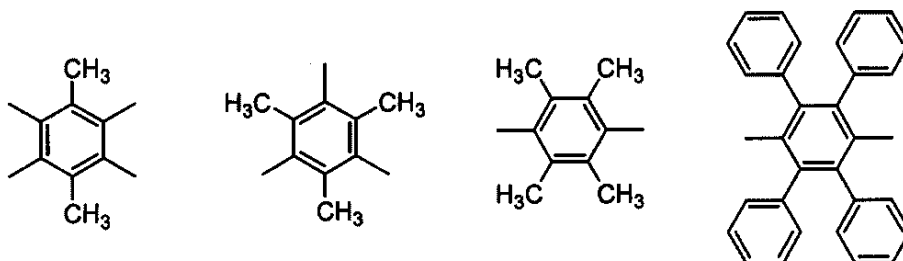
【化 2 1】



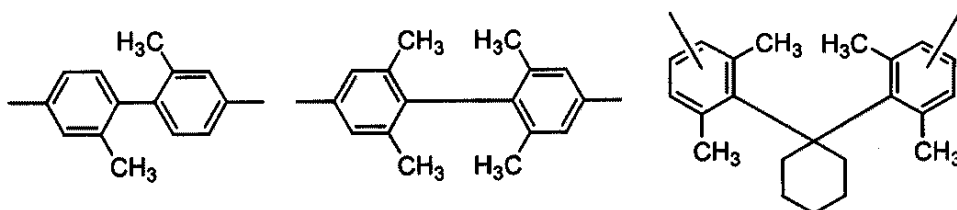
10



20



30



【0059】

一般式 (B) における X^{B^2} は、 $-O-$ 、 $-S-$ 又は $=N-R^{B^2}$ を表す。 R^{B^2} は、水素原子、脂肪族炭化水素基、アリール基又は複素環基を表す。

R^{B^2} の脂肪族炭化水素基は、直鎖、分岐又は環状のアルキル基（好ましくは炭素数 1～20、より好ましくは炭素数 1～12、特に好ましくは炭素数 1～8 のアルキル基であり、例えば、メチル、エチル、イソプロピル、*t*-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、シクロヘキシル等が挙げられる。）
、アルケニル基（好ましくは炭素数 2～20、より好ましくは炭素数 2～12、特に好ましくは炭素数 2～8 のアルケニル基であり、例えば、ビニル、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニル等が挙げられる。）
、アルキニル基（好ましくは炭素数 2～20、より好ましくは炭素数 2～12、特に好ましくは炭素数 2～8 のアルキニル基であり、例えば、プロパルギル、3-ペンチニル等が挙げられる。）であり、アルキル基であると好ましい。

【0060】

R^{B^2} のアリール基は、単環又は縮合環であり、好ましくは炭素数 6～30、より好ましくは炭素数 6～20、さらに好ましくは炭素数 6～12 のアリール基であり、例えば、フ

40

50

エニル、2-メチルフェニル、3-メチルフェニル、4-メチルフェニル、2-メトキシフェニル、3-トリフルオロメチルフェニル、ペンタフルオロフェニル、1-ナフチル、2-ナフチル等が挙げられる。

【0061】

R^{B2} の複素環基は、単環又は縮合環であり、好ましくは炭素数1~20、より好ましくは炭素数1~12、さらに好ましくは炭素数2~10の複素環基であり、好ましくは窒素原子、酸素原子、硫黄原子、セレン原子の少なくとも一つを含む芳香族ヘテロ環基である。この複素環基の例としては、例えば、ピロリジン、ピペリジン、ピペラジン、モルフォリン、チオフェン、セレノフェン、フラン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリダジン、ピリミジン、トリアゾール、トリアジン、インドール、インダゾール、プリン、チアゾリン、チアゾール、チアジアゾール、オキサゾリン、オキサゾール、オキサジアゾール、キノリン、イソキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、プテリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、テトラゾール、ベンゾイミダゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾトリアゾール、テトラザインデン、カルバゾール、アゼピン等が挙げられ、好ましくは、フラン、チオフェン、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、キノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリンであり、より好ましくはフラン、チオフェン、ピリジン、キノリンであり、さらに好ましくはキノリンである。

10

【0062】

R^{B2} で表される脂肪族炭化水素基、アリール基及び複素環基は置換基を有していてもよく、置換基としては前記 L^B で表される基の置換基として挙げたものと同様であり、また好ましい置換基も同様である。

20

R^{B2} として好ましくは脂肪族炭化水素基、アリール基又は複素環基であり、より好ましくは脂肪族炭化水素基（好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、さらに好ましくは炭素数6~12のもの）又はアリール基であり、さらに好ましくは脂肪族炭化水素基（好ましくは炭素数1~20、より好ましくは炭素数1~12、さらに好ましくは炭素数2~10のもの）である。

X^{B2} として好ましくは $-O-$ 、 $=N-R^{B2}$ であり、特に好ましくは $=N-R^{B2}$ である。

【0063】

Z^{B2} は、芳香族環を形成するために必要な原子群を表す。 Z^{B2} で形成される芳香族環は芳香族炭化水素環、芳香族複素環のいずれでもよく、具体例としては、例えば、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、ピロール環、フラン環、チオフェン環、セレノフェン環、テルロフェン環、イミダゾール環、チアゾール環、セレナゾール環、テルラゾール環、チアジアゾール環、オキサジアゾール環、ピラゾール環などが挙げられ、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、より好ましくはベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環であり、さらに好ましくはベンゼン環、ピリジン環であり、特に好ましくはピリジン環である。

30

【0064】

Z^{B2} で形成される芳香族環は、さらに他の環と縮合環を形成してもよく、置換基を有していてもよい。置換基としては前記 L^B で表される基の置換基として挙げたものと同様であり、好ましくはアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、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、スルホニル基、ハロゲン原子、シアノ基、複素環基であり、より好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、複素環基であり、さらに好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、芳香族複素環基であり、特に好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、芳香族複素環基である。

40

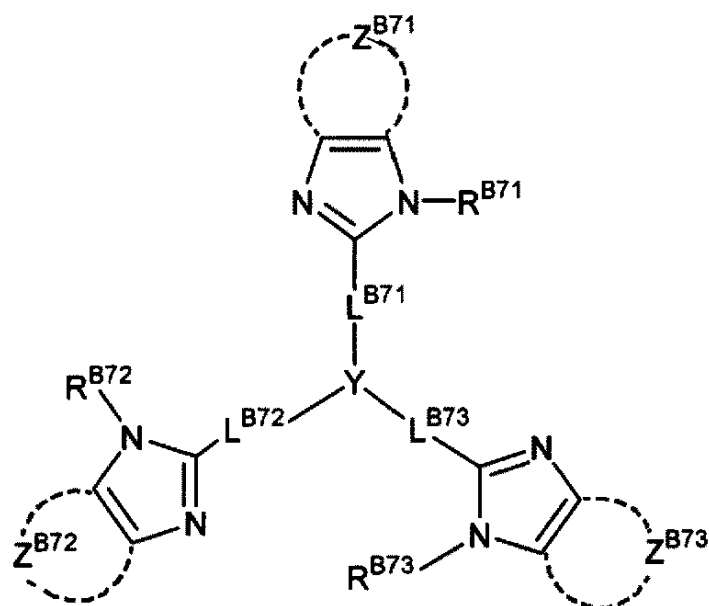
50

n^{B^2} は、1～4の整数であり、2～3であると好ましい。

【0065】

前記一般式 (B) で表される含窒素5員環誘導体のうち、さらに好ましくは下記一般式 (B') で表されるものが好ましい。

【化22】



10

20

【0066】

一般式 (B') 中、 R^{B71} 、 R^{B72} 及び R^{B73} は、それぞれ一般式 (B) における R^{B2} と同様であり、また好ましい範囲も同様である。

Z^{B71} 、 Z^{B72} 及び Z^{B73} は、それぞれ一般式 (B) における Z^{B2} と同様であり、また好ましい範囲も同様である。

L^{B71} 、 L^{B72} 及び L^{B73} は、それぞれ連結基を表し、一般式 (B) における L^B の例を二価としたものが挙げられ、好ましくは、単結合、二価の芳香族炭化水素環基、二価の芳香族複素環基、及びこれらの組み合わせからなる連結基であり、より好ましくは単結合である。 L^{B71} 、 L^{B72} 及び L^{B73} は置換基を有していてもよく、置換基としては前記一般式 (B) における L^B で表される基の置換基として挙げたものと同様であり、また好ましい置換基も同様である。

