

(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2005-213188

(P2005-213188A)

(43) 公開日 平成17年8月11日(2005.8.11)

(51) Int. Cl. ⁷	F I	テーマコード (参考)
C07D 209/86	C07D 209/86	3K007
C09K 11/06	C09K 11/06 645	4C204
H05B 33/14	C09K 11/06 650	
	C09K 11/06 660	
	H05B 33/14 B	
審査請求 未請求 請求項の数 8 O L (全 48 頁)		

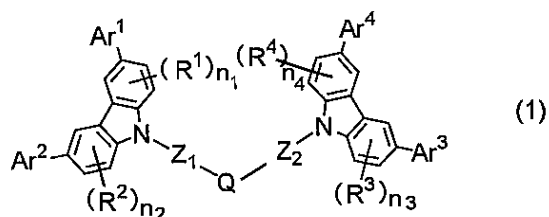
(21) 出願番号	特願2004-21188 (P2004-21188)	(71) 出願人	000005968 三菱化学株式会社 東京都港区芝五丁目33番8号
(22) 出願日	平成16年1月29日 (2004.1.29)	(74) 代理人	100103997 弁理士 長谷川 暁司
		(72) 発明者	飯田 宏一朗 神奈川県横浜市青葉区鴨志田町1000番地 株式会社三菱化学科学技術研究センター 一内
		(72) 発明者	矢部 昌義 神奈川県横浜市青葉区鴨志田町1000番地 株式会社三菱化学科学技術研究センター 一内
		最終頁に続く	

(54) 【発明の名称】 化合物、電荷輸送材料、有機電界発光素子材料および有機電界発光素子

(57) 【要約】

【課題】 優れた電荷輸送性を有する化合物、また、有機電界発光素子に用いた場合、駆動安定性が高く、かつ発光効率の高い素子となる化合物を提供する。

【解決手段】 下記一般式(1)で表わされる化合物。



(一般式(1)中、Ar¹~Ar⁴は、各々独立に、置換基を有していても良い芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表す。R¹~R⁴は、各々独立に任意の置換基を表す。n₁~n₄は、各々独立に0~3の整数を表す。Z₁及びZ₂は、各々カルバゾール環と連結基Qとを繋ぐ、直接結合またはカルバゾール環と共役可能な電子を有する任意の連結基を表す。連結基Qは、分子内において、上記2つのカルバゾール環と実質的に非共役性の、任意の連結基を表す。)

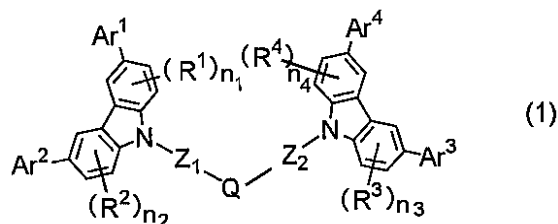
【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記一般式(1)で表わされる化合物。

【化 1】



10

(一般式(1)中、 $Ar^1 \sim Ar^4$ は、各々独立に、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表し、該芳香族炭化水素基及び該芳香族複素環基は、それぞれ置換基を有していても良い。

$R^1 \sim R^4$ は、各々独立に任意の置換基を表す。 $n_1 \sim n_4$ は、各々独立に0~3の整数を表す。

n_1 が2以上の場合の R^1 、 n_2 が2以上の場合の R^2 、 n_3 が2以上の場合の R^3 及び n_4 が2以上の場合の R^4 は、各々 R^1 どうし、 R^2 どうし、 R^3 どうし及び R^4 どうしが互いに同一であっても異なってもよい。

20

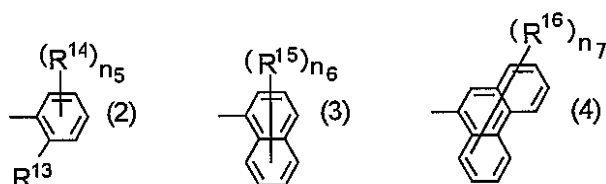
Z_1 及び Z_2 は、各々隣接するカルバゾール環の窒素原子と連結基Qとを繋ぐ、直接結合または該カルバゾール環と共役可能な電子を有する任意の連結基を表す。

Qは、分子内において、 Z_1 及び Z_2 に隣接する2つのカルバゾール環と実質的に非共役性の、任意の連結基を表す。)

【請求項 2】

前記 $Ar^1 \sim Ar^4$ が、各々独立に下記一般式(2)~(4)のいずれかで表される請求項1に記載の化合物。

【化 2】



30

(一般式(2)中、 R^{13} は、任意の置換基を表す。また、一般式(2)~(4)中、 $R^{14} \sim R^{16}$ は、各々独立に任意の置換基を表す。

一般式(2)中、 n_5 は、0~4の整数であり、 n_5 が2以上の場合には、 R^{14} どうしは互いに同一であっても異なってもよい。

40

一般式(3)中、 n_6 は、0~7の整数であり、 n_6 が2以上の場合には、 R^{15} どうしは互いに同一であっても異なってもよい。

一般式(4)中、 n_7 は、0~9の整数であり、 n_7 が2以上の場合には、 R^{16} どうしは互いに同一であっても異なってもよい。)

【請求項 3】

請求項1または2に記載の化合物を含有してなる、電荷輸送材料。

【請求項 4】

請求項1または2に記載の化合物を含有してなる、有機電界発光素子材料。

【請求項 5】

基板上に、陽極、陰極、およびこれら両極間に設けられた中間層を有する有機電界発光

50

素子において、該中間層に請求項 1 または 2 に記載の化合物を含む層を有する、有機電界発光素子。

【請求項 6】

請求項 1 または 2 に記載の化合物を含む層が発光層である、請求項 5 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 7】

該発光層が、請求項 1 または 2 に記載の化合物をホスト材料として含み、該ホスト材料に対してドーブされる材料として有機金属錯体を含む、発光層を有する請求項 6 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 8】

更に、該発光層の陰極側界面に接する正孔阻止層を有する、請求項 6 または 7 に記載の有機電界発光素子。

10

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は新規な化合物に関するものであり、詳しくは電荷輸送材料、有機電界発光素子材料として有用な化合物に関するものである。

【背景技術】

【0002】

近年、薄膜型の電界発光 (EL) 素子としては、無機材料を使用したものに代わり、有機薄膜を用いた EL 素子の開発が行われるようになってきている。また、EL 素子の発光効率を上げる試みとして、蛍光 (一重項励起子による発光) ではなく燐光 (三重項励起子による発光) を用いることが検討されている。

20

有機電界発光素子をフラットパネル・ディスプレイ等の表示素子に応用するためには、素子の発光効率を改善すると同時に駆動時の安定性を十分に確保する必要がある。駆動時の安定性が保てない駆動劣化の主原因は、発光層の劣化によると推定されている。発光層の劣化は、発光層の温度上昇により起こる。発光層の温度上昇は、次の (i) ~ (ii) の要因により起こるものと考えられる。(i) 素子に引加する電流が増えると、発光層に注入される電荷が増え、それに伴い励起子とならない電荷の量が増加する。(ii) 励起子となったもの

30

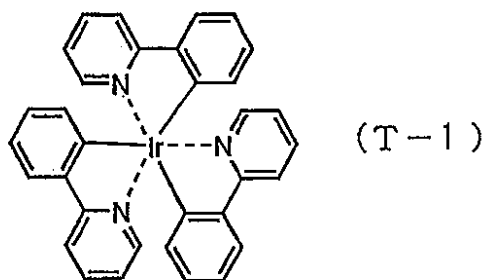
【0003】

特に、三重項励起子は、一重項励起子に比較して熱的安定性に劣るため、三重項励起子を使用した素子は発光層の劣化、駆動劣化が起こりやすいと考えられる。非特許文献 1 では、以下に示す燐光分子 (T-1) を発光層にドーブすることで、緑色発光での効率が大きく改善されることが提案されている。しかしながら、(T-1) を使用した有機電界発光素子は、その発光効率が注入電流の上昇とともに大きく低下しており、発光層の劣化、駆動劣化が起こることが知られている。

【0004】

【化 1】

40



【0005】

50

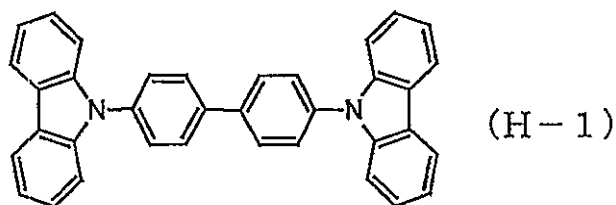
これまでに開発された燐光分子を用いた有機電界発光素子の多くは、発光層のホストとしてカルバゾリル基を含む材料を用いることを特徴としている。

上記非特許文献1ではホスト材料として以下に示すビフェニル誘導体(H-1)を用いている。(H-1)は、連結基を介して一分子中に2つのカルバゾール環を有しているため、正孔輸送能と電子輸送能とがともに優れており、ホスト材料として優れている。しかしながら、上記(H-1)は非常に結晶化しやすく、また、(H-1)を使用した発光層は劣化しやすいことが知られている。非特許文献2では、(H-1)が電気的な酸化還元に関与しやすく、特に、一電子酸化された後、3位または6位の水素原子が水素イオンとして脱離することを示している。

【0006】

10

【化2】



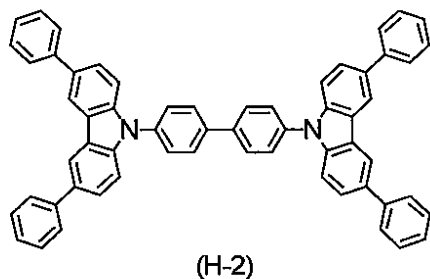
【0007】

また、特許文献1では、同様に連結基を介して一分子中に2つのカルバゾール環を有する化合物(H-2)が有機電界発光素子の電荷輸送/発光材料として提案されている。(H-2)は、上記(H-1)に比べ、高い耐熱性を有し、膜の安定性も良いと考えられる。

20

【0008】

【化3】



30

【0009】

しかしながら、上記(H-2)は(H-1)に比べ、共役系が大きく広がっているため、HOMO(最高被占分子軌道)とLUMO(最低空分子軌道)との間のバンドギャップが小さく、一重項励起子のエネルギー準位が低い。三重項励起子は一重項励起子に比べエネルギー準位が低いので、燐光分子を用いた有機電界発光素子において、上記(H-2)のような化合物を発光層のホストとして用いた場合、黄~緑色より短波長の発光効率がよく得られないと考えられる。

40

【特許文献1】米国特許第6562982号明細書

【非特許文献1】Appl. Phys. Lett., 75巻, 4頁, 1999年

【非特許文献2】J. Electrochem. Soc., 122巻, 876頁, 1975年

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0010】

本発明は、連結基を介して1分子中にカルバゾール環を2つ以上有する化合物を使用する有機電界発光素子において、駆動安定性に優れ、かつ発光効率の高い有機電界発光素子を提供することを目的とする。

50

【課題を解決するための手段】

【0011】

本発明者らが鋭意検討した結果、下記一般式(1)で表わされる、特定の連結基でカルバゾール環が連結された化合物が上記諸課題を解決できることを見だし、本発明に至った。

下記一般式(1)で表わされる化合物は、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基(Ar¹~Ar⁴)を有するカルバゾール環が、非共役連結基(Q)で連結していることを特徴とする。非共役連結基(Q)で連結されることにより、分子の対称性が低下するため、非晶質性が向上し、容易には結晶化しない非晶質薄膜を得ることが可能となる。また、水素イオンの脱離も起こらないため、発光層が劣化しにくく、駆動安定性に優れた有機電界発光素子を提供することができる。

10

【0012】

また、共役可能な連結基で連結している化合物に比べて、バンドギャップが大きいいため、発光効率の高い素子を提供することができる。

更に、カルバゾール環の3-および6-位が芳香族炭化水素基または芳香族複素環基(Ar¹~Ar⁴)で置換されているため、酸化された後の水素イオンの脱離が大幅に抑制され、電気的な酸化還元に対して安定である。

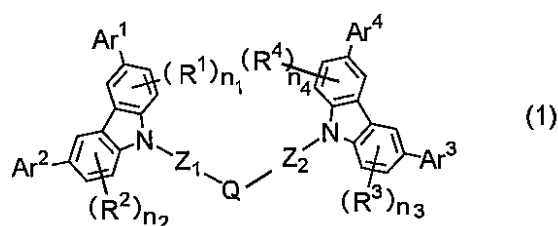
【0013】

すなわち、本発明は下記一般式(1)で表わされる化合物、該化合物を含んでなる電荷輸送材料、有機電界発光素子材料、および該化合物を含む層を有する有機電界発光素子に

20

【0014】

【化4】



30

【0015】

(一般式(1)中、Ar¹~Ar⁴は、各々独立に、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表し、該芳香族炭化水素基及び該芳香族複素環基は、それぞれ置換基を有していても良い。

R¹~R⁴は、各々独立に任意の置換基を表す。n₁~n₄は、各々独立に0~3の整数を表す。

n₁が2以上の場合のR¹、n₂が2以上の場合のR²、n₃が2以上の場合のR³及びn₄が2以上の場合のR⁴は、各々R¹どうし、R²どうし、R³どうし及びR⁴どうしが互いに同一であっても異なってもよい。

40

Z₁及びZ₂は、各々隣接するカルバゾール環の窒素原子と連結基Qとを繋ぐ、直接結合または該カルバゾール環と共役可能な電子を有する任意の連結基を表す。

連結基Qは、分子内において、Z₁及びZ₂に隣接する2つのカルバゾール環と実質的に非共役性の、任意の連結基を表す。)

【発明の効果】

【0016】

本発明によれば、優れた電荷輸送性を有する非晶質性の高い化合物、及び、駆動安定性に優れ、かつ発光効率の高い有機電界発光素子を提供できる。

【発明を実施するための最良の形態】

【0017】

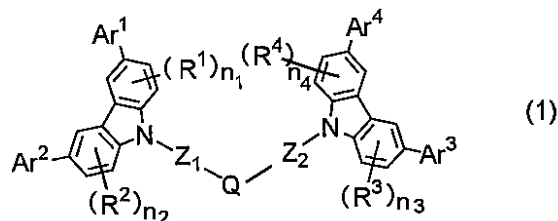
50

以下、本発明の実施の形態について詳細に説明するが、本発明は以下の実施の形態に限定されるものではなく、その要旨の範囲内で種々変形して実施することができる。

本発明の化合物は、下記一般式(1)で表されるものである。

【0018】

【化5】



10

【0019】

(Ar¹ ~ Ar⁴)

一般式(1)中、Ar¹ ~ Ar⁴は、各々独立に、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表す。該芳香族炭化水素基及び該芳香族複素環基は、それぞれ置換基を有していても良い。

該芳香族炭化水素基を例示するならば、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、ペリレン環、テトラセン環、ピレン環、ベンズピレン環、クリセン環、トリフェニレン環、アセナフテン環などの、6員環の単環または2~5縮合環由来の1価の基であり、電子供与性および電子受容性がともに比較的小さい性質を有する点で共通する。

20

【0020】

該芳香族複素環基を例示するならば、フラン環、ベンゾフラン環、チオフェン環、ベンゾチオフェン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、オキサジアゾール環、インドール環、カルバゾール環、ピロロイミダゾール環、ピロロピラゾール環、ピロロピロール環、チエノピロール環、チエノチオフェン環、フロピロール環、フロフラン環、チエノフラン環、ベンゾイソオキサゾール環、ベンゾイソチアゾール環、ベンゾイミダゾール環、ピリジン環、ピラジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、シノリン環、キノキサリン環、フェナントリジン環、ベンゾイミダゾール環、ペリミジン環、キナゾリン環、キナゾリノン環、アズレン環などの、ヘテロ原子として、例えば、酸素、窒素、硫黄、ケイ素からなる群から選ばれるものを、通常1以上、通常4以下、中でも2以下有する、5または6員環の単環または2~4縮合環由来の1価の基であり、高い電荷輸送性を有する点で共通する。

30

【0021】

Ar¹ ~ Ar⁴として、HOMO(最高被占分子軌道)とLUMO(最低空分子軌道)との間のバンドギャップが大きいという点からは、芳香族炭化水素基が好ましい。中でも、ベンゼン環、ナフタレン環、フェナントレン環、由来の基が好ましい。

