

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5551865号
(P5551865)

(45) 発行日 平成26年7月16日 (2014. 7. 16)

(24) 登録日 平成26年5月30日 (2014. 5. 30)

(51) Int. Cl.

F I

H O 1 L 51/50 (2006. 01)

H O 5 B 33/14 B

C O 9 K 11/06 (2006. 01)

H O 5 B 33/22 B

C O 7 F 7/10 (2006. 01)

C O 9 K 11/06 6 6 O

C O 9 K 11/06 6 9 O

C O 7 F 7/10 C S P S

請求項の数 12 (全 73 頁)

(21) 出願番号 特願2008-298282 (P2008-298282)
 (22) 出願日 平成20年11月21日 (2008. 11. 21)
 (65) 公開番号 特開2009-152571 (P2009-152571A)
 (43) 公開日 平成21年7月9日 (2009. 7. 9)
 審査請求日 平成23年7月8日 (2011. 7. 8)
 (31) 優先権主張番号 特願2007-306264 (P2007-306264)
 (32) 優先日 平成19年11月27日 (2007. 11. 27)
 (33) 優先権主張国 日本国 (JP)

(73) 特許権者 512253626
 ユー・ディー・シー アイルランド リミ
 テッド
 アイルランド ダブリン 4 ボールスブ
 リッジ ザ スウィープステークス アレ
 クサンドラ ハウス
 (74) 代理人 110000109
 特許業務法人特許事務所サイクス
 (72) 発明者 伊勢 俊大
 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

審査官 横川 美穂

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機電界発光素子および新規ケイ素置換基含有有機化合物

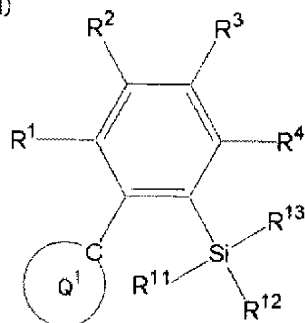
(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

陰極と陽極の間に少なくとも一種の発光材料を含有する発光層を含む、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、下記一般式 (I) で表される化合物を少なくとも一種、有機層に含有することを特徴とする有機電界発光素子。

【化 1】

一般式 (I)



(一般式 (I) 中、Q¹は芳香族ヘテロ環を表す。R¹、R²、R³およびR⁴は各々独立して水素原子または、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、アミノ基、シリル基、フッ素基、シアノ基からなる群より選択される置換基を表す。R¹¹、R¹²およびR¹³は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、R¹¹、R¹²およびR¹³のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す

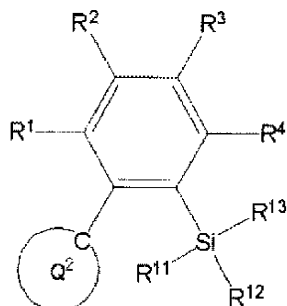
。)

【請求項 2】

一般式 (I) で表される化合物が、下記一般式 (II) で表される化合物であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機電界発光素子。

【化 2】

一般式(II)



10

(一般式 (II) 中、 Q^2 は含窒素芳香族ヘテロ環を表す。 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、アミノ基、シリル基、フッ素基、シアノ基からなる群より選択される置換基を表す。 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す。)

20

【請求項 3】

前記一般式 (I) 又は前記一般式 (II) で表される化合物を発光層に含有することを特徴とする請求項 1 または 2 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 4】

前記発光層と陰極との間に少なくとも一層の有機層を有し、前記一般式 (I) 又は前記一般式 (II) で表される化合物を前記発光層と陰極との間の有機層に含有することを特徴とする請求項 1 ~ 3 のいずれかに記載の有機電界発光素子。

【請求項 5】

前記発光材料の少なくとも一種が燐光材料であることを特徴とする請求項 1 ~ 4 のいずれかに記載の有機電界発光素子。

30

【請求項 6】

前記発光材料の少なくとも一種が白金錯体またはイリジウム錯体であることを特徴とする請求項 1 ~ 5 のいずれかに記載の有機電界発光素子。

【請求項 7】

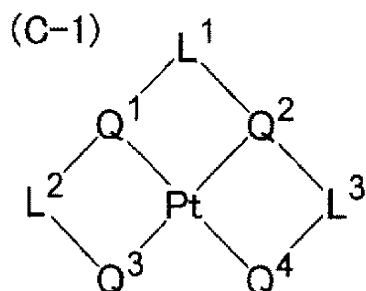
前記白金錯体が三座または四座の配位子の白金錯体であることを特徴とする請求項 6 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 8】

前記白金錯体が下記一般式 (C-1) で表されることを特徴とする請求項 7 に記載の有機電界発光素子。

40

【化 3】



(式中、 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 および Q^4 はそれぞれ独立に Pt に配位する配位子を表す。 L^1 、

50

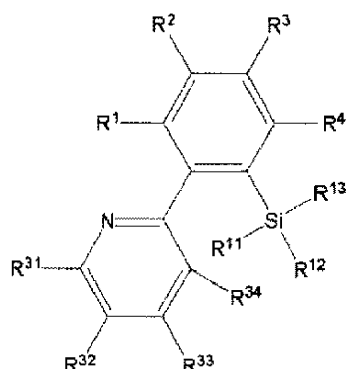
L^2 および L^3 はそれぞれ独立に単結合または二価の連結基を表す。)

【請求項 9】

下記一般式 (III) で表される化合物。

【化 4】

一般式(III)



10

(一般式 (III) 中、 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、アミノ基、シリル基、フッ素基、シアノ基からなる群より選択される置換基を表す。 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す。ただし、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} のうち二つがアルキル基であるとき、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} の残りの一つはアリール基ではない。 R^{31} 、 R^{32} 、 R^{33} および R^{34} は各々独立して水素原子または、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、アミノ基、シリル基、フッ素基、シアノ基からなる群より選択される置換基を表す。)

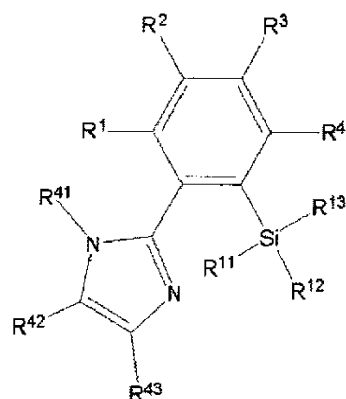
20

【請求項 10】

下記一般式 (IV) で表される化合物。

【化 5】

一般式(IV)



30

(一般式 (IV) 中、 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、アミノ基、シリル基、フッ素基、シアノ基からなる群より選択される置換基を表す。 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す。 R^{41} はアルキル基、アリール基または芳香族ヘテロ環基を表す。 R^{42} および R^{43} は各々独立して水素原子または、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、アミノ基、シリル基、フッ素基、シアノ基からなる群より選択される置換基を表す。)

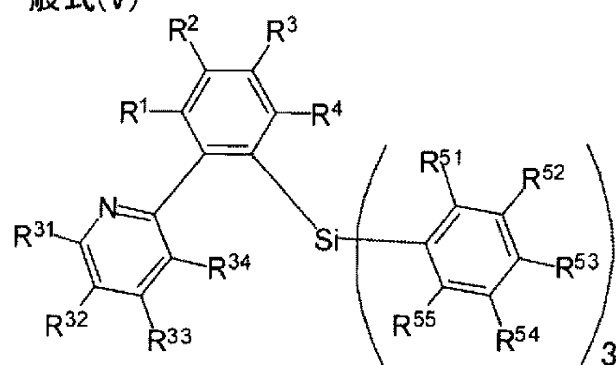
40

【請求項 11】

下記一般式 (V) で表される化合物。

【化 6】

一般式(V)



10

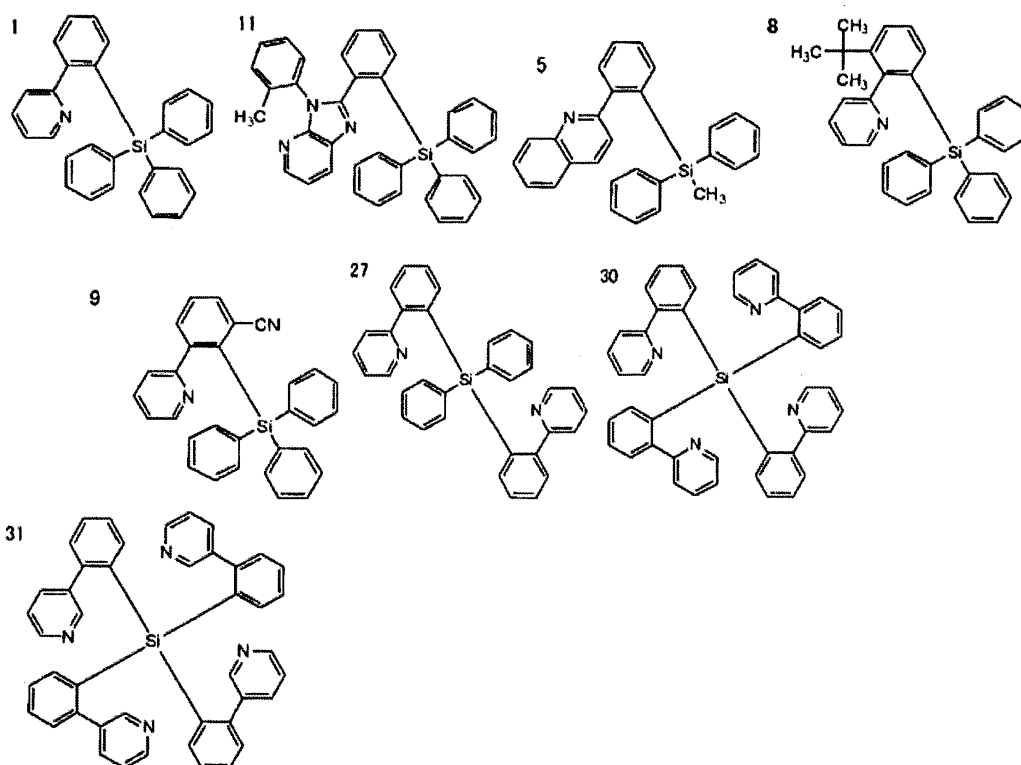
(一般式(V)中、 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、アミノ基、シリル基、フッ素基、シアノ基からなる群より選択される置換基を表す。 R^{31} 、 R^{32} 、 R^{33} 、 R^{34} 、 R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{54} および R^{55} は各々独立して水素原子または、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、アミノ基、シリル基、フッ素基、シアノ基からなる群より選択される置換基を表す。)

【請求項 12】

下記のいずれかの構造を有する請求項 9 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

【化 7】



30

40

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は電気エネルギーを光に変換して発光する有機電界発光素子および新規なケイ素置換基含有有機化合物に関する。

【背景技術】

【0002】

50

有機電界発光素子（以下、「有機EL素子」ともいう）は、低電圧駆動で高輝度の発光が得られることから活発に研究開発が行われている。有機電界発光素子は、一对の電極間に有機層を有し、陰極から注入された電子と陽極から注入された正孔とが有機層において再結合し、生成した励起子のエネルギーを発光に利用するものである。

【0003】

近年、燐光発光材料を用いることにより、素子の高効率化が進んでいる。燐光発光材料としてイリジウム錯体や白金錯体などを用いた燐光発光素子に関する発明が開示されている（例えば、特許文献1及び2参照）。しかしながら、高効率と高耐久性を両立する素子の開発には至っていない。

【0004】

10

また、燐光材料と共に発光層を形成するホスト材料として、蒸着適性やアモルファス性を付与するために、トリフェニルシリル基を有する材料を用いた有機電界発光素子に関する発明が開示されている（例えば特許文献3および4参照）が、これらは、最低励起三重項エネルギー（ T_1 エネルギー）が低く、青色領域に発光を有する燐光発光材料と共に用いると燐光発光材料の発光を消光してしまい、有機電界発光素子の発光効率を低下させてしまうため青色燐光発光素子には適用できなかつたり、また、電荷注入・輸送能が低いために素子の駆動電圧が高くなってしまいうなど、改善が求められていた。

【0005】

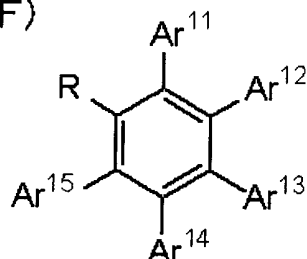
また、特許文献5には、下記一般式（F）で表される化合物を含有する有機電界発光素子に関する発明が開示され、具体的化合物としてベンゼンのオルト位に芳香族ヘテロ環とトリメチルシリル基が置換した化合物（F-31）と（F-33）が例示されている。しかし、これらを用いた素子の耐久性は不十分であり、更なる改良が求められていた。

20

【0006】

【化1】

一般式(F)



30

【0007】

（一般式（F）中、 Ar^{11} 、 Ar^{12} 、 Ar^{13} 、 Ar^{14} および Ar^{15} はそれぞれアリール基または芳香族ヘテロ環基を表し、Rは水素原子、脂肪族炭化水素基、フルオロアルキル基、ハロゲン原子、スルホニル基、シリル基およびシアノ基から選ばれる基を表す。ただし、Rが水素原子あるいは脂肪族炭化水素基である場合、 Ar^{11} 、 Ar^{12} 、 Ar^{13} 、 Ar^{14} および Ar^{15} のうち少なくとも一つはハメットのシグマパラ値が0.05以上の置換基を少なくとも一つ以上有するアリール基である。

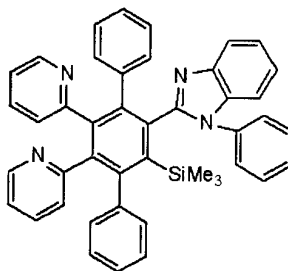
40

【0008】

【化 2】



F-31



F-33

10

【0009】

さらに、燐光発光素子の電子輸送層に用いる電子輸送材料としてAlq(8-ヒドロキシキノリンのアルミニウム錯体)を用いた有機電界発光素子が開示されている(例えば非特許文献1参照)が、Alqは T_1 エネルギーが低く、発光層に隣接する層に用いた場合、燐光発光材料の発光を消光し有機電界発光素子の発光効率を低下させてしまうため、該層に適用できる T_1 エネルギーの高い材料も求められている。

【特許文献1】米国特許第6303238号明細書

【特許文献2】国際公開第00/57676号パンフレット

20

【特許文献3】国際公開第05/022962号パンフレット

【特許文献4】国際公開第04/095598号パンフレット

【特許文献5】特開2006-135160号公報

【非特許文献1】Materials Science and Engineering C24 (2004) 167-171

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0010】

本発明の目的は、発光輝度が高く、発光効率が高く、かつ耐久性が高い有機電界発光素子の提供にある。また、特に青色領域に発光を有する有機電界発光素子であって、発光輝度が高く、発光効率が高く、かつ耐久性が高い有機電界発光素子の提供にある。さらに、その有機電界発光素子を提供するために好適なケイ素置換基を有する有機化合物を提供することにある。

30

【課題を解決するための手段】

【0011】

本発明者らは、上記課題を解決すべく検討した結果、特定のケイ素置換基を有する化合物を有機層に含有する有機電界発光素子が、上記課題を解決することを見出した。すなわち、本発明は下記的手段により達成された。

【0012】

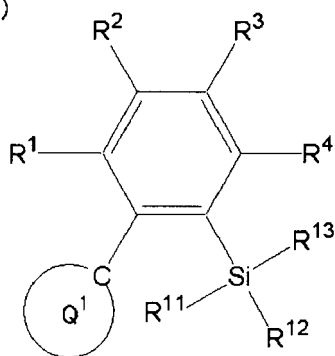
1) 陰極と陽極の間に少なくとも一種の発光材料を含有する発光層を含む、少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、下記一般式(I)で表される化合物を少なくとも一種、有機層に含有することを特徴とする有機電界発光素子。

40

【0013】

【化 3】

一般式(I)



10

【 0 0 1 4 】

(一般式(I)中、 Q^1 は芳香族ヘテロ環を表す。 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す。)

【 0 0 1 5 】

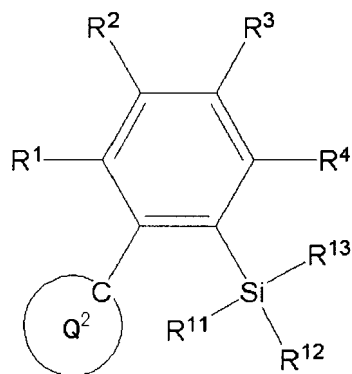
2) 一般式(I)で表される化合物が、下記一般式(II)で表される化合物であることを特徴とする上記1)に記載の有機電界発光素子。

20

【 0 0 1 6 】

【化 4】

一般式(II)



30

【 0 0 1 7 】

(一般式(II)中、 Q^2 は含窒素芳香族ヘテロ環を表す。 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す。)

40

3) 前記一般式(I)又は前記一般式(II)で表される化合物を発光層に含有することを特徴とする上記1)または2)に記載の有機電界発光素子。

4) 前記発光層と陰極との間に少なくとも一層の有機層を有し、前記一般式(I)又は一般式(II)で表される化合物を該発光層と陰極との間の有機層に含有することを特徴とする上記1)～3)のいずれかに記載有機電界発光素子。

5) 前記発光材料の少なくとも一種が燐光材料であることを特徴とする上記1)～4)のいずれかに記載の有機電界発光素子。

6) 前記発光材料の少なくとも一種が白金錯体またはイリジウム錯体であることを特徴

50

とする上記 1) ~ 5) のいずれかに記載の有機電界発光素子。

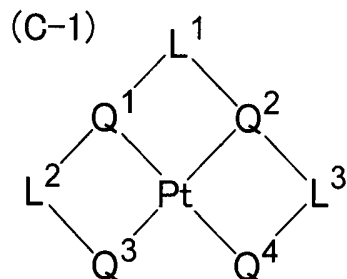
7) 前記白金錯体が三座または四座の配位子の白金錯体であることを特徴とする上記 6) に記載の有機電界発光素子。

8)

前記白金錯体下記一般式 (C-1) で表されることを特徴とする上記 7) に記載の有機電界発光素子。

【0018】

【化5】



10

【0019】

(式中、 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 および 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 および L^3 はそれぞれ独立に単結合または二価の連結基を表す。)

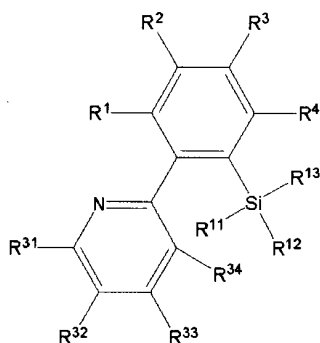
20

9) 下記一般式 (III) で表される化合物。

【0020】

【化6】

一般式(III)



30

【0021】

(一般式 (III) 中、 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す。 R^{31} 、 R^{32} 、 R^{33} および R^{34} は各々独立して水素原子または置換基を表す。)

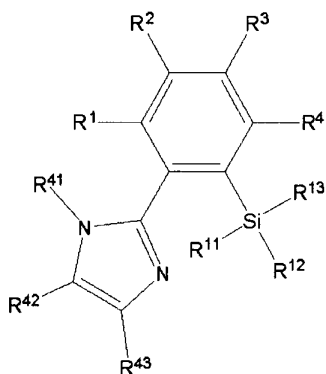
40

10) 下記一般式 (IV) で表される化合物。

【0022】

【化 7】

一般式(IV)



10

【 0 0 2 3 】

(一般式(IV)中、 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す。 R^{41} はアルキル基、アリール基または芳香族ヘテロ環基を表す。 R^{42} および R^{43} は各々独立して水素原子または置換基を表す。)

【発明の効果】

20

【 0 0 2 4 】

本発明の発光素子は、高い発光輝度、高い外部量子効率を有し、かつ耐久性に優れる。また、青色領域においても高い発光輝度、高い外部量子効率で発光し、かつ耐久性に優れる。

【発明を実施するための最良の形態】

【 0 0 2 5 】

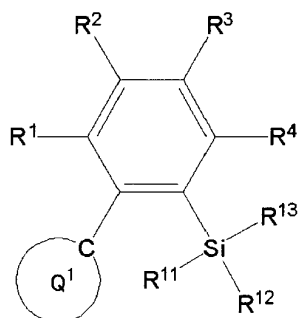
本発明の有機電界発光素子は、陰極と陽極の間に少なくとも一種の発光材料を含有する発光層を含む、少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、下記一般式(I)で表される化合物を少なくとも一種、有機層に含有することを特徴とする。

【 0 0 2 6 】

30

【化 8】

一般式(I)



40

【 0 0 2 7 】

(一般式(I)中、 Q^1 は芳香族ヘテロ環を表す。 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す。)

【 0 0 2 8 】

すなわち、本発明の有機電界発光素子は、有機層として、少なくとも一つの発光層を有する。また発光層以外の有機層として、正孔注入層、正孔輸送層、電子ブロック層、励起子ブロック層、正孔ブロック層、電子輸送層、電子注入層、保護層などが適宜配置されて

50

いてもよく、それぞれ他の層の機能を兼ね備えていても良い。また各層は複数の層から構成されていても良い。

【 0 0 2 9 】

本発明の有機電界発光素子は、励起一重項からの発光（蛍光）を利用するものでも励起三重項からの発光（燐光）を利用するものでもよいが、発光効率の観点から、燐光を利用するものの方が好ましい。

【 0 0 3 0 】

本発明の有機電界発光素子の発光層は少なくとも一種の発光材料と、少なくとも一種のホスト材料から構成されていることが好ましい。ここで、ホスト材料とは、発光層を構成する材料のうち、発光材料以外のものであり、発光材料を分散して層中に保持する機能、陽極や正孔輸送層等から正孔を受け取る機能、陰極や電子輸送層等から電子を受け取る機能、正孔及び／または電子を輸送する機能、正孔と電子の再結合の場を提供する機能、再結合により生成した励起子のエネルギーを発光材料に移動させる機能、及び正孔及び／または電子を発光材料に輸送する機能のうち少なくとも一種の機能を有する材料を意味する。

【 0 0 3 1 】

本発明の化合物は、有機層のうちいずれの層に含有されていてもよく、また複数の層に含有されていても良いが、正孔注入層、正孔輸送層、電子ブロック層、発光層、正孔ブロック層、電子輸送層、電子注入層に含有されていることが好ましく、発光層、正孔ブロック層、電子輸送層、電子注入層に含有されていることがより好ましく、発光層に含有されていることがさらに好ましく、発光層にホスト材料として含有されていることが最も好ましい。発光層にホスト材料として含有される場合、発光層における本発明の化合物の含有率は、50～99.9質量％であることが好ましく、60～99質量％であることがより好ましい。また正孔注入層、正孔輸送層、電子ブロック層、正孔ブロック層、電子輸送層、電子注入層に含有される場合、各層における本発明の化合物の含有率は、70～100％であることが好ましく、85～100％であることがより好ましく、99～100％であることが最も好ましい。また、電子輸送層を2層以上有する場合、1層が本発明の化合物を含有していればよい。

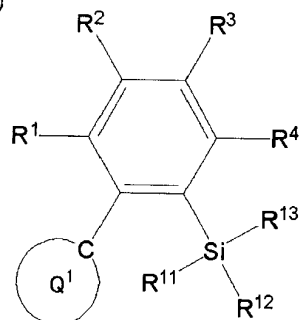
【 0 0 3 2 】

一般式（I）で表される化合物について説明する。

【 0 0 3 3 】

【化9】

一般式(I)



【 0 0 3 4 】

（一般式（I）中、 Q^1 は芳香族ヘテロ環を表す。 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す。）

【 0 0 3 5 】

Q^1 は芳香族ヘテロ環を表す。本発明において、芳香族ヘテロ環とは、少なくとも一つ

のヘテロ原子を含む芳香環を意味する。また、芳香族ヘテロ環基とは、芳香族ヘテロ環に結合した水素原子が脱離して形成される基を意味する。

Q¹で表される芳香族ヘテロ環としては、含窒素ヘテロ五員環、含窒素ヘテロ六員環、含酸素ヘテロ五員環、含硫黄ヘテロ五員環などが上げられ、具体的にはピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、1,2,4-トリアジン環、1,3,5-トリアジン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、1,2,3-トリアゾール環、1,2,4-トリアゾール環、フラン環、チオフェン環、オキサゾール環、イソオキサゾール環、チアゾール環、イソチアゾール環、1,2,3-オキサジアゾール環、1,2,4-オキサジアゾール環、1,3,4-オキサジアゾール環、1,2,3-チアジアゾール環、1,2,4-チアジアゾール環、1,3,4-チアジアゾール環、セレノフェン環、テルロフェン環などが挙げられる。電荷輸送性および素子の駆動耐久性の観点から、芳香環母核の安定性、薄膜のイオン化ポテンシャルや電子親和力のコントロール、 π 電子系の広がりなどを考慮すると、好ましくは、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、1,3,5-トリアジン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、1,2,4-トリアゾール環、フラン環、チオフェン環、オキサゾール環、チアゾール環、1,3,4-オキサジアゾール環、1,3,4-チアジアゾール環であり、より好ましくはピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、1,3,5-トリアジン環、ピラゾール環、イミダゾール環、オキサゾール環、チアゾール環、チオフェン環であり、より好ましくはピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、イミダゾール環、ピラゾール環、オキサゾール環、チアゾール環であり、さらに好ましくは、ピリジン環、ピラジン環、イミダゾール環であり、特に好ましくは、ピリジン環、イミダゾール環である。

