

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第5431602号
(P5431602)

(45) 発行日 平成26年3月5日(2014.3.5)

(24) 登録日 平成25年12月13日(2013.12.13)

(51) Int.Cl.	F I		
HO 1 L 51/50 (2006.01)	HO 5 B 33/14	B	
CO 9 K 11/06 (2006.01)	CO 9 K 11/06	6 9 0	
CO 7 C 13/66 (2006.01)	CO 7 C 13/66		
CO 7 C 15/38 (2006.01)	CO 7 C 15/38		
CO 7 C 15/20 (2006.01)	CO 7 C 15/20		

請求項の数 6 (全 91 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2013-40011 (P2013-40011)	(73) 特許権者	000183646
(22) 出願日	平成25年2月28日(2013.2.28)		出光興産株式会社
(62) 分割の表示	特願2011-508352 (P2011-508352) の分割		東京都千代田区丸の内3丁目1番1号
原出願日	平成22年4月5日(2010.4.5)	(74) 代理人	110000637
(65) 公開番号	特開2013-141006 (P2013-141006A)	(72) 発明者	岩隈 俊裕
(43) 公開日	平成25年7月18日(2013.7.18)		千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
審査請求日	平成25年2月28日(2013.2.28)	(72) 発明者	高嶋 頼由
(31) 優先権主張番号	特願2009-92523 (P2009-92523)		千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
(32) 優先日	平成21年4月6日(2009.4.6)	(72) 発明者	伊藤 光則
(33) 優先権主張国	日本国(JP)		千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
		(72) 発明者	荻原 俊成
			千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
		審査官	中山 佳美

最終頁に続く

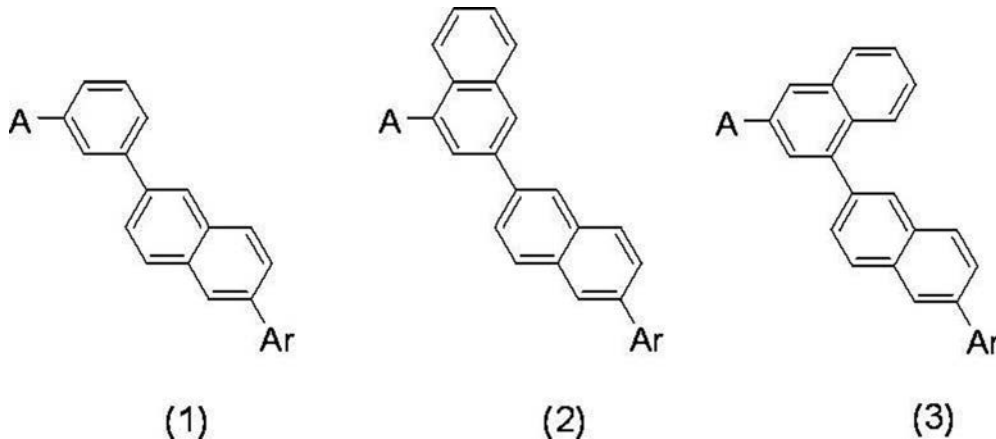
(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス素子用材料

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記式(1)、式(2)、及び式(3)のうちのいずれかの一般式で表され、置換基を有しても良い有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【化1】



10

(式中、Aは、3-フルオランテニル基、5-ベンゾ[c]フェナントレニル基、6-ベンゾ[c]フェナントレニル基、10-ベンゾ[g]クリセニル基から選択される

20

基を表し；

A r は、ナフタレン、フェナントレン、フルオランテン、トリフェニレン、クリセン、ピセン、ベンゾ [c] フェナントレン、ジベンゾ [c , g] フェナントレン、ベンゾ [g] クリセンおよびベンゾ [b] フルオランテンから選ばれる縮合芳香族環を表す。）

【請求項 2】

前記 A 又は前記 A r はフェニル基又はナフチル基を置換基として有しても良い請求項 1 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 3】

前記 A が無置換の 3 - フルオランテニル基、5 - ベンゾ [c] フェナントレニル基、6 - ベンゾ [c] フェナントレニル基、10 - ベンゾ [g] クリセニル基から選択される基である請求項 1 又は 2 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

