

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2016-127083

(P2016-127083A)

(43) 公開日 平成28年7月11日(2016.7.11)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
H O 1 L 51/50 (2006.01)	H O 5 B 33/14 B	3 K 1 0 7
C O 7 D 487/04 (2006.01)	C O 7 D 487/04 1 3 6	4 C O 5 O
C O 9 K 11/06 (2006.01)	C O 9 K 11/06 6 5 O	

審査請求 未請求 請求項の数 35 O L (全 65 頁)

(21) 出願番号	特願2014-265581 (P2014-265581)	(71) 出願人	000183646
(22) 出願日	平成26年12月26日 (2014.12.26)		出光興産株式会社
			東京都千代田区丸の内3丁目1番1号
		(71) 出願人	515003156
			インスト ケミー オーガニッチネイ ポ
			ルスキエイ アカデミー ナウク
			ポーランド ピーエル・O 1-224 ワ
			ルシャワ カスプシャカ 44/52
		(74) 代理人	100078732
			弁理士 大谷 保
		(74) 代理人	100131635
			弁理士 有永 俊
		(72) 発明者	羽山 友治
			千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地

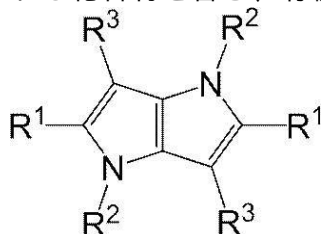
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】高性能な有機EL素子、及び該有機EL素子を提供し得る材料を提供する。

【解決手段】陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、有機薄膜層の少なくとも1層が式(I)で表される化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。



(I)

[一般式(I)中、R¹は、アルキル基、アリール基、アリールエチニル基が置換したアリール基、又はヘテロアリール基を表す。R²及びR³は、それぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アリール基、アリールエチニル基が置換したアリール基、又はヘテロアリール基を表す。]

【選択図】なし

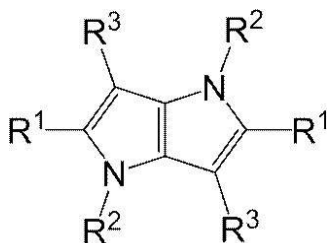
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

前記一層以上の有機薄膜層が発光層を含む層であり、前記一層以上の有機薄膜層の少なくとも 1 層が下記一般式 (I) で表される化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1】



(I)

10

[一般式 (I) 中、 R^1 は、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールエチニル基が置換した環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基 (但し、該アリール基はさらに置換基を有していてもよい)、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6 ~ 30 のヘテロアリール基を表す。

20

R^2 及び R^3 は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールエチニル基が置換した環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基 (但し、該アリール基はさらに置換基を有していてもよい)、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6 ~ 30 のヘテロアリール基を表す。

2 つの R^1 はそれぞれ同一でも異なってもよい。2 つの R^2 はそれぞれ同一でも異なってもよい。2 つの R^3 はそれぞれ同一でも異なってもよい。]

30

【請求項 2】

R^3 がいずれも水素原子である、請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 3】

R^1 及び R^2 が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6 ~ 30 のヘテロアリール基である、請求項 1 又は 2 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 4】

R^1 が、無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であるか、又は、 $-NO_2$ 、 $-CN$ 、 $-OCH_3$ 、 $-SO_2CH_3$ 、 $-SO_3H$ 、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CHO$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-SF_5$ 、 $-CF_3$ 、メチル基、 t -ブチル基、イソプロピル基、ヘキシル基、オクチル基、トリメチルシリルエチニル基、アリルオキシ基、ジアリールアミノ基 (アリール基の環形成炭素数は 6 ~ 25)、ジアルキルアミノ基 (アルキル基の炭素数は 1 ~ 10)、及びホスフィンオキシド基から選択される少なくとも 1 つの置換基で置換された環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である、請求項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【請求項 5】

R^1 及び R^2 が、それぞれ独立に、無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であるか、又は、 $-NO_2$ 、 $-CN$ 、 $-OCH_3$ 、 $-SO_2CH_3$ 、 $-SO_3H$ 、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CHO$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-SF_5$ 、 $-CF_3$ 、メチル基

50

、*t*-ブチル基、イソプロピル基、ヘキシル基、オクチル基、トリメチルシリルエチニル基、アリールオキシ基、ジアリールアミノ基（アリール基の環形成炭素数は6～25）、ジアルキルアミノ基（アルキル基の炭素数は1～10）、及びホスフィンオキシド基から選択される少なくとも1つの置換基で置換された環形成炭素数6～50のアリール基である、請求項1又は2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項6】

前記環形成炭素数6～50のアリール基がフェニル基である、請求項4又は5に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項7】

R^1 及び R^2 のうちの少なくとも一方が、電子吸引性基が置換した環形成炭素数6～50のアリール基である、請求項1～3のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【請求項8】

R^1 が、-CNで置換された環形成炭素数6～50のアリール基である、請求項7に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項9】

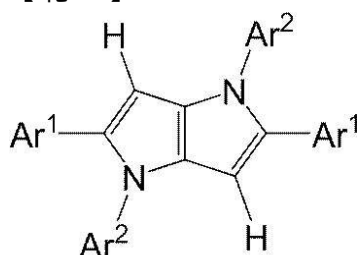
前記ヘテロアリール基が6員環を少なくとも1つ含む、請求項1～3のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項10】

前記化合物が下記一般式(II)で表される化合物である、請求項1～3のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

【化2】



(II)

30

〔一般式(II)中、 Ar^1 及び Ar^2 は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数6～30のヘテロアリール基を表す。

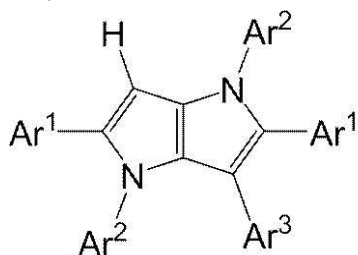
2つの Ar^1 はそれぞれ同一でも異なってもよい。2つの Ar^2 はそれぞれ同一でも異なってもよい。〕

【請求項11】

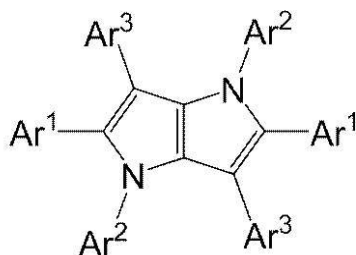
前記化合物が下記一般式(III)又は(IV)で表される化合物である、請求項1又は3に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【化3】



(III)



(IV)

50

[一般式 (III) 及び (IV) 中、 Ar^1 、 Ar^2 及び Ar^3 は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6 ~ 30 のヘテロアリール基を表す。

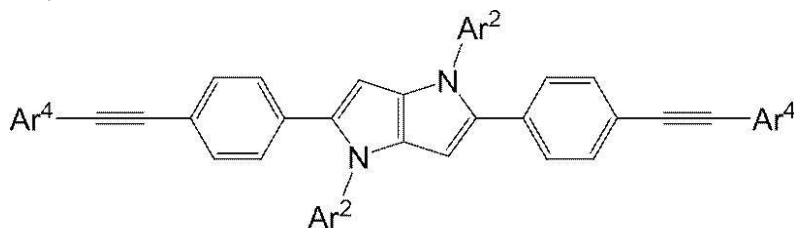
2 つの Ar^1 はそれぞれ同一でも異なってもよい。2 つの Ar^2 はそれぞれ同一でも異なってもよい。式 (IV) 中の 2 つの Ar^3 はそれぞれ同一でも異なってもよい。]

【請求項 12】

前記化合物が下記一般式 (V) で表される化合物である、請求項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【化 4】



(V)

20

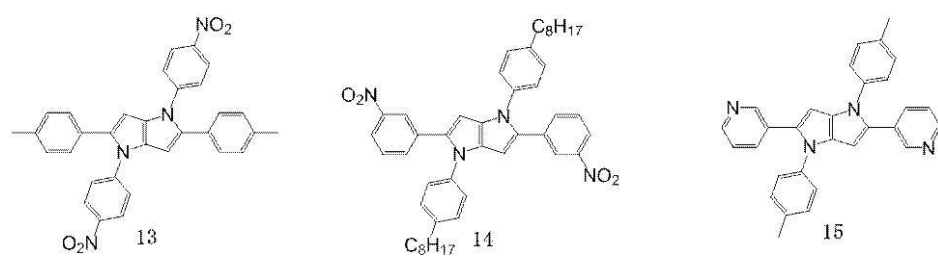
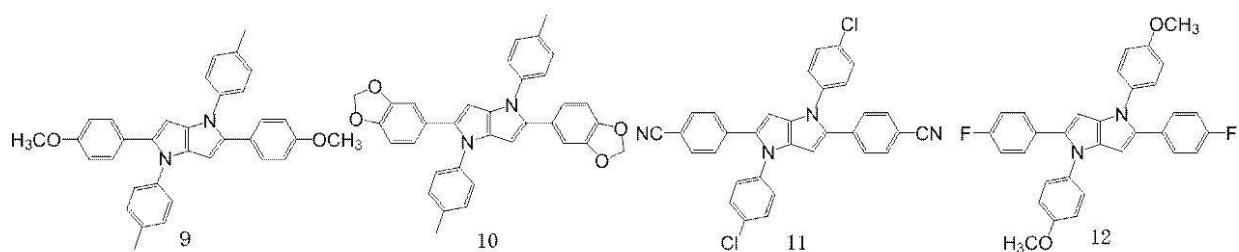
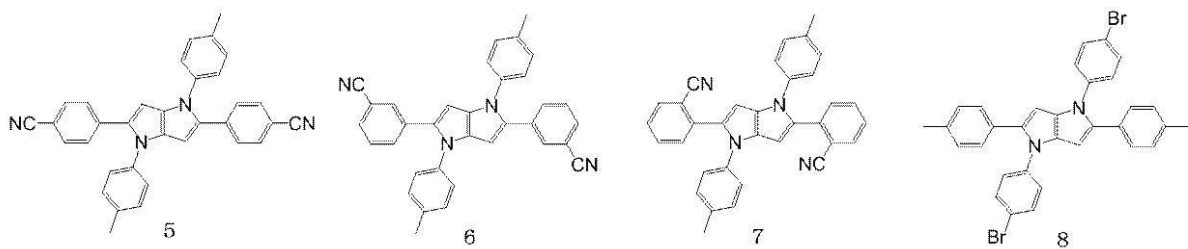
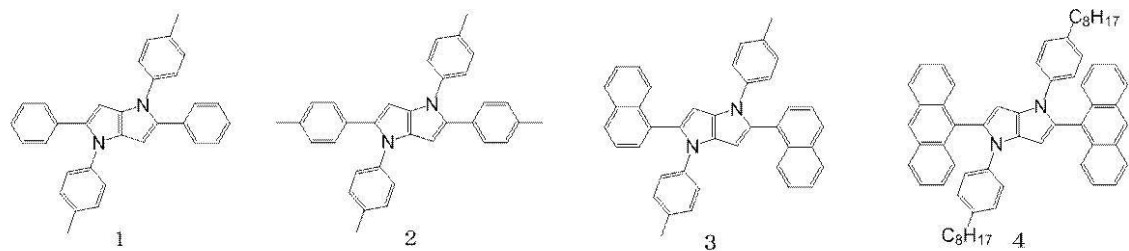
[一般式 (V) 中、 Ar^2 及び Ar^4 は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6 ~ 30 のヘテロアリール基を表す。

2 つの Ar^2 はそれぞれ同一でも異なってもよい。2 つの Ar^4 はそれぞれ同一でも異なってもよい。]

【請求項 13】

前記化合物が以下の化合物群から選択される少なくとも 1 つである、請求項 1 ~ 12 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 5】

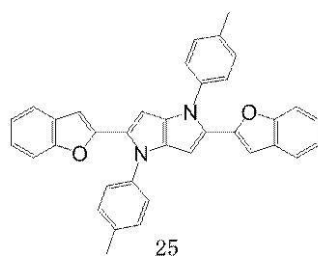
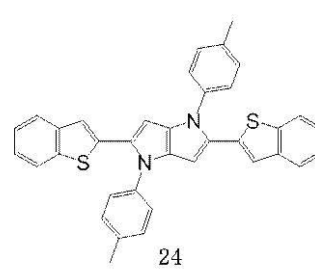
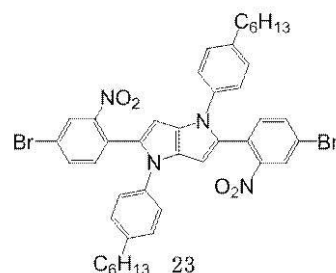
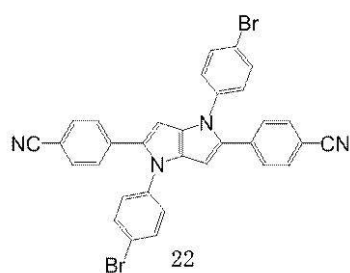
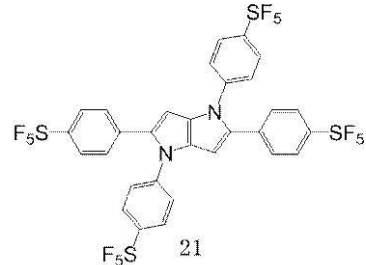
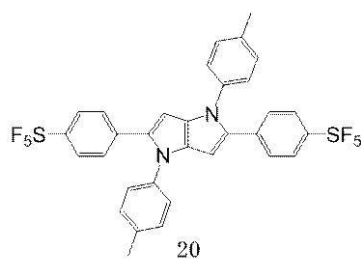
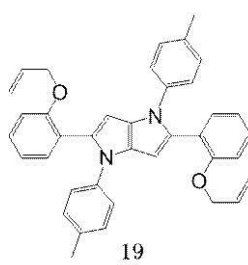
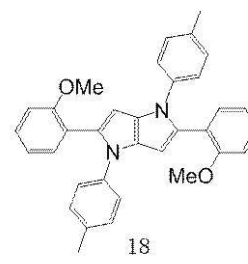
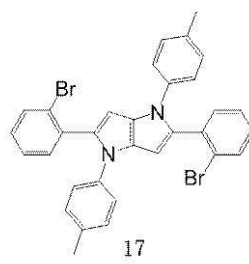
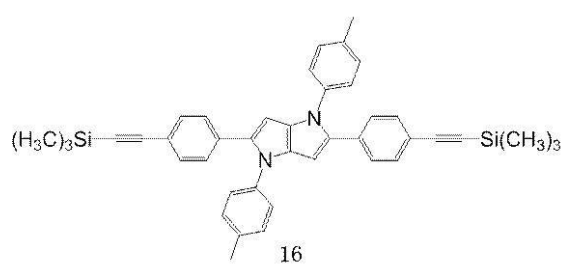


10

20

30

【化 6】

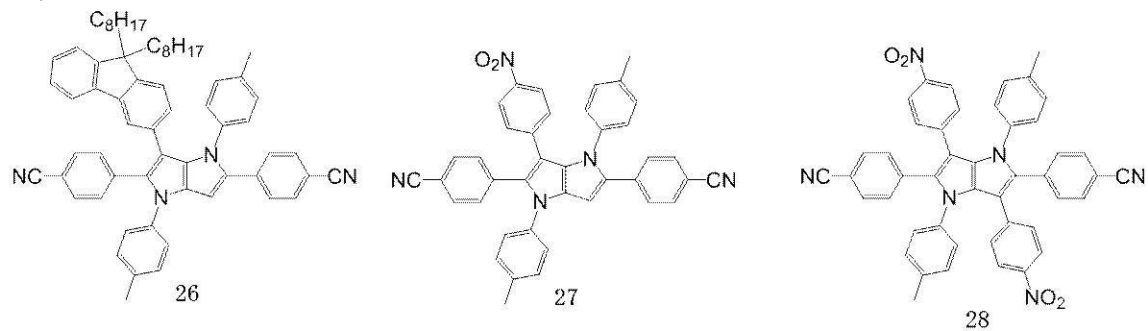


10

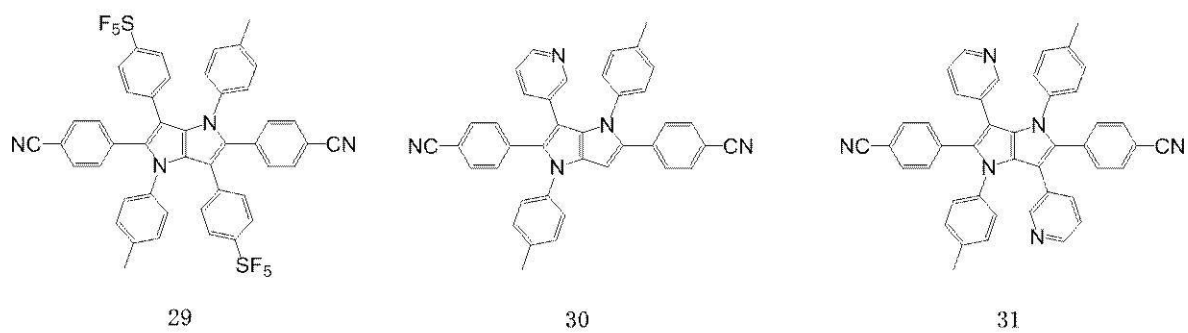
20

30

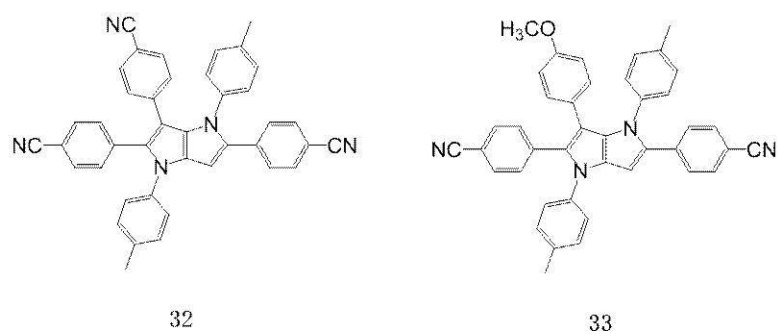
【化 7】



10

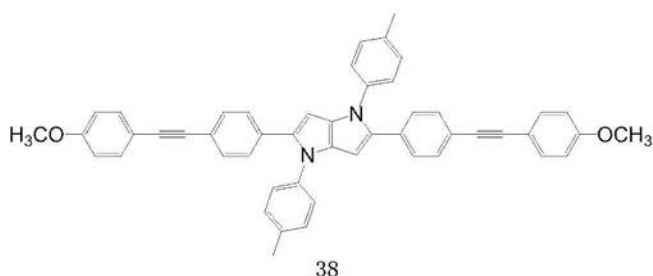
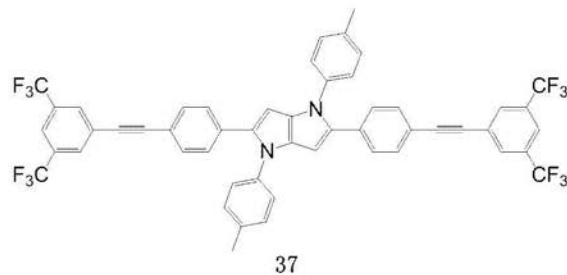
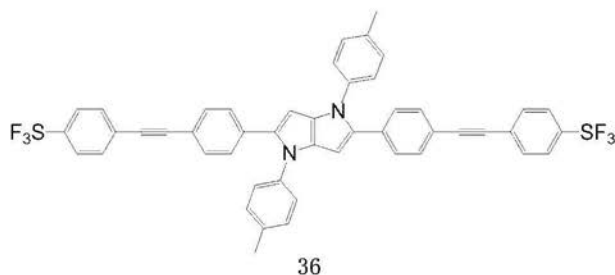
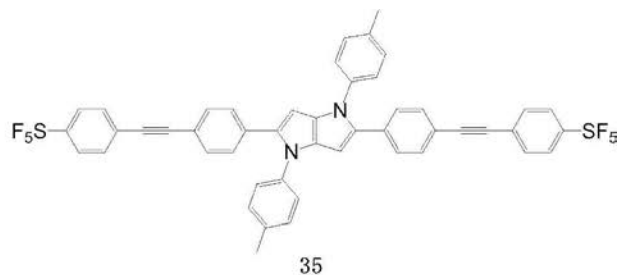
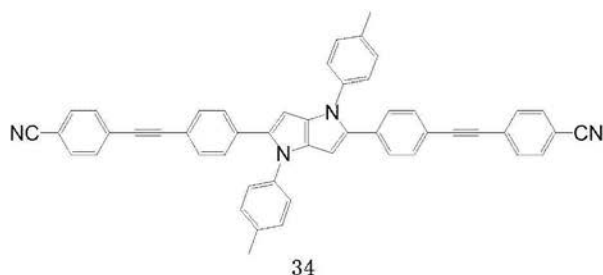


20



30

【化 8】



【請求項 1 4】

発光層が前記化合物を含有する、請求項 1 ~ 1 3 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 5】

発光層が、さらにホスト材料を含有する、請求項 1 4 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 6】

前記化合物とホスト材料との含有比率（前記化合物 / ホスト材料）が、質量比で、1 / 99 ~ 20 / 80 である、請求項 1 5 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 7】

前記ホスト材料の三重項励起準位 [T_1 (H)] が、前記化合物の三重項励起準位 [T_1 (D)] よりも小さい、請求項 1 5 又は 1 6 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 8】

前記ホスト材料が、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の芳香族縮合環を含有する縮合多環芳香族化合物であるか、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の芳香族縮合環と置換もしくは無置換の環形成原子数 10 ~ 50 のヘテロ芳香族縮合環とを含有する縮合多環ヘテロ芳香族化合物である、請求項 1 5 ~ 1 7 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 9】

前記ホスト材料が、下記一般式 (1) で表される縮合環多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物である、請求項 1 5 ~ 1 7 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

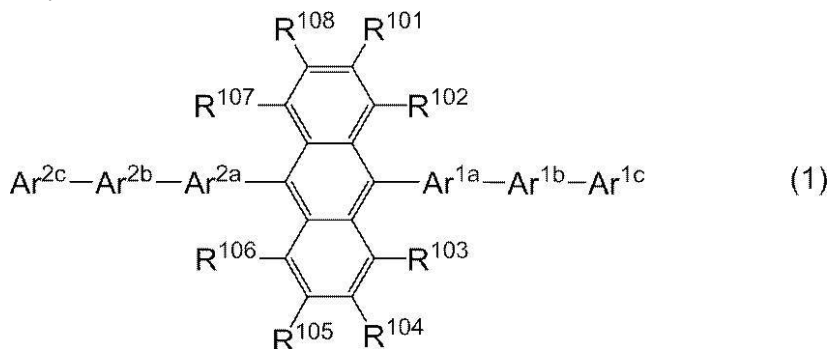
20

30

40

50

【化 9】



10

〔一般式(1)中、 Ar^{1a} 及び Ar^{2a} は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の非縮合アリーレン基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の非縮合ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合ヘテロアリーレン基を表す。

Ar^{1b} 及び Ar^{2b} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の非縮合アリーレン基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の非縮合ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合ヘテロアリーレン基を表す。

20

Ar^{1c} 及び Ar^{2c} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の非縮合アリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の非縮合ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合ヘテロアリール基を表す。

$R^{101} \sim R^{108}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の非縮合アリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の非縮合ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合ヘテロアリール基であるか、又は、前記非縮合アリール基、前記非縮合ヘテロアリール基、前記縮合アリール基及び前記縮合ヘテロアリール基から選択される少なくとも2つの組み合わせからなる基であるか、又は、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルコキシ基、環形成炭素数6～50のアリール基を有する置換もしくは無置換の炭素数7～51のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、シリル基であるか、又は、

30

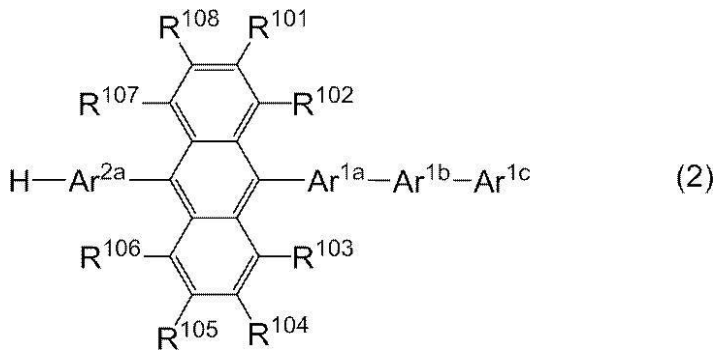
炭素数1～50のアルキル基、環形成炭素数6～50の非縮合アリール基及び環形成炭素数10～50の縮合アリール基から選択される置換基を有する、モノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基である。]

【請求項20】

前記ホスト材料が、下記一般式(2)で表される縮合環多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物である、請求項15～17のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【化 1 0】



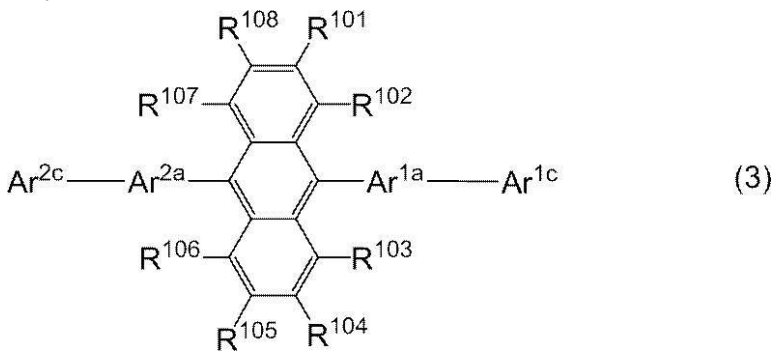
10

【一般式(2)中、 Ar^{1a} 、 Ar^{2a} 、 Ar^{1b} 、 Ar^{1c} 及び $R^{101} \sim R^{108}$ は、前記定義の通りである。但し、 Ar^{1b} は単結合ではなく、且つ Ar^{1c} は水素原子ではない。】

【請求項 2 1】

前記ホスト材料が、下記一般式(3)で表される縮合環多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物である、請求項15～17のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1 1】



20

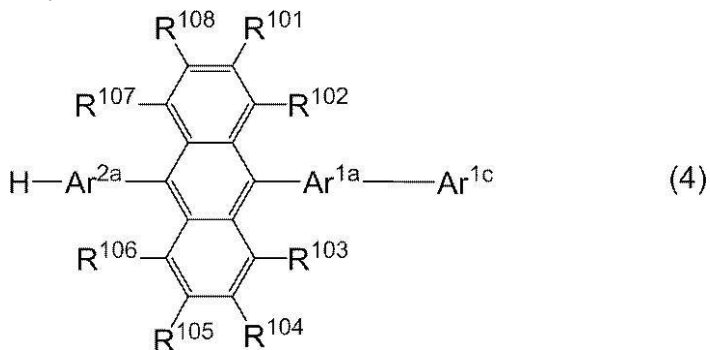
【一般式(3)中、 Ar^{1a} 、 Ar^{2a} 、 Ar^{1c} 、 Ar^{2c} 及び $R^{101} \sim R^{108}$ は、前記定義の通りである。但し、 Ar^{1c} 及び Ar^{2c} は、いずれも水素原子ではない。】

30

【請求項 2 2】

前記ホスト材料が、下記一般式(4)で表される縮合環多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物である、請求項15～17のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1 2】