【0036】

Q¹は置換基を有していてもよく、Q¹の置換基としては下記置換基群Aから選択される置換基が挙げられる。Q¹が置換基を複数有している場合は、それらの置換基は互いに同一でも異なっているもよい。

【0037】

(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、例えばフェニロ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、例えばフェニロ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-ベンズイミゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、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、カルボキシル基、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、ペリリル、ペリリジノ、モルホリノ、ピロリル、ピロリジノ、ベンゾオキサゾリル、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。)、シリロキシ基(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ロキシ、トリフェニルシリロ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

10

20

30

40

50

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 から選択される基を挙げることができる。

本発明において、上記アルキル基等の置換基の「炭素数」とは、アルキル基等の置換基が他の置換基によって置換されてもよい場合も含み、当該他の置換基の炭素数も包含する意味で用いる。

【0038】

Q¹で表される芳香族ヘテロ環はさらに他の環と縮合環を形成してもよく、縮合する環としては、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、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、1,2,4-トリアゾール環、オキサゾール環、チアゾール環、フラン環、チオフェン環、セレノフェン環、テルロフェン環、シロール環、ゲルモール環、ホスホール環等が挙げられ、電荷輸送性および素子の駆動耐久性の観点から、芳香環母核の安定性、薄膜のイオン化ポテンシャルや電子親和力のコントロール、 π 電子系の広がりなどを考慮すると、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、オキサゾール環、チオフェン環であり、より好ましくは、ベンゼン環、ピラジン環、イミダゾール環であり、さらに好ましくはベンゼン環、ピリジン環である。

上記の置換基および縮合環は、さらに置換基を有していてもよく、さらに他の環と縮合していてもよい。

【0039】

R¹、R²、R³およびR⁴は各々独立して水素原子または置換基を表す。R¹、R²、R³およびR⁴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各々独立に適用できる。電荷輸送性および素子の駆動耐久性の観点から、置換基の嵩高さ、電子的な摂動を考慮すると、R¹、R²、R³およびR⁴として好ましくは、水素原子、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、アミノ基、シリル基、フッ素基、シアノ基であり、より好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基であり、さらに好ましくは水素原子、アルキル基であり、特に好ましくは水素原子である。また、R¹、R²、R³およびR⁴のうち少なくとも一つは水素原子であるか、またはアリール基、芳香族ヘテロ環基以外の置換基である形態が好ましい。即ち、R¹、R²、R³およびR⁴全てがアリール基または芳香族ヘテロ環基であることはない形態が好ましい。R¹、R²、R³およびR⁴のうち少なくとも一つが、水素原子、アルキル基、アルコキシ基、アミノ基、シリル基、フッ素基、シアノ基からなる群から選ばれることがより好ましく、さらに最低励起三重項エネルギーを高く保持する観点から、R¹、R²、R³およびR⁴のうち少なくとも一つが、水素原子、アルキル基からなる群から選ばれることが更に好ましく、R¹、R²、R³およびR⁴全てが水素原子である形態が最も好ましい。

【0040】

R¹¹、R¹²およびR¹³は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、R¹¹、R¹²およびR¹³のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す。当該アルキル基としては、メチル基、エチル基、イソプロピル基、tert-ブチル基、n-オクチル基、n-デシル基、n-ヘキサデシル基、シクロプロピル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基などが挙げられ、好ましくはメチル基、エチル基、イソプロピル基である。当該アリール基、芳香族ヘテロ環基としては、フェニル基、ピリジル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、イミダゾリル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、ピラゾリル基、チエニル基、フリル基等が挙げられ、素子の駆動耐久性の観点からシリル基上の置換基は嵩高いものが好ましく、また、電荷輸送性の観点から、母核の電位や π 電子系の広がりなどを考慮すると、好ましくはフェニル基、ピリジル基であり、より好ましくはフェニル基である。

電荷輸送性、素子の駆動耐久性の観点から、R¹¹、R¹²およびR¹³とケイ素原子で表される基として好ましくは、トリフェニルシリル基、ジメチルフェニルシリル基、メチルジフェニルシリル基、エチルジフェニルシリル基、イソプロピルジフェニルシリル基であり、より好ましくはトリフェニルシリル基、ジメチルフェニルシリル基であり、さらに好ましくはトリフェニルシリル基である。

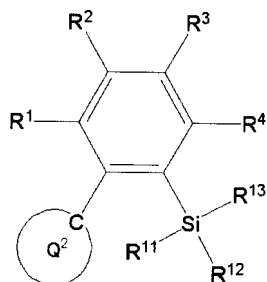
【 0 0 4 1 】

一般式 (I) で表される化合物は、電荷輸送性および素子の駆動耐久性の観点から、芳香環母核の安定性、薄膜のイオン化ポテンシャルや電子親和力のコントロール、 π 電子系の広がりなどを考慮すると、より好ましくは一般式 (I I) で表される化合物である。次に一般式 (I I) で表される化合物について説明する。

【 0 0 4 2 】

【 化 1 0 】

一般式 (II)



10

【 0 0 4 3 】

(一般式 (I I) 中、 Q^2 は含窒素芳香族ヘテロ環を表す。 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す。)

20

【 0 0 4 4 】

Q^2 は含窒素芳香族ヘテロ環を表す。 Q^2 で表される含窒素芳香族ヘテロ環としては、電荷輸送性および素子の駆動耐久性の観点から、芳香環母核の安定性、薄膜のイオン化ポテンシャルや電子親和力のコントロール、 π 電子系の広がりなどを考慮すると、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、プリダジン環、1,2,4-トリアジン環、1,3,5-トリアジン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、1,2,3-トリアゾール環、1,2,4-トリアゾール環、オキサゾール環、イソオキサゾール環、チアゾール環、イソチアゾール環、1,2,3-オキサジアゾール環、1,2,4-オキサジアゾール環、1,3,4-オキサジアゾール環、1,2,3-チアジアゾール環、1,2,4-チアジアゾール環、1,3,4-チアジアゾール環などが挙げられ、好ましくはピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、プリダジン環、1,3,5-トリアジン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、1,2,4-トリアゾール環、オキサゾール環、チアゾール環、1,3,4-オキサジアゾール環、1,3,4-チアジアゾール環などが挙げられ、好ましくはピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、1,3,5-トリアジン環、ピラゾール環、イミダゾール環、オキサゾール環、チアゾール環、より好ましくはピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、イミダゾール環、ピラゾール環、オキサゾール環、チアゾール環であり、さらに好ましくは、ピリジン環、ピラジン環、イミダゾール環であり、特に好ましくは、ピリジン環、イミダゾール環である。

30

40

【 0 0 4 5 】

Q^2 は置換基を有していてもよく、 Q^2 の置換基としては前記置換基群 A が挙げられる。また、その置換の態様は、前記 Q^1 と同様である。

【 0 0 4 6 】

Q^2 で表される含窒素芳香族ヘテロ環はさらに他の環と縮合環を形成してもよく、縮合する環としては、前記 Q^1 で表される芳香族ヘテロ環が形成する縮合環として挙げたものが適用できる。また、その縮環の態様は、前記 Q^1 と同様である。

上記の置換基および縮合環は、さらに置換基を有していてもよく、さらに他の環と縮合していてもよい。

【 0 0 4 7 】

50

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は一般式(Ⅰ)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。

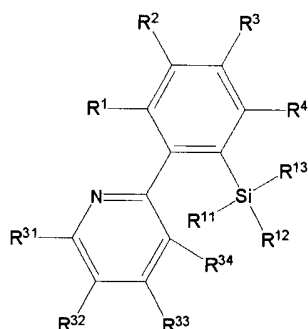
【0048】

一般式(Ⅱ)で表される化合物は、電荷輸送性および素子の駆動耐久性の観点から、芳香環母核の安定性、薄膜のイオン化ポテンシャルや電子親和力のコントロール、 π 電子系の広がりなどを考慮すると、好ましくは一般式(ⅡⅡ)で表される化合物である。次に一般式(ⅡⅡⅡ)で表される化合物について説明する。

【0049】

【化11】

一般式(Ⅲ)



10

20

【0050】

(一般式(ⅡⅡⅡ)中、 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す。 R^{31} 、 R^{32} 、 R^{33} および R^{34} は各々独立して水素原子または置換基を表す。)

【0051】

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は一般式(Ⅰ)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。

30

【0052】

R^{31} 、 R^{32} 、 R^{33} および R^{34} は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{31} 、 R^{32} 、 R^{33} および R^{34} 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各々独立に適用できる。 R^{31} 、 R^{32} 、 R^{33} および R^{34} として好ましくは、水素原子、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、アミノ基、シリル基、フッ素基、シアノ基であり、より好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基であり、さらに好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基であり、特に好ましくは水素原子である。

【0053】

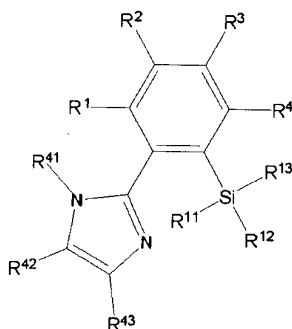
一般式(ⅡⅡ)で表される化合物の別の好ましい形態は、電荷輸送性および素子の駆動耐久性の観点から、芳香環母核の安定性、薄膜のイオン化ポテンシャルや電子親和力のコントロール、 π 電子系の広がりなどを考慮すると、下記一般式(Ⅳ)で表される化合物である。次に一般式(Ⅳ)で表される化合物について説明する。

40

【0054】

【化 1 2】

一般式(IV)



10

【0055】

(一般式(IV)中、 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は各々独立してアルキル基、アリール基、または芳香族ヘテロ環基を表し、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} のうち少なくとも一つはアリール基、または芳香族ヘテロ環基を表す。 R^{41} はアルキル基、アリール基または芳香族ヘテロ環基を表す。 R^{42} および R^{43} は各々独立して水素原子または置換基を表す。)

【0056】

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^{11} 、 R^{12} および R^{13} は一般式(I)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。

20

【0057】

R^{41} はアルキル基、アリール基または芳香族ヘテロ環基を表す。 R^{41} として好ましくはアリール基であり、より好ましくはフェニル基である。 R^{41} で表されるアルキル基、アリール基または芳香族ヘテロ環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用できる。

【0058】

R^{42} および R^{43} は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{42} および R^{43} で表される置換基としては各々独立に前記置換基群Aとして挙げたものが適用できる。 R^{42} および R^{43} として好ましくはアルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、シリル基、シアノ基、フッ素基、 R^{42} と R^{43} が連結して芳香環または芳香族ヘテロ環を形成する基であり、より好ましくは、アリール基、シアノ基、 R^{42} と R^{43} が連結して芳香環または芳香族ヘテロ環を形成する基であり、より好ましくは R^{42} と R^{43} が連結して芳香環または芳香族ヘテロ環を形成する基であり、さらに好ましくは R^{42} と R^{43} が連結してベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環を形成する基である。

30

【0059】

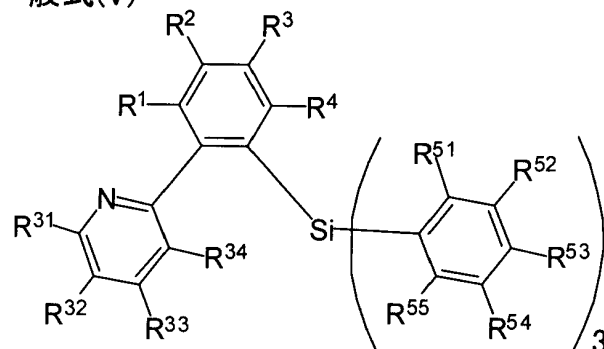
一般式(III)で表される化合物の好ましい形態は、電荷輸送性および素子の駆動耐久性の観点から、芳香環母核の安定性、薄膜のイオン化ポテンシャルや電子親和力のコントロール、 π 電子系の広がりなどを考慮すると、下記一般式(V)で表される化合物である。次に一般式(V)で表される化合物について説明する。

40

【0060】

【化 1 3】

一般式(V)



10

【0061】

(一般式(V)中、 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{31} 、 R^{32} 、 R^{33} 、 R^{34} 、 R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{54} および R^{55} は各々独立して水素原子または置換基を表す。)

【0062】

R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は一般式(I)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。

20

【0063】

R^{31} 、 R^{32} 、 R^{33} および R^{34} は一般式(III)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。

R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{54} および R^{55} は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{54} および R^{55} 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各々独立に適用できる。 R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{54} および R^{55} として好ましくは、水素原子、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、アミノ基、シリル基、フッ素基、シアノ基であり、より好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基であり、さらに好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基であり、特に好ましくは水素原子である。

30

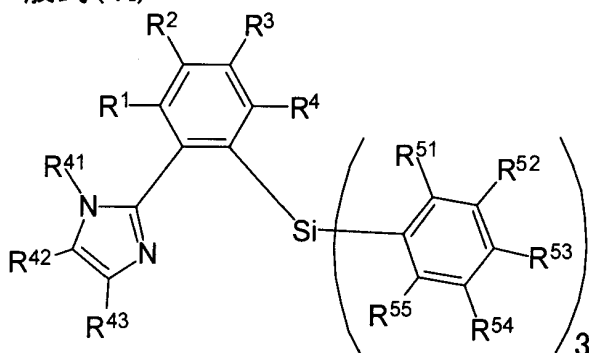
【0064】

一般式(V)で表される化合物の好ましい形態は、電荷輸送性および素子の駆動耐久性の観点から、芳香環母核の安定性、薄膜のイオン化ポテンシャルや電子親和力のコントロール、 π 電子系の広がりなどを考慮すると、下記一般式(VI)で表される化合物である。次に一般式(VI)で表される化合物について説明する。

【0065】

【化 1 4】

一般式(VI)



10

【0066】

(一般式(VI)中、 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{41} はアルキル基、アリール基または芳香族ヘテロ環基を表す。 R^{42} および R^{43} は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{54} および R^{55} は各々独立して水素原子または置換基を表す。)

20

【0067】

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 は一般式(I)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。 R^{41} 、 R^{42} および R^{43} は、一般式(IV)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。 R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{54} および R^{55} は一般式(V)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0068】

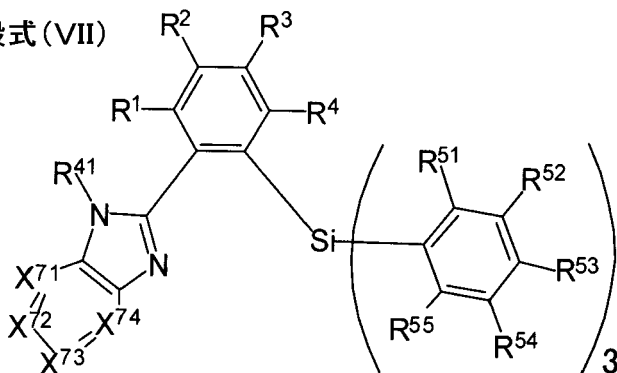
一般式(VI)で表される化合物の好ましい形態は、電荷輸送性および素子の駆動耐久性の観点から、芳香環母核の安定性、薄膜のイオン化ポテンシャルや電子親和力のコントロール、 π 電子系の広がりなどを考慮すると、下記一般式(VII)で表される化合物である。次に一般式(VII)で表される化合物について説明する。

30

【0069】

【化 1 5】

一般式(VII)



40

【0070】

(一般式(VII)中、 R^1 、 R^2 、 R^3 および R^4 は各々独立して水素原子または置換基を表す。 R^{41} はアルキル基、アリール基または芳香族ヘテロ環基を表す。 R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{54} および R^{55} は各々独立して水素原子または置換基を表す。 X^{71} 、 X^{72} 、 X^{73} およ

50

び X^{74} はそれぞれ独立して窒素原子、置換または無置換の炭素原子を表す。)

【0071】

R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 は一般式(I)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。 R^{41} は、一般式(IV)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。 R^{51} 、 R^{52} 、 R^{53} 、 R^{54} および R^{55} は一般式(V)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。 X^{71} 、 X^{72} 、 X^{73} および X^{74} はそれぞれ独立して窒素原子、置換または無置換の炭素原子を表す。 X^{71} 、 X^{72} 、 X^{73} および X^{74} が置換の炭素原子の場合、置換基としては前記置換基群Aとして挙げたものが各々独立に適用できる。電荷輸送性および素子の駆動耐久性の観点から、芳香環母核の安定性、薄膜のイオン化ポテンシャルや電子親和力のコントロール、 π 電子系の広がりなどを考慮すると、 X^{71} 、 X^{72} 、 X^{73} および X^{74} としては窒素原子と無置換の炭素原子の組み合わせが好ましく、窒素原子数は1~2が好ましい。

10

【0072】

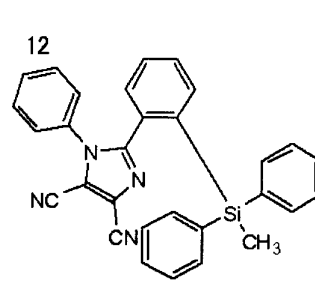
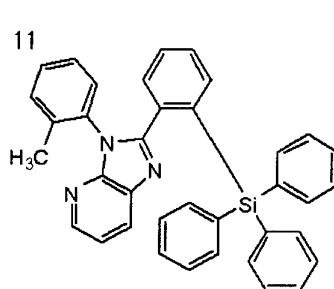
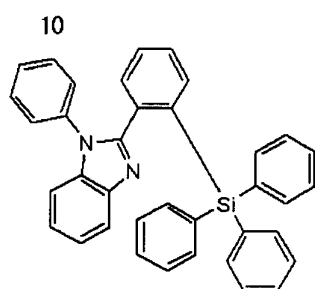
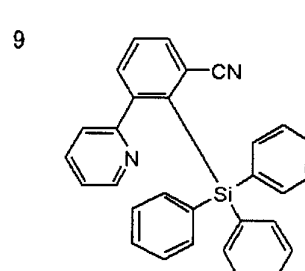
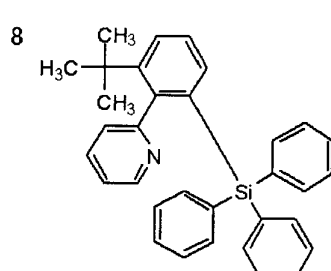
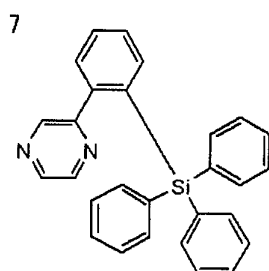
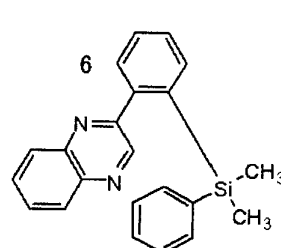
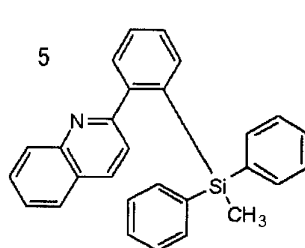
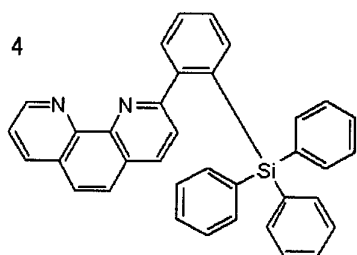
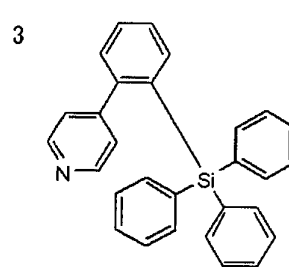
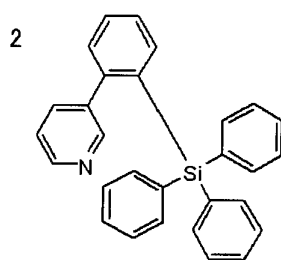
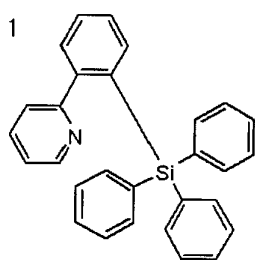
本発明の一般式(I)で表される化合物は低分子量化合物であっても良いし、残基がポリマー主鎖に接続された高分子量化合物(好ましくは質量平均分子量1000~5000000、より好ましくは5000~2000000、更に好ましくは10000~1000000)もしくは、本発明の一般式(I)で表される化合物の構造を主鎖に持つ高分子量化合物(好ましくは質量平均分子量1000~5000000、より好ましくは5000~2000000、更に好ましくは10000~1000000)であっても良い。高分子量化合物の場合はホモポリマーであっても良いし、他のポリマーとの共重合体であっても良く、共重合体である場合はランダム共重合体であっても、ブロック共重合体であっても良い。更に共重合体の場合、発光機能を有する化合物および/または電荷輸送機能を有する化合物をポリマー内に有しても良い。

20

以下に、本発明における一般式(I)~(VII)で表される化合物の具体例を例示するが、本発明はこれらに限定されるものではない。

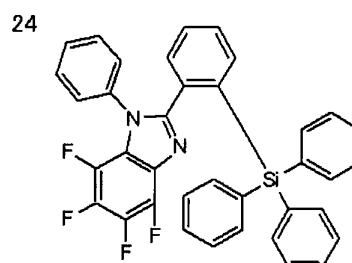
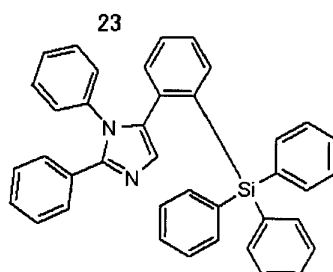
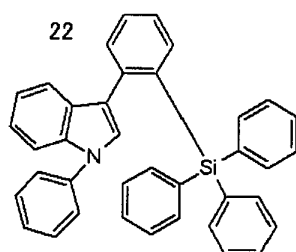
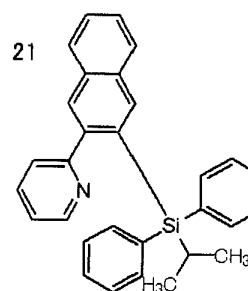
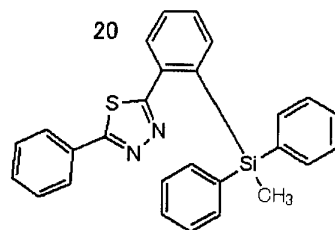
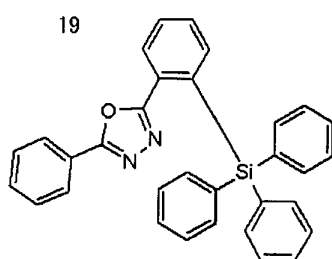
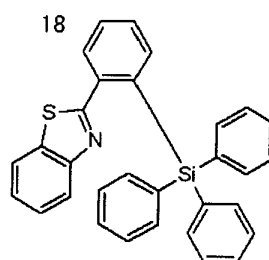
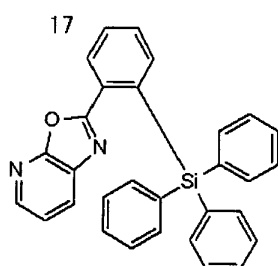
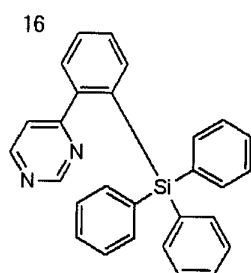
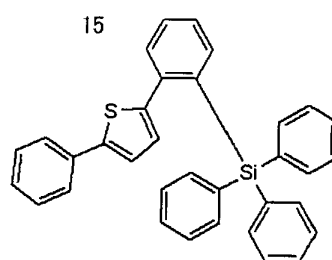
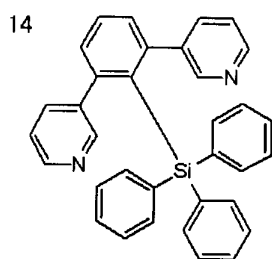
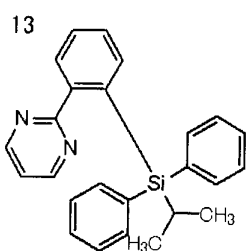
【0073】

【化 1 6】



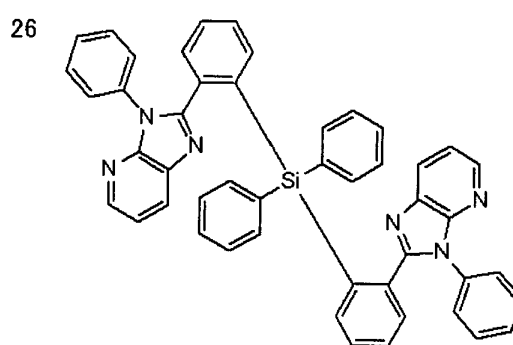
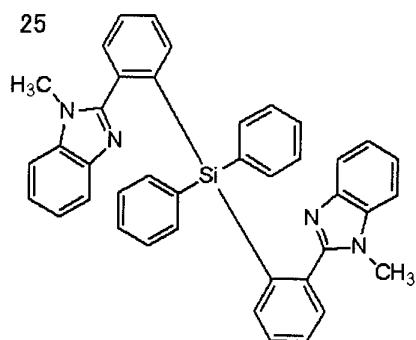
【 0 0 7 4 】

