

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第5399173号
(P5399173)

(45) 発行日 平成26年1月29日(2014.1.29)

(24) 登録日 平成25年11月1日(2013.11.1)

(51) Int.Cl.	F I
HO 1 L 51/30 (2006.01)	HO 1 L 29/28 25OH
HO 1 L 51/00 (2006.01)	HO 1 L 29/28 100Z
CO 7 D 263/56 (2006.01)	CO 7 D 263/56
CO 7 D 413/10 (2006.01)	CO 7 D 413/10 CSP
CO 7 D 271/10 (2006.01)	CO 7 D 271/10

請求項の数 6 (全 148 頁)

(21) 出願番号 特願2009-203827 (P2009-203827)	(73) 特許権者 000153878 株式会社半導体エネルギー研究所 神奈川県厚木市長谷398番地
(22) 出願日 平成21年9月3日(2009.9.3)	
(65) 公開番号 特開2010-83876 (P2010-83876A)	(72) 発明者 瀬尾 哲史 神奈川県厚木市長谷398番地 株式会社 半導体エネルギー研究所内
(43) 公開日 平成22年4月15日(2010.4.15)	
審査請求日 平成24年8月7日(2012.8.7)	
(31) 優先権主張番号 特願2008-229129 (P2008-229129)	(72) 発明者 川上 祥子 神奈川県厚木市長谷398番地 株式会社 半導体エネルギー研究所内
(32) 優先日 平成20年9月5日(2008.9.5)	
(33) 優先権主張国 日本国(JP)	
(31) 優先権主張番号 特願2008-228805 (P2008-228805)	(72) 発明者 野村 洸子 神奈川県厚木市長谷398番地 株式会社 半導体エネルギー研究所内
(32) 優先日 平成20年9月5日(2008.9.5)	
(33) 優先権主張国 日本国(JP)	
(31) 優先権主張番号 特願2008-228660 (P2008-228660)	(72) 発明者 大澤 信晴 神奈川県厚木市長谷398番地 株式会社 半導体エネルギー研究所内
(32) 優先日 平成20年9月5日(2008.9.5)	
(33) 優先権主張国 日本国(JP)	

最終頁に続く

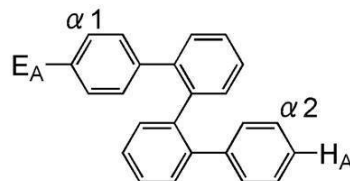
(54) 【発明の名称】 有機半導体材料および電子機器

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

一般式(G1)で表される有機半導体材料。

【化1】



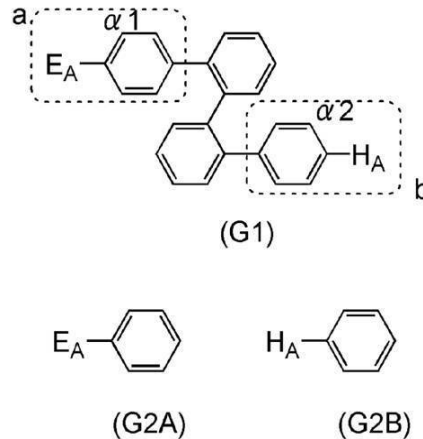
(G1)

(式中、E_Aは電子受容ユニット、H_Aはホール受容ユニットであり、1の炭素とE_Aは結合して環を形成していてもよく、2の炭素とH_Aは結合して環を形成していてもよい。)

【請求項2】

一般式(G1)で表される有機半導体材料。

【化2】



10

(式中、 E_A および H_A は、それぞれ置換基であり、 $\alpha 1$ の炭素と E_A は結合して環を形成していてもよく、 $\alpha 2$ の炭素と H_A は結合して環を形成していてもよい。また、 a で表される骨格を水素で置換した一般式 (G2A) で表される化合物は、 b で表される骨格を水素で置換した一般式 (G2B) で表される化合物よりも、電子親和力が大きく、かつ、イオン化ポテンシャルが大きい。)

20

【請求項3】

請求項2において、

一般式 (G2A) で表される化合物の電子親和力は 2.0 eV 以上 4.0 eV 以下であり、一般式 (G2B) で表される化合物のイオン化ポテンシャルは 4.5 eV 以上 6.5 eV 以下であることを特徴とする有機半導体材料。

【請求項4】

請求項1乃至請求項3のいずれか一項において、

前記 E_A は、含窒素6員芳香環基、1,2-アゾール基、1,3-アゾール基、ポリアゾール基のいずれかである有機半導体材料。

【請求項5】

請求項1乃至請求項4のいずれか一項において、

前記 H_A は 過剰系ヘテロ芳香族置換基、またはジアリールアミノ基である有機半導体材料。

30

【請求項6】

請求項1乃至請求項5のいずれか一項に記載の有機半導体材料を含む電子機器。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機半導体材料に関する。また、これを用いた発光素子、発光装置、照明装置、及び電子機器に関する。

40

【背景技術】

【0002】

有機化合物は無機化合物に比べて、多様な構造をとることができ、適切な分子設計により様々な機能を有する材料を合成できる可能性がある。これらの利点から、近年、機能性有機材料を用いたエレクトロニクスに注目が集まっている。

【0003】

例えば、有機化合物を機能性材料として用いたエレクトロニクスデバイスの例として、太陽電池や発光素子、有機トランジスタ等が挙げられる。これらは有機化合物の電気物性および光物性を利用したデバイスであり、特に発光素子はめざましい発展を見せている。

【0004】

50

発光素子の発光機構は、一对の電極間に発光層を挟んで電圧を印加することにより、陰極から注入された電子および陽極から注入されたホール（正孔）が発光層で再結合して分子励起子を形成し、その分子励起子が基底状態に緩和する際にエネルギーを放出して発光するといわれている。励起状態には一重項励起状態（ S^* ）起と三重項励起状態（ T^* ）が知られ、発光はどちらの励起状態を経ても可能であると考えられている。また、発光素子におけるその統計的な生成比率は、 $S^* : T^* = 1 : 3$ であると考えられている。

【0005】

一重項励起状態を発光に変換する化合物（以下、蛍光性化合物と称す）は室温において、三重項励起状態からの発光（燐光）は観測されず、一重項励起状態からの発光（蛍光）のみが観測される。したがって、蛍光性化合物を用いた発光素子における内部量子効率（注入したキャリアに対して発生するフォトンの割合）の理論的境界は、 $S^* : T^* = 1 : 3$ であることを根拠に25%とされている。

10

【0006】

一方、三重項励起状態を発光に変換する化合物（以下、燐光性化合物と称す）を用いれば、内部量子効率は75～100%まで理論上は可能となる。つまり、蛍光性化合物に比べて3～4倍の発光効率が可能となる。このような理由から、高効率な発光素子を実現するために、燐光性化合物を用いた発光素子の開発が近年盛んに行われている。

【0007】

上述した燐光性化合物を用いて発光素子の発光層を形成する場合、燐光性化合物の濃度消光や三重項-三重項消滅（ $T-T$ アニヒレーション）による消光を抑制するために、他の物質からなるマトリクス中に該燐光性化合物が分散するようにして形成することが多い。この時、マトリクスとなる物質はホスト材料、燐光性化合物のようにマトリクス中に分散される物質はゲスト材料と呼ばれる。

20

【0008】

燐光性化合物をゲスト材料とする場合、ホスト材料に必要とされる性質は、広いエネルギーギャップ（最高被占有軌道準位（ $HOMO$ 準位）と最低空軌道準位（ $LUMO$ 準位）との差）を有する、もしくは、該燐光性化合物よりも大きな三重項励起エネルギー（基底状態と三重項励起状態とのエネルギー差）を有することである。そのため、このような性質を有する物質の開発が進められている。

【0009】

例えば、非特許文献1では、青色の発光を示す燐光性化合物のホスト材料およびホール輸送層として、クアテルフェニレン骨格を有する材料が使用されている。

30

【先行技術文献】

【非特許文献】

【0010】

【非特許文献1】J. Kido, 他2名, ケミストリーレターズ, Vol. 36, No. 2, 316-317 (2007)

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0011】

非特許文献1に記載されているホスト材料は、ホール輸送層に用いられていることからわかるようにホール輸送性を示す。そのため、非特許文献1に記載されている材料を発光層のホスト材料として用いた場合、発光層をホールが突き抜けていることが予想される。非特許文献1では、発光層をホールが突き抜けていくことを防止するため、発光層の陰極側にホールブロック材料である $t-Bu-TAZ$ を用いて電子輸送層を形成していると考えられる。このように発光層のホスト材料がホール輸送性であるため、発光領域が発光層と電子輸送層（ホールブロック層）との界面に偏る可能性がある。

40

【0012】

発光領域が局所的に偏ると、三重項-三重項消滅（ $T-T$ アニヒレーション）による消光や、発光層に隣接する層（ホール輸送層、電子輸送層、又は、ホールブロック層）への励

50

起子の拡散が生じてしまい、発光効率が低下してしまう。

【0013】

そこで、ホスト材料は酸化及び還元 of いずれも可能なバイポーラ性を有し、かつ双方に安定であることが要求される。しかしながら、電子輸送性を有する骨格とホール輸送性を有する骨格を直接結合させると、バンドギャップの低下を招くために、高い三重項励起エネルギーを有する材料を合成するのは困難である。また、電子輸送性を有する骨格とホール輸送性を有する骨格との間に置換基を導入して共役系を拡張すると、バンドギャップの低下及び三重項励起エネルギーの低下を引き起こす問題がある。

【0014】

上記問題を鑑み、本発明の一態様は、バイポーラ性を有する新規な材料を提供することを目的の一とする。

10

【0015】

また、発光素子の駆動電圧を低減することを目的とする。また、発光素子の発光効率を向上させることを目的の一とする。

【0016】

また、発光素子、発光装置、電子機器の消費電力を低減することを目的の一とする。

【課題を解決するための手段】

【0017】

本発明者らは、電子輸送性を有する骨格とホール輸送性を有する骨格とを、共役が広がりにくいねじれたクアテルフェニレン骨格を介して結合した材料が、広いエネルギーギャップを有し、電子輸送性とホール輸送性を有する（つまり、バイポーラ性を有する）ことを見いだした。

20

【0018】

より具体的には、クアテルフェニレン骨格として、[1, 1' : 2', 1'' : 2'', 1''']クアテルフェニル-4-4'''-ジイル基を適用した一般式(G1)で表される材料が、広いエネルギーギャップを有し、電子輸送性とホール輸送性を有することを見いだした。

【0019】

分子内に電子輸送性を有する骨格とホール輸送性を有する骨格とを有する化合物であっても、バイポーラ性を有さない場合もある。しかしながら、本発明の一態様である有機半導体材料は、中心に共役が広がりにくいねじれたクアテルフェニレン骨格を有するため、電子輸送性を有する骨格とホール輸送性を有する骨格が分子内で相互作用することを抑制し、バイポーラ性を実現していると考えられる。

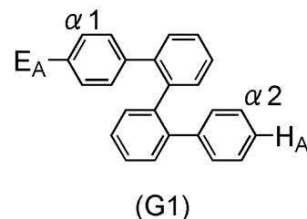
30

【0020】

よって、本発明の一態様は、一般式(G1)で表される有機半導体材料である。

【0021】

【化1】



40

【0022】

(式中、 E_A は電子受容ユニット、 H_A はホール受容ユニットであり、1の炭素と E_A は結合して環を形成していてもよく、2の炭素と H_A は結合して環を形成していてもよい。)

【0023】

上記構成において、電子受容ユニットとは、ホール受容ユニットよりも電子親和力が大き

50

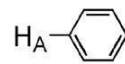
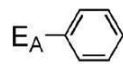
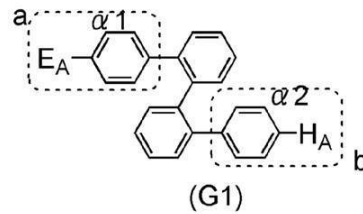
く、かつ、イオン化ポテンシャルが大きいものである。また、電子受容ユニットは電子輸送性を有する骨格であり、ホール受容ユニットはホール輸送性を有する骨格である。

【0024】

すなわち、本発明の一態様は、一般式(G1)で表される有機半導体材料である。

【0025】

【化2】



【0026】

(式中、 E_A および H_A は、それぞれ置換基であり、1の炭素と E_A は結合して環を形成していてもよく、2の炭素と H_A は結合して環を形成していてもよい。また、部分構造aに相当する一般式(G2A)で表される化合物は、部分構造bに相当する一般式(G2B)で表される化合物よりも、電子親和力が大きく、かつ、イオン化ポテンシャルが大きい。)

【0027】

上記構成において、一般式(G2A)で表される化合物の電子親和力は2.0 eV以上4.0 eV以下であり、一般式(G2B)で表される化合物のイオン化ポテンシャルは4.5 eV以上6.5 eV以下であることが好ましい。特に、発光素子に用いる場合には、一般式(G2A)で表される化合物の電子親和力は2.0 eV以上3.0 eV以下であり、一般式(G2B)で表される化合物のイオン化ポテンシャルは5.0 eV以上6.0 eV以下であることがより好ましい。

【0028】

上記構成において、 E_A で表される置換基としては、含窒素6員芳香環基、1,2-アゾール基、1,3-アゾール基、ポリアゾール基などが挙げられる。

【0029】

また、上記構成において、 H_A で表される置換基としては、電子過剰型ヘテロ芳香族置換基、またはジアリールアミノ基などが挙げられる。

【0030】

また、一般式(G1)で表される有機半導体材料において、電子輸送性を有する骨格(E_A)として、ベンゾオキサゾール骨格を選択することができる。

【0031】

よって、本発明の一態様は、一般式(BOX1)で表されるベンゾオキサゾール誘導体である。

【0032】

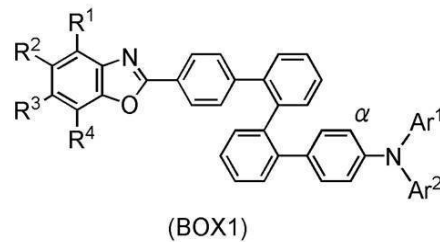
10

20

30

40

【化3】



【0033】

10

(式中、 Ar^1 、 Ar^2 は、それぞれ独立に、置換又は無置換の炭素数6～13のアリール基を表し、 $R^1 \sim R^4$ は、それぞれ独立に、水素、炭素数1～4のアルキル基、無置換の炭素数6～10のアリール基、ハロゲンのいずれかを表す。 Ar^1 と α の炭素、又は Ar^1 と Ar^2 とは、直接、又は硫黄、酸素、もしくは窒素を介して結合していてもよい。)

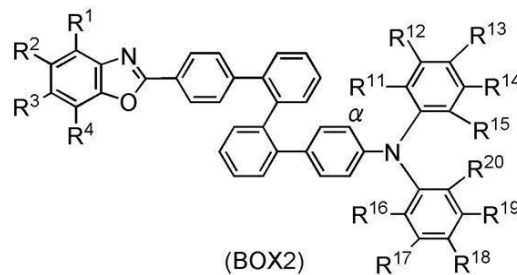
【0034】

また、本発明の一態様は、一般式(BOX2)で表されるベンゾオキサゾール誘導体である。

【0035】

【化4】

20



【0036】

30

(式中、 $R^1 \sim R^4$ は、それぞれ独立に、水素、炭素数1～4のアルキル基、無置換の炭素数6～10のアリール基、ハロゲンのいずれかを表し、 $R^{11} \sim R^{20}$ は、それぞれ独立に、水素、炭素数1～4のアルキル基、置換又は無置換の炭素数6～13のアリール基のいずれかを表す。 R^{11} と結合したベンゼン環上の炭素と α の炭素、又は R^{15} と結合したベンゼン環上の炭素と R^{20} と結合したベンゼン環上の炭素とは、直接結合していてもよい。)

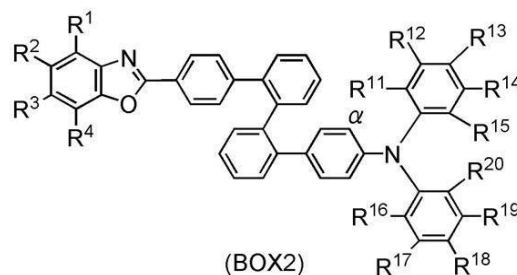
【0037】

また、本発明の一態様は、一般式(BOX2)で表されるベンゾオキサゾール誘導体である。

【0038】

【化5】

40



【0039】

(式中、 $R^1 \sim R^4$ は、それぞれ独立に、水素、炭素数1～4のアルキル基、無置換の炭

50

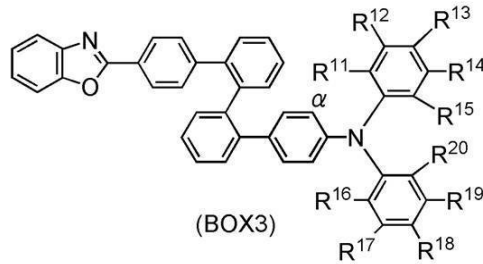
素数 6 ~ 10 のアリール基、ハロゲンのいずれかを表し、 $R^{11} \sim R^{20}$ は、それぞれ独立に、水素、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、置換又は無置換の炭素数 6 ~ 13 のアリール基のいずれかを表す。 R^{11} と結合したベンゼン環上の炭素と R^{15} と結合したベンゼン環上の炭素と R^{20} と結合したベンゼン環上の炭素とは、直接結合してカルバゾール骨格を形成してもよい。)

【0040】

また、本発明の一態様は、一般式 (BOX3) で表されるベンゾオキサゾール誘導体である。

【0041】

【化6】



【0042】

(式中、 $R^{11} \sim R^{20}$ は、それぞれ独立に、水素、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、置換又は無置換の炭素数 6 ~ 13 のアリール基のいずれかを表す。 R^{11} と結合したベンゼン環上の炭素と R^{15} と結合したベンゼン環上の炭素と R^{20} と結合したベンゼン環上の炭素とは、直接結合してカルバゾール骨格を形成してもよい。)

【0043】

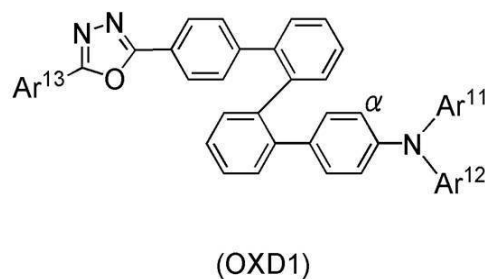
また、一般式 (G1) で表される有機半導体材料において、電子輸送性を有する骨格 (E_A) として、オキサジアゾール骨格を選択することができる。

【0044】

よって、本発明の一態様は一般式 (OXD1) で表されるオキサジアゾール誘導体である。

【0045】

【化7】



【0046】

(式中、 Ar^{11} 、 Ar^{12} 及び Ar^{13} は、炭素数 6 ~ 13 の置換または無置換のアリール基を表す。また、 Ar^{11} と Ar^{12} は、それぞれ互いに直接結合していてもよく、あるいは、酸素、硫黄、又は窒素のいずれかを介して結合していてもよい。)

【0047】

一般式 (OXD1) で表されるオキサジアゾール誘導体のうち、一般式 (OXD2) で表されるオキサジアゾール誘導体であることが好ましい。

【0048】

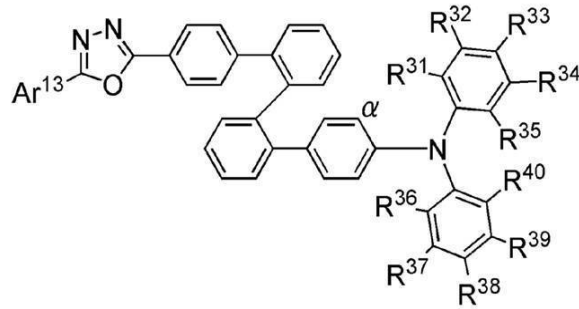
10

20

30

40

【化 8】



(OXD2)

【0049】

(式中、 $R^{31} \sim R^{40}$ は、水素、炭素数 1~4 のアルキル基、又は炭素数 6~13 の無置換のアリール基のいずれかを表し、 Ar^{13} は、炭素数 6~13 の置換又は無置換のアリール基を表す。また、 R^{31} と結合したベンゼン環上の炭素と R^{35} と結合したベンゼン環上の炭素と R^{40} と結合したベンゼン環上の炭素は、それぞれ互いに直接結合してカルバゾール骨格を形成していてもよい。)

【0050】

また、一般式 (OXD2) で表されるオキサジアゾール誘導体のうち、 Ar^{13} は、置換又は無置換のフェニル基、置換又は無置換のナフチル基のいずれかを表すのが好ましく、 Ar^{13} が無置換のフェニル基、または、無置換の 1-ナフチル基、または無置換の 2-ナフチル基のいずれかを表すのがより好ましい。

【0051】

上述した有機半導体材料は、バイポーラ性を有しているため、発光素子や有機トランジスタなどの有機デバイスに好適に用いることができる。

【0052】

よって、本発明の一態様は、上述した有機半導体材料を用いた発光素子である。

【0053】

特に、上述した有機半導体材料は、大きな三重項励起エネルギーを有するため、燐光性化合物とともに発光素子に用いた場合、より顕著な効果を有する。

【0054】

よって、本発明の一態様は、一对の電極間に、上述した有機半導体材料を含み、発光層に燐光性化合物を含む発光素子である。

【0055】

また、上述した有機半導体材料はバイポーラ性を有するため、発光層に用いることが好ましい。

【0056】

また、上述した発光素子を有する発光装置も本発明の一態様の範疇に含めるものである。

【0057】

なお、本明細書中における発光装置とは、画像表示デバイス、発光デバイス、もしくは光源 (照明装置を含む) を含む。また、発光素子が形成されたパネルにコネクタ、例えば FPC (Flexible printed circuit) もしくは TAB (Tape Automated Bonding) テープもしくは TCP (Tape Carrier Package) が取り付けられたモジュール、TAB テープや TCP の先にプリント配線板が設けられたモジュール、または発光素子に COG (Chip On Glass) 方式により IC (集積回路) が直接実装されたモジュールも全て発光装置を含むものとする。

【0058】

10

20

30

40

50

また、上述の発光素子を表示部に用いた電子機器も本発明の一態様の範疇に含めるものとする。したがって、本発明の一態様である電子機器は、表示部を有し、表示部は、上述した発光素子を用いている。

【発明の効果】

【0059】

本発明の一態様である有機半導体材料は、新規なバイポーラ性の材料である。

【0060】

また、本発明の一態様であるベンゾオキサゾール誘導体は、新規なバイポーラ性の材料である。

【0061】

10

また、本発明の一態様であるオキサジアゾール誘導体は、新規なバイポーラ性の材料である。

【0062】

また、本発明の一態様を適用することにより、発光素子の駆動電圧を低減することができる。また、発光素子の発光効率を向上させることができる。

【0063】

また、本発明の一態様を適用することにより、発光素子、発光装置、電子機器の消費電力を低減することができる。

【図面の簡単な説明】

【0064】

20

【図1】本発明の一態様の発光素子を説明する図。

【図2】本発明の一態様の発光素子を説明する図。

【図3】本発明の一態様の発光素子を説明する図。

【図4】本発明の一態様の発光装置を説明する図。

【図5】本発明の一態様の発光装置を説明する図。

【図6】本発明の一態様の電子機器を説明する図。

【図7】本発明の一態様の電子機器を説明する図。

【図8】本発明の一態様の電子機器を説明する図。

【図9】本発明の一態様の電子機器を説明する図。

【図10】本発明の一態様の照明装置を説明する図。

30

【図11】本発明の一態様の照明装置を説明する図。

【図12】本発明の一態様の電子機器を説明する図。

【図13】2, 5 - ジフェニル - 1, 3, 4 - オキサジアゾールのC V測定結果を示す図

。

【図14】2, 5 - ジフェニル - 1, 3, 4 - オキサジアゾールのC V測定結果を示す図

。

【図15】2 - フェニルベンゾオキサゾールのC V測定結果を示す図。

【図16】2 - フェニルベンゾオキサゾールのC V測定結果を示す図。

【図17】9 - フェニル - 9H - カルバゾールのC V測定結果を示す図。

【図18】9 - フェニル - 9H - カルバゾールのC V測定結果を示す図。

40

【図19】トリフェニルアミンのC V測定結果を示す図。

【図20】トリフェニルアミンのC V測定結果を示す図。

【図21】Z - CzPO11のC V測定結果を示す図。

【図22】Z - CzPO11のC V測定結果を示す図。

【図23】Z - CzPO11の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを示す図。

【図24】Z - DP h A O 1 1のC V測定結果を示す図。

【図25】Z - DP h A O 1 1のC V測定結果を示す図。

【図26】Z - DP h A O 1 1の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを示す図。

【図27】Z - CzPBOxのC V測定結果を示す図。

【図28】Z - CzPBOxのC V測定結果を示す図。

50

- 【図29】 Z - CzPBOxの吸収スペクトルおよび発光スペクトルを示す図。
 【図30】 Z - DP h A B O xのC V測定結果を示す図。
 【図31】 Z - DP h A B O xのC V測定結果を示す図。
 【図32】 Z - DP h A B O xの吸収スペクトルおよび発光スペクトルを示す図。
 【図33】 実施例の発光素子を説明する図。
 【図34】 実施例3で作製した発光素子の電流密度 - 輝度特性を示す図。
 【図35】 実施例3で作製した発光素子の電圧 - 輝度特性を示す図。
 【図36】 実施例3で作製した発光素子の輝度 - 電流効率特性を示す図。
 【図37】 実施例3で作製した発光素子の発光スペクトルを示す図。
 【図38】 実施例4で作製した発光素子の電流密度 - 輝度特性を示す図。
 【図39】 実施例4で作製した発光素子の電圧 - 輝度特性を示す図。
 【図40】 実施例4で作製した発光素子の輝度 - 電流効率特性を示す図。
 【図41】 実施例4で作製した発光素子の発光スペクトルを示す図。
 【図42】 実施例5で作製した発光素子の電流密度 - 輝度特性を示す図。
 【図43】 実施例5で作製した発光素子の電圧 - 輝度特性を示す図。
 【図44】 実施例5で作製した発光素子の輝度 - 電流効率特性を示す図。
 【図45】 実施例5で作製した発光素子の発光スペクトルを示す図。
 【図46】 実施例6で作製した発光素子の電流密度 - 輝度特性を示す図。
 【図47】 実施例6で作製した発光素子の電圧 - 輝度特性を示す図。
 【図48】 実施例6で作製した発光素子の輝度 - 電流効率特性を示す図。
 【図49】 実施例6で作製した発光素子の発光スペクトルを示す図。
 【図50】 Z - Cz P O 1 1の¹H NMRチャートを示す図。
 【図51】 Z - DP h P A 1 1の¹H NMRチャートを示す図。
 【図52】 Z - Cz P B O xの¹H NMRチャートを示す図。
 【図53】 Z - DP h A B O xの¹H NMRチャートを示す図。

10

20

【発明を実施するための形態】

【0065】

以下、本発明の実施の態様について図面を用いて詳細に説明する。但し、本発明は以下の説明に限定されず、本発明の趣旨及びその範囲から逸脱することなくその形態及び詳細を様々に変更し得ることは当業者であれば容易に理解される。従って、本発明は以下に示す実施の形態の記載内容に限定して解釈されるものではない。

30

【0066】

(実施の形態1)

本実施の形態では、本発明の一態様である有機半導体材料について説明する。

【0067】

本実施の形態の有機半導体材料は、Z型のクアテルフェニレン骨格([1, 1': 2', 1'': 2'', 1''': 2'''])クアテルフェニル-4-4'''-ジイル基)を有している。Z型のクアテルフェニレン骨格の一方の端のベンゼン環には、パラ位に電子受容ユニットが結合し、他方の端のベンゼン環には、パラ位にホール受容ユニットが結合している。

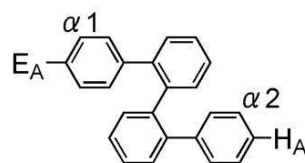
40

【0068】

より具体的には、一般式(G1)で表される有機半導体材料である。

【0069】

【化9】



(G1)

50

【0070】

(式中、 E_A は電子受容ユニット、 H_A はホール受容ユニットであり、1の炭素と E_A は結合して環を形成していてもよく、2の炭素と H_A は結合して環を形成していてもよい。)

【0071】

このような構造を有する有機半導体材料は、分子内に電子受容ユニットおよびホール受容ユニットを有するため、電子もホールも輸送することができるバイポーラ性の材料である。

【0072】

分子内に電子受容ユニットとホール受容ユニットを有する化合物であっても、バイポーラ性を有さない場合もあるが、本実施の形態の有機半導体材料は、中心にオルト位で結合したベンゼン環を有するため、電子受容ユニットとホール受容ユニットが分子内で相互作用することを抑制し、バイポーラ性を実現していると考えられる。

【0073】

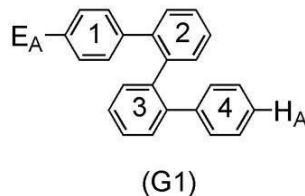
具体的には、下記に示す一般式(G1)において、ベンゼン環2およびベンゼン環3はオルト位で結合しているベンゼン環である。このオルト位で結合しているベンゼン環を2つ有することにより、この両端に結合している置換基同士の相互作用が抑制されることが考えられる。そのため、バイポーラ性を有する有機半導体材料が得られる。

【0074】

また、下記一般式(G1)で表される有機半導体材料は、オルト位で結合しているベンゼン環を2つ有することにより、構造がねじれ、共役が広がりにくいと考えられる。そのため、大きな分子量を有しながらも広いエネルギーギャップを有することができる。よって、発光素子の発光層におけるホスト材料として好適に用いることができる。また、大きい三重項励起エネルギーを有しているため、燐光性化合物とともに発光素子に好適に用いることができる。

【0075】

【化10】



【0076】

なお、オルト位に結合しているベンゼン環の数が増えていくと、合成方法が複雑となり、収率が低下してしまう。また、ベンゼン環の数が増えていくと電子受容ユニットとホール受容ユニットとの距離が離れてしまう。また、ベンゼン環の数が増えていくと、キャリアを受容するユニット以外の部位の割合が増加してしまうため、キャリアのホッピング距離が増えてしまい、キャリア輸送性が低下してしまう。よって、本発明の一態様は、これらの問題を考慮して最適な構造のバイポーラ性有機半導体を提供する。

【0077】

なお、電子受容ユニットとは、ホール受容ユニットよりも電子親和力が大きく、かつ、イオン化ポテンシャルが大きいものである。

【0078】

実際には、置換基自体の電子親和力やイオン化ポテンシャルを評価することは困難である。従って本明細書においては、電子受容ユニット E_A の電子親和力とイオン化ポテンシャルは、一般式(G1)で表される有機半導体材料における部分構造aでに相当する、一般式(G2A)で表される化合物を用いて評価する。同様に、ホール受容ユニット H_A の電子親和力とイオン化ポテンシャルは、一般式(G1)で表される有機半導体材料における

10

20

30

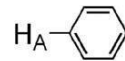
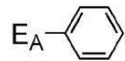
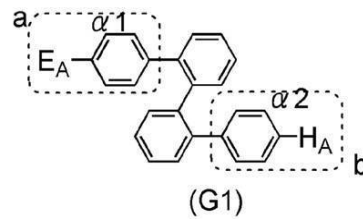
40

50

部分構造 b に相当する、一般式 (G 2 B) で表される化合物を用いて評価する。

【 0 0 7 9 】

【 化 1 1 】



10

【 0 0 8 0 】

つまり、本実施の形態の有機半導体材料は一般式 (G 1) で表され、一般式 (G 1) において、部分構造 a に相当する、一般式 (G 2 A) で表される化合物は、部分構造 b に相当する、一般式 (G 2 B) で表される化合物よりも、電子親和力が大きく、かつ、イオン化ポテンシャルが大きい。

【 0 0 8 1 】

また、本実施の形態の有機半導体材料は、中心にオルト位で結合したベンゼン環を有しており、電子受容ユニットとホール受容ユニットが分子内で相互作用することを抑制している。そのため、一般式 (G 1) で表される有機半導体材料の電子親和力は、一般式 (G 2 A) で表される化合物の電子親和力とほぼ同じ値となる。よって、一般式 (G 2 A) で表される化合物の電子親和力は 2 . 0 e V 以上 4 . 0 e V 以下であることが好ましい。特に、一般式 (G 1) で表される有機半導体材料を発光素子に用いる場合、発光素子に用いられる一般的な有機材料の電子親和力の値を考慮すると、一般式 (G 2 A) で表される化合物の電子親和力が 2 . 0 e V 以上 3 . 0 e V 以下であることがより好ましい。

20

【 0 0 8 2 】

同様に、一般式 (G 1) で表される有機半導体材料のイオン化ポテンシャルは、一般式 (G 2 B) で表される化合物のイオン化ポテンシャルとほぼ同じ値となる。よって、一般式 (G 2 B) で表される化合物のイオン化ポテンシャルは 4 . 5 e V 以上 6 . 5 e V 以下であることが好ましい。特に、一般式 (G 1) で表される有機半導体材料を発光素子に用いる場合、発光素子に用いられる一般的な有機材料のイオン化ポテンシャルの値を考慮すると、一般式 (G 2 B) で表される化合物のイオン化ポテンシャルは 5 . 0 e V 以上 6 . 0 e V 以下であることがより好ましい。

30

【 0 0 8 3 】

上述した構成とすることにより、広いバンドギャップの有機半導体材料を得ることができる。

【 0 0 8 4 】

電子受容ユニット E_A としては、大きい電子親和力を保有させるため、電子不足型ヘテロ芳香族置換基が好ましい。電子不足型ヘテロ芳香族置換基としては、含窒素 6 員芳香環基 (ただし、該含窒素 6 員芳香環は、芳香族炭化水素の縮環体および含窒素 6 員芳香環の縮環体を含む)、1, 2 - アゾール基 (ただし、該 1, 2 - アゾールは、芳香族炭化水素の縮環体および含窒素 6 員芳香環の縮環体を含む)、1, 3 - アゾール基 (ただし、該 1, 3 - アゾールは、芳香族炭化水素の縮環体および含窒素 6 員芳香環の縮環体を含む)、ポリアゾール基 (ただし、該ポリアゾールは、芳香族炭化水素の縮環体および含窒素 6 員芳香環の縮環体を含む)、などが挙げられる。特に、含窒素 6 員芳香環基、1, 3 - アゾール基、ポリアゾール基は、比較的大きな電子親和力を有すると共に、還元及び引き続く酸化の繰り返しに対して安定で、高い電子輸送性を示すため好ましい。

40

50

【 0 0 8 5 】

含窒素 6 員芳香環基としては、例えば、置換または無置換のピリジル基、置換または無置換のピラジニル基、置換または無置換のピリミジニル基、置換または無置換のピリダジニル基、置換または無置換の 1, 2, 4 - トリアジニル基、置換または無置換の 1, 3, 5 - トリアジニル基、置換または無置換のキノリル基、置換または無置換のイソキノリル基、置換または無置換の 1, 5 - ナフチリジニル基、置換または無置換の 1, 6 - ナフチリジニル基、置換または無置換の 1, 7 - ナフチリジニル基、置換または無置換の 1, 8 - ナフチリジニル基、置換または無置換の 2, 6 - ナフチリジニル基、置換または無置換の 2, 7 - ナフチリジニル基、置換または無置換のキノキサリニル基、置換または無置換のキナゾリニル基、置換または無置換のフタラジニル基、置換または無置換のシンノリニル基、置換または無置換のフェナントリジニル基、置換または無置換の 1, 10 - フェナントロリニル基、などが挙げられる。

10

【 0 0 8 6 】

また 1, 2 - アゾール基としては、例えば、置換または無置換のピラゾリル基、置換または無置換のイソオキサゾリル基、置換または無置換のイソチアゾリル基、置換または無置換のインダゾリル基、置換または無置換の 1, 2 - ベンゾイソオキサゾリル基、置換または無置換の 1, 2 - ベンゾイソチアゾリル基、置換または無置換の 2, 1 - ベンゾイソオキサゾリル基、置換または無置換の 2, 1 - ベンゾイソチアゾリル基、などが挙げられる。

【 0 0 8 7 】

また 1, 3 - アゾール基としては、例えば、置換または無置換のイミダゾリル基、置換または無置換のオキサゾリル基、置換または無置換のチアゾリル基、置換または無置換の 1 H - ベンゾイミダゾリル基、置換または無置換のベンゾオキサゾリル基、置換または無置換のベンゾチアゾリル基、イミダゾ [1, 2 - a] ピリジル基などが挙げられる。

20

【 0 0 8 8 】

またポリアゾール基としては、例えば、置換または無置換の 1 H - 1, 2, 3 - トリアゾリル基、置換または無置換の 1, 2, 5 - オキサジアゾリル基、置換または無置換の 1, 2, 5 - チアジアゾリル基、置換または無置換の 1 H - 1, 2, 4 - トリアゾリル基、置換または無置換の 4 H - 1, 2, 4 - トリアゾリル基、置換または無置換の 1, 2, 4 - オキサジアゾリル基、置換または無置換の 1, 2, 4 - チアジアゾリル基、置換または無置換の 1, 3, 4 - オキサジアゾリル基、置換または無置換の 1, 3, 4 - チアジアゾリル基、置換または無置換の 1 H - ベンゾトリアゾリル基、置換または無置換の 2 H - ベンゾトリアゾリル基、置換または無置換の 2, 1, 3 - ベンゾオキサジアゾリル基、置換または無置換の 2, 1, 3 - ベンゾチアジアゾリル基、などが挙げられる。

30

【 0 0 8 9 】

なお、上述した含窒素 6 員芳香環基、1, 2 - アゾール基、1, 3 - アゾール基、ポリアゾール基がさらに置換基を有する場合、その置換基としては、フェニル基、トリル基、ナフチル基のようなアリール基や、ピリジル基、キノリル基、イソキノリル基のようなヘテロアリール基や、メチル基、エチル基、イソプロピル基、tert - ブチル基のようなアルキル基などが挙げられる。

40

【 0 0 9 0 】

以上で述べたような電子受容ユニット E_A を適宜選択することで、a で表される部分構造を形成することができる。

【 0 0 9 1 】

電子受容ユニット E_A として、含窒素 6 員芳香環基（ただし、該含窒素 6 員芳香環は、芳香族炭化水素の縮環体および含窒素 6 員芳香環の縮環体を含む）を適用した場合の部分構造 a の具体例としては、4 - (2 - ピリジル) フェニル基、4 - (5 - メチル - 2 - ピリジル) フェニル基、4 - (6 - メチル - 2 - ピリジル) フェニル基、4 - (3 - フェニル - 2 - ピリジル) フェニル基、4 - (6 - フェニル - 2 - ピリジル) フェニル基、4 - (3 - ピリジル) フェニル基、4 - (6 - メチル - 3 - ピリジル) フェニル基、4 - (2,

50

2' : 6' , 2'' - テルピリジン - 4' - イル) フェニル基、4 - (3 - フェニルピラジン - 2 - イル) フェニル基、4 - (3, 5, 6 - トリフェニルピラジン - 2 - イル) フェニル基、4 - (ピリミジン - 4 - イル) フェニル基、4 - (6 - メチルピリミジン - 4 - イル) フェニル基、4 - (6 - フェニルピリミジン - 4 - イル) フェニル基、4 - (ピリミジン - 5 - イル) フェニル基、4 - (2, 4, 6 - トリフェニルピリミジン - 5 - イル) フェニル基、4 - (6 - フェニルピリダジン - 3 - イル) フェニル基、4 - (3 - メチル - 1, 2, 4 - トリアジン - 6 - イル) フェニル基、4 - (4, 6 - ジフェニル - 1, 3, 5 - トリアジン - 2 - イル) フェニル基、4 - (3 - キノリル) フェニル基、4 - (8 - キノリル) フェニル基、4 - (2, 4 - ジメチル - 8 - キノリル) フェニル基、4 - (4 - イソキノリル) フェニル基、4 - (1, 5 - ナフチリジン - 3 - イル) フェニル基、4 - (1, 6 - ナフチリジン - 4 - イル) フェニル基、4 - (5, 7 - ジメチル - 1, 6 - ナフチリジン - 4 - イル) フェニル基、4 - (5 - メチル - 1, 6 - ナフチリジン - 2 - イル) フェニル基、4 - (1, 7 - ナフチリジン - 8 - イル) フェニル基、4 - (1, 8 - ナフチリジン - 2 - イル) フェニル基、4 - (3 - メチル - 1, 8 - ナフチリジン - 2 - イル) フェニル基、4 - (1, 8 - ナフチリジン - 3 - イル) フェニル基、4 - (2 - メチル - 1, 8 - ナフチリジン - 3 - イル) フェニル基、4 - (1, 8 - ナフチリジン - 4 - イル) フェニル基、4 - (2, 6 - ナフチリジン - 1 - イル) フェニル基、4 - (2, 7 - ナフチリジン - 3 - イル) フェニル基、4 - (キノキサリン - 2 - イル) フェニル基、4 - (3 - メチルキノキサリン - 2 - イル) フェニル基、4 - (3 - イソプロピルキノキサリン - 2 - イル) フェニル基、4 - (3 - フェニルキノキサリン - 2 - イル) フェニル基、4 - (キナゾリン - 4 - イル) フェニル基、4 - (フタラジン - 1 - イル) フェニル基、4 - (3 - フェニルシンノリン - 4 - イル) フェニル基、4 - (フェナントリジン - 6 - イル) フェニル基、4 - (1, 10 - フェナントロリン - 2 - イル) フェニル基、4 - (1, 10 - フェナントロリン - 3 - イル) フェニル基、などが挙げられる。

10

20

【0092】

また、電子受容ユニット E_A として、1, 2 - アゾール基 (ただし、該 1, 2 - アゾールは、芳香族炭化水素の縮環体および含窒素 6 員芳香環の縮環体を含む) を適用した場合の部分構造 a の具体例としては、4 - (3, 5 - ジフェニル - 1H - ピラゾール - 1 - イル) フェニル基、4 - (1, 5 - ジフェニル - 1H - ピラゾール - 3 - イル) フェニル基、4 - (5 - フェニルイソキサゾール - 3 - イル) フェニル基、4 - (5 - フェニルイソチアゾール - 3 - イル) フェニル基、4 - (3 - メチル - 1, 2 - ベンゾイソキサゾール - 5 - イル) フェニル基、4 - (3 - メチル - 1, 2 - ベンゾイソチアゾール - 5 - イル) フェニル基、4 - (2, 1 - ベンゾイソキサゾール - 3 - イル) フェニル基、4 - (2, 1 - ベンゾイソチアゾール - 3 - イル) フェニル基、などが挙げられる。

30

【0093】

また、電子受容ユニット E_A として、1, 3 - アゾール基 (ただし、該 1, 2 - アゾールは、芳香族炭化水素の縮環体および含窒素 6 員芳香環の縮環体を含む) を適用した場合の部分構造 a の具体例としては、4 - (2, 4 - ジフェニル - 1H - イミダゾール - 1 - イル) フェニル基、4 - (2 - フェニルオキサゾール - 4 - イル) フェニル基、4 - (2 - フェニルチアゾール - 4 - イル) フェニル基、4 - (1 - メチル - 1H - ベンゾイミダゾール - 2 - イル) フェニル基、4 - (1 - エチル - 1H - ベンゾイミダゾール - 2 - イル) フェニル基、4 - (1 - フェニル - 1H - ベンゾイミダゾール - 2 - イル) フェニル基、4 - (2 - フェニル - 1H - ベンゾイミダゾール - 1 - イル) フェニル基、4 - (ベンゾオキサゾール - 2 - イル) フェニル基、4 - (5 - フェニルベンゾオキサゾール - 2 - イル) フェニル基、4 - [5 - (p - トリル) ベンゾオキサゾール - 2 - イル] フェニル基、4 - (ベンゾチアゾール - 2 - イル) フェニル基、4 - (5 - フェニルベンゾチアゾール - 2 - イル) フェニル基、4 - [5 - (p - トリル) ベンゾチアゾール - 2 - イル] フェニル基、4 - (イミダゾ [1, 2 - a] ピリジン - 2 - イル) フェニル基、4 - (5 - フェニルイミダゾ [1, 2 - a] ピリジン - 2 - イル) フェニル基、などが挙げられる。

40

50

【0094】

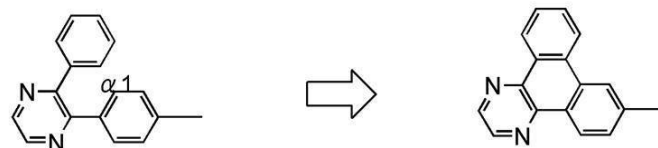
また、電子受容ユニット E_A として、ポリアゾール基（ただし、該ポリアゾールは、芳香族炭化水素の縮環体および含窒素6員芳香環の縮環体を含む）を適用した場合の部分構造 a の具体例としては、4 - (1 - フェニル - 1H - 1, 2, 3 - トリアゾール - 4 - イル) フェニル基、4 - (4 - フェニル - 1, 2, 5 - オキサジアゾール - 3 - イル) フェニル基、4 - (4 - フェニル - 1, 2, 5 - チアジアゾール - 3 - イル) フェニル基、4 - (5 - メチル - 1 - フェニル - 1H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3 - イル) フェニル基、4 - (4, 5 - ジフェニル - 4H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3 - イル) フェニル基、4 - [4 - (4 - sec - ブチルフェニル) - 5 - フェニル - 4H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3 - イル] フェニル基、4 - (3, 5 - ジフェニル - 4H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 4 - イル) フェニル基、4 - [4 - フェニル - 5 - (2 - ピリジル) - 4H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3 - イル] フェニル基、4 - [5 - (2 - ピリジル) - 4 - (4 - ピリジル) - 4H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3 - イル] フェニル基、4 - [5 - フェニル - 4 - (8 - キノリル) - 4H - 1, 2, 4 - トリアゾール - 3 - イル] フェニル基、4 - (3 - フェニル - 1, 2, 4 - オキサジアゾール - 5 - イル) フェニル基、4 - (3 - フェニル - 1, 2, 4 - チアジアゾール - 5 - イル) フェニル基、4 - (5 - フェニル - 1, 3, 4 - オキサジアゾール - 2 - イル) フェニル基、4 - [5 - (4 - tert - ブチルフェニル) - 1, 3, 4 - オキサジアゾール - 2 - イル] フェニル基、4 - [5 - (2 - ナフチル) - 1, 3, 4 - オキサジアゾール - 2 - イル] フェニル基、4 - {5 - [4 - (1 - ナフチル) フェニル] - 1, 3, 4 - オキサジアゾール - 2 - イル} フェニル基、4 - {5 - [4 - (2 - ナフチル) フェニル] - 1, 3, 4 - オキサジアゾール - 2 - イル} フェニル基、4 - (5 - フェニル - 1, 3, 4 - チアジアゾール - 2 - イル) フェニル基、4 - [5 - (4 - tert - ブチルフェニル) - 1, 3, 4 - チアジアゾール - 2 - イル] フェニル基、4 - [5 - (2 - ナフチル) - 1, 3, 4 - チアジアゾール - 2 - イル] フェニル基、4 - {5 - [4 - (1 - ナフチル) フェニル] - 1, 3, 4 - チアジアゾール - 2 - イル} フェニル基、4 - {5 - [4 - (2 - ナフチル) フェニル] - 1, 3, 4 - チアジアゾール - 2 - イル} フェニル基、などが挙げられる。

【0095】

なお、部分構造 a において、電子受容ユニット E_A は 1 の炭素と結合して環を形成してもよいが、その具体的な一例を下記に示す。下記に示すように、電子受容ユニット E_A として 3 - フェニルピラジン - 2 - イル基を選択すると、部分構造 a は 4 - (3 - フェニルピラジン - 2 - イル) フェニル基（構造式 (11)）となる。この 4 - (3 - フェニルピラジン - 2 - イル) フェニル基（構造式 (11)）において、電子受容ユニット E_A と 1 の炭素とが結合した場合、部分構造 a はジベンゾ [f, h] キノキサリン - 7 - イル基（構造式 (12)）となる。したがって、本実施の形態の部分構造 a としては、ジベンゾ [f, h] キノキサリン - 7 - イル基も含むものとする。これは一例であり、他の電子受容ユニット E_A を選択した場合も同様である。

【0096】

【化12】



(11)

4 - (3 - フェニルピラジン - 2 - イル) フェニル基

(12)

ジベンゾ [f, h] キノキサリン - 7 - イル基

【0097】

10

20

30

40

50

ホール受容ユニットとしては、小さいイオン化ポテンシャルを保有させるため、電子過剰型ヘテロ芳香族置換基、またはジアリールアミノ基が好ましい。なお、ジアリールアミノ基は、アリール基同士が直接結合してカルバゾール環を形成するか、窒素または酸素または硫黄を介して結合して環を形成してもよい。特に、ジアリールアミノ基（アリール基同士が直接結合してカルバゾール環を形成するか、窒素または酸素または硫黄を介して結合して環を形成する場合を含む）は、比較的小さいイオン化ポテンシャルを示すと共に、酸化及び引き続く還元繰り返しに対して安定で、高いホール輸送性を示すため好ましい。

【0098】

電子過剰型ヘテロ芳香族置換基としては、モノヘテロ5員芳香環基（ただし、該モノヘテロ5員芳香環は、芳香族炭化水素の縮環体および含窒素6員芳香環の縮環体を含む）が挙げられ、具体的には、置換または無置換のピロリル基、置換または無置換のフリル基、置換または無置換のチエニル基、置換または無置換のインドリル基、置換または無置換のベンゾフリル基、置換または無置換のベンゾチエニル基、置換または無置換のイソインドリル基、置換または無置換のイソベンゾフリル基、置換または無置換のイソベンゾチエニル基、などが挙げられる。

【0099】

またジアリールアミノ基としては、置換または無置換のジフェニルアミノ基、置換または無置換のN-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ基、置換または無置換のN-(2-ナフチル)-N-フェニルアミノ基、などが挙げられる。さらにジアリールアミノ基は、アリール基同士が直接結合してカルバゾール環を形成するか、窒素または酸素または硫黄を介して結合して環を形成してもよく、その場合のホール受容ユニットは、置換または無置換の9H-カルバゾール-9-イル基、置換または無置換の10H-フェノキサジン-10-イル基、置換または無置換の10H-フェノチアジン-10-イル基、置換または無置換の5,10-ジヒドロフェナジン-5-イル基となる。

【0100】

なお、上述したモノヘテロ5員芳香環基やジアリールアミノ基がさらに置換基を有する場合、その置換基としては、フェニル基、トリル基、ナフチル基のようなアリール基や、ピリジル基、キノリル基、イソキノリル基のようなヘテロアリール基や、メチル基、エチル基、イソプロピル基、t-ブチル基のようなアルキル基などが挙げられる。

【0101】

以上で述べたようなホール受容ユニットを適宜選択することで、bで表される部分構造を形成することができる。

【0102】

ホール受容ユニットH_Aとして、モノヘテロ5員芳香環基（ただし、該モノヘテロ5員芳香環は、芳香族炭化水素の縮環体および含窒素6員芳香環の縮環体を含む）を適用した場合の部分構造bの具体例としては、4-(1-メチル-5-フェニル-1H-ピロール-2-イル)フェニル基、4-(1,5-ジフェニル-1H-ピロール-2-イル)フェニル基、4-(2,5-ジフェニル-1H-ピロール-1-イル)フェニル基、4-(5-フェニル-2-フリル)フェニル基、4-(5-フェニル-2-チエニル)フェニル基、4-(1H-インドール-1-イル)フェニル基、4-(2-メチル-1H-インドール-1-イル)フェニル基、4-(2-フェニル-1H-インドール-1-イル)フェニル基、4-(1-フェニル-1H-インドール-2-イル)フェニル基、4-(2-ベンゾフリル)フェニル基、4-(2-ベンゾチエニル)フェニル基、4-(2,3-ジフェニルイソインドール-1-イル)フェニル基、4-(3-フェニルイソフリル)フェニル基、4-(3-フェニルイソチエニル)フェニル基、などが挙げられる。

【0103】

ホール受容ユニットH_Aとして、ジアリールアミノ基（アリール基同士が直接結合してカルバゾール環を形成するか、窒素または酸素または硫黄を介して結合して環を形成する場合を含む）を適用した場合の部分構造bの具体例としては、4-(ジフェニルアミノ)フ

10

20

30

40

50

エニル基、4 - [N - (ビフェニル - 4 - イル) - N - フェニルアミノ] フェニル基、4 - { N - [4 - (1 - ナフチル) フェニル] - N - フェニルアミノ } フェニル基、4 - { N - [4 - (2 - ナフチル) フェニル] - N - フェニルアミノ } フェニル基、4 - { N , N - ビス [4 - (1 - ナフチル) フェニル] アミノ } フェニル基、4 - [N - (1 - ナフチル) - N - フェニルアミノ] フェニル基、4 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル基、4 - (3 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル基、4 - [3 - (1 - ナフチル) - 9 H - カルバゾール - 9 - イル] フェニル基、4 - [3 - (2 - ナフチル) - 9 H - カルバゾール - 9 - イル] フェニル基、4 - (10 - フェニル - 5 , 10 - ジヒドロフェナジン - 5 - イル) フェニル基、4 - (10 H - フェノキサジン - 10 - イル) フェニル基、4 - (10 H - フェノチアジン - 10 - イル) フェニル基、などが挙げられる。

10

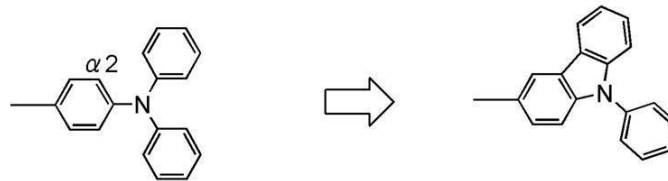
【 0 1 0 4 】

なお、部分構造 b において、ホール受容ユニット H_A は 2 の炭素と結合して環を形成してもよいが、その具体的な一例を下記に示す。下記に示すように、ホール受容ユニット H_A としてジフェニルアミノ基を選択すると、部分構造 b は 4 - (ジフェニルアミノ) フェニル基 (構造式 (2 1)) となる。この 4 - (ジフェニルアミノ) フェニル基 (構造式 (2 1)) において、ホール受容ユニット H_A と 2 の炭素とが結合した場合、骨格 b は 9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル基 (構造式 (2 2)) となる。したがって、本実施の形態の骨格 b としては、9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル基も含むものとする。これは一例であり、他のホール受容ユニット H_A を選択した場合も同様である。

20

【 0 1 0 5 】

【 化 1 3 】



(21)

4 - (ジフェニルアミノ)
フェニル基

(22)

9 - フェニル - 9 H -
カルバゾール - 3 - イル基

30

【 0 1 0 6 】

本実施の形態に係る有機半導体材料は電子輸送性もホール輸送性も有するバイポーラ性である。そのため、発光素子に適用した場合、駆動電圧を低減することができる。特に発光層に適用した場合に顕著な効果が得られる。

【 0 1 0 7 】

また、本実施の形態に係る有機半導体材料を発光層のホスト材料として用いた場合、発光領域が局所的に偏ることを抑制でき、発光性の高い物質の濃度消光や三重項 - 三重項消滅 (T - T アニヒレーション) による消光を抑制することができる。よって、高い発光効率を実現できる。

40

【 0 1 0 8 】

また、本実施の形態に係る有機半導体材料は、中心に、オルト位で結合しているベンゼン環を 2 つ有することにより、立体的に嵩高い構造となっている。立体的に嵩高い構造とすることで、膜にした場合に結晶化しにくい。よって、本実施の形態に係る有機半導体材料は薄膜状態においてアモルファス状態を維持しやすく、発光素子に好適である。

【 0 1 0 9 】

また、本実施の形態に係る有機半導体材料は、三重項励起エネルギーが大きい。よって、燐光性化合物とともに発光素子に用いることができる。特に、短波長の発光を示す燐光性

50

化合物とともに用いた場合に顕著な効果が得られる。

【0110】

また、本実施の形態に係る有機半導体材料は、エネルギーギャップ（最高被占有軌道準位（HOMO準位）と最低空軌道準位（LUMO準位）との差）が大きい。よって、蛍光性化合物とともに発光素子に用いることができる。特に、短波長の発光を示す蛍光性化合物とともに用いた場合に顕著な効果が得られる。

【0111】

また、本実施の形態の有機半導体材料は、電子受容ユニットとホール受容ユニットを共役が広がりにくいねじれたクアテルフェニレン骨格を介して結合しているため、三重項励起エネルギーを引き下げることなく、分子量を増加させることができ、且つ、立体的にかさ高い分子骨格を構築することが可能である。また、大きなバンドギャップを有する構造とすることができる。このような材料を発光素子に用いることで、膜質を安定化させることができる。

【0112】

（実施の形態2）

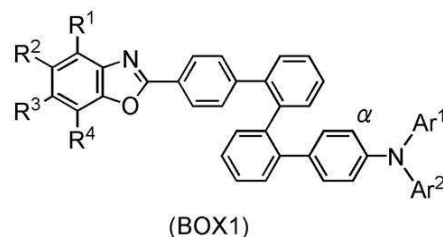
本実施の形態では、実施の形態1で示す本発明の一態様である有機半導体材料の一例として、一般式（G1）で示した構造を有するベンゾオキサゾール誘導体について説明する。

【0113】

本実施の形態に係るベンゾオキサゾール誘導体は、一般式（BOX1）で表されるベンゾオキサゾール誘導体である。

【0114】

【化14】



【0115】

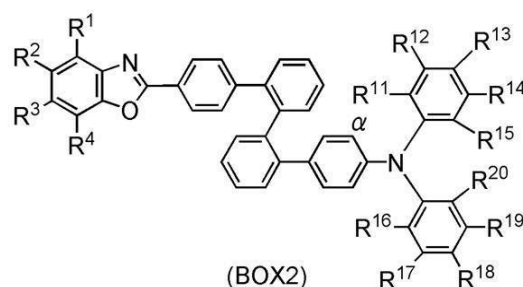
（式中、 Ar^1 、 Ar^2 は、それぞれ独立に、置換又は無置換の炭素数6～13のアリール基を表し、 $R^1 \sim R^4$ は、それぞれ独立に、水素、炭素数1～4のアルキル基、無置換の炭素数6～10のアリール基、ハロゲンのいずれかを表す。 Ar^1 と Ar^2 とは、直接、又は硫黄、酸素、もしくは窒素を介して結合していてもよい。）

【0116】

本実施の形態に係るベンゾオキサゾール誘導体は、一般式（BOX2）で表されるベンゾオキサゾール誘導体である。

【0117】

【化15】



10

20

30

40

50

【0118】

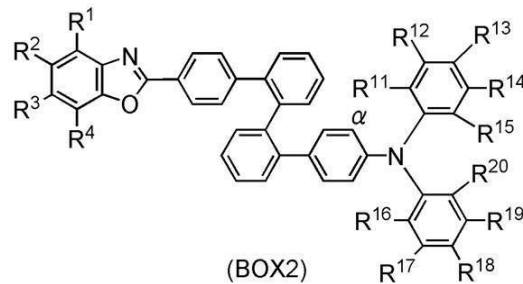
(式中、 $R^1 \sim R^4$ は、それぞれ独立に、水素、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、無置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基、ハロゲンのいずれかを表し、 $R^{11} \sim R^{20}$ は、それぞれ独立に、水素、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、置換又は無置換の炭素数 6 ~ 13 のアリール基のいずれかを表す。 R^{11} と結合したベンゼン環上の炭素と R^{15} と結合したベンゼン環上の炭素と R^{20} と結合したベンゼン環上の炭素とは、直接結合していてもよい。)

【0119】

本実施の形態に係るベンゾオキサゾール誘導体は、一般式 (BOX2) で表されるベンゾオキサゾール誘導体である。

【0120】

【化16】



10

20

【0121】

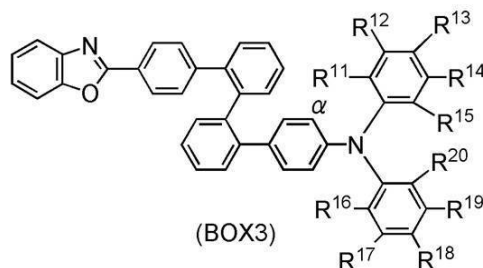
(式中、 $R^1 \sim R^4$ は、それぞれ独立に、水素、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、無置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基、ハロゲンのいずれかを表し、 $R^{11} \sim R^{20}$ は、それぞれ独立に、水素、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、置換又は無置換の炭素数 6 ~ 13 のアリール基のいずれかを表す。 R^{11} と結合したベンゼン環上の炭素と R^{15} と結合したベンゼン環上の炭素と R^{20} と結合したベンゼン環上の炭素とは、直接結合してカルバゾール骨格を形成してもよい。)

