

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2017-208455

(P2017-208455A)

(43) 公開日 平成29年11月24日(2017.11.24)

| (51) Int.Cl. | F I | テーマコード (参考) |
|--------------------------------|---------------|-----------------|
| HO 1 L 51/50 (2006.01) | H O 5 B 33/14 | B 3 K 1 0 7 |
| CO 9 K 11/06 (2006.01) | H O 5 B 33/22 | D 4 C 0 5 0 |
| CO 7 D 487/04 (2006.01) | CO 9 K 11/06 | 6 4 5 4 C 0 7 1 |
| CO 7 D 495/22 (2006.01) | CO 7 D 487/04 | 1 3 7 |
| | CO 7 D 495/22 | |
| 審査請求 未請求 請求項の数 36 O L (全 38 頁) | | |

(21) 出願番号 特願2016-100072 (P2016-100072)
 (22) 出願日 平成28年5月19日 (2016.5.19)

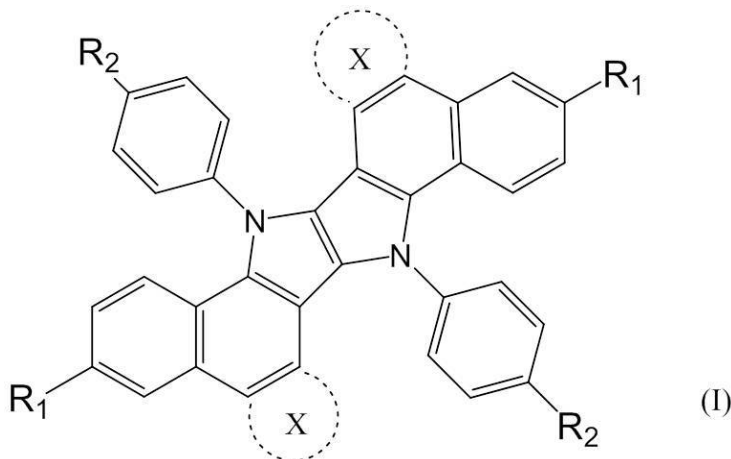
(71) 出願人 000183646
 出光興産株式会社
 東京都千代田区丸の内3丁目1番1号
 (71) 出願人 516149402
 インスティテュート オブ オーガニック
 ケミストリィ, ポーリッシュ アカデミ
 ー オブ サイエンスイズ
 ポーランド ピーエル-01-224 ワ
 ルシャワ カズプシャカ 44/52
 (74) 代理人 100078732
 弁理士 大谷 保
 (74) 代理人 100131635
 弁理士 有永 俊
 (72) 発明者 伊藤 裕勝
 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
 最終頁に続く

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

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】 深い青色発光し、かつ長寿命な有機EL素子用材料を提供する。

【解決手段】 一層以上の有機薄膜層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、有機薄膜層が発光層を含む層であり、下記一般式(I)で表される化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。



【選択図】 なし

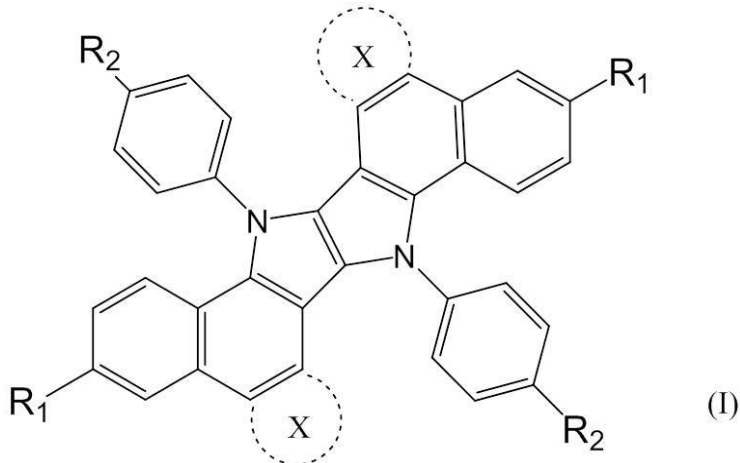
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

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

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

【化 1】



10

20

[式(I)中、R₁は、それぞれ独立に、水素原子、-COOR(Rは、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基又はアミノ基)、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルコキシ基、ジアルキルアミノ基(アルキル基の炭素数は1~10)、-CN、-SO₃H、-CHO、-F、-Cl、-Br、-I、-NO₂、又は-NH₂を表す。2つのR₁はそれぞれ同一でも異なってもよい。

R₂は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルコキシ基を表す。2つのR₂はそれぞれ同一でも異なってもよい。

30

Xは、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の芳香族複素環である。2つのXはそれぞれ同一でも異なってもよい。]

【請求項 2】

前記式(I)において、2つのR₁が同一である、請求項1に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 3】

前記式(I)において、2つのR₂が同一である、請求項1又は2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【請求項 4】

前記式(I)において、2つのXが同一である、請求項1~3のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 5】

前記式(I)のR₁が、それぞれ独立に、水素原子、-CN、-COOCH₃、-COOC₂H₅、-SO₃H、-CHO、-F、-Cl、-Br、-I、-NO₂、-OCH₃、-NH₂又は-N(CH₃)₂である、請求項1~4のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 6】

前記式(I)のR₁が、それぞれ独立に、水素原子又は-CNである、請求項1~5の

50

いずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 7】

前記式 (I) の R_1 が、いずれも水素原子である請求項 1 ~ 6 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 8】

前記式 (I) の R_1 が、いずれも -CN である請求項 1 ~ 6 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 9】

前記式 (I) の R_2 が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基である、請求項 1 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【請求項 10】

前記式 (I) の R_2 が、それぞれ独立に、t-ブチル基又は n-オクチル基である、請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 11】

前記式 (I) の X が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環である、請求項 1 ~ 10 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 12】

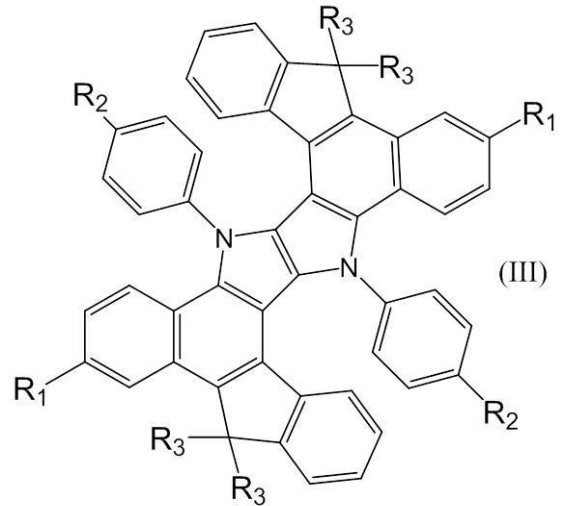
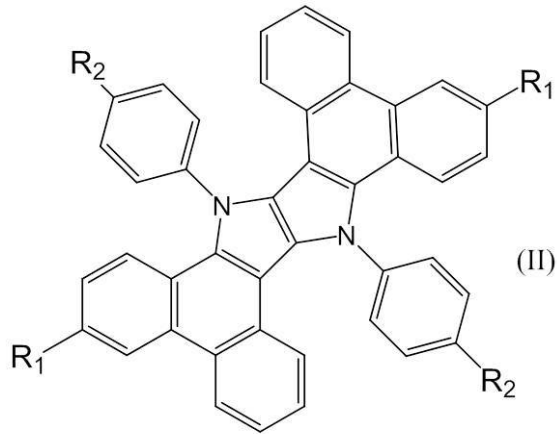
前記式 (I) の X が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のベンゼン、置換もしくは無置換のインデン、置換もしくは無置換のチオフェン、又は置換もしくは無置換のベンゾチオフェンである、請求項 1 ~ 10 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

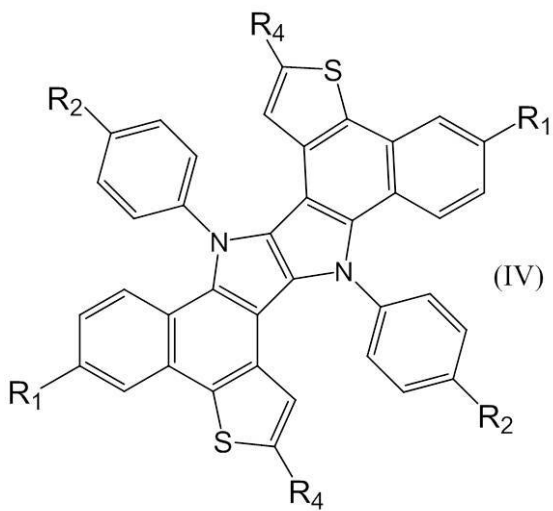
【請求項 13】

前記式 (I) が、下記式 (II) ~ (VI) のいずれかで表されることを特徴とする、請求項 1 ~ 12 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

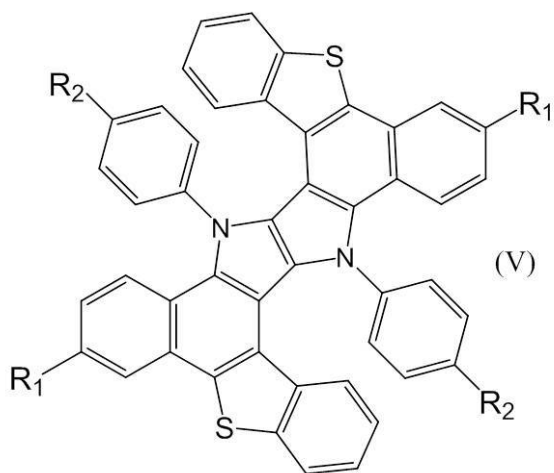
【化 2】



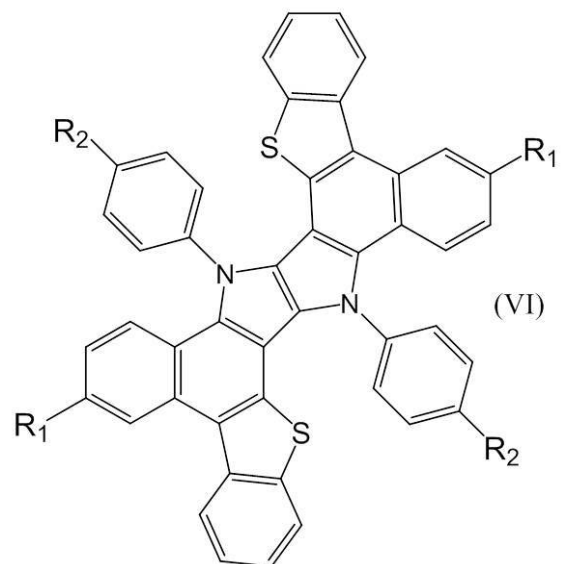
10



20



30



40

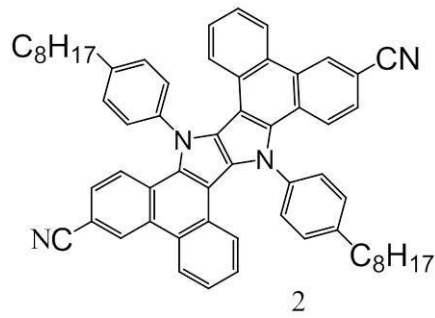
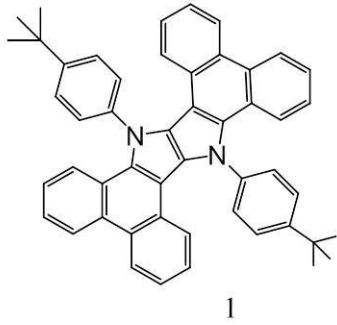
【式(II)～(VI)中、 R_1 及び R_2 は、式(I)と同じである。式(III)の R_3 と式(V)の R_4 は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基である。式(III)において、複数の R_3 は同一でも異なってもよい。式(V)において、2つの R_4 は同一でも異なってもよい。】

