

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6034196号
(P6034196)

(45) 発行日 平成28年11月30日 (2016.11.30)

(24) 登録日 平成28年11月4日 (2016.11.4)

(51) Int. Cl.

F I

H O 1 L 51/50 (2006.01)

H O 5 B 33/14 B

C O 9 K 11/06 (2006.01)

H O 5 B 33/22 D

C O 7 D 519/00 (2006.01)

H O 5 B 33/22 B

C O 7 D 491/048 (2006.01)

C O 9 K 11/06 6 6 O

C O 9 K 11/06 6 9 O

請求項の数 22 (全 77 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2012-550954 (P2012-550954)

(86) (22) 出願日 平成23年12月26日 (2011.12.26)

(86) 国際出願番号 PCT/JP2011/080133

(87) 国際公開番号 W02012/090967

(87) 国際公開日 平成24年7月5日 (2012.7.5)

審査請求日 平成26年8月28日 (2014.8.28)

(31) 優先権主張番号 特願2010-293899 (P2010-293899)

(32) 優先日 平成22年12月28日 (2010.12.28)

(33) 優先権主張国 日本国 (JP)

(73) 特許権者 000183646

出光興産株式会社

東京都千代田区丸の内3丁目1番1号

(74) 代理人 100078732

弁理士 大谷 保

(74) 代理人 100135758

弁理士 伊藤 高志

(72) 発明者 沼田 真樹

千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地

審査官 岩井 好子

(出願人による申告) 国等の委託研究の成果に係る特許出願(平成21年度独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構「次世代高効率・高品質照明の基盤技術開発」プロジェクトの委託研究、産業技術力強化法第19条の適用を受ける特許出願)

最終頁に続く

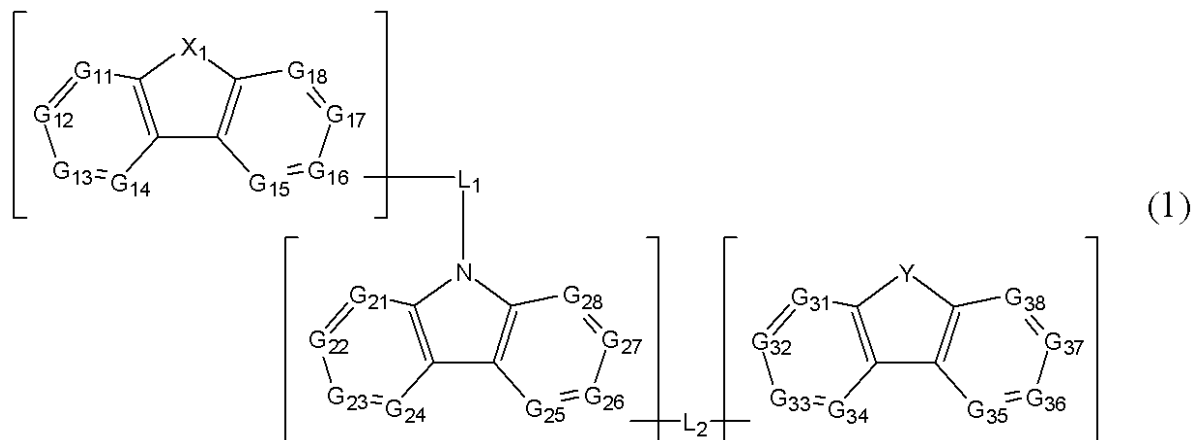
(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス素子用材料及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記一般式(1)で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【化 1】



(一般式(1)において、

G_{11} 、 G_{12} または G_{14} のうち 1 つは窒素原子を表し、それ以外のうち 1 つは L_1 と結合する炭素原子を表し、それ以外は $C(R_1)$ を表す。

$G_{21} \sim G_{28}$ のうち 1 つは L_2 と結合する炭素原子を表し、それ以外は $C(R_2)$ を表す。

$G_{31} \sim G_{38}$ のうち 1 つは L_2 と結合する炭素原子を表し、それ以外は $C(R_3)$ を表す。

R_1 は、水素原子、炭素数 1 ~ 20 の置換もしくは無置換のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 の置換もしくは無置換のシクロアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 の置換もしくは無置換のシクロアルコキシ基、炭素数 1 ~ 20 の置換もしくは無置換のアルコキシ基、環形成炭素数 6 ~ 18 の置換もしくは無置換のアリール基、環形成炭素数 6 ~ 18 の置換もしくは無置換のアリールオキシ基、炭素数 0 ~ 20 の置換もしくは無置換のアミノ基、炭素数 0 ~ 30 の置換もしくは無置換のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基を表し、複数の $R_1 \sim R_3$ は、それぞれ互いに同一でも異なってもよい。

10

$R_2 \sim R_3$ は互いに独立して、水素原子、炭素数 1 ~ 20 の置換もしくは無置換のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 の置換もしくは無置換のシクロアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 の置換もしくは無置換のシクロアルコキシ基、炭素数 1 ~ 20 の置換もしくは無置換のアルコキシ基、環形成炭素数 6 ~ 18 の置換もしくは無置換のアリール基、環形成炭素数 6 ~ 18 の置換もしくは無置換のアリールオキシ基、炭素数 0 ~ 20 の置換もしくは無置換のアミノ基、炭素数 0 ~ 30 の置換もしくは無置換のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基を表し、複数の $R_2 \sim R_3$ は、それぞれ互いに同一でも異なってもよい。

$R_1 \sim R_2$ の置換基は、それぞれ独立に、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルコキシ基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、環形成炭素数 6 ~ 18 のヘテロアリール基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリールオキシ基、炭素数 0 ~ 20 のアミノ基、炭素数 0 ~ 30 のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基である。

20

R_3 の置換基は、それぞれ独立に、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルコキシ基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリールオキシ基、炭素数 0 ~ 20 のアミノ基、炭素数 0 ~ 30 のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基である。

X_1 は、酸素原子、硫黄原子又は $-N(R_4)-$ を表す。

30

R_4 は、水素原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は環形成炭素数 5 ~ 18 のヘテロアリール基を表す。

L_1 は、単結合、又は環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基を表す。

L_2 は、単結合、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基、又は
【化 2】



40

を表す。

Y は、酸素原子、又は $-N(-L_3-R_5)-$ を表す。

L_3 は、単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、又は環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基を表す。

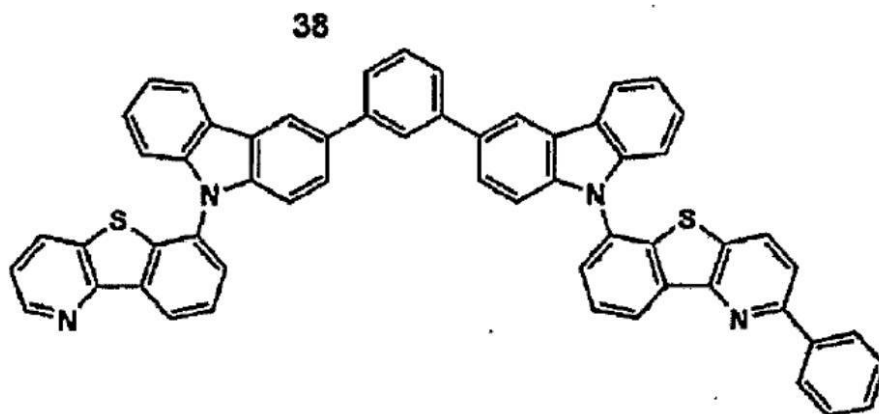
R_5 は、水素原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は環形成炭素数 5 ~ 18 のヘテロアリール基を表す。

但し、 X_1 が酸素原子又は硫黄原子である場合、 $G_{11} \sim G_{18}$ のいずれか 1 つのみが窒素原子を表す。また、 X_1 が $-N(R_4)-$ である場合、 Y は $-N(-L_3-R_5)-$ を表し、かつ、 R_2 及び R_3 は水素原子を表す。

50

一般式(1)は、下記化合物38となる場合は無い。

【化3】



10

)

【請求項2】

前記一般式(1)において、 G_{14} が窒素原子である請求項1に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項3】

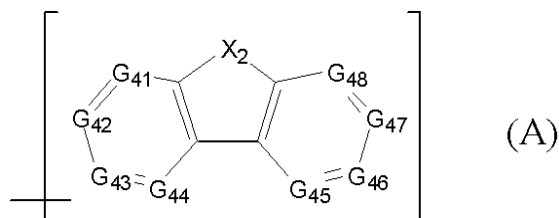
20

前記一般式(1)において、 X_1 が酸素原子又は硫黄原子を表す請求項1又は2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項4】

前記一般式(1)において、 Y が $-N(-L_3-R_5)-$ を表し、 R_5 が下記一般式(A)で表されるヘテロアリール基を表す請求項1～3のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【化4】



30

(一般式(A)において、

$G_{41} \sim G_{48}$ のうち1つは L_3 と結合する炭素原子を表し、それ以外は窒素原子又はC(R_6)を表す。

R_6 は、水素原子、炭素数1～20の置換もしくは無置換のアルキル基、環形成炭素数3～20の置換もしくは無置換のシクロアルキル基、炭素数1～20の置換もしくは無置換のアルコキシ基、環形成炭素数3～20の置換もしくは無置換のシクロアルコキシ基、環形成炭素数6～18の置換もしくは無置換のアリール基、環形成原子数5～18の置換もしくは無置換のヘテロアリール基、環形成炭素数6～18の置換もしくは無置換のアリールオキシ基、炭素数0～20の置換もしくは無置換のアミノ基、炭素数0～30の置換もしくは無置換のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基を表し、複数の R_6 は、互いに同一でも異なっていてもよい。

40

R_6 の置換基は、それぞれ独立に、炭素数1～20のアルキル基、環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、炭素数1～20のアルコキシ基、環形成炭素数3～20のシクロアルコキシ基、環形成炭素数6～18のアリール基、環形成原子数5～18のヘテロアリール基、環形成炭素数6～18のアリールオキシ基、炭素数0～20のアミノ基、炭素数0～20のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基である。

50

X_2 は、酸素原子、硫黄原子又は $-N(R_7)-$ を表す。

R_7 は、水素原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基を表す。)

【請求項 5】

前記一般式 (1) において、Y が酸素原子である請求項 1 ~ 4 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 6】

前記一般式 (1) において、 G_{16} が L_1 と結合する炭素原子を表す請求項 1 ~ 5 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

10

【請求項 7】

前記 L_1 が環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基を表す請求項 6 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 8】

前記 L_1 がフェニレン基を表す請求項 7 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 9】

前記一般式 (1) において、 L_2 が

【化 5】



20

を表す請求項 1 ~ 8 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 10】

前記一般式 (1) において、 X_1 が $-N(R_4)-$ を表す請求項 1 ~ 9 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 11】

前記一般式 (1) において、 G_{26} 及び G_{33} が L_2 と結合する炭素原子を表す請求項 1 ~ 10 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

30

【請求項 12】

前記一般式 (1) において、 $G_{41} \sim G_{48}$ のうち、少なくとも 1 つが窒素原子を表す請求項 4 ~ 11 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 13】

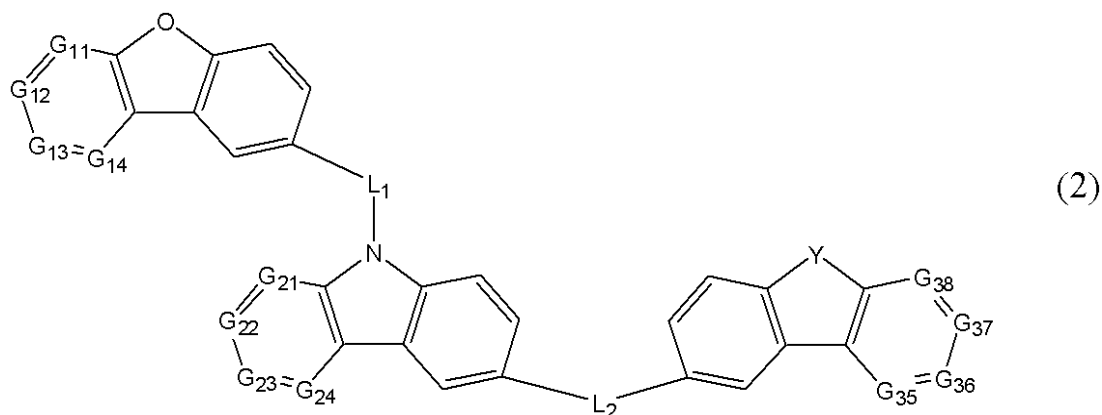
前記一般式 (1) において、 R_2 のうち少なくとも 1 つが置換もしくは無置換のカルバゾリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基及び置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基から選ばれる基である請求項 1 ~ 12 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 14】

下記一般式 (2) で表される請求項 1 ~ 9 及び 11 ~ 13 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

40

【化 6】



10

(一般式(2)において、

G_{11} 、 G_{12} または G_{14} のうち 1 つは窒素原子を表し、それ以外は $C(R_1)$ を表す。

$G_{21} \sim G_{24}$ は $C(R_2)$ を表す。

$G_{35} \sim G_{38}$ は $C(R_3)$ を表す。

R_1 は、水素原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、又は環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基を表す。

20

$R_2 \sim R_3$ は互いに独立して、水素原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基を表す。

L_1 は、単結合、又は環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基を表す。

L_2 は、単結合、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基、又は

【化 7】



30

を表す。

Y は、酸素原子、又は $-N(-L_3-R_5)-$ を表す。

L_3 は、単結合、又は環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基を表す。

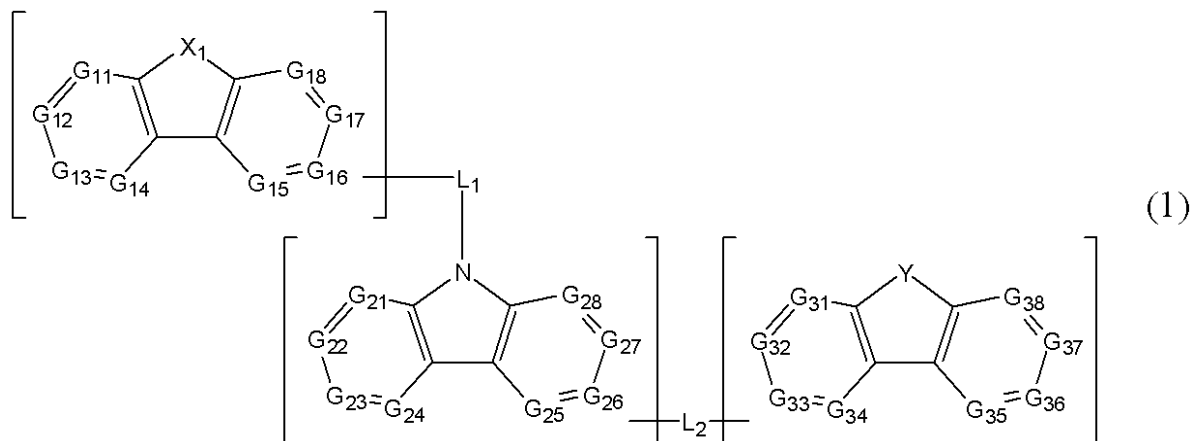
R_5 は、水素原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基を表す。)

【請求項 15】

陰極と陽極との間に、発光層を含む一層以上の有機薄膜層を有し、該発光層が燐光発光性材料を含有し、該有機薄膜層の少なくとも一層が、下記一般式(1)で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【化 8】



10

(一般式 (1) において、

G_{11} 、 G_{12} または G_{14} のうち 1 つは窒素原子を表し、それ以外のうち 1 つは L_1 と結合する炭素原子を表し、それ以外は $C(R_1)$ を表す。

$G_{21} \sim G_{28}$ のうち 1 つは L_2 と結合する炭素原子を表し、それ以外は $C(R_2)$ を表す。

$G_{31} \sim G_{38}$ のうち 1 つは L_2 と結合する炭素原子を表し、それ以外は $C(R_3)$ を表す。

20

R_1 は、水素原子、炭素数 1 ～ 20 の置換もしくは無置換のアルキル基、環形成炭素数 3 ～ 20 の置換もしくは無置換のシクロアルキル基、環形成炭素数 3 ～ 20 の置換もしくは無置換のシクロアルコキシ基、炭素数 1 ～ 20 の置換もしくは無置換のアルコキシ基、環形成炭素数 6 ～ 18 の置換もしくは無置換のアリール基、環形成炭素数 6 ～ 18 の置換もしくは無置換のアリールオキシ基、炭素数 0 ～ 20 の置換もしくは無置換のアミノ基、炭素数 0 ～ 30 の置換もしくは無置換のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基を表し、複数の $R_1 \sim R_3$ は、それぞれ互いに同一でも異なってもよい。

$R_2 \sim R_3$ は互いに独立して、水素原子、炭素数 1 ～ 20 の置換もしくは無置換のアルキル基、環形成炭素数 3 ～ 20 の置換もしくは無置換のシクロアルキル基、環形成炭素数 3 ～ 20 の置換もしくは無置換のシクロアルコキシ基、炭素数 1 ～ 20 の置換もしくは無置換のアルコキシ基、環形成炭素数 6 ～ 18 の置換もしくは無置換のアリール基、環形成炭素数 6 ～ 18 の置換もしくは無置換のアリールオキシ基、炭素数 0 ～ 20 の置換もしくは無置換のアミノ基、炭素数 0 ～ 30 の置換もしくは無置換のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基を表し、複数の $R_2 \sim R_3$ は、それぞれ互いに同一でも異なってもよい。

30

$R_1 \sim R_2$ の置換基は、それぞれ独立に、炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、炭素数 1 ～ 20 のアルコキシ基、環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルコキシ基、環形成炭素数 6 ～ 18 のアリール基、環形成炭素数 6 ～ 18 のアリールオキシ基、炭素数 0 ～ 20 のアミノ基、炭素数 0 ～ 30 のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基である。

40

R_3 の置換基は、それぞれ独立に、炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、炭素数 1 ～ 20 のアルコキシ基、環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルコキシ基、環形成炭素数 6 ～ 18 のアリール基、環形成炭素数 6 ～ 18 のアリールオキシ基、炭素数 0 ～ 20 のアミノ基、炭素数 0 ～ 30 のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基である。

X_1 は、酸素原子、硫黄原子又は $-N(R_4)-$ を表す。

R_4 は、水素原子、炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、環形成炭素数 6 ～ 18 のアリール基、又は環形成炭素数 5 ～ 18 のヘテロアリール基を表す。

50

L_1 は、単結合、又は環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基を表す。

L_2 は、単結合、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基、又は
【化 9】



を表す。

Y は、酸素原子、又は $-N(-L_3-R_5)-$ を表す。

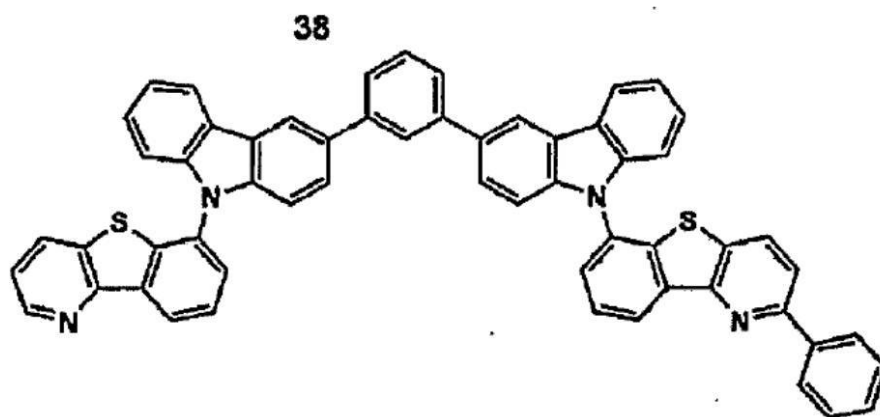
L_3 は、単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、又は環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基を表す。 10

R_5 は、水素原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基を表す。

但し、 X_1 が酸素原子又は硫黄原子である場合、 $G_{11} \sim G_{18}$ のいずれか 1 つのみが窒素原子を表す。また、 X_1 が $-N(R_4)-$ である場合、 Y は $-N(-L_3-R_5)-$ を表し、かつ、 R_2 及び R_3 は水素原子を表す。

一般式 (1) は、下記化合物 38 となる場合は無い。

【化 10】



20

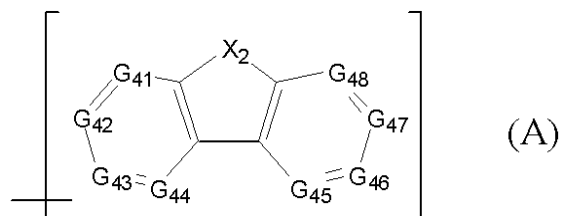
30

)

【請求項 16】

前記一般式 (1) において、 Y が $-N(-L_3-R_5)-$ を表し、 R_5 が下記一般式 (A) で表されるヘテロアリール基を表す請求項 15 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 11】



40

(一般式 (A) において、

$G_{41} \sim G_{48}$ のうち 1 つは L_3 と結合する炭素原子を表し、それ以外は窒素原子又は $C(R_6)$ を表す。

R_6 は、水素原子、炭素数 1 ~ 20 の置換もしくは無置換のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 の置換もしくは無置換のシクロアルキル基、炭素数 1 ~ 20 の置換もしくは無置 50

換のアルコキシ基、環形成炭素数 3 ~ 20 の置換もしくは無置換のシクロアルコキシ基、環形成炭素数 6 ~ 18 の置換もしくは無置換のアリール基、環形成原子数 5 ~ 18 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基、環形成炭素数 6 ~ 18 の置換もしくは無置換のアリールオキシ基、炭素数 0 ~ 20 の置換もしくは無置換のアミノ基、炭素数 0 ~ 30 の置換もしくは無置換のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基を表し、複数の R_6 は、互いに同一でも異なっているもよい。

R_6 の置換基は、それぞれ独立に、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルコキシ基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリールオキシ基、炭素数 0 ~ 20 のアミノ基、炭素数 0 ~ 30 のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基である。

X_2 は、酸素原子、硫黄原子又は $-N(R_7)-$ を表す。

R_7 は、水素原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基を表す。

【請求項 17】

前記陽極と前記発光層との間に正孔輸送帯域を有し、前記発光層または該正孔輸送帯域が上記一般式 (1) で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有する請求項 15 又は 16 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 18】

前記発光層と前記陰極との間に電子輸送帯域を有し、該電子輸送帯域が上記一般式 (1) で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有する請求項 15 又は 16 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 19】

前記発光層が上記一般式 (1) で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有する請求項 15 又は 16 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 20】

前記陰極と前記電子輸送帯域との界面領域に電子供与性ドーパントを有する請求項 18 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 21】

前記電子輸送帯域が電子注入層を有し、該電子注入層が含窒素複素環誘導体を含む請求項 18 又は 20 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 22】

前記発光性材料が、イリジウム (Ir)、オスmium (Os) または白金 (Pt) から選ばれる金属を含む化合物である請求項 15 ~ 21 のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機エレクトロルミネッセンス素子 (以下、エレクトロルミネッセンスを EL と略記することがある) は、電界を印加することより、陽極より注入された正孔と陰極より注入された電子の再結合エネルギーにより蛍光性物質あるいは燐光性物質が発光する原理を利用した自発光素子である。低電圧駆動の積層型有機 EL 素子が報告されて以来、有機材料を構成材料とする有機 EL 素子に関する研究が盛んに行われている。この積層型素子では、トリス (8 - キノリノラト) アルミニウムを発光層に、トリフェニルジアミン誘導体を正孔輸送層に用いている。積層構造の利点としては、発光層への正孔の注入効率を高めるこ

10

20

30

40

50

と、陰極より注入された電子をブロックして再結合により生成する励起子の生成効率を高めること、発光層内で生成した励起子を閉じ込めること等が挙げられる。この例のように有機EL素子の素子構造としては、正孔輸送（注入）層、電子輸送発光層の2層型、又は正孔輸送（注入）層、発光層、電子輸送（注入）層の3層型等がよく知られている。こうした積層型構造素子では注入された正孔と電子の再結合効率を高めるため、素子構造や形成方法の工夫がなされている。

【0003】

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

10

従来、有機EL素子の発光材料として一重項励起子により発光する蛍光発光材料が用いられているが、近年、蛍光発光材料に加えて三重項励起子により発光する燐光発光材料利用することも提案されている。有機EL素子内で電子と正孔が再結合する際にはスピン多重度の違いから一重項励起子と三重項励起子とが1：3の割合で生成すると考えられているので、燐光発光材料を用いた有機EL素子は、蛍光発光材料のみを使った有機EL素子に比べて3～4倍の発光効率を達成し得る。

【0004】

しかしながら、青色燐光発光では、高効率かつ長寿命の達成が困難であり、燐光発光性ドーパントの周辺に存在するホスト材料、正孔輸送材料、電子輸送材料については、高い発光内部量子効率のために、高い三重項励起エネルギーを有し、ワイドギャップにより発光性ドーパントの励起子のエネルギー的閉じ込めが出来ること、高い電力変換効率のために、高いキャリア注入性・輸送性を有し、低電圧駆動が可能であること、長寿命化のために、高い化学的・熱的安定性を有することなどが望まれている。また、材料の構造最適化によって素子性能最適化を行う場合、構造修飾と性能（具体的には主にキャリアバランス）変調の対応の単純性が材料に備わっていると材料検討において格段に利便性が高い。

20

【0005】

特許文献1及び2にはカルバゾール環を有する化合物が開示されているが、環中に不飽和の窒素原子を含むものは記載されていない。

30

また、特許文献3～5にはジベンゾフランやジベンゾチオフェンの環中に不飽和の窒素原子を含む環と、複数のカルバゾール環が9位の窒素原子と3位の炭素原子で連なって結合する構造が開示されており、該構造を用いることにより酸化還元電位を減少させ、且つ、電気化学的安定性を改善できるという旨が記載されている。しかしながら、ジベンゾフランやジベンゾチオフェンの環中に不飽和の窒素原子を含む環を用いた化合物については、化合物の物性やそれを用いた素子性能についての記載は無い。

特許文献6にはジベンゾフランやジベンゾチオフェンの環中に不飽和の窒素原子を含む環と、それらを結合させる中心の連結基とが、炭素原子同士で結合した化合物が開示されている。

40

【先行技術文献】

【特許文献】

【0006】

【特許文献1】特開2008-135498

【特許文献2】特開2008-294161

【特許文献3】国際公開WO2009/086028

【特許文献4】米国公開公報US2009/153034

【特許文献5】米国公開公報US2009/134784

【特許文献6】特開2008-074939

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

50

【 0 0 0 7 】

本発明は、上記課題を解決するためになされたもので、低電圧で駆動しても、外部量子効率が高くかつ長寿命な有機ＥＬ素子及びそれを実現する有機ＥＬ素子用材料を提供することを目的とする。

【課題を解決するための手段】

【 0 0 0 8 】

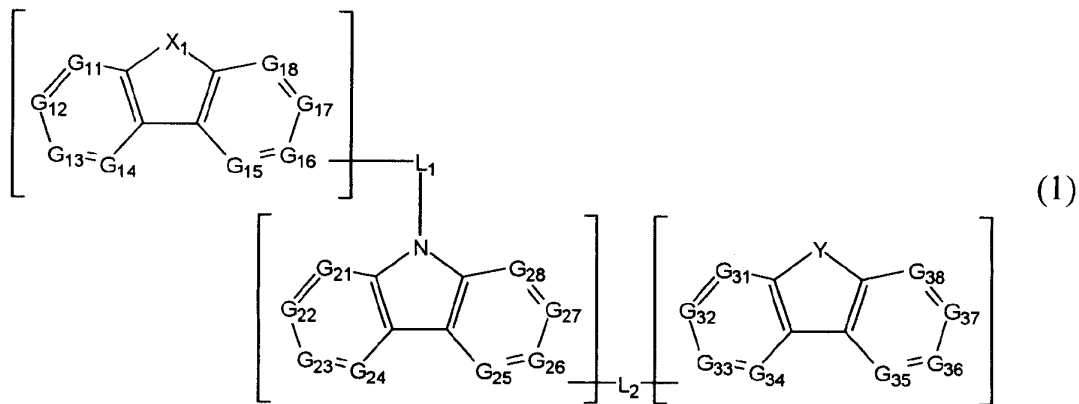
本発明者らは、前記目的を達成するために鋭意研究を重ねた結果、下記一般式（１）で表される化合物が、有機ＥＬ素子材料として用いた場合に、低電圧で駆動しても高い効率で発光を生じさせ、かつ素子の長寿命化を達成できることを見出し、本発明を解決するに至った。