【0122】

本実施の形態に係るベンゾオキサゾール誘導体は、一般式 (BOX3) で表されるベンゾオキサゾール誘導体である。

【0123】

【化17】



30

40

【0124】

(式中、 $R^{11} \sim R^{20}$ は、それぞれ独立に、水素、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、置換又は無置換の炭素数 6 ~ 13 のアリール基のいずれかを表す。 R^{11} と結合したベンゼン環上の炭素と R^{15} と結合したベンゼン環上の炭素と R^{20} と結合したベンゼン環上の炭素とは、直接結合してカルバゾール骨格を形成してもよい。)

【0125】

なお、本明細書中で示すアリール基またはアリーレン基の炭素数は、主骨格の環を形成する炭素数を示しており、それに結合する置換基の炭素数を含むものではない。アリール基またはアリーレン基に結合する置換基としては、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、炭素数 6 ~

50

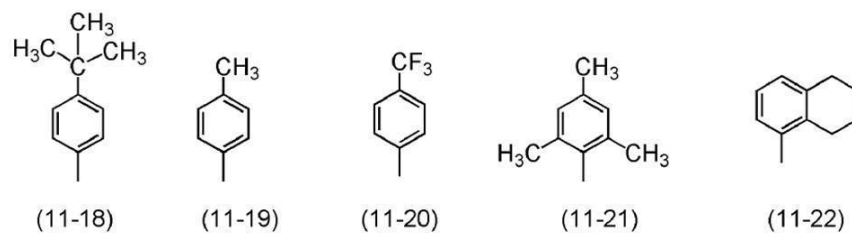
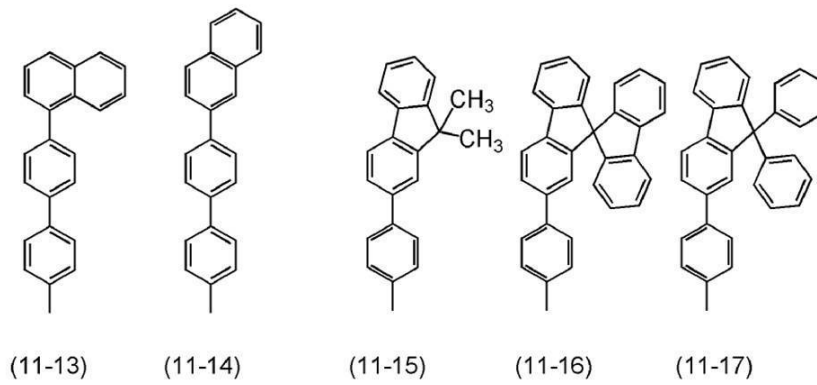
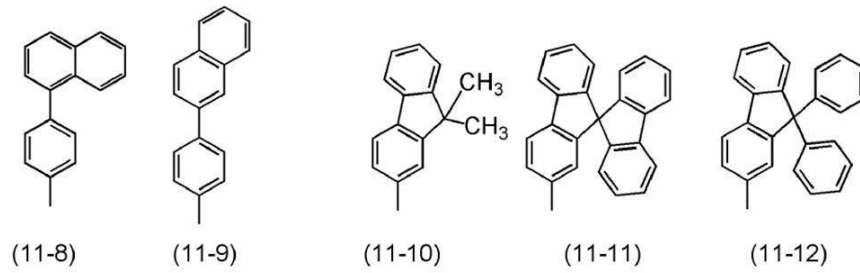
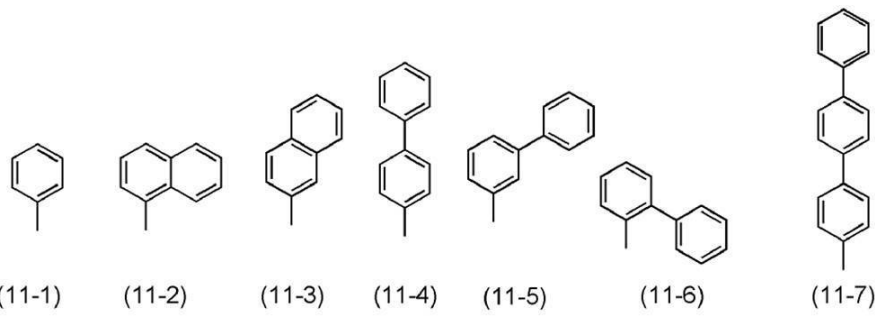
13のアリール基、または炭素数1のハロアルキル基が挙げられる。具体的には、メチル基、エチル基、プロピル基、ブチル基、フェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、またはトリフルオロメチル基等が挙げられる。また、アリール基またはアリーレン基が有する置換基は1つであっても複数であってもよく、アリール基またはアリーレン基が2つの置換基を有する場合、置換基同士が互いに結合して環を形成していてもよい。例えば、アリール基がフルオレニル基である場合、フルオレン骨格の9位の炭素が2つのフェニル基を有していてもよく、さらにその2つのフェニル基が互いに結合して、スピロ環構造を形成していてもよい。

【0126】

一般式(BOX1)~(BOX3)において、炭素数6~13のアリール基は、置換基を有していても良く、複数の置換基を有する場合、置換基同士が互いに結合して環を形成していても良い。また、1つの炭素が2つの置換基を有している場合も置換基同士が互いに結合して、スピロ環を形成していても良い。例えば、 Ar^1 、 Ar^2 で表される基の具体例として構造式(11-1)~構造式(11-22)で表される置換基が挙げられる。

【0127】

【化18】

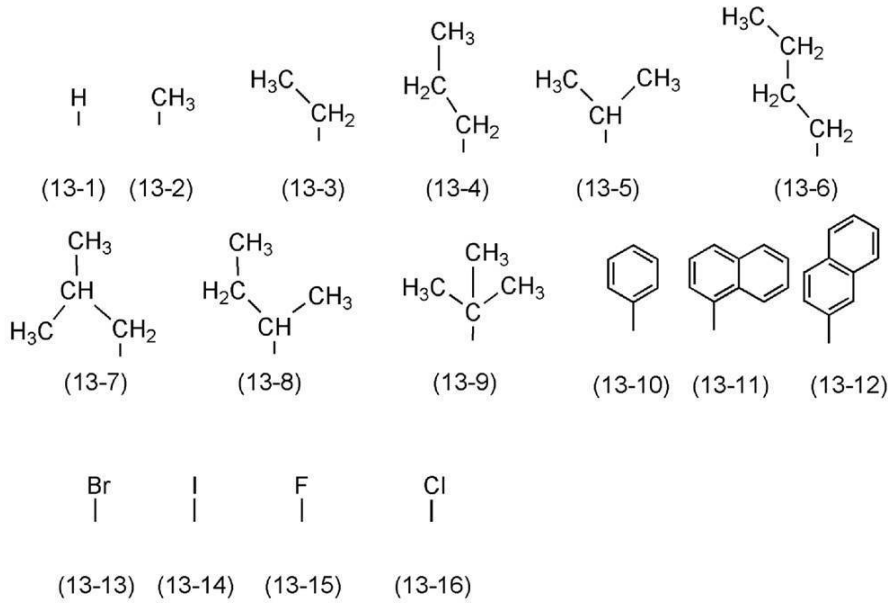


【0128】

例えば、 $R^1 \sim R^4$ 及び $R^{11} \sim R^{20}$ で表される基の具体例として構造式(13-1) ~ 構造式(13-16)で表される置換基が挙げられる。

【0129】

【化19】



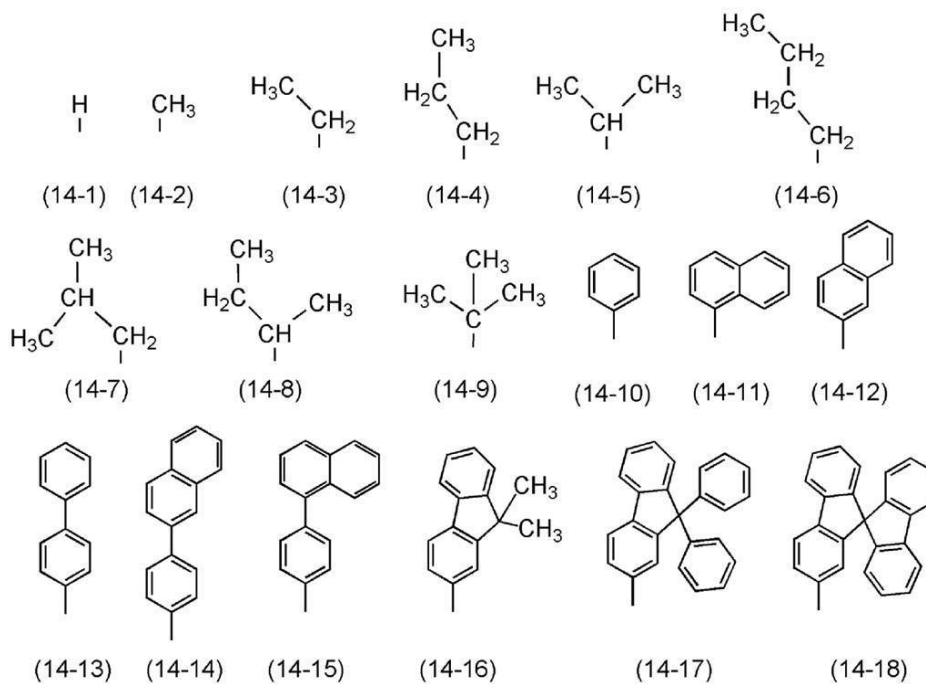
10

【0130】

例えば、 $R^{11} \sim R^{20}$ で表される基の具体例として構造式(14-1)～構造式(14-18)で表される置換基が挙げられる。

【0131】

【化20】



30

40

【0132】

また、一般式(BOX1)～(BOX3)で表されるベンゾオキサゾール誘導体において、合成および精製の容易さの点から、 Ar^1 、 Ar^2 はフェニル基であることが好ましい。

【0133】

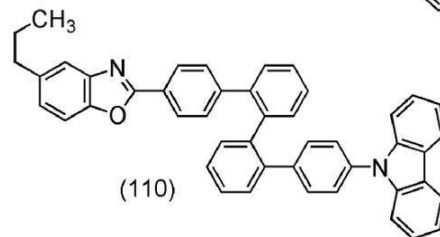
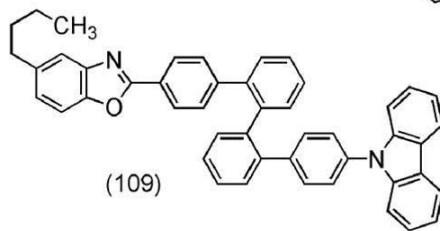
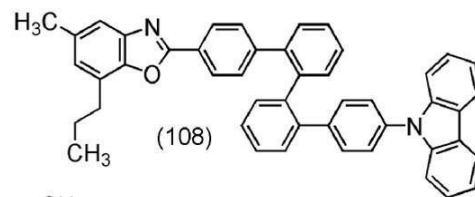
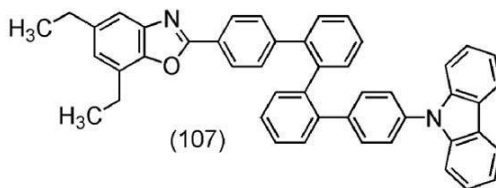
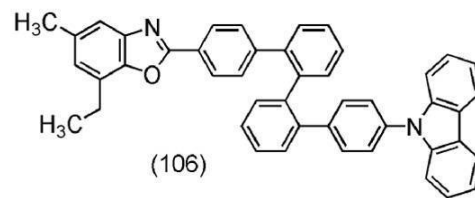
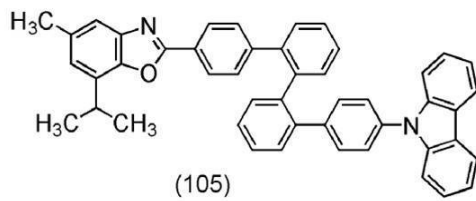
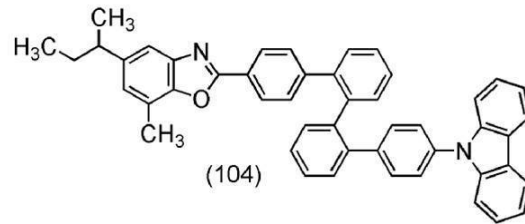
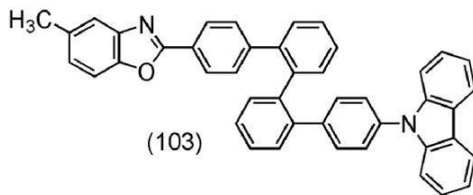
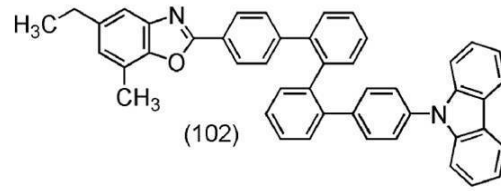
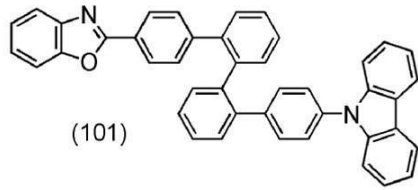
一般式(BOX1)～(BOX3)で表されるベンゾオキサゾール誘導体の具体例としては、構造式(101)～構造式(194)、構造式(201)～構造式(294)、構造式(301)～構造式(383)で表されるベンゾオキサゾール誘導体を挙げることで

50

きる。但し、本実施の形態はこれらに限定されない。

【 0 1 3 4 】

【 化 2 1 】



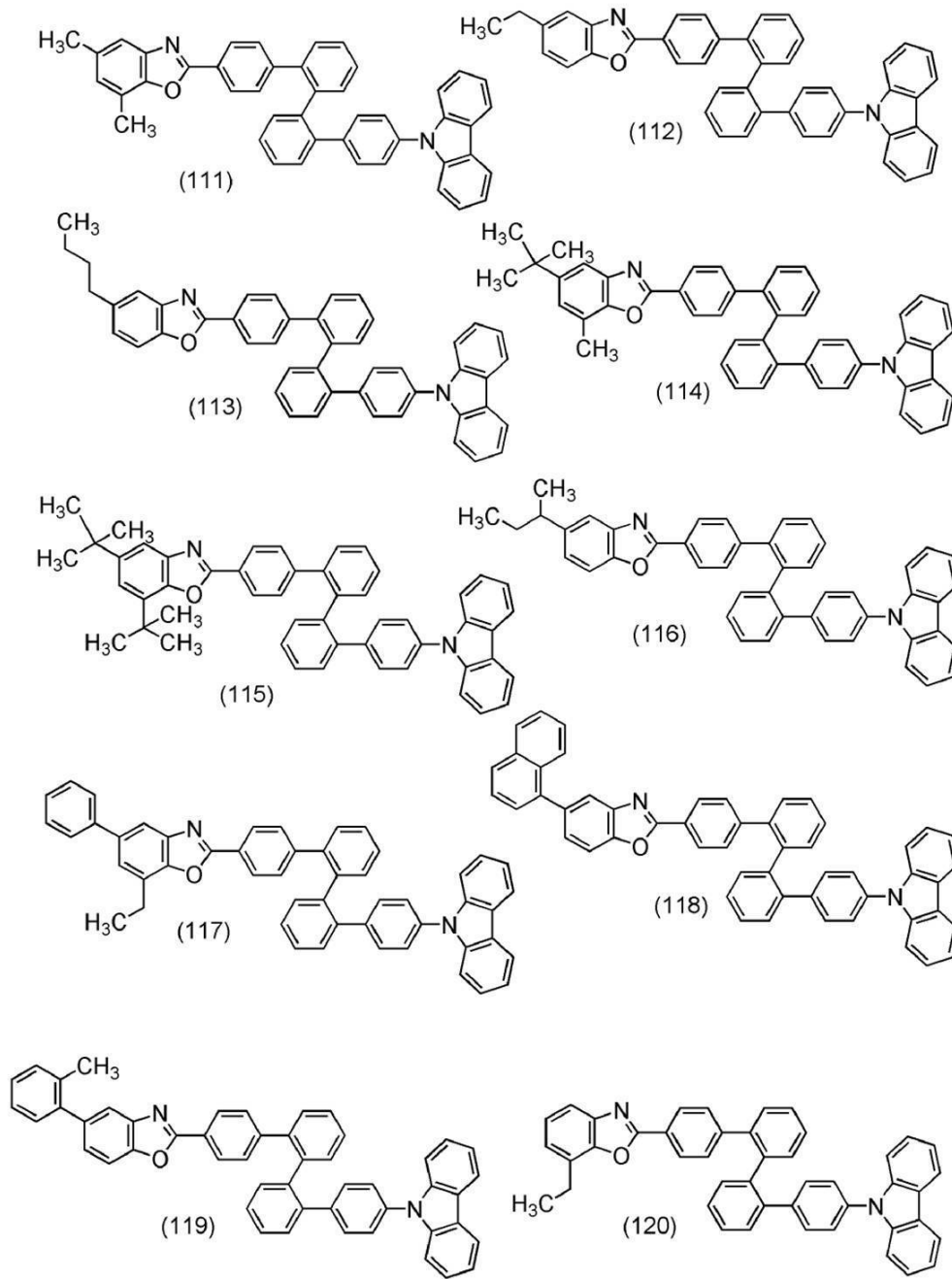
【 0 1 3 5 】

10

20

30

【化 2 2】



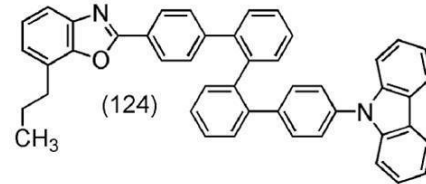
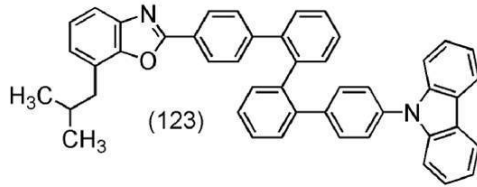
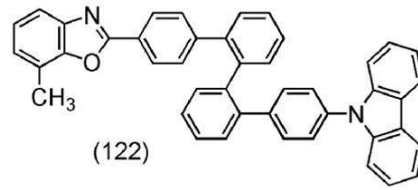
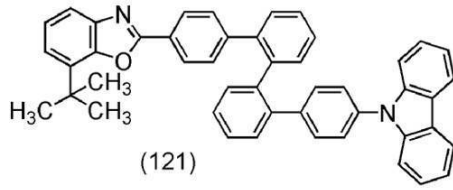
10

20

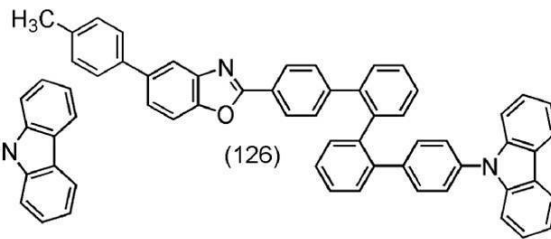
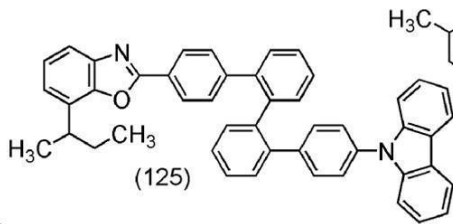
30

【 0 1 3 6】

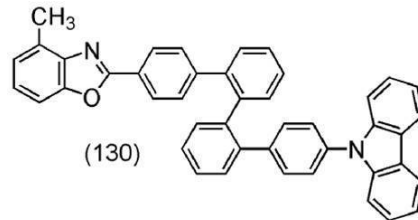
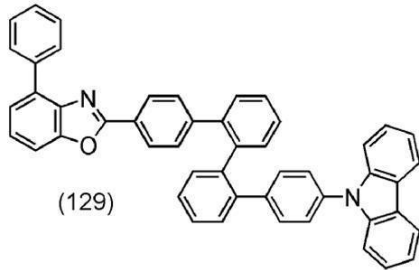
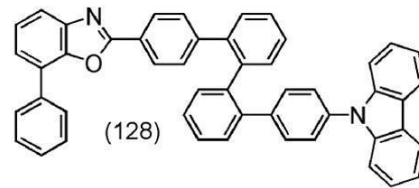
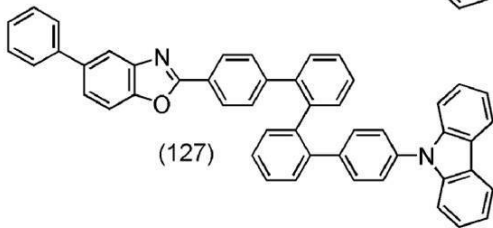
【化 2 3】



10



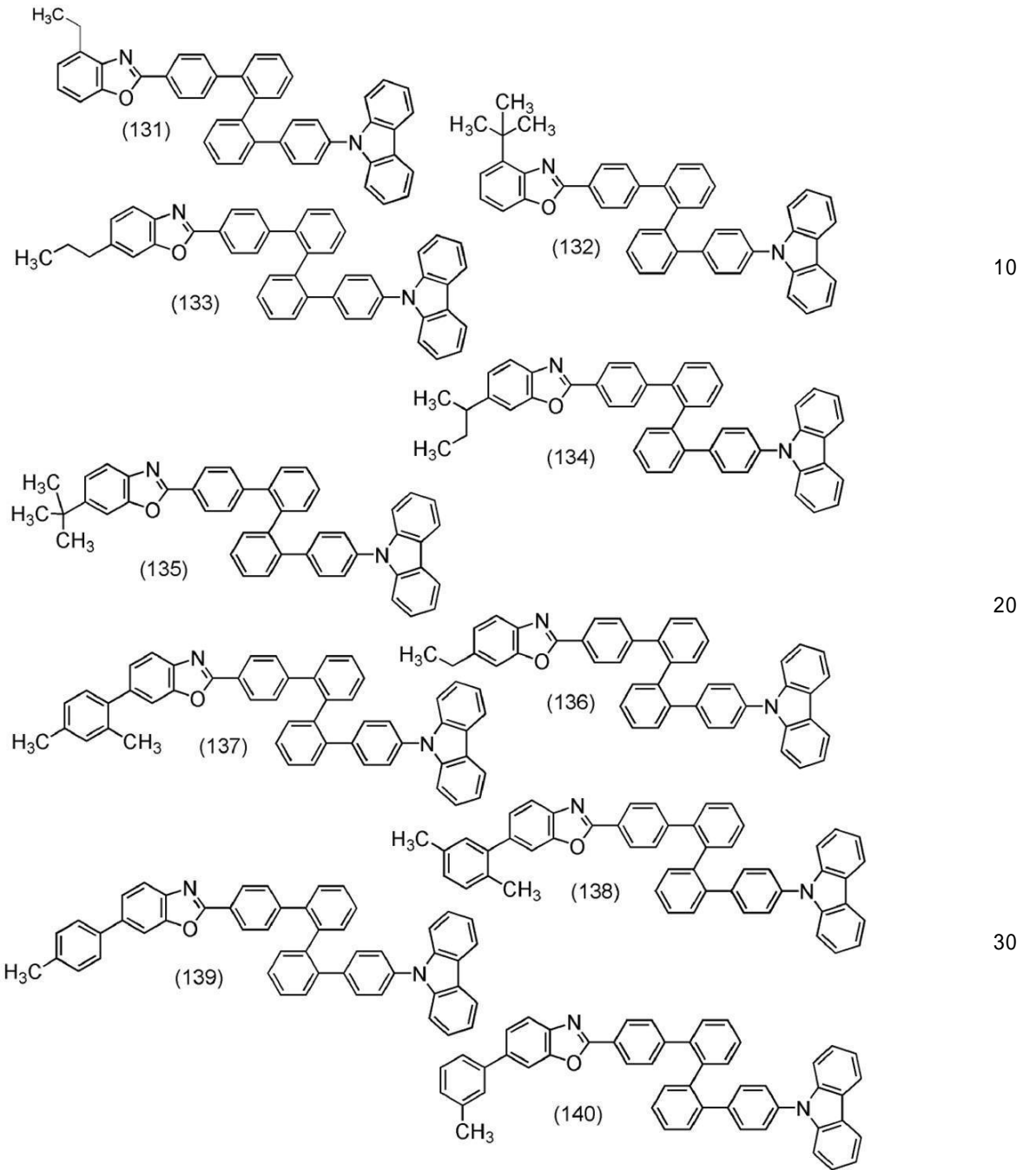
20



30

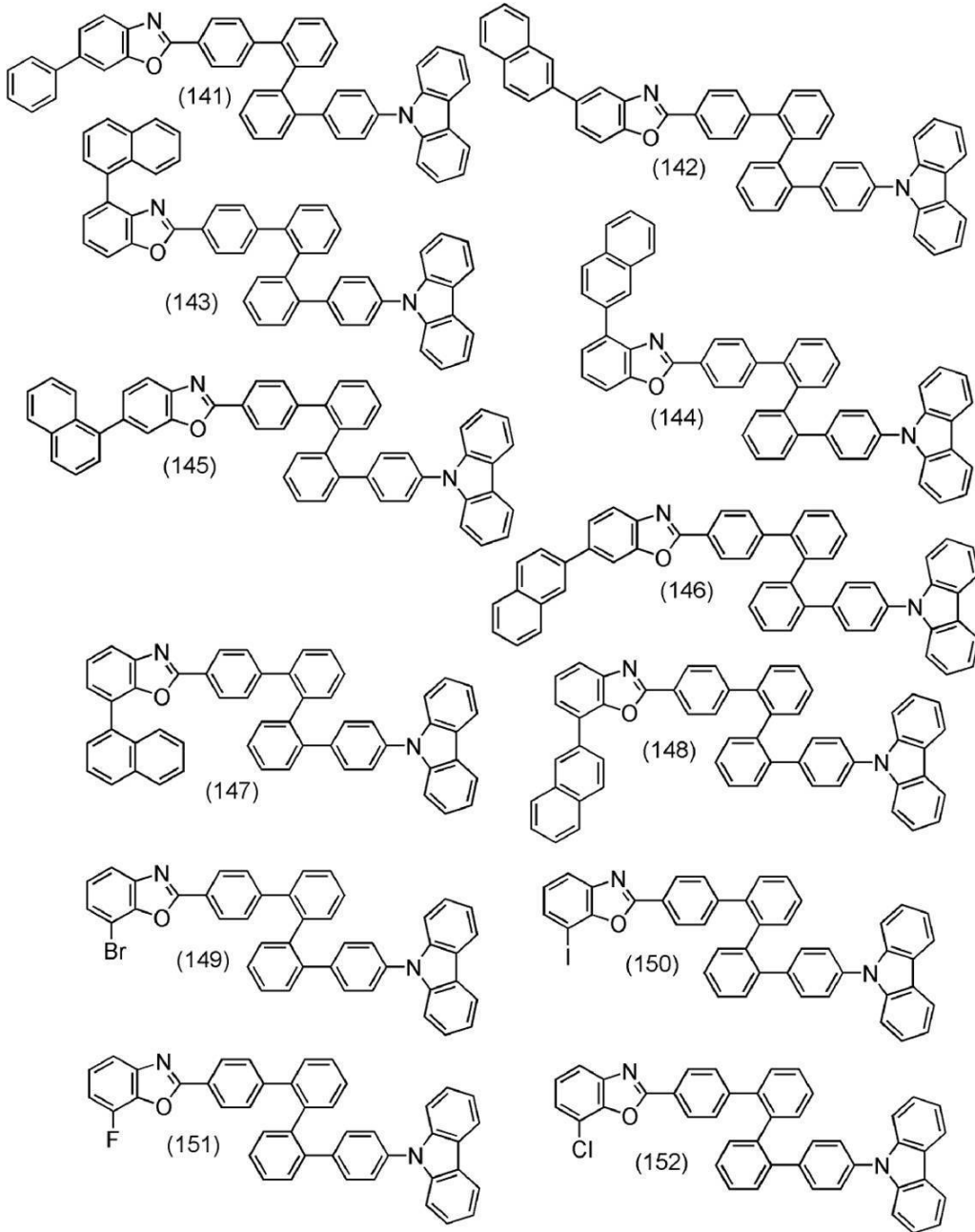
【 0 1 3 7 】

【化 2 4】



【 0 1 3 8 】

【化 2 5】



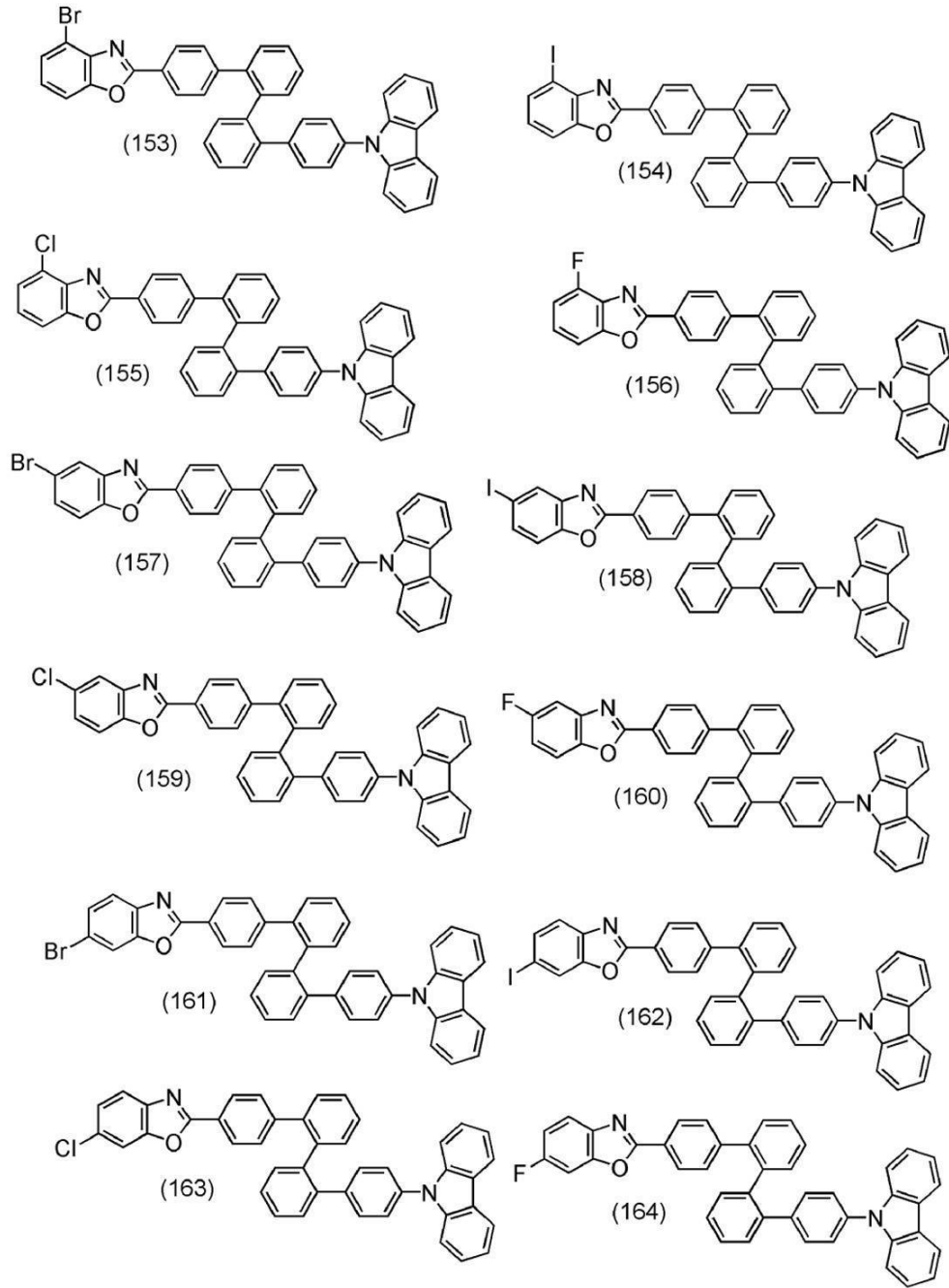
10

20

30

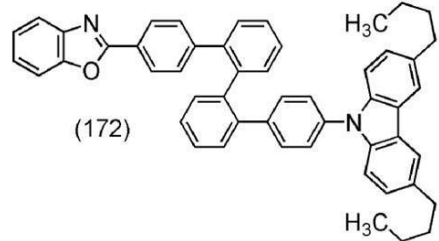
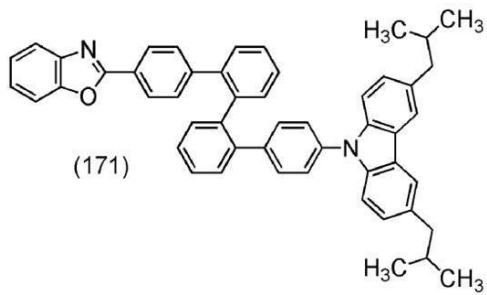
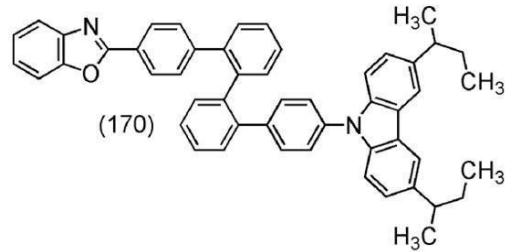
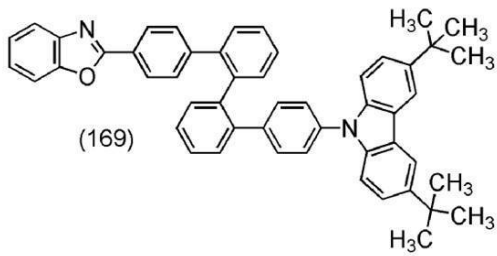
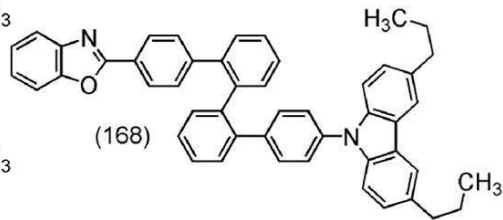
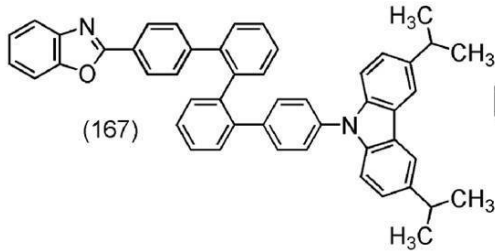
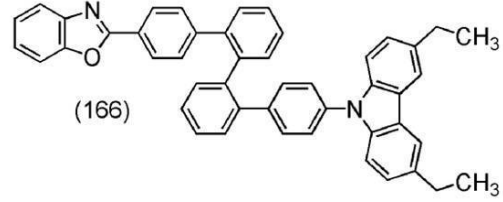
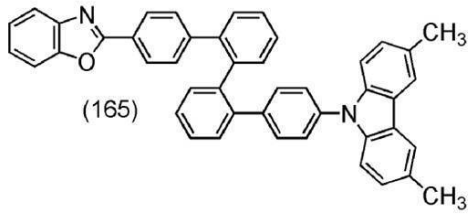
【 0 1 3 9 】

【化 2 6】



【 0 1 4 0】

【化 2 7】



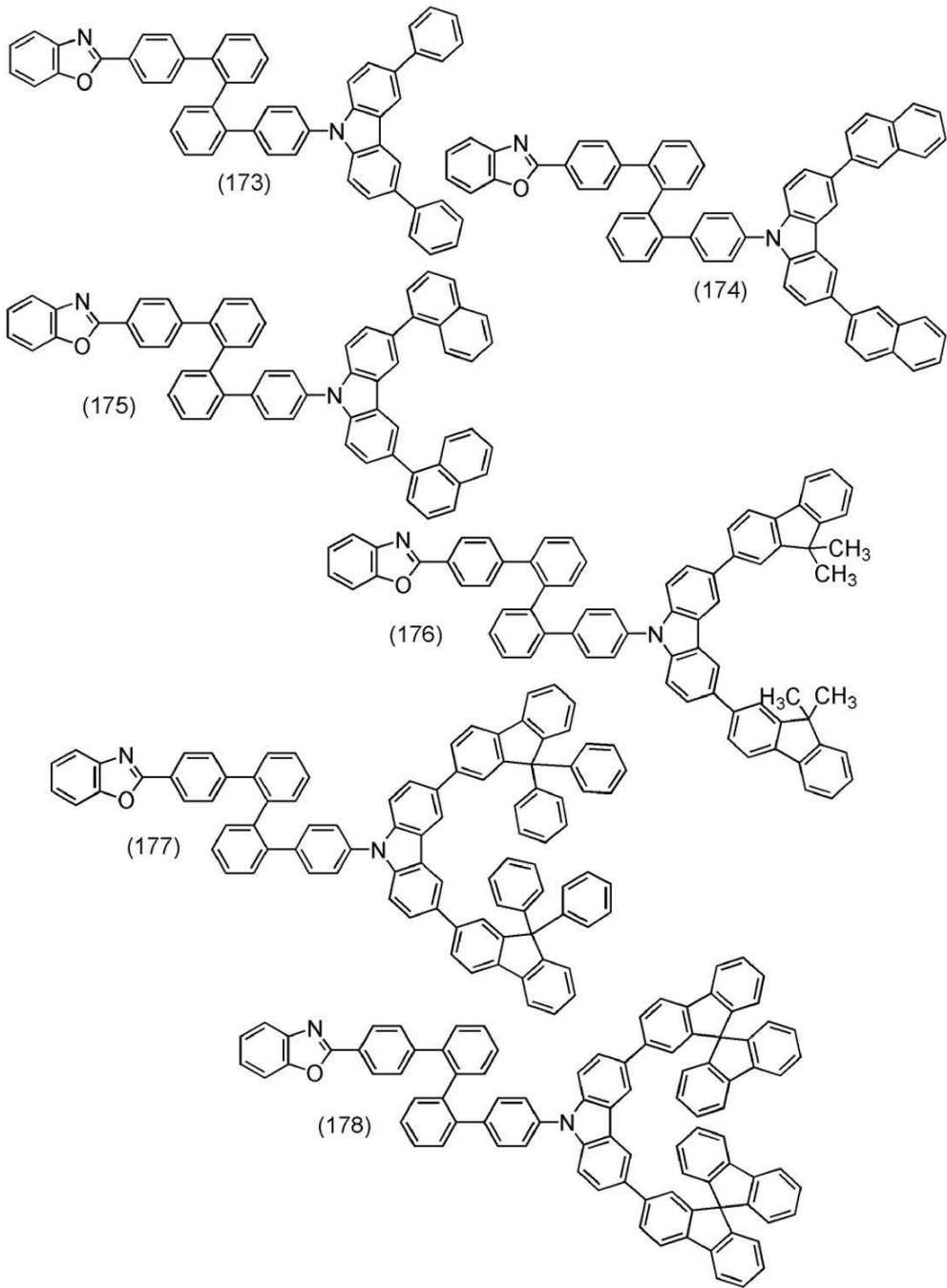
10

20

30

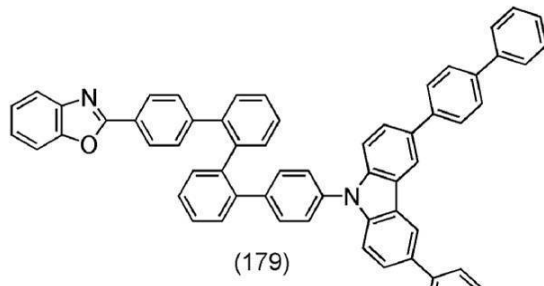
【 0 1 4 1 】

【化 2 8】

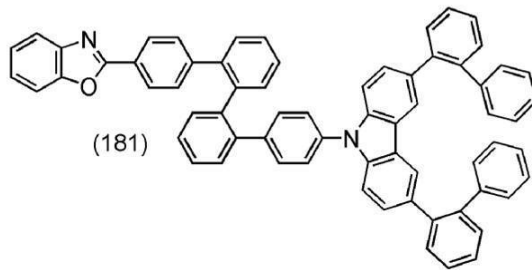
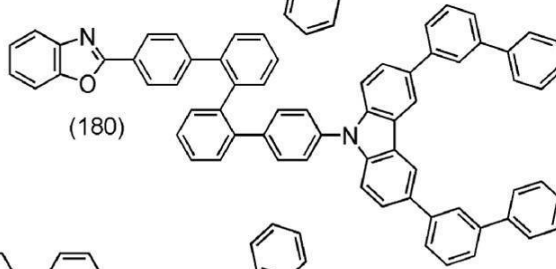