40

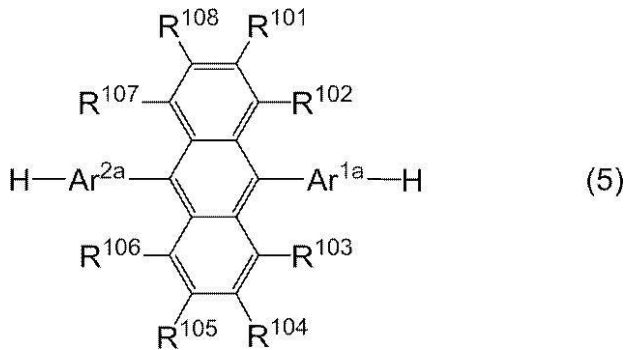
【一般式(4)中、 Ar^{1a} 、 Ar^{2a} 、 Ar^{1c} 及び $R^{101} \sim R^{108}$ は、前記定義の通りである。但し、 Ar^{1c} は水素原子ではない。】

【請求項 2 3】

50

前記ホスト材料が、下記一般式(5)で表される縮合環多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物である、請求項15～17のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化13】



10

[一般式(5)中、 Ar^{1a} 、 Ar^{2a} 及び $R^{101} \sim R^{108}$ は、前記定義の通りである。]

【請求項24】

Ar^{1a} 及び Ar^{2a} が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合ヘテロアリーレン基である、請求項19～23のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

【請求項25】

Ar^{1a} 及び Ar^{2a} のうちの一方が、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の非縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の非縮合ヘテロアリーレン基であり、他方が、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合ヘテロアリーレン基である、請求項19～23のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項26】

Ar^{1a} 及び Ar^{2a} がいずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の非縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の非縮合ヘテロアリーレン基である、請求項19～23のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

【請求項27】

Ar^{1a} 及び Ar^{2a} がいずれも、置換もしくは無置換のフェニレン基である、請求項19～23のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項28】

Ar^{1a} が置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合ヘテロアリーレン基であり、 Ar^{2a} が無置換のフェニレン基である、請求項19～23のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【請求項29】

Ar^{1a} が置換もしくは無置換のフェニレン基であり、 Ar^{2a} が無置換のフェニレン基である、請求項19～23のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項30】

Ar^{1a} が置換もしくは無置換のナフチレン基であり、 Ar^{1b} が置換もしくは無置換のフェニレン基である、請求項19又は20に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項31】

Ar^{2a} が、カルバゾール、ジベンゾフラン又はジベンゾチオフェンの二価の基であり

50

、該２価の基は置換基を有していてもよい、請求項１９～２３のいずれか１項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項３２】

Ar^{2c} が、置換もしくは無置換の N - カルbazolil基、置換もしくは無置換の C - カルbazolil基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基又は置換もしくは無置換のジベンゾチエニル基である、請求項１９又は２１に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項３３】

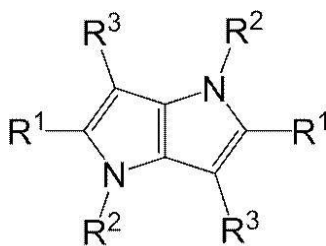
一層以上の有機薄膜層が、発光層と陽極との間に正孔輸送領域を有しており、該正孔輸送領域が前記化合物を含む、請求項１～１３のいずれか１項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【請求項３４】

下記一般式（Ⅰ）に記載の化合物からなる、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【化１４】



20

(Ⅰ)

〔一般式（Ⅰ）中、 R^1 は、置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリールエチニル基が置換した環形成炭素数６～５０のアリール基（但し、該アリール基はさらに置換基を有していてもよい）、又は置換もしくは無置換の環形成原子数６～３０のヘテロアリール基を表す。

30

R^2 及び R^3 は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリールエチニル基が置換した環形成炭素数６～５０のアリール基（但し、該アリール基はさらに置換基を有していてもよい）、又は置換もしくは無置換の環形成原子数６～３０のヘテロアリール基を表す。

２つの R^1 はそれぞれ同一でも異なってもよい。２つの R^2 はそれぞれ同一でも異なってもよい。２つの R^3 はそれぞれ同一でも異なってもよい。〕

【請求項３５】

請求項１～３３のいずれか１項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した、電子機器。

40

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【０００１】

本発明は、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器に関する。

【背景技術】

【０００２】

陽極と陰極との間に発光層を含む有機薄膜層を備え、発光層に注入された正孔と電子との再結合によって生じる励起子（エキシトン）エネルギーから発光を得る有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、「有機ＥＬ素子」と記載することもある）が知られている。

50

有機ＥＬ素子は、自発光型素子としての利点を活かし、高発光効率、高画質、低消費電力さらには薄型のデザイン性に優れた発光素子として期待されている。発光層を、ホストにドーパントとして発光材料をドーピングしたホスト／ドーパント発光層にすることが知られている。

ホスト／ドーパント発光層では、ホストに注入された電荷から効率よく励起子を生成することができる。そして、生成された励起子のエネルギーをドーパントに移動させ、ドーパントから高効率の発光を得ることができる。

【０００３】

近年では有機ＥＬ素子の性能向上を果たすべく、ホスト／ドーパントシステムに関してもさらなる研究が行われており、好適なホスト材料及びその他の有機ＥＬ素子用材料の探索が続いている。

そのような有機ＥＬ素子用材料、特に燐光発光性有機ＥＬ素子のホスト材料として、複素芳香族５員環と複素芳香族縮合環とを有する化合物が提案されている（特許文献１）。しかし、蛍光発光性有機ＥＬ素子用材料、特にドーパント材料としての性能は不明である。また、複素芳香族縮合環を有するその他の化合物として特許文献２並びに非特許文献１～３に記載の化合物も知られているが、これらの文献には、有機ＥＬ素子用材料としての利用については何ら開示されていない。

【先行技術文献】

【特許文献】

【０００４】

【特許文献１】特開２０１０－２３８８８０号公報

【特許文献２】国際公開第２０１４／０７００２９号

【非特許文献】

【０００５】

【非特許文献１】Asian Journal of Organic Chemistry（アジア ジャーナル オブ オーガニック ケミストリー），２０１３，２，p.411-415

【非特許文献２】The Journal of Organic Chemistry（ザ ジャーナル オブ オーガニック ケミストリー），２０１４，７９，p.3119-3128

【非特許文献３】Organic and Biomolecular Chemistry（オーガニックアンド バイオモレキュラー ケミストリー），２０１４，１２，p.2874-2881

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【０００６】

本発明の目的は、高性能な有機ＥＬ素子、及びそのような有機ＥＬ素子を提供し得る材料を提供することである。また、他の目的は、当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【０００７】

本発明者らは、鋭意研究を重ねた結果、特定の置換基を持つピロロピロール骨格を有する化合物が上記課題を解決し得ることを見出した。

【０００８】

すなわち、本発明の一態様によれば、下記〔１〕～〔３〕が提供される。

〔１〕陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

前記一層以上の有機薄膜層が発光層を含む層であり、前記一層以上の有機薄膜層の少なくとも１層が下記一般式（Ⅰ）で表される化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

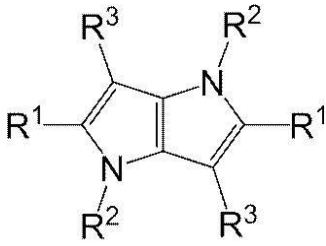
10

20

30

40

【化 1】



(I)

10

[一般式 (I) 中、 R^1 は、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールエチニル基が置換した環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基 (但し、該アリール基はさらに置換基を有していてもよい)、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6 ~ 30 のヘテロアリール基を表す。

R^2 及び R^3 は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールエチニル基が置換した環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基 (但し、該アリール基はさらに置換基を有していてもよい)、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6 ~ 30 のヘテロアリール基を表す。

20

2 つの R^1 はそれぞれ同一でも異なってもよい。2 つの R^2 はそれぞれ同一でも異なってもよい。2 つの R^3 はそれぞれ同一でも異なってもよい。]

[2] 前記一般式 (I) に記載の化合物からなる、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

[3] 前記有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した、電子機器。

【発明の効果】

【0009】

本発明によれば、高性能な有機 EL 素子、及びそのような有機 EL 素子を提供し得る材料を提供できる。また、当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供できる。

30

【図面の簡単な説明】

【0010】

【図 1】本発明の一態様に係る有機 EL 素子の概略構成を示す図である。

【発明を実施するための形態】

【0011】

本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「炭素数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の炭素数を表すものであり、置換されている場合の置換基の炭素数は含めない。ここで、「 YY 」は「 XX 」よりも大きく、「 XX 」と「 YY 」はそれぞれ 1 以上の整数を意味する。

40

また、本明細書において、「置換もしくは無置換の原子数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「原子数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の原子数を表すものであり、置換されている場合の置換基の原子数は含めない。ここで、「 YY 」は「 XX 」よりも大きく、「 XX 」と「 YY 」はそれぞれ 1 以上の整数を意味する。

【0012】

本明細書において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物 (例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物) の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記される「環形成炭素数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が 6 であり、ナ

50

フタレン環は環形成炭素数が10であり、ピリジニル基は環形成炭素数5であり、フラニル基は環形成炭素数4である。また、ベンゼン環やナフタレン環に置換基として例えばアルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、環形成炭素数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の炭素数は環形成炭素数の数に含めない。

【0013】

また、本明細書において、環形成原子数とは、原子が環状に結合した構造（例えば単環、縮合環、環集合）の化合物（例えば単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物）の当該環自体を構成する原子の数を表す。環を構成しない原子（例えば環を構成する原子の結合手を終端する水素原子）や、当該環が置換基によって置換される場合の置換基に含まれる原子は環形成原子数には含まない。以下で記される「環形成原子数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ピリジン環の環形成原子数は6であり、キナゾリン環の環形成原子数は10であり、フラン環の環形成原子数は5である。ピリジン環やキナゾリン環の炭素原子にそれぞれ結合している水素原子や置換基を構成する原子については、環形成原子数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の原子数は環形成原子数の数に含めない。

10

【0014】

また、本明細書において、「水素原子」とは、中性子数が異なる同位体、すなわち、軽水素（protium）、重水素（deuterium）及び三重水素（tritium）を包含する。

20

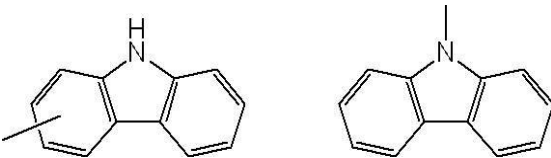
本明細書中において、「ヘテロアリール基」、「ヘテロアリーレン基」及び「複素環基」は、環形成原子として、少なくとも1つのヘテロ原子を含む基であり、該ヘテロ原子としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子及びセレン原子から選ばれる1種以上であることが好ましい。

【0015】

本明細書中において、「置換もしくは無置換のカルバゾリル基」は、下記のカルバゾリル基、

30

【化2】



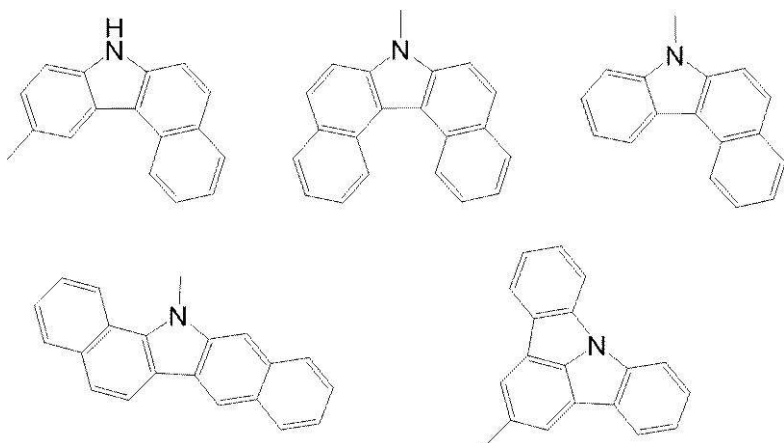
及び上記の基に対して、さらに任意の置換基を有する置換カルバゾリル基を表す。

なお、当該置換カルバゾリル基は、任意の置換基同士が互いに結合して縮環してもよく、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子及びセレン原子等のヘテロ原子を含んでもよく、また、結合位置は1位～9位のいずれであってもよい。このような置換カルバゾリル基の具体例として、例えば、下記に示す基が挙げられる。

40

【0016】

【化 3】

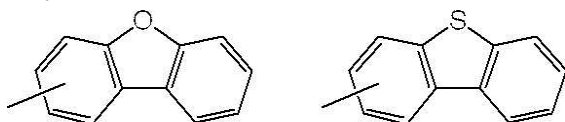


10

【 0 0 1 7 】

本明細書において、「置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基」及び「置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基」は、下記のジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基、

【化 4】



20

及び上記の基に対して、さらに任意の置換基を有する置換ジベンゾフラニル基及び置換ジベンゾチオフェニル基を表す。

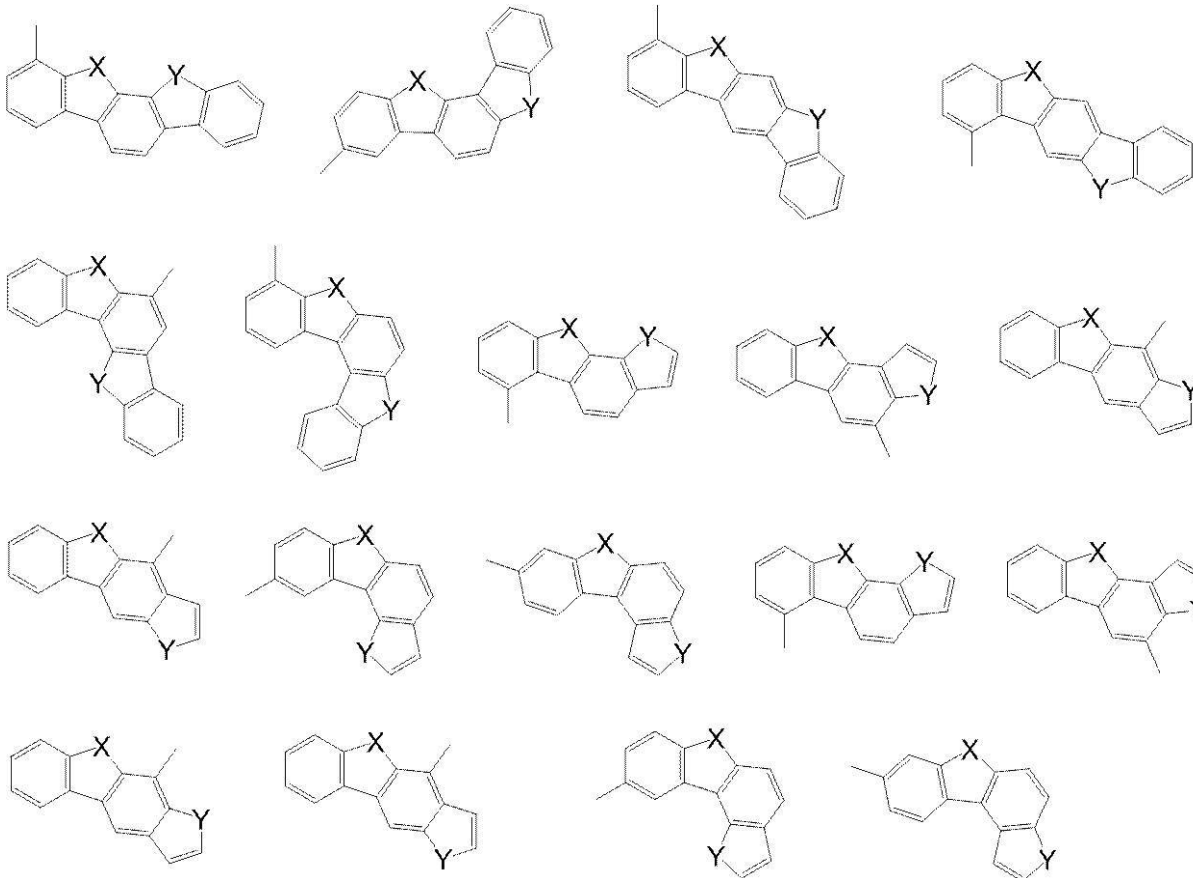
なお、当該置換ジベンゾフラニル基及び置換ジベンゾチオフェニル基は、任意の置換基同士が互いに結合して縮環してもよく、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子及びセレン原子等のヘテロ原子を含んでもよく、また、結合位置は 1 位～ 8 位のいずれであってもよい。

このような置換ジベンゾフラニル基及び置換ジベンゾチオフェニル基の具体例として、例えば、下記に示す基が挙げられる。

30

【 0 0 1 8 】

【化 5】



10

20

[上記式中、Xは酸素原子又は硫黄原子を表し、Yは酸素原子、硫黄原子、NH、NR^a (R^a はアルキル基又はアリール基である。)、CH₂、又は、CR^b₂ (R^b はアルキル基又はアリール基である。)を表す。]

【 0 0 1 9 】

また、「置換基」、又は「置換もしくは無置換」との記載における置換基としては、炭素数 1 ~ 5 0 (好ましくは 1 ~ 1 8、より好ましくは 1 ~ 8) のアルキル基；環形成炭素数 3 ~ 5 0 (好ましくは 3 ~ 1 0、より好ましくは 3 ~ 8、さらに好ましくは 5 又は 6) のシクロアルキル基；環形成炭素数 6 ~ 5 0 (好ましくは 6 ~ 2 5、より好ましくは 6 ~ 1 8) のアリール基；環形成炭素数 6 ~ 5 0 (好ましくは 6 ~ 2 5、より好ましくは 6 ~ 1 8) のアリール基を有する炭素数 7 ~ 5 1 (好ましくは 7 ~ 3 0、より好ましくは 7 ~ 2 0) のアラルキル基；アミノ基；炭素数 1 ~ 5 0 (好ましくは 1 ~ 1 8、より好ましくは 1 ~ 8) のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 5 0 (好ましくは 6 ~ 2 5、より好ましくは 6 ~ 1 8) のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基；炭素数 1 ~ 5 0 (好ましくは 1 ~ 1 8、より好ましくは 1 ~ 8) のアルキル基を有するアルコキシ基；環形成炭素数 6 ~ 5 0 (好ましくは 6 ~ 2 5、より好ましくは 6 ~ 1 8) のアリール基を有するアリールオキシ基；炭素数 1 ~ 5 0 (好ましくは 1 ~ 1 8、より好ましくは 1 ~ 8) のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 5 0 (好ましくは 6 ~ 2 5、より好ましくは 6 ~ 1 8) のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基；環形成原子数 5 ~ 5 0 (好ましくは 5 ~ 2 4、より好ましくは 5 ~ 1 3) のヘテロアリール基；炭素数 1 ~ 5 0 (好ましくは 1 ~ 1 8、より好ましくは 1 ~ 8) のハロアルキル基；ハロゲン原子 (フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子) ；シアノ基；ニトロ基；炭素数 1 ~ 5 0 (好ましくは 1 ~ 1 8、より好ましくは 1 ~ 8) のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 5 0 (好ましくは 6 ~ 2 5、より好ましくは 6 ~ 1 8) のアリール基から選ばれる置換基を有するスルホニル基；炭素数 1 ~ 5 0 (好ましくは 1 ~ 1 8、より好ましくは 1 ~ 8) のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 5 0 (好ましくは 6 ~ 2 5、よ

30

40

50

り好ましくは 6 ~ 18) のアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換ホスフォリル基；アルキルスルホニルオキシ基；アリールスルホニルオキシ基；アルキルカルボニルオキシ基；アリールカルボニルオキシ基；ホウ素含有基；亜鉛含有基；スズ含有基；ケイ素含有基；マグネシウム含有基；リチウム含有基；ヒドロキシ基；アルキル置換又はアリール置換カルボニル基；カルボキシ基；ビニル基；(メタ)アクリロイル基；エポキシ基；並びにオキセタニル基からなる群より選ばれる少なくとも 1 つが好ましいが、特にこれらに制限されるものではない。

これらの置換基は、さらに上述の任意の置換基により置換されていてもよい。また、これらの置換基は、複数の置換基が互いに結合して環を形成していてもよい。

また、「置換もしくは無置換の ZZ 基」との記載における「無置換の ZZ 基」とは、ZZ 基の ZZ 基の水素原子がこれらの置換基で置換されていないことを意味する。

【0020】

上記置換基の中でも、より好ましくは、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 (好ましくは 1 ~ 18、より好ましくは 1 ~ 8) のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 (好ましくは 3 ~ 10、より好ましくは 3 ~ 8、さらに好ましくは 5 又は 6) のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 (好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18) のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 (好ましくは 1 ~ 18、より好ましくは 1 ~ 8) のアルキル基及び置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 (好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18) のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 (好ましくは 5 ~ 24、より好ましくは 5 ~ 13) のヘテロアリール基、ハロゲン原子、シアノ基である。

【0021】

本明細書中、好ましいとする態様 (例えば、化合物、各種基、数値範囲等) は、他のあらゆる態様 (例えば、化合物、各種基、数値範囲等) と任意に組み合わせることができ、また、好ましいとする態様 (より好ましい態様、更に好ましい態様、特に好ましい態様を含む。) の組み合わせはより好ましいと言える。

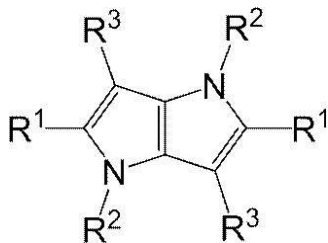
【0022】

[有機エレクトロルミネッセンス素子用材料]

本発明の一態様においては、下記一般式 (I) で表される化合物 [化合物 (I) と略称することがある。] を有機エレクトロルミネッセンス素子の材料として用いる。当該化合物は有機 EL 素子に好適な化合物であり、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料として有用である。

【0023】

【化 6】



(I)

【0024】

[一般式 (I) 中、R¹ は、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールエチニル基が置換した環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基 (但し、該アリール基はさらに置換基を有していてもよい)、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6 ~ 30 のヘテロアリール基を表す。

R^2 及び R^3 は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールエチニル基が置換した環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基（但し、該アリール基はさらに置換基を有していてもよい）、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6 ~ 30 のヘテロアリール基を表す。

2つの R^1 はそれぞれ同一でも異なってもよい。2つの R^2 はそれぞれ同一でも異なってもよい。2つの R^3 はそれぞれ同一でも異なってもよい。]

【0025】

（一般式（I）中の各基についての説明）

炭素数 1 ~ 50 のアルキル基は、直鎖状でも分岐鎖状であってもよい。該アルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基（異性体を含む）、ヘキシル基（異性体を含む）、ヘプチル基（異性体を含む）、オクチル基（異性体を含む）、ノニル基（異性体を含む）、デシル基（異性体を含む）、ウンデシル基（異性体を含む）、及びドデシル基（異性体を含む）、トリデシル基、テトラデシル基、オクタデシル基、テトラコサニル基、テトラコンタニル基等が挙げられる。これらの中でも、有機EL素子の高性能化の観点から、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*t*-ブチル基が好ましい。該アルキル基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、より好ましくは炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、さらに好ましくは炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、特に好ましくは炭素数 1 ~ 5 のアルキル基である。

【0026】

環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基、ナフチルフェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、アセナフチレニル基、アントリル基、ベンゾアントリル基、アセアントリル基、フェナントリル基、ベンゾフェナントリル基、フェナレニル基、フルオレニル基、9,9-ジアルキルフルオレニル基（該アルキル基の炭素数はいずれも、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 5、さらに好ましくは 1 である。）、9,9-ジアリールフルオレニル基（該アリール基の環形成炭素数は好ましくは 6 ~ 50、より好ましくは 6 ~ 20、さらに好ましくは 6 ~ 14、特に好ましくは 6 ~ 12 である。）、9,9'-スピロビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、ピセニル基、ペンタフェニル基、ペンタセニル基、ピレニル基、クリセニル基、ベンゾクリセニル基、*s*-インダセニル基、*as*-インダセニル基、フルオランテニル基、ベンゾフルオランテニル基、テトラセニル基、トリフェニレニル基、ベンゾトリフェニレニル基、ペリレニル基、コロニル基、ジベンゾアントリル基等が挙げられる。これらの中でも、有機EL素子の高性能化の観点から、フェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、9,9-ジアルキルフルオレニル基、アントリル基が好ましく、フェニル基がより好ましい。該アリール基としては、好ましくは環形成炭素数 6 ~ 25 のアリール基、より好ましくは環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、さらに好ましくは環形成炭素数 6 ~ 14 のアリール基である。

なお、本発明においては、置換されたアリール基としては、有機EL素子の高性能化の観点から、特に、 $-NO_2$ 、 $-CN$ 、 $-OCH_3$ 、 $-SO_2CH_3$ 、 $-SO_3H$ 、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CHO$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-SF_5$ 、 $-CF_3$ 、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基（好ましくは、メチル基、*t*-ブチル基、イソプロピル基、ヘキシル基、オクチル基）、トリアルキルシリルエチニル基（該アルキル基の炭素数は好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 5 であり、好ましくは、トリメチルシリルエチニル基である。）、アリルオキシ基、ジアリールアミノ基（アリール基の環形成炭素数は、好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18、さらに好ましくは 6 ~ 14 である。）、ジアルキルアミノ基（該アルキル基の炭素数は好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 5 である。）、及びホスフィンオキシド基から選択される少なくとも 1 つの置換基で置換された環形成炭素数 6 ~ 50（好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18、さらに好ましくは 6 ~ 14）のアリール基が好ましい。

【0027】

環形成炭素数6～50のアリールエチニル基が置換した環形成炭素数6～50のアリール基において、アリールエチニル基のアリール基部位は、前記アリール基と同様に説明され、好ましいものも同じであるが、有機EL素子の高性能化の観点から、特に好ましくはフェニル基である。置換基を有するアリールエチニル基としては、有機EL素子の高性能化の観点から、 $-\text{NO}_2$ 、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{OCH}_3$ 、 $-\text{SO}_2\text{CH}_3$ 、 $-\text{SO}_3\text{H}$ 、 $-\text{F}$ 、 $-\text{Cl}$ 、 $-\text{Br}$ 、 $-\text{I}$ 、 $-\text{CHO}$ 、 $-\text{COOH}$ 、 $-\text{CONH}_2$ 、 $-\text{SF}_5$ 、 $-\text{CF}_3$ 、炭素数1～10のアルキル基（好ましくは、メチル基、*t*-ブチル基、イソプロピル基、ヘキシル基、オクチル基）、トリアルキルシリルエチニル基（該アルキル基の炭素数は好ましくは1～10、より好ましくは1～5であり、好ましくは、トリメチルシリルエチニル基である。）、アリルオキシ基、ジアリールアミノ基（アリール基の環形成炭素数は、好ましくは6～25、より好ましくは6～18、さらに好ましくは6～14である。）、ジアルキルアミノ基（該アルキル基の炭素数は好ましくは1～10、より好ましくは1～5である。）、及びホスフィンオキシド基から選択される少なくとも1つの置換基で置換されたアリールエチニル基が好ましく、 $-\text{CN}$ 、 $-\text{SF}_3$ 、 $-\text{SF}_5$ 、 $-\text{CF}_3$ 及び $-\text{OCH}_3$ から選択される少なくとも1つの置換基で置換されたアリールエチニル基がより好ましい。