10

【 0 0 0 9 】

すなわち、本発明は、下記式（１）で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を提供する。

【化１】



20

【 0 0 1 0 】

（一般式（１）において、

$G_{11} \sim G_{18}$ の少なくとも１つは窒素原子を表し、それ以外のうち１つは L_1 と結合する炭素原子を表し、それ以外は $C(R_1)$ を表す。

30

$G_{21} \sim G_{28}$ のうち１つは L_2 と結合する炭素原子を表し、それ以外は $C(R_2)$ 又は窒素原子を表す。

$G_{31} \sim G_{38}$ のうち１つは L_2 と結合する炭素原子を表し、それ以外は $C(R_3)$ 又は窒素原子を表す。

$R_1 \sim R_3$ は互いに独立して、水素原子、炭素数１～２０の置換もしくは無置換のアルキル基、環形成炭素数３～２０の置換もしくは無置換のシクロアルキル基、環形成炭素数３～２０の置換もしくは無置換のシクロアルコキシ基、炭素数１～２０の置換もしくは無置換のアルコキシ基、環形成炭素数６～１８の置換もしくは無置換のアリール基、環形成原子数５～１８の置換もしくは無置換のヘテロアリール基、環形成炭素数６～１８の置換もしくは無置換のアリールオキシ基、炭素数０～２０の置換もしくは無置換のアミノ基、炭素数０～３０の置換もしくは無置換のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基を表し、複数の $R_1 \sim R_3$ は、それぞれ互いに同一でも異なってもよい。

40

$R_1 \sim R_3$ の置換基は、それぞれ独立に、炭素数１～２０のアルキル基、環形成炭素数３～２０のシクロアルキル基、炭素数１～２０のアルコキシ基、環形成炭素数３～２０のシクロアルコキシ基、環形成炭素数６～１８のアリール基、環形成原子数５～１８のヘテロアリール基、環形成炭素数６～１８のアリールオキシ基、炭素数０～２０のアミノ基、炭素数０～３０のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基である。

X_1 は、酸素原子、硫黄原子又は $-N(R_4)-$ を表す。

R_4 は、水素原子、炭素数１～２０のアルキル基、環形成炭素数３～２０のシクロアル

50

キル基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基を表す。

L_1 は、単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基、又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリーレン基（但し、ジベンゾフラン又はジベンゾチオフェンの 2 価基は除く）を表す。

L_2 は、単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基、環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリーレン基、窒素原子を含む 2 価の連結基、酸素原子を含む 2 価の連結基、ケイ素原子を含む 2 価の連結基、リン原子を含む 2 価の連結基、又は硫黄原子を含む 2 価の連結基を表す。

Y は、酸素原子、硫黄原子又は $-N(-L_3-R_5)-$ を表す。

10

L_3 は、単結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキレン基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリーレン基、又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリーレン基を表す。

R_5 は、水素原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基を表す。 R_5 は、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基、環形成炭素数 5 ~ 6 のシクロアルキル基、フェニル基、環形成原子数 6 ~ 14 のヘテロアリール基、であることがより好ましい。

但し、 X_1 が酸素原子又は硫黄原子である場合、 $G_{11} \sim G_{18}$ のいずれか 1 つのみが窒素原子を表す。また、 X_1 が $-N(R_4)-$ である場合、 Y は $-N(-L_3-R_5)-$ を表し、かつ、 R_2 及び R_3 は水素原子を表す。）

20

【0011】

さらに、本発明は、陰極と陽極との間に、発光層を含む一層以上の有機薄膜層を有し、該発光層が燐光発光性材料を含有し、該有機薄膜層の少なくとも一層が、上記一般式（1）で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子をも提供する。

【発明の効果】

【0012】

本発明によれば、低電圧で駆動しても、外部量子効率が高くかつ長寿命な有機 EL 素子及びそれを実現する有機 EL 素子用材料を提供することができる。

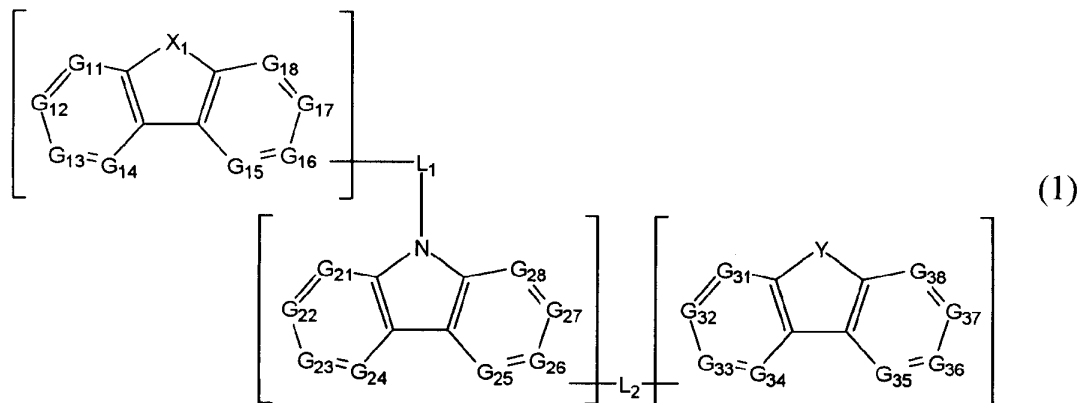
30

【発明を実施するための形態】

【0013】

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料は、下記式（1）で表される。

【化 2】



40

【0014】

（一般式（1）において、

$G_{11} \sim G_{18}$ の少なくとも 1 つは窒素原子を表し、それ以外のうち 1 つは L_1 と結合する炭素原子を表し、それ以外は $C(R_1)$ を表す。

50

$G_{21} \sim G_{28}$ のうち1つは L_2 と結合する炭素原子を表し、それ以外は $C(R_2)$ 又は窒素原子を表す。

$G_{31} \sim G_{38}$ のうち1つは L_2 と結合する炭素原子を表し、それ以外は $C(R_3)$ 又は窒素原子を表す。

$R_1 \sim R_3$ は互いに独立して、水素原子、炭素数1～20の置換もしくは無置換のアルキル基、環形成炭素数3～20の置換もしくは無置換のシクロアルキル基、環形成炭素数3～20の置換もしくは無置換のシクロアルコキシ基、炭素数1～20の置換もしくは無置換のアルコキシ基、環形成炭素数6～18の置換もしくは無置換のアリール基、環形成原子数5～18の置換もしくは無置換のヘテロアリール基、環形成炭素数6～18の置換もしくは無置換のアリールオキシ基、炭素数0～20の置換もしくは無置換のアミノ基、炭素数0～30の置換もしくは無置換のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基を表し、複数の $R_1 \sim R_3$ は、それぞれ互いに同一でも異なってもよい。

$R_1 \sim R_3$ の置換基は、それぞれ独立に、炭素数1～20のアルキル基、環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、炭素数1～20のアルコキシ基、環形成炭素数3～20のシクロアルコキシ基、環形成炭素数6～18のアリール基、環形成原子数5～18のヘテロアリール基、環形成炭素数6～18のアリールオキシ基、炭素数0～20のアミノ基、炭素数0～30のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基である。

X_1 は、酸素原子、硫黄原子又は $-N(R_4)-$ を表す。

R_4 は、水素原子、炭素数1～20のアルキル基、環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、環形成炭素数6～18のアリール基、又は環形成原子数5～18のヘテロアリール基を表す。

L_1 は、単結合、炭素数1～20のアルキレン基、環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、環形成炭素数6～18のアリーレン基、又は環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基（但し、ジベンゾフラン又はジベンゾチオフェンの2価基は除く）を表す。

L_2 は、単結合、炭素数1～20のアルキレン基、環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、環形成炭素数6～18のアリーレン基、環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基、窒素原子を含む2価の連結基、酸素原子を含む2価の連結基、ケイ素原子を含む2価の連結基、リン原子を含む2価の連結基、又は硫黄原子を含む2価の連結基を表す。

Y は、酸素原子、硫黄原子又は $-N(-L_3-R_5)-$ を表す。

L_3 は、単結合、炭素数1～20のアルキレン基、環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、環形成炭素数6～18のアリーレン基、又は環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基を表す。

R_5 は、水素原子、炭素数1～20のアルキル基、環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、環形成炭素数6～18のアリール基、又は環形成原子数5～18のヘテロアリール基を表す。

但し、 X_1 が酸素原子又は硫黄原子である場合、 $G_{11} \sim G_{18}$ のいずれか1つのみが窒素原子を表す。また、 X_1 が $-N(R_4)-$ である場合、 Y は $-N(-L_3-R_5)-$ を表し、かつ、 R_2 及び R_3 は水素原子を表す。）

【0015】

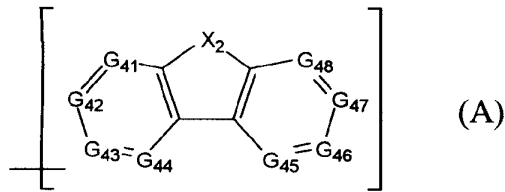
特に式(1)のように、(アザ化された)カリバゾリル基のN位(9位)でアザ化されたカルバゾリル基、アザ化されたジベンゾフラニル基あるいはアザ化されたジベンゾチオフェニル基が直接又は結合基を介して結合することで、アザ化されたカルバゾール骨格、アザ化されたジベンゾフラン骨格あるいはアザ化されたジベンゾチオフェン骨格のLUMO準位が深くなり、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を用いた有機EL素子の発光層などへの電子の注入が容易になる。これにより、キャリアバランス調整を容易とすることが可能となり、本発明の効果が良好に奏される。

【0016】

前記一般式(1)において、 Y が $-N(-L_3-R_5)-$ を表し、 R_5 が環形成原子数6～14のヘテロアリール基を表すことが好ましい。さらに、前記一般式(1)において、 Y が $-N(-L_3-R_5)-$ を表し、 R_5 が下記一般式(A)で表されるヘテロアリール基

を表すことが特に好ましい。

【化 3】



【0017】

(一般式 (A) において、

$G_{41} \sim G_{48}$ のうち 1 つは L_3 と結合する炭素原子を表し、それ以外は窒素原子又は C (R_6) を表す。

R_6 は、水素原子、炭素数 1 ~ 20 の置換もしくは無置換のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 の置換もしくは無置換のシクロアルキル基、炭素数 1 ~ 20 の置換もしくは無置換のアルコキシ基、環形成炭素数 3 ~ 20 の置換もしくは無置換のシクロアルコキシ基、環形成炭素数 6 ~ 18 の置換もしくは無置換のアリール基、環形成原子数 5 ~ 18 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基、環形成炭素数 6 ~ 18 の置換もしくは無置換のアリールオキシ基、炭素数 0 ~ 20 の置換もしくは無置換のアミノ基、炭素数 0 ~ 30 の置換もしくは無置換のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基を表し、複数の R_6 は、互いに同一でも異なってもよい。

R_6 の置換基は、それぞれ独立に、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルコキシ基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリールオキシ基、炭素数 0 ~ 20 のアミノ基、炭素数 0 ~ 30 のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基である。

R_6 のうち、0 ~ 4 個が水素原子以外の上記置換もしくは無置換の置換基を表すことが好ましく、0 ~ 2 個が水素原子以外の上記置換もしくは無置換の置換基を表すことが特に好ましい。また、 R_6 のいずれか 1 つ以上が上記置換された置換基である場合、 R_6 のうち 1 ~ 2 個が置換された置換基を表すことが好ましい。

R_6 の置換基は、それぞれ独立に、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルコキシ基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリールオキシ基、炭素数 0 ~ 30 のアミノ基、炭素数 0 ~ 30 のシリル基、フルオロ基、又はシアノ基である。

X_2 は、酸素原子、硫黄原子又は $-N(R_7)-$ を表す。

R_7 は、水素原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、環形成炭素数 6 ~ 18 のアリール基、又は環形成原子数 5 ~ 18 のヘテロアリール基を表す。

【0018】

一方、前記一般式 (1) において Y が酸素原子又は硫黄原子であると、 $-N(R_4)-$ である場合に比べて、本発明の効果を損なうことなく分子量を小さくでき、素子作製時の蒸着に要する温度を低くすることができるため、材料の熱分解に対する負担を軽減することが出来る。

【0019】

また、前記一般式 (1) において、 X_1 が $-N(R_4)-$ であると、 X_1 が酸素原子や硫黄原子の場合よりもイオン化ポテンシャルが浅くなり、本発明の効果を損なうことなくホール注入性、ホール輸送性に優れるため好ましい。

【0020】

$G_{11} \sim G_{18}$ のうち、1 ~ 4 個が窒素原子であることが好ましく、1 個又は 2 個が窒素原

10

20

30

40

50

子であることが特に好ましい。また、 G_{14} が窒素原子であることが好ましく、さらに $G_{11} \sim G_{13}$ がC(R_1)であることがより好ましい。

$G_{21} \sim G_{28}$ のうち、0～2個が窒素原子であることが好ましく、0個又は1個が窒素原子であることが特に好ましい。

$G_{31} \sim G_{38}$ のうち、0～2個が窒素原子であることが好ましく、0個又は1個が窒素原子であることが特に好ましい。

$G_{41} \sim G_{48}$ のうち、少なくとも1個が窒素原子であることが好ましく、0～4個が窒素原子であることがより好ましく、0～2個が窒素原子であることが特に好ましい。

【0021】

$R_1 \sim R_7$ のアルキル基としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、
n-ブチル基、s-ブチル基、イソブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキ
シル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基、n-ノニル基、n-デシル基、n-ウンデシ
ル基、n-ドデシル基、n-トリデシル基、n-テトラデシル基、n-ペンタデシル基、
n-ヘキサデシル基、n-ヘプタデシル基、n-オクタデシル基、ネオペンチル基、1-
メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチ
ル基、1-ヘプチルオクチル基、3-メチルペンチル基等が挙げられ、このうち炭素数1
～6のものが好ましい。

【0022】

$R_1 \sim R_7$ のシクロアルキル基の例としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シク
ロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、ノルボルニル基、アダマンチル基
等が挙げられ、このうち環形成炭素数5又は6のものが好ましい。

$R_1 \sim R_7$ のアルコキシ基としては、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ
基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基等が挙げられ、炭素数が3以上のものは直鎖状
、環状又は分岐を有するものでもよく、このうち炭素数1～6のものが好ましい。

【0023】

$R_1 \sim R_7$ のシクロアルコキシ基としては、シクロペントキシ基、シクロヘキシルオキシ
基等が挙げられ、このうち環形成炭素数5又は6のものが好ましい。

$R_1 \sim R_7$ のアリール基としては、フェニル基、トリル基、キシリル基、メシチル基、o-
-ビフェニル基、m-ビフェニル基、p-ビフェニル基、o-ターフェニル基、m-ター
フェニル基、p-ターフェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、トリフェニレン基な
どが挙げられる。中でもフェニル基が好ましい。

$R_1 \sim R_7$ のアリールオキシ基としては、例えば、フェノキシ基、ビフェニルオキシ基等
が挙げられ、フェノキシ基が好ましい。

【0024】

$R_1 \sim R_7$ のヘテロアリール基としては、カルバゾリル基、カルボリニル基、ジベンゾフ
ラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ピローリル基、フリル基、チエニル基、シローリル
基、ピリジル基、キノリル基、イソキノリル基、インドリル基、ベンゾフリル基、ベンゾ
チオフェニル基、イミダゾリル基、ベンズイミダゾリル基、ピリミジル基、セレノフェニ
ル基、オキサジアゾリル基、トリアゾーリル基、アザフェナントレン基、フェナントロリ
ン基が挙げられ、このうち環形成原子数6～14のものが好ましい。

$R_1 \sim R_7$ のアミノ基及びシリル基は既述のように置換基で置換されていてもよい。置換
シリル基としては、トリメチルシリル基が好ましい。

【0025】

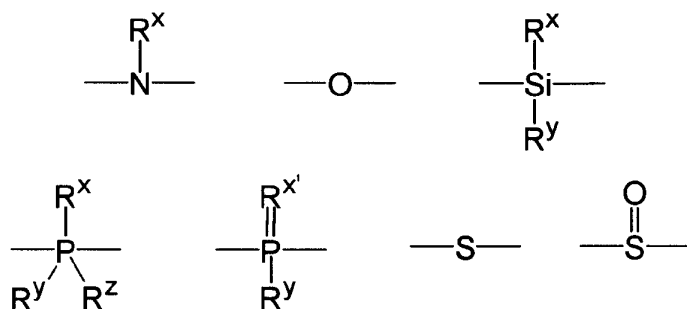
$L_1 \sim L_3$ のアルキレン基、環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、環形成炭素数
6～18のアリーレン基、環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基としては、 $R_1 \sim R_7$
の対応する基の1つの水素原子を結合手で置き換えたものが挙げられる。また、本発
明においてはアリーレン基には9,9-フルオレニリデン基も含まれる。

アリーレン基としては後述する他、p-フェニレン基、m-フェニレン基、ビフェニ
レン基が好適であり、アミノ基としては後述する他、ビフェニルアミノ基が好適である。

【0026】

L_2 の、窒素原子を含む2価の連結基、酸素原子を含む2価の連結基、ケイ素原子を含む2価の連結基、リン原子を含む2価の連結基、硫黄原子を含む2価の連結基としては、下記のような基が挙げられる。

【化4】



10

(上記各式中、 R^x 、 R^y 及び R^z はそれぞれ独立に、水素原子又は既述の置換基Rから選ばれる基である。また、 $R^{x'}$ は酸素である。)上記の中でも「-S-」基、ホスホキシド基、エーテル基が好ましい。

【0027】

L_1 及び L_3 は、互いに独立して、単結合、環形成炭素数6～18のアリーレン基、環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基であると好ましく、より好ましくは単結合、フェニレン基、又は環形成原子数6～14のヘテロアリーレン基である。 L_1 が環形成炭素数6～18のアリーレン基、又は環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基(但し、ジベンゾフラン又はジベンゾチオフェンの2価基は除く)であることにより、本発明の効果を損なうことなく、分子が取り得るコンフォメーション数が増すことでアモルファス性が高くなり、素子の欠陥や短寿命原因となりやすい結晶化を抑制し易いため好ましい。

20

L_2 は、単結合、窒素原子を含む2価の連結基、酸素原子を含む2価の連結基、ケイ素原子を含む2価の連結基、リン原子を含む2価の連結基、硫黄原子を含む2価の連結基、環形成炭素数6～18のアリーレン基、環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基であると好ましく、より好ましくは単結合、窒素原子を含む2価の連結基、酸素原子を含む2価の連結基、ケイ素原子を含む2価の連結基、リン原子を含む2価の連結基、硫黄原子を含む2価の連結基、フェニレン基、又は環形成原子数6～14のヘテロアリーレン基である。 L_2 が炭素数1～20のアルキレン基、環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、酸素原子を含む2価の連結基、ケイ素原子を含む2価の連結基、リン原子を含む2価の連結基、又は硫黄原子を含む2価の連結基であると、これら連結基が非共役性の構造であるために三重項エネルギーがワイドギャップとなり、発光ドーパントの三重項励起子に対する閉じ込め効果がより大きくなり高効率化に有利となる。このことはまた、より高エネルギーの発光波長(短波長)の発光ドーパントの選択を可能にするため好ましい。

30

【0028】

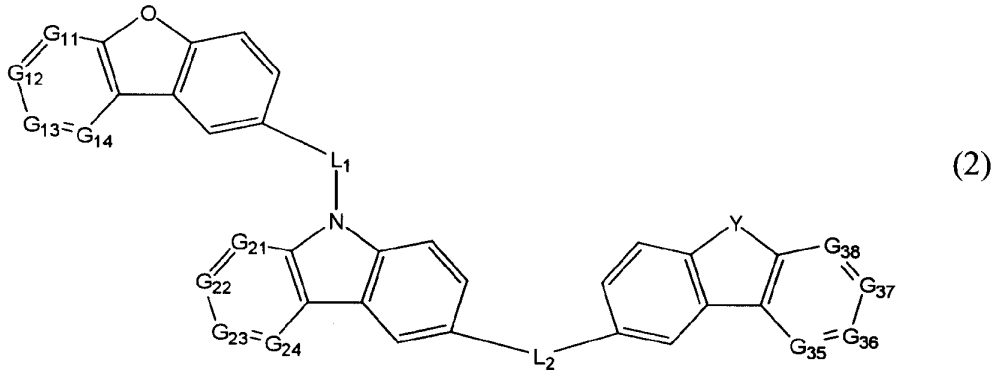
本発明の有機EL素子用材料は、りん光発光性材料と共に用いるホスト材料、正孔輸送材料または電子輸送材料であることが好ましい。より好ましくはホスト材料または発光層に直接隣接する正孔輸送材料または発光層に直接隣接する電子輸送材料であることが好ましい。また、三重項のエネルギーレベルが2.5 eV以上であることが好ましく、2.8 eV以上であることがより好ましい。

40

【0029】

本発明の有機EL素子用材料は、下記式(2)で表されるものであることが好ましい。

【化 5】



10

(一般式(2)において、

$G_{11} \sim G_{14}$ のうち1つは窒素原子を表し、それ以外はC(R_1)を表す。

$G_{21} \sim G_{24}$ はC(R_2)又は窒素原子を表す。

$G_{35} \sim G_{38}$ はC(R_3)又は窒素原子を表す。

$R_1 \sim R_3$ は互いに独立して、水素原子、炭素数1～20のアルキル基、環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、環形成炭素数6～18のアリール基、又は環形成原子数5～18のヘテロアリール基を表す。

20

L_1 は、単結合、環形成炭素数6～18のアリーレン基、又は環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基(但し、ジベンゾフラン又はジベンゾチオフェンの2価基は除く)を表す。

L_2 は、単結合、環形成炭素数6～18のアリーレン基、環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基、窒素原子を含む2価の連結基、酸素原子を含む2価の連結基、ケイ素原子を含む2価の連結基、リン原子を含む2価の連結基、又は硫黄原子を含む2価の連結基を表す。

Yは、酸素原子、硫黄原子又は-N(- L_3 - R_5)-を表す。

L_3 は、単結合、環形成炭素数6～18のアリーレン基、又は環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基を表す。

30

R_5 は、水素原子、炭素数1～20のアルキル基、環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、環形成炭素数6～18のアリール基、又は環形成原子数5～18のヘテロアリール基を表す。)

【0030】

また、本発明の有機EL素子用材料においては、以下の態様が好ましい。

(1) G_{16} が L_1 と結合する炭素原子を表す。

(2) L_1 が単結合、環形成炭素数6～18のアリーレン基、又は環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基(但し、ジベンゾフラン又はジベンゾチオフェンの2価基は除く)を表す。特に、 L_1 がフェニレン基を表す。

(3) L_2 が単結合、酸素原子、環形成炭素数6～18のアリーレン基、又は環形成原子数5～18のヘテロアリーレン基を表す。

40

(4) X_1 が硫黄原子又は酸素原子を表す。特に、 X_1 が酸素原子を表す。

(5) G_{26} 及び G_{33} が L_2 と結合する炭素原子を表す。

(6) $G_{31} \sim G_{38}$ 及び $G_{41} \sim G_{48}$ のうち、少なくとも1つが窒素原子を表す。

(7) L_2 が炭素数1～20のアルキレン基、環形成炭素数3～20のシクロアルキレン基、酸素原子を含む2価の連結基、ケイ素原子を含む2価の連結基、リン原子を含む2価の連結基、又は硫黄原子を含む2価の連結基を表す。

【0031】

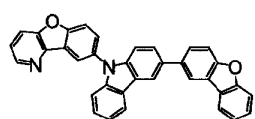
本発明の一般式(1)で表される有機EL素子用材料の具体例を以下に示すが、本発明は、これら例示化合物に限定されるものではない。なお、下記具体例に示されている置換