30

Y は、窒素原子、1, 3, 5-ベンゼントリイル基又は2, 4, 6-トリアジントリイル基を表す。1, 3, 5-ベンゼントリイル基は2, 4, 6-位に置換基を有していてもよく、置換基としては、例えば、アルキル基、芳香族炭化水素環基、ハロゲン原子などが挙げられる。

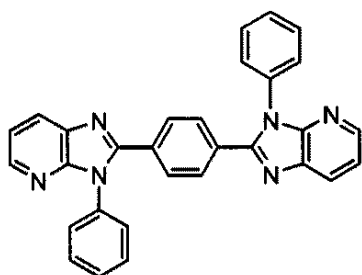
【0067】

一般式 (B) 又は (B') で表される含窒素5員環誘導体の具体例を以下に示すが、これら例示化合物に限定されるものではない。

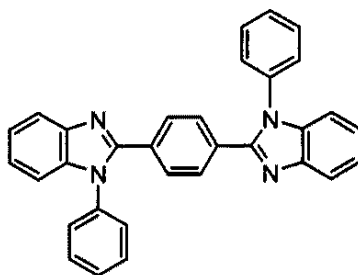
40

【化 2 3】

(B-1)

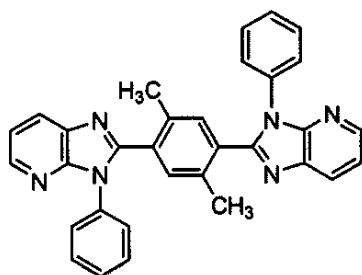


(B-5)

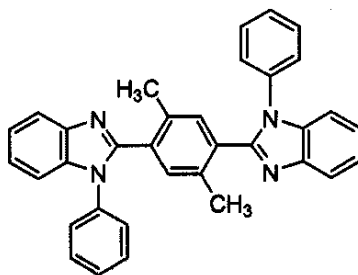


10

(B-2)

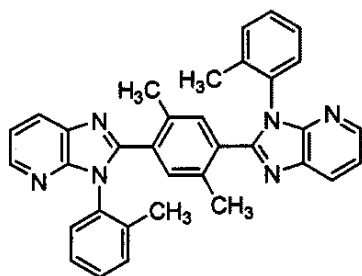


(B-6)

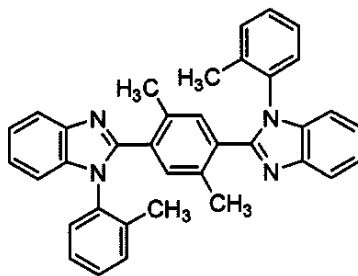


20

(B-3)

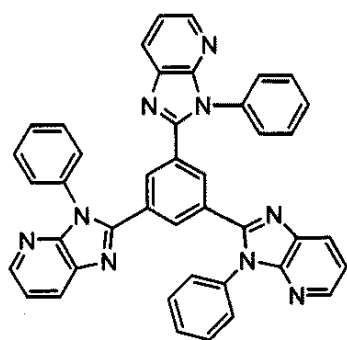


(B-7)

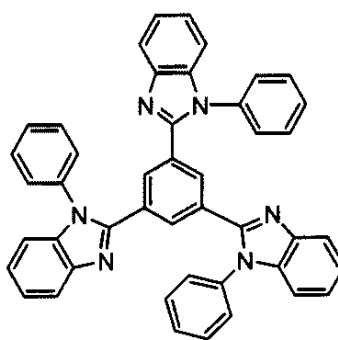


30

(B-4)



(B-8)

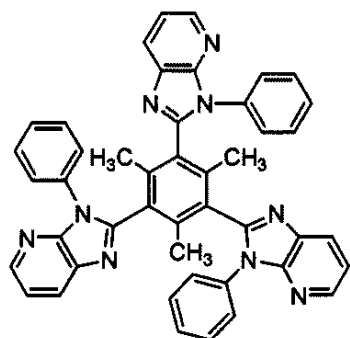


40

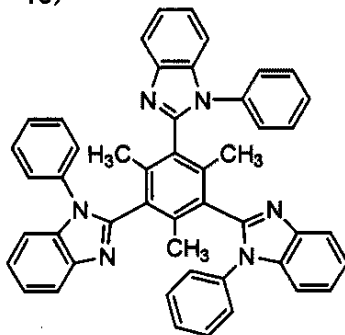
【0 0 6 8】

【化 2 4】

(B-9)

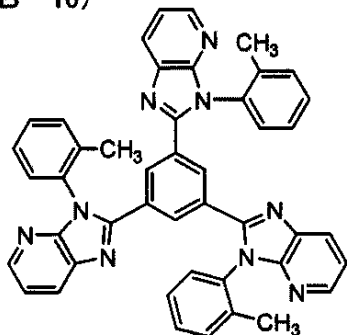


(B-13)

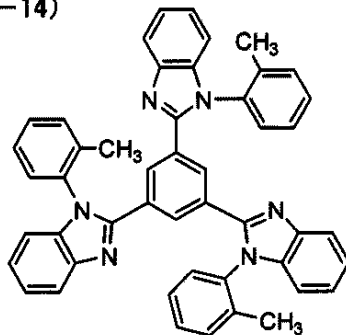


10

(B-10)

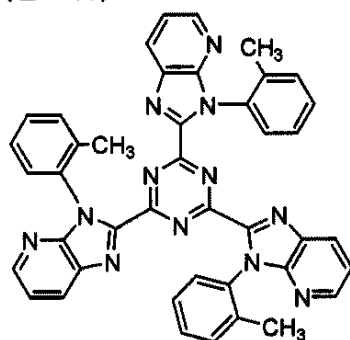


(B-14)

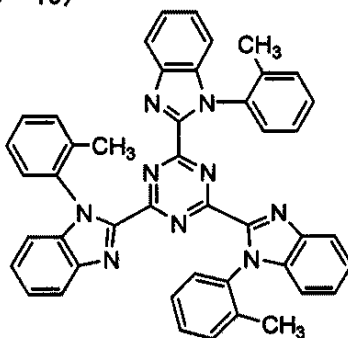


20

(B-11)

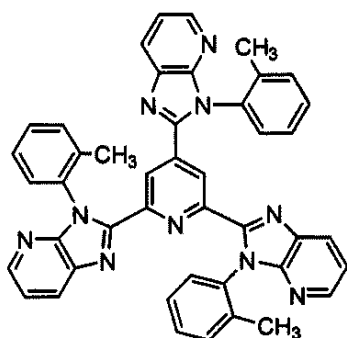


(B-15)

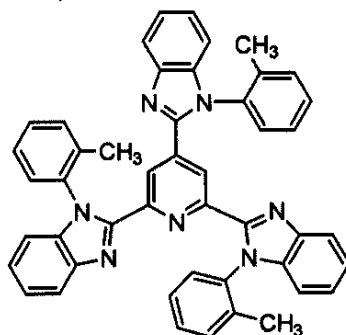


30

(B-12)



(B-16)



40

【0069】

電子注入層及び電子輸送層を構成する化合物としては、電子欠乏性含窒素5員環または電子欠乏性含窒素6員環骨格と、置換又は無置換のインドール骨格、置換又は無置換のカルバゾール骨格、置換又は無置換のアザカルバゾール骨格を組み合わせた構造を有する化合物等も挙げられる。また、好適な電子欠乏性含窒素5員環または電子欠乏性含窒素6員環骨格としては、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、トリアゾール、オキサ

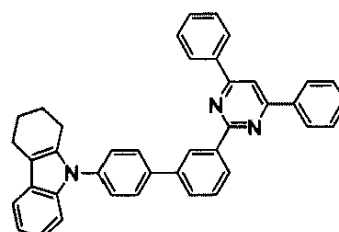
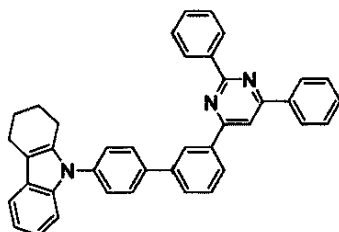
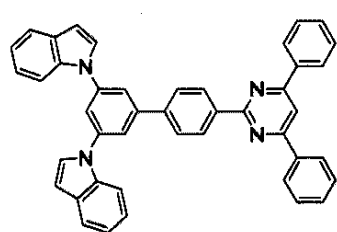
50