【請求項14】

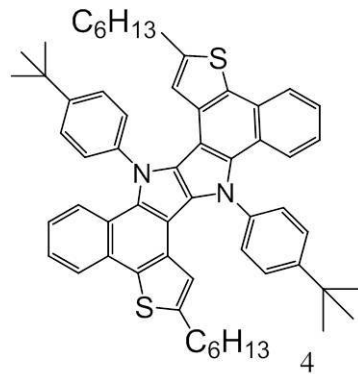
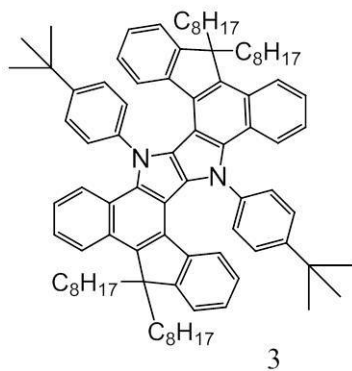
50

前記化合物の少なくとも1つが以下の化合物1～7の群から選択される、請求項1～13のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

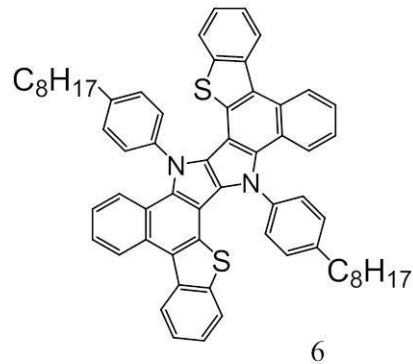
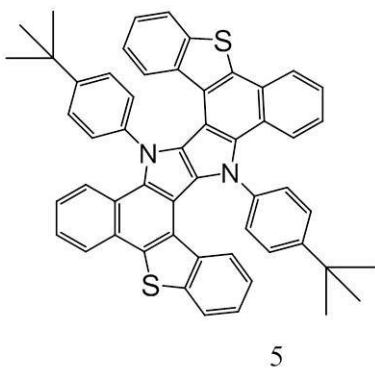
【化3】



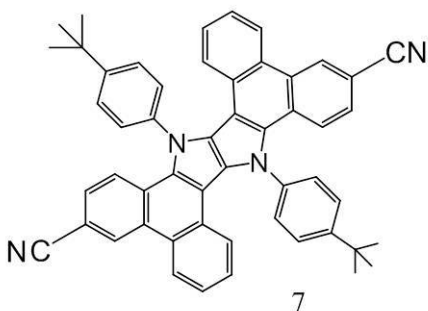
10



20



30



40

【請求項15】

発光層が前記化合物を含有する、請求項1～14のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項16】

発光層が、さらにホスト材料を含有する、請求項15に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項17】

前記化合物とホスト材料との含有比率（前記化合物/ホスト材料）が、質量比で、1 /

50

99 ~ 20 / 80 である、請求項 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】

前記ホスト材料の三重項励起準位 [T_1 (H)] が、前記化合物の三重項励起準位 [T_1 (D)] よりも小さい、請求項 16 又は 17 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 19】

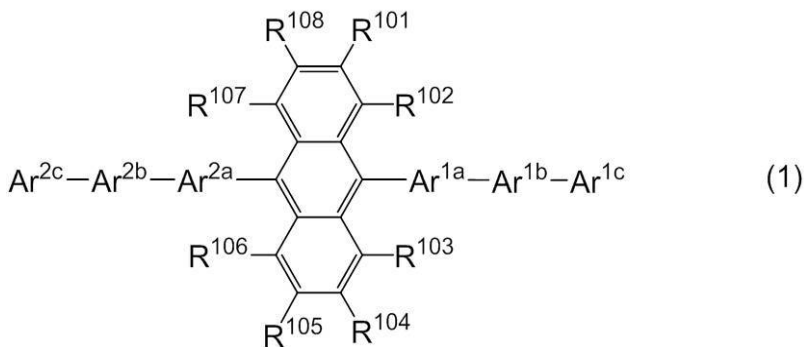
前記ホスト材料が、置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の芳香族縮合環を含有する縮合多環芳香族化合物であるか、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の芳香族縮合環と置換もしくは無置換の環形成原子数 10 ~ 50 のヘテロ芳香族縮合環とを含有する縮合多環ヘテロ芳香族化合物である、請求項 16 ~ 18 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【請求項 20】

前記ホスト材料が、下記一般式 (1) で表される縮合多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物である、請求項 16 ~ 18 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 4】



20

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

30

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

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

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

40

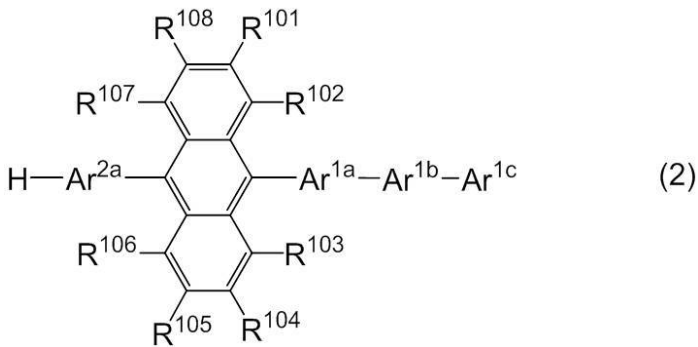
50

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

【請求項 2 1】

前記ホスト材料が、下記一般式 (2) で表される縮合多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物である、請求項 16 ~ 18 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 5】



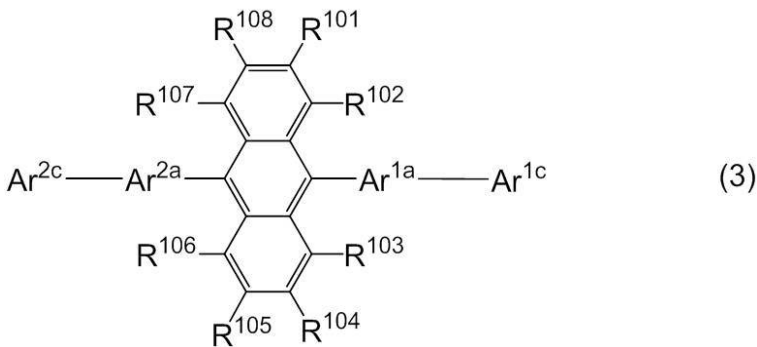
[一般式 (2) 中、 Ar^{1a} 、 Ar^{2a} 、 Ar^{1b} 、 Ar^{1c} 及び $R^{101} \sim R^{108}$ は、前記定義の通りである。但し、 Ar^{1b} は単結合ではなく、且つ Ar^{1c} は水素原子ではない。]

20

【請求項 2 2】

前記ホスト材料が、下記一般式 (3) で表される縮合多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物である、請求項 16 ~ 18 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 6】



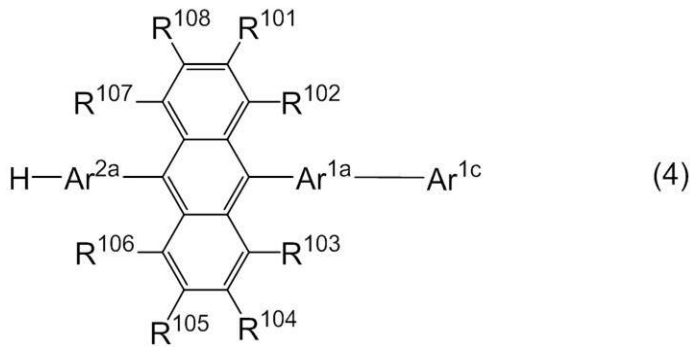
[一般式 (3) 中、 Ar^{1a} 、 Ar^{2a} 、 Ar^{1c} 、 Ar^{2c} 及び $R^{101} \sim R^{108}$ は、前記定義の通りである。但し、 Ar^{1c} 及び Ar^{2c} は、いずれも水素原子ではない。]

40

【請求項 2 3】

前記ホスト材料が、下記一般式 (4) で表される縮合多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物である、請求項 16 ~ 18 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 7】



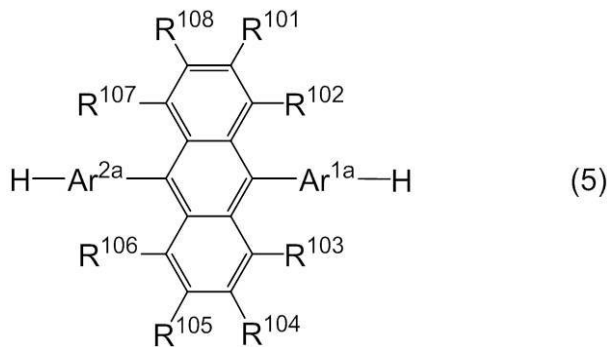
10

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

【請求項 2 4】

前記ホスト材料が、下記一般式 (5) で表される縮合多環芳香族化合物又は縮合多環ヘテロ芳香族化合物である、請求項 1 6 ~ 1 8 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 8】



20

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

30

【請求項 2 5】

Ar^{1a} 及び Ar^{2a} が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 0 ~ 5 0 の縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 5 0 の縮合ヘテロアリーレン基である、請求項 2 0 ~ 2 4 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 6】

Ar^{1a} 及び Ar^{2a} のうちの一方が、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 の非縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の非縮合ヘテロアリーレン基であり、他方が、置換もしくは無置換の環形成炭素数 1 0 ~ 5 0 の縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 5 0 の縮合ヘテロアリーレン基である、請求項 2 0 ~ 2 4 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【請求項 2 7】

Ar^{1a} 及び Ar^{2a} がいずれも、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0 の非縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0 の非縮合ヘテロアリーレン基である、請求項 2 0 ~ 2 4 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 8】

Ar^{1a} 及び Ar^{2a} がいずれも、置換もしくは無置換のフェニレン基である、請求項 2 0 ~ 2 4 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2 9】

50

Ar^{1a} が置換もしくは無置換の環形成炭素数 10 ~ 50 の縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合ヘテロアリーレン基であり、 Ar^{2a} が無置換のフェニレン基である、請求項 20 ~ 24 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 30】

Ar^{1a} が置換もしくは無置換のフェニレン基であり、 Ar^{2a} が無置換のフェニレン基である、請求項 20 ~ 24 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 31】

Ar^{1a} が置換もしくは無置換のナフチレン基であり、 Ar^{1b} が置換もしくは無置換のフェニレン基である、請求項 20 又は 21 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【請求項 32】

Ar^{2a} が、カルバゾール、ジベンゾフラン又はジベンゾチオフェンの二価の基であり、該 2 価の基は置換基を有していてもよい、請求項 20 ~ 24 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 33】

Ar^{2c} が、置換もしくは無置換の N - カルバゾリル基、置換もしくは無置換の C - カルバゾリル基、置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基又は置換もしくは無置換のジベンゾチエニル基である、請求項 20 又は 22 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

【請求項 34】

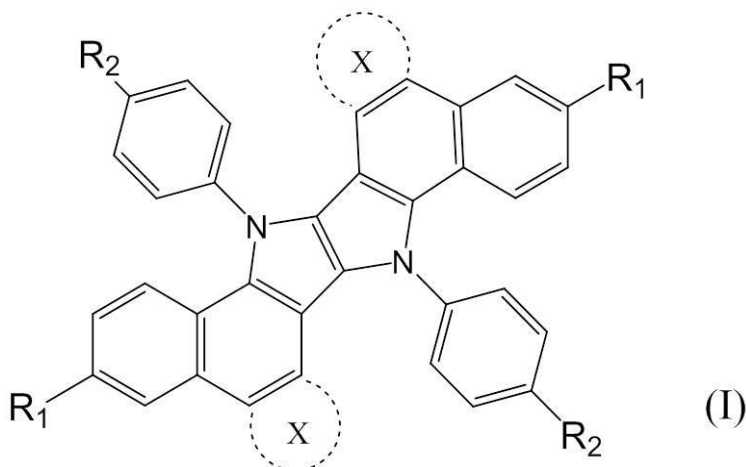
一層以上の有機薄膜層が、発光層と陽極との間に正孔輸送領域を有しており、該正孔輸送領域が前記化合物を含む、請求項 1 ~ 14 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 35】

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

【化 9】

30



40

[式 (I) 中、 R_1 は、それぞれ独立に、水素原子、 $-COOR$ (R は、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基又はアミノ基)、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、ジアルキルアミノ基 (アルキル基の炭素数は 1 ~ 10)、 $-CN$ 、 $-SO_3H$ 、 $-CHO$ 、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-NO_2$ 、又は $-NH_2$ を表す。2 つの R_1 はそれぞれ同一でも異なっていてもよい。