50

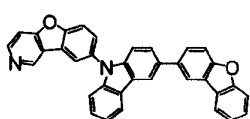
基は、本発明において好ましい置換基として挙げることができる。

【 0 0 3 2 】

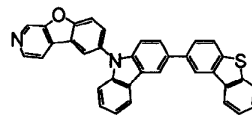
【 化 6 】



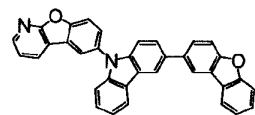
H-1



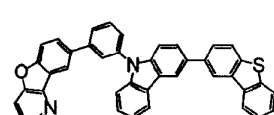
H-2



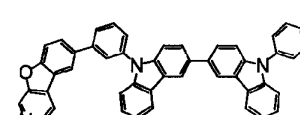
H-3



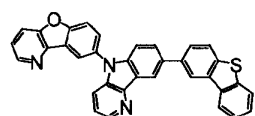
H-4



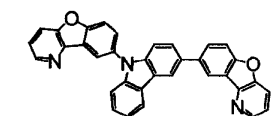
H-5



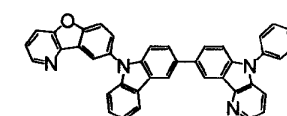
H-6



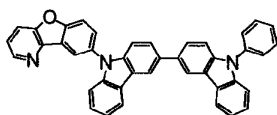
H-7



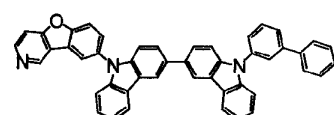
H-8



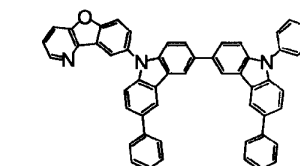
H-9



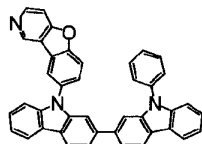
H-10



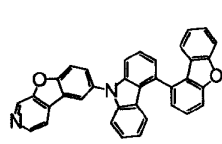
H-11



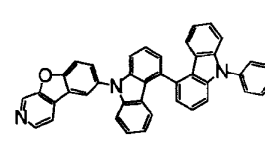
H-12



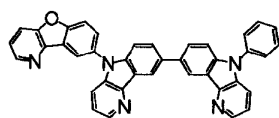
H-13



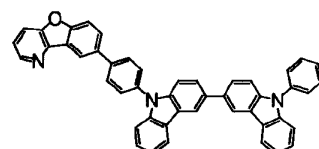
H-14



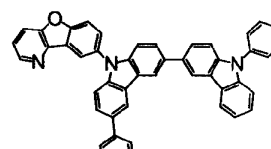
H-15



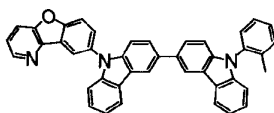
H-16



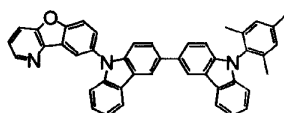
H-17



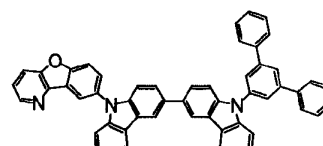
H-18



H-19



H-20



H-21

【 0 0 3 3 】

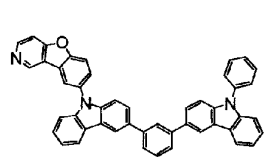
10

20

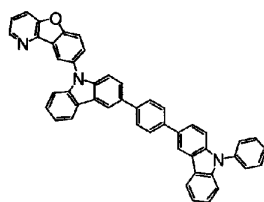
30

40

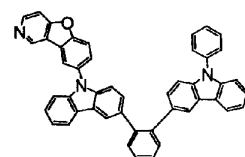
【化 7】



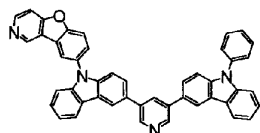
H-22



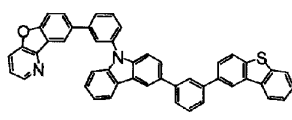
H-23



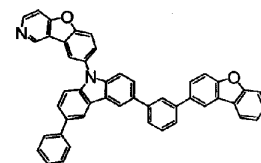
H-24



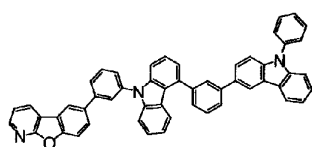
H-25



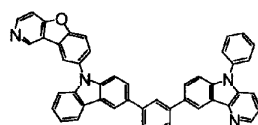
H-26



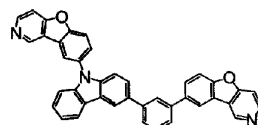
H-27



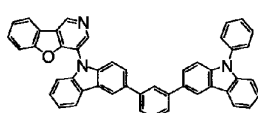
H-28



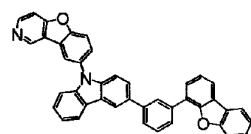
H-29



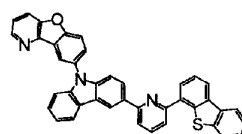
H-30



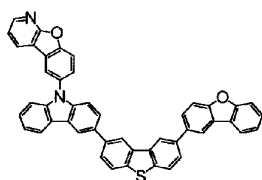
H-31



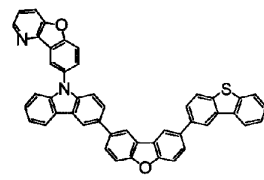
H-32



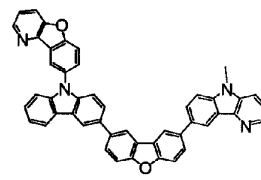
H-33



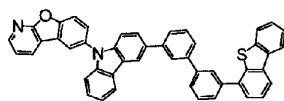
H-34



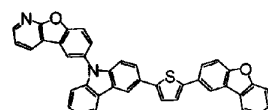
H-35



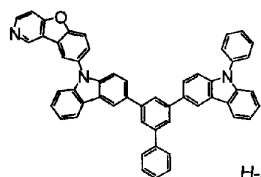
H-36



H-37



H-38



H-39

【 0 0 3 4 】

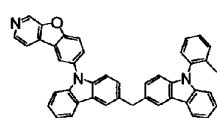
10

20

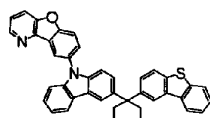
30

40

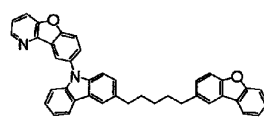
【化 8】



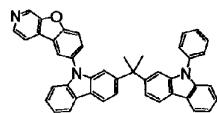
H-40



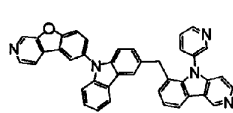
H-41



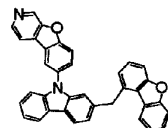
H-42



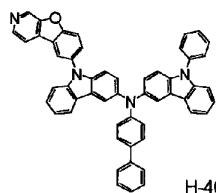
H-43



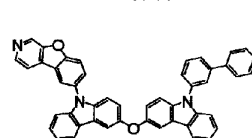
H-44



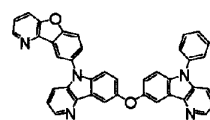
H-45



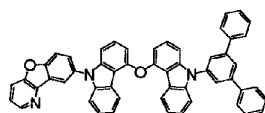
H-46



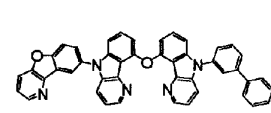
H-47



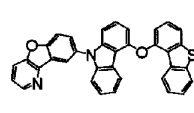
H-48



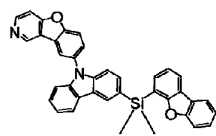
H-49



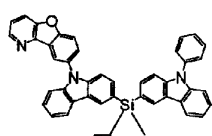
H-50



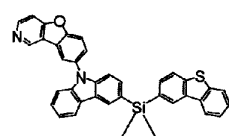
H-51



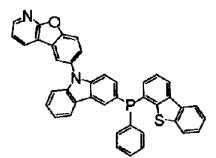
H-52



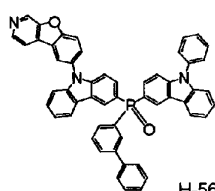
H-53



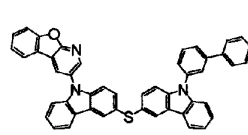
H-54



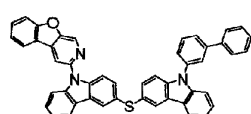
H-55



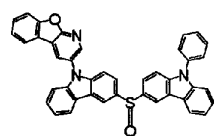
H-56



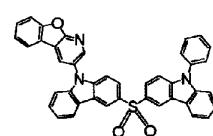
H-57



H-58



H-59



H-60

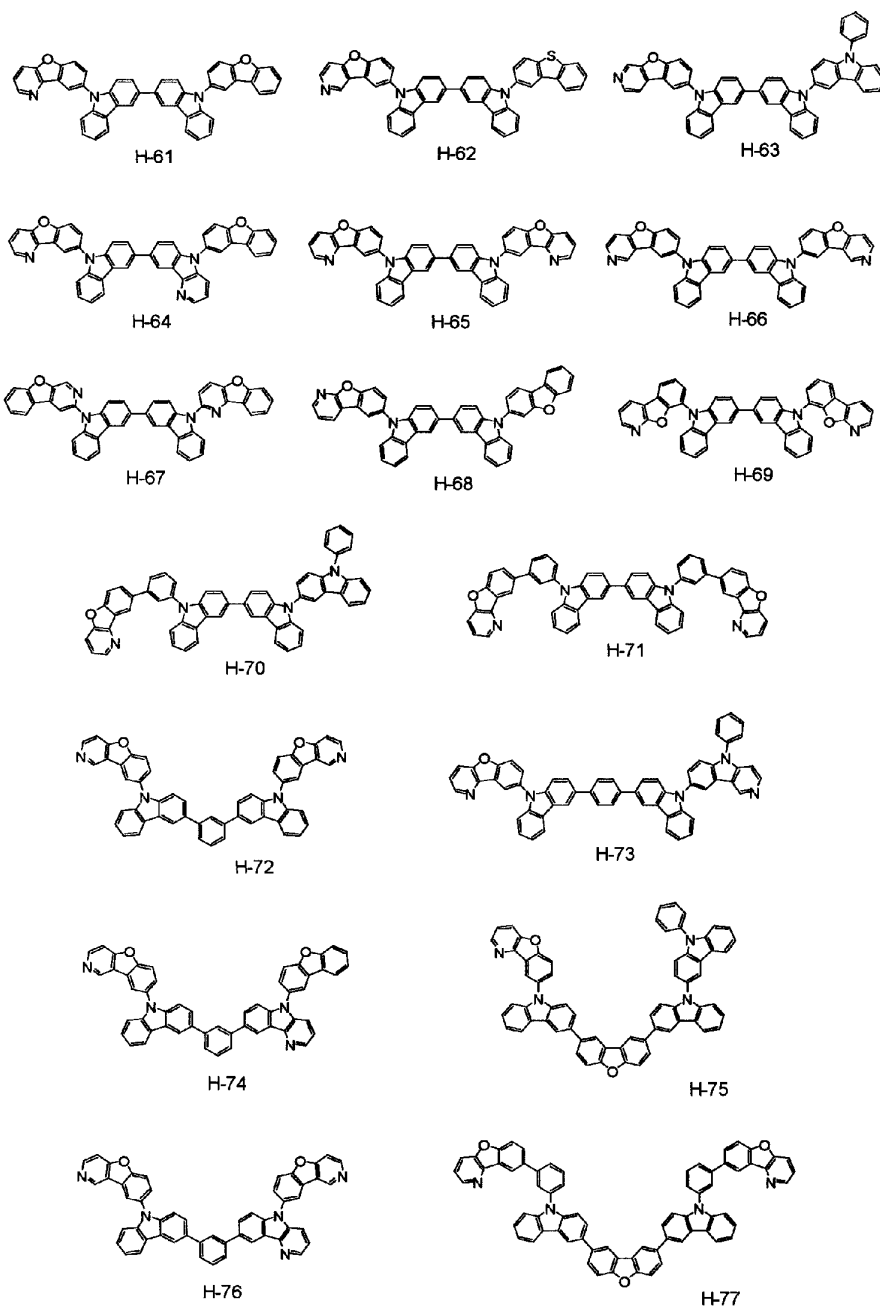
【 0 0 3 5 】

10

20

30

【化 9】



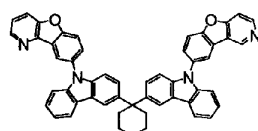
10

20

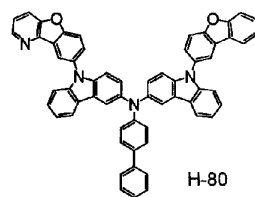
30

【 0 0 3 6 】

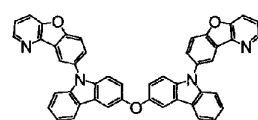
H-78



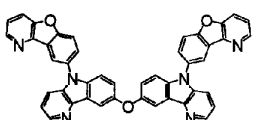
H-79



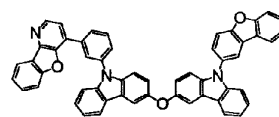
H-80



H-81

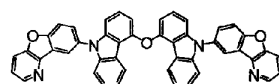


H-82

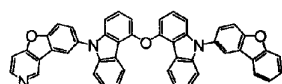


H-83

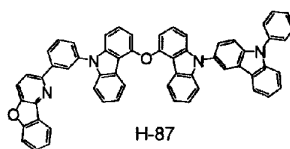
H-84



H-85



H-86

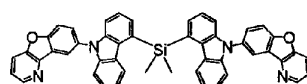


H-87

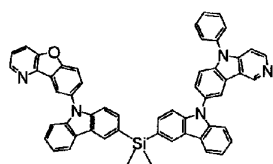


H-88

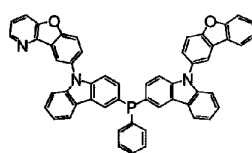
H-88



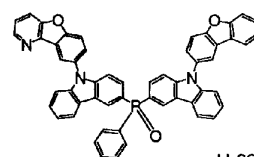
H-89



H-90

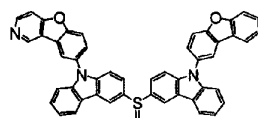


H-91

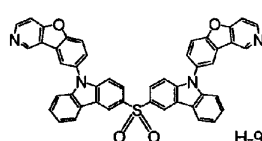


H-92

H-93



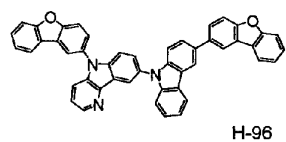
H-94



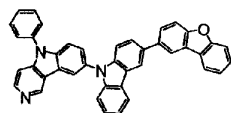
H-95

【 0 0 3 7 】

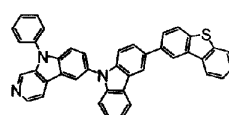
【化 1 1】



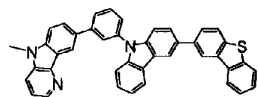
H-96



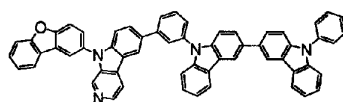
H-97



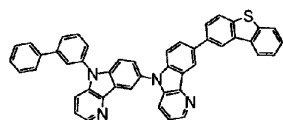
H-98



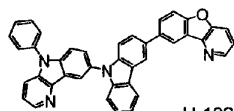
H-99



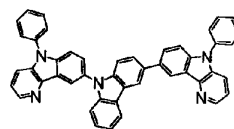
H-100



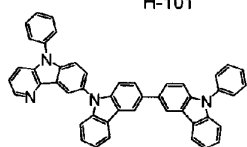
H-101



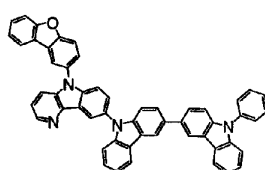
H-102



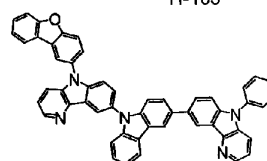
H-103



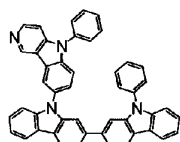
H-104



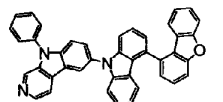
H-105



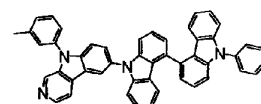
H-106



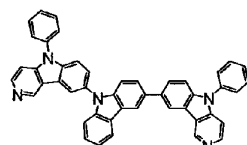
H-107



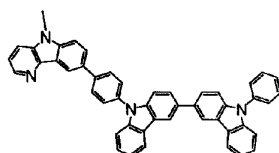
H-108



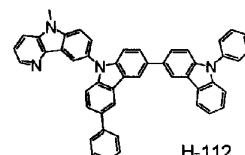
H-109



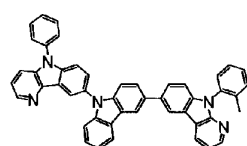
H-110



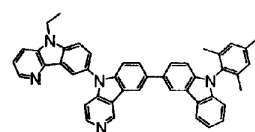
H-111



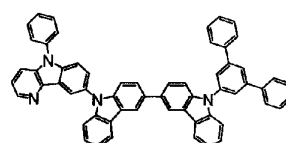
H-112



H-113



H-114



H-115

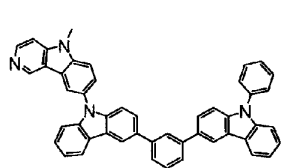
【 0 0 3 8 】

10

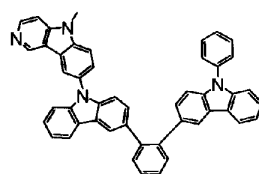
20

30

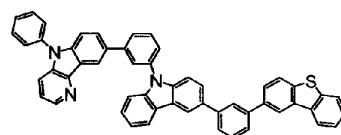
【化 1 2】



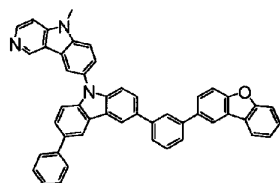
H-116



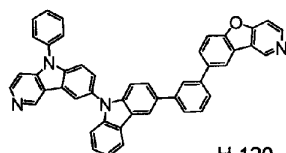
H-117



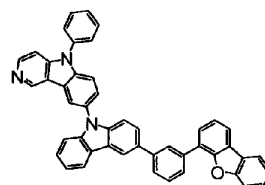
H-118



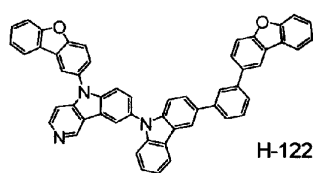
H-119



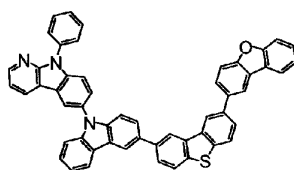
H-120



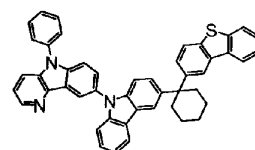
H-121



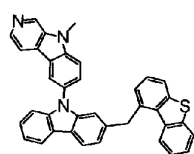
H-122



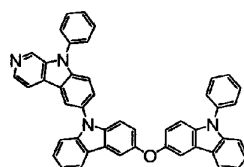
H-123



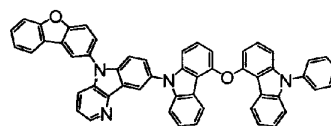
H-124



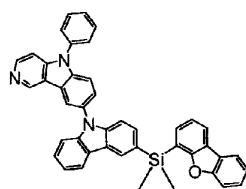
H-125



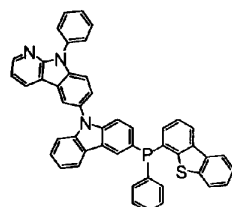
H-126



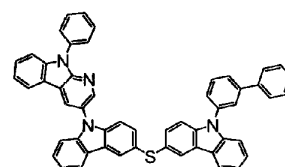
H-127



H-128



H-129



H-130

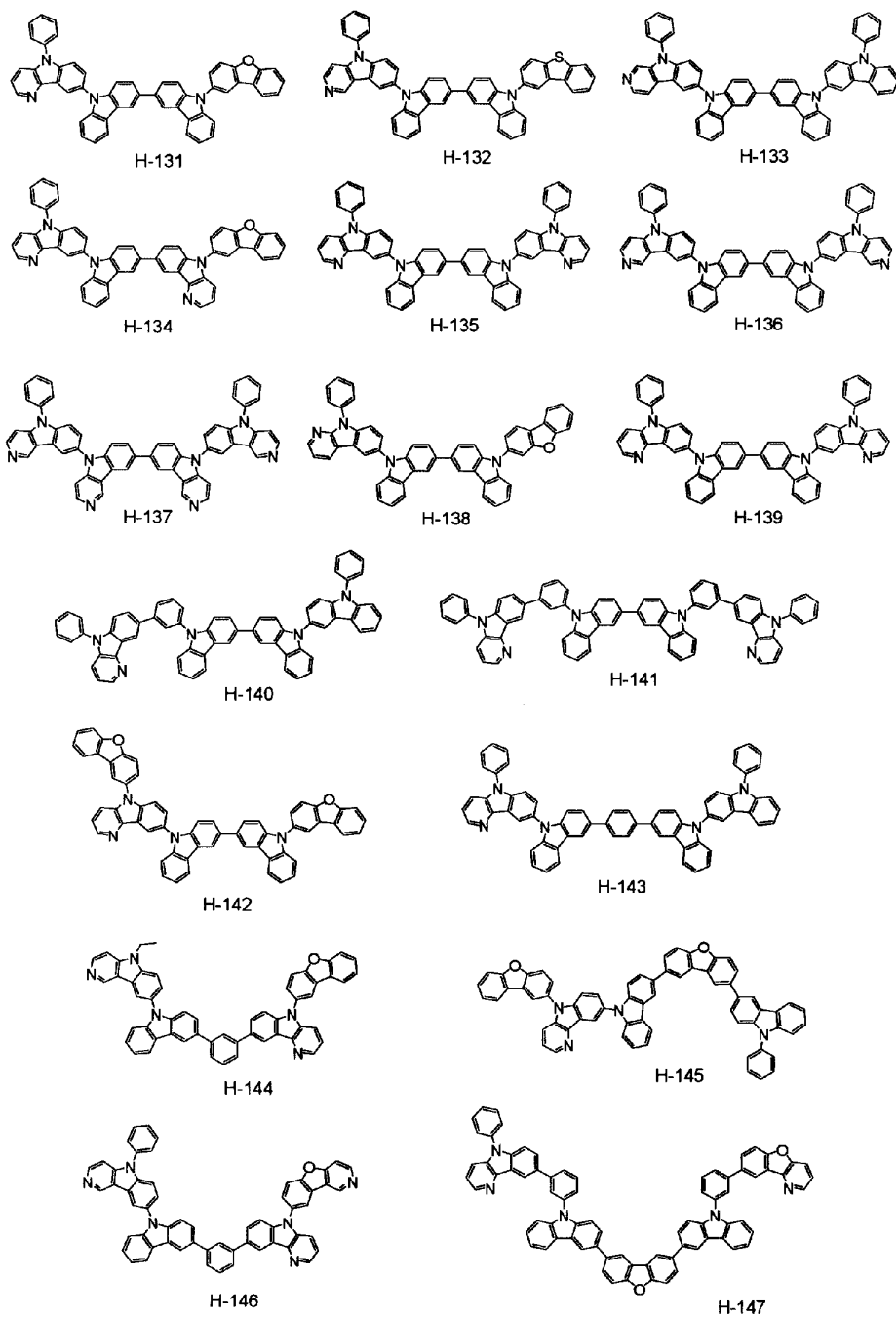
【 0 0 3 9 】

10

20

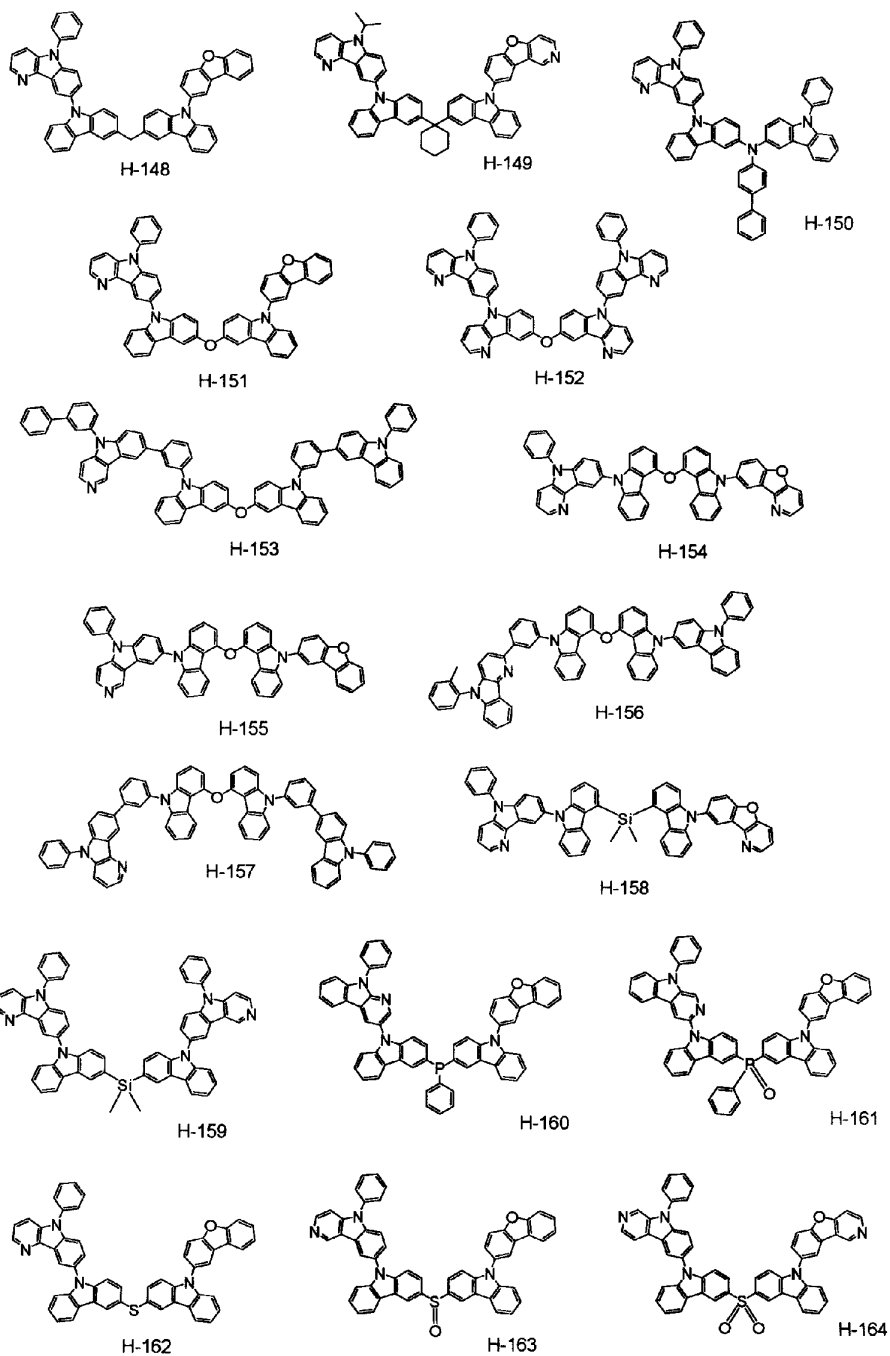
30

【化 1 3】



【 0 0 4 0 】

【化 1 4】



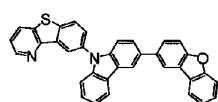
10

20

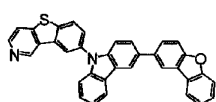
30

【 0 0 4 1 】

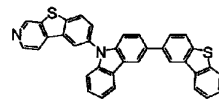
【化 1 5】



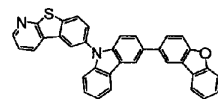
H-165



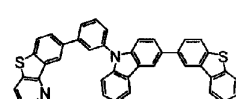
H-166



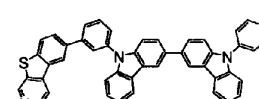
H-167



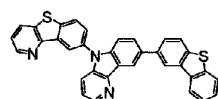
H-168



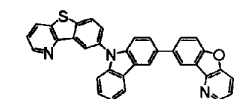
H-169



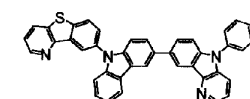
H-170



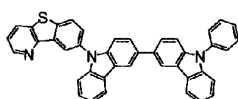
H-171



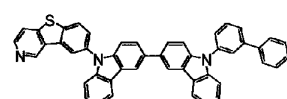
H-172



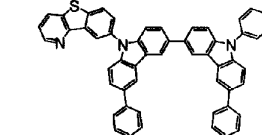
H-173



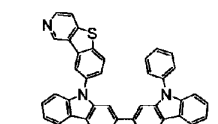
H-174



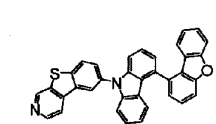
H-175



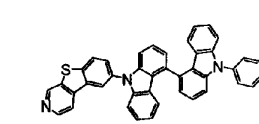
H-176



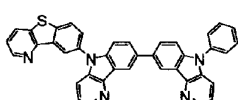
H-177



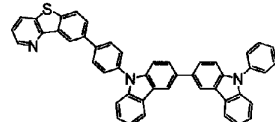
H-178



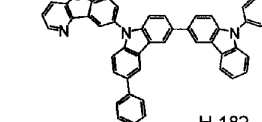
H-179



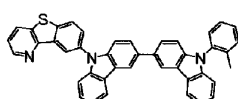
H-180



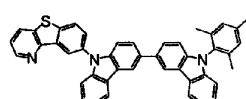
H-181



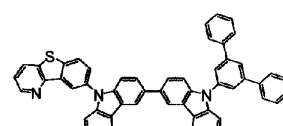
H-182



H-183



H-184



H-185

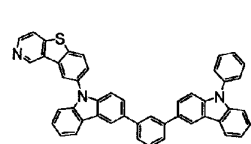
【 0 0 4 2 】

10

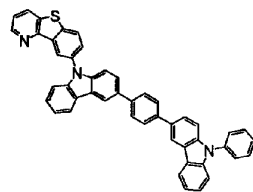
20

30

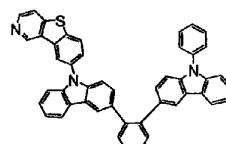
【化 1 6】



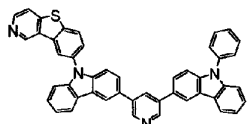
H-186



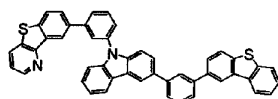
H-187



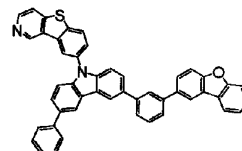
H-188