電荷輸送性が大きいという点からは、芳香族複素環基が好ましい。中でも、チオフェン環、ピロール環、ピラゾール環、オキサジアゾール環、インドール環、ピリジン環、ピラジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、フェナントリジン環、由来の基が好ましい。Ar¹ ~ Ar⁴は、それぞれ分子量が、その置換基も含めて、好ましくは、400以下、更に好ましくは250以下程度である。

40

(R¹ ~ R⁴)

R¹ ~ R⁴は、任意の置換基が適用可能であり、各々が同一であっても異なってもよい。また、R¹ ~ R⁴は、置換基を有していてもよい。

【0022】

n₁ ~ n₄は、各々独立に0~3の整数を表す。n₁ ~ n₄が、それぞれ0の場合は、n₁ ~ n₄が水素原子(無置換)であることを意味する。

50

n_1 が2以上の場合、 R^1 どうしは互いに同一であっても異なってもよい。 n_2 が2以上の場合、 R^2 どうしは互いに同一であっても異なってもよい。 n_3 が2以上の場合、 R^3 どうしは互いに同一であっても異なってもよい。 n_4 が2以上の場合、 R^4 どうしは互いに同一であっても異なってもよい。

($Ar^1 \sim Ar^4$ の置換基、 $R^1 \sim R^4$)

上記 $Ar^1 \sim Ar^4$ が有していても良い置換基、および $R^1 \sim R^4$ は、本発明の性能を損なわない範囲で任意であるが、それぞれ分子量が、その置換基も含めて、好ましくは400以下、更に好ましくは250以下程度のもので、例示するならば以下の通りである。

(1) 置換基を有していてもよいアルキル基、好ましくは炭素数1から10、更に好ましくは炭素数1から6の直鎖、分岐または環状のアルキル基が挙げられる。例えば、メチル、エチル、*n*-プロピル、2-プロピル、*n*-ブチル、イソブチル、*tert*-ブチル、シクロヘキシル基などが挙げられる。

10

(2) 置換基を有していてもよいアルケニル基、好ましくは炭素数2から10、更に好ましくは炭素数2から7のアルケニル基が挙げられる。例えば、ビニル、アリル、1-ブテニル基などが挙げられる。

(3) 置換基を有していてもよいアルキニル基、好ましくは炭素数2から10、更に好ましくは炭素数2から7のアルキニル基が挙げられる。例えば、エチニル、プロパルギル基などが挙げられる。

(4) 置換基を有していてもよいアラルキル基、好ましくは炭素数7から25、更に好ましくは炭素数7から15のアラルキル基が挙げられる。例えば、ベンジル基などが挙げられる。

20

(5) 置換基を有していてもよいアミノ基が挙げられる。該アミノ基として好ましくは、炭素数1から10、更に好ましくは炭素数1から6のアルキル基を1つ以上有するアルキルアミノ基が挙げられる。例えばメチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ基などが挙げられる。また、該アミノ基として好ましくは、炭素数6から25、更に好ましくは炭素数6から15の芳香族炭化水素基を有するアリールアミノ基が挙げられる。例えばフェニルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノ基などが挙げられる。また、該アミノ基として好ましくは、5または6員環の芳香族複素環基を有するヘテロアリールアミノ基が挙げられる。例えばピリジルアミノ、チエニルアミノ、ジチエニルアミノ基などが含まれる。また、該アミノ基として好ましくは、炭素数2から10、更に好ましくは炭素数2から7のアシル基を有するアシルアミノ基が挙げられる。例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノ基などが含まれる。

30

(6) 置換基を有していてもよいアルコキシ基、好ましくは炭素数1から10、更に好ましくは炭素数1から7のアルコキシ基が挙げられる。例えば、メトキシ、エトキシ、ブトキシ基などが挙げられる。

(7) 置換基を有していてもよいアリールオキシ基、好ましくは炭素数6から25、更に好ましくは炭素数6から15の芳香族炭化水素基を有するものである。例えば、フェニルオキシ、1-ナフチルオキシ、2-ナフチルオキシ基などが挙げられる。

(8) 置換基を有していてもよいヘテロアリールオキシ基、好ましくは5または6員環の芳香族複素環基を有するものである。例えば、ピリジルオキシ、チエニルオキシ基などが挙げられる。

40

(9) 置換基を有していてもよいアシル基、好ましくは、炭素数1から10、更に好ましくは炭素数1から6のアシル基が挙げられる。例えば、ホルミル、アセチル、ベンゾイル基などが挙げられる。

(10) 置換基を有していてもよいアルコキシカルボニル基、好ましくは、炭素数2から10、更に好ましくは炭素数2から7のアルコキシカルボニル基が挙げられる。例えば、メトキシカルボニル、エトキシカルボニル基などが挙げられる。

(11) 置換基を有していてもよいアリールオキシカルボニル基、好ましくは、炭素数7から25、更に好ましくは炭素数7から15のアリールオキシカルボニル基が挙げられる。例えば、フェノキシカルボニル基などが挙げられる。

50

(12) 置換基を有していてもよいアルキルカルボニルオキシ基、好ましくは炭素数2から10、更に好ましくは炭素数2から7のアルキルカルボニルオキシ基が挙げられる。例えばアセトキシ基などが挙げられる。

(13) カルボキシル基、

(14) シアノ基、

(15) 水酸基、

(16) チオール基が挙げられる。

(17) 置換基を有していてもよいアルキルチオ基、好ましくは炭素数1から10、更に好ましくは炭素数2から7のアルキルチオ基が挙げられる。例えば、メチルチオ基、エチルチオ基などが挙げられる。

10

(18) 置換基を有していてもよいアリアルチオ基、好ましくは炭素数6から25、更に好ましくは炭素数6から14のアリアルチオ基が挙げられる。例えば、フェニルチオ基、1-ナフチルチオ基などが挙げられる。

(19) 置換基を有していてもよいスルホニル基、例えばメシル基、トシル基などが挙げられる。

(20) 置換基を有していてもよいシリル基、例えばトリメチルシリル基、トリフェニルシリル基など挙げられる。

(21) 置換基を有していてもよいボリル基、例えばジメシチルボリル基などが挙げられる。

(22) 置換基を有していてもよいホスフィノ基、例えばジフェニルホスフィノ基などが挙げられる。

20

(23) 置換基を有していてもよい芳香族炭化水素基が挙げられる。例えば、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、ペリレン環、テトラセン環、ピレン環、ベンズピレン環、クリセン環、トリフェニレン環、フルオランテン環などの、5または6員環の単環または2~5縮合環由来の1価の基が挙げられる。

(24) 置換基を有していてもよい芳香族複素環基が挙げられる。例えば、フラン環、ベンゾフラン環、チオフエン環、ベンゾチオフエン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、オキサジアゾール環、インドール環、カルバゾール環、ピロロイミダゾール環、ピロロピラゾール環、ピロロピロール環、チエノピロール環、チエノチオフエン環、フロピロール環、フロフラン環、チエノフラン環、ベンゾイソオキサゾール環、ベンゾイソチアゾール環、ベンゾイミダゾール環、ピリジン環、ピラジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、シノリン環、キノキサリン環、ベンゾイミダゾール環、ペリミジン環、キナゾリン環、キナゾリノン環、アズレン環などの、ヘテロ原子として、酸素、窒素、硫黄、ケイ素からなる群から選ばれるものを、通常1以上、通常4以下、中でも2以下有する、5または6員環の単環または2~4縮合環由来の1価の基が挙げられる。

30

【0023】

$R^1 \sim R^4$ として、電荷輸送性、バンドギャップの点から、好ましくは無置換($n=0$)、または、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アラルキル基、アルコキシ基、アリアルオキシ基、ヘテロアリアルオキシ基、芳香族炭化水素基、芳香族複素環基であり、更に好ましくは、無置換($n=0$)、または、アルキル基、芳香族炭化水素基、芳香族複素環基である。

40

【0024】

$R^1 \sim R^4$ の置換位置としては、耐熱性の点で、カルバゾール環の2-位、7-位が好ましく、酸化還元安定性の点で、カルバゾール環の1-位、8-位が好ましい。

($Ar^1 \sim Ar^4$ の置換基の置換基、 $R^1 \sim R^4$ の置換基)

上述した各基(1)~(24)が有する置換基、すなわち、 $Ar^1 \sim Ar^4$ が有していてもよい置換基の置換基および $R^1 \sim R^4$ の置換基としては、例えば、炭素数1~6程度のアルキル基、炭素数1~6程度のアルコキシ基、ハロゲン原子(好ましくは、フッ素原子または塩素原子)およびフェニル基などが挙げられる。

50

(Z_1 、 Z_2)

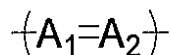
一般式(1)中、連結基 Z_1 及び Z_2 は、各々独立に隣接するカルバゾール環の窒素原子と連結基Qとを繋ぐ直接結合または該カルバゾール環と共役可能な電子を有する連結基であれば任意のものが適用可能である。 Z_1 及び Z_2 としては、その置換基も含めた分子量が好ましくは400以下、更に好ましくは250以下である。

【0025】

ここで、カルバゾール環と共役可能な電子を有する連結基とは、単結合と多重結合が交互に存在する連結基であって、

【0026】

【化6】



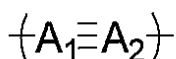
10

【0027】

および

【0028】

【化7】



20

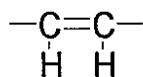
【0029】

で表される構造のうち、1種類のみを用いて表される連結基、1種類を複数個連結して表される連結基、2種類以上を各々1つずつ或いは複数個組み合わせて連結して表される、連結基である。

(但し、 A_1 および A_2 は、同一でも互いに異なっていてもよい、価数の点から適用可能な、任意の原子を表す。例えば、該原子としては炭素原子、窒素原子、ケイ素原子、リン原子などが挙げられる。)

【0030】

【化8】



30

【0031】

A_1 および A_2 は、原子の価数によっては、記載以外にも結合を有することがある。例えば、上記のように、ビニレン基の2つの炭素原子(それぞれ A_1 、 A_2 に相当)は、炭素原子の価数が4であり、上記 A_1 、 A_2 に対して、それぞれ1つずつの水素原子が結合していることになる。)

該連結基としては、二価の芳香族炭化水素基、二価の芳香族複素環基、非芳香族性環状オレフィン類由来の二価の基なども含まれる。

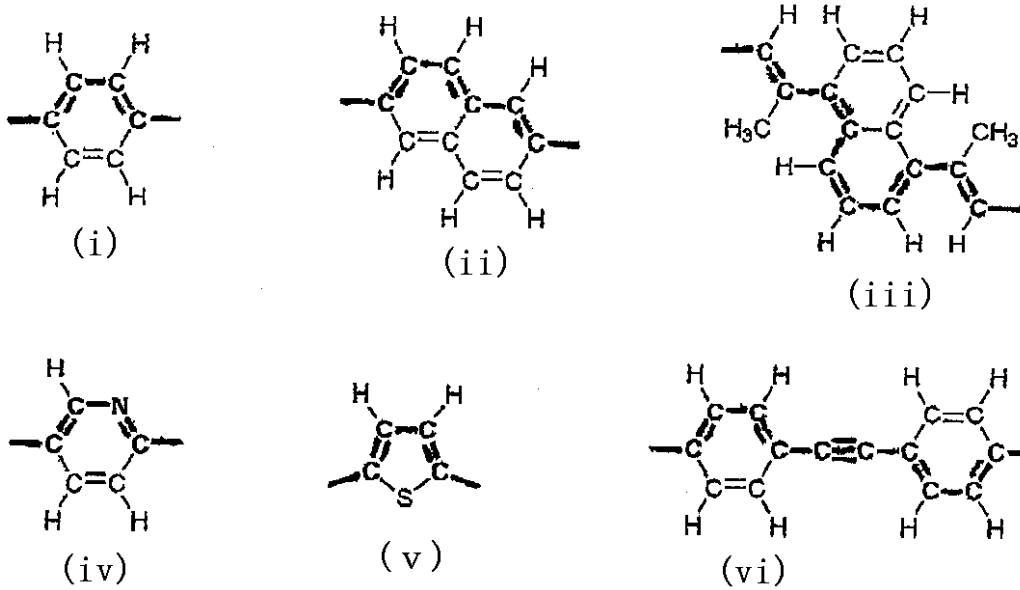
40

【0032】

具体例を挙げて説明するならば、共役可能な電子を有する各連結基は以下のように表現することができる。

【0033】

【化9】



10

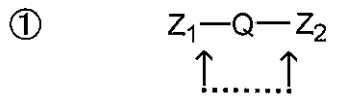
【0034】

具体例からも明らかな様に、隣接するカルバゾール環とQとを結合する部分が、単結合、多重結合の交互で表現できるとは、すなわち、以下の・・・・・・で表される部分が単結合と多重結合の交互で表現できればよい。

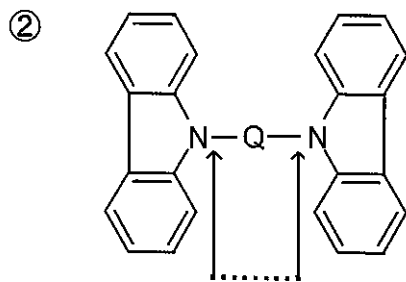
20

【0035】

【化10】



30



(Z₁, Z₂が直接結合の場合)

40

【0036】

また、説明するまでもないことであるが、連結基を構造式で図説表現すると、単結合と多重結合で表現できないルートをも有する場合もあるが、連結基中、単結合と多重結合の交互で表現できるルートがあればよい。上記具体例中の(i)を例に挙げると、図上、太線の部分は、左から単結合 - 二重結合 - 単結合 - 二重結合 - 単結合と単結合と多重結合の交互で表現できる。

50

【0037】

しかしながら、細線の部分のルートをとると、左から（最左、最右の結合は図面上太線）

単結合 - 単結合 - 二重結合 - 単結合 - 単結合

と、単結合と多重結合の交互で表現できない。

しかしながら、このような場合、太線の部分の様に、単結合と多重結合の交互で表現できるルートがあるので、(i)で表される連結基は、カルバゾール環と共役可能な電子を有する連結基である。

【0038】

連結基 Z_1 及び Z_2 は、それぞれ 1 種類または 2 種類以上の基を連結して用いることができる。 10

また、連結基 Z_1 及び Z_2 として、好ましくは、直接結合、置換基を有していてもよいアルケン由来の二価の基、置換基を有していてもよいアルキン由来の二価の基、置換基を有していてもよい二価の、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基などが挙げられる。

【0039】

より好ましくは、直接結合、芳香族炭化水素基、芳香族複素環基である。該芳香族炭化水素基では単環または 2 ~ 3 環が縮合してなる芳香族炭化水素基、前記芳香族複素環基では単環または 2 ~ 3 環が縮合してなる芳香族複素環基が好ましい。

尚、該芳香族炭化水素基としては、例えばベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、ペリレン環、テトラセン環、ピレン環、ベンズピレン環、クリセン環、トリフェニレン環、フルオランテン環などの、6 員環の単環または 2 ~ 5 縮合環由来の基が挙げられる。 20

【0040】

また、該芳香族複素環基としては、例えば、フラン環、ベンゾフラン環、チオフェン環、ベンゾチオフェン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、オキサジアゾール環、インドール環、カルバゾール環、ピロロイミダゾール環、ピロロピラゾール環、ピロロピロール環、チエノピロール環、チエノチオフェン環、フロピロール環、フロフラン環、チエノフラン環、ベンゾイソオキサゾール環、ベンゾイソチアゾール環、ベンゾイミダゾール環、ピリジン環、ピラジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、シノリン環、キノキサリン環、ベンゾイミダゾール環、ペリミジン環、キナゾリン環、キナゾリノン環、アズレン環などの単環または 2 ~ 4 縮合環由来の基が挙げられる。 30

(Z_1 , Z_2 の置換基)

上記連結基 Z_1 及び Z_2 は、任意の置換基を有していてもよい。該置換基の例を以下に記載する。

(1) 置換基を有していてもよいアルキル基、好ましくは炭素数 1 から 10、更に好ましくは炭素数 1 から 6 の直鎖または分岐のアルキル基が挙げられる。例えば、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、2-プロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*tert*-ブチル基などが挙げられる。

(2) 置換基を有していてもよいアルケニル基、好ましくは、炭素数 2 から 10、更に好ましくは炭素数 2 から 7 のアルケニル基が挙げられる。例えば、ビニル基、アリル基、1-ブテニル基などが挙げられる。 40

(3) 置換基を有していてもよいアルキニル基、好ましくは炭素数 2 から 10、更に好ましくは炭素数 2 から 7 のアルキニル基が挙げられる。例えば、エチニル基、プロパルギル基などが挙げられる。