【 0 1 4 2 】

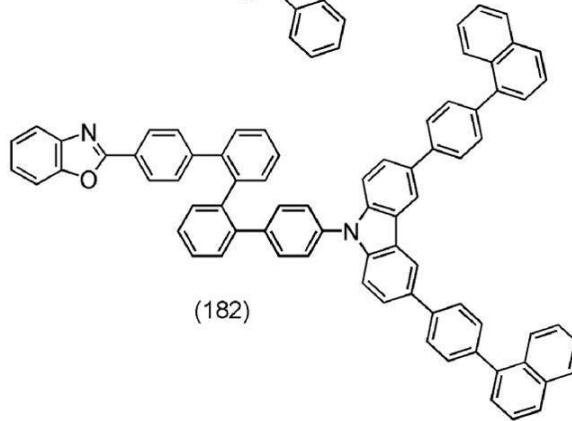
【化 2 9】



10



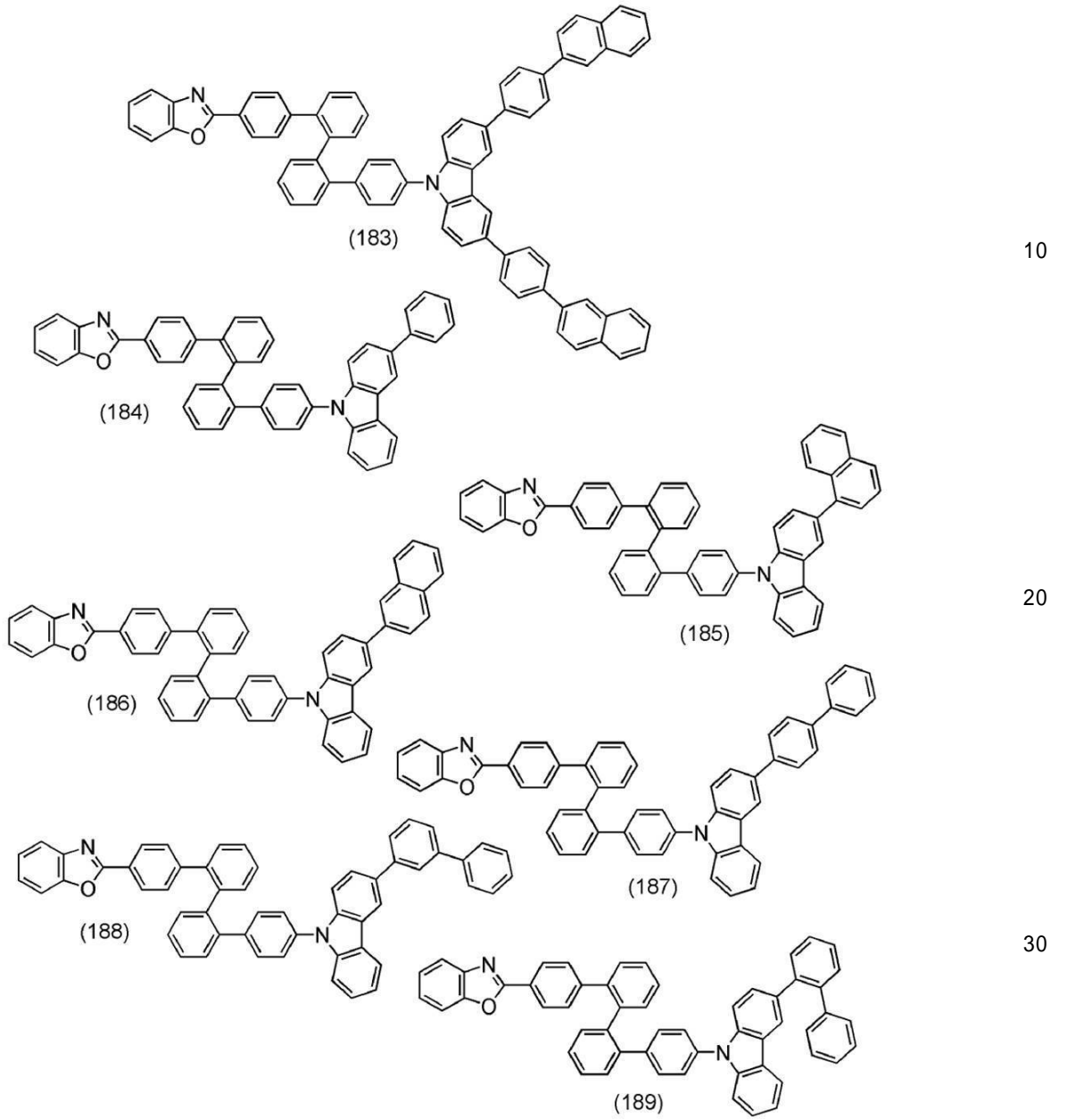
20



30

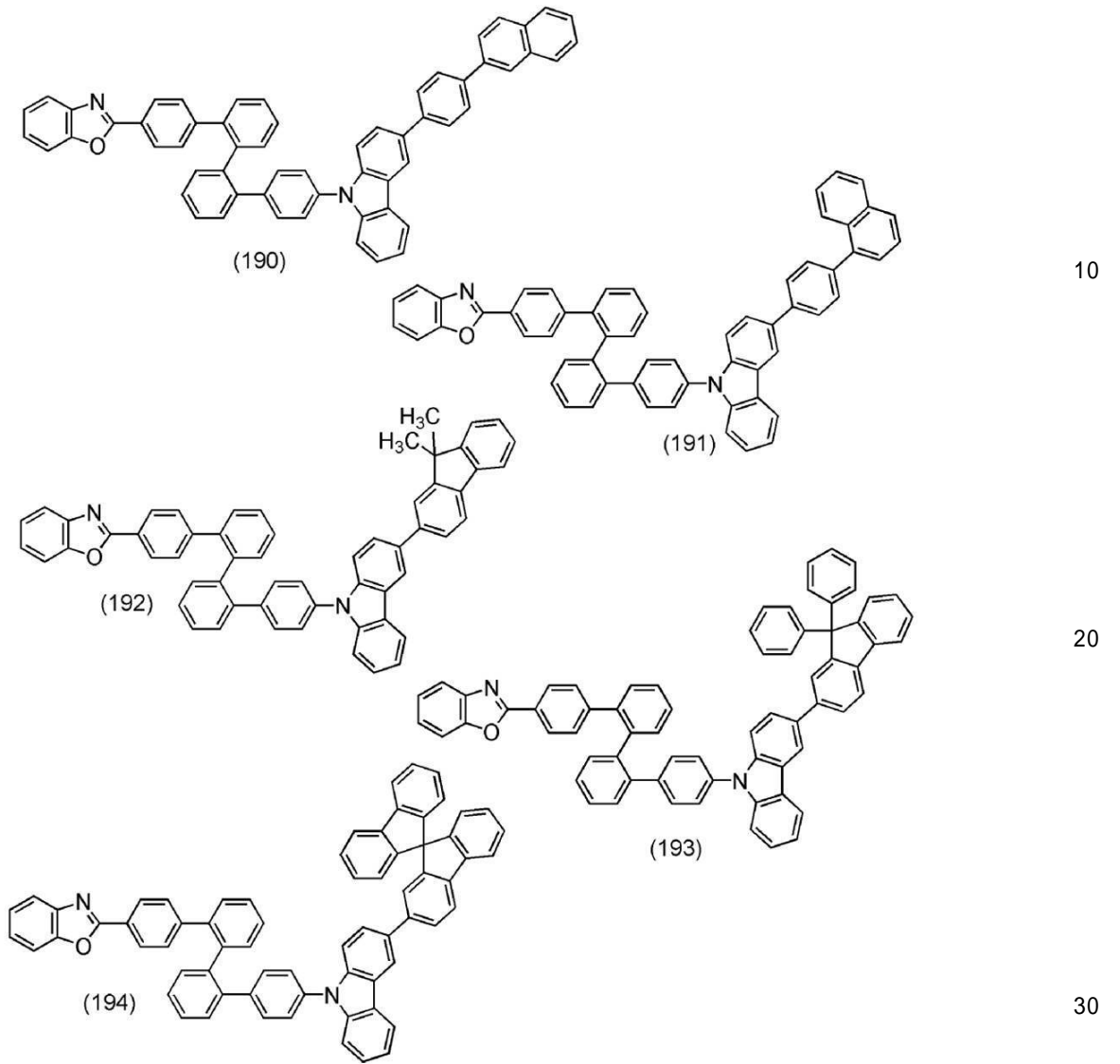
【 0 1 4 3 】

【化 3 0】



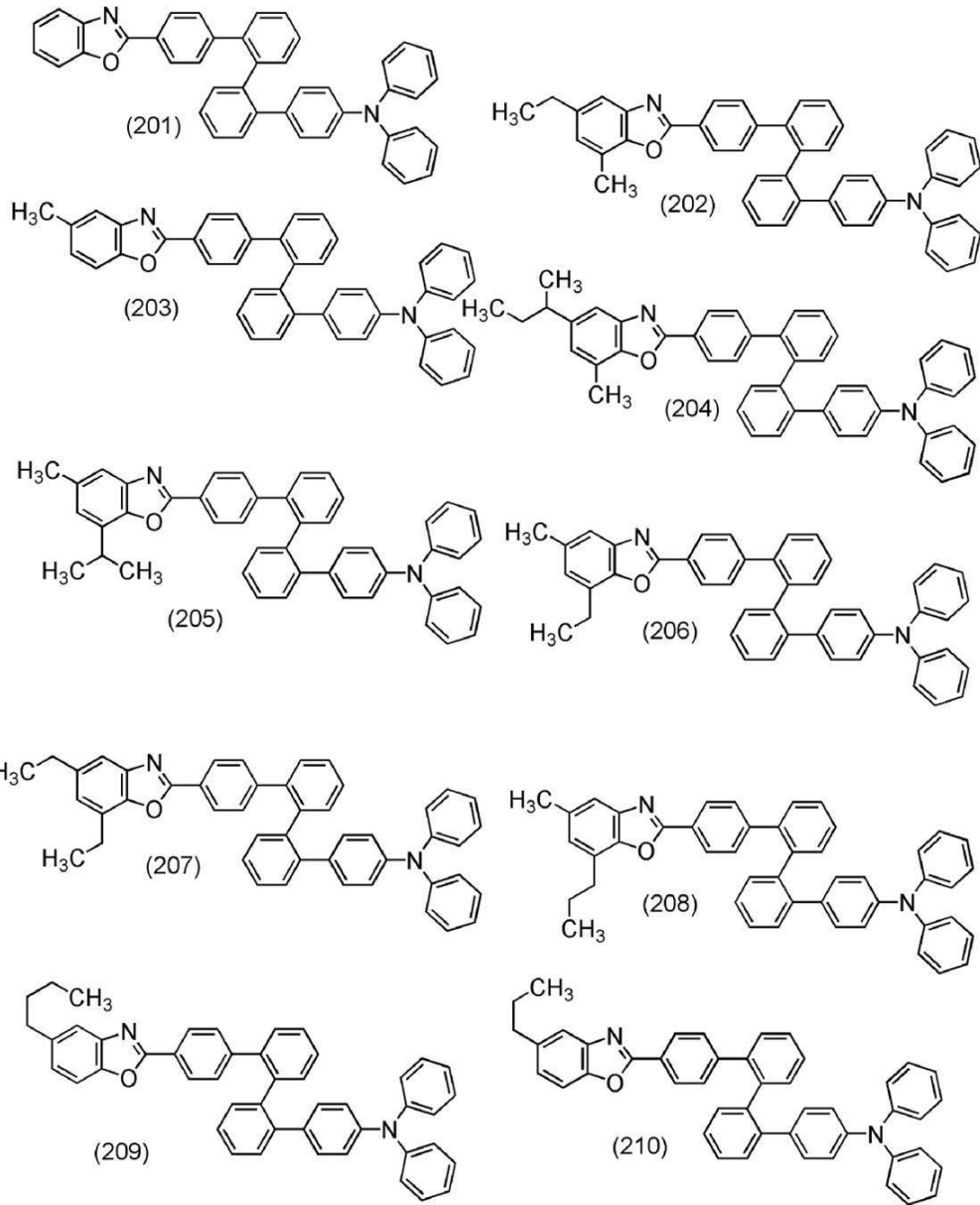
【 0 1 4 4】

【化 3 1】



【 0 1 4 5 】

【化 3 2】



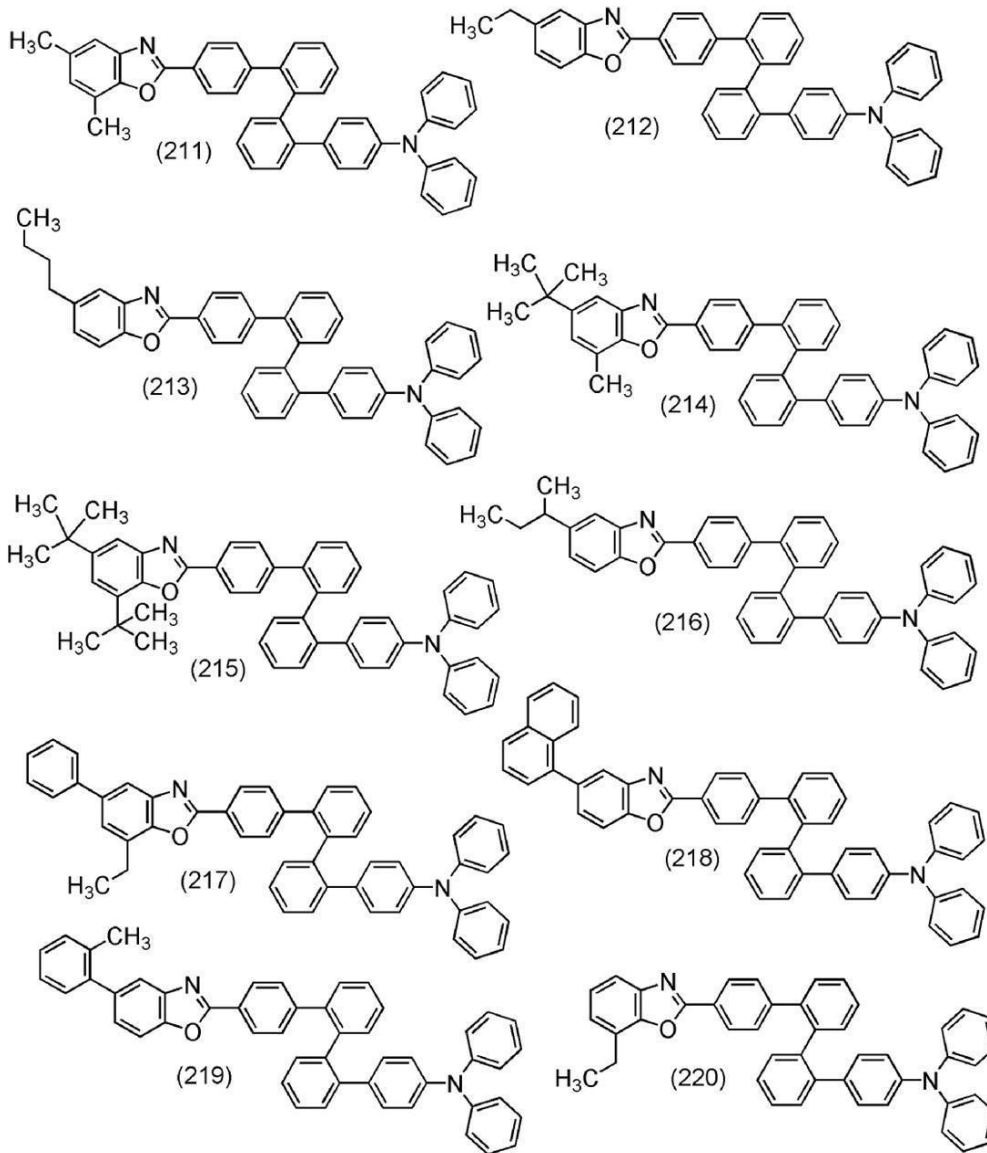
10

20

30

【 0 1 4 6 】

【化 3 3】



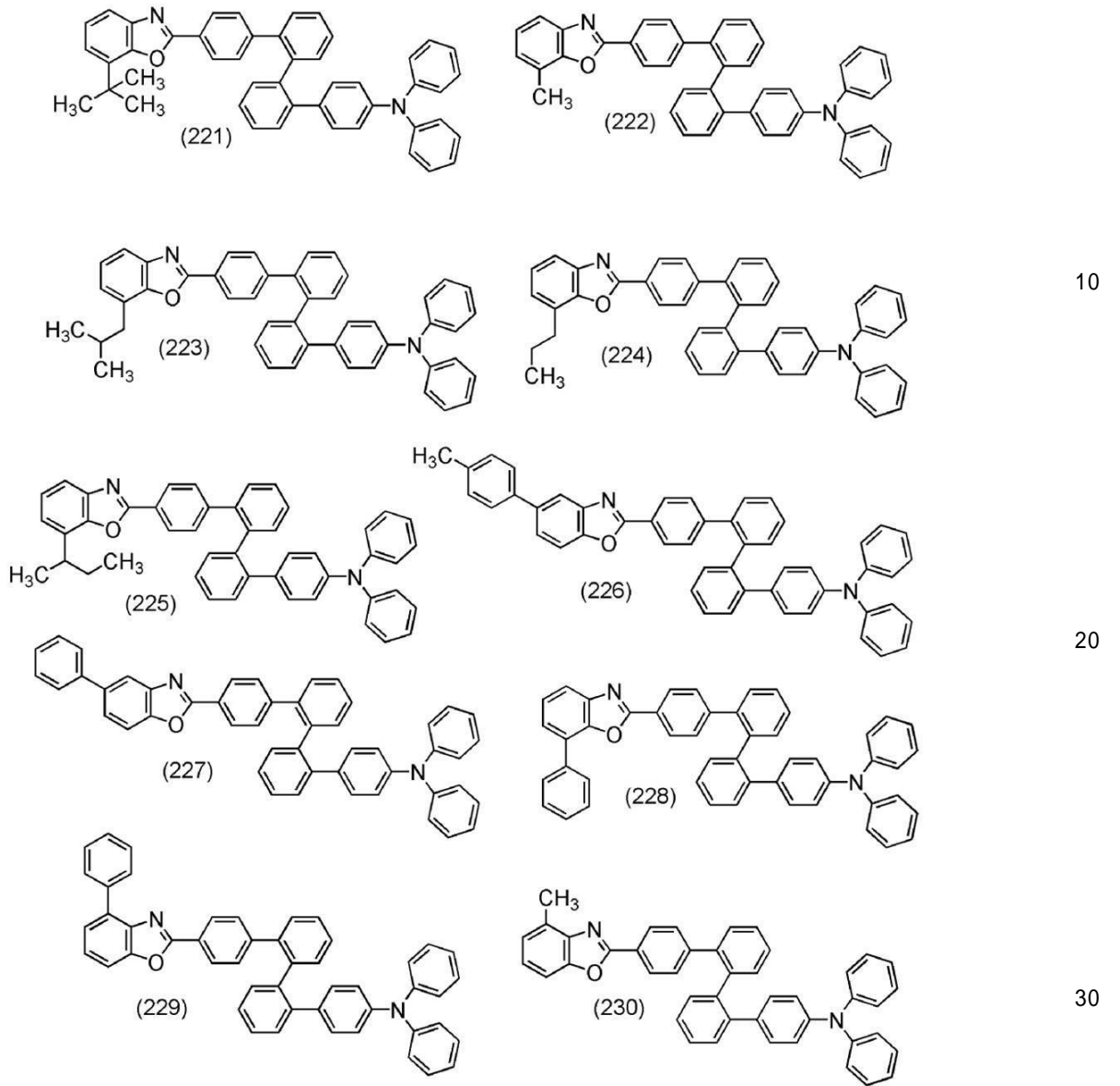
10

20

30

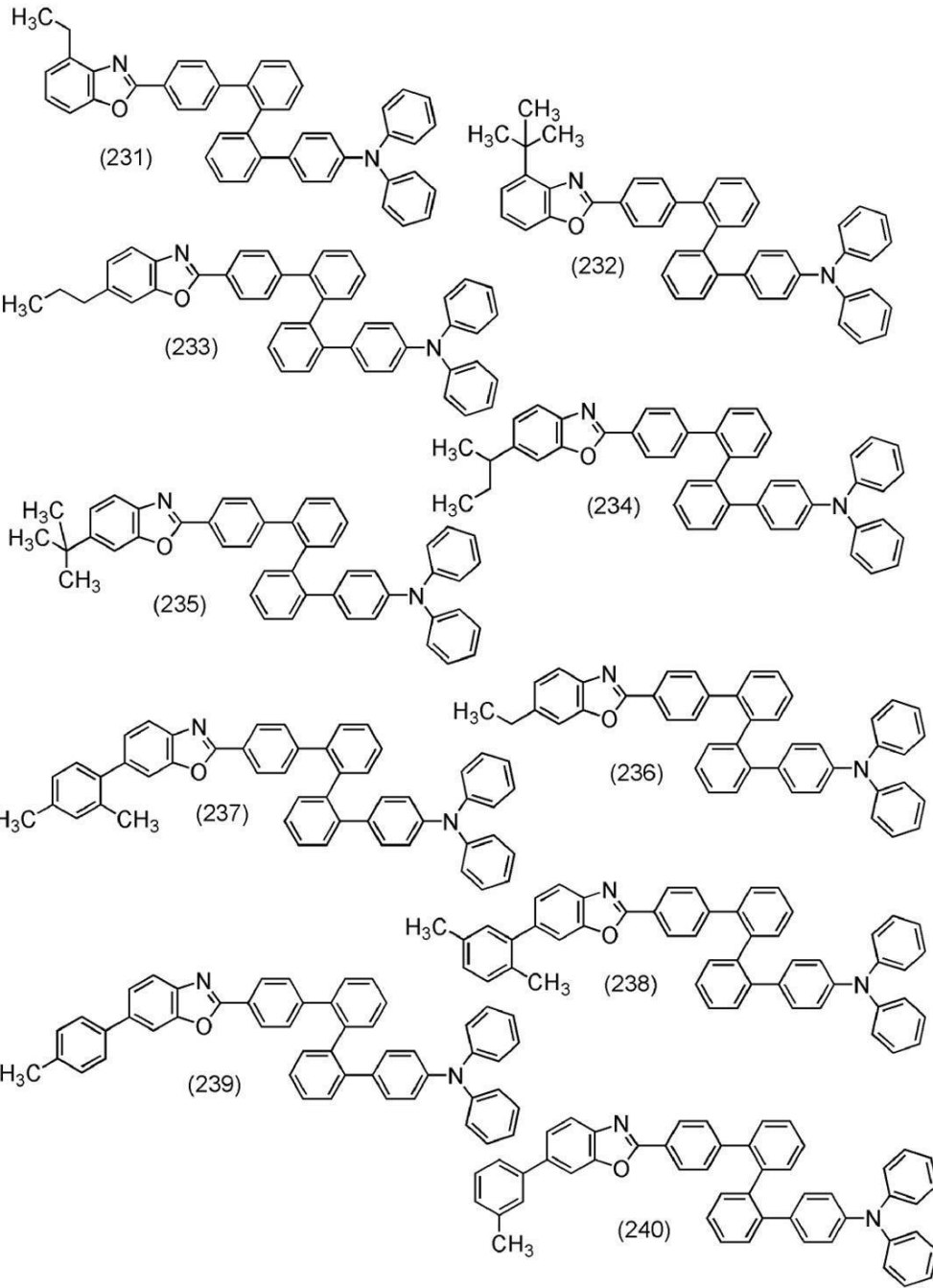
【 0 1 4 7 】

【化 3 4】



【 0 1 4 8 】

【化 3 5】



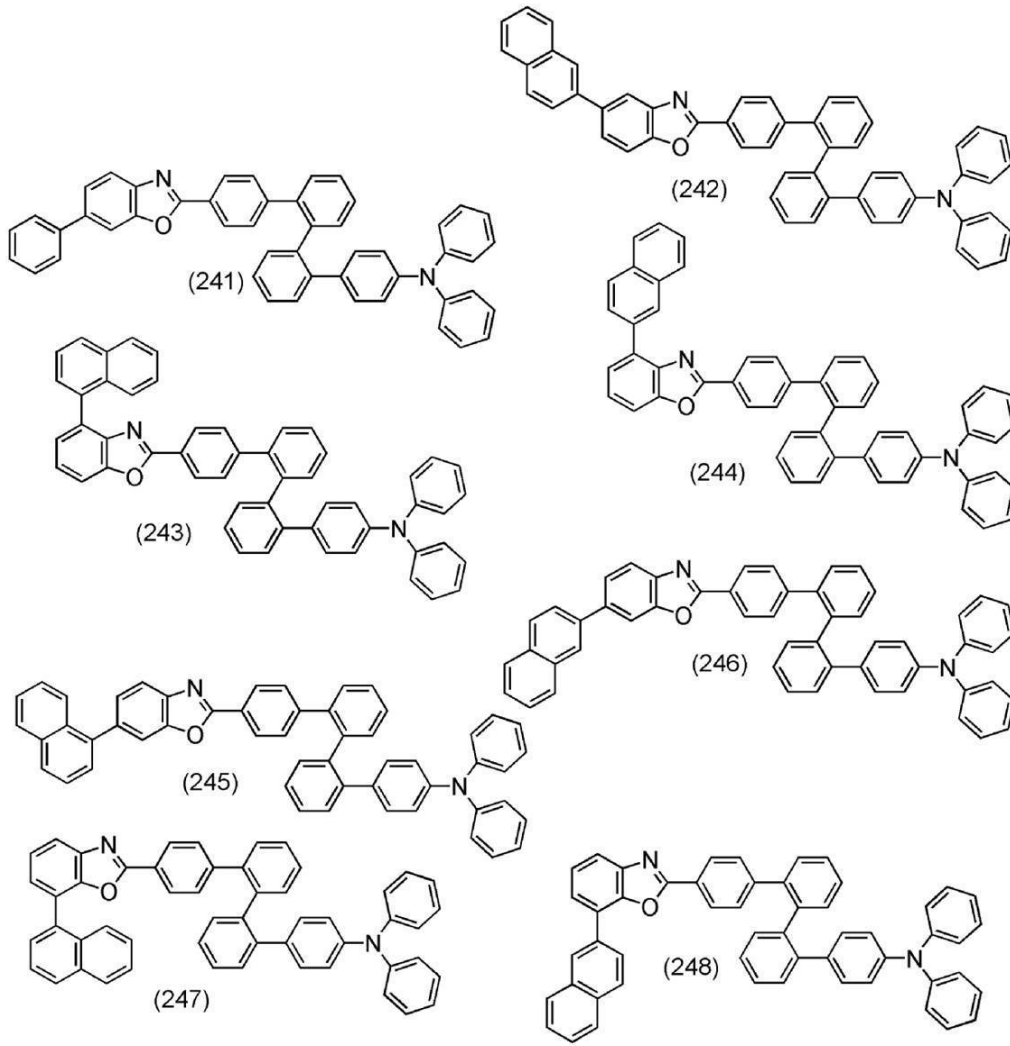
10

20

30

【 0 1 4 9 】

【化 3 6】



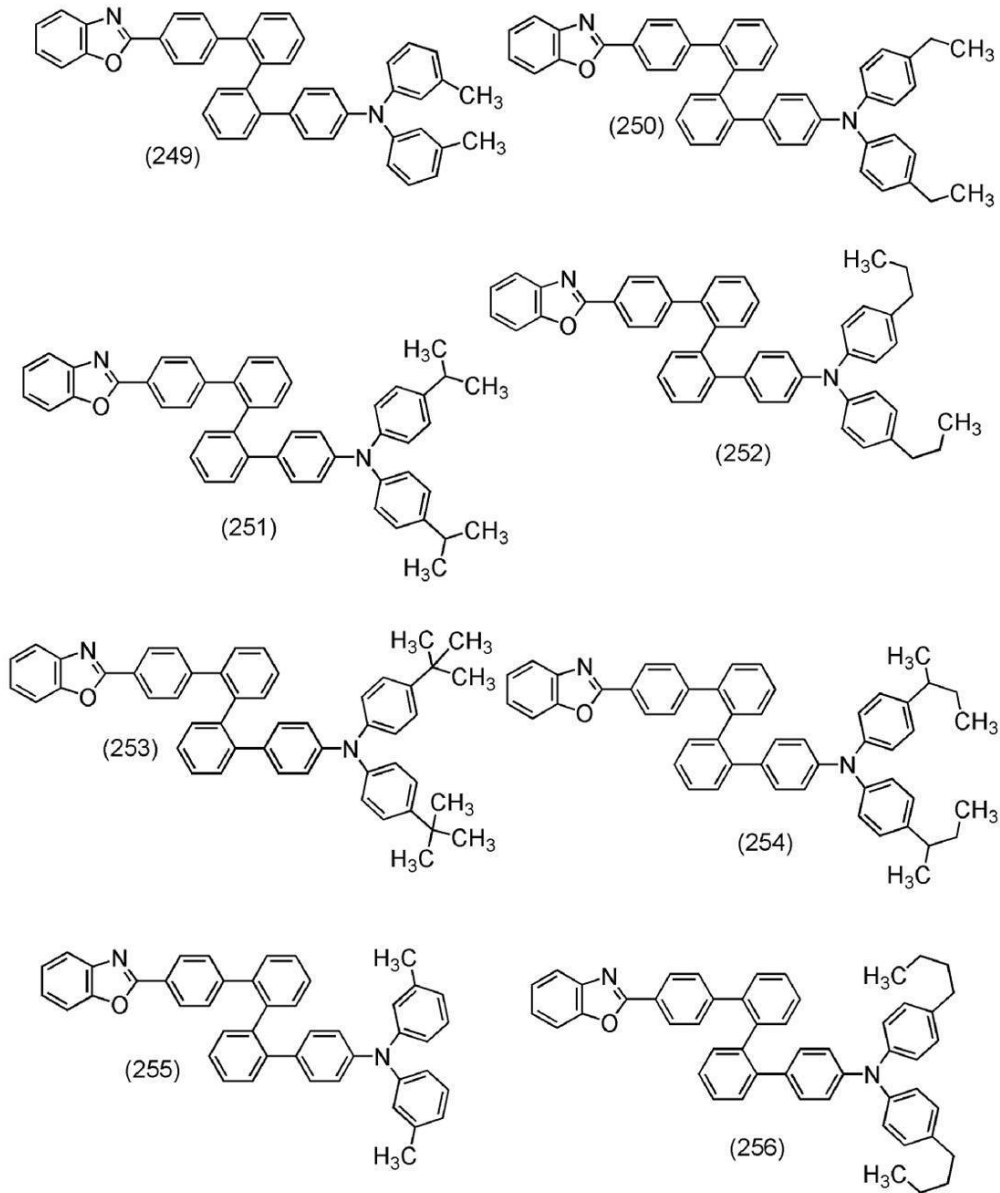
10

20

【 0 1 5 0 】

30

【化 3 7】



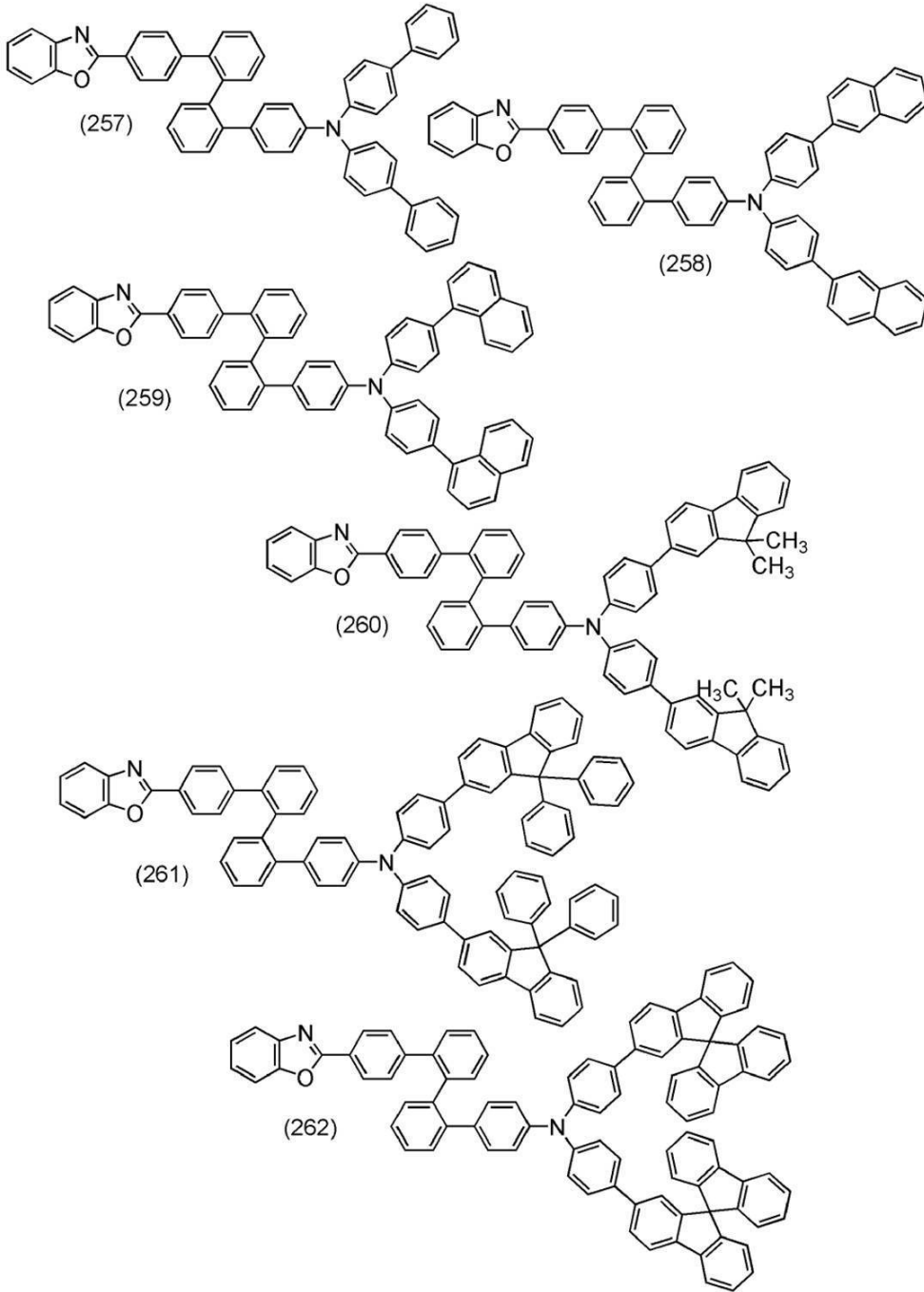
10

20

30

【 0 1 5 1 】

【化 3 8】



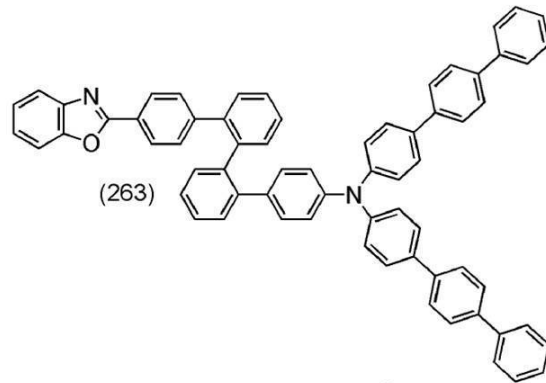
10

20

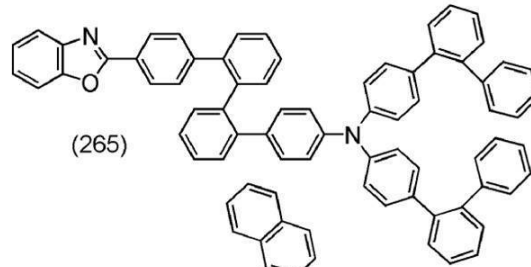
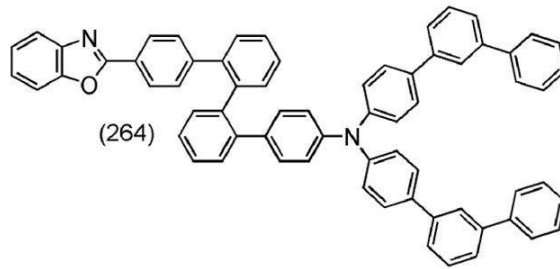
30

【 0 1 5 2 】

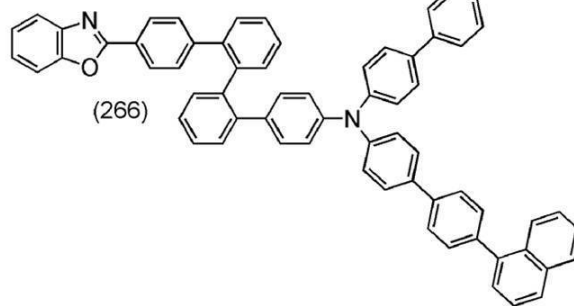
【化 3 9】



10



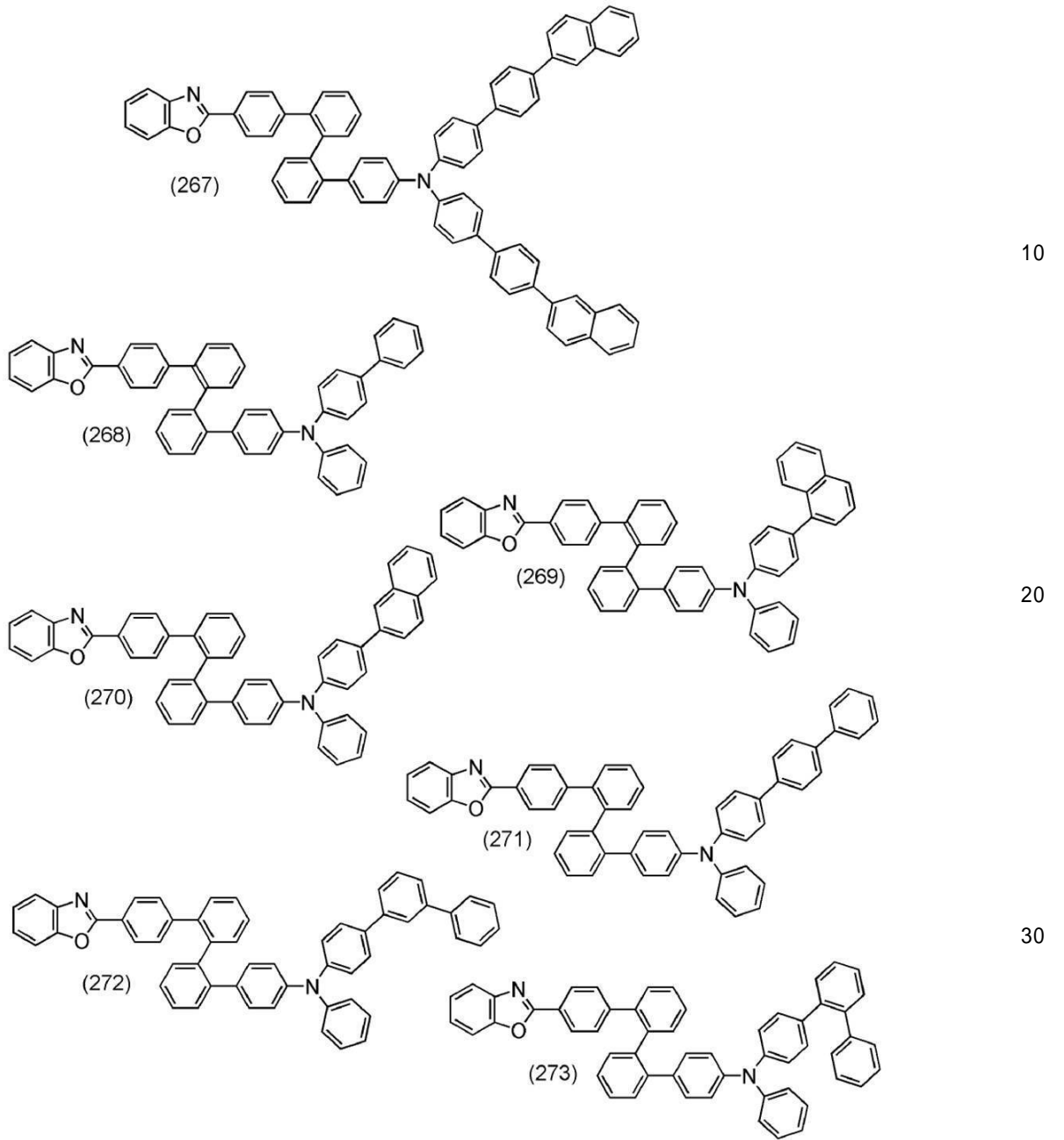
20



30

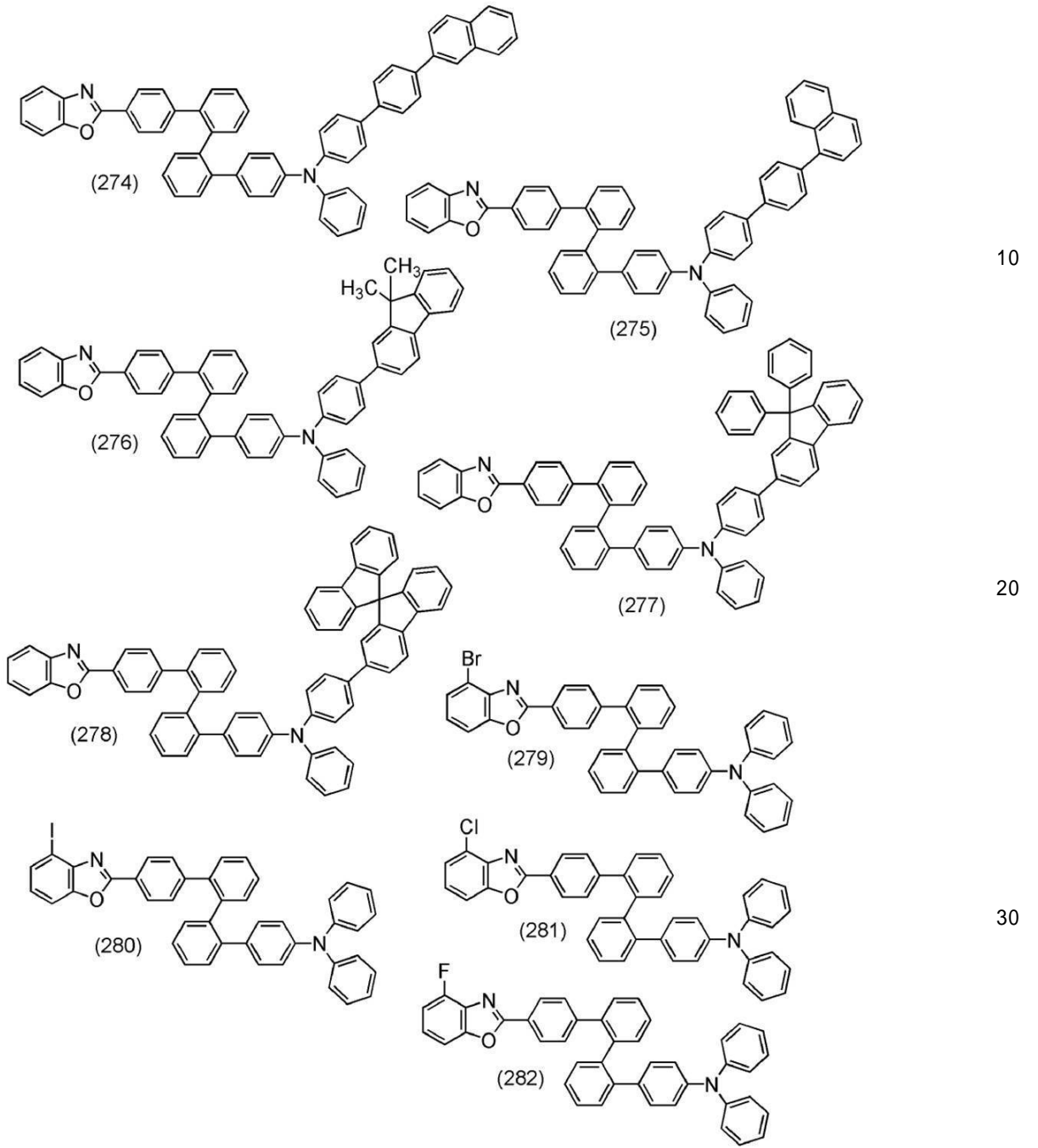
【 0 1 5 3 】

【化 4 0】



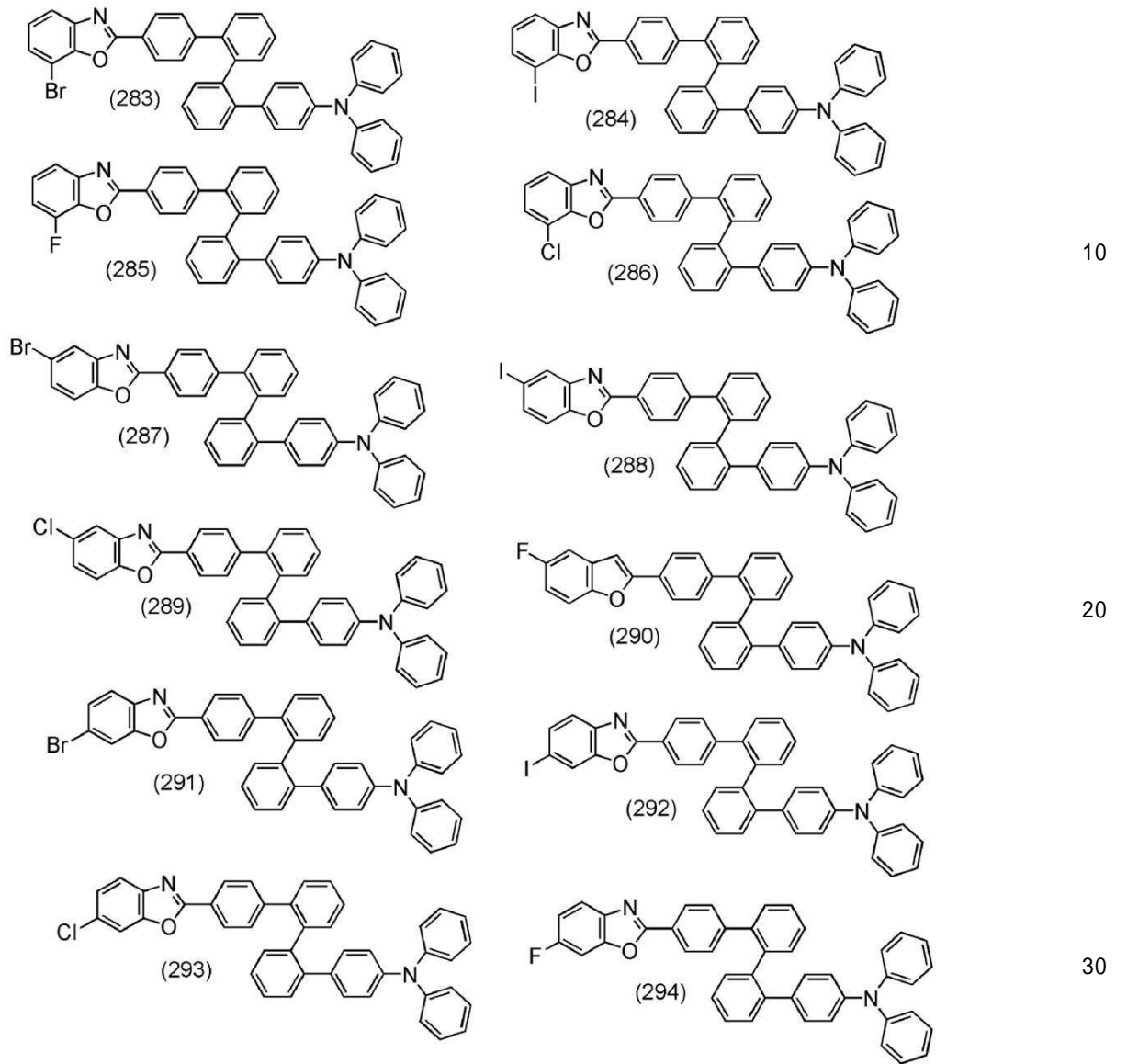
【 0 1 5 4】

【化 4 1】



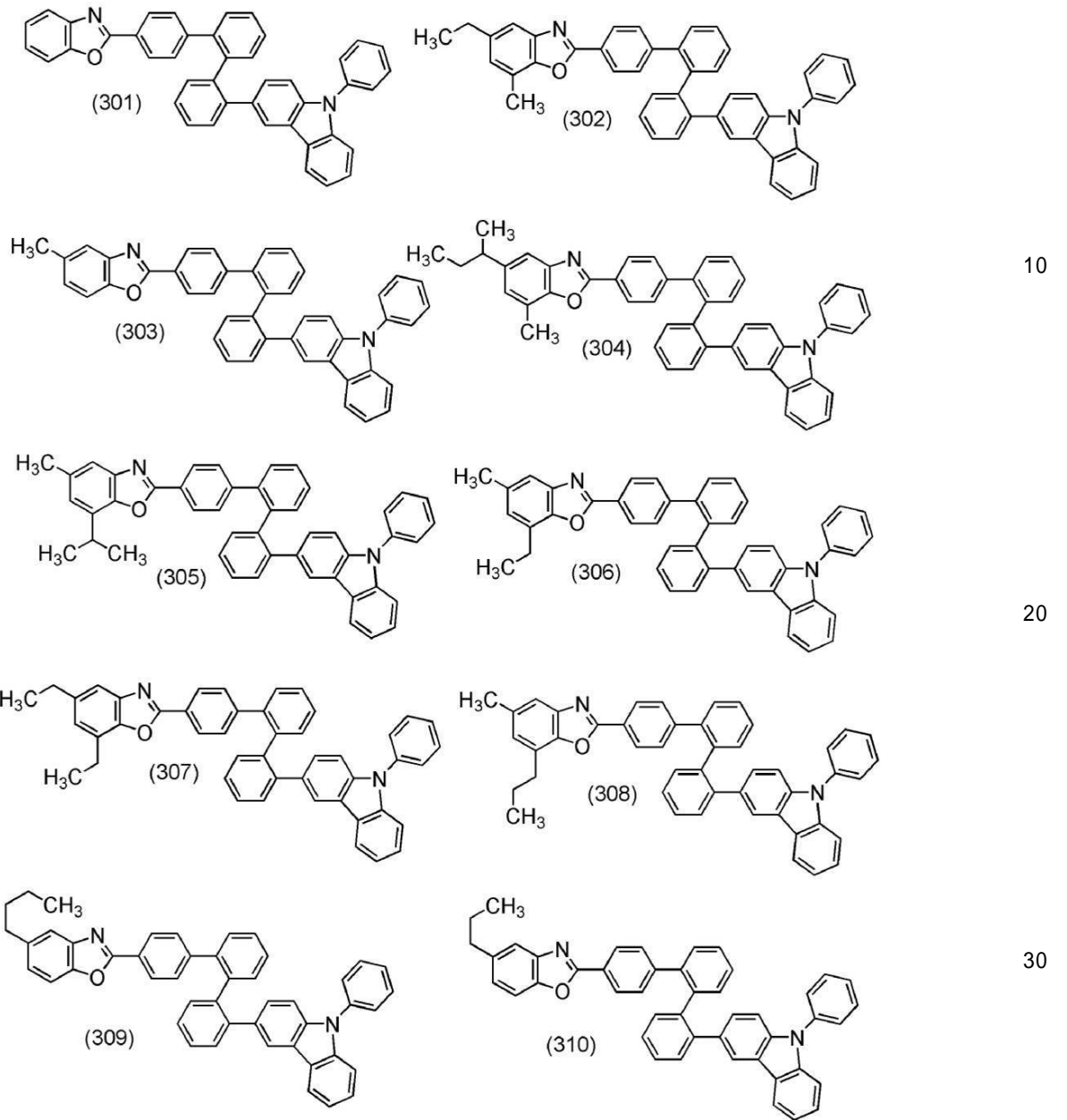
【 0 1 5 5 】

【化 4 2】



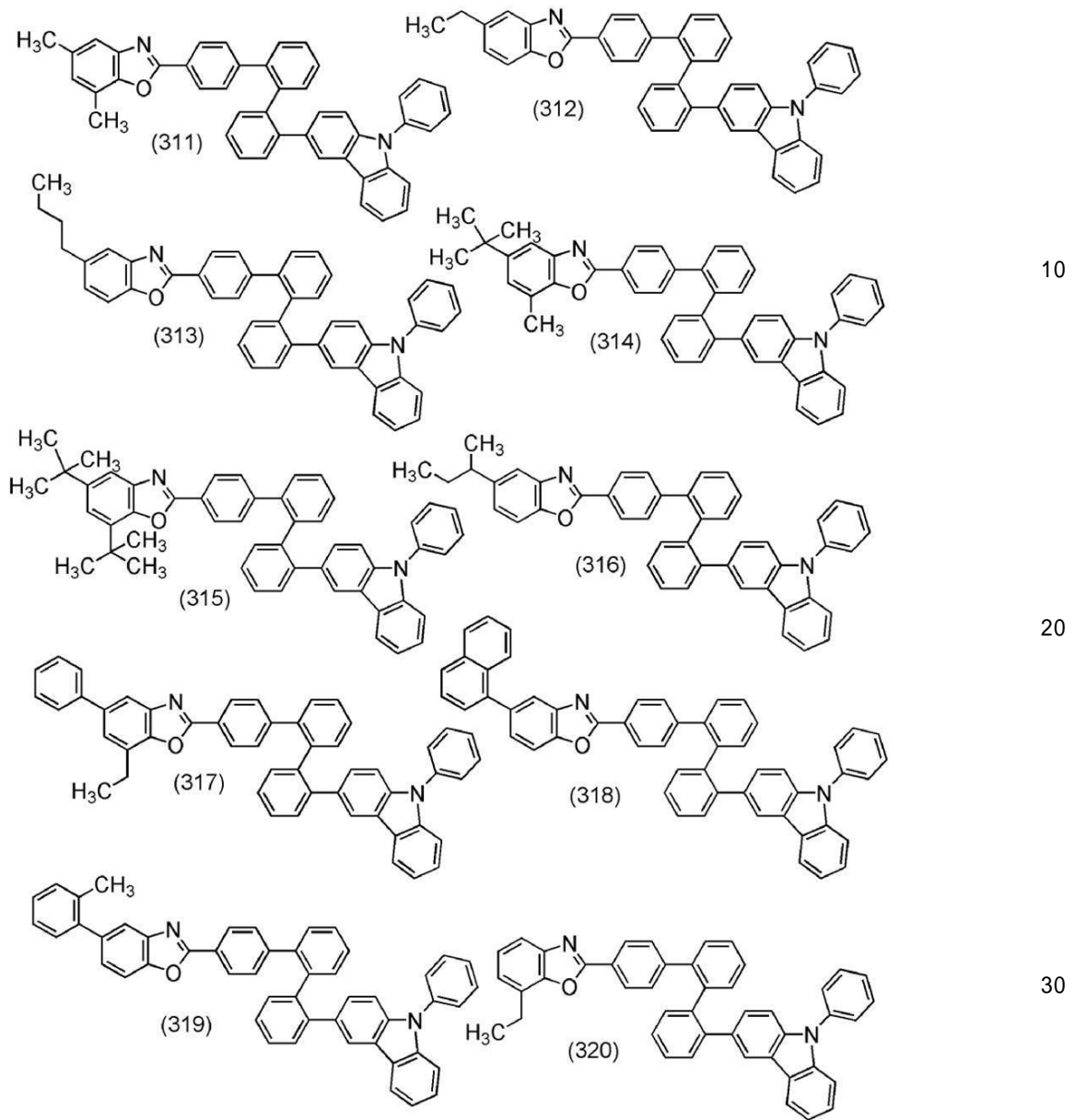
【 0 1 5 6 】

【化 4 3】



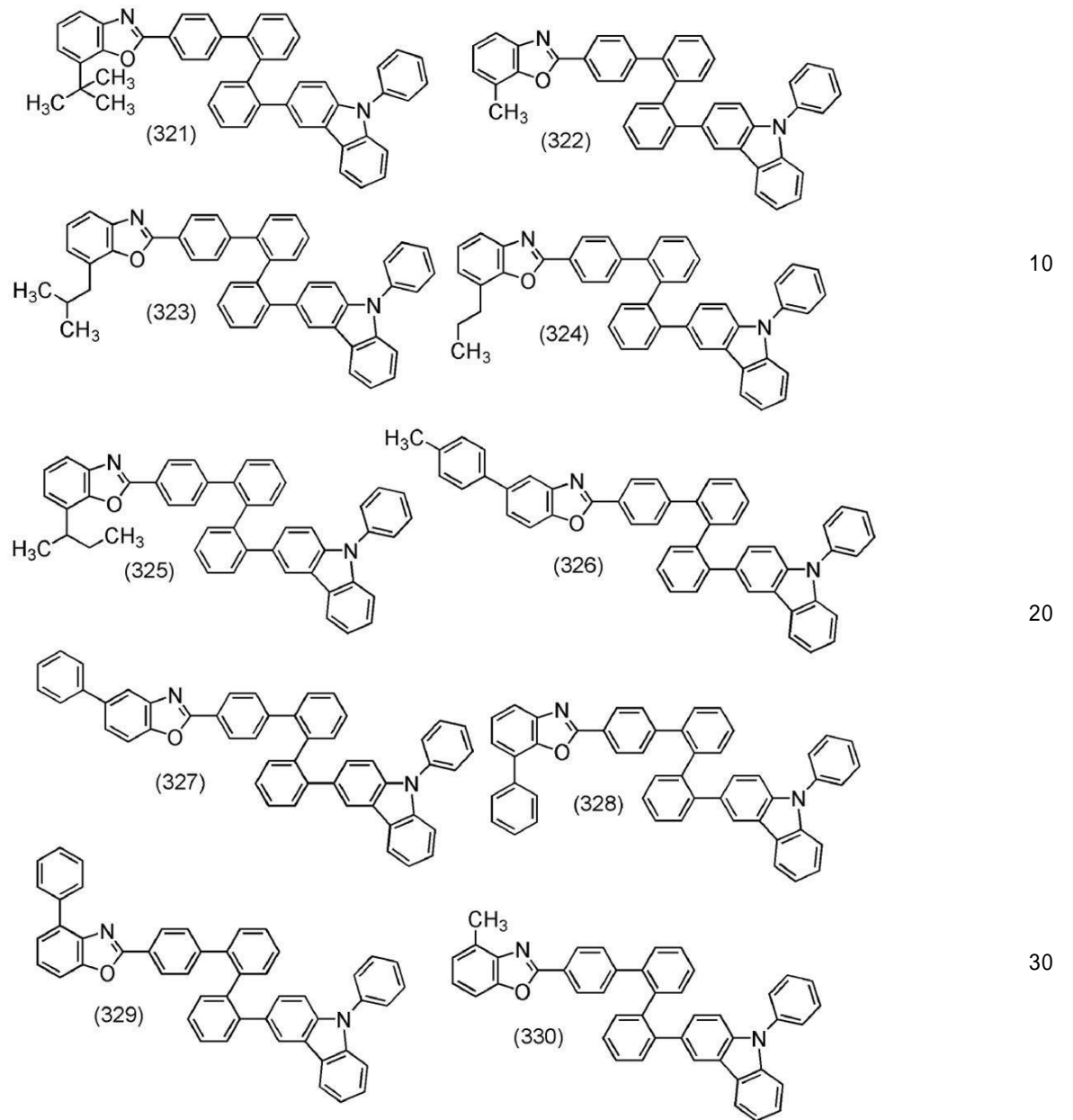
【 0 1 5 7 】

【化 4 4】



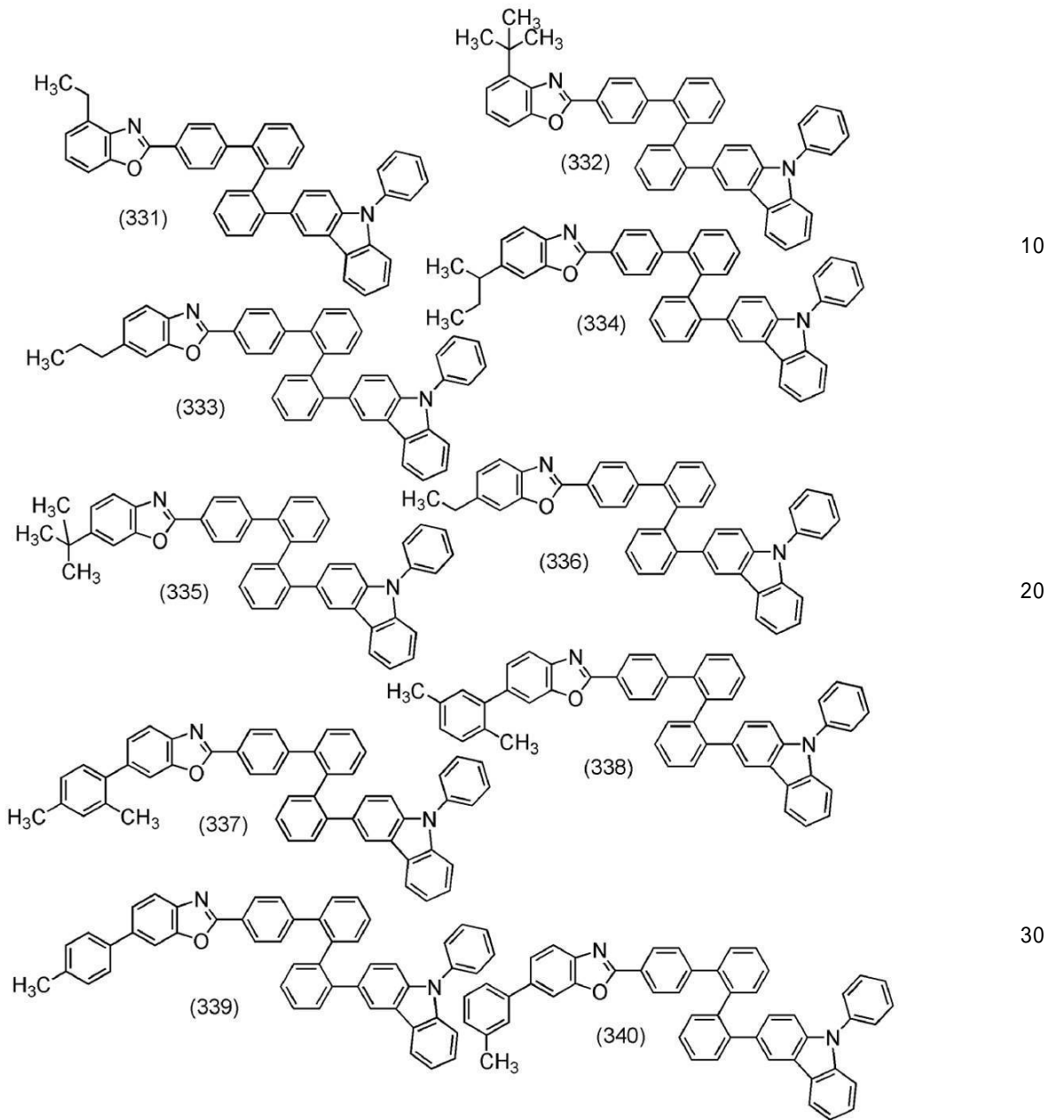
【 0 1 5 8 】

【化 4 5】



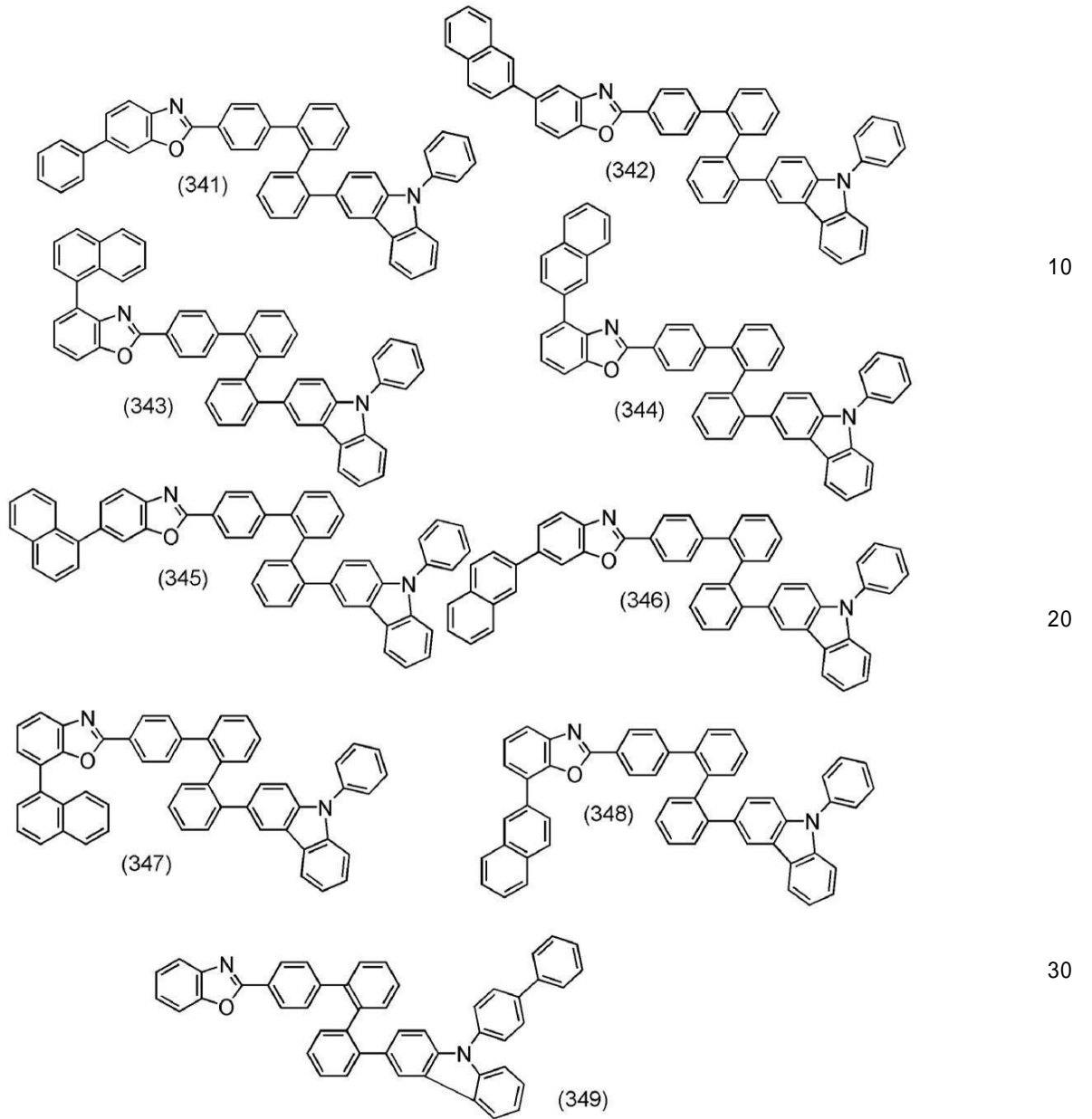
【 0 1 5 9 】

【化 4 6】



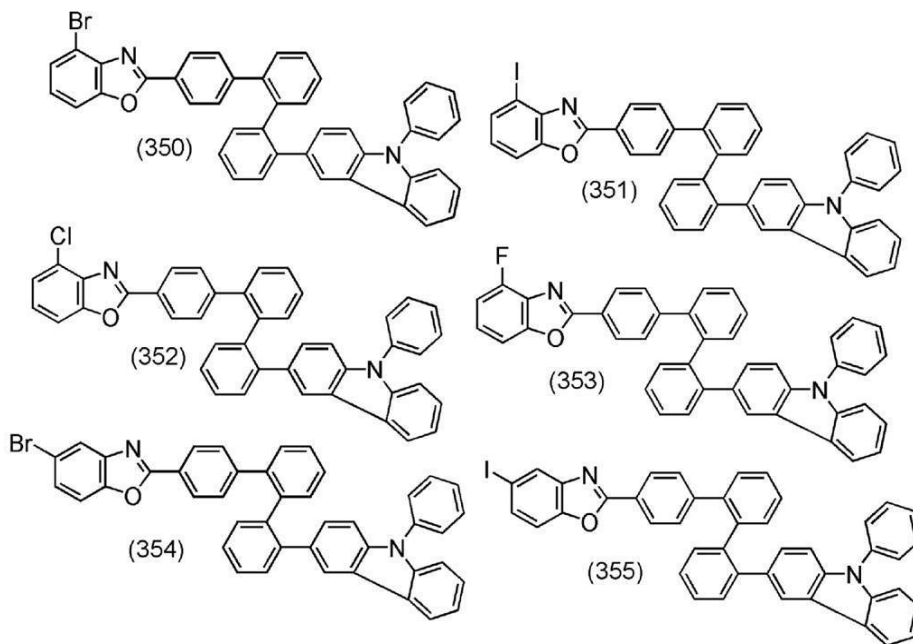
【 0 1 6 0】

【化 4 7】



【 0 1 6 1 】

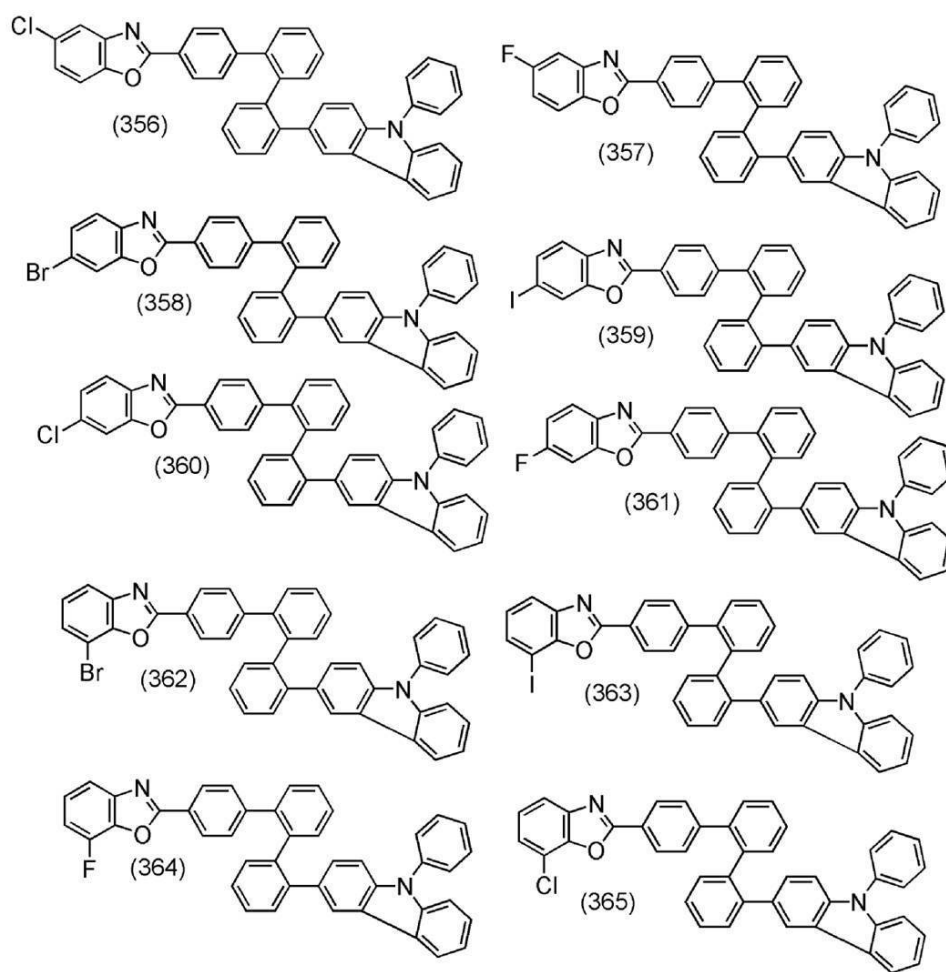
【化48】



10

【0162】

【化49】



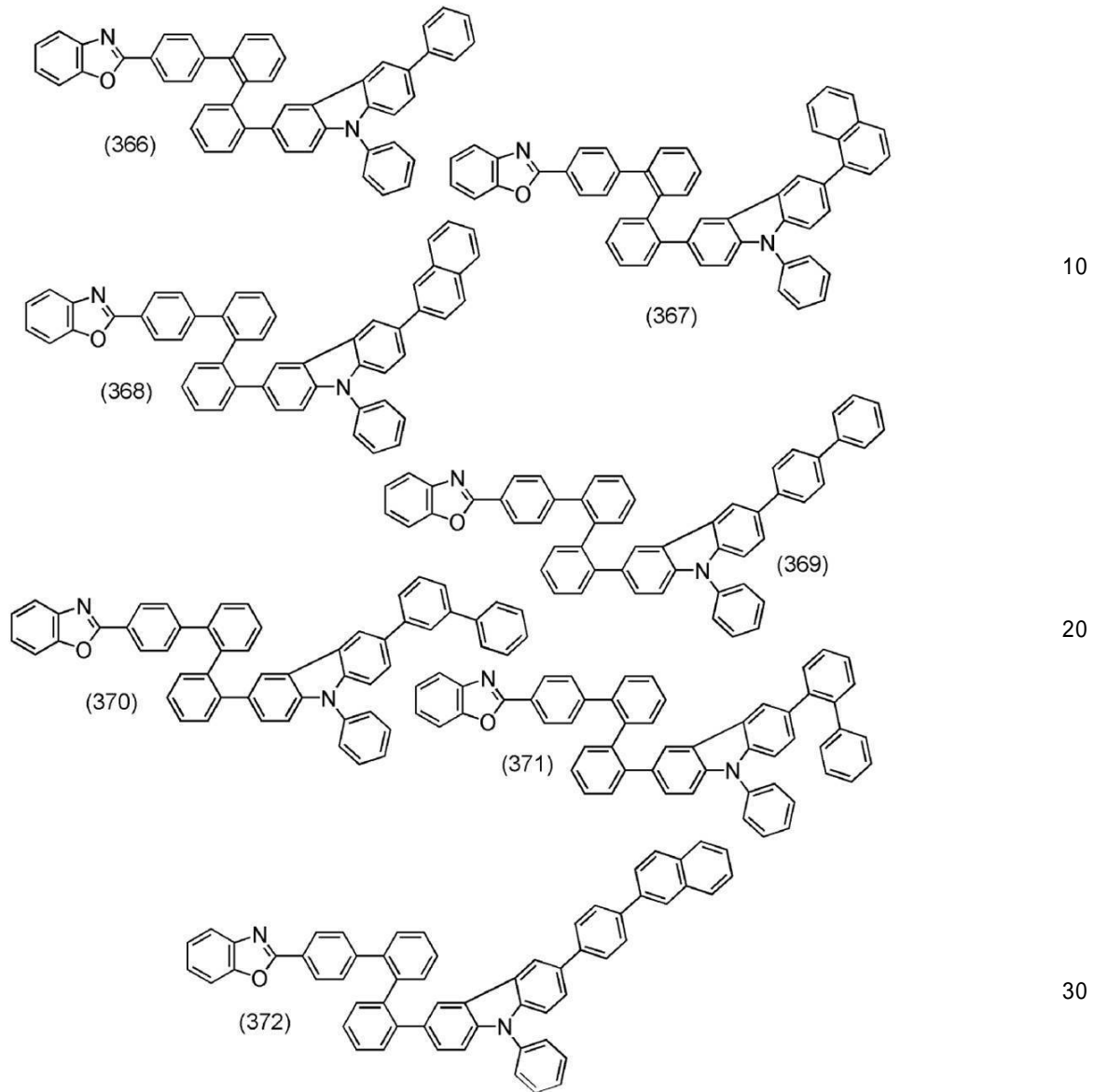
20

30

40

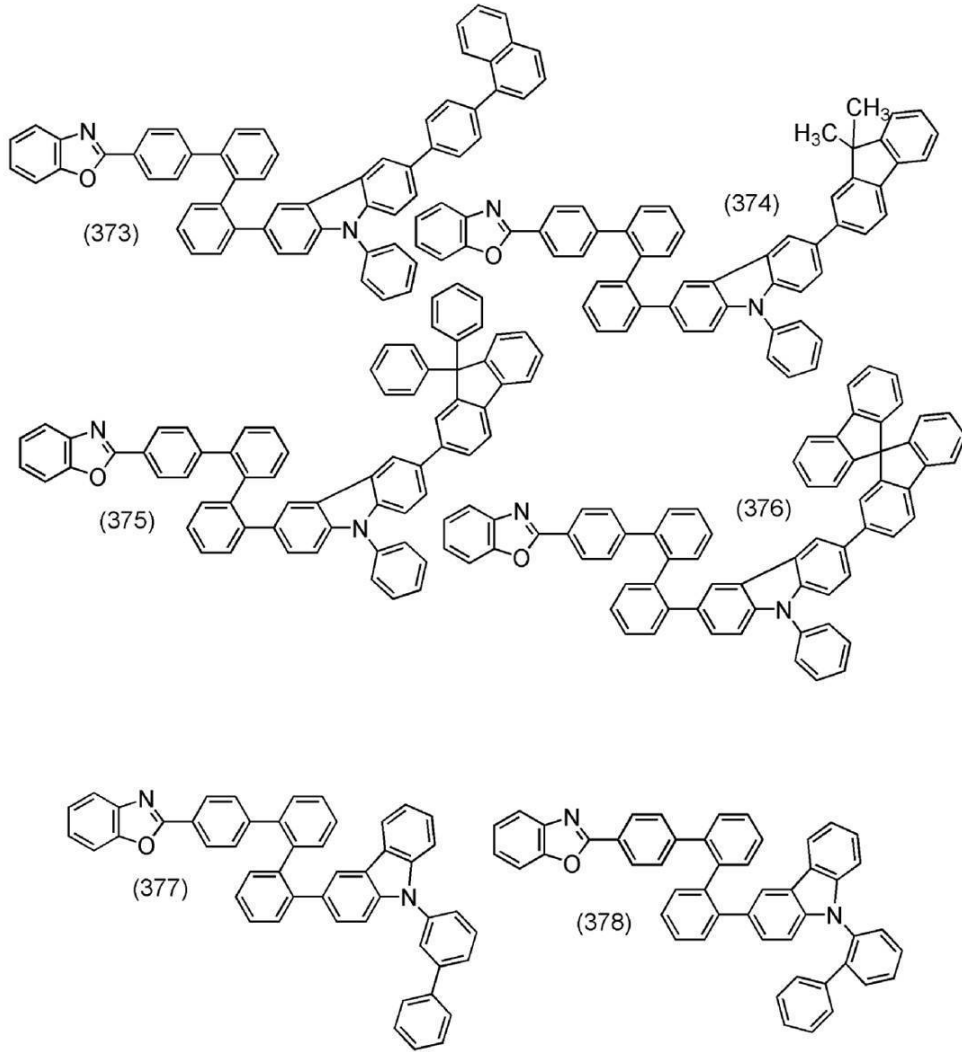
【0163】

【化 5 0】



【 0 1 6 4】

【化 5 1】



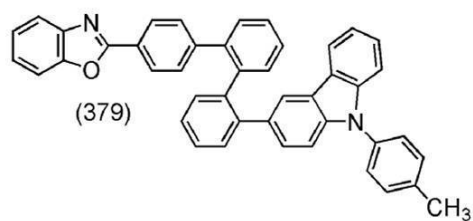
10

20

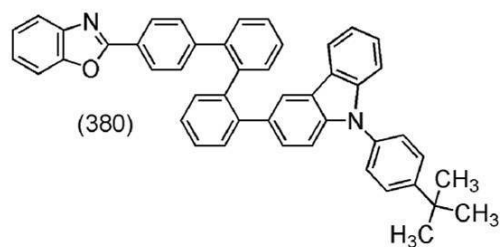
30

【 0 1 6 5 】

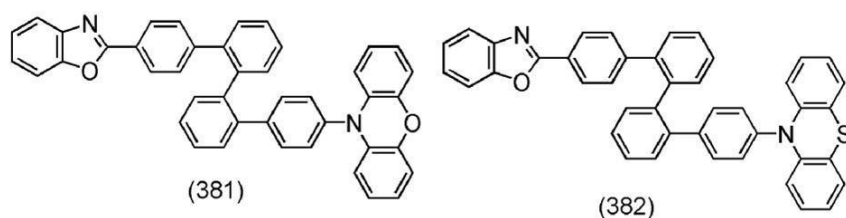
【化52】



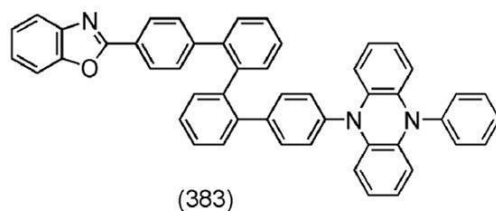
10



20



30



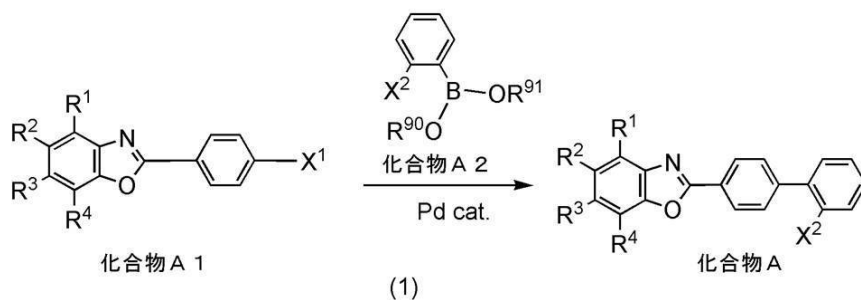
【0166】

本実施の形態のベンゾオキサゾール誘導体の合成方法としては、種々の反応の適用が可能である。例えば、下記の合成スキーム(1)、(1-2)、(2)、(3)、(4)に示す合成反応を行うことによって合成することができる。