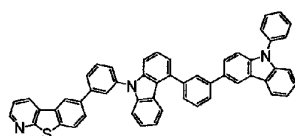
H-189



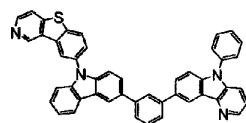
H-190



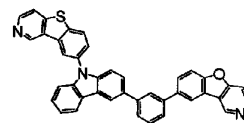
H-191



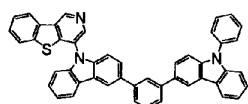
H-192



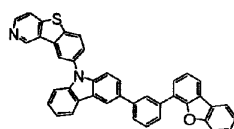
H-193



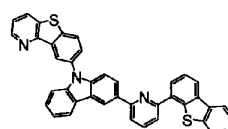
H-194



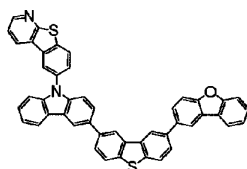
H-195



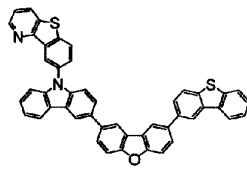
H-196



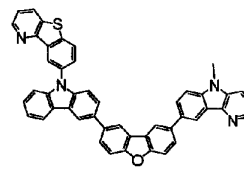
H-197



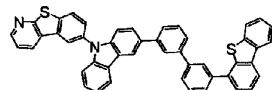
H-198



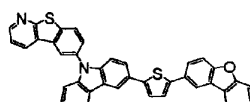
H-199



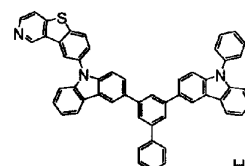
H-200



H-201



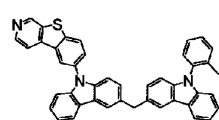
H-202



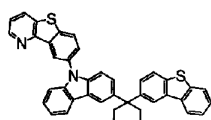
H-203

【 0 0 4 3 】

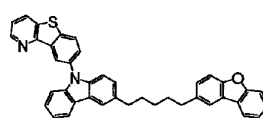
【化 1 7】



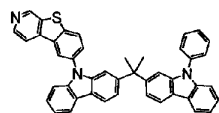
H-204



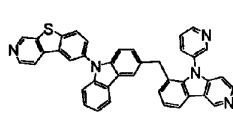
H-205



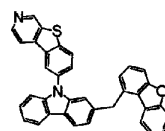
H-206



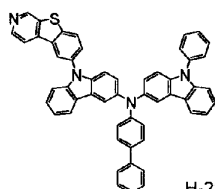
H-207



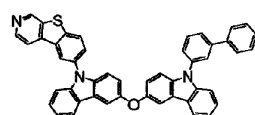
H-208



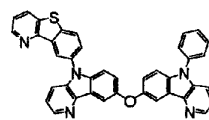
H-209



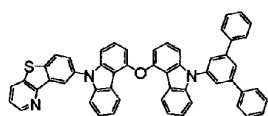
H-210



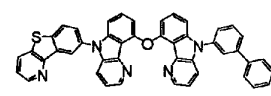
H-211



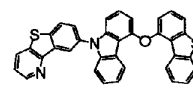
H-212



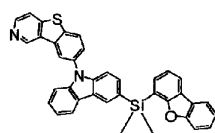
H-213



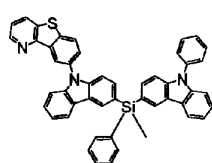
H-214



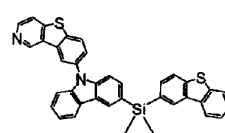
H-215



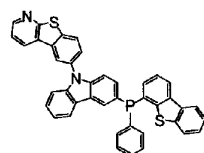
H-216



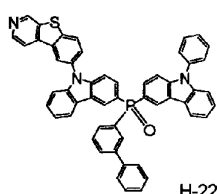
H-217



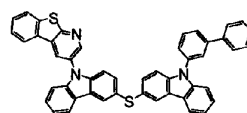
H-218



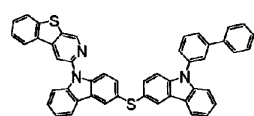
H-219



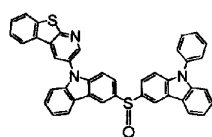
H-220



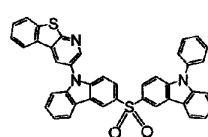
H-221



H-222



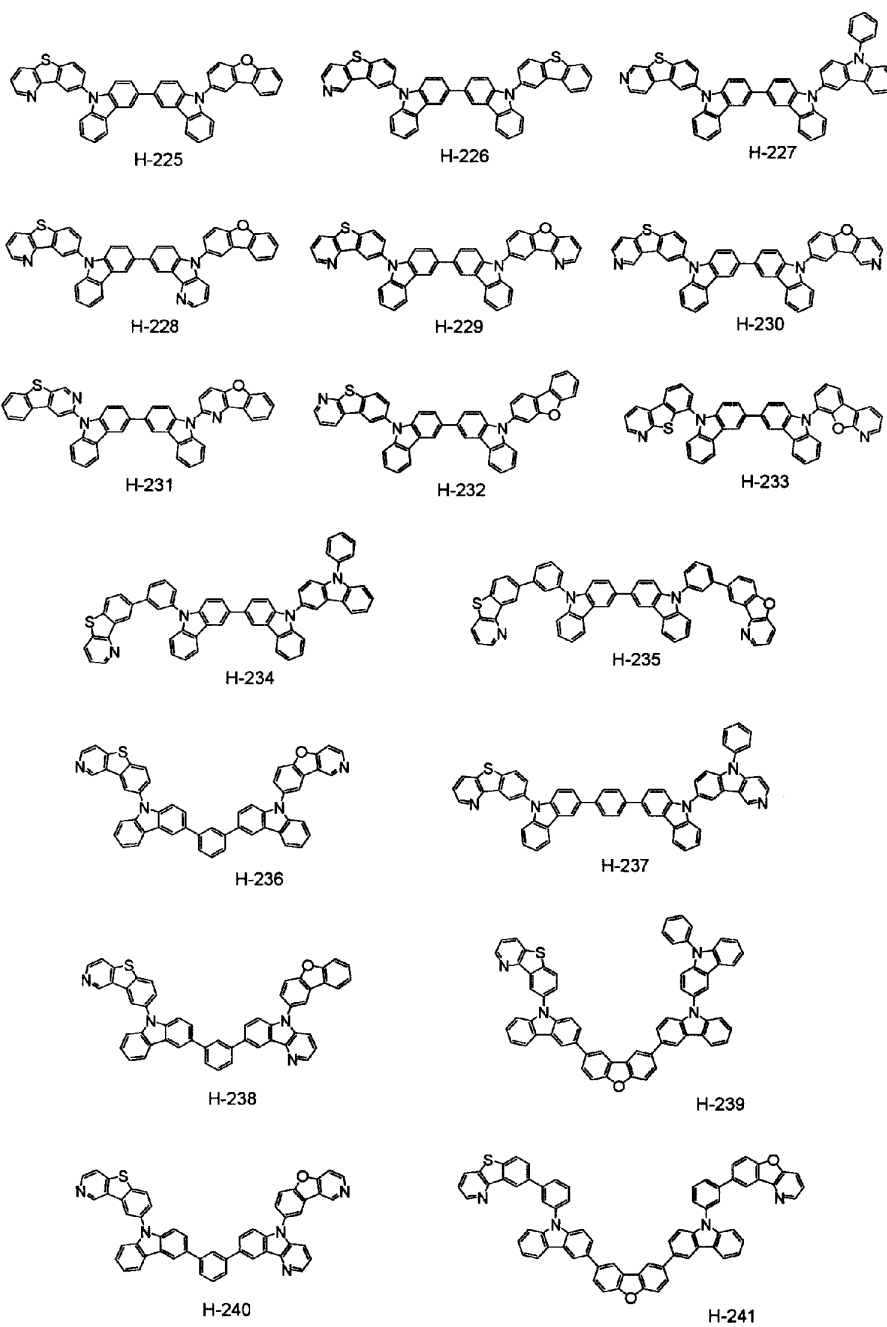
H-223



H-224

【 0 0 4 4 】

【化 1 8】



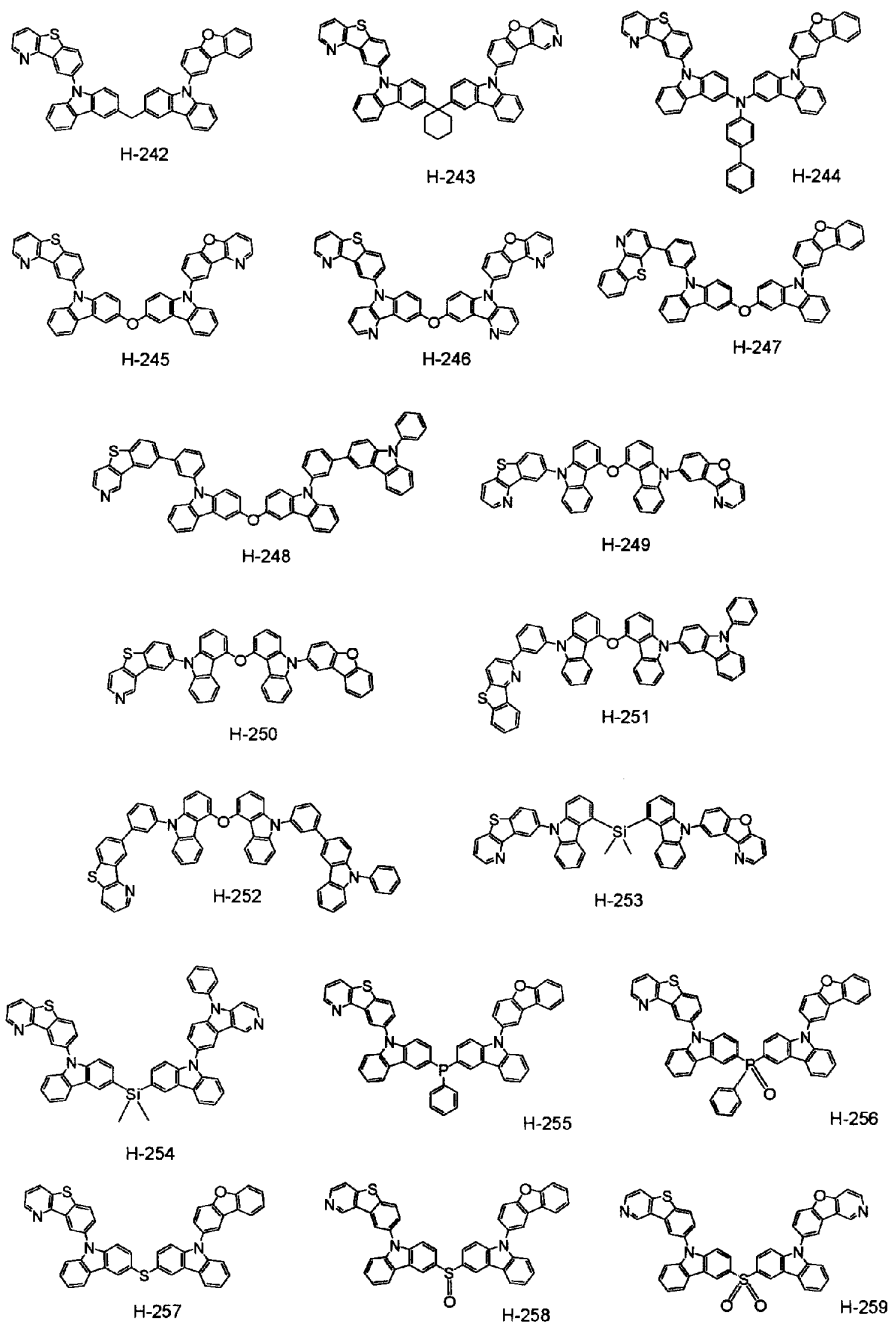
10

20

30

【 0 0 4 5】

【化 19】



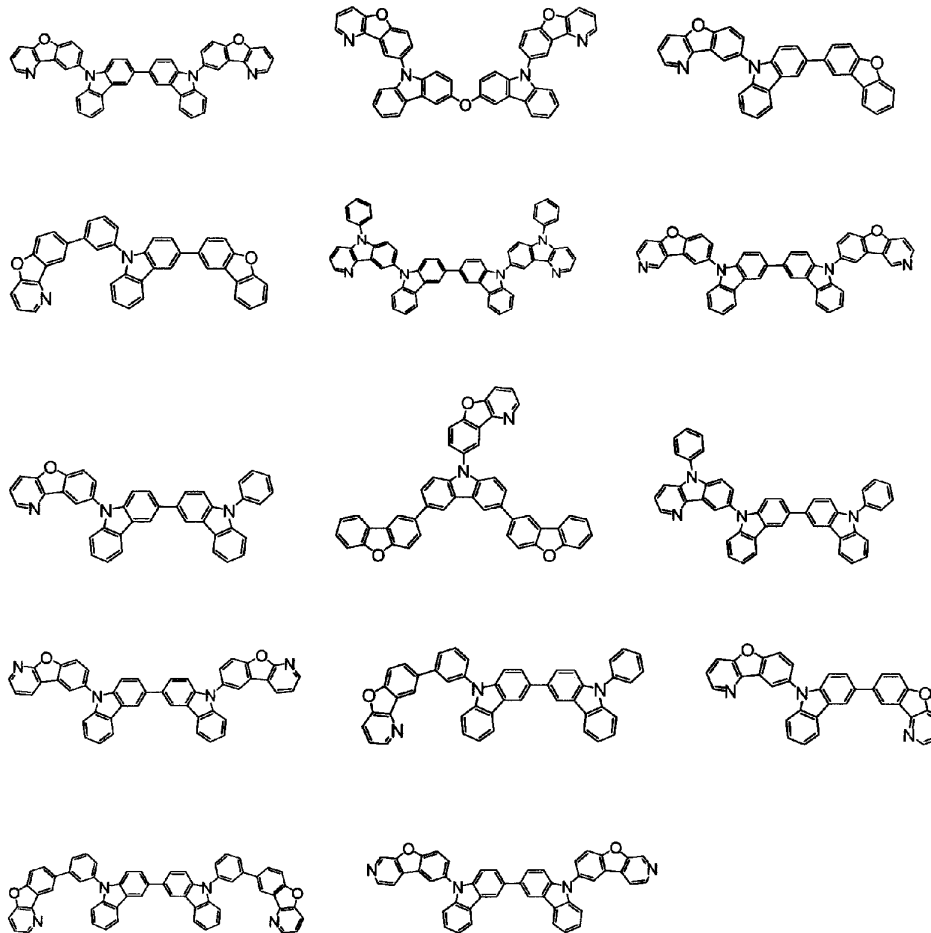
10

20

30

【 0 0 4 6 】

【化 20】



10

20

【0047】

次に、本発明の有機EL素子について説明する。

本発明の有機EL素子は、陰極と陽極との間に、発光層を含む一層以上の有機薄膜層を有し、この発光層が燐光発光性材料を含有し、また、この有機薄膜層の少なくとも一層が、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有する。

30

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

また、有機EL素子の構造は、発光層を含む有機層ユニットを少なくとも2つ有するタンデム素子構成とすることができる。有機層ユニットの構造としては、正孔輸送帯域／発光層、発光層／電子輸送帯域、正孔輸送帯域／発光層／電子輸送帯域が挙げられる。

2つの発光層の間には中間層（中間導電層、電荷発生層、CGLとも呼ぶ）が介在し、ユニット毎に電子輸送帯域を設けることができる。タンデム素子構成では、少なくとも1つの発光層が燐光発光層である。タンデム素子構成の具体的な積層順の例としては、陽極／燐光発光層／中間層／燐光発光層／電子輸送帯域（好適には障壁層を含む）／陰極、陽極／燐光発光層／電子輸送帯域（好適には障壁層を含む）／中間層／燐光発光層／陰極、陽極／蛍光発光層／中間層／燐光発光層／電子輸送帯域（好適には障壁層を含む）／陰極、陽極／燐光発光層／電子輸送帯域（好適には障壁層を含む）／中間層／蛍光発光層／陰極、陽極／燐光発光層／電子輸送帯域（好適には障壁層を含む）／中間層／燐光発光層／電子輸送帯域（好適には障壁層を含む）／陰極等が挙げられる。

40

なお、本発明において「正孔注入・輸送層」は、正孔輸送層の態様に含まれる。また、上記発光層は、複数の発光層の積層体であってもよい。

50

【 0 0 4 8 】

本発明の有機 E L 素子は、上述のように、陽極と発光層との間に正孔輸送帯域を有し、発光層または正孔輸送帯域が本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有してもよく、また、発光層と前記陰極との間に電子輸送帯域を有し、電子輸送帯域が本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含有してもよい。

本発明の有機 E L 素子は、前記一般式 (1) で表される有機 E L 素子用材料を、前記発光層、正孔輸送帯域 (正孔輸送層、正孔注入層)、電子輸送帯域 (電子輸送層、電子注入層、障壁層) のいずれか一層以上を含むことが好ましく、特に少なくとも発光層又は電子輸送帯域を含むことがより好ましい。

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を含む有機薄膜層において、該材料を 5 0 体積 % (v/v) 以上で含有することが好ましく、7 0 体積 % (v/v) 以上で含有することがより好ましく、9 0 体積 % (v/v) 以上で含有することがさらに好ましい。

【 0 0 4 9 】

上記電子輸送帯域は、発光層に隣接する部分に障壁層を有することが好ましい。障壁層は、後述するように、発光層で生成する三重項励起子が電子輸送帯域へ拡散することを防止し、三重項励起子を発光層内に閉じ込めることによって三重項励起子の発光ドーパント以外の電子輸送帯域の分子上でのエネルギー失活を抑制する機能を有する。

本発明の理解を容易にするために説明すると、本発明化合物を電子輸送帯域の障壁層として使用することにより、発光層に効率よく電子注入しつつ、三重項励起子が電子輸送帯域でエネルギー失活することを防ぐことが可能であると推測される。すなわち、本発明化合物を障壁層に用いることで、電子・正孔の再結合領域を制御することが容易になると推測される。また、本発明化合物は正孔注入・正孔輸送に対する高い電気化学的安定性も兼ね備えるため、本発明化合物を障壁層として使用すれば、同障壁層の電気化学的劣化を防ぐことができると推測され、耐久性に優れた有機エレクトロルミネッセンス素子を得ることができると考えられる。

本発明の化合物を障壁層として用いる場合、発光層中の燐光発光性ドーパントの三重項エネルギーを E^T_d 、障壁層として用いる化合物の三重項エネルギーを E^T_{TB} とすると、 $E^T_d < E^T_{TB}$ のエネルギー大小関係であれば、エネルギー関係上、燐光発光性ドーパントの三重項励起子が閉じ込められ (他分子へ移動できなくなり)、該ドーパント上で発光する以外のエネルギー失活経路が断たれ、高効率に発光することができると推測される。ただし、 $E^T_d < E^T_{TB}$ の関係が成り立つ場合であってもこのエネルギー差 $\Delta E^T = E^T_{TB} - E^T_d$ が小さい場合には、実際の素子駆動環境である室温程度の環境下では、周辺の熱エネルギーにより吸熱的にこのエネルギー差 ΔE^T を乗り越えて三重項励起子が他分子へ移動することが可能であると考えられる。特に燐光発光の場合は蛍光発光に比べて励起子寿命が長いこと、相対的に吸熱的励起子移動過程の影響が現れやすくなるため、本発明の化合物を障壁層に用いることは燐光素子の高効率化のために効果的であると推測される。室温の熱エネルギーに対してこのエネルギー差 ΔE^T は大きい程好ましく、0 . 1 e V 以上であるとさらに好ましく、0 . 2 e V 以上であると特に好ましい。

【 0 0 5 0 】

本発明における三重項エネルギーとは、試料を E P A 溶媒 (ジエチルエーテル : イソペンタン : エタノール = 5 : 5 : 2 (容積比)) に 1 0 $\mu\text{mol/L}$ で溶解させ、燐光測定用試料とする。この燐光測定用試料を石英セルに入れ、温度 7 7 K で励起光を照射し、放射される燐光の燐光スペクトルを測定する。これを基に換算式 $E^T (\text{eV}) = 1239 . 85 / \lambda_{\text{edge}}$ によって求めた値と定義する。「 λ_{edge} 」とは、縦軸にりん光強度、横軸に波長をとって、りん光スペクトルを表したときに、りん光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸の交点の波長値 (単位 : nm) を意味する。

発光層のホスト材料としては、 $A_b - A_h$ 0 . 1 e V となるものが好ましい。ここで、 A_b は障壁層材料のアフィニティー準位を表し、 A_h は発光層ホスト材料のアフィニティー準位を表す。

10

20

30

40

50

本発明におけるアフィニティ準位 A_f (電子親和力) とは、材料の分子に電子を一つ与えた時に放出または吸収されるエネルギーをいい、放出の場合は正、吸収の場合は負と定義する。アフィニティ準位 A_f は、イオン化ポテンシャル I_p と光学エネルギーギャップ $E_g(S)$ とにより次のように規定する。

$$A_f = I_p - E_g(S)$$

ここで、イオン化ポテンシャル I_p は、各材料の化合物から電子を取り去ってイオン化するために要するエネルギーを意味し、本発明では大気中光電子分光装置 (AC-3、理研計器株式会社製) で測定した正の符号を持つ値である。光学エネルギーギャップ $E_g(S)$ は、伝導レベルと価電子レベルとの差をいい、本発明では各材料のジクロロメタン希薄溶液の紫外・可視光吸収スペクトルの長波長側接線とベースライン (吸収ゼロ) との交点の波長値をエネルギーに換算して求めた正の符号を持つ値である。

10

また、障壁層を構成する材料の電子移動度は、電界強度 $0.04 \sim 0.5 \text{ MV/cm}$ の範囲において、 $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 以上であることが望ましい。有機材料の電子移動度の測定方法としては、Time of Flight法等幾つかの方法が知られているが、ここではインピーダンス分光法で決定される電子移動度をいう。

電子注入層は、電界強度 $0.04 \sim 0.5 \text{ MV/cm}$ の範囲において、 $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 以上であることが望ましい。これにより陰極からの電子注入層への電子注入が促進され、ひいては隣接する障壁層、発光層への電子注入も促進し、より低電圧での駆動を可能にするためである。

【0051】

20

また、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料は、ガラス転移点が 140 以上、より好ましくは 150 以上のものであると、熱的安定性に優れるため好ましい。ガラス転移点の上限としては、通常、 260 程度である。ここで、本発明における上記ガラス転移点とは、 3 mg 程度の試料を用い、Perkin Elmer社製DSC8500を用い、以下の(1)～(6)までの2サイクルの昇降温プロセスを行い、(6)の昇温時のDSC曲線のベースラインが段状に変化している変曲点の立ち上がり温度として定義できる。

(1) 30 で1分間保持する。

(2) 30 から試料の熱分解温度未満の一定温度まで昇温速度 $10 / \text{min}$ で加熱する。

30

(3) 三分間該一定温度にて3分間保持する。

(4) 該一定温度から 0 まで $200 / \text{min}$ で冷却する。

(5) 0 で10分間保持する。

(6) 0 から 200 まで昇温速度 $10 / \text{min}$ で加熱する。

【0052】

上記発光層はホスト材料と、ドーパント (燐光発光性材料) から形成されることが好ましく、上記本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料をホスト材料として含有することが好ましい。

【0053】

りん光発光性材料としては、りん光量子収率が高く、発光素子の外部量子効率をより向上させることができるという点で、イリジウム (Ir)、オスミウム (Os) および白金 (Pt) から選ばれる金属を含有する化合物であると好ましく、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等の金属錯体であるとさらに好ましく、中でもイリジウム錯体及び白金錯体がより好ましい。前記金属錯体は、中心金属原子と配位子に含まれる炭素原子とがオルトメタル結合しているオルトメタル化金属錯体であることが好ましく、オルトメタル化イリジウム錯体がより好ましい。オルトメタル化金属錯体のさらに好ましい形態としては、以下に示すイリジウム錯体が挙げられる。

40

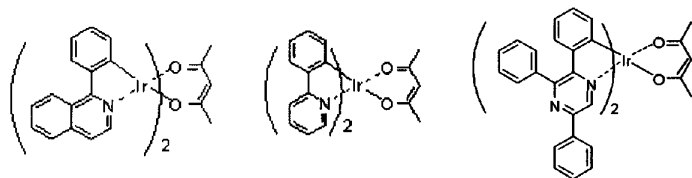
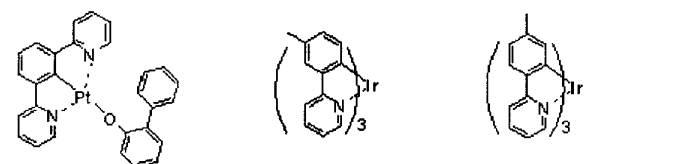
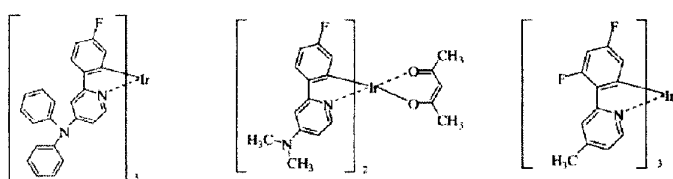
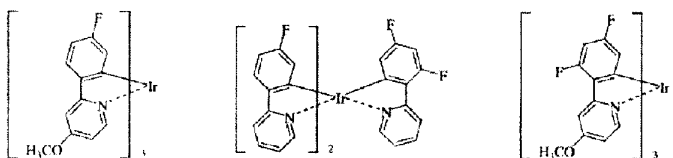
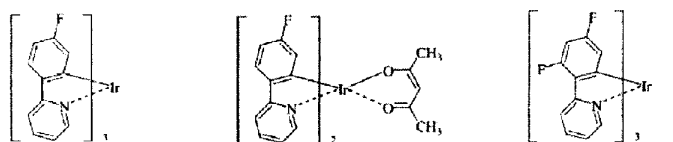
【0054】

[illegible]

20

【 0 0 5 5 】

【化 2 2】



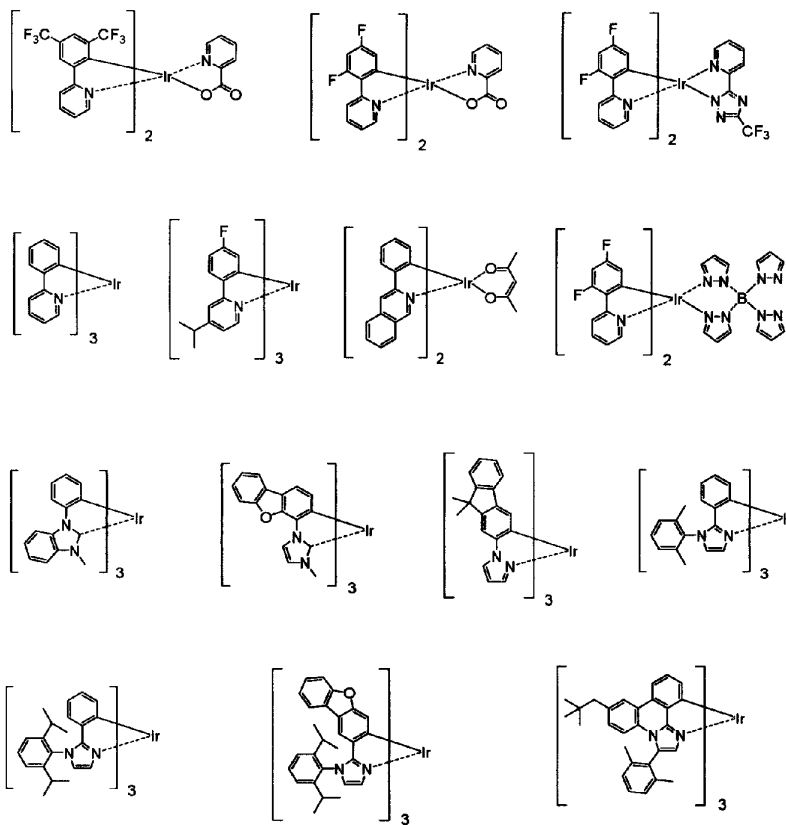
【 0 0 5 6】

10

20

30

【化 2 3】

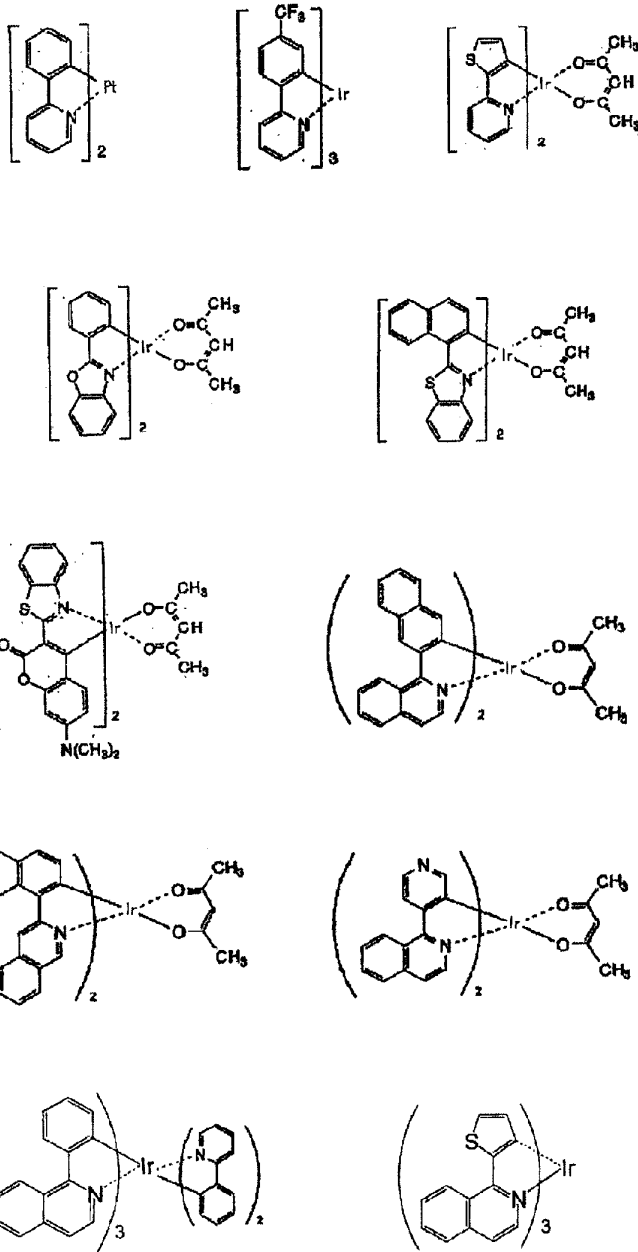


10

20

【 0 0 5 7 】

【化 2 4】



10

20

30

【 0 0 5 8】

また、本発明の有機 E L 素子は、前記発光層が本発明の有機 E L 用素子用材料を含有するホスト材料とりん光発光性材料を含有し、りん光発光性材料として発光波長の極大値が 550 nm、好ましくは 500 nm 以下である青色系金属錯体を含有することが好ましい。