ジアゾール、ピラゾール、イミダゾール、キノキサリン、ピロール骨格及び、それらがお互いに縮合したベンズイミダゾール、イミダゾピリジン等の分子骨格が挙げられる。これらの組み合わせの中で好ましくはピリジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン骨格と、カルバゾール、インドール、アザカルバゾール、キノキサリン骨格が挙げられる。前述の骨格は置換されていても無置換であっていてもよい。

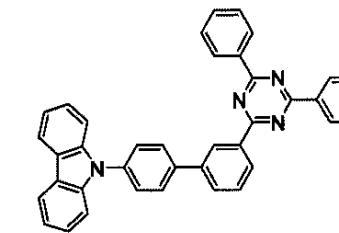
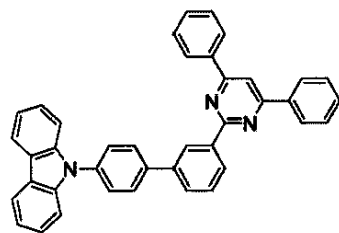
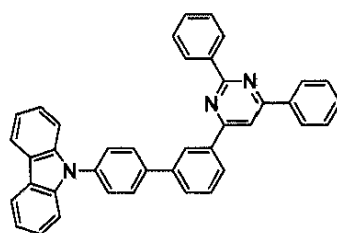
電子輸送性化合物の具体例を以下に示す。

【0070】

【化25】



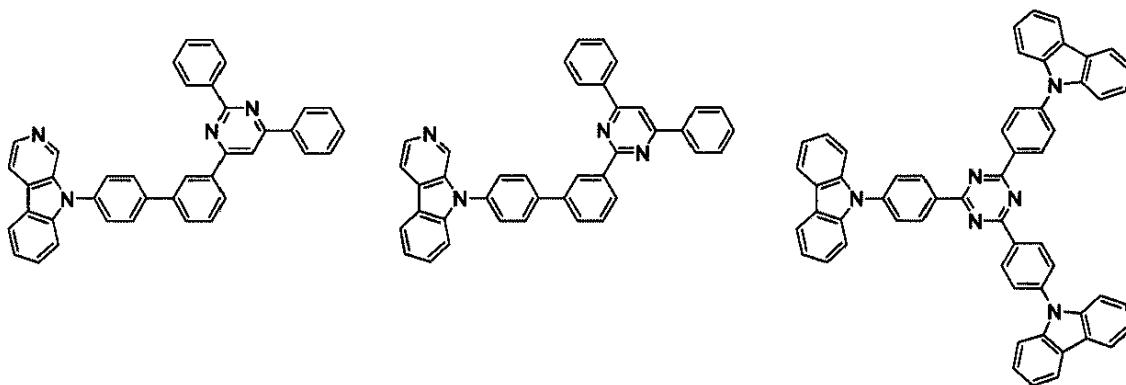
10



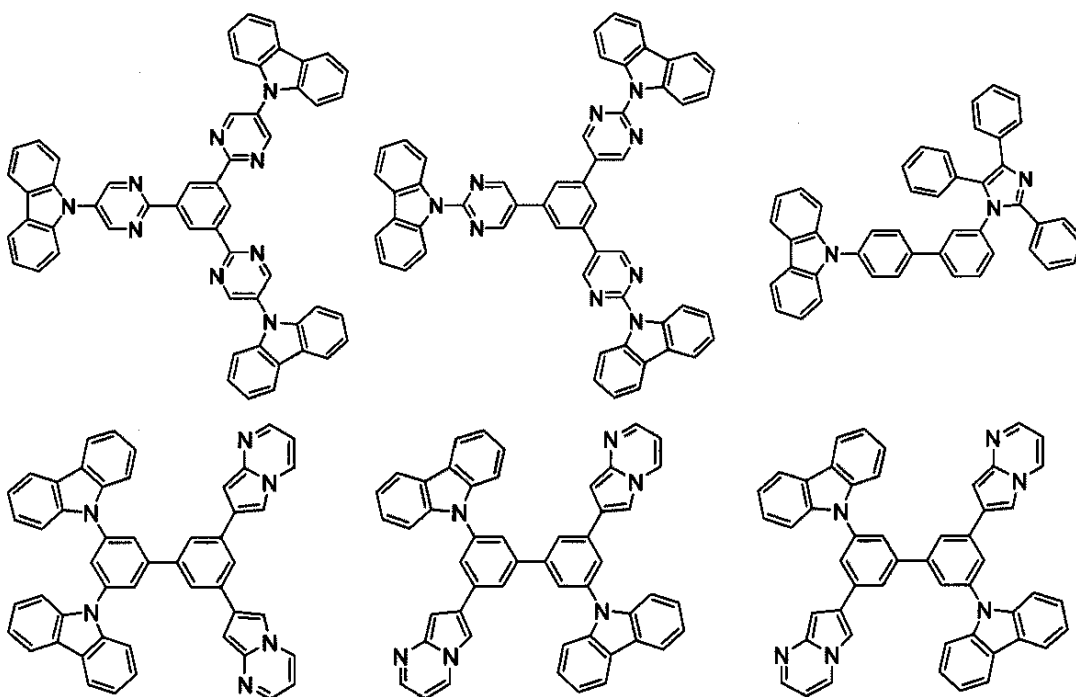
20

【0071】

【化 2 6】



10

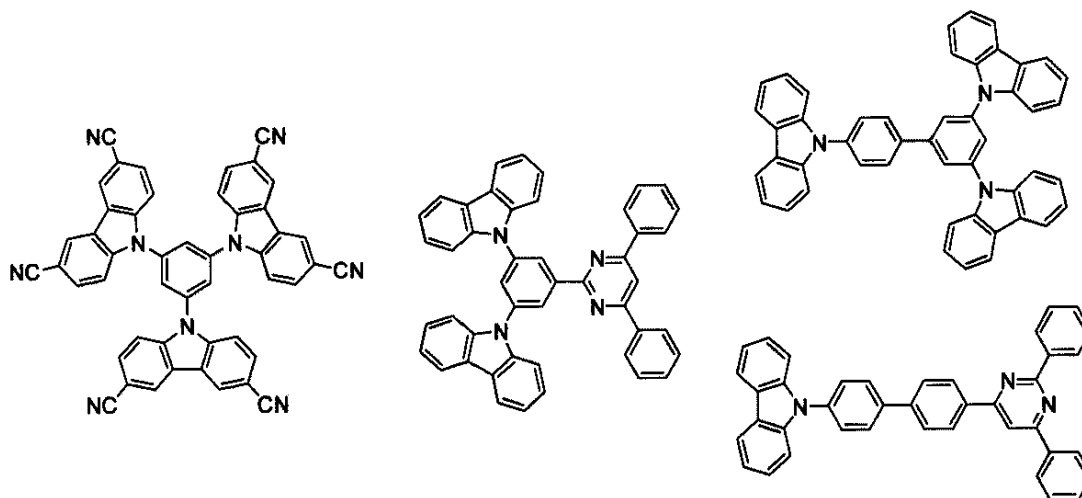


20

30

【0 0 7 2】

【化 2 7】



40

【0 0 7 3】

50

電子注入層及び電子輸送層は、前記材料の1種又は2種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。これらは π 電子欠乏性含窒素ヘテロ環基であることが好ましい。

【0074】

また、前記電子注入層の構成成分として、前記含窒素環誘導体の他に無機化合物として、絶縁体又は半導体を使用することが好ましい。電子注入層が絶縁体や半導体で構成されていれば、電流のリークを有効に防止して、電子注入性を向上させることができる。

このような絶縁体としては、アルカリ金属カルコゲニド、アルカリ土類金属カルコゲニド、アルカリ金属のハロゲン化物及びアルカリ土類金属のハロゲン化物からなる群から選択される少なくとも一つの金属化合物を使用するのが好ましい。電子注入層がこれらのアルカリ金属カルコゲニド等で構成されていれば、電子注入性をさらに向上させることができる点で好ましい。具体的に、好ましいアルカリ金属カルコゲニドとしては、例えば、 Li_2O 、 K_2O 、 Na_2S 、 Na_2Se 及び Na_2O が挙げられ、好ましいアルカリ土類金属カルコゲニドとしては、例えば、 CaO 、 BaO 、 SrO 、 BeO 、 BaS 及び CaSe が挙げられる。また、好ましいアルカリ金属のハロゲン化物としては、例えば、 LiF 、 NaF 、 KF 、 LiCl 、 KCl 及び NaCl 等が挙げられる。また、好ましいアルカリ土類金属のハロゲン化物としては、例えば、 CaF_2 、 BaF_2 、 SrF_2 、 MgF_2 及び BeF_2 等のフッ化物や、フッ化物以外のハロゲン化物が挙げられる。

