

(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2011-153239

(P2011-153239A)

(43) 公開日 平成23年8月11日(2011.8.11)

| (51) Int.Cl.                 | F I            | テーマコード (参考) |
|------------------------------|----------------|-------------|
| <b>C09K 11/06 (2006.01)</b>  | C09K 11/06 660 | 3K107       |
| <b>H01L 51/50 (2006.01)</b>  | H05B 33/14 B   | 4H006       |
| <b>C07F 15/02 (2006.01)</b>  | C07F 15/02     | 4H050       |
| <b>C07C 251/24 (2006.01)</b> | C07C 251/24    |             |

審査請求 未請求 請求項の数 9 O L (全 15 頁)

|           |                            |          |                     |
|-----------|----------------------------|----------|---------------------|
| (21) 出願番号 | 特願2010-16081 (P2010-16081) | (71) 出願人 | 000000099           |
| (22) 出願日  | 平成22年1月27日 (2010.1.27)     |          | 株式会社 I H I          |
|           |                            |          | 東京都江東区豊洲三丁目1番1号     |
|           |                            | (74) 代理人 | 100093861           |
|           |                            |          | 弁理士 大賀 真司           |
|           |                            | (74) 代理人 | 100129218           |
|           |                            |          | 弁理士 百本 宏之           |
|           |                            | (72) 発明者 | 江口 晴樹               |
|           |                            |          | 東京都江東区豊洲三丁目1番1号 株式会 |
|           |                            |          | 社 I H I 内           |
|           |                            | (72) 発明者 | 淵上 健児               |
|           |                            |          | 東京都江東区豊洲三丁目1番1号 株式会 |
|           |                            |          | 社 I H I 内           |

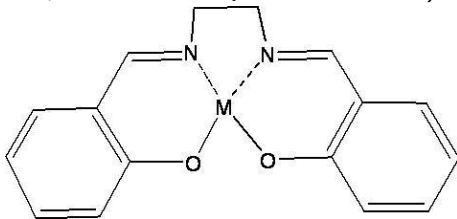
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機E L用発光材料、および、これを用いた有機E L素子

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】 発光効率が高く、発光寿命の長い有機E L素子に用いられる発光材料の提供。

【解決手段】 有機E L発光材料は金属サレン錯体化合物であって、例えば下式で表されるN, N' - ビス(サリチリデン)エチレンジアミン金属錯体である。



(金属Mは、Fe、Cr、Mn、Co、Ni、Mo、Ru、Rh、Pd、W、Re、Os、Ir、Pt、Nd、Sm、Eu又はGdである。) Mが鉄である金属サレン錯体は青色のりん光を発光し、発光層にドーピングすることにより青色発光有機E L素子が得られる。

【選択図】 なし

## 【特許請求の範囲】

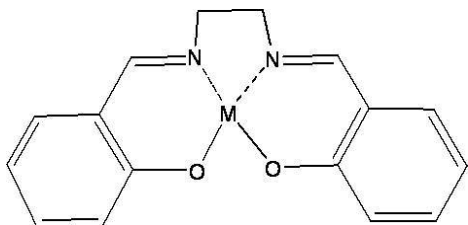
## 【請求項 1】

金属サレン錯体化合物からなる有機 E L 用発光材料。

## 【請求項 2】

前記金属サレン錯体化合物が下記 ( I )、( I I )、( I I I ) 及び ( I V ) の少なくとも一つからなる、請求項 1 記載の有機 E L 用発光材料。

( I )

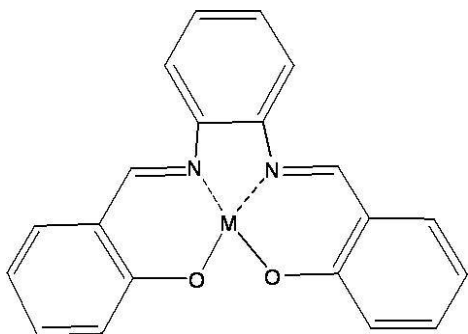


10

N,N' -Bis(salicylidene)ethylenediamine metal

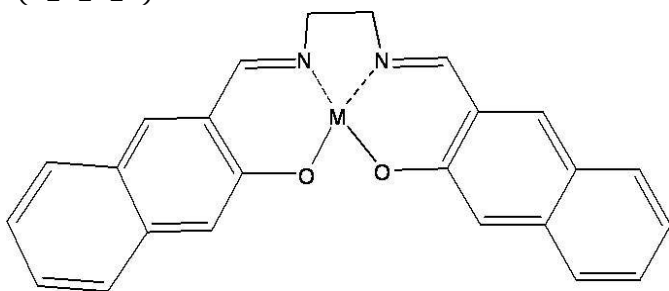
( I I )

20



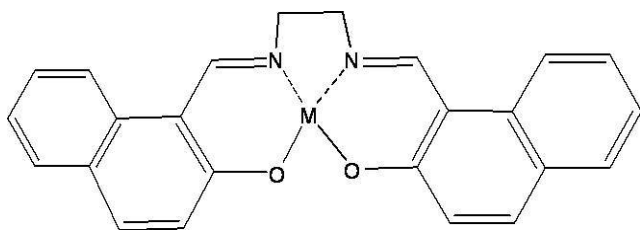
30

( I I I )



40

( I V )