40

【 0 0 5 9】

本発明の有機 E L 素子は、正孔輸送層（正孔注入層）を有し、該正孔輸送層（正孔注入層）が本発明の有機 E L 素子用材料を含有しても好ましい。

【 0 0 6 0】

本発明の有機 E L 素子は、陰極と有機薄膜層との界面領域に電子供与性ドーパントを有するのが好ましく、陰極と電子輸送帯域との界面領域に電子供与性ドーパントを有することがより好ましい。電子供与性ドーパントとは、仕事関数 3.8 eV 以下の金属を含有する化合物をいい、アルカリ金属、アルカリ金属錯体、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属錯体、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属錯体、及び希土類金属化合物等から選ばれた少なくとも一種類が挙げられる。

50

【0061】

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

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

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

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

【0062】

アルカリ金属化合物としては、Li₂O、Cs₂O、K₂O等のアルカリ酸化物、LiF、NaF、CsF、KF等のアルカリハロゲン化物等が挙げられ、LiF、Li₂O、NaFが好ましい。

アルカリ土類金属化合物としては、BaO、SrO、CaO及びこれらを混合したBa_xSr_{1-x}O（0 < x < 1）、Ba_xCa_{1-x}O（0 < x < 1）等が挙げられ、BaO、SrO、CaOが好ましい。

希土類金属化合物としては、YbF₃、ScF₃、ScO₃、Y₂O₃、Ce₂O₃、GdF₃、TbF₃等が挙げられ、YbF₃、ScF₃、TbF₃が好ましい。

【0063】

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

【0064】

電子供与性ドーパントの添加形態としては、界面領域に層状又は島状に形成すると好ましい。形成方法としては、抵抗加熱蒸着法により電子供与性ドーパントを蒸着しながら、界面領域を形成する発光材料や電子注入材料である有機物を同時に蒸着させ、有機物中に電子供与性ドーパントを分散する方法が好ましい。分散濃度はモル比で有機物：電子供与性ドーパント = 100 : 1 ~ 1 : 100、好ましくは5 : 1 ~ 1 : 5である。電子供与性ドーパントを層状に形成する場合は、界面の有機層である発光材料や電子注入材料を層状に形成した後に、電子供与性ドーパントを単独で抵抗加熱蒸着法により蒸着し、好ましくは層の厚み0.1 ~ 15 nmで形成する。電子供与性ドーパントを島状に形成する場合は、界面の有機層である発光材料や電子注入材料を島状に形成した後に、電子供与性ドーパントを単独で抵抗加熱蒸着法により蒸着し、好ましくは島の厚み0.05 ~ 1 nmで形成する。

【0065】

本発明の有機EL素子は、発光層と陰極との間に電子注入層を有し、該電子注入層が含窒素複素環誘導体を（より好ましくは50質量%以上で）含有すると好ましい。電子注入層に用いる電子輸送材料としては、分子内にヘテロ原子を1個以上含有する芳香族ヘテロ環化合物が好ましく用いられ、特に含窒素複素環誘導体が好ましい。

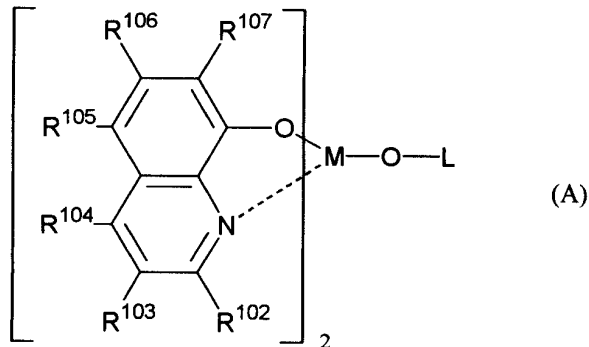
【 0 0 6 6 】

この含窒素複素環誘導体としては、例えば、式（ A ）で表される含窒素複素環金属キレート錯体が好ましい。

【 0 0 6 7 】

この含窒素複素環誘導体としては、例えば、式（ A ）で表される含窒素複素環金属キレート錯体が好ましい。

【 化 2 5 】



10

【 0 0 6 8 】

$R^{102} \sim R^{107}$ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、アミノ基、炭素数 1 ～ 40 の炭化水素基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アルコキシカルボニル基、または、複素環基であり、これらは置換されていてもよい。

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

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

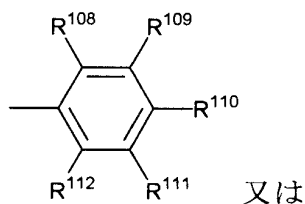
30

【 0 0 6 9 】

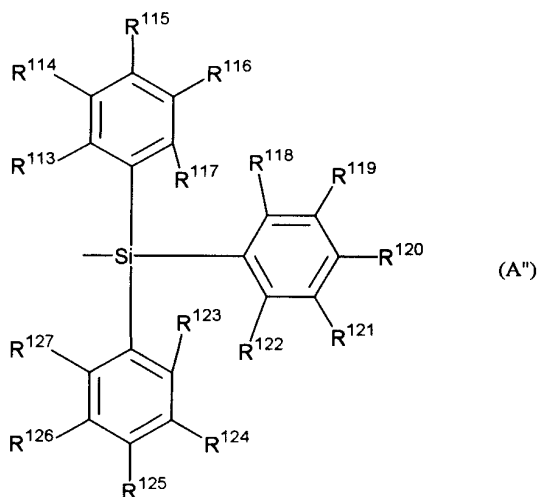
M は、アルミニウム（ Al ）、ガリウム（ Ga ）又はインジウム（ In ）であり、 In であると好ましい。

式（ A ）の L は、下記式（ A' ）又は（ A'' ）で表される基である。

【化 2 6】



又は



(A'')

【 0 0 7 0】

(式中、 $R^{108} \sim R^{112}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 40 の炭化水素基であり、互いに隣接する基が環状構造を形成していてもよい。また、 $R^{113} \sim R^{127}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 40 の炭化水素基であり、互いに隣接する基が環状構造を形成していてもよい。)

【 0 0 7 1】

式 (A') 及び式 (A'') の $R^{108} \sim R^{112}$ 及び $R^{113} \sim R^{127}$ が示す炭素数 1 ~ 40 の炭化水素基としては、 $R^2 \sim R^7$ の具体例と同様のものが挙げられる。

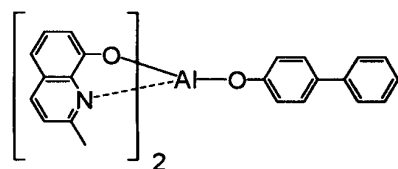
また、 $R^8 \sim R^{12}$ 及び $R^{13} \sim R^{27}$ の互いに隣接する基が環状構造を形成した場合の 2 価の基としては、テトラメチレン基、ペンタメチレン基、ヘキサメチレン基、ジフェニルメタン - 2, 2' - ジイル基、ジフェニルエタン - 3, 3' - ジイル基、ジフェニルプロパン - 4, 4' - ジイル基等が挙げられる。

【 0 0 7 2】

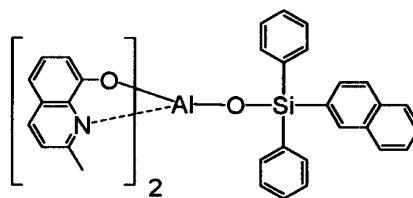
式 (A) で表される含窒素複素環の金属キレート錯体の具体例を以下に示すが、これら例示化合物に限定されるものではない。

【 0 0 7 3】

【化 2 7】



(A-1)



(A-2)

【 0 0 7 4】

含窒素複素環誘導体としては、以下の一般式を有する有機化合物からなる含窒素複素環誘導体であって、金属錯体でない含窒素化合物も挙げられる。例えば、(a) に示す骨格を含有する 5 員環もしくは 6 員環や、式 (b) に示す構造のものが挙げられる。

10

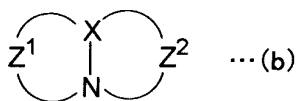
20

30

40

50

【化 2 8】



【 0 0 7 5 】

10

(式 (b) 中、X は炭素原子もしくは窒素原子を表す。Z¹ならびに Z²は、それぞれ独立に含窒素ヘテロ環を形成可能な原子群を表す。)

【 0 0 7 6 】

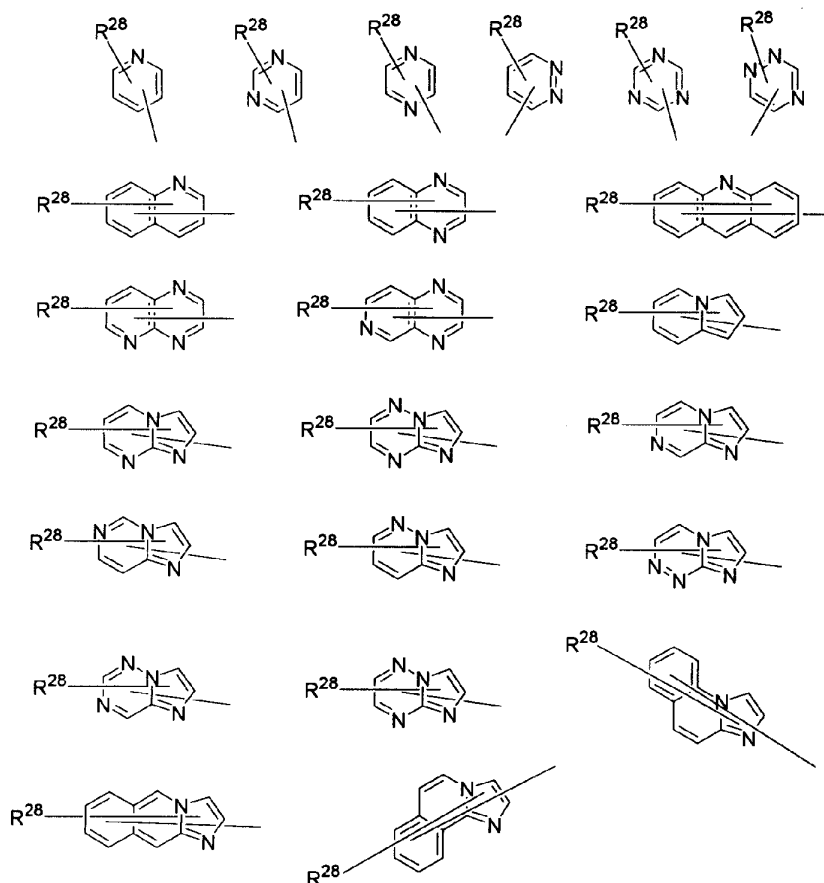
好ましくは、5員環もしくは6員環からなる含窒素芳香多環族を有する有機化合物。さらには、このような複数窒素原子を有する含窒素芳香多環族の場合は、上記 (a) と (b) を組み合わせた骨格を有する含窒素芳香多環有機化合物。

【 0 0 7 7 】

含窒素有機化合物の含窒素基は、例えば、以下の一般式で表される含窒素複素環基から選択される。

【化 2 9】

20



30

40

【 0 0 7 8 】

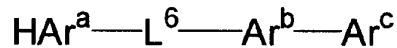
(各式中、R²⁸は、炭素数 6 ~ 40 のアリール基、炭素数 3 ~ 40 のヘテロアリール基、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基であり、n は 0 ~ 5 の整数であり、n が 2 以上の整数であるとき、複数の R²⁸ は互いに同一又は異なってもよい。)

【 0 0 7 9 】

50

さらに、好ましい具体的な化合物として、下記式で表される含窒素複素環誘導体が挙げられる。

【化 3 0】



【0080】

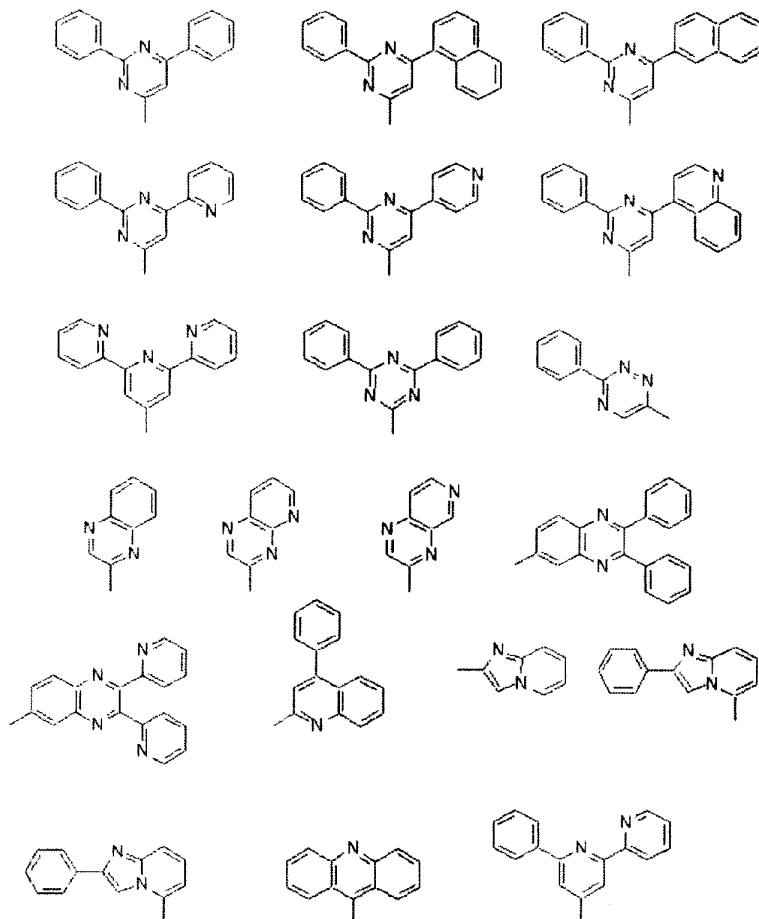
(式中、 HAr^a は、置換基を有していても良い炭素数3～40の含窒素複素環であり、 L^b は単結合、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリーレン基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリーレン基であり、 Ar^b は置換基を有していても良い炭素数6～40の2価の芳香族炭化水素基であり、 Ar^c は置換基を有していても良い炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基である。)

10

【0081】

HAr^a は、例えば、下記の群から選択される。

【化 3 1】



20

30

40

【0082】

L^b は、例えば、下記の群から選択される。

【化 3 2】

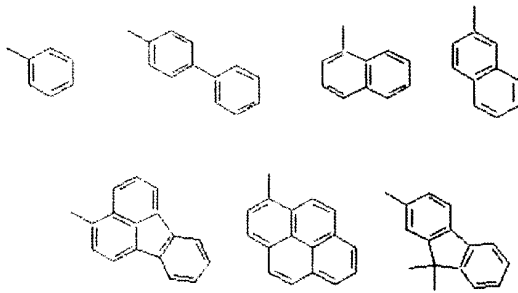


【0083】

50

Ar^c は、例えば、下記の群から選択される。

【化 3 3】

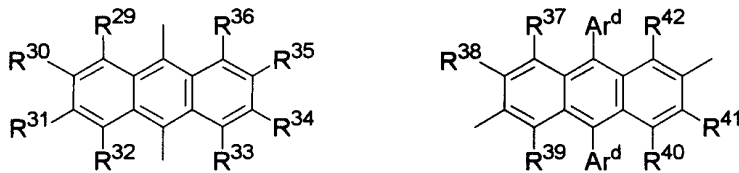


10

【0084】

Ar^b は、例えば、下記のアリールアントラニル基から選択される。

【化 3 4】



20

【0085】

(式中、 $R^{29} \sim R^{42}$ は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、炭素数1～20のアルキル基、炭素数1～20のアルコキシ基、炭素数6～40のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は炭素数3～40のヘテロアリール基であり、 Ar^d は、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は炭素数3～40のヘテロアリール基である。)

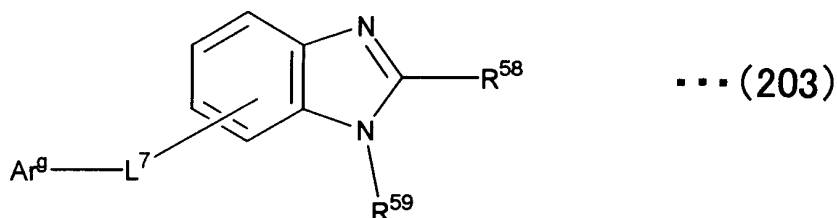
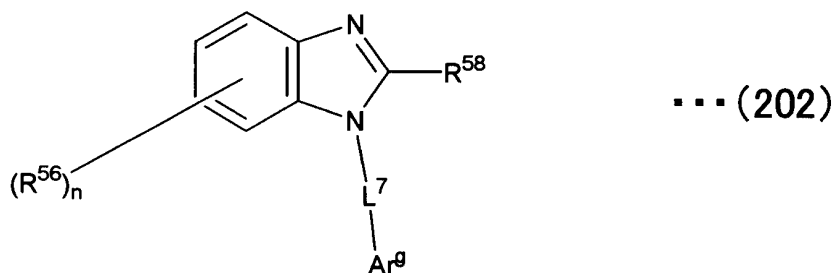
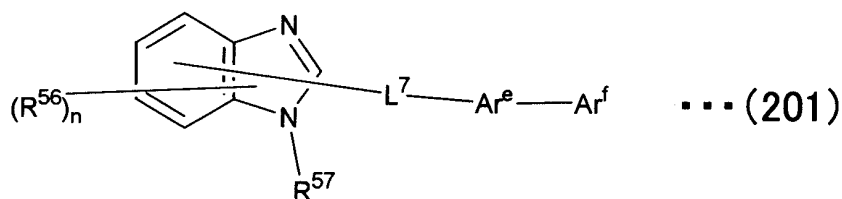
また、上記式で表される Ar^b において、 $R^{29} \sim R^{36}$ は、いずれも水素原子である含窒素複素環誘導体が好ましい。

【0086】

また、電子輸送層は、下記一般式(201)～(203)で表される含窒素複素環誘導体の少なくともいずれか1つを含有することが好ましい。

30

【化 3 5】



【 0 0 8 7 】

式(201)～(203)中、 R^{56} は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基で、 n は0～4の整数であり、 R^{57} は、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は炭素数1～20のアルコキシ基であり、 R^{58} 及び R^{59} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基であり、 L^7 は、単結合、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリーレン基、置換基を有していてもよいピリジニレン基、置換基を有していてもよいキノリニレン基又は置換基を有していてもよいフルオレニレン基であり、 Ar^e は、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリーレン基、置換基を有していてもよいピリジニレン基又は置換基を有していてもよいキノリニレン基であり、 Ar^f は、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基である。

Ar^g は、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基、又は $-Ar^e-Ar^f$ で表される基(Ar^e 及び Ar^f は、それぞれ前記と同じ)である。

【 0 0 8 8 】

なお、前記式(201)～(203)において、 R^{56} は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を

有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基である。

【0089】

前記炭素数 6 ~ 60 のアリール基としては、炭素数 6 ~ 40 のアリール基が好ましく、炭素数 6 ~ 20 のアリール基がさらに好ましく、具体的には、フェニル基、ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、ナфтаセニル基、クリセニル基、ピレニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、トリル基、*t*-ブチルフェニル基、(2-フェニルプロピル)フェニル基、フルオランテニル基、フルオレニル基、スピロビフルオレンからなる 1 価の基、パーフルオロフェニル基、パーフルオロナフチル基、パーフルオロアントリル基、パーフルオロビフェニル基、9-フェニルアントラセンからなる 1 価の基、9-(1'-ナフチル)アントラセンからなる 1 価の基、9-(2'-ナフチル)アントラセンからなる 1 価の基、6-フェニルクリセンからなる 1 価の基、9-[4-(ジフェニルアミノ)フェニル]アントラセンからなる 1 価の基等が挙げられ、フェニル基、ナフチル基、ビフェニル基、ターフェニル基、9-(10-フェニル)アントリル基、9-[10-(1'-ナフチル)]アントリル基、9-[10-(2'-ナフチル)]アントリル基等が好ましい。

10

【0090】

炭素数 1 ~ 20 のアルキル基としては、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基が好ましく、具体的には、メチル基、エチル基、プロピル基、ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基等の他、トリフルオロメチル基等のハロアルキル基が挙げられ、炭素数が 3 以上のものは直鎖状、環状又は分岐を有するものでよい。

20

炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基としては、炭素数 1 ~ 6 のアルコキシ基が好ましく、具体的には、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基等が挙げられ、炭素数が 3 以上のものは直鎖状、環状又は分岐を有するものでよい。

【0091】

R⁵⁶の示す各基の置換基としては、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 40 のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 40 のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数 3 ~ 40 のヘテロアリール基等が挙げられる。

30

ハロゲン原子としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素等が挙げられる。

炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、炭素数 6 ~ 40 のアリール基としては、前記と同様のものが挙げられる。

【0092】

炭素数 6 ~ 40 のアリールオキシ基としては、例えば、フェノキシ基、ビフェニルオキシ基等が挙げられる。

炭素数 3 ~ 40 のヘテロアリール基としては、例えば、ピローリル基、フリル基、チエニル基、シローリル基、ピリジル基、キノリル基、イソキノリル基、ベンゾフリル基、イミダゾリル基、ピリミジル基、カルバゾリル基、セレノフェニル基、オキサジアゾリル基、トリアゾリル基等が挙げられる。

40

n は 0 ~ 4 の整数であり、0 ~ 2 であると好ましい。

【0093】

前記式(201)において、R⁵⁷は、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 60 のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基である。

これら各基の具体例、好ましい炭素数及び置換基としては、前記 R について説明したものと同様である。

【0094】

50

前記式(202)及び(203)において、 R^{58} 及び R^{59} は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基である。

これら各基の具体例、好ましい炭素数及び置換基としては、前記 R^{56} について説明したものと同様である。

【0095】

前記式(201)～(203)において、 L^7 は、単結合、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリーレン基、置換基を有していてもよいピリジニレン基、置換基を有していてもよいキノリニレン基又は置換基を有していてもよいフルオレニレン基である。

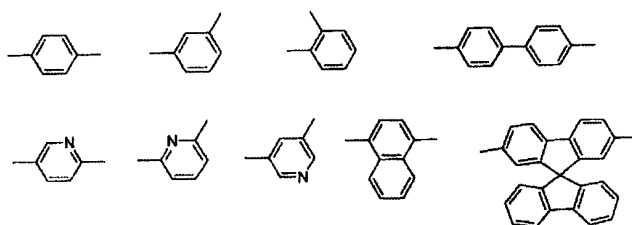
10

炭素数6～60のアリーレン基としては、炭素数6～40のアリーレン基が好ましく、炭素数6～20のアリーレン基がさらに好ましく、具体的には、前記Rについて説明したアリール基から水素原子1個を除去して形成される2価の基が挙げられる。 L^7 の示す各基の置換基としては、前記 R^{56} について説明したものと同様である。

【0096】

また、 L^7 は、

【化36】



20

【0097】

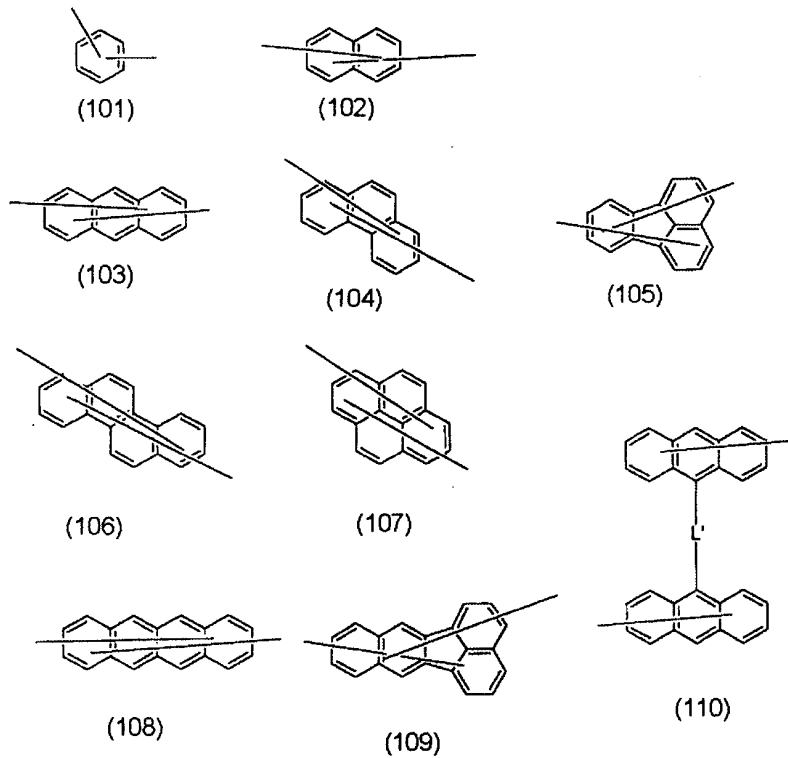
からなる群から選択される基であると好ましい。

前記式(201)において、 Ar^e は、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリーレン基、置換基を有していてもよいピリジニレン基又は置換基を有していてもよいキノリニレン基である。 Ar^e 及び Ar^g の示す各基の置換基としては、それぞれ前記Rについて説明したものと同様である。

30

また、 Ar^e は、下記式(101)～(110)で表される縮合環基から選択されるいずれかの基であると好ましい。

【化 3 7】



10

20

【 0 0 9 8】

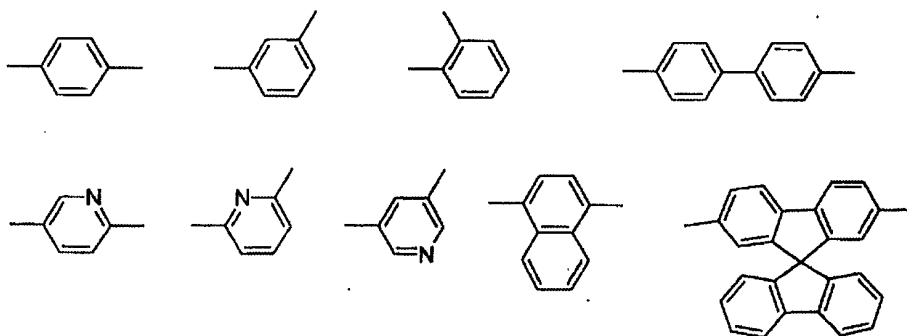
前記式(101)～(110)中、それぞれの縮合環は、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基からなる結合基が結合していてもよく、該結合基が複数ある場合は、該結合基は互いに同一でも異なってもよい。これら各基の具体例としては、前記と同様のものが挙げられる。

30

前記式(110)において、L'は、単結合、又は

【 0 0 9 9】

【化 3 8】



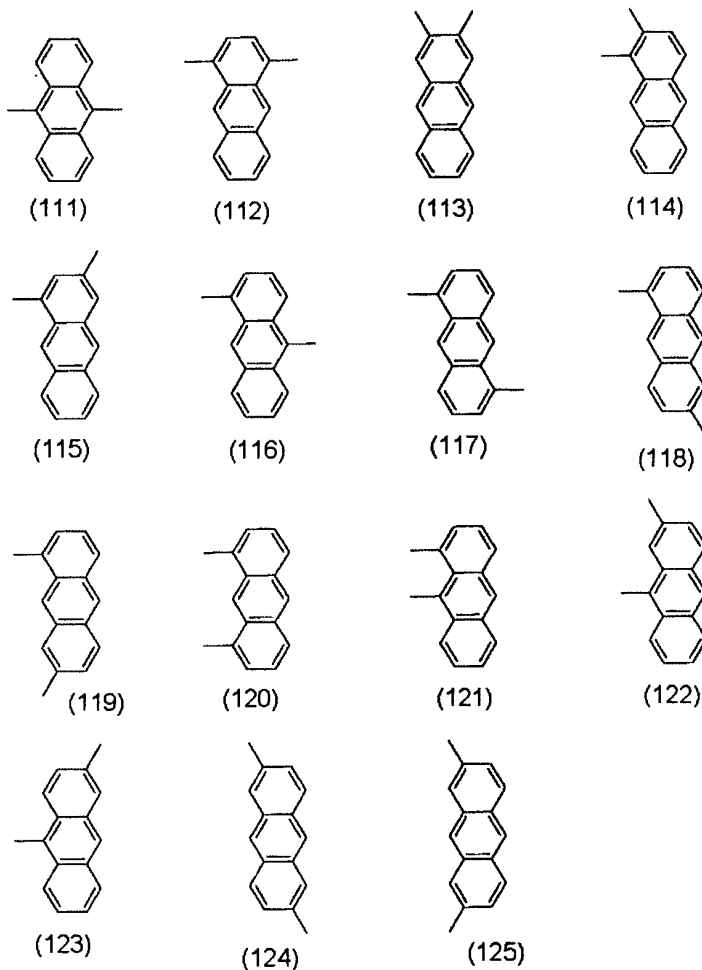
40

【 0 1 0 0】

からなる群から選択される基である。

A^rの示す前記式(103)が、下記式(111)～(125)で表される縮合環基であると好ましい。

【化 3 9】



10

20

【 0 1 0 1】

前記式(111)～(125)中、それぞれの縮合環は、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基からなる結合基が結合していてもよく、該結合基が複数ある場合は、該結合基は互いに同一でも異なってもよい。これら各基の具体例としては、前記と同様のものが挙げられる。