【0167】

【化53】

40



【0168】

50

<ハロゲン化したベンゾオキサゾール化合物（化合物A）の合成>

ハロゲン化したベンゾオキサゾール化合物（化合物A）は合成スキーム（1）のようにして合成することができる。すなわちハロゲン化したベンゾオキサゾール化合物（化合物A1）とアリールボロン酸又はその誘導体を、パラジウム触媒を用いた鈴木・宮浦反応によりカップリングし、ハロゲン化したベンゾオキサゾール化合物（化合物A）を得ることができる。

【0169】

合成スキーム（1）において、 X^1 、 X^2 はハロゲン又はトリフラート基を表し、ハロゲンとしては、ヨウ素、臭素、塩素が挙げられ、 X^1 、 X^2 はそれぞれ同じであっても異なっても良い。また $R^1 \sim R^4$ は、水素、炭素数1～4のアルキル基、無置換の炭素数6～10のアリール基、ハロゲンのいずれかを表す。 R^{90} 、 R^{91} は、水素あるいは炭素数1～6のアルキル基を表し、アルキル基の場合、 R^{90} と R^{91} とが互いに結合して環を形成していてもよい。合成スキーム（1）において、用いることができるパラジウム触媒としては、酢酸パラジウム（II）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）等が挙げられるが、用いることができる触媒はこれらに限られるものではない。合成スキーム（1）において、用いることができるパラジウム触媒の配位子としては、トリ（オルトトリル）ホスフィンや、トリフェニルホスフィンや、トリシクロヘキシルホスフィン等が挙げられる。用いることができる配位子はこれらに限られるものではない。

【0170】

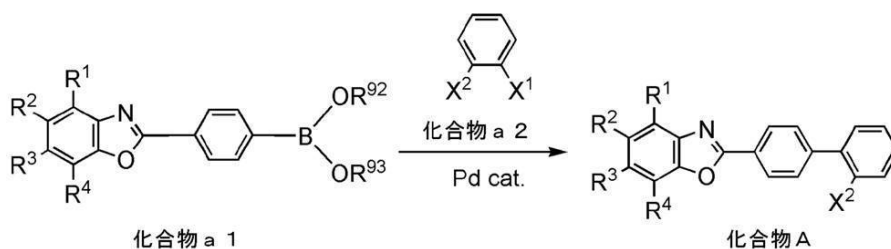
合成スキーム（1）において、用いることができる塩基としては、ナトリウム tert-ブトキシド等の有機塩基や、炭酸カリウム等の無機塩基等が挙げられるが、用いることができる塩基はこれらに限られるものではない。合成スキーム（1）において、用いることができる溶媒としては、トルエンと水の混合溶媒、トルエンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、キシレンと水の混合溶媒、キシレンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、ベンゼンと水の混合溶媒、ベンゼンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、エチレングリコールジメチルエーテル等のエーテル類と水の混合溶媒などが挙げられる。ただし、用いることができる溶媒はこれらに限られるものではない。また、トルエンと水、又はトルエンとエタノールと水の混合溶媒がより好ましい。

【0171】

ハロゲン化したベンゾオキサゾール化合物（化合物A）の合成法は、合成スキーム（1）以外にも合成スキーム（1-2）のような合成法もある。

【0172】

【化54】



(1-2)

【0173】

<ハロゲン化したベンゾオキサゾール化合物（化合物B）の合成>

ハロゲン化したベンゾオキサゾール化合物（化合物B）は合成スキーム（1-2）のようにして合成することができる。すなわちベンゾオキサゾール化合物のボロン酸またはその誘導体（化合物a1）とジハロゲン化ベンゼン（化合物a2）とを、パラジウム触媒を用いた鈴木・宮浦反応によりカップリングし、ハロゲン化したベンゾオキサゾール化合物（

化合物 B) を得ることができる。

【 0 1 7 4 】

合成スキーム (1 - 2) において、 X^1 、 X^2 はハロゲン又はトリフラート基を表し、ハロゲンとしては、ヨウ素、臭素、塩素が挙げられ、 X^1 、 X^2 はそれぞれ同じであっても異なっても良い。また $R^1 \sim R^4$ は、水素、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、無置換の炭素数 6 ~ 10 のアリール基、ハロゲンのいずれかを表す。 R^{92} 、 R^{93} は、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基を表し、 R^{92} と R^{93} とが、互いに結合して環を形成していてもよい。合成スキーム (1 - 2) において、用いることができるパラジウム触媒としては、酢酸パラジウム (II)、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) 等が挙げられるが、用いることができる触媒はこれらに限られるものではない。合成スキーム 1 - 2 において、用いることができるパラジウム触媒の配位子としては、トリ (オルトトリアル) ホスフィンや、トリフェニルホスフィンや、トリシクロヘキシルホスフィン等が挙げられる。用いることができる配位子はこれらに限られるものではない。

10

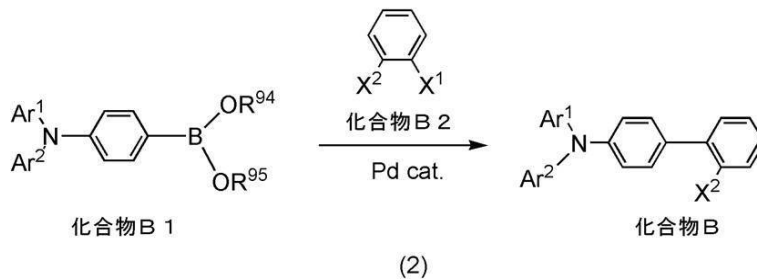
【 0 1 7 5 】

合成スキーム (1 - 2) において、用いることができる塩基としては、ナトリウム *tert*-ブトキシド等の有機塩基や、炭酸カリウム等の無機塩基等が挙げられるが、用いることができる塩基はこれらに限られるものではない。合成スキーム (1 - 2) において、用いることができる溶媒としては、トルエンと水の混合溶媒、トルエンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、キシレンと水の混合溶媒、キシレンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、ベンゼンと水の混合溶媒、ベンゼンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、エチレングリコールジメチルエーテル等のエーテル類と水の混合溶媒などが挙げられる。ただし、用いることができる溶媒はこれらに限られるものではない。また、トルエンと水、又はトルエンとエタノールと水の混合溶媒がより好ましい。

20

【 0 1 7 6 】

【 化 5 5 】



30

【 0 1 7 7 】

< ハロゲン化アリールアミン化合物 (化合物 B) の合成 >

ハロゲン化アリールアミン化合物 (化合物 B) は合成スキーム (2) のようにして合成することができる。すなわち 3 級アリールアミン化合物のボロン酸もしくはその誘導体 (化合物 B 1) とジハロゲン化アリール (化合物 B 2) とを、パラジウム触媒を用いた鈴木・宮浦反応によりカップリングし、ハロゲン化アリールアミン化合物 (化合物 B) を得ることができる。合成スキーム (2) において、 X^1 、 X^2 はハロゲン又はトリフラート基を表し、ハロゲンとしては、ヨウ素、臭素、塩素が挙げられ、 X^1 、 X^2 はそれぞれ同じであっても異なっても良い。また Ar^1 、 Ar^2 はそれぞれ独立に、置換又は無置換の炭素数 6 ~ 13 のアリール基を表す。 R^{94} 、 R^{95} は、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基を表し、 R^{94} と R^{95} とが、互いに結合して環を形成していてもよい。

40

【 0 1 7 8 】

合成スキーム (2) において、用いることができるパラジウム触媒としては、酢酸パラジウム (II)、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) 等が挙げられるが、用いることができる触媒はこれらに限られるものではない。合成スキーム (2) において、用いることができるパラジウム触媒の配位子としては、トリ (オルトトリアル) ホスフィンや、トリフェニルホスフィンや、トリシクロヘキシルホスフィン等が挙げられる

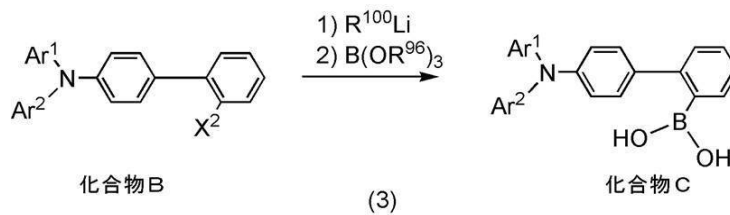
50

。用いることができる配位子はこれらに限られるものではない。合成スキーム(2)において、用いることができる塩基としては、ナトリウム tert-ブトキッド等の有機塩基や、炭酸カリウム等の無機塩基等が挙げられるが、用いることができる塩基はこれらに限られるものではない。合成スキーム(2)において、用いることができる溶媒としては、トルエンと水の混合溶媒、トルエンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、キシレンと水の混合溶媒、キシレンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、ベンゼンと水の混合溶媒、ベンゼンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、エチレングリコールジメチルエーテル等のエーテル類と水の混合溶媒などが挙げられる。ただし、用いることができる溶媒はこれらに限られるものではない。また、トルエンと水、又はトルエンとエタノールと水の混合溶媒がより好ましい。

10

【0179】

【化56】



【0180】

< 3級アリールアミンボロン酸又はその誘導体(化合物C)の合成 >
 一般式(化合物C)で表される3級アリールアミンボロン酸又はその誘導体は、合成スキーム(3)のようにして合成することができる。すなわち、3級アミン化合物(化合物B)にアルキルリチウム試薬とホウ酸エステルを用いてボロン酸へ変換することにより、3級アミンボロン酸(化合物C)を得ることができる。

20

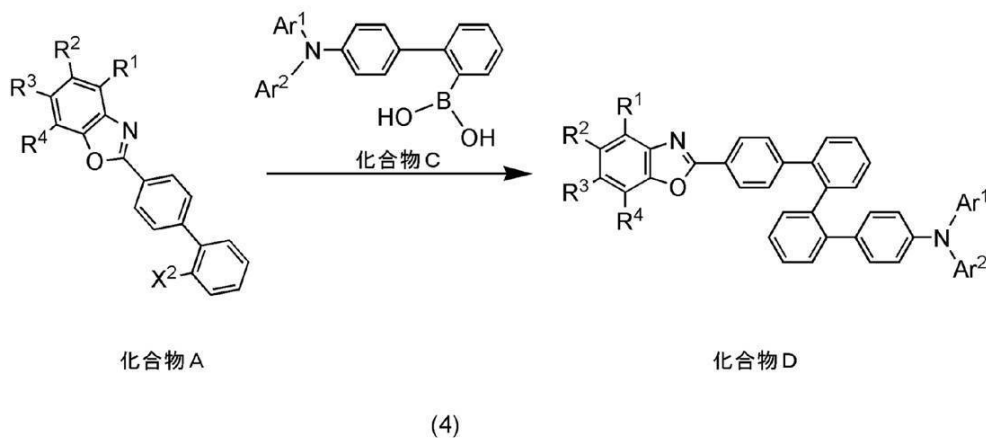
【0181】

R¹⁰⁰は炭素数1~6のアルキル基を表す。R⁹⁶は炭素数1~6のアルキル基を表す。アルキルリチウム試薬としてはn-ブチルリチウム、メチルリチウム等を用いることができる。ホウ酸エステルとしてはホウ酸トリメチル、ホウ酸イソプロピルなどを用いることができる。化合物Cのホウ酸骨格を、エチレングリコールやピナコールで保護してもよい。

30

【0182】

【化57】



40

【0183】

ベンゾオキサゾール化合物(化合物D)は合成スキーム(4)のようにして合成することができる。すなわち、ハロゲン化したベンゾオキサゾール化合物(化合物A)と3級アリールアミンボロン酸(化合物C)とを、パラジウム触媒を用いた鈴木・宮浦反応によりカ

50

ップリングし、3級アリアルアミン化合物(化合物D)を得ることができる。合成スキーム(4)において、 X^2 はハロゲン又はトリフラート基を表し、ハロゲンとしては、ヨウ素、臭素、塩素が挙げられる。また Ar^1 、 Ar^2 は、それぞれ独立に、置換又は無置換の炭素数6~13のアリアル基を表し、 R^1 ~ R^4 は、それぞれ独立に、水素、炭素数1~4のアルキル基、無置換の炭素数6~10のアリアル基、ハロゲンのいずれかを表す。合成スキーム(4)において、化合物Cの代わりに化合物Cのホウ酸骨格をエチレングリコールやピナコールで保護することによって得られる有機ホウ素化合物を用いてもよい。

【0184】

合成スキーム(4)において、用いることができるパラジウム触媒としては、酢酸パラジウム(II)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)等が挙げられるが、用いることができる触媒はこれらに限られるものではない。合成スキーム(4)において、用いることができるパラジウム触媒の配位子としては、トリ(オルトトリル)ホスフィンや、トリフェニルホスフィンや、トリシクロヘキシルホスフィン等が挙げられる。用いることができる配位子はこれらに限られるものではない。合成スキーム(4)において、用いることができる塩基としては、ナトリウム tert-ブトキシド等の有機塩基や、炭酸カリウム等の無機塩基等が挙げられるが、用いることができる塩基はこれらに限られるものではない。合成スキーム(4)において、用いることができる溶媒としては、トルエンと水の混合溶媒、トルエンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、キシレンと水の混合溶媒、キシレンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、ベンゼンと水の混合溶媒、ベンゼンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、エチレングリコールジメチルエーテル等のエーテル類と水の混合溶媒などが挙げられる。ただし、用いることができる溶媒はこれらに限られるものではない。また、トルエンと水、又はトルエンとエタノールと水の混合溶媒がより好ましい。

【0185】

以上のようにして、本実施の形態におけるベンゾオキサゾール誘導体を合成することができる。

【0186】

本実施の形態におけるベンゾオキサゾール誘導体はバンドギャップが非常に大きいことから色純度の良好な発光を得ることが可能である。また、本実施の形態のベンゾオキサゾール誘導体は、ホール輸送性及び電子輸送性を有するバイポーラ材料であり、かつバンドギャップが広い。

【0187】

また、本実施の形態のベンゾオキサゾール誘導体は、電子輸送性を有するベンゾオキサゾール骨格とホール輸送性を有する骨格とを、共役が広がりにくいねじれたクアテルフェニレン骨格を介して結合することで、高い三重項励起エネルギーを維持したまま分子量を大きくすることができるため、電気化学的安定性及び熱的安定性の高いベンゾオキサゾール誘導体とすることが可能である。よって、本実施の形態のベンゾオキサゾール誘導体を用いることで発光素子の信頼性を向上させることができる。

【0188】

本実施の形態におけるベンゾオキサゾール誘導体は、単独で発光中心材料として発光層に用いることのできる他、ホスト材料として用いることもでき、本実施の形態のベンゾオキサゾール誘導体に発光物質となるドーパント材料を分散させた構成とすることで、ドーパント材料からの色純度のよい発光を効率よく得ることができる。

【0189】

また、本実施の形態におけるベンゾオキサゾール誘導体よりも大きなバンドギャップを有する材料(ホスト材料)に、本実施の形態におけるベンゾオキサゾール誘導体をドーパント材料として分散させてなる発光層に用いることもでき、本実施の形態におけるベンゾオキサゾール誘導体からの発光を得ることができる。

【0190】

本実施の形態のベンゾオキサゾール誘導体は、キャリア輸送材料として発光素子の機能層

10

20

30

40

50

に用いることができる。例えば、ホール輸送層、ホール注入層、電子輸送層、又は電子注入層として用いることができる。本明細書では、キャリア注入性の高い物質やキャリア輸送性の高い物質からなる層をキャリアの注入、輸送などに機能する、機能層ともよぶ。

【0191】

本実施の形態のベンゾオキサゾール誘導体を、発光素子に用いることにより、高効率、高信頼性及び長寿命の発光素子を得ることができる。

【0192】

(実施の形態3)

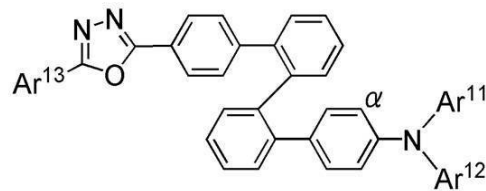
本実施の形態では、実施の形態1で示す本発明の一態様である有機半導体材料の一例として、一般式(G1)で示した構造を有するオキサジアゾール誘導体について説明する。

【0193】

本実施の形態のオキサジアゾール誘導体は、一般式(OXD1)で表されるオキサジアゾール誘導体である。

【0194】

【化58】



(OXD1)

【0195】

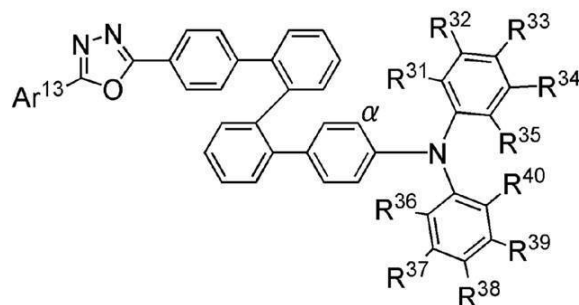
式中、Ar¹¹、Ar¹²及びAr¹³は、炭素数6~13の置換または無置換のアリール基を表す。また、Ar¹¹とαの炭素、又は、Ar¹¹とAr¹²は、それぞれ互いに直接結合していてもよく、あるいは、酸素、硫黄、又は窒素のいずれかを介して結合していてもよい。

【0196】

また、本実施の形態のオキサジアゾール誘導体は、一般式(OXD2)で表されるオキサジアゾール誘導体であるのが好ましい。

【0197】

【化59】



(OXD2)

【0198】

式中、R³¹~R⁴⁰は、水素、炭素数1~4のアルキル基、又は炭素数6~13の無置換のアリール基のいずれかを表し、Ar¹³は、炭素数6~13の置換又は無置換のアリール基を表す。また、R³¹と結合したベンゼン環上の炭素とαの炭素、又は、R³⁵と

10

20

30

40

50

結合したベンゼン環上の炭素と R^{40} と結合したベンゼン環上の炭素は、それぞれ互いに直接結合してカルバゾール骨格を形成していてもよい。

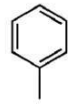
【0199】

一般式(OXD1)及び一般式(OXD2)において、 Ar^{11} 、 Ar^{12} 及び Ar^{13} で表される置換基としては、例えば、構造式(15-1)~(15-16)で表される置換基が挙げられる。 Ar^{11} 、 Ar^{12} 及び Ar^{13} に結合する置換基としては、炭素数1~4のアルキル基または無置換の炭素数6~13のアリール基が挙げられる。具体的には、メチル基、エチル基、プロピル基、ブチル基、フェニル基、ナフチル基またはフルオレニル基等が挙げられる。また、アリール基が有する置換基は1つであっても複数であってもよく、アリール基が2つの置換基を有する場合、置換基同士が互いに結合して環を形成していてもよい。環構造としてはスピロ環を含むものとする。

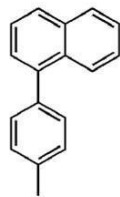
10

【0200】

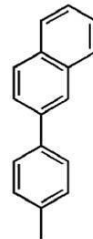
【化60】



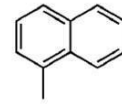
(15-1)



(15-2)

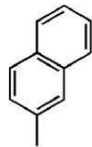


(15-3)

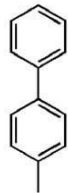


(15-4)

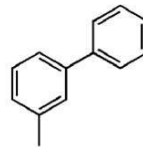
20



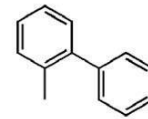
(15-5)



(15-6)

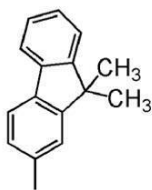


(15-7)

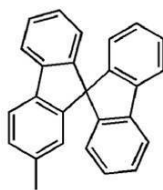


(15-8)

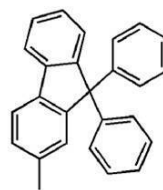
30



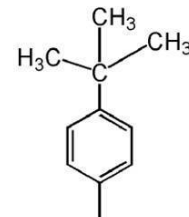
(15-9)



(15-10)

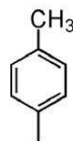


(15-11)

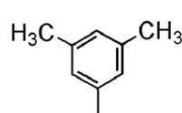


(15-12)

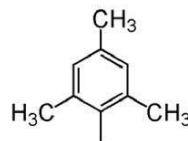
40



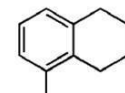
(15-13)



(15-14)



(15-15)



(15-16)

【0201】

なお、一般式(OXD2)において、 Ar^{13} は、構造式(15-4)~(15-8)及

50

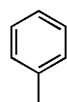
び(15-12)~(15-15)で示すように、炭素数1~4のアルキル基または無置換の炭素数6~10の置換基を有する、フェニル基又はナフチル基であるのが好ましく、構造式(15-1)、(15-4)、(15-5)で示すように、無置換のフェニル基又はナフチル基であるのがより好ましい。

【0202】

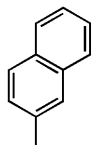
また、一般式(OXD2)において、 $R^{31} \sim R^{40}$ で表される置換基としては、例えば構造式(12-1)~(12-25)で表される置換基が挙げられる。

【0203】

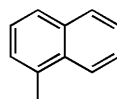
【化61】



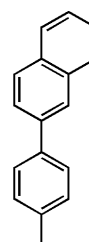
(12-1)



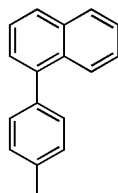
(12-2)



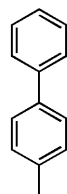
(12-3)



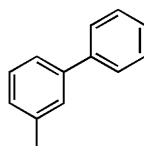
(12-4)



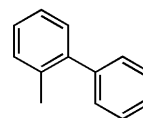
(12-5)



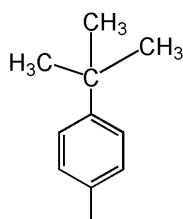
(12-6)



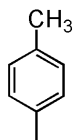
(12-7)



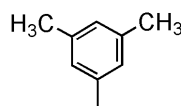
(12-8)



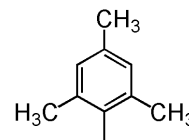
(12-9)



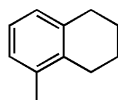
(12-10)



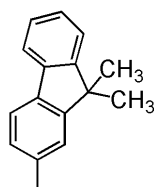
(12-11)



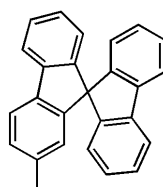
(12-12)



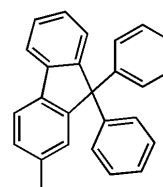
(12-13)



(12-14)



(12-15)



(12-16)

【0204】

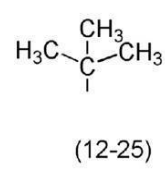
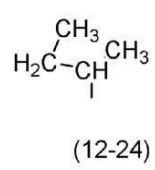
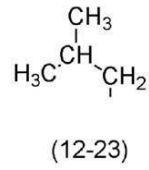
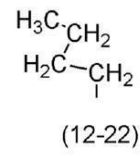
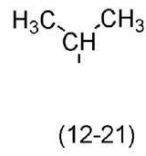
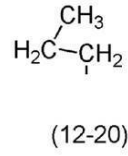
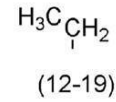
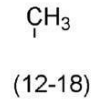
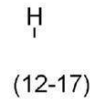
10

20

30

40

【化 6 2】



10

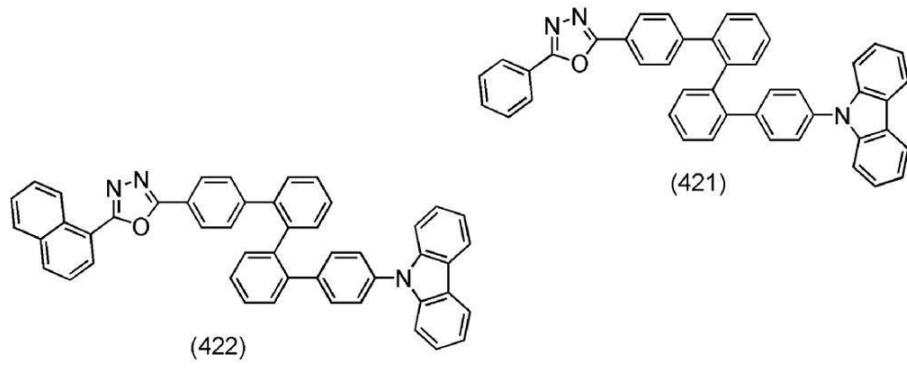
【 0 2 0 5】

本実施の形態のオキサジアゾール誘導体の具体例としては、例えば、構造式(421)～(533)に示されるオキサジアゾール誘導体を挙げるることができる。ただし、本実施の形態はこれらに限定されない。

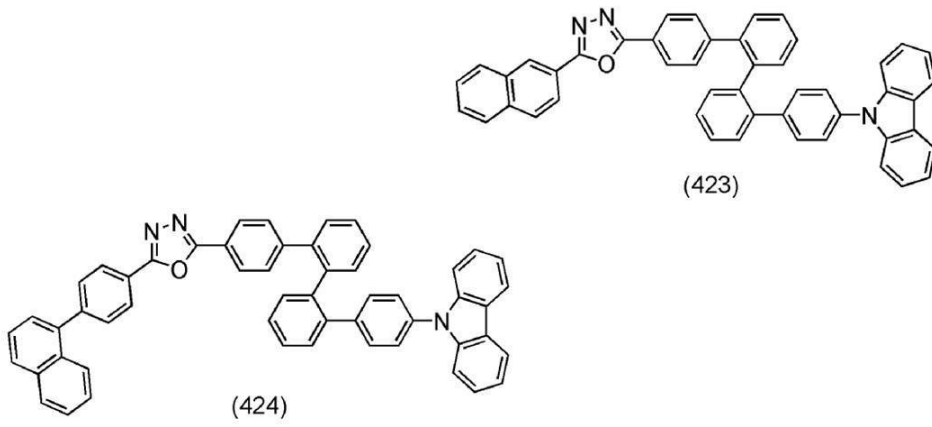
20

【 0 2 0 6】

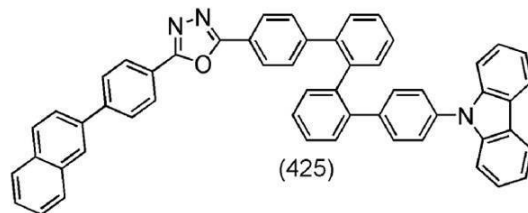
【化 6 3】



10



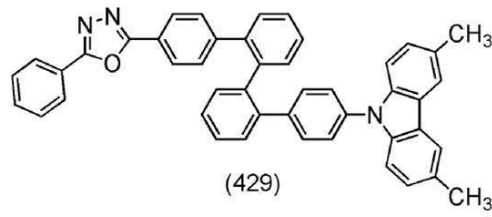
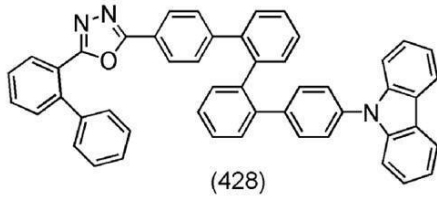
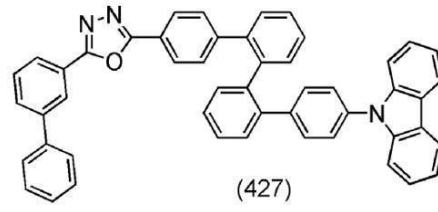
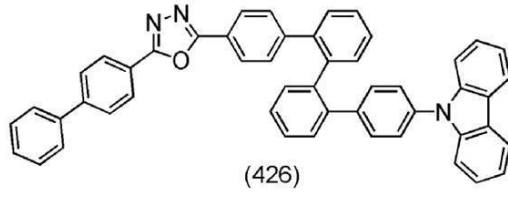
20



30

【 0 2 0 7】

【化 6 4】



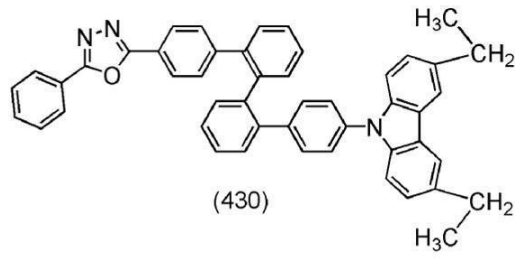
【 0 2 0 8 】

10

20

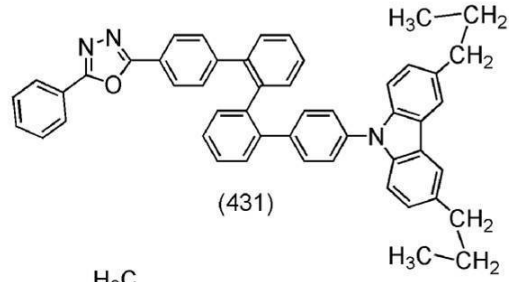
30

【化 6 5】



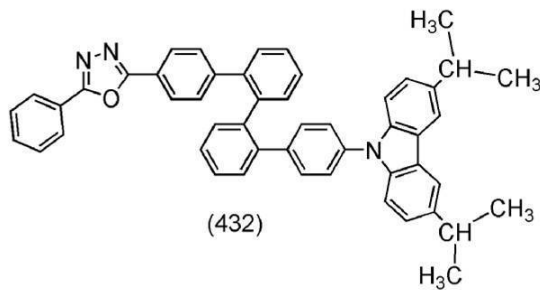
(430)

10



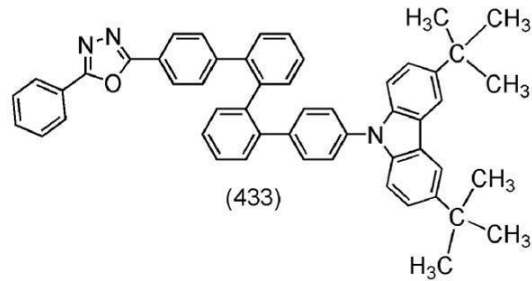
(431)

20



(432)

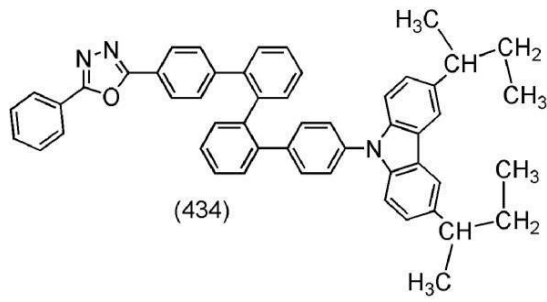
30



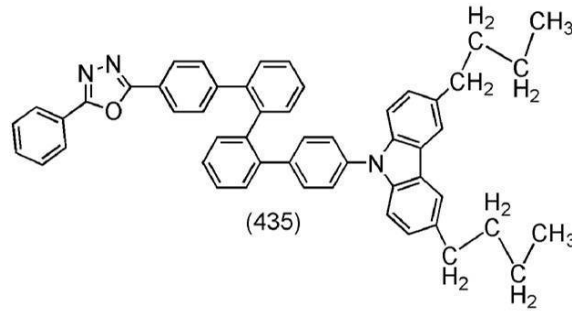
(433)

【 0 2 0 9 】

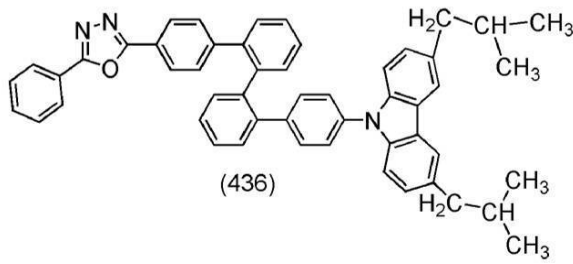
【化 6 6】



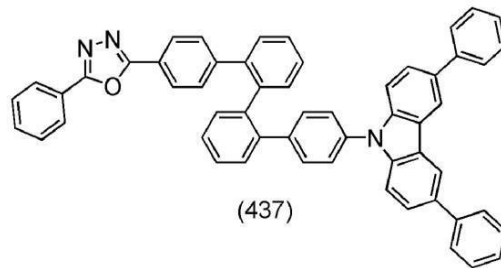
10



20

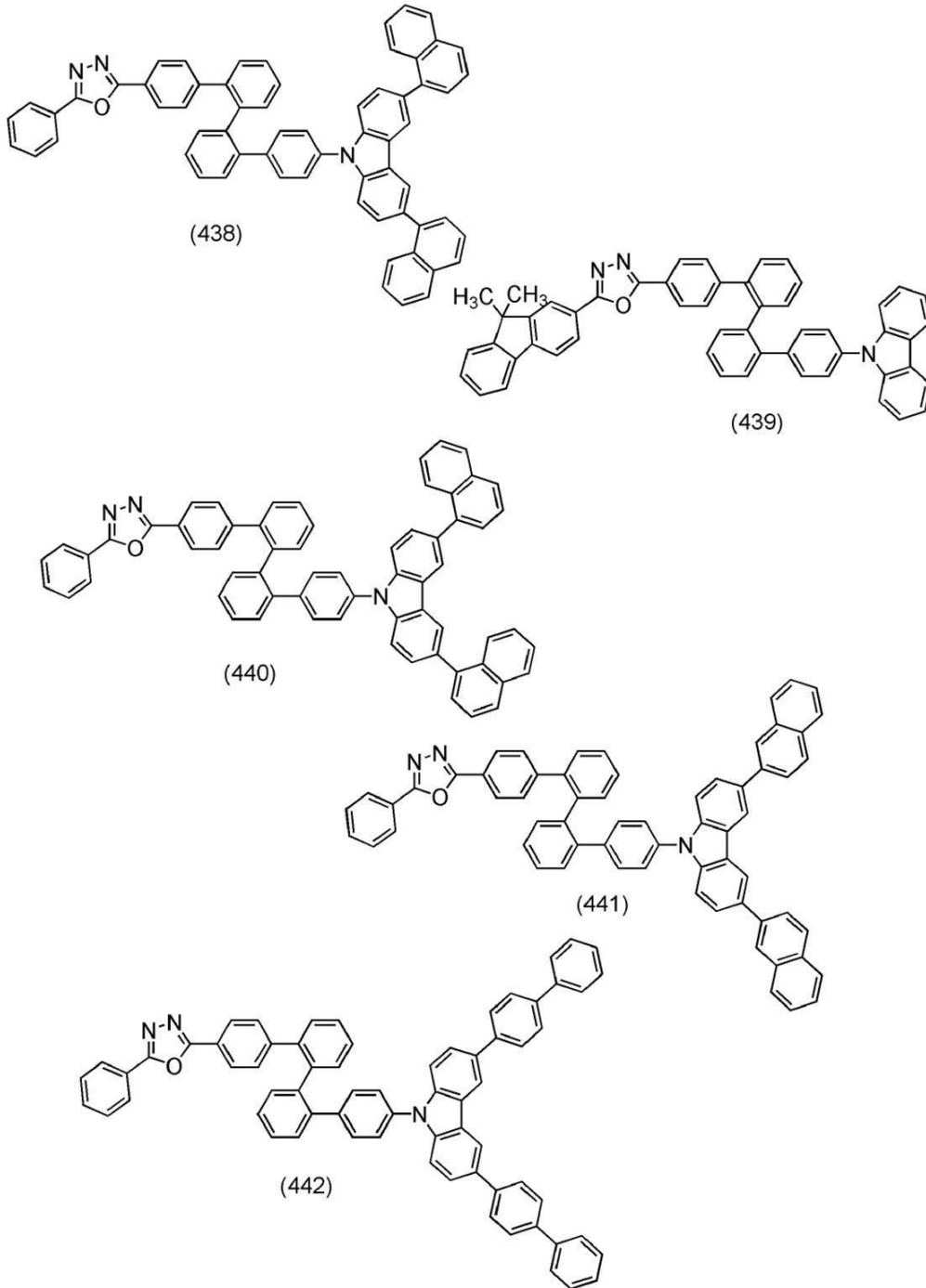


30



【 0 2 1 0 】

【化 6 7】



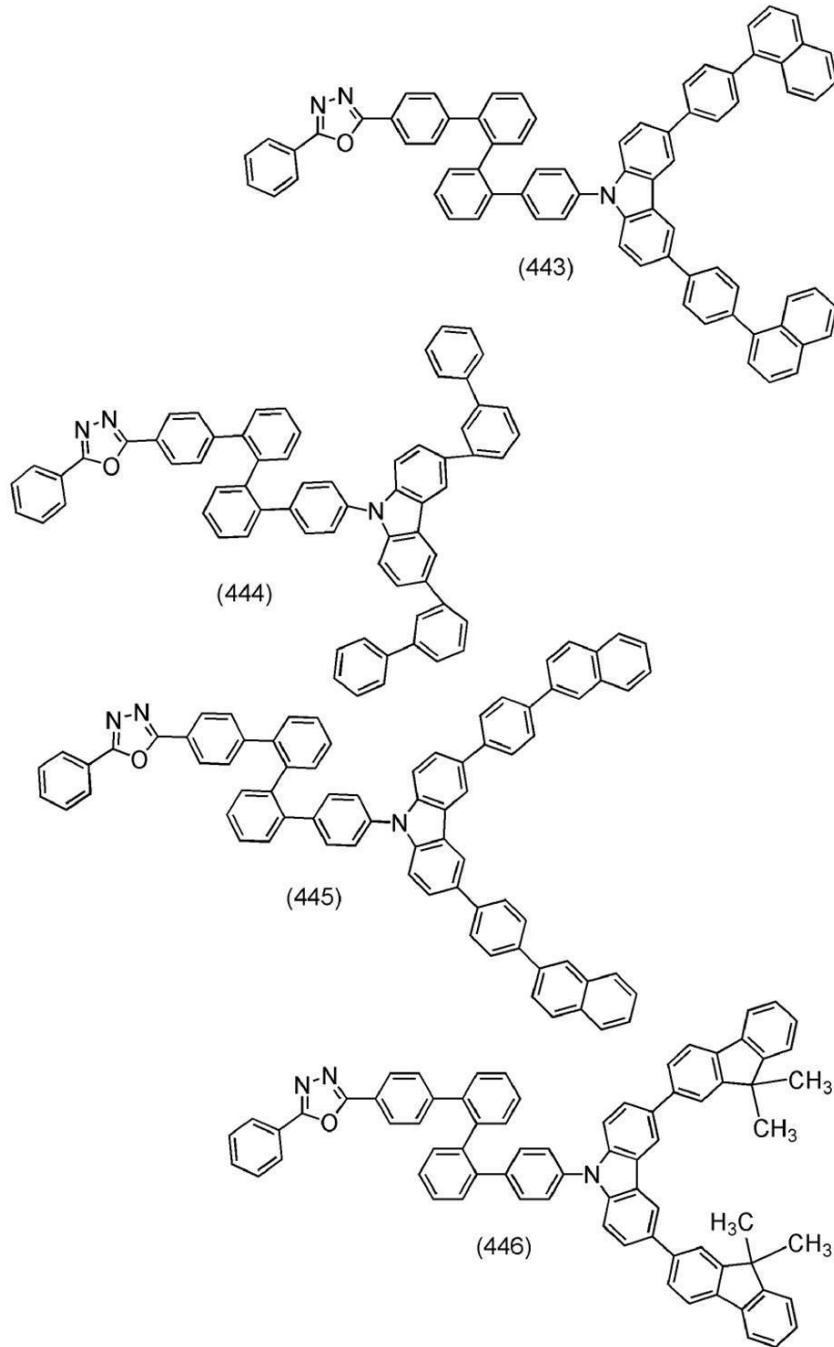
10

20

30

【 0 2 1 1 】

【化 6 8】



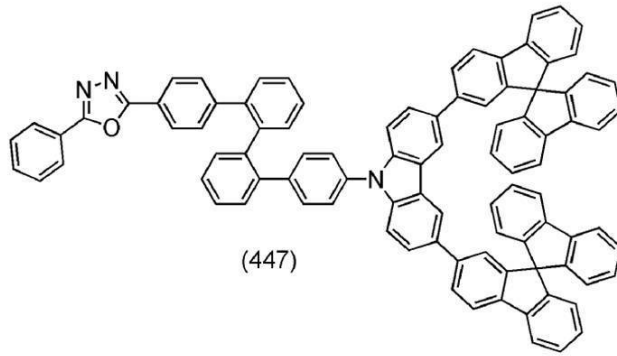
10

20

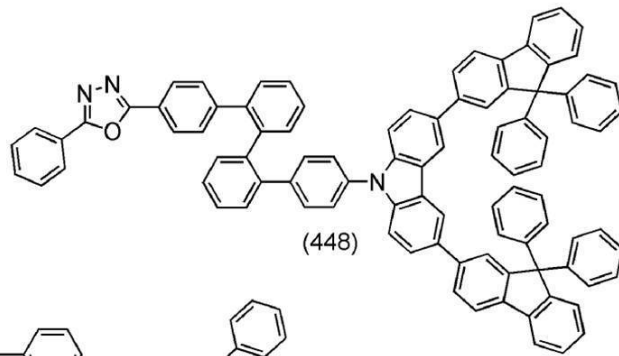
30

【 0 2 1 2 】

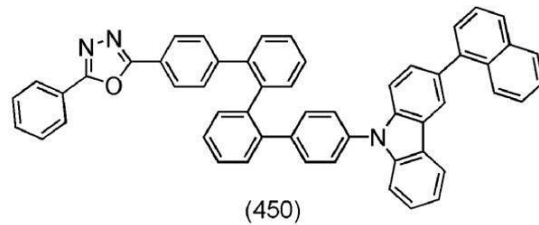
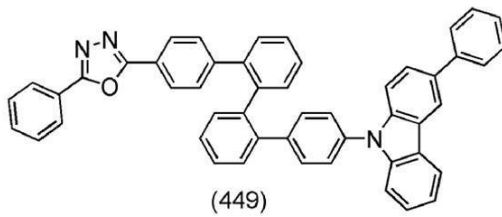
【化 6 9】



10



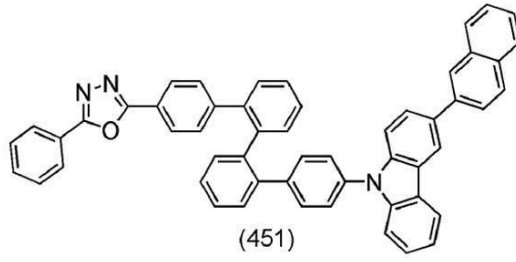
20



30

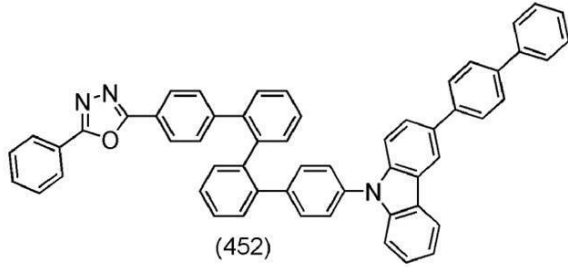
【 0 2 1 3 】

【化70】

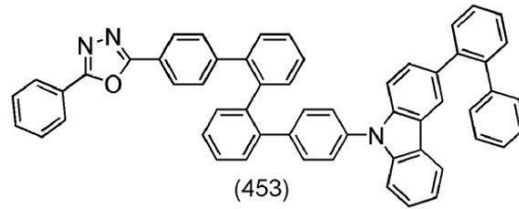


(451)

10

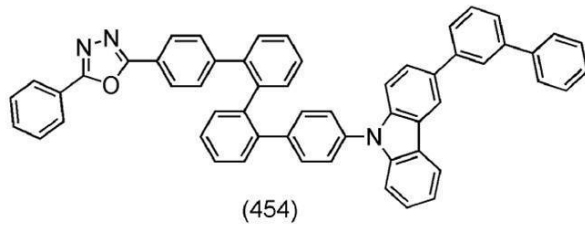


(452)

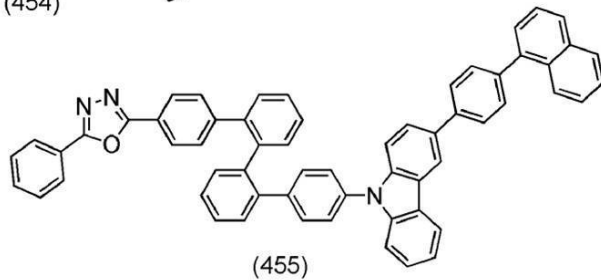


(453)

20



(454)

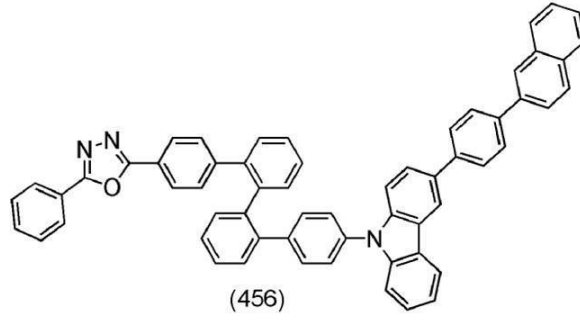


(455)

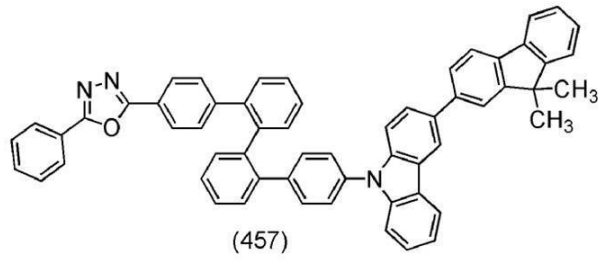
30

【0214】

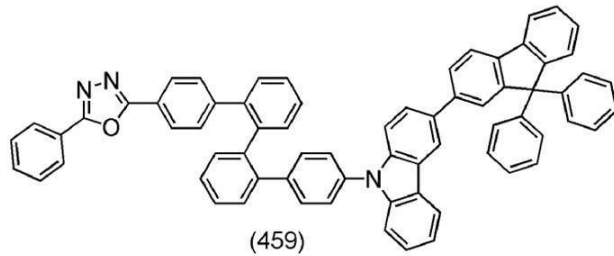
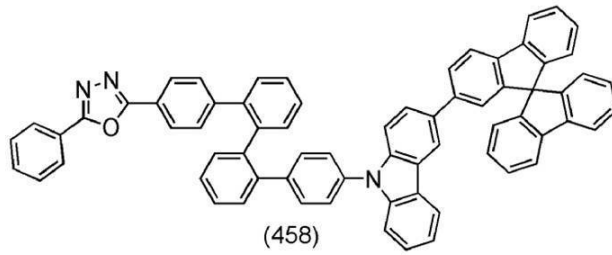
【化 7 1】



10



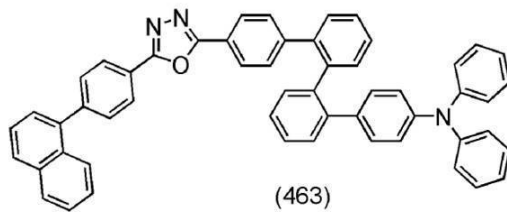
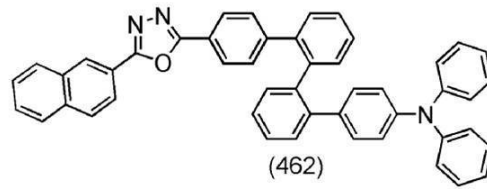
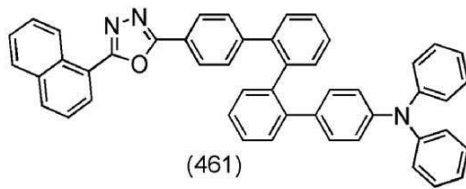
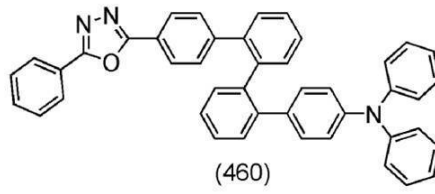
20



30

【 0 2 1 5 】

【化 7 2】



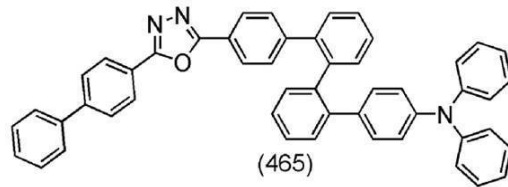
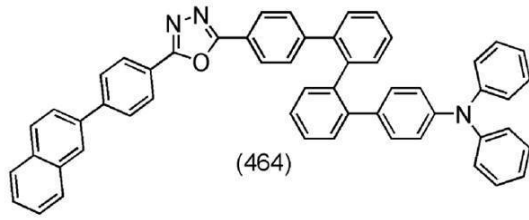
10

20

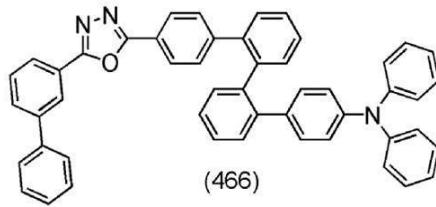
30

【 0 2 1 6 】

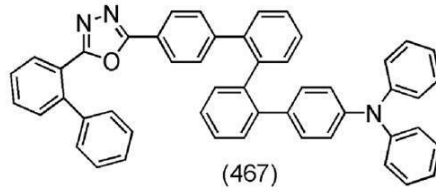
【化 7 3】



10



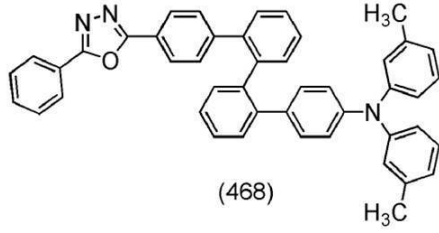
20



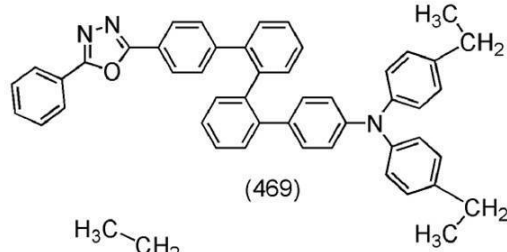
【 0 2 1 7 】

30

【化74】

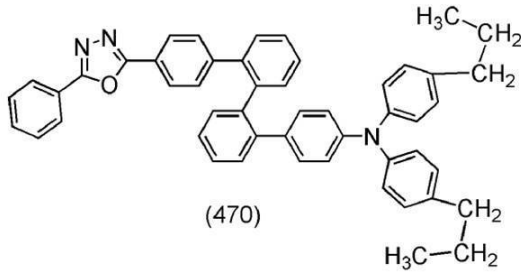


(468)



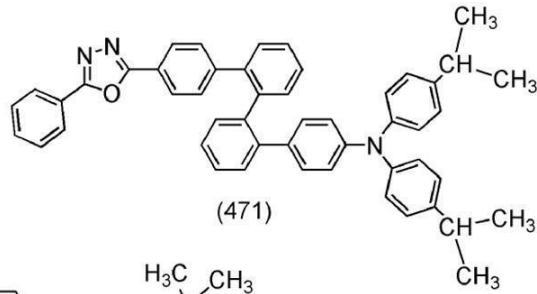
(469)

10

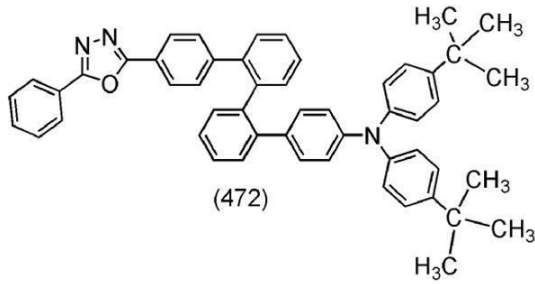


(470)

20



(471)

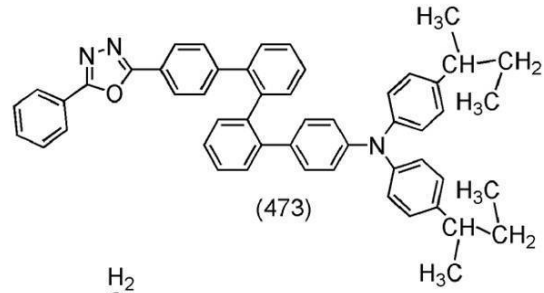


(472)

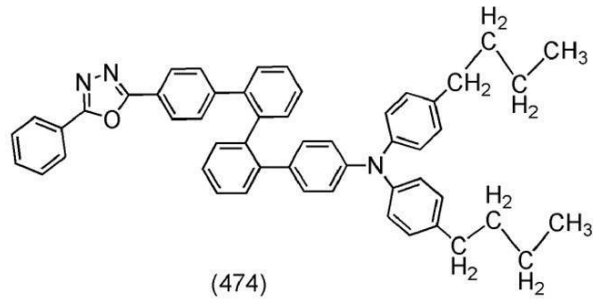
30

【0218】

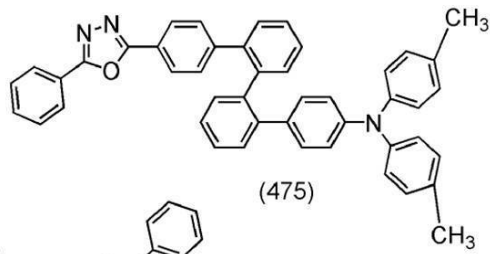
【化 7 5】



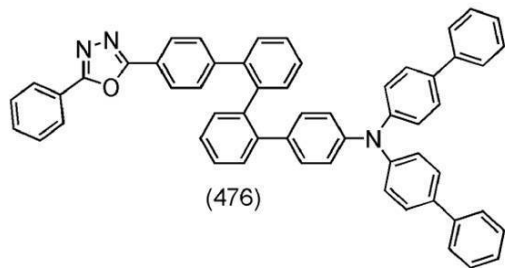
(473)



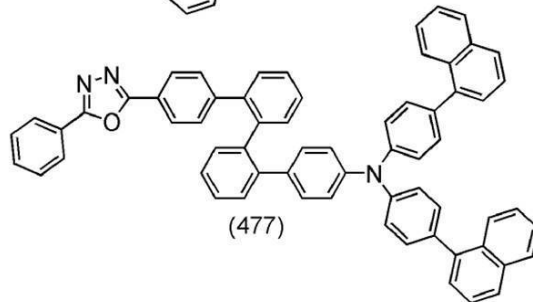
(474)



(475)



(476)



(477)

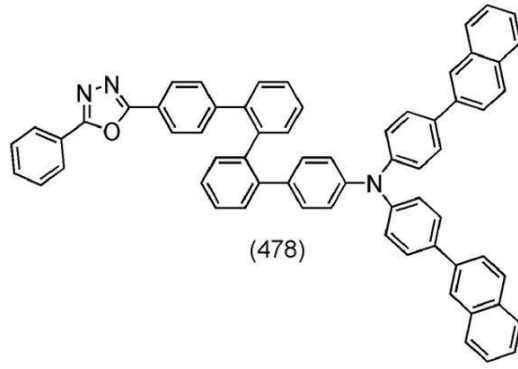
10

20

30

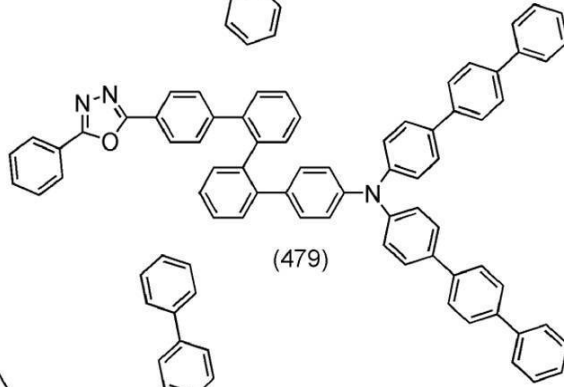
【 0 2 1 9 】

【化 7 6】



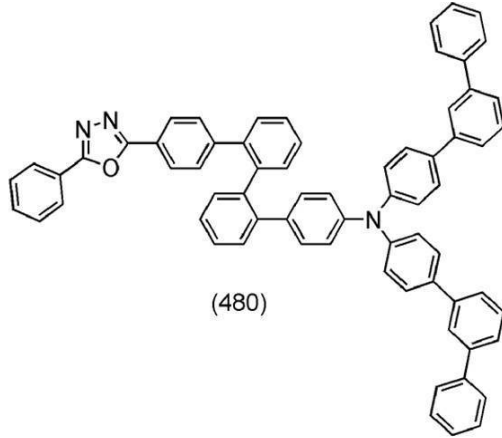
(478)

10

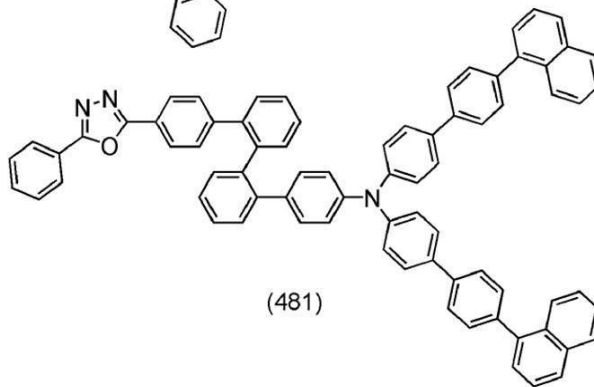


(479)

20



(480)

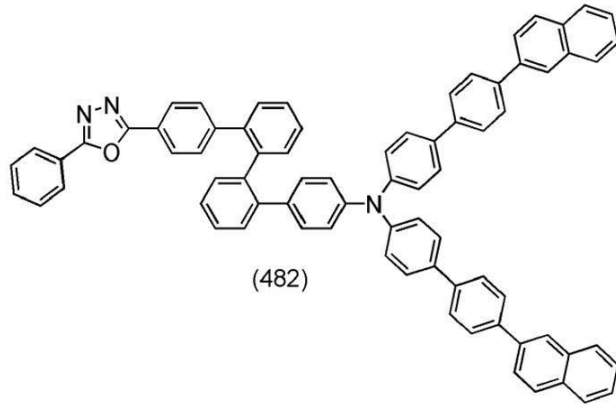


(481)

30

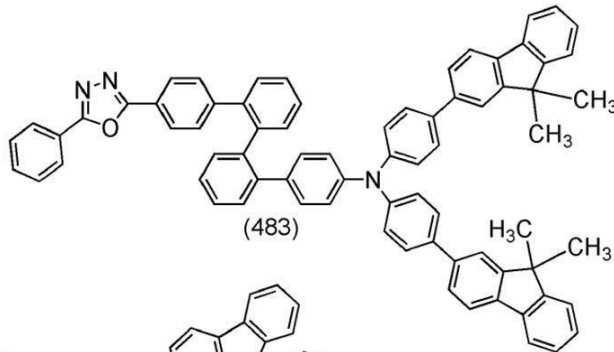
【 0 2 2 0 】

【化 7 7】



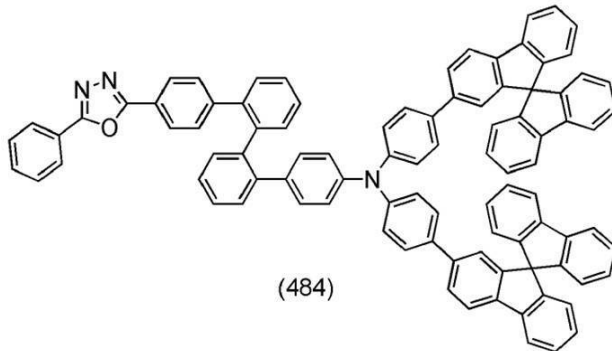
(482)

10



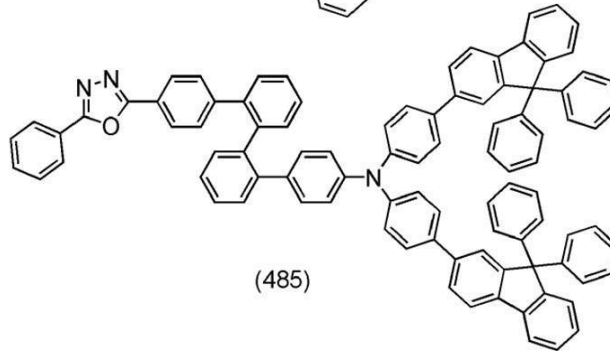
(483)

20



(484)