また、半導体としては、 Ba 、 Ca 、 Sr 、 Yb 、 Al 、 Ga 、 In 、 Li 、 Na 、 Cd 、 Mg 、 Si 、 Ta 、 Sb 及び Zn の少なくとも一つの元素を含む酸化物、窒化物又は酸化窒化物等の一種単独又は二種以上の組み合わせが挙げられる。また、電子注入層を構成する無機化合物が、微結晶又は非晶質の絶縁性薄膜であることが好ましい。電子注入層がこれらの絶縁性薄膜で構成されていれば、より均質な薄膜が形成されるために、ダークスポット等の画素欠陥を減少させることができる。なお、このような無機化合物としては、前記アルカリ金属カルコゲニド、アルカリ土類金属カルコゲニド、アルカリ金属のハロゲン化物及びアルカリ土類金属のハロゲン化物等が挙げられる。

また、本発明における電子注入層は、前述の還元性ドーパントを含有していても好ましい。

【0075】

本発明において、有機EL素子の陽極は、正孔を正孔輸送層又は発光層に注入する役割を担うものであり、4.5 eV以上の仕事関数を有することが効果的である。本発明に用いられる陽極材料の具体例としては、酸化インジウム錫合金(ITO)、酸化錫(NESA)、金、銀、白金、銅等が適用できる。また陰極としては、電子注入層又は発光層に電子を注入する目的で、仕事関数の小さい材料が好ましい。陰極材料は特に限定されないが、具体的にはインジウム、アルミニウム、マグネシウム、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、アルミニウム-リチウム合金、アルミニウム-スカンジウム-リチウム合金、マグネシウム-銀合金等が使用できる。

【0076】

本発明の有機EL素子の各層の形成方法は特に限定されない。従来公知の真空蒸着法、スピニング法等による形成方法を用いることができる。本発明の有機EL素子に用いる、前記一般式(1)～(3)のいずれかで表される化合物を含有する有機薄膜層は、真空蒸着法、分子線蒸着法(MBE法)あるいは溶媒に解かした溶液のディッピング法、スピニング法、キャスト法、バーコート法、ロールコート法等の塗布法による公知の方法で形成することができる。

本発明の有機EL素子の各有機層の膜厚は特に制限されないが、一般に膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、逆に厚すぎると高い印加電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常は数nmから1 μm の範囲が好ましい。

【実施例】

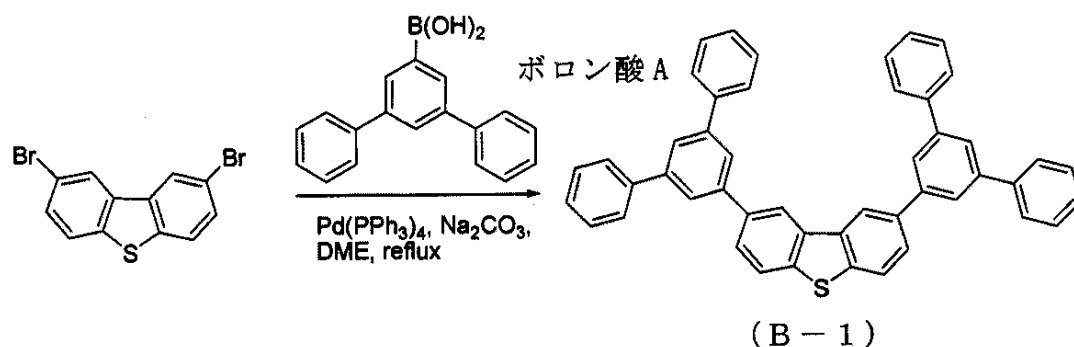
【0077】

次に、実施例を用いて本発明をさらに詳しく説明する。

合成実施例 1

化合物 (B-1) の合成経路を以下に示す。

【化 2 8】



10

アルゴン雰囲気下、300 mL の 3 つ口フラスコに 2, 8-ジブロモジベンゾチオフェン 1.31 g (3.83 mmol)、ボロン酸 A 2.50 g (9.12 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 0.527 g (0.456 mmol) を入れ、アルゴン置換した。これに、1, 2-ジメトキシエタン 27.4 mL、2.0 M 炭酸ナトリウム水溶液 13.7 mL (27.4 mmol) を加え、アルゴン雰囲気下、9 時間加熱還流した。反応液に水 100 mL、塩化メチレン 100 mL を加え、有機層を分離し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。エバポレーターで減圧濃縮した後、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(溶出溶媒：塩化メチレン/ヘキサン=1/2)で精製し、化合物 (B-1) 2.09 g (3.26 mmol, 収率 85%) を得た。90 MHz $^1\text{H-NMR}$ 及び FD-MS (フィールドディソープションマス分析) の測定により目的物 (B-1) であることを確認した。FD-MS の測定結果を以下に示す。

20

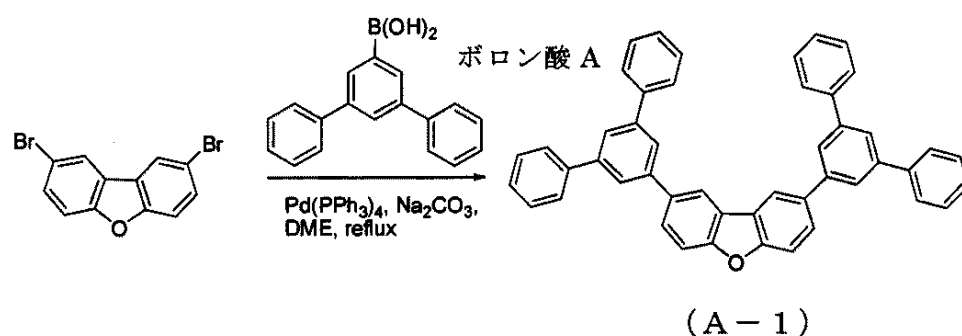
FD-MS: calcd for $\text{C}_{28}\text{H}_{20}\text{S}_2$ = 640, found: m/z = 640 (M^+ , 100)

【0078】

合成実施例 2

化合物 (A-1) の合成経路を以下に示す。

【化 2 9】



30

アルゴン雰囲気下、300 mL の 3 つ口フラスコに 2, 8-ジブロモジベンゾフラン 2.53 g (7.76 mmol)、ボロン酸 A 5.07 g (18.5 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 1.07 g (0.925 mmol) を入れ、アルゴン置換した。これに、1, 2-ジメトキシエタン 55.5 mL、2.0 M 炭酸ナトリウム水溶液 27.8 mL (55.5 mmol) を加え、アルゴン雰囲気下、9 時間加熱還流した。反応液に水 100 mL、塩化メチレン 100 mL を加え、有機層を分離し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。エバポレーターで減圧濃縮した後、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(溶出溶媒：塩化メチレン/ヘキサン=1/2)で精製し、化合物 (A-1) 3.83 g (6.13 mmol, 収率 79%) を得た。FD-MS (フィールドディソープションマス分析) の測定により目的物 (A-1) であ

40

50

ることを確認した。FD-MSの測定結果を以下に示す。

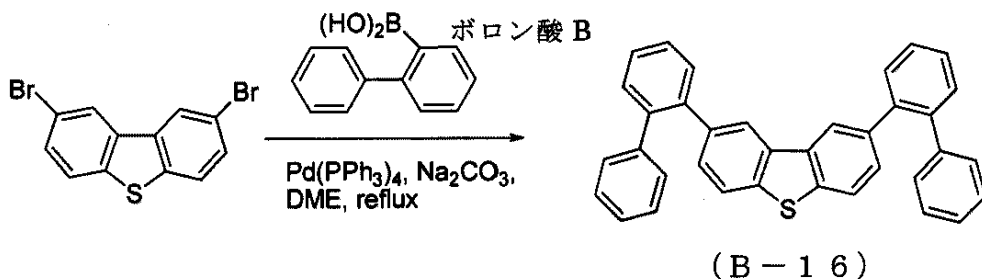
FD-MS: calcd for $C_{48}H_{30}O_2=624$, found: $m/z=624$ (M^+ , 100)