(4) 置換基を有していてもよいアラルキル基、好ましくは炭素数 7 から 25、更に好ましくは炭素数 7 から 15 アラルキル基が挙げられる。例えば、ベンジル基、フェネチル基などが挙げられる。

(5) 置換基を有していてもよいアミノ基が挙げられる。該アミノ基として好ましくは、炭素数 1 から 10、更に好ましくは炭素数 1 から 6 のアルキル基を 1 つ以上有するアルキ 50

ルアミノ基が挙げられる。例えばメチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジベンジルアミノ基などが挙げられる。また、該アミノ基として好ましくは、炭素数6から25、更に好ましくは炭素数6から14の芳香族炭化水素基を有するアリールアミノ基が挙げられる。例えばフェニルアミノ基、ジフェニルアミノ基、ジトリルアミノ基などが挙げられる。また、該アミノ基として好ましくは、5または6員環の芳香族複素環基を有するヘテロアリールアミノ基が挙げられる。例えばピリジルアミノ基、チエニルアミノ基、ジチエニルアミノ基などが含まれる。また、該アミノ基として好ましくは、炭素数2から10、更に好ましくは炭素数2から7のアシル基を有するアシルアミノ基が挙げられる。例えばアセチルアミノ基、ベンゾイルアミノ基などが含まれる。

(6) 置換基を有していてもよいアルコキシ基、好ましくは炭素数1から10、更に好ましくは炭素数1から6のアルコキシ基が挙げられる。例えば、メトキシ基、エトキシ基、ブトキシ基などが挙げられる。

(7) 置換基を有していてもよいアリールオキシ基、好ましくは炭素数6から25、更に好ましくは炭素数6から15の芳香族炭化水素基を有するものである。例えば、フェニルオキシ基、1-ナフチルオキシ基、2-ナフチルオキシ基などが挙げられる。

(8) 置換基を有していてもよいヘテロアリールオキシ基、好ましくは5または6員環の芳香族複素環基を有するものである。例えば、ピリジルオキシ基、チエニルオキシ基などが挙げられる。

(9) 置換基を有していてもよいアシル基、好ましくは、炭素数1から10、更に好ましくは炭素数1から6のアシル基が挙げられる。たとえばホルミル基、アセチル基、ベンゾイル基などが挙げられる。

(10) 置換基を有していてもよいアルコキシカルボニル基、好ましくは炭素数2から10、更に好ましくは炭素数2から6のアルコキシカルボニル基が挙げられる。例えば、メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基などが挙げられる。

(11) 置換基を有していてもよいアリールオキシカルボニル基、好ましくは炭素数7から25、更に好ましくは炭素数7から15のアリールオキシカルボニル基が挙げられる。例えば、フェノキシカルボニル基などが挙げられる。

(12) 置換基を有していてもよいアルキルカルボニルオキシ基、好ましくは炭素数2から10、更に好ましくは炭素数2から7のアルキルカルボニルオキシ基が挙げられる。例えばアセトキシ基などが挙げられる。

(13) カルボキシル基、

(14) シアノ基、

(15) 水酸基、

(16) チオール基が挙げられる。

(17) 置換基を有していてもよいアルキルチオ基、好ましくは炭素数1から10、更に好ましくは炭素数1から6のアルキルチオ基が挙げられる。例えば、メチルチオ基、エチルチオ基などが挙げられる。

(18) 置換基を有していてもよいアリールチオ基、好ましくは炭素数6~25、更に好ましくは炭素数6から14のアリールチオ基が挙げられる。例えば、フェニルチオ基、1-ナフチルチオ基などが挙げられる。

(19) 置換基を有していてもよいスルホニル基、例えば、メシル基、トシル基などが挙げられる。

(20) 置換基を有していてもよいシリル基、例えば、トリメチルシリル基、トリフェニルシリル基などが挙げられる。

(21) 置換基を有していてもよいボリル基、例えば、ジメシチルボリル基などが挙げられる。

(22) 置換基を有していてもよいホスフィノ基、例えば、ジフェニルホスフィノ基などが挙げられる。

(23) 置換基を有していてもよい芳香族炭化水素基が挙げられる。例えば、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、ペリレン環、テトラセン環、ピレ

ン環、ベンズピレン環、クリセン環、トリフェニレン環、フルオランテン環などの、6員環の単環または2～5縮合環由来の基が挙げられる。

(24) 置換基を有してもよい芳香族複素環基が挙げられる。例えば、フラン環、ベンゾフラン環、チオフェン環、ベンゾチオフェン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、オキサジアゾール環、インドール環、カルバゾール環、ピロロイミダゾール環、ピロロピラゾール環、ピロロピロール環、チエノピロール環、チエノチオフェン環、フロピロール環、フロフラン環、チエノフラン環、ベンゾイソキサゾール環、ベンゾイソチアゾール環、ベンゾイミダゾール環、ピリジン環、ピラジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、シノリン環、キノキサリン環、ベンゾイミダゾール環、ペリミジン環、キナゾリン環、キナゾリノン環、アズレン環などの、5または6員環の単環または2～5縮合環由来の基が挙げられる。

10

【0041】

分子振動を制限する観点から、 Z_1 及び Z_2 は、その置換基としてアルキル基或いは芳香族炭化水素基を有すること、或いは置換基を有さないことが好ましい。前記アルキル基の中では、メチル基が更に好ましく、芳香族炭化水素基の中ではフェニル基が更に好ましい。最も好ましくは、 Z_1 及び Z_2 が置換基を有さないことである。

(Q)

一般式(1)中、連結基Qとは、分子内において、 Z_1 及び Z_2 に隣接する2つのカルバゾール環と実質的に非共役性の、任意の連結基である。連結基Qを有することにより、1分子中に2つ以上のカルバゾール環を有する化合物であっても、有機電界発光素子として使用した場合に、駆動安定性に優れ、かつ発光効率の高い素子を提供する事が出来る。

20

【0042】

2つのカルバゾール環が共役不可能であれば、酸化還元電位差が拡大し、HOMO(最高被占分子軌道)とLUMO(最低空分子軌道)との間のバンドギャップが大きくなる。バンドギャップが大きくなることにより、発光効率の高い素子を提供することが出来る。

ここで、非共役性の連結基とは、具体的には、上記共役可能な連結基とは逆で、単結合と多重結合の交互で表現できない連結基が挙げられる。すなわち、上記共役可能な連結基の説明を参照に、逆に考えるものである。

【0043】

但し、どちらかのカルバゾール環もしくは連結基 Z_1 、 Z_2 と連結基Qが、実質的に同一平面上に存在し得ない構造となり得るような連結基、すなわち非共役とする連結基であれば、本発明に含まれる。例えば、連結基Qがo-フェニレン基、連結基 Z_1 、 Z_2 が直接結合である構造は、単結合と多重結合の交互で表現することが可能である。しかし、化合物が最安定化構造をとった際に、カルバゾール環と連結基Qが、同一平面上に存在し得ない構造となる。そのため、連結基Qは隣接する2つのカルバゾール環と非共役性になるため、本発明の範囲内である。

30

(Qの例示)

連結基Qを例示すると以下の通りである。連結基Qとしては、その置換基も含め好ましくは分子量400以下、更に好ましくは分子量250以下である。

(1) 置換基を有してもよいアルカン由来の二価の基(パーフルオロアルカンを含む)、好ましくは炭素数1～10、更に好ましくは炭素数1～6のアルカン由来の基である。

40

(2) 酸素原子 - O - 、

(3) 硫黄原子 - S - 、

(4) 2価のアミノ基 - NH - 、

(5) カルボニル基 - CO - 、

(6) カルボニルオキシ基 - CO - O -

(7) スルホニル基 - SO₂ - 、

(8) 置換基を有してもよいアミド基 - NHCO - 、

(9) 置換基を有してもよいボランジイル基 - BH - 、

(10) 置換基を有してもよいシリル基 - SiH₂ - 、

50

(11) 置換基を有してもよいシロキシ基 - OSiH₂ -、

(12) 置換基を有してもよいホスフィノ基 - PH -、

(13) 置換基を有していてもよい2価の芳香族炭化水素基(例えばベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、ペリレン環、テトラセン環、ピレン環、ベンズピレン環、クリセン環、トリフェニレン環、アセナフテン環、フルオランテン環などの6員環の単環或いは2~5縮合環由来の2価の基が挙げられる。中でも、酸化還元電位差、耐熱性の点で、好ましくは、ベンゼン環、ナフタレン環、フェナントレン環、ピレン環、更に好ましくはベンゼン環、ナフタレン環である。)

(14) または、置換基を有していてもよい2価の芳香族複素環基(例えばフラン環、ベンゾフラン環、チオフェン環、ベンゾチオフェン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、オキサジアゾール環、インドール環、カルバゾール環、ピロロイミダゾール環、ピロピラゾール環、ピロロピロール環、チエノピロール環、チエノチオフェン環、フロピロル環、フロフラン環、チエノフラン環、ベンゾイソオキサゾール環、ベンゾイソチアゾール環、ベンゾイミダゾール環、ピリジン環、ピラジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、シノリン環、キノキサリン環、ベンゾイミダゾール環、ペリミジン環、キナゾリン環、キナゾリノン環、アズレン環などの、6または5員環の単環或いは2~5縮合環由来の2価の基が挙げられる。中でも、酸化還元電位差、電荷輸送性の点で、好ましくは、チオフェン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、オキサジアゾール環、インドール環、カルバゾール環、ピリジン環、ピラジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、更に好ましくは、ピリジン環、ピラジン環、トリアジン環、キノリン環、である。) などが挙げられる。

【0044】

連結基Qは、本発明の趣旨に則る限りにおいて、単独若しくは2種以上の基を連結して適用可能である。

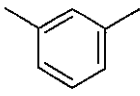
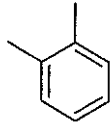
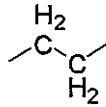
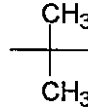
連結基Qの好ましい具体例を以下に示す。以下、L¹¹、L¹⁰は、任意の置換基を示し、好ましくはアルキル基、芳香族炭化水素基、芳香族複素環基である。

【0045】

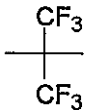
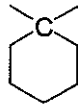
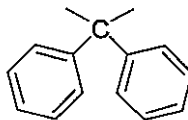
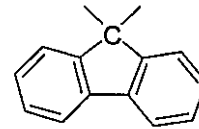
10

20

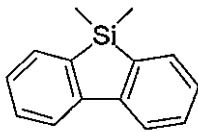
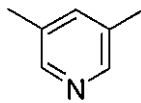
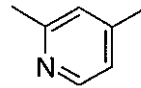
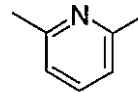
【化 1 1】

**Q-1****Q-2****Q-3****Q-4****Q-5****Q-6****Q-7****Q-8**

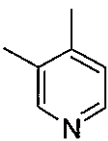
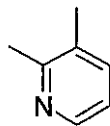
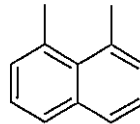
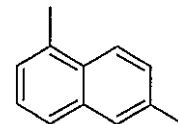
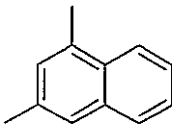
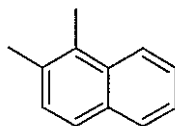
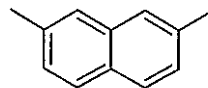
10

**Q-9****Q-10****Q-11****Q-12**

20

**Q-13****Q-14****Q-15****Q-16**

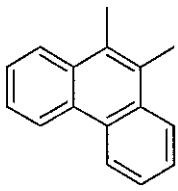
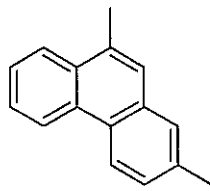
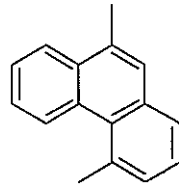
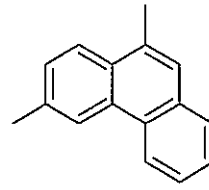
30

**Q-17****Q-18****Q-19****Q-20****Q-21****Q-22****Q-23**

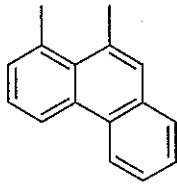
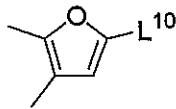
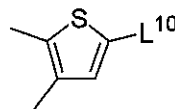
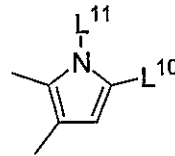
40

【 0 0 4 6 】

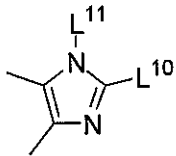
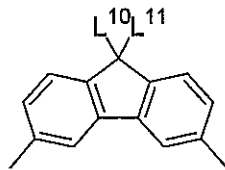
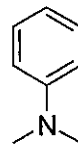
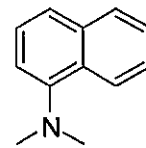
【化 1 2】

**Q-24****Q-25****Q-26****Q-27**

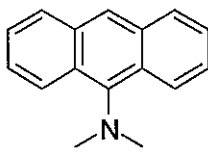
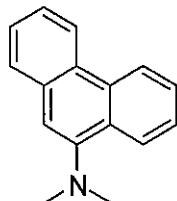
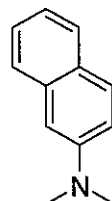
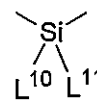
10

**Q-28****Q-29****Q-30****Q-31**

20

**Q-32****Q-33****Q-34****Q-35**

30

**Q-36****Q-37****Q-38****Q-39**

40

【0047】

中でも、十分に広い酸化還元電位差を得る観点、優れた電気酸化還元耐久性を発現する観点および優れた電荷輸送性を得る観点から、Q-1~4, 8~18, 19~23, 29, 33~39が好ましく、Q-1, 3, 4, 8~18, 20, 21, 23, 33~35, 37, 38がより好ましく、Q-1, 8, 10~12, 14~16, 20, 21, 23, 33~35, 38が更に好ましい。

(Qの置換基)

連結基Qの前記した置換基は、具体例としては、上記(Z₁, Z₂の置換基)として挙げ

50

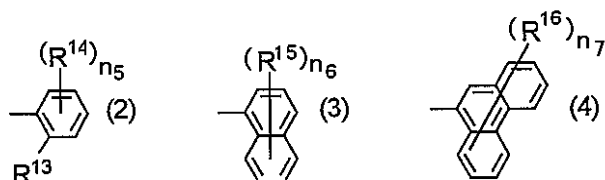
たものと同様である。好ましい置換基についても、同様である。

【0048】

前記一般式(1)中、 $Ar^1 \sim Ar^4$ が、各々下記一般式(2)~(4)のいずれかで表される構造であることが、HOMO(最高被占分子軌道)とLUMO(最低空分子軌道)との間のバンドギャップが大きいため好ましい。

【0049】

【化13】



10

【0050】

一般式(2)中、 R^{13} は水素原子ではなく任意の置換基を表す。一般式(2)~(4)中、 $R^{14} \sim R^{16}$ は、各々独立に任意の置換基を表す。また、一般式(2)中、 n_5 は、0~4の整数であり、 n_5 が2以上の場合には、 R^{14} どうしは互いに異なっていてもよい。一般式(3)中、 n_6 は、0~7の整数であり、 n_6 が2以上の場合には、 R^{15} どうしは互いに異なっていてもよい。一般式(4)中、 n_7 は、0~9の整数であり、 n_7 が2以上の場合には、 R^{16} どうしは互いに異なっていてもよい。

20

($R^{13} \sim R^{16}$)

$R^{13} \sim R^{16}$ の具体例は、上記($Ar^1 \sim Ar^4$ の置換基、 $R^1 \sim R^4$)の例と同じである。また、 $R^{13} \sim R^{16}$ が有し得る置換基は、($Ar^1 \sim Ar^4$ の置換基の置換基、 $R^1 \sim R^4$ の置換基)と同様である。

【0051】

前記一般式(2)中、 R^{13} は、極性が小さく電荷輸送を阻害しない点で、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、芳香族炭化水素基、芳香族複素環基が好ましく、アルキル基、芳香族炭化水素基が更に好ましい。

$R^{14} \sim R^{16}$ は、耐熱性、電荷輸送性の点で、無置換($n=0$)、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アラルキル基、アルコキシ基、アリーロキシ基、芳香族炭化水素基、芳香族複素環基が好ましく、無置換($n=0$)、アルキル基、芳香族炭化水素基が更に好ましい。