R_2 は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、又は置換もしくは

50

無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基を表す。2 つの R_2 はそれぞれ同一でも異なってもよい。

X は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の芳香族複素環である。2 つの X はそれぞれ同一でも異なってもよい。]

【請求項 36】

請求項 1 ~ 34 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した、電子機器。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

10

【0001】

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

【背景技術】

【0002】

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

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

20

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

近年では有機 EL 素子の性能向上を果たすべく、ホスト/ドーパントシステムに関してもさらなる研究が行われており、好適なホスト材料及びその他の有機 EL 素子用材料の探索が続いている（例えば、特許文献 1 及び 2）。

【先行技術文献】

【特許文献】

30

【0003】

【特許文献 1】国際公開第 2011/132866 号

【特許文献 2】国際公開第 2012/035934 号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

本発明の目的は、深い青色発光し、かつ長寿命な有機 EL 素子を提供することである。また、他の目的は、当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供することである。

【課題を解決するための手段】

40

【0005】

本発明者らは、鋭意研究を重ねた結果、有機薄膜層の少なくとも 1 層が、特定の縮環様式を持つピロロピロール骨格を有する化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子、及び当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器が上記課題を解決し得ることを見出した。

【0006】

すなわち、本発明の一態様によれば、下記 [1] ~ [3] が提供される。

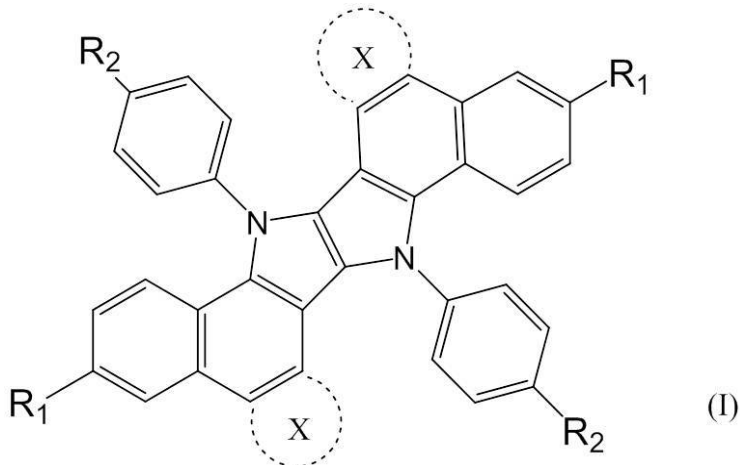
[1] 陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、

前記一層以上の有機薄膜層が発光層を含む層であり、前記一層以上の有機薄膜層の少な

50

くとも1層が下記一般式(I)で表される化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化1】



10

【式(I)中、 R_1 は、それぞれ独立に、水素原子、 $-COOR$ (R は、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基又はアミノ基)、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルコキシ基、ジアルキルアミノ基(アルキル基の炭素数は1~10)、 $-CN$ 、 $-SO_3H$ 、 $-CHO$ 、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、 $-NO_2$ 、又は $-NH_2$ を表す。2つの R_1 はそれぞれ同一でも異なってもよい。

20

R_2 は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~50のシクロアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルコキシ基を表す。2つの R_2 はそれぞれ同一でも異なってもよい。

X は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~50の芳香族複素環である。2つの X はそれぞれ同一でも異なってもよい。】

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

30

【3】前記有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した、電子機器。

【発明の効果】

【0007】

本発明によれば、深い青色発光し、かつ長寿命な有機EL素子、及びそのような有機EL素子を提供し得る有機EL素子用材料を提供できる。また、当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供できる。

【図面の簡単な説明】

【0008】

【図1】本発明の一態様に係る有機EL素子の概略構成を示す図である。

40

【発明を実施するための形態】

【0009】

本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「炭素数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の炭素数を表すものであり、置換されている場合の置換基の炭素数は含めない。

また、本明細書において、「置換もしくは無置換の原子数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「原子数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の原子数を表すものであり、置換されている場合の置換基の原子数は含めない。

【0010】

本明細書において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物(例えば、

50

単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物)の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記される「環形成炭素数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が6であり、ナフタレン環は環形成炭素数が10であり、ピリジニル基は環形成炭素数5であり、フラニル基は環形成炭素数4である。また、ベンゼン環やナフタレン環に置換基として例えばアルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、環形成炭素数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合(スピロフルオレン環を含む)、置換基としてのフルオレン環の炭素数は環形成炭素数の数に含めない。

10

【0011】

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

20

【0012】

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

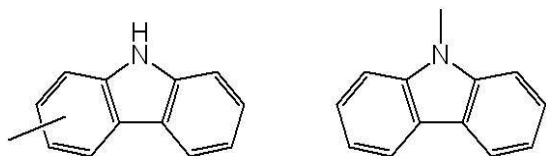
本明細書中において、「ヘテロアリール基」、「ヘテロアリーレン基」及び「複素環基」は、環形成原子として、少なくとも1つのヘテロ原子を含む基であり、該ヘテロ原子としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子及びセレン原子から選ばれる1種以上であることが好ましい。

30

【0013】

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

【化2】



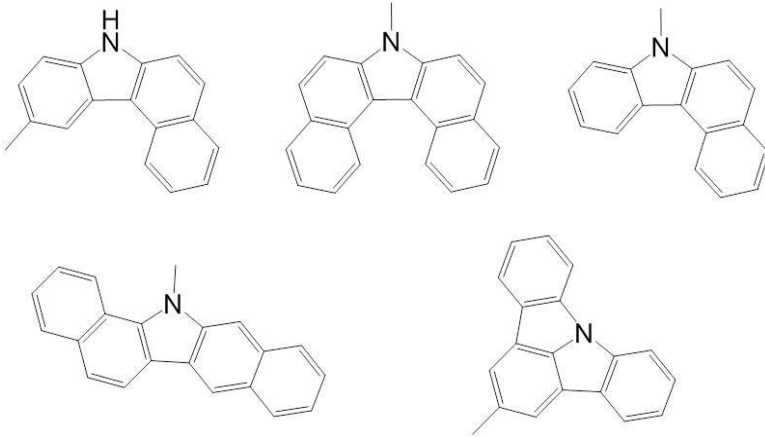
及び上記の基に対して、さらに任意の置換基を有する置換カルバゾリル基を表す。

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

40

【0014】

【化3】

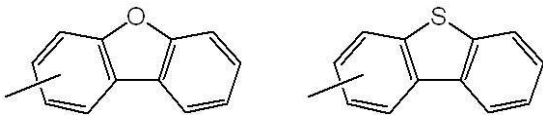


10

【0015】

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

【化4】



20

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

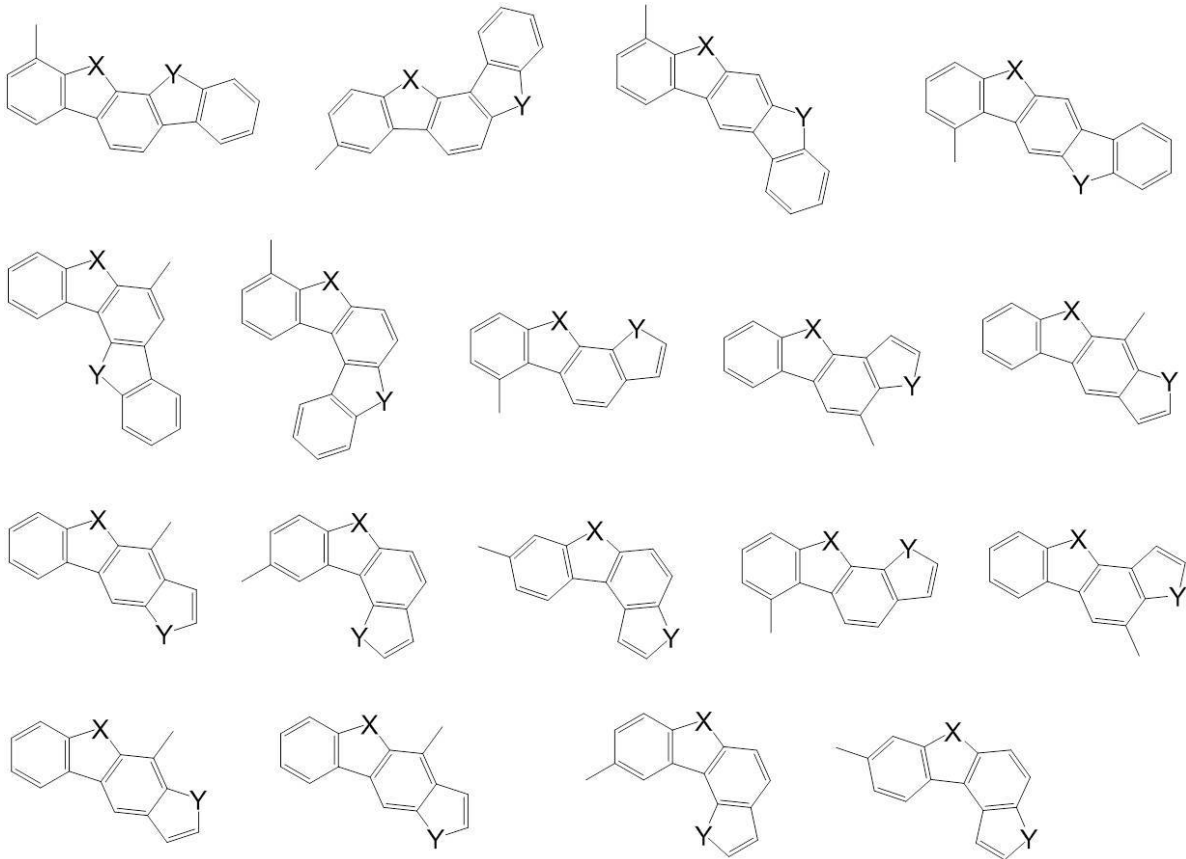
なお、当該置換ジベンゾフラニル基及び置換ジベンゾチオフェニル基は、任意の置換基同士が互いに結合して縮環してもよく、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子及びセレン原子等のヘテロ原子を含んでもよく、また、結合位置は1位～8位のいずれであってもよい。

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

30

【0016】

【化5】



10

20

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

【0017】

また、「置換基」、又は「置換もしくは無置換」との記載における置換基としては、炭素数1~50(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のアルキル基；環形成炭素数3~50(好ましくは3~10、より好ましくは3~8、さらに好ましくは5又は6)のシクロアルキル基；環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、より好ましくは6~18)のアリール基；環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、より好ましくは6~18)のアリール基を有する炭素数7~51(好ましくは7~30、より好ましくは7~20)のアラルキル基；アミノ基；炭素数1~50(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のアルキル基及び環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、より好ましくは6~18)のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基；炭素数1~50(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のアルキル基を有するアルコキシ基；環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、より好ましくは6~18)のアリール基を有するアリールオキシ基；炭素数1~50(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のアルキル基及び環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、より好ましくは6~18)のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基；環形成原子数5~50(好ましくは5~24、より好ましくは5~13)のヘテロアリール基；炭素数1~50(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のハロアルキル基；ハロゲン原子(フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子)；シアノ基；ニトロ基；炭素数1~50(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のアルキル基及び環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、より好ましくは6~18)のアリール基から選ばれる置換基を有するスルホニル基；炭素数1~50(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のアルキル基及び環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、よ

30

40

50

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

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

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

【0018】

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

【0019】

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

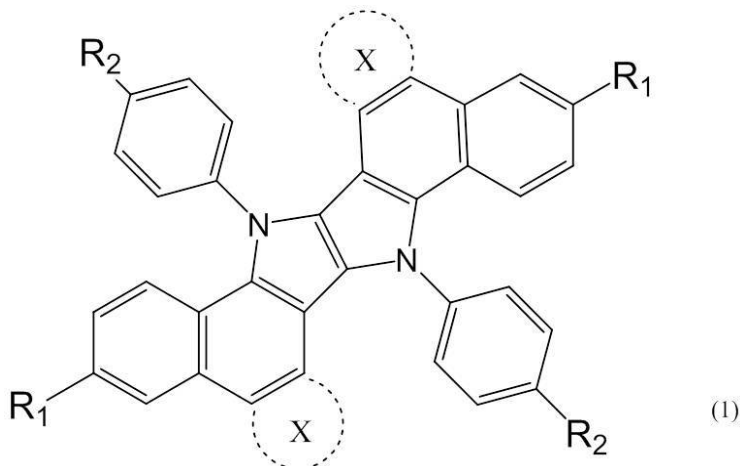
【0020】

[有機エレクトロルミネッセンス素子用材料]