MはFe、Cr、Mn、Co、Ni、Mo、Ru、Rh、Pd、W、Re、Os、Ir、Pt、Nd、Sm、Eu、又は、Gd である。 10

【請求項 3】

前記金属サレン錯体（Mが鉄である。）は、青色のりん光を発光する請求項 2 記載の有機 EL 用発光材料。

【請求項 4】

発光層が請求項 1 乃至 3 の何れか 1 項記載の金属サレン錯体を含むものである有機 EL 素子。

【請求項 5】

前記発光層がホスト化合物に前記金属錯体がゲスト化合物としてドーブされたものである請求項 4 記載の有機 EL 素子。 20

【請求項 6】

前記金属サレン錯体が 0.5 原子重量%以上 5 原子重量%以下ドーブされている請求項 5 記載の有機 EL 素子。

【請求項 7】

請求項 4 乃至 7 の何れか一項記載の有機 EL 素子を備える有機 EL 発光デバイス。

【請求項 8】

HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) が -3.90 eV ~ -4.50 eV である、請求項 1 記載の有機 EL 用発光材料。

【請求項 9】

LUMO (Lowest Occupied Molecular Orbital) が -3.4 eV ~ -3.0 eV である、請求項 1 又は 8 記載の有機 EL 用発光材料。 30

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機 EL 用発光材料に係わり、詳しくは、青色のりん光を発光する金属錯体に係わり、さらに詳しくは、金属サレン錯体に関するものである。

【背景技術】

【0002】

近年、有機エレクトロルミネッセンス (Organic Electro-Luminescence: 有機 EL) による発光原理を利用した発光素子や表示デバイスが注目されている。 40

【0003】

有機 EL 素子の主要部は発光層であり、発光層に使用される発光材料には、大きく分けて、高分子のものと低分子のものがある。ポリマー分子を用いたものが高分子材料であり、それ以外の分子を用いたものが低分子材料である。

【0004】

高分子材料をインクとした印刷技術を利用することによって、大型の有機 EL デバイスを安価に製造できることが叫ばれているが、高分子材料の寿命に難があり、現状では、低分子材料が一般的に発光材料として利用されている。

【0005】

真空蒸着によって低分子材料が薄膜化・積層化され、これを発光層として利用した発光 50

デバイスが実用化されている。低分子材料は蛍光材料とりん光材料に大別される。蛍光材料は一重項発光を利用した材料で、光の３原色となる赤・緑・青色とも、コスト・寿命・耐久性・成膜性などに優れた材料である。

#### 【 0 0 0 6 】

一方、りん光材料は三重項発光を利用した材料であり、蛍光材料より十分に発光効率がよいが、寿命、電流増加時の効率低下、精製の困難さ、熱耐性の点に難がある。特に、青色用の材料は、十分実用化には至っていないのが現状である。なお、青色用りん材料として、例えば、特開2006-232784号公報、特開2008-37848号、そして、特開2007-9009号公報等に記載の白金錯体が存在する。

#### 【 先行技術文献 】

#### 【 特許文献 】

#### 【 0 0 0 7 】

【 特許文献 1 】 特開2006-232784号公報

【 特許文献 2 】 特開2008-37848号公報

【 特許文献 3 】 特開2007-9009号公報

#### 【 発明の概要 】

#### 【 発明が解決しようとする課題 】

#### 【 0 0 0 8 】

有機ＥＬにおける青色発光に関して、発光材料の発光効率をさらに向上すること、そして、発光材料を長寿命化することが大きな課題となっている。また、青色発光材料にはイリジウム、白金錯体等の限定された材料が使用されており、希少金属を使用しない発光材料が求められている。

#### 【 0 0 0 9 】

本発明は、有機ＥＬの分野において、新規な発光材料を提供することを目的とするものである。本発明の他の目的は、発光効率が高く、長寿命な青色発光材料を提供することにある。本発明のさらに他の目的は、希少金属を使用しない青色発光材料を提供することにある。本発明のさらに他の目的は、これら発光材料を用いた有機ＥＬ素子及び有機ＥＬデバイスを提供することにある。

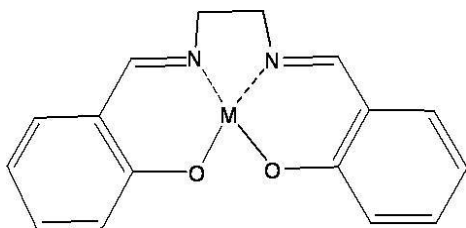
#### 【 課題を解決するための手段 】

#### 【 0 0 1 0 】

前記目的を達成するために本発明は、金属サレン錯体化合物からなる有機ＥＬ用発光材料であることを特徴とする。本発明に係る金属サレン錯体化合物の好適な例は、下記（Ⅰ）、（Ⅱ）、（Ⅲ）及び（Ⅳ）の少なくとも一つからなるものである。

#### 【 0 0 1 1 】

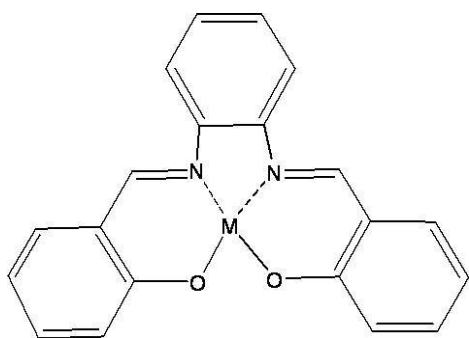
#### （Ⅰ）



#### 【 0 0 1 2 】

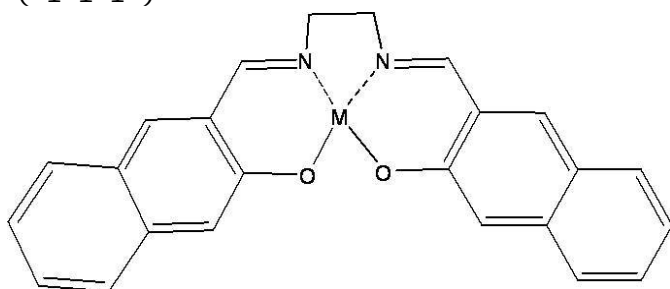
N,N'-Bis(salicylidene)ethylenediamine metal