【化 17】

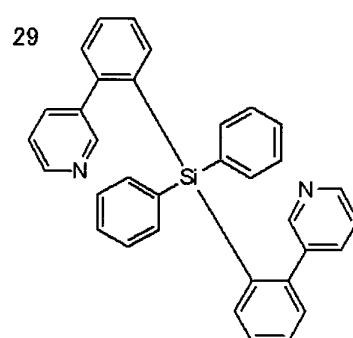
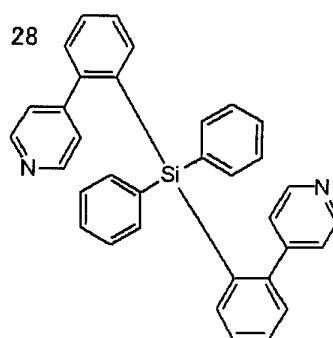
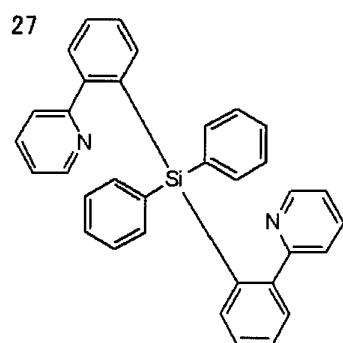


【 0 0 7 5 】

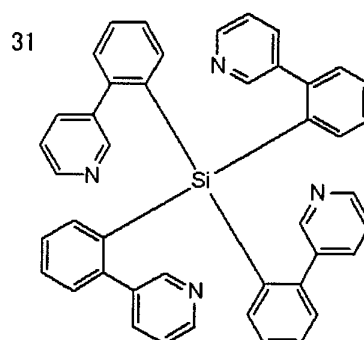
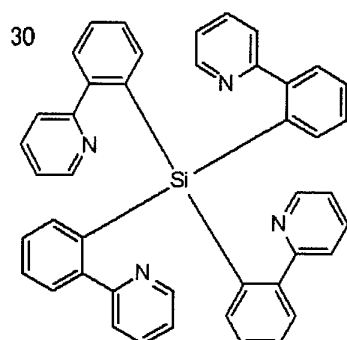
【化 1 8】



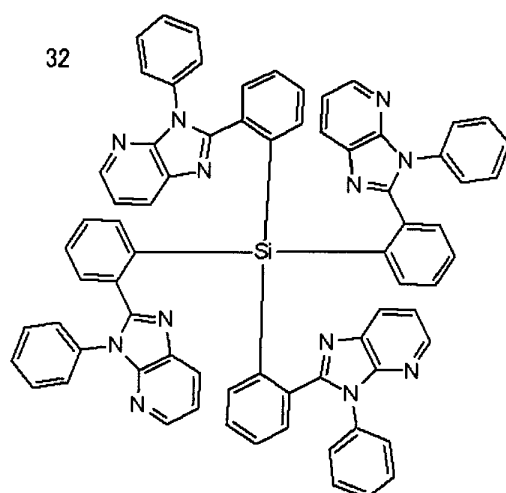
10



20



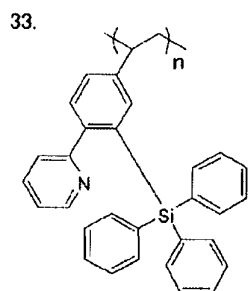
30



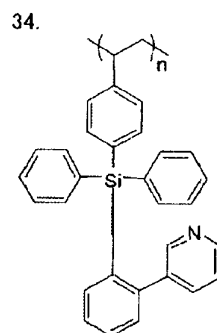
40

【 0 0 7 6 】

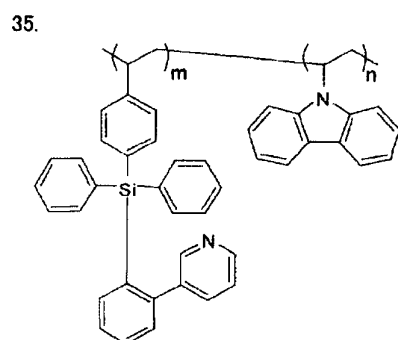
【化 19】



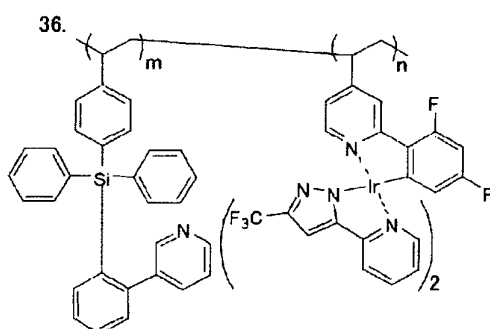
質量平均分子量=7000



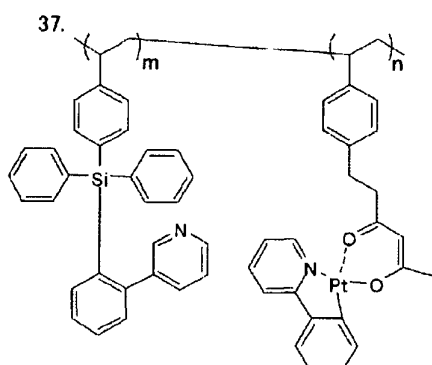
質量平均分子量=15000



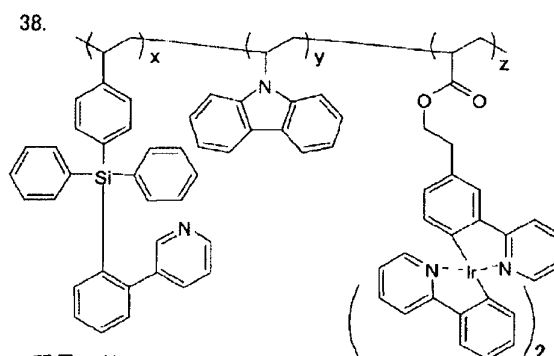
質量%比 m:n=70:30
質量平均分子量=16000



質量%比 m:n=85:15
質量平均分子量=10000



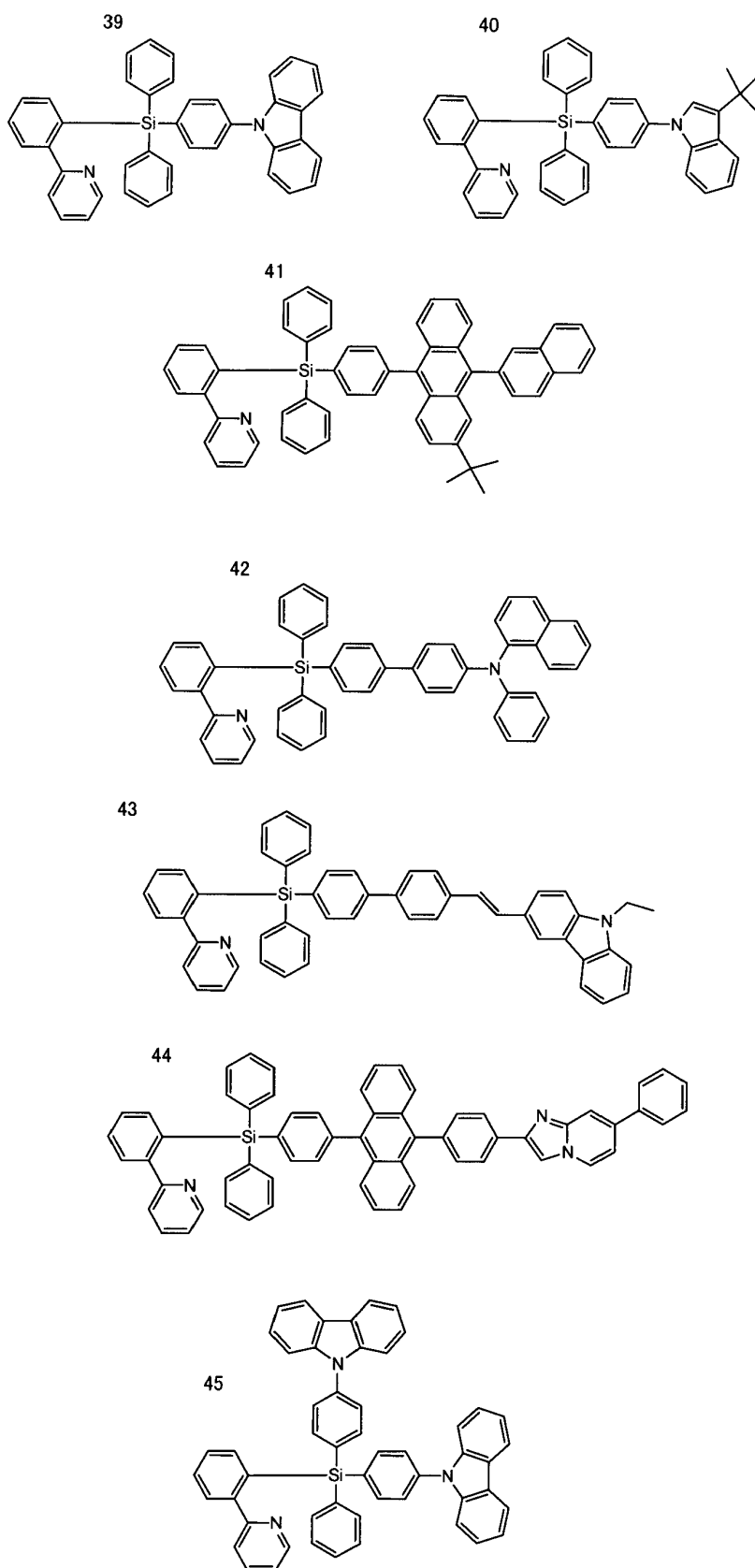
質量%比 m:n=85:15
質量平均分子量=15000



質量%比 x:y:z=50:40:10
質量平均分子量=9000

【 0 0 7 7 】

【化 2 0】



10

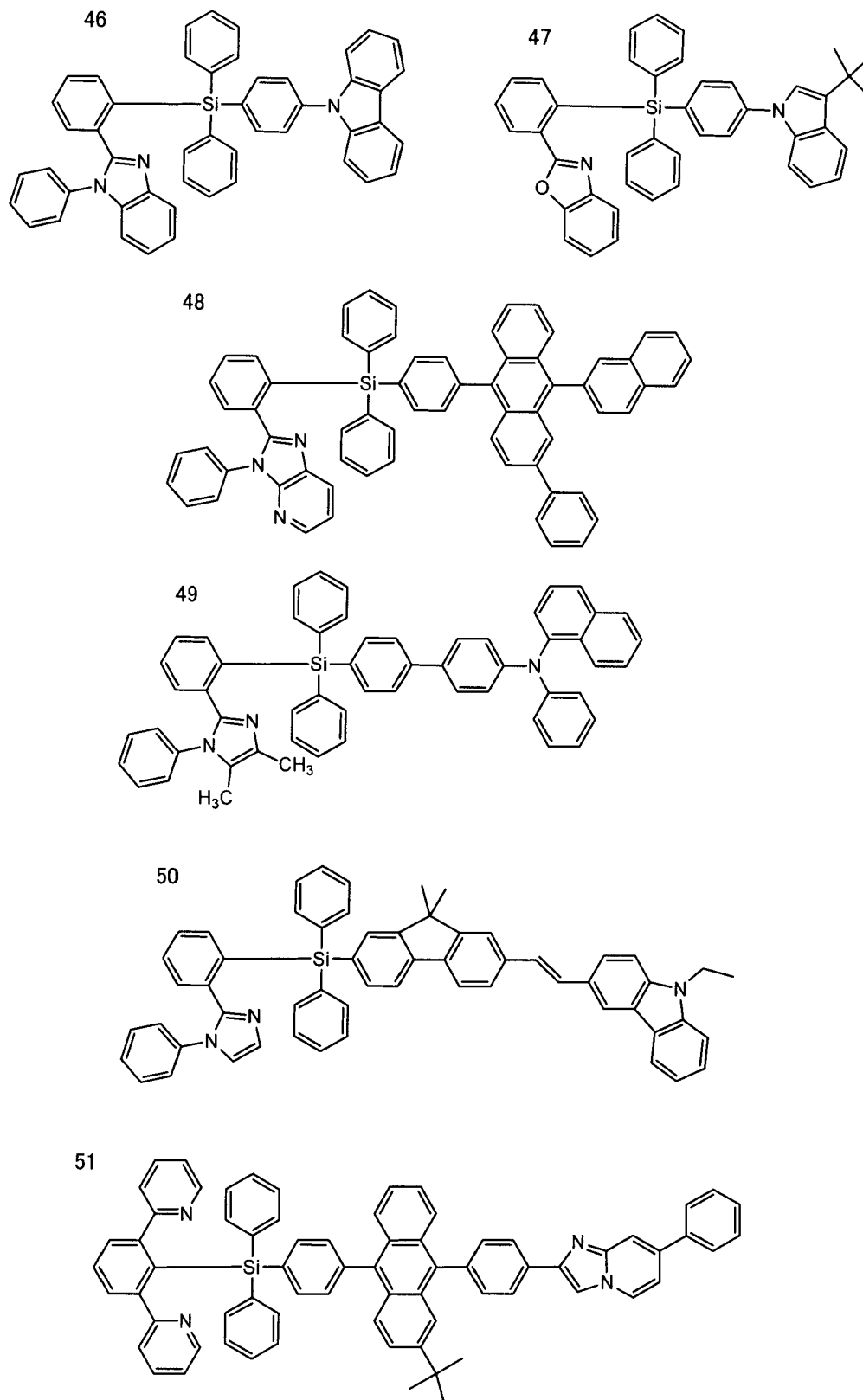
20

30

40

【 0 0 7 8】

【化 2 1】



10

20

30

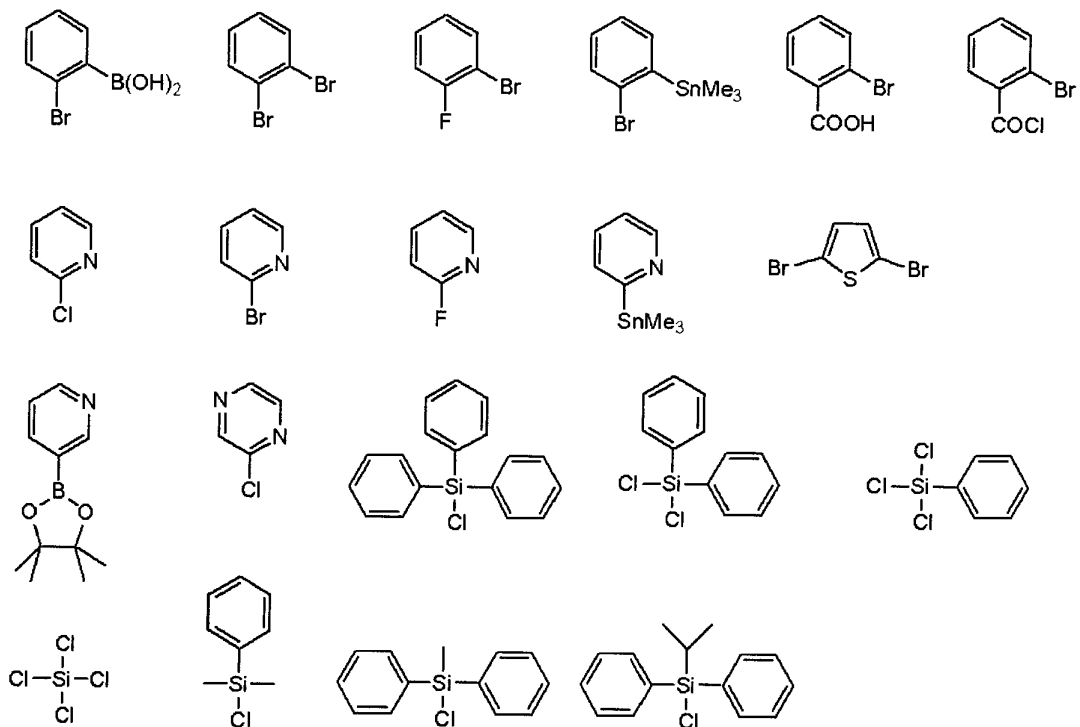
40

【 0 0 7 9 】

本発明の一般式 (I) ~ (V I I) で表される化合物は、種々の公知の合成法を組み合わせることで合成することが可能である。合成原料としては、例えば以下のものを使用できる。

【 0 0 8 0 】

【化 2 2】



10

20

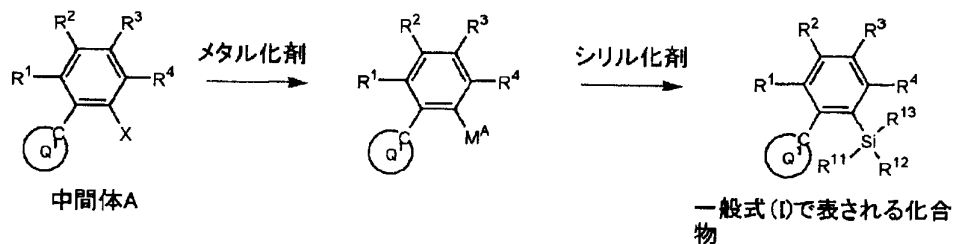
【0081】

一般式 (I) で表される化合物は、例えば以下のように、中間体Aを経由したルートAまたは中間体Bおよび中間体Cを経由したルートBで合成することができる。

【0082】

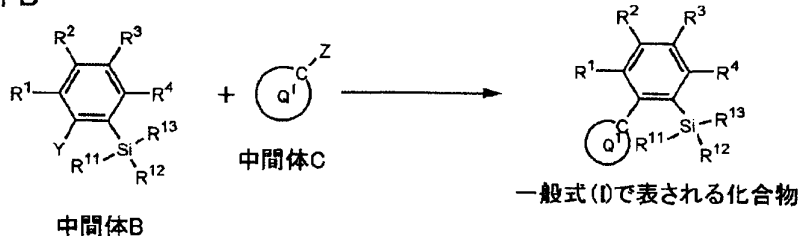
【化 2 3】

ルートA



30

ルートB



40

【0083】

ルートAにおけるXは、Cl基、Br基、I基、H基を表し、好ましくは、Br基である。 M^A は、Li、Mgを表し、好ましくはLiである。

一般式 (I) で表される化合物は、例えば次のような反応で合成できる。中間体Aの溶液 (溶媒としては、例えばジエチルエーテル、テトラヒドロフラン、ジオキサン) に、

50

0 ~ 30 で、メタル化剤（例えば *n*-ブチルリチウム、*sec*-ブチルリチウム、*tert*-ブチルリチウム、リチウムジイソプロピルアミド、ジブチル（テトラメチルピペリジノ）マグネシウムリチウム、リチウム金属、マグネシウム金属等）を作用させてメタル化した後、シリル化剤（例えばトリフェニルシリルクロリド、メチルジフェニルシリルクロリド、ジメチルフェニルシリルクロリド、ジイソプロピルフェニルシリルクロリド、メトキシトリフェニルシラン、ジフェニルシリルジクロリド、フェニルトリクロロシラン、テトラクロロシラン等）と反応させることにより、一般式（I）で表される化合物を得ることができる。

【0084】

ルートBにおけるYは、Cl基、Br基、I基、 $-\text{OSO}_2\text{CF}_3$ 基、 $-\text{OSO}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_3$ 基、 $-\text{OSO}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{CF}_3$ 基等を表す。Zは、 $-\text{B}(\text{OH})_2$ 、 $-\text{B}(\text{OR})_2$ 、（テトラメチルピナコリル）ボリル基、 $-\text{SnR}_3$ 基、Cl基、Br基、I基などを表す。

一般式（I）で表される化合物は、例えば次のような反応で合成できる。YがCl基、Br基、I基、 $-\text{OSO}_2\text{CF}_3$ 基、 $-\text{OSO}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_3$ 基、 $-\text{OSO}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{CF}_3$ 基である中間体Bと、Zが $-\text{B}(\text{OH})_2$ 、 $-\text{B}(\text{OR})_2$ 、（テトラメチルピナコリル）ボリル基である中間体C（Yに対して0.3~1.1等量）をテトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム、ビス（ジベンジリデンアセトン）パラジウム等の0価のパラジウム触媒または酢酸パラジウム、ジクロロビス（トリフェニルホスフィン）パラジウム等の2価のパラジウム触媒（Yに対して0.0001~0.5等量）、*tert*-ブトキシナトリウム、*tert*-ブトシカリウム、炭酸セシウム、炭酸ナトリウム、炭酸カリウム、リン酸三カリウム、トリエチルアミン、水酸化カリウム、水酸化ナトリウム、フッ化カリウムなどの塩基（Yに対して1.5~10等量）、また必要に応じて配位子（ホスフィン、カルベン配位子）と共に、溶媒（水、ベンゼン、トルエン、キシレンなどの芳香族炭化水素類、ジクロロエタン、クロロホルム等のハロゲン化炭化水素類、テトラヒドロフラン、1,2-ジメトキシエタン、1,4-ジオキサン、ジエチルエーテル等のエーテル類、メタノール、エタノール、イソプロピルアルコール等のアルコール類、酢酸エチル、酢酸ブチル等のエステル類）中で0~溶媒沸点の温度下で攪拌することにより、一般式（I）で表される化合物を得ることができる。

具体的な合成処方実施例に記載した。

【0085】

素子の耐久性を勘案すると、本発明の化合物のガラス転移温度（ T_g ）は、130以上、450以下であることが好ましく、より好ましくは135以上、450以下であり、さらに好ましくは140以上、450以下であり、特に好ましくは150以上、450以下であり、最も好ましくは160以上、450以下である。

【0086】

ここで、 T_g は示差走査熱量測定（DSC）、示差熱分析（DTA）などの熱測定や、X線回折（XRD）、偏光顕微鏡観察などにより確認できる。

【0087】

本発明の素子が燐光を利用する発光素子である場合には、本発明の化合物の最低励起三重項エネルギー（ T_1 エネルギー）は、60 kcal/mol（251.40 kJ/mol）以上、95 kcal/mol（398.05 kJ/mol）以下が好ましく、65 kcal/mol（272.35 kJ/mol）以上、95 kcal/mol（398.05 kJ/mol）以下がより好ましく、68 kcal/mol（284.92 kJ/mol）以上、95 kcal/mol（398.05 kJ/mol）以下がさらに好ましい。

【0088】

ここで、 T_1 エネルギーは、材料の薄膜の燐光発光スペクトルを測定し、その短波長端から求めることができる。例えば、洗浄した石英ガラス基板の上に、材料を真空蒸着法により約50 nmの膜厚に成膜し、薄膜の燐光発光スペクトルを液体窒素温度下でF-7000日立分光蛍光光度計（日立ハイテクノロジーズ）を用いて測定する。得られた発光スペクトルの短波長側の立ち上がり波長をエネルギー単位に換算することにより T_1 エネルギーを求めることができる。

【 0 0 8 9 】

次に本発明の化合物を含有する有機電界発光素子について説明する。

【 0 0 9 0 】

[有機電界発光素子]

発光層と陰極との間に少なくとも一層の有機層を有し、前記一般式 (I) で表される化合物を該発光層と陰極との間の有機層に含有することが好ましい。

本発明の有機電界発光素子は基板上に陰極と陽極を有し、両電極の間に発光層を含む有機層を有する。発光素子の性質上、陽極及び陰極のうち少なくとも一方の電極は、透明であることが好ましい。

【 0 0 9 1 】

本発明における有機層の積層の形態としては、陽極側から、正孔輸送層、発光層、電子輸送層の順に積層されている態様が好ましい。更に、正孔輸送層と陽極との間に正孔注入層、及び/又は発光層と電子輸送層との間に、電子輸送性中間層を有する。また、発光層と正孔輸送層との間に正孔輸送性中間層を、同様に陰極と電子輸送層との間に電子注入層を設けても良い。

尚、各層は複数の層に分かれていてもよい。

【 0 0 9 2 】

有機層を構成する各層は、蒸着法やスパッタ法等の乾式製膜法、転写法、印刷法、塗布法、インクジェット法、およびスプレー法等いずれによっても好適に形成することができる。

【 0 0 9 3 】

次に、本発明の発光素子を構成する要素について、詳細に説明する。

【 0 0 9 4 】

(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。その具体例としては、イットリア安定化ジルコニア (Y S Z)、ガラス等の無機材料、ポリエチレンテレフタレート、ポリブチレンフタレート、ポリエチレンナフタレート等のポリエステル、ポリスチレン、ポリカーボネート、ポリエーテルスルホン、ポリアリレート、ポリイミド、ポリシクロオレフィン、ノルボルネン樹脂、およびポリ(クロロトリフルオロエチレン)等の有機材料が挙げられる。