30

【0052】

R^{14} は、無置換($n=0$)、または、 $n=1$ または2であることが好ましい。 R^{14} の置換位置としては、耐熱性の点では、カルバゾール環に結合する位置に対して、p-位が好ましく、非晶質性の点ではm-位が好ましく、バンドギャップの点ではo-位が好ましい。

R^{15} は、無置換($n=0$)、または、 $n=1$ または2であることが好ましい。 R^{15} の置換位置としては、カルバゾール環に結合する位置を1-位とすると、耐熱性の点では4-位、5-位が好ましく、非晶質性の点では3-位、6-位、7-位が好ましく、バンドギャップの点では2-位、8-位が好ましい。

40

【0053】

R^{16} は、無置換($n=0$)、または、 $n=1 \sim 3$ のいずれかであることが好ましい。 R^{16} の置換位置としては、カルバゾール環に結合する位置を9-位とすると、耐熱性の点では4-位、6-位が好ましく、非晶質性の点では2-位、7-位、8-位が好ましく、バンドギャップの点では1-位、10-位が好ましい。

前記一般式(1)で表される化合物の、分子量は通常400以上、好ましくは450以上、更に好ましくは500以上、通常4000以下、好ましくは3000以下、更に好ましくは2000以下の範囲である。上限を越えると、昇華性が著しく低下して電界発光素

50

子を制作する際に蒸着法を用いる場合において支障を来し、分子量が下限を下回ると、ガラス転移温度および/または融点および/または気化温度が低下するため、耐熱性が著しく損なわれる。

【0054】

また、ガラス転移温度は、通常60以上、耐熱性を含めた駆動安定性の点で好ましくは200以上である。融点は、通常100以上、耐熱性の点で好ましくは200以上である。ただし、化合物の非晶質性が高くなれば明確な融点を持たないことがある。

また、酸化還元電位としては、酸化される電位が、通常、 $+0.9 \sim +1.6 \text{ V vs. SCE}$ 、電荷輸送性の点で好ましくは $+1.0 \sim +1.4 \text{ V vs. SCE}$ 、還元される電位が、通常、 $-2.7 \sim -1.7 \text{ V vs. SCE}$ 、電荷輸送性の点で好ましくは $-2.5 \sim -1.8 \text{ V vs. SCE}$ である。

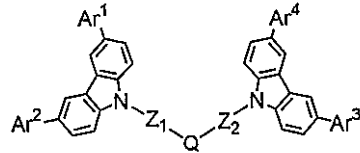
10

【0055】

以下に、本発明の化合物の好ましい具体例を挙げるが、本発明はこれらに限定されるものではない。

【0056】

【表 1】



番号	-Z ₁ -Q-Z ₂ -	-Ar ¹	-Ar ²	-Ar ³	-Ar ⁴
1					
2					
3					
4					
5					
6					
7					
8					
9					
10					
11					
12					
13					
14					

10

20

30

40

【 0 0 5 7 】

【表 2】

番号	-Z ₁ -Q-Z ₂ -	-Ar ¹	-Ar ²	-Ar ³	-Ar ⁴
15					
16					
17					
18					
19					
20					
21					
22					
23					
24					
25					
26					
27					
28					
29					
30					
31					

10

20

30

40

【表 3】

番号	-Z ₁ -Q-Z ₂ -	-Ar ¹	-Ar ²	-Ar ³	-Ar ⁴
32					
33					
34					
35					
36					
37					
38					
39					
40					
41					
42					
43					
44					
45					
46					
47					
48					
49					

10

20

30

40

【表 4】

番号	-Z ₁ -Q-Z ₂ -	-Ar ¹	-Ar ²	-Ar ³	-Ar ⁴
50					
51					
52					
53					
54					
55					
56					
57					
58					
59					
60					
61					
62					
63					
64					
65					
66					

10

20

30

40

【 0 0 6 0 】

【表 5】

番号	-Z ₁ -Q-Z ₂ -	-Ar ¹	-Ar ²	-Ar ³	-Ar ⁴
67					
68					
69					
70					
71					
72					
73					
74					
75					
76					
77					
78					
79					
80					

10

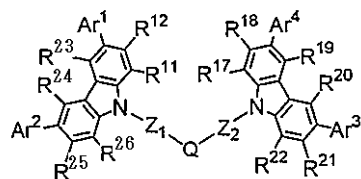
20

30

40

【 0 0 6 1 】

【表 6】



番号	-Z ₁ -Q-Z ₂ -	-Ar ¹	-Ar ²	-Ar ³	-Ar ⁴	R ¹¹ ~ R ²⁶
81						R ¹¹ =R ²⁶ =R ¹⁷ =R ²² =CH ₃ R ¹² =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =H R ¹⁸ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =H
82						R ¹¹ =R ¹⁷ =CH ₃ R ¹² =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =R ²⁶ =H R ¹⁸ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =R ²² =H
83						R ¹¹ =R ¹⁷ =C ₂ H ₅ R ¹² =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =R ²⁶ =H R ¹⁸ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =R ²² =H
84						R ¹¹ =R ²⁶ =R ¹⁷ =R ²² =OCH ₃ R ¹² =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =H R ¹⁸ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =H
85						R ¹² =R ¹⁸ =C ₆ H ₅ R ¹¹ =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =R ²⁶ =H R ¹⁷ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =R ²² =H
86						R ¹¹ =R ²⁶ =R ¹⁷ =R ²² =CH ₃ R ¹² =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =H R ¹⁸ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =H
87						R ²³ =R ¹⁹ =CH ₃ R ¹¹ =R ¹² =R ²⁴ =R ²⁵ =R ²⁶ =H R ¹⁷ =R ¹⁸ =R ²⁰ =R ²¹ =R ²² =H
88						R ¹¹ =R ¹⁷ =CH ₃ R ¹² =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =R ²⁶ =H R ¹⁸ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =R ²² =H
89						R ¹¹ =R ²⁶ =R ¹⁷ =R ²² =CH ₃ R ¹² =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =H R ¹⁸ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =H
90						R ¹¹ =R ²⁶ =OCH ₃ R ¹² =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =R ¹⁷ =H R ¹⁸ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =R ²² =H
91						R ¹¹ =R ¹⁷ =CH ₃ R ¹² =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =R ²⁶ =H R ¹⁸ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =R ²² =H
92						R ¹² =R ¹⁸ =CH ₃ R ¹¹ =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =R ²⁶ =H R ¹⁷ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =R ²² =H
93						R ¹¹ =R ¹⁷ =OCH ₃ R ¹² =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =R ²⁶ =H R ¹⁸ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =R ²² =H
94						R ¹¹ =R ²⁶ =R ¹⁷ =R ²² =CH ₃ R ¹² =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =H R ¹⁸ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =H
95						R ¹¹ =R ¹⁷ =CH ₃ R ¹² =R ²³ =R ²⁴ =R ²⁵ =R ²⁶ =H R ¹⁸ =R ¹⁹ =R ²⁰ =R ²¹ =R ²² =H

10

20

30

40

【0062】

上記具体例のうち、非晶質性、耐熱性、電荷輸送性の点で、より好ましくはNo. 1~9、11、16、17、19~23、26、30、31、33、34、36~43、45~51、53、54、59、62~68、70、71、73~75、77~84、86~91、93~95の化合物であり、さらに好ましくはNo. 1~5、8、19、20、23、30、31、33、37、39、42、43、46、51、54、63、67、70、71、74、75、77~79、81、82の化合物であり、最も好ましくは、No. 1~3、19、20、30、31、33、54、74、75である。

50

【0063】

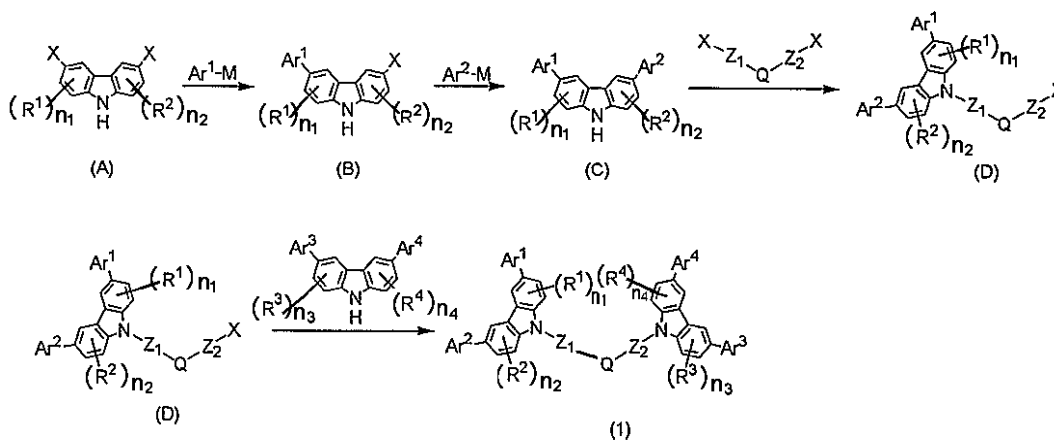
Ar¹ ~ Ar⁴に酸素原子や窒素原子などのヘテロ原子が含まれるときは、十分な耐熱性を保つために、Z₁-Q-Z₂は芳香族炭化水素基およびアルカン由来の2価の基とした連結基であることが好ましく、縮合環を含んでいることがさらに好ましい。Z₁-Q-Z₂にピリジン環やピラジン環などの含窒素6員環が含まれる化合物は、電子輸送性が向上するため好ましいが、三重項励起状態のエネルギー順位を高く保つためには、Ar¹ ~ Ar⁴は一般式(2)で表されることが好ましい。また、Z₁-Q-Z₂に3級アミンが含まれる化合物は、正孔輸送性が向上するため好ましいが、三重項励起状態のエネルギー順位を高く保つためには、Ar¹ ~ Ar⁴は一般式(2)で表されることが好ましい。

(一般式(1)の合成法)

本発明の前記一般式(1)で表される化合物は例えば、次のような手法を用いて合成することができる。

【0064】

【化14】



【0065】

(上記一般式(A)(B)(C)(D)中、Xはヨウ素、臭素、塩素などのハロゲン原子、または、-OSO₂CF₃、-OSO₂C₆H₄CH₃などのエステル化されたヒドロキシル基を表し、Ar¹ ~ Ar⁴、R¹ ~ R⁴は前記一般式(1)における場合と同義である。Ar¹-MおよびAr²-Mは有機マグネシウム試薬、有機ホウ素試薬、有機スズ試薬、有機ケイ素試薬などの有機金属試薬を表す。X-Z₁-Q-Z₂-Xは、ハロゲン原子および/またはエステル化されたヒドロキシル基を2つ有する化合物を表す。Z₁-Q-Z₂は、前記一般式(1)における場合と同義である。)

まず、一般式(A)で表されるカルバゾール誘導体と有機金属試薬とを、触媒、および、塩基性物質の存在下で反応させることにより、一般式(C)で表される3-位および6-位が芳香族炭化水素基で置換された中間体を得られる。この際、段階的に反応させ、一般式(B)で表される中間体を経ることにより、3-位と6-位にそれぞれ異なる芳香族炭化水素基或いは芳香族複素環基を入れることができる。

【0066】

次に一般式(C)で表される中間体と、ハロゲン原子および/またはエステル化されたヒドロキシル基を2つ有する化合物X-Z₁-Q-Z₂-Xとを、触媒、および、塩基性物質の存在下で反応させることにより、本発明の一般式(1)で表される有機化合物を得られる。この際、段階的に反応させ、一般式(D)で表される中間体を経ることにより、Z₁とZ₂にそれぞれ異なる置換基を有するカルバゾール環を連結させることができる。

【0067】

前記使用される触媒としては、パラジウム、ニッケル、銅などの遷移金属触媒が挙げられ、通常、触媒はカルバゾール環を有する中間体に対して0.1 ~ 200モル%程度使用される。また、塩基性物質としては、炭酸カリウム、炭酸カルシウム、リン酸カリウム、

10

20

30

40

50

炭酸セシウム、tert-ブトキシナトリウムなどが挙げられ、通常、塩基性物質はカルバゾール環を有する中間体に対して50~1000モル%程度使用される。

【0068】

反応温度としては、通常、20以上、好ましくは50以上、300以下、好ましくは、200以下である。反応に使用できる溶媒としては、トルエン、キシレン、ニトロベンゼン等の芳香族系溶媒、テトラヒドロフラン、エトレングリコールジメチルエーテル、テトラグライム等のエーテル系溶媒が挙げられる。

反応生成物から、目的物を常法に従って、ろ過または抽出後、濃縮することにより溶媒から分離し、適宜、再結晶化、カラムクロマトグラフィー等の手法により、精製して本発明の化合物を得ることができる。

10

【0069】

本発明は、有機電界発光素子の材料として提案されるものであるが、前記一般式(1)で表される化合物は、適度な電荷輸送性を有するため、電荷輸送材料として電子写真感光体、有機電界発光素子、光電変換素子、有機太陽電池、有機整流素子等にも好適に使用できる。

また、結晶化し難く、ガラス転移温度が高いため薄膜形成性に優れるため、耐熱性に優れ、長期間安定に駆動(発光)する有機電界発光素子を提供することが可能であり、有機電界発光素子材料として好適である。

【0070】

本発明の化合物を用いた有機電界発光素子の発光層によれば、低電圧において高輝度・高効率で発光させることが可能となり、さらには素子の安定性が向上する。

20

また、優れた耐熱性、製膜性、電荷輸送性、発光特性から、素子の層構成に合わせて、発光材料、正孔注入材、正孔輸送材、電子注入材、電子輸送材、正孔阻止材、電子阻止材などとしても適用可能である。

【0071】

従って、本発明による有機電界発光素子はフラットパネル・ディスプレイ(例えばOAコンピュータ用や壁掛けテレビ)、車載表示素子、携帯電話表示や面発光体としての特徴を生かした光源(例えば、複写機の光源、液晶ディスプレイや計器類のバックライト光源)、表示板、標識灯への応用が考えられ、その技術的価値は大きいものである。

続いて、本発明の化合物を用いた有機電界発光素子について説明する。

30

【0072】

本発明の有機電界発光素子は、基板上に陽極、陰極、およびこれら両極間に設けられた中間層を有し、該中間層として、前記一般式(1)で表される化合物を含有する層を有することを特徴とする。また、前記一般式(1)で表される化合物を含有する層は、発光層であることが好ましい。

本発明において、前記一般式(1)で表される化合物は、非晶質性および耐熱性に優れ、かつ、正孔輸送性と電子輸送性が共に優れており、また両者のバランスがよく、さらに三重項励起子のエネルギー準位が高いとの理由から、発光層材料、中でもホスト材料として使用した場合に、その長所が最も生かされ、耐熱性を含めた駆動安定性に優れ、発光効率の高い有機電界発光素子が得られるため好ましい。

40

【0073】

本発明の有機電界発光素子において、同一の層内に2種以上の前記一般式(1)で表される化合物が含有されていても良い。また、2以上の層に前記一般式(1)で表される化合物が含有されている場合、これらの層に含有される該化合物は同一のものであっても異なるものであってもよい。

なお、本発明の有機電界発光素子において、陰極-発光層間を「電子輸送層」と称し、2つ以上の場合は陰極に接している層を「電子注入層」、それ以外の層を総称して「電子輸送層」と称す。また、陰極-発光層間に設けられた層のうち、発光層に接している層を、特に「正孔阻止層」と称する場合がある。

【0074】

50

以下に、添付図面を参照して、前記一般式(1)で表される化合物を、発光層に含有する場合を例に、本発明の有機電界発光素子の実施の形態を詳細に説明する。

図1は本発明に用いられる一般的な有機電界発光素子の構造例を模式的に示す断面図であり、1は基板、2は陽極、4は正孔輸送層、5は発光層、6は正孔阻止層、8は陰極を各々表わす。

【0075】

基板1は有機電界発光素子の支持体となるものであり、石英やガラスの板、金属板や金属箔、プラスチックフィルムやシートなどが用いられる。特にガラス板や、ポリエステル、ポリメタクリレート、ポリカーボネート、ポリスルホンなどの透明な合成樹脂の板またはフィルムが好ましい。合成樹脂基板を使用する場合にはガスバリア性に留意する必要がある。基板のガスバリア性が小さすぎると、基板を通過した外気により有機電界発光素子が劣化することがあるので好ましくない。このため、合成樹脂基板の少なくとも片面に緻密なシリコン酸化膜等を設けてガスバリア性を確保する方法も好ましい方法の一つである。