10

また、該アリールエチニル基が置換している、「環形成炭素数6～50のアリール基」は、前記アリール基と同様に説明され、好ましいものも同じであるが、特に好ましくはフェニル基である。さらに、該アリール基は、環形成炭素数6～50のアリールエチニル基以外の置換基を有していてもよく、該置換基は前述のとおりである。

20

【0028】

環形成原子数6～50（好ましくは6～24、より好ましくは環形成原子数6～13）のヘテロアリール基は少なくとも1個、好ましくは1～5個（より好ましくは1～3個、さらに好ましくは1～2個）のヘテロ原子、例えば、窒素原子、硫黄原子、酸素原子、リン原子を含む。該ヘテロ原子としては、有機EL素子の高性能化の観点から、好ましくは窒素原子、酸素原子である。なお、ヘテロ原子を2つ以上有する場合には、それらは同一であってもよいし、異なってもよい。

該ヘテロアリール基としては、例えば、ピリジル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、トリアジニル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、イソベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、イソベンゾチオフェニル基、インドリジニル基、キノリジニル基、キノリル基、イソキノリル基、シンノリル基、フタラジニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、ベンズイミダゾリル基、ベンズオキサゾリル基、ベンズチアゾリル基、インダゾリル基、ベンズイソキサゾリル基、ベンズイソチアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、フェノキサジニル基、アザトリフェニレニル基、ジアザトリフェニレニル基、キサンテニル基、アザカルバゾリル基、アザジベンゾフラニル基、アザジベンゾチオフェニル基、ベンゾフラノベンゾチオフェニル基、ベンゾチエノベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラノナフチル基、ジベンゾチエノナフチル基、ジナフトチエノチオフェニル基及び1,3-ベンゾジオキサリル基などが挙げられる。

30

40

これらの中でも、有機EL素子の高性能化の観点から、6員環を少なくとも1つ含むヘテロアリール基であることが好ましく、6員環1つ又は2つと5員環1つとが縮合したヘテロアリール基であることがより好ましく、ベンゼン環1つ又は2つとヘテロ5員環1つとが縮合したヘテロアリール基であることがさらに好ましい。環形成原子数6～30のヘテロアリール基としては、より具体的には、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、1,3-ベンゾジオキサリル基（好ましくは1,3-ベンゾジオキサール-5-イル基）がより好ましい。

【0029】

有機EL素子の高性能化の観点から、 R^1 及び R^2 が、それぞれ独立に、置換もしくは

50

無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6 ~ 30 のヘテロアリール基であることが好ましい。有機 E L 素子の高性能化の観点から、 R^1 及び R^2 は、無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であるか、又は、 $-NO_2$ 、 $-CN$ 、 $-OCH_3$ 、 $-SO_2CH_3$ 、 $-SO_3H$ 、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CHO$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-SF_5$ 、 $-CF_3$ 、メチル基、*t*-ブチル基、イソプロピル基、ヘキシル基、オクチル基、トリメチルシリルエチニル基、アリルオキシ基、ジアリールアミノ基、ジアルキルアミノ基、及びホスフィンオキシド基から選択される少なくとも 1 つの置換基で置換された環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であることがより好ましい。また、 R^1 が、無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であるか、又は、 $-NO_2$ 、 $-CN$ 、 $-OCH_3$ 、 $-SO_2CH_3$ 、 $-SO_3H$ 、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-CHO$ 、 $-COOH$ 、 $-CONH_2$ 、 $-SF_5$ 、 $-CF_3$ 、メチル基、*t*-ブチル基、イソプロピル基、ヘキシル基、オクチル基、トリメチルシリルエチニル基、アリルオキシ基、ジアリールアミノ基、ジアルキルアミノ基、及びホスフィンオキシド基から選択される少なくとも 1 つの置換基で置換された環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であることがさらに好ましい。特に、 R^1 が $-CN$ で置換された環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であることが好ましい。

10

R^1 及び R^2 を水素原子以外の前記の基とすることで、ピロロピロール構造の熱的及び電氣的安定性が増す傾向があり、その結果、特に寿命の向上に寄与していると推測される。

有機 E L 素子の高性能化の観点から、 R^1 及び R^2 のうちの少なくとも一方が、1 つ又は 2 つ以上の電子吸引性基が置換した環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であることが好ましい。ここで言う電子吸引性基とは、誘起効果及びメソメリー効果のうち、支配的な効果が電子吸引性である基のことである。該電子吸引性基としては、好ましくは $-CN$ 、 $-F$ 、 $-CF_3$ であり、より好ましくは $-CN$ である。

20

特に、 R^1 が $-CN$ で置換された環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基であることが好ましい。

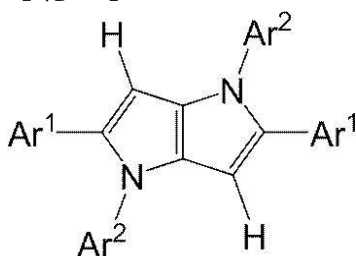
なお、2 つの R^1 は同一であることが好ましい。また、2 つの R^2 は同一であることが好ましい。これは、 R^1 や R^2 が同一である事であることにより、化合物の合成がより単純になることから、反応後の精製が容易になり、結果としてより高純度な化合物を得ることが出来るため、素子性能の向上を実現できるからである。

30

【0030】

化合物 (I) の中でも、有機 E L 素子の高性能化の観点から、下記一般式 (II) ~ (V) のいずれかで表される化合物が好ましい。

【化 7】



(II)

40

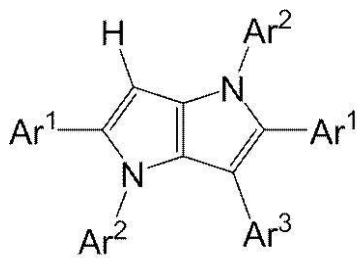
[一般式 (II) 中、 Ar^1 及び Ar^2 は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6 ~ 30 のヘテロアリール基を表す。

2 つの Ar^1 はそれぞれ同一でも異なってもよい。2 つの Ar^2 はそれぞれ同一でも異なってもよい。]

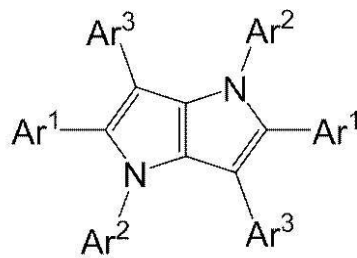
【0031】

50

【化 8】



(III)



(IV)

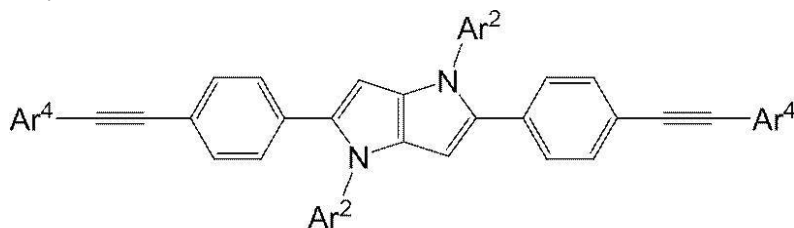
10

[一般式 (III) 及び (IV) 中、 Ar^1 、 Ar^2 及び Ar^3 は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6 ~ 30 のヘテロアリール基を表す。

2つの Ar^1 はそれぞれ同一でも異なってもよい。2つの Ar^2 はそれぞれ同一でも異なってもよい。式 (IV) 中の2つの Ar^3 はそれぞれ同一でも異なってもよい。]

【0032】

【化 9】



(V)

20

[一般式 (V) 中、 Ar^2 及び Ar^4 は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 6 ~ 30 のヘテロアリール基を表す。

2つの Ar^2 はそれぞれ同一でも異なってもよい。2つの Ar^4 はそれぞれ同一でも異なってもよい。]

【0033】

前記一般式 (II) ~ (IV) 中の Ar^1 が表す前記アリール基及びヘテロアリール基は、一般式 (I) 中の R^1 の場合と同様に説明され、好ましいものも同じである。前記一般式 (II) ~ (IV) 中の Ar^2 が表す前記アリール基及びヘテロアリール基は、一般式 (I) 中の R^2 の場合と同様に説明され、好ましいものも同じである。前記一般式 (II) ~ (IV) 中の Ar^3 が表す前記アリール基及びヘテロアリール基は、一般式 (I) 中の R^3 の場合と同様に説明され、好ましいものも同じである。

30

40

前記一般式 (II) ~ (IV) のいずれにおいても、有機 EL 素子の高性能化の観点から、2つの Ar^1 は同一であることが好ましい。また、前記一般式 (II) ~ (IV) のいずれにおいても、有機 EL 素子の高性能化の観点から、2つの Ar^2 が同一であることが好ましい。さらに、前記一般式 (IV) において、高性能化の観点から、2つの Ar^3 が同一であることが好ましい。

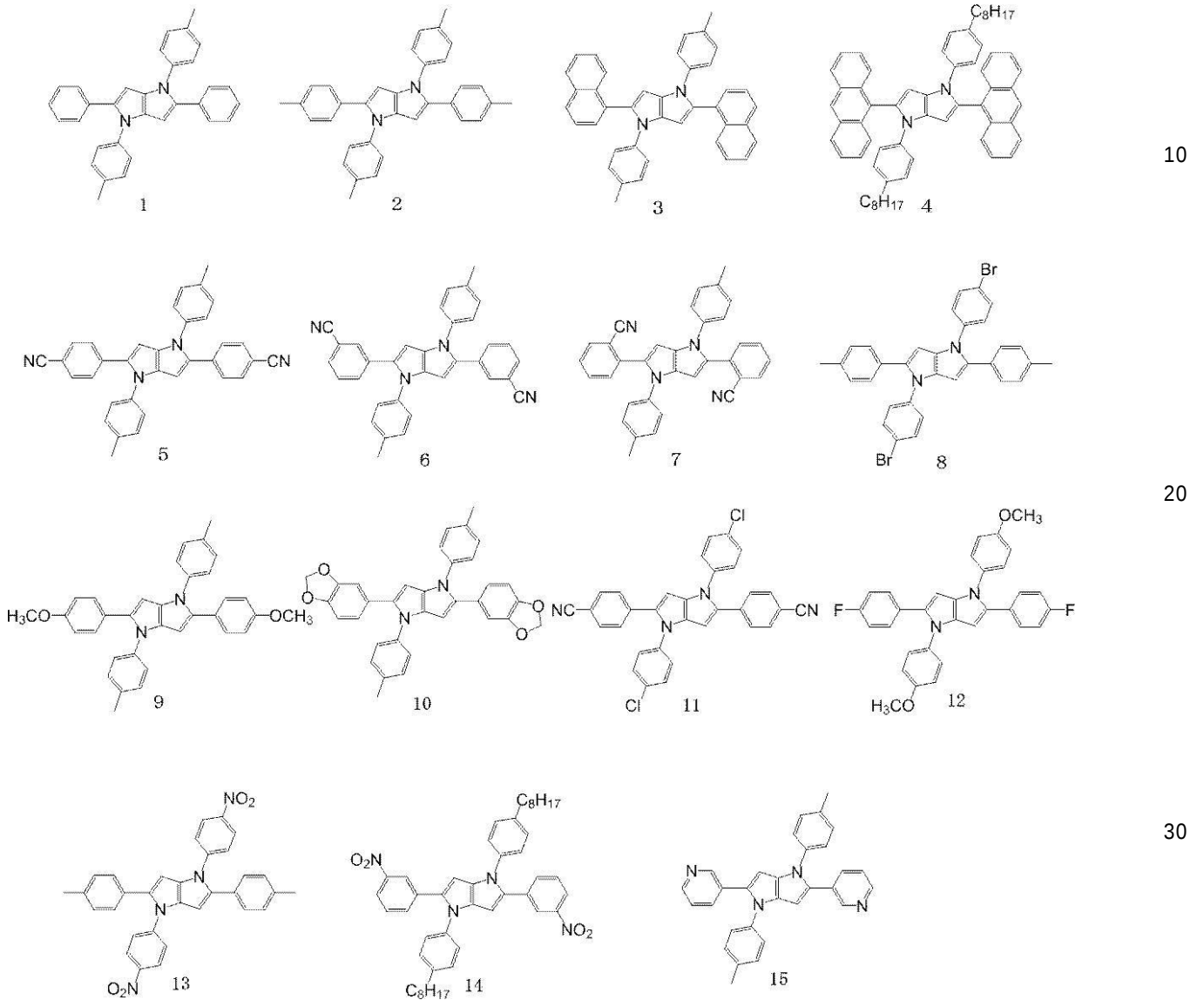
これは、2つの Ar^1 や2つの Ar^2 (さらには2つの Ar^3) が同一である事であることにより、化合物の合成がより単純になることから、反応後の精製が容易になり、結果としてより高純度な化合物を得ることが出来るため、素子性能の向上を実現できるからである。

50

【 0 0 3 4 】

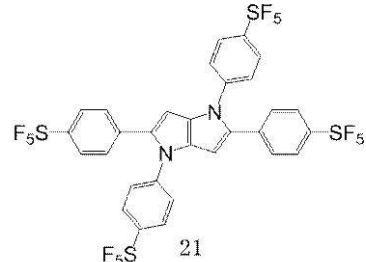
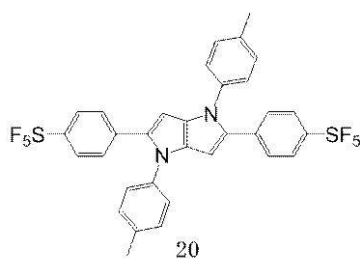
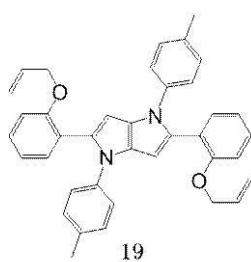
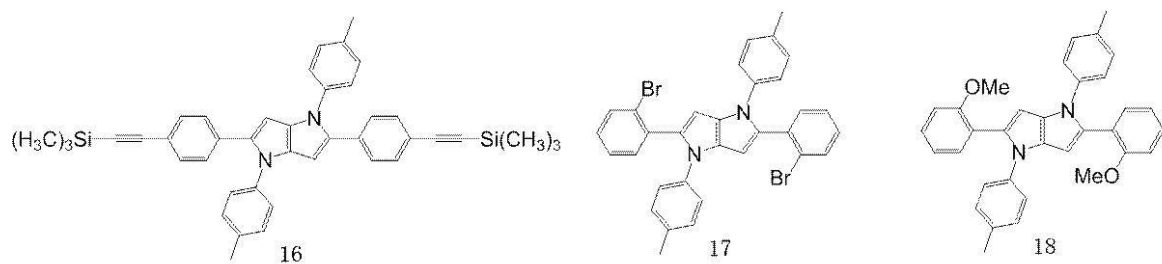
前記化合物（Ⅰ）の具体例としては以下の化合物が挙げられ、有機ＥＬ素子の高性能化の観点から、以下の群（化合物１～３８）から選択される少なくとも１つを有機ＥＬ素子用材料として用いることが好ましい。

【化１０】

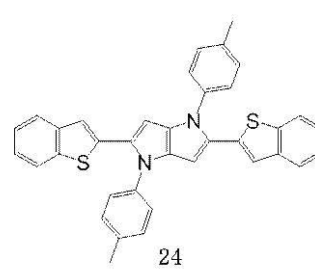
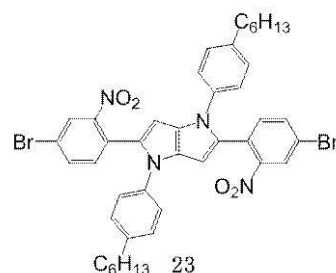
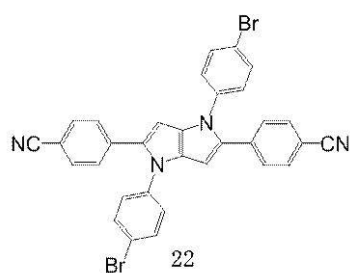


【 0 0 3 5 】

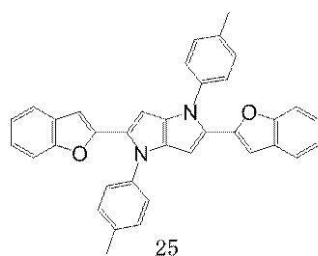
【化 1 1】



10



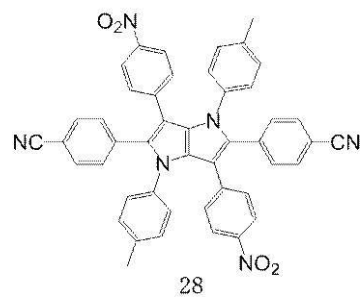
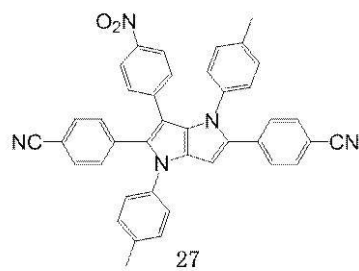
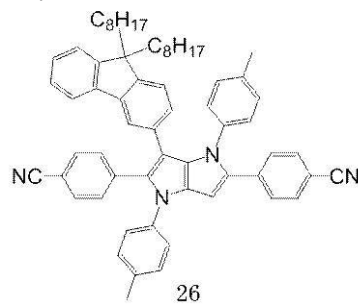
20



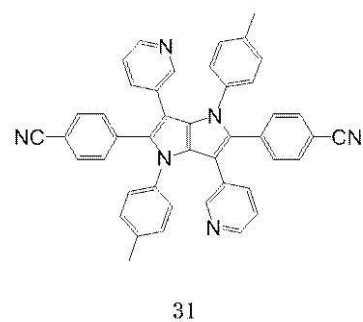
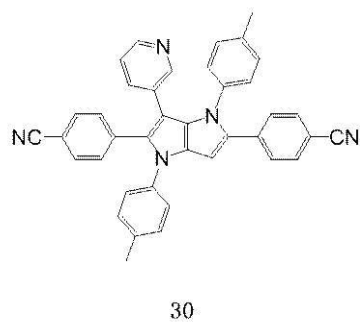
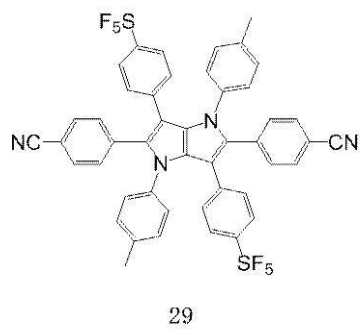
30

【 0 0 3 6 】

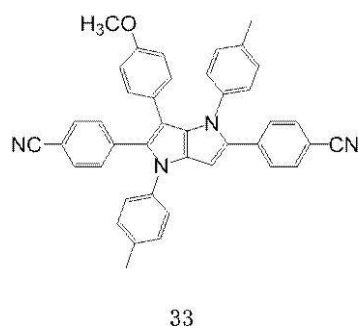
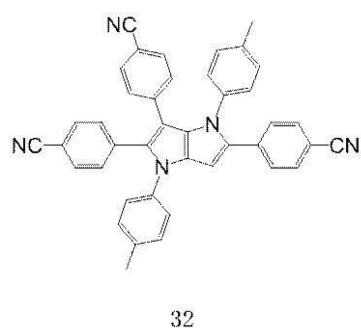
【化 1 2】



10



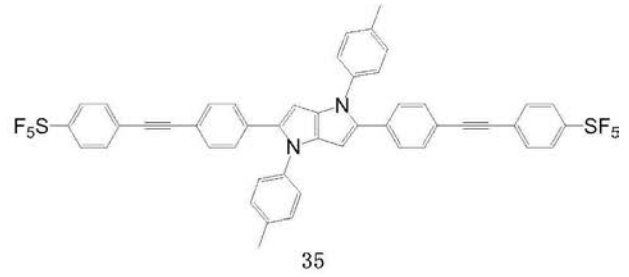
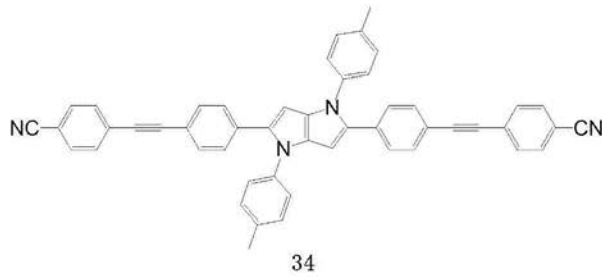
20



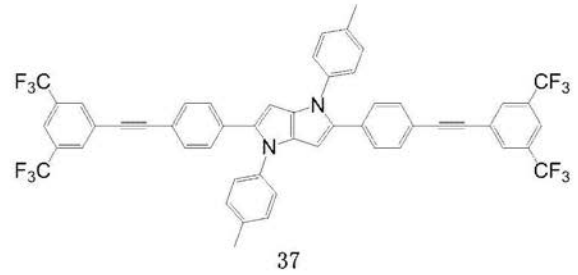
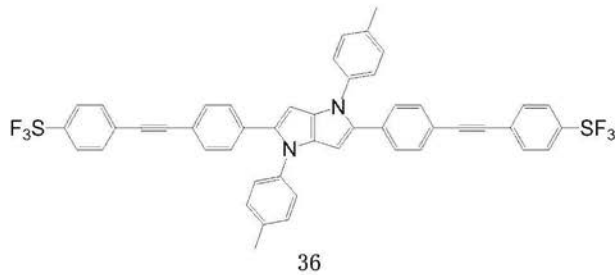
30

【 0 0 3 7 】

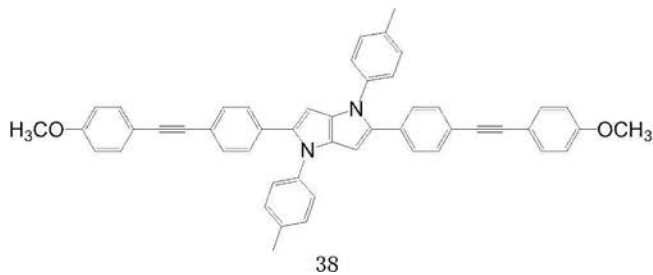
【化 1 3】



10



20



【 0 0 3 8 】

上記化合物（Ⅰ）の製造方法に特に制限はないが、アルデヒド化合物、アミン化合物及びジアセチル化合物を、必要に応じて酢酸等の溶媒の存在下に反応させる方法によって製造でき、さらに必要に応じてシリカゲルカラムクロマトグラフィーや再結晶等の精製手段により、純度を高めることが好ましい。なお、化合物（Ⅰ）の製造方法については、例えば国際公開第 2 0 1 4 / 0 8 0 0 2 9 号の記載を参照できる。

30

【 0 0 3 9 】

〔有機エレクトロルミネッセンス素子〕

次に、本発明の一態様の有機 E L 素子について説明する。

有機 E L 素子は、陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有する。この一層以上の有機薄膜層は発光層を含み、有機薄膜層の少なくとも 1 層が本発明の前記化合物（前記化合物（Ⅰ）や、それに包含される下位概念の前記各化合物（Ⅱ）～（Ⅴ））を含む。

40

本発明の前記化合物が含まれる有機薄膜層の例としては、陽極と発光層との間に設けられる陽極側有機薄膜層（正孔輸送層、正孔注入層等）、発光層、陰極と発光層との間に設けられる陰極側有機薄膜層（電子輸送層、電子注入層等）、スペース層、障壁層等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。前記化合物（Ⅰ）は、上記いずれの層に含まれていてもよい。特に、蛍光発光ユニットの発光層が本発明の前記化合物を含むことが好ましく、その場合、本発明の前記化合物はドーバント材料として機能し得る。

【 0 0 4 0 】

本発明の一態様において、有機 E L 素子は、蛍光発光型の単色発光素子であっても、蛍光／燐光ハイブリッド型の白色発光素子であってもよいし、単独の発光ユニットを有するシンプル型であっても、複数の発光ユニットを有するタンデム型であってもよい。ここで

50

、「発光ユニット」とは、一層以上の有機層を含み、そのうちの一層が発光層であり、注入された正孔と電子が再結合することにより発光することができる最小単位をいう。

【0041】

従って、シンプル型有機EL素子の代表的な素子構成としては、以下の素子構成を挙げることができる。

(1) 陽極 / 発光ユニット / 陰極

また、上記発光ユニットは、蛍光発光層のみならず燐光発光層を有する積層型であってもよく、その場合、各発光層の間に、燐光発光層で生成された励起子が蛍光発光層に拡散することを防ぐ目的で、スペース層を有していてもよい。発光ユニットの代表的な層構成を以下に示す。

(a) 正孔輸送層 / 発光層 (/ 電子輸送層)

(b) 正孔輸送層 / 第一蛍光発光層 / 第二蛍光発光層 (/ 電子輸送層)

(c) 正孔輸送層 / 燐光発光層 / スペース層 / 蛍光発光層 (/ 電子輸送層)

(d) 正孔輸送層 / 第一燐光発光層 / 第二燐光発光層 / スペース層 / 蛍光発光層 (/ 電子輸送層)

(e) 正孔輸送層 / 第一燐光発光層 / スペース層 / 第二燐光発光層 / スペース層 / 蛍光発光層 (/ 電子輸送層)

(f) 正孔輸送層 / 燐光発光層 / スペース層 / 第一蛍光発光層 / 第二蛍光発光層 (/ 電子輸送層)

(g) 正孔輸送層 / 電子障壁層 / 蛍光発光層 (/ 電子輸送層)

(h) 正孔輸送層 / 蛍光発光層 / 正孔障壁層 (/ 電子輸送層)

(i) 正孔輸送層 / 蛍光発光層 / トリプレット障壁層 (/ 電子輸送層)

【0042】

上記各蛍光発光層又は燐光発光層は、それぞれ互いに異なる発光色を示すものとしてすることができる。具体的には、上記積層発光ユニット(d)において、正孔輸送層 / 第一燐光発光層 (赤色発光) / 第二燐光発光層 (緑色発光) / スペース層 / 蛍光発光層 (青色発光) / 電子輸送層といった層構成等が挙げられる。

なお、各発光層と正孔輸送層あるいはスペース層との間には、適宜、電子障壁層を設けてもよい。また、各発光層と電子輸送層との間には、適宜、正孔障壁層を設けてもよい。電子障壁層や正孔障壁層を設けることで、電子又は正孔を発光層内に閉じ込めて、発光層における電荷の再結合確率を高め、発光効率を向上させることができる。

【0043】

タンデム型有機EL素子の代表的な素子構成としては、以下の素子構成を挙げることができる。

(2) 陽極 / 第一発光ユニット / 中間層 / 第二発光ユニット / 陰極

ここで、上記第一発光ユニット及び第二発光ユニットとしては、例えば、それぞれ独立に上述の発光ユニットと同様のものを選択することができる。

上記中間層は、一般的に、中間電極、中間導電層、電荷発生層、電子引抜層、接続層、中間絶縁層とも呼ばれ、第一発光ユニットに電子を、第二発光ユニットに正孔を供給する、公知の材料構成を用いることができる。