例えば、基板としてガラスを用いる場合、その材質については、ガラスからの溶出イオンを少なくするため、無アルカリガラスを用いることが好ましい。また、ソーダライムガラスを用いる場合には、シリカなどのバリアコートを施したものを使用することが好ましい。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。

【 0 0 9 5 】

基板の形状、構造、大きさ等については、特に制限はなく、発光素子の用途、目的等に応じて適宜選択することができる。一般的には、基板の形状としては、板状であることが好ましい。基板の構造としては、単層構造であってもよいし、積層構造であってもよく、また、単一部材で形成されていてもよいし、2以上の部材で形成されていてもよい。

【 0 0 9 6 】

基板は、無色透明であっても、有色透明であってもよいが、発光層から発せられる光を散乱又は減衰等させることがない点で、無色透明であることが好ましい。

【 0 0 9 7 】

基板には、その表面又は裏面に透湿防止層(ガスバリア層)を設けることができる。

透湿防止層(ガスバリア層)の材料としては、窒化珪素、酸化珪素などの無機物が好適に用いられる。透湿防止層(ガスバリア層)は、例えば、高周波スパッタリング法などにより形成することができる。

熱可塑性基板を用いる場合には、更に必要に応じて、ハードコート層、アンダーコート層などを設けてもよい。

【 0 0 9 8 】

(陽極)

陽極は、通常、有機層に正孔を供給する電極としての機能を有していればよく、その形状、構造、大きさ等については特に制限はなく、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。前述のごとく、陽極は、通常透明陽極として設けられる。

【 0 0 9 9 】

陽極の材料としては、例えば、金属、合金、金属酸化物、導電性化合物、又はこれらの混合物が好適に挙げられる。陽極材料の具体例としては、アンチモンやフッ素等をドーパした酸化錫 (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) 等の導電性金属酸化物、金、銀、クロム、ニッケル等の金属、さらにこれらの金属と導電性金属酸化物との混合物又は積層物、ヨウ化銅、硫化銅などの無機導電性物質、ポリアニリン、ポリチオフェン、ポリピロールなどの有機導電性材料、及びこれらと ITO との積層物などが挙げられる。この中で好ましいのは、導電性金属酸化物であり、特に、生産性、高導電性、透明性等の点からは ITO が好ましい。

10

【 0 1 0 0 】

陽極は、例えば、印刷方式、コーティング方式等の湿式方式、真空蒸着法、スパッタリング法、イオンプレーティング法等の物理的方式、CVD、プラズマCVD法等の化学的方式などの中から、陽極を構成する材料との適性を考慮して適宜選択した方法に従って、前記基板上に形成することができる。例えば、陽極の材料として、ITOを選択する場合には、陽極の形成は、直流又は高周波スパッタ法、真空蒸着法、イオンプレーティング法等に従って行うことができる。

20

【 0 1 0 1 】

本発明の有機電界発光素子において、陽極の形成位置としては特に制限はなく、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、前記基板上に形成されるのが好ましい。この場合、陽極は、基板における一方の表面の全部に形成されていてもよく、その一部に形成されていてもよい。

【 0 1 0 2 】

なお、陽極を形成する際のパターンニングとしては、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。

30

【 0 1 0 3 】

陽極の厚みとしては、陽極を構成する材料により適宜選択することができ、一概に規定することはできないが、通常、10 nm ~ 50 μ m 程度であり、50 nm ~ 20 μ m が好ましい。

【 0 1 0 4 】

陽極の抵抗値としては、 $10^3 \Omega / \square$ 以下が好ましく、 $10^2 \Omega / \square$ 以下がより好ましい。陽極が透明である場合は、無色透明であっても、有色透明であってもよい。透明陽極側から発光を取り出すためには、その透過率としては、60 % 以上が好ましく、70 % 以上がより好ましい。

40

【 0 1 0 5 】

なお、透明陽極については、沢田豊監修「透明導電膜の新展開」シーエムシー刊 (1999) に詳述があり、ここに記載される事項を本発明に適用することができる。耐熱性の低いプラスチック基材を用いる場合は、ITO 又は IZO を使用し、150 以下の低温で成膜した透明陽極が好ましい。

【 0 1 0 6 】

(陰極)

陰極は、通常、有機層に電子を注入する電極としての機能を有していればよく、その形

50

状、構造、大きさ等については特に制限はなく、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。

【0107】

陰極を構成する材料としては、例えば、金属、合金、金属酸化物、電気伝導性化合物、これらの混合物などが挙げられる。具体例としてはアルカリ金属（たとえば、Li、Na、K、Cs等）、アルカリ土類金属（たとえばMg、Ca等）、金、銀、鉛、アルミニウム、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、インジウム、およびイッテルビウム等の希土類金属などが挙げられる。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できる。

10

【0108】

これらの中でも、陰極を構成する材料としては、電子注入性の点で、アルカリ金属やアルカリ土類金属が好ましく、保存安定性に優れる点で、アルミニウムを主体とする材料が好ましい。

アルミニウムを主体とする材料とは、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）をいう。

【0109】

なお、陰極の材料については、特開平2 - 15595号公報、特開平5 - 121172号公報に詳述されており、これらの広報に記載の材料は、本発明においても適用することができる。

20

【0110】

陰極の形成方法については、特に制限はなく、公知の方法に従って行うことができる。例えば、印刷方式、コーティング方式等の湿式方式、真空蒸着法、スパッタリング法、イオンプレーティング法等の物理的方式、CVD、プラズマCVD法等の化学的方式などの中から、前記した陰極を構成する材料との適性を考慮して適宜選択した方法に従って形成することができる。例えば、陰極の材料として、金属等を選択する場合には、その1種又は2種以上を同時又は順次にスパッタ法等に従って行うことができる。

【0111】

陰極を形成するに際してのパターニングは、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、レーザーなどによる物理的エッチングによって行ってもよく、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。

30

【0112】

本発明において、陰極形成位置は特に制限はなく、有機層上の全部に形成されていてもよく、その一部に形成されていてもよい。

また、陰極と前記有機層との間に、アルカリ金属又はアルカリ土類金属のフッ化物、酸化物等による誘電体層を0.1nm ~ 5nmの厚みで挿入してもよい。この誘電体層は、一種の電子注入層と見ることにもできる。誘電体層は、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等により形成することができる。

40

【0113】

陰極の厚みは、陰極を構成する材料により適宜選択することができ、一概に規定することはできないが、通常10nm ~ 5μm程度であり、50nm ~ 1μmが好ましい。

また、陰極は、透明であってもよいし、不透明であってもよい。なお、透明な陰極は、陰極の材料を1nm ~ 10nmの厚さに薄く成膜し、更にITOやIZO等の透明な導電性材料を積層することにより形成することができる。

【0114】

（有機層）

本発明における有機層について説明する。

本発明の有機EL素子は、発光層を含む少なくとも一層の有機層を有しており、発光層

50

以外の他の有機層としては、前述したごとく、正孔輸送層、電子輸送層、電荷ブロック層、正孔注入層、電子注入層等の各層が挙げられる。

【0115】

本発明の有機EL素子において、有機層を構成する各層は、蒸着法やスパッタ法等の乾式製膜法、湿式塗布方式、転写法、印刷法、インクジェット方式等いずれによっても好適に形成することができる。

【0116】

(発光層)

発光層は、電界印加時に、陽極、正孔注入層、又は正孔輸送層から正孔を受け取り、陰極、電子注入層、又は電子輸送層から電子を受け取り、正孔と電子の再結合の場を提供して発光させる機能を有する層である。

10

本発明における発光層は、発光材料のみで構成されていても良く、ホスト材料と発光材料の混合層とした構成でも良い。ホスト材料としては、本発明の一般式(I)で表される化合物が好ましいが、本発明以外のものを併用乃至単独で使用することもできる。詳細は後述の<ホスト材料>の項で記載される。

また、発光層は1層であっても2層以上であってもよく、それぞれの層が異なる発光色で発光してもよい。さらに、発光層中に電荷輸送性を有さず、発光しない材料を含んでいても良い。

【0117】

<発光材料>

20

本発明における発光材料としては、燐光性発光材料、蛍光性発光材料等いずれも用いることができる。

本発明における発光層は、色純度を向上させるためや発光波長領域を広げるために2種類以上の発光材料を含有することができる。発光材料の少なくとも一種が燐光発光材料であることが好ましい。

本発明における発光材料は、更に前記ホスト材料との間で、 $1.2\text{ eV} > I_p > 0.2\text{ eV}$ 、及び/又は $1.2\text{ eV} > E_a > 0.2\text{ eV}$ の関係を満たすことが駆動耐久性の観点で好ましい。ここで、 I_p は、ホスト材料と発光材料の I_p 値の差を、 E_a はホスト材料と発光材料の E_a 値の差を意味する。

前記発光材料の少なくとも一種が白金錯体またはイリジウム錯体であることが好ましい。

30

【0118】

《蛍光発光材料》

前記蛍光発光材料としては、一般には、ベンゾオキサゾール、ベンゾイミダゾール、ベンゾチアゾール、スチリルベンゼン、ポリフェニル、ジフェニルブタジエン、テトラフェニルブタジエン、ナフタルイミド、クマリン、ピラン、ペリノン、オキサジアゾール、アルダジン、ピラリジン、シクロペンタジエン、ビススチリルアントラセン、キナクリドン、ピロロピリジン、チアジアゾロピリジン、シクロペンタジエン、スチリルアミン、芳香族ジメチリデン化合物、縮合多環芳香族化合物(アントラセン、フェナントロリン、ピレン、ペリレン、ルブレン、またはペンタセンなど)、8-キノリノールの金属錯体、ピロメテン錯体や希土類錯体に代表される各種金属錯体、ポリチオフェン、ポリフェニレン、ポリフェニレンビニレン等のポリマー化合物、有機シラン、およびこれらの誘導体などを挙げることができる。

40

【0119】

《燐光発光材料》

前記燐光発光材料としては、一般に、遷移金属原子又はランタノイド原子を含む錯体を挙げることができる。

例えば、該遷移金属原子としては、特に限定されないが、好ましくは、ルテニウム、ロジウム、パラジウム、タンゲステン、レニウム、オスミウム、イリジウム、金、銀、銅、及び白金が挙げられ、より好ましくは、レニウム、イリジウム、及び白金であり、更に好

50

ましくはイリジウム、白金である。

ランタノイド原子としては、例えばランタン、セリウム、プラセオジウム、ネオジウム、サマリウム、ユーロピウム、ガドリニウム、テルビウム、ジスプロシウム、ホルミウム、エルビウム、ツリウム、イッテルビウム、およびルテシウムが挙げられる。これらのランタノイド原子の中でも、セリウム、ネオジウム、ユーロピウム、及びガドリニウムが好ましい。

【0120】

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。

具体的な配位子としては、好ましくは、ハロゲン配位子（好ましくは塩素配位子）、芳香族炭素環配位子（例えば、好ましくは炭素数 5 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 30、さらに好ましくは炭素数 6 ~ 20 であり、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、シクロペンタジエニルアニオン、ベンゼンアニオン、またはナフチルアニオンなど）、含窒素ヘテロ環配位子（例えば、好ましくは炭素数 5 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 30、さらに好ましくは炭素数 6 ~ 20 であり、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、ピラゾリルピリジン、ピロリルピリジン、イミダゾリルピリジン、トリアゾリルピリジン、フェニルイソキノリン、ピコリン酸、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、またはフェナントロリンなど）、ジケトン配位子（例えば、アセチルアセトンなど）、カルボン酸配位子（例えば、好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、さらに好ましくは炭素数 2 ~ 16 であり、酢酸配位子など）、アルコラト配位子（例えば、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、さらに好ましくは炭素数 6 ~ 20 であり、フェノラト配位子など）、シリルオキシ配位子（例えば、好ましくは炭素数 3 ~ 40、より好ましくは炭素数 3 ~ 30、さらに好ましくは炭素数 3 ~ 20 であり、例えば、トリメチルシリルオキシ配位子、ジメチル - tert - ブチルシリルオキシ配位子、トリフェニルシリルオキシ配位子など）、一酸化炭素配位子、イソニトリル配位子、シアノ配位子、リン配位子（好ましくは炭素数 3 ~ 40、より好ましくは炭素数 3 ~ 30、さらに好ましくは炭素数 3 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 20 であり、例えば、トリフェニルホスフィン配位子など）、チオラト配位子（好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、さらに好ましくは炭素数 6 ~ 20、例えば、フェニルチオラト配位子など）、ホスフィンオキシド配位子（好ましくは炭素数 3 ~ 30、より好ましくは炭素数 8 ~ 30、さらに好ましくは炭素数 18 ~ 30、例えば、トリフェニルホスフィンオキシド配位子など）であり、より好ましくは、含窒素ヘテロ環配位子である。

上記錯体は、化合物中に遷移金属原子を一つ有してもよいし、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。

【0121】

燐光発光材料の具体例としては、例えば、US 6 303 238 B1、US 6 097 147、US 6 653 654、WO 00 / 57676、WO 00 / 70655、WO 01 / 08230、WO 01 / 39234 A2、WO 01 / 41512 A1、WO 02 / 02714 A2、WO 02 / 15645 A1、WO 02 / 44189 A1、WO 04 / 108857、WO 04 / 081017、WO 04 / 085450、WO 05 / 113704、WO 05 / 019373 A2、WO 05 / 042444、WO 05 / 042550、WO 06 / 098505、WO 06 / 121811、WO 06 / 014599、WO 07 / 095118、特開 2001 - 247859、特開 2002 - 302671、特開 2002 - 117978、特開 2003 - 133074、特開 2002 - 235076、特開 2003 - 123982、特開 2002 - 170684、EP 1 211 257、特開 2002 - 2

10

20

30

40

50

2 6 4 9 5、特開 2 0 0 2 - 2 3 4 8 9 4、特開 2 0 0 1 - 2 4 7 8 5 9、特開 2 0 0 1 - 2 9 8 4 7 0、特開 2 0 0 2 - 1 7 3 6 7 4、特開 2 0 0 2 - 2 0 3 6 7 8、特開 2 0 0 2 - 2 0 3 6 7 9、特開 2 0 0 4 - 3 5 7 7 9 1、特開 2 0 0 5 - 3 1 0 7 3 3、特開 2 0 0 5 - 3 1 7 5 1 6、特開 2 0 0 6 - 2 6 1 6 2 3、特開 2 0 0 6 - 2 3 2 7 8 4、特開 2 0 0 6 - 2 5 6 9 9 9、特開 2 0 0 7 - 1 9 4 6 2、特開 2 0 0 7 - 8 4 6 3 5、特開 2 0 0 7 - 9 6 2 5 9 等の特許文献に記載の燐光発光化合物などが挙げられる。また、その他の錯体燐光発光材料としては、Coordination Chemistry Reviews 250 (2006) 2093 - 2126 に記載の化合物が挙げられる。燐光発光材料としては、金属 - 炭素結合、金属 - 窒素結合、金属 - 酸素結合、金属 - 硫黄結合の少なくとも一つの配位様式を含むイリジウム錯体、白金錯体、またはレニウム錯体が好ましい。更に、発光効率、駆動耐久性、色度等の観点で、3 座以上の多座配位子を含むイリジウム錯体、白金錯体、またはレニウム錯体が特に好ましい。白金錯体が三座または四座の配位子の白金錯体であることが最も好ましい。

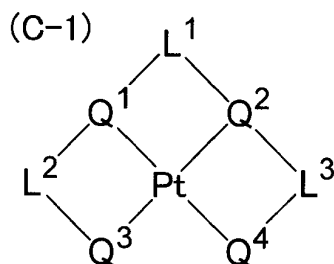
10

【0122】

上記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。

【0123】

【化24】



20

【0124】

(式中、 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 および 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 および L^3 はそれぞれ独立に単結合または二価の連結基を表す。)

一般式 (C - 1) について説明する。 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 および 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 および 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 および 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 および 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い。

30

炭素原子で Pt に結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 および 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、チオフェン配位子、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および、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。

40

窒素原子で Pt に結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 および 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、チアゾール配位子およ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

50

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およ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。

酸素原子で P t に結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 および 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およ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などが挙げられる。

硫黄原子で P t に結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 および 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、チアゾール配位子およ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、アリールメルカプト配位子、ヘテロアリールメルカプト配位子などが挙げられる。

リン原子で P t に結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 および 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 および 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）。

【0125】

Q^1 、 Q^2 、 Q^3 および 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、さら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。

【0126】

L^1 、 L^2 および L^3 は、単結合または二価の連結基を表す。 L^1 、 L^2 および 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、ナフタレンジル）、ヘテロアリーレン基（ピリジンジイル、チオフエンジイルなど）、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）、また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、さらに置換基を有していてもよい。

L^1 、 L^2 および 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、さらに好ましくは単結合、アルキレン基、アリーレン基であり、さらに好ましくは、単結合、メチレン基、フェニレン基であり、さらに好ましくは単結合、ジ置換のメチレン基であり、さら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

10

20

30

40

50

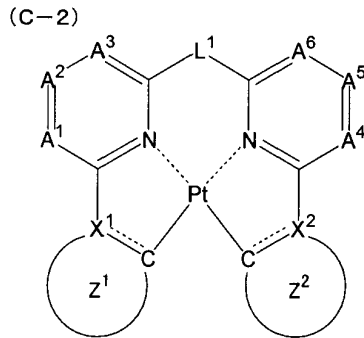
タンジイル基、フルオレンジイル基、フルオロメチルメチレン基であり、特に好ましくは単結合、ジメチルメチレン基、ジフェニルメチレン基、シクロヘキサンジイル基である。

【 0 1 2 7 】

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。

【 0 1 2 8 】

【 化 2 5 】



10

【 0 1 2 9 】

(式中、 L^1 は単結合または二価の連結基を表す。 $A^1 \sim A^6$ は、それぞれ独立に C - R または N を表す。R は水素原子または置換基を表す。 X^1 および X^2 は C または N を表す。 Z^1 および Z^2 は式中の X - C と共に形成される 5 または 6 員の芳香環または芳香族ヘテロ環を表す。

20

【 0 1 3 0 】

一般式 (C - 2) について説明する。 L^1 は前記一般式 (C - 1) 中のそれと同義であり、また好ましい範囲も同様である。 $A^1 \sim A^6$ はそれぞれ独立に C - R または N を表す。R は水素原子または置換基を表す。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。

$A^1 \sim A^6$ 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。 $A^1 \sim A^6$ が C - R である場合に、 A^2 、 A^5 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、フッ素基であり、 A^1 、 A^3 、 A^4 、 A^6 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。 X^1 および X^2 は C または N を表す。 Z^1 は式中の X^1 - C と共に形成される 5 または 6 員の芳香族炭化水素環または芳香族ヘテロ環を表す。 Z^2 は式中の X^2 - C と共に形成される 5 または 6 員の芳香族炭化水素環または芳香族ヘテロ環を表す。 Z^1 および Z^2 で表される芳香族炭化水素環または芳香族ヘテロ環としては、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、ピレン環、フェナントレン環、ペリレン環、ピリジン環、キノリン環、イソキノリン環、フェナントリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、ピリダジン環、トリアジン環、シンノリン環、アクリジン環、フタラジン環、キナゾリン環、キノキサリン環、ナフチリジン環、プテリジン環、ピロール環、ピラゾール環、トリアゾール環、インドール環、カルバゾール環、インダゾール環、ベンゾイミダゾール環、オキサゾール環、チアゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、ベンゾオキサゾール環、ベンゾチアゾール環、イミダゾピリジン環、チオフェン環、ベンゾチオフェン環、フラン環、ベンゾフラン環、ホスホール環、ホスフィニン環、シロール環などが挙げられる。 Z^1 および Z^2 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用できる。また、 Z^1 および Z^2 は他の環と縮合環を形成していても良い。

30

40

50

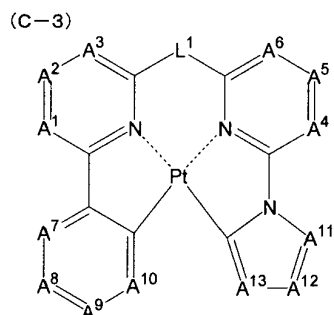
Z^1 および Z^2 として好ましくは、ベンゼン環、ナフタレン環、ピラゾール環、イミダゾール環、トリアゾール環、ピリジン環、インドール環、チオフェン環であり、より好ましくはベンゼン環、ピラゾール環、ピリジン環である。

【 0 1 3 1 】

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。

【 0 1 3 2 】

【 化 2 6 】



10

【 0 1 3 3 】

(式中、 $A^1 \sim A^{13}$ は、それぞれ独立に、C - RまたはNを表す。Rは水素原子または置換基を表す。 L^1 は単結合または二価の連結基を表す。)