【0079】

合成実施例 3

化合物 (B-16) の合成経路を以下に示す。

【化30】



10

アルゴン雰囲気下、300 mL の3つ口フラスコに2,8-ジブロモジベンゾチオフェン 2.15 g (6.29 mmol)、硼酸 B 2.97 g (15.0 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 0.867 g (0.750 mmol)を入れ、アルゴン置換した。これに、1,2-ジメトキシエタン 45.0 mL、2.0 M炭酸ナトリウム水溶液 22.5 mL (45.0 mmol)を加え、アルゴン雰囲気下、10時間加熱還流した。反応液に水 100 mL、塩化メチレン 100 mLを加え、有機層を分離し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。エバポレーターで減圧濃縮した後、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(溶出溶媒:塩化メチレン/ヘキサン=1/2)で精製し、化合物 (B-16) 1.84 g (3.77 mmol, 収率60%)を得た。FD-MS (フィールドディソープションマス分析)の測定により目的物 (B-16)であることを確認した。FD-MSの測定結果を以下に示す。

20

FD-MS: calcd for $C_{36}H_{24}S=488$, found: $m/z=488$ (M^+ , 100)

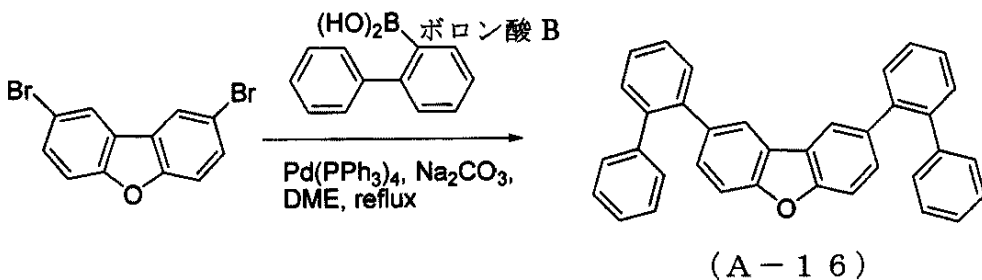
【0080】

合成実施例 4

化合物 (A-16) の合成経路を以下に示す。

30

【化31】



40

アルゴン雰囲気下、300 mL の3つ口フラスコに2,8-ジブロモジベンゾフラン 1.87 g (5.74 mmol)、硼酸 B 2.70 g (13.7 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 0.792 g (0.685 mmol)を入れ、アルゴン置換した。これに、1,2-ジメトキシエタン 41.1 mL、2.0 M炭酸ナトリウム水溶液 20.6 mL (41.1 mmol)を加え、アルゴン雰囲気下、10時間加熱還流した。反応液に水 100 mL、塩化メチレン 100 mLを加え、有機層を分離し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。エバポレーターで減圧濃縮した後、得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(溶出溶媒:塩化メチレン/ヘキサン=1/2)で精製し、化合物 (A-16) 2.03 g (4.31 mmol, 収率75%)を得た。FD-MS (フィールドディソープションマス分析)の測定により目的物 (A-16)であることを確認した。FD-MSの測定結果を以下に示す。

50

16)であることを確認した。FD-MSの測定結果を以下に示す。

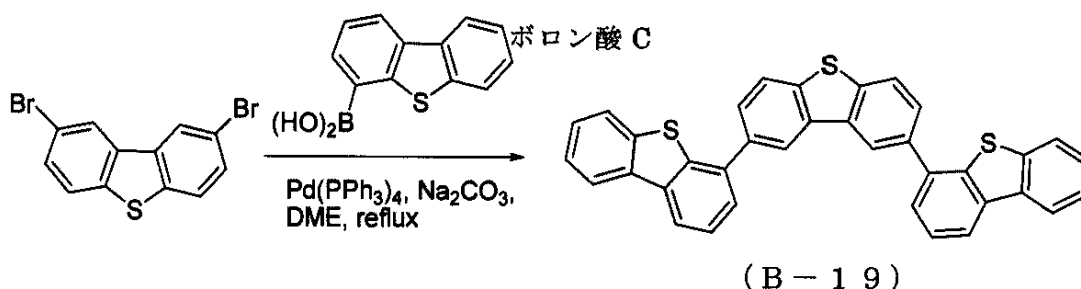
FD-MS: calcd for $C_{36}H_{24}O=472$, found: $m/z=472$ (M^+ , 100)

【0081】

合成実施例5

化合物(B-19)の合成経路を以下に示す。

【化32】



10

アルゴン雰囲気下、300 mLの3つ口フラスコに2,8-ジブロモジベンゾチオフェン 2.13 g (6.23 mmol)、ボロン酸C 3.38 g (14.8 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 0.855 g (0.740 mmol)を入れ、アルゴン置換した。これに、1,2-ジメトキシエタン 44 mL、2.0 M炭酸ナトリウム水溶液 22 mL (44.4 mmol)を加え、アルゴン雰囲気下、10時間加熱還流した。反応液を濾過した後、得られた固体を水、メタノール、塩化メチレンで洗浄することで、化合物(B-19) 2.15 g (3.92 mmol, 収率63%)を得た。FD-MS (フィールドディソープションマス分析)の測定により目的物(B-19)であることを確認した。FD-MSの測定結果を以下に示す。

20

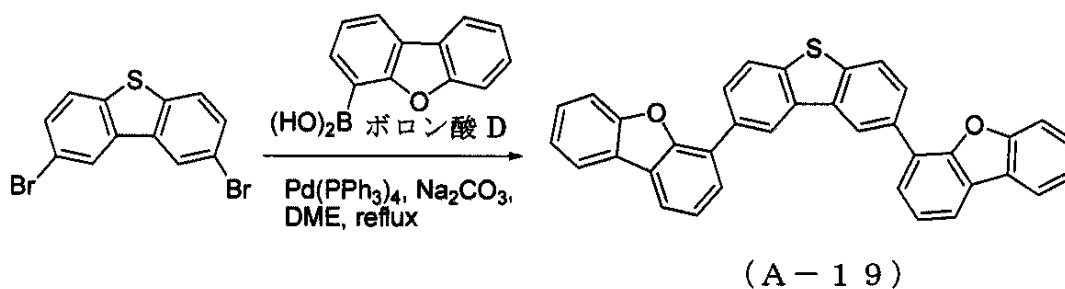
FD-MS: calcd for $C_{36}H_{20}S_3=548$, found: $m/z=548$ (M^+ , 100)

【0082】

合成実施例6

化合物(A-19)の合成経路を以下に示す。

【化33】



30

アルゴン雰囲気下、300 mLの3つ口フラスコに2,8-ジブロモジベンゾチオフェン 3.52 g (10.3 mmol)、ボロン酸D 5.19 g (24.5 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 1.42 g (1.23 mmol)を入れ、アルゴン置換した。これに、1,2-ジメトキシエタン 73.5 mL、2.0 M炭酸ナトリウム水溶液 36.8 mL (73.5 mmol)を加え、アルゴン雰囲気下、10時間加熱還流した。反応液を濾過した後、得られた固体を水、メタノール、塩化メチレンで洗浄することで、化合物(A-19) 3.78 g (7.31 mmol, 収率71%)を得た。FD-MS (フィールドディソープションマス分析)の測定により目的物(A-19)であることを確認した。FD-MSの測定結果を以下に示す。

40

FD-MS: calcd for $C_{36}H_{20}O_2S=516$, found: $m/z=516$ (M^+ , 100)