【0044】

図1に、前記有機EL素子の一例の概略構成を示す。有機EL素子1は、基板2、陽極3、陰極4、及び該陽極3と陰極4との間に配置された発光ユニット10とを有する。発光ユニット10は、蛍光ホスト材料と蛍光ドーパント材料 (蛍光発光材料) を含む少なくとも1つの蛍光発光層を含む発光層5を有する。発光層5と陽極3との間に正孔注入・輸送層 (陽極側有機薄膜層、又は正孔輸送領域などとも称する。) 6等、発光層5と陰極4との間に電子注入・輸送層 (陰極側有機薄膜層、又は電子輸送領域などとも称する。) 7等を形成してもよい。また、発光層5の陽極3側に電子障壁層 (図示せず) を、発光層5の陰極4側に正孔障壁層 (図示せず) を、それぞれ設けてもよい。これにより、電子や正孔を発光層5に閉じ込めて、発光層5における励起子の生成確率をさらに高めることがで

10

20

30

40

50

きる。

なお、蛍光ドーパント材料（蛍光発光材料）と組み合わせられたホスト材料を蛍光ホスト材料と称する。

【0045】

（基板）

基板は、発光素子の支持体として用いられる。基板としては、例えば、ガラス、石英、プラスチックなどを用いることができる。また、可撓性基板を用いてもよい。可撓性基板とは、折り曲げることができる（フレキシブル）基板のことであり、例えば、ポリカーボネート、ポリ塩化ビニルからなるプラスチック基板等が挙げられる。

【0046】

（陽極）

基板上に形成される陽極には、仕事関数の大きい（具体的には4.0 eV以上）金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム - 酸化スズ（ITO: Indium Tin Oxide）、珪素若しくは酸化珪素を含有した酸化インジウム - 酸化スズ、酸化インジウム - 酸化亜鉛、酸化タンゲステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、グラフェン等が挙げられる。この他、金（Au）、白金（Pt）、または金属材料の窒化物（例えば、窒化チタン）等が挙げられる。

【0047】

（陰極）

陰極には、仕事関数の小さい（具体的には3.8 eV以下）金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。このような陰極材料の具体例としては、元素周期表の第1族または第2族に属する元素、すなわちリチウム（Li）やセシウム（Cs）等のアルカリ金属、およびマグネシウム（Mg）等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金（例えば、MgAg、AlLi）等、並びに希土類金属およびこれを含む合金等が挙げられる。

【0048】

（発光層のドーパント材料）

発光層は、発光性の高い物質を含む層であり、種々の材料を用いることができる。例えば、発光性の高い物質としては、蛍光を発光する蛍光性化合物を用いることができ、少なくとも前記化合物（I）を用いることが好ましい。蛍光性化合物は一重項励起状態から発光可能な化合物である。

【0049】

前記化合物（I）以外では、発光層に用いることができる青色系の蛍光発光材料として、ピレン誘導体、スチリルアミン誘導体、クリセン誘導体、フルオランテン誘導体、フルオレン誘導体、ジアミン誘導体、トリアリールアミン誘導体等が使用できる。具体的には、N, N' - ビス[4 - (9H - カルバゾール - 9 - イル)フェニル] - N, N' - ジフェニルスチルベン - 4, 4' - ジアミン（略称：YGAS）、4 - (9H - カルバゾール - 9 - イル) - 4' - (10 - フェニル - 9 - アントリル)トリフェニルアミン（略称：YGAPA）、4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) - 4' - (9 - フェニル - 9H - カルバゾール - 3 - イル)トリフェニルアミン（略称：PCBAPA）などが挙げられる。

また、緑色系の蛍光発光材料として、芳香族アミン誘導体等を使用できる。具体的には、N - (9, 10 - ジフェニル - 2 - アントリル) - N, 9 - ジフェニル - 9H - カルバゾール - 3 - アミン（略称：2PCAPA）、N - [9, 10 - ビス(1, 1' - ビフェニル - 2 - イル) - 2 - アントリル] - N, 9 - ジフェニル - 9H - カルバゾール - 3 - アミン（略称：2PCABPhA）、N - (9, 10 - ジフェニル - 2 - アントリル) - N, N', N' - トリフェニル - 1, 4 - フェニレンジアミン（略称：2DPAPA）、N - [9, 10 - ビス(1, 1' - ビフェニル - 2 - イル) - 2 - アントリル] - N, N', N' - トリフェニル - 1, 4 - フェニレンジアミン（略称：2DPABPhA）、N - [

10

20

30

40

50

9, 10 - ビス (1, 1' - ビフェニル - 2 - イル)] - N - [4 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル] - N - フェニルアントラセン - 2 - アミン (略称 : 2 Y G A B P h A)、N, N, 9 - トリフェニルアントラセン - 9 - アミン (略称 : D P h A P h A) などが挙げられる。

また、赤色系の蛍光発光材料として、テトラセン誘導体、ジアミン誘導体等が使用できる。具体的には、N, N, N', N' - テトラキス (4 - メチルフェニル) テトラセン - 5, 11 - ジアミン (略称 : p - m P h T D)、7, 14 - ジフェニル - N, N, N', N' - テトラキス (4 - メチルフェニル) アセナフト [1, 2 - a] フルオランテン - 3, 10 - ジアミン (略称 : p - m P h A F D) などが挙げられる。

【 0 0 5 0 】

(発光層のホスト材料)

発光層としては、上述した発光性の高い物質 (ドーバント材料) を他の物質 (ホスト材料) に分散させた構成としてもよい。発光性の高い物質を分散させるための物質としては、各種のものをを用いることができ、発光性の高い物質よりも最低空軌道準位 (L U M O 準位) が高く、最高被占有軌道準位 (H O M O 準位) が低い物質を用いることが好ましい。

発光性の高い物質を分散させるための物質 (ホスト材料) としては、例えば、1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、若しくは亜鉛錯体等の金属錯体、2) オキサジアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、若しくはフェナントロリン誘導体等の複素環化合物、3) カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体、フェナントレン誘導体、ピレン誘導体、若しくはクリセン誘導体等の縮合芳香族化合物、4) トリアリールアミン誘導体、若しくは縮合多環芳香族アミン誘導体等の芳香族アミン化合物を使用できる。より具体的には、トリス (8 - キノリノラト) アルミニウム (III) (略称 : A l q)、トリス (4 - メチル - 8 - キノリノラト) アルミニウム (III) (略称 : A l m q 3)、ビス (10 - ヒドロキシベンゾ [h] キノリノラト) ベリリウム (II) (略称 : B e B q 2)、ビス (2 - メチル - 8 - キノリノラト) (4 - フェニルフェノラト) アルミニウム (III) (略称 : B A l q)、ビス (8 - キノリノラト) 亜鉛 (II) (略称 : Z n q)、ビス [2 - (2 - ベンゾオキサゾリル) フェノラト] 亜鉛 (II) (略称 : Z n P B O)、ビス [2 - (2 - ベンゾチアゾリル) フェノラト] 亜鉛 (II) (略称 : Z n B T Z) などの金属錯体、2 - (4 - ビフェニル) - 5 - (4 - t e r t - ブチルフェニル) - 1, 3, 4 - オキサジアゾール (略称 : P B D)、1, 3 - ビス [5 - (p - t e r t - ブチルフェニル) - 1, 3, 4 - オキサジアゾール - 2 - イル] ベンゼン (略称 : O X D - 7)、3 - (4 - ビフェニル) - 4 - フェニル - 5 - (4 - t e r t - ブチルフェニル) - 1, 2, 4 - トリアゾール (略称 : T A Z)、2, 2', 2'' - (1, 3, 5 - ベンゼントリイル) トリス (1 - フェニル - 1 H - ベンゾイミダゾール) (略称 : T P B I)、バソフェナントロリン (略称 : B P h e n)、バソキュプロイン (略称 : B C P) などの複素環化合物や、9 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) フェニル] - 9 H - カルバゾール (略称 : C z P A)、3, 6 - ジフェニル - 9 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) フェニル] - 9 H - カルバゾール (略称 : D P C z P A)、9, 10 - ビス (3, 5 - ジフェニルフェニル) アントラセン (略称 : D P P A)、9, 10 - ジ (2 - ナフチル) アントラセン (略称 : D N A)、2 - t e r t - ブチル - 9, 10 - ジ (2 - ナフチル) アントラセン (略称 : t - B u D N A)、9, 9' - ビアントリル (略称 : B A N T)、9, 9' - (スチルベン - 3, 3' - ジイル) ジフェナントレン (略称 : D P N S)、9, 9' - (スチルベン - 4, 4' - ジイル) ジフェナントレン (略称 : D P N S 2)、3, 3', 3'' - (ベンゼン - 1, 3, 5 - トリイル) トリピレン (略称 : T P B 3)、9, 10 - ジフェニルアントラセン (略称 : D P A n t h)、6, 12 - ジメトキシ - 5, 11 - ジフェニルクリセンなどの縮合芳香族化合物、N, N - ジフェニル - 9 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) フェニル] - 9 H - カルバゾール - 3 - アミン (略称 : C z A 1 P A)、4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) トリフェニルアミン (略称 : D P h P A)、N, 9 - ジフェニル - N - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) フェニル] - 9 H - カルバゾール - 3 - アミン (略称 : P C A P A)、N, 9 - ジフェニル - N -

10

20

30

40

50

{ 4 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) フェニル] フェニル } - 9 H - カルバゾール - 3 - アミン (略称 : PCAPBA)、N - (9 , 10 - ジフェニル - 2 - アントリル) - N , 9 - ジフェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - アミン (略称 : 2PCAPA)、NPB (または α - NPD)、TPD、DFLDPBi、BSPB などの芳香族アミン化合物などを用いることができる。また、発光性の高い物質 (ドーバント材料) を分散させるための物質 (ホスト材料) は複数種用いることができる。

【 0051 】

前記化合物 (I) を発光層に含有させる場合、該発光層はさらにホスト材料を含有することが好ましい。その場合、前記化合物 (I) とホスト材料との含有比率 (化合物 (I) / ホスト材料) は、質量比で、好ましくは 1 / 99 ~ 20 / 80、より好ましくは 1 / 99 ~ 15 / 85、さらに好ましくは 2 / 98 ~ 10 / 90、特に好ましくは 2 / 98 ~ 7 / 93 である。

なお、前記ホスト材料の三重項励起準位 [T_1 (H)] は、化合物 (I) の三重項励起準位 [T_1 (D)] よりも小さいことが好ましい。これにより、三重項励起子が発光層内のホスト材料に閉じ込められ TTF (Triplet-Triplet-Fusion) 現象を効率的に起こして蛍光素子の高効率化に寄与するからである (WO2011 / 086941 等参照)。

【 0052 】

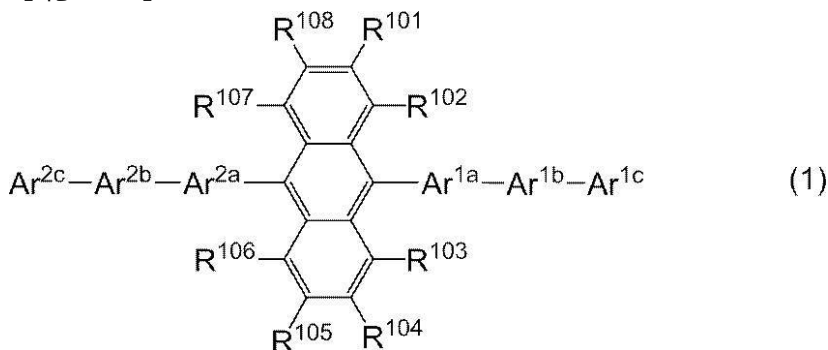
前記化合物 (I) を発光層に含有させる場合、発光層がさらに含有するホスト材料としては、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 (好ましくは 10 ~ 30、より好ましくは 10 ~ 20、さらに好ましくは 10 ~ 14) の芳香族縮合環を含有する縮合多環芳香族化合物であるか、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 (好ましくは 10 ~ 30、より好ましくは 10 ~ 20、さらに好ましくは 10 ~ 14) の芳香族縮合環と置換もしくは無置換の環形成原子数 10 ~ 50 (好ましくは 10 ~ 30、より好ましくは 10 ~ 20、さらに好ましくは 10 ~ 13) のヘテロ芳香族縮合環とを含有する縮合多環ヘテロ芳香族化合物であることが好ましい。

上記縮合多環芳香族化合物の環形成炭素数の合計は、好ましくは 30 ~ 70、より好ましくは 30 ~ 60、さらに好ましくは 30 ~ 50、特に好ましくは 30 ~ 40 である。縮合多環ヘテロ芳香族化合物の環形成原子数の合計は、好ましくは 30 ~ 70、より好ましくは 30 ~ 60、さらに好ましくは 30 ~ 55、特に好ましくは 30 ~ 45 である。

【 0053 】

また、前記化合物 (I) を発光層に含有させる場合、発光層がさらに含有するホスト材料としては、有機 EL 素子の高性能化の観点から、下記一般式 (1) で表される縮合多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物であることがより好ましい。

【 化 14 】



[一般式 (1) 中、 Ar^{1a} 及び Ar^{2a} は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の非縮合アリーレン基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の非縮合ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合アリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合ヘテロアリーレン基を表す。

Ar^{1b} 及び Ar^{2b} は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の環形成炭素

数 6 ~ 50 の非縮合アリーレン基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の非縮合ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合アリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合ヘテロアリーレン基を表す。

Ar^{1c} 及び Ar^{2c} は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の非縮合アリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の非縮合ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合アリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合ヘテロアリール基を表す。

$R^{101} \sim R^{108}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の非縮合アリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の非縮合ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合アリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合ヘテロアリール基であるか、又は、前記非縮合アリール基、前記非縮合ヘテロアリール基、前記縮合アリール基及び前記縮合ヘテロアリール基から選択される少なくとも 2 つの組み合わせからなる基であるか、又は、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基を有する置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 51 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、シリル基であるか、又は、

炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 50 の非縮合アリール基及び環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合アリール基から選択される置換基を有する、モノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基である。]

【0054】

Ar^{1a} 、 Ar^{2a} 、 Ar^{1b} 及び Ar^{2b} が表す非縮合アリーレン基の環形成炭素数は、高性能化の観点から、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 20、さらに好ましくは 6 ~ 14、特に好ましくは 6 ~ 12 である。非縮合アリーレン基としては、有機 EL 素子の高性能化の観点から、1, 2 - フェニレン基、1, 3 - フェニレン基、1, 4 - フェニレン基などのフェニレン基が好ましい。

非縮合ヘテロアリーレン基の環形成原子数は、有機 EL 素子の高性能化の観点から、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 20、さらに好ましくは 5 ~ 10 である。

縮合アリーレン基の環形成炭素数は、有機 EL 素子の高性能化の観点から、好ましくは 10 ~ 30、より好ましくは 10 ~ 20、さらに好ましくは 10 ~ 14 である。縮合アリーレン基としては、有機 EL 素子の高性能化の観点から、1, 4 - ナフチレン基、2, 6 - ナフチレン基などのナフチレン基が好ましい。

縮合ヘテロアリーレン基の環形成原子数は、有機 EL 素子の高性能化の観点から、好ましくは 8 ~ 30、より好ましくは 8 ~ 20、さらに好ましくは 8 ~ 13 である。

【0055】

Ar^{1a} 及び Ar^{2a} は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合ヘテロアリーレン基であることが好ましい。

Ar^{1a} 及び Ar^{2a} のうちの一方が、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の非縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の非縮合ヘテロアリーレン基であり、他方が、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合ヘテロアリーレン基であるのも好ましい。

Ar^{1a} 及び Ar^{2a} がいずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の非縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の非縮合ヘテロアリーレン基であるのも好ましい。

Ar^{1a} 及び Ar^{2a} がいずれも、置換もしくは無置換のフェニレン基であるのも好ましい。

Ar^{1a} が置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合アリーレン基又は置換

10

20

30

40

50

もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合ヘテロアリーレン基であり、 Ar^{2a} が無置換のフェニレン基であるのも好ましい。

Ar^{1a} が置換もしくは無置換のフェニレン基であり、 Ar^{2a} が無置換のフェニレン基であるのも好ましい。

Ar^{1a} が置換もしくは無置換のナフチレン基であり、 Ar^{1b} が置換もしくは無置換のフェニレン基であるのも好ましい。

Ar^{2a} が、カルバゾール、ジベンゾフラン又はジベンゾチオフェンの二価の基（該 2 価の基は置換基を有していてもよい）であるのも好ましい。

Ar^{2c} が、置換もしくは無置換の N - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の C - カルバゾリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基又は置換もしくは無置換のジベンゾチエニル基であるのも好ましい。

【0056】

Ar^{1c} 及び Ar^{2c} が表す非縮合アリール基の環形成炭素数は、有機 EL 素子の高性能化の観点から、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 20、さらに好ましくは 6 ~ 14、特に好ましくは 6 ~ 12 である。非縮合アリール基としては、フェニル基が好ましい。

非縮合ヘテロアリール基の環形成原子数は、有機 EL 素子の高性能化の観点から、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 20、さらに好ましくは 5 ~ 10 である。

縮合アリール基の環形成炭素数は、有機 EL 素子の高性能化の観点から、好ましくは 10 ~ 30、より好ましくは 10 ~ 20、さらに好ましくは 10 ~ 14 である。縮合アリール基としては、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基などのナフチル基；9 - フェナントリル基などのフェナントリル基；2 - トリフェニレニル基などのトリフェニレニル基が好ましく、ナフチル基、フェナントリル基がより好ましい。

縮合ヘテロアリール基の環形成原子数は、有機 EL 素子の高性能化の観点から、好ましくは 8 ~ 30、より好ましくは 8 ~ 20、さらに好ましくは 8 ~ 13 である。縮合ヘテロアリール基としては、2 - ジベンゾフラニル基、4 - ジベンゾフラニル基などのジベンゾフラニル基；2 - ジベンゾチオフェニル基、4 - ジベンゾチオフェニル基などのジベンゾチオフェニル基が好ましい。

【0057】

$R^{101} \sim R^{108}$ が表す非縮合アリール基の環形成炭素数は、有機 EL 素子の高性能化の観点から、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 20、さらに好ましくは 6 ~ 14、特に好ましくは 6 ~ 12 である。非縮合ヘテロアリール基の環形成原子数は、有機 EL 素子の高性能化の観点から、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 20、さらに好ましくは 5 ~ 10 である。縮合アリール基の環形成炭素数は、有機 EL 素子の高性能化の観点から、好ましくは 10 ~ 30、より好ましくは 10 ~ 20、さらに好ましくは 10 ~ 14 である。縮合ヘテロアリール基の環形成原子数は、有機 EL 素子の高性能化の観点から、好ましくは 8 ~ 30、より好ましくは 8 ~ 20、さらに好ましくは 8 ~ 13 である。

アルキル基の炭素数は、好ましくは 1 ~ 30、より好ましくは 1 ~ 10、さらに好ましくは 1 ~ 6、特に好ましくは 1 ~ 3 である。シクロアルキル基の環形成炭素数は、好ましくは 3 ~ 30、より好ましくは 3 ~ 10、さらに好ましくは 3 ~ 6 である。アルコキシ基の炭素数は、好ましくは 1 ~ 30、より好ましくは 1 ~ 10、さらに好ましくは 1 ~ 6、特に好ましくは 1 ~ 3 である。環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基を有する置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 51 のアラルキル基については、アリール基の好ましい環形成炭素数は、有機 EL 素子の高性能化の観点から、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 20、さらに好ましくは 6 ~ 14、特に好ましくは 6 ~ 12 であり、そのとき、アラルキル基の炭素数は、好ましくは 7 ~ 31、より好ましくは 7 ~ 21、さらに好ましくは 7 ~ 15、特に好ましくは 7 ~ 13 である。アリールオキシ基の環形成炭素数は、有機 EL 素子の高性能化の観点から、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 20、さらに好ましくは 6 ~ 14、特に好ましくは 6 ~ 12 である。

モノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基としては、トリ置換シリル基が好ましく、トリ

10

20

30

40

50

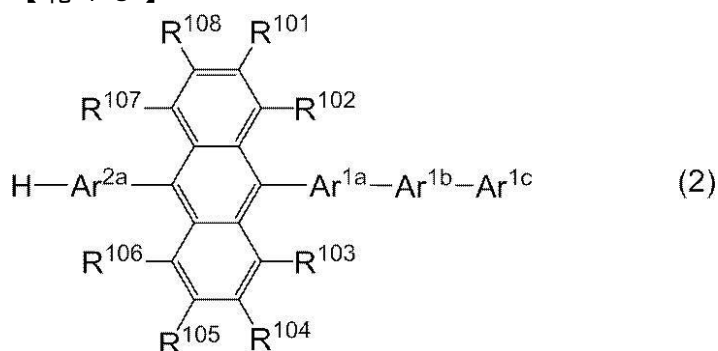
アルキルシリル基（アルキル基の炭素数は１～５０、好ましくは１～３０、より好ましくは１～１０、さらに好ましくは１～６、特に好ましくは１～３）がより好ましい。トリアルキルシリル基としては、トリメチルシリル基が好ましい。

なお、 $R^{101} \sim R^{108}$ としては、それぞれ独立に、水素原子、前記アルキル基、又は、前記モノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基であることが好ましく、水素原子、無置換のアルキル基、又はトリ置換シリル基であることがより好ましく、いずれも水素原子であることがさらに好ましい。

【００５８】

前記一般式（１）で表される縮合環多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物の中でも、有機ＥＬ素子の高性能化の観点から、下記一般式（２）～（５）のいずれかで表される縮合環多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物であることがより好ましい。

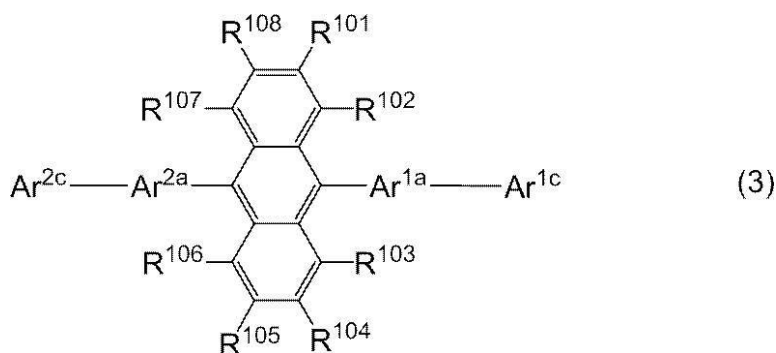
【化１５】



[一般式（２）中、 Ar^{1a} 、 Ar^{2a} 、 Ar^{1b} 、 Ar^{1c} 及び $R^{101} \sim R^{108}$ は、前記一般式（１）中の定義の通りであり、好ましいものも同じである。但し、 Ar^{1b} は単結合ではなく、且つ Ar^{1c} は水素原子ではない。]

【００５９】

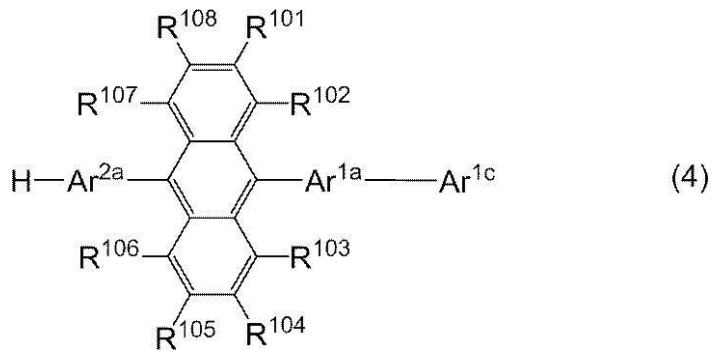
【化１６】



[一般式（３）中、 Ar^{1a} 、 Ar^{2a} 、 Ar^{1c} 、 Ar^{2c} 及び $R^{101} \sim R^{108}$ は、前記一般式（１）中の定義の通りであり、好ましいものも同じである。但し、 Ar^{1c} 及び Ar^{2c} は、いずれも水素原子ではない。]

【００６０】

【化 1 7】

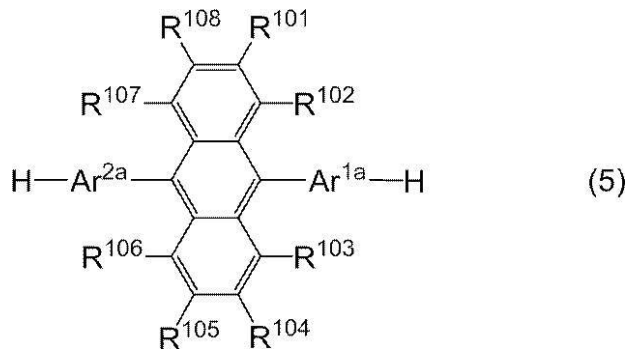


10

[一般式 (4) 中、Ar^{1a}、Ar^{2a}、Ar^{1c} 及び R¹⁰¹ ~ R¹⁰⁸ は、前記一般式 (1) 中の定義の通りであり、好ましいものも同じである。但し、Ar^{1c} は水素原子ではない。]

【 0 0 6 1】

【化 1 8】



20

[一般式 (5) 中、Ar^{1a}、Ar^{2a} 及び R¹⁰¹ ~ R¹⁰⁸ は、前記一般式 (1) 中の定義の通りであり、好ましいものも同じである。]

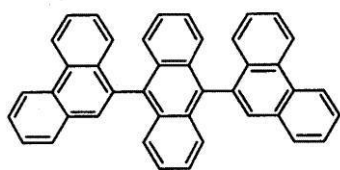
【 0 0 6 2】

前記一般式 (1) で表される縮合環多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物の具体例としては、以下のものが挙げられる。