20

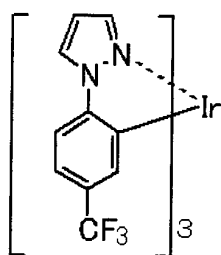
【 0 1 3 4 】

発光材料の具体例としては例えば下記のもの挙げられるが、これらに限定されるものではない。

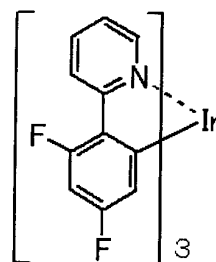
【 0 1 3 5 】

【化 2 7】

D-1

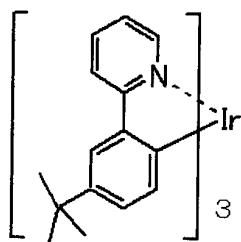


D-2

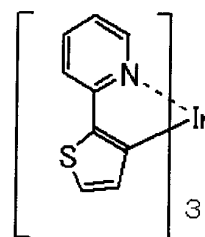


10

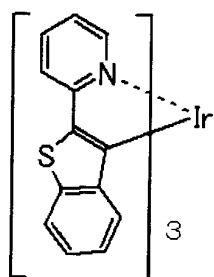
D-3



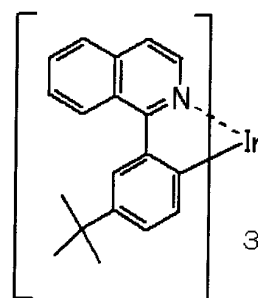
D-4



D-5

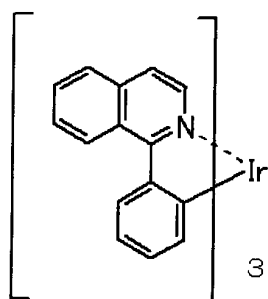


D-6

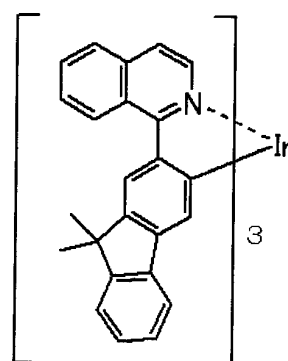


20

D-7

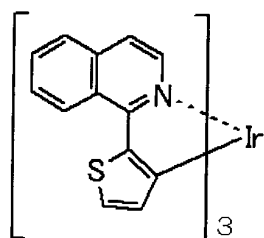


D-8



30

D-9

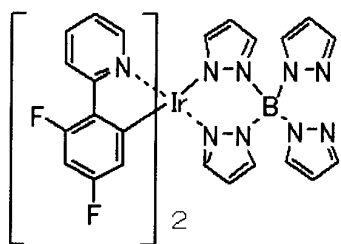


40

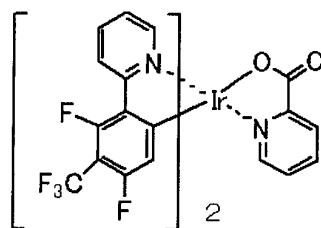
【 0 1 3 6 】

【化 2 8】

D-10

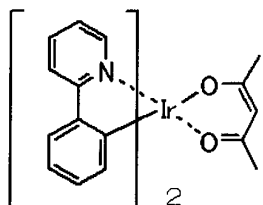


D-11

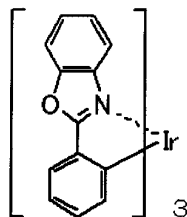


10

D-12

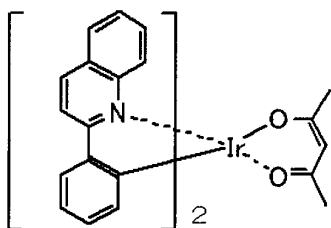


D-13

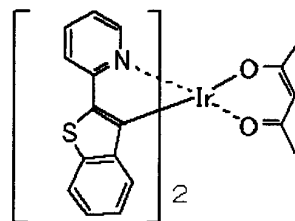


20

D-14

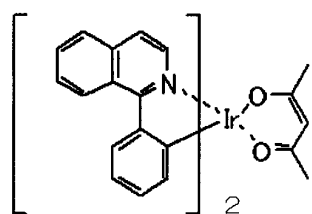


D-15

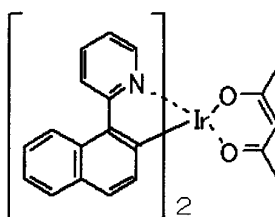


30

D-16



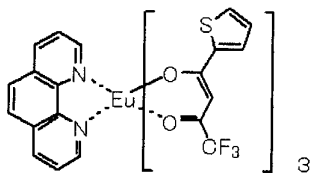
D-17



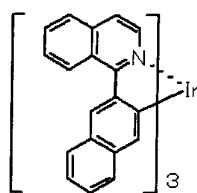
【 0 1 3 7 】

【化 2 9】

D-18

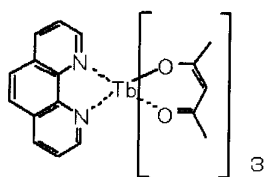


D-19

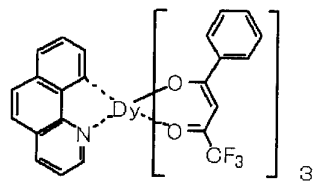


10

D-20

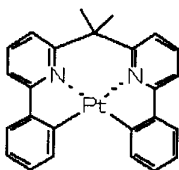


D-21

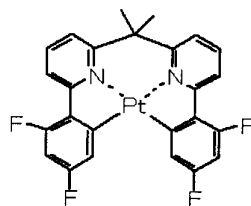


20

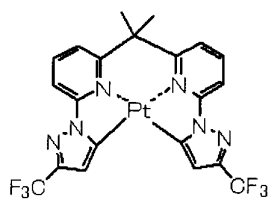
D-22



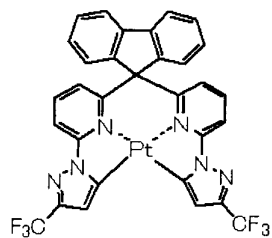
D-23



D-24

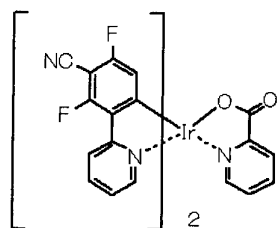


D-25



30

D-26

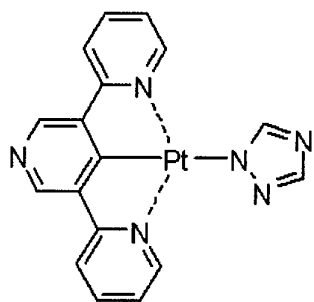


40

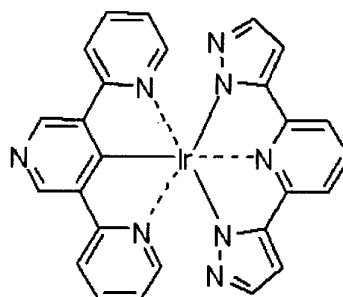
【 0 1 3 8 】

【化 3 0】

D-27

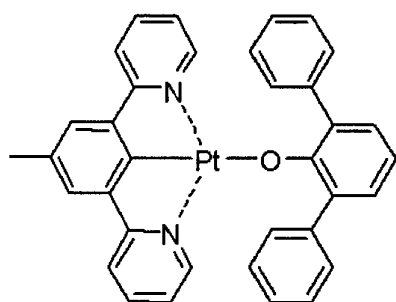


D-28

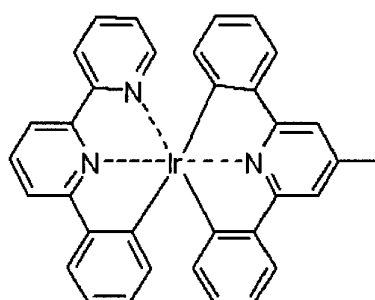


10

D-29

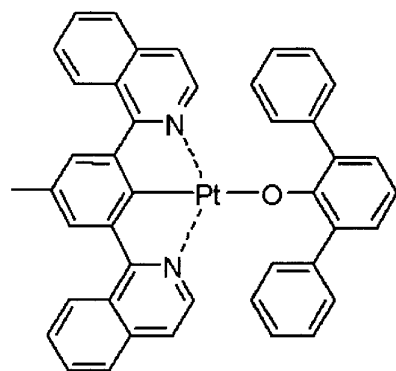


D-30

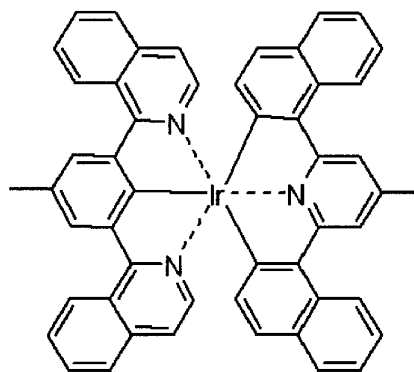


20

D-31



D-32

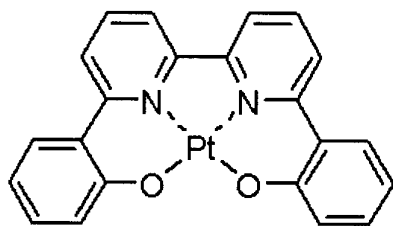


30

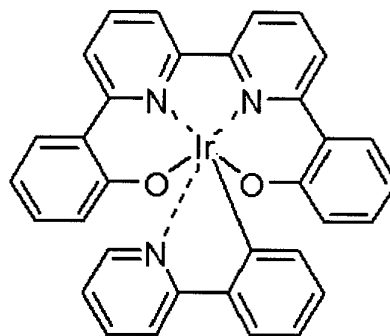
【 0 1 3 9】

【化 3 1】

D-33

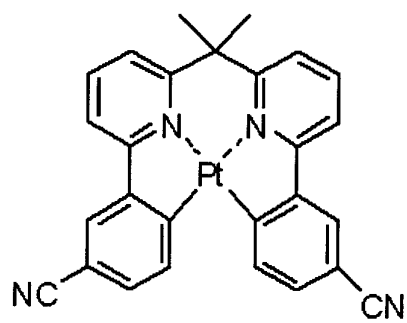


D-34

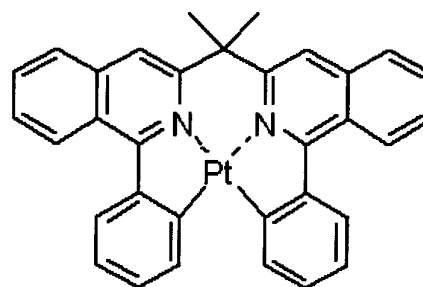


10

D-35

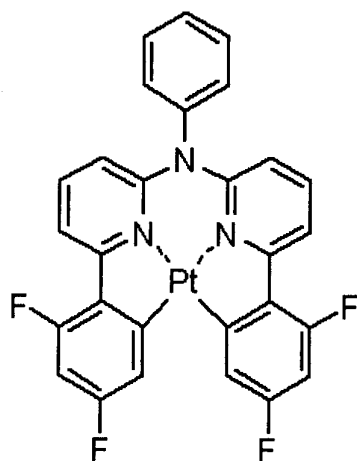


D-36



20

D-37



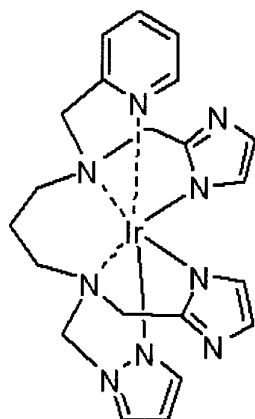
30

40

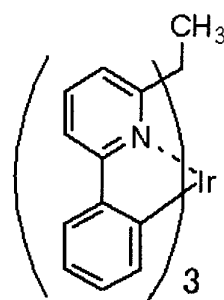
【 0 1 4 0 】

【化 3 2】

D-38

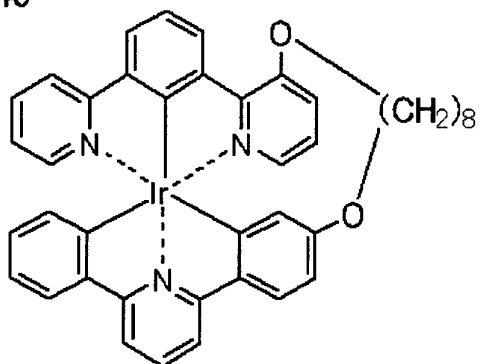


D-39

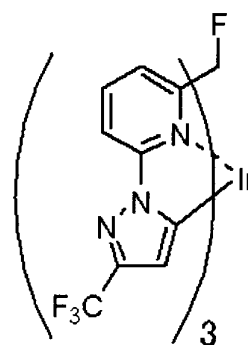


10

D-40

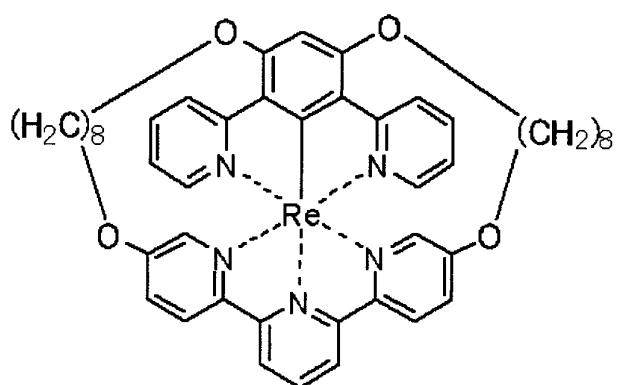


D-41

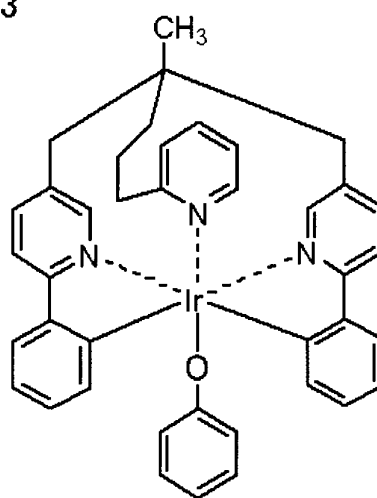


20

D-42



D-43

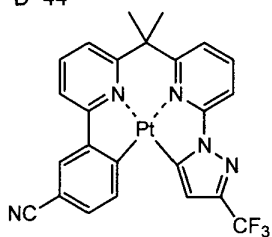


40

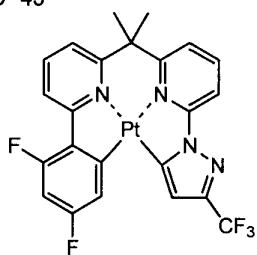
【 0 1 4 1】

【化 3 3】

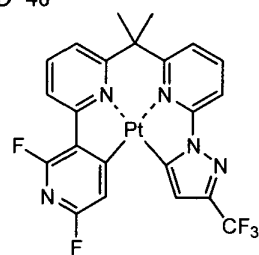
D-44



D-45

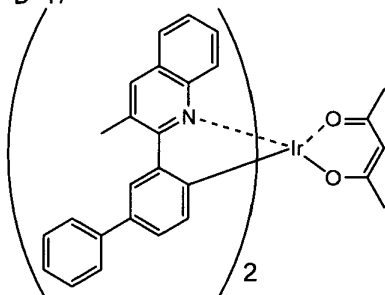


D-46

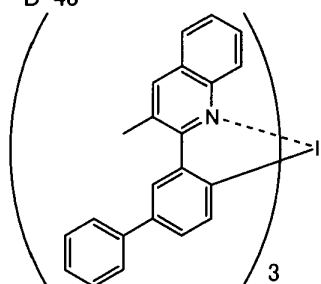


10

D-47

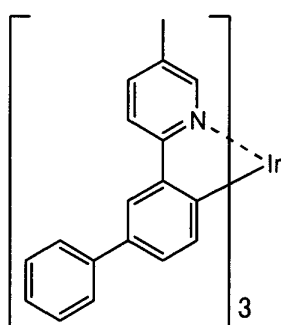


D-48

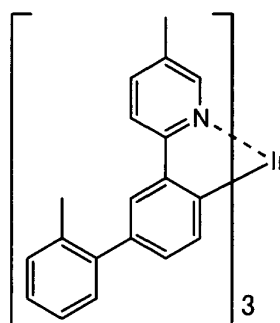


20

D-49

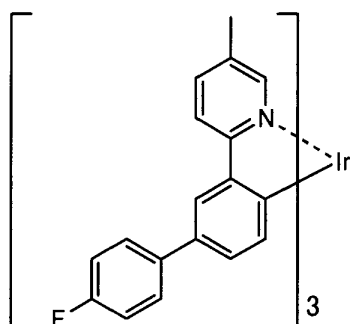


D-50

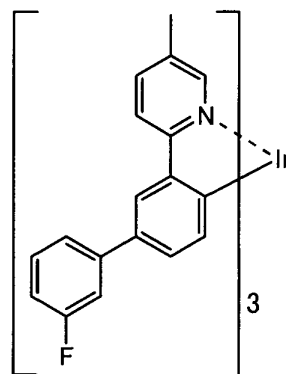


30

D-51



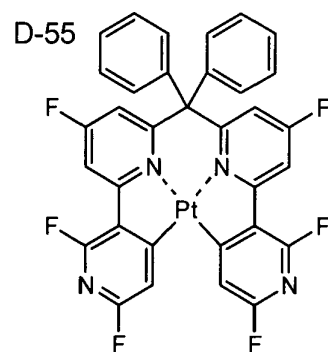
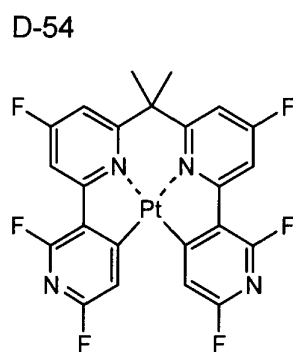
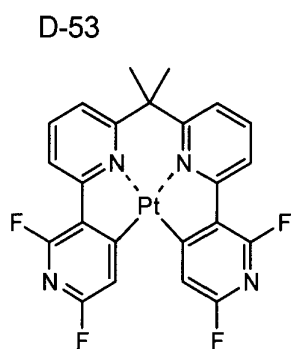
D-52



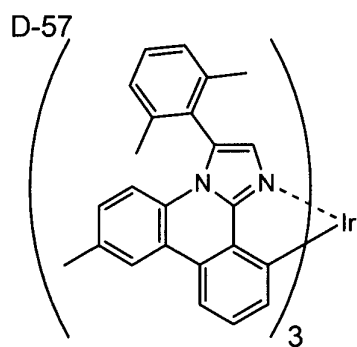
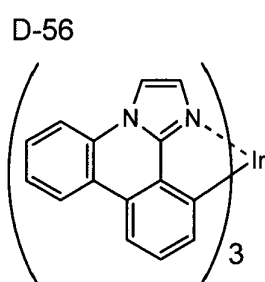
40

【 0 1 4 2 】

【化 3 4】



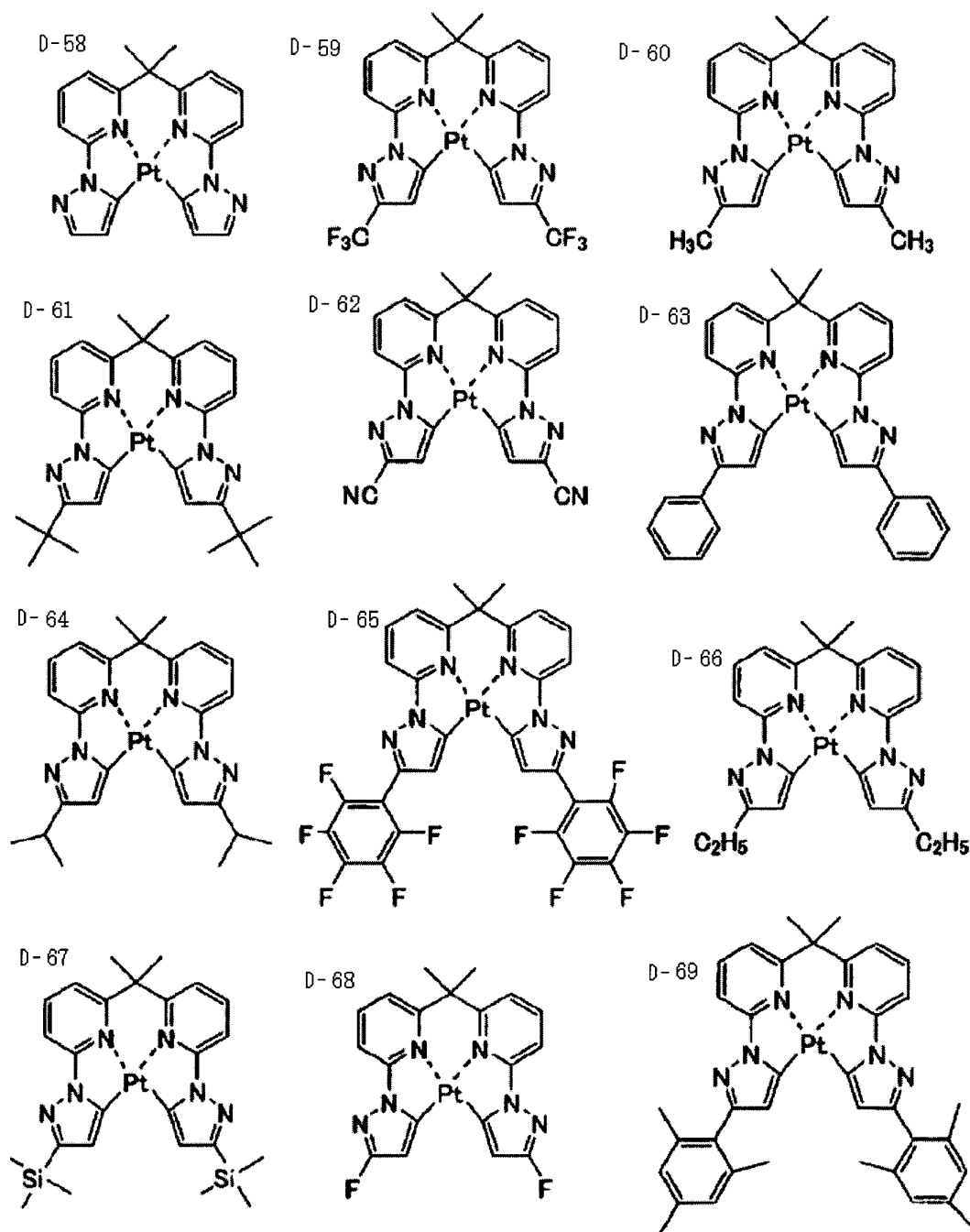
10



20

【 0 1 4 3】

【化 3 5】



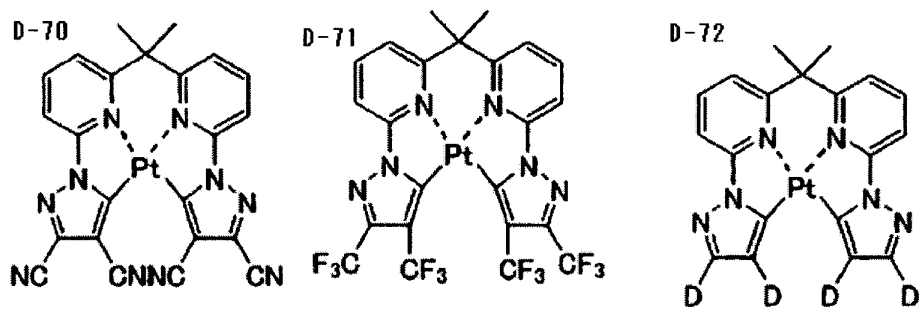
10

20

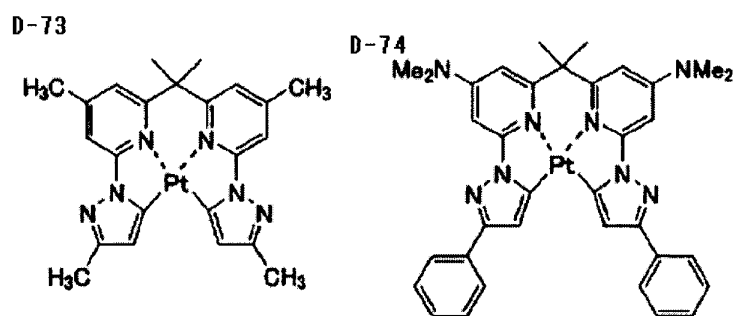
30

【 0 1 4 4 】

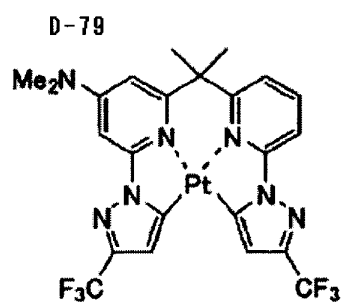
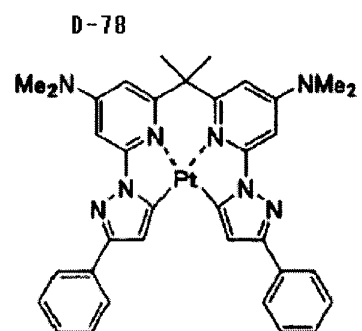
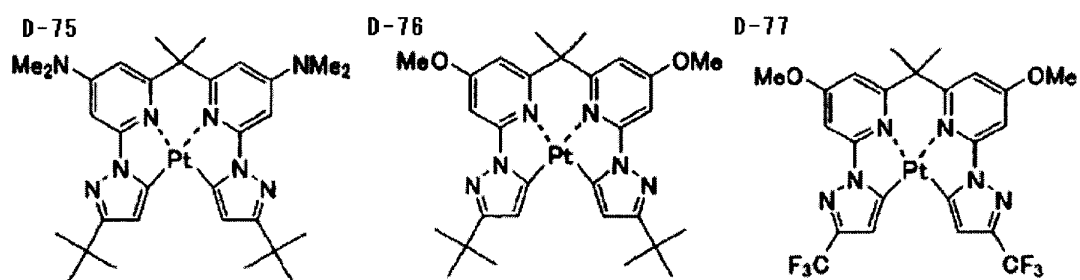
【化 3 6】