#### （Ⅱ）



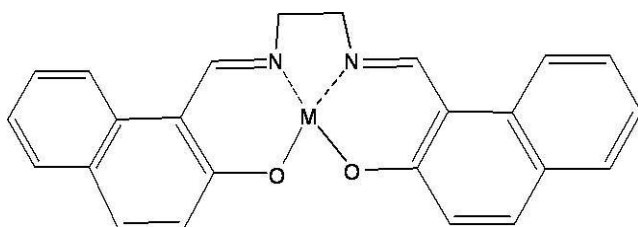
10

【 0 0 1 3 】  
( I I I )



20

【 0 0 1 4 】  
( I V )



30

【 0 0 1 5 】

Mは遷移金属、例えば、Fe、Cr、Mn、Co、Ni、Mo、Ru、Rh、Pd、W、Re、Os、Ir、Pt、Nd、Sm、Eu、又は、Gdである。

【 0 0 1 6 】

前記金属サレン錯体 (Mが鉄である。) は、青色のりん光を発光する。

40

【 0 0 1 7 】

さらに、本発明は、発光層が前記金属サレン錯体を含むものである有機EL素子であることを特徴とする。

【 0 0 1 8 】

前記発光層は、ホスト化合物に前記金属錯体がゲスト化合物としてドーブされたものであってもよい。前記金属錯体は、好ましくは、0.5原子重量%以上5原子重量%以下ドーブされている。ホスト化合物としては、例えば、キノリノールアルミニウム錯体 (Alq3) がある。

【 0 0 1 9 】

さらに、本発明は、前記有機EL素子を備える有機EL発光デバイスであることを特徴

50

とするものである。

【発明の効果】

【0020】

以上説明したように、本発明によれば、有機ELの分野において、新規な発光材料を提供することができる。また、発光効率が高く、長寿命な青色発光材料を提供することができる。さらにまた、希少金属を使用しない青色発光材料を提供することができる。さらに、これら青色発光材料を用いた有機EL素子及び有機ELデバイスを提供することができる。

【図面の簡単な説明】

【0021】

10

【図1】本発明に係わる有機EL素子の実施形態に係る斜視図である。

【図2】鉄サレン錯体のフォトルミネッセンスの測定結果を示す特性図である。

【図3】有機EL素子のELスペクトルを示す特性図である。

【図4】有機EL素子のIVL特性（電流電圧照度特性）の第1の測定結果を示す特性図である。

【図5】その第2の測定結果を示す特性図である。

【図6】その第3の測定結果を示す特性図である。

【図7】ドーパ濃度の異なる素子間のIVL比較を示す特性図である。

【図8】鉄サレン錯体がドーパされて青色発光を達成する発光層の断面図である。

【発明を実施するための形態】

20

【0022】

図1に、本発明に係わる有機EL素子の斜視図を示す。有機EL素子は、ガラス基板22から、順に、陽極20、正孔注入層18、正孔輸送層16、発光層14、電子輸送層及び電子注入層12、陰極10からなる多層構造を備え、さらに、これらを封止するための封止層を備えている。図1の矢印は、有機ELによる発光の方向を示している。

【0023】

（1）基板

ガラス基板の他、フレキシブル化を目的としてプラスチック基板が使用される。水分が基板を透過するのを防ぐために、透明プラスチックフィルムにバリア性を持たせている。

【0024】

30

（2）陽極

基板の底から発光させる場合、素子内で発生した光を外部に取り出すために80%以上の透明性が要求される。また、陽極から多くの正孔を発光層に注入するために仕事関数が高いものが要求される。ITO (Indium Tin Oxide) 透明電極が多用されている。

【0025】

（3）正孔注入層

陽極で発生した正孔を正孔輸送層に注入するものである。高分子材料として、ポリスチレンスルホン酸（PSS）がドーパされたポリエチレンジオキシチオフェン（PEDOT：PSS）が、低分子材料として、フタロシアニン系のCuPc（銅フタロシアニン）が広く用いられている。

40

【0026】

（4）正孔輸送層

正孔輸送層は、正孔注入層から注入された正孔を発光層に輸送する。適切なイオン化ポテンシャルと正孔移動度を有することが必要であり、トリフェニルアミン誘導体が広く使用されている。

【0027】

（5）発光層

発光ホスト材料、及び、発光色素であるドーピング材料は、陽極および陰極から注入されたホールおよび電子の再結合中心として機能する。また、発光層におけるホスト材料への発光色素のドーピングは、高い発光効率を得ると共に発光波長を変換させる。

50

## 【 0 0 2 8 】

発光層は、電荷注入のための適切なエネルギーレベルを持ち、化学的安定性や耐熱性に優れ、均質なアモルファス薄膜によって形成されることが求められる。また、発光色の種類や色純度が優れていることや発光効率の高いことが求められている。

## 【 0 0 2 9 】

発光層は既述の金属サレン錯体を正孔輸送層に蒸着するか、あるいは金属サレン錯体をホスト化合物と共に正孔輸送層に蒸着するかによって製造される。

## 【 0 0 3 0 】

## ( 6 ) 電子輸送層

電子輸送層としては、キノリノールアルミニウム錯体Alq<sub>3</sub>、オキサジアゾール誘導体、トリアゾール誘導体、バソフェナントロリン誘導体、シロール誘導体などが利用されている。