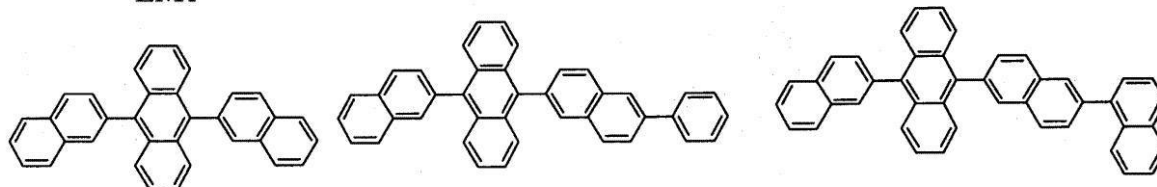
30

【 0 0 6 3】

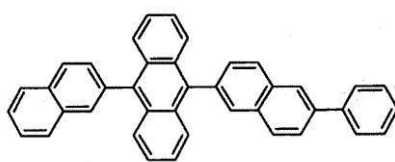
【化 1 9】



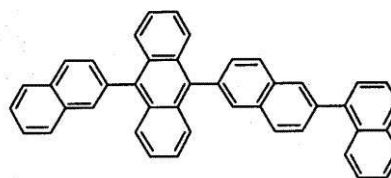
EM1



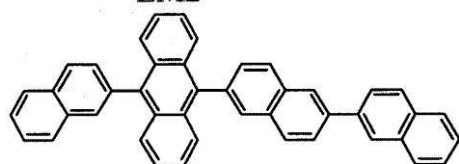
EM2



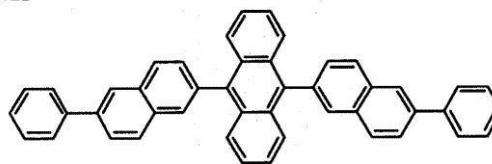
EM3



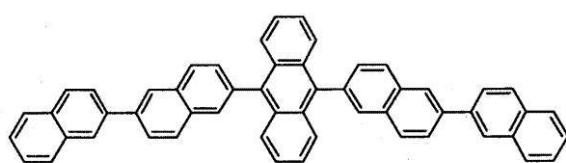
EM4



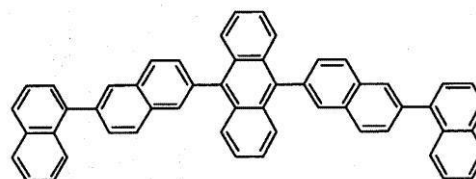
EM5



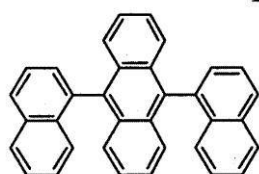
EM6



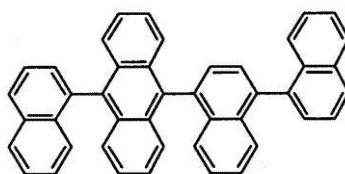
EM7



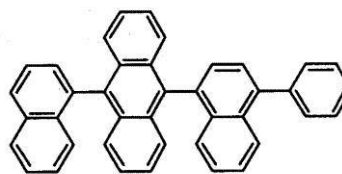
EM8



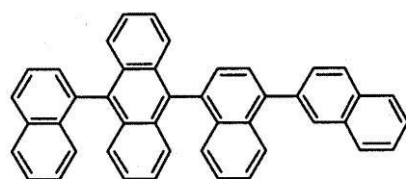
EM9



EM10



EM11



EM12

【 0 0 6 4 】

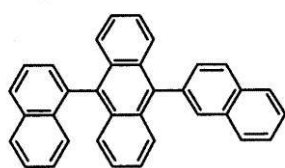
10

20

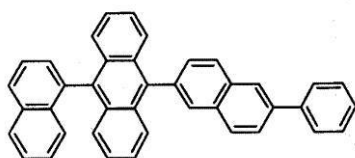
30

40

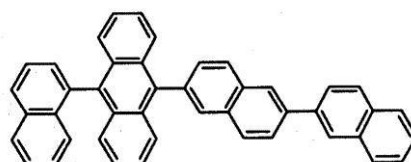
【化 2 0】



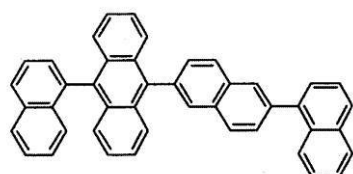
EM13



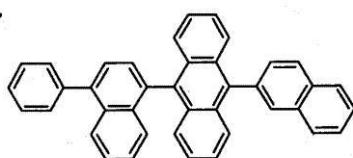
EM14



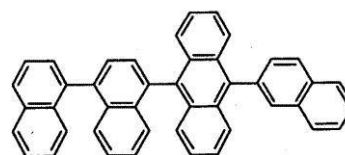
EM15



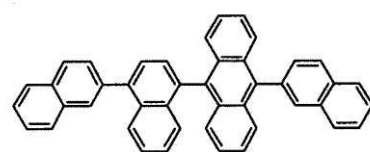
EM16



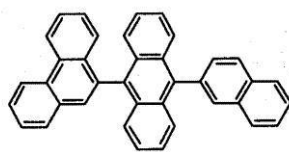
EM17



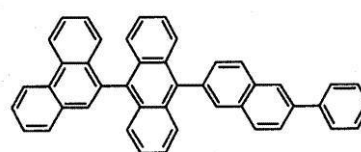
EM18



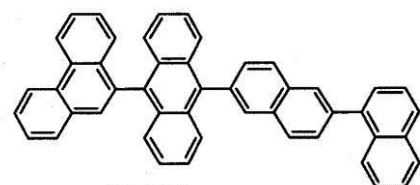
EM19



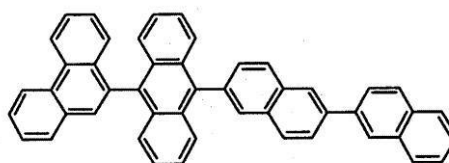
EM20



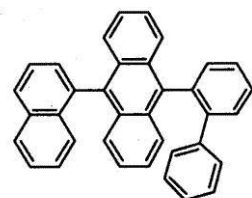
EM21



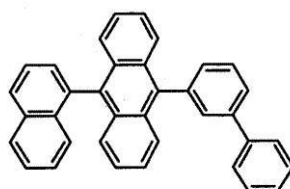
EM22



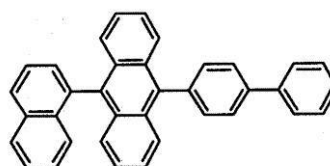
EM23



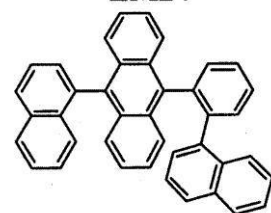
EM24



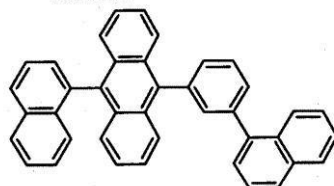
EM25



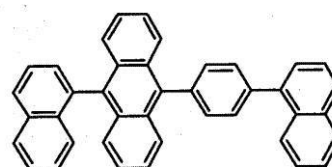
EM26



EM27



EM28



EM29

【 0 0 6 5】

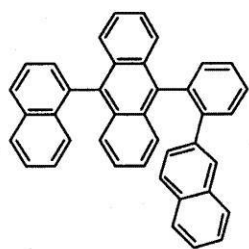
10

20

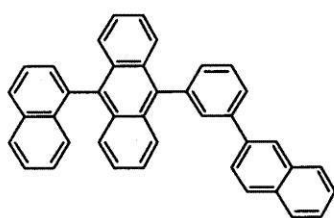
30

40

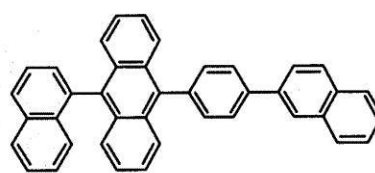
【化 2 1】



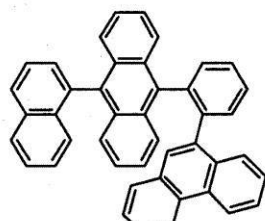
EM30



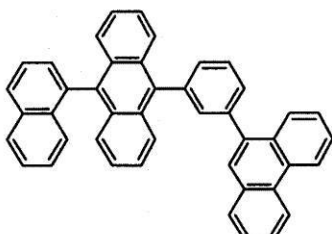
EM31



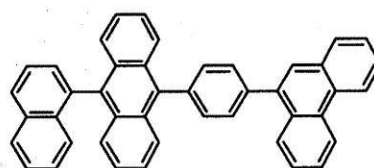
EM32



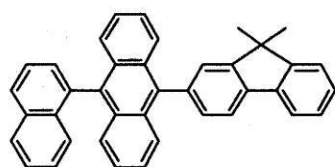
EM33



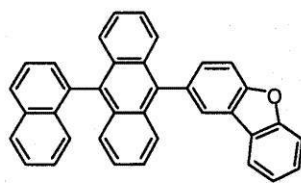
EM34



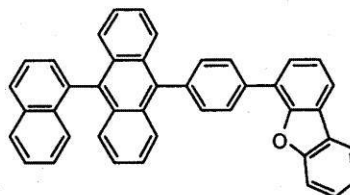
EM35



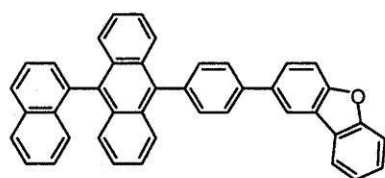
EM36



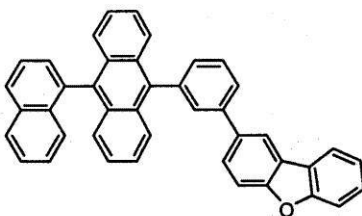
EM37



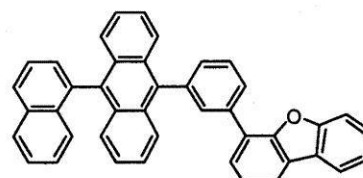
EM38



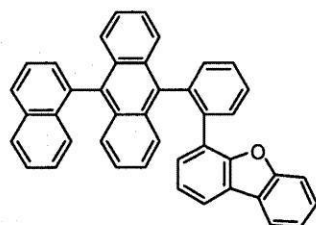
EM39



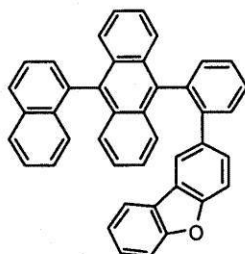
EM40



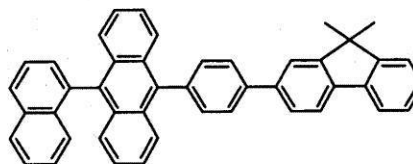
EM41



EM42



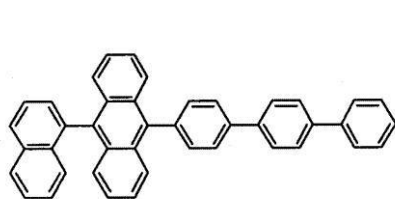
EM43



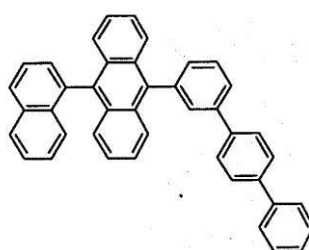
EM44

【 0 0 6 6 】

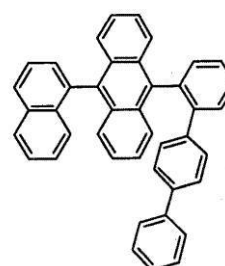
【化 2 2】



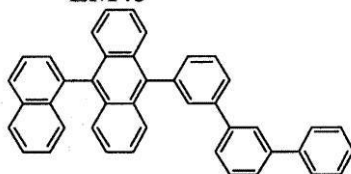
EM45



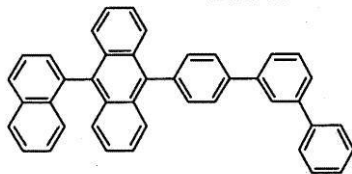
EM46



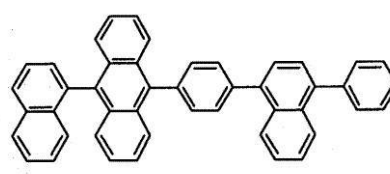
EM47



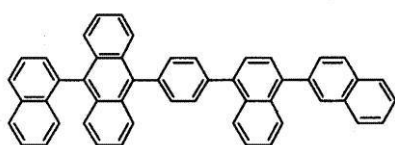
EM48



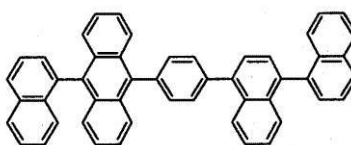
EM49



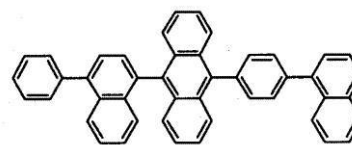
EM50



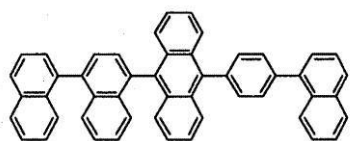
EM51



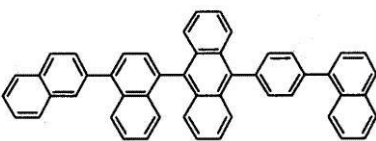
EM52



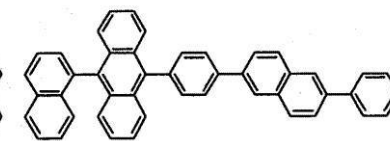
EM53



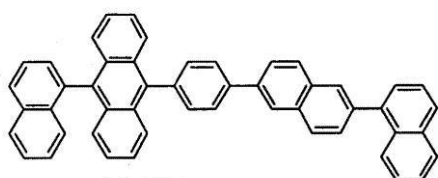
EM54



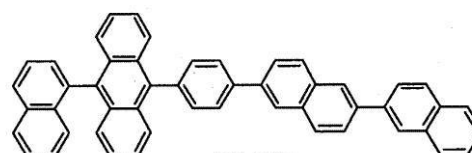
EM55



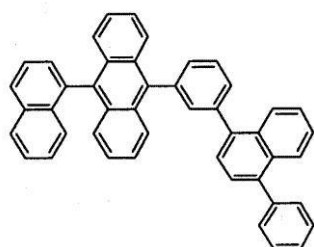
EM56



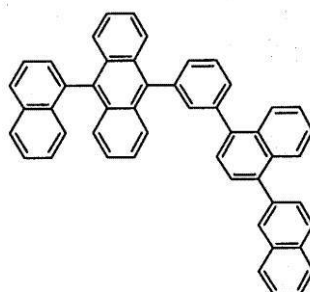
EM57



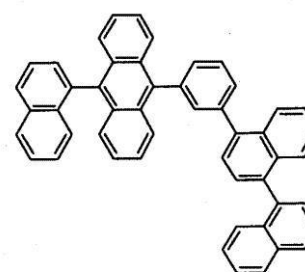
EM58



EM59



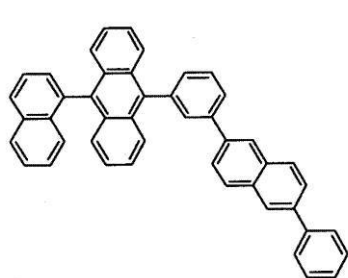
EM60



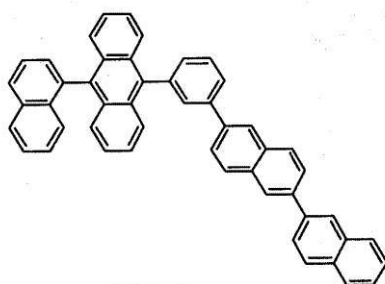
EM61

【 0 0 6 7 】

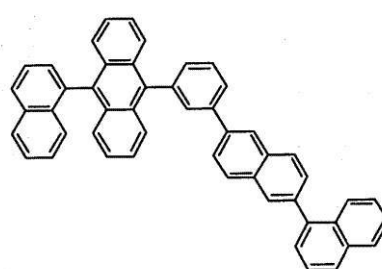
【化 2 3】



EM62

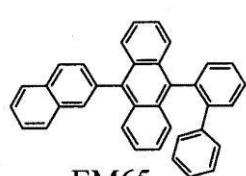


EM63

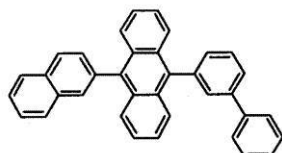


EM64

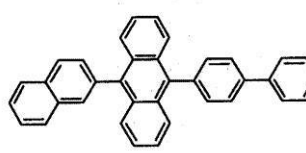
10



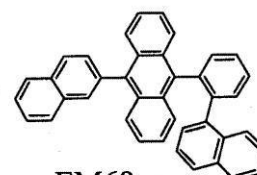
EM65



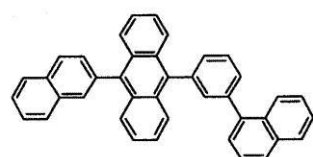
EM66



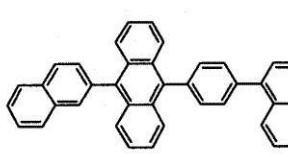
EM67



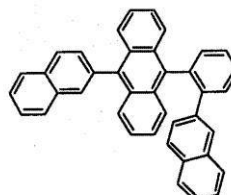
EM68



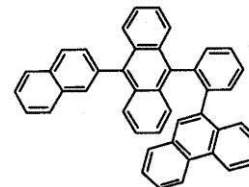
EM69



EM70

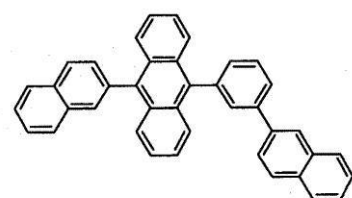


EM71

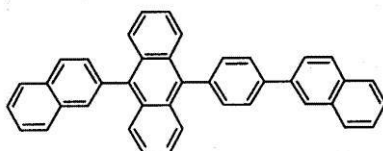


EM72

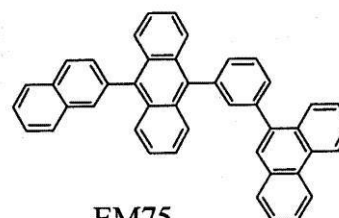
20



EM73

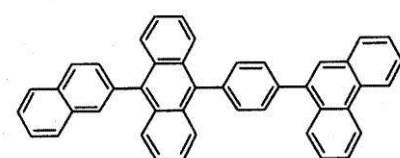


EM74

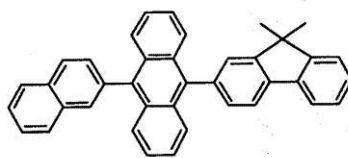


EM75

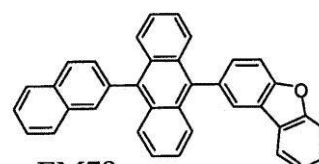
30



EM76



EM77

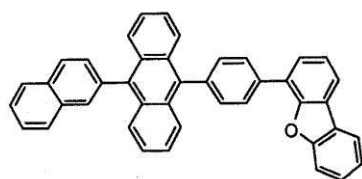


EM78

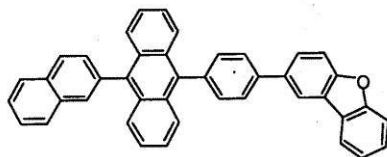
40

【 0 0 6 8 】

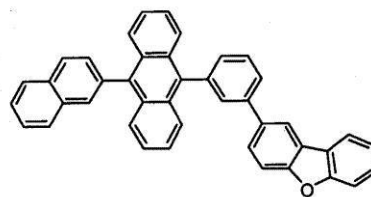
【化 2 4】



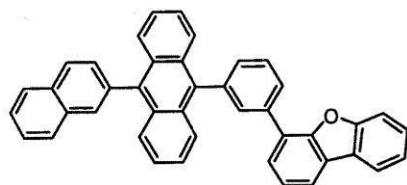
EM79



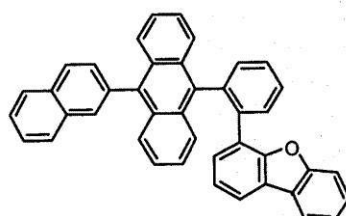
EM80



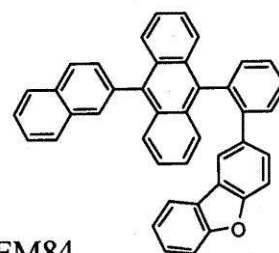
EM81



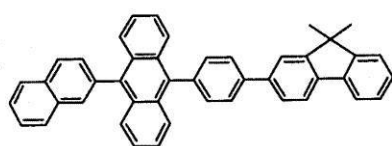
EM82



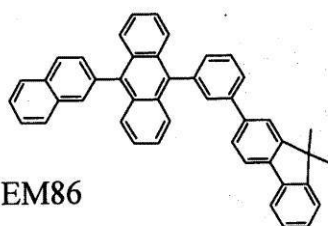
EM83



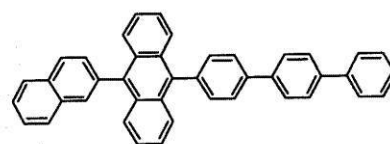
EM84



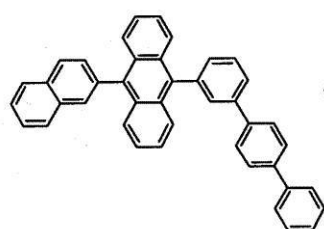
EM85



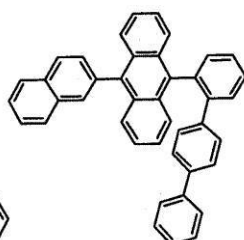
EM86



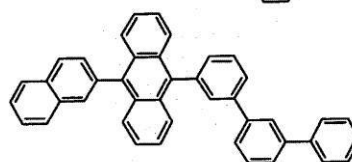
EM87



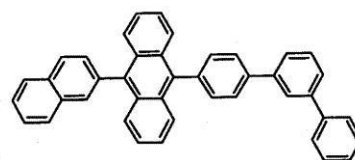
EM88



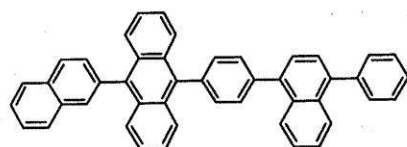
EM89



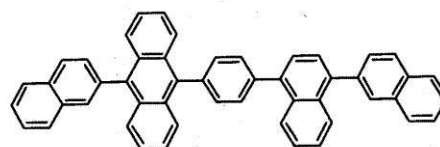
EM90



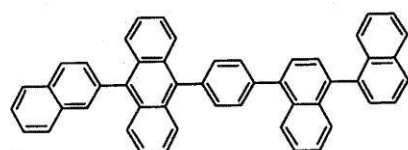
EM91



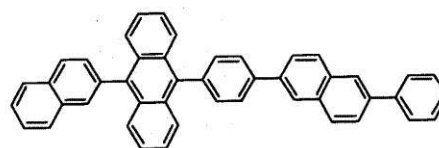
EM92



EM93



EM94



EM95

【 0 0 6 9 】

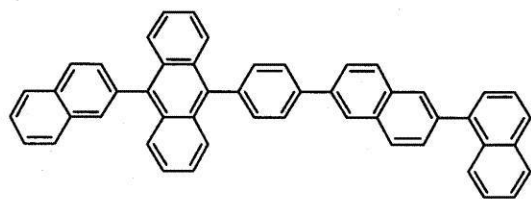
10

20

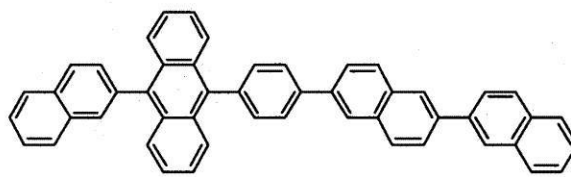
30

40

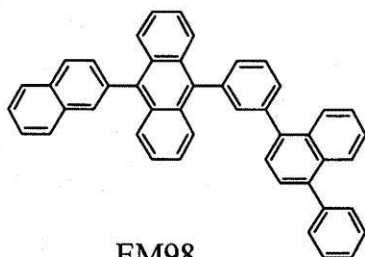