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

【0021】

【化6】



【0022】

[式(I)中、R₁は、それぞれ独立に、水素原子、-COOR(Rは、置換もしくは無

置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基又はアミノ基)、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基、ジアルキルアミノ基(アルキル基の炭素数は 1 ~ 10)、-CN、-SO₃H、-CHO、-F、-Cl、-Br、-I、-NO₂、又は-NH₂を表す。2つのR₁はそれぞれ同一でも異なってもよい。

R₂は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基を表す。2つのR₂はそれぞれ同一でも異なってもよい。

Xは、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の芳香族複素環である。2つのXはそれぞれ同一でも異なってもよい。]

【0023】

(一般式(I)中の各基についての説明)

前記R₁及びR₂の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基は、直鎖状でも分岐鎖状であってもよい。該アルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、イソブチル基、s-ブチル基、t-ブチル基、ペンチル基(異性体を含む)、ヘキシル基(異性体を含む)、ヘプチル基(異性体を含む)、オクチル基(異性体を含む)、ノニル基(異性体を含む)、デシル基(異性体を含む)、ウンデシル基(異性体を含む)、及びドデシル基(異性体を含む)、トリデシル基、テトラデシル基、オクタデシル基、テトラコサニル基、テトラコンタニル基等が挙げられる。これらの中でも、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、t-ブチル基、n-オクチル基が好ましい。該アルキル基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、より好ましくは炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、さらに好ましくは炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、特に好ましくは炭素数 1 ~ 5 のアルキル基である。

【0024】

前記R₁及びR₂の炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基は、-OY₁で表され、Y₁は炭素数 1 ~ 50 のアルキル基である。該アルキル基の例としては、上記した例が挙げられ、好ましい炭素数も同様である。具体的には、メトキシ基、エトキシ基、フロボキシ基、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、メトキシ基が好ましい。

【0025】

前記R₁のジアルキルアミノ基(アルキル基の炭素数は 1 ~ 10)としては、-N(Y₂)₂で表され、Y₂は炭素数 1 ~ 10 のアルキル基である。該アルキル基の例としては、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、イソブチル基、s-ブチル基、t-ブチル基、ペンチル基(異性体を含む)、ヘキシル基(異性体を含む)、ヘプチル基(異性体を含む)、オクチル基(異性体を含む)、ノニル基(異性体を含む)、デシル基(異性体を含む)等が挙げられ、2つのY₂は同一でも異なってもよい。ジアルキルアミノ基の具体例としては、ジエチルアミノ基、ジメチルアミノ基等が挙げられ、ジメチルアミノ基が好ましい。

【0026】

前記R₂の炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等が挙げられ、好ましくは 3 ~ 10、より好ましくは 3 ~ 8、さらに好ましくは 5 又は 6 である。

【0027】

前記Xの環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環としては、ベンゼン、インデン、ナフタレン等が挙げられ、ベンゼン、インデンが好ましい。また、インデンについては、3位が2つのアルキル基で置換されていると好ましく、2つのn-オクチル基で置換されていると好ましい。

該芳香族炭化水素環の環形成炭素数としては、好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18、さらに好ましくは 6 ~ 9 である。

【0028】

10

20

30

40

50

前記 X の環形成原子数数 5 ~ 50 の芳香族複素環としては、チオフェン、ベンゾチオフェン、フラン、ベンゾフラン等が挙げられ、チオフェン、ベンゾチオフェンが好ましい。

該芳香族複素環の好ましい環形成原子数としては、好ましくは 5 ~ 24、より好ましくは 5 ~ 13、さらに好ましくは 6 ~ 9 である。

【0029】

前記式 (I) において、2つの R_1 が同一であると好ましい。前記式 (I) において、2つの R_2 が同一であると好ましい。前記式 (I) において、2つの X が同一であると好ましい。

前記式 (I) において、2つの R_1 、2つの R_2 、2つの X が、それぞれ同一であることにより、化合物構造が対称となる事で、材料の発光スペクトルをより好適な形状にすることができる。

10

【0030】

前記式 (I) の R_1 が、それぞれ独立に、水素原子、-CN、-COOCH₃、-COOC₂H₅、-SO₃H、-CHO、-F、-Cl、-Br、-I、-NO₂、-OCH₃、-NH₂ 又は -N(CH₃)₂ であると好ましく、水素原子又は -CN であると好ましい。

また、前記式 (I) の R_1 が、いずれも水素原子であるか、いずれも -CN であると好ましい。

【0031】

前記式 (I) の R_2 が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基であると好ましく、t-ブチル基又は n-オクチル基であるとより好ましい。

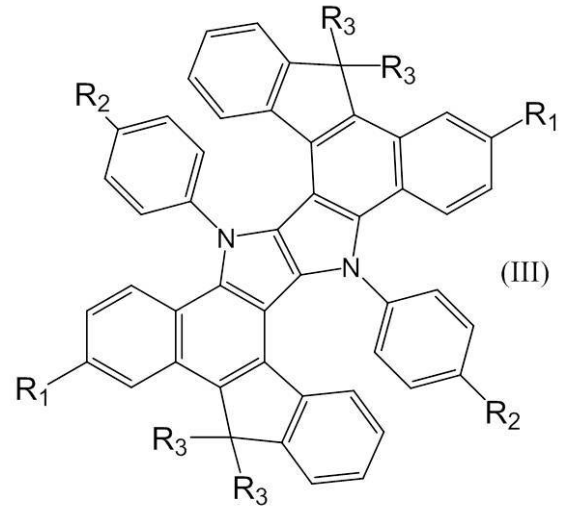
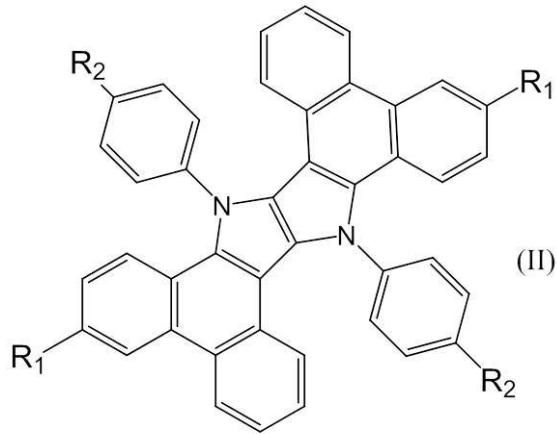
20

前記式 (I) の X が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環であると好ましく、ベンゼン、又はインデンであるとより好ましい。

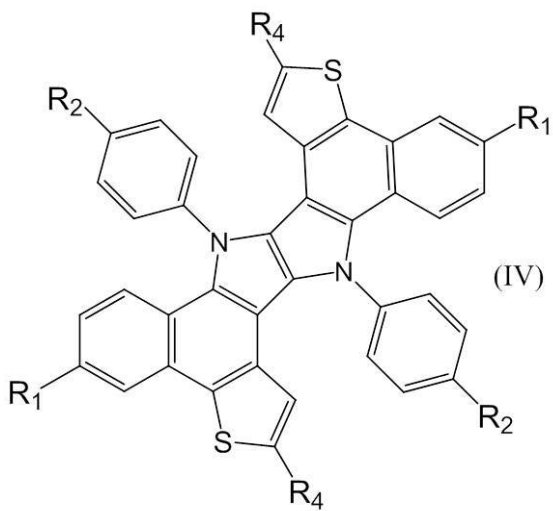
【0032】

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

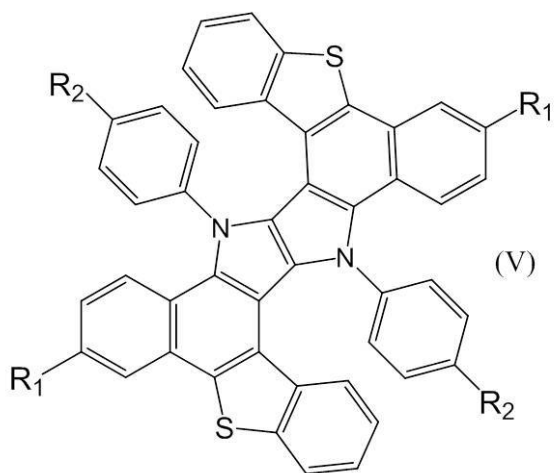
【化 7】



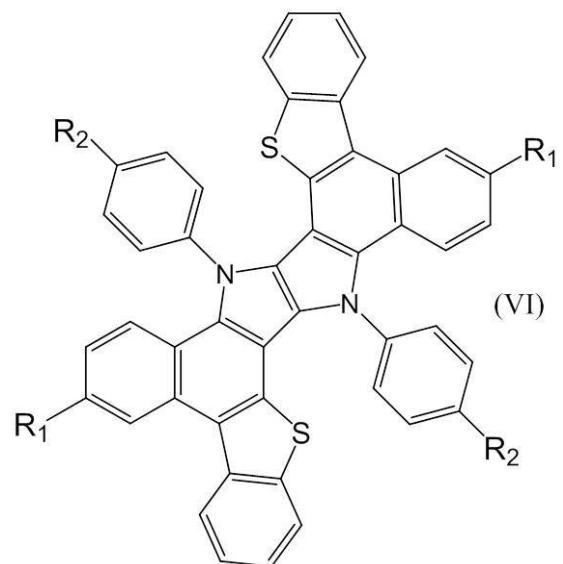
10



20



30



40

【 0 0 3 3 】

式 (II) ~ (VI) 中、 R_1 及び R_2 は、式 (I) と同じであり、その具体例や好ましい炭素数も同じである。

式 (III) の R_3 と式 (IV) の R_4 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 ~ 50 のアルキル基である。該アルキル基の具体例や好ましい炭素数は、前記式 (I) の R 及び R_2 と同じである。

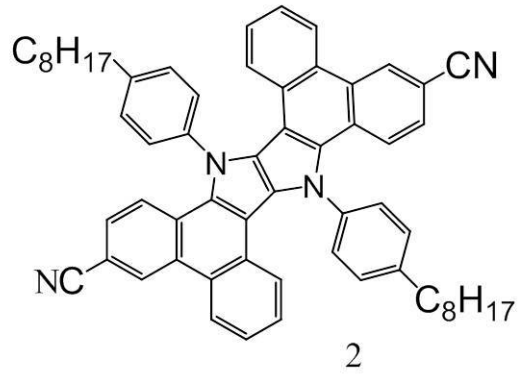
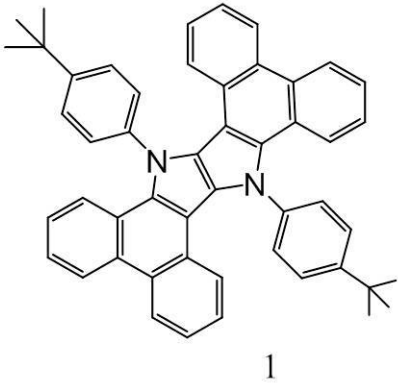
50

式(III)において、複数の R_3 は同一でも異なってもよい。式(IV)において、2つの R_4 は同一でも異なってもよい。

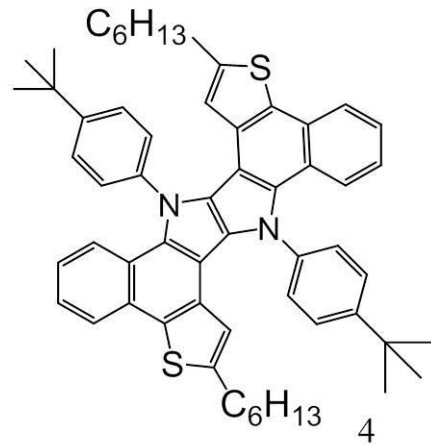
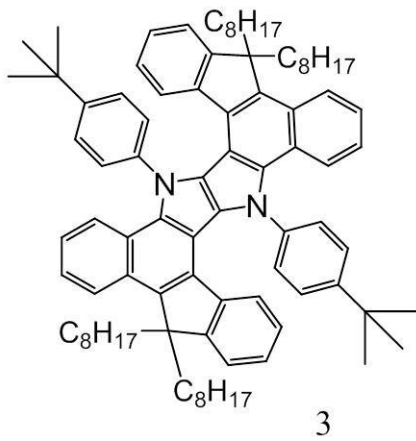
【0034】