10



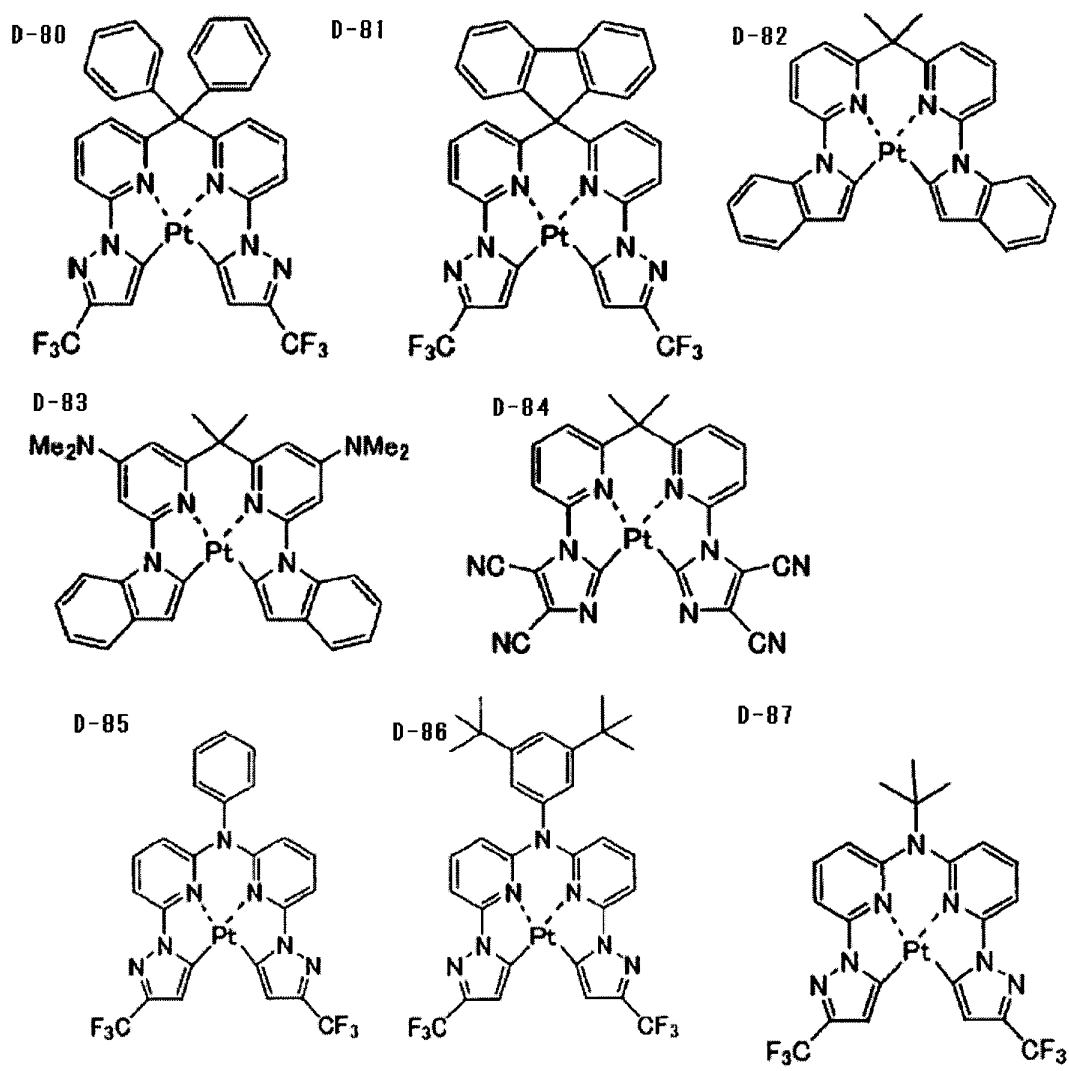
20



30

【 0 1 4 5 】

【化 3 7】



10

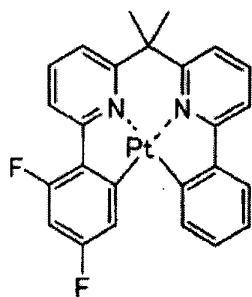
20

30

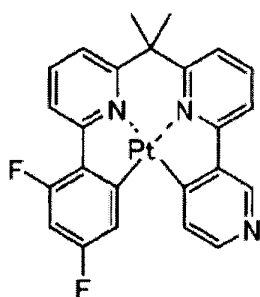
【 0 1 4 6 】

【化 3 8】

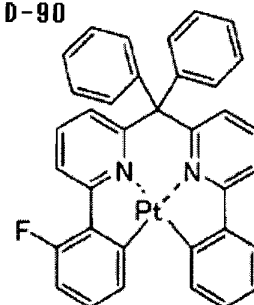
D-88



D-89

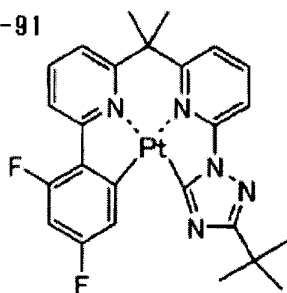


D-90

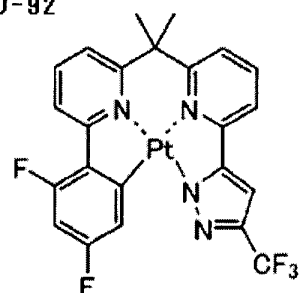


10

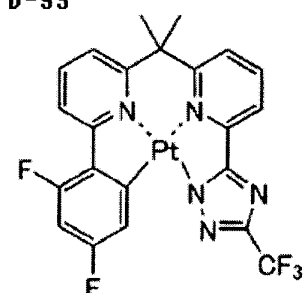
D-91



D-92

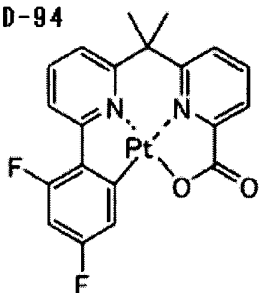


D-93

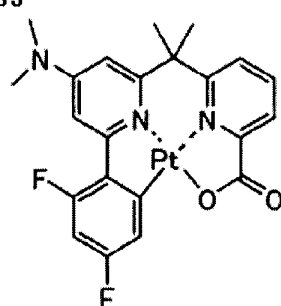


20

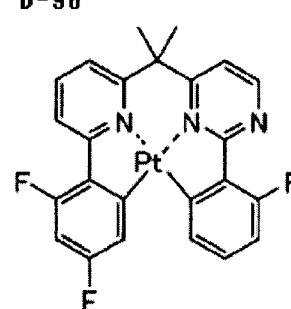
D-94



D-95



D-96

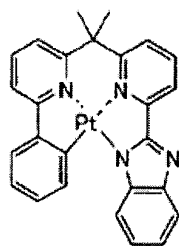


30

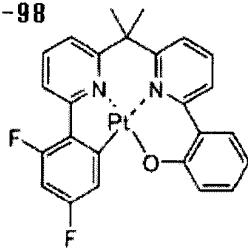
【 0 1 4 7 】

【化 3 9】

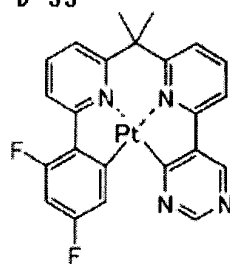
D-97



D-98

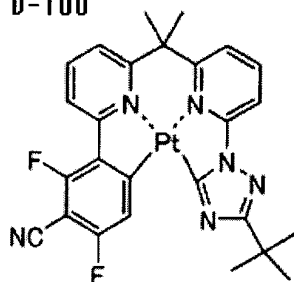


D-99

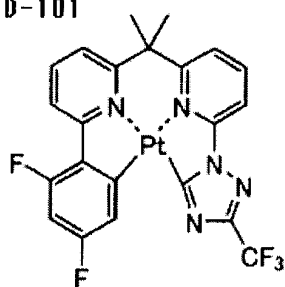


10

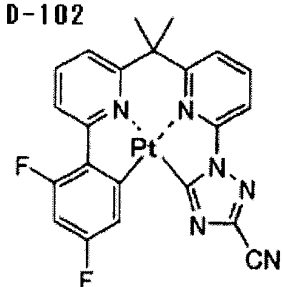
D-100



D-101

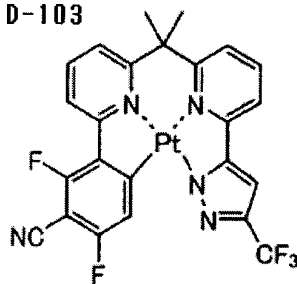


D-102

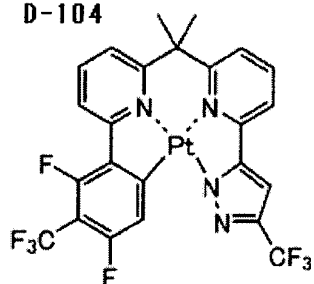


20

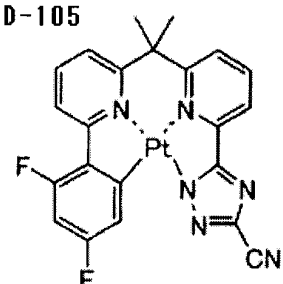
D-103



D-104

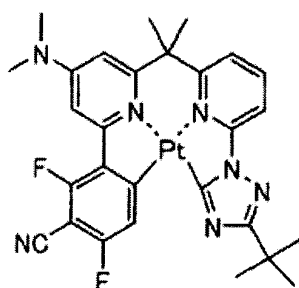


D-105

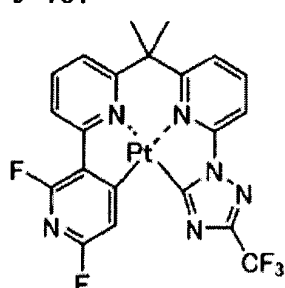


30

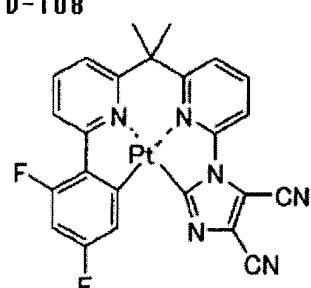
D-106



D-107



D-108

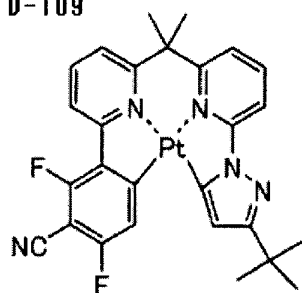


40

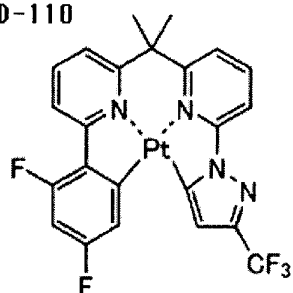
【 0 1 4 8 】

【化 40】

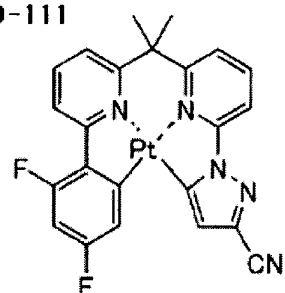
D-109



D-110

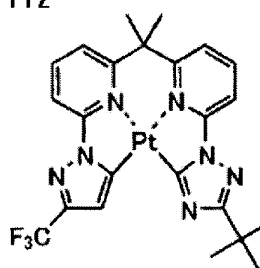


D-111

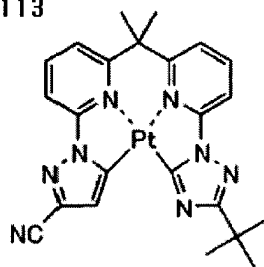


10

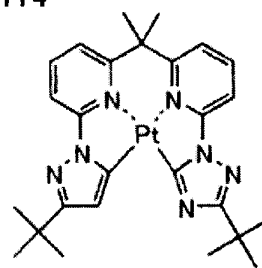
D-112



D-113

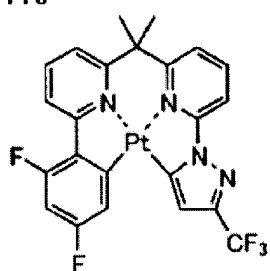


D-114

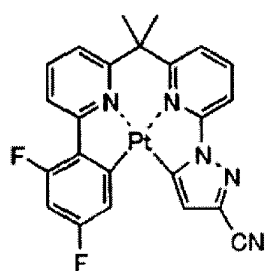


20

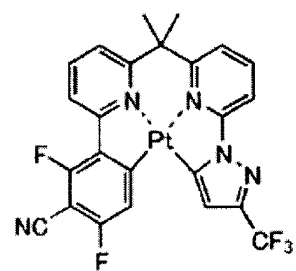
D-115



D-116

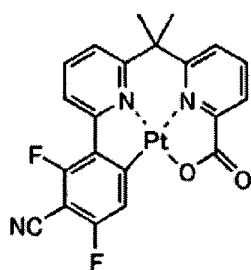


D-117

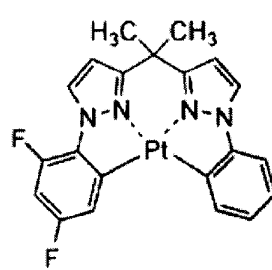


30

D-118



D-119

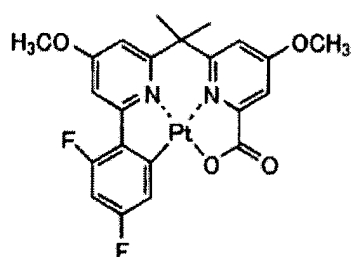


40

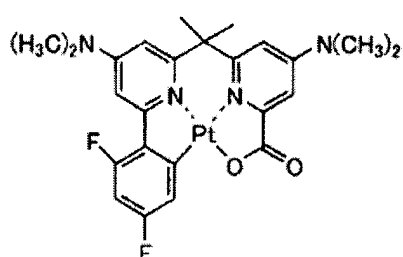
【 0 1 4 9 】

【化 4 1】

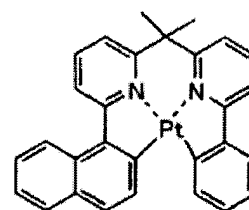
D-120



D-121

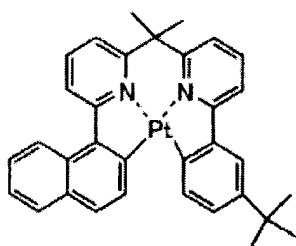


D-122



10

D-123

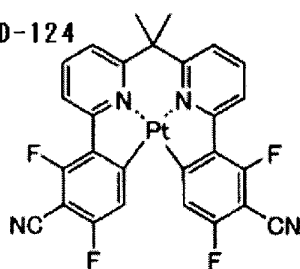


【 0 1 5 0 】

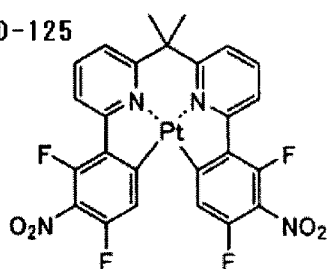
20

【化 4 2】

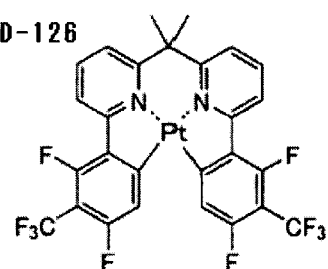
D-124



D-125

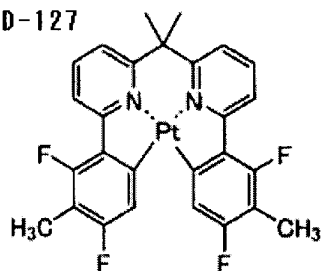


D-126

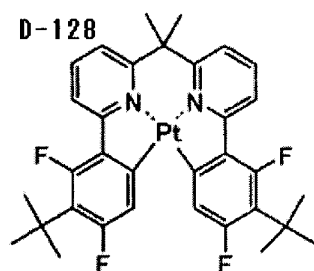


30

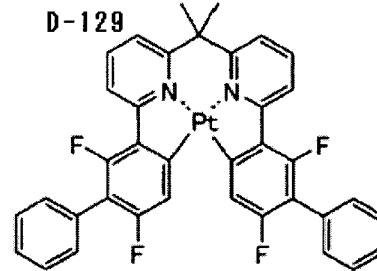
D-127



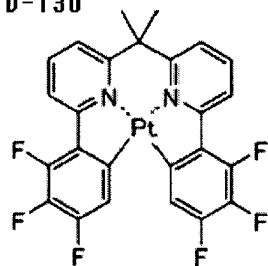
D-128



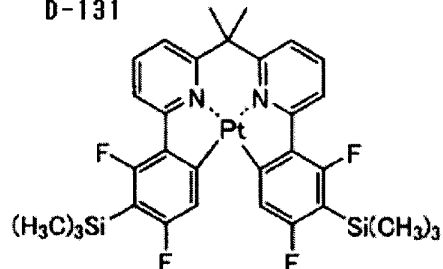
D-129



D-130



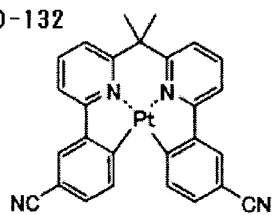
D-131



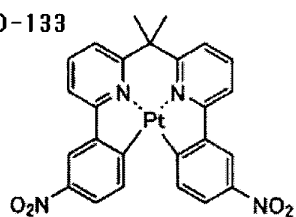
40

【 0 1 5 1 】

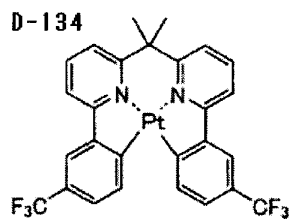
D-132



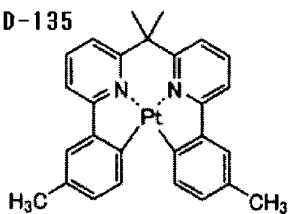
D-133



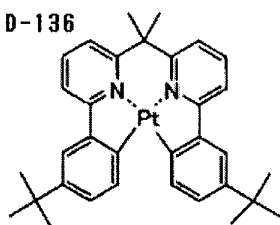
D-134



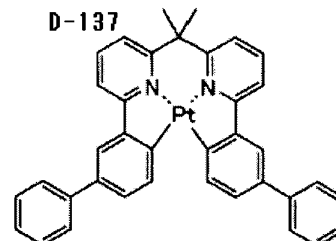
D-135



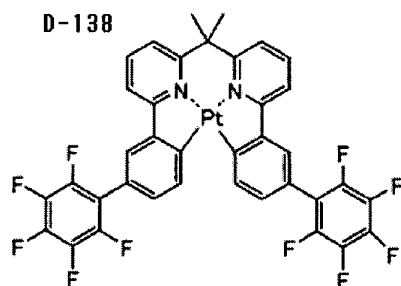
D-136



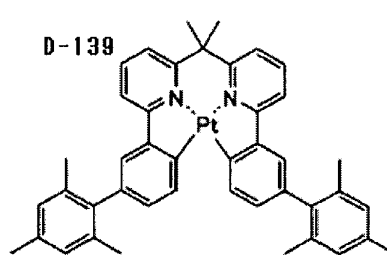
D-137



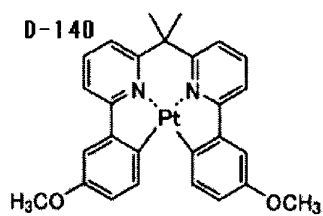
D-138



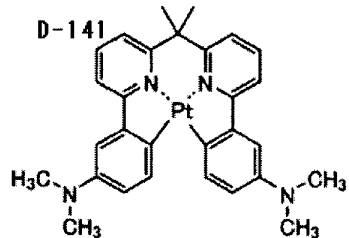
D-139



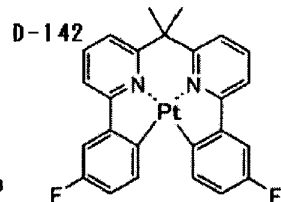
D-140



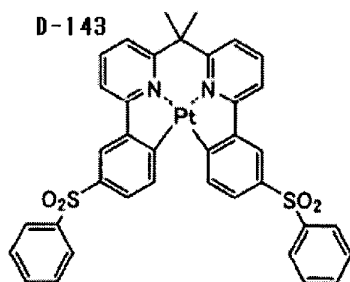
D-141



D-142

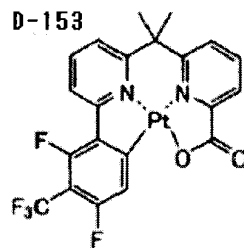
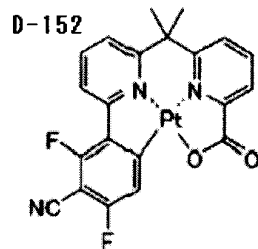
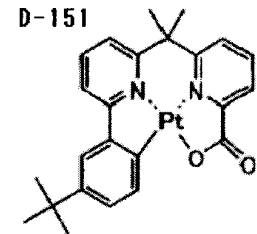
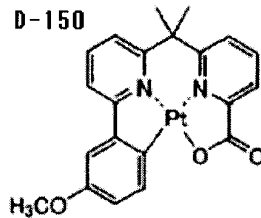
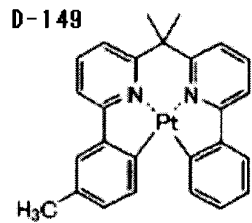
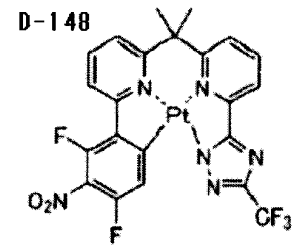
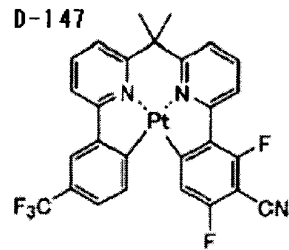
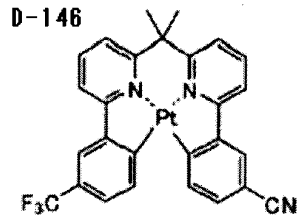
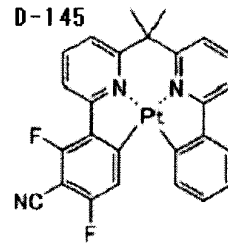
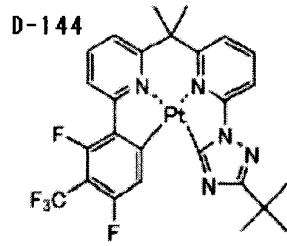


D-143



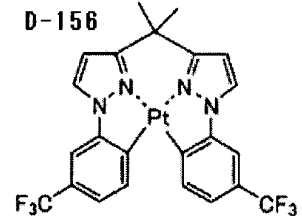
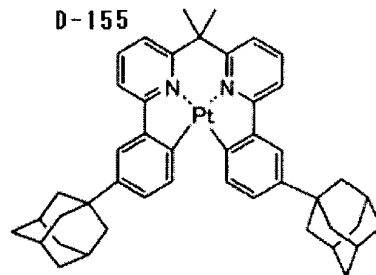
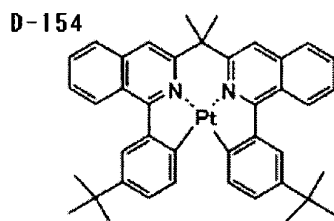
40

【化 4 4】



【 0 1 5 3】

【化 4 5】



【 0 1 5 4】

発光層中の発光材料は、発光層中に一般的に発光層を形成する全化合物質量に対して、0.1質量%～50質量%含有されるが、耐久性、外部量子効率の観点から1質量%～50質量%含有されることが好ましく、2質量%～40質量%含有されることがより好ましい。

【 0 1 5 5】

発光層の厚さは、特に限定されるものではないが、通常、2nm～500nmであるの

10

20

30

40

50

が好ましく、中でも、外部量子効率の観点で、3 nm ~ 200 nmであるのがより好ましく、5 nm ~ 100 nmであるのが更に好ましい。

【0156】

<ホスト材料>

本発明に用いられるホスト材料としては、本発明の化合物の他、例えば、以下の材料を挙げることができる。

ホスト材料は電荷輸送材料及びホール輸送性材料を挙げることができ、電荷輸送材料であることが好ましい。ホスト材料は1種であっても2種以上であっても良く、例えば、電子輸送性のホスト材料とホール輸送性のホスト材料を混合した構成が挙げられる。

ピロール、インドール、カルバゾール、アザインドール、アザカルバゾール、トリアゾール、オキサゾール、オキサジアゾール、ピラゾール、イミダゾール、チオフェン、ポリアリールアルカン、ピラゾリン、ピラズロン、フェニレンジアミン、アリールアミン、アミノ置換カルコン、スチリルアントラセン、フルオレノン、ヒドラゾン、スチルベン、シラザン、芳香族第三級アミン化合物、スチリルアミン化合物、ポルフィリン系化合物、ポリシラン系化合物、ポリ(N-ビニルカルバゾール)、アニリン系共重合体、チオフェンオリゴマー、ポリチオフェン等の導電性高分子オリゴマー、有機シラン、カーボン膜、ピリジン、ピリミジン、トリアジン、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、オキサゾール、オキサジアゾール、フルオレノン、アントラキノジメタン、アントロン、ジフェニルキノン、チオピランジオキシド、カルボジイミド、フルオレニリデンメタン、ジスチリルピラジン、フッ素置換芳香族化合物、ナフタレンペリレン等の複素環テトラカルボン酸無水物、フタロシアニン、8-キノリノール誘導体の金属錯体やメタルフタロシアニン、ベンゾオキサゾールやベンゾチアゾールを配位子とする金属錯体に代表される各種金属錯体およびそれらの誘導体(置換基や縮環を有していてもよい)等を挙げることができる。

【0157】

本発明における発光層において、前記ホスト材料(一般式(I)で表される化合物も含む)の三重項最低励起エネルギー(T_1 エネルギー)が、前記燐光発光材料の T_1 エネルギーより高いことが色純度、発光効率、駆動耐久性の点で好ましい。

【0158】

また、本発明におけるホスト化合物の含有量は、特に限定されるものではないが、発光効率、駆動電圧の観点から、発光層を形成する全化合物質量に対して15質量%以上95質量%以下であることが好ましい。

【0159】

(正孔注入層、正孔輸送層)

正孔注入層、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。これらの層に用いる正孔注入材料、正孔輸送材料は、低分子化合物であっても高分子化合物であってもよい。

具体的には、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、ポリアリールアルカン誘導体、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、フタロシアニン系化合物、ポルフィリン系化合物、チオフェン誘導体、有機シラン誘導体、カーボン、イリジウム錯体等の各種金属錯体等を含有する層であることが好ましい。

【0160】

本発明の有機EL素子の正孔注入層あるいは正孔輸送層には、電子受容性ドーパントを含有させることができる。正孔注入層、あるいは正孔輸送層に導入する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、無機化合物でも有機化合物でも使用できる。

【0161】

10

20

30

40

50

具体的には、無機化合物は塩化第二鉄や塩化アルミニウム、塩化ガリウム、塩化インジウム、五塩化アンチモンなどのハロゲン化金属、五酸化バナジウム、および三酸化モリブデンなどの金属酸化物などが挙げられる。

【0162】

有機化合物の場合は、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などを有する化合物、キノン系化合物、酸無水物系化合物、フラレーンなどを好適に用いることができる。

この他にも、特開平6-212153、特開平11-111463、特開平11-251067、特開2000-196140、特開2000-286054、特開2000-315580、特開2001-102175、特開2001-160493、特開2002-252085、特開2002-56985、特開2003-157981、特開2003-217862、特開2003-229278、特開2004-342614、特開2005-72012、特開2005-166637、特開2005-209643等に記載の化合物を好適に用いることができる。