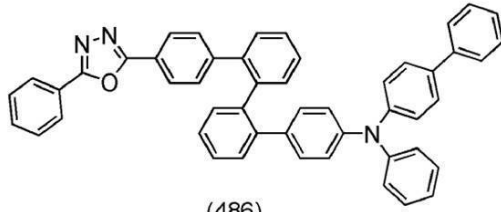
30



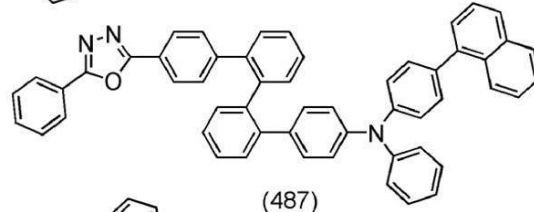
(485)

【 0 2 2 1】

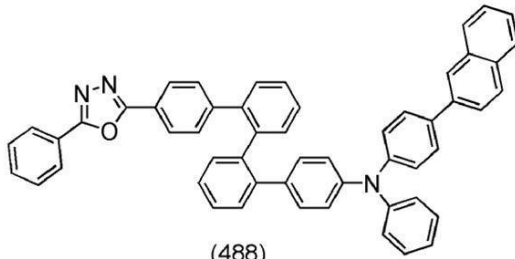
【化 7 8】



(486)



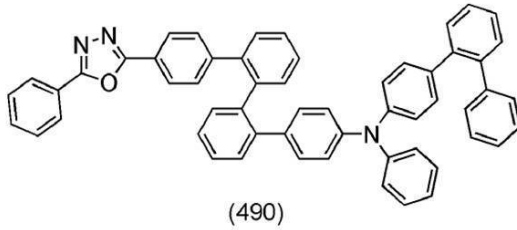
(487)



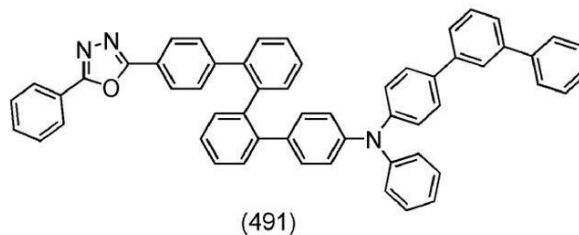
(488)



(489)



(490)



(491)

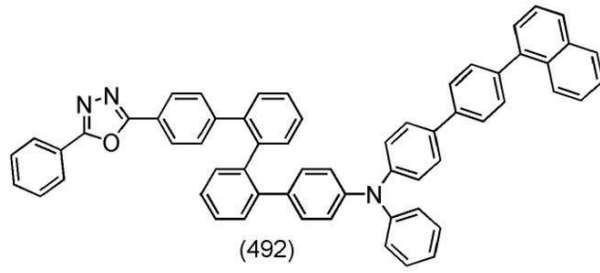
10

20

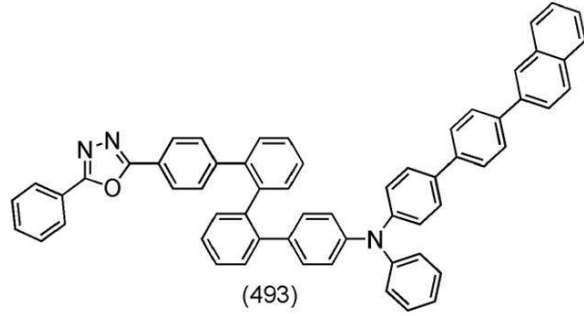
30

【 0 2 2 2】

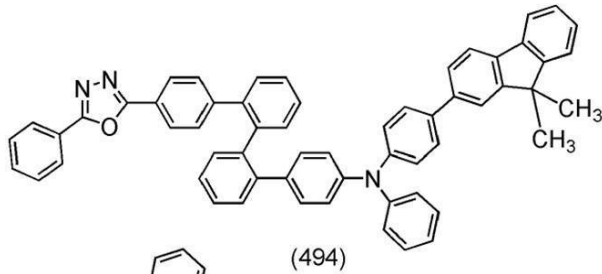
【化 7 9】



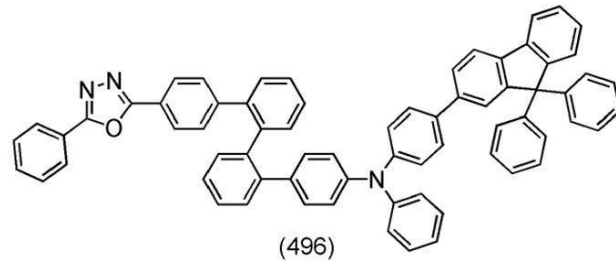
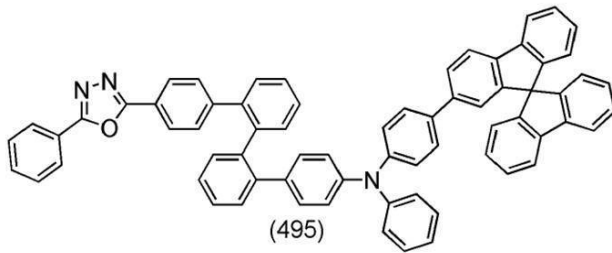
10



20

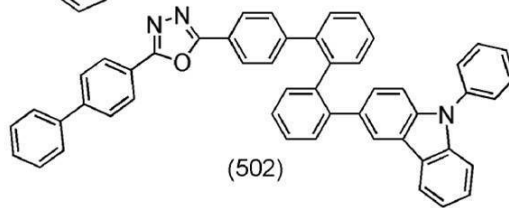
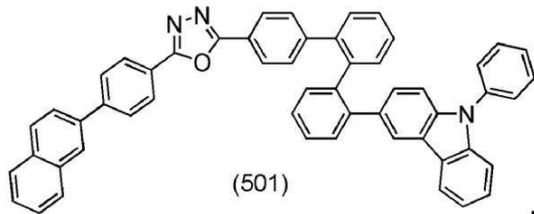
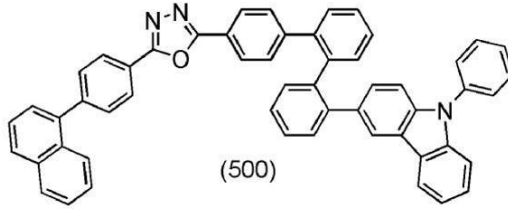
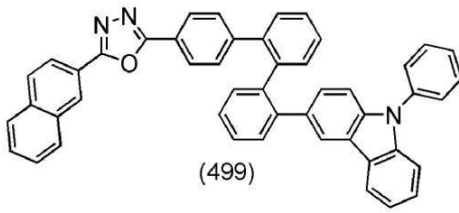
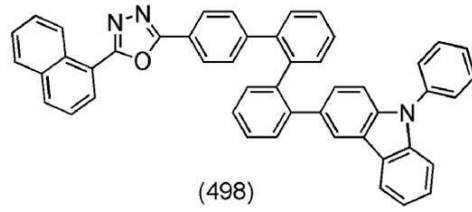
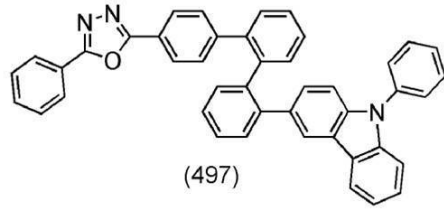


30



【 0 2 2 3】

【化 8 0】



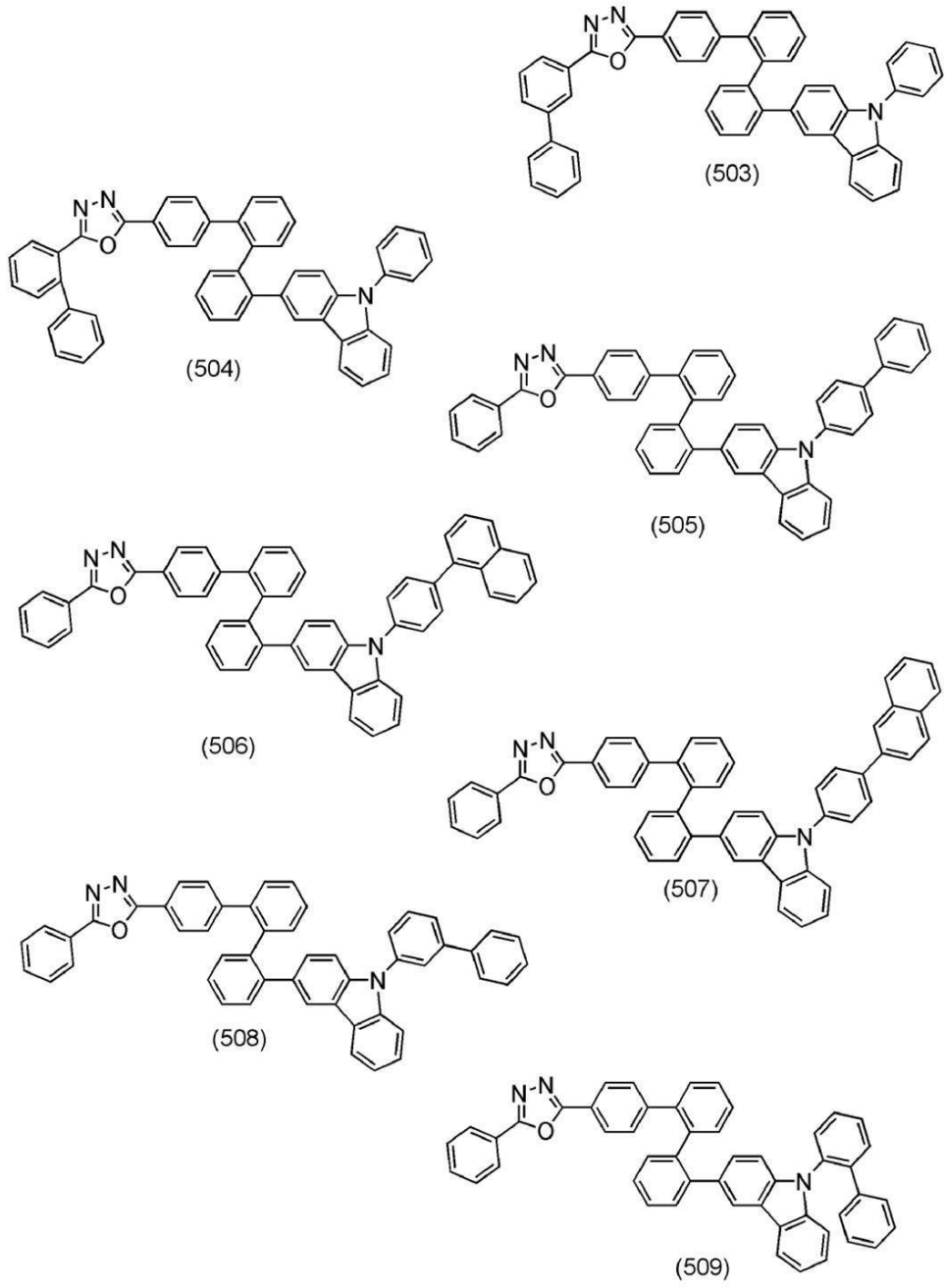
10

20

30

【 0 2 2 4 】

【化 8 1】



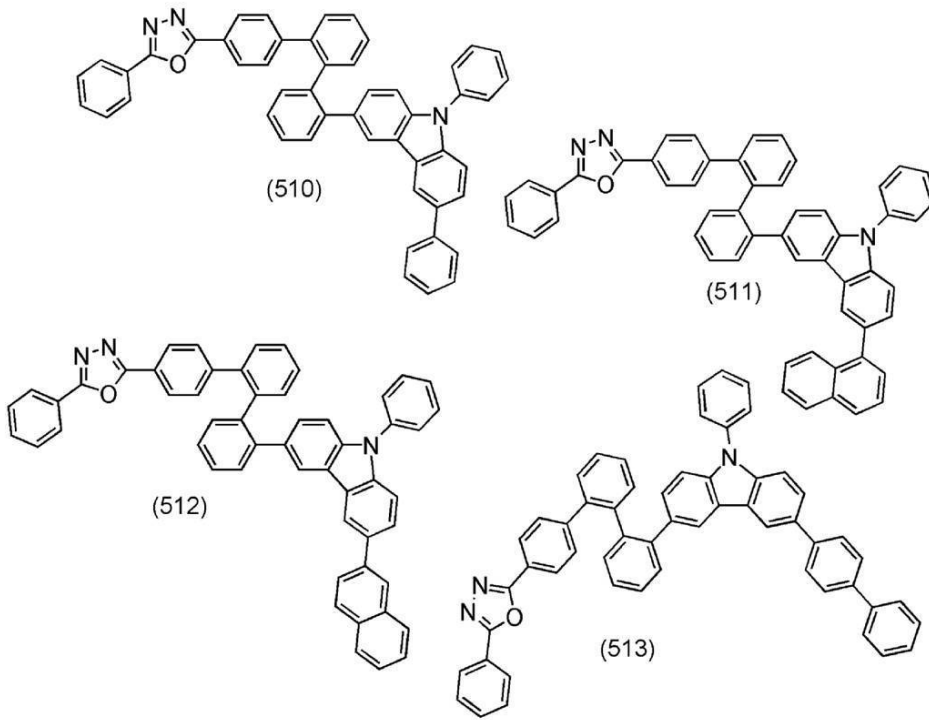
10

20

30

【 0 2 2 5 】

【化 8 2】

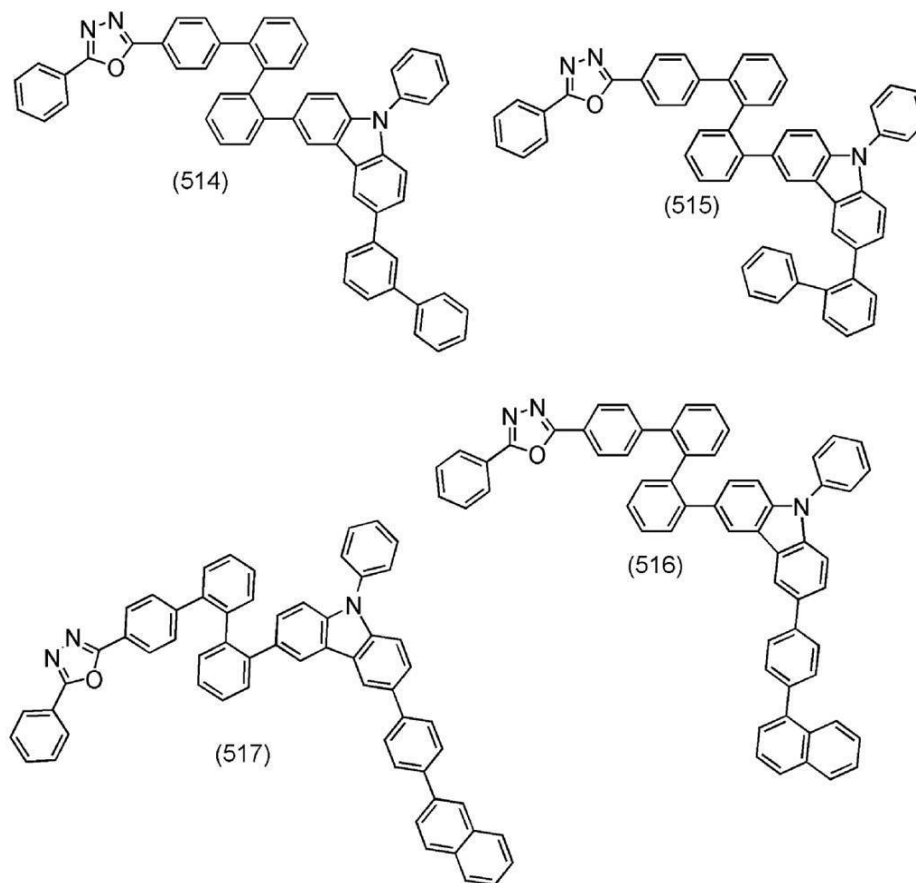


10

20

【 0 2 2 6】

【化 8 3】

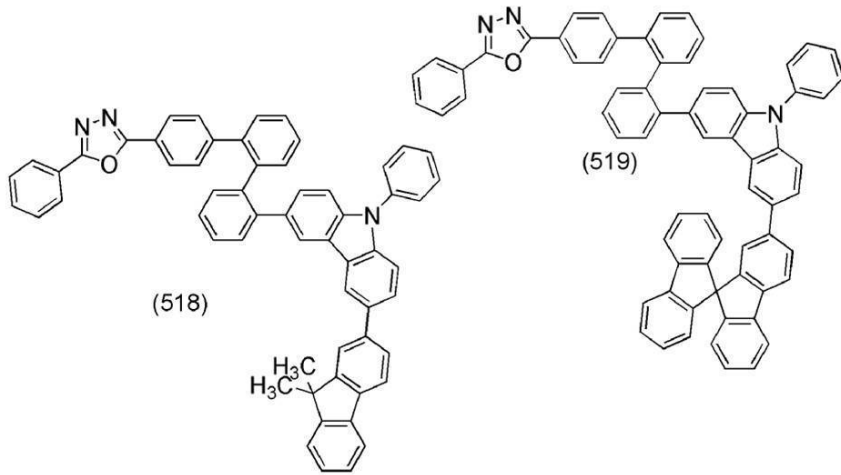


30

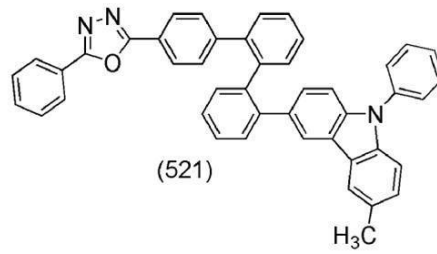
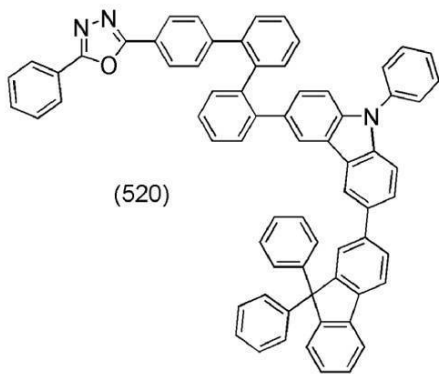
40

【 0 2 2 7】

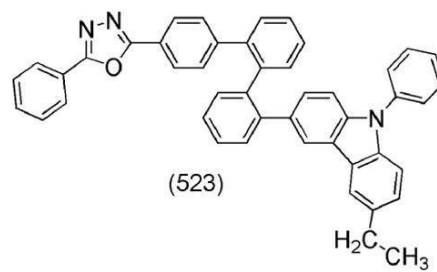
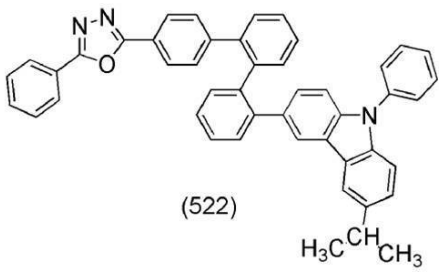
【化 8 4】



10



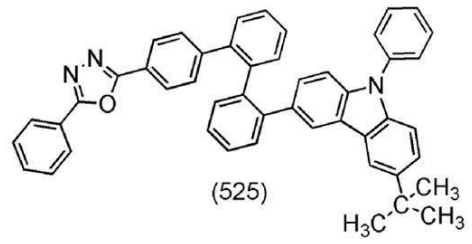
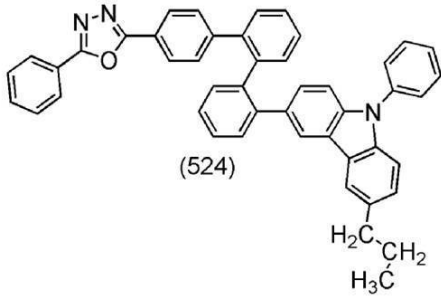
20



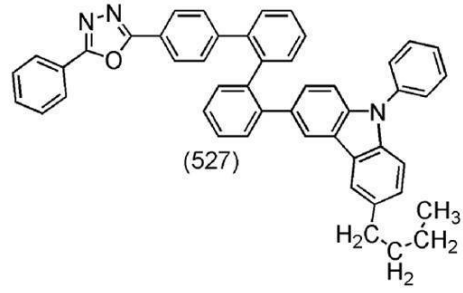
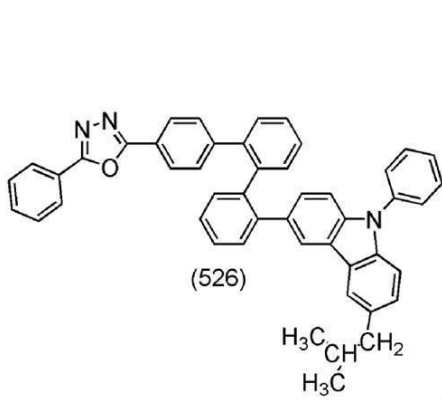
30

【 0 2 2 8 】

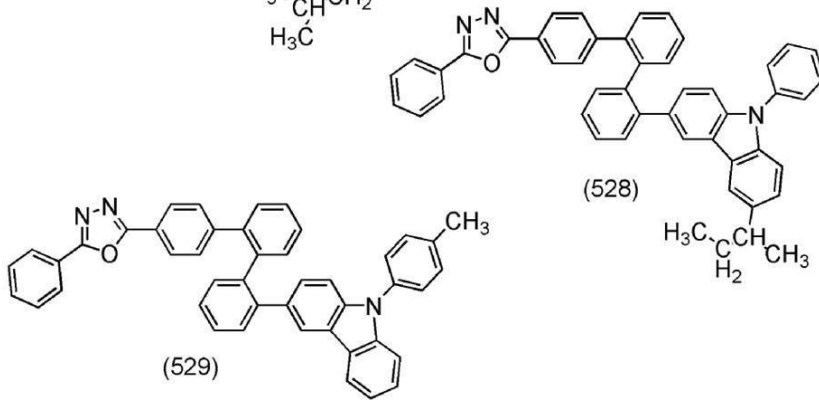
【化 8 5】



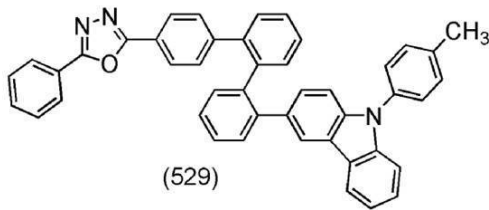
10



20



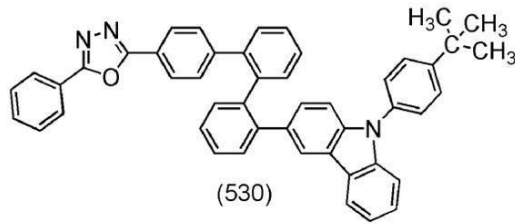
(529)



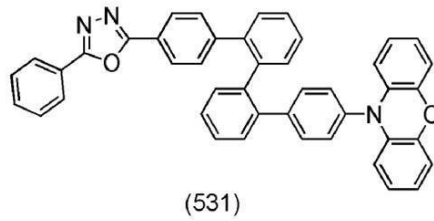
30

【 0 2 2 9 】

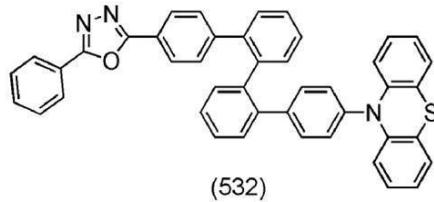
【化 8 6】



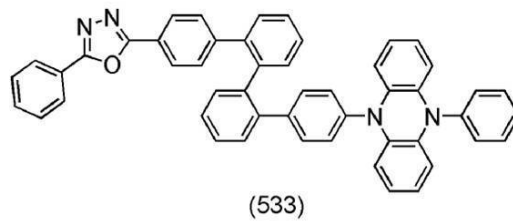
10



20



30



【 0 2 3 0 】

一般式 (OXD1) で表されるオキサジアゾール誘導体は、以下において合成スキーム (11) 乃至 (14) で表される合成方法によって合成することができる。以下、本実施の形態のオキサジアゾール誘導体の合成方法の一例について説明する。

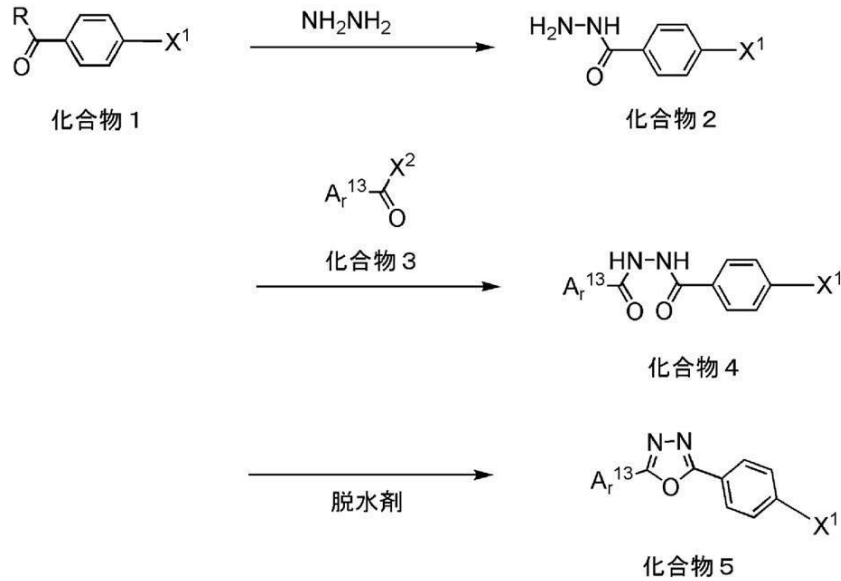
【 0 2 3 1 】

はじめに、ハロゲン化オキサジアゾール誘導体 (化合物 5) を合成する。合成スキーム (11) を以下に示す。

40

【 0 2 3 2 】

【化 8 7】



10

20

【 0 2 3 3】

合成スキーム(11)においては、ハロゲン化アリール誘導体(化合物1)とヒドラジンとを反応させることにより、ハロゲン化アリールヒドラジド(化合物2)を合成する。なお、合成スキーム(11)において、ヒドラジンは水和物であってもよい。次に、ハロゲン化アリールヒドラジド(化合物2)とアリールカルボン酸ハライド(化合物3)とを反応させることにより、ジアシルヒドラジン誘導体(化合物4)を得る。さらに、ジアシルヒドラジン誘導体(化合物4)を脱水剤により脱水閉環させて、1,3,4-オキサジアゾール環を形成させることにより、ハロゲン化オキサジアゾール誘導体(化合物5)を得ることができる。なお、合成スキーム(11)中において、Rは炭素数1~4のアルコシキ基、又はハロゲンを表す。またAr¹³は、炭素数6~10のアリール基を表す。また、X¹およびX²はハロゲン基を表す。X¹はプロモ基またはヨード基であるのが好ましく、X²はクロロ基であるのが好ましい。

30

【 0 2 3 4】

なお、脱水剤としては、塩化ホスホリルや塩化チオニル等を用いることができる。

【 0 2 3 5】

また、ハロゲン化オキサジアゾール誘導体(化合物5)を合成する手法は上記合成スキーム(11)に限定されることはなく、他の公知の手法を用いることができる。

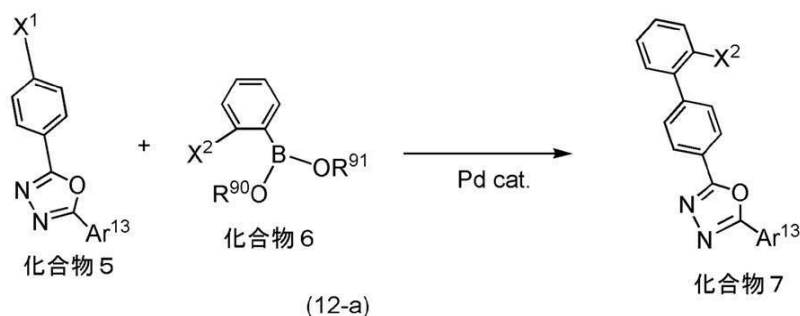
【 0 2 3 6】

次いで、本実施の形態のオキサジアゾール誘導体における電子受容ユニットを合成する。具体的には、化合物7で表されるハロゲン化したオキサジアゾール化合物を合成する。合成スキーム(12-a)を以下に示す。

40

【 0 2 3 7】

【化 8 8】



10

【0238】

ハロゲン化したオキサジアゾール化合物（化合物5）とアリールボロン酸又はその誘導体（化合物6）とを、パラジウム触媒を用いた鈴木・宮浦反応によりカップリングし、ハロゲン化したオキサジアゾール化合物（化合物7）を得ることができる。

【0239】

合成スキーム（12-a）において、 X^1 、 X^2 はハロゲン又はトリフラート基を表し、ハロゲンとしては、ヨウ素、臭素又は塩素が挙げられる。また、 X^1 、 X^2 はそれぞれ同じであっても異なっても良い。また合成スキーム（12-a）において、 R^{90} は、水素、又は炭素数1～6のアルキル基を表し、 R^{91} は、水素又は炭素数1～6のアルキル基を表す。また、 R^{90} と R^{91} は互いに結合して環を形成していてもよい。

20

【0240】

合成スキーム（12-a）において用いることができるパラジウム触媒としては、酢酸パラジウム（II）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）等が挙げられる。合成スキーム（12-a）において用いることができるパラジウム触媒の配位子としては、トリ（オルトトール）ホスフィンや、トリフェニルホスフィンや、トリシクロヘキシルホスフィン等が挙げられる。合成スキーム（12-a）において用いることができる塩基としては、ナトリウム tert-ブトキシド等の有機塩基や、炭酸カリウム等の無機塩基等が挙げられる。

【0241】

合成スキーム（12-a）において用いることができる溶媒としては、トルエンと水の混合溶媒、トルエンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、キシレンと水の混合溶媒、キシレンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、ベンゼンと水の混合溶媒、ベンゼンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、エチレングリコールジメチルエーテル等のエーテル類と水の混合溶媒などが挙げられる。なお、トルエンと水、又はトルエンとエタノールと水の混合溶媒がより好ましい。

30

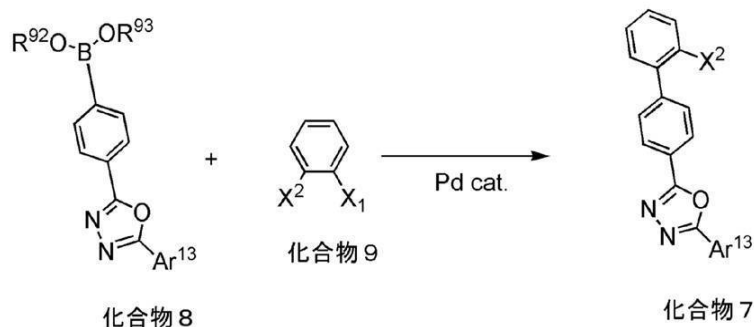
【0242】

なお、化合物7で表されるハロゲン化したオキサジアゾール化合物の合成法は、合成スキーム（12-a）に示した合成法に限られない。例えば、以下に示す合成スキーム（12-b）の合成方法によって合成してもよい。

40

【0243】

【化 8 9】



10

【 0 2 4 4 】

ボロン酸またはその誘導体（化合物 8）とジハロゲン化アリール（化合物 9）とを、パラジウム触媒を用いた鈴木・宮浦反応によりカップリングし、ハロゲン化したオキサジアゾール化合物（化合物 7）を得ることができる。

【 0 2 4 5 】

合成スキーム（12 - b）において、 X^1 、 X^2 はハロゲン又はトリフラート基を表し、ハロゲンとしては、ヨウ素、臭素、又は塩素が挙げられる。また、 X^1 、 X^2 はそれぞれ同じであっても異なっても良い。また R^{92} は、水素、又は炭素数 1 ~ 6 のアルキル基を表し、 R^{93} は、水素又は炭素数 1 ~ 6 のアルキル基を表す。また、 R^{92} と R^{93} は互いに結合して環を形成していてもよい。

20

【 0 2 4 6 】

合成スキーム（12 - b）において用いることができるパラジウム触媒としては、酢酸パラジウム（II）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）等が挙げられる。合成スキーム（12 - b）において用いることができるパラジウム触媒の配位子としては、トリ（オルトトトリル）ホスフィンや、トリフェニルホスフィンや、トリシクロヘキシルホスフィン等が挙げられる。合成スキーム（12 - b）において用いることができる塩基としては、ナトリウム tert - ブトキシド等の有機塩基や、炭酸カリウム等の無機塩基等が挙げられる。

30

【 0 2 4 7 】

合成スキーム（12 - b）において用いることができる溶媒としては、トルエンと水の混合溶媒、トルエンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、キシレンと水の混合溶媒、キシレンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、ベンゼンと水の混合溶媒、ベンゼンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、エチレングリコールジメチルエーテル等のエーテル類と水の混合溶媒などが挙げられる。また、トルエンと水、又はトルエンとエタノールと水の混合溶媒がより好ましい。

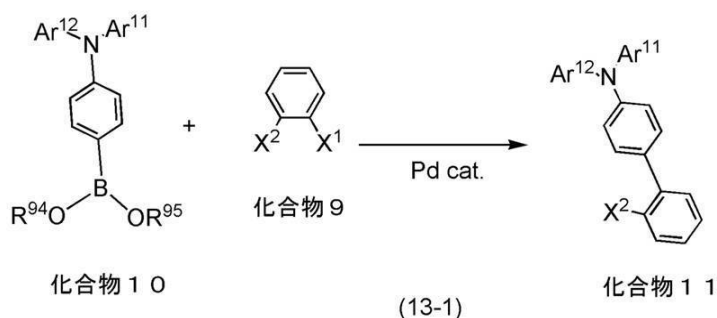
【 0 2 4 8 】

次いで、本実施の形態のオキサジアゾール誘導体におけるホール受容ユニットを合成する。合成スキーム（13 - 1）及び（13 - 2）を以下に示す。

40

【 0 2 4 9 】

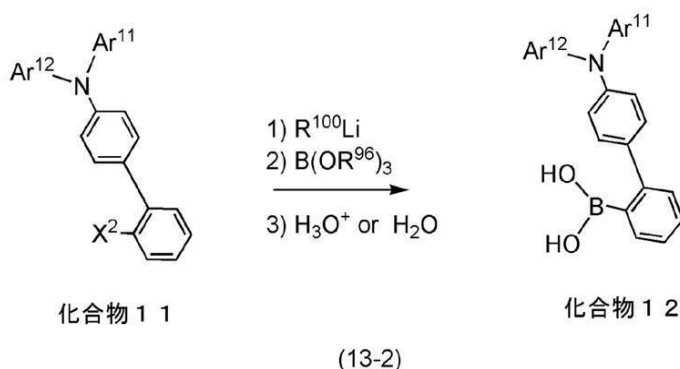
【化90】



10

【0250】

【化91】



20

【0251】

3級アリールアミン化合物のボロン酸またはその誘導体（化合物10）とジハロゲン化アリール（化合物9）とを、パラジウム触媒を用いた鈴木・宮浦反応によりカップリングすることで、ハロゲン化アリールアミン化合物（化合物11）を合成する（合成スキーム（13-1））。

【0252】

合成スキーム（13-1）において、 X^1 、 X^2 はハロゲン又はトリフラート基を表し、ハロゲンとしては、ヨウ素、臭素、又は塩素が挙げられる。また、 X^1 、 X^2 はそれぞれ同じであっても異なっても良い。また Ar^{11} 、 Ar^{12} は、炭素数6～13の置換または無置換のアリール基を表す。また、 R^{94} 及び R^{95} は水素、あるいは炭素数1～6のアルキル基を表す。

【0253】

合成スキーム（13-1）において用いることができるパラジウム触媒としては、酢酸パラジウム（II）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）等が挙げられる。合成スキーム（13-1）において用いることができるパラジウム触媒の配位子としては、トリ（オルトトリル）ホスフィンや、トリフェニルホスフィンや、トリシクロヘキシルホスフィン等が挙げられる。

30

40

【0254】

合成スキーム（13-1）において用いることができる塩基としては、ナトリウム tert-ブトキシド等の有機塩基や、炭酸カリウム等の無機塩基等が挙げられる。合成スキーム（13-1）において用いることができる溶媒としては、トルエンと水の混合溶媒、トルエンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、キシレンと水の混合溶媒、キシレンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、ベンゼンと水の混合溶媒、ベンゼンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、エチレングリコールジメチルエーテル等のエーテル類と水の混合溶媒などが挙げられる。なお、トルエンと水、又はトルエンとエタノールと水の混合溶媒がより好ましい。

50

【0255】

次いで、ハロゲン化アリールアミン化合物（化合物11）をアルキルリチウム試薬とホウ酸エステルを用いてボロン酸へ変換することにより、3級アミノボロン酸（化合物12）を得ることができる（合成スキーム（13-2））。

【0256】

合成スキーム（13-2）においてR¹⁰⁰は炭素数1～6のアルキル基を表す。R⁹⁶は炭素数1～6のアルキル基を表す。化合物12のホウ酸骨格をエチレングリコールやピナコールで保護してもよい。

【0257】

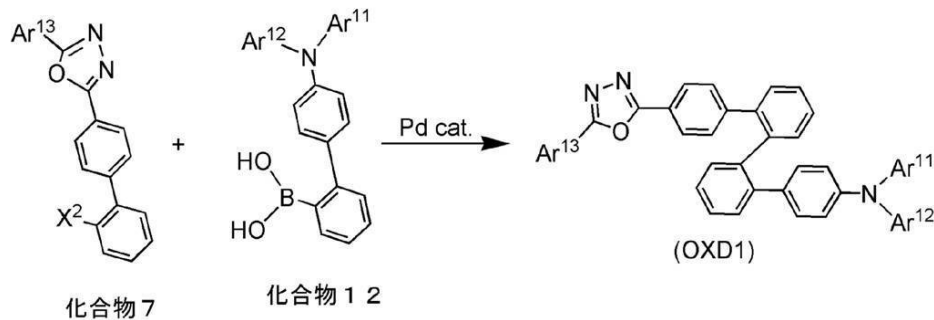
合成スキーム（13-2）において、アルキルリチウム試薬としてはn-ブチルリチウム、メチルリチウム等を用いることができる。また、ホウ酸エステルとしてはホウ酸トリメチル、ホウ酸イソプロピルなどを用いることができる。

【0258】

次いで、化合物7と化合物12をカップリングさせて、一般式（OXD1）で表される本実施の形態のオキサジアゾール誘導体を合成する。合成スキーム（14）を以下に示す。

【0259】

【化92】



【0260】

ハロゲン化したオキサジアゾール化合物（化合物7）と3級アリールアミノボロン酸（化合物12）とを、パラジウム触媒を用いた鈴木・宮浦反応によりカップリングすることで、一般式（OXD1）で表される本実施の形態のオキサジアゾール誘導体を得ることができる。

【0261】

合成スキーム（14）において、X²はハロゲン又はトリフラート基を表し、ハロゲンとしては、ヨウ素、臭素または塩素が挙げられる。またAr¹¹、Ar¹²及びAr¹³は、炭素数6～13の置換または無置換のアリール基を表す。

【0262】

合成スキーム（14）において用いることができるパラジウム触媒としては、酢酸パラジウム（II）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）等が挙げられる。合成スキーム（14）において用いることができるパラジウム触媒の配位子としては、トリ（オルトトリル）ホスフィンや、トリフェニルホスフィンや、トリシクロヘキシルホスフィン等が挙げられる。合成スキーム（14）において用いることができる塩基としては、ナトリウム tert-ブトキシド等の有機塩基や、炭酸カリウム等の無機塩基等が挙げられる。

【0263】

合成スキーム（14）において用いることができる溶媒としては、トルエンと水の混合溶媒、トルエンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、キシレンと水の混合溶媒、キシレンとエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、ベンゼンと水の混合溶媒、ベンゼン

とエタノール等のアルコールと水の混合溶媒、エチレングリコールジメチルエーテル等のエーテル類と水の混合溶媒などが挙げられる。なお、トルエンと水、又はトルエンとエタノールと水の混合溶媒がより好ましい。また、化合物 1 2 の代わりに、化合物 1 2 のホウ酸骨格をアルキル基で保護した構造の化合物を用いてもよい。

【0264】

以上によって、本実施の形態のオキサジアゾール誘導体を合成することができる。

【0265】

本実施の形態のオキサジアゾール誘導体は励起エネルギーが高く、電子輸送性とホール輸送性を有する。よって、発光素子に好適に用いることができる。特に、発光素子が効率良く発光するためには注入される電子とホールのバランスが重要であるため、本実施の形態のオキサジアゾール誘導体を発光層に用いることが好ましい。また、本実施の形態のオキサジアゾール誘導体は、三重項励起エネルギーが大きいため、燐光を発光する物質とともに発光層に用いることができる。

10

【0266】

また、一重項励起エネルギー（基底状態と一重項励起状態とのエネルギー差）は三重項励起エネルギーよりも大きいため、大きな三重項励起エネルギーを有する物質は大きな一重項励起エネルギーをも有する。したがって、三重項励起エネルギーの大きい本実施の形態のオキサジアゾール誘導体は蛍光を発光する物質とともに発光層に用いた場合においても有益である。

【0267】

また、本実施の形態のオキサジアゾール誘導体は、電子輸送性を有するオキサジアゾール骨格とホール輸送性を有する骨格とを、共役が広がりにくいねじれたクアテルフェニレン骨格を介して結合することで、高い三重項励起エネルギーを維持したまま分子量を大きくすることができるため、電気化学的安定性及び熱的安定性の高いオキサジアゾール誘導体とすることが可能である。よって、本実施の形態のオキサジアゾール誘導体を用いることで発光素子の信頼性を向上させることができる。

20

【0268】

また、本実施の形態のオキサジアゾール誘導体は、キャリアを輸送することができるため、発光素子において、キャリア輸送層として用いることができる。特に、本実施の形態のオキサジアゾール誘導体は、大きい三重項エネルギーを有するため、発光層と接する層に用いても発光層からのエネルギー移動が生じにくく、高い発光効率を実現することができる。

30

【0269】

（実施の形態 4）

本実施の形態では、実施の形態 1 乃至 3 で示した有機半導体材料を用いた発光素子の一態様について、図 1 および図 2 を用いて説明する。

【0270】

本実施の形態の発光素子は、一对の電極間に複数の層を有する。当該複数の層は、電極から離れたところに発光領域が形成されるように、つまり電極から離れた部位でキャリアの再結合が行われるように、キャリア注入性の高い物質やキャリア輸送性の高い物質からなる層を組み合わせることで積層されたものである。

40

【0271】

本形態において、発光素子は、第 1 の電極 102 と、第 2 の電極 104 と、第 1 の電極 102 と第 2 の電極との間に設けられた EL 層とから構成されている。なお、本形態では第 1 の電極 102 は陽極として機能し、第 2 の電極 104 は陰極として機能するものとして、以下、説明をする。つまり、第 1 の電極 102 の方が第 2 の電極 104 よりも電位が高くなるように、第 1 の電極 102 と第 2 の電極 104 に電圧を印加したときに、発光が得られるものとして、以下説明をする。

【0272】

基板 101 は発光素子の支持体として用いられる。基板 101 としては、例えばガラス、

50

またはプラスチック、金属などを用いることができる。なお、発光素子の支持体として機能するものであれば、これら以外のものでもよい。なお、発光素子からの発光を、基板を通して外部へ取り出す場合には、基板 101 は透光性を有する基板であることが好ましい。

【0273】

第1の電極 102 としては、仕事関数の大きい（具体的には 4.0 eV 以上であることが好ましい）金属、合金、導電性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。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（IZO: Indium Zinc Oxide）、酸化タングステン及び酸化亜鉛を含有した酸化インジウム（IWZO）等が挙げられる。これらの導電性金属酸化物膜は、通常スパッタにより成膜されるが、ゾル - ゲル法などを応用して、インクジェット法、スピコート法などにより作製しても構わない。例えば、酸化インジウム - 酸化亜鉛（IZO）は、酸化インジウムに対し 1 ~ 20 wt % の酸化亜鉛を加えたターゲットを用いてスパッタリング法により形成することができる。また、酸化タングステン及び酸化亜鉛を含有した酸化インジウム（IWZO）は、酸化インジウムに対し酸化タングステンを 0.5 ~ 5 wt %、酸化亜鉛を 0.1 ~ 1 wt % 含有したターゲットを用いてスパッタリング法により形成することができる。この他、金（Au）、白金（Pt）、ニッケル（Ni）、タングステン（W）、クロム（Cr）、モリブデン（Mo）、鉄（Fe）、コバルト（Co）、銅（Cu）、パラジウム（Pd）、チタン（Ti）、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。

10

20

【0274】

また、第1の電極 102 と接する層として、後述する複合材料を含む層を用いた場合には、第1の電極 102 として、仕事関数の大小に関わらず、様々な金属、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できる。例えば、アルミニウム（Al）、銀（Ag）、アルミニウムを含む合金（AlSi など）等を用いることができる。また、仕事関数の小さい材料である、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）、カルシウム（Ca）、ストロンチウム（Sr）等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金（MgAg、AlLi）、ユウロピウム（Eu）、イッテルビウム（Yb）等の希土類金属およびこれらを含む合金等を用いることもできる。アルカリ金属、アルカリ土類金属、これらを含む合金の膜は、真空蒸着法を用いて形成することができる。また、アルカリ金属またはアルカリ土類金属を含む合金はスパッタリング法により形成することも可能である。また、銀ペーストなどをインクジェット法などにより成膜することも可能である。

30

【0275】

本実施の形態で示す EL 層 103 は、ホール注入層 111、ホール輸送層 112、発光層 113、電子輸送層 114、電子注入層 115 を有している。なお、EL 層 103 は、少なくとも発光層を有していればよく、その他の層の積層構造については特に限定されない。すなわち、EL 層 103 は、層の積層構造については特に限定されず、電子輸送性の高い物質またはホール輸送性の高い物質、電子注入性の高い物質、ホール注入性の高い物質、バイポーラ性（電子及びホールの輸送性の高い物質）の物質、発光性の高い物質等を含む層と、実施の形態 1 乃至 3 で示した有機半導体材料とを適宜組み合わせる構成すればよい。例えば、ホール注入層、ホール輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層等を適宜組み合わせる構成することができる。各層を構成する材料について以下に具体的に示す。

40

【0276】

ホール注入層 111 は、ホール注入性の高い物質を含む層である。ホール注入性の高い物質としては、酸化モリブデンや酸化バナジウム、酸化ルテニウム、酸化タングステン、酸化マンガン等を用いることができる。この他、低分子の有機化合物としては、フタロシアニン（略称：H₂Pc）、銅（II）フタロシアニン（略称：CuPc）、バナジルフタ

50

ロシアニン（略称：VOPc）等のフタロシアニン系の化合物、4, 4', 4'' - トリス（N, N - ジフェニルアミノ）トリフェニルアミン（略称：TDATA）、4, 4', 4'' - トリス [N - (3 - メチルフェニル) - N - フェニルアミノ] トリフェニルアミン（略称：MTDATA）、4, 4' - ビス [N - (4 - ジフェニルアミノフェニル) - N - フェニルアミノ] ビフェニル（略称：DPAB）、4, 4' - ビス（N - { 4 - [N' - (3 - メチルフェニル) - N' - フェニルアミノ] フェニル } - N - フェニルアミノ）ビフェニル（略称：DNTPD）、1, 3, 5 - トリス [N - (4 - ジフェニルアミノフェニル) - N - フェニルアミノ] ベンゼン（略称：DPA3B）、3 - [N - (9 - フェニルカルバゾール - 3 - イル) - N - フェニルアミノ] - 9 - フェニルカルバゾール（略称：PCzPCA1）、3, 6 - ビス [N - (9 - フェニルカルバゾール - 3 - イル) - N - フェニルアミノ] - 9 - フェニルカルバゾール（略称：PCzPCA2）、3 - [N - (1 - ナフチル) - N - (9 - フェニルカルバゾール - 3 - イル) アミノ] - 9 - フェニルカルバゾール（略称：PCzPCN1）等の芳香族アミン化合物等が挙げられる。

【0277】

また、ホール注入層111として、ホール輸送性の高い物質にアクセプター性物質を含有させた複合材料を用いることができる。なお、ホール輸送性の高い物質にアクセプター性物質を含有させたものを用いることにより、電極の仕事関数に依らず電極を形成する材料を選ぶことができる。つまり、第1の電極102として仕事関数の大きい材料だけでなく、仕事関数の小さい材料を用いることができる。これらの複合材料は、ホール輸送性の高い物質とアクセプター物質とを共蒸着することにより形成することができる。

【0278】

なお、本明細書中において、複合とは、単に2つの材料を混合させるだけでなく、複数の材料を混合することによって材料間での電荷の授受が行われ得る状態になることを言う。

【0279】

複合材料に用いる有機化合物としては、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、芳香族炭化水素、高分子化合物（オリゴマー、 dendriマー、ポリマー等）など、種々の化合物を用いることができる。なお、複合材料に用いる有機化合物としては、ホール輸送性の高い有機化合物であることが好ましい。具体的には、 $10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{Vs}$ 以上のホール移動度を有する物質であることが好ましい。但し、電子よりもホール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。以下では、複合材料に用いることのできる有機化合物を具体的に列挙する。

【0280】

複合材料に用いることのできる有機化合物としては、例えば、MTDATA、TDATA、DPAB、DNTPD、DPA3B、PCzPCA1、PCzPCA2、PCzPCN1、4, 4' - ビス [N - (1 - ナフチル) - N - フェニルアミノ] ビフェニル（略称：NPBまたは - NPD）、N, N' - ビス（3 - メチルフェニル） - N, N' - ジフェニル - [1, 1' - ビフェニル] - 4, 4' - ジアミン（略称：TPD）等の芳香族アミン化合物や、4, 4' - ジ（N - カルバゾリル）ビフェニル（略称：CBP）、1, 3, 5 - トリス [4 - (N - カルバゾリル) フェニル] ベンゼン（略称：TCPB）、9 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) フェニル] - 9H - カルバゾール（略称：CzPA）、1, 4 - ビス [4 - (N - カルバゾリル) フェニル] - 2, 3, 5, 6 - テトラフェニルベンゼン等のカルバゾール誘導体や、2 - tert - ブチル - 9, 10 - ジ（2 - ナフチル）アントラセン（略称：t - BuDNA）、2 - tert - ブチル - 9, 10 - ジ（1 - ナフチル）アントラセン、9, 10 - ビス（3, 5 - ジフェニルフェニル）アントラセン（略称：DPPA）、2 - tert - ブチル - 9, 10 - ビス（4 - フェニルフェニル）アントラセン（略称：t - BuDBA）、9, 10 - ジ（2 - ナフチル）アントラセン（略称：DNA）、9, 10 - ジフェニルアントラセン（略称：DPAnth）、2 - tert - ブチルアントラセン（略称：t - BuAnth）、9, 10 - ビス（4 - メチル - 1 - ナフチル）アントラセン（略称：DMNA）、9, 10 - ビス [2 - (1 - ナフチル) フェニル] - 2 - tert - ブチル - アントラセン、9, 10 - ビス [2 -

(1-ナフチル)フェニル]アントラセン、2,3,6,7-テトラメチル-9,10-ジ(1-ナフチル)アントラセン、2,3,6,7-テトラメチル-9,10-ジ(2-ナフチル)アントラセン、9,9'-ピアントリル、10,10'-ジフェニル-9,9'-ピアントリル、10,10'-ビス(2-フェニルフェニル)-9,9'-ピアントリル、10,10'-ビス[(2,3,4,5,6-ペンタフェニル)フェニル]-9,9'-ピアントリル、アントラセン、テトラセン、ルブレン、ペリレン、2,5,8,11-テトラ(tert-ブチル)ペリレン、ペンタセン、コロネン、4,4'-ビス(2,2-ジフェニルビニル)ビフェニル(略称:DPVBi)、9,10-ビス[4-(2,2-ジフェニルビニル)フェニル]アントラセン(略称:DPVPA)等の芳香族炭化水素化合物を挙げることができる。

10

【0281】

また、アクセプター性物質としては、7,7,8,8-テトラシアノ-2,3,5,6-テトラフルオロキノジメタン(略称:F₄-TCNQ)、クロラニル等の有機化合物や、遷移金属酸化物を挙げることができる。また、元素周期表における第4族乃至第8族に属する金属の酸化物を挙げることができる。具体的には、酸化バナジウム、酸化ニオブ、酸化タンタル、酸化クロム、酸化モリブデン、酸化タングステン、酸化マンガン、酸化レニウムは電子受容性が高いため好ましい。中でも特に、酸化モリブデンは大気中でも安定であり、吸湿性が低く、扱いやすいため好ましい。

【0282】

また、ホール注入層111としては、高分子化合物(オリゴマー、 dendリマー、ポリマー等)を用いることができる。例えば、ポリ(N-ビニルカルバゾール)(略称:PVK)、ポリ(4-ビニルトリフェニルアミン)(略称:PVTPA)、ポリ[N-(4-{N'-[4-(4-ジフェニルアミノ)フェニル]フェニル-N'-フェニルアミノ}フェニル)メタクリルアミド](略称:PTPDMA)ポリ[N,N'-ビス(4-ブチルフェニル)-N,N'-ビス(フェニル)ベンジジン](略称:Poly-TPD)などの高分子化合物が挙げられる。また、ポリ(3,4-エチレンジオキシチオフェン)/ポリ(スチレンスルホン酸)(PEDOT/PSS)、ポリアニリン/ポリ(スチレンスルホン酸)(PANI/PSS)等の酸を添加した高分子化合物を用いることができる。

20

【0283】

また、上述したPVK、PVTPA、PTPDMA、Poly-TPD等の高分子化合物と、上述したアクセプター性物質を用いて複合材料を形成し、ホール注入層111として用いてもよい。

30

【0284】

ホール輸送層112は、ホール輸送性の高い物質を含む層である。ホール輸送性の高い物質としては、低分子の有機化合物としては、NPB(または-NPD)、TPD、4,4'-ビス[N-(9,9-ジメチルフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:DFLDPBi)、4,4'-ビス[N-(スピロ-9,9'-ビフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:BSPB)、4,4',4''-トリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン(略称:m-MTDATA)、N-[4-(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル]-N-フェニル-スピロ-9,9'-ビフルオレン-2-アミン(略称:YGASF)、N,N'-ビス[4-(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル-N,N'-ジフェニルビフェニル-4,4'-ジアミン(略称:YGABP)、4-(9H-カルバゾール-9-イル)-2'-フェニルトリフェニルアミン(略称:o-YGA1BP)、4-(9H-カルバゾール-9-イル)-3'-フェニルトリフェニルアミン(略称:m-YGA1BP)、4-(9H-カルバゾール-9-イル)-4'-フェニルトリフェニルアミン(略称:p-YGA1BP)、1,3,5-トリ(N-カルバゾリル)ベンゼン(略称:TCzB)、4,4',4''-トリス(N-カルバゾリル)トリフェニルアミン(略称:TCTA)などの芳香族アミン化合物を用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{Vs}$ 以上のホール移動度を有する物質である。但し、電子よりもホ

40

50

ール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、ホール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。

【0285】

また、上述したホール輸送性の高い物質にアクセプター性物質を含有させた複合材料をホール輸送層112として用いても良い。

【0286】

また、ホール輸送層112として、PVK、PVTPA、PTPDMA、Poly-TPDなどの高分子化合物を用いることもできる。

【0287】

発光層113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や燐光を発光する燐光性化合物を用いることができる。また、発光性の高い物質は、一種だけでなく複数種用いてもよい。

【0288】

発光層に用いることのできる燐光性化合物としては、例えば、青色系の発光材料として、ビス[2-(4',6'-ジフルオロフェニル)ピリジナト-N, C^{2'}']イリジウム(III)テトラキス(1-ピラゾリル)ボラート(略称:FIr6)、ビス[2-(4',6'-ジフルオロフェニル)ピリジナト-N, C^{2'}']イリジウム(III)ピコリナート(略称:FIrpic)、ビス[2-(3',5'-ビストリフルオロメチルフェニル)ピリジナト-N, C^{2'}']イリジウム(III)ピコリナート(略称:Ir(CF₃ppy)₂(pic))、ビス[2-(4',6'-ジフルオロフェニル)ピリジナト-N, C^{2'}']イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:FIracac)などが挙げられる。また、緑色系の発光材料として、トリス(2-フェニルピリジナト-N, C^{2'})イリジウム(III)(略称:Ir(ppy)₃)、ビス(2-フェニルピリジナト-N, C^{2'})イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(ppy)₂(acac))、ビス(1,2-ジフェニル-1H-ベンゾイミダゾラト)イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(pbi)₂(acac))、ビス(ベンゾ[h]キノリナト)イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(bzq)₂(acac))などが挙げられる。また、黄色系の発光材料として、ビス(2,4-ジフェニル-1,3-オキサゾラト-N, C^{2'})イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(dpo)₂(acac))、ビス[2-(4'-パーフルオロフェニル)ピリジナト]イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(p-PF-ph)₂(acac))、ビス(2-フェニルベンゾチアゾラト-N, C^{2'})イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(bt)₂(acac))などが挙げられる。また、橙色系の発光材料として、トリス(2-フェニルキノリナト-N, C^{2'})イリジウム(III)(略称:Ir(pq)₃)、ビス(2-フェニルキノリナト-N, C^{2'})イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(pq)₂(acac))などが挙げられる。また、赤色系の発光材料として、ビス[2-(2'-ベンゾ[4,5-]チエニル)ピリジナト-N, C^{3'}']イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(btp)₂(acac))、ビス(1-フェニルイソキノリナト-N, C^{2'})イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(piq)₂(acac))、(アセチルアセトナト)ビス[2,3-ビス(4-フルオロフェニル)キノキサリナト]イリジウム(III)(略称:Ir(Fdpq)₂(acac))、2,3,7,8,12,13,17,18-オクタエチル-21H,23H-ポルフィリン白金(II)(略称:PtOEP)等の有機金属錯体が挙げられる。また、トリス(アセチルアセトナト)(モノフェナントロリン)テルビウム(III)(略称:Tb(acac)₃(Phen))、トリス(1,3-ジフェニル-1,3-プロパンジオナト)(モノフェナントロリン)ユーロピウム(III)(略称:Eu(DBM)₃(Phen))、トリス[1-(2-テノイル)-3,3,3-トリフルオロアセトナト](モノフェ

10

20

30

40

50

ナントロリン)ユーロピウム(III)(略称:Eu(TTA)₃(Phen))等の希土類金属錯体は、希土類金属イオンからの発光(異なる多重度間の電子遷移)であるため、燐光性化合物として用いることができる。

【0289】

発光層に用いることのできる蛍光性化合物としては、例えば、青色系の発光材料として、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 Stilben-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-(9H-カルバゾール-9-イル)-4'-(9,10-ジフェニル-2-アントリル)トリフェニルアミン(略称:2YGAPPA)、N,9-ジフェニル-N-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール-3-アミン(略称:PCAPA)、ペリレン、2,5,8,11-テトラ-tert-ブチルペリレン(略称:TBP)、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、緑色系の発光材料として、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-[9,10-ビス(1,1'-ビフェニル-2-イル)]-N-[4-(9H-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:2YGABPhA)、N,N,9-トリフェニルアントラセン-9-アミン(略称:DPhAPhA)などが挙げられる。また、黄色系の発光材料として、ルブレン、5,12-ビス(1,1'-ビフェニル-4-イル)-6,11-ジフェニルテトラセン(略称:BPT)などが挙げられる。また、赤色系の発光材料として、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-mPhTD)、7,13-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-mPhAFD)などが挙げられる。

【0290】

なお、発光層としては、上述した発光性の高い物質(ゲスト材料)を他の物質(ホスト材料)に分散させた構成としてもよい。発光性の物質を分散させるための物質(ホスト材料)としては、各種のものを用いることができ、発光性の高い物質(ゲスト材料)よりも最低空軌道準位(LUMO準位)が高く、最高被占有軌道準位(HOMO準位)が低い物質を用いることが好ましい。なお、本明細書中において、HOMO準位又はLUMO準位が高いとは、そのエネルギーレベルが大きいことを意味し、HOMO準位又はLUMO準位が低いとは、そのエネルギーレベルが小さいことを意味する。例えば、-5.5 eVのHOMO準位を有する物質Aは、-5.2 eVのHOMO準位を有する物質BよりHOMO準位が0.3 eV低く、-5.7 eVのHOMO準位を有する物質CよりHOMO準位が0.2 eV高いとすることができる。

【0291】

実施の形態1乃至3で示した有機半導体材料は、広いバンドギャップを有し、バイポーラ性であるため、ホスト材料として好適である。実施の形態1乃至3で示した有機半導体材料は、広いバンドギャップを有するため、短波長の発光を示すゲスト材料を用いた場合であっても効率よくゲスト材料からの発光を得ることができる。また、発光素子の駆動電圧を低減することができる。

【0292】

また、実施の形態1乃至3で示した有機半導体材料は、大きい三重項励起エネルギーを有

するため、ゲスト材料として燐光性化合物を用いた場合であっても効率よくゲスト材料からの発光を得ることができる。特に、短波長の発光を示す燐光性化合物を用いた場合に顕著な効果が得られる。