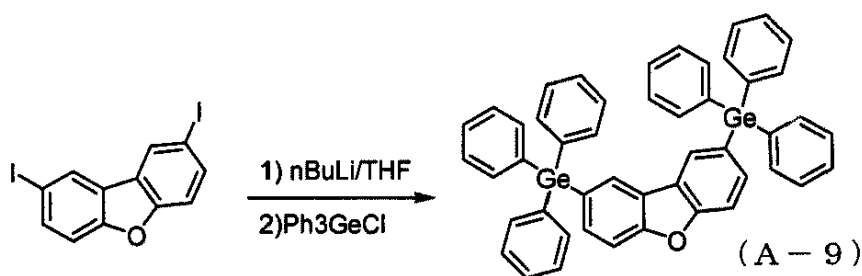
【0083】

合成実施例7

50

化合物 (A-9) の合成経路を以下に示す。

【化34】



10

アルゴン雰囲気下、300 mL の3つ口フラスコに2,8-ジヨードジベンゾフラン 3.0 g (7.16 mmol)、脱水テトラヒドロフラン 100 mL を入れ、攪拌しながら -70℃ に冷却した。そこへノルマルブチリチウム 1.6 M ヘキサン溶液 9.9 mL (15.8 mmol) を加えて攪拌しながら 30 分かけて -10℃ まで昇温した。再び -70℃ に冷やした後、トリフェニルゲルマニウムクロリド 4.7 g (16 mmol) を脱水テトラヒドロフラン 50 mL に溶かした溶液を 10 分かけて滴下し、反応溶液を 1 時間かけて室温まで昇温した。飽和塩化アンモニウム水溶液を加えて反応を終了させ、ジクロロメタンで抽出し、濃縮後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して化合物 (A-9) 1.92 g (2.47 mmol, 収率 35%) を得た。FD-MS (フィールドディソープションマ分析) の測定により目的物 (A-9) であることを確認した。FD-MS の測定結果を以下に示す。

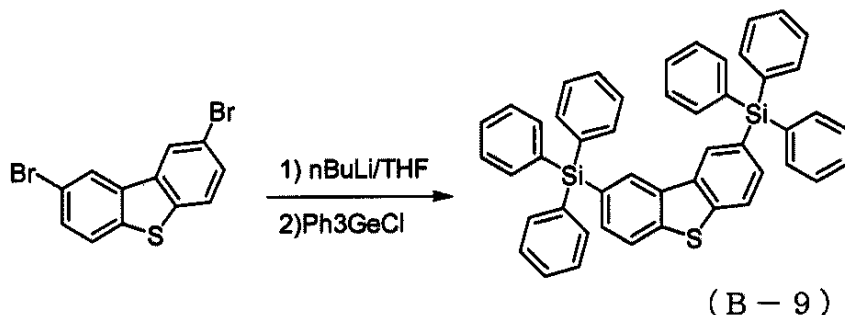
FD-MS: calcd for $C_{48}H_{36}Ge_2O$ = 776, found: m/z = 776, 774

【0084】

合成実施例 8

化合物 (B-9) の合成経路を以下に示す。

【化35】



30

アルゴン雰囲気下、300 mL の3つ口フラスコに2,8-ジブロモジベンゾチオフェン 2.0 g (5.85 mmol)、脱水テトラヒドロフラン 80 mL を入れ、攪拌しながら -70℃ に冷却した。そこへノルマルブチリチウム 1.6 M ヘキサン溶液 8.0 mL (12.8 mmol) を加えて攪拌しながら 30 分かけて -10℃ まで昇温した。再び -70℃ に冷やした後、トリフェニルシリルクロリド 3.8 g (13 mmol) を脱水テトラヒドロフラン 40 mL に溶かした溶液を 10 分かけて滴下し、反応溶液を 1 時間かけて室温まで昇温した。飽和塩化アンモニウム水溶液を加えて反応を終了させ、ジクロロメタンで抽出し、濃縮後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して化合物 (B-9) 1.84 g (2.62 mmol, 収率 45%) を得た。FD-MS (フィールドディソープションマ分析) の測定により目的物 (B-9) であることを確認した。FD-MS の測定結果を以下に示す。

FD-MS: calcd for $C_{48}H_{36}SSi_2$ = 700, found: m/z = 700 (M^+ , 100)

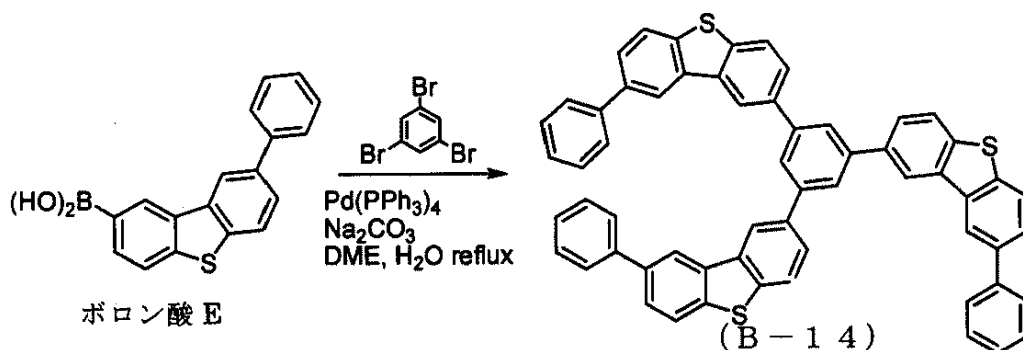
【0085】

50

合成実施例 9

化合物 (B-14) の合成経路を以下に示す。

【化 3 6】



10

アルゴン雰囲気下、300 mL の 3 つ口フラスコにボロン酸 E 4.0 g (13.2 mmol)、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム 760 mg (0.66 mmol)、トリブromoベンゼン 940 mg (3.0 mmol) を入れ、アルゴン置換した。これに、1,2-ジメトキシエタン 40 mL、2.0 M 炭酸ナトリウム水溶液 20 mL (40 mmol) を加え、アルゴン雰囲気下、12 時間加熱還流した。反応液をジクロロメタンで抽出し、濃縮後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、化合物 (B-14) 1.13 g (1.33 mmol, 収率 44%) を得た。FD-MS (フィールドディソープションマス分析) の測定により目的物 (B-14) であることを確認した。FD-MS の測定結果を以下に示す。

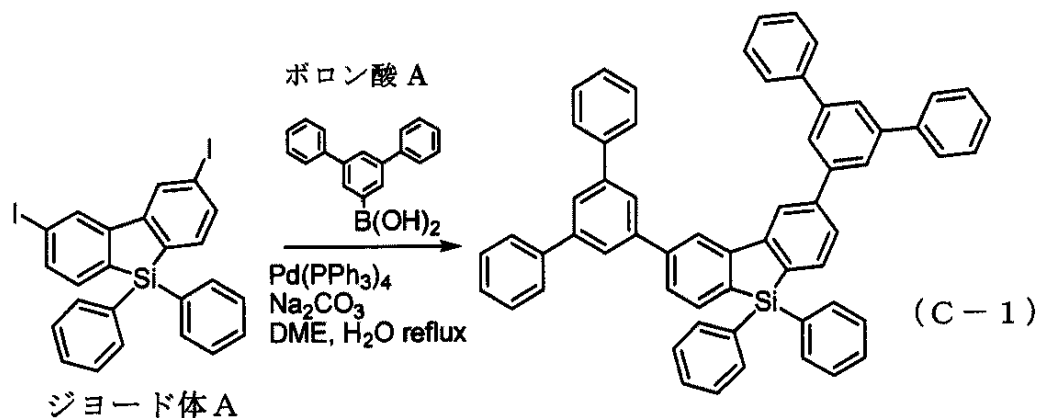
FD-MS: calcd for $\text{C}_{60}\text{H}_{36}\text{S}_3$ = 852, found: m/z = 853, 852

【0086】

合成実施例 10

化合物 (C-1) の合成経路を以下に示す。

【化 3 7】



30

40

アルゴン雰囲気下、300 mL の 3 つ口フラスコにジヨード体 A 3.6 g (6.1 mmol)、ボロン酸 A 3.67 g (13.4 mmol)、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム 772 mg (0.67 mmol) を入れ、アルゴン置換した。これに、1,2-ジメトキシエタン 50 mL、2.0 M 炭酸ナトリウム水溶液 20 mL (40 mmol) を加え、アルゴン雰囲気下、12 時間加熱還流した。反応液に水 100 mL、塩化メチレン 100 mL を加え、抽出した後エバポレーターで減圧濃縮した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、化合物 (C-1) 2.12 g (2.68 mmol, 収率 44%) を得た。FD-MS (フィールドディソープションマス分析) の測定により目的物 (C-1) であることを確認した。FD-MS の測定結果を

50

FD-MS: calcd for $C_{60}H_4$, $M=790$, found: $m/z=790$ (M^+ , 100%)