【化 2 5】



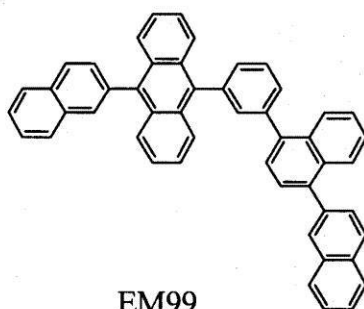
EM96



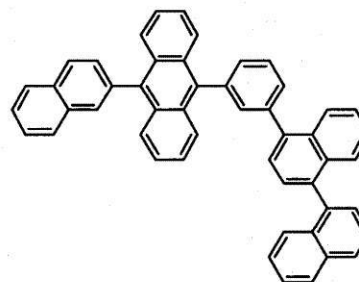
EM97



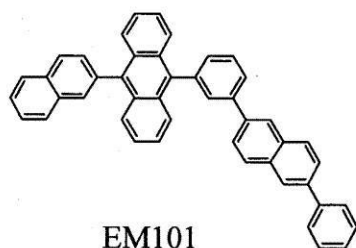
EM98



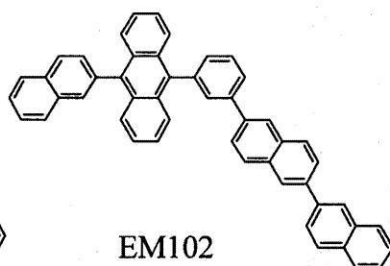
EM99



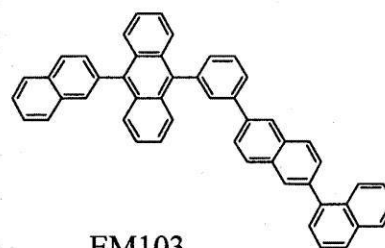
EM100



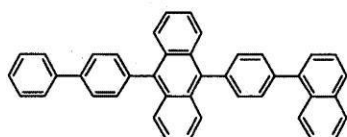
EM101



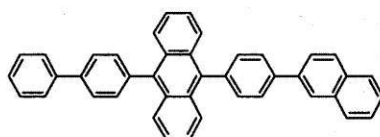
EM102



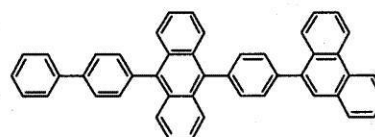
EM103



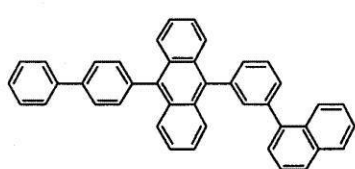
EM104



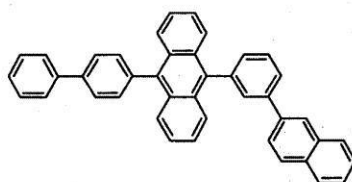
EM105



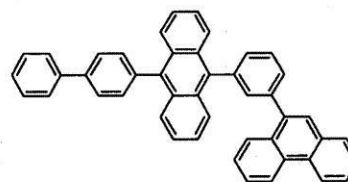
EM106



EM107



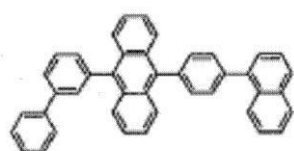
EM108



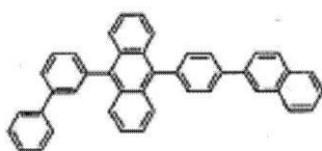
EM109

【 0 0 7 0 】

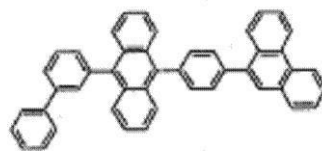
【化 2 6】



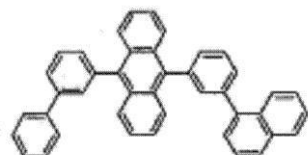
EM110



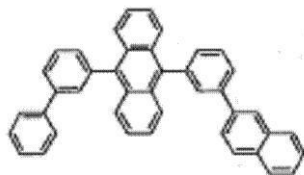
EM111



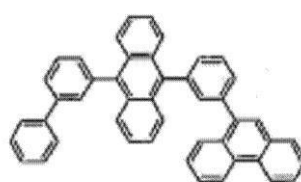
EM112



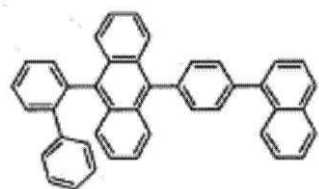
EM113



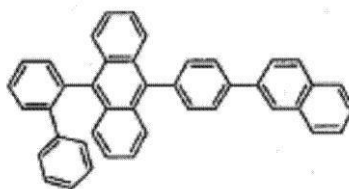
EM114



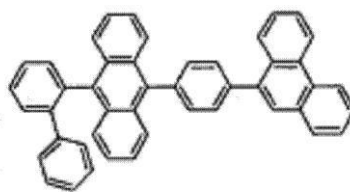
EM115



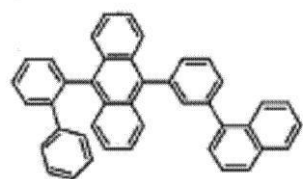
EM116



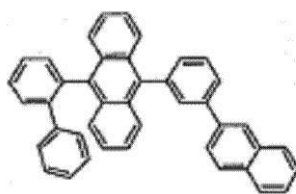
EM117



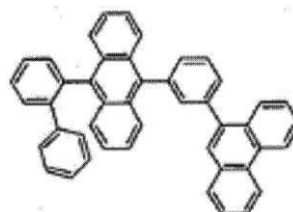
EM118



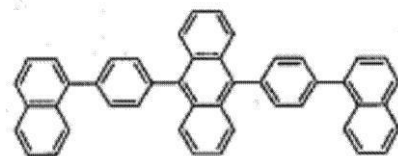
EM119



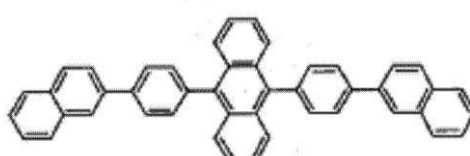
EM120



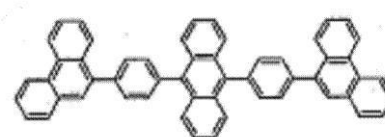
EM121



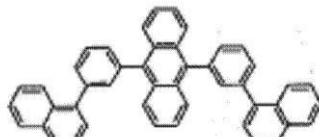
EM122



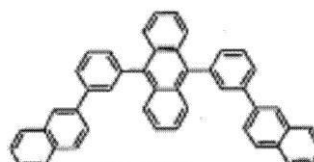
EM123



EM124



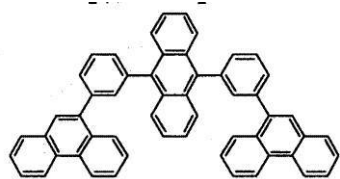
EM125



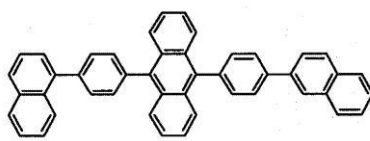
EM126

【 0 0 7 1 】

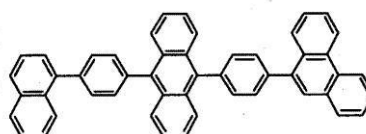
【化 2 7】



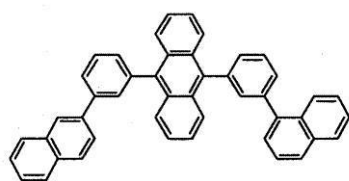
EM127



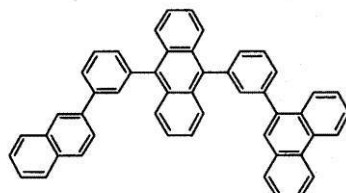
EM128



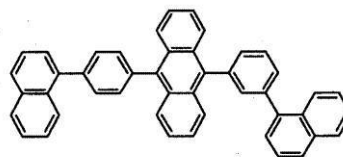
EM129



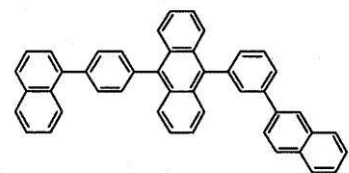
EM130



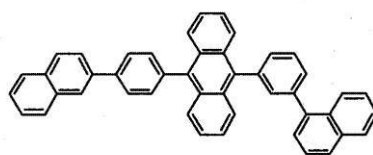
EM131



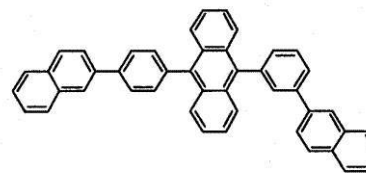
EM132



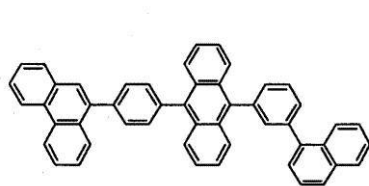
EM133



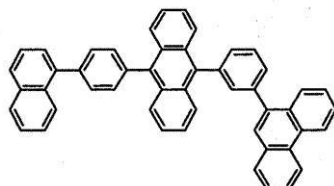
EM134



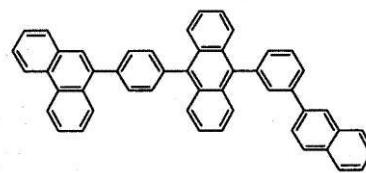
EM135



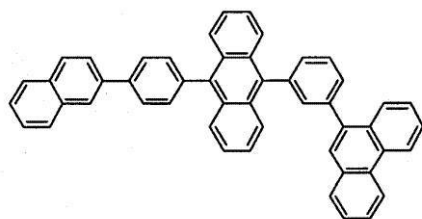
EM136



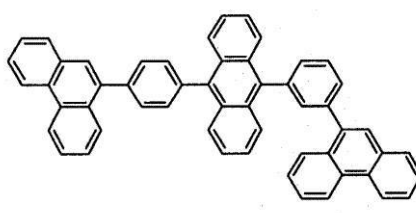
EM137



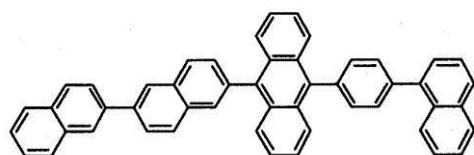
EM138



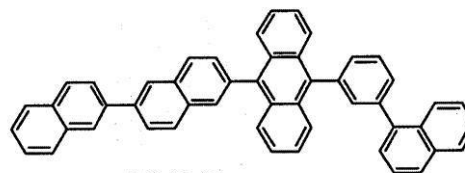
EM139



EM140



EM141



EM142

【 0 0 7 2 】

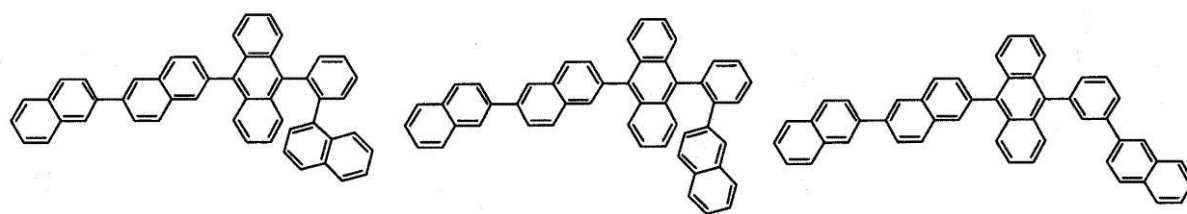
10

20

30

40

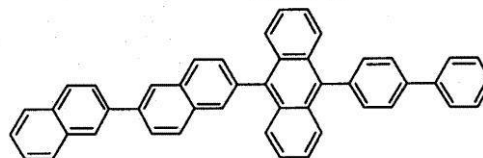
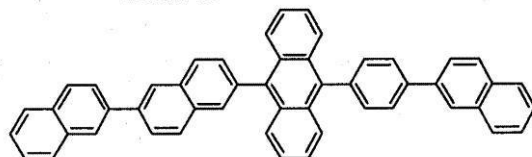
【化 2 8】



EM143

EM144

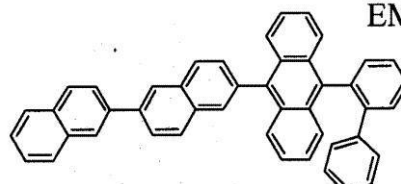
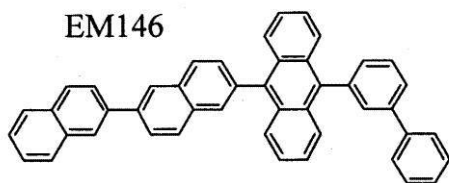
EM145



10

EM146

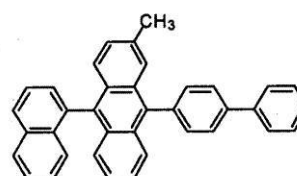
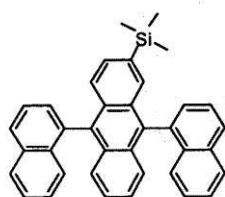
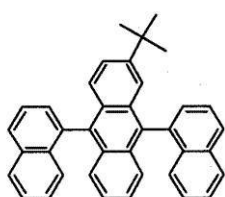
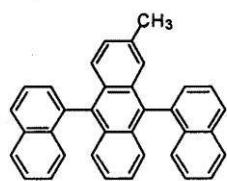
EM147



EM148

EM149

20



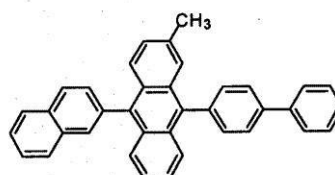
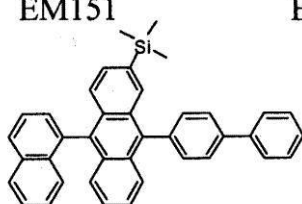
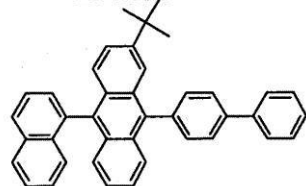
EM150

EM151

EM152

EM153

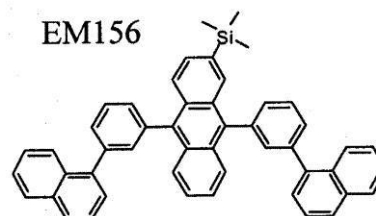
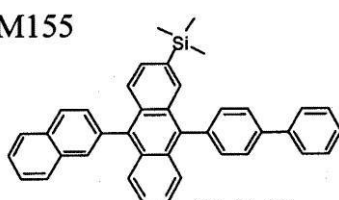
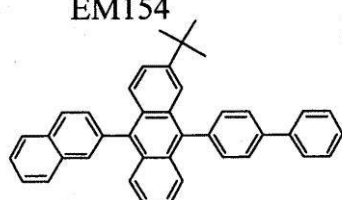
30



EM154

EM155

EM156



EM157

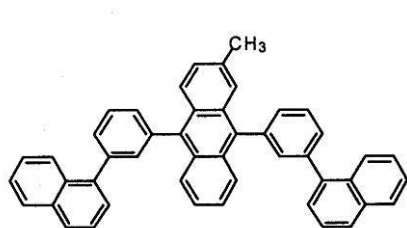
EM158

EM159

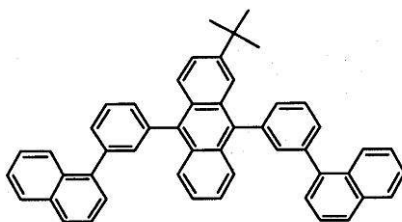
40

【 0 0 7 3 】

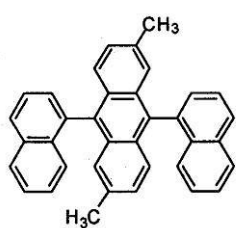
【化 2 9】



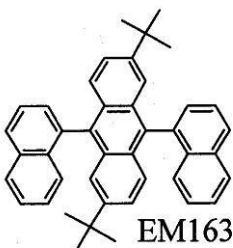
EM160



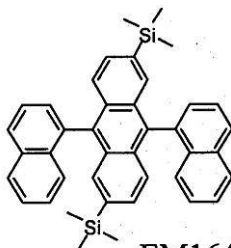
EM161



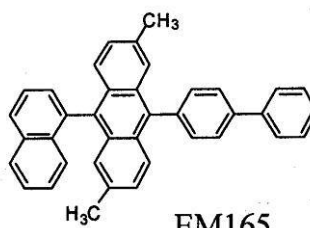
EM162



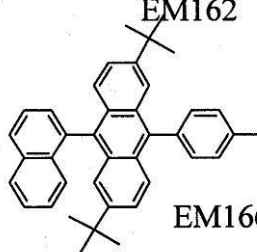
EM163



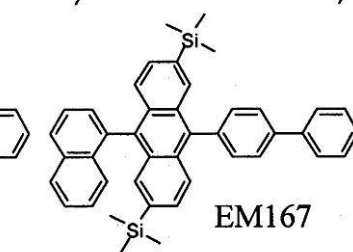
EM164



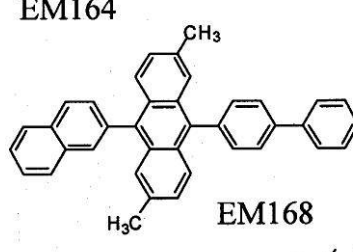
EM165



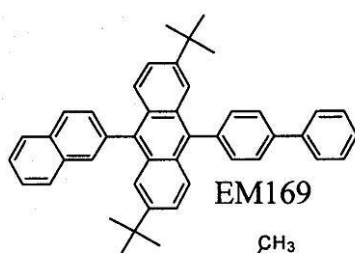
EM166



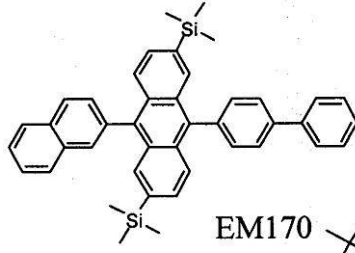
EM167



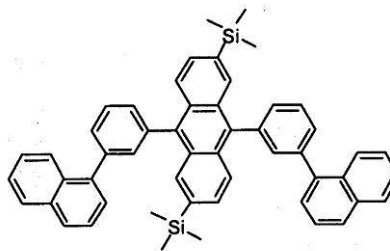
EM168



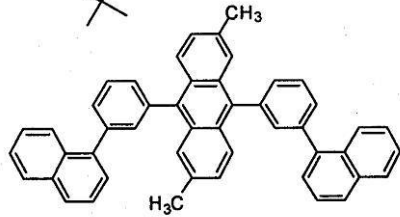
EM169



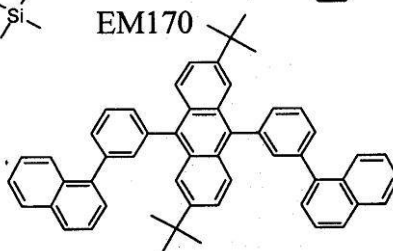
EM170



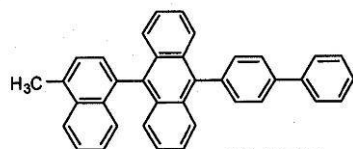
EM171



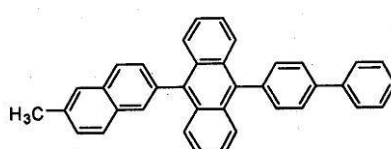
EM172



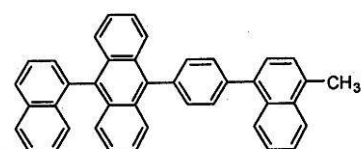
EM173



EM174



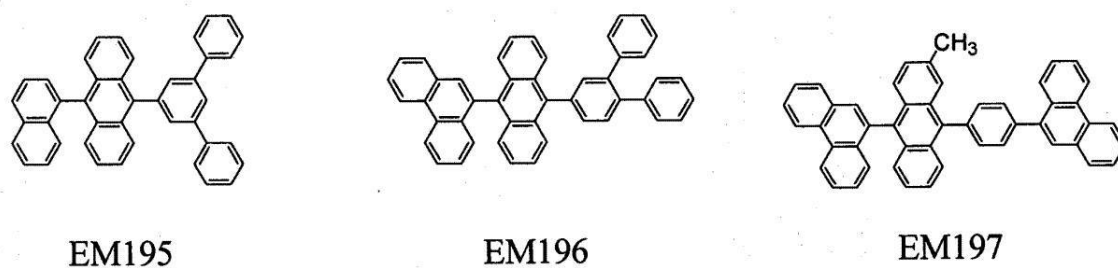
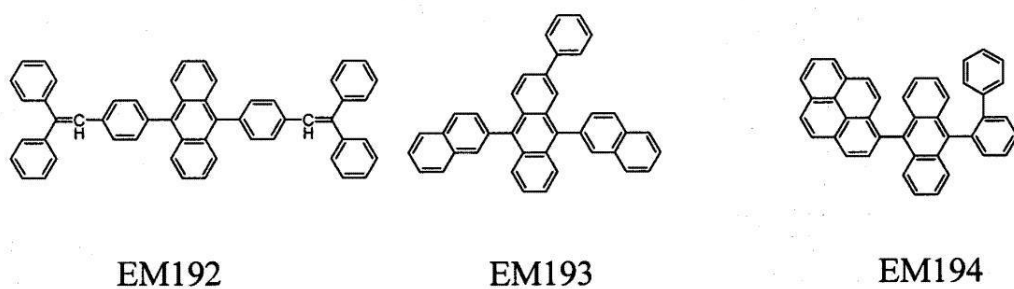
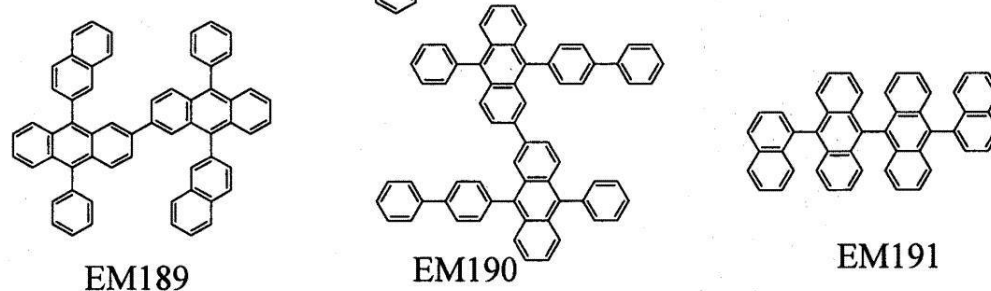
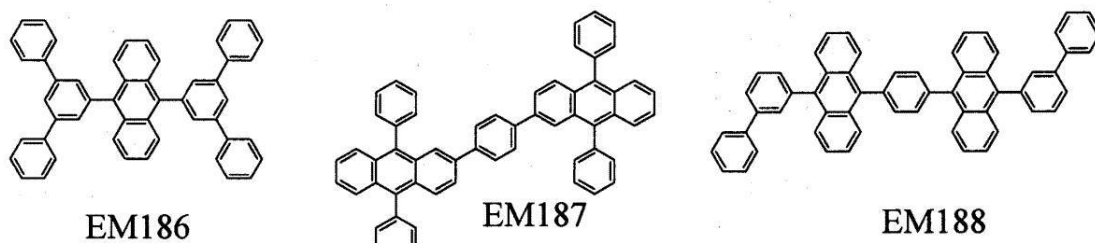
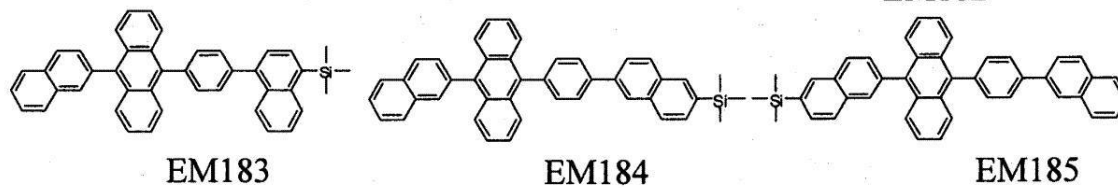
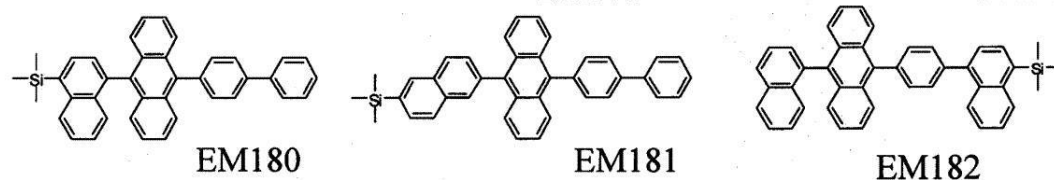
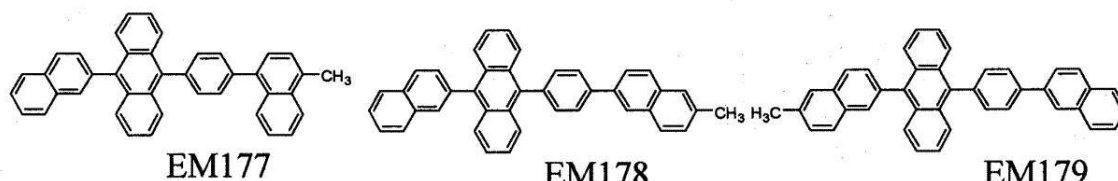
EM175



EM176

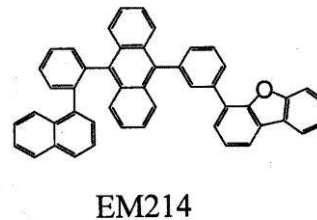
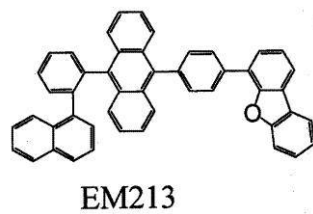
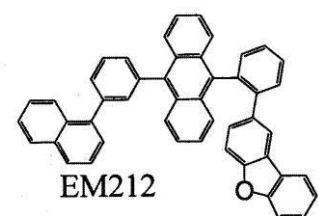
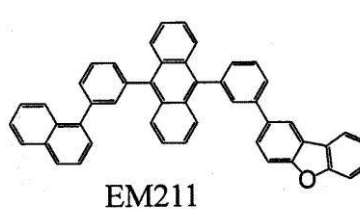
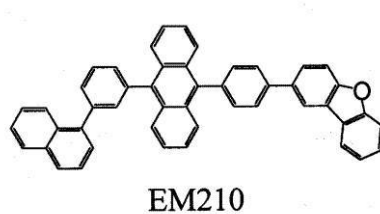
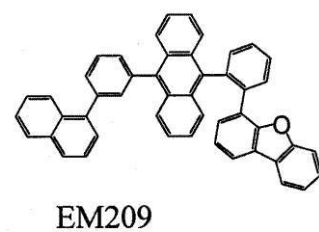
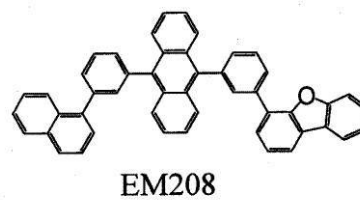
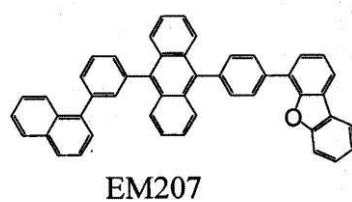
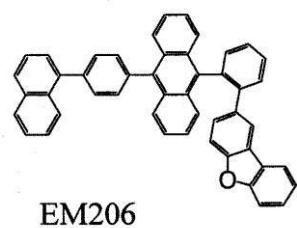
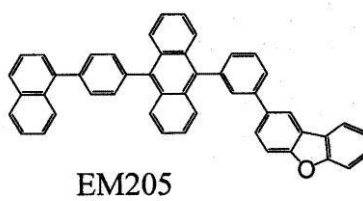
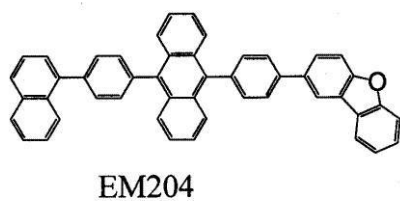
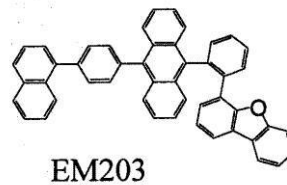
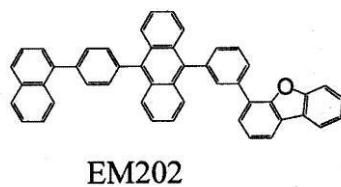
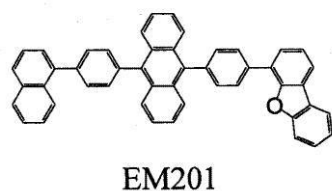
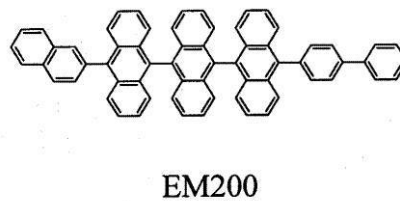
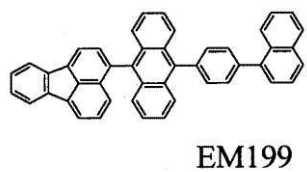
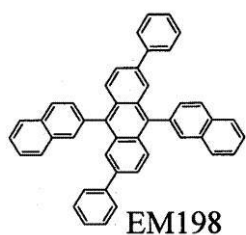
【 0 0 7 4 】