10

## 【 0 0 3 1 】

## ( 7 ) 電子注入層

正孔注入層と同様の目的で、電子の注入効率を高めるため、陰極界面にLiやCs等のアルカリ金属をドーブした層を設けることが行われている。

## 【 0 0 3 2 】

## ( 8 ) 陰極

陰極材料として、電子を注入しやすいように低仕事関数の金属であるアルカリ土類金属やアルカリ金属が使用される。Al、Mg、Agの共蒸着膜、LiFまたはLi<sub>2</sub>Oの薄膜蒸着膜の上にAlを蒸着した積層電極等が利用される。高分子系ではCaまたはBaとAlの積層膜が利用される。

20

## 【 0 0 3 3 】

## ( 9 ) 封止

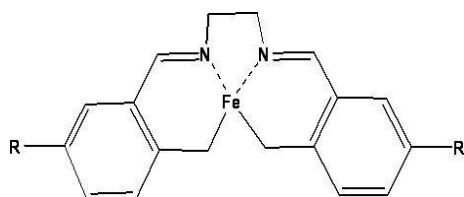
有機化合物や陰極材料は水分や酸素と反応することがあり、陰極材料の酸化や有機材料との界面からの剥離などによりダークスポットが生じる原因となる。その防止のため、素子を金属の封止缶やガラスとエポキシなどで封止する。金属の封止缶を使った場合、缶内部に乾燥窒素を充填したり、乾燥剤（ゲッター）を封入することが行われている。

## 【 実施例 】

## 【 0 0 3 4 】

30

## ( 1 ) 金属サレン錯体(鉄サレン錯体)の合成



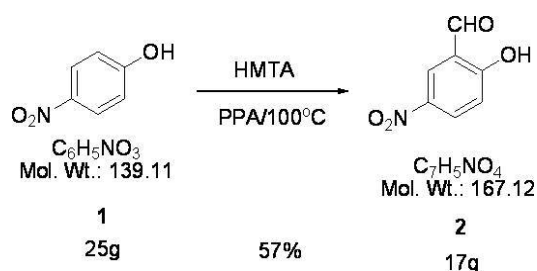
## 【 0 0 3 5 】

## 鉄サレン錯体

40

Complex A

Step 1:



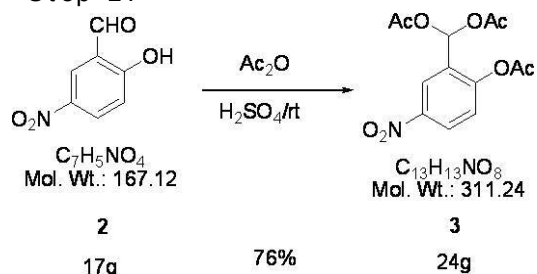
## 【 0 0 3 6 】

4-nitrophenol (25g, 0.18mol)、hexamethylene tetramine (25g, 0.18mol)、polyphosphoric acid (200ml)の混合物を1時間100 で攪拌した。その後、その混合物を500mlの酢酸エチルと1Lの水の中に入れ、完全に溶解するまで攪拌した。さらにその溶液に400mlの酢酸エチルを追加で加えたところその溶液は2つの相に分離し、水の相を取り除き、残りの化合物を塩性溶剤で2回洗浄し、無水MgSO<sub>4</sub>で乾燥させた結果、compound 2が17g (収率57%) 合成できた。

10

## 【 0 0 3 7 】

Step 2:



20

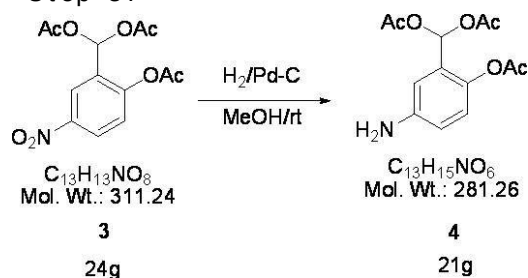
## 【 0 0 3 8 】

Compound 2 (17g, 0.10mol) compound 2 (17g, 0.10mol), acetic anhydride (200ml), H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> (少々)を室温で1時間攪拌させた。得られた溶液は、氷水(2L)の中に0.5時間混ぜ、加水分解を行った。得られた溶液をフィルターにかけ、大気中で乾燥させたところ白い粉末状のものが得られた。酢酸エチルを含む溶液を使ってその粉末を再結晶化させたところ、24gのCompound 3 (収率76%)の白い結晶を得ることができた。

30

## 【 0 0 3 9 】

Step 3:



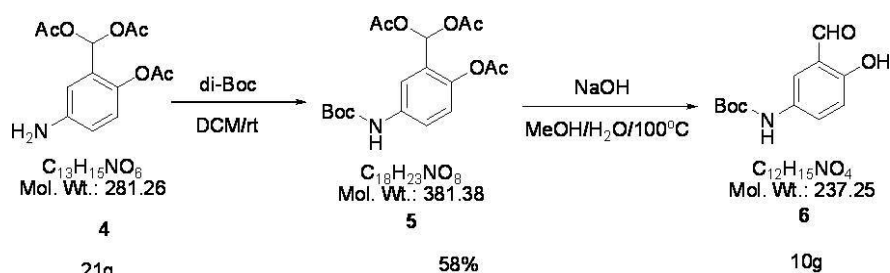
## 【 0 0 4 0 】

compound 3 (24g, 77mmol)とメタノール(500ml)に10%のパラジウムを担持したカーボン(2.4g)の混合物を一晩1.5気圧の水素還元雰囲気中で還元した。終了後、フィルターでろ過したところ茶色油状のcompound 4 (21g)が合成できた。

40

## 【 0 0 4 1 】

Step 4, 5:



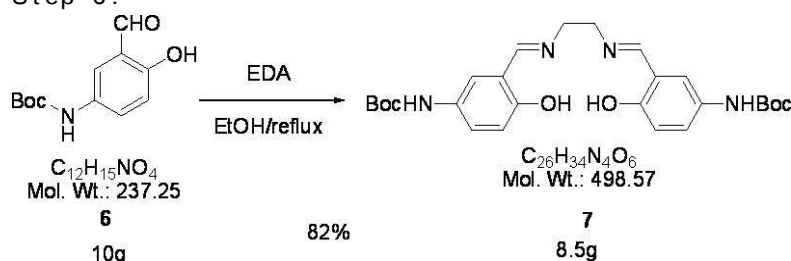
【 0 0 4 2 】

無水ジクロロメタン (DCM) (200ml) に compound 4 (21g, 75mmol), di(tert-butyl) dicarbonate (18g, 82mmol) を窒素雰囲気で一晩攪拌した。得られた溶液を真空中で蒸発させた後、メタノール (100ml) で溶解させた。その後、水酸化ナトリウム (15g, 374mmol) と水 (50 ml) を加え、5時間還流させた。その後冷却し、フィルターでろ過し、水で洗浄後、真空中で乾燥させたところ茶色化合物がえられた。得られた化合物は、シリカゲルを使ったフラッシュクロマトグラフィーを2回行うことで、10gの compound 6 (収率58%) が得られた。

10

【 0 0 4 3 】

Step 6:



20

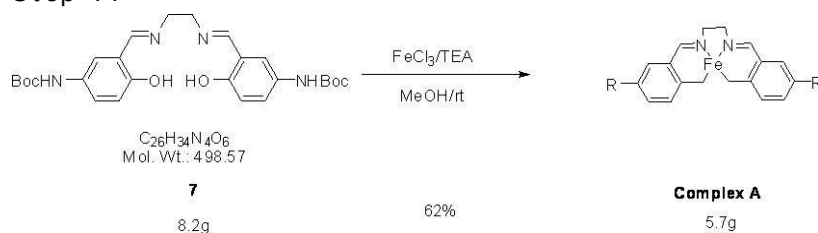
【 0 0 4 4 】

無水エタノール400mlの中に compound 6 (10g, 42mmol) を入れ、加熱しながら還流させ、無水エタノール20mlにエチレンジアミン (1.3g, 21mmol) を0.5時間攪拌しながら数滴加えた。そして、その混合溶液を氷の容器に入れて冷却し15分間かき混ぜた。その後、200mlのエタノールで洗浄しフィルターをかけ、真空中で乾燥させたところ compound 7 が8.5g (収率82%) で合成できた。

30

【 0 0 4 5 】

Step 7:



【 0 0 4 6 】

無水メタノール (50ml) の中に compound 7 (8.2g, 16mmol)、triethylamine (22ml, 160mmol) を入れ、10mlメタノールの中に  $\text{FeCl}_3$  (2.7g, 16mmol) を加えた溶液を窒素雰囲気下で混合した。室温窒素雰囲気下で1時間混合したところ茶色の化合物が得られた。その後、真空中で乾燥させた。得られた化合物はジクロロメタン400mlで希釈し、塩性溶液で2回洗浄し、 $\text{Na}_2\text{SO}_4$  で乾燥させ、真空中で乾燥させたところ complex A が得られた。得られた化合物はジエチルエーテルとパラフィンの溶液中で再結晶させ高速液化クロマトグラフィーで測定したところ純度95%以上の complex A (鉄サレン錯体) 5.7g (収率62%) を得た。

40

【 0 0 4 7 】

同様に、化学式 (I I) の化合物の合成は、Khairul I. Ansari, James D. Grant, Getachew A. Woldemariam, Sahba Kasiri and Subhrangsu S. Mandal, 'Iron(III)-salen complexes with less DNA cleavage activity exhibit more efficient apoptosis in MC

50

F7 cells', Org. Biomol. Chem. 7(2009) 926-932、あるいは、Sheila M. Crawford, 'The ultra-violet and visible spectra of some transition metal chelates with N, N'-bis-(o-hydroxybenzylidene)ethylenediamine and N, N'-bis-(o-hydroxybenzylidene)-o-phenylenediamine and related compounds', Spectrochimica Acta, 19 (1963) 255-270を参照することによって可能である。

【0048】

さらに、化学式(III)の化合物の合成は、

G. V. Panova, N. K. Vikulova and V. M. Potapov, 'Stereochemistry of Four-coordinate Chelate Compounds of Schiff Bases and Their Analogues', Russian Chemical Reviews, 49 (1980) 655-667、Alexander V. Woznycia, John Desper and Christopher J. Levy, 'Monohelical Iron(II) and Zinc(II) Complexes of a (1R, 2R)-Cyclohexyl Salen Ligand with Benz[a]anthryl Sidearms', Inorganic Chemistry 45 (2006) 10034-10036を参照することによって可能である。

10

【0049】

さらにまた、化学式(IV)の化合物の合成は、G. V. Panova, N. K. Vikulova and V. M. Potapov, 'Stereochemistry of Four-coordinate Chelate Compounds of Schiff Bases and Their Analogues', Russian Chemical Reviews, 49 (1980) 655-667を参照することによって可能である。

【0050】

鉄サレンの発光試験(化学式(I))

20

まず初めに鉄サレン錯体をクロロホルム溶液に濃度250mg/mlで溶解した。その後、ドイツJETI社製SPECBOS1201Mの装置を用いてフォトルミネッセンスの測定を行った。図2に示す様に、下記のとおり光の波長が280nmから480nmで発光スペクトルがみられた。これを、450nmから600nmで発光がみられるキノリノールアルミニウム錯体Alq3からなるホスト化合物に原子重量1%、そして原子重量5%混合することにより緑から青へ発光させる実験を行った。