合成实施例 1-1

【化 3 8】



アルゴン雰囲気下、300 mLの3つ口フラスコにジヨード体B 3.5 g (5.6 mmol)、脱水テトラヒドロフラン80 mLを入れ、攪拌しながら-70℃に冷却した。そこへノルマルブチルリチウム1.6 Mヘキサン溶液 7.8 mL (12.3 mmol)を加えて攪拌しながら30分かけて-10℃まで昇温した。再び-70℃に冷やした後、トリフェニルゲルマニウムクロリド4.4 g (13 mmol)を脱水テトラヒドロフラン50 mLに溶かした溶液を10分かけて滴下し、反応溶液を1時間かけて室温まで昇温した。飽和塩化アンモニウム水溶液を加えて反応を終了させ、ジクロロメタンで抽出し、濃縮後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して化合物(D-6) 2.63 g (2.66 mmol, 収率48%)を得た。FD-MS (フィールドディソープションマス分析)の測定により目的物(D-6)であることを確認した。FD-MSの測定結果を以下に示す。

【0088】

＜FD-MS測定＞

条件：加速電圧 8 kV

エミッタ種 カーボン

40

得られた化合物は下記の方法によって最低励起 3 重項エネルギー準位 T_1 を測定した。

合成した化合物のそれぞれについての3重項エネルギーレベルの測定結果を表1に示す。

50

【表 1】

表 1 3重項エネルギーレベル

化合物	3重項エネルギーレベル (eV)
A-1	2.86
B-1	2.86
A-16	2.84
B-16	2.84
A-19	2.83
B-19	2.82
A-9	2.98
B-9	3.03
B-14	2.84
C-1	2.61
D-6	2.60

10

20

30

【0091】

以下に有機EL素子作製例を示す。前記合成例で示した合成法により得られた化合物は全て $10^{-1} \sim 10^{-4}$ Paの減圧下、昇華することにより精製して用いた。

実施例1（有機EL素子作製）

25mm×75mm×1.1mm厚のITO透明電極付きガラス基板（ジオマティック社製）をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に、前記透明電極を覆うようにして膜厚100nmのHTM（下記構造式参照）を成膜した。該HTM膜は正孔注入輸送層として機能する。さらに、該正孔注入輸送層の成膜に続けて、この膜上に膜厚30nmで、ホスト化合物としてA-1と錯体K-1を抵抗加熱により共蒸着成膜した。錯体K-1の濃度は7wt%であった。このホスト化合物：A-1膜は、発光層として機能する。そして、該発光層成膜に続けて、下記材料ETM1を膜厚25nm、さらに該ETM1の上に下記材料ETM2を5nm積層成膜した。該ETM1層及びETM2層は電子輸送層、電子注入層として機能する。そして、この後LiFを電子注入性電極（陰極）として成膜速度1Å/minで膜厚0.1nm形成した。このLiF層上に金属Alを蒸着させ、金属陰極を膜厚150nm形成し有機EL発光素子を形成した。

40

50

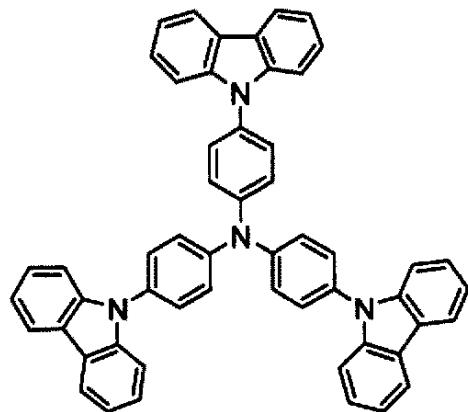
【0092】

(有機EL素子の発光性能評価)

以上のように作製した有機EL素子を直流電流駆動（電流密度 $J = 1 \text{ mA/cm}^2$ ）により発光させ、輝度（L）を測定し、発光効率（ L/J ）を求め、その結果を下記表2に示す。

【0093】

【化39】

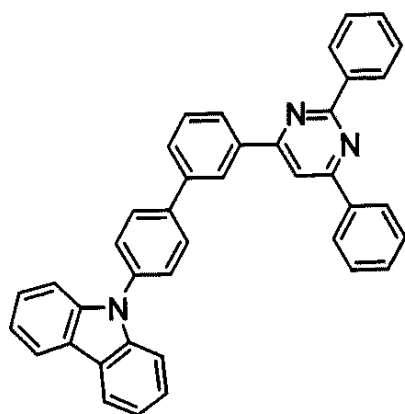


H T M

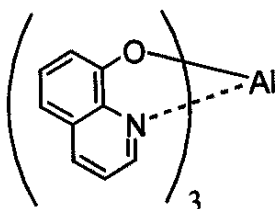
10

20

【化40】



E T M 1



E T M 2

30

【0094】

実施例2～9

実施例1において、ホスト化合物A-1の代わりに表2のホスト化合物欄に記載した各化合物を用いた以外は同様にして有機EL素子を作製した。得られたそれぞれの有機EL素子について、実施例1と同様にして発光効率を測定し、結果を表2に示す。

【0095】

比較例1～3

実施例1において、ホスト化合物A-1の代わりに、特開平5-109485号公報、特開2004-002351及び特開2002-308837号公報にそれぞれ記載されている下記比較化合物1～3を用いた以外は同様にして有機EL素子を作製した。得られたそれぞれの有機EL素子について、実施例1と同様にして発光効率を測定し、結果を表2に示す。

【0096】

実施例10～11

50

実施例 1 において、錯体 K-1 の代わりに K-17、ホスト化合物 A-1 の代わりに表 3 のホスト化合物欄に記載した各化合物を用いた以外は同様にして有機 EL 素子を作製した。得られたそれぞれの有機 EL 素子について、実施例 1 と同様にして発光効率を測定し、結果を表 3 に示す。

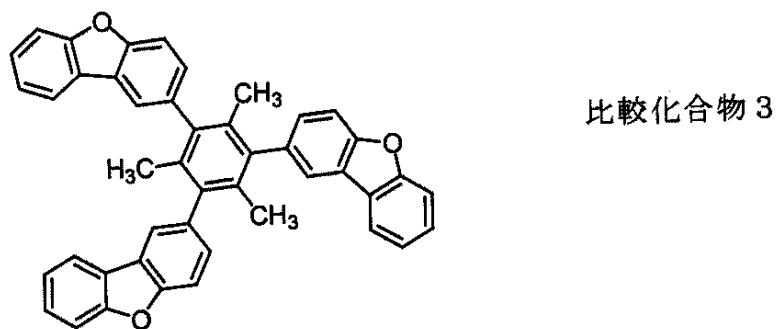
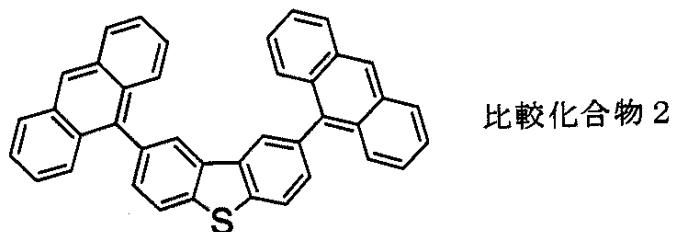
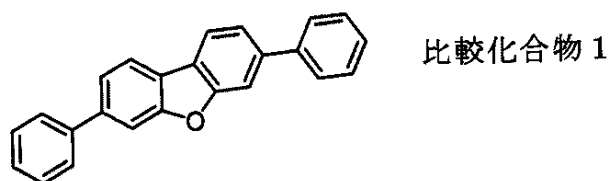
【0097】

比較例 5～7

実施例 1 において、ホスト化合物 A-1 の代わりに、特開平 5-109485 号公報、特開 2004-002351 及び特開 2002-308837 号公報にそれぞれ記載されている下記比較化合物 1～3 を用いた以外は同様にして有機 EL 素子を作製した。得られたそれぞれの有機 EL 素子について、実施例 1 と同様にして発光効率を測定し、結果を表 10 3 に示す。

【0098】

【化 41】



【0099】

【表 2】

表 2

	ホスト 化合物 No	J (mA/cm ²)	L (cd/m ²)	L/J (cd/A)	発光波長 $\lambda_{\max}$ (nm)
実施例 1	A-1	1.0	466	47	487
実施例 2	B-1	1.0	418	42	486
実施例 3	A-16	1.0	321	32	487
実施例 4	B-16	1.0	350	35	486
実施例 5	A-19	1.0	487	49	487
実施例 6	B-19	1.0	491	49	487
実施例 7	A-9	1.0	320	32	485
実施例 8	B-9	1.0	304	30	485
実施例 9	B-14	1.0	438	44	486
比較例 1	比較化合物 1	1.0	102	10	487
比較例 2	比較化合物 2	1.0	—	錯体発光せず	—
比較例 3	比較化合物 3	1.0	228	23	487