【化 3 0】



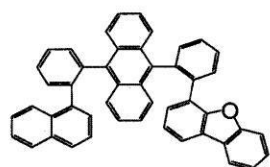
【 0 0 7 5】

【化 3 1】

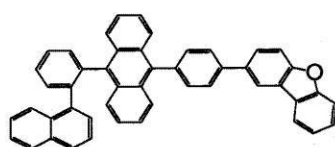


【 0 0 7 6 】

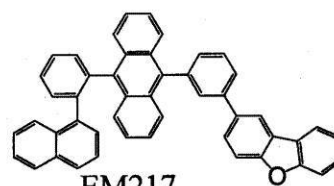
【化 3 2】



EM215



EM216



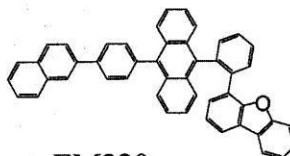
EM217



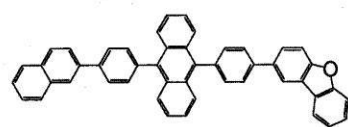
EM218



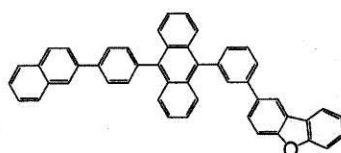
EM219



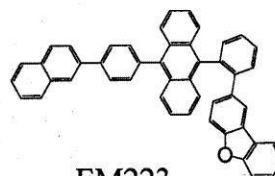
EM220



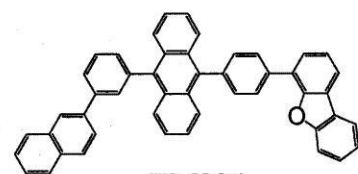
EM221



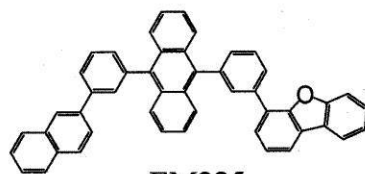
EM222



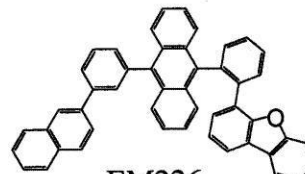
EM223



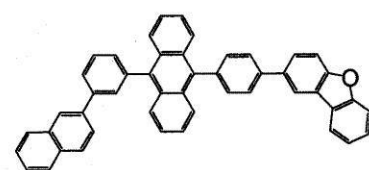
EM224



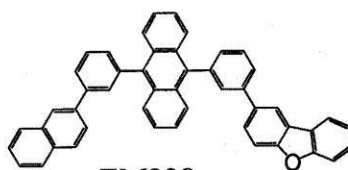
EM225



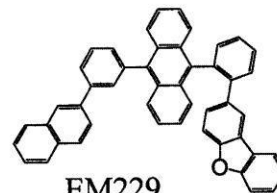
EM226



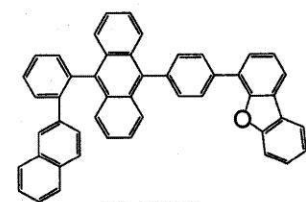
EM227



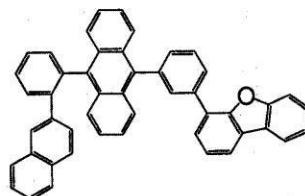
EM228



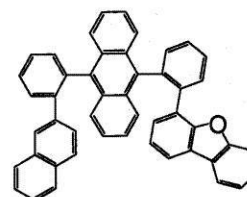
EM229



EM230



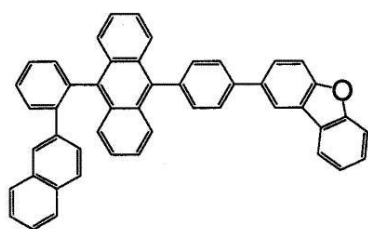
EM231



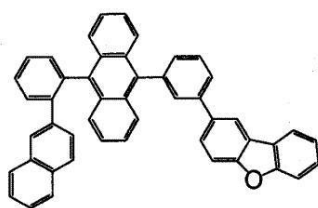
EM232

【 0 0 7 7 】

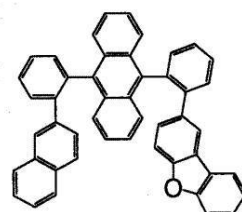
【化 3 3】



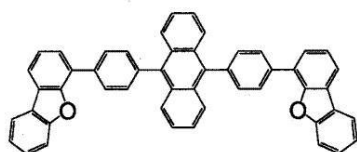
EM233



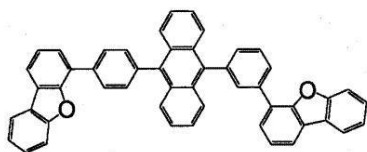
EM234



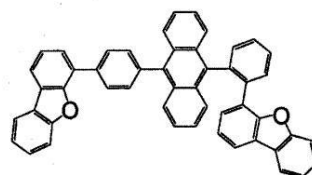
EM235



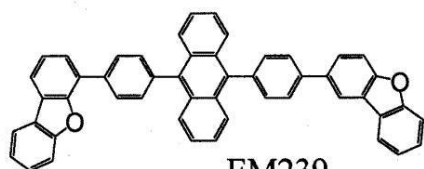
EM236



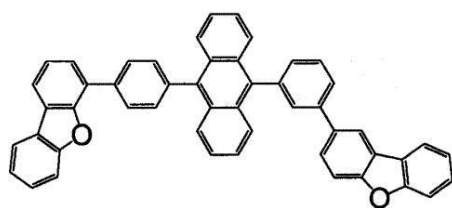
EM237



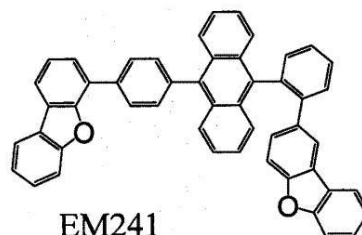
EM238



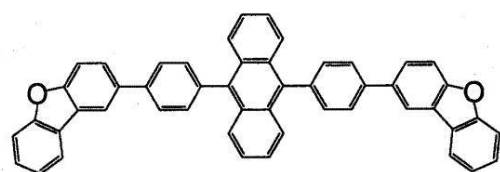
EM239



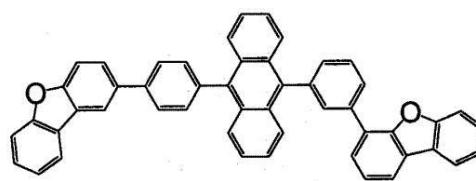
EM240



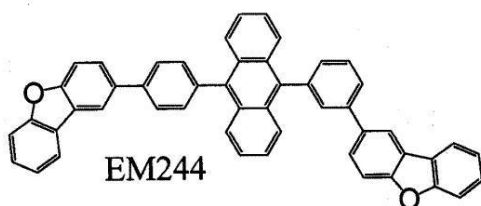
EM241



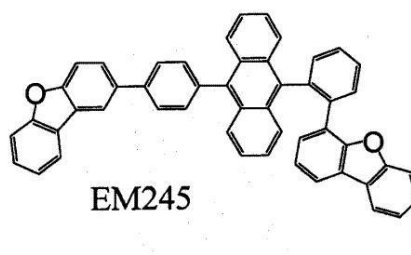
EM242



EM243



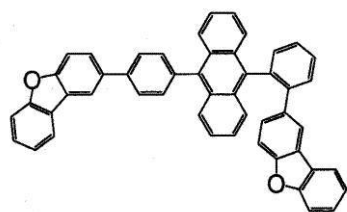
EM244



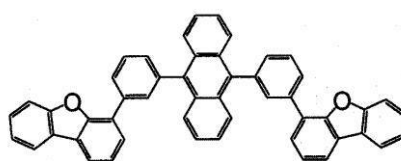
EM245

【 0 0 7 8 】

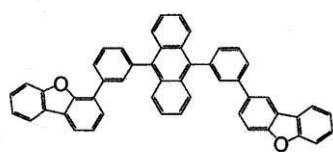
【化 3 4】



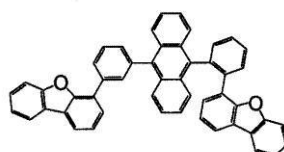
EM246



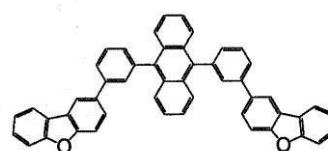
EM247



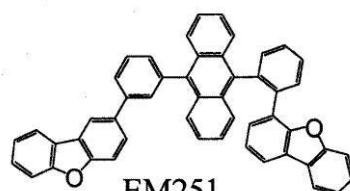
EM248



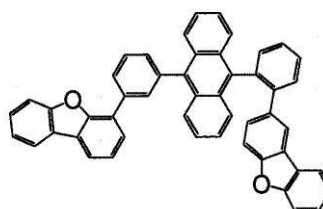
EM249



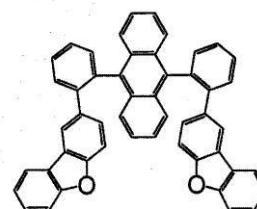
EM250



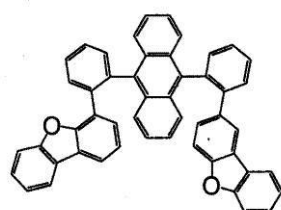
EM251



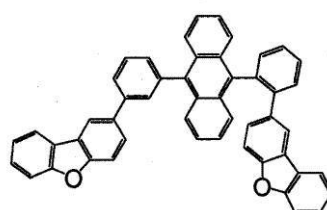
EM252



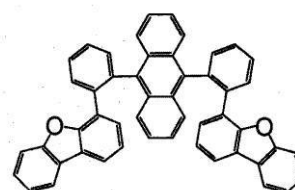
EM253



EM254



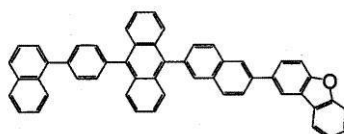
EM255



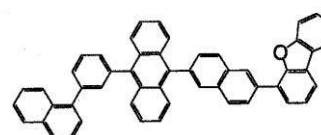
EM256



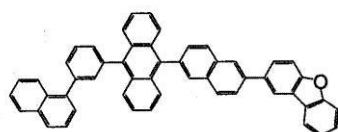
EM257



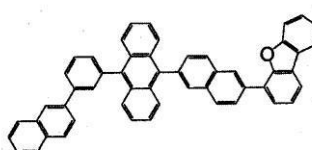
EM258



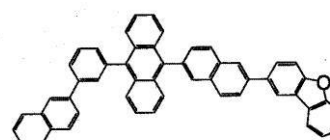
EM259



EM260



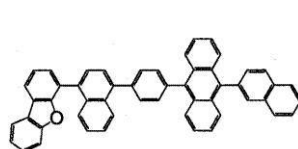
EM261



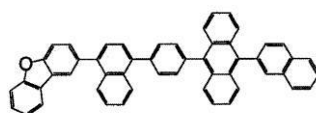
EM262

【 0 0 7 9 】

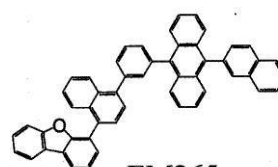
【化 3 5】



EM263



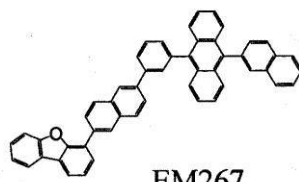
EM264



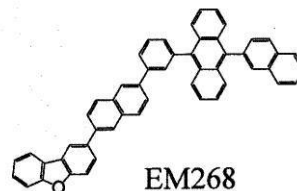
EM265



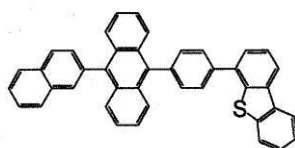
EM266



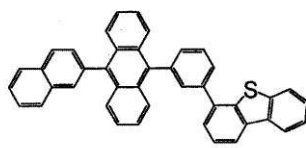
EM267



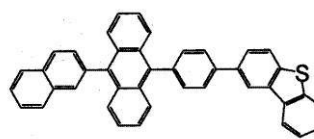
EM268



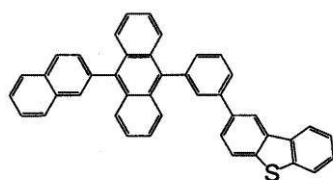
EM269



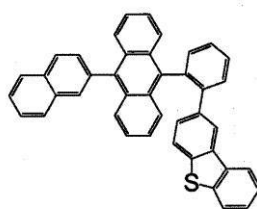
EM270



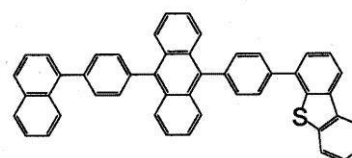
EM271



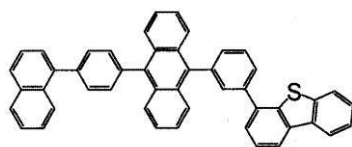
EM272



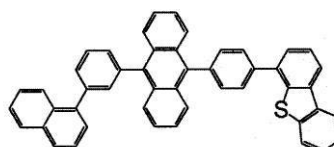
EM273



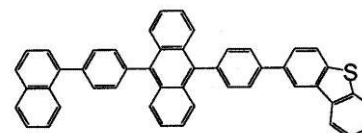
EM274



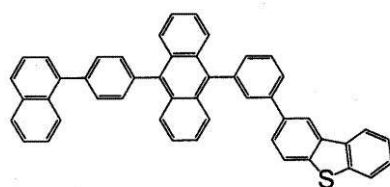
EM275



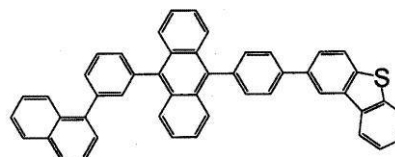
EM276



EM277



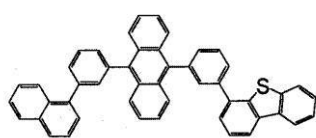
EM278



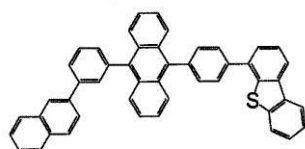
EM279

【 0 0 8 0 】

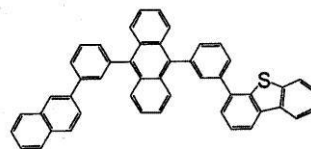
【化 3 6】



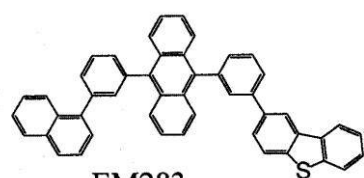
EM280



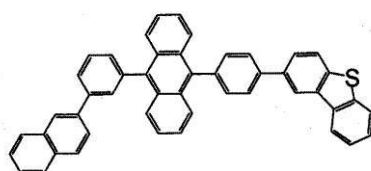
EM281



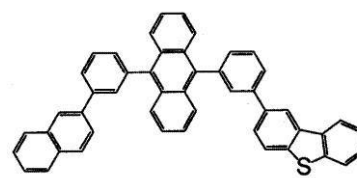
EM282



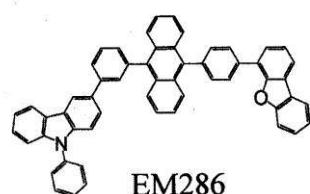
EM283



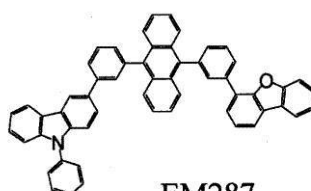
EM284



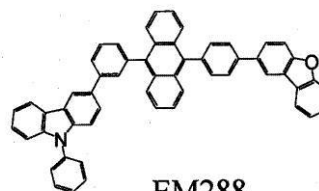
EM285



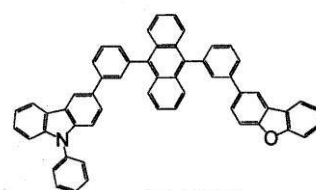
EM286



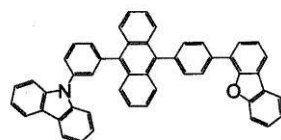
EM287



EM288



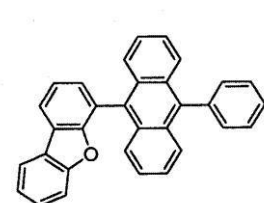
EM289



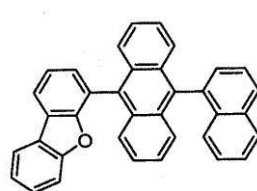
EM290



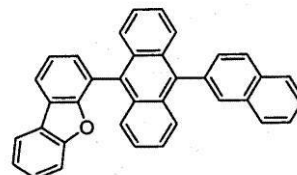
EM291



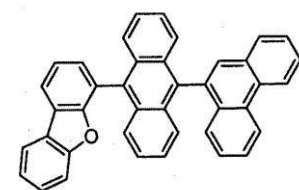
EM292



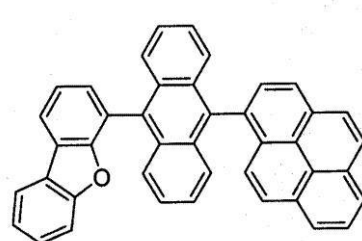
EM293



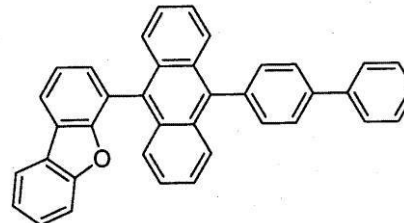
EM294



EM295



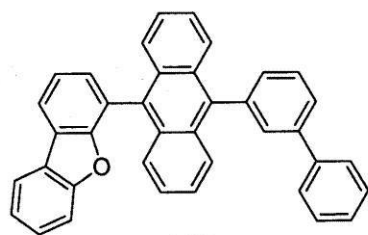
EM296



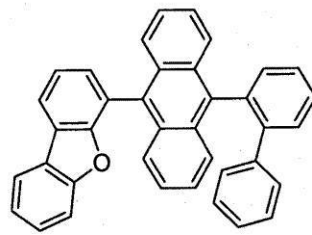
EM297

【 0 0 8 1 】

【化 3 7】

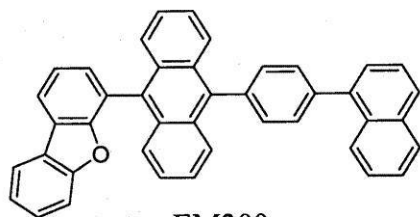


EM298

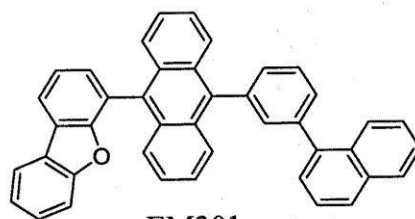


EM299

10

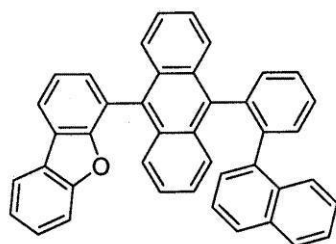


EM300

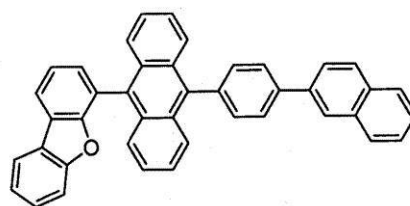


EM301

20

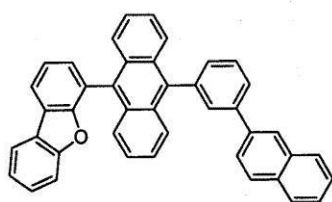


EM302



EM303

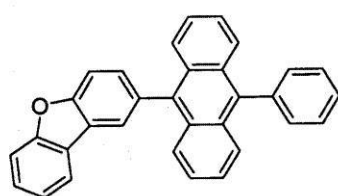
30



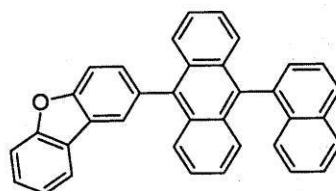
EM304



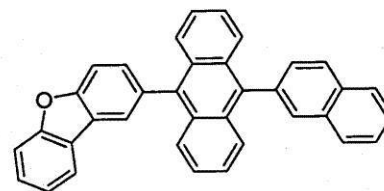
EM305



EM306



EM307

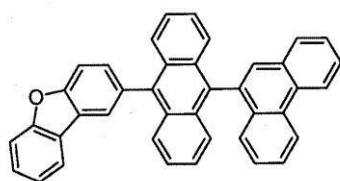


EM308

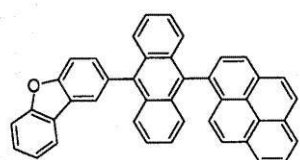
40

【 0 0 8 2 】

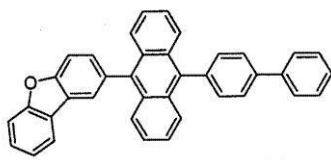
【化 3 8】



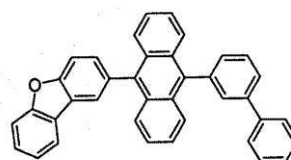
EM309



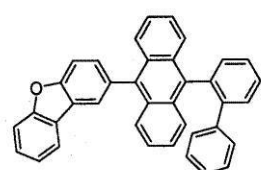
EM310



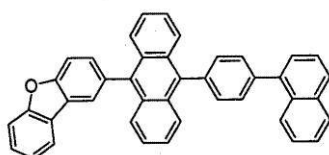
EM311



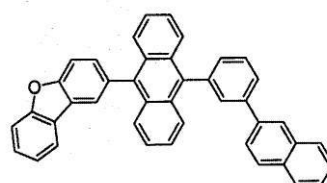
EM312



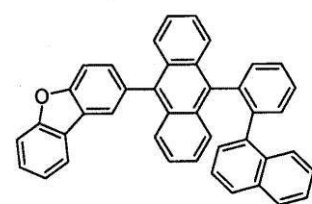
EM313



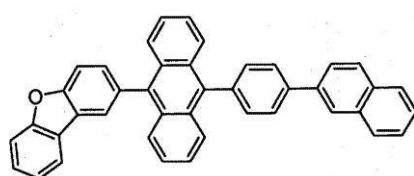
EM314



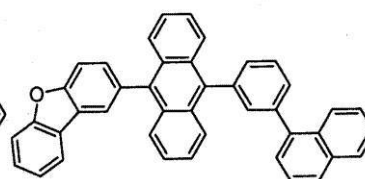
EM315



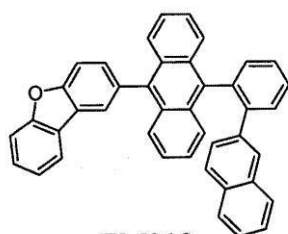
EM316



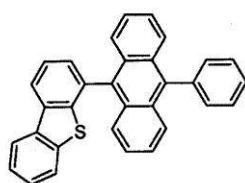
EM317



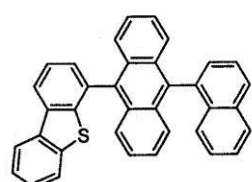
EM318



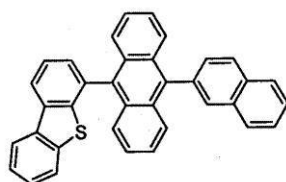
EM319



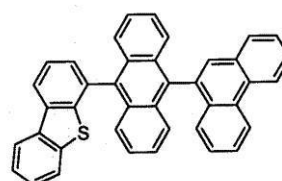
EM320



EM321



EM322



EM323

【 0 0 8 3 】

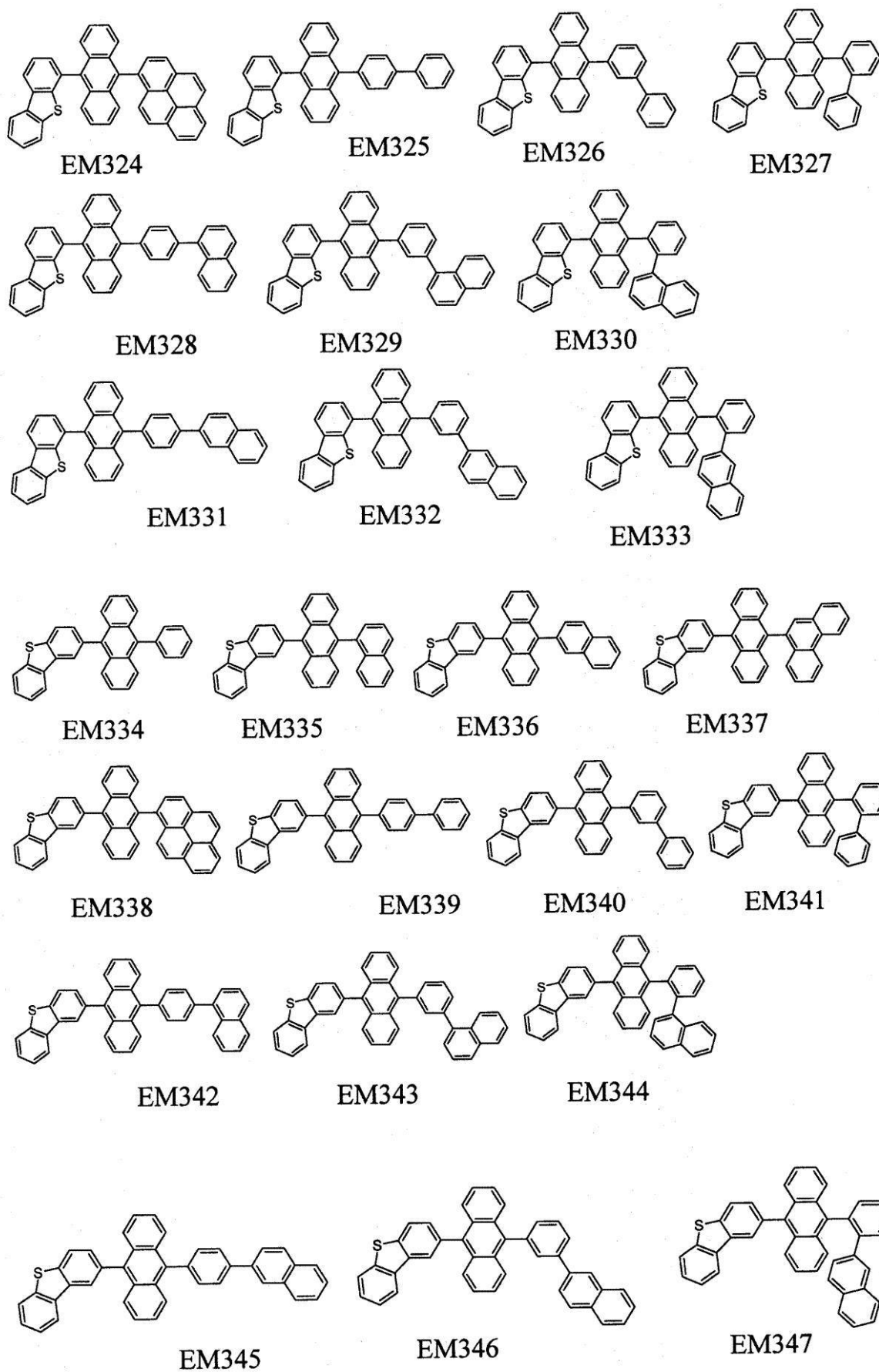
10

20

30

40

【化 3 9】



10

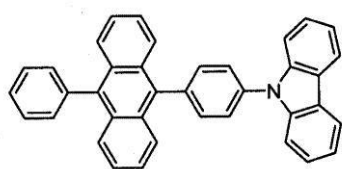
20

30

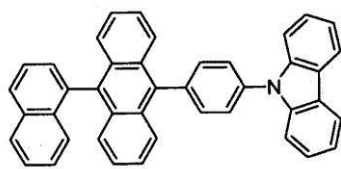
40

【 0 0 8 4 】

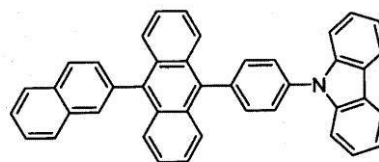
【化 4 0】



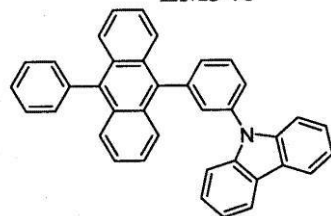
EM348



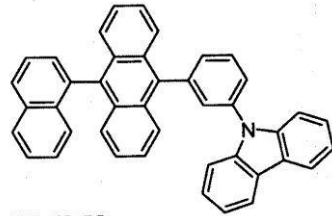
EM349



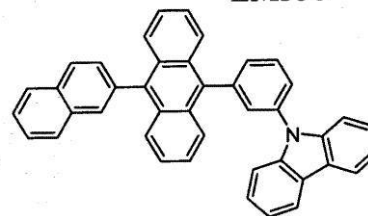
EM350



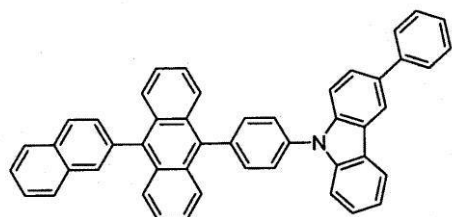
EM351



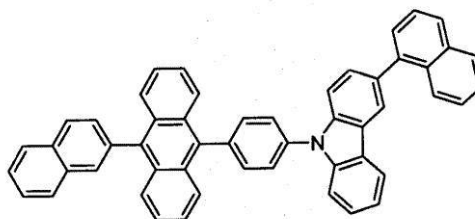
EM352



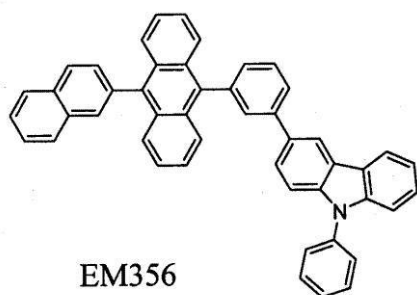
EM353



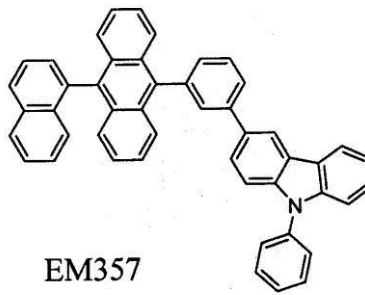
EM354



EM355



EM356



EM357

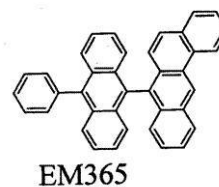
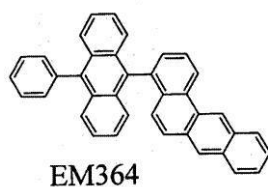
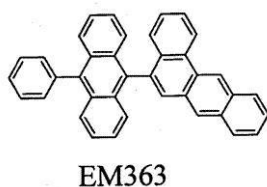
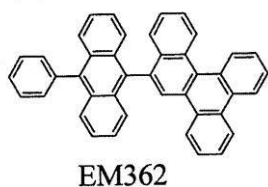
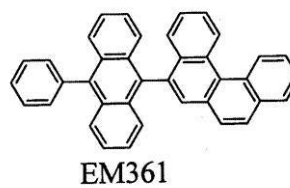
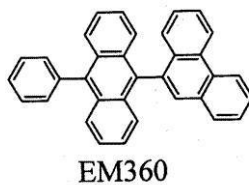
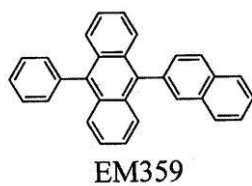
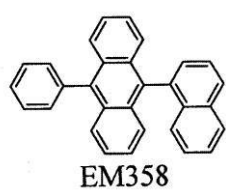
【 0 0 8 5 】