【0293】

ホスト材料は複数種用いることができる。例えば、結晶化を抑制するためにルブレン等の結晶化を抑制する物質をさらに添加してもよい。また、発光性の物質へのエネルギー移動をより効率良く行うためにNPB、あるいはAlq等をさらに添加してもよい。

【0294】

発光性の高い物質（ゲスト材料）を他の物質（ホスト材料）に分散させた構成とすることにより、発光層113の結晶化を抑制することができる。また、発光性の高い物質（ゲスト材料）の濃度が高いことによる濃度消光を抑制することができる。

10

【0295】

電子輸送層114は、電子輸送性の高い物質を含む層である。例えば、低分子の有機化合物として、トリス（8-キノリノラト）アルミニウム（III）（略称：Alq）、トリス（4-メチル-8-キノリノラト）アルミニウム（III）（略称：Almq₃）、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：BeBq₂）、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：BALq）、ビス（8-キノリノラト）亜鉛（II）（略称：Znq）、ビス[2-（2-ベンゾオキサゾリル）フェノラト]亜鉛（II）（略称：ZnPBO）、ビス[2-（2-ベンゾチアゾリル）フェノラト]亜鉛（II）（略称：ZnBTZ）などの金属錯体を用いることができる。さらに、金属錯体以外にも、2-（4-ピフェニル）-5-（4-tert-ブチルフェニル）-1,3,4-オキサジアゾール（略称：PBD）、1,3-ビス[5-（p-tert-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：OXD-7）、3-（4-ピフェニル）-4-フェニル-5-（4-tert-ブチルフェニル）-1,2,4-トリアゾール（略称：TAZO1）、2,2',2''-（1,3,5-ベンゼントリイル）トリス（1-フェニル-1H-ベンゾイミダゾール）（略称：TPBI）、パソフェナントロリン（略称：BPhen）、パソキュープロイン（略称：BCP）などの複素環化合物も用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{Vs}$ 以上の電子移動度を有する物質である。なお、ホールよりも電子の輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を電子輸送層として用いても構わない。また、電子輸送層は、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。

20

30

【0296】

また、電子輸送層114として、高分子化合物を用いることができる。例えば、ポリ[（9,9-ジヘキシルフルオレン-2,7-ジイル）-co-（ピリジン-3,5-ジイル）]（略称：PF-Py）、ポリ[（9,9-ジオクチルフルオレン-2,7-ジイル）-co-（2,2'-ビピリジン-6,6'-ジイル）]（略称：PF-BPy）などを用いることができる。

【0297】

電子注入層115は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入性の高い物質としては、リチウム（Li）、マグネシウム（Mg）、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）等のようなアルカリ金属又はアルカリ土類金属又はそれらの化合物を用いることができる。例えば、電子輸送性を有する物質からなる層中にアルカリ金属又はアルカリ土類金属又はそれらの化合物を含有させたもの、例えばAlqからなる層中にマグネシウム（Mg）を含有させたもの等を用いることができる。なお、電子注入層として、電子輸送性を有する物質からなる層中にアルカリ金属又はアルカリ土類金属を含有させたものを用いることにより、第2の電極104からの電子注入が効率良く行われるためより好ましい。

40

【0298】

第2の電極104を形成する物質としては、仕事関数の小さい（具体的には 3.8 eV 以

50

下であることが好ましい) 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できる。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)、カルシウム(Ca)、ストロンチウム(Sr)等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金(MgAg、AlLi)、ユウロピウム(Eu)、イッテルビウム(Yb)等の希土類金属およびこれらを含む合金等が挙げられる。アルカリ金属、アルカリ土類金属、これらを含む合金の膜は、真空蒸着法を用いて形成することができる。また、アルカリ金属またはアルカリ土類金属を含む合金はスパッタリング法により形成することも可能である。また、銀ペーストなどをインクジェット法などに塗布して第2の電極104を形成することも可能である。

10

【0299】

また、第2の電極104と電子輸送層114との間に、電子注入を促す機能を有する層である電子注入層115を設けることにより、仕事関数の大小に関わらず、Al、Ag、ITO、珪素若しくは酸化珪素を含有した酸化インジウム-酸化スズ等様々な導電性材料を第2の電極104として用いることができる。これら導電性材料は、スパッタリング法やインクジェット法、スピコート法等を用いて成膜することが可能である。

【0300】

なお、実施の形態1で示した有機半導体材料は青色発光を示すため、発光性の高い物質として、発光層に用いることもできる。例えば、実施の形態3で示したオキサジアゾール誘導体は、紫色~青色の発光を示し、発光性の高い物質として発光素子に好適に用いることができる。また、実施の形態1乃至3で示した有機半導体材料はパイポーラ性であるため、発光層以外の層(例えば、ホール輸送層、電子輸送層など)に用いることもできる。また、実施の形態1乃至3で示した有機半導体材料は広いバンドギャップを有するため、電子ブロック層やホールブロック層として用いることもできる。また、実施の形態1乃至3で示した有機半導体材料は大きい三重項励起エネルギーを有するため、エキシトンブロック層として用いることもできる。

20

【0301】

EL層の形成方法としては、乾式法、湿式法を問わず、種々の方法を用いることができる。例えば、真空蒸着法、インクジェット法またはスピコート法など用いても構わない。また各電極または各層ごとに異なる成膜方法を用いて形成しても構わない。

30

【0302】

例えば、高分子化合物を用いて湿式法でEL層を形成してもよい。または、低分子の有機化合物を用いて湿式法で形成することもできる。また、低分子の有機化合物を用いて真空蒸着法などの乾式法を用いてEL層を形成してもよい。

【0303】

また、電極についても、ゾル-ゲル法を用いて湿式法で形成しても良いし、金属材料のペーストを用いて湿式法で形成してもよい。また、スパッタリング法や真空蒸着法などの乾式法を用いて形成しても良い。

【0304】

例えば、本実施の形態の発光素子を表示装置に適用し、大型基板を用いて作製する場合には、発光層は湿式法により形成することが好ましい。発光層を、インクジェット法を用いて形成することにより、大型基板を用いても発光層の塗り分けが容易となる。

40

【0305】

以上のような構成を有する本実施の形態の発光素子は、第1の電極102と第2の電極104との間に電位差を与えることにより電流が流れ、EL層103においてホールと電子とが再結合し、発光するものである。

【0306】

発光は、第1の電極102または第2の電極104のいずれか一方または両方を通して外部に取り出される。従って、第1の電極102または第2の電極104のいずれか一方または両方は、透光性を有する電極である。例えば、第1の電極102のみが透光性を有す

50

る電極である場合、発光は第1の電極102を通過して基板側から取り出される。また、第2の電極104のみが透光性を有する電極である場合、発光は第2の電極104を通過して基板と逆側から取り出される。第1の電極102および第2の電極104がいずれも透光性を有する電極である場合、発光は第1の電極102および第2の電極104を通過して、基板側および基板と逆側の両方から取り出される。

【0307】

なお、第1の電極102と第2の電極104との間に設けられる層の構成は、上記のものには限定されない。発光領域と金属とが近接することによって生じる消光を防ぐように、第1の電極102および第2の電極104から離れた部位にホールと電子とが再結合する発光領域を設けた構成であり、実施の形態1で示した有機半導体材料を有する構成であれば、上記以外のものでもよい。

10

【0308】

つまり、層の積層構造については特に限定されず、電子輸送性の高い物質またはホール輸送性の高い物質、電子注入性の高い物質、ホール注入性の高い物質、バイポーラ性（電子及びホールの輸送性の高い物質）の物質等から成る層と、実施の形態1乃至3で示した有機半導体材料を適宜組み合わせる構成すればよい。

【0309】

例えば、図2に示すように、基板101上に、陰極として機能する第2の電極104、EL層103、陽極として機能する第1の電極102とが順に積層された構成としてもよい。図2では、第2の電極104上に、電子注入層115、電子輸送層114、発光層113、ホール輸送層112、ホール注入層111が順に積層された構成となっている。

20

【0310】

なお、本実施の形態においては、ガラス、プラスチックなどからなる基板上に発光素子を作製している。一基板上にこのような発光素子を複数作製することで、パッシブマトリクス型の発光装置を作製することができる。また、ガラス、プラスチックなどからなる基板上に、例えば、薄膜トランジスタ（TFT）を形成し、TFTと電氣的に接続された電極上に発光素子を作製してもよい。これにより、TFTによって発光素子の駆動を制御するアクティブマトリクス型の発光装置を作製できる。なお、TFTの構造は、特に限定されない。スタガ型のTFTでもよいし、逆スタガ型のTFTでもよい。また、TFT基板に形成される駆動用回路についても、N型およびP型のTFTからなるものでもよいし、若しくはN型のTFTまたはP型のTFTのいずれか一方からのみなるものでもよい。また、TFTに用いられる半導体膜の結晶性についても特に限定されない。非晶質半導体膜を用いてもよいし、結晶性半導体膜を用いてもよい。また、単結晶半導体膜を用いてもよい。単結晶半導体膜は、スマートカット法などを用いて作製することができる。

30

【0311】

なお、本実施の形態は、他の実施の形態と適宜組み合わせることが可能である。

【0312】

（実施の形態5）

本実施の形態は、本発明の一態様に係る発光ユニットを複数積層した構成の発光素子（以下、積層型素子という）の態様について、図3を参照して説明する。この発光素子は、第1の電極と第2の電極との間に、複数の発光ユニットを有する積層型発光素子である。各発光ユニットの構成としては、上記実施の形態4で示した構成と同様な構成を用いることができる。つまり、実施の形態4で示した発光素子は、1つの発光ユニットを有する発光素子である。本実施の形態では、複数の発光ユニットを有する発光素子について説明する。

40

【0313】

図3において、第1の電極501と第2の電極502との間には、第1の発光ユニット511と第2の発光ユニット512が積層されている。第1の発光ユニット511と第2の発光ユニット512との間には、電荷発生層513が設けられている。第1の電極501と第2の電極502は実施の形態4と同様なものを適用することができる。また、第1の

50

発光ユニット511と第2の発光ユニット512は同じ構成であっても異なる構成であってもよく、その構成は実施の形態4で示した構成と同様なものを適用することができる。

【0314】

電荷発生層513は、第1の電極501と第2の電極502に電圧を印加したときに、一方の側の発光ユニットに電子を注入し、他方の側の発光ユニットにホールを注入する層であり、単層でも複数の層を積層した構成であってもよい。複数の層を積層した構成としては、ホールを注入する層と電子を注入する層とを積層する構成であることが好ましい。

【0315】

ホールを注入する層としては、酸化モリブデン、酸化バナジウム、酸化レニウム、酸化ルテニウム等の半導体や絶縁体を用いることができる。あるいは、ホール輸送性の高い物質に、アクセプター物質が添加された構成であってもよい。ホール輸送性の高い物質とアクセプター性物質を含む層は、実施の形態4で示した複合材料であり、アクセプター物質として、7,7,8,8-テトラシアノ-2,3,5,6-テトラフルオロキノジメタン(略称:F₄-TCNQ)や、酸化バナジウムや酸化モリブデンや酸化タングステン等の金属酸化物を含む。ホール輸送性の高い物質としては、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、芳香族炭化水素、高分子化合物(オリゴマー、デンドリマー、ポリマー)など、種々の化合物を用いることができる。なお、ホール輸送性の高い物質としては、ホール移動度が $10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{Vs}$ 以上であるものを適用することが好ましい。但し、電子よりもホール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。ホール輸送性の高い物質とアクセプター性物質を含む複合材料は、キャリア注入性、キャリア輸送性に優れているため、低電圧駆動、低電流駆動を実現することができる。

【0316】

電子を注入する層としては、酸化リチウム、フッ化リチウム、炭酸セシウム等の絶縁体や半導体を用いることができる。あるいは、電子輸送性の高い物質に、ドナー性物質が添加された構成であってもよい。ドナー性物質としては、アルカリ金属またはアルカリ土類金属または希土類金属または元素周期表における第13族に属する金属およびその酸化物、炭酸塩を用いることができる。具体的には、リチウム(Li)、セシウム(Cs)、マグネシウム(Mg)、カルシウム(Ca)、イッテルビウム(Yb)、インジウム(In)、酸化リチウム、炭酸セシウムなどを用いることが好ましい。また、テトラチアナフタセンのような有機化合物をドナー性物質として用いてもよい。電子輸送性の高い物質としては、実施の形態4で示した材料を用いることができる。なお、電子輸送性の高い物質としては、電子移動度が $10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{Vs}$ 以上であるものを適用することが好ましい。但し、ホールよりも電子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。電子輸送性の高い物質とドナー性物質とを有する複合材料は、キャリア注入性、キャリア輸送性に優れているため、低電圧駆動、低電流駆動を実現することができる。

【0317】

また、電荷発生層513として、実施の形態4で示した電極材料を用いることもできる。例えば、ホール輸送性の高い物質と金属酸化物を含む層と透明導電膜とを組み合わせ形成しても良い。なお、光取り出し効率の点から、電荷発生層は透光性の高い層とすることが好ましい。

【0318】

いずれにしても、第1の発光ユニット511と第2の発光ユニット512に挟まれる電荷発生層513は、第1の電極501と第2の電極502に電圧を印加したときに、一方の側の発光ユニットに電子を注入し、他方の側の発光ユニットにホールを注入するものであれば良い。例えば、第1の電極の電位の方が第2の電極の電位よりも高くなるように電圧を印加した場合、電荷発生層513は、第1の発光ユニット511に電子を注入し、第2の発光ユニット512にホールを注入するものであればいかなる構成でもよい。

【0319】

本実施の形態では、2つの発光ユニットを有する発光素子について説明したが、同様に、3つ以上の発光ユニットを積層した発光素子についても、同様に適用することが可能であ

10

20

30

40

50

る。本実施の形態に係る発光素子のように、一对の電極間に複数の発光ユニットを電荷発生層で仕切って配置することで、電流密度を低く保ったまま、高輝度領域での発光が可能であるため、長寿命素子を実現できる。また、低電圧駆動が可能で消費電力が低い発光装置を実現することができる。

【0320】

また、それぞれの発光ユニットの発光色を異なるものにする事で、発光素子全体として、所望の色の発光を得ることができる。例えば、2つの発光ユニットを有する発光素子において、第1の発光ユニットの発光色と第2の発光ユニットの発光色を補色の関係になるようにすることで、発光素子全体として白色発光する発光素子を得ることも可能である。なお、補色とは、混合すると無彩色になる色同士の関係をいう。つまり、補色の関係にある色を発光する物質から得られた光を混合すると、白色発光を得ることができる。また、3つの発光ユニットを有する発光素子の場合でも同様であり、例えば、第1の発光ユニットの発光色が赤色であり、第2の発光ユニットの発光色が緑色であり、第3の発光ユニットの発光色が青色である場合、発光素子全体としては、白色発光を得ることができる。

10

【0321】

なお、本実施の形態は、他の実施の形態と適宜組み合わせることが可能である。

【0322】

(実施の形態6)

本実施の形態では、上記実施の形態で示した本発明の一態様の発光素子を有する発光装置について説明する。

20

【0323】

本実施の形態では、画素部に本発明の一態様の発光素子を有する発光装置について図4を用いて説明する。なお、図4(A)は、発光装置を示す上面図、図4(B)は図4(A)をA-A'およびB-B'で切断した断面図である。この発光装置は、画素部602に設置された発光素子の発光を制御するものとして、点線で示された駆動回路部(ソース側駆動回路)601、駆動回路部(ゲート側駆動回路)603を含んでいる。また、604は封止基板、605はシール材であり、シール材605で囲まれた内側は、空間607になっている。

【0324】

なお、引き回し配線608はソース側駆動回路601及びゲート側駆動回路603に入力される信号を伝送するための配線であり、外部入力端子となるFPC(フレキシブルプリントサーキット)609からビデオ信号、クロック信号、スタート信号、リセット信号等を受け取る。なお、ここではFPCしか図示されていないが、このFPCにはプリント配線基板(PWB)が取り付けられていても良い。本明細書における発光装置には、発光装置本体だけでなく、それにFPCもしくはPWBが取り付けられた状態をも含むものとする。

30

【0325】

次に、断面構造について図4(B)を用いて説明する。素子基板610上には駆動回路部及び画素部が形成されているが、ここでは、駆動回路部であるソース側駆動回路601と、画素部602中の一つの画素が示されている。

40

【0326】

なお、ソース側駆動回路601はNチャンネル型TFT623とPチャンネル型TFT624とを組み合わせたCMOS回路が形成される。また、駆動回路は、種々のCMOS回路、PMOS回路もしくはNMOS回路で形成しても良い。また、本実施の形態では、画素部が形成された基板と同一基板上に駆動回路を形成したドライバー体型を示すが、必ずしもその必要はなく、駆動回路を、画素部が形成された基板と同一基板上ではなく、外部に形成することもできる。

【0327】

また、画素部602はスイッチング用TFT611と、電流制御用TFT612とそのドレインに電氣的に接続された第1の電極613とを含む複数の画素により形成される。な

50

お、第1の電極613の端部を覆って絶縁物614が形成されている。ここでは、ポジ型の感光性アクリル樹脂を用いることにより形成する。

【0328】

また、被覆性を良好なものとするため、絶縁物614の上端部または下端部に曲率を有する曲面が形成されるようにする。例えば、絶縁物614の材料としてポジ型の感光性アクリルを用いた場合、絶縁物614の上端部のみに曲率半径(0.2 μm ~ 3 μm)を有する曲面を持たせることが好ましい。また、絶縁物614として、光の照射によってエッチャントに不溶解性となるネガ型、或いは光の照射によってエッチャントに溶解性となるポジ型のいずれも使用することができる。

【0329】

第1の電極613上には、EL層616、および第2の電極617がそれぞれ形成されている。ここで、第1の電極613に用いる材料としては、さまざまな金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物を用いることができる。第1の電極を陽極として用いる場合には、その中でも、仕事関数の大きい(好ましくは仕事関数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。例えば、珪素を含有した酸化インジウム-酸化スズ膜、酸化インジウム-酸化亜鉛膜、窒化チタン膜、クロム膜、タングステン膜、Zn膜、Pt膜などの単層膜の他、窒化チタンとアルミニウムを主成分とする膜との積層、窒化チタン膜とアルミニウムを主成分とする膜と窒化チタン膜との3層構造等の積層膜を用いることができる。なお、積層構造とすると、配線としての抵抗も低く、良好なオーミックコンタクトがとれ、さらに陽極として機能させることができる。

【0330】

また、EL層616は、蒸着マスクを用いた蒸着法、インクジェット法、スピンコート法等の種々の方法によって形成される。EL層616は、実施の形態1乃至3で示した有機半導体材料を有している。また、EL層616を構成する材料としては、低分子化合物、または高分子化合物、オリゴマー、 dendrimer のいずれを用いてもよい。また、EL層に用いる材料としては、有機化合物だけでなく、無機化合物を用いてもよい。

【0331】

また、第2の電極617に用いる材料としては、さまざまな金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物を用いることができる。第2の電極を陰極として用いる場合には、その中でも、仕事関数の小さい(好ましくは仕事関数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。例えば、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)、カルシウム(Ca)、ストロンチウム(Sr)等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金(MgAg、AlLi)等が挙げられる。なお、EL層616で生じた光を第2の電極617を透過させる場合には、第2の電極617として、膜厚を薄くした金属薄膜と、透明導電膜(酸化インジウム-酸化スズ(ITO)、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(IZO)、酸化タングステン及び酸化亜鉛を含有した酸化インジウム(IWZO)等)との積層膜を用いることも可能である。

【0332】

さらにシール材605で封止基板604を素子基板610と貼り合わせることにより、素子基板610、封止基板604、およびシール材605で囲まれた空間607に発光素子618が備えられた構造になっている。なお、空間607には、充填材が充填されており、不活性気体(窒素やアルゴン等)が充填される場合の他、シール材605が充填される場合もある。

【0333】

なお、シール材605にはエポキシ系樹脂を用いるのが好ましい。また、これらの材料はできるだけ水分や酸素を透過しない材料であることが望ましい。また、封止基板604に用いる材料としてガラス基板や石英基板の他、FRP(Fiber glass - Rein

10

20

30

40

50

forced Plastics)、P V F (ポリビニルフロライド)、ポリエステルまたはアクリル等からなるプラスチック基板を用いることができる。

【0334】

以上のようにして、実施の形態4または5の発光素子を有する発光装置を得ることができる。

【0335】

本実施の形態の発光装置は、実施の形態4または5で示した発光素子を有する。実施の形態4または5で示した発光素子は高い発光効率を有し、駆動電圧が低い。そのため、高輝度での発光が可能な発光装置を得ることができる。また、消費電力の低い発光装置を得ることができる。

10

【0336】

以上のように、本実施の形態では、トランジスタによって発光素子の駆動を制御するアクティブマトリクス型の発光装置について説明したが、パッシブマトリクス型の発光装置であってもよい。図5には本発明の一態様を適用して作製したパッシブマトリクス型の発光装置を示す。なお、図5(A)は、発光装置を示す斜視図、図5(B)は図5(A)をX-Yで切断した断面図である。図5において、基板951上には、電極952と電極956との間にはEL層955が設けられている。電極952の端部は絶縁層953で覆われている。そして、絶縁層953上には隔壁層954が設けられている。隔壁層954の側壁は、基板面に近くなるに伴って、一方の側壁と他方の側壁との間隔が狭くなっていくような傾斜を有する。つまり、隔壁層954の短辺方向の断面は、台形状であり、底辺(絶縁層953の面方向と同様の方向を向き、絶縁層953と接する辺)の方が上辺(絶縁層953の面方向と同様の方向を向き、絶縁層953と接しない辺)よりも短い。このように、隔壁層954を設けることで、陰極をパターンニングすることができる。また、パッシブマトリクス型の発光装置においても、発光効率が高く、駆動電圧が低い本発明の一態様に係る発光素子を含むことによって、消費電力の低い発光装置を得ることができる。

20

【0337】

なお、本実施の形態は、他の実施の形態と適宜組み合わせることが可能である。

【0338】

(実施の形態7)

本実施の形態では、実施の形態6に示す発光装置をその一部に含む本発明の一態様の電子機器について説明する。本発明の一態様の電子機器は、実施の形態4または5で示した発光素子を有し、低消費電力の表示部を有する。

30

【0339】

本発明の一態様の発光装置を用いて作製された電子機器として、ビデオカメラ、デジタルカメラ等のカメラ、ゴーグル型ディスプレイ、ナビゲーションシステム、音響再生装置(カーオーディオ、オーディオコンポ等)、コンピュータ、ゲーム機器、携帯情報端末(モバイルコンピュータ、携帯電話、携帯型ゲーム機または電子書籍等)、記録媒体を備えた画像再生装置(具体的にはDigital Versatile Disc(DVD)等の記録媒体を再生し、その画像を表示しうる表示装置を備えた装置)などが挙げられる。これらの電子機器の具体例を図6に示す。

40

【0340】

図6(A)は本実施の形態に係るテレビ装置であり、筐体9101、支持台9102、表示部9103、スピーカー部9104、ビデオ入力端子9105等を含む。このテレビ装置において、表示部9103は、上記実施の形態で説明したものと同様の発光素子をマトリクス状に配列して構成されている。当該発光素子は、発光効率が高く、消費電力が低いという特徴を有している。また、駆動電圧が低いという特徴を有する。その発光素子で構成される表示部9103も同様の特徴を有するため、このテレビ装置は低消費電力化が図られている。このような特徴により、テレビ装置において、電源回路を大幅に削減、若しくは縮小することができるので、筐体9101や支持台9102の小型軽量化を図ることが可能である。本実施の形態に係るテレビ装置は、低消費電力及び小型軽量化が図られて

50

いるので、それにより住環境に適合した製品を提供することができる。

【0341】

図6(B)は本実施の形態に係るコンピュータであり、本体9201、筐体9202、表示部9203、キーボード9204、外部接続ポート9205、ポインティングデバイス9206等を含む。このコンピュータにおいて、表示部9203は、上記実施の形態で説明したものと同様の発光素子をマトリクス状に配列して構成されている。当該発光素子は、発光効率が高く、消費電力が低いという特徴を有している。また、駆動電圧が低いという特徴を有する。その発光素子で構成される表示部9203も同様の特徴を有するため、このコンピュータは低消費電力化が図られている。このような特徴により、コンピュータにおいて、電源回路を大幅に削減、若しくは縮小することができるので、本体9201や筐体9202の小型軽量化を図ることが可能である。本実施の形態に係るコンピュータは、低消費電力及び小型軽量化が図られているので、環境に適合した製品を提供することができる。

10

【0342】

図6(C)は本実施の形態に係るカメラであり、本体9301、表示部9302、筐体9303、外部接続ポート9304、リモコン受信部9305、受像部9306、バッテリー9307、音声入力部9308、操作キー9309、接眼部9310等を含む。このカメラにおいて、表示部9302は、上記実施の形態で説明したものと同様の発光素子をマトリクス状に配列して構成されている。当該発光素子は、発光効率が高く、消費電力が低いという特徴を有している。また、駆動電圧が低いという特徴を有する。その発光素子で構成される表示部9302も同様の特徴を有するため、このカメラは低消費電力化が図られている。このような特徴により、カメラにおいて、電源回路を大幅に削減、若しくは縮小することができるので、本体9301の小型軽量化を図ることが可能である。本実施の形態に係るカメラは、低消費電力及び小型軽量化が図られているので、携帯に適した製品を提供することができる。

20

【0343】

図6(D)に示す本発明に係る電子ペーパーは、可撓性を有しており、本体9660、画像を表示する表示部9661、ドライバIC9662、受信装置9663、フィルムバッテリー9664などを含んでいる。ドライバICや受信装置などは半導体部品を用い実装しても良い。本発明の電子機器は本体9660を構成する材料をプラスチックやフィルムなど可撓性を有する材料で形成する。この電子ペーパーにおいて、表示部9661は、実施の形態1乃至実施の形態3で説明したものと同様の発光素子をマトリクス状に配列して構成されている。当該発光素子は、長寿命であり消費電力が低いという特徴を有している。その発光素子で構成される表示部9661も同様の特徴を有するため、この電子ペーパーは信頼性が高く、低消費電力化が図られている。

30

【0344】

図6(E)は本実施の形態に係る携帯電話であり、本体9401、筐体9402、表示部9403、音声入力部9404、音声出力部9405、操作キー9406、外部接続ポート9407、アンテナ9408等を含む。この携帯電話において、表示部9403は、実施の形態2で説明したものと同様の発光素子をマトリクス状に配列して構成されている。当該発光素子は、発光効率が高く、消費電力が低いという特徴を有している。また、駆動電圧が低いという特徴を有する。その発光素子で構成される表示部9403も同様の特徴を有するため、この携帯電話は低消費電力化が図られている。このような特徴により、携帯電話において、電源回路を大幅に削減、若しくは縮小することができるので、本体9401や筐体9402の小型軽量化を図ることが可能である。本実施の形態に係る携帯電話は、低消費電力及び小型軽量化が図られているので、携帯に適した製品を提供することができる。

40

【0345】

図12には、図6(E)とは異なる構成の携帯電話の一例を示す。図12(A)が正面図

50

、図12(B)が背面図、図12(C)が展開図である。図12に示す携帯電話は、電話と携帯情報端末の双方の機能を備えており、コンピュータを内蔵し、音声通話以外にも様々なデータ処理が可能な所謂スマートフォンである。

【0346】

図12に示す携帯電話は、筐体1001及び1002二つの筐体で構成されている。筐体1001には、表示部1101、スピーカー1102、マイクロフォン1103、操作キー1104、ポインティングデバイス1105、カメラ用レンズ1106、外部接続端子1107、イヤホン端子1008等を備え、筐体1002には、キーボード1201、外部メモリスロット1202、カメラ用レンズ1203、ライト1204等を備えている。また、アンテナは筐体1001内部に内蔵されている。

10

【0347】

また、上記構成に加えて、非接触ICチップ、小型記録装置等を内蔵していてもよい。

【0348】

表示部1101には、上記実施の形態で示した発光装置を組み込むことが可能であり、使用形態に応じて表示の方向が適宜変化する。表示部1101と同一面上にカメラ用レンズ1106を備えているため、テレビ電話が可能である。また、表示部1101をフィンガーとしカメラ用レンズ1203及びライト1204で静止画及び動画の撮影が可能である。スピーカー1102及びマイクロフォン1103は音声通話に限らず、テレビ電話、録音、再生等が可能である。操作キー1104では、電話の発着信、電子メール等の簡単な情報入力、画面のスクロール、カーソル移動等が可能である。更に、重なり合った筐体1001と筐体1002(図12(A))は、スライドし図12(C)のように展開し、携帯情報端末として使用できる。この場合、キーボード1201、ポインティングデバイス1105を用い円滑な操作が可能である。外部接続端子1107はACアダプタ及びUSBケーブル等の各種ケーブルと接続可能であり、充電及びコンピュータ等とのデータ通信が可能である。また、外部メモリスロット1202に記録媒体を挿入しより大量のデータ保存及び移動に対応できる。

20

【0349】

また、上記機能に加えて、赤外線通信機能、テレビ受信機能等を備えたものであってもよい。

【0350】

図7は音響再生装置、具体例としてカーオーディオであり、本体701、表示部702、操作スイッチ703、704を含む。表示部702は上記実施の形態の発光装置(パッシブマトリクス型またはアクティブマトリクス型)で実現することができる。また、この表示部702はセグメント方式の発光装置で形成しても良い。いずれにしても、本発明の一態様に係る発光素子を用いることにより、車両用電源(12~42V)を使って、低消費電力化を図りつつ、明るい表示部を構成することができる。また、本実施の形態では車載用オーディオを示すが、携帯型や家庭用のオーディオ装置に用いても良い。

30

【0351】

図8は、音響再生装置の一例としてデジタルプレーヤーを示している。図8に示すデジタルプレーヤーは、本体710、表示部711、メモリ部712、操作部713、イヤホン714等を含んでいる。なお、イヤホン714の代わりにヘッドホンや無線式イヤホンを用いることができる。表示部711として、上記実施の形態の発光装置(パッシブマトリクス型またはアクティブマトリクス型)で実現することができる。また、この表示部711はセグメント方式の発光装置で形成しても良い。いずれにしても、本発明の一態様に係る発光素子を用いることにより、二次電池(ニッケル-水素電池など)を使っても表示が可能であり、低消費電力化を図りつつ、明るい表示部を構成することができる。メモリ部712は、ハードディスクや不揮発性メモリを用いている。例えば、記録容量が20~200ギガバイト(GB)のNAND型不揮発性メモリを用い、操作部713を操作することにより、映像や音声(音楽)を記録、再生することができる。なお、表示部702及び表示部711は黒色の背景に白色の文字を表示することで消費電力を抑えられる。これは

40

50

携帯型のオーディオ装置において特に有効である。

【0352】

以上の様に、本発明の一態様を適用して作製した発光装置の適用範囲は極めて広く、この発光装置をあらゆる分野の電子機器に適用することが可能である。本発明の一態様を適用することにより、低消費電力の表示部を有する電子機器を作製することが可能となる。

【0353】

また、本発明の一態様を適用した発光装置は、発光効率の高い発光素子を有しており、照明装置として用いることもできる。本発明の一態様を適用した発光装置は、高輝度の発光が可能であり照明装置として好適である。本発明の一態様を適用した発光素子を照明装置として用いる一態様を、図9を用いて説明する。

10

【0354】

図9には、本発明の一態様の係る発光装置を用いた照明装置として用いた電子機器の一例として、本発明の一態様を適用した発光装置をバックライトとして用いた液晶表示装置を示す。図9に示した液晶表示装置は、筐体901、液晶層902、バックライト903、筐体904を有し、液晶層902は、ドライバIC905と接続されている。また、バックライト903は、本発明の一態様を適用した発光装置が用いられおり、端子906により、電流が供給されている。

【0355】

本発明の一態様に係る発光装置は薄型で低消費電力であるため、本発明の一態様に係る発光装置を液晶表示装置のバックライトとして用いることにより、表示装置の薄型化、低消費電力化も可能となる。また、本発明の一態様に係る発光装置は、面発光の照明装置であり大面積化も可能であるため、バックライトの大面積化が可能であり、液晶表示装置の大面積化も可能になる。

20

【0356】

図10は、本発明の一態様に係る発光装置を、照明装置である電気スタンドとして用いた例である。図10に示す電気スタンドは、筐体2001と、光源2002を有し、光源2002として、本発明の一態様に係る発光装置が用いられている。本発明の一態様の発光装置は低消費電力化されているため、電気スタンドも消費電力が低い。

【0357】

図11は、本発明の一態様を適用した発光装置を、室内の照明装置3001として用いた例である。本発明の一態様に係る発光装置は大面積化も可能であるため、大面積の照明装置として用いることができる。また、本発明の一態様に係る発光装置は、低消費電力であるため、低消費電力の照明装置として用いることが可能となる。このように、本発明の一態様を適用した発光装置を、室内の照明装置3001として用いた部屋に、図6(A)で説明したような、本発明の一態様に係るテレビ装置3002を設置して公共放送や映画を鑑賞することができる。このような場合、両装置は低消費電力であるので、環境への負荷を低減することができる。

30

【0358】

なお、本実施の形態は、他の実施の形態と適宜組み合わせることが可能である。

【実施例1】

40

【0359】

本実施例では、本発明の一態様に係る有機半導体材料における電子受容ユニットおよびホール受容ユニットの一例について説明する。

【0360】

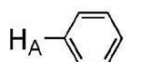
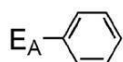
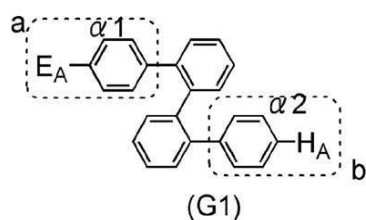
本発明の一態様に係る有機半導体材料の電子受容ユニットおよびホール受容ユニットは、実施の形態1でも述べたように、置換基の状態電子親和力やイオン化ポテンシャルを評価することは困難である。そのため、各ユニットの電子親和力およびイオン化ポテンシャルを一般式(G1)で表される有機半導体材料における部分構造aに相当する一般式(G2A)で表される化合物を用いて評価した。また、ホール受容ユニットは、一般式(G1)で表される有機半導体材料における部分構造bに相当する一般式(G2B)で表される

50

化合物を用いて評価した。

【0361】

【化93】

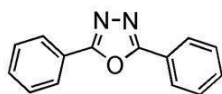


【0362】

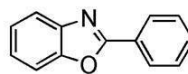
本実施例では、部分構造 a に相当する一般式 (G2A) で表される化合物として、2,5-ジフェニル-1,3,4-オキサジアゾール、2-フェニルベンゾオキサゾールを用い、サイクリックボルタンメトリ (CV) 測定によって電子親和力およびイオン化ポテンシャルを算出した。本実施例で測定した2,5-ジフェニル-1,3,4-オキサジアゾール、2-フェニルベンゾオキサゾールの構造式を以下に示す。

【0363】

【化94】



2,5-ジフェニル-1,3,4-
オキサジアゾール



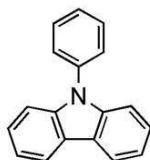
2-フェニルベンゾオキサゾール

【0364】

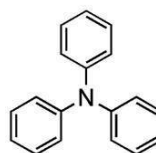
本実施例では、部分構造 b に相当する一般式 (G2B) で表される化合物として、9-フェニル-9H-カルバゾール、トリフェニルアミンを用い、サイクリックボルタンメトリ (CV) 測定によって電子親和力およびイオン化ポテンシャルを算出した。本実施例で測定した9-フェニル-9H-カルバゾール、トリフェニルアミンの構造式を以下に示す。

【0365】

【化95】



9-フェニル-9H-カルバゾール



トリフェニルアミン

【0366】

CV測定には、電気化学アナライザー (ビー・イー・エス (株) 製、型番: ALSモデル600Aまたは600C) を用いた。CV測定における溶液は、溶媒として脱水ジメチルホルムアミド (DMF) ((株) アルドリッチ製、99.8%、カタログ番号; 22705-6) を用い、支持電解質である過塩素酸テトラ-n-ブチルアンモニウム (n-Bu₄NClO₄) ((株) 東京化成製、カタログ番号; T0836) を100mmol/L

10

20

30

40

50

の濃度となるように溶解させ、さらに測定対象を 2 mmol/L の濃度となるように溶解させて調製した。また、作用電極としては白金電極（ビー・イー・エス（株）製、PTE 白金電極）を、補助電極としては白金電極（ビー・イー・エス（株）製、VC-3用Pt カウンター電極（5 cm））を、参照電極としては Ag/Ag^+ 電極（ビー・イー・エス（株）製、RE7非水溶媒系参照電極）をそれぞれ用いた。なお、測定は室温（ $20 \sim 25$ ）で行った。また、CV測定時のスキャン速度は、 0.1 V/sec に統一した。

【0367】

（参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーの算出）

まず、本実施例で用いる参照電極（ Ag/Ag^+ 電極）の真空準位に対するポテンシャルエネルギー（ eV ）を算出した。つまり、 Ag/Ag^+ 電極のフェルミ準位を算出した。10
メタノール中におけるフェロセンの酸化還元電位は、標準水素電極に対して $+0.610$ [V vs. SHE] であることが知られている（参考文献：Christian R. Goldsmith et al., J. Am. Chem. Soc., Vol. 124, No. 1, 83-96, 2002）。一方、本実施例で用いる参照電極を用いて、メタノール中におけるフェロセンの酸化還元電位を求めたところ、 $+0.11 \text{ V}$ [vs. Ag/Ag^+] であった。したがって、本実施例で用いる参照電極のポテンシャルエネルギーは、標準水素電極に対して 0.50 [eV] 低くなっていることがわかった。

【0368】

ここで、標準水素電極の真空準位からのポテンシャルエネルギーは -4.44 eV であることが知られている（参考文献：大西敏博・小山珠美著、高分子EL材料（共立出版）、p. 64-67）。以上のことから、本実施例で用いる参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、 $-4.44 - 0.50 = -4.94$ [eV] であると算出できた。20

【0369】

<測定例1：2, 5-ジフェニル-1, 3, 4-オキサジアゾール>

まず、本測定例で、CV測定からのイオン化ポテンシャルおよび電子親和力の算出について詳述する。

【0370】

また、2, 5-ジフェニル-1, 3, 4-オキサジアゾールの酸化反応特性のCV測定結果を図13に示す。なお、酸化反応特性の測定は、参照電極に対する作用電極の電位を -0.14 V から 1.50 V まで走査した後、 1.50 V から -0.14 V まで走査した。30

【0371】

図13に示すように、酸化反応特性の測定において、少なくとも 1.20 V 程度まで酸化を示すピークは現れていない。また、 1.20 V 以上では大電流が流れている影響で、酸化を示すピークがあったとしても、それは観測できない。つまり、このデータからは、2, 5-ジフェニル-1, 3, 4-オキサジアゾールの酸化電位は少なくとも 1.20 V 以上ということがわかる。ここで、上述した通り、本実施例で用いる参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、 -4.94 [eV] であるため、CV測定における 1.20 V の酸化電位は、HOMO準位に換算すると $-(-4.94 - 1.20) = -6.14 \text{ eV}$ である。したがって、2, 5-ジフェニル-1, 3, 4-オキサジアゾールのイオン化ポテンシャルは少なくとも 6.14 eV 以上であることがわかった。40

【0372】

2, 5-ジフェニル-1, 3, 4-オキサジアゾールの還元反応特性のCV測定結果を図14に示す。なお、還元反応特性の測定は、参照電極に対する作用電極の電位を -1.45 V から -2.70 V まで走査した後、 -2.70 V から -1.45 V まで走査した。

【0373】

図14に示すように、還元反応特性の測定において、還元ピーク電位 E_{pc} は、 -2.51 V であった。また、酸化ピーク電位 E_{pa} は -2.39 V であった。したがって、半波電位（ E_{pc} と E_{pa} の中間の電位）は -2.45 V と算出できる。このことは、2, 5-ジフェニル-1, 3, 4-オキサジアゾールは -2.45 [V vs. Ag/Ag^+] 50

の電気エネルギーにより還元されることを示しており、このエネルギーはLUMO準位に相当する。ここで、上述した通り、本実施例で用いる参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、 -4.94 [eV]であるため、2,5-ジフェニル-1,3,4-オキサジアゾールのLUMO準位は、 $-4.94 - (-2.45) = -2.49$ [eV]であることがわかった。よって、2,5-ジフェニル-1,3,4-オキサジアゾールの電子親和力は、 2.49 [eV]であると算出できた。

【0374】

<測定例2：2-フェニルベンゾオキサゾール>

また、2-フェニルベンゾオキサゾールの酸化反応特性のCV測定結果を図15に示す。なお、酸化反応特性の測定は、参照電極に対する作用電極の電位を -0.18 Vから 1.50 Vまで走査した後、 1.50 Vから -0.18 Vまで走査した。

10

【0375】

図15に示すように、酸化反応特性の測定において、少なくとも 1.20 V程度まで酸化を示すピークは現れていない。また、 1.20 V以上では大電流が流れている影響で、酸化を示すピークがあったとしても、それは観測できない。つまり、このデータからは、2-フェニルベンゾオキサゾールの酸化電位は少なくとも 1.20 V以上ということがわかる。ここで、上述した通り、本実施例で用いる参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、 -4.94 [eV]であるため、CV測定における 1.20 Vの酸化電位は、HOMO準位に換算すると $-(-4.94 - 1.20) = -6.14$ eVである。したがって、2-フェニルベンゾオキサゾールのイオン化ポテンシャルは少なくとも 6.14 eV以上であることがわかった。

20

【0376】

2-フェニルベンゾオキサゾールの還元反応特性のCV測定結果を図16に示す。なお、還元反応特性の測定は、参照電極に対する作用電極の電位を -1.43 Vから -2.64 Vまで走査した後、 -2.64 Vから -1.43 Vまで走査した。

【0377】

図16に示すように、還元反応特性の測定において、還元ピーク電位 E_{pc} は、 -2.51 Vであった。また、酸化ピーク電位 E_{pa} は -2.42 Vであった。したがって、半波電位(E_{pc} と E_{pa} の中間の電位)は -2.47 Vと算出できる。このことは、2-フェニルベンゾオキサゾールは -2.47 [V vs. Ag/Ag⁺]の電気エネルギーにより還元されることを示しており、このエネルギーはLUMO準位に相当する。ここで、上述した通り、本実施例で用いる参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、 -4.94 [eV]であるため、2-フェニルベンゾオキサゾールのLUMO準位は、 $-4.94 - (-2.47) = -2.47$ [eV]であることがわかった。よって、2-フェニルベンゾオキサゾールの電子親和力は、 2.47 [eV]であると算出できた。

30

【0378】

<測定例3：フェニルカルバゾール>

また、フェニルカルバゾールの酸化反応特性のCV測定結果を図17に示す。なお、酸化反応特性の測定は、参照電極に対する作用電極の電位を -0.13 Vから 1.15 Vまで走査した後、 1.15 Vから -0.13 Vまで走査した。

40

【0379】

図17に示すように、酸化反応特性の測定において、酸化ピーク電位 E_{pa} は、 1.02 Vであった。また、還元ピーク電位 E_{pc} は 0.86 Vであった。したがって、半波電位(E_{pa} と E_{pc} の中間の電位)は 0.94 Vと算出できる。このことは、フェニルカルバゾールは 0.44 [V vs. Ag/Ag⁺]の電気エネルギーにより酸化されることを示しており、このエネルギーはHOMO準位に相当する。ここで、上述した通り、本実施例で用いる参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、 -4.94 [eV]であるため、フェニルカルバゾールのHOMO準位は、 $-4.94 - 0.94 = -5.88$ [eV]であることがわかった。よって、フェニルカルバゾールのイオン化ポテンシャルは、 5.88 [eV]であると算出できた。

50

【0380】

フェニルカルバゾールの還元反応特性のCV測定結果を図18に示す。なお、還元反応特性の測定は、参照電極に対する作用電極の電位を -1.10 V から -3.00 V まで走査した後、 -3.00 V から -1.10 V まで走査した。

【0381】

図18に示すように、還元反応特性の測定において、少なくとも -2.70 V 程度まで還元を示すピークは現れていない。また、 -2.70 V 以下では大電流が流れている影響で、還元を示すピークがあったとしても、それは観測できない。つまり、このデータからは、フェニルカルバゾールの還元電位は少なくとも -2.70 V 以下ということがわかる。ここで、上述した通り、本実施例で用いる参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、 -4.94 [e V] であるため、CV測定における -2.70 V の還元電位は、LUMO準位に換算すると $-4.94 - (-2.70) = -2.24\text{ e V}$ である。したがって、フェニルカルバゾールの電子親和力は少なくとも 2.24 e V 以下であることがわかった。

10

【0382】

<測定例4：トリフェニルアミン>

【0383】

また、トリフェニルアミンの酸化反応特性のCV測定結果を図19に示す。なお、酸化反応特性の測定は、参照電極に対する作用電極の電位を 0.01 V から 0.73 V まで走査した後、 0.73 V から 0.01 V まで走査した。

20

【0384】

図19に示すように、酸化反応特性の測定において、酸化ピーク電位 E_{p_a} は、 0.67 V であった。また、還元ピーク電位 E_{p_c} は 0.50 V であった。したがって、半波電位(E_{p_a} と E_{p_c} の中間の電位)は 0.59 V と算出できる。このことは、トリフェニルアミンは $0.44\text{ [V vs. Ag / Ag^+]}$ の電気エネルギーにより酸化されることを示しており、このエネルギーはHOMO準位に相当する。ここで、上述した通り、本実施例で用いる参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、 -4.94 [e V] であるため、トリフェニルアミンのHOMO準位は、 $-4.94 - 0.59 = -5.53\text{ [e V]}$ であることがわかった。よって、トリフェニルアミンのイオン化ポテンシャルは、 5.53 [e V] であると算出できた。

30

【0385】

トリフェニルアミンの還元反応特性のCV測定結果を図20に示す。なお、還元反応特性の測定は、参照電極に対する作用電極の電位を -1.08 V から -3.00 V まで走査した後、 -3.00 V から -1.08 V まで走査した。

【0386】

図20に示すように、還元反応特性の測定において、少なくとも -2.70 V 程度まで還元を示すピークは現れていない。また、 -2.70 V 以下では大電流が流れている影響で、還元を示すピークがあったとしても、それは観測できない。つまり、このデータからは、トリフェニルアミンの還元電位は少なくとも -2.70 V 以下ということがわかる。ここで、上述した通り、本実施例で用いる参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、 -4.94 [e V] であるため、CV測定における -2.70 V の還元電位は、LUMO準位に換算すると $-4.94 - (-2.70) = -2.24\text{ e V}$ である。したがって、トリフェニルアミンの電子親和力は少なくとも 2.24 e V 以下であることがわかった。

40

【0387】

以上の測定から算出した2,5-ジフェニル-1,3,4-オキサジアゾール、2-フェニルベンゾオキサゾール、9-フェニル-9H-カルバゾール、トリフェニルアミンの電子親和力およびイオン化ポテンシャルを表1に示す。

【0388】

【表 1】

	名称	電子親和力[eV]	イオン化ポテンシャル[eV]
一般式 (G2A)	2, 5-ジフェニル-1, 3, 4-オキサジアゾール	2.49	6.14以上
一般式 (G2B)	2-フェニルベンゾオキサゾール	2.48	6.14以上
	9-フェニル-9H-カルバゾール	2.24以下	5.88
	トリフェニルアミン	2.24以下	5.53

【0389】

表 1 からわかるように、2, 5-ジフェニル-1, 3, 4-オキサジアゾール、2-フェニルベンゾオキサゾールは9-フェニル-9H-カルバゾール、トリフェニルアミンよりも、電子親和力が大きく、かつ、イオン化ポテンシャルが大きい。

10

【0390】

また、2, 5-ジフェニル-1, 3, 4-オキサジアゾール、2-フェニルベンゾオキサゾールの電子親和力は、2.4 eV 以上 3.5 eV 以下であり、9-フェニル-9H-カルバゾール、トリフェニルアミンのイオン化ポテンシャルは5.0 eV 以上 6.0 eV 以下である。

【0391】

よって、本発明の一態様に係る有機半導体材料の部分構造 a として、2, 5-ジフェニル-1, 3, 4-オキサジアゾール骨格である4-(5-フェニル-1, 3, 4-オキサジアゾール-2-イル)フェニル基、2-フェニルベンゾオキサゾール骨格である4-(ベンゾオキサゾール-2-イル)基を好適に用いることができる。また、部分構造 b として9-フェニル-9H-カルバゾール骨格である4-(9H-カルバゾール-9-イル)基、トリフェニルアミン骨格である4-(ジフェニルアミノ)フェニル基を好適に用いることができる。

20

【実施例 2】

【0392】

本実施例では、実施例 1 で示した電子受容ユニットおよびホール受容ユニットを有する有機半導体材料について説明する。

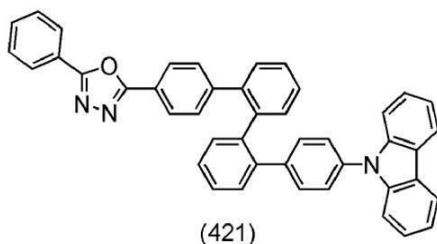
【0393】

実施例 1 で示した化合物の部分構造 a および部分構造 b を組み合わせて、4種の有機半導体材料を合成した。合成した有機半導体材料の構造式を以下に示す。

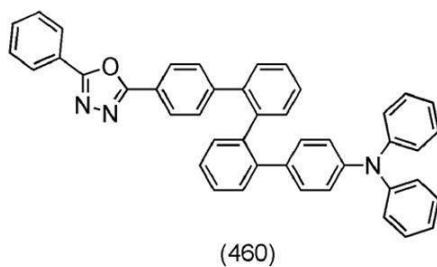
30

【0394】

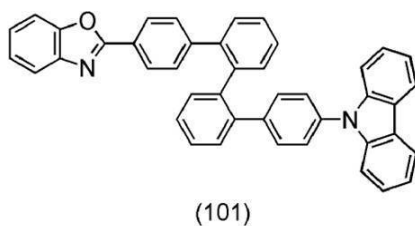
【化 9 6】



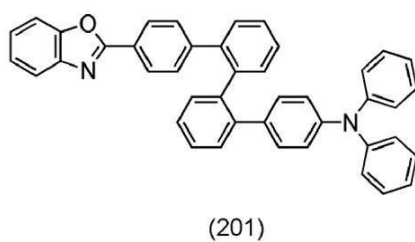
10



20



30



【 0 3 9 5】

構造式(421)で表される9-[4'''-(5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル)-[1,1':2',1'':2'',1''':2''',1'''']]クアテルフェニル-4-イル]-9H-カルバゾール(略称:Z-CzPO11)は、部分構造aとして、2,5-ジフェニル-1,3,4-オキサジアゾール骨格である4-(5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル)フェニル基を有し、部分構造bとして、9-フェニル-9H-カルバゾール骨格である4-(9H-カルバゾール-9-イル)基を有する。

40

【 0 3 9 6】

構造式(460)で表される4-[4''-(5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル)-[1,1':2',1'']]テルフェニル-2-イル]トリフェニルアミン(略称:Z-DPhAO11)は、部分構造aとして、2,5-ジフェニル-1,3,4-オキサジアゾール骨格である4-(5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾール

50

ール - 2 - イル) フェニル基を有し、部分構造 b として、トリフェニルアミン骨格である 4 - (ジフェニルアミノ) フェニル基を有する。

【0397】

構造式 (101) で表される 9 - [4'' - (ベンゾオキサゾール - 2 - イル) - [1, 1' : 2', 1'' : 2'', 1''']] クアテルフェニル - 4 - イル)] - 9H - カルバゾール (略称: Z - CzPBOx) は、部分構造 a として、2 - フェニルベンゾオキサゾール骨格である 4 - (ベンゾオキサゾール - 2 - イル) 基を有し、部分構造 b として、9 - フェニル - 9H - カルバゾール骨格である 4 - (9H - カルバゾール - 9 - イル) 基を有する。

【0398】

構造式 (201) で表される 4 - [4'' - (ベンゾオキサゾール - 2 - イル) - [1, 1' : 2', 1'']] クアテルフェニル - 2 - イル] トリフェニルアミン (略称: Z - DPhABOx) は、部分構造 a として、2 - フェニルベンゾオキサゾール骨格である 4 - (ベンゾオキサゾール - 2 - イル) 基を有し、部分構造 b として、トリフェニルアミン骨格である 4 - (ジフェニルアミノ) フェニル基を有する。

【0399】

これらの有機半導体材料の物性を測定した。具体的には、CV測定、吸収スペクトルおよび発光スペクトルの測定を行った。

【0400】

CV測定は、実施例 1 と同じ条件で行った。装置は、電気化学アナライザー (ビー・イー・エス (株) 製、型番: ALSモデル 600A または 600C) を用いた。CV測定における溶液は、溶媒として脱水ジメチルホルムアミド (DMF) ((株) アルドリッチ製、99.8%、カタログ番号; 22705-6) を用い、支持電解質である過塩素酸テトラ - n - ブチルアンモニウム ($n\text{-Bu}_4\text{NClO}_4$) ((株) 東京化成製、カタログ番号; T0836) を 100 mmol/L の濃度となるように溶解させ、さらに測定対象を 2 mmol/L の濃度となるように溶解させて調製した。また、作用電極としては白金電極 (ビー・イー・エス (株) 製、PTE 白金電極) を、補助電極としては白金電極 (ビー・イー・エス (株) 製、VC-3 用 Pt カウンター電極 (5 cm)) を、参照電極としては Ag/Ag⁺ 電極 (ビー・イー・エス (株) 製、RE7 非水溶媒系参照電極) をそれぞれ用いた。なお、測定は室温 (20 ~ 25) で行った。また、CV測定時のスキャン速度は、0.1 V/sec に統一した。

【0401】

吸収スペクトルおよび発光スペクトルの測定には紫外可視分光光度計 (日本分光株式会社製、V550 型) を用いた。溶液は石英セルに入れ、石英セルにトルエンのみを入れて測定した吸収スペクトルを差し引いた吸収スペクトルを図示している。薄膜は石英基板に蒸着して薄膜サンプルを作製し、石英基板の吸収スペクトルを差し引いた吸収スペクトルを図示している。

【0402】

< Z - CzPO11 について >

【0403】

Z - CzPO11 の酸化反応特性については次のようにして調べた。参照電極に対する作用電極の電位を -0.35 V から 1.01 V まで変化させた後、1.01 V から -0.35 V まで変化させる走査を 1 サイクルとし、100 サイクル測定した。また、Z - CzPO11 の還元反応特性については次のようにして調べた。参照電極に対する作用電極の電位を -1.51 V から -2.50 V まで変化させた後、-2.50 V から -1.51 V まで変化させる走査を 1 サイクルとし、100 サイクル測定した。

【0404】

図 21 に Z - CzPO11 の酸化側の CV 測定結果を、図 22 に Z - CzPO11 の還元側の CV 測定結果をそれぞれ示す。図 21 および図 22 において、横軸は参照電極に対する作用電極の電位 (V) を表し、縦軸は作用電極と補助電極との間に流れた電流値 (A)

10

20

30

40

50

を表す。図 2 1 では、 1.04 V ($v s . A g / A g ^ +$ 電極) に酸化を示す電流が観測された。図 2 2 では、 -2.40 V ($v s . A g / A g ^ +$ 電極) に還元を示す電流が観測された。酸化反応も還元反応も起こることから、Z - C z P O 1 1 は、電子もホールも注入されうる材料、つまり、パイポーラ性の材料であることがわかった。

【0405】

また、100 サイクルもの走査を繰り返しているにもかかわらず、酸化反応および還元反応において、CV 曲線のピーク位置やピーク強度にあまり変化が見られない。このことから、本発明の有機半導体材料である Z - C z P O 1 1 は酸化反応および還元反応の繰り返しに対して極めて安定であることが分かった。つまり、電気化学的に安定であることがわかった。

10

【0406】

また、CV 測定から Z - C z P O 1 1 のイオン化ポテンシャルおよび電子親和力を算出した。

【0407】

図 2 1 に示すように、酸化反応特性の測定において、酸化ピーク電位 E_{p_a} は、 1.04 V であった。また、還元ピーク電位 E_{p_c} は 0.85 V であった。したがって、半波電位 (E_{p_a} と E_{p_c} の中間の電位) は 0.95 V と算出できる。本実施例では、実施例 1 と同じ参照電極を用いているため、参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、 $-4.94 [eV]$ である。よって、Z - C z P O 1 1 の H O M O 準位は、 $-4.94 - 0.95 = -5.89 [eV]$ であることがわかった。よって、Z - C z P O 1 1 のイオン化ポテンシャルは、 $5.89 [eV]$ であると算出できた。

20

【0408】

図 2 2 に示すように、還元反応特性の測定において、還元ピーク電位 E_{p_c} は、 -2.40 V であった。また、酸化ピーク電位 E_{p_a} は -2.30 V であった。したがって、半波電位 (E_{p_c} と E_{p_a} の中間の電位) は -2.35 V と算出できる。本実施例では、実施例 1 と同じ参照電極を用いているため、参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、 $-4.94 [eV]$ である。よって、Z - C z P O 1 1 の L U M O 準位は、 $-4.94 - (-2.35) = -2.49 [eV]$ であることがわかった。よって、Z - C z P O 1 1 の電子親和力は、 $2.59 [eV]$ であると算出できた。

【0409】

また、Z - C z P O 1 1 のトルエン溶液の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを図 2 3 (A) に、Z - C z P O 1 1 の薄膜の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを図 2 3 (B) 示す。図 2 3 において横軸は波長 (nm)、縦軸は強度 (任意単位) を表す。トルエン溶液の場合では 302 nm 付近に吸収が見られた。また、最大発光波長はトルエン溶液の場合では 392 nm (励起波長 320 nm) であった。また、薄膜の場合では 236 nm 付近、 298 nm 付近に吸収が見られた。また、最大発光波長は薄膜の場合では 407 nm (励起波長 321 nm) であった。

30

【0410】

また、Z - C z P O 1 1 の薄膜の吸収スペクトルのデータを用い、直接遷移を仮定した T a u c プロットから吸収端を求め、その吸収端を光学的エネルギーギャップとして見積もったところ、そのエネルギーギャップは 3.64 eV であった。よって、Z - C z P O 1 1 は広い光学的エネルギーギャップを有することがわかった。

40

【0411】

< Z - D P h A O 1 1 について >

【0412】

Z - D P h A O 1 1 の酸化反応特性については次のようにして調べた。参照電極に対する作用電極の電位を -0.31 V から 0.75 V まで変化させた後、 0.75 V から -0.31 V まで変化させる走査を 1 サイクルとし、100 サイクル測定した。また、Z - D P h A O 1 1 の還元反応特性については次のようにして調べた。参照電極に対する作用電極の電位を -1.36 V から -2.50 V まで変化させた後、 -2.50 V から -1.36

50

Vまで変化させる走査を1サイクルとし、100サイクル測定した。

【0413】

図24にZ-DPhAO11の酸化側のCV測定結果を、図25にZ-DPhAO11の還元側のCV測定結果をそれぞれ示す。図24および図25において、横軸は参照電極に対する作用電極の電位(V)を表し、縦軸は作用電極と補助電極との間に流れた電流値(A)を表す。図24では、0.65V付近(vs. Ag/Ag⁺電極)に還元を示す電流が観測された。図25では、-2.43V付近(vs. Ag/Ag⁺電極)に還元を示す電流が観測された。酸化反応も還元反応も起こることから、Z-DPhAO11は、電子もホールも注入されうる材料、つまり、パイポラ性の材料であることがわかった。

【0414】

100サイクルもの走査を繰り返しているにもかかわらず、酸化反応および還元反応において、CV曲線のピーク位置にあまり変化が見られない。このことから、本発明の有機半導体材料であるZ-DPhAO11は酸化反応および還元反応の繰り返しに対して極めて安定であることが分かった。つまり、電気化学的に安定であることがわかった。

【0415】

また、CV測定からZ-DPhAO11のイオン化ポテンシャルおよび電子親和力を算出した。

【0416】

図24に示すように、酸化反応特性の測定において、酸化ピーク電位 E_{pa} は、0.65Vであった。また、還元ピーク電位 E_{pc} は0.51Vであった。したがって、半波電位(E_{pa} と E_{pc} の中間の電位)は0.58Vと算出できる。本実施例では、実施例1と同じ参照電極を用いているため、参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、-4.94[eV]である。よって、Z-DPhAO11のHOMO準位は、-4.94-0.58=-5.52[eV]であることがわかった。よって、Z-DPhAO11のイオン化ポテンシャルは、5.52[eV]であると算出できた。