【0076】

基板1上には陽極2が設けられるが、陽極2は正孔輸送層4への正孔注入の役割を果たすものである。陽極2は、通常、アルミニウム、金、銀、ニッケル、パラジウム、白金等の金属、インジウム及び/またはスズの酸化物などの金属酸化物、ヨウ化銅などのハロゲン化金属、カーボンブラック、あるいは、ポリ(3-メチルチオフェン)、ポリピロール、ポリアニン等の導電性高分子などにより構成される。陽極2は通常、スパッタリング法、真空蒸着法などにより形成されることが多い。また、銀などの金属微粒子、ヨウ化銅などの微粒子、カーボンブラック、導電性の金属酸化物微粒子、導電性高分子微粉末などで陽極2を形成する場合には、適当なバインダー樹脂溶液中に分散させて、基板1上に塗布することにより形成することもできる。さらに、導電性高分子で陽極2を形成する場合には、電解重合により基板1上に直接重合薄膜を形成したり、基板1上に導電性高分子を塗布して形成することもできる(Appl. Phys. Lett., 60巻, 2711頁, 1992年)。

【0077】

陽極2は通常は単層構造であるが、所望により複数の材料からなる積層構造とすることも可能である。

陽極2の厚みは、必要とする透明性により異なる。透明性が必要とされる場合は、可視光の透過率を、通常60%以上、好ましくは80%以上とすることが望ましい。この場合、陽極の厚みは通常5nm以上、好ましくは10nm以上であり、また通常1000nm以下、好ましくは500nm以下程度である。不透明でよい場合は陽極2の厚みは任意であり、所望により金属で形成して基板1を兼ねてもよい。

【0078】

図1に示す構成の素子において、陽極2の上には正孔輸送層4が設けられる。正孔輸送層の材料に要求される条件としては、陽極からの正孔注入効率が高く、かつ、注入された正孔を効率よく輸送することができる材料であることが必要である。そのためには、イオン化ポテンシャルが小さく、可視光の光に対して透明性が高く、しかも正孔移動度が大きく、さらに安定性に優れ、トラップとなる不純物が製造時や使用時に発生しにくいことが要求される。また、発光層5に接するために発光層からの発光を消光したり、発光層との間でエキサイプレックスを形成して効率を低下させないことが求められる。上記の一般的な要求以外に、車載表示用の応用を考えた場合、素子にはさらに耐熱性が要求される。従って、Tgとして85以上の値を有する材料が望ましい。

【0079】

このような正孔輸送材料としては、例えば、4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ピフェニルで代表される2個以上の3級アミンを含み2個以上の縮合芳香族環が窒素原子に置換した芳香族ジアミン(特開平5-234681号公報)、4,4',4''-トリス(1-ナフチルフェニルアミノ)トリフェニルアミン等のスターバ

10

20

30

40

50

ースト構造を有する芳香族アミン化合物 (J . L u m i n . , 7 2 - 7 4 巻、9 8 5 頁、1 9 9 7 年)、トリフェニルアミンの四量体から成る芳香族アミン化合物 (C h e m . C o m m u n . , 2 1 7 5 頁、1 9 9 6 年)、2, 2, 7, 7 - テトラキス - (ジフェニルアミノ) - 9, 9 - スピロピフルオレン等のスピロ化合物 (S y n t h . M e t a l s , 9 1 巻、2 0 9 頁、1 9 9 7 年) 等が挙げられる。これらの化合物は、単独で用いてもよいし、必要に応じて、複数種混合して用いてもよい。

【0080】

上記の化合物以外に、正孔輸送層4の材料として、ポリビニルカルバゾール、ポリビニルトリフェニルアミン (特開平7 - 5 3 9 5 3 号公報)、テトラフェニルベンジジンを含むポリアリーレンエーテルサルホン (P o l y m . A d v . T e c h . , 7 巻、3 3 頁、1 9 9 6 年) 等の高分子材料が挙げられる。 10

正孔輸送層4は、スプレー法、印刷法、スピコート法、ディップコート法、ダイコート法などの通常の塗布法や、インクジェット法、スクリーン印刷法など各種印刷法等の湿式成膜法や、真空蒸着法などの乾式成膜法で形成することができる。

【0081】

塗布法の場合は、正孔輸送材料を1種または2種以上を、必要により正孔のトラップにならないバインダー樹脂や塗布性改良剤などの添加剤を添加し、適当な溶剤に溶解して塗布溶液を調製し、スピコート法などの方法により陽極2上に塗布し、乾燥して正孔輸送層4を形成する。バインダー樹脂としては、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエステル等が挙げられる。バインダー樹脂は添加量が多いと正孔移動度を低下させるので、少ない方が望ましく、通常、50重量%以下が好ましい。 20

【0082】

真空蒸着法の場合には、正孔輸送材料を真空容器内に設置されたルツボに入れ、真空容器内を適当な真空ポンプで10⁻⁴Pa程度にまで排気した後、ルツボを加熱して、正孔輸送材料を蒸発させ、ルツボと向かい合って置かれた、陽極2が形成された基板1上に正孔輸送層4を形成させる。

正孔輸送層4の膜厚は、通常5nm以上、好ましくは10nm以上であり、また通常300nm以下、好ましくは100nm以下である。この様に薄い膜を一様に形成するためには、一般に真空蒸着法がよく用いられる。

【0083】

図1に示す素子において、正孔輸送層4の上には発光層5が設けられる。発光層5は、電界を与えられた電極間において、陽極から注入されて正孔輸送層を移動する正孔と、陰極から注入されて正孔阻止層6を移動する電子との再結合により励起されて強い発光を示す化合物より形成される。 30

発光層5に用いられる該化合物としては、安定な薄膜形状を有し、固体状態で高い発光 (蛍光または燐光) 量子収率を示し、正孔および/または電子を効率よく輸送することができる化合物であることが必要である。さらに電気化学的かつ化学的に安定であり、トラップとなる不純物が製造時や使用時に発生しにくい化合物であることが要求される。

【0084】

前記一般式(1)で表される化合物は、このような条件を満たすため、有機電界発光素子における発光層材料として用いることが好ましい。発光層5は、該化合物のみからなる層であってもよいが、以下に述べる様々な目的で、発光材料 (ドーパント材料) をも含有する層であることが好ましい。ドーパント材料をも含有する層である場合、前記一般式(1)で表される化合物はホスト材料として使用される。前記一般式(1)で表される化合物をホスト材料として含む際、ドーパント材料 (ホスト材料に対してドーブされる材料) としては、有機金属錯体であることが好ましい。 40

【0085】

素子の発光効率を向上させるとともに発光色を変える目的で、例えば、8 - ヒドロキシキノリンのアルミニウム錯体をホスト材料として、クマリン等のレーザー用蛍光色素をドーブすること (J . A p p l . P h y s . , 6 5 巻 , 3 6 1 0 頁 , 1 9 8 9 年) 50

)等が行われており、本発明の有機電界発光素子における発光層に対しても、蛍光色素をドーピングすることは好ましい。

【0086】

ドーピング用材料としては、クマリン以外にも各種の蛍光色素が使用できる。青色発光を与える蛍光色素としては、ペリレン、ピレン、アントラセン、クマリンおよびそれらの誘導体等が挙げられる。緑色蛍光色素としては、キナクリドン誘導体、クマリン誘導体等が挙げられる。黄色蛍光色素としては、ルブレン、ペリミドン誘導体等が挙げられる。赤色蛍光色素としては、DCM系化合物、ベンゾピラン誘導体、ローダミン誘導体、ベンゾチオキサントン誘導体、アザベンゾチオキサントン等が挙げられる。

【0087】

上記のドーピング用蛍光色素以外にも、ホスト材料に応じて、レーザー研究、8巻、694頁、803頁、958頁(1980年);同9巻、85頁(1981年)、に列挙されている蛍光色素などが発光層用のドーピング材料として使用することができる。

ホスト材料に対して上記蛍光色素がドーピングされる量は、 10^{-3} 重量%以上が好ましく、0.1重量%がより好ましい。また10重量%以下が好ましく、3重量%以下がより好ましい。下限値を下回ると、素子の発光効率向上に寄与できない場合があり、上限値を越えると濃度消光が起き、発光効率の低下に至る可能性がある。

【0088】

一方、燐光発光を示す発光層は、通常、燐光性ドーパントとホスト材料を含んで形成される。燐光性ドーパントとしては、例えば周期表7ないし11族から選ばれる金属を含む有機金属錯体が挙げられ、該金属錯体のT1(最低励起三重項準位)より高いT1を有する電荷輸送性有機化合物をホスト材料として使用することが好ましい。前記一般式(1)で表される化合物は、この燐光発光を示す発光層におけるホスト材料としても、好適に使用できる。

【0089】

周期表7ないし11族から選ばれる金属を含む燐光性有機金属錯体における、該金属として好ましくは、ルテニウム、ロジウム、パラジウム、銀、レニウム、オスミウム、イリジウム、白金、および金が挙げられる。これらの有機金属錯体として、好ましくは下記一般式(i)または一般式(ii)で表される化合物が挙げられる。

【0090】

【化15】

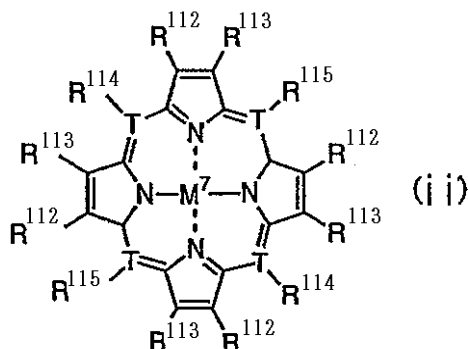


【0091】

(式中、Mは金属、nは該金属の価数を表す。LおよびL'は二座配位子を表す。jは0または1または2を表す。)

【0092】

【化16】



10

20

30

40

50

【0093】

(式中、 M^7 は金属、Tは炭素または窒素を表わす。Tが窒素の場合は R^{114} 、 R^{115} は無く

、Tが炭素の場合は R^{114} 、 R^{115} は水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、シアノ基、アミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アラルキルアミノ基、ハロアルキル基、水酸基、アリールオキシ基、置換基を有していてもよい芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表わす。

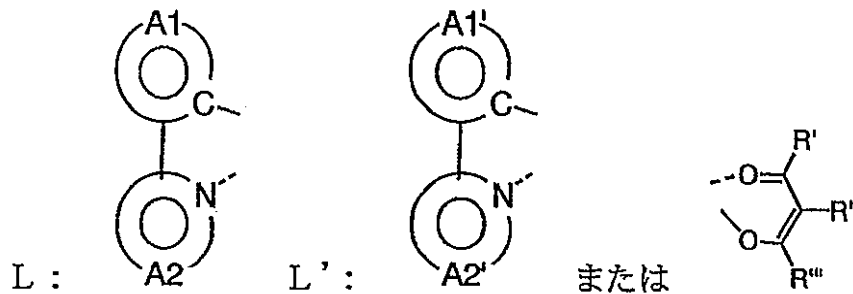
【0094】

R^{112} 、 R^{113} は水素原子、ハロゲン原子、アルキル基、アラルキル基、アルケニル基、シアノ基、アミノ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、カルボキシル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基、アラルキルアミノ基、ハロアルキル基、水酸基、アリールオキシ基、置換基を有していてもよい芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表わし、互いに連結して環を形成しても良い。) 10

一般式(i)中の二座配位子LおよびL'はそれぞれ以下の部分構造を有する配位子を示す。

【0095】

【化17】



20

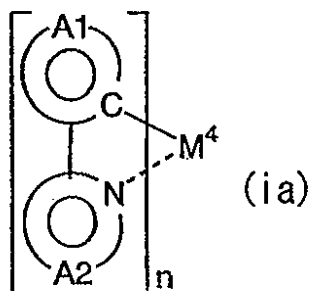
【0096】

(環A1および環A1'は各々独立に、芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表わし、置換基を有していてもよい。環A2および環A2'は含窒素芳香族複素環基を表わし、置換基を有していてもよい。 R' 、 R'' および R''' はそれぞれハロゲン原子；アルキル基；アルケニル基；アルコキシカルボニル基；メトキシ基；アルコキシ基；アリールオキシ基；ジアルキルアミノ基；ジアリールアミノ基；カルバゾリル基；アシル基；ハロアルキル基またはシアノ基を表す。) 30

一般式(i)で表される化合物として、さらに好ましくは下記一般式(i a)、(i b)(i c)で表される化合物が挙げられる。

【0097】

【化18】



40

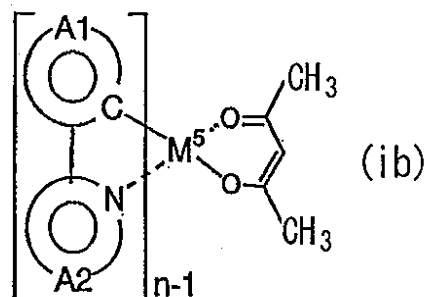
【0098】

50

(式中、 M^4 は金属、 n は該金属の価数を表す。環A1は置換基を有していてもよい芳香族炭化水素基を表わし、環A2は置換基を有していてもよい含窒素芳香族複素環基を表わす。)

【0099】

【化19】



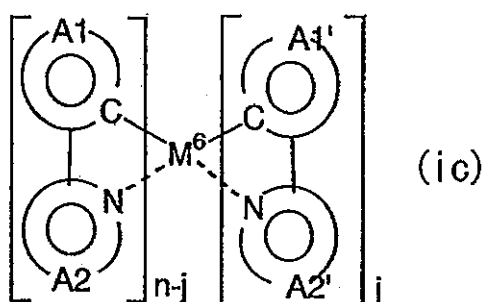
10

【0100】

(式中、 M^5 は金属、 n は該金属の価数を表す。環A1は置換基を有していてもよい芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表わし、環A2は置換基を有していてもよい含窒素芳香族複素環基を表わす。)

【0101】

【化20】



30

【0102】

(式中、 M^6 は金属、 n は該金属の価数を表し、 j は0または1または2を表す。環A1および環A1'は各々独立に、置換基を有していてもよい芳香族炭化水素基または芳香族複素環基を表わし、環A2および環A2'は各々独立に、置換基を有していてもよい含窒素芳香族複素環基を表わす。)

一般式(i a)、(i b)、(i c)で表される化合物の環A1および環A1'として、好ましくは、フェニル基、ピフェニル基、ナフチル基、アントリル基、チエニル基、フリル基、ベンゾチエニル基、ベンゾフリル基、ピリジル基、キノリル基、イソキノリル基、またはカルバゾリル基が挙げられる。

【0103】

環A2および環A2'として、好ましくは、ピリジル基、ピリミジル基、ピラジル基、トリアジル基、ベンゾチアゾール基、ベンゾオキサゾール基、ベンゾイミダゾール基、キノリル基、イソキノリル基、キノキサリル基、またはフェナントリル基が挙げられる。

一般式(i a)、(i b)および(i c)で表される化合物が有していてもよい置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1~6のアルキル基；ビニル基等の炭素数2~6のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2~6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1~6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリールオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基；ジフェニルアミノ基等のジアリールアミノ基；カルバゾリル基；アセチル基等のアシル基；トリフルオロメチル基等

50

のハロアルキル基；シアノ基等が挙げられ、これらは互いに連結して環を形成しても良い。

【0104】

なお、環A1が有する置換基と環A2が有する置換基が結合、または環A1'が有する置換基と環A2'が有する置換基が結合して、一つの縮合環を形成してもよく、このような縮合環としては7,8-ベンゾキノリン基等が挙げられる。

環A1、環A1'、環A2および環A2'の置換基として、より好ましくはアルキル基、アルコキシ基、芳香族炭化水素基、シアノ基、ハロゲン原子、ハロアルキル基、ジアリールアミノ基、またはカルバゾリル基が挙げられる。

【0105】

式(i a)、(i b)における M^4 ないし M^5 として好ましくは、ルテニウム、ロジウム、パラジウム、銀、レニウム、オスミウム、イリジウム、白金または金が挙げられる。