前記化合物(I)の具体例としては以下の化合物が挙げられる。

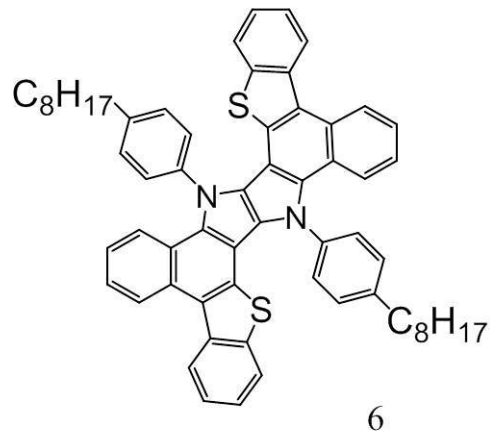
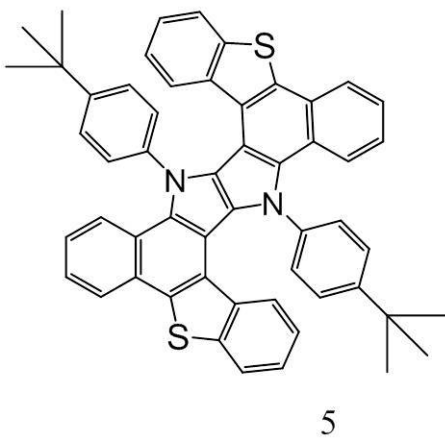
【化 8】



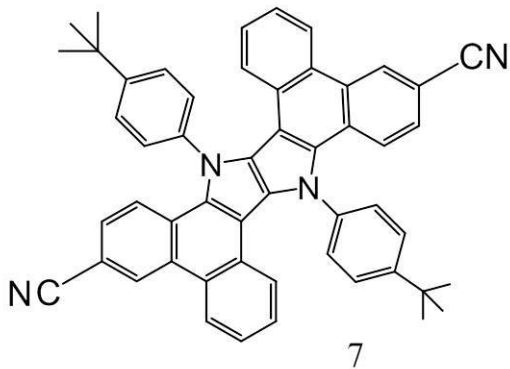
10



20



30



40

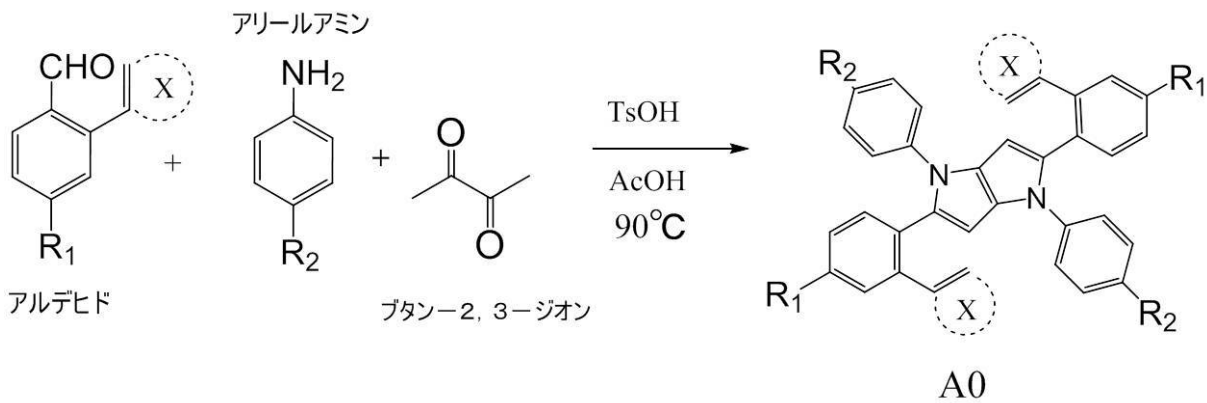
【 0 0 3 5 】

上記化合物（１）の製造方法に特に制限は無いが、例えば、以下の様に合成できる。

50

(1) 化合物 A0 の合成

【化 9】



10

(式中、 R_1 、 R_2 及び X は、前記式 (I) と同じである)

【0036】

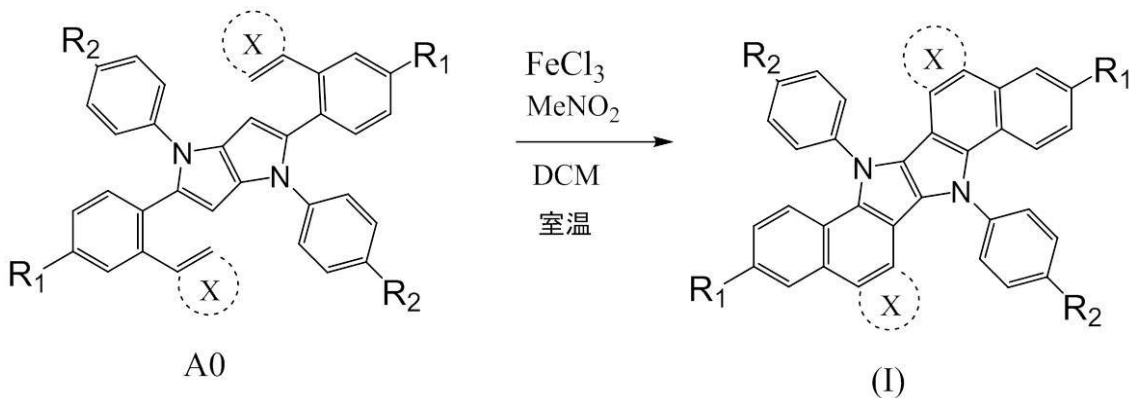
環流冷却器とマグネティックスターラーを備えた 25 ml の丸底フラスコに、アリールアミン 6 mmol、芳香族アルデヒド 6 mmol、及び TsOH (p-トルエンスルホン酸) 0.6 mmol を入れた後、氷酢酸 6 ml を追加し、その混合物を 90 で 30 分間反応させた。その後、ブタン-2,3-ジオン 2.46 ml (3 mmol) を添加し、その混合物を 90 で 3 時間反応させた後、冷却した。得られた沈殿物を濾過し、冷却した氷酢酸で洗浄し、AcOEt (酢酸エチル) から再結晶させ、減圧乾燥して生成物として化合物 A0 を得た。

20

【0037】

(2) 式 (I) で表される化合物の合成

【化 10】



30

(式中、 R_1 、 R_2 及び X は、前記式 (I) と同じである)

【0038】

アルゴン気流下で、環流冷却器とマグネティックスターラーを備えた 50 ml の丸底フラスコに、乾燥塩化メチレン (DCM) 12 ml と化合物 A0 1 mmol を入れた。その後、ニトロメタン 12 ml 中に溶解した塩化第 2 鉄 20 mmol をシリンジを介して添加し、室温で 30 分間反応させた。その後、15 ml の水を添加し、生成物を 15 分間攪拌した。2 層に分かれたため、水層を塩化メチレン 10 ml で 3 回抽出した。有機層を混合、乾燥して、溶媒を蒸発させ、粗生成物をカラムクロマトグラフィーで精製し、減圧乾燥して生成物として式 (I) で表される化合物を得た。

40

【0039】

[有機エレクトロルミネッセンス素子]

次に、本発明の一態様の有機 EL 素子について説明する。

有機 EL 素子は、陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に一層以上の有機薄膜層を有す

50

る。この一層以上の有機薄膜層は発光層を含み、有機薄膜層の少なくとも1層が本発明の前記化合物（前記化合物（I）や、それに包含される下位概念の前記各化合物（II）～（VI））を含む。

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

【0040】

本発明の一態様において、有機EL素子は、蛍光発光型の単色発光素子であっても、蛍光/燐光ハイブリッド型の白色発光素子であってもよいし、単独の発光ユニットを有するシンプル型であっても、複数の発光ユニットを有するタンデム型であってもよい。ここで、「発光ユニット」とは、一層以上の有機層を含み、そのうちの一層が発光層であり、注入された正孔と電子が再結合することにより発光することができる最小単位をいう。

【0041】

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

（1）陽極/発光ユニット/陰極

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

（a）正孔輸送層/発光層（/電子輸送層）

（b）正孔輸送層/第一蛍光発光層/第二蛍光発光層（/電子輸送層）

（c）正孔輸送層/燐光発光層/スペース層/蛍光発光層（/電子輸送層）

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

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

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

（g）正孔輸送層/電子障壁層/蛍光発光層（/電子輸送層）

（h）正孔輸送層/蛍光発光層/正孔障壁層（/電子輸送層）

（i）正孔輸送層/蛍光発光層/トリプレット障壁層（/電子輸送層）

【0042】

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

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

【0043】

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

（2）陽極/第一発光ユニット/中間層/第二発光ユニット/陰極

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

10

20

30

40

50

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

【0044】

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

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

【0045】

（基板）

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

【0046】

（陽極）

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

【0047】

（陰極）

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

【0048】

（発光層のドーパント材料）

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

【0049】

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

10

20

30

40

50

ニルスチルベン - 4 , 4' - ジアミン (略称 : Y G A 2 S)、4 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) - 4' - (10 - フェニル - 9 - アントリル) トリフェニルアミン (略称 : Y G A P A)、4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) - 4' - (9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) トリフェニルアミン (略称 : P C B A P A) などが挙げられる。

また、緑色系の蛍光発光材料として、芳香族アミン誘導体等を使用できる。具体的には、N - (9 , 10 - ジフェニル - 2 - アントリル) - N , 9 - ジフェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - アミン (略称 : 2 P C A P A)、N - [9 , 10 - ビス (1 , 1' - ビフェニル - 2 - イル) - 2 - アントリル] - N , 9 - ジフェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - アミン (略称 : 2 P C A B P h A)、N - (9 , 10 - ジフェニル - 2 - アントリル) - N , N' , N' - トリフェニル - 1 , 4 - フェニレンジアミン (略称 : 2 D P A P A)、N - [9 , 10 - ビス (1 , 1' - ビフェニル - 2 - イル) - 2 - アントリル] - N , N' , N' - トリフェニル - 1 , 4 - フェニレンジアミン (略称 : 2 D P A B P h A)、N - [9 , 10 - ビス (1 , 1' - ビフェニル - 2 - イル)] - N - [4 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル] - N - フェニルアントラセン - 2 - アミン (略称 : 2 Y G A B P h A)、N , N , 9 - トリフェニルアントラセン - 9 - アミン (略称 : D P h A P h A) などが挙げられる。

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

【 0 0 5 0 】

(発光層のホスト材料)

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

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

10

20

30

40

50

エニル] - 9H - カルバゾール (略称: DP Cz PA)、9, 10 - ビス (3, 5 - ジフェニルフェニル) アントラセン (略称: DP PA)、9, 10 - ジ (2 - ナフチル) アントラセン (略称: DNA)、2 - tert - ブチル - 9, 10 - ジ (2 - ナフチル) アントラセン (略称: t - Bu DNA)、9, 9' - ビアントリル (略称: B ANT)、9, 9' - (スチルベン - 3, 3' - ジイル) ジフェナントレン (略称: DP NS)、9, 9' - (スチルベン - 4, 4' - ジイル) ジフェナントレン (略称: DP NS 2)、3, 3', 3'' - (ベンゼン - 1, 3, 5 - トリイル) トリピレン (略称: TP B 3)、9, 10 - ジフェニルアントラセン (略称: DP Anth)、6, 12 - ジメトキシ - 5, 11 - ジフェニルクリセンなどの縮合芳香族化合物、N, N - ジフェニル - 9 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) フェニル] - 9H - カルバゾール - 3 - アミン (略称: Cz A 1 PA)、4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) トリフェニルアミン (略称: DP h PA)、N, 9 - ジフェニル - N - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) フェニル] - 9H - カルバゾール - 3 - アミン (略称: PC A PA)、N, 9 - ジフェニル - N - {4 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) フェニル] フェニル} - 9H - カルバゾール - 3 - アミン (略称: PC A P B A)、N - (9, 10 - ジフェニル - 2 - アントリル) - N, 9 - ジフェニル - 9H - カルバゾール - 3 - アミン (略称: 2 PC A PA)、NP B (または - NP D)、TP D、DF L DP B i、B S P B などの芳香族アミン化合物などを用いることができる。また、発光性の高い物質 (ドーパント材料) を分散させるための物質 (ホスト材料) は複数種用いることができる。