【0417】

図25に示すように、還元反応特性の測定において、還元ピーク電位 E_{pc} は、-2.43Vであった。また、酸化ピーク電位 E_{pa} は-2.31Vであった。したがって、半波電位(E_{pc} と E_{pa} の中間の電位)は-2.37Vと算出できる。本実施例では、実施例1と同じ参照電極を用いているため、参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、-4.94[eV]である。よって、Z-DPhAO11のLUMO準位は、-4.94-(-2.37)=-2.57[eV]であることがわかった。よって、Z-DPhAO11の電子親和力は、2.57[eV]であると算出できた。

【0418】

また、Z-DPhAO11のトルエン溶液の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを図26(A)に、Z-DPhAO11の薄膜の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを図26(B)示す。図26において横軸は波長(nm)、縦軸は強度(任意単位)を表す。トルエン溶液の場合では305nm付近に吸収が見られた。また、最大発光波長はトルエン溶液の場合では446nm(励起波長334nm)であった。また、薄膜の場合では309nm付近に吸収が見られた。また、最大発光波長は薄膜の場合では440nm(励起波長322nm)であった。

【0419】

また、Z-DPhAO11の薄膜の吸収スペクトルのデータを用い、直接遷移を仮定したTaucプロットから吸収端を求め、その吸収端を光学的エネルギーギャップとして見積もったところ、そのエネルギーギャップは3.62eVであった。よって、Z-DPhAO11は広い光学的エネルギーギャップを有することがわかった。

【0420】

<Z-CzPBOxについて>

【0421】

Z-CzPBOxの酸化反応特性については次のようにして調べた。参照電極に対する作

10

20

30

40

50

用電極の電位を -0.16 V から 1.10 V まで変化させた後、 1.10 V から -0.16 V まで変化させる走査を 1 サイクルとし、100 サイクル測定した。また、Z-CzPBOx の還元反応特性については次のようにして調べた。参照電極に対する作用電極の電位を -1.24 V から -2.55 V まで変化させた後、 -2.55 V から -1.24 V まで変化させる走査を 1 サイクルとし、100 サイクル測定した。

【0422】

図 27 に Z-CzPBOx の酸化側の CV 測定結果を、図 28 に Z-CzPBOx の還元側の CV 測定結果をそれぞれ示す。図 27 および図 28 において、横軸は参照電極に対する作用電極の電位 (V) を表し、縦軸は作用電極と補助電極との間に流れた電流値 (A) を表す。図 27 では、 0.98 V 付近 (vs. Ag/Ag⁺ 電極) に還元を示す電流が観測された。図 28 では、 -2.41 V 付近 (vs. Ag/Ag⁺ 電極) に還元を示す電流が観測された。酸化反応も還元反応も起こることから、Z-CzPBOx は、電子もホールも注入されうる材料、つまり、バイポーラ性の材料であることがわかった。

10

【0423】

100 サイクルもの走査を繰り返しているにもかかわらず、酸化反応および還元反応において、CV 曲線のピーク位置やピーク強度にあまり変化が見られない。このことから、本発明の有機半導体材料である Z-CzPBOx は酸化反応および還元反応の繰り返しに対して極めて安定であることが分かった。つまり、電気化学的に安定であることがわかった。

【0424】

また、CV 測定から Z-CzPBOx のイオン化ポテンシャルおよび電子親和力を算出した。

20

【0425】

図 27 に示すように、酸化反応特性の測定において、酸化ピーク電位 E_{pa} は、 0.98 V であった。また、還元ピーク電位 E_{pc} は 0.85 V であった。したがって、半波電位 (E_{pa} と E_{pc} の中間の電位) は 0.92 V と算出できる。本実施例では、実施例 1 と同じ参照電極を用いているため、参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、 -4.94 [eV] である。よって、Z-CzPBOx の HOMO 準位は、 $-4.94 - 0.92 = -5.86\text{ [eV]}$ であることがわかった。よって、Z-CzPBOx のイオン化ポテンシャルは、 5.86 [eV] であると算出できた。

30

【0426】

図 28 に示すように、還元反応特性の測定において、還元ピーク電位 E_{pc} は、 -2.41 V であった。また、酸化ピーク電位 E_{pa} は -2.28 V であった。したがって、半波電位 (E_{pc} と E_{pa} の中間の電位) は -2.35 V と算出できる。本実施例では、実施例 1 と同じ参照電極を用いているため、参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、 -4.94 [eV] である。よって、Z-CzPBOx の LUMO 準位は、 $-4.94 - (-2.35) = -2.60\text{ [eV]}$ であることがわかった。よって、Z-CzPBOx の電子親和力は、 2.60 [eV] であると算出できた。

【0427】

また、Z-CzPBOx のトルエン溶液の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを図 29 (A) に、Z-CzPBOx の薄膜の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを図 29 (B) 示す。図 29 において横軸は波長 (nm)、縦軸は強度 (任意単位) を表す。トルエン溶液の場合では 312 nm 付近に吸収が見られた。また、最大発光波長はトルエン溶液の場合では 390 nm (励起波長 324 nm) であった。また、薄膜の場合では 236 nm 付近、 299 nm 付近、 317 nm 付近に吸収が見られた。また、最大発光波長は薄膜の場合では 410 nm (励起波長 345 nm) であった。

40

【0428】

また、Z-CzPBOx の薄膜の吸収スペクトルのデータを用い、直接遷移を仮定した Tauc プロットから吸収端を求め、その吸収端を光学的エネルギーギャップとして見積もったところ、そのエネルギーギャップは 3.46 eV であった。よって、Z-CzPBO

50

×は広い光学的エネルギーギャップを有することがわかった。

【0429】

< Z - D P h A B O x について >

【0430】

Z - D P h A B O x の酸化反応特性については次のようにして調べた。参照電極に対する作用電極の電位を 0 . 0 2 V から 0 . 8 0 V まで変化させた後、0 . 8 0 V から 0 . 0 2 V まで変化させる走査を 1 サイクルとし、1 0 0 サイクル測定した。また、Z - D P h A B O x の還元反応特性については次のようにして調べた。参照電極に対する作用電極の電位を - 1 . 3 2 V から - 2 . 5 5 V まで変化させた後、- 2 . 5 5 V から - 1 . 3 2 V まで変化させる走査を 1 サイクルとし、1 0 0 サイクル測定した。

10

【0431】

図 3 0 に Z - D P h A B O x の酸化側の C V 測定結果を、図 3 1 に Z - D P h A B O x の還元側の C V 測定結果をそれぞれ示す。図 3 0 および図 3 1 において、横軸は参照電極に対する作用電極の電位 (V) を表し、縦軸は作用電極と補助電極との間に流れた電流値 (A) を表す。図 3 0 では、0 . 6 3 V 付近 (v s . A g / A g + 電極) に還元を示す電流が観測された。図 3 1 では、- 2 . 1 8 V 付近 (v s . A g / A g + 電極) に還元を示す電流が観測された。酸化反応も還元反応も起こることから、Z - D P h A B O x は、電子もホールも注入されうる材料、つまり、パイポーラ性の材料であることがわかった。

【0432】

1 0 0 サイクルもの走査を繰り返しているにもかかわらず、酸化反応および還元反応において、C V 曲線のピーク位置やピーク強度にあまり変化が見られない。このことから、本発明の有機半導体材料である Z - D P h A B O x は酸化反応および還元反応の繰り返しに対して極めて安定であることが分かった。つまり、電気化学的に安定であることがわかった。

20

【0433】

また、C V 測定から Z - D P h A B O x のイオン化ポテンシャルおよび電子親和力を算出した。

【0434】

図 3 0 に示すように、酸化反応特性の測定において、酸化ピーク電位 E_{p_a} は、0 . 6 3 V であった。また、還元ピーク電位 E_{p_c} は 0 . 5 1 V であった。したがって、半波電位 (E_{p_a} と E_{p_c} の中間の電位) は 0 . 5 7 V と算出できる。本実施例では、実施例 1 と同じ参照電極を用いているため、参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、- 4 . 9 4 [e V] である。よって、Z - D P h A B O x の H O M O 準位は、- 4 . 9 4 - 0 . 5 7 = - 5 . 5 1 [e V] であることがわかった。よって、Z - D P h A B O x のイオン化ポテンシャルは、5 . 5 1 [e V] であると算出できた。

30

【0435】

図 3 1 に示すように、還元反応特性の測定において、還元ピーク電位 E_{p_c} は、- 2 . 4 2 V であった。また、酸化ピーク電位 E_{p_a} は - 2 . 2 9 V であった。したがって、半波電位 (E_{p_c} と E_{p_a} の中間の電位) は - 2 . 3 6 V と算出できる。本実施例では、実施例 1 と同じ参照電極を用いているため、参照電極の真空準位に対するポテンシャルエネルギーは、- 4 . 9 4 [e V] である。よって、Z - D P h A B O x の L U M O 準位は、- 4 . 9 4 - (- 2 . 3 6) = - 2 . 5 9 [e V] であることがわかった。よって、Z - D P h A B O x の電子親和力は、2 . 5 9 [e V] であると算出できた。

40

【0436】

また、Z - D P h A B O x のトルエン溶液の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを図 3 2 (A) に、Z - D P h A B O x の薄膜の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを図 3 2 (B) 示す。図 3 2 において横軸は波長 (n m) 、縦軸は強度 (任意単位) を表す。トルエン溶液の場合では 3 1 0 n m 付近に吸収が見られた。また、最大発光波長はトルエン溶液の場合では 4 5 0 n m (励起波長 3 1 9 n m) であった。また、薄膜の場合では 3 1 8 n m 付近に吸収が見られた。また、最大発光波長は薄膜の場合では 4 5 0 n m (励起波長

50

344 nm)であった。

【0437】

また、Z-DPhABO_xの薄膜の吸収スペクトルのデータを用い、直接遷移を仮定したTaucプロットから吸収端を求め、その吸収端を光学的エネルギーギャップとして見積もったところ、そのエネルギーギャップは3.42 eVであった。よって、Z-DPhABO_xは広い光学的エネルギーギャップを有することがわかった。

【0438】

以上の測定から算出したZ-CzPO11、Z-DPhAO11、Z-CzPBO_x、Z-DPhABO_xの電子親和力およびイオン化ポテンシャルを表2に示す。

【0439】

【表2】

構造式	略称	電子親和力[eV]	イオン化ポテンシャル[eV]
(421)	Z-CzPO11	2.59	5.89
(460)	Z-DPhPA11	2.57	5.52
(101)	Z-CzPBO _x	2.60	5.86
(201)	Z-DPhABO _x	2.59	5.53

【0440】

表2からわかるように、同じ骨格bを有するZ-CzPO11およびZ-CzPBO_xのイオン化ポテンシャルは、ほぼ同じ値となっており、この値は表1に記載されている9-フェニル-9H-カルバゾールのイオン化ポテンシャルとほぼ同じである。同様に、同じ骨格bを有するZ-DPhAO11およびZ-DPhABO_xのイオン化ポテンシャルは、ほぼ同じ値となっており、この値は表1に記載されているトリフェニルアミンのイオン化ポテンシャルとほぼ同じである。つまり、ホール受容ユニットのイオン化ポテンシャルの値と有機半導体材料のイオン化ポテンシャルの値がほぼ同じになることを示している。

【0441】

一方、電子受容ユニットに関しては、Z-CzPO11、Z-DPhAO11、Z-CzPBO_x、Z-DPhABO_xの電子親和力はほぼ同じ値を示しており、表1に記載されている2,5-ジフェニル-1,3,4-オキサジアゾールおよび2-フェニルベンゾオキサゾールの電子親和力の値もおおむね同じである。

【0442】

これらのことから、本発明に係る有機半導体材料において、クアテルフェニレン基により共役の広がりが抑制され、電子受容ユニットとホール受容ユニットが分子内で相互作用することが抑制されていることが示唆される。よって、本発明に係る有機半導体材料は、電子受容ユニットおよびホール受容ユニットの性質の一部を維持しており、電子もホールも輸送することができるバイポーラ性の材料であることがわかった。また、電子親和力が大きい電子受容ユニットを用い、イオン化ポテンシャルが小さいホール受容ユニットを分子内に同時に用いても、広いバンドギャップを有する有機半導体材料が得られることが考えられる。

【実施例3】

【0443】

本実施例では、実施例2で示した有機半導体材料を発光素子に適用した一例について、図33を用いて説明する。本実施例で用いた材料の構造式を以下に示す。なお、すでに構造式を示した材料については省略する。

【0444】

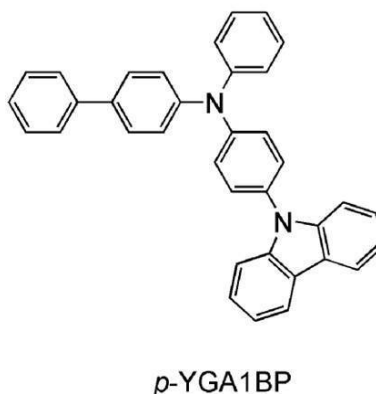
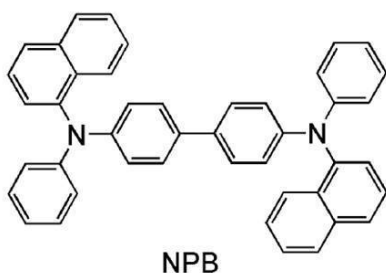
10

20

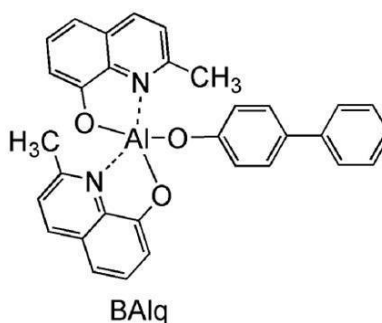
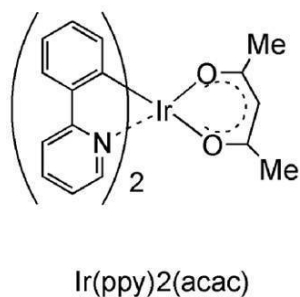
30

40

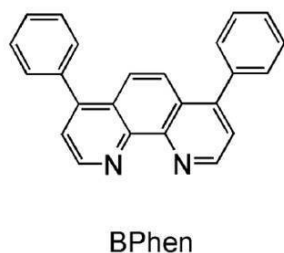
【化97】



10



20



30

【0445】

以下に、本実施例の発光素子の作製方法を示す。

【0446】

(発光素子1)

【0447】

まず、ガラス基板2101上に、酸化珪素を含むインジウム錫酸化物(ITSO)をスパッタリング法にて成膜し、第1の電極2102を形成した。なお、その膜厚は110nmとし、電極面積は2mm×2mmとした。

40

【0448】

次に、第1の電極2102が形成された面が下方となるように、第1の電極が形成された基板を真空蒸着装置内に設けられた基板ホルダーに固定した。成膜室を 10^{-4} Pa程度まで減圧した後、第1の電極2102上に、4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ピフェニル(略称:NPB)と酸化モリブデン(VI)とを共蒸着することにより、有機化合物と無機化合物とを複合してなる複合材料を含む層2111を形成した。その膜厚は40nmとし、NPBと酸化モリブデン(VI)との比率は、重量比で4:1(=NPB:酸化モリブデン)となるように調節した。なお、共蒸着法とは、一つの処理室内で複数の蒸発源から同時に蒸着を行う蒸着法である。

【0449】

50

次に、抵抗加熱を用いた蒸着法により、複合材料を含む層 2 1 1 1 上に 4 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) - 4 ' - フェニルトリフェニルアミン (略称 : Y G A 1 B P)、を 2 0 n m の膜厚となるように成膜し、ホール輸送層 2 1 1 2 を形成した。

【 0 4 5 0 】

さらに、構造式 (4 2 1) で表される Z - C z P O 1 1 とビス (2 - フェニルピリジナト - N , C 2 ') イリジウム (I I I) アセチルアセトナート (略称 : I r (p p y) ₂ (a c a c)) とを共蒸着することにより、ホール輸送層 2 1 1 2 上に 4 0 n m の膜厚の発光層 2 1 1 3 を形成した。ここで、Z - C z P O 1 1 と I r (p p y) ₂ (a c a c) との重量比は、1 : 0 . 0 6 (= Z - C z P O 1 1 : I r (p p y) ₂ (a c a c)) となるように調節した。

10

【 0 4 5 1 】

次に、抵抗加熱による蒸着法により、発光層 2 1 1 3 上に、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 (I I I) (略称 : B A l q) を 1 0 n m の膜厚となるように成膜し、第 1 の電子輸送層 2 1 1 4 A を形成した。そして、抵抗加熱による蒸着法により、第 1 の電子輸送層 2 1 1 4 A 上に、バソフェナントロリン (略称 : B P h e n) を 2 0 n m の膜厚となるように成膜し、第 2 の電子輸送層 2 1 1 4 B を形成した。

【 0 4 5 2 】

さらに、第 2 の電子輸送層 2 1 1 4 B に、フッ化リチウムを 1 n m の膜厚となるように成膜し、電子注入層 2 1 1 5 を形成した。

20

【 0 4 5 3 】

最後に、抵抗加熱による蒸着法を用い、電子注入層 2 1 1 5 上にアルミニウムを 2 0 0 n m の膜厚となるように成膜することにより、第 2 の電極 2 1 0 4 を形成することで、発光素子 1 を作製した。

【 0 4 5 4 】

(発光素子 2)

発光素子 1 と同一基板を用い、Z - C z P O 1 1 の代わりに、構造式 (4 6 0) で表される Z - D P h A O 1 1 を用いて、発光素子 1 と同様に発光素子 2 を作製した。つまり、Z - D P h A O 1 1 と I r (p p y) ₂ (a c a c) とを共蒸着することにより、ホール輸送層 2 1 1 2 上に 4 0 n m の膜厚の発光層 2 1 1 3 を形成した。ここで、Z - D P h A O 1 1 と I r (p p y) ₂ (a c a c) との重量比は、1 : 0 . 0 6 (= Z - D P h A O 1 1 : I r (p p y) ₂ (a c a c)) となるように調節した。発光層 2 1 1 3 以外は発光素子 1 と同様に作製した。

30

【 0 4 5 5 】

以上により得られた発光素子 1 および発光素子 2 を、窒素雰囲気グローブボックス内において、発光素子が大気に曝されないように封止する作業を行った後、これらの発光素子の動作特性について測定を行った。なお、測定は室温 (2 5 ° C に保たれた雰囲気) で行った。

【 0 4 5 6 】

発光素子 1 および発光素子 2 の電流密度 - 輝度特性を図 3 4 に示す。また、電圧 - 輝度特性を図 3 5 に示す。また、輝度 - 電流効率特性を図 3 6 に示す。図 3 4 および図 3 5 は測定データであり、これらのデータを元に輝度 - 電流効率特性 (図 3 6) を算出した。

40

【 0 4 5 7 】

また、1 m A の電流を流したときの発光スペクトルを図 3 7 に示す。図 3 7 から、発光素子 1 および発光素子 2 の発光は、I r (p p y) ₂ (a c a c) に由来した発光であることがわかった。本発明の有機半導体材料は、高い三重項励起エネルギーを有するため、発光層のホスト材料として用いることにより、緑色の発光を示す燐光性化合物からの発光が効率よく得られたことがわかる。

【 0 4 5 8 】

発光素子 1 において、輝度 8 5 0 c d / m ² のときの C I E 色度座標は (x = 0 . 3 5、

50

$y = 0.62$) であり、緑色の発光を示した。また、輝度 850 cd/m^2 のときの電流効率は 70 cd/A であり、外部量子効率は 19.5% であり、非常に高い発光効率を示した。また、輝度 850 cd/m^2 のときの電圧は 4.4 V であり、電流密度は 1.21 mA/cm^2 であった。パワー効率は 50 lm/W であり、非常に高いパワー効率を示した。また、エネルギー変換効率を算出したところ、 9.9% と高いエネルギー変換効率を示した。また、図 36 から、発光素子 1 は最大で 70 cd/A という非常に高い電流効率を示すことがわかる。

【0459】

また、発光素子 2 において、輝度 830 cd/m^2 のときの CIE 色度座標は ($x = 0.35$, $y = 0.62$) であり、緑色の発光を示した。また、輝度 830 cd/m^2 のときの電流効率は 72 cd/A であり、外部量子効率は 20.1% であり、非常に高い発光効率を示した。また、輝度 830 cd/m^2 のときの電圧は 4.6 V であり、電流密度は 1.15 mA/cm^2 であった。パワー効率は 49 lm/W であり、非常に高いパワー効率を示した。また、エネルギー変換効率を算出したところ、 9.8% と高いエネルギー変換効率を示した。また、図 36 から、発光素子 2 は最大で 72 cd/A という非常に高い電流効率を示すことがわかる。

【0460】

上記のことからわかるように、本発明の一態様を適用することにより、非常に高い発光効率を示す発光素子を得ることができる。また、駆動電圧の低い発光素子を得ることができる。また、非常に高い発光効率であり、かつ、駆動電圧も低減されているため、消費電力を低減することができる。

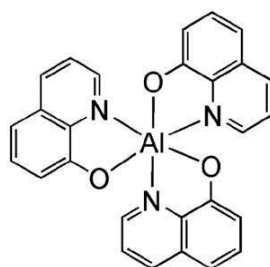
【実施例 4】

【0461】

本実施例では、実施例 2 で示した有機半導体材料を発光素子に適用した一例について、図 33 を用いて説明する。本実施例で用いた材料の構造式を以下に示す。なお、すでに構造式を示した材料については省略する。

【0462】

【化 98】



Alq

【0463】

以下に、本実施例の発光素子の作製方法を示す。

【0464】

(発光素子 3)

実施例 3 における発光素子 1 の BAlq の代わりに、トリス(8-キノリノラト)アルミニウム (III) (略称: Alq) を用いて、発光素子 3 を作製した。つまり、Alq を 10 nm の膜厚となるように成膜し、第 1 の電子輸送層 2114A を形成した。第 1 の電子輸送層 2114A 以外は発光素子 1 と同様に作製した。

【0465】

以上により得られた発光素子 3 を、窒素雰囲気グローブボックス内において、発光素子が大気に曝されないように封止する作業を行った後、これらの発光素子の動作特性について測定を行った。なお、測定は室温 (25°C に保たれた雰囲気) で行った。

【0466】

発光素子3の電流密度 - 輝度特性を図38に示す。また、電圧 - 輝度特性を図39に示す。また、輝度 - 電流効率特性を図40に示す。図38および図39は測定データであり、これらのデータを元に輝度 - 電流効率特性(図40)を算出した。

【0467】

また、1mAの電流を流したときの発光スペクトルを図41に示す。図41から、発光素子3の発光は、 $\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{acac})$ に由来した発光であることがわかった。本発明の有機半導体材料は、高い三重項励起エネルギーを有するため、発光層のホスト材料として用いることにより、緑色の発光を示す燐光性化合物からの発光が効率よく得られたことがわかる。

10

【0468】

発光素子3において、輝度 $1020\text{cd}/\text{m}^2$ のときのCIE色度座標は($x = 0.35$ 、 $y = 0.62$)であり、緑色の発光を示した。また、輝度 $1020\text{cd}/\text{m}^2$ のときの電流効率は $69\text{cd}/\text{A}$ であり、外部量子効率は 18.9% であり、非常に高い発光効率を示した。また、輝度 $1020\text{cd}/\text{m}^2$ のときの電圧は 4.6V であり、電流密度は $1.48\text{mA}/\text{cm}^2$ であった。パワー効率は $47\text{lm}/\text{W}$ であり、非常に高いパワー効率を示した。また、エネルギー変換効率を算出したところ、 9.2% と高いエネルギー変換効率を示した。また、図40から、発光素子3は最大で $69\text{cd}/\text{A}$ という非常に高い電流効率を示すことがわかる。

【0469】

上記のことからわかるように、本発明の一態様を適用することにより、非常に高い発光効率を示す発光素子を得ることができる。また、駆動電圧の低い発光素子を得ることができる。また、非常に高い発光効率であり、かつ、駆動電圧も低減されているため、消費電力を低減することができる。

20

【実施例5】

【0470】

本実施例では、実施例2で示した有機半導体材料を発光素子に適用した一例について、図33を用いて説明する。

【0471】

以下に、本実施例の発光素子の作製方法を示す。

30

【0472】

(発光素子4)

実施例3における発光素子1のZ-CzPO11の代わりに、構造式(101)で表されるZ-CzPBOxを用いて、発光素子1と同様に発光素子4を作製した。つまり、Z-CzPBOxと $\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{acac})$ とを共蒸着することにより、ホール輸送層2112上に 40nm の膜厚の発光層2113を形成した。ここで、Z-CzPBOxと $\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{acac})$ との重量比は、 $1:0.06 (= \text{Z-CzPBOx} : \text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{acac}))$ となるように調節した。発光層2113以外は発光素子1と同様に作製した。

【0473】

(発光素子5)

発光素子4と同一基板を用い、Z-CzPBOxの代わりに、構造式(201)で表されるZ-DPhABOxを用いて、発光素子4と同様に発光素子5を作製した。つまり、Z-DPhABOxと $\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{acac})$ とを共蒸着することにより、ホール輸送層2112上に 40nm の膜厚の発光層2113を形成した。ここで、Z-DPhABOxと $\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{acac})$ との重量比は、 $1:0.06 (= \text{Z-DPhABOx} : \text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{acac}))$ となるように調節した。発光層2113以外は発光素子4と同様に作製した。

40

【0474】

以上により得られた発光素子4および発光素子5を、窒素雰囲気グローブボックス内に

50

において、発光素子が大気に曝されないように封止する作業を行った後、これらの発光素子の動作特性について測定を行った。なお、測定は室温（25℃）に保たれた雰囲気で行った。

【0475】

発光素子4および発光素子5の電流密度 - 輝度特性を図42に示す。また、電圧 - 輝度特性を図43に示す。また、輝度 - 電流効率特性を図44に示す。図42および図43は測定データであり、これらのデータを元に輝度 - 電流効率特性（図44）を算出した。

【0476】

また、1mAの電流を流したときの発光スペクトルを図45に示す。図45から、発光素子4および発光素子5の発光は、 $\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{acac})$ に由来した発光であることがわかった。実施の形態2で示すベンゾオキサゾール誘導体は、高い三重項励起エネルギーを有するため、発光層のホスト材料として用いることにより、緑色の発光を示す燐光性化合物からの発光が効率よく得られたことがわかる。

10

【0477】

発光素子4において、輝度 $1080\text{cd}/\text{m}^2$ のときのCIE色度座標は（ $x = 0.35$ 、 $y = 0.62$ ）であり、緑色の発光を示した。また、輝度 $1080\text{cd}/\text{m}^2$ のときの電流効率は $49\text{cd}/\text{A}$ であり、外部量子効率は 13.6% であり、高い発光効率を示した。また、輝度 $1080\text{cd}/\text{m}^2$ のときの電圧は 5.8V であり、電流密度は $2.22\text{mA}/\text{cm}^2$ であった。パワー効率は $26\text{lm}/\text{W}$ であり、高いパワー効率を示した。また、エネルギー変換効率を算出したところ、 5.3% と高いエネルギー変換効率を示した。また、図44から、発光素子4は最大で $54\text{cd}/\text{A}$ という高い電流効率を示すことがわかる。

20

【0478】

また、発光素子5において、輝度 $850\text{cd}/\text{m}^2$ のときのCIE色度座標は（ $x = 0.35$ 、 $y = 0.62$ ）であり、緑色の発光を示した。また、輝度 $850\text{cd}/\text{m}^2$ のときの電流効率は $37\text{cd}/\text{A}$ であり、外部量子効率は 10.4% であり、高い発光効率を示した。また、輝度 $850\text{cd}/\text{m}^2$ のときの電圧は 5.4V であり、電流密度は $2.27\text{mA}/\text{cm}^2$ であった。パワー効率は $22\text{lm}/\text{W}$ であり、高いパワー効率を示した。また、エネルギー変換効率を算出したところ、 4.3% と高いエネルギー変換効率を示した。また、図44から、発光素子5は最大で $55\text{cd}/\text{A}$ という高い電流効率を示すことがわかる。

30

【0479】

上記のことからわかるように、本発明の一態様を適用することにより、非常に高い発光効率を示す発光素子を得ることができる。また、駆動電圧の低い発光素子を得ることができる。また、非常に高い発光効率であり、かつ、駆動電圧も低減されているため、消費電力を低減することができる。

【実施例6】

【0480】

本実施例では、実施例2で示した有機半導体材料を発光素子に適用した一例について、図33を用いて説明する。

40

【0481】

以下に、本実施例の発光素子の作製方法を示す。

【0482】

（発光素子6）

実施例5における発光素子4のBA1qの代わりに、トリス（8-キノリノラト）アルミニウム（III）（略称：Alq）を用いて、発光素子6を作製した。つまり、Alqを10nmの膜厚となるように成膜し、第1の電子輸送層2114Aを形成した。第1の電子輸送層2114A以外は発光素子4と同様に作製した。

【0483】

以上により得られた発光素子6を、窒素雰囲気グローブボックス内において、発光素子

50

が大気に曝されないように封止する作業を行った後、これらの発光素子の動作特性について測定を行った。なお、測定は室温（25 に保たれた雰囲気）で行った。

【0484】

発光素子6の電流密度 - 輝度特性を図46に示す。また、電圧 - 輝度特性を図47に示す。また、輝度 - 電流効率特性を図48に示す。図46および図47は測定データであり、これらのデータを元に輝度 - 電流効率特性（図48）を算出した。

【0485】

また、1 mAの電流を流したときの発光スペクトルを図49に示す。図49から、発光素子6の発光は、 $\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{acac})$ に由来した発光であることがわかった。本発明の有機半導体材料は、高い三重項励起エネルギーを有するため、発光層のホスト材料として用いることにより、緑色の発光を示す燐光性化合物からの発光が効率よく得られたことがわかる。

【0486】

発光素子6において、輝度 1150 cd/m^2 のときのCIE色度座標は（ $x = 0.35$ 、 $y = 0.62$ ）であり、緑色の発光を示した。また、輝度 1150 cd/m^2 のときの電流効率は 70 cd/A であり、外部量子効率は 19.3% であり、非常に高い発光効率を示した。また、輝度 1150 cd/m^2 のときの電圧は 6.2 V であり、電流密度は 1.66 mA/cm^2 であった。パワー効率は 35 lm/W であり、高いパワー効率を示した。また、エネルギー変換効率を算出したところ、 7.0% と高いエネルギー変換効率を示した。また、図48から、発光素子6は最大で 70 cd/A という高い電流効率を示すことがわかる。

【0487】

上記のことからわかるように、本発明の一態様を適用することにより、非常に高い発光効率を示す発光素子を得ることができる。また、駆動電圧の低い発光素子を得ることができる。また、非常に高い発光効率であり、かつ、駆動電圧も低減されているため、消費電力を低減することができる。

【実施例7】

【0488】

本実施例では、実施例2で示した本発明の一態様の有機半導体材料の合成方法について具体的に説明する。

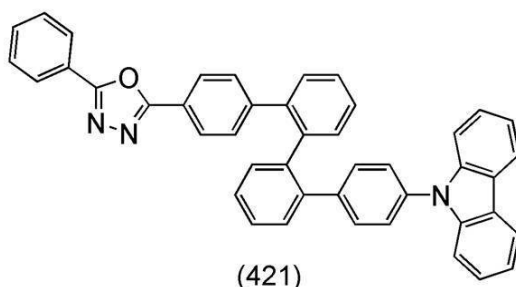
【0489】

<合成例1：Z-CzPO11>

実施の形態3で示すオキサジアゾール誘導体の一である、構造式(421)で表される9-[4'-[5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル]-[1,1':2',1'':2'',1''':2''',1'''']]クアテルフェニル-4-イル]-9H-カルバゾール（略称：Z-CzPO11）の合成方法について説明する。

【0490】

【化99】



【0491】

[ステップ1：2-(2'-プロモビフェニル-4-イル)-5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾールの合成]

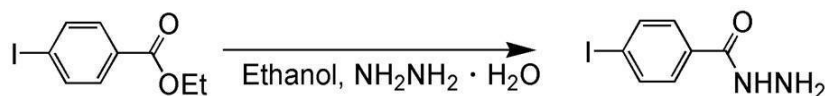
【0492】

(i) 4-ヨードベンゾイルヒドラジンの合成

4-ヨードベンゾイルヒドラジンの合成スキームを(A-1)に示す。

【0493】

【化100】



(A-1)

10

【0494】

エチル-4-ヨードベンゾエート25g(90mmol)を200mL三口フラスコに入れ、エタノール80mLを加えて、室温で10分撹拌した。撹拌後、この溶液にヒドラジン・1水和物20mLを加え、この混合物を80℃で5時間加熱撹拌した。撹拌後、この混合物を約500mLの水に加えて洗浄した。洗浄後、この混合物を吸引ろ過して固体を回収したところ、白色針状固体を収量23g、収率98%で得た。

【0495】

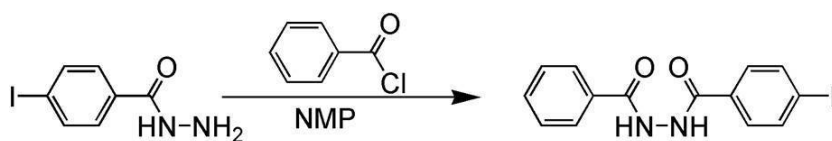
(ii) 1-ベンゾイル-2-(4-ヨードベンゾイル)ヒドラジンの合成

1-ベンゾイル-2-(4-ヨードベンゾイル)ヒドラジンの合成スキームを(A-2)に示す。

20

【0496】

【化101】



(A-2)

30

【0497】

4-ヨードベンゾイルヒドラジン15g(57mmol)を300mL三口フラスコに入れ、N-メチル-2-ピロリドン(略称:NMP)15mLを加えて、室温で10分撹拌した。撹拌後、この溶液にN-メチル-2-ピロリドン5mLとベンゾイルクロライド7.9mL(69mmol)の混合溶液50mLを滴下ロートにより滴下し、この溶液を室温で18時間撹拌した。撹拌後、この溶液に水を加えたところ、固体が析出した。析出した固体を吸引ろ過により回収した。回収した固体を約500mL飽和炭酸水素ナトリウム水溶液に加えて撹拌し、洗浄した。洗浄後、この混合物を吸引ろ過して固体を得た。得られた固体を約500mLの水に加えて撹拌し、洗浄した。洗浄後、この混合物を吸引ろ過して固体を得た。得られた固体をメタノールで洗浄したところ、粉末状白色固体を収量20g、収率97%で得た。

40

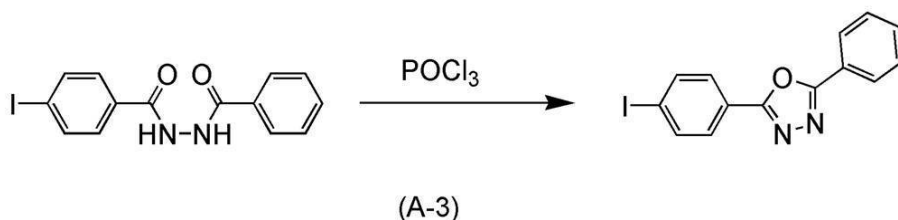
【0498】

(iii) 2-(4-ヨードフェニル)-5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾールの合成

2-(4-ヨードフェニル)-5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾールの合成スキームを(A-3)に示す。

【0499】

【化102】



【0500】

1 - ベンゾイル - 2 - (4 - ヨードベンゾイル) ヒドラジン 15 g (41 mmol) を 300 mL 三口フラスコに入れ、塩化ホスホリル 100 mL を加えた。この混合物を窒素気流下にて、100 で 5 時間攪拌した。攪拌後、この溶液の塩化ホスホリルを留去して固体を得た。得られた固体を水で洗浄した後、飽和炭酸水素ナトリウム水溶液で洗浄した。得られた固体をメタノールで洗浄したところ、粉末状白色固体を収量 9.0 g、収率 63% で得た。

10

【0501】

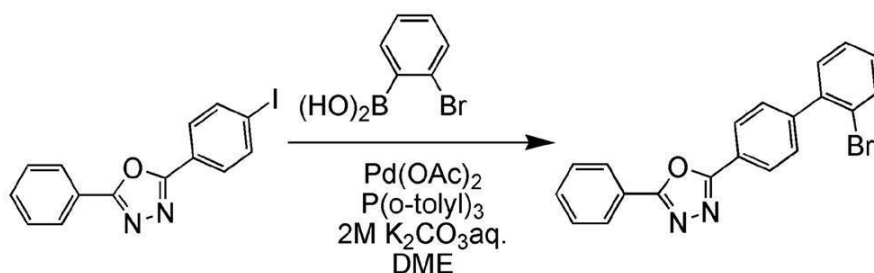
(vi) 2 - (2' - ブロモビフェニル - 4 - イル) - 5 - フェニル - 1, 3, 4 - オキサジアゾールの合成

2 - (2' - ブロモビフェニル - 4 - イル) - 5 - フェニル - 1, 3, 4 - オキサジアゾールの合成スキームを (A - 4) に示す。

20

【0502】

【化103】



30

【0503】

2 - (4 - ヨードフェニル) - 5 - フェニル - 1, 3, 4 - オキサジアゾール 5.0 g (14 mmol)、2 - ブロモフェニルボロン酸 2.9 g (14 mmol)、酢酸パラジウム (II) 0.032 g (0.14 mmol)、トリ (オルト - トリル) ホスフィン 0.30 g (1.0 mmol) を 100 mL 三口フラスコに入れた。この混合物へ 1, 2 - ジメトキシエタン (DME) 40 mL、2 M 炭酸カリウム水溶液 15 mL を加えて、この混合物を減圧脱気した後、当該フラスコ内を窒素置換した。この混合物を 90 で 5 時間加熱攪拌した。反応後、この混合物にトルエンを加え、水層と有機層とに分け、有機層を飽和炭酸ナトリウム水溶液、飽和食塩水の順で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。

40

【0504】

乾燥後、この混合物を吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液をセライト (和光純薬工業株式会社、カタログ番号 : 531 - 16855) を通して吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を濃縮して得た化合物を、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによる精製を行った。カラムクロマトグラフィーはまず、トルエンを展開溶媒として用い、次いでトルエン : 酢酸エチル = 10 : 1 の混合溶媒を展開溶媒として用いることにより行った。得られたフラクションを濃縮し、メタノールを加えて超音波を照射したところ、固体が析出した

50

。析出した固体を吸引ろ過により回収した。回収した固体をエタノールとヘキサンの混合溶媒で再結晶したところ、粉末状白色固体を収量 3.1 g、収率 58% で得た。

【0505】

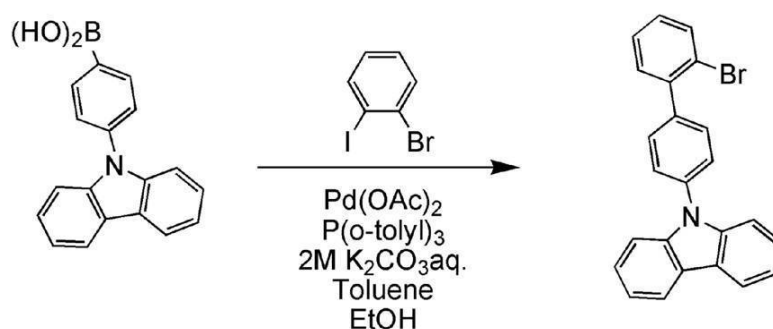
[ステップ 2 : 4' - (9H - カルバゾール - 9 - イル) ビフェニル - 2 - ボロン酸の合成]

【0506】

(i) 9 - (2' - ブロモビフェニル - 4 - イル) - 9H - カルバゾールの合成
9 - (2' - ブロモビフェニル - 4 - イル) - 9H - カルバゾールの合成スキームを (B - 1) に示す。

【0507】

【化104】



(B-1)

【0508】

4 - (9H - カルバゾール - 9 - イル) フェニルボロン酸 5.0 g (17 mmol)、2 - ブロモヨードベンゼン 9.9 g (35 mmol)、酢酸パラジウム (II) 0.039 g (0.17 mmol)、トリ (オルト - トリル) ホスフィン 0.37 g (1.2 mmol) を 200 mL 三口フラスコに入れた。この混合物にトルエン 30 mL、エタノール 5 mL、2 M 炭酸カリウム水溶液 15 mL を加え、この混合物を減圧脱気した後、当該フラスコ内を窒素置換した。この混合物を 90 ° で 5 時間加熱撹拌した。撹拌後、この混合物にトルエンを加え、有機層を飽和炭酸ナトリウム水溶液、飽和食塩水の順で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。乾燥後、この混合物を吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を濃縮し、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによる精製を行った。カラムクロマトグラフィーはまず、ヘキサンを展開溶媒として用い、次いでヘキサン : 酢酸エチル = 20 : 1 の混合溶媒を展開溶媒として用いることにより行った。得られたフラクションを濃縮し、乾燥したところ、無色油状物質を収量 6.0 g、収率 86% で得た。

【0509】

(ii) 4' - (9H - カルバゾール - 9 - イル) ビフェニル - 2 - ボロン酸の合成
4' - (9H - カルバゾール - 9 - イル) ビフェニル - 2 - ボロン酸の合成スキームを (B - 2) に示す。

【0510】

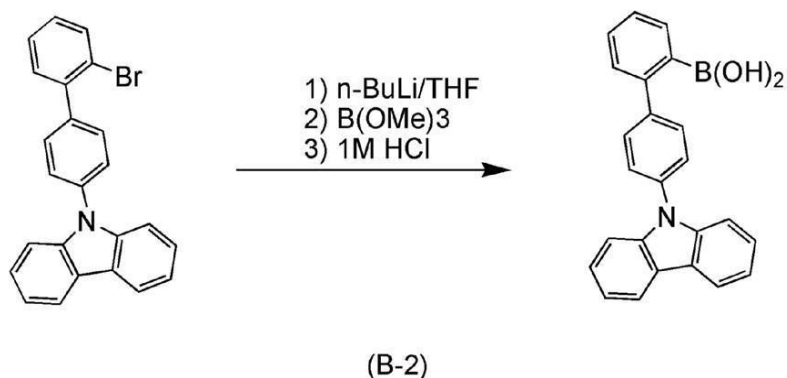
10

20

30

40

【化105】



10

【0511】

9-(2'-プロモピフェニル)-9H-カルバゾール 6.2 g (16 mmol)、テトラヒドロフラン (THF) 100 mL の混合溶液を 300 mL 三口フラスコに入れ、この溶液を減圧脱気した後、当該フラスコ内を窒素置換した。この溶液を -78 で 20 分攪拌した。攪拌後、1.55 mol/L の n-ブチルリチウムのヘキサン溶液 12 mL (19 mmol) をシリンジにより滴下し、-78 で 2 時間攪拌した。攪拌後、ホウ酸トリメチル 4.0 mL を加えて -78 で 1 時間、その後、-78 から徐々に室温に戻しながら、24 時間攪拌した。攪拌後、この溶液に 1 M 希塩酸を 50 mL 加え、室温で 30 分攪拌した。攪拌後、この混合物に酢酸エチルを加え、酢酸エチルで抽出した。抽出後、有機層と抽出溶液を合わせて飽和食塩水で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。乾燥後、この混合物を吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を濃縮し、クロロホルムとヘキサンの混合溶媒により再結晶したところ、粉末状白色固体を 3.2 g、収率 55% で得た。

20

【0512】

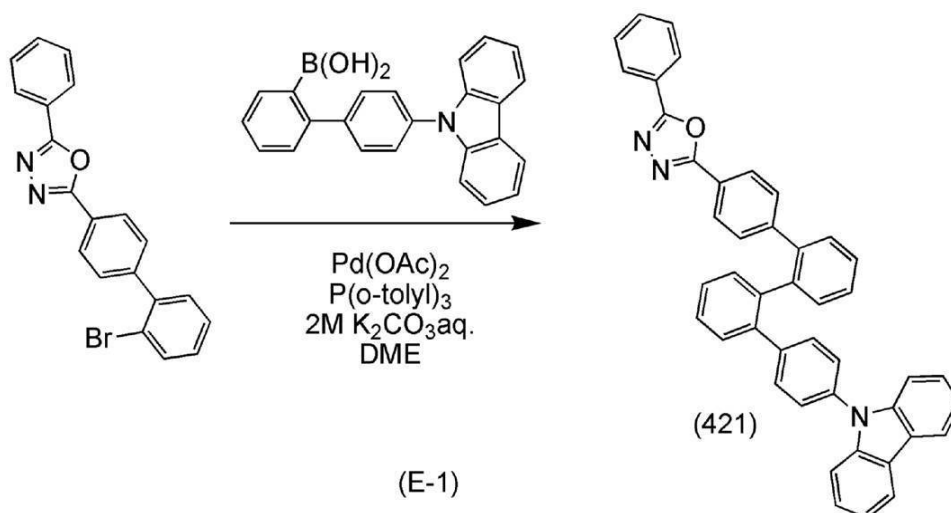
[ステップ3: Z-CzPO11の合成]

Z-CzPO11の合成スキームを(E-1)に示す。

30

【0513】

【化106】



40

【0514】

合成例1のステップ1で合成した2-(2'-プロモピフェニル-4-イル)-5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾール 1.0 g (2.7 mmol)、合成例1のステップ

50

2で合成した4'-（9H-カルバゾール-9-イル）ビフェニル-2-ボロン酸1.0g（2.7mmol）、酢酸パラジウム（II）0.010g（0.045mmol）、トリ（オルト-トリル）ホスフィン0.10g（0.33mmol）を100mL三口フラスコに入れた。この混合物へ1,2-ジメトキシエタン（DME）15mL、2M炭酸カリウム水溶液10mLを加えて、この混合物を減圧脱気した後、当該フラスコ内を窒素置換した。この混合物を90℃で10時間加熱撹拌した。撹拌後、この混合物にクロロホルムを加え、水層と有機層とに分け、有機層を飽和炭酸ナトリウム水溶液、飽和食塩水の順で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。乾燥後、この混合物を吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を、セラライト（和光純薬工業株式会社、カタログ番号：531-16855）を通して吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を濃縮して得た化合物を、シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製を行った。クロマトグラフィーはまず、トルエンを展開溶媒として用い、次いでトルエン：酢酸エチル=10：1の混合溶媒を展開溶媒として用いることにより行った。得られたフラクションを濃縮して得た固体をクロロホルムに溶解し、高速液体クロマトグラフィー（略称：HPLC）により精製を行った。クロマトグラフィーはクロロホルムを展開溶媒に用いることにより行った。得られたフラクションを濃縮して得た固体をクロロホルムとメタノールの混合溶媒で再結晶したところ、粉末状白色固体を収量0.30g、収率18%で得た。

10

【0515】

得られた化合物を核磁気共鳴測定（NMR）によって測定し、得られた化合物が9-[4'-（5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル）-[1,1':2',1'']クアテルフェニル-4-イル]-9H-カルバゾール（略称：Z-CzPO11）であることを確認した。

20

【0516】

以下に¹H NMRデータを示す。

¹H NMR（CDCl₃, 300MHz）：δ = 6.79（d, J = 8.3Hz, 2H）、6.88（d, J = 8.3Hz, 2H）、7.22（d, J = 8.3Hz, 2H）、7.25 - 7.33（m, 4H）、7.39 - 7.62（m, 13H）、7.84（d, J = 8.3Hz, 2H）、8.09 - 8.18（m, 4H）

【0517】

また、¹H NMRチャートを図50に示す。なお、図50（B）は、図50（A）における6.5ppm～8.5ppmの範囲を拡大して表したチャートである。

30

【0518】

また、得られたZ-CzPO11に対して、熱重量測定-示差熱分析（TG-DTA：Thermogravimetry-Differential Thermal Analysis）を行った。示差熱熱重量同時測定装置（セイコー電子株式会社製、TG/DTA 320型）により測定したところ、大気圧下で測定開始時における重量に対し95%の重量になる温度（以下、「5%重量減少温度」と示す。）は387℃であった。また、示差走査熱量分析装置（DSC：Differential Scanning Calorimetry、パーキンエルマー製、型番：Pyris 1 DSC）を用いてZ-CzPO11のガラス転移温度を測定した結果、119℃であった。これらの結果から、Z-CzPO11は良好な耐熱性を有する材料であることが分かった。

40

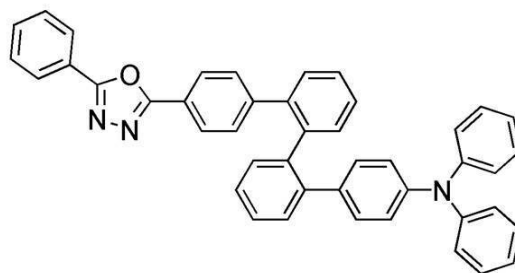
【0519】

<合成例2：Z-DPhAO11>

実施の形態3で示すオキサジアゾール誘導体の一である、構造式（460）で表される4-[4'-（5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル）-[1,1':2',1'']テルフェニル-2-イル]トリフェニルアミン（略称：Z-DPhAO11）の合成方法について説明する。

【0520】

【化107】



(460)

10

【0521】

[ステップ1: 4'-(N,N-ジフェニルアミノ)ビフェニル-2-ボロン酸の合成]

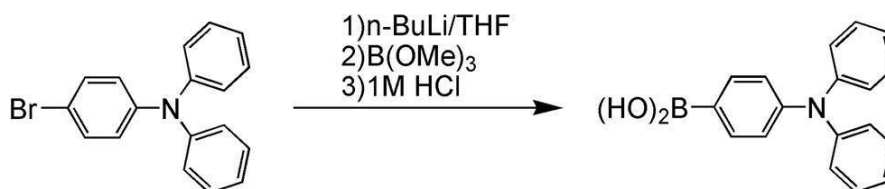
【0522】

(i) 4-(ジフェニルアミノ)フェニルボロン酸の合成

4-(ジフェニルアミノ)フェニルボロン酸の合成スキームを(C-1)に示す。

【0523】

【化108】



(C-1)

20

【0524】

4-プロモトリフェニルアミン10g(31mmol)を、テトラヒドロフラン(THF)200mLに溶かした溶液を500mL三口フラスコに入れ、撹拌した。この溶液を減圧脱気した後、当該フラスコ内を窒素置換した。この溶液を-78で20分撹拌した。撹拌後、1.55mol/Lのn-ブチルリチウムのヘキサン溶液24mL(37mmol)をシリンジにより滴下し、-78で2時間撹拌した。撹拌後、この混合物にホウ酸トリメチル8.0mL(72mmol)を加えて-78で1時間、その後、-78から徐々に室温に戻し、24時間撹拌した。撹拌後、この溶液に1M希塩酸を50mL加え、室温で30分撹拌した。撹拌後、この混合物に酢酸エチルを加え、酢酸エチルで抽出した。抽出後、有機層と抽出溶液を合わせて飽和食塩水で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。乾燥後、この混合物を吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を濃縮し、トルエンとヘキサンの混合溶媒により再結晶したところ、粉末状白色固体を収量5.5g、収率62%で得た。

30

40

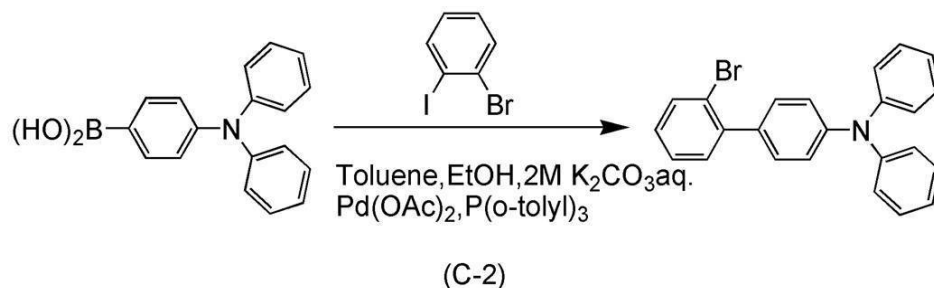
【0525】

(ii) 4-(2'-プロモフェニル)トリフェニルアミンの合成

4-(2'-プロモフェニル)トリフェニルアミンの合成スキームを(C-2)に示す。

【0526】

【化109】



10

【0527】

4-(ジフェニルアミノ)フェニルボロン酸 5.5 g (19 mmol)、2-ブロモヨードベンゼン 11 g (38 mmol)、酢酸パラジウム (II) 0.043 g (0.19 mmol)、トリ(オルト-トリル)ホスフィン 0.41 g (1.3 mmol) を 200 mL 三口フラスコに入れた。この混合物にトルエン 30 mL、エタノール 5 mL、2 M 炭酸カリウム水溶液 15 mL を加え、この混合物を減圧脱気した後、当該フラスコ内を窒素置換した。この混合物を 90 °C で 5 時間加熱撹拌した。撹拌後、この混合物にトルエンを加え、有機層を飽和炭酸ナトリウム水溶液、飽和食塩水の順で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。乾燥後、この混合物を吸引ろ過してろ液を得た。得られたろ液を濃縮し、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによる精製を行った。カラム

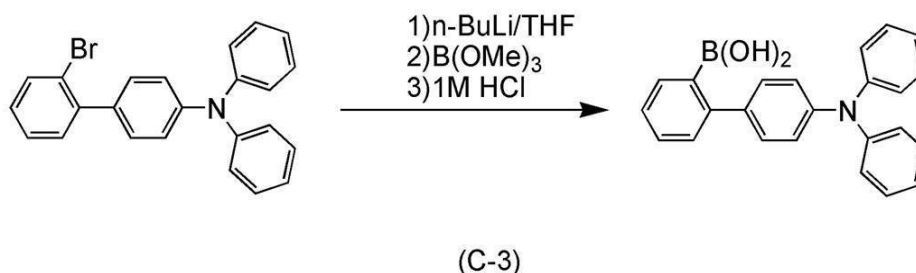
20

【0528】

(iii) 4'-(ジフェニルアミノ)ピフェニル-2-ボロン酸の合成
4'-(ジフェニルアミノ)ピフェニル-2-ボロン酸の合成スキームを (C-3) に示す。

【0529】

【化110】



30

【0530】

4-(2-ブロモフェニル)トリフェニルアミン 4.9 g (12 mmol)、テトラヒドロフラン (THF) 100 mL の混合溶液を 300 mL 三口フラスコに入れ、この溶液を減圧脱気した後、当該フラスコ内を窒素置換した。この溶液を -78 °C で 20 分撹拌した。撹拌後、1.55 mol/L の n-ブチルリチウムのヘキサン溶液 9.5 mL (15 mmol) をシリンジにより滴下し、-78 °C で 2 時間撹拌した。撹拌後、この混合物にホウ酸トリメチル 2.8 mL (25 mmol) を加えて -78 °C で 1 時間、その後、-78 °C から徐々に室温に戻し、18 時間撹拌した。撹拌後、この溶液に 1 M 希塩酸を 50 mL 加え、室温で 30 分撹拌した。撹拌後、この混合物に酢酸エチルを加え、酢酸エチルで抽出した。抽出後、有機層と抽出溶液を合わせて飽和食塩水で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。乾燥後、この混合物を吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を濃縮し、トルエンとヘキサンの混合溶媒により再結晶したところ、粉末状白

40

50

色固体を2.4 g、収率55%で得た。

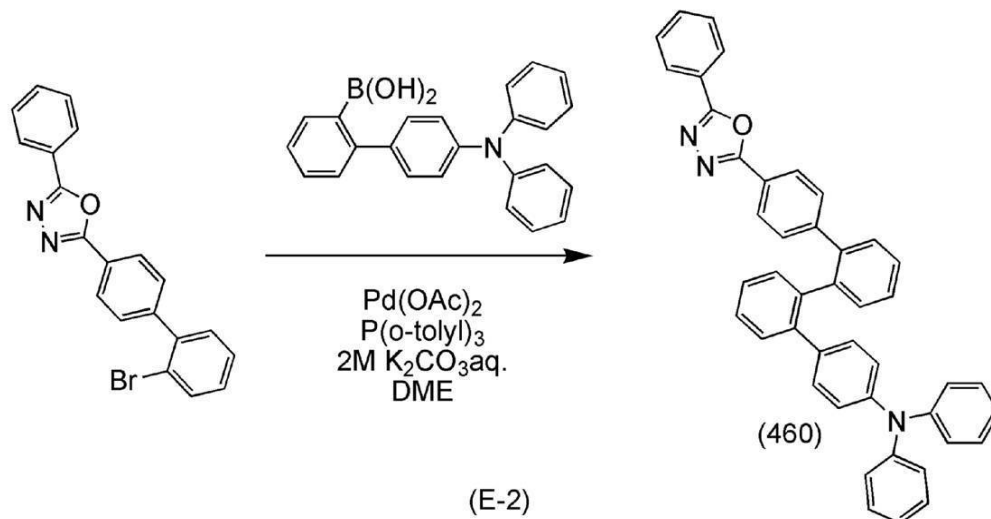
【0531】

[ステップ2: Z-DPhAO11)の合成]

Z-DPhAO11の合成スキームを(E-2)に示す。

【0532】

【化111】



10

20

【0533】

合成例1のステップ1で合成した2-(2'-プロモビフェニル-4-イル)-5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾール1.0 g (2.7 mmol)、合成例2のステップ1で合成した4'-(ジフェニルアミノ)ビフェニル-2-ボロン酸0.97 g (2.7 mmol)、酢酸パラジウム(II)0.010 g (0.045 mmol)、トリス(オルト-トリル)ホスフィン0.10 g (0.33 mmol)を100 mL三口フラスコに入れた。この混合物へ1,2-ジメトキシエタン15 mL(略称: DME)、2 M炭酸カリウム水溶液15 mLを加えて、この混合物を減圧脱気した後、当該フラスコ内を窒素置換した。この混合物を90℃で10時間加熱撹拌した。撹拌後、この混合物にトルエンを加え、水層と有機層とに分け、有機層を飽和炭酸ナトリウム水溶液、飽和食塩水の順で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。乾燥後、この混合物を吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を、セライト(和光純薬工業株式会社、カタログ番号: 531-16855)を通して吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を濃縮して得た化合物を、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによる精製を行った。クロマトグラフィーはまず、トルエンを展開溶媒として用い、次いでトルエン:酢酸エチル=20:1の混合溶媒を展開溶媒として用いることにより行った。得られたフラクションを濃縮して得た固体をクロロホルムに溶解し、高速液体クロマトグラフィー(略称: HPLC)による精製を行った。クロマトグラフィーはクロロホルムを展開溶媒に用いることにより行った。得られたフラクションを濃縮して得た固体をクロロホルムとメタノールの混合溶媒で再結晶したところ、粉末状白色固体を収量0.60 g、収率37%で得た。

30

40

【0534】

得られた白色固体0.60 gをトレインサブレーション法により昇華精製した。昇華精製は7.0 Paの減圧下、アルゴンの流量を4 mL/minとして230℃で18時間行った。昇華精製後、目的の化合物を収量0.55 g、収率92%で得た。

【0535】

得られた化合物を核磁気共鳴測定(NMR)によって測定し、得られた化合物が4-[4'-(5-フェニル-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル)-[1,1':2',1'']]テルフェニル-2-イル]トリフェニルアミン(略称: Z-DPhAO11)であることを確認した。

50

【0536】

以下に¹H NMRデータを示す。

¹H NMR (CDCl₃, 300 MHz): = 6.44 (d, J = 8.8 Hz, 2H)、6.72 (d, J = 8.8 Hz, 2H)、6.86 (d, J = 8.8 Hz, 2H)、6.97 - 7.56 (m, 21H)、7.79 (d, J = 8.3 Hz, 2H)、8.09 - 8.13 (m, 2H)

【0537】

また、¹H NMRチャートを図51に示す。なお、図51(B)は、図51(A)における6.5 ppm ~ 8.5 ppmの範囲を拡大して表したチャートである。

【0538】

また、得られたZ-DPhAO11に対して、熱重量測定-示差熱分析(TG-DTA)を行った。示差熱熱重量同時測定装置(セイコー電子株式会社製, TG/DTA 320型)により測定したところ、5%重量減少温度は395であった。また、示差走査熱量分析装置(DSC、パーキンエルマー製、型番: Pyris 1 DSC)を用いてZ-DPhAO11のガラス転移温度を測定した結果、99であった。これらの結果から、Z-DPhAO11は良好な耐熱性を有する材料であることが分かった。

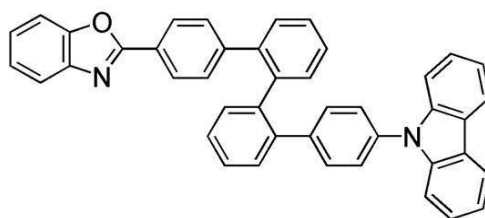
【0539】

<合成例3: Z-CzPBOx>

実施の形態2で示すベンゾオキサゾール誘導体の一である、構造式(101)で表される9-[4'''-(ベンゾオキサゾール-2-イル)-[1,1':2',1'':2''',1''']]クアテルフェニル-4-イル]-9H-カルバゾール(略称: Z-CzPBOx)の合成方法について説明する。

【0540】

【化112】



(101)