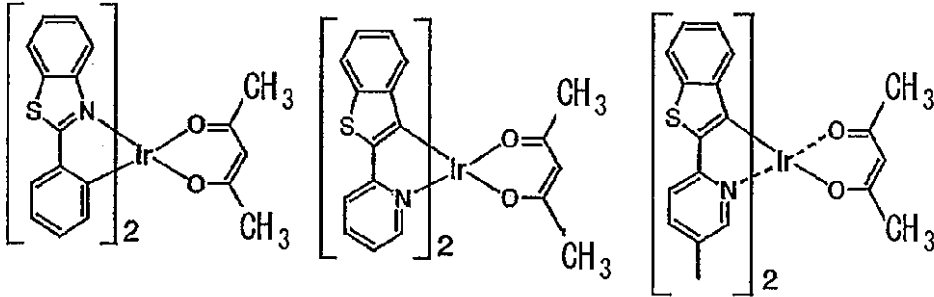
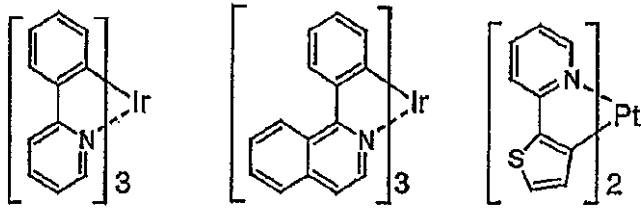
式(ii)における M^7 として好ましくは、ルテニウム、ロジウム、パラジウム、銀、レニウム、オスミウム、イリジウム、白金または金が挙げられ、特に好ましくは、白金、パラジウム等の2価の金属が挙げられる。

【0106】

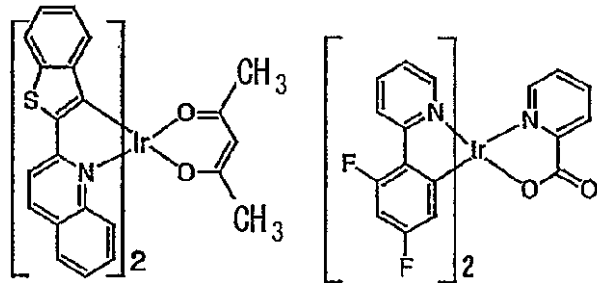
前記一般式(i)、(i a)、(i b)および(i c)で示される有機金属錯体の具体例を以下に示すが、下記の化合物に限定されるわけではない。

【0107】

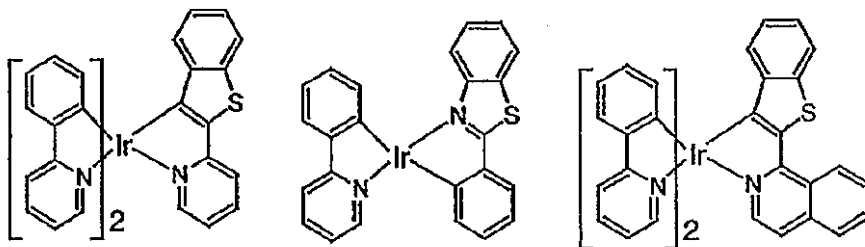
【化 2 1】



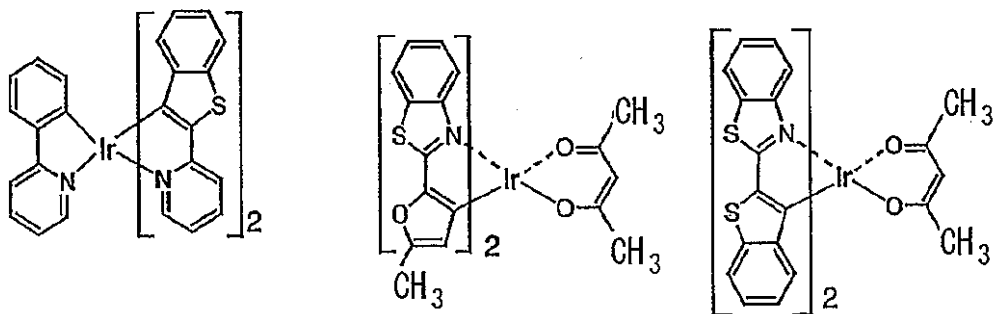
10



20



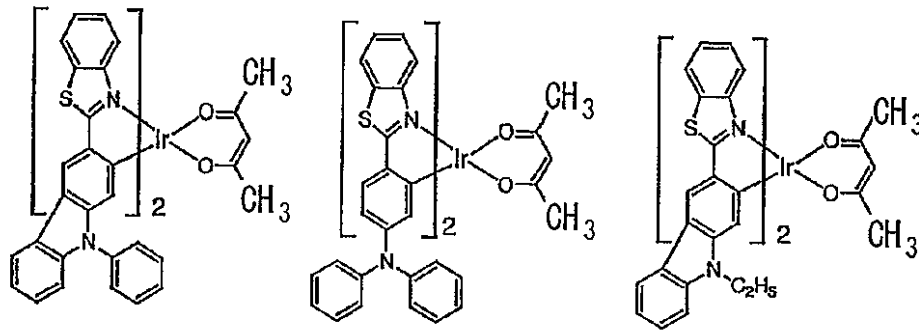
30



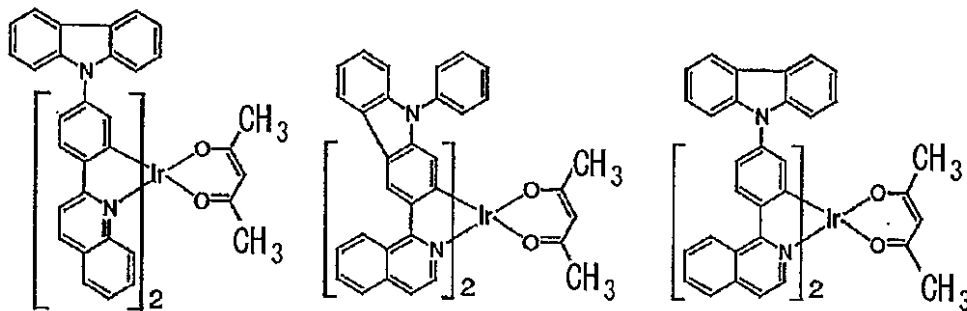
40

【 0 1 0 8 】

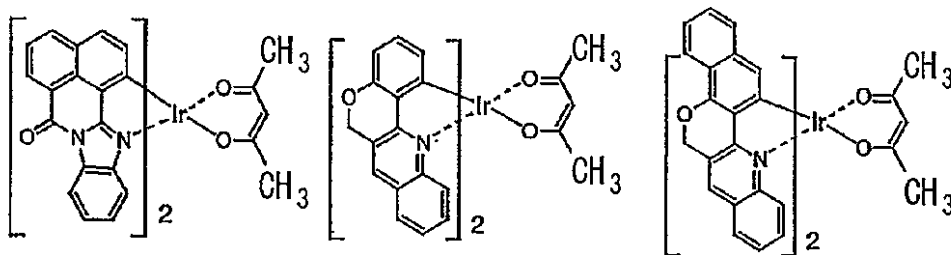
【化 2 2】



10



20



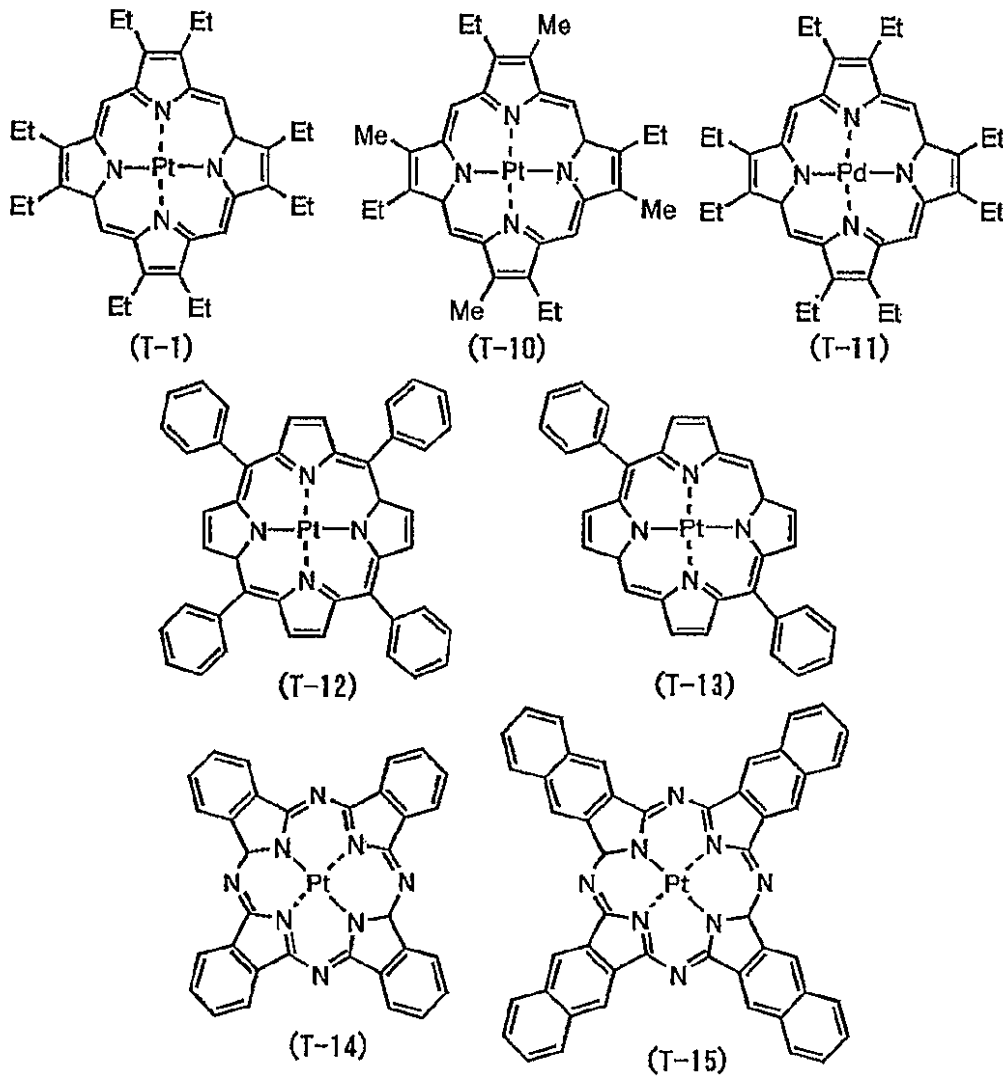
30

【0109】

前記一般式(ii)で表わされる有機金属錯体の具体例を以下に示すが、下記の化合物に限定されるわけではない。なお、式中のMeはメチル基、Etはエチル基を表す。

【0110】

【化 2 3】



10

20

30

【0111】

さらに、前記一般式(1)で表される化合物を含む発光層は、燐光性ドーパントと共に、前述の蛍光色素をも含有していてもよい。

発光層中にドーパントとして含有される有機金属錯体の量は、0.1重量%以上が好ましく、また30重量%以下が好ましい。下限値を下回ると素子の発光効率向上に寄与できない場合があり、上限値を上回ると有機金属錯体同士が2量体を形成する等の理由で濃度消光が起き、発光効率の低下に至る可能性がある。

【0112】

燐光発光を示す発光層における燐光性ドーパントの量は、従来の蛍光(1重項)を用いた素子において、発光層に含有される蛍光性色素(ドーパント)の量より、若干多い方が好ましい傾向がある。また燐光性ドーパントと共に蛍光色素が発光層中に含有される場合、該蛍光色素の量は、0.05重量%以上が好ましく、0.1重量%以上がより好ましい。また10重量%以下が好ましく、3重量%以下がより好ましい。

40

【0113】

発光層5の膜厚は、通常3nm以上、好ましくは5nm以上であり、また通常200nm以下、好ましくは100nm以下である。

なお、発光層5は、本発明の性能を損なわない範囲で上記以外の成分を含んでいてもよい。

50

例えば、8-ヒドロキシキノリンのアルミニウム錯体などの金属錯体（特開昭59-194393号公報）、10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリンの金属錯体（特開平6-322362号公報）、ビスチリルベンゼン誘導体（特開平1-245087号公報、同2-222484号公報）、ビスチリルアリーレン誘導体（特開平2-247278号公報）、（2-ヒドロキシフェニル）ベンゾチアゾールの金属錯体（特開平8-315983号公報）、シロール誘導体、等の蛍光発光を生じる発光層材料、4,4'-N,N'-ジカルバゾールビフェニルなどのカルバゾール誘導体（WO 00/70655号公報）、トリス（8-ヒドロキシキノリン）アルミニウム（USP 6,303,238号公報）、2,2',2''-(1,3,5-ベンゼントリル)トリス[1-フェニル-1H-ベンズイミダゾール]（Appl. Phys. Lett., 78巻, 1622項, 2001）、ポリビニルカルバゾール（特開2001-257076号公報）等の燐光発光を生じる発光層材料などを含有していても良い。

10

【0114】

発光層も正孔輸送層と同様の方法で形成することができる。上述の蛍光色素および/または燐光色素（燐光性ドーパント）を発光層のホスト材料にドーブする方法を以下に説明する。

塗布の場合は、前記発光層ホスト材料と、ドーブ用色素、さらに必要により、電子のトラップや発光の消光剤とならないバインダー樹脂や、レベリング剤等の塗布性改良剤などの添加剤を添加し溶解した塗布溶液を調整し、スピンコート法などの方法により正孔輸送層4上に塗布し、乾燥して発光層5を形成する。バインダー樹脂としては、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエステル等が挙げられる。バインダー樹脂は添加量が多いと正孔/電子移動度を低下させるので、少ない方が望ましく、50重量%以下が好ましい。

20

【0115】

真空蒸着法の場合には、前記ホスト材料を真空容器内に設置されたるつぼに入れ、ドーブする色素を別のつぼに入れ、真空容器内を適当な真空ポンプで 1.0×10^{-4} Torr程度にまで排気した後、各々のつぼを同時に加熱して蒸発させ、つぼと向かい合せて置かれた基板の上に層を形成する。また、他の方法として、上記の材料を予め所定比で混合したものを同一のつぼを用いて蒸発させてもよい。

【0116】

上記各ドーパントが発光層中にドーブされる場合、発光層の膜厚方向において均一にドーブされるが、膜厚方向において濃度分布があっても構わない。例えば、正孔輸送層との界面近傍にのみドーブしたり、逆に、正孔阻止層界面近傍にドーブしてもよい。

30

発光層も正孔輸送層と同様の方法で形成することができるが、通常は真空蒸着法が用いられる。

【0117】

図1に示す素子において、正孔阻止層6は発光層5の上に、発光層5の陰極側の界面に接するように積層される。

正孔阻止層は、正孔輸送層から移動してくる正孔を陰極に到達するのを阻止する役割と、陰極から注入された電子を効率よく発光層の方向に輸送することができる化合物より形成されることが好ましい。正孔阻止層を構成する材料に求められる物性としては、電子移動度が高く正孔移動度が低いことが必要とされる。正孔阻止層6は正孔と電子を発光層内に閉じこめて、発光効率を向上させる機能を有する。本発明の化合物を含む層を発光層として使用する場合、発光層の陰極側界面に接する正孔阻止層を有することが好ましい。

40

【0118】

本発明で用いられる正孔阻止層のイオン化ポテンシャルは発光層のイオン化ポテンシャル（発光層がホスト材料とドーパントを含んでいる場合にはホスト材料のイオン化ポテンシャル）より0.1 eV以上大きいことが好ましい。イオン化ポテンシャルは物質のHOMO（最高被占分子軌道）レベルにある電子を真空準位に放出するのに必要なエネルギーで定義される。イオン化ポテンシャルは光電子分光法で直接定義されるか、電気化学的に測定した酸化電位を基準電極に対して補正しても求められる。後者の方法の場合、例えば

50

飽和甘コウ電極 (SCE) を基準電極として用いたとき、

【0119】

【数1】

イオン化ポテンシャル=酸化電位 (vs. SCE) + 4.3 eV

【0120】

で定義される。(“Molecular Semiconductors”, Springer-Verlag, 1985年、98頁)。

10

さらに、本発明で用いられる正孔阻止層の電子親和力 (EA) は、発光層の電子親和力 (発光層がホスト材料とドーパントを含んでいる場合にはホスト材料の電子親和力) と比較して同等以上であることが好ましい。電子親和力もイオン化ポテンシャルと同様に真空準位を基準として、真空準位にある電子が物質の LUMO (最低空分子軌道) レベルに落ちて安定化するエネルギーで定義される。電子親和力は、上述のイオン化ポテンシャルから光学的バンドギャップを差し引いて求められるか、電気化学的な還元電位から下記の式で同様に求められる。