10

20

【0051】

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

なお、前記ホスト材料の三重項励起準位 [$T_1 (H)$] は、化合物 (I) の三重項励起準位 [$T_1 (D)$] よりも小さいことが好ましい。これにより、三重項励起子が発光層内のホスト材料に閉じ込められ TTF (Triplet-Triplet-Fusion) 現象を効率的に起こして蛍光素子の高効率化に寄与するからである (WO 2011/086941 等参照)。

30

【0052】

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

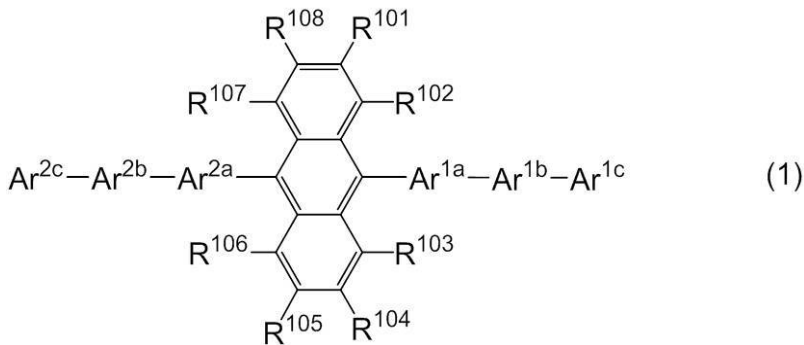
40

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

【0053】

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

【化 1 1】



10

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

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

20

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

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

30

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

【0054】

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

40

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

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

50

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

【0055】

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

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

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

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

Ar^{1a} が置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50の縮合アリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合ヘテロアリーレン基であり、 Ar^{2a} が無置換のフェニレン基であるのも好ましい。

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

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

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

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

【0056】

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

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

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

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

【0057】

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

10

20

30

40

50

ましくは5～10である。縮合アリアル基の環形成炭素数は、有機EL素子の高性能化の観点から、好ましくは10～30、より好ましくは10～20、さらに好ましくは10～14である。縮合ヘテロアリアル基の環形成原子数は、有機EL素子の高性能化の観点から、好ましくは8～30、より好ましくは8～20、さらに好ましくは8～13である。

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

10

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

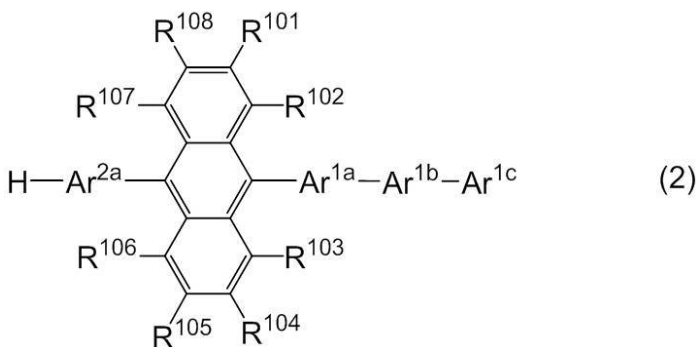
20

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

【0058】

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

【化12】



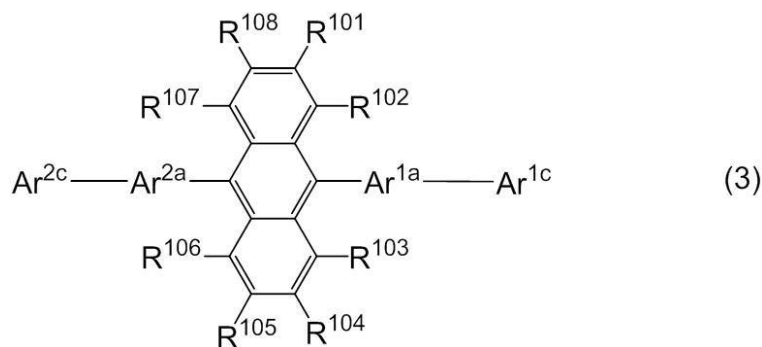
30

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

40

【0059】

【化 1 3】

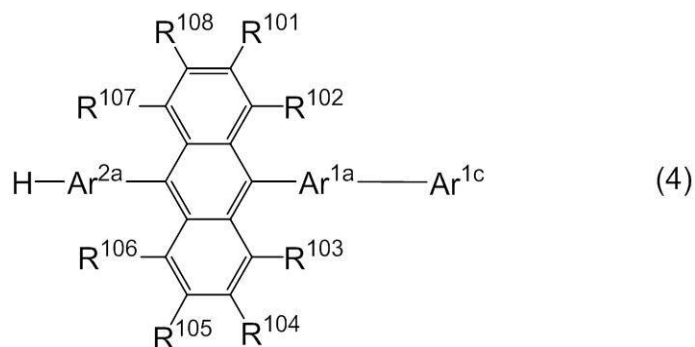


10

[一般式(3)中、Ar^{1a}、Ar^{2a}、Ar^{1c}、Ar^{2c}及びR¹⁰¹~R¹⁰⁸は、前記一般式(1)中の定義の通りであり、好ましいものも同じである。但し、Ar^{1c}及びAr^{2c}は、いずれも水素原子ではない。]

【0060】

【化 1 4】

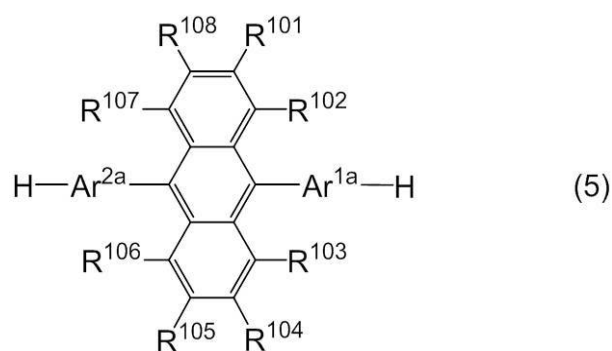


20

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

【0061】

【化 1 5】



40

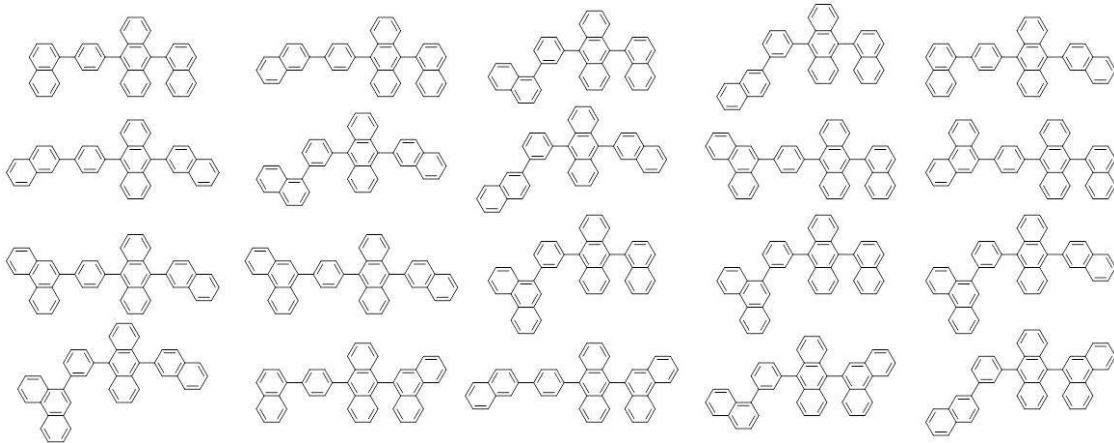
[一般式(5)中、Ar^{1a}、Ar^{2a}及びR¹⁰¹~R¹⁰⁸は、前記一般式(1)中の定義の通りであり、好ましいものも同じである。]