【0051】

(2)有機EL素子の作製・電気及び光学特性評価

a. 有機EL素子の作製条件

ITO基板の洗浄プロセスは次の用にした。ITO洗浄環境は、クラス1000のクリーンルーム内に設置されているクラス100のクリーンブースで行うこととした。洗浄に用いた溶媒は、イソプロピルアルコール(IPA)、有機アルカリ水溶液、超純水(18MΩ, TOC: ~10ppb)を用いた。洗浄のため超音波洗浄機(使用周波数は40kHzと950kHz)、UVオゾン洗浄機を用いた。

30

【0052】

真空チャンバー内で、原料化合物を加熱し蒸発させる真空蒸着法で行った。蒸着プロセスの条件は、真空度( $1 \sim 2 \times 10^{-4}$ Pa)である。

最初に、ITO膜を準備し、そのITO膜上に、蒸着膜速度0.1~0.2nm/secで、正孔注入層である2-TNATAを30nm膜厚で製膜した。その後、原料を2-TNATAからNPDに変更して2-TNATA膜の上に正孔輸送層としてNPDを蒸着膜速度0.1~0.2nm/secで50nm製膜した。その後、原料をNPDからAlq3と鉄サレンを混合したものに变更し同じく蒸着膜速度0.1~0.2nm/secで30nmの膜厚で発光層として製膜した。

40

【0053】

次に、原料をAlq3単独に変更し、Alq3を蒸着膜速度0.1~0.2nm/secで30nmの膜厚で同じく電子輸送層として製膜した。その後、原料をLiFに変更し蒸着膜厚速度0.01nm/sec、膜厚0.8nmで電子注入層として製膜した。最後に電極材としてアルミニウムを蒸着膜速度0.1~0.2nm/secで150nmの膜厚で製膜した。

【0054】

有機ELの構造は、次の3パターンとした。

(1) ITO/2-TNATA(30nm)/NPD(50nm)/鉄サレン0%Alq3(30nm)/

50

Alq3(30nm)/LiF(0.8nm)/Al(150nm)

(2) ITO/2-TNATA(30nm)/NPD(50nm)/鉄サレン1%@Alq3(30nm)/

Alq3(30nm)/LiF(0.8nm)/Al(150nm)

(3) ITO/2-TNATA(30nm)/NPD(50nm)/鉄サレン5%@Alq3(30nm)/

Alq3(30nm)/LiF(0.8nm)/Al(150nm)

発光面積を $2.0 \times 2.0 \text{ mm}^2$ とした。

#### 【0055】

##### b. 発光試験

封止をグローブボックス内( $\text{H}_2\text{O}$ と $\text{O}_2$ は10ppm未満)で行い。UV硬化はガラス製封止缶張り合わせ後、グローブボックス外に取り出して実施した。硬化温度は80℃、硬化時間は3時間とした。素子内に導入した乾燥剤(ゲッター)はCaO系のダイニック製10mm角のものを  
10

#### 【0056】

光表面を顕微鏡で拡大観察したところ、ドーブ濃度0%の素子ではダークスポットのない良好な発光が得られた。1%の素子では細かいダークスポットが発光表面全体に見られた。5%の素子についても写真撮影をおこなったが、発光はしたものの写真が撮影できるほどの光量が得られず、下記のようにブラックアウトした画像となった。

#### 【0057】

##### c. ELスペクトル測定

今回作製した構造(1)~(3)の素子におけるELスペクトル(@5mA)を図3に示す。(3)の素子については、測定に発光強度が足りなかったため駆動電流を13mAまで上げて行っているが、それでも強度不足であり、S/Nが若干悪いスペクトルになっている。  
20

#### 【0058】

##### d. 電流・電圧・輝度(IVL)特性評価

作製した構成(1)~(3)の素子についてIVL特性(電流電圧照度特性)の測定を行った。電圧、電流の測定はソースメジャーユニット横河電気製GS610を用いた。輝度計はトプコン社製のBM-9をもちいた。電流、電圧、輝度の自動測定制御ソフトはシステムハウスサンライズ製W32-G610IVL2-Rを用いた。今回、各構造の素子を3基板分作製しており、各基板で良好な発光表面を有する素子を1つ選びIVL測定を行った。評価数(N)をそれぞれの素子について“3”とした。(1)の結果を図4に示し、(2)の結果を図5に示し、(6)の結果を図6に示す。  
30

#### 【0059】

##### e. ドーブ濃度の異なる素子間のIVL比較(最大値比較)

これを図7に示す。各材料の測定結果を代表とする各グラフは、N=3の測定値の中でも電流効率-電流密度特性において最大値を取るものを選定した。

#### 【0060】

以上のとおり、図4乃至図7に示すとおり、発光層であるAlq3に鉄サレン錯体を加えることにより青色で発光する有機EL素子を提供することが可能となる。  
40

#### 【0061】

##### (3) 本有機ELの寿命について

標記有機ELを作製してから3ヶ月経過後、電流、電圧、輝度の再測定を行ったが劣化は認められなかった。

#### 【0062】

##### (4) 他の化合物の発光の可能性について

化学式(I)の鉄サレン錯体は、図8に示す発光層にドーブしてブルーシフトした結果、青色発光を達成したものである。ブルーシフトさせるにはHOMO(Highest Occupied Molecular Orbital)が-3.90 eV~-4.50 eV、LUMO(Lowest Occupied Molecular Orbital)が-3.4 eV~-3.0 eVであることが好ましい。よい。  
50

## 【 0 0 6 3 】

化学式 ( I I ) 乃至 ( I V ) について、化合物 ( I ) と同様に検討したところ、青色の有機 E L 発光が可能であることが分かった。( I )、( I I )、( I I I )、( I V ) の HOMO と LUMO をアクセルリス社の DMOI3 を使って計算したところ、その結果は以下の通りであった。