30

【 0 1 0 2】

前記式(201)において、 Ar^f は、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基である。

40

これら各基の具体例、好ましい炭素数及び置換基としては、前記 R^{56} について説明したものと同様である。

【 0 1 0 3】

前記式(202)及び(203)において、 Ar^g は、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基、又は $-Ar^e-Ar^f$ で表される基(Ar^e 及び Ar^f は、それぞれ前記と同じ)である。

これら各基の具体例、好ましい炭素数及び置換基としては、前記 R^{56} について説明した

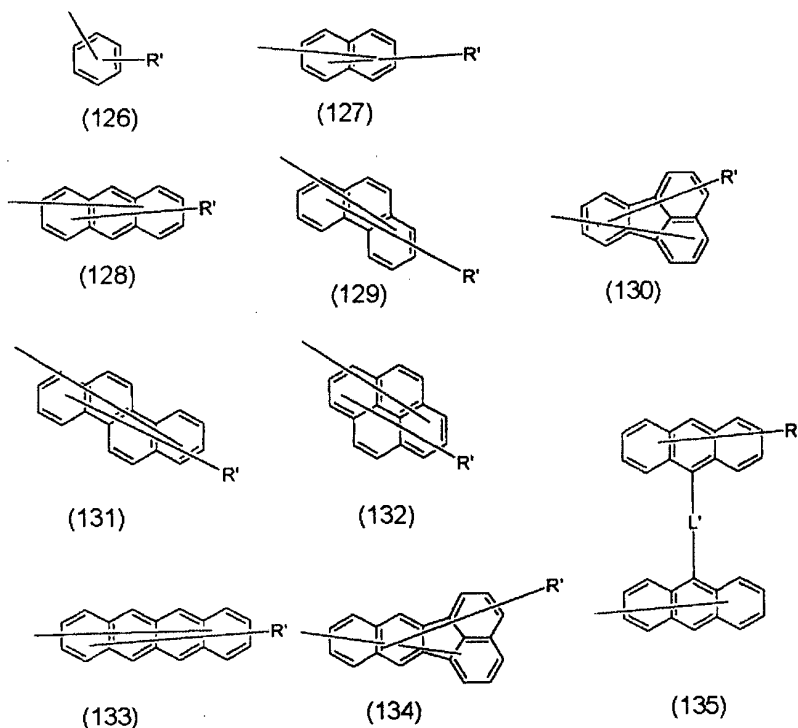
50

ものと同様である。

また、 Ar^g は、下記式(126)～(135)で表される縮合環基から選択されるいずれかの基であると好ましい。

【0104】

【化40】



10

20

【0105】

前記式(126)～(135)中、それぞれの縮合環は、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基からなる結合基が結合していてもよく、該結合基が複数ある場合は、該結合基は互いに同一でも異なってもよい。これら各基の具体例としては、前記と同様のものが挙げられる。

30

前記式(135)において、 L' は、前記と同じである。

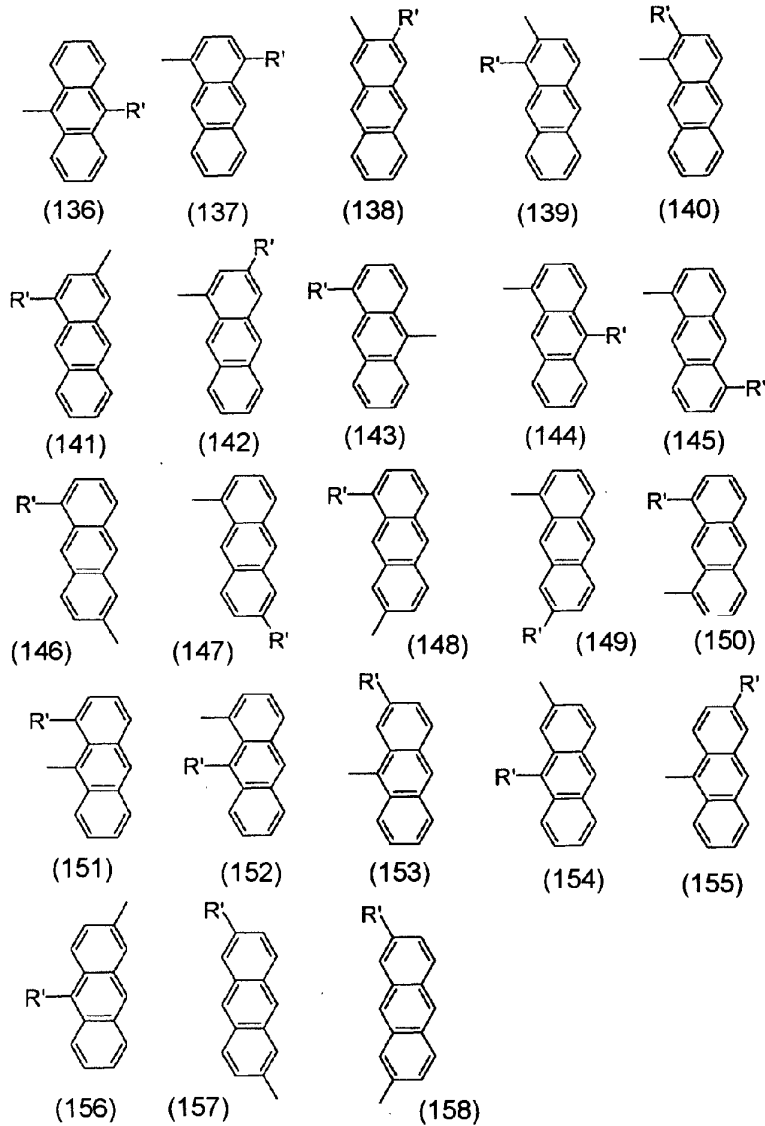
前記式(126)～(135)において、 R' は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基である。これら各基の具体例としては、前記と同様のものが挙げられる。

40

Ar^g の示す一般式(128)が、下記式(136)～(158)で表される縮合環基であると好ましい。

【0106】

【化 4 1】



10

20

30

【 0 1 0 7 】

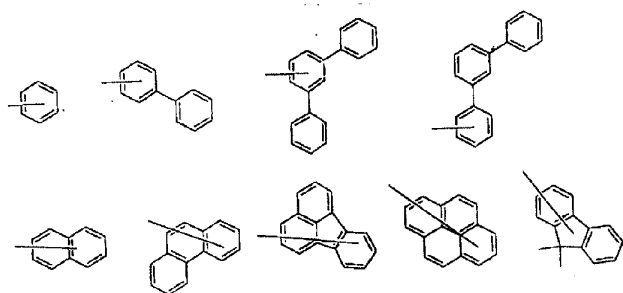
前記式 (1 3 6) ~ (1 5 8) 中、それぞれの縮合環は、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 2 0 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 2 0 のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 4 0 のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 4 0 のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数 3 ~ 4 0 のヘテロアリール基からなる結合基が結合していてもよく、該結合基が複数ある場合は、該結合基は互いに同一でも異なってもよい。これら各基の具体例としては、前記と同様のものが挙げられる。R' は、前記と同じである。

また、Ar^f及びAr^gは、それぞれ独立に、

【 0 1 0 8 】

40

【化 4 2】



10

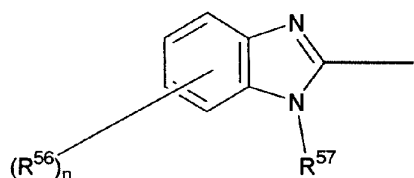
【 0 1 0 9】

からなる群から選択される基であると好ましい。

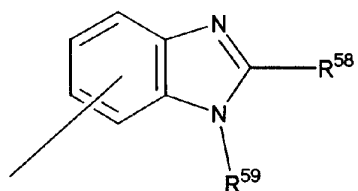
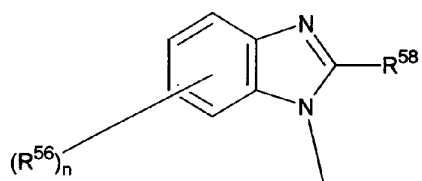
前記式(201)～(203)で示される含窒素複素環誘導体の具体例を下記に示すが、本発明はこれらの例示化合物に限定されるものではない。

なお、下記表において、H A r は、前記式(201)～(203)における、

【化 4 3】



20

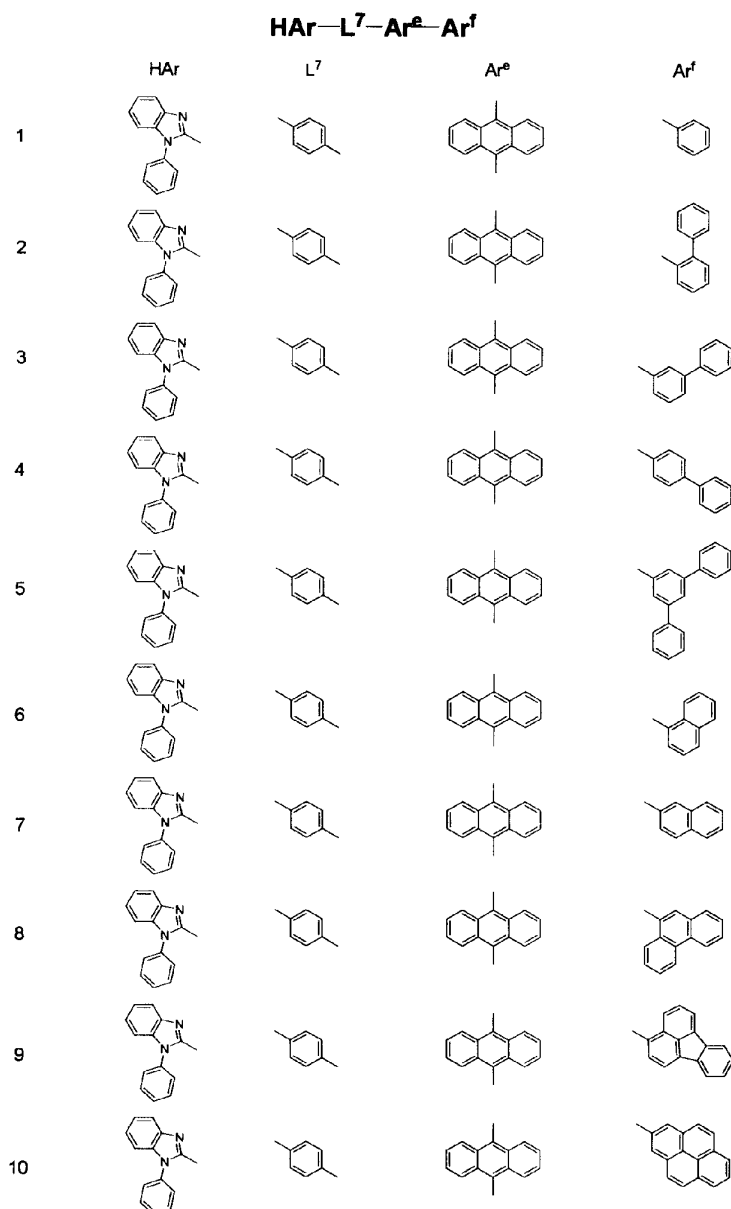


30

を示す。

【 0 1 1 0】

【化 4 4】



10

20

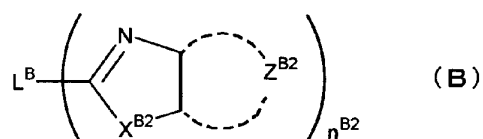
30

【 0 1 1 1】

また、含窒素複素環誘導体としては、含窒素 5 員環誘導体も好ましく挙げられる。該含窒素 5 員環としては、例えばイミダゾール環、トリアゾール環、テトラゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、オキサトリアゾール環、チアトリアゾール環等が挙げられ、含窒素 5 員環誘導体としては、ベンゾイミダゾール環、ベンゾトリアゾール環、ピリジノイミダゾール環、ピリミジノイミダゾール環、ピリダジノイミダゾール環であり、特に好ましくは、下記一般式 (B) で表されるものである。

40

【化 4 5】



【 0 1 1 2】

一般式 (B) 中、 L^{B} は二価以上の連結基を表し、例えば、炭素原子、ケイ素原子、窒素原子、ホウ素原子、酸素原子、硫黄原子、金属原子 (例えば、バリウム原子、ベリリウ

50

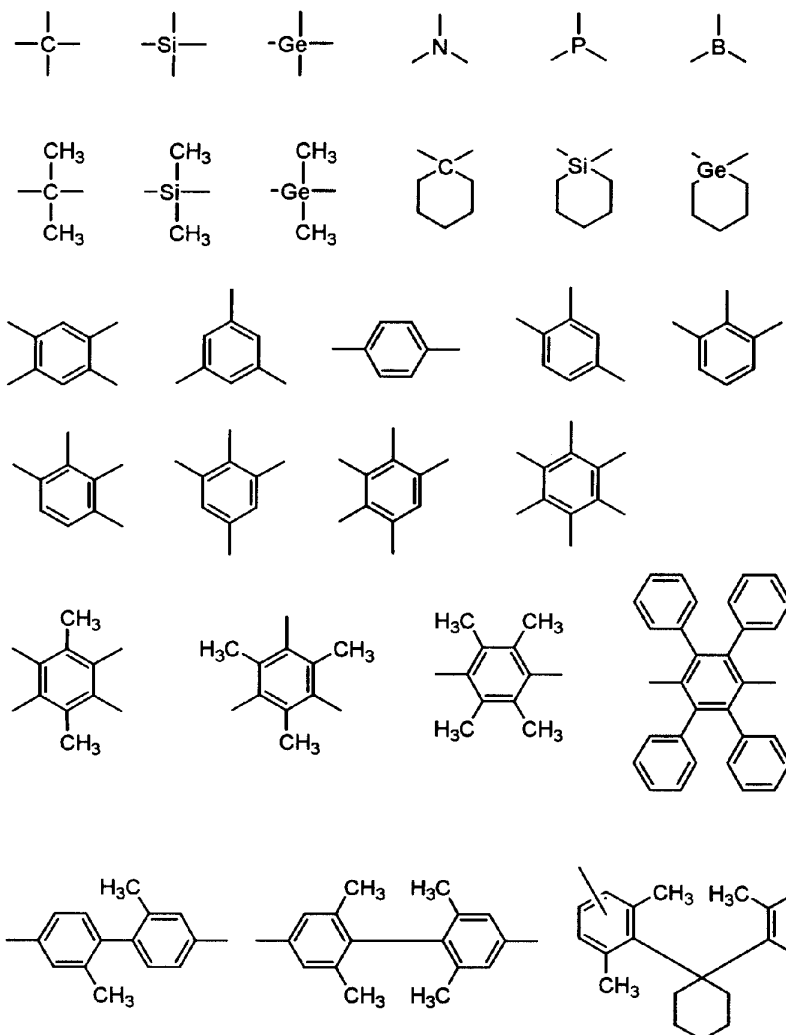
ム原子)、芳香族炭化水素環、芳香族複素環等が挙げられ、これらのうち炭素原子、窒素原子、ケイ素原子、ホウ素原子、酸素原子、硫黄原子、芳香族炭化水素環、芳香族複素環基が好ましく、炭素原子、ケイ素原子、芳香族炭化水素環、芳香族複素環基がさらに好ましい。

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

【0113】

L^B の具体例としては、以下に示すものが挙げられる。

【化46】



【0114】

一般式(B)における X^{B2} は、 $-O-$ 、 $-S-$ 又は $-N(R^{B2})-$ を表す。 R^{B2} は、水素原子、脂肪族炭化水素基、アリール基又は複素環基を表す。

R^{B2} の脂肪族炭化水素基は、直鎖状又は分岐状アルキル基(好ましくは炭素数1~20、より好ましくは炭素数1~12、特に好ましくは炭素数1~8のアルキル基であり、例

10

20

30

40

50

例えば、メチル基、エチル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基、*n*-オクチル基、*n*-デシル基、*n*-ヘキサデシル基等が挙げられる。)、シクロアルキル基(好ましくは環形成炭素数3~10であり、例えば、シクロプロピル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等が挙げられる。)、アルケニル基(好ましくは炭素数2~20、より好ましくは炭素数2~12、特に好ましくは炭素数2~8のアルケニル基であり、例えば、ビニル基、アリル基、2-ブテニル基、3-ペンテニル基等が挙げられる。)、アルキニル基(好ましくは炭素数2~20、より好ましくは炭素数2~12、特に好ましくは炭素数2~8のアルキニル基であり、例えばプロパルギル基、3-ペンチニル基等が挙げられる。)であり、アルキル基が好ましい。

【0115】

R^{B2} のアリール基は単環又は縮合環であり、好ましくは環形成炭素数6~30、より好ましくは環形成炭素数6~20、さらに好ましくは環形成炭素数6~12のアリール基であり、例えば、フェニル基、2-メチルフェニル基、3-メチルフェニル基、4-メチルフェニル基、2-メトキシフェニル基、3-トリフルオロメチルフェニル基、ペンタフルオロフェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基等が挙げられ、フェニル基、2-メチルフェニル基が好ましい。

【0116】

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

【0117】

R^{B2} で表される脂肪族炭化水素基、アリール基及び複素環基は置換基を有していてもよく、かかる置換基としては、好ましくはアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アシルオキシ基、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、アリールオキシカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、スルファモイル基、カルバモイル基、アルキルチオ基、アリールチオ基、スルホニル基、ハロゲン原子、シアノ基、芳香族複素環基であり、より好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、芳香族複素環基であり、さらに好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、アリールオキシ基、芳香族複素環基であり、特に好ましくはアルキル基、アリール基、アルコキシ基、芳香族複素環基である。

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

X^{B2} としては、好ましくは-O-又はN(R^{B2})-であり、より好ましくは-N(R^{B2})-である。

10

20

30

40

50

【0118】

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

【0119】

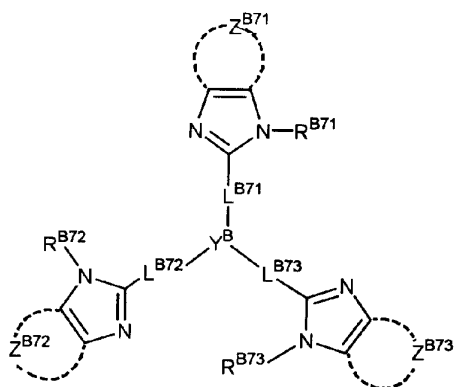
Z^{B2} で形成される芳香族環は、さらに他の環と縮合環を形成してもよく、置換基を有していてもよい。置換基としては前記 L^B で表される基の置換基として挙げたものと同様であり、好ましくはアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アシルオキシ基、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、アリールオキシカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、スルファモイル基、カルバモイル基、アルキルチオ基、アリールチオ基、スルホニル基、ハロゲン原子、シアノ基、複素環基であり、より好ましくはアル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

n^{B2} は、1～4の整数であり、2～3であると好ましい。

【0120】

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

【化47】



(B')

【0121】

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

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

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

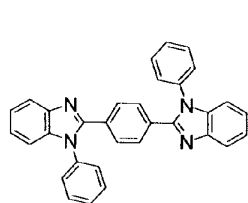
Y^B は、窒素原子、1,3,5-ベンゼントリイル基又は2,4,6-トリアジントリ

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

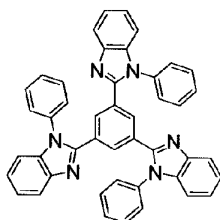
【0122】

一般式 (B) 又は一般式 (B') で表される含窒素 5 員環誘導体の具体例を以下に示すが、これら例示化合物に限定されるものではない。

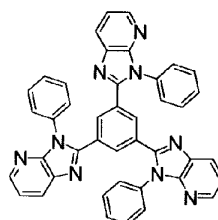
【化 48】



(B-1)



(B-2)



(B-3)

10

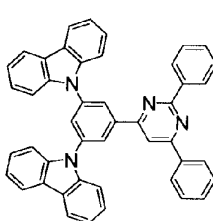
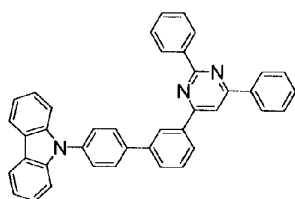
【0123】

電子注入層及び電子輸送層を構成する化合物としては、電子欠乏性含窒素 5 員環又は電子欠乏性含窒素 6 員環骨格と、置換又は無置換のインドール骨格、置換又は無置換のカルバゾール骨格、置換又は無置換のアザカルバゾール骨格を組み合わせた構造を有する化合物等も挙げられる。また、好適な電子欠乏性含窒素 5 員環又は電子欠乏性含窒素 6 員環骨格としては、例えばピリジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、トリアゾール、オキサジアゾール、ピラゾール、イミダゾール、キノキサリン、ピロール骨格及び、それらがお互いに縮合したベンズイミダゾール、イミダゾピリジン等の分子骨格が挙げられる。これらの組み合わせの中でも、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン骨格と、カルバゾール、インドール、アザカルバゾール、キノキサリン骨格が好ましく挙げられる。前述の骨格は置換されていてもよいし、無置換でもよい。

20

【0124】

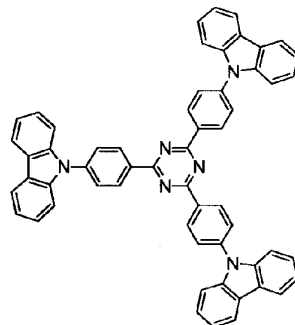
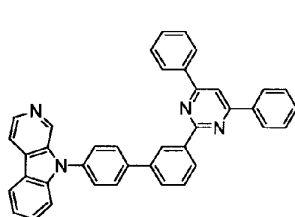
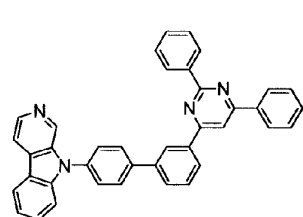
【化 49】



30

電子輸送性化合物の具体例を以下に示すが、特にこれらに限定されない。

【化 50】



40

50

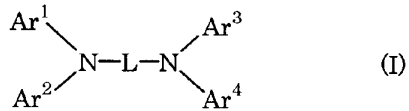
【 0 1 2 5 】

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

【 0 1 2 6 】

正孔注入層又は正孔輸送層（正孔注入輸送層も含む）には芳香族アミン化合物、例えば、一般式（I）で表わされる芳香族アミン誘導体が好適に用いられる。

【 化 5 1 】



10

【 0 1 2 7 】

一般式（I）において、 $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^4$ は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基または置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基を表す。

【 0 1 2 8 】

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基としては、例えば、フェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニルイル基、4'' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基、フルオランテニル基、フルオレニル基などが挙げられる。

20

【 0 1 2 9 】

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基としては、例えば、1 - ピロリル基、2 - ピロリル基、3 - ピロリル基、ピラジニル基、2 - ピリジニル基、3 - ピリジニル基、4 - ピリジニル基、1 - インドリル基、2 - インドリル基、3 - インドリル基、4 - インドリル基、5 - インドリル基、6 - インドリル基、7 - インドリル基、1 - イソインドリル基、2 - イソインドリル基、3 - イソインドリル基、4 - イソインドリル基、5 - イソインドリル基、6 - イソインドリル基、7 - イソインドリル基、2 - フリル基、3 - フリル基、2 - ベンゾフラニル基、3 - ベンゾフラニル基、4 - ベンゾフラニル基、5 - ベンゾフラニル基、6 - ベンゾフラニル基、7 - ベンゾフラニル基、1 - イソベンゾフラニル基、3 - イソベンゾフラニル基、4 - イソベンゾフラニル基、5 - イソベンゾフラニル基、6 - イソベンゾフラニル基、7 - イソベンゾフラニル基、キノリル基、3 - キノリル基、4 - キノリル基、5 - キノリル基、6 - キノリル基、7 - キノリル基、8 - キノリル基、1 - イソキノリル基、3 - イソキノリル基、4 - イソキノリル基、5 - イソキノリル基、6 - イソキノリル基、7 - イソキノリル基、8 - イソキノリル基、2 - キノキサリニル基、5 - キノキサリニル基、6 - キノキサリニル基、1 - カルバゾリル基、2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、9 - カルバゾリル基、1 - フェナンスリジニル基、2 - フェナンスリジニル基、3 - フェナンスリジニル基、4 - フェナンスリジニル基、6 - フェナンスリジニル基、7 - フェナンスリジニル基、8 - フェナンスリジニル基、9 - フェナンスリジニル基、10 - フェナンスリジニル基、1 - アクリジニル基、2 - アクリジニル基、3 - アクリジニル基、4 - アクリジニル基、9 - アクリジニル基、1, 7 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 3 -

30

40

50

イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル
 基、1, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、
 1, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1
 , 8 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 8
 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 8 - フェ
 ナンスロリン - 6 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 8 - フェナ
 ンスロリン - 9 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 9 - フェナ
 スロリン - 2 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェナンスロ
 リン - 4 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン
 - 6 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 8
 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 2
 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 4
 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 1 -
 イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル
 基、2, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、
 2, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2,
 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 8
 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 8 - フェ
 ナンスロリン - 5 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 8 - フェナ
 ンスロリン - 7 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 8 - フェナ
 スロリン - 10 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 7 - フェナンスロ
 リン - 3 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン
 - 5 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 8
 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 10 -
 イル基、1 - フェナジニル基、2 - フェナジニル基、1 - フェノチアジニル基、2 - フェ
 ノチアジニル基、3 - フェノチアジニル基、4 - フェノチアジニル基、10 - フェノチア
 ジニル基、1 - フェノキサジニル基、2 - フェノキサジニル基、3 - フェノキサジニル基
 、4 - フェノキサジニル基、10 - フェノキサジニル基、2 - オキサゾリル基、4 - オキ
 サゾリル基、5 - オキサゾリル基、2 - オキサジアゾリル基、5 - オキサジアゾリル基、
 3 - フラザニル基、2 - チエニル基、3 - チエニル基、2 - メチルピロール - 1 - イル基
 、2 - メチルピロール - 3 - イル基、2 - メチルピロール - 4 - イル基、2 - メチルピロ
 ール - 5 - イル基、3 - メチルピロール - 1 - イル基、3 - メチルピロール - 2 - イル基
 、3 - メチルピロール - 4 - イル基、3 - メチルピロール - 5 - イル基、2 - t - ブチル
 ピロール - 4 - イル基、3 - (2 - フェニルプロピル)ピロール - 1 - イル基、2 - メチ
 ル - 1 - インドリル基、4 - メチル - 1 - インドリル基、2 - メチル - 3 - インドリル基
 、4 - メチル - 3 - インドリル基、2 - t - ブチル 1 - インドリル基、4 - t - ブチル 1
 - インドリル基、2 - t - ブチル 3 - インドリル基、4 - t - ブチル 3 - インドリル基等
 が挙げられる。好ましくはフェニル基、ナフチル基、ピフェニル基、アントラニル基、フ
 エナンスリル基、ピレニル基、クリセニル基、フルオランテニル基、フルオレニル基など
 が挙げられる。

【0130】

L は連結基である。具体的には置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリー
 レン基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリーレン基、または、2 個
 以上のアリーレン基もしくはヘテロアリーレン基を単結合、エーテル結合、チオエーテル
 結合、炭素数 1 ~ 20 のアルキレン基、炭素数 2 ~ 20 のアルケニレン基、アミノ基で結
 合して得られる 2 価の基である。環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基としては、例えば
 、1, 4 - フェニレン基、1, 2 - フェニレン基、1, 3 - フェニレン基、1, 4 - ナフ
 チレン基、2, 6 - ナフチレン基、1, 5 - ナフチレン基、9, 10 - アントラニレン基
 、9, 10 - フェナントレニレン基、3, 6 - フェナントレニレン基、1, 6 - ピレニレ
 ン基、2, 7 - ピレニレン基、6, 12 - クリセニレン基、4, 4' - ビフェニレン基、

3, 3' - ビフェニレン基、2, 2' - ビフェニレン基、2, 7 - フルオレニレン基等が挙げられる。環形成原子数 5 ~ 50 のアリーレン基としては、例えば、2, 5 - チオフェニレン基、2, 5 - シローリレン基、2, 5 - オキサジアゾーリレン基等が挙げられる。好ましくは 1, 4 - フェニレン基、1, 2 - フェニレン基、1, 3 - フェニレン基、1, 4 - ナフチレン基、9, 10 - アントラニレン基、6, 12 - クリセニレン基、4, 4' - ビフェニレン基、3, 3' - ビフェニレン基、2, 2' - ビフェニレン基、2, 7 - フルオレニレン基である。