【0541】

[ステップ1: 2-(2'-プロモビフェニル-4-イル)ベンゾオキサゾールの合成]

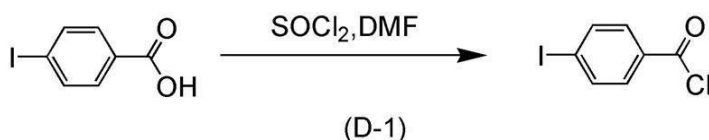
【0542】

(i) 4-ヨードベンゾイルクロリドの合成

4-ヨードベンゾイルクロリドの合成スキームを(D-1)に示す。

【0543】

【化113】



(D-1)

【0544】

4-ヨード安息香酸25g(0.10mol)を200mL三口フラスコに入れ、塩化チオニル70mL、N,N-ジメチルホルムアミド(DMF)3滴を加えた。この混合物を窒素気流下、80で3時間攪拌した。攪拌後、反応溶液中の塩化チオニルを減圧蒸留により除去し、淡黄色油状物質を得た。

【0545】

10

20

30

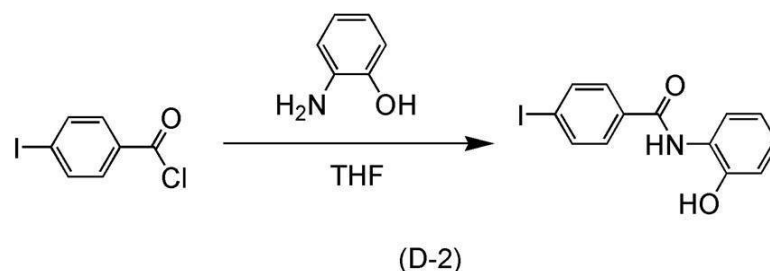
40

50

(ii) 4-ヨード-N-(2-ヒドロキシフェニル)ベンズアミドの合成
4-ヨード-N-(2-ヒドロキシフェニル)ベンズアミドの合成スキームを(D-2)に示す。

【0546】

【化114】



10

【0547】

2-アミノフェノール10g(92mmol)、トリエチルアミン7.0mLを300mL三口フラスコに入れ、テトラヒドロフラン(THF)100mLを加えた。この溶液を0で20分攪拌した。攪拌後、4-ヨード安息香酸クロリド(0.10mol)をテトラヒドロフラン(略称:THF)100mLに溶かした溶液を滴下した。この溶液を窒素気流下、0で5時間攪拌した。攪拌後、この溶液を約300mLの水に加え、得られた混合物の水層を酢酸エチルで抽出した。抽出後、有機層と抽出溶液を合わせて1Mの塩酸、飽和炭酸水素ナトリウム水溶液、飽和食塩水の順で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。乾燥後、この混合物をセライト(和光純薬工業株式会社、カタログ番号:531-16855)を通して吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を濃縮して得た固体を酢酸エチルとヘキサンの混合溶媒で再結晶したところ、粉末状白色固体を収量30g、収率97%で得た。

20

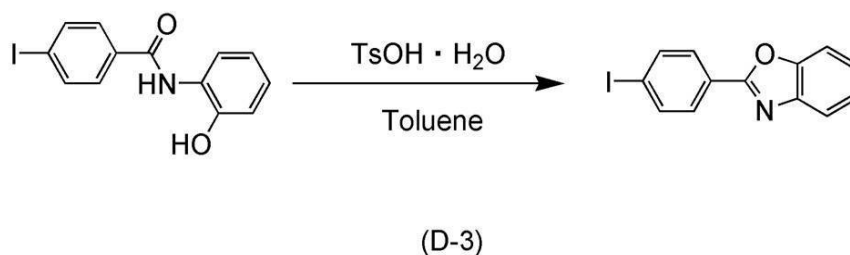
【0548】

(iii) 2-(4-ヨードフェニル)ベンゾオキサゾールの合成

2-(4-ヨードフェニル)ベンゾオキサゾールの合成スキームを(D-3)に示す。

【0549】

【化115】



30

【0550】

4-ヨード-N-(2-ヒドロキシフェニル)ベンズアミド15g(44mmol)、パラ-トルエンスルホン酸・1水和物24g(0.14mol)を300mL三口フラスコに入れ、当該フラスコ内を窒素置換した。この混合物にトルエン300mLを加えた。この混合物を窒素気流下、110で4時間攪拌した。攪拌後、反応混合物を約300mLの水に加えた後、この混合物の水層を酢酸エチルにより抽出した。抽出後、有機層と抽出溶液を合わせて飽和炭酸水素ナトリウム水溶液、飽和食塩水の順で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。乾燥後、この混合物を、セライト(和光純薬工業株式会社、カタログ番号:531-16855)を通して吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を濃縮して得た固体を酢酸エチルとヘキサンの混合溶媒により再結晶したところ、粉末状白色固体を収量11g、収率75%で得た。

40

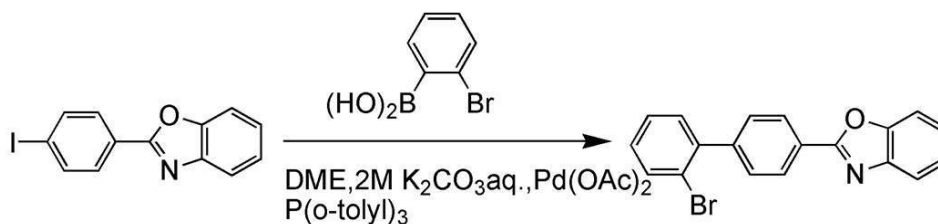
【0551】

50

(iv) 2-(2'-ブロモピフェニル-4-イル)ベンゾオキサゾールの合成
2-(2'-ブロモピフェニル-4-イル)ベンゾオキサゾールの合成スキームを(D-4)に示す。

【0552】

【化116】



10

【0553】

2-(4-ヨードフェニル)ベンゾオキサゾール 7.0 g (22 mmol)、2-ブロモフェニルボロン酸 4.4 g (22 mmol)、酢酸パラジウム(II) 0.049 g (0.22 mmol)、トリ(オルト-トリル)ホスフィン 0.46 g (1.5 mmol)を100 mL三口フラスコに入れた。この混合物に1,2-ジメトキシエタン(略称: DME) 60 mL、2 M炭酸カリウム水溶液 30 mLを加え、この混合物を減圧脱気した後、当該フラスコ内を窒素置換した。この混合物を90℃で10時間加熱撹拌した。撹拌後、この混合物にトルエンを加え、有機層を飽和炭酸ナトリウム水溶液、飽和食塩水の順で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。乾燥後、この混合物を吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を、セライト(和光純薬工業株式会社、カタログ番号: 531-16855)を通して吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を濃縮し、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによる精製を行った。カラムクロマトグラフィーはまず、クロロホルム:ヘキサン=1:4の混合溶媒を展開溶媒として用い、次いでクロロホルム:ヘキサン=1:1の混合溶媒を展開溶媒として用いることにより行った。得られたフラクションを濃縮し、固体を得た。得られた固体をクロロホルムとヘキサンの混合溶媒で再結晶したところ、粉末状白色固体を収量2.2 g、収率29%で得た。

20

30

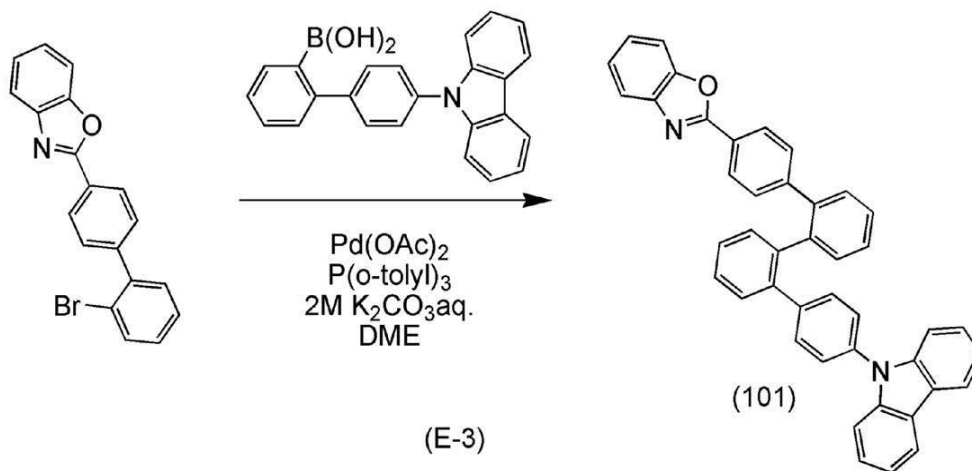
【0554】

[ステップ2: Z-CzPBOxの合成]

Z-CzPBOxの合成スキームを(E-3)に示す。

【0555】

【化117】



40

【0556】

50

合成例3のステップ1で合成した2-(2'-プロモビフェニル-4-イル)ベンゾオキサゾール2.1g(5.7mmol)、合成例1のステップ2で合成した4'-(9H-カルバゾール-9-イル)ビフェニル-2-ボロン酸2.0g(5.7mmol)、酢酸パラジウム(II)0.020g(0.089mmol)、トリ(オルト-トリル)ホスフィン0.20g(0.65mmol)を200mL三口フラスコに入れた。この混合物へ1,2-ジメトキシエタン(略称:DME)30mL、2M炭酸カリウム水溶液30mLを加えて、この混合物を減圧脱気した後、当該フラスコ内を窒素置換した。この混合物を90℃で10時間加熱撹拌した。撹拌後、この混合物にクロロホルムを加え、有機層を飽和炭酸ナトリウム水溶液、飽和食塩水の順で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。乾燥後、この混合物を吸引ろ過してろ液を得た。得られたろ液を、セライト(和光純薬工業株式会社、カタログ番号:531-16855)を通して吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を濃縮し、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによる精製を行った。クロマトグラフィーはトルエンを展開溶媒として用いることにより行った。得られたフラクションを濃縮して得た固体をクロロホルムに溶解し、高速液体クロマトグラフィー(HPLC)による精製を行った。カラムクロマトグラフィーはクロロホルムを展開溶媒として用いることにより行った。得られたフラクションを濃縮して得た固体をクロロホルムとメタノールの混合溶媒で再結晶したところ、粉末状白色固体を収量2.6g、収率77%で得た。

【0557】

得られた白色固体2.6gの昇華精製をトレインサブレーション法により行った。昇華精製は7.0Paの減圧下、アルゴンの流量を4mL/minとして250℃で15時間行った。収量2.3gで収率は88%であった。

【0558】

得られた化合物を核磁気共鳴測定(NMR)によって測定し、得られた化合物が9-[4''-(ベンゾオキサゾール-2-イル)-[1,1':2',1'':2'',1''']クアテルフェニル-4-イル]-9H-カルバゾール(略称:Z-CzPBOx)であることを確認した。

【0559】

以下に¹H NMRデータを示す。

¹H NMR(CDCl₃, 300MHz): δ = 6.78(d, J = 8.3Hz, 2H)、6.87(d, J = 8.3Hz, 2H)、7.15-7.62(m, 19H)、7.72-7.77(m, 1H)、7.95(d, J = 8.3Hz, 2H)、8.16(d, J = 7.8Hz, 2H)。

【0560】

また、¹H NMRチャートを図52に示す。なお、図52(B)は、図52(A)における6.5ppm~8.5ppmの範囲を拡大して表したチャートである。

【0561】

また、得られたZ-CzPBOxの熱重量測定-示差熱分析(TG-DTA)を行った。測定には高真空差動型示差熱天秤(ブルカー・エイックスエス株式会社製、TG-DTA2410SA)を用いた。常圧、昇温速度10℃/min、窒素気流下(流速200mL/min)の条件で測定したところ、重量と温度の関係(熱重量測定)から、5%重量減少温度は395.2℃であった。

【0562】

また、示差走査熱量測定装置(DSC、パーキンエルマー社製、Pyris1)を用いて、Z-CzPBOxの熱物性を測定した。まず、サンプルを40℃/minの昇温速度で-10℃から350℃まで加熱した後、40℃/minで-10℃まで冷却した。その後、10℃/minの昇温速度で290℃まで加熱することにより、DSCチャートを得た。DSCチャートにはZ-CzPBOxのガラス転移点を示すピークが観測されており、そのガラス転移温度(Tg)は110℃であることがわかった。このことから、Z-CzPBOxは高いガラス転移点を有することがわかった。従って本合成例のZ-CzPBO

10

20

30

40

50

×は高い耐熱性を有することが確認できた。

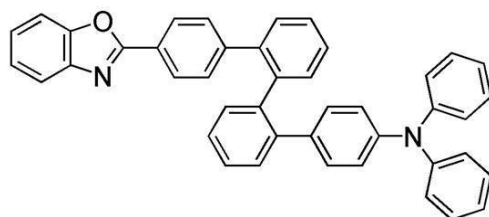
【0563】

<合成例4：Z-DPhABOx>

実施の形態2で示すベンゾオキサゾール誘導体の一である、構造式(201)で表される4-[4'-(ベンゾオキサゾール-2-イル)-[1,1':2',1'']]クアテルフェニル-2-イル]トリフェニルアミン(略称：Z-DPhABOx)の合成方法について説明する。

【0564】

【化118】



(201)

10

【0565】

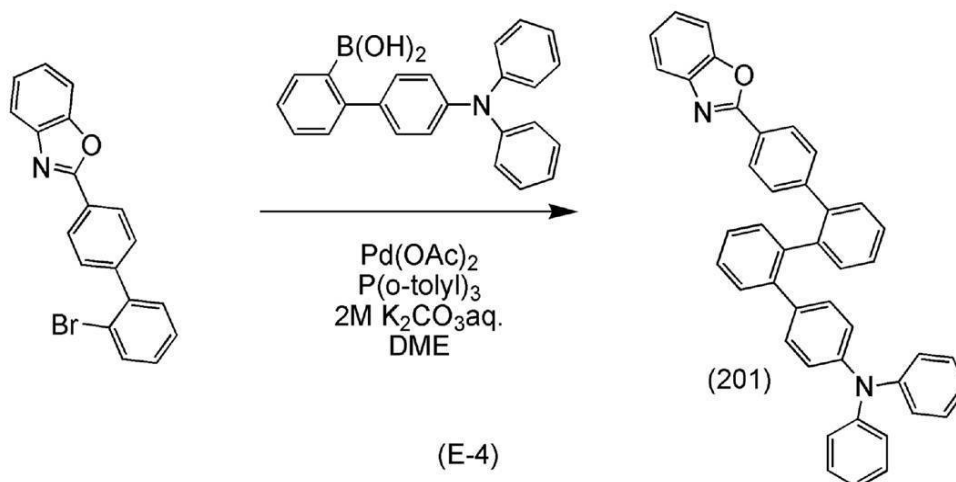
[ステップ1：Z-DPhABOxの合成]

Z-DPhABOxの合成スキームを(E-4)に示す。

20

【0566】

【化119】



(E-4)

30

【0567】

合成例3のステップ1で合成した2-(2'-プロモビフェニル-4-イル)ベンゾオキサゾール1.0g(2.9mmol)、合成例2のステップ1で合成した4'-(ジフェニルアミノ)ビフェニル-2-ボロン酸1.0g(2.9mmol)、酢酸パラジウム(II)0.010g(0.045mmol)、トリ(オルト-トリル)ホスフィン0.10g(0.33mmol)を100mL三口フラスコに入れた。この混合物へ1,2-ジメトキシエタン(DME)15mL、2M炭酸カリウム水溶液15mLを加え、この混合物を減圧脱気した後、当該フラスコ内を窒素置換した。この混合物を90℃で10時間加熱撹拌した。撹拌後、この混合物にトルエンを加え、有機層を飽和食塩水で洗浄した。洗浄後、有機層に硫酸マグネシウムを加えて乾燥した。乾燥後、この混合物を吸引ろ過してろ液を得た。得られたろ液を、セライト(和光純薬工業株式会社、カタログ番号：531-16855)を通して吸引ろ過し、ろ液を得た。得られたろ液を濃縮し、シリカゲルカ

40

50

ラムクロマトグラフィーによる精製を行った。クロマトグラフィーはまずトルエン：ヘキサン = 1 : 1 の混合溶媒を展開溶媒として用い、次いで、トルエンを展開溶媒として用いることにより行った。得られたフラクションを濃縮して得た固体をクロロホルムとメタノールの混合溶媒で再結晶したところ、粉末状白色固体を収量 1.0 g、収率 61% で得た。

【0568】

得られた白色固体 1.0 g の昇華精製をトレインサブレーション法により行った。昇華精製は 7.0 Pa の減圧下、アルゴンの流量を 4 mL/min とし、230 °C で 20 時間行った。収量 0.84 g で収率は 84% であった。

【0569】

得られた化合物を核磁気共鳴測定 (NMR) によって測定し、得られた化合物が 4 - [4 ' ' - (ベンゾオキサゾール - 2 - イル) - [1 , 1 ' : 2 ' , 1 ' '] クアテルフェニル - 2 - イル] トリフェニルアミン (略称: Z - DP h A B O x) であることを確認した。

【0570】

以下に ^1H NMR データを示す。

^1H NMR (CDCl₃, 300 MHz): δ = 6.45 (d, J = 8.3 Hz, 2H)、6.71 (d, J = 8.3 Hz, 2H)、6.85 (d, J = 8.3 Hz, 2H)、6.98 - 7.17 (m, 7H)、7.23 - 7.57 (m, 14H)、7.71 - 7.75 (m, 1H)、7.92 (d, J = 7.8 Hz, 2H)。

【0571】

また、 ^1H NMR チャートを図 53 に示す。なお、図 53 (B) は、図 53 (A) における 6.5 ppm ~ 8.5 ppm の範囲を拡大して表したチャートである。

【0572】

また、示差走査熱量測定装置 (DSC、パーキンエルマー社製、Pyris 1) を用いて、Z - DP h A B O x の熱物性を測定した。まず、サンプルを 40 °C/min の昇温速度で -10 °C から 350 °C まで加熱した後、40 °C/min で -10 °C まで冷却した。その後、10 °C/min の昇温速度で 290 °C まで加熱することにより、DSC チャートを得た。DSC チャートには Z - DP h A B O x のガラス転移点を示すピークが観測されており、そのガラス転移温度 (T_g) は 98.4 °C であることがわかった。このことから、Z - DP h A B O x は高いガラス転移点を有することがわかった。従って本合成例の Z - DP h A B O x は高い耐熱性を有することが確認できた。

【符号の説明】

【0573】

- 101 基板
- 102 第1の電極
- 103 EL層
- 104 第2の電極
- 111 ホール注入層
- 112 ホール輸送層
- 113 発光層
- 114 電子輸送層
- 115 電子注入層
- 501 第1の電極
- 502 第2の電極
- 511 第1の発光ユニット
- 512 第2の発光ユニット
- 513 電荷発生層
- 601 ソース側駆動回路
- 602 画素部

10

20

30

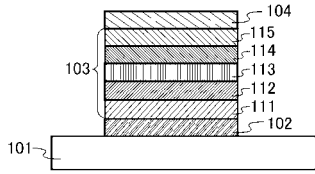
40

50

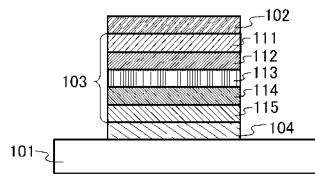
6 0 3	ゲート側駆動回路	
6 0 4	封止基板	
6 0 5	シール材	
6 0 7	空間	
6 0 8	配線	
6 0 9	F P C (フレキシブルプリントサーキット)	
6 1 0	素子基板	
6 1 1	スイッチング用 T F T	
6 1 2	電流制御用 T F T	
6 1 3	第 1 の電極	10
6 1 4	絶縁物	
6 1 6	E L 層	
6 1 7	第 2 の電極	
6 1 8	発光素子	
6 2 3	N チャネル型 T F T	
6 2 4	P チャネル型 T F T	
7 0 1	本体	
7 0 2	表示部	
7 0 3	操作スイッチ	
7 0 4	表示部	20
7 1 0	本体	
7 1 1	表示部	
7 1 2	メモリ部	
7 1 3	操作部	
7 1 4	イヤホン	
9 0 1	筐体	
9 0 2	液晶層	
9 0 3	バックライト	
9 0 4	筐体	
9 0 5	ドライバ I C	30
9 0 6	端子	
9 5 1	基板	
9 5 2	電極	
9 5 3	絶縁層	
9 5 4	隔壁層	
9 5 5	E L 層	
9 5 6	電極	
1 0 0 1	筐体	
1 0 0 2	筐体	
1 1 0 1	表示部	40
1 1 0 2	スピーカー	
1 1 0 3	マイクロフォン	
1 1 0 4	操作キー	
1 1 0 5	ポインティングデバイス	
1 1 0 6	カメラ用レンズ	
1 1 0 7	外部接続端子	
1 1 0 8	イヤホン端子	
1 2 0 1	キーボード	
1 2 0 2	外部メモリスロット	
1 2 0 3	カメラ用レンズ	50

1 2 0 4	ライト	
2 0 0 1	筐体	
2 0 0 2	光源	
2 1 0 1	ガラス基板	
2 1 0 2	第 1 の電極	
2 1 0 4	第 2 の電極	
2 1 1 1	複合材料を含む層	
2 1 1 2	ホール輸送層	
2 1 1 3	発光層	
2 1 1 4 A	第 1 の電子輸送層	10
2 1 1 4 B	第 2 の電子輸送層	
2 1 1 5	電子注入層	
3 0 0 1	照明装置	
3 0 0 2	テレビ装置	
9 1 0 1	筐体	
9 1 0 2	支持台	
9 1 0 3	表示部	
9 1 0 4	スピーカー部	
9 1 0 5	ビデオ入力端子	
9 2 0 1	本体	20
9 2 0 2	筐体	
9 2 0 3	表示部	
9 2 0 4	キーボード	
9 2 0 5	外部接続ポート	
9 2 0 6	ポインティングデバイス	
9 3 0 1	本体	
9 3 0 2	表示部	
9 3 0 3	筐体	
9 3 0 4	外部接続ポート	
9 3 0 5	リモコン受信部	30
9 3 0 6	受像部	
9 3 0 7	バッテリー	
9 3 0 8	音声入力部	
9 3 0 9	操作キー	
9 3 1 0	接眼部	
9 4 0 1	本体	
9 4 0 2	筐体	
9 4 0 3	表示部	
9 4 0 4	音声入力部	
9 4 0 5	音声出力部	40
9 4 0 6	操作キー	
9 4 0 7	外部接続ポート	
9 4 0 8	アンテナ	

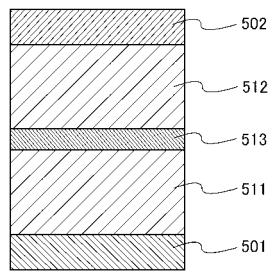
【 図 1 】



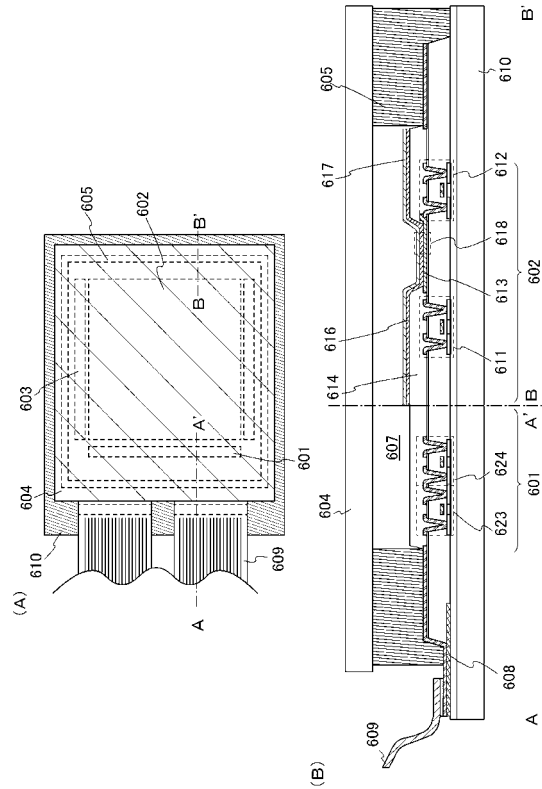
【 図 2 】



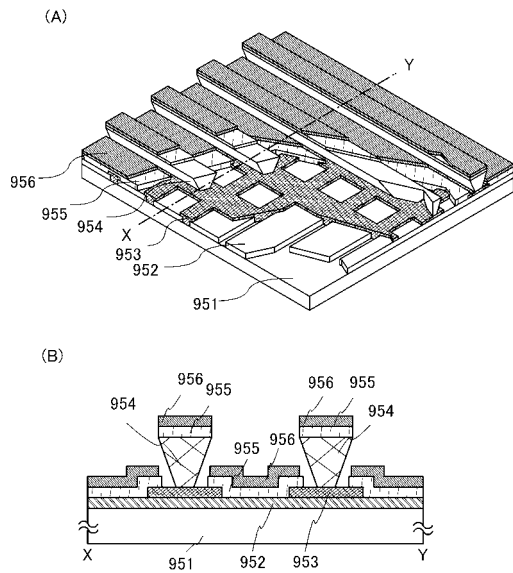
【 図 3 】



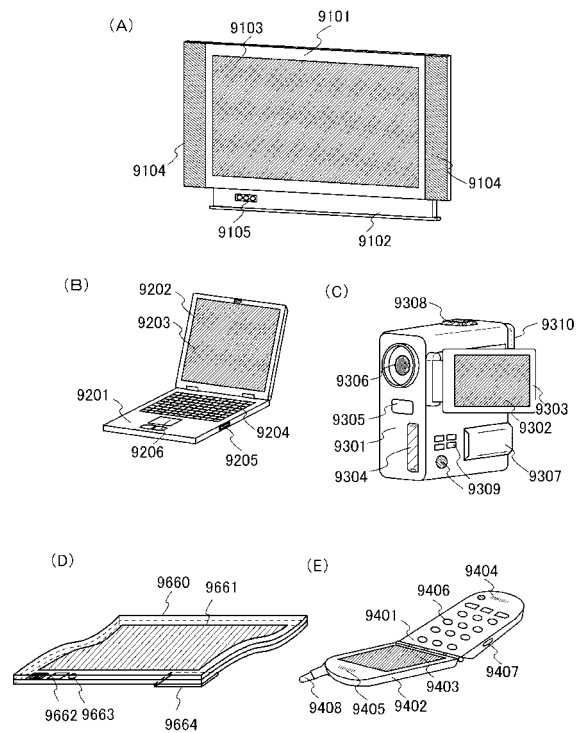
【 図 4 】



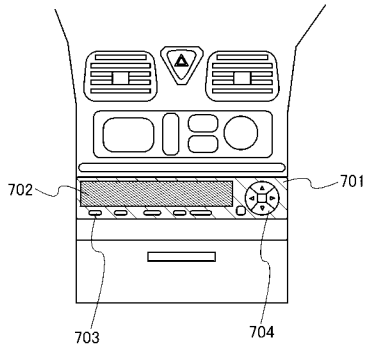
【 図 5 】



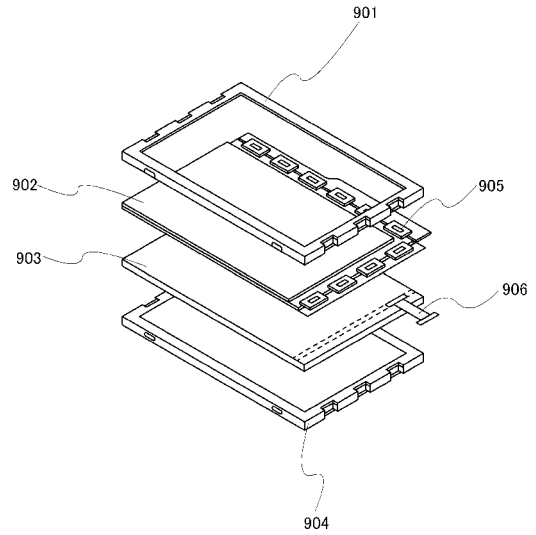
【 図 6 】



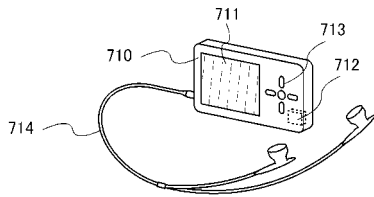
【図7】



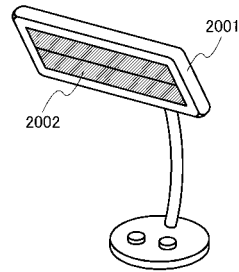
【図9】



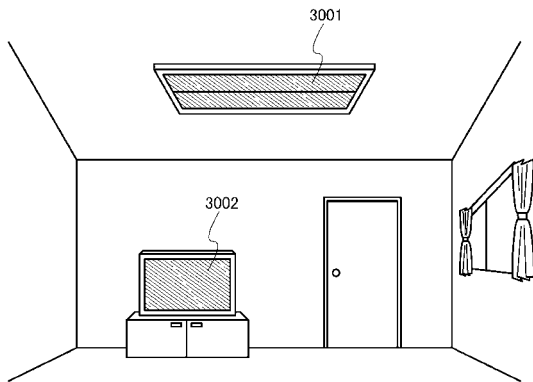
【図8】



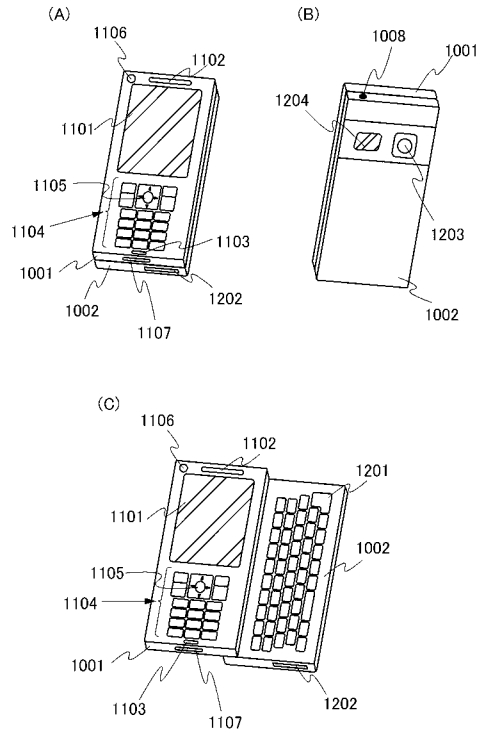
【図10】



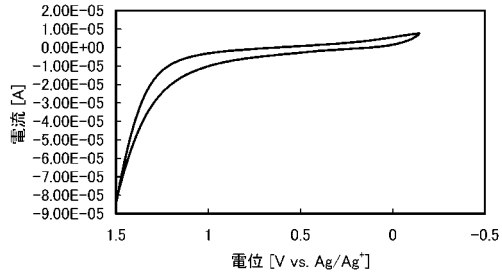
【図11】



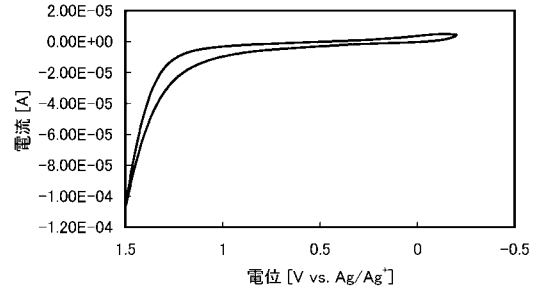
【図12】



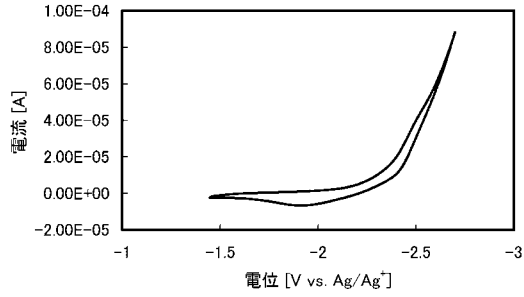
【 図 1 3 】



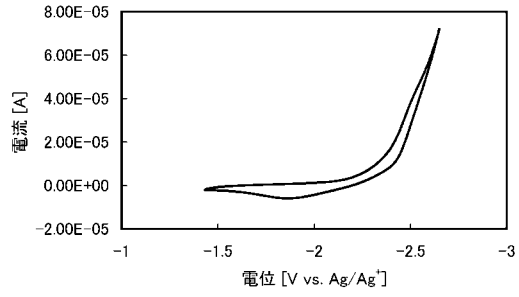
【 図 1 5 】



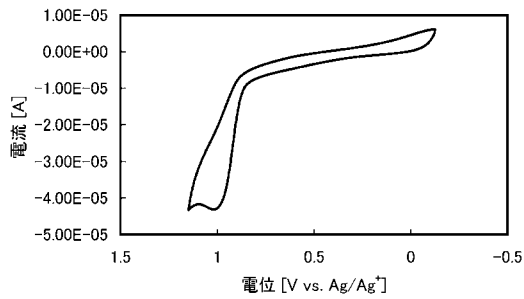
【 図 1 4 】



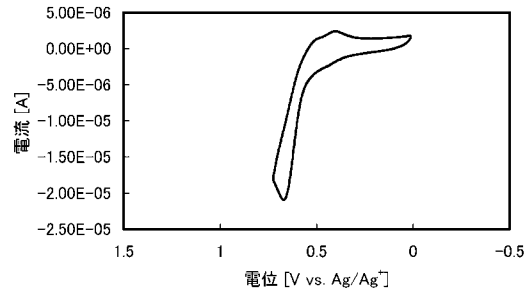
【 図 1 6 】



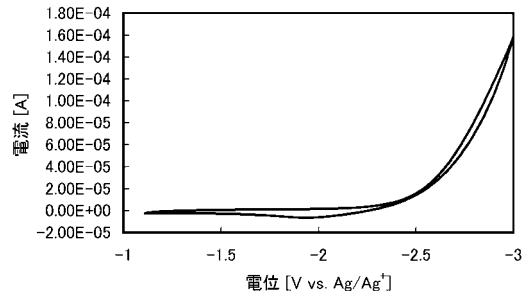
【 図 1 7 】



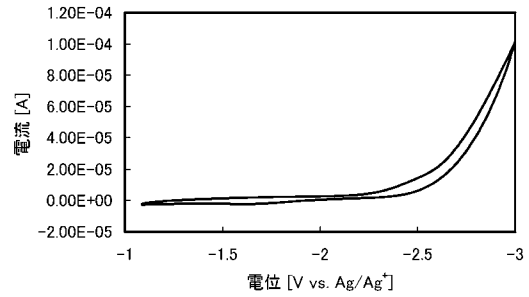
【 図 1 9 】



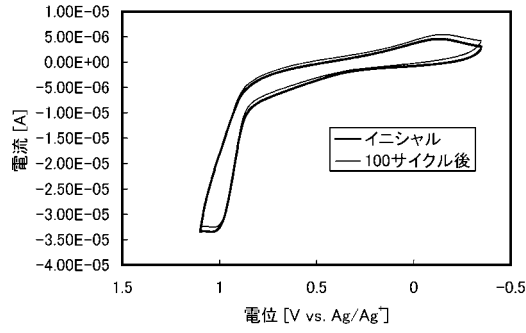
【 図 1 8 】



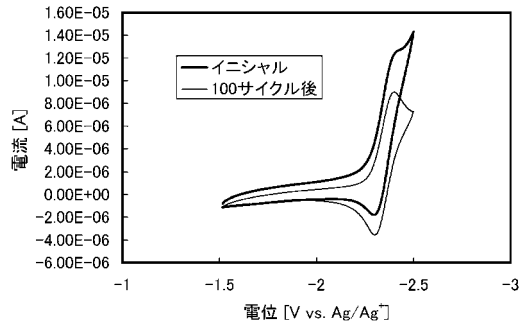
【 図 2 0 】



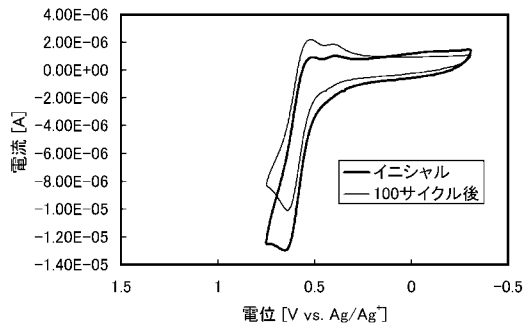
【図 2 1】



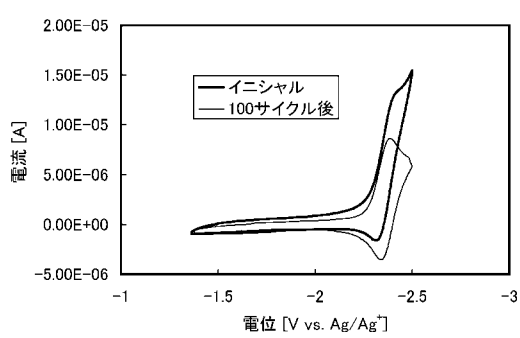
【図 2 2】



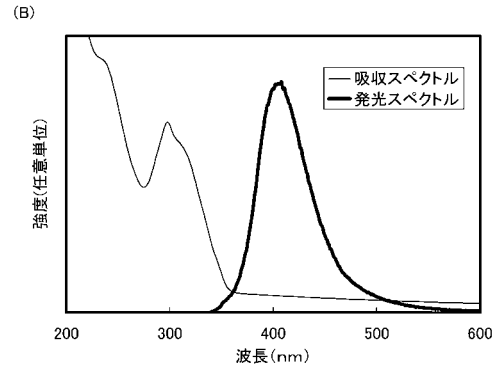
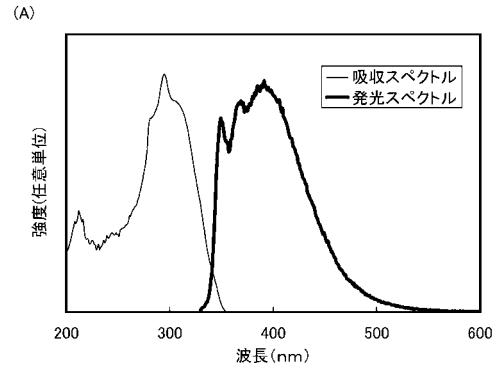
【図 2 4】



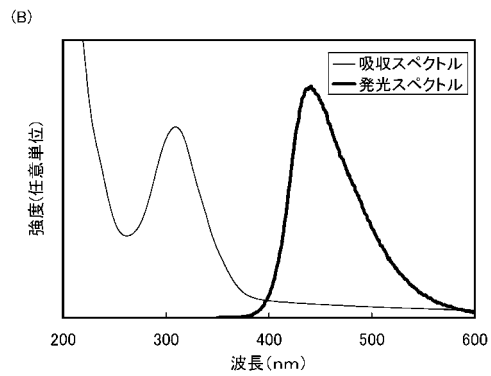
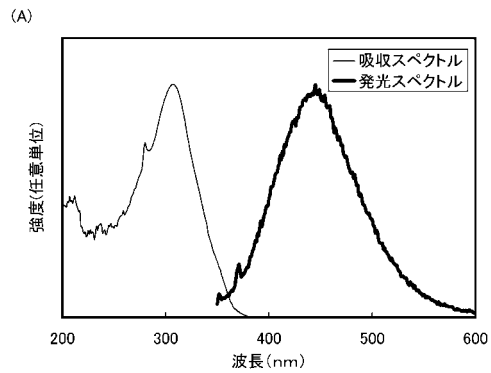
【図 2 5】



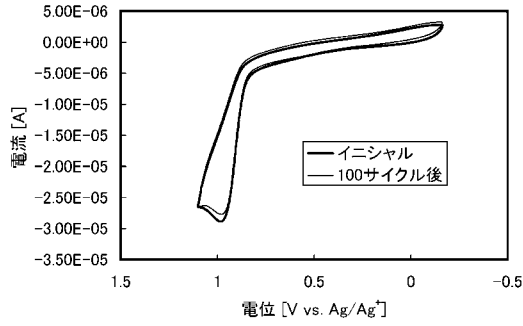
【図 2 3】



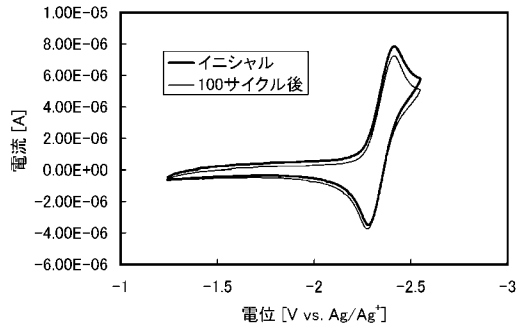
【図 2 6】



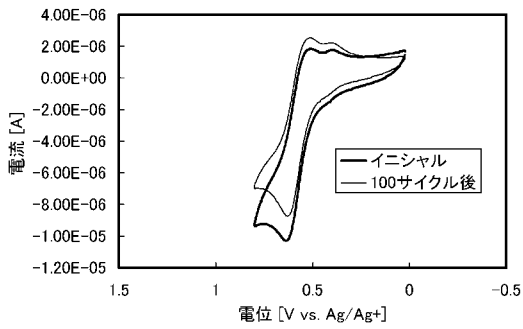
【図 27】



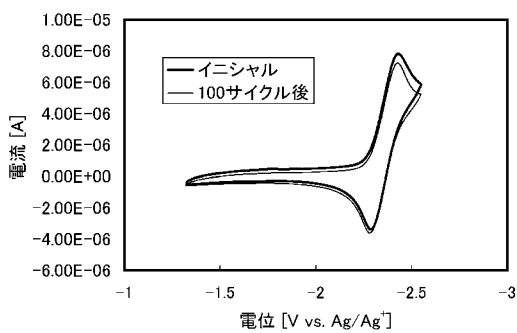
【図 28】



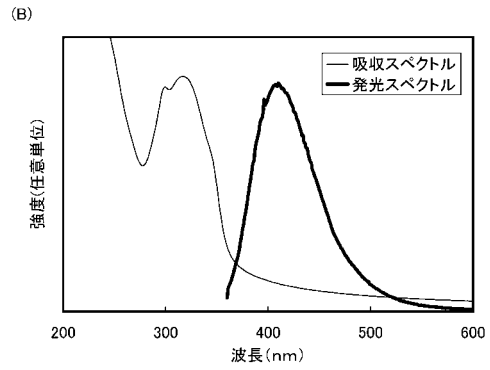
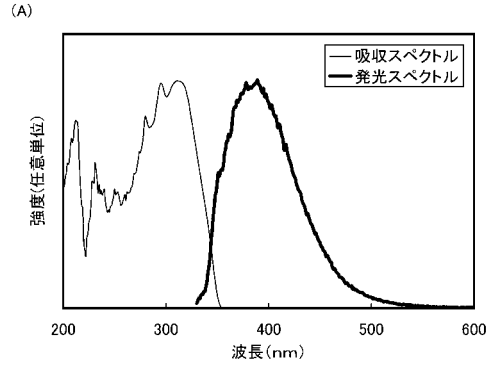
【図 30】



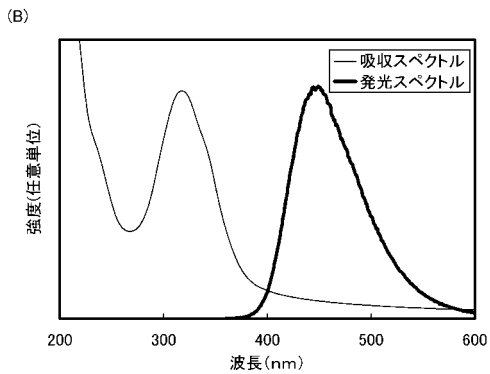
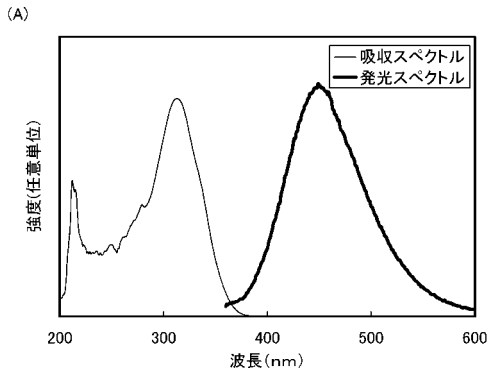
【図 31】



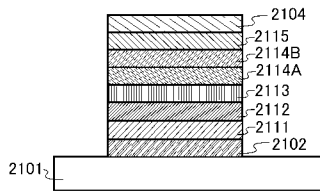
【図 29】



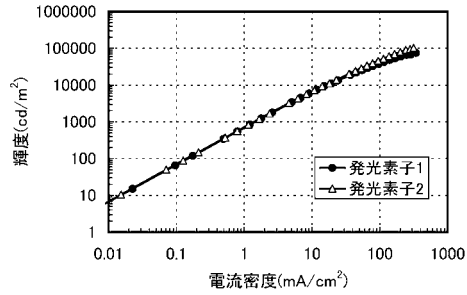
【図 32】



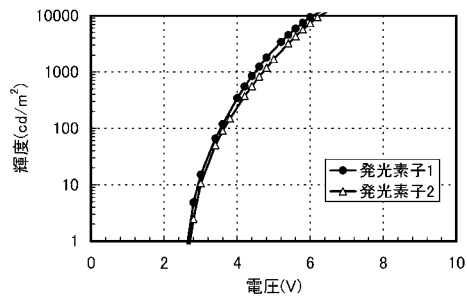
【 図 3 3 】



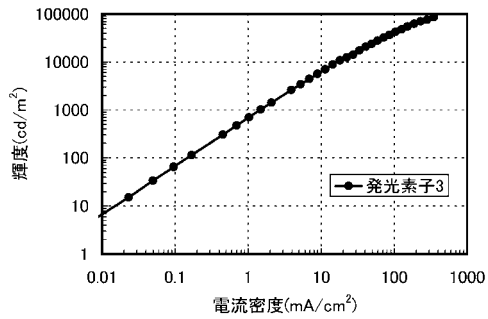
【 図 3 4 】



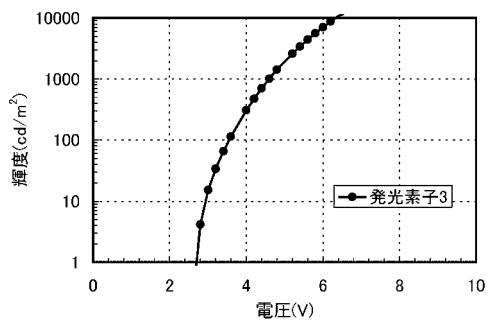
【 図 3 5 】



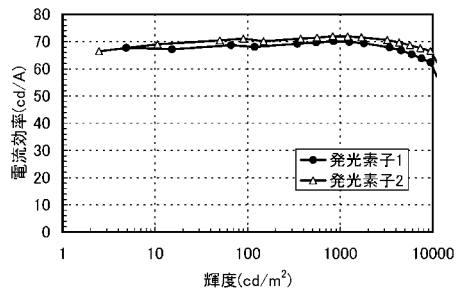
【 図 3 8 】



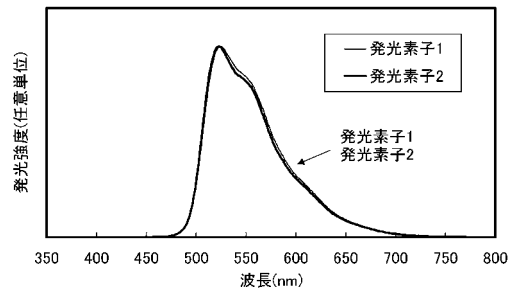
【 図 3 9 】



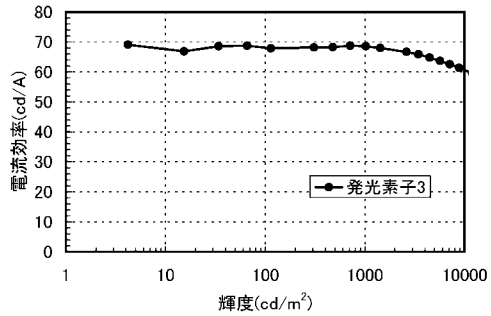
【 図 3 6 】



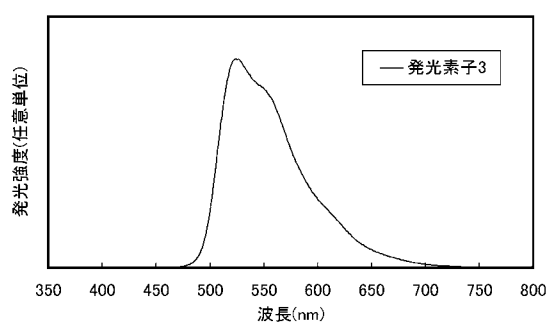
【 図 3 7 】



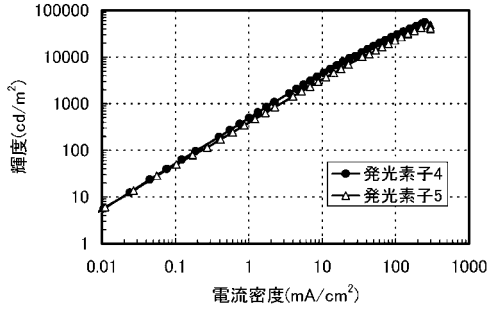
【 図 4 0 】



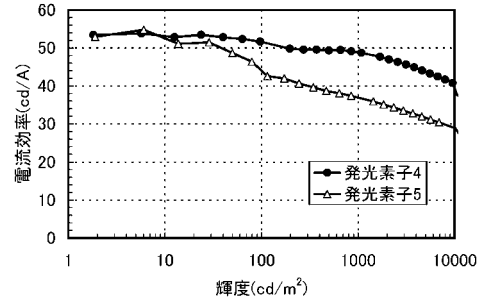
【 図 4 1 】



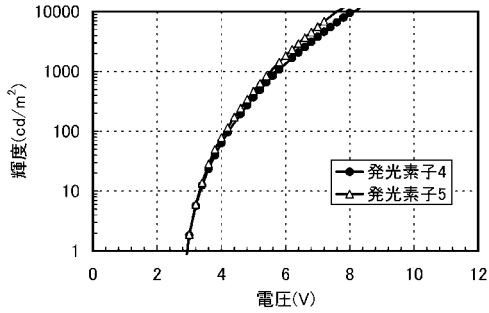
【 図 4 2 】



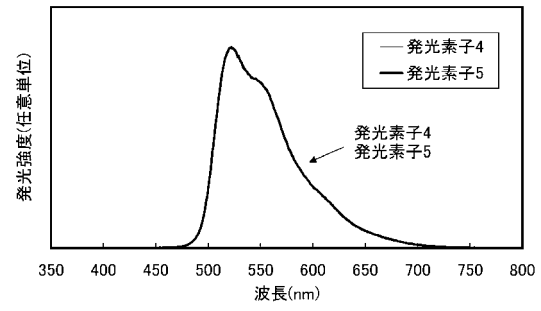
【 図 4 4 】



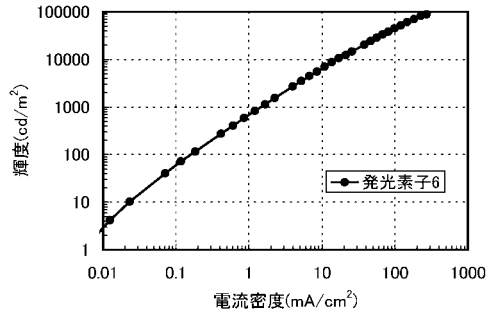
【 図 4 3 】



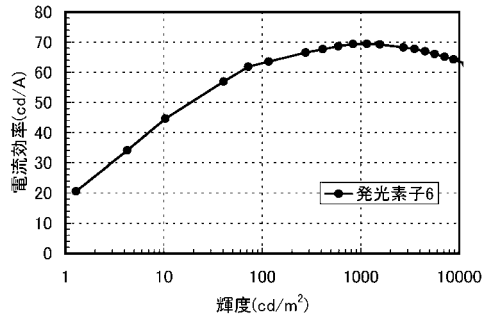
【 図 4 5 】



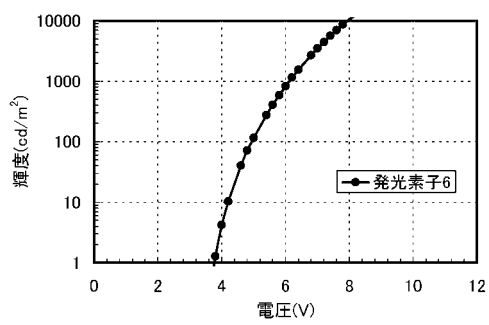
【 図 4 6 】



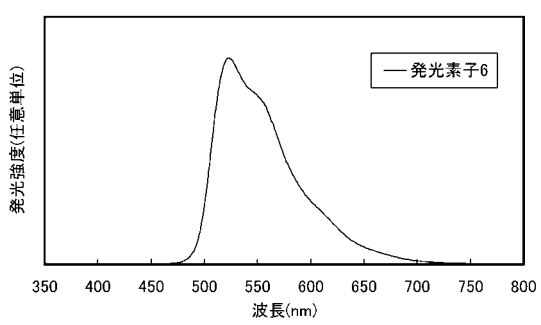
【 図 4 8 】



【 図 4 7 】

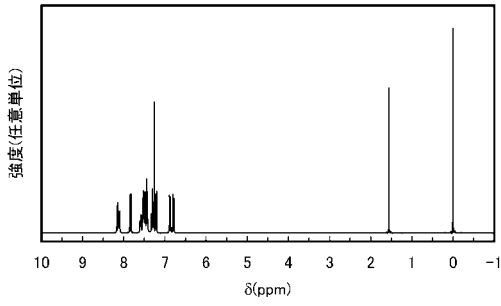


【 図 4 9 】

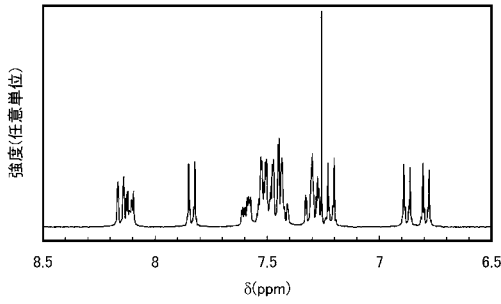


【 5 0 】

(A)

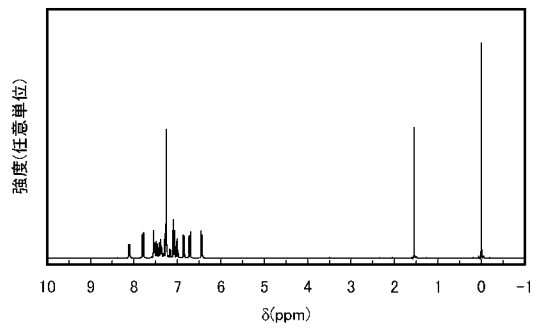


(B)

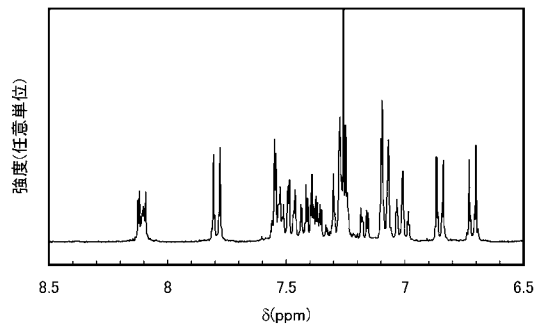


【 5 1 】

(A)

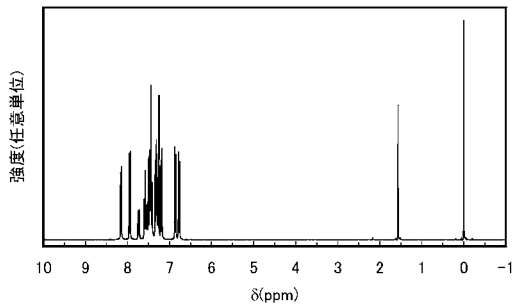


(B)

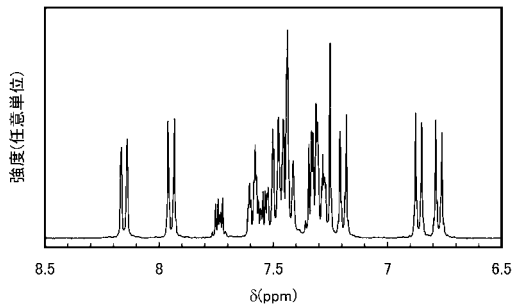


【 5 2 】

(A)

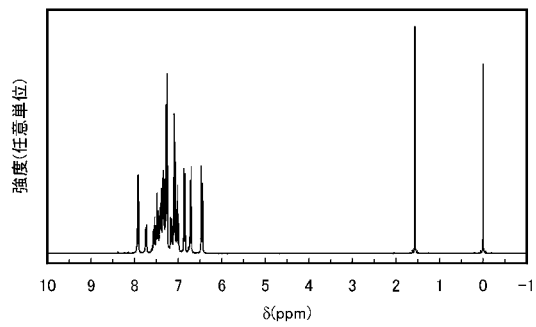


(B)

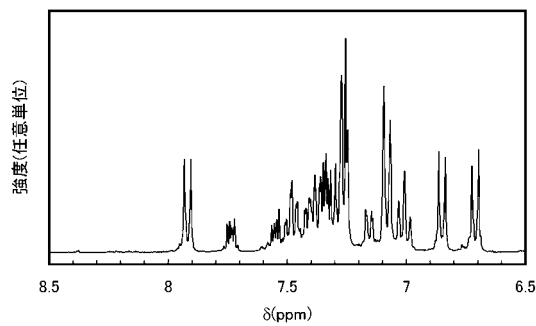


【 5 3 】

(A)



(B)



フロントページの続き

審査官 鈴木 聡一郎

- (56)参考文献 特開2005-320277(JP,A)
特開2003-007467(JP,A)
特開2009-10181(JP,A)
特開2005-166680(JP,A)
Nobuhiro IDE et al., "Organic Light Emitting Diode (OLED) and its application to lighting devices", Proceedings of SPIE, The International Society for Optical Engineering, 2006年, Vol. 6333, p.63330M-1 - 63330M-10, Organic Light Emitting Materials and Devices X
Daisaku TANAKA et al., "High Lumnous Efficiency Blue Organic Light-Emitting Devices Using High Triplet Excited Energy Materials", Japanese Journal of Applied Physics, 日本, The Japan Society of Applied Physics, 2007年, Vol. 46, No. 5, p.L117-L119
Yuya AGATA et al., "Syntheses and Properties of Novel Quarterphenylene-based Materials for Blue Organic Light-emitting D", Chemistry Letters, The Chemical Society of Japan, 2007年 1月27日, Vol. 36, No. 2, p.316-317

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

H01L 27/28
H01L 51/00
H01L 51/05 - 51/40
H01L 51/50
H05B 33/00 - 33/28
C07D 263/56
C07D 271/10
C07D 413/10

专利名称(译)	有机半导体材料和电子设备		
公开(公告)号	JP5399173B2	公开(公告)日	2014-01-29
申请号	JP2009203827	申请日	2009-09-03
[标]申请(专利权)人(译)	株式会社半导体能源研究所		
申请(专利权)人(译)	半导体能源研究所有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	半导体能源研究所有限公司		
[标]发明人	瀬尾 哲史 川上 祥子 野村 洸子 大澤 信晴		
发明人	瀬尾 哲史 川上 祥子 野村 洸子 大澤 信晴		
IPC分类号	H01L51/30 H01L51/00 C07D263/56 C07D413/10 C07D271/10		
CPC分类号	C07D263/57 C07D271/07 C07D413/10 C07D417/10 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1029 C09K2211/1033 H01L51/0061 H01L51/007 H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/5016 H05B33/10 H05B33/14 H01L51/5056 C07F5/025 H01L51/0069 H01L51/5072 H01L51/5096		
FI分类号	H01L29/28.250.H H01L29/28.100.Z C07D263/56 C07D413/10.CSP C07D271/10		
F-TERM分类号	4C056/AA01 4C056/AB01 4C056/AB02 4C056/AC02 4C056/AC07 4C056/AD01 4C056/AD03 4C056 /AE03 4C056/AF05 4C056/FA14 4C056/FB01 4C056/FC01 4C063/AA01 4C063/BB06 4C063/CC52 4C063/CC58 4C063/DD08 4C063/EE10		
审查员(译)	铃木宗一郎		
优先权	2008229129 2008-09-05 JP 2008228805 2008-09-05 JP 2008228660 2008-09-05 JP		
其他公开文献	JP2010083876A5 JP2010083876A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

要解决的问题：提供具有双极性性质的新材料。还有一个目的是降低发光元件，发光装置和电子装置的功耗。解决方案：具有电子传输性质的骨架和具有空穴传输性质的骨架在扭曲的四亚甲基骨架中形成（优选[1,1'; 2'; 1“：2”]，1'''] 四联苯-4-4'- '- 二基）基团，可以降低发光元件，发光器件和电子器件的功耗。【选择图】无