## 【 0 0 6 4 】

化合物 ( I )

HOMO -3.991 eV

LUMO -3.320 eV

化合物 ( I I )

HOMO -4.495 eV

LUMO -3.012 eV

化合物 ( I I I )

HOMO -4.195 eV

LUMO -3.165 eV

化合物 ( I V )

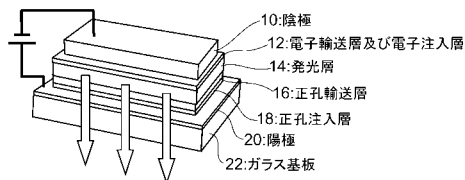
HOMO -4.134 eV

LUMO -3.325 eV

化学式 ( I I )、( I I I )、( I V ) の HOMO と LUMO はブルーシフトの要件を満たしているので化学式 ( I ) 同様、有機 E L の添加剤として用いることが可能であることが分かった。

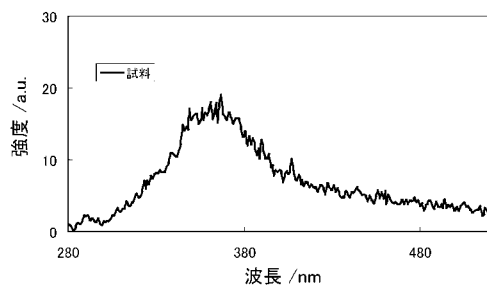
## 【 図 1 】

図 1



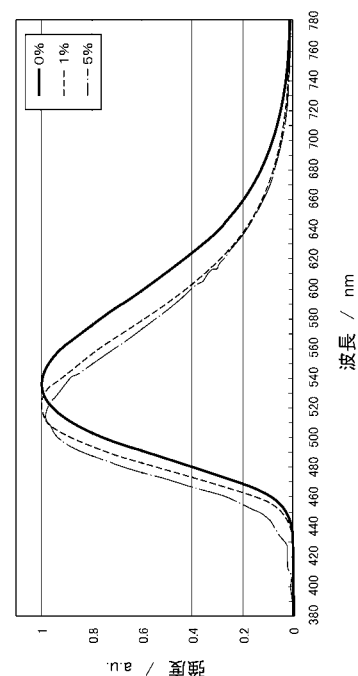
## 【 図 2 】

図 2



## 【 図 3 】

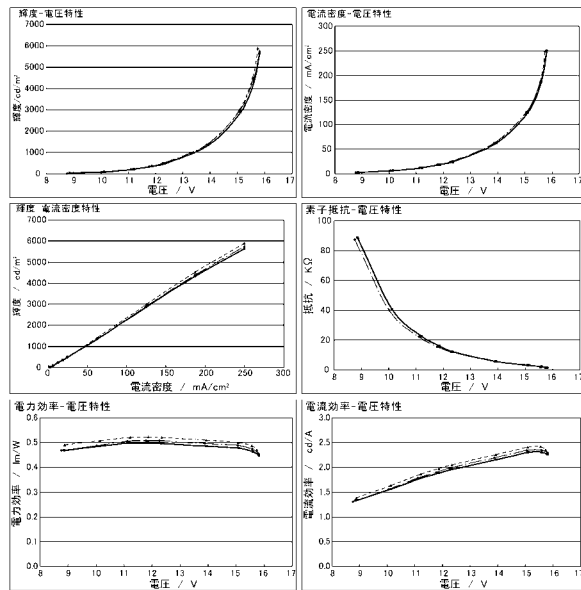
図 3



【図 4】

図 4

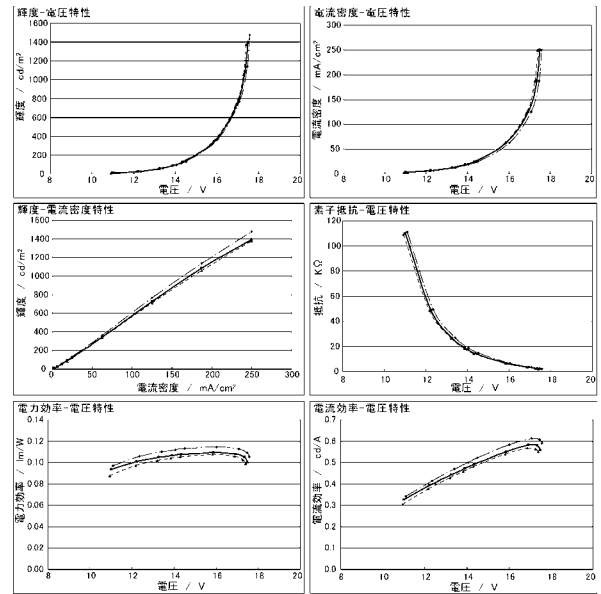
ITO / 2-TNATA(30) / NPD(50) / 鉄サレン錯体(0%)@Alq(30) / Alq(30) / LiF(0.8) / Al(150) 単位: nm



【図 5】

図 5

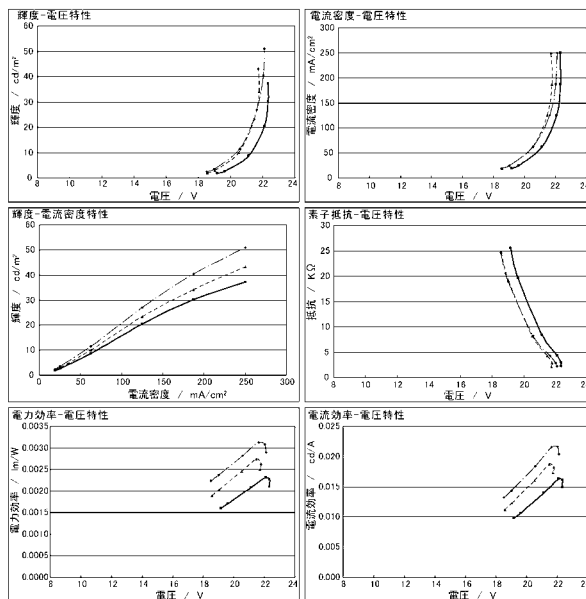
ITO / 2-TNATA(30) / NPD(50) / 鉄サレン錯体(1%)@Alq(30) / Alq(30) / LiF(0.8) / Al(150) 単位: nm