10

【請求項 4】

前記 A r が、それぞれ独立に、ナフチル基、フルオランテニル基、フェナントレニル基、ベンゾフェナントレニル基、ベンゾ [g] クリセニル基から選択される基である請求項 1 から請求項 3 までのいずれか一項記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 5】

前記 A r が、2 - ナフチル基、3 - フルオランテニル基、8 - フルオランテニル基、9 - フェナントレニル基、5 - ベンゾ [c] フェナントレニル基、6 - ベンゾ [c] フェナントレニル基、10 - ベンゾ [g] クリセニル基から選択される基である請求項 4 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

20

【請求項 6】

前記式 (1) の一般式で表される有機エレクトロルミネッセンス素子用材料であり、前記 A r が、2 - ナフチル基である請求項 5 記載の有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料に関する（以下、有機エレクトロルミネッセンス素子を「有機 EL 素子」と略記する場合がある。）。特に、赤色に発光する有機エレクトロルミネッセンス素子用材料に関する。

30

【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が知られている（例えば、特許文献 1 ~ 19 参照）。

このような有機エレクトロルミネッセンス素子は、自発光型素子としての利点を活かし、発光効率、画質、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。

【0003】

有機エレクトロルミネッセンス素子の更なる改善点としては、例えば、発光効率が挙げられる。

40

この点、内部量子効率を高めるため、3重項励起子からの発光が得られる発光材料（燐光発光材料）の開発が進められ、最近では燐光発光を示す有機エレクトロルミネッセンス素子が報告されている。

このような燐光発光材料を用いて発光層（燐光発光層）を構成することにより 75% 以上、理論上 100% 近い値の内部量子効率を実現でき、高効率、低消費電力の有機エレクトロルミネッセンス素子が得られる。

【0004】

また、発光層を形成するにあたっては、ホスト材料に、ドーパントとして発光材料をドーピングするドーピング法が知られている。

50

ドーピング法で形成した発光層では、ホスト材料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励起子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。

ここで、ホスト材料から燐光発光性の燐光ドーパントに分子間エネルギー移動を行うためには、ホスト材料の3重項エネルギー E_{g_H} が、燐光ドーパントの3重項エネルギー E_{g_D} よりも大きいことが必要である。

【0005】

3重項エネルギーが有効に大きい材料としては、CBP (4,4'-bis(N-carbazolyl)Biphenyl) が代表的に知られている(例えば、特許文献1参照)。

このCBPをホスト材料とすれば、所定の発光波長(例えば、緑、赤)を示す燐光ドーパントへのエネルギー移動が可能であり、高効率の有機エレクトロルミネッセンス素子を得ることができる。

また、特許文献2には、カルバゾール等の含窒素環を含有する縮合環誘導体を、赤色燐光を示す燐光発光層のホスト材料として用いた技術が開示されている。

【0006】

その一方、蛍光発光を示す蛍光ドーパント用のホスト材料(蛍光ホスト)は種々知られており、蛍光ドーパントとの組み合わせで発光効率、寿命に優れた蛍光発光層を形成できるホスト材料が種々提案されている。

しかし、蛍光ホストでは、励起1重項エネルギー $E_g(S)$ は蛍光ドーパントよりも大きい、3重項エネルギー $E_g(T)$ は必ずしも大きくないため、単純には燐光発光層のホスト材料(燐光ホスト)として転用できない。

【0007】

例えば、蛍光ホストとしてはアントラセン誘導体が良く知られている。

しかし、アントラセン誘導体は、3重項エネルギー $E_g(T)$ が1.9 eV程度と小さい。このため、520 nmから720 nmの可視光領域の発光波長を有する燐光ドーパントに対するエネルギー移動が確保できない。また、励起された3重項エネルギーを発光層内に閉じ込めることができない。

したがって、アントラセン誘導体は燐光ホストとして不適切である。

また、ペリレン誘導体、ピレン誘導体およびナフタセン誘導体等も同様の理由で燐光ホストとして好ましくない。

【0008】

また、燐光ホストとして芳香族炭化水素化合物を用いた例が知られている(特許文献3)。特許文献3には、ベンゼン骨格を中心とし、置換基として2つの芳香族基がメタ位に結合した化合物を、燐光ホストとして用いている構成が記載されている。