【0062】

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

【0063】

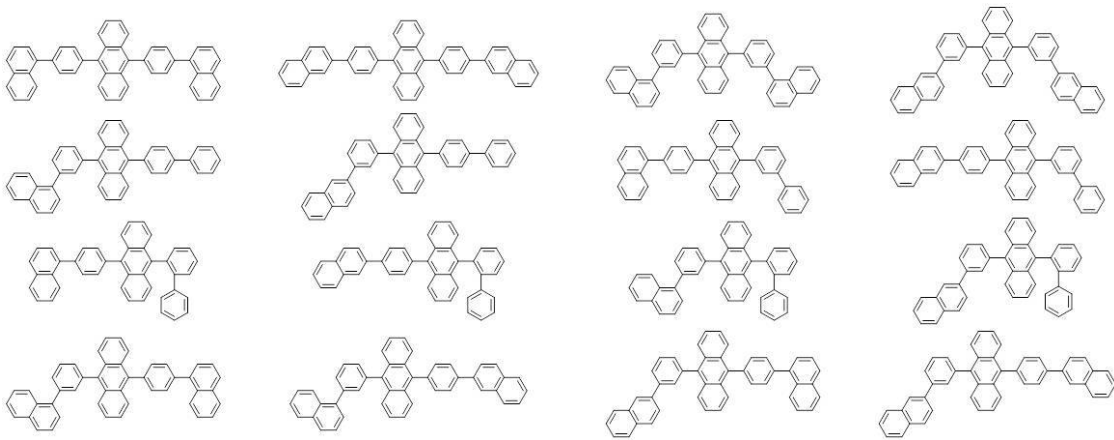
【化 1 6】



10

【 0 0 6 4】

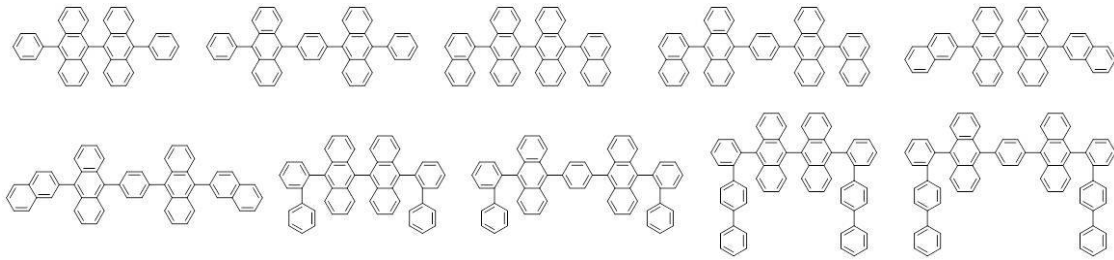
【化 1 7】



20

【 0 0 6 5】

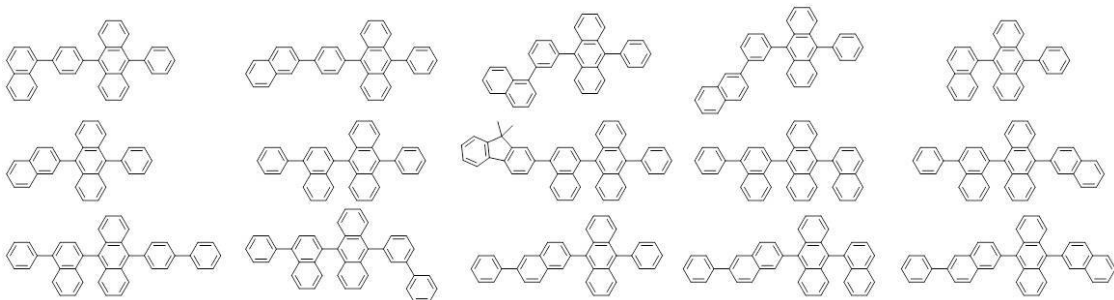
【化 1 8】



30

【 0 0 6 6】

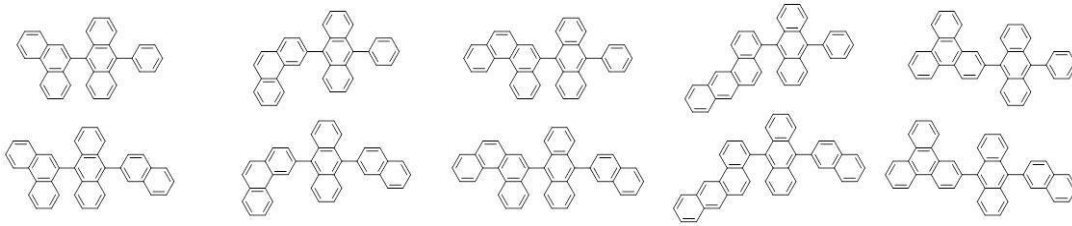
【化 1 9】



40

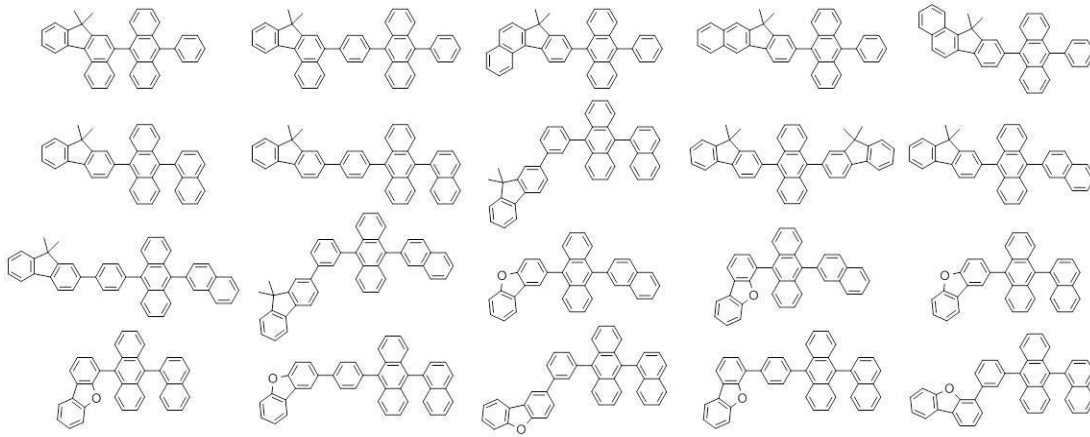
【 0 0 6 7】

【化 2 0】



【 0 0 6 8】

【化 2 1】

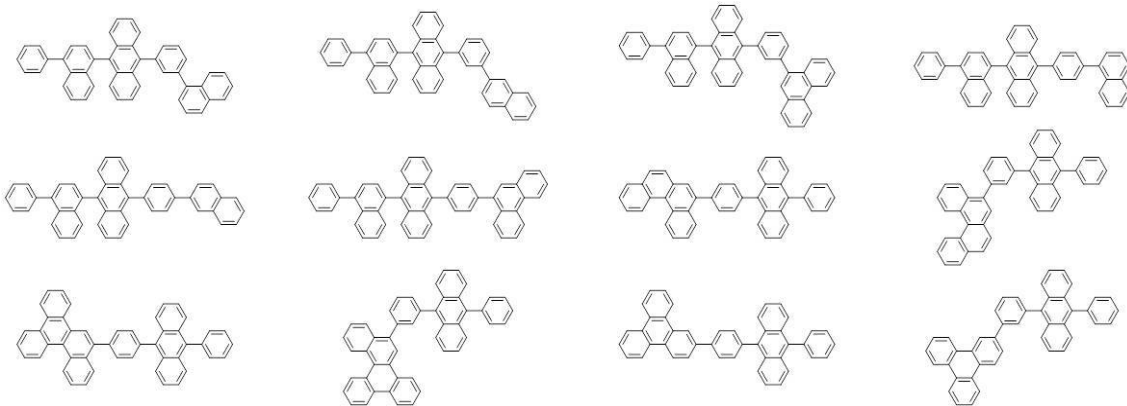


10

20

【 0 0 6 9】

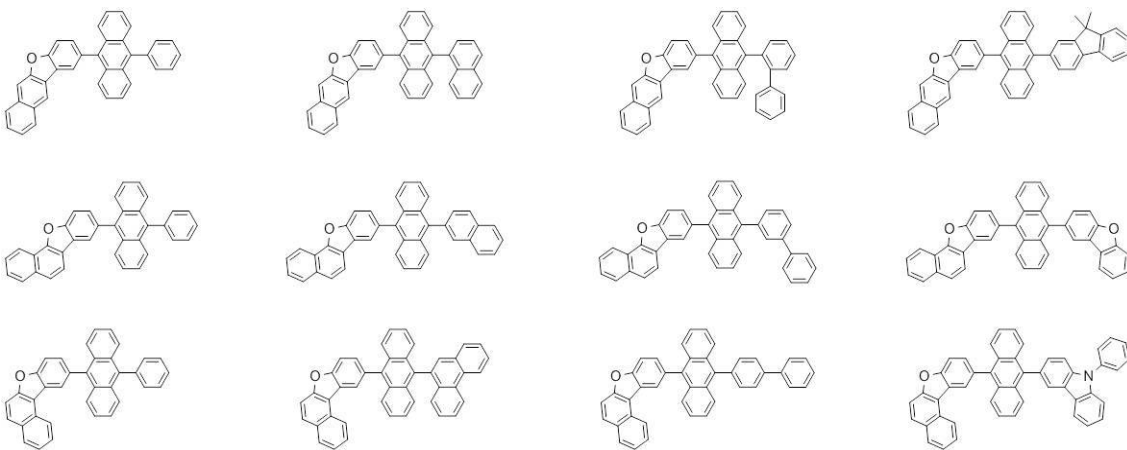
【化 2 2】



30

【 0 0 7 0】

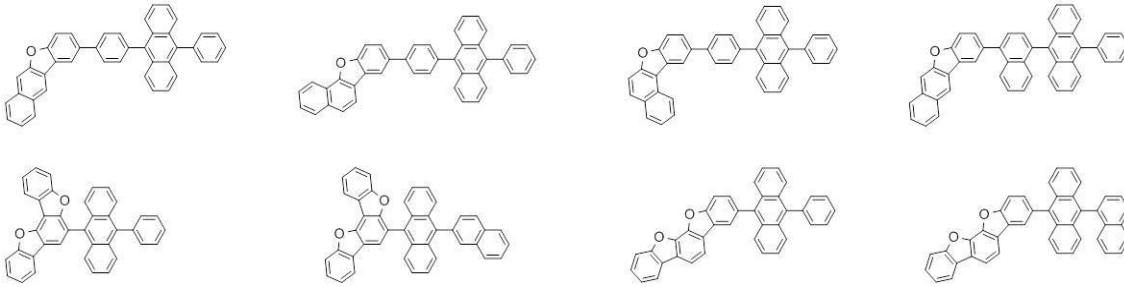
【化 2 3】



40

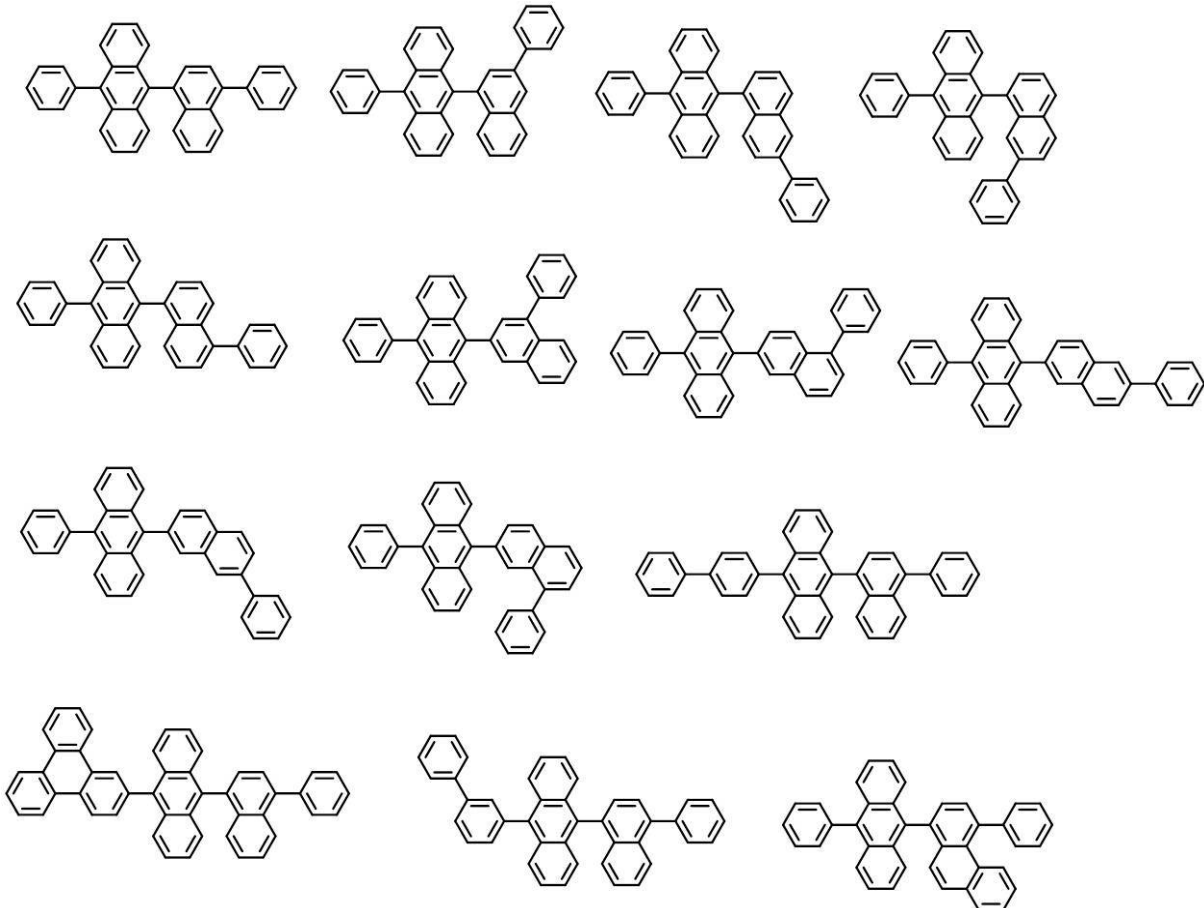
【 0 0 7 1】

【化 2 4】



【 0 0 7 2】

【化 2 5】



【 0 0 7 3】

(電子輸送層)

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

【 0 0 7 4】

(電子注入層)

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

なお、電子注入層と電子輸送層とを併せて電子輸送領域と称することがある。

【 0 0 7 5】

(正孔注入層)

10

20

30

40

50

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

【0076】

（正孔輸送層）

正孔輸送層は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層には、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体等を使用する事ができる。ポリ（N-ビニルカルバゾール）（略称：PVK）やポリ（4-ビニルトリフェニルアミン）（略称：PVTPA）等の高分子化合物を用いることもできる。但し、電子よりも正孔の輸送性の高い物質であれば、これら以外のものを用いてもよい。なお、正孔輸送性の高い物質を含む層は、単層のものだけでなく、上記物質からなる層が二層以上積層したものとしてもよい。

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

【0077】

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

【0078】

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

【0079】

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

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

【0080】

[電子機器]

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

【実施例】

【0081】

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

【0082】

合成例1 [化合物7の合成]