【図 6】

図 6

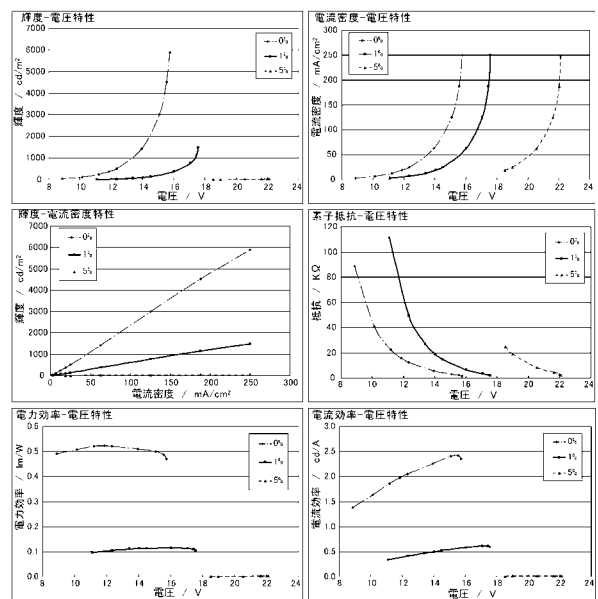
ITO / 2-TNATA(30) / NPD(50) / 鉄サレン錯体(5%)@Alq(30) / Alq(30) / LiF(0.8) / Al(150) 単位: nm



【図 7】

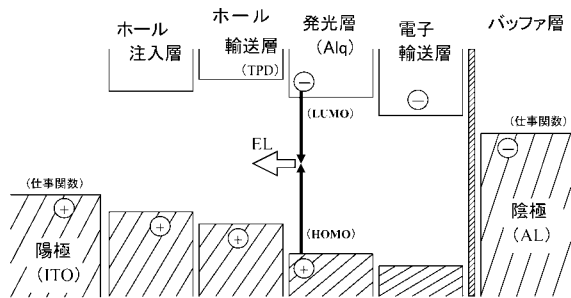
図 7

ITO / 2-TNATA(30) / NPD(50) / 鉄サレン錯体(0%or1%or5%)@Alq(30) / Alq(30) / LiF(0.8) / Al(150)



【 図 8 】

図 8



---

フロントページの続き

(72)発明者 保戸塚 梢

東京都江東区豊洲三丁目1番1号 株式会社I H I 内

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 CC04 CC06 CC21 DD53 DD59 DD64 DD67 DD69

FF14 FF19

4H006 AA03 AB82

4H050 AA03 AB91 WB13 WB14 WB21

|                |                                                                                                                                                                                                                  |         |            |
|----------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|------------|
| 专利名称(译)        | 用于有机EL的发光材料和使用其的有机EL器件                                                                                                                                                                                           |         |            |
| 公开(公告)号        | <a href="#">JP2011153239A</a>                                                                                                                                                                                    | 公开(公告)日 | 2011-08-11 |
| 申请号            | JP2010016081                                                                                                                                                                                                     | 申请日     | 2010-01-27 |
| [标]申请(专利权)人(译) | 石川岛播磨重工业株式会社                                                                                                                                                                                                     |         |            |
| 申请(专利权)人(译)    | 株式会社IHI                                                                                                                                                                                                          |         |            |
| [标]发明人         | 江口晴樹<br>淵上健児<br>保戸塚梢                                                                                                                                                                                             |         |            |
| 发明人            | 江口 晴樹<br>淵上 健児<br>保戸塚 梢                                                                                                                                                                                          |         |            |
| IPC分类号         | C09K11/06 H01L51/50 C07F15/02 C07C251/24                                                                                                                                                                         |         |            |
| FI分类号          | C09K11/06.660 H05B33/14.B C07F15/02 C07C251/24                                                                                                                                                                   |         |            |
| F-TERM分类号      | 3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC04 3K107/CC06 3K107/CC21 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD64 3K107/DD67 3K107/DD69 3K107/FF14 3K107/FF19 4H006/AA03 4H006/AB82 4H050/AA03 4H050/AB91 4H050/WB13 4H050/WB14 4H050/WB21 |         |            |
| 其他公开文献         | JP5569009B2                                                                                                                                                                                                      |         |            |
| 外部链接           | <a href="#">Espacenet</a>                                                                                                                                                                                        |         |            |

#### 摘要(译)

解决的问题：提供一种用于有机EL元件的发光材料，该发光材料具有高发光效率和长发光寿命。 解决方案：有机EL发光材料是一种金属Salen配合物化合物，例如，是下式表示的N，N'-双（水杨基）乙二胺金属配合物。（金属M为Fe，Cr，Mn，Co，Ni，Mo，Ru，Rh，Pd，W，Re，Os，Ir，Pt，Nd，Sm，Eu或Gd。）其中M为铁的金属。 萨林配合物发出蓝色磷光，并且可以通过掺杂发光层来获得发蓝色光的有机EL器件。 [选择图]无

#### (57)【要約】（修正有）

【課題】発光効率が高く、発光寿命が長い有機EL発光材料を提供する。

【解決手段】有機EL発光材料は、N，N'-ビス（サリチリデン）エ