10

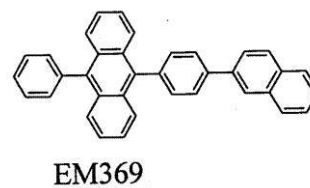
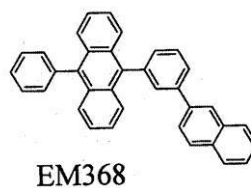
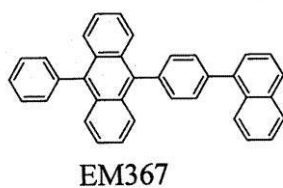
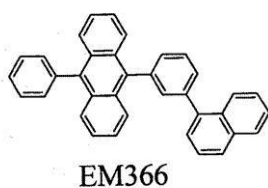
20

30

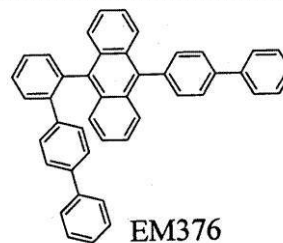
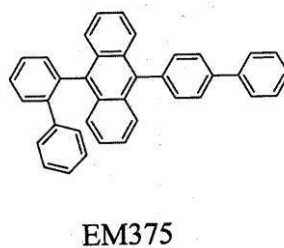
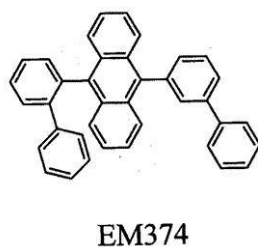
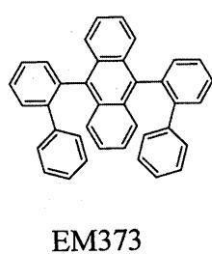
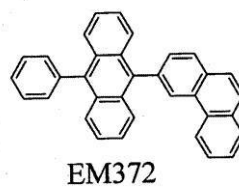
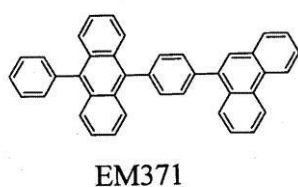
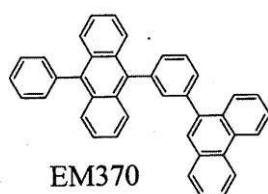
【化 4 1】



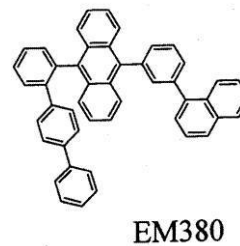
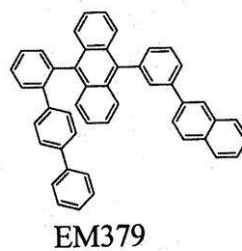
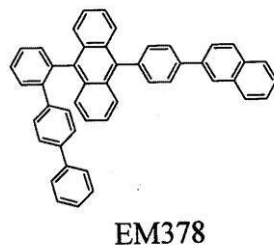
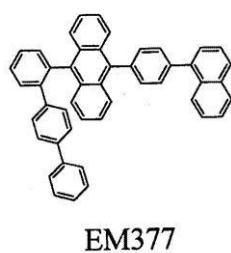
10



20



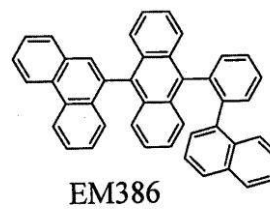
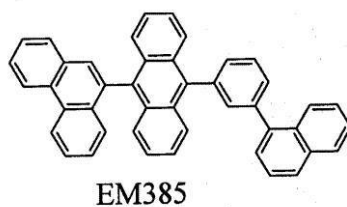
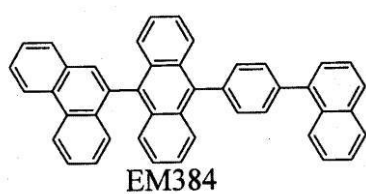
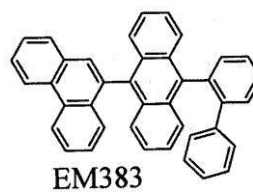
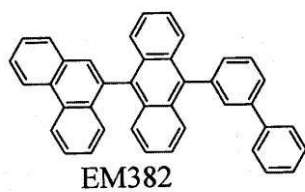
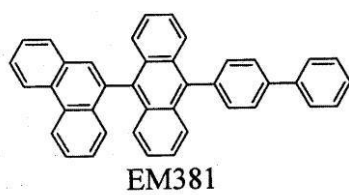
30



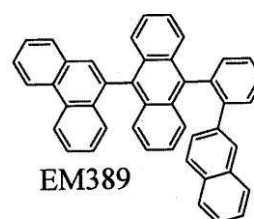
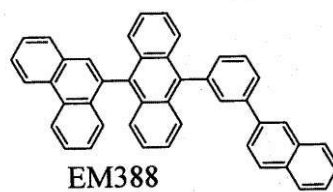
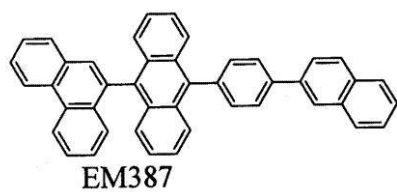
40

【 0 0 8 6 】

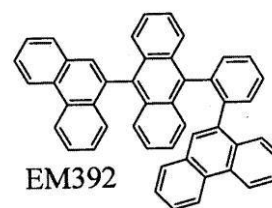
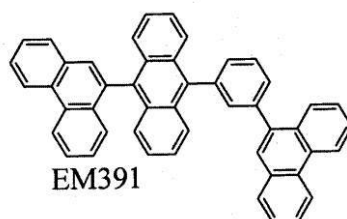
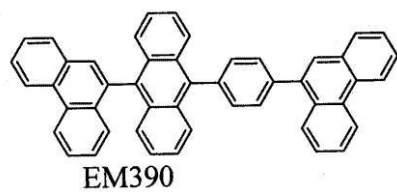
【化 4 2】



10



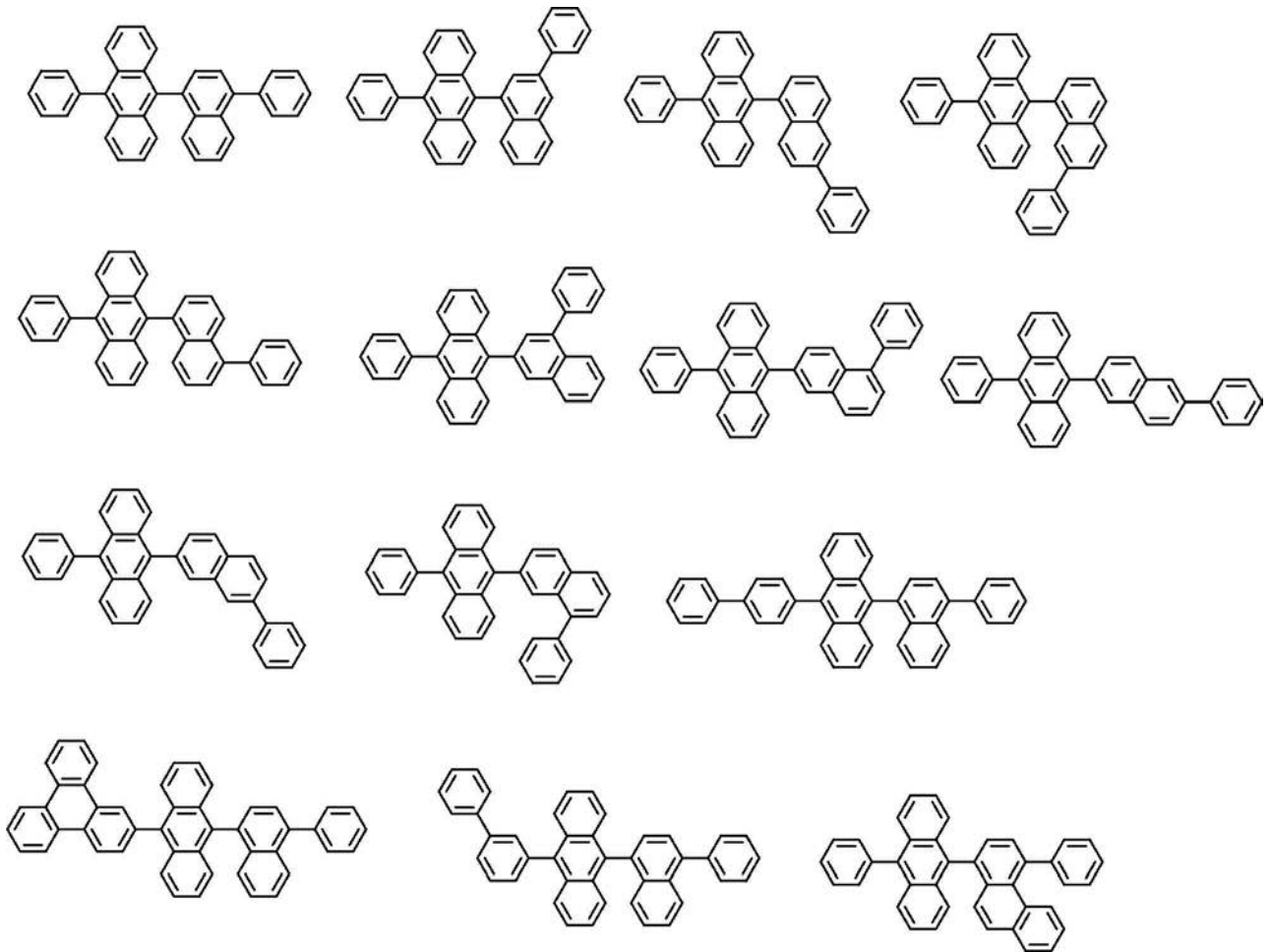
20



30

【 0 0 8 7 】

【化 4 3】



10

20

【0088】

(電子輸送層)

電子輸送層は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層には、1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体、2) イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、3) 高分子化合物を使用することができる。

30

【0089】

(電子注入層)

電子注入層は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層には、リチウム (Li)、フッ化リチウム (LiF)、フッ化セシウム (CsF)、フッ化カルシウム (CaF₂)、リチウム酸化物 (LiO_x) 等のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を用いることができる。

なお、電子注入層と電子輸送層とを併せて電子輸送領域と称することがある。

40

【0090】

(正孔注入層)

正孔注入層は、正孔注入性の高い物質を含む層である。正孔注入性の高い物質としては、モリブデン酸化物、チタン酸化物、バナジウム酸化物、レニウム酸化物、ルテニウム酸化物、クロム酸化物、ジルコニウム酸化物、ハフニウム酸化物、タンタル酸化物、銀酸化物、タングステン酸化物、マンガン酸化物、芳香族アミン化合物、又は高分子化合物 (オリゴマー、 dendrimer、ポリマー等) 等も使用できる。

【0091】

(正孔輸送層)

正孔輸送層は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層には、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体等を使用する事ができる。ポリ (N -

50

ビニルカルバゾール) (略称: PVK) やポリ(4-ビニルトリフェニルアミン) (略称: PVTPA) 等の高分子化合物を用いることもできる。但し、電子よりも正孔の輸送性の高い物質であれば、これら以外のものを用いてもよい。なお、正孔輸送性の高い物質を含む層は、単層のものだけでなく、上記物質からなる層が二層以上積層したものとしてもよい。

なお、正孔注入層と正孔輸送層とを併せて正孔輸送領域と称することがある。本発明においては、一層以上の有機薄膜層が、発光層と陽極との間に正孔輸送領域を有しており、該正孔輸送領域が前記化合物(I)を含有するものも好ましい。

【0092】

本発明の一態様において、有機EL素子の各層は従来公知の真空蒸着法、スピンコーティング法等により形成することができる。例えば、真空蒸着法、分子線蒸着法(MBE法)、あるいは、層を形成する化合物の溶液を用いた、ディッピング法、スピンコーティング法、キャスト法、バーコート法、ロールコート法等の塗布法による公知の方法で形成することができる。

【0093】

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

【0094】

前記化合物(I)を含有する層(発光層又は正孔輸送領域など)は、真空蒸着法により成膜することが好ましい。その際、ホスト材料と一緒に共蒸着することが好ましい。

また、前記化合物(I)を含有する層以外の各層の形成方法は特に限定されない。従来公知の真空蒸着法、スピンコーティング法等による形成方法を用いることができる。本発明の一実施態様である有機EL素子に用いる、本発明の他の実施態様である化合物を含有する有機薄膜層は、真空蒸着法、分子線蒸着法(MBE法)、あるいは当該化合物を溶媒に解かした溶液のディッピング法、スピンコーティング法、キャスト法、バーコート法、ロールコート法等の塗布法による公知の方法で形成することができる。

【0095】

[電子機器]

本発明の化合物を用いて得られる有機EL素子は、有機ELパネルモジュール等の表示部品、テレビ、携帯電話、パーソナルコンピュータ等の表示装置、及び、照明、車両用灯具の発光装置等の電子機器に使用できる。つまり、本発明は、前記有機EL素子を搭載した電子機器をも提供する。

【実施例】

【0096】

次に、実施例および比較例を挙げて本発明をさらに詳しく説明するが、本発明はこれらの実施例の記載内容になんら制限されるものではない。

なお、以下の合成例は、J. Org. Chem., 2014, 79, p. 3119-3128を参照したものである。

【0097】

合成例 1

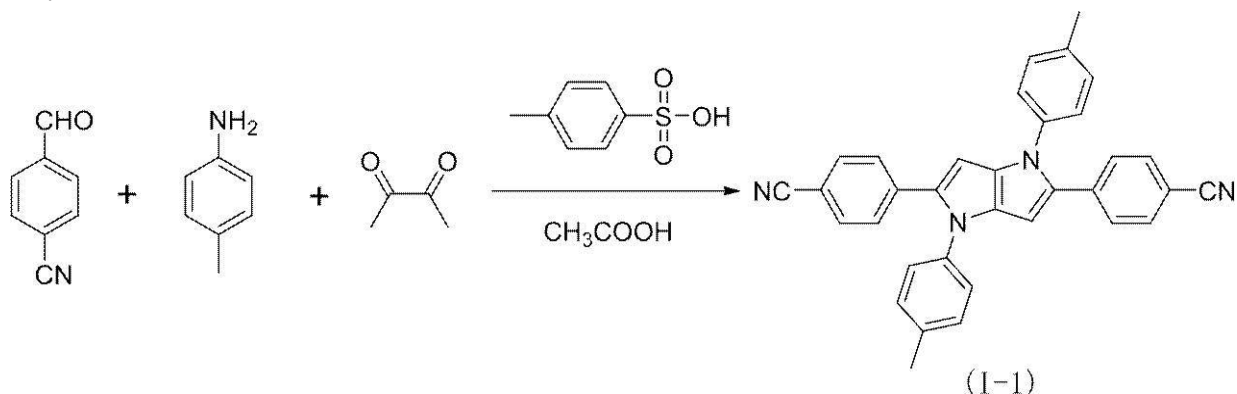
10

20

30

40

【化 4 4】



10

【0098】

p - トルイジン (6 . 0 8 g 、 5 6 . 7 m m o l) 、 p - シアノベンズアルデヒド (7 . 4 4 g 、 5 6 . 7 m m o l) 、 2 , 3 - ブタンジオン (2 . 4 4 g 、 2 8 . 4 m m o l) 、 酢酸 (6 0 m L) 、 p - トルエンスルホン酸一水和物 (1 . 0 8 g 、 5 . 6 7 m m o l) を混合し、100 で3時間撹拌した。室温まで冷却後、固体をろ別、酢酸で洗浄した。得られた混合物を、シリカゲルのカラムクロマトグラフィーと酢酸からの再結晶で精製し、化合物 (1) (1 . 6 5 g 、 3 . 3 8 m m o l 、 収率 1 2 %) を得た。該化合物は、質量分析の結果、 $m/e = 488.6$ であり、上記化合物 (I - 1) (E x a c t m a s s : 488.20) であると同定した。

20

【0099】

上記の合成反応や J . O r g . C h e m . , 2 0 1 4 、 7 9 、 p . 3 1 1 9 - 3 1 2 8 を参照し、必要に応じて公知の反応や原料を利用することによって、特許請求の範囲に記載されたあらゆる化合物 (I) を合成することが可能である。

【0100】

実施例 1

2 5 m m × 2 5 m m × 厚さ 1 . 1 m m の I T O 透明電極 (陽極) 付きガラス基板 (ジオマテック株式会社製) をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を 5 分間行った後、U V オゾン洗浄を 5 分間行った。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に前記透明電極を覆うようにして下記化合物 (H I - 1) を蒸着して膜厚 6 0 n m の H I - 1 膜を成膜し、正孔注入層を形成した。次に、この正孔注入層上に、正孔輸送材料として上記化合物 (H T - 1) を蒸着して膜厚 2 0 n m の H T - 1 膜を成膜し、正孔輸送層を形成した。こうして、正孔輸送領域を形成した。

30

さらに、この H T - 1 膜上に膜厚 4 0 n m で、ホスト材料として上記化合物 (B H - 1) と、ドーパント材料として前記化合物 (I - 1) とを 1 9 : 1 の質量比で共蒸着により成膜し、発光層とした。

次に、下記化合物 (E T - 1) を膜厚 2 0 n m で蒸着し、電子輸送層とした。その上に、弗化リチウムを膜厚 1 n m で蒸着し、次いでアルミニウムを膜厚 8 0 n m で蒸着した。このアルミニウム / 弗化リチウムは陰極として働く。このようにして蛍光発光性の有機 E L 素子を作製した。

40

[有機 E L 素子の評価]

作製した有機 E L 素子について、下記方法に従って測定を行い、性能を評価した。結果を表 1 に示す。

(1) 駆動電圧

電流密度が $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ となるように陽極 (I T O 透明電極) と金属陰極 (金属 A l) との間に通電したときの電圧 (単位 : V) を計測した。

(2) 外部量子効率 (E Q E)

電流密度が $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ となるように素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペ

50

クトルを分光放射輝度計「CS-1000」（コニカミノルタ株式会社製）で計測した。得られた上記分光放射輝度スペクトルから、ランバシアン放射を行なったと仮定し、外部量子効率（単位：％）を算出した。

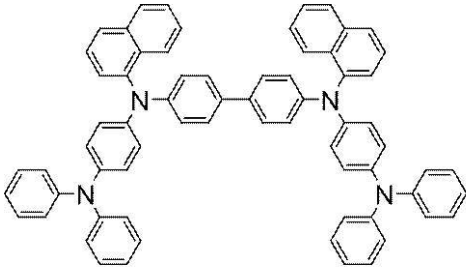
（３）色純度

上記（２）で得られた分光放射輝度スペクトルより、発光ピーク波長〔 λ_p （単位：nm）〕を求めた。

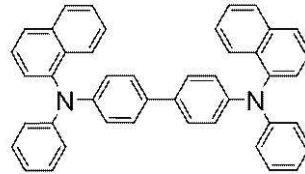
【０１０１】

以下に、有機ＥＬ素子の製造に用いた化合物を示す。

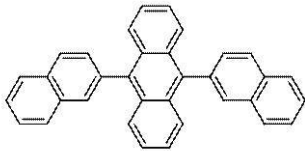
【化４５】



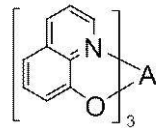
(HI-1)



(HT-1)



(BH-1)



(ET-1)

10

20

【０１０２】

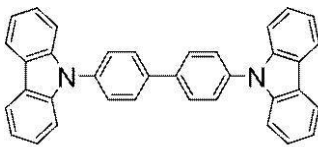
比較例１～２

実施例１において、化合物（Ｉ－１）の代わりに下記構造の化合物（Ａ）、（Ｂ）のいずれかを用いた以外は同様にして有機ＥＬ素子を作製し、評価した。結果を表１に示す。

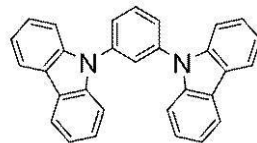
30

【０１０３】

【化４６】



(A)



(B)

【０１０４】

実施例２

実施例１における発光層の成膜において、ホスト材料を用いず、化合物（Ｉ－１）のみを用いたこと以外は同様にして有機ＥＬ素子を作製し、評価した。結果を表１に示す。

40

【０１０５】

【表 1】

表 1

	ドーパント 材料	ホスト 材料	駆動電圧 (V)	EQE (%)	λ_p (nm)
実施例 1	I-1	BH-1	6.80	3.26	463
比較例 1	(A)	BH-1	7.14	1.54	454
比較例 2	(B)	BH-1	7.22	1.57	453
実施例 2	I-1	—	4.94	2.25	476

10

【0106】

表 1 より、蛍光発光性の有機 EL 素子において、ドーパント材料として化合物 (I-1) と好適な組合せであるホスト材料 BH-1 を用いると、有機 EL 素子の高性能化を実現できたことが分かる。具体的には、比較例 1 ~ 2 と実施例 1 との比較では、実施例 1 の方が低電圧駆動が可能であり、かつ外部量子効率が高くなっている。実施例 1 で用いた化合物 (I-1) は、イオン化ポテンシャル (5.8 eV) が、ホスト材料 (BH-1) のイオン化ポテンシャル (6.0 eV) よりも小さく、正孔注入性が向上していることから低電圧化し、また、化合物 (I-1) の固体 (膜) 状態での量子収率が高い傾向にあることから高効率になったものと推測される。

20

さらに、実施例 1 と実施例 2 との対比により、実施例 1 は外部量子効率がより一層向上していることが分かる。ホストを用いていない実施例 2 とホスト (BH-1) を用いている実施例 1 では、ホストを用いている実施例 1 の方が電子と正孔の再結合確率が向上するため高効率化したものと推測される。

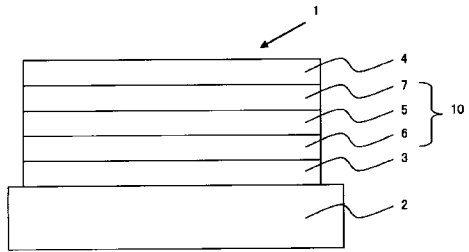
【符号の説明】

【0107】

- 1 有機 EL 素子
- 3 陽極
- 4 陰極
- 5 発光層
- 6 陽極側有機薄膜層
- 7 陰極側有機薄膜層
- 10 発光ユニット

30

【図 1】



フロントページの続き

- (72)発明者 河村 昌宏
千葉県袖ヶ浦市上泉 1 2 8 0 番地
- (72)発明者 水木 由美子
千葉県袖ヶ浦市上泉 1 2 8 0 番地
- (72)発明者 伊藤 裕勝
千葉県袖ヶ浦市上泉 1 2 8 0 番地
- (72)発明者 羽毛田 匡
千葉県袖ヶ浦市上泉 1 2 8 0 番地
- (72)発明者 ダニエル グリコ
ポーランド ピーエル - 0 1 - 1 6 7 ワルシャワ ザビシ 1 6 - 7 2
- (72)発明者 アニタ ヤニガ
ポーランド ピーエル - 3 2 - 6 4 2 ブウォシェニツァ ユーエル . ヨーゼファ ススキエゴ
8 9
- (72)発明者 マチエイ クルゼスゼウスキー
ポーランド ピーエル - 6 4 - 9 2 0 ピワ ロダコフスキエゴ 3 2
- F ターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 BB08 CC04 DD53 DD59 DD66 DD68 DD69
FF14 FF20
4C050 AA01 BB04 CC04 EE02 FF05 GG01 HH01

专利名称(译)	用于有机电致发光器件，有机电致发光器件和电子器件的材料		
公开(公告)号	JP2016127083A	公开(公告)日	2016-07-11
申请号	JP2014265581	申请日	2014-12-26
[标]申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社 安装化学螺旋利基NEI波尔喜欢的Apex学院现在点击		
申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社 安装化学螺旋利基NEI Porusukiei学院Nauck		
[标]发明人	羽山友治 河村昌宏 水木由美子 伊藤裕勝 羽毛田匡 ダニエルグリコ アニタヤニガ マチェイクルゼスゼウスキー		
发明人	羽山 友治 河村 昌宏 水木 由美子 伊藤 裕勝 羽毛田 匡 ダニエル グリコ アニタ ヤニガ マチェイ クルゼスゼウスキー		
IPC分类号	H01L51/50 C07D487/04 C09K11/06		
FI分类号	H05B33/14.B C07D487/04.136 C09K11/06.650		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/BB08 3K107/CC04 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD66 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/FF14 3K107/FF20 4C050/AA01 4C050/BB04 4C050/CC04 4C050/EE02 4C050/FF05 4C050/GG01 4C050/HH01		
其他公开文献	JP6613518B2		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

要解决的问题：提供高性能有机EL元件，并提供可提供有机EL元件的材料。溶剂：提供包含负电极，正电极和一种或多种有机电致发光元件的有机电致发光元件。负电极和正电极之间的薄膜层，其中至少一个有机薄膜层含有由式(I)表示的化合物。(通式(I)中，R表示烷基，芳基，被芳基乙炔基取代的芳基或杂芳基。Rand R表示氢原子，烷基，芳基，被芳基乙炔基或杂芳基取代的芳基。)选择的附图：无