(1) 化合物Aの合成

環流冷却器とマグネティックスターラーを備えた25mlの丸底フラスコに、4-t e

10

20

30

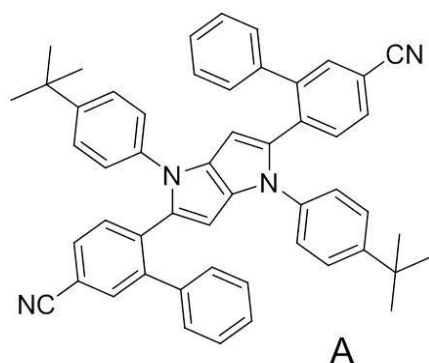
40

50

tert-ブチルアニリン 6 mmol、4-ホルミル-3-フェニルベンゾニトリル 6 mmol、及び TsOH 0.6 mmol を入れた後、氷酢酸を追加し、その混合物を 90 で 30 分間攪拌した。その後、ブタン-2,3-ジオン 3 mmol をシリンジを介してよりゆっくりと添加し、その混合物を 90 で 3 時間攪拌した後、室温まで冷却した。得られた沈殿物を濾過し、冷却した氷酢酸で洗浄し、AcOEt から再結晶させ、減圧乾燥して高純度の生成物を得た。

得られた生成物は、¹H NMR 分析及び HEMS 分析により、下記化合物 A (2,5-Bis(5-cyano-[1,1'-biphenyl]-2-yl)-1,4-bis(4-tert-butylphenyl)-1,4-dihydropyrrolo[3,2-b]pyrrole) であることを確認した。収率は 41% であった。

【化 26】



10

20

【0083】

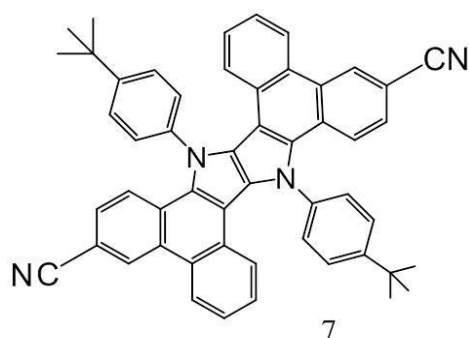
(2) 化合物 7 の合成

アルゴン気流下で、環流冷却器とマグネティックスターラーを備えた 50 ml の丸底フラスコに、乾燥塩化メチレン 12 ml と化合物 A 1 mmol を入れた。その後、ニトロメタン中に溶解した塩化第 2 鉄をシリンジを介して添加し、室温で 30 分間反応させた。その後、15 ml の水を添加し、生成物を 15 分間攪拌した。2 層に分かれたため、水層を塩化メチレン 10 ml で 3 回抽出した。有機層を混合、乾燥して、溶媒を蒸発させ、粗生成物をカラムクロマトグラフィーで精製した。

得られた生成物は、HEMS 分析により、下記化合物 7 (3,12-Dicyano-9,18-bis(4-tert-butylphenyl)-9,18-dihydrodibenzo[e,g]-dibenzo[4,5:6,7]indolo[3,2-b]indole) であることを確認した。収率は 70% であった。

30

【化 27】



40

【0084】

実施例 1

25 mm × 25 mm × 厚さ 1.1 mm の ITO 透明電極 (陽極) 付きガラス基板 (ジオマテック株式会社製) をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を 5 分間行った後、UV オゾン洗浄を 5 分間行った。

洗浄後の透明電極ライン付きガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に前記透明電極を覆うようにして下記化合物 (HI-1) を蒸着して膜厚 60 nm の HI-1 膜を成膜し、正孔注入層を形成した。次に、この正孔注入層上に、正孔輸送材料として上記化合物 (HT-1) を蒸着して膜厚 20

50

nmのHT-1膜を成膜し、正孔輸送層を形成した。こうして、正孔輸送領域を形成した。

さらに、このHT-1膜上に膜厚40nmで、ホスト材料として上記化合物(BH-1)と、ドーパント材料として前記化合物7とを化合物7が重量比で5%含まれるように共蒸着により成膜し、発光層とした。

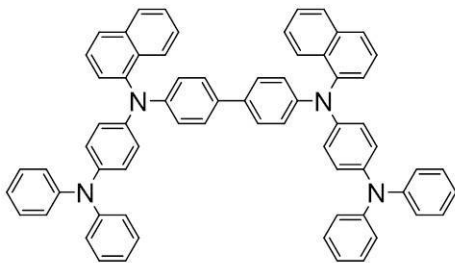
次に、下記化合物(ET-1)を膜厚20nmで蒸着し、電子輸送層とした。その上に、弗化リチウムを膜厚1nmで蒸着し、次いでアルミニウムを膜厚80nmで蒸着した。このアルミニウム/弗化リチウムは陰極として働く。このようにして蛍光発光性の有機EL素子を作製した。

得られた有機EL素子において、色度[CIE色度座標(x, y)]及び色純度[発光ピーク波長 λ_p (単位: nm)]を測定した。また、電流密度50mA/cm²において駆動した際に輝度が初期輝度の80%となるまでの時間(LT80)を測定した。それらの結果を表1に示す。

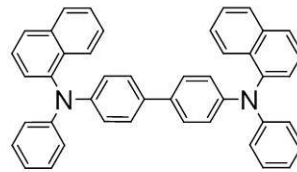
【0085】

以下に、有機EL素子の製造に用いた化合物を示す。

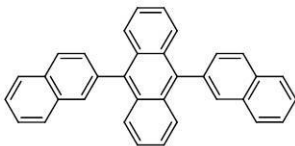
【化28】



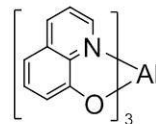
(HI-1)



(HT-1)



(BH-1)



(ET-1)

【0086】

比較例1~2

実施例1において、化合物7の代わりに下記構造の比較化合物1、2を用いた以外は同様にして有機EL素子を作製し、評価した。結果を表1に示す。

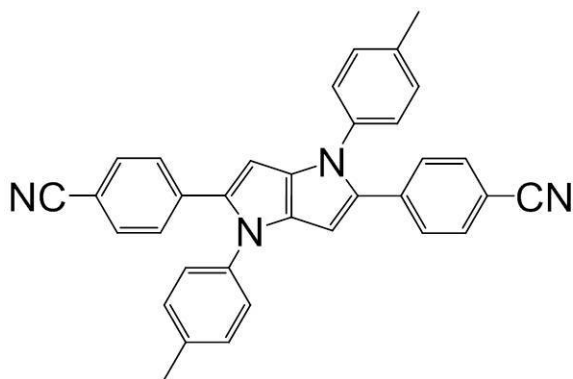
【0087】

10

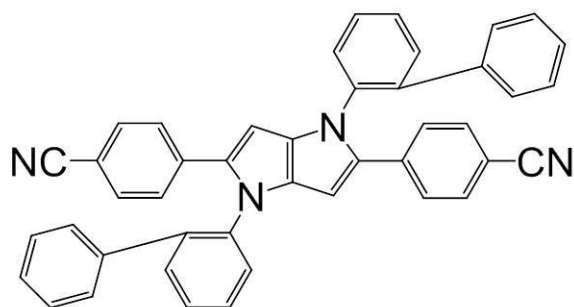
20

30

【化 2 9】



比較化合物1



比較化合物2

10

【0088】

【表 1】

| 表 1 | | | | | |
|------|---------|--------|--------|------------------|----------|
| | ドーパント材料 | 色度 x | 色度 y | λ_p [nm] | LT80 (h) |
| 実施例1 | 化合物7 | 0.170 | 0.127 | 445 | 73 |
| 比較例1 | 比較化合物1 | 0.147 | 0.184 | 462 | 31 |
| 比較例2 | 比較化合物2 | 0.177 | 0.185 | 458 | 40 |

20

【0089】

表 1 より、化合物 7 をドーパント材料として用いた実施例 1 の素子は、色度及び蛍光ピーク波長の数値より、比較例 1 及び 2 に対し、深い青色であり、かつ寿命も長いことが確認できる。

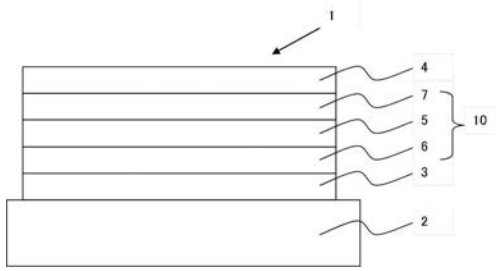
【符号の説明】

【0090】

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

30

【 図 1 】



フロントページの続き

(72)発明者 河村 昌宏

千葉県袖ヶ浦市上泉 1 2 8 0 番地

(72)発明者 水木 由美子

千葉県袖ヶ浦市上泉 1 2 8 0 番地

(72)発明者 羽毛田 匡

千葉県袖ヶ浦市上泉 1 2 8 0 番地

(72)発明者 ダニエル グリコ

ポーランド ピーエル - 0 1 - 1 6 7 ワルシャワ ザビシ 1 6 - 7 2

(72)発明者 マチェイ クルゼスゼウスキー

ポーランド ピーエル - 6 4 - 9 2 0 ピワ ロダコフスキエゴ 3 2

Fターム(参考) 3K107 AA01 CC07 CC21 DD53 DD59 DD68 DD69 FF14 FF20

4C050 AA01 AA07 BB04 CC04 EE02 FF01 GG01 HH01

4C071 AA01 AA08 BB03 BB08 CC02 CC22 EE13 FF03 GG01 JJ01

LL05

| | | | |
|----------------|---|---------|------------|
| 专利名称(译) | 用于有机电致发光器件，有机电致发光器件和电子器件的材料 | | |
| 公开(公告)号 | JP2017208455A | 公开(公告)日 | 2017-11-24 |
| 申请号 | JP2016100072 | 申请日 | 2016-05-19 |
| [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 | | |
| [标]发明人 | 伊藤裕勝 河村昌宏 水木由美子 羽毛田匡 ダニエルグリコ マチエイクルゼスゼウスキー | | |
| 发明人 | 伊藤 裕勝 河村 昌宏 水木 由美子 羽毛田 匡 ダニエル グリコ マチエイ クルゼスゼウスキー | | |
| IPC分类号 | H01L51/50 C09K11/06 C07D487/04 C07D495/22 | | |
| FI分类号 | H05B33/14.B H05B33/22.D C09K11/06.645 C07D487/04.137 C07D495/22 | | |
| F-TERM分类号 | 3K107/AA01 3K107/CC07 3K107/CC21 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/FF14 3K107/FF20 4C050/AA01 4C050/AA07 4C050/BB04 4C050/CC04 4C050/EE02 4C050/FF01 4C050/GG01 4C050/HH01 4C071/AA01 4C071/AA08 4C071/BB03 4C071/BB08 4C071/CC02 4C071/CC22 4C071/EE13 4C071/FF03 4C071/GG01 4C071/JJ01 4C071/LL05 | | |
| 外部链接 | Espacenet | | |

摘要(译)
要解决的问题：提供一种有机EL器件的材料，该器件发出深蓝光并具有长寿命。一种具有一个或多个有机薄膜层的有机电致发光器件，其中所述有机薄膜层是包含发光层并且包含由以下通式(1)表示的化合物的层。 [选择图]无

| (19) 日本国特許庁(JP) | (12) 公開特許公報(A) | (11) 特許出願公開番号 特開2017-208455A (P2017-208455A) |
|-----------------------|--|--|
| | (43) 公開日 | 平成29年11月24日(2017.11.24) |
| (51) Int. Cl. | F I | テーマコード(参考) |
| H01L 51/50 (2006.01) | H05B 33/14 | 3K107 |
| C09K 11/06 (2006.01) | H05B 33/22 | D 4C050 |
| C07D 487/04 (2006.01) | C09K 11/06 | 645 4C071 |
| C07D 495/22 (2006.01) | C07D 487/04 | 137 |
| | C07D 495/22 | |
| | 審査請求 未請求 | 請求項の数 36 O L (全 38 頁) |
| (21) 出願番号 | 特願2016-100072(P2016-100072) | (71) 出願人 |
| (22) 出願日 | 平成28年5月19日(2016.5.19) | 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 516149402 |
| | | (71) 出願人 |
| | | インスティテュート オブ オーガニック ケミストリィ、ポーリッシュ アカデミ ー オブ サイエンスイズ ポーランド ビーエル-01-224 ワルシャワ カスプシヤカ 44/52 |
| | | (74) 代理人 |
| | | 100078732 弁理士 大谷 保 |
| | | (74) 代理人 |
| | | 100131635 弁理士 有永 俊 |
| | | (72) 発明者 |
| | | 伊藤 裕勝 千葉県楡ヶ浦市上泉1280番地 最終頁に続く |
| (54) 【発明の名称】 | 有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器 | |