【0163】

このうちヘキサシアノブタジエン、ヘキサシアノベンゼン、テトラシアノエチレン、テトラシアノキノジメタン、テトラフルオロテトラシアノキノジメタン、p-フルオラニル、p-クロラニル、p-ブロマニル、p-ベンゾキノ、2,6-ジクロロベンゾキノ、2,5-ジクロロベンゾキノ、1,2,4,5-テトラシアノベンゼン、1,4-ジシアノテトラフルオロベンゼン、2,3-ジクロロ-5,6-ジシアノベンゾキノ、p-ジニトロベンゼン、m-ジニトロベンゼン、o-ジニトロベンゼン、1,4-ナフトキノ、2,3-ジクロロナフトキノ、1,3-ジニトロナフタレン、1,5-ジニトロナフタレン、9,10-アントラキノ、1,3,6,8-テトラニトロカルバゾール、2,4,7-トリニトロ-9-フルオレノン、2,3,5,6-テトラシアノピリジン、またはフラレーンC60が好ましく、ヘキサシアノブタジエン、ヘキサシアノベンゼン、テトラシアノエチレン、テトラシアノキノジメタン、テトラフルオロテトラシアノキノジメタン、p-フルオラニル、p-クロラニル、p-ブロマニル、2,6-ジクロロベンゾキノ、2,5-ジクロロベンゾキノ、2,3-ジクロロナフトキノ、1,2,4,5-テトラシアノベンゼン、2,3-ジクロロ-5,6-ジシアノベンゾキノ、または2,3,5,6-テトラシアノピリジンがより好ましく、テトラフルオロテトラシアノキノジメタンが特に好ましい。

【0164】

これらの電子受容性ドーパントは、単独で用いてもよいし、2種以上を用いてもよい。電子受容性ドーパントの使用量は、材料の種類によって異なるが、正孔輸送層材料に対して0.01質量%~50質量%であることが好ましく、0.05質量%~20質量%であることが更に好ましく、0.1質量%~10質量%であることが特に好ましい。

【0165】

正孔注入層、正孔輸送層の厚さは、駆動電圧を下げるという観点から、各々500nm以下であることが好ましい。

正孔輸送層の厚さとしては、1nm~500nmであるのが好ましく、5nm~200nmであるのがより好ましく、10nm~100nmであるのが更に好ましい。また、正孔注入層の厚さとしては、0.1nm~200nmであるのが好ましく、0.5nm~100nmであるのがより好ましく、1nm~100nmであるのが更に好ましい。

正孔注入層、正孔輸送層は、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。

【0166】

(電子注入層、電子輸送層)

電子注入層、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る。これらの層に用いる電子注入材料、電子輸送材料は低分子化合物であっても高分子化合物であってもよい。

具体的には、本発明の化合物の他、ピリジン誘導体、キノリン誘導体、ピリミジン誘導体、ピラジン誘導体、フタラジン誘導体、フェナントロリン誘導体、トリアジン誘導体、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、フルオレノン誘導体、アントラキノジメタン誘導体、アントロン誘導体、ジフェニルキノン誘導体、チオピランジオキシド誘導体、カルボジイミド誘導体、フルオレニリデンメタン誘導体、ジスチリルピラジン誘導体、ナフタレン、ペリレン等の芳香環テトラカルボン酸無水物、フタロシアニン誘導体、8-キノリノール誘導体の金属錯体やメタルフタロシアニン、ベンゾオキサゾールやベンゾチアゾールを配位子とする金属錯体に代表される各種金属錯体、シロールに代表される有機シラン誘導体、等を含む層であることが好ましい。

10

【0167】

本発明の有機EL素子の電子注入層あるいは電子輸送層には、電子供与性ドーパントを含むことができる。電子注入層、あるいは電子輸送層に導入される電子供与性ドーパントとしては、電子供与性で有機化合物を還元する性質を有していればよく、Liなどのアルカリ金属、Mgなどのアルカリ土類金属、希土類金属を含む遷移金属や還元性有機化合物などが好適に用いられる。金属としては、特に仕事関数が4.2 eV以下の金属が好適に使用でき、具体的には、Li、Na、K、Be、Mg、Ca、Sr、Ba、Y、Cs、La、Sm、Gd、およびYbなどが挙げられる。また、還元性有機化合物としては、例えば、含窒素化合物、含硫黄化合物、含リン化合物などが挙げられる。

この他にも、特開平6-212153、特開2000-196140、特開2003-68468、特開2003-229278、特開2004-342614等に記載の材料を用いることが出来る。

20

【0168】

これらの電子供与性ドーパントは、単独で用いてもよいし、2種以上を用いてもよい。電子供与性ドーパントの使用量は、材料の種類によって異なるが、電子輸送層材料に対して0.1質量%~99質量%であることが好ましく、1.0質量%~80質量%であることが更に好ましく、2.0質量%~70質量%であることが特に好ましい。

【0169】

電子注入層、電子輸送層の厚さは、駆動電圧を下げるという観点から、各々500nm以下であることが好ましい。

30

電子輸送層の厚さとしては、1nm~500nmであるのが好ましく、5nm~200nmであるのがより好ましく、10nm~100nmであるのが更に好ましい。また、電子注入層の厚さとしては、0.1nm~200nmであるのが好ましく、0.2nm~100nmであるのがより好ましく、0.5nm~50nmであるのが更に好ましい。

電子注入層、電子輸送層は、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。

【0170】

(正孔ブロック層)

正孔ブロック層は、陽極側から発光層に輸送された正孔が、陰極側に通ることを防止する機能を有する層である。本発明において、発光層と陰極側で隣接する有機層として、正孔ブロック層を設けることができる。

40

正孔ブロック層を構成する化合物の例としては、アルミニウム(III)ビス(2-メチル-8-キノリナト)4-フェニルフェノレート(Aluminum(III)bis(2-methyl-8-quinolinato)4-phenylphenolate(略号BALq))等のアルミニウム錯体、トリアゾール誘導体、2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline(略号:BCP))等のフェナントロリン誘導体等が挙げられる。

正孔ブロック層の厚さとしては、1nm~500nmであるのが好ましく、5nm~200nmであるのがより好ましく、10nm~100nmであるのが更に好ましい。

正孔ブロック層は、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

50

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。

【0171】

(電子ブロック層)

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、陽極側に通りぬけることを防止する機能を有する層である。本発明において、発光層と陽極側で隣接する有機層として、電子ブロック層を設けることができる。

電子ブロック層を構成する化合物の例としては、例えば前述の正孔輸送材料として挙げたものが適用できる。

電子ブロック層の厚さとしては、1 nm ~ 500 nmであるのが好ましく、5 nm ~ 200 nmであるのがより好ましく、10 nm ~ 100 nmであるのが更に好ましい。

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。

(保護層)

本発明において、有機EL素子全体は、保護層によって保護されていてもよい。

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よい。

その具体例としては、In、Sn、Pb、Au、Cu、Ag、Al、Ti、Ni等の金属、MgO、SiO、SiO₂、Al₂O₃、GeO、NiO、CaO、BaO、Fe₂O₃、Y₂O₃、TiO₂等の金属酸化物、SiN_x、SiN_xO_y等の金属窒化物、MgF₂、LiF、AlF₃、CaF₂等の金属フッ化物、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%以下の防湿性物質等が挙げられる。

【0172】

保護層の形成方法については、特に限定はなく、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)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、転写法を適用できる。

【0173】

(封止容器)

さらに、本発明の有機電界発光素子は、封止容器を用いて素子全体を封止してもよい。

また、封止容器と発光素子の間の空間に水分吸収剤又は不活性液体を封入してもよい。水分吸収剤としては、特に限定されることはないが、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、五酸化燐、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、モレキュラーシーブ、ゼオライト、および酸化マグネシウム等を挙げることができる。不活性液体としては、特に限定されることはないが、例えば、パラフィン類、流動パラフィン類、パーフルオロアルカンやパーフルオロアミン、パーフルオロエーテル等のフッ素系溶剤、塩素系溶剤、およびシリコンオイル類が挙げられる。

【0174】

また、下記に示す、樹脂封止層にて封止する方法も好適に用いられる。

(樹脂封止層)

本発明の機能素子は樹脂封止層により大気との接触により、酸素や水分による素子性能の劣化を抑制することが好ましい。

<素材>

10

20

30

40

50

樹脂封止層の樹脂素材としては、特に限定されることはなく、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、またはエステル系樹脂等を用いることができるが、中でも水分防止機能の点からエポキシ樹脂が好ましい。エポキシ樹脂の中でも熱硬化型エポキシ樹脂、または光硬化型エポキシ樹脂が好ましい。

< 作製方法 >

樹脂封止層の作製方法は特に限定されることはなく、例えば、樹脂溶液を塗布する方法、樹脂シートを圧着または熱圧着する方法、蒸着やスパッタリング等により乾式重合する方法が挙げられる。

< 膜厚み >

樹脂封止層の厚みは $1\text{ }\mu\text{m}$ 以上、 1 mm 以下が好ましい。更に好ましくは $5\text{ }\mu\text{m}$ 以上、 $100\text{ }\mu\text{m}$ 以下であり、最も好ましくは $10\text{ }\mu\text{m}$ 以上 $50\text{ }\mu\text{m}$ 以下である。これよりも薄いと、第2の基板を装着時に上記無機膜を損傷する恐れがある。またこれよりも厚いと有機電界発光素子自体の厚みが厚くなり、有機電界発光素子の特徴である薄膜性を損なうことになる。

【0175】

(封止接着剤)

本発明に用いられる封止接着剤は、端部よりの水分や酸素の侵入を防止する機能を有する。

< 素材 >

前記封止接着剤の材料としては、前記樹脂封止層で用いる材料と同じものを用いることができる。中でも、水分防止の点からエポキシ系の接着剤が好ましく、中でも光硬化型接着剤あるいは熱硬化型接着剤が好ましい。

【0176】

また、上記材料にフィラーを添加することも好ましい。

封止剤に添加されているフィラーとしては、 SiO_2 、 SiO (酸化ケイ素)、 SiON (酸化窒化ケイ素) または SiN (窒化ケイ素) 等の無機材料が好ましい。フィラーの添加により、封止剤の粘度が上昇し、加工適正が向上し、および耐湿性が向上する。

【0177】

< 乾燥剤 >

封止接着剤は乾燥剤を含有しても良い。乾燥剤としては、酸化バリウム、酸化カルシウム、または酸化ストロンチウムが好ましい。

封止接着剤に対する乾燥剤の添加量は、 0.01 質量% 以上 20 質量% 以下であることが好ましく、更に好ましくは 0.05 質量% 以上 15 質量% 以下である。これよりも少ないと、乾燥剤の添加効果が薄れることになる。またこれよりも多い場合には封止接着剤中に乾燥剤を均一分散させることが困難になり好ましくない。

< 封止接着剤の処方 >

・ポリマー組成、濃度、

封止接着剤としては特に限定されることはなく、前記のものを用いることができる。例えば光硬化型エポキシ系接着剤としては長瀬ケムテック(株)製のXNR5516を挙げることができる。そこに直接前記乾燥剤を添加し、分散せしめれば良い。

・厚み

封止接着剤の塗布厚みは $1\text{ }\mu\text{m}$ 以上 1 mm 以下であることが好ましい。これよりも薄いと封止接着剤を均一に塗れなくなり好ましくない。またこれよりも厚いと、水分が侵入する道筋が広くなり好ましくない。

< 封止方法 >

本発明においては、上記乾燥剤の入った封止接着剤をディスペンサー等により任意量塗布し、塗布後第2基板を重ねて硬化させることにより機能素子を得ることができる。

【0178】

(駆動)

本発明の有機電界発光素子は、陽極と陰極との間に直流(必要に応じて交流成分を含ん

10

20

30

40

50

でもよい) 電圧 (通常 2 ボルト ~ 15 ボルト)、又は直流電流を印加することにより、発光を得ることができる。

本発明の有機電界発光素子の駆動方法については、特開平 2 - 148687 号、同 6 - 301355 号、同 5 - 29080 号、同 7 - 134558 号、同 8 - 234685 号、同 8 - 241047 号の各公報、特許第 2784615 号、米国特許 5828429 号、同 6023308 号の各明細書等に記載の駆動方法を適用することができる。

【0179】

本発明の発光素子は、種々の公知の工夫により、光取り出し効率を向上させることができる。例えば、基板表面形状を加工する (例えば微細な凹凸パターンを形成する)、基板・ITO 層・有機層の屈折率を制御する、基板・ITO 層・有機層の膜厚を制御すること等により、光の取り出し効率を向上させ、外部量子効率を向上させることが可能である。

10

【0180】

本発明の発光素子は、陽極側から発光を取り出す、いわゆるトップエミッション方式であっても良い。

【0181】

本発明の有機 EL 素子は、発光効率を向上させるため、複数の発光層の間に電荷発生層が設けた構成をとることができる。

前記電荷発生層は、電界印加時に電荷 (正孔及び電子) を発生する機能を有すると共に、発生した電荷を電荷発生層と隣接する層に注入させる機能を有する層である。

【0182】

20

前記電荷発生層を形成する材料は、上記の機能を有する材料であれば何でもよく、単一化合物で形成されていても、複数の化合物で形成されていてもよい。

具体的には、導電性を有するものであっても、ドーピングされた有機層のように半導電性を有するものであっても、また、電気絶縁性を有するものであってもよく、特開平 11 - 329748 や、特開 2003 - 272860 や、特開 2004 - 39617 に記載の材料が挙げられる。

更に具体的には、ITO、IZO (インジウム亜鉛酸化物) などの透明導電材料、C60 等のフラーレン類、オリゴチオフェン等の導電性有機物、金属フタロシアニン類、無金属フタロシアニン類、金属ポルフィリン類、無金属ポルフィリン類等などの導電性有機物、Ca、Ag、Al、Mg : Ag 合金、Al : Li 合金、Mg : Li 合金などの金属材料、正孔伝導性材料、電子伝導性材料、及びそれらを混合させたものを用いてもよい。

30

前記正孔伝導性材料は、例えば 2 - TNATA、NPD などの正孔輸送有機材料に F4 - TCNQ、TCNQ、FeCl₃ などの電子求引性を有する酸化剤をドーピングさせたものや、P 型導電性高分子、P 型半導体などが挙げられ、前記電子伝導性材料は電子輸送有機材料に 4 . 0 eV 未満の仕事関数を有する金属もしくは金属化合物をドーピングしたものや、N 型導電性高分子、N 型半導体などが挙げられる。N 型半導体としては、N 型 Si、N 型 CdS、N 型 ZnS などが挙げられ、P 型半導体としては、P 型 Si、P 型 CdTe、P 型 CuO などが挙げられる。

また、前記電荷発生層として、V₂O₅ などの電気絶縁性材料を用いることもできる。

【0183】

40

前記電荷発生層は、単層でも複数積層させたものでもよい。複数積層させた構造としては、透明伝導材料や金属材料などの導電性を有する材料と正孔伝導性材料、または、電子伝導性材料を積層させた構造、上記の正孔伝導性材料と電子伝導性材料を積層させた構造の層などが挙げられる。

【0184】

前記電荷発生層は、一般に、可視光の透過率が 50 % 以上になるよう、膜厚・材料を選択することが好ましい。また膜厚は、特に限定されるものではないが、0 . 5 ~ 200 nm が好ましく、1 ~ 100 nm がより好ましく、3 ~ 50 nm がさらに好ましく、5 ~ 30 nm が特に好ましい。

電荷発生層の形成方法は、特に限定されるものではなく、前述した有機層の形成方法を

50

用いることができる。

【0185】

電荷発生層は前記二層以上の発光層間に形成するが、電荷発生層の陽極側および陰極側には、隣接する層に電荷を注入する機能を有する材料を含んでいても良い。陽極側に隣接する層への電子の注入性を上げるため、例えば、BaO、SrO、Li₂O、LiCl、LiF、MgF₂、MgO、CaF₂などの電子注入性化合物を電荷発生層の陽極側に積層させてもよい。

以上で挙げられた内容以外にも、特開2003-45676号公報、米国特許第6337492号、同第6107734号、同第6872472号等に記載を元にして、電荷発生層の材料を選択することができる。

10

【0186】

本発明における有機EL素子は、共振器構造を有しても良い。例えば、透明基板上に、屈折率の異なる複数の積層膜よりなる多層膜ミラー、透明または半透明電極、発光層、および金属電極を重ね合わせて有する。発光層で生じた光は多層膜ミラーと金属電極を反射板としてその間で反射を繰り返し共振する。

別の好ましい態様では、透明基板上に、透明または半透明電極と金属電極がそれぞれ反射板として機能して、発光層で生じた光はその間で反射を繰り返し共振する。

共振構造を形成するためには、2つの反射板の有効屈折率、反射板間の各層の屈折率と厚みから決定される光路長を所望の共振波長の得るのに最適な値となるよう調整される。第一の態様の場合の計算式は特開平9-180883号明細書に記載されている。第二の態様の場合の計算式は特開2004-127795号明細書に記載されている。

20

【0187】

(本発明の用途)

本発明の有機電界発光素子は、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、光通信等に好適に利用できる。

【0188】

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EL素子を基板上に配置する3色発光法、白色発光用の有機EL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EL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。

30

また、上記方法により得られる異なる発光色の有機EL素子を複数組み合わせることで、所望の発光色の平面型光源を得ることができる。例えば、青色および黄色の発光素子を組み合わせた白色発光光源、青色、緑色、赤色の発光素子を組み合わせた白色発光光源等である。

【実施例】

【0189】

以下、実施例により本発明をさらに詳細に説明するが、本発明はこれらに限定されるものではない。

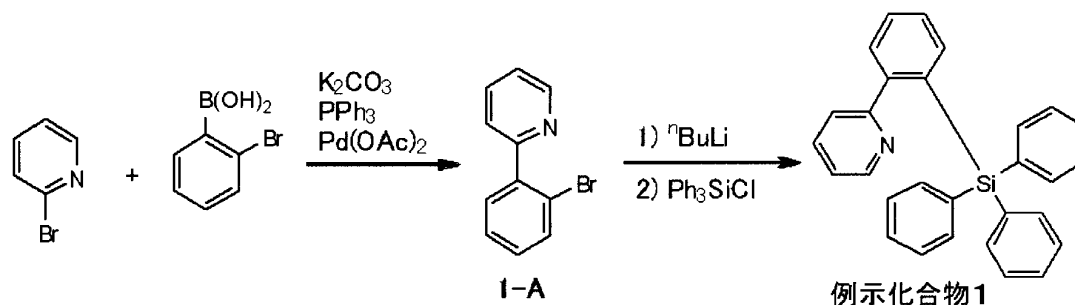
40

<合成例>

合成例1：例示化合物1の合成

【0190】

【化 4 6】



10

【0191】

窒素気流下、1 L 三口丸底フラスコに、2 - ブロモピリジン 16.4 g、2 - ブロモフェニルボロン酸 25 g、トリフェニルホスフィン 2.72 g、炭酸カリウム 38.7 g、水、200 mL、1, 2 - ジメトキシエタン 150 mL を入れ、攪拌した。酢酸パラジウム 0.58 g を加えて 5 時間加熱攪拌した後、室温に冷却した。得られた反応混合物を酢酸エチルで抽出し、水、飽和食塩水で順次洗浄した後、硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去した。シリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン：酢酸エチル = 9 : 1）で精製し、化合物 1 - A を 15.7 g 得た（収率 65 %）。

【0192】

窒素気流下、200 mL 三口丸底フラスコに、化合物 1 - A 3.5 g とテトラヒドロフラン 70 mL を入れ、攪拌しながら - 60 °C まで冷却した。n - ブチルリチウム（1.6 M ヘキサン溶液）10.3 mL をゆっくりと滴下し、滴下終了後 30 分攪拌した。トリフェニルシリルクロリド 5.7 g を 20 mL のテトラヒドロフランに溶解した溶液を調製し、- 60 °C で反応液中にゆっくりと滴下した。滴下終了後、- 60 °C で 10 分攪拌し、徐々に室温まで昇温した。得られた反応混合物を酢酸エチルで抽出し、水、飽和食塩水で順次洗浄した後、硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去した。シリカゲルカラムクロマトグラフィー（ヘキサン：酢酸エチル = 9 : 1）で精製し、化合物 1 を 3.1 g 得た（収率 50 %）。¹H - NMR（300 MHz, CDCl₃） δ 6.75（1H, mC）, 7.25（10H, mC）, 7.42（8H, mC）, 7.47（1H, dd）, 7.64（2H, mC）, 7.93（1H, d）。

20

30

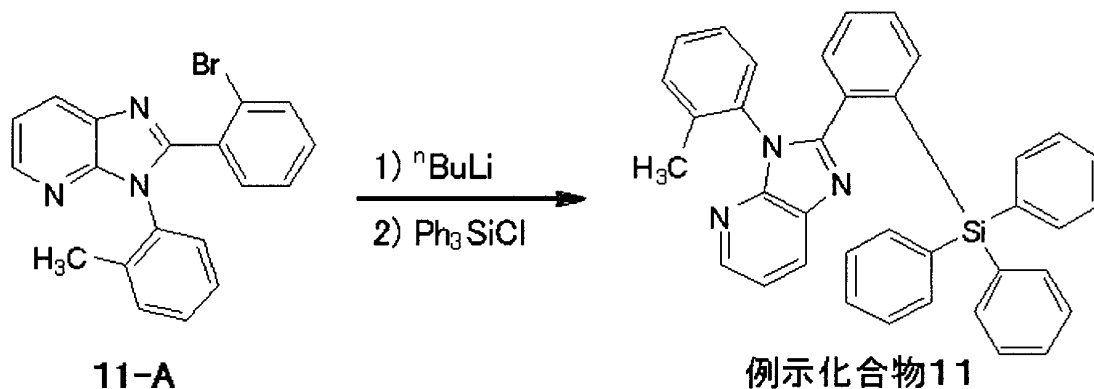
化合物 1 の薄膜状態における T₁ エネルギーは 72 kcal/mol であった。

【0193】

合成例 2：例示化合物 11 の合成

【0194】

【化 4 7】



40

【0195】

窒素気流下、200 mL 三口丸底フラスコに、化合物 11 - A 4 g とテトラヒドロフラン 80 mL を入れ、攪拌しながら - 70 °C まで冷却した。n - ブチルリチウム（1.6 M ヘキサン溶液）7.6 mL をゆっくりと滴下し、滴下終了後 1 時間攪拌した。トリフェ

50

ニリルシリルクロリド 3.6 g を 15 mL のテトラヒドロフランに溶解した溶液を調製し、-60 で反応液中にゆっくりと滴下した。滴下終了後、徐々に室温まで昇温した。得られた反応混合物を酢酸エチルで抽出し、水、飽和食塩水で順次洗浄した後、硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去した。酢酸エチルから再結晶し、化合物 11 を 3.0 g 得た (収率 51%) $^1\text{H-NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) δ 2.02 (3H, s), 6.84 (1H, d), 6.99 (2H, m), 7.22 (1H, m), 7.25-7.4 (3H, m), 7.47 (1H, dd), 7.61 (7H, m), 8.16 (1H, dd)。

化合物 11 の薄膜状態における T_1 エネルギーは 73 kcal/mol であった。

【0196】

10

<有機電界発光素子>

実施例 1

(本発明の有機電界発光素子 1-1 の作製)

ガラス基板の上にITOを150 nmの厚さに成膜した陽極基板を洗浄し、この上に銅フタロシアニン10 nmを蒸着し(正孔注入層)、この上にNPDを40 nm蒸着した(正孔輸送層)。この上に、本発明の化合物 1 と $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ を 92:8 の質量比で 40 nm 蒸着した(発光層)。この上にBA1qを30 nm蒸着した(電子輸送層)。この上にフッ化リチウムを1 nm蒸着した後、パターンニングしたマスクを設置して陰極としてアルミニウムを約70 nmの厚みで蒸着した。各層はいずれも抵抗加熱真空蒸着法により成膜した。作成した素子を窒素ガス下、ステンレス製の封止缶および紫外線硬化型の接着剤を用いて封止し、本発明の有機電界発光素子 1-1 を作製した。

20

(本発明の有機電界発光素子 1-2 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに本発明の化合物 11 を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 1-1 の作製と同様にして、本発明の有機電界発光素子 1-2 を作製した。

(本発明の有機電界発光素子 1-3 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに本発明の化合物 31 を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 1-1 の作製と同様にして、本発明の有機電界発光素子 1-3 を作製した。

(比較素子 1-1 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに化合物 M1 (特許文献 3、149 頁に記載の化合物「目的物 54」)を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 1-1 の作製と同様にして、比較素子 1-1 を作製した。

30

(比較素子 1-2 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに化合物 X1 (特許文献 4、60 頁および請求項 49 に記載の化合物)を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 1-1 の作製と同様にして、比較素子 1-2 を作製した。

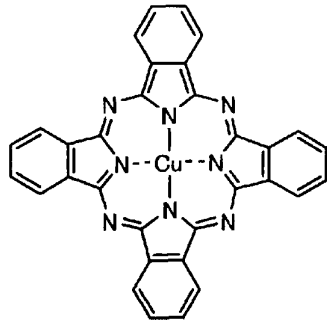
(比較素子 1-3 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに化合物 F31 (特許文献 5、11 頁に記載の化合物)を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 1-1 の作製と同様にして、比較素子 1-3 を作製した。