特許文献4~9には、種々の芳香族炭化水素化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子が開示されている。

【0009】

さらに、特許文献10には、2,7-ナフタレン環の左右の置換位置に、縮合芳香族炭化水素環を配した化合物が例示されている。

特許文献11には、2,7-ナフタレン環の左右の置換位置に、含窒素ヘテロ環であるフェナントリン環を配する化合物が例示されている。

特許文献12には、2,7-ナフタレン環の左右の置換位置に、アントラセン環を必須骨格とした芳香族置換基を有する化合物が例示されている。

【0010】

さらに、特許文献13、14には、4つの芳香族炭化水素環が連なった構造を有する化合物と、この化合物を用いた有機EL素子が記載されている。この芳香族炭化水素化合物は、一方の末端の芳香族炭化水素環が縮合多環芳香族環であり、その環に連結する隣の芳香族炭化水素環がメタ結合を有する2個のベンゼン環であり、残りの2つの環が縮合芳香族環である。また、この芳香族炭化水素化合物を赤色燐光錯体と共に発光層に用いた素子では比較的高い効率と比較的長いデバイス寿命が示されている。

10

20

30

40

50

また、本発明に関連するフルオランテン化合物およびそれを用いた有機EL素子については特許文献15～19にも開示されている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0011】

【特許文献1】US2002/0182441号公報

【特許文献2】WO2005/112519号公報

【特許文献3】特開2003-142267号公報

【特許文献4】WO2007/046658号公報

【特許文献5】特開2006-151966号公報

10

【特許文献6】特開2005-8588号公報

【特許文献7】特開2005-19219号公報

【特許文献8】特開2005-197262号公報

【特許文献9】特開2004-75567号公報

【特許文献10】US2008/0224603号公報

【特許文献11】特開2004-281390号公報

【特許文献12】特開2006-045503号公報

【特許文献13】WO2009/008215号公報

【特許文献14】WO2009/008205号公報

【特許文献15】WO2002/20693号公報

20

【特許文献16】特開2001-250690号公報

【特許文献17】特開2001-244075号公報

【特許文献18】特開2001-257074号公報

【特許文献19】特開平10-189248号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0012】

しかしながら、特許文献1に記載の有機EL素子では、CBPをホスト材料として使用すると、燐光発光により発光効率は格段に向上する一方、寿命は非常に短く、実用に適さないという問題がある。これは、CBPの分子構造上の酸化安定性が高くないため、正孔による分子の劣化が激しいためと考えられる。

30

特許文献2に記載の有機EL素子では、発光効率および寿命について改善されているものの、実用化には十分でない場合もある。

特許文献3に記載の芳香族炭化水素化合物は、中心のベンゼン骨格に対し、左右対称に分子を伸張した分子構造になっているため、発光層が結晶化しやすいという問題点がある。そのため、特許文献3に記載の芳香族炭化水素化合物を用いた有機EL素子では、駆動電圧が高くなってしまう場合がある。