【0131】

L が 2 個以上のアリーレン基またはヘテロアリーレン基からなる連結基である場合、隣り合うアリーレン基またはヘテロアリーレン基は 2 価の基を介して互いに結合して新たな環を形成してもよい。環を形成する 2 価基の例としては、テトラメチレン基、ペンタメチレン基、ヘキサメチレン基、ジフェニルメタン - 2, 2' - ジイル基、ジフェニルエタン - 3, 3' - ジイル基、ジフェニルプロパン - 4, 4' - ジイル基等が挙げられる。

【0132】

$Ar^1 \sim Ar^4$ および L の置換基としては、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基または置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基で置換されたアミノ基、ハロゲン基、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基等である。

【0133】

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基の例としては、フェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル) フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニルイル基、4'' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基、フルオランテニル基、フルオレニル基等が挙げられる。

【0134】

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基の例としては、1 - ピロリル基、2 - ピロリル基、3 - ピロリル基、ピラジニル基、2 - ピリジニル基、3 - ピリジニル基、4 - ピリジニル基、1 - インドリル基、2 - インドリル基、3 - インドリル基、4 - インドリル基、5 - インドリル基、6 - インドリル基、7 - インドリル基、1 - イソインドリル基、2 - イソインドリル基、3 - イソインドリル基、4 - イソインドリル基、5 - イソインドリル基、6 - イソインドリル基、7 - イソインドリル基、2 - フリル基、3 - フリル基、2 - ベンゾフラニル基、3 - ベンゾフラニル基、4 - ベンゾフラニル基、5 - ベンゾフラニル基、6 - ベンゾフラニル基、7 - ベンゾフラニル基、1 - イソベンゾフラニル基、3 - イソベンゾフラニル基、4 - イソベンゾフラニル基、5 - イソベンゾフラニル基、6 - イソベンゾフラニル基、7 - イソベンゾフラニル基、キノリル基、3 - キノリル基、4 - キノリル基、5 - キノリル基、6 - キノリル基、7 - キノリル基、8 - キノリ

10

20

30

40

50

ル基、1 - イソキノリル基、3 - イソキノリル基、4 - イソキノリル基、5 - イソキノリル基、6 - イソキノリル基、7 - イソキノリル基、8 - イソキノリル基、2 - キノキサリニル基、5 - キノキサリニル基、6 - キノキサリニル基、1 - カルバゾリル基、2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、9 - カルバゾリル基、1 - フェナンスリジニル基、2 - フェナンスリジニル基、3 - フェナンスリジニル基、4 - フェナンスリジニル基、6 - フェナンスリジニル基、7 - フェナンスリジニル基、8 - フェナンスリジニル基、9 - フェナンスリジニル基、10 - フェナンスリジニル基、1 - アクリジニル基、2 - アクリジニル基、3 - アクリジニル基、4 - アクリジニル基、9 - アクリジニル基、1, 7 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1 - フェナジニル基、2 - フェナジニル基、1 - フェノチアジニル基、2 - フェノチアジニル基、3 - フェノチアジニル基、4 - フェノチアジニル基、10 - フェノチアジニル基、1 - フェノキサジニル基、2 - フェノキサジニル基、3 - フェノキサジニル基、4 - フェノキサジニル基、10 - フェノキサジニル基、2 - オキサゾリル基、4 - オキサゾリル基、5 - オキサゾリル基、2 - オキサジアゾリル基、5 - オキサジアゾリル基、3 - フラザニル基、2 - チエニル基、3 - チエニル基、2 - メチルピロール - 1 - イル基、2 - メチルピロール - 3 - イル基、2 - メチルピロール - 4 - イル基、2 - メチルピロール - 5 - イル基、3 - メチルピロール - 1 - イル基、3 - メチルピロール - 2 - イル基、3 - メチルピロール - 4 - イル基、3 - メチルピロール - 5 - イル基、2 - t - ブチルピロール - 4 - イル基、3 - (2 - フェニルプロピル)ピロール - 1 - イル基、2 - メチル - 1 - インドリル基、4 - メチル - 1 - インドリル基、2 - メチル - 3 - インドリル基、4 - メチル - 3 - インドリル基、2 - t - ブチル 1 - インドリル基、4 - t - ブチル 1 - インドリル基、2 - t - ブチル 3 - インドリル基、4 - t - ブチル 3 - インドリル基等が挙げられる。

【0135】

置換又は無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、s - ブチル基、イソブチル基、t - ブチル基

、n - ペンチル基、n - ヘキシル基、n - ヘプチル基、n - オクチル基、ヒドロキシメチル基、1 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシイソブチル基、1, 2 - ジヒドロキシエチル基、1, 3 - ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3 - ジヒドロキシ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1 - クロロエチル基、2 - クロロエチル基、2 - クロロイソブチル基、1, 2 - ジクロロエチル基、1, 3 - ジクロロイソプロピル基、2, 3 - ジクロロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリクロロプロピル基、ブromoメチル基、1 - ブromoエチル基、2 - ブromoエチル基、2 - ブromoイソブチル基、1, 2 - ジブromoエチル基、1, 3 - ジブromoイソプロピル基、2, 3 - ジブromo - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリブromoプロピル基、ヨードメチル基、1 - ヨードエチル基、2 - ヨードエチル基、2 - ヨードイソブチル基、1, 2 - ジヨードエチル基、1, 3 - ジヨードイソプロピル基、2, 3 - ジヨード - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1 - アミノエチル基、2 - アミノエチル基、2 - アミノイソブチル基、1, 2 - ジアミノエチル基、1, 3 - ジアミノイソプロピル基、2, 3 - ジアミノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基、2 - シアノイソブチル基、1, 2 - ジシアノエチル基、1, 3 - ジシアノイソプロピル基、2, 3 - ジシアノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1 - ニトロエチル基、2 - ニトロエチル基、2 - ニトロイソブチル基、1, 2 - ジニトロエチル基、1, 3 - ジニトロイソプロピル基、2, 3 - ジニトロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリニトロプロピル基等が挙げられる。

10

20

【0136】

置換もしくは無置換の炭素数3～50のシクロアルキル基の例としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、4 - メチルシクロヘキシル基、1 - アダマンチル基、2 - アダマンチル基、1 - ノルボルニル基、2 - ノルボルニル基等が挙げられる。

【0137】

置換又は無置換の炭素数1～50のアルコキシ基は、- OYで表される基である。Yの例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、s - ブチル基、イソブチル基、t - ブチル基、n - ペンチル基、n - ヘキシル基、n - ヘプチル基、n - オクチル基、ヒドロキシメチル基、1 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシイソブチル基、1, 2 - ジヒドロキシエチル基、1, 3 - ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3 - ジヒドロキシ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1 - クロロエチル基、2 - クロロエチル基、2 - クロロイソブチル基、1, 2 - ジクロロエチル基、1, 3 - ジクロロイソプロピル基、2, 3 - ジクロロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリクロロプロピル基、ブromoメチル基、1 - ブromoエチル基、2 - ブromoエチル基、2 - ブromoイソブチル基、1, 2 - ジブromoエチル基、1, 3 - ジブromoイソプロピル基、2, 3 - ジブromo - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリブromoプロピル基、ヨードメチル基、1 - ヨードエチル基、2 - ヨードエチル基、2 - ヨードイソブチル基、1, 2 - ジヨードエチル基、1, 3 - ジヨードイソプロピル基、2, 3 - ジヨード - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1 - アミノエチル基、2 - アミノエチル基、2 - アミノイソブチル基、1, 2 - ジアミノエチル基、1, 3 - ジアミノイソプロピル基、2, 3 - ジアミノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基、2 - シアノイソブチル基、1, 2 - ジシアノエチル基、1, 3 - ジシアノイソプロピル基、2, 3 - ジシアノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1 - ニトロエチル基、2 - ニトロエチル基、2 - ニトロイソブチル基、1, 2 - ジニトロエチル基、1, 3 - ジニトロイソプロピル基、2, 3 - ジニトロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリニトロプロピル基等が挙げられる。

30

40

【0138】

置換又は無置換の炭素数7～50のアラルキル基の例としては、ベンジル基、1 - フェ

50

ニルエチル基、2 - フェニルエチル基、1 - フェニルイソプロピル基、2 - フェニルイソプロピル基、フェニル - t - ブチル基、 α - ナフチルメチル基、1 - α - ナフチルエチル基、2 - α - ナフチルエチル基、1 - α - ナフチルイソプロピル基、2 - α - ナフチルイソプロピル基、 β - ナフチルメチル基、1 - β - ナフチルエチル基、2 - β - ナフチルエチル基、1 - β - ナフチルイソプロピル基、2 - β - ナフチルイソプロピル基、1 - ピロリルメチル基、2 - (1 - ピロリル)エチル基、p - メチルベンジル基、m - メチルベンジル基、o - メチルベンジル基、p - クロロベンジル基、m - クロロベンジル基、o - クロロベンジル基、p - ブロモベンジル基、m - ブロモベンジル基、o - ブロモベンジル基、p - ヨードベンジル基、m - ヨードベンジル基、o - ヨードベンジル基、p - ヒドロキシベンジル基、m - ヒドロキシベンジル基、o - ヒドロキシベンジル基、p - アミノベンジル基、m - アミノベンジル基、o - アミノベンジル基、p - ニトロベンジル基、m - ニトロベンジル基、o - ニトロベンジル基、p - シアノベンジル基、m - シアノベンジル基、o - シアノベンジル基、1 - ヒドロキシ - 2 - フェニルイソプロピル基、1 - クロロ - 2 - フェニルイソプロピル基等が挙げられる。

【0139】

置換又は無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基は、-OY'と表され、Y'の例としてはフェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナフトセニル基、2 - ナフトセニル基、9 - ナフトセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニルイル基、4'' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基等が挙げられる。

【0140】

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリールオキシ基は、-OZ'と表され、Z'の例としては2 - ピロリル基、3 - ピロリル基、ピラジニル基、2 - ピリジニル基、3 - ピリジニル基、4 - ピリジニル基、2 - インドリル基、3 - インドリル基、4 - インドリル基、5 - インドリル基、6 - インドリル基、7 - インドリル基、1 - イソインドリル基、3 - イソインドリル基、4 - イソインドリル基、5 - イソインドリル基、6 - イソインドリル基、7 - イソインドリル基、2 - フリル基、3 - フリル基、2 - ベンゾフラニル基、3 - ベンゾフラニル基、4 - ベンゾフラニル基、5 - ベンゾフラニル基、6 - ベンゾフラニル基、7 - ベンゾフラニル基、1 - イソベンゾフラニル基、3 - イソベンゾフラニル基、4 - イソベンゾフラニル基、5 - イソベンゾフラニル基、6 - イソベンゾフラニル基、7 - イソベンゾフラニル基、2 - キノリル基、3 - キノリル基、4 - キノリル基、5 - キノリル基、6 - キノリル基、7 - キノリル基、8 - キノリル基、1 - イソキノリル基、3 - イソキノリル基、4 - イソキノリル基、5 - イソキノリル基、6 - イソキノリル基、7 - イソキノリル基、8 - イソキノリル基、2 - キノキサリニル基、5 - キノキサリニル基、6 - キノキサリニル基、1 - カルバゾリル基、2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、1 - フェナンスリジニル基、2 - フェナンスリジニル基、3 - フェナンスリジニル基、4 - フェナンスリジニル基、6 - フェナンスリジニル基、7 - フェナンスリジニル基、8 - フェナンスリジニル基、9 - フェナンスリジニル基、10 - フェナンスリジニル基、1 - アクリジニル基、2 - アクリジニル基、3 - アクリジニル基、4 - アクリジニル基、9 - アクリジニル基、1, 7 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、

10

20

30

40

50

1, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1 - フェナジニル基、2 - フェナジニル基、1 - フェノチアジニル基、2 - フェノチアジニル基、3 - フェノチアジニル基、4 - フェノチアジニル基、1 - フェノキサジニル基、2 - フェノキサジニル基、3 - フェノキサジニル基、4 - フェノキサジニル基、2 - オキサゾリル基、4 - オキサゾリル基、5 - オキサゾリル基、2 - オキサジアゾリル基、5 - オキサジアゾリル基、3 - フラザニル基、2 - チエニル基、3 - チエニル基、2 - メチルピロール - 1 - イル基、2 - メチルピロール - 3 - イル基、2 - メチルピロール - 4 - イル基、2 - メチルピロール - 5 - イル基、3 - メチルピロール - 1 - イル基、3 - メチルピロール - 2 - イル基、3 - メチルピロール - 4 - イル基、3 - メチルピロール - 5 - イル基、2 - t - ブチルピロール - 4 - イル基、3 - (2 - フェニルプロピル)ピロール - 1 - イル基、2 - メチル - 1 - インドリル基、4 - メチル - 1 - インドリル基、2 - メチル - 3 - インドリル基、4 - メチル - 3 - インドリル基、2 - t - ブチル 1 - インドリル基、4 - t - ブチル 1 - インドリル基、2 - t - ブチル 3 - インドリル基、4 - t - ブチル 3 - インドリル基等が挙げられる。

【0141】

置換又は無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールチオ基は、-SY"と表され、Y"の例としてはフェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニルイル基、4" - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基等が挙げられる。

【0142】

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリールチオ基は、-SZ"と表

10

20

30

40

50

され、Z”の例としては2-ピロリル基、3-ピロリル基、ピラジニル基、2-ピリジニル基、3-ピリジニル基、4-ピリジニル基、2-インドリル基、3-インドリル基、4-インドリル基、5-インドリル基、6-インドリル基、7-インドリル基、1-イソインドリル基、3-イソインドリル基、4-イソインドリル基、5-イソインドリル基、6-イソインドリル基、7-イソインドリル基、2-フリル基、3-フリル基、2-ベンゾフラニル基、3-ベンゾフラニル基、4-ベンゾフラニル基、5-ベンゾフラニル基、6-ベンゾフラニル基、7-ベンゾフラニル基、1-イソベンゾフラニル基、3-イソベンゾフラニル基、4-イソベンゾフラニル基、5-イソベンゾフラニル基、6-イソベンゾフラニル基、7-イソベンゾフラニル基、2-キノリル基、3-キノリル基、4-キノリル基、5-キノリル基、6-キノリル基、7-キノリル基、8-キノリル基、1-イソキノリル基、3-イソキノリル基、4-イソキノリル基、5-イソキノリル基、6-イソキノリル基、7-イソキノリル基、8-イソキノリル基、2-キノキサリニル基、5-キノキサリニル基、6-キノキサリニル基、1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、1-フェナンスリジニル基、2-フェナンスリジニル基、3-フェナンスリジニル基、4-フェナンスリジニル基、6-フェナンスリジニル基、7-フェナンスリジニル基、8-フェナンスリジニル基、9-フェナンスリジニル基、10-フェナンスリジニル基、1-アクリジニル基、2-アクリジニル基、3-アクリジニル基、4-アクリジニル基、9-アクリジニル基、1,7-フェナンスロリン-2-イル基、1,7-フェナンスロリン-3-イル基、1,7-フェナンスロリン-4-イル基、1,7-フェナンスロリン-5-イル基、1,7-フェナンスロリン-6-イル基、1,7-フェナンスロリン-8-イル基、1,7-フェナンスロリン-9-イル基、1,7-フェナンスロリン-10-イル基、1,8-フェナンスロリン-2-イル基、1,8-フェナンスロリン-3-イル基、1,8-フェナンスロリン-4-イル基、1,8-フェナンスロリン-5-イル基、1,8-フェナンスロリン-6-イル基、1,8-フェナンスロリン-7-イル基、1,8-フェナンスロリン-9-イル基、1,8-フェナンスロリン-10-イル基、1,9-フェナンスロリン-2-イル基、1,9-フェナンスロリン-3-イル基、1,9-フェナンスロリン-4-イル基、1,9-フェナンスロリン-5-イル基、1,9-フェナンスロリン-6-イル基、1,9-フェナンスロリン-7-イル基、1,9-フェナンスロリン-8-イル基、1,9-フェナンスロリン-10-イル基、1,10-フェナンスロリン-2-イル基、1,10-フェナンスロリン-3-イル基、1,10-フェナンスロリン-4-イル基、1,10-フェナンスロリン-5-イル基、2,9-フェナンスロリン-1-イル基、2,9-フェナンスロリン-3-イル基、2,9-フェナンスロリン-4-イル基、2,9-フェナンスロリン-5-イル基、2,9-フェナンスロリン-6-イル基、2,9-フェナンスロリン-7-イル基、2,9-フェナンスロリン-8-イル基、2,9-フェナンスロリン-10-イル基、2,8-フェナンスロリン-1-イル基、2,8-フェナンスロリン-3-イル基、2,8-フェナンスロリン-4-イル基、2,8-フェナンスロリン-5-イル基、2,8-フェナンスロリン-6-イル基、2,8-フェナンスロリン-7-イル基、2,8-フェナンスロリン-9-イル基、2,8-フェナンスロリン-10-イル基、2,7-フェナンスロリン-1-イル基、2,7-フェナンスロリン-3-イル基、2,7-フェナンスロリン-4-イル基、2,7-フェナンスロリン-5-イル基、2,7-フェナンスロリン-6-イル基、2,7-フェナンスロリン-8-イル基、2,7-フェナンスロリン-9-イル基、2,7-フェナンスロリン-10-イル基、1-フェナジニル基、2-フェナジニル基、1-フェノチアジニル基、2-フェノチアジニル基、3-フェノチアジニル基、4-フェノチアジニル基、1-フェノキサジニル基、2-フェノキサジニル基、3-フェノキサジニル基、4-フェノキサジニル基、2-オキサゾリル基、4-オキサゾリル基、5-オキサゾリル基、2-オキサジアゾリル基、5-オキサジアゾリル基、3-フラザニル基、2-チエニル基、3-チエニル基、2-メチルピロール-1-イル基、2-メチルピロール-3-イル基、2-メチルピロール-4-イル基、2-メチルピロール-5-イル基、3-メチルピロール-1-イル基、3-メチルピロール-2-イル基、3-メチル

10

20

30

40

50

ピロール - 4 - イル基、3 - メチルピロール - 5 - イル基、2 - t - ブチルピロール - 4 - イル基、3 - (2 - フェニルプロピル)ピロール - 1 - イル基、2 - メチル - 1 - インドリル基、4 - メチル - 1 - インドリル基、2 - メチル - 3 - インドリル基、4 - メチル - 3 - インドリル基、2 - t - ブチル 1 - インドリル基、4 - t - ブチル 1 - インドリル基、2 - t - ブチル 3 - インドリル基、4 - t - ブチル 3 - インドリル基等が挙げられる。

【0143】

置換又は無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルコキシカルボニル基は - COOZ と表され、Z の例としてはメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、s - ブチル基、イソブチル基、t - ブチル基、n - ペンチル基、n - ヘキシル基、n - ヘプチル基、n - オクチル基、ヒドロキシメチル基、1 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシイソブチル基、1, 2 - ジヒドロキシエチル基、1, 3 - ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3 - ジヒドロキシ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1 - クロロエチル基、2 - クロロエチル基、2 - クロロイソブチル基、1, 2 - ジクロロエチル基、1, 3 - ジクロロイソプロピル基、2, 3 - ジクロロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリクロロプロピル基、ブromoメチル基、1 - ブromoエチル基、2 - ブromoエチル基、2 - ブromoイソブチル基、1, 2 - ジブromoエチル基、1, 3 - ジブromoイソプロピル基、2, 3 - ジブromo - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリブromoプロピル基、ヨードメチル基、1 - ヨードエチル基、2 - ヨードエチル基、2 - ヨードイソブチル基、1, 2 - ジヨードエチル基、1, 3 - ジヨードイソプロピル基、2, 3 - ジヨード - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1 - アミノエチル基、2 - アミノエチル基、2 - アミノイソブチル基、1, 2 - ジアミノエチル基、1, 3 - ジアミノイソプロピル基、2, 3 - ジアミノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基、2 - シアノイソブチル基、1, 2 - ジシアノエチル基、1, 3 - ジシアノイソプロピル基、2, 3 - ジシアノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1 - ニトロエチル基、2 - ニトロエチル基、2 - ニトロイソブチル基、1, 2 - ジニトロエチル基、1, 3 - ジニトロイソプロピル基、2, 3 - ジニトロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリニトロプロピル基等が挙げられる。

【0144】

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基または置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の複素環基で置換されたアミノ基は - NPQ と表わされ、P、Q の例としては、フェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ビレニル基、2 - ビレニル基、4 - ビレニル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニルイル基、4'' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基、2 - ピロリル基、3 - ピロリル基、ピラジニル基、2 - ピリジニル基、3 - ピリジニル基、4 - ピリジニル基、2 - インドリル基、3 - インドリル基、4 - インドリル基、5 - インドリル基、6 - インドリル基、7 - インドリル基、1 - イソインドリル基、3 - イソインドリル基、4 - イソインドリル基、5 - イソインドリル基、6 - イソインドリル基、7 - イソインドリル基、2 - フリル基、3 - フリル基、2 - ベンゾフラニル基、3 - ベンゾフラニル基、4 - ベンゾフラニル基、5 - ベンゾフラニル基、6 - ベンゾフラニル基、7 - ベンゾフラニル基、1 - イソベンゾフラニル基、3 - イソベンゾフラニル基、4 - イソベンゾフラニル基、5 - イソベンゾフ

ラニル基、6 - イソベンゾフラニル基、7 - イソベンゾフラニル基、2 - キノリル基、3 - キノリル基、4 - キノリル基、5 - キノリル基、6 - キノリル基、7 - キノリル基、8 - キノリル基、1 - イソキノリル基、3 - イソキノリル基、4 - イソキノリル基、5 - イソキノリル基、6 - イソキノリル基、7 - イソキノリル基、8 - イソキノリル基、2 - キノキサリニル基、5 - キノキサリニル基、6 - キノキサリニル基、1 - カルバゾリル基、2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、1 - フェナンスリジニル基、2 - フェナンスリジニル基、3 - フェナンスリジニル基、4 - フェナンスリジニル基、6 - フェナンスリジニル基、7 - フェナンスリジニル基、8 - フェナンスリジニル基、9 - フェナンスリジニル基、10 - フェナンスリジニル基、1 - アクリジニル基、2 - アクリジニル基、3 - アクリジニル基、4 - アクリジニル基、9 - アクリジニル基、1, 7 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、2, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1 - フェナジニル基、2 - フェナジニル基、1 - フェノチアジニル基、2 - フェノチアジニル基、3 - フェノチアジニル基、4 - フェノチアジニル基、1 - フェノキサジニル基、2 - フェノキサジニル基、3 - フェノキサジニル基、4 - フェノキサジニル基、2 - オキサゾリル基、4 - オキサゾリル基、5 - オキサゾリル基、2 - オキサジアゾリル基、5 - オキサジアゾリル基、3 - フラザニル基、2 - チエニル基、3 - チエニル基、2 - メチルピロール - 1 - イル基、2 - メチルピロール - 3 - イル基、2 - メチルピロール - 4 - イル基、2 - メチルピロール - 5 - イル基、3 - メチルピロール - 1 - イル基、3 - メチルピロール - 2 - イル基、3 - メチルピロール - 4 - イル基、3 - メチルピロール - 5 - イル基、2 - t - ブチルピロール - 4 - イル基、3 - (2 - フェニルプロピル)ピロール - 1 - イル基、2 - メチル - 1 - インドリル基、4 - メチル - 1 - インドリル基、2 - メチル - 3 - インドリル基、4 - メチル - 3 - インドリル基、2 - t - ブチル 1 - インドリル基、4 - t - ブチル 1 - インドリル基、2 - t - ブチル 3 - インドリル基、4 - t - ブチル 3 - インドリル基等が挙げられる。

【0145】

一般式(I)の化合物の具体例を以下に記すが、これらに限定されるものではない。

10

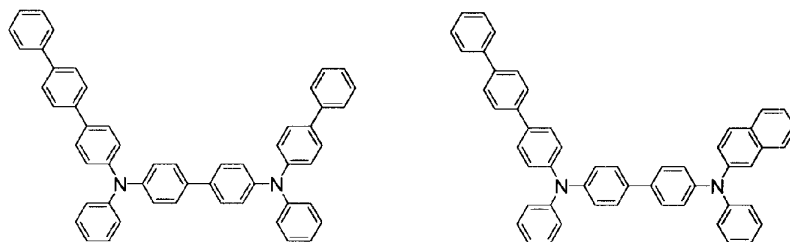
20

30

40

50

【化 5 2】

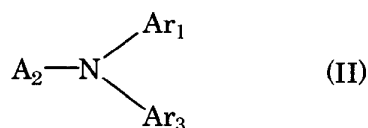


【 0 1 4 6 】

10

また、下記一般式 (II) の芳香族アミンも正孔注入層または正孔輸送層の形成に好適に用いられる。

【化 5 3】

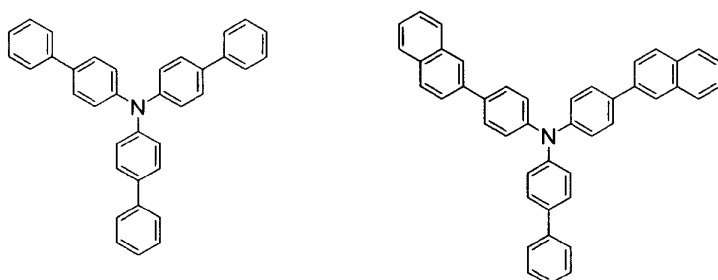


【 0 1 4 7 】

一般式 (II) において、 $\text{Ar}_1 \sim \text{Ar}_3$ の定義は前記一般式 (I) の $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^4$ の定義と同様である。以下に一般式 (II) の化合物の具体例を記すがこれらに限定されるものではない。

20

【化 5 4】



30

【 0 1 4 8 】

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

40

【 0 1 4 9 】

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

本発明の有機 EL 素子の各有機層の膜厚は特に制限されないが、一般に膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、逆に厚すぎると高い印加電圧が必要となり効率が悪

50

くなるため、通常は数 nm から 1 μm の範囲が好ましい。

【実施例】

【0150】

次に、合成例および実施例を用いて本発明をさらに詳細に説明する。ただし、本発明は以下の合成例、実施例に限定されない。

【0151】

有機 EL 素子の評価方法は下記の通りである。

(1) 外部量子効率 (%)

23、乾燥窒素ガス雰囲気下で、輝度 1000 cd/m² 時の外部量子効率を輝度計 (ミノルタ社製分光輝度放射計 CS-1000) を用いて測定した。

10

(2) 半減寿命 (時間)

初期輝度 1000 cd/m² で連続通電試験 (直流) をおこない、初期輝度が半減するまでの時間を測定した。

(3) 電圧 (V)

23、乾燥窒素ガス雰囲気下で、KEITHLY 236 SOURCE MEASURE UNIT を用いて、電気配線された素子に電圧を印加して発光させ、素子以外の配線抵抗にかかる電圧を差し引いて素子印加電圧を測定した。電圧の印加・測定と同時に輝度計 (ミノルタ社製分光輝度放射計 CS-1000) を用いて輝度測定も行い、これらの測定結果から素子輝度が 100 cd/m² 時の電圧を読み取った。

(4) 三重項エネルギー

20

試料を EPA 溶媒 (ジエチルエーテル : イソペンタン : エタノール = 5 : 5 : 2 (容積比)) に 10 μmol/L で溶解させ、燐光測定用試料とする。この燐光測定用試料を石英セルに入れ、温度 77 K で励起光を照射し、放射される燐光の燐光スペクトルを測定する。これを基に換算式 $E^T(\text{eV}) = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$ によって求めた値と定義する。「 λ_{edge} 」とは、縦軸にりん光強度、横軸に波長をとって、りん光スペクトルを表したときに、りん光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸の交点の波長値 (単位 : nm) を意味する。

(5) ガラス転移点

3 mg 程度の試料を用い、Perkin Elmer 社製 DSC 8500 を用い、以下の (1) ~ (6) までの 2 サイクルの昇降温プロセスを行い、(6) の昇温時の DSC 曲線のベースラインが段状に変化している変曲点の立ち上がり温度を持って定義した。

30

(1) 30 で 1 分間保持する。

(2) 30 から試料の熱分解温度未満の一定温度まで昇温速度 10 /min で加熱する。

(3) 三分間該一定温度にて 3 分間保持する。

(4) 該一定温度から 0 まで 200 /min で冷却する。

(5) 0 で 10 分間保持する。

(6) 0 から 200 まで昇温速度 10 /min で加熱する。

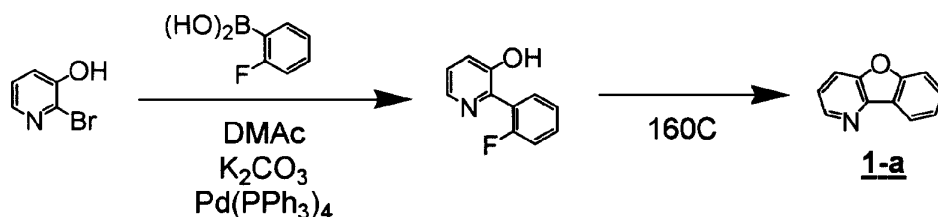
【0152】

合成例 1 (化合物 (1) の合成)