10

20

【表 3】

表 3

	ホスト 化合物 No	J (mA/cm ²)	L (cd/m ²)	L/J (cd/A)	発光波長 $\lambda_{\max}$ (nm)
実施例 10	A-9	1.0	98	10	440
実施例 11	B-9	1.0	128	13	440
比較例 5	比較化合物 1	1.0	—	錯体発光せず	—
比較例 6	比較化合物 2	1.0	—	錯体発光せず	—
比較例 7	比較化合物 3	1.0	34	3	441

30

40

【0100】

この表から、本発明による化合物を発光層に用いた有機 EL 素子は発光効率が高かった。本結果より、本発明における化合物は有機 EL 用途として有効である。

【産業上の利用可能性】

50

【0101】

以上詳細に説明したように、本発明の一般式（１）～（７）のいずれかで表される化合物からなる有機ＥＬ素子用材料を利用すると、発光効率が高く、画素欠陥が無く、耐熱性に優れ、長寿命である有機ＥＬ素子が得られる。このため、本発明の有機ＥＬ素子は、各種電子機器の光源等として極めて有用である。

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/JP2007/055478
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER <i>H01L51/50(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, C07D307/91(2006.01)n, C07D333/76(2006.01)n, C07D409/14(2006.01)n, C07F15/00(2006.01)n</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) H01L51/50, C09K11/06, C07D307/91, C07D333/76, C07D409/14, C07F15/00		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2007 Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2007 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2007		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAPLUS (STN), REGISTRY (STN)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 2005-112765 A (Mitsui Chemicals, Inc.), 28 April, 2005 (28.04.05), Par. Nos. [0022] to [0050] (Family: none)	1-2, 7, 11-12, 15
X	JP 2004-171808 A (Konica Minolta Holdings, Inc.), 17 June, 2004 (17.06.04), Par. Nos. [0029] to [0157] (Family: none)	1, 7-11, 13-16
P, X	JP 2007-59244 A (Konica Minolta Holdings, Inc.), 08 March, 2007 (08.03.07), Par. Nos. [0071] to [0120] (Family: none)	1, 5-11, 14-15
☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☐ See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 29 May, 2007 (29.05.07)		Date of mailing of the international search report 12 June, 2007 (12.06.07)
Name and mailing address of the ISA/ Japanese Patent Office		Authorized officer
Facsimile No.		Telephone No.

国際調査報告		国際出願番号 PCT/J P 2 0 0 7 / 0 5 5 4 7 8													
A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (I P C)) Int.Cl. H01L51/50(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, C07D307/91(2006.01)n, C07D333/76(2006.01)n, C07D409/14(2006.01)n, C07F15/00(2006.01)n															
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 (I P C)) Int.Cl. H01L51/50, C09K11/06, C07D307/91, C07D333/76, C07D409/14, C07F15/00															
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2007年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2007年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2007年</td> </tr> </table>				日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2007年	日本国実用新案登録公報	1996-2007年	日本国登録実用新案公報	1994-2007年				
日本国実用新案公報	1922-1996年														
日本国公開実用新案公報	1971-2007年														
日本国実用新案登録公報	1996-2007年														
日本国登録実用新案公報	1994-2007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) CAplus (STN), 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 請求の範囲の番号													
X	JP 2005-112765 A (三井化学株式会社) 2005.04.28, 段落番号0022-0050 ファミリーなし	1-2, 7, 11-12, 15													
X	JP 2004-171808 A (コニカミノルタホールディングス株式会社) 2004.06.17, 段落番号0029-0157 ファミリーなし	1, 7-11, 13-16													
☒ 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。															
<table border="0"> <tr> <td>* 引用文献のカテゴリー</td> <td>の日の後に公表された文献</td> </tr> <tr> <td>「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</td> <td>「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</td> </tr> <tr> <td>「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</td> <td>「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</td> </tr> <tr> <td>「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)</td> <td>「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</td> </tr> <tr> <td>「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献</td> <td>「&」 同一パテントファミリー文献</td> </tr> <tr> <td>「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願</td> <td></td> </tr> </table>				* 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	
* 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 29.05.2007		国際調査報告の発送日 12.06.2007													
国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁 (I S A / 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) 松田 憲之 電話番号 03-3581-1101 内線 3271	20 3494												

国際調査報告

国際出願番号 PCT/JP2007/055478

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 請求の範囲の番号
P, X	JP 2007-59244 A (コニカミノルタホールディングス株式会社) 2007.03.08, 段落番号0071-0120 ファミリーなし	1、5-11, 14-15

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 F 7/30 (2006.01)	C 0 7 D	409/14	
C 0 7 F 7/08 (2006.01)	C 0 9 K	11/06	6 9 0
	C 0 9 K	11/06	6 6 0
	C 0 9 K	11/06	6 3 5
	C 0 9 K	11/06	6 5 0
	C 0 7 F	7/30	F
	C 0 7 F	7/08	W
	C 0 7 F	7/08	R
	C 0 7 F	7/30	A

(81)指定国 AP(BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), EA(AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), EP(AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MT, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OA(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RS, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, SV, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW

F ターム (参考) 3K107 AA01 BB01 CC04 CC07 CC21 CC24 CC26 DD53 DD59 DD64
DD67 DD68 DD69 DD71 DD74 DD75 DD76 DD78
4C037 SA10
4C063 AA03 BB01 CC94 DD76 EE10
4H049 VN01 VN02 VP01 VP02 VP03 VQ07 VQ58 VQ62 VR24 VU25

(注) この公表は、国際事務局 (W I P O) により国際公開された公報を基に作成したものである。なおこの公表に係る日本語特許出願 (日本語実用新案登録出願) の国際公開の効果は、特許法第 1 8 4 条の 1 0 第 1 項 (実用新案法第 4 8 条の 1 3 第 2 項) により生ずるものであり、本掲載とは関係ありません。

专利名称(译)	用于有机电致发光器件的材料和使用其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	JPWO2007111176A1	公开(公告)日	2009-08-13
申请号	JP2008507439	申请日	2007-03-19
[标]申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
[标]发明人	中野裕基 岩隈俊裕 松浦正英 池田秀嗣		
发明人	中野 裕基 岩隈 俊裕 松浦 正英 池田 秀嗣		
IPC分类号	H01L51/50 C07D333/76 C07D307/91 C07D409/14 C09K11/06 C07F7/30 C07F7/08		
CPC分类号	H01L51/0067 C07D307/91 C07D333/76 C07D409/14 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/1059 C09K2211/1088 C09K2211/1092 C09K2211/1096 C09K2211/185 C09K2211/186 H01L51/0059 H01L51/0061 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/0081 H01L51/0094 H01L51/5012 H01L51/5016 H01L51/5048 H05B33/14 H05B33/20		
FI分类号	H05B33/14.B H05B33/22.B H05B33/22.D C07D333/76 C07D307/91 C07D409/14 C09K11/06.690 C09K11/06.660 C09K11/06.635 C09K11/06.650 C07F7/30.F C07F7/08.W C07F7/08.R C07F7/30.A		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC04 3K107/CC07 3K107/CC21 3K107/CC24 3K107/CC26 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD64 3K107/DD67 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/DD71 3K107/DD74 3K107/DD75 3K107/DD76 3K107/DD78 4C037/SA10 4C063/AA03 4C063/BB01 4C063/CC94 4C063/DD76 4C063/EE10 4H049/VN01 4H049/VN02 4H049/VP01 4H049/VP02 4H049/VP03 4H049/VQ07 4H049/VQ58 4H049/VQ62 4H049/VR24 4H049/VU25		
优先权	11/392604 2006-03-30 US 2006082792 2006-03-24 JP		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

一种具有特定结构的有机电致发光器件的材料。一种有机电致发光器件，包括阴极，阳极和夹在阴极和阳极之间的有机薄膜层，并包括至少一层，其中有机薄膜层中的至少一层含有有机薄膜材料上述电致发光器件。获得具有优异的发光效率，没有像素缺陷的有机电致发光器件，其具有优异的耐热性和延长的寿命。

【化 1】