【0121】

【数2】

電子親和力=還元電位 (vs. SCE) + 4.3 eV

20

【0122】

従って、本発明で用いられる正孔阻止層は、酸化電位と還元電位をもちいて、

(正孔阻止材料の酸化電位) - (発光材料の酸化電位) $0.1 V$

(正孔阻止材料の還元電位) (発光材料の還元電位)

と表現することも出来る。

さらに後述の電子輸送層を有する素子の場合には、正孔阻止層の電子親和力は電子輸送層の電子親和力と比較して同等以下であることが好ましい。

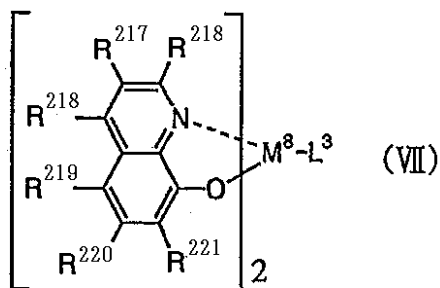
(電子輸送材料の還元電位) (正孔阻止材料の還元電位) (発光材料の還元電位)

30

このような条件を満たす正孔阻止材料として、好ましくは、下記一般式 (VII) で表わされる混合配位子錯体が挙げられる。

【0123】

【化24】



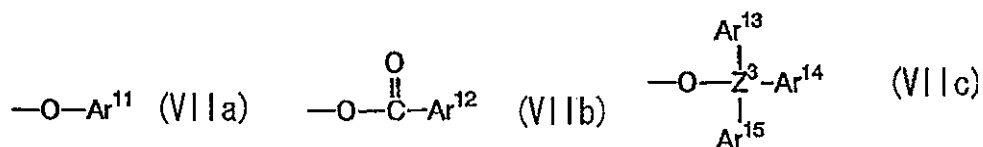
40

【0124】

(式中、 $R^{216} \sim R^{221}$ は、水素原子または任意の置換基を表す。 M^8 はアルミニウム、ガリウム、インジウムから選ばれる金属原子を表す。 L^3 は以下に示す一般式 (VIIa)、(VIIb)、(VIIc) のいずれかで表される。

【0125】

【化 2 5】



【0126】

(式中、 $\text{Ar}^{11} \sim \text{Ar}^{15}$ は、置換基を有していてもよい芳香族炭化水素環基または置換基を有していてもよい芳香族複素環基を表し、 Z^3 はシリコンまたはゲルマニウムを表す。)

前記一般式(VII)において、 $\text{R}^{216} \sim \text{R}^{221}$ は水素原子または任意の置換基を表すが、好ましくは水素原子；塩素、臭素等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ベンジル基等のアラルキル基；ビニル基等の炭素数2～6のアルケニル基；シアノ基；アミノ基；アシル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2～6のアルコキシカルボニル基；カルボキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリアルオキシ基；ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基等のジアルキルアミノ基；ジベンジルアミノ基、ジフェネチルアミノ基などのジラルキルアミノ基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；水酸基；置換基を有していてもよいフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基；置換基を有していてもよいチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基を表わす。

10

20

【0127】

前記芳香族炭化水素環基および芳香族複素環基が有しうる置換基としては、フッ素原子等のハロゲン原子；メチル基、エチル基等の炭素数1～6のアルキル基；ビニル基等の炭素数2～6のアルケニル基；メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基等の炭素数2～6のアルコキシカルボニル基；メトキシ基、エトキシ基等の炭素数1～6のアルコキシ基；フェノキシ基、ベンジルオキシ基などのアリアルオキシ基；ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基等のジアルキルアミノ基；アセチル基等のアシル基；トリフルオロメチル基等のハロアルキル基；シアノ基等が挙げられる。 R^{16} ないし R^{21} としてより好ましくは水素原子、アルキル基、ハロゲン原子またはシアノ基が挙げられる。また R^{19} としては、シアノ基が特に好ましい。

30

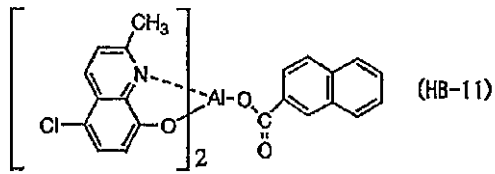
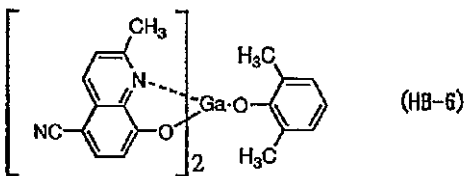
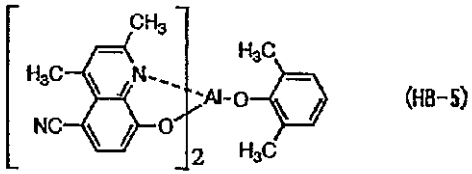
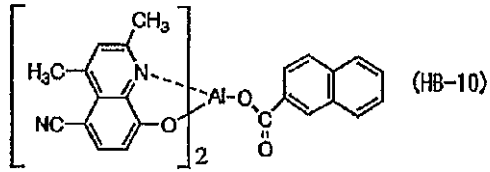
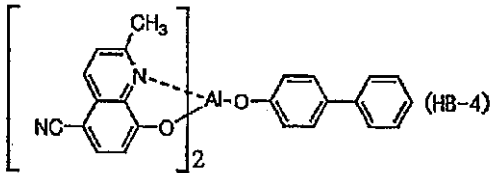
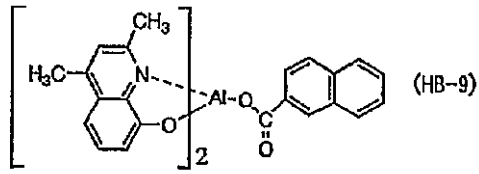
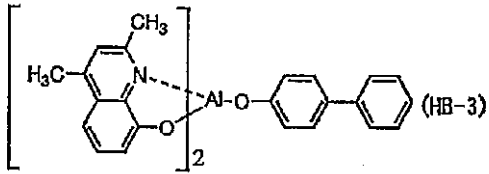
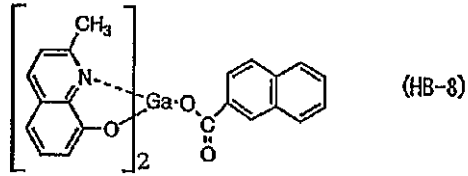
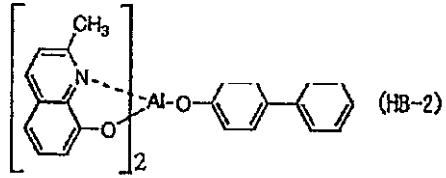
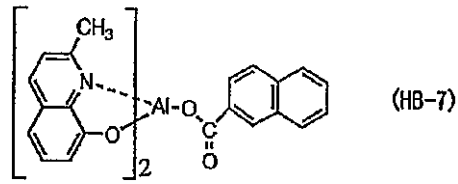
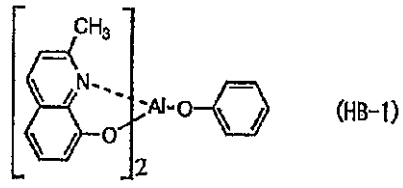
【0128】

上記式(VII)中、 $\text{Ar}^{11} \sim \text{Ar}^{15}$ として、具体的には、置換基を有していてもよいフェニル基、ピフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水素環基またはチエニル基、ピリジル基等の芳香族複素環基を表わす。

前記一般式(VII)で表わされる化合物の好ましい具体例を以下に示すが、これらに限定するものではない。

【0129】

【化 2 6】



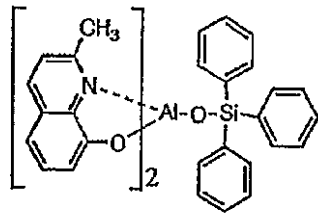
【 0 1 3 0 】

10

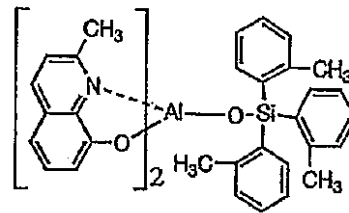
20

30

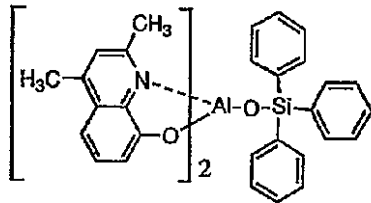
【化 2 7】



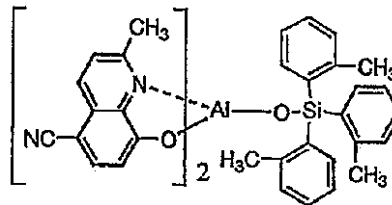
(HB-12)



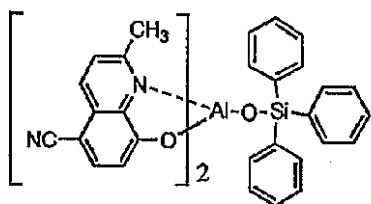
(HB-17)



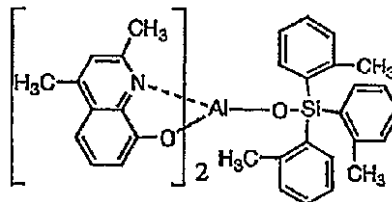
(HB-13)



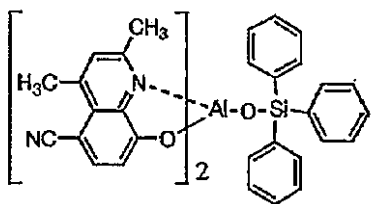
(HB-18)



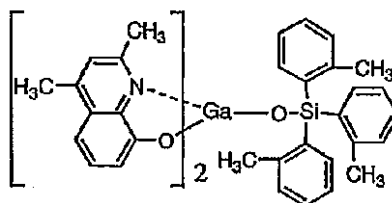
(HB-14)



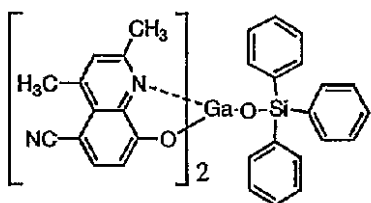
(HB-19)



(HB-15)



(HB-20)



(HB-16)

10

20

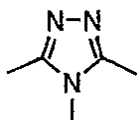
30

【0131】

なお、これらの化合物は正孔阻止層中に、単独で用いてもよいし、必要に応じて、各々混合して用いてもよい。

【0132】

【化 2 8】



40

【0133】

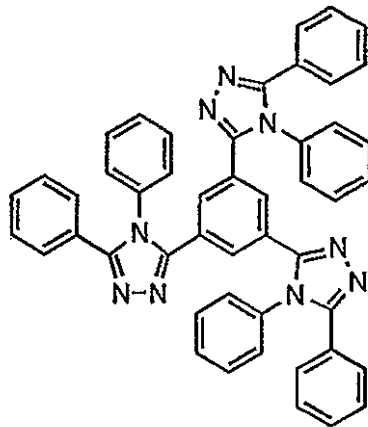
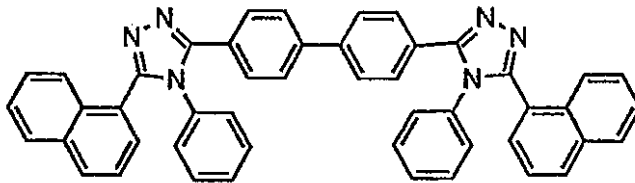
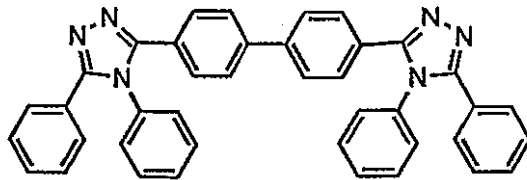
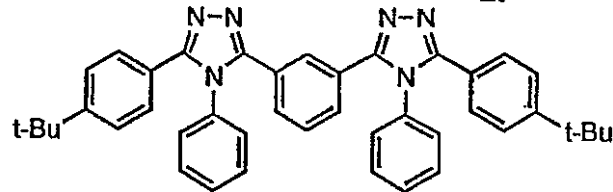
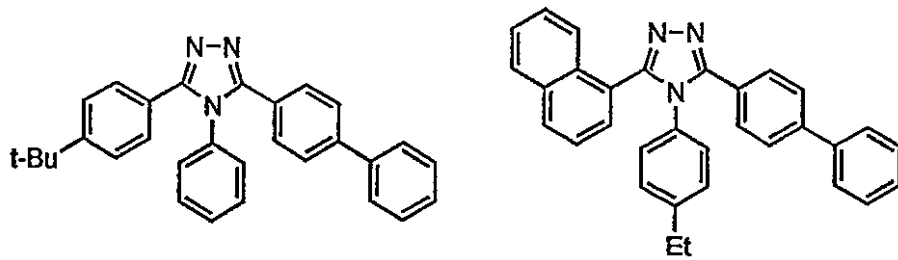
正孔阻止材料としては、前記一般式(VII)の混合配位子錯体の他に、以下の構造式で示される1,2,4-トリアゾール環残基を少なくとも1個有する化合物を用いることができる。

前記構造式で表わされる1,2,4-トリアゾール環残基を少なくとも1個有する化合物の具体例を以下に示す。

50

【 0 1 3 4 】

【 化 2 9 】



10

20

30

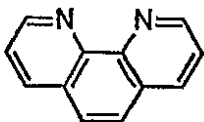
40

【 0 1 3 5 】

正孔阻止材料として、さらに、以下の構造式で示されるフェナントロリン環を少なくとも1個有する化合物が挙げられる。

【 0 1 3 6 】

【 化 3 0 】



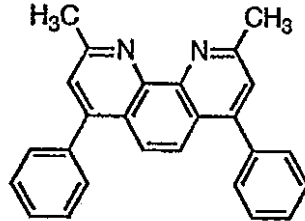
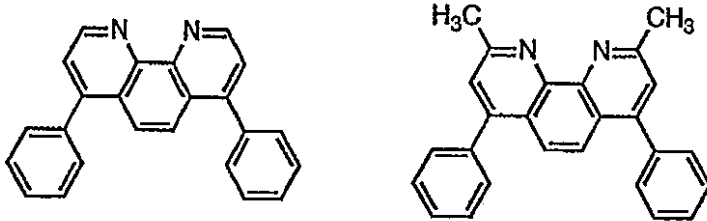
50

【 0 1 3 7 】

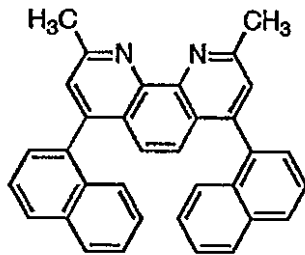
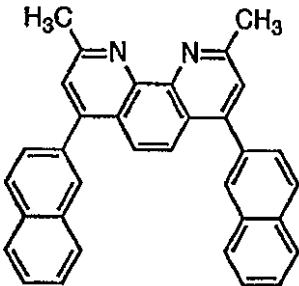
前記構造式で表わされるフェナントロリン環を少なくとも1個有する化合物の具体例を以下に示す。

【 0 1 3 8 】

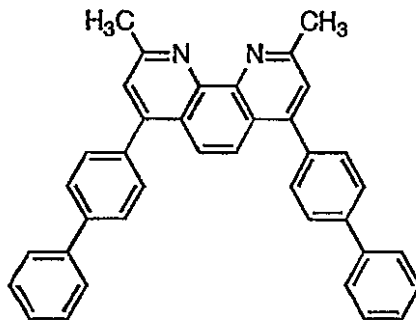
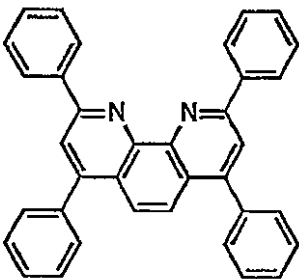
【 化 3 1 】



10



20



30

【 0 1 3 9 】

正孔阻止層6の膜厚は、通常0.3nm以上、好ましくは0.5nm以上であり、また通常100nm以下、好ましくは50nm以下である。正孔阻止層も正孔輸送層と同様の方法で形成することができるが、通常は真空蒸着法が用いられる。本発明においては発光層の陰極側界面に接する正孔阻止層を設けることが好ましい。