40

(1) 化合物 (1-a) の合成

【化 55】



50

【 0 1 5 3 】

三口フラスコに2 - ブロモ - 3 - ヒドロキシピリジン 1 0 0 . 1 g (5 7 5 m m o l)、2 - フルオロフェニルボロン酸 8 8 . 5 g (6 3 2 . 5 m m o l)、炭酸カリウム 8 8 . 5 g (2 3 0 0 m m o l)、N , N - ジメチルアセトアミド 1 1 5 0 m l、P d (P P h ₃)₄ 1 3 . 3 g (1 1 . 5 m m o l)を入れ、窒素雰囲気下にて 9 0 ° で 1 2 時間加熱撹拌した後、1 6 0 ° で 8 時間過熱撹拌した。

反応終了後、室温まで冷却した後、試料溶液にトルエン 1 L、水 1 Lを加え、分液ロートに移して良く振り、トルエン相を回収し、水相からトルエンで数回抽出した。このトルエン溶液をさらに水で数回洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥し、シリカゲルショートカラムを通し、濃縮した。得られた試料をヘキサン 2 0 0 m l から再結晶して薄く黄色を帯びた固体を得た。

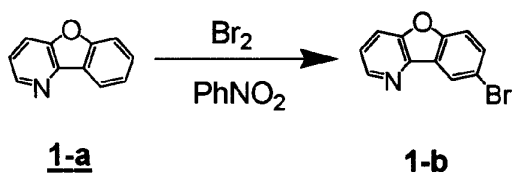
10

同定は¹H - N M Rによって行った。収量は 5 4 . 4 g、収率は 5 6 %であった。

【 0 1 5 4 】

(2) 化合物 (1 - b) の合成

【 化 5 6 】



20

【 0 1 5 5 】

三口フラスコに化合物 1 - a 5 2 . 6 g (3 1 0 m m o l)、ニトロベンゼン 1 5 5 m l、臭素 1 9 . 1 m l (3 7 2 m m o l)を入れ、大気雰囲気下 1 4 0 ° で 1 2 時間加熱撹拌した。

反応終了後、室温まで冷却した後、試料溶液を氷水浴で冷やしながらチオ硫酸ナトリウム水溶液を加えて残存臭素を失活し、さらに水酸化ナトリウム水溶液を加えて水相が p H 1 0 になるよう調整した。溶液を分液ロートに移し、トルエンにて数回抽出した。これを無水硫酸マグネシウムで乾燥し、ろ過、濃縮した。これをシリカゲルクロマトグラフィー (C H ₂ C l ₂ : A c O E t = 8 : 2) にて精製し、得られた試料をヘキサンで分散洗浄、ろ取、真空乾燥 (4 0 ° 、 6 時間) して薄く黄色を帯びた固体を得た。

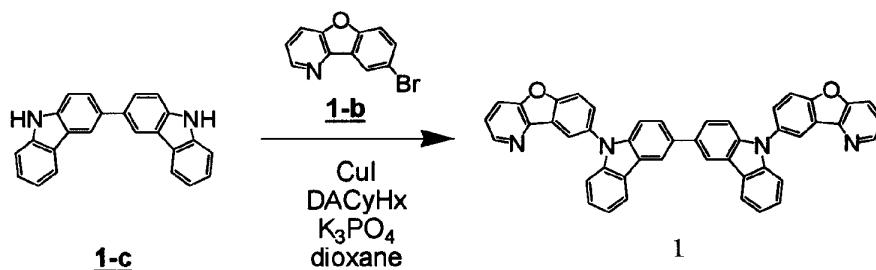
30

同定は¹H - N M Rによって行った。収量は 3 2 . 1 g、収率は 4 2 %であった。

【 0 1 5 6 】

(3) 化合物 (1) の合成

【 化 5 7 】



40

【 0 1 5 7 】

三口フラスコに化合物 1 - c 6 . 6 5 g (2 0 m m o l)、化合物 1 - b 1 0 . 9 2 g (4 4 m m o l)、K₃ P O₄ 1 6 . 9 8 g (8 0 m m o l)、C u I 3 . 8 1 g (2 0 m m o l)、t r a n s - 1 , 2 - ジアミノシクロヘキサン 7 . 2 m l (6 0 m m o l)、1 , 4 - ジオキサン 8 0 m l を入れ、窒素雰囲気下にて 2 4 時間還流させた。

50

反応終了後、試料溶液にメタノール 80 ml と水 80 ml を加え、超音波洗浄を 10 分間行った後、析出試料をろ取し、メタノールと水で洗浄した。試料を乾燥させた後、*o*-キシレン 1 l に加熱して溶解させ、室温まで冷却した後、すぐにシリカゲルショートカラムを通して原点不純物を除去し、溶液を濃縮した。これを *o*-キシレン：酢酸エチル = 1：1 混合溶媒から 3 回再結晶して白色の固体を得た。

同定は¹H-NMR と FD/MS による分子量測定によって行った。収量は 4.5 g、収率は 34% であった。また、三重項エネルギー及びガラス転移点を測定し、結果を表 2 に示す。

【0158】

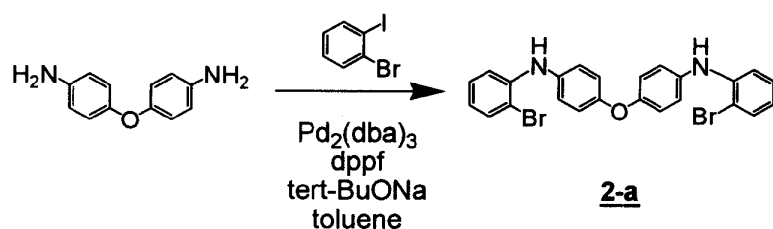
合成例 2 (化合物 (2) の合成)

10

【0159】

(1) 化合物 (2-a) の合成

【化 58】



20

【0160】

三口フラスコに 4,4'-ジアミノジフェニルエーテル 48.1 g (240 mmol)、2-ブロモヨードベンゼン 149.4 g (528 mmol)、*tert*-BuONa 92.3 g (960 mmol)、Pd₂(dba)₃ 2.2 g (2.4 mmol)、1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン 2.66 g (4.8 mmol)、トルエン 960 ml を入れて、窒素雰囲気下、8 時間還流させた。

反応終了後、水 500 ml を加えた後、分液ロートに移し、酢酸エチルにて数回抽出した。これを無水硫酸マグネシウムで乾燥し、ろ過、濃縮した。これをシリカゲルクロマトグラフィー(トルエン：ヘキサン = 3：7)で精製し、無色の粘体を得た。

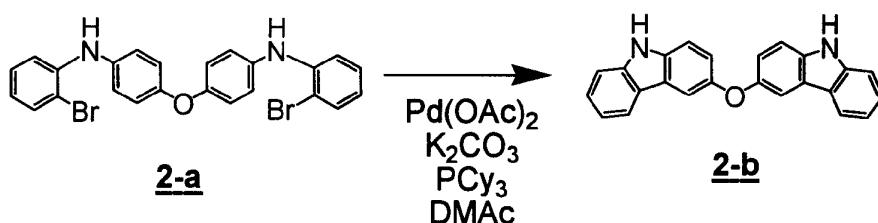
30

同定は¹H-NMR と FD/MS による分子量測定によって行った。収量は 109.6 g、収率は 90% であった。

【0161】

(2) 化合物 (2-b) の合成

【化 59】



40

【0162】

三口フラスコに化合物 2-a 28.01 g (54.9 mmol)、酢酸パラジウム 2.47 g (10.98 mmol)、炭酸カリウム 30.35 g (mmol)、N,N-ジメチルアセトアミド 274 ml、トリシクロヘキシルホスフィン(トルエン溶液(20 wt%)) 30.8 ml (21.96 mmol) を入れ、窒素雰囲気下で 150℃、8 時間加熱撹拌した。

反応終了後、試料溶液をセライトを通して無機塩をろ別し、ろ液を水 1 l に注ぎ込み、

50

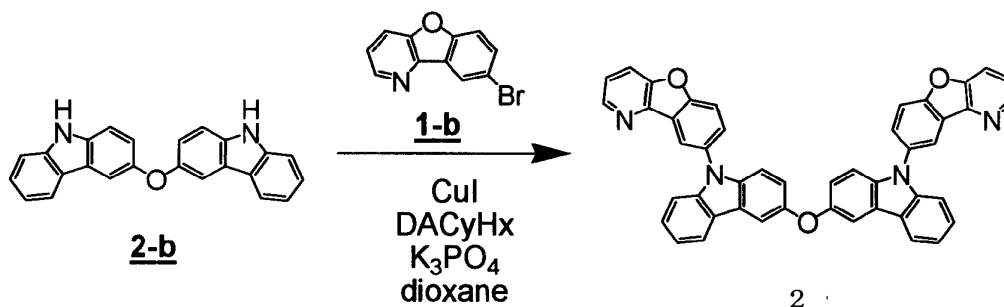
析出した試料をろ取した。試料をメタノール：酢酸エチル = 200 ml : 200 ml の混合溶媒で分散洗浄し、ろ取、真空乾燥 (60℃、4 時間) を行い白色の固体を得た。

同定は¹H-NMR と FD/MS による分子量測定によって行った。収量は 13.63 g、収率は 71% であった。

【0163】

(3) 化合物 (2) の合成

【化60】



10

【0164】

原料として化合物 1-c に代えて化合物 2-b を用いた以外は合成例 1 - (3) 化合物 (1) の合成と同様にして合成した。また、三重項エネルギーを測定し、結果を表 2 に示す。

20

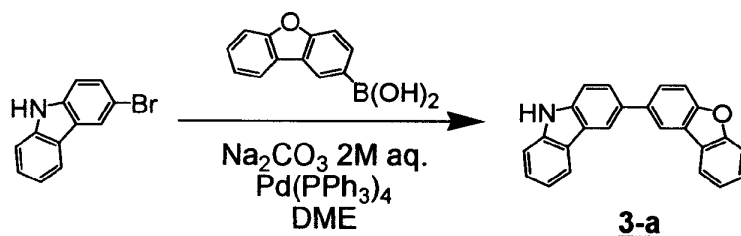
【0165】

合成例 3 (化合物 (3) の合成)

【0166】

(1) 化合物 (3-a) の合成

【化61】



30

【0167】

三口フラスコに 3-ブロモカルバゾール 12.31 g (50 mmol)、2-ジベンゾフランボロン酸 11.66 g (55 mmol)、炭酸ナトリウム 2M 水溶液 50 ml、1,2-ジメトキシエタン 50 ml、Pd(PPh₃)₄ 1.16 g (1.0 mmol) を入れ、窒素雰囲気下にて 12 時間還流させた。

反応終了後、試料溶液を分液ロートに移し、ジクロロメタンにて数回抽出した。これを無水硫酸マグネシウムで乾燥、ろ過、濃縮した。これを酢酸エチル：メタノール = 1 : 2 混合溶媒で分散洗浄して白色の固体を得た。

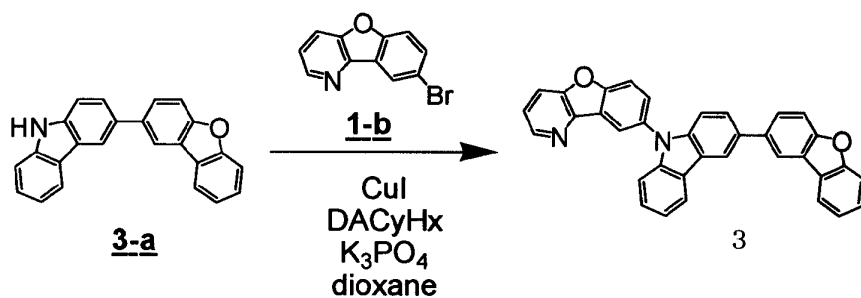
40

収量は 16.27 g、収率は 65% であった。

【0168】

(2) 化合物 (3) の合成

【化 6 2】



10

【0169】

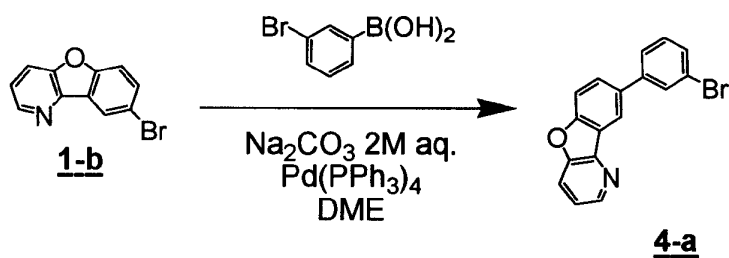
原料として化合物 1 - c に代えて化合物 3 - a を用いた以外は合成例 1 - (3) 化合物 (1) の合成と同様にして合成した。また、三重項エネルギーを測定し、結果を表 2 に示す。

【0170】

合成例 4 (化合物 (4) の合成)

(1) 化合物 (4 - a) の合成

【化 6 3】



20

【0171】

三口フラスコに化合物 1 - b 12.40 g (50 mmol)、3 - ブロモフェニルボロン酸 12.04 g (60 mmol)、炭酸ナトリウム 2 M 水溶液 50 ml、1, 2 - ジメトキシエタン 50 ml、Pd(PPh₃)₄ 1.16 g (1.0 mmol) を入れ、窒素雰囲気下にて 12 時間還流させた。

30

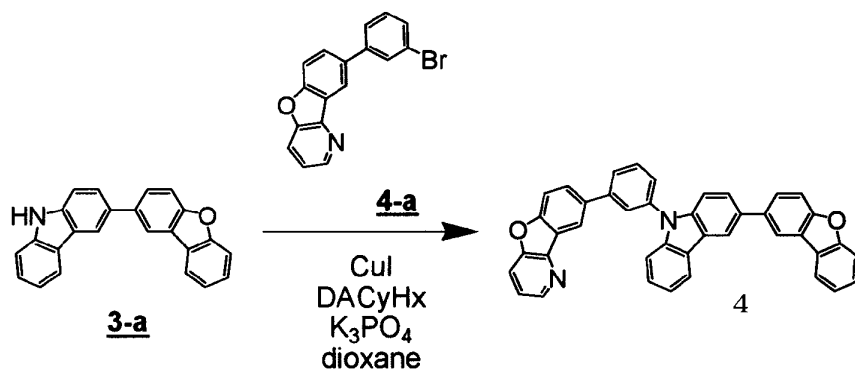
反応終了後、試料溶液を分液ロートに移し、ジクロロメタンにて数回抽出した。これを無水硫酸マグネシウムで乾燥、ろ過、濃縮した。これをシリカゲルクロマトグラフィー (ジクロロメタン : 酢酸エチル = 9 : 1) で精製し、無色の粘体を得た。

収量は 5.02 g、収率は 31% であった。

【0172】

(2) 化合物 (4) の合成

【化 6 4】



40

50

【 0 1 7 3 】

原料として化合物 1 - c に代えて化合物 3 - a、化合物 1 - b に代えて化合物 4 - a を用いた以外は合成例 1 - (3) 化合物 (1) の合成と同様にして合成した。また、三重項エネルギーを測定し、結果を表 2 に示す。

【 0 1 7 4 】

合成例 5 ~ 1 0

合成例 1 ~ 4 と同様にして、パラジウム触媒や銅触媒等を用いたカップリング反応や閉環反応、その他当業者に公知の有機合成反応により、後述の化合物 (5) ~ (1 0) を合成した。

【 0 1 7 5 】

10

実施例 1

膜厚 1 3 0 n m の I T O 電極ライン付きガラス基板 (ジオマティック社製) を、イソプロピルアルコール中で 5 分間、超音波洗浄した後、U V オゾン洗浄を 3 0 分間行なった。

洗浄後の I T O 電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず I T O 電極ラインが形成されている側の面上に、I T O 電極ラインを覆うようにして化合物 (H I 1) を厚さ 2 0 n m で、次いで化合物 (H T 1) を厚さ 6 0 n m で抵抗加熱蒸着し、順次薄膜を成膜した。成膜レートは 1 / s とした。これらの薄膜は、それぞれ正孔注入層及び正孔輸送層として機能する。

次に、正孔注入・輸送層上に、化合物 (H 1) と化合物 (B D 1) を同時に抵抗加熱蒸着して膜厚 5 0 n m の薄膜を成膜した。このとき、化合物 (B D 1) を、化合物 (H 1) と化合物 (B D 1) の総質量に対し質量比で 2 0 % になるように蒸着した。成膜レートはそれぞれ 1 . 2 / s 、 0 . 3 / s とした。この薄膜は、燐光発光層として機能する。尚、化合物 (B D 1) の三重項エネルギーを表 2 に示す。

20

次に、この燐光発光層上に、化合物 (1) を抵抗加熱蒸着して膜厚 1 0 n m の薄膜を成膜した。成膜レートは 1 . 2 / s とした。この薄膜は障壁層として機能する。

次に、この障壁層上に、化合物 (E T 1) を抵抗加熱蒸着して膜厚 1 0 n m の薄膜を成膜した。成膜レートは 1 / s とした。この膜は電子注入層として機能する。

次に、この電子注入層上に膜厚 1 . 0 n m の L i F を成膜レート 0 . 1 / s で蒸着した。

次に、この L i F 膜上に金属アルミニウムを成膜レート 8 . 0 / s にて蒸着し、膜厚 8 0 n m の金属陰極を形成して有機 E L 素子を得た。

30

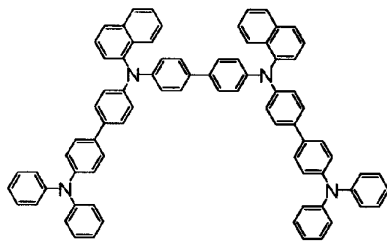
【 0 1 7 6 】

実施例 2 ~ 4 及び比較例 1

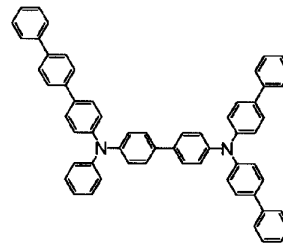
実施例 1 において、化合物 (1) を用いる代わりに表 1 に記載の化合物を用いて障壁層を形成した以外は実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

【 0 1 7 7 】

【化 6 5】

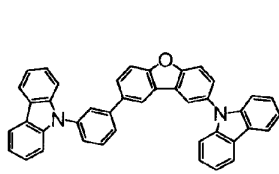


化合物 (H I 1)

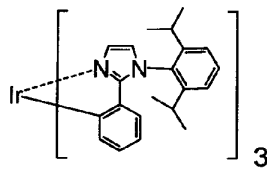


化合物 (H T 1)

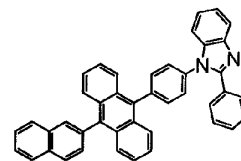
10



化合物 (H 1)

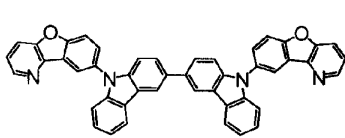


化合物 (B D 1)

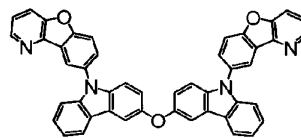


化合物 (E T 1)

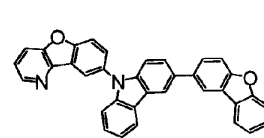
20



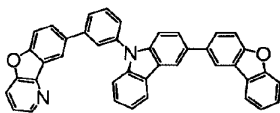
化合物 (1)



化合物 (2)



化合物 (3)



化合物 (4)

30

【 0 1 7 8】

【表 1】

表 1

	障壁層	電圧 (V)	外部量子効率 (%)	半減寿命 (時間)
実施例 1	化合物 (1)	3. 2	1 8. 5	4 8 0 0
実施例 2	化合物 (2)	3. 4	1 8. 0	4 2 0 0
実施例 3	化合物 (3)	3. 3	1 8. 3	5 3 0 0
実施例 4	化合物 (4)	3. 5	1 7. 5	5 2 0 0
比較例 1	化合物 (H 1)	5. 7	1 4. 3	5 0 0 0

40

【 0 1 7 9】

【表 2】

表 2

化合物	三重項エネルギー (eV)	ガラス転移点 (℃)
化合物 (1)	2.94	162
化合物 (2)	2.97	149
化合物 (3)	2.95	111
化合物 (4)	2.95	118
化合物 (H 1)	3.03	126
化合物 (B D 1)	2.64	—

10

【0180】

表 1 より、本発明の化合物 (1) ~ (4) は、長寿命であり、かつ、比較例の化合物よりも低電圧且つ高効率で駆動する有機 EL 素子を提供できることがわかる。

また、本発明の有機 EL 素子は、障壁層を構成する化合物 (1) ~ (4) の三重項エネルギーと、燐光性ドーパントである化合物 (B D 1) の三重項エネルギーとが、 $0.2 \text{ eV} < \Delta E^T = E_{TB}^T - E_d^T$ の関係を満たし、効率の高いものである。

20

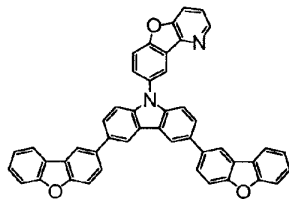
【0181】

実施例 5 ~ 10 及び比較例 2 ~ 3

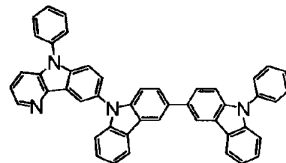
実施例 1 において、化合物 (1) を用いる代わりに表 3 に記載の化合物を用いて障壁層を形成した以外は実施例 1 と同様にして有機 EL 素子を作製した。

【0182】

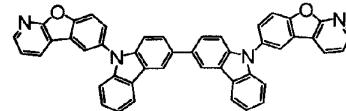
【化 6 6】



化合物 (5)

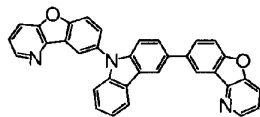


化合物 (6)

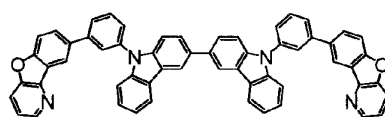


化合物 (7)

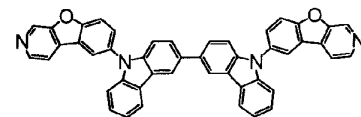
30



化合物 (8)

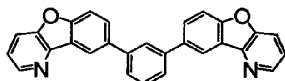


化合物 (9)

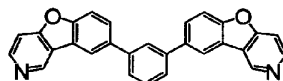


化合物 (10)

40



化合物 (H 2)



化合物 (H 3)

【0183】

【表 3】

表 3

	障壁層	電圧 (V)	外部量子効率 (%)	半減寿命 (時間)
実施例 5	化合物 (5)	4.1	16.7	4700
実施例 6	化合物 (6)	4.6	16.4	5000
実施例 7	化合物 (7)	5.3	16.2	4800
実施例 8	化合物 (8)	4.2	15.8	4000
実施例 9	化合物 (9)	4.1	18.9	4900
実施例 10	化合物 (10)	4.8	15.8	3400
比較例 2	化合物 (H2)	4.4	18.0	2500
比較例 3	化合物 (H3)	5.0	15.3	200

10

【0184】

【表 4】

表 4

化合物	三重項エネルギー (eV)	ガラス転移点 (°C)
化合物 (5)	2.97	149
化合物 (6)	2.92	150
化合物 (7)	2.88	—
化合物 (8)	2.95	121
化合物 (9)	2.92	159
化合物 (10)	2.91	171
化合物 (H2)	3.03	71
化合物 (H3)	3.04	検出されず

20

30

【0185】

表 2 及び 4 より、一般式 (1) において G11 ~ G14 のなかで G14 が窒素原子である場合が最も三重項エネルギーが高く、高効率化に有利であることが分かる。

表 1 及び 2 より、一般式 (1) において G11 ~ G14 のなかで G14 が窒素原子である場合が最も低電圧且つ長寿命であることが分かる。

表 2 より、L₂ が酸素原子を含む 2 価の連結基である化合物 (2) が、これが単結合である化合物 (1) と比較して、より高い三重項エネルギーを有することがわかる。

【産業上の利用可能性】

【0186】

40

以上詳細に説明したように、本発明の有機 EL 素子用材料を利用すると、発光効率が高く、かつ寿命の長い有機 EL 素子が得られる。このため、本発明の有機 EL 素子は、各種電子機器のディスプレイ、光源等として極めて有用である。

フロントページの続き

(51)Int.Cl.

F I

C 0 7 D 519/00

C 0 7 D 491/048

(56)参考文献 国際公開第2009/060780(WO,A1)

特開2001-102175(JP,A)

特開2011-084531(JP,A)

米国特許出願公開第2009/0134784(US,A1)

(58)調査した分野(Int.Cl.,DB名)

H 0 1 L 5 1 / 5 0

C 0 9 K 1 1 / 0 6

C 0 7 D 4 9 1 / 0 4 8

C 0 7 D 5 1 9 / 0 0

CAplus/REGISTRY(STN)

专利名称(译)	用于有机电致发光器件的材料和使用其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	JP6034196B2	公开(公告)日	2016-11-30
申请号	JP2012550954	申请日	2011-12-26
[标]申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
当前申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
[标]发明人	沼田真樹		
发明人	沼田 真樹		
IPC分类号	H01L51/50 C09K11/06 C07D519/00 C07D491/048		
CPC分类号	H01L51/0072 C07D471/04 C07D491/044 C07D495/04 C07D519/00 C07F7/0814 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1088 C09K2211/1092 H01L51/0071 H01L51/0073 H01L51/0085 H01L51/5016 H01L51/5056 H01L51/5072		
FI分类号	H05B33/14.B H05B33/22.D H05B33/22.B C09K11/06.660 C09K11/06.690 C07D519/00 C07D491/048		
代理人(译)	伊藤 高志		
审查员(译)	岩井良子		
优先权	2010293899 2010-12-28 JP		
其他公开文献	JPWO2012090967A1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

用于具有特定结构的有机电致发光器件的材料，所述特定结构具有在二苯并呋喃，咔唑或二苯并噻吩骨架的芳环中具有氮原子作为杂原子的部分结构，以及包括在阴极和阳极之间的发光层的一个或多个层发光层含有磷光材料，并且至少一层有机薄膜层含有低电压下的本发明的有机电致发光器件的材料本发明提供一种即使在驱动时也具有高外部量子效率和长寿命的有机EL元件，以及用于实现该有机EL元件的有机EL元件的材料。

(19) 日本国特許庁 (JP)		(12) 特 許 公 報 (B2)		(11) 特許番号 特許第6034196号 (P6034196)	
(45) 発行日 平成28年11月30日 (2016. 11. 30)		(24) 登録日 平成28年11月4日 (2016. 11. 4)			
(51) Int. Cl. H 0 1 L 51/50 (2006. 01) C 0 9 K 11/06 (2006. 01) C 0 7 D 519/00 (2006. 01) C 0 7 D 491/048 (2006. 01)		F I H 0 5 B 33/14 B H 0 5 B 33/22 D H 0 5 B 33/22 B C 0 9 K 11/06 6 6 0 C 0 9 K 11/06 6 9 0 請求項の数 22 (全 77 頁) 最終頁に続く			
(21) 出願番号 特願2012-550954 (P2012-550954)		(73) 特許権者 000183646 出光興産株式会社 東京都千代田区丸の内3丁目1番1号			
(86) (22) 出願日 平成23年12月26日 (2011. 12. 26)		(74) 代理人 100078732 弁理士 大谷 保			
(86) 国際出願番号 PCT/JP2011/080133		(74) 代理人 100135758 弁理士 伊藤 高志			
(87) 国際公開番号 W02012/090967		(72) 発明者 沼田 真樹 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地			
(87) 国際公開日 平成24年7月5日 (2012. 7. 5)		審査官 岩井 好子			
審査請求日 平成26年8月28日 (2014. 8. 28)					
(31) 優先権主張番号 特願2010-293899 (P2010-293899)					
(32) 優先日 平成22年12月28日 (2010. 12. 28)					
(33) 優先権主張国 日本国 (JP)					
(出願人による申告) 国等の委託研究の成果に係る特許出願 (平成21年度独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構「次世代高効率・高品質照明の基盤技術開発」プロジェクトの委託研究、産業技術力強化法第19条の適用を受ける特許出願)					
最終頁に続く					
(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス素子用材料及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子					