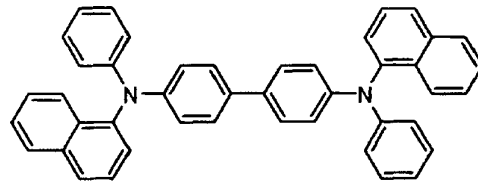
【0197】

40

【化 4 8】

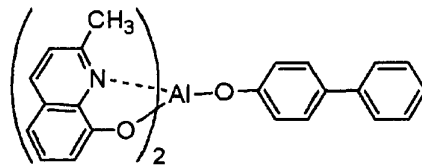


銅フタロシアニン

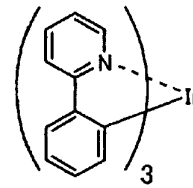


NPD

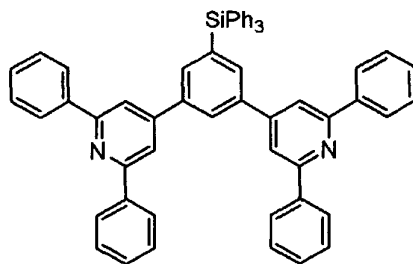
10



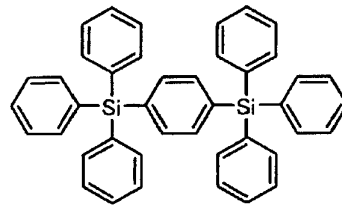
Balq

Ir(ppy)₃

20

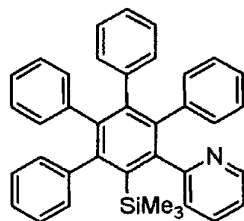


M1



X1

30



F-31

【0198】

(有機電界発光素子の性能評価)

40

(a)外部量子効率

東陽テクニカ製ソースメジャーユニット2400を用いて、直流電圧を各素子に印加し発光させる。その輝度をトプコン社製輝度計BM-8を用いて測定した。発光スペクトルと発光波長は浜松ホトニクス製スペクトルアナライザーPMA-11を用いて測定した。これらを元に輝度が1000cd/m²付近の外部量子効率を輝度換算法により算出した。

(b)駆動耐久性

各素子を輝度が1000cd/m²になるように直流電圧を印加し、輝度が500cd/m²になるまでの時間を測定した。この輝度半減時間を駆動耐久性評価の指標とした。

(c)駆動電圧

各素子を輝度が1000cd/m²になるように直流電圧を印加し発光させる。この時の

50

印加電圧を駆動電圧評価の指標とした。

得られた結果を表 1 にまとめた。

【 0 1 9 9 】

【 表 1 】

表 1

	外部量子効率相対値	駆動耐久性相対値	駆動電圧相対値
本発明の有機電界発光素子 1-1	10	100	10
本発明の有機電界発光素子 1-2	9	90	11
本発明の有機電界発光素子 1-3	14	130	9
比較素子 1-1	3	45	13
比較素子 1-2	9	25	18
比較素子 1-3	6	60	11

10

【 0 2 0 0 】

上記結果から明らかなように、本発明の素子は比較素子に比べ、外部量子効率が高く、かつ駆動耐久性に優れ、さらに駆動電圧が低い。

【 0 2 0 1 】

実施例 2

(本発明の有機電界発光素子 2 - 1 の作製)

20

ガラス基板上にITOを150nmの厚さに成膜した陽極基板を洗浄し、この上に銅フタロシアニン10nmを蒸着し(正孔注入層)、この上にNPDを30nm蒸着した(正孔輸送層)。この上に、本発明の化合物15と化合物i-1を80:20の質量比で50nm蒸着した(発光層)。この上にBALqを30nm蒸着した(電子輸送層)。この上にフッ化リチウムを1nm蒸着した後、パターンニングしたマスクを設置して陰極としてアルミニウムを約70nmの厚みで蒸着した。各層はいずれも抵抗加熱真空蒸着法により成膜した。作成した素子を窒素ガス下、ステンレス製の封止缶および紫外線硬化型の接着剤を用いて封止し、本発明の有機電界発光素子2-1を作製した。

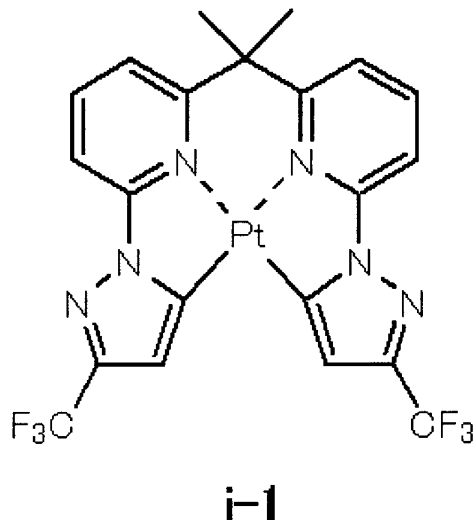
(比較素子 2 - 1 の作製)

本発明の化合物15の代わりに化合物M1を用いた以外は本発明の有機電界発光素子2-1の作製と同様にして、比較素子2-1を作製した。

30

【 0 2 0 2 】

【 化 4 9 】



40

【 0 2 0 3 】

実施例 1 と同様に有機電界発光素子を評価し、得られた結果を表 2 にまとめた。

【 0 2 0 4 】

50

【表 2】

表 2

	外部量子効率相対値	駆動耐久性相対値	駆動電圧相対値
本発明の有機電界発光素子2-1	10	100	10
比較素子2-1	1	11	11

【0205】

上記結果から明らかなように、本発明の素子は比較素子に比べ、外部量子効率が高く、かつ駆動耐久性に優れ、さらに駆動電圧が低い。

【0206】

10

実施例 3

(本発明の有機電界発光素子 3 - 1 の作製)

ガラス基板上にITOを150nmの厚さに成膜した陽極基板を洗浄し、この上に銅フタロシアニン10nmを蒸着し(正孔注入層)、この上にNPDを30nm蒸着した(正孔輸送層)。この上に、本発明の化合物1とmCPと化合物i-1を20:65:15の質量比で60nm蒸着した(発光層)。この上にBA1qを30nm蒸着した(電子輸送層)。この上にフッ化リチウムを1nm蒸着した後、パターニングしたマスクを設置して陰極としてアルミニウムを約70nmの厚みで蒸着した。各層はいずれも抵抗加熱真空蒸着法により成膜した。作成した素子を窒素ガス下、ステンレス製の封止缶および紫外線硬化型の接着剤を用いて封止し、本発明の有機電界発光素子 3 - 1 を作製した。

20

【0207】

(本発明の有機電界発光素子 3 - 2 の作製)

本発明の化合物1の代わりに本発明の化合物31を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 3 - 1 の作製と同様にして、本発明の有機電界発光素子 3 - 2 を作製した。

【0208】

(比較素子 3 - 1 の作製)

本発明の化合物1の代わりに化合物M1を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 3 - 1 の作製と同様にして、比較素子 3 - 1 を作製した。

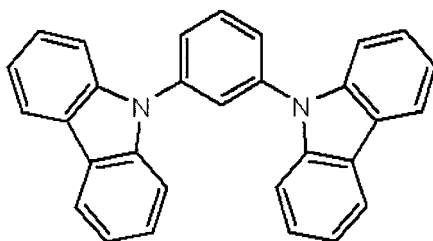
(比較素子 3 - 2 の作製)

本発明の化合物1の代わりに化合物X1を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 3 - 1 の作製と同様にして、比較素子 3 - 2 を作製した。

30

【0209】

【化50】



mCP

40

【0210】

実施例1と同様に有機電界発光素子を評価し、得られた結果を表3にまとめた。

【0211】

【表 3】

表 3

	外部量子効率相対値	駆動耐久性相対値	駆動電圧相対値
本発明の有機電界発光素子3-1	10	100	10
本発明の有機電界発光素子3-2	10	120	8
比較素子3-1	1	30	14
比較素子3-2	7	33	16

【0212】

10

上記結果から明らかなように、本発明の素子は比較素子に比べ、外部量子効率が高く、かつ駆動耐久性に優れ、さらに駆動電圧が低い。

【0213】

実施例 4

(本発明の有機電界発光素子 4 - 1 の作製)

i-1の代わりにi-2を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子 2 - 1 の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子 4 - 1 を作製した。

(本発明の有機電界発光素子 4 - 2 の作製)

本発明の化合物 1 5 の代わりに本発明の化合物 2 6 を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子 4 - 1 の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子 4 - 2 を作製した。

20

【0214】

(比較素子 4 - 1 の作製)

本発明の化合物 1 5 の代わりに化合物 M 1 を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 4 - 1 の作製と同様にして、比較素子 4 - 1 を作製した。

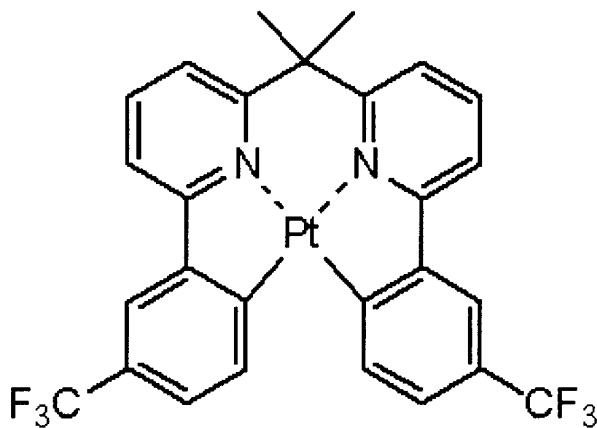
(比較素子 4 - 2 の作製)

本発明の化合物 1 5 の代わりに化合物 X 1 を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 4 - 1 の作製と同様にして、比較素子 4 - 2 を作製した。

【0215】

【化 5 1】

30



40

i-2

【0216】

実施例 1 と同様に有機電界発光素子を評価し、得られた結果を表 4 にまとめた。

【0217】

【表 4】

表 4

	外部量子効率相対値	駆動耐久性相対値	駆動電圧相対値
本発明の有機電界発光素子 4-1	10	100	10
本発明の有機電界発光素子 4-2	13	110	9
比較素子 4-1	6	54	15
比較素子 4-2	9	46	17

【0218】

上記結果から明かなように、本発明の素子は比較素子に比べ、外部量子効率が高く、かつ駆動耐久性に優れ、さらに駆動電圧が低い。

10

【0219】

実施例 5

(本発明の有機電界発光素子 5-1 の作製)

i-1の代わりにi-3を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子 3-1 の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子 5-1 を作製した。

(本発明の有機電界発光素子 5-2 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに本発明の化合物 3-1 を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子 5-1 の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子 5-2 を作製した。

【0220】

20

(比較素子 5-1 の作製)

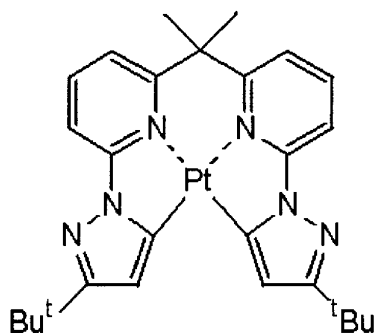
本発明の化合物 1 の代わりに化合物 M 1 を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 5-1 の作製と同様にして、比較素子 5-1 を作製した。

(比較素子 5-2 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに化合物 X 1 を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 5-1 の作製と同様にして、比較素子 5-2 を作製した。

【0221】

【化 5 2】



30

i-3

40

【0222】

実施例 1 と同様 に有機電界発光素子 を評価し、得られた結果を表 5 にまとめた。

【0223】

【表 5】

表 5

	外部量子効率相対値	駆動耐久性相対値	駆動電圧相対値
本発明の有機電界発光素子 5-1	10	100	10
本発明の有機電界発光素子 5-2	11	130	8
比較素子 5-1	2	10	13
比較素子 5-2	5	22	16

【0224】

10

上記結果から明らかなように、本発明の素子は比較素子に比べ、外部量子効率が高く、かつ駆動耐久性に優れ、さらに駆動電圧が低い。

【0225】

実施例 6

(本発明の有機電界発光素子 6-1 の作製)

$\text{Ir}(\text{ppy})_3$ の代わりに FR-1 を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子 1-1 の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子 6-1 を作製した。

(本発明の有機電界発光素子 6-2 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに本発明の化合物 11 を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子 6-1 の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子 6-2 を作製した。

20

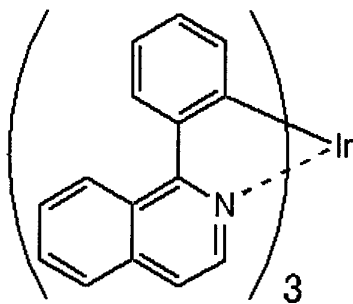
【0226】

(比較素子 6-1 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに化合物 X 1 を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 6-1 の作製と同様にして、比較素子 6-1 を作製した。

【0227】

【化 53】



30

FR-1

【0228】

実施例 1 と同様に有機電界発光素子を評価し、得られた結果を表 6 にまとめた。

【0229】

40

【表 6】

表 6

	外部量子効率相対値	駆動耐久性相対値	駆動電圧相対値
本発明の有機電界発光素子 6-1	10	100	10
本発明の有機電界発光素子 6-2	10	150	8
比較素子 6-1	4	30	15

【0230】

上記結果から明らかなように、本発明の素子は比較素子に比べ、外部量子効率が高く、

50

かつ駆動耐久性に優れ、さらに駆動電圧が低い。

【0231】

実施例7

(本発明の有機電界発光素子7-1の作製)

ガラス基板上にITOを150nmの厚さに成膜した陽極基板を洗浄し、この上に銅フタロシアニン10nmを蒸着し(正孔注入層)、この上にNPDを50nm蒸着した(正孔輸送層)。この上に、本発明の化合物1とルブレンを97:3の質量比で10nm蒸着した(発光層)。この上にAlqを30nm蒸着した(電子輸送層)。この上にフッ化リチウムを1nm蒸着した後、パターンニングしたマスクを設置して陰極としてアルミニウムを約70nmの厚みで蒸着した。各層はいずれも抵抗加熱真空蒸着法により成膜した。作成した素子を窒素ガス下、ステンレス製の封止缶および紫外線硬化型の接着剤を用いて封止し、本発明の有機電界発光素子7-1を作製した。

10

(本発明の有機電界発光素子7-2の作製)

本発明の化合物1の代わりに本発明の化合物11を用いた以外は本発明の有機電界発光素子7-1の作製と同様にして、本発明の有機電界発光素子7-2を作製した。

【0232】

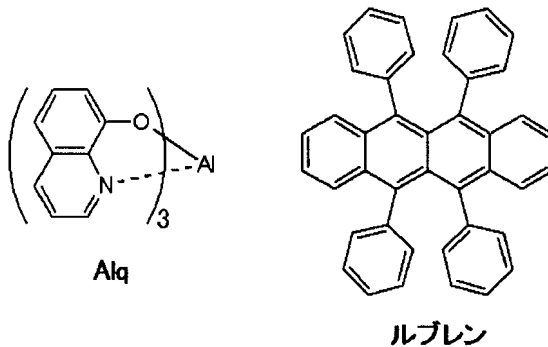
(比較素子7-1の作製)

本発明の化合物1の代わりに化合物X1を用いた以外は本発明の有機電界発光素子7-1の作製と同様にして、比較素子7-1を作製した。

【0233】

【化54】

20



30

【0234】

実施例1と同様に有機電界発光素子を評価し、得られた結果を表7にまとめた。

【0235】

【表7】

表7

	外部量子効率相対値	駆動耐久性相対値	駆動電圧相対値
本発明の有機電界発光素子7-1	10	100	10
本発明の有機電界発光素子7-2	11	140	8
比較素子7-1	7	10	20

40

【0236】

上記結果から明らかなように、本発明の素子は比較素子に比べ、外部量子効率が高く、かつ駆動耐久性に優れ、さらに駆動電圧が低い。

【0237】

実施例8

(本発明の有機電界発光素子8-1の作製)

ガラス基板上にITOを150nmの厚さに成膜した陽極基板を洗浄し、この上に銅フタロシアニン10nmを蒸着し(正孔注入層)、この上にNPDを40nm蒸着した(正孔

50

輸送層)。この上に、mCPとi-1を88:12の質量比で80nm蒸着した(発光層)。この上に本発明の化合物11を15nm蒸着し、さらにこの上にBA1qを15nm蒸着した(電子輸送層)。この上にフッ化リチウムを1nm蒸着した後、パターンニングしたマスクを設置して陰極としてアルミニウムを約70nmの厚みで蒸着した。各層はいずれも抵抗加熱真空蒸着法により成膜した。作成した素子を窒素ガス下、ステンレス製の封止缶および紫外線硬化型の接着剤を用いて封止し、本発明の有機電界発光素子8-1を作製した。

【0238】

(本発明の有機電界発光素子8-2の作製)

本発明の化合物11の代わりに本発明の化合物30を用いた以外は本発明の有機電界発光素子8-1の作製と同様にして、本発明の有機電界発光素子8-2を作製した。

10

(比較素子8-1の作製)

本発明の化合物11の代わりに化合物X1を用いた以外は本発明の有機電界発光素子8-1の作製と同様にして、比較素子8-1を作製した。

【0239】

(比較素子8-2の作製)

本発明の化合物11の代わりに化合物A1qを用いた以外は本発明の有機電界発光素子8-1の作製と同様にして、比較素子8-2を作製した。

【0240】

実施例1と同様に有機電界発光素子を評価し、得られた結果を表8にまとめた。

20

【0241】

【表8】

表8

	外部量子効率相対値	駆動耐久性相対値	駆動電圧相対値
本発明の有機電界発光素子8-1	10	100	10
本発明の有機電界発光素子8-2	9	85	12
比較素子8-1	4	8	24
比較素子8-2	1	33	18

30

【0242】

上記結果から明らかなように、本発明の素子は比較素子に比べ、外部量子効率が高く、かつ駆動耐久性に優れ、さらに駆動電圧が低い。

【0243】

実施例9

(本発明の有機電界発光素子9-1の作製)

FR-1の代わりにD-16を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子6-1の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子9-1を作製した。

(本発明の有機電界発光素子9-2の作製)

本発明の化合物1の代わりに本発明の化合物11を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子9-1の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子9-2を作製した。

40

【0244】

(比較素子9-1の作製)

本発明の化合物1の代わりに化合物X1を用いた以外は本発明の有機電界発光素子9-1の作製と同様にして、比較素子9-1を作製した。

【0245】

実施例1と同様に有機電界発光素子を評価し、得られた結果を表9にまとめた。

【0246】

【表 9】

表 9

	外部量子効率相対値	駆動耐久性相対値	駆動電圧相対値
本発明の有機電界発光素子 9-1	10	100	10
本発明の有機電界発光素子 9-2	10	150	9
比較素子 9-1	3	43	20

【0247】

実施例 10

10

(本発明の有機電界発光素子 10-1 の作製)

i-1の代わりに D-46 を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子 3-1 の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子 10-1 を作製した。

(本発明の有機電界発光素子 10-2 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに本発明の化合物 31 を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子 10-1 の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子 10-2 を作製した。

【0248】

(比較素子 10-1 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに化合物 M1 を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 10-1 の作製と同様にして、比較素子 10-1 を作製した。

20

(比較素子 10-2 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに化合物 X1 を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 10-1 の作製と同様にして、比較素子 10-2 を作製した。

実施例 1 と同様に有機電界発光素子を評価し、得られた結果を表 10 にまとめた。

【0249】

【表 10】

表 10

	外部量子効率相対値	駆動耐久性相対値	駆動電圧相対値
本発明の有機電界発光素子 10-1	10	100	10
本発明の有機電界発光素子 10-2	11	90	11
比較素子 10-1	3	8	19
比較素子 10-2	3	20	17

30

【0250】

実施例 11

(本発明の有機電界発光素子 11-1 の作製)

i-1の代わりに D-53 を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子 3-1 の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子 11-1 を作製した。

40

(本発明の有機電界発光素子 11-2 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに本発明の化合物 31 を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子 11-1 の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子 11-2 を作製した。

【0251】

(比較素子 11-1 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに化合物 M1 を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 11-1 の作製と同様にして、比較素子 11-1 を作製した。

(比較素子 11-2 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに化合物 X1 を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 11-1 の作製と同様にして、比較素子 11-2 を作製した。

50

実施例 1 と同様に有機電界発光素子を評価し、得られた結果を表 1 1 にまとめた。

【 0 2 5 2 】

【表 1 1 】

表 1 1

	外部量子効率相対値	駆動耐久性相対値	駆動電圧相対値
本発明の有機電界発光素子 11-1	10	100	10
本発明の有機電界発光素子 11-2	9	100	9
比較素子 11-1	3	8	17
比較素子 11-2	2	14	33

10

【 0 2 5 3 】

実施例 1 2

(本発明の有機電界発光素子 1 2 - 1 の作製)

i-1 の代わりに D - 5 4 を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子 3 - 1 の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子 1 2 - 1 を作製した。

(本発明の有機電界発光素子 1 2 - 2 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに本発明の化合物 3 1 を使用した以外は、本発明の有機電界発光素子 1 2 - 1 の作製と同様にして本発明の有機電界発光素子 1 2 - 2 を作製した。

【 0 2 5 4 】

20

(比較素子 1 2 - 1 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに化合物 M 1 を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 1 2 - 1 の作製と同様にして、比較素子 1 2 - 1 を作製した。

(比較素子 1 2 - 2 の作製)

本発明の化合物 1 の代わりに化合物 X 1 を用いた以外は本発明の有機電界発光素子 1 2 - 1 の作製と同様にして、比較素子 1 2 - 2 を作製した。

実施例 1 と同様に有機電界発光素子を評価し、得られた結果を表 1 2 にまとめた。

【 0 2 5 5 】

【表 1 2 】

表 1 2

	外部量子効率相対値	駆動耐久性相対値	駆動電圧相対値
本発明の有機電界発光素子 12-1	10	100	10
本発明の有機電界発光素子 12-2	10	100	8
比較素子 12-1	4	10	13
比較素子 12-2	4	21	19

30

フロントページの続き

(56)参考文献 特開2006-135160(JP, A)

Toshiki Nokami et al., Generation of pyridyl coordinated organosilicon cation pool by oxidative Si-Si bond dissociation, Beilstein Journal of Organic Chemistry, 2007年
2月 8日, Vol.3/No.7

Lin et al., Heteroatom Chemistry, 1998年, Vol. 9/No. 6, P. 549-552
Chemical Communications, 2005年, Issue 27, P.3454-3456

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

H01L 51/50

C07F 7/10

C09K 11/06

C A p l u s (S T N)

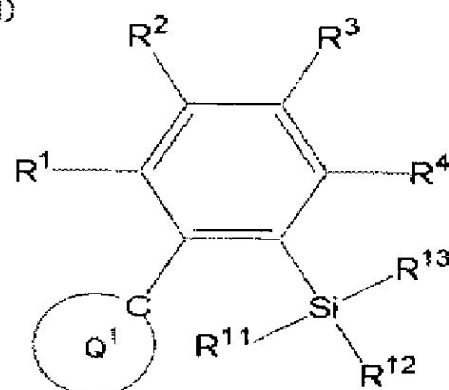
R E G I S T R Y (S T N)

专利名称(译)	有机电致发光器件和含硅取代基的新型有机化合物		
公开(公告)号	JP5551865B2	公开(公告)日	2014-07-16
申请号	JP2008298282	申请日	2008-11-21
[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		
当前申请(专利权)人(译)	谷得属海爱尔兰有限公司		
[标]发明人	伊勢俊大		
发明人	伊勢 俊大		
IPC分类号	H01L51/50 C09K11/06 C07F7/10		
CPC分类号	C09K11/06 C07F7/0812 C09K2211/1007 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1059		
FI分类号	H05B33/14.B H05B33/22.B C09K11/06.660 C09K11/06.690 C07F7/10.CSPS C07F7/10.SCS.P		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC02 3K107/CC03 3K107/CC22 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD64 3K107/DD67 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/DD74 3K107/DD78 4H049/VN01 4H049/VP01 4H049/VQ59 4H049/VQ60 4H049/VR24 4H049/VU29 4H049/VW02		
优先权	2007306264 2007-11-27 JP		
其他公开文献	JP2009152571A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

要解决的问题：提供一种发光亮度高，发光效率高，耐久性高的有机电致发光器件。溶剂：有机电致发光器件包括至少一个含有至少一种由式（I）代表的化合物的有机层（I），其中有机层包括在负电极和正电极之间的发光层，并且发光层包含至少一种发光材料。在式（I）中，Q¹表示芳族杂环；其中R¹，R²，R³和R⁴各自独立地表示氢原子或取代基；并且R¹¹，R¹²和R¹³中的至少一个表示芳基或芳族杂环基。

一般式(I)



（I）中、Q¹は芳香族ヘテロ子または、アルキル基、アリ-