陰極8は、正孔阻止層6を介して発光層5に電子を注入する役割を果たす。陰極8として用いられる材料は、前記陽極2に使用される材料を用いることが可能であるが、効率よく電子注入を行なうには、仕事関数の低い金属が好ましく、スズ、マグネシウム、インジウム、カルシウム、アルミニウム、銀等の適当な金属またはそれらの合金が用いられる。具体例としては、マグネシウム-銀合金、マグネシウム-インジウム合金、アルミニウム-リチウム合金等の低仕事関数合金電極が挙げられる。さらに、陰極と発光層または電子輸送層の界面にLiF、MgF₂、Li₂O等の極薄絶縁膜(0.1~5nm)を挿入することも、素子の効率を向上させる有効な方法である(Appl. Phys. Lett., 70巻, 152頁, 1997年; 特開平10-74586号公報; IEEE Trans. Electron. Devices, 44巻, 1245頁, 1997年)。陰極8の膜厚は通常、陽極2と同様である。低仕事関数金属から成る陰極を保護する目的で、この上にさらに、仕事関数が高く大気に対して安定な金属層を積層することは素子の

40

50

安定性を増す。この目的のために、アルミニウム、銀、銅、ニッケル、クロム、金、白金等の金属が使われる。

【0140】

素子の発光効率をさらに向上させることを目的として、図2および図3に示すように、正孔阻止層6と陰極8の間に電子輸送層7が設けられていてもよい。電子輸送層7は、電界を与えられた電極間において陰極から注入された電子を効率よく正孔阻止層6の方向に輸送することができる化合物より形成される。

このような条件を満たす材料としては、8-ヒドロキシキノリンのアルミニウム錯体などの金属錯体(特開昭59-194393号公報)、10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリンの金属錯体、オキサジアゾール誘導体、ジスチリルピフェニル誘導体、シロール誘導体、3-または5-ヒドロキシフラボン金属錯体、ベンズオキサゾール金属錯体、ベンゾチアゾール金属錯体、トリスベンズイミダゾリルベンゼン(米国特許第5,645,948号)、キノキサリン化合物(特開平6-207169号公報)、フェナントロリン誘導体(特開平5-331459号公報)、2-t-ブチル-9,10-N,N-ジシアノアントラキノンジイミン、n型水素化非晶質炭化シリコン、n型硫化亜鉛、n型セレン化亜鉛などが挙げられる。

【0141】

電子輸送層6の膜厚は、通常5nm以上、好ましくは10nm以上であり、また通常200nm以下、好ましくは100nm以下である。

電子輸送層7は、正孔輸送層4と同様にして塗布法あるいは真空蒸着法により正孔阻止層6上に積層することにより形成される。通常は、真空蒸着法が用いられる。

正孔注入の効率をさらに向上させ、かつ、有機層全体の陽極への付着力を改善させる目的で、正孔輸送層4と陽極2との間に正孔注入層3を挿入することも行われている(図3参照)。正孔注入層3を挿入することで、初期の素子の駆動電圧が下がると同時に、素子を定電流で連続駆動した時の電圧上昇も抑制される効果がある。正孔注入層に用いられる材料に要求される条件としては、陽極とのコンタクトがよく均一な薄膜が形成でき、熱的に安定、すなわち、融点及びガラス転移温度が高く、融点としては300以上、ガラス転移温度としては100以上であることが好ましい。さらに、イオン化ポテンシャルが低く陽極からの正孔注入が容易なこと、正孔移動度が大きいことが挙げられる。

【0142】

この目的のために、これまでに銅フタロシアニン等のフタロシアニン化合物(特開昭63-295695号公報)、ポリアニン(Appl. Phys. Lett., 64巻、1245頁、1994年)、ポリチオフエン(Optical Materials, 9巻、125頁、1998年)等の有機化合物や、スパッタ・カーボン膜(Synth. Met., 91巻、73頁、1997年)や、バナジウム酸化物、ルテニウム酸化物、モリブデン酸化物等の金属酸化物(J. Phys. D, 29巻、2750頁、1996年)が報告されている。

【0143】

また、正孔注入・輸送性の低分子有機化合物と電子受容性化合物を含有する層(特開平11-251067号公報、特開2000-159221号公報等に記載)や、芳香族アミノ基等を含有する非共役系高分子化合物に、必要に応じて電子受容性化合物をドーピングした層(特開平11-135262号公報、特開平11-283750号公報、特開2000-36390号公報、特開2000-150168号公報、特開平2001-223084号公報、およびWO97/33193号公報など)、またはポリチオフエン等の導電性ポリマーを含む層(特開平10-92584号公報)なども挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【0144】

上記正孔注入層材料としては、低分子・高分子いずれの化合物を用いることも可能である。

正孔注入層の場合も、正孔輸送層と同様にして薄膜形成可能であるが、無機物の場合に

10

20

30

40

50

は、さらに、スパッタ法や電子ビーム蒸着法、プラズマCVD法が用いられる。

以上のようにして形成される正孔注入層3の膜厚は、低分子化合物を用いて形成される場合、下限は通常3nm、好ましくは10nm程度であり、上限は通常100nm、好ましくは50nm程度である。また高分子化合物を用いて形成される正孔注入層3の、膜厚の下限は通常5nm、好ましくは10nm程度であり、上限は通常1000nm、好ましくは500nm程度である。

【0145】

本発明の有機電界発光素子は、図1とは逆の構造、すなわち、基板上に陰極8、正孔阻止層6、発光層5、正孔輸送層4、陽極2の順に積層することも可能であり、既述したように少なくとも一方が透明性の高い2枚の基板の間に本発明の有機電界発光素子を設けることも可能である。同様に、図2または図3に示した前記各層構成とは逆の順に積層することも可能である。また、図1～3のいずれの層構成においても、本発明の趣旨を逸脱しない範囲で、上述以外の任意の層を有していてもよく、また上記複数の層の機能を併有する層を設けることにより、層構成を簡略化する等、適宜変形を加えることが可能である。

10

【0146】

以上、前記一般式(1)で表される化合物を、発光層に含有する層構成を例に、本発明の有機電界発光素子について説明したが、前述したように、一般式(1)で表される化合物は、発光層と陰極または陽極との間に設けられた任意の層に含有されていても良く、その場合の発光層は、一般式(1)で表される化合物から選択されたものであっても、それ以外の材料からなるものであっても良い。

20

【0147】

本発明は、有機電界発光素子が、単一の素子、アレイ状に配置された構造からなる素子、陽極と陰極がX-Yマトリックス状に配置された構造のいずれにおいても適用することができる。

本発明によれば、一般式(1)で表される化合物を用いることにより、耐熱性、駆動安定性に優れ、駆動寿命が長く、さらに高発光効率および低駆動電圧である有機電界発光素子を得ることができる。

【実施例】

【0148】

次に、本発明を実施例によって更に具体的に説明するが、本発明はその要旨を越えない限り、以下の実施例の記載に限定されるものではない。

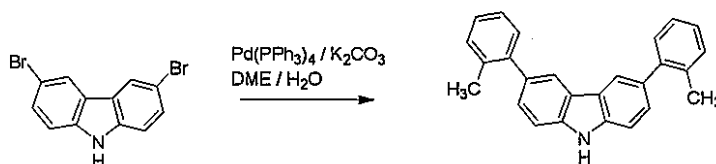
30

(実施例1)

(例示化合物1の合成)

【0149】

【化32】



40

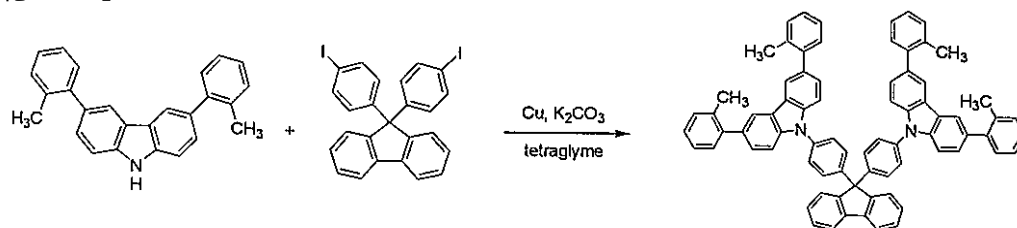
【0150】

窒素バブリング条件下、3,6-ジブromoカルバゾール(6.50g)、o-トリルボロン酸(6.80g)、テトラキス(トリフェニルフォスフィン)パラジウム(1.15g)、炭酸カリウム(8.29g)、ジメトキシエタン(80ml)、イオン交換水(40ml)を、加熱還流下、2時間攪拌し、得られた反応溶液に塩化メチレン(300ml)、イオン交換水(100ml)を加え、よく振り混ぜた後、油層を分取。無水硫酸マグネシウムで乾燥、濾過、濃縮後、シリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、3,6-ジ(o-トリル)カルバゾール(4.77g)を得た。

50

【 0 1 5 1 】

【 化 3 3 】



例示化合物 1

10

【 0 1 5 2 】

9,9-ビス(4-アミノフェニル)フルオレンを亜硝酸ナトリウムによってジアゾ化した後、ヨウ化カリウムでヨウ素に変換することにより、9,9-ビス(4-ヨードフェニル)フルオレンを得た。

次に、窒素気流中、3,6-ジ(o-トリル)カルバゾール(1.04g)、9,9-ビス(4-ヨードフェニル)フルオレン(0.855g)、銅(0.19g)、炭酸カリウム(0.62g)、テトラグライム(1.2ml)を200で5時間攪拌した。得られた反応混合物から塩化メチレン(100ml)で抽出し、これをシリカゲルカラムクロマトグラフィー(n-ヘキサン/塩化メチレン=7/4)およびSEC(サイズ排除クロマトグラフィー)で精製し、例示化合物1(0.88g)を得た。

20

【 0 1 5 3 】

DEI-MS(m/z = 1009(M⁺))および¹H-NMRより、例示化合物1であることを確認した。

¹H-NMR(CDCl₃, 270MHz)データを以下に示す。

8.06(s, 4H), 7.89(d, 2H), 7.64(d, 2H), 7.59-7.56(m, 8H), 7.51(d, 4H), 7.46(dd, 4H), 7.40-7.24(m, 20H), 2.33(s, 12H)

(例示化合物1の電気化学的測定)

例示化合物1の電気化学的測定を行った。

【 0 1 5 4 】

BAS社製エレクトロケミカルアナライザー650Aにより、過塩素酸テトラブチルアンモニウム0.1Mの塩化メチレン溶液中で、作用電極としてBAS製GCE、対電極としてPt線、参照電極としてAg線を用いてサイリックボルタンメトリーを測定した。

30

酸化側の電位は+1.25V vs. SCEであり、水素イオンが脱離することに由来する2段階の還元波は観測されなかった。従って、本発明の化合物は、水素イオンの脱離が起こらないため、発光層が劣化しにくく、駆動安定性の良好な素子を提供できると考えられる。

【 0 1 5 5 】

還元側の電位は-2.56V vs. SCEであり、酸化側、還元側ともに有機電界発光素子のホスト材料として適度な値を示した。なお、電位は内標物質としてフェロセン/フェロセニウムを用いて換算した。

上記酸化側の電位、還元側の電位から、本発明の化合物は、バンドギャップが大きいことがわかり、発光効率のよい素子を提供できると考えられる。

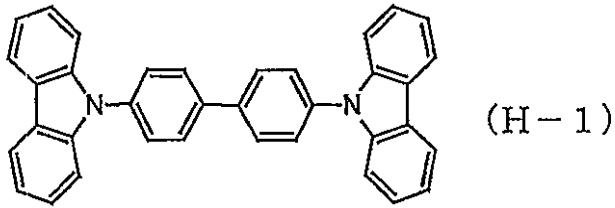
40

(比較例1)

燐光分子を用いた有機電界発光素子のホスト材料として広く用いられている下記化合物(H-1)の電気化学的測定を行った。

【 0 1 5 6 】

【化 3 4】



【0157】

10

BAS社製エレクトロケミカルアナライザー650Aにより、過塩素酸テトラブチルアンモニウム0.1Mの塩化メチレン溶液中で、作用電極としてBAS製GCE、対電極としてPt線、参照電極としてAg線を用いてサイリックポルタンメトリーを測定したところ、酸化側の電位は+1.27V vs. SCEであり、水素イオンが脱離することに由来する2段階の還元波が観測された。還元側の電位は-2.40V vs. SCEであった。なお、電位は内標物質としてフェロセン/フェロセニウムを用いて換算した。

【0158】

上記の測定から、化合物(H-1)は、駆動時に水素イオンの脱離が起き、水素イオンの脱離は、励起子を熱失活させる原因となると考えられるため、化合物(H-1)を用いた有機電界発光素子は発光効率の低下が起こりやすく、駆動安定性が悪いと考えられる。

20

【図面の簡単な説明】

【0159】

【図1】有機電界発光素子の一例を示した模式断面図。

【図2】有機電界発光素子の別の例を示した模式断面図。

【図3】有機電界発光素子の別の例を示した模式断面図。

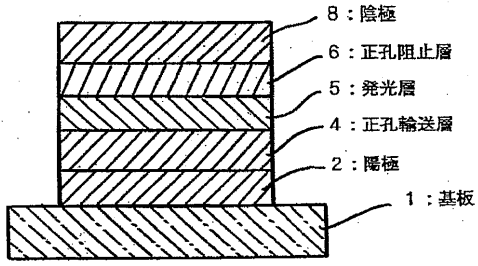
【符号の説明】

【0160】

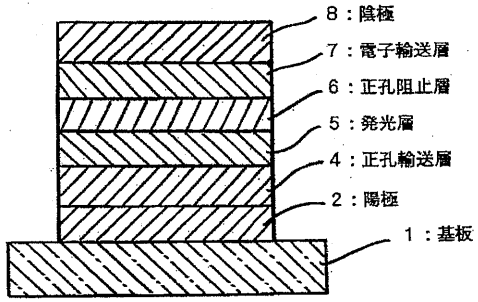
- | | |
|---|-------|
| 1 | 基板 |
| 2 | 陽極 |
| 3 | 正孔注入層 |
| 4 | 正孔輸送層 |
| 5 | 発光層 |
| 6 | 正孔阻止層 |
| 7 | 電子輸送層 |
| 8 | 陰極 |

30

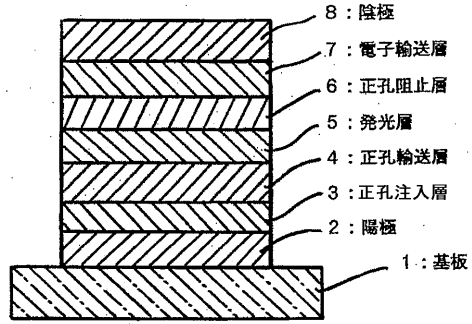
【 図 1 】



【 図 2 】



【 図 3 】



フロントページの続き

(72)発明者 佐藤 秀樹

神奈川県横浜市青葉区鴨志田町1000番地 株式会社三菱化学科学技術研究センター内

Fターム(参考) 3K007 AB03 AB11 AB14 DB03 FA01

4C204 BB05 CB25 EB01 FB16 GB07

【要約の続き】

专利名称(译)	化合物，电荷传输材料，有机电致发光元件材料和有机电致发光元件		
公开(公告)号	JP2005213188A	公开(公告)日	2005-08-11
申请号	JP2004021188	申请日	2004-01-29
[标]申请(专利权)人(译)	三菱化学株式会社		
申请(专利权)人(译)	三菱化学株式会社		
[标]发明人	飯田宏一朗 矢部昌義 佐藤秀樹		
发明人	飯田 宏一朗 矢部 昌義 佐藤 秀樹		
IPC分类号	H01L51/50 C07D209/86 C09K11/06 H05B33/14		
FI分类号	C07D209/86 C09K11/06.645 C09K11/06.650 C09K11/06.660 H05B33/14.B		
F-TERM分类号	3K007/AB03 3K007/AB11 3K007/AB14 3K007/DB03 3K007/FA01 4C204/BB05 4C204/CB25 4C204/EB01 4C204/FB16 4C204/GB07 3K107/AA01 3K107/CC04 3K107/CC21 3K107/DD53 3K107/DD58 3K107/DD64 3K107/DD67 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/DD74		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

要解决的问题：当用于有机电致发光元件中时，获得具有优异电荷传输性能的化合物和成为具有高驱动稳定性和高发光效率的元素的化合物。
 溶解：化合物由通式(1)表示(Ar¹-Ar⁴各自独立地为芳香族烃基或可含有取代基的芳香族杂环基。R¹-R⁴各自独立地为任意取代基；n₁-n₄各自独立地为0-3的整数；Z₁-Z₂各自是将咪唑环与连接基团Q或含有电子的任意连接基团组合的直接键合与咪唑环共轭；连接基团Q是任意连接基团，与分子中的两个咪唑环基本上不共轭)。