特許文献4～9に記載の有機EL素子では、芳香族炭化水素化合物の燐光ホストとしての有効性についてはなんら開示されていない。

特許文献10～14に記載の有機EL素子では、駆動電圧が比較的に高く、十分な素子の長寿命化が図れない場合がある。

40

また、特許文献15～19に記載の有機EL素子では、フルオランテン化合物を燐光発光材料と共に用いた構成については何ら開示されていない。

【0013】

本発明の目的は、駆動電圧を低減することができ、高効率かつ長寿命な燐光発光性の有機EL素子用材料を提供することにある。

【課題を解決するための手段】

【0014】

本発明者らは、上記目的を達成するために鋭意研究を重ねた結果、下記式(1)、式(2)、及び式(3)のうちのいずれかの一般式で表される構造から選択される有機EL素

50

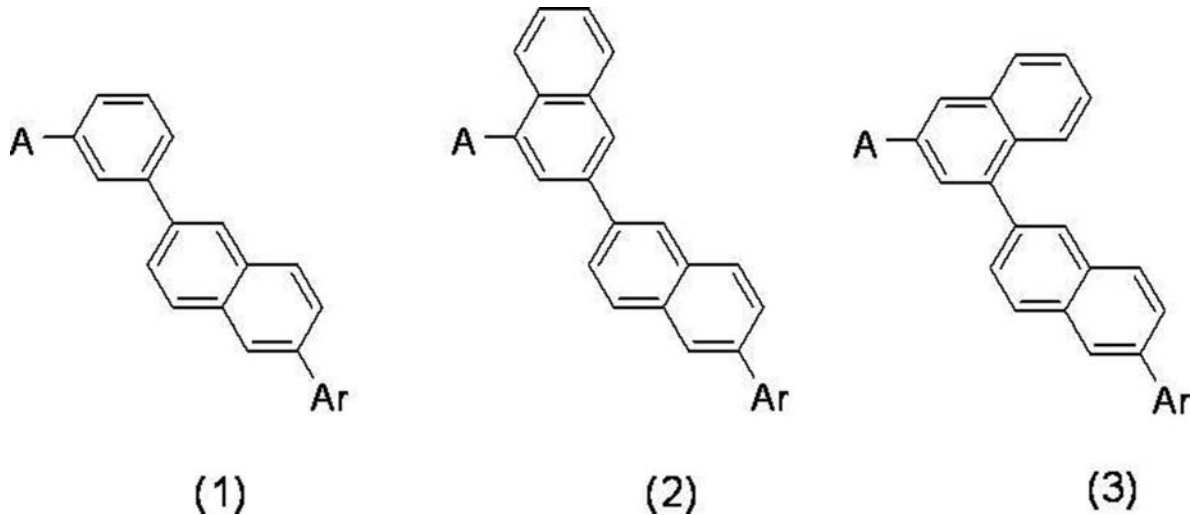
子用材料（以下、有機EL素子用材料と略記することがある）を用いることにより、駆動電圧の低減が図れ、高効率かつ長寿命な燐光発光性の有機EL素子が得られることを見出し、本発明を完成するに至った。

【0015】

すなわち、本発明の有機EL素子用材料は、下記式（1）、式（2）、及び式（3）のうちのいずれかの一般式で表され、置換基を有しても良いことを特徴とする。

【0016】

【化1】



10

20

【0017】

（式中、Aは、3-フルオランテニル基、5-ベンゾ[c]フェナントレニル基、6-ベンゾ[c]フェナントレニル基、10-ベンゾ[g]クリセニル基から選択される基を表し；

Arは、ナフタレン、フェナントレン、フルオランテン、トリフェニレン、クリセン、ピセン、ベンゾ[c]フェナントレン、ジベンゾ[c, g]フェナントレン、ベンゾ[g]クリセンおよびベンゾ[b]フルオランテンから選ばれる縮合芳香族環を表す。）

【0018】

ここで、上記特許文献13、14には本発明と同様に、4つの芳香族炭化水素環が連なった構造を有する芳香族炭化水素化合物が一般式により記載されている。しかしながら、特許文献13、14には、本発明の上記式（1）、式（2）、及び式（3）のうちのいずれかの一般式で表される化合物については具体的に記載されていない。また、特許文献13、14の実施例を参照すると、特許文献13、14の有機EL素子では、駆動電圧が4.1～4.7Vであり、まだ改善の余地があると言える。

本発明の有機EL素子材料は、上記特許文献13、14に記載の直列する4つの環の様々な結合様式のうち、一般式（1）～式（3）に示すような特定の結合様式を有する。すなわち、本発明の有機EL素子材料は、中間の2価の芳香族環が2,6-ナフタレン骨格であり、末端の縮合芳香族環が特定の芳香族環である構造を有する。そのため、本発明の有機EL素子材料を有する有機EL素子では、上記特許文献13、14には記載のない、有機EL素子の顕著な駆動電圧の低下が起こる。

30

40

本発明の有機EL素子材料では、分子構造に適当な共役長の伸長と、メタ位に位置する2価の芳香族炭化水素環を介して低電圧化に寄与する縮合芳香族炭化水素環を末端に有することで、有機EL素子の発光効率を高く、寿命に優れ、かつ素子の駆動電圧の低下を実現することができる。

【0019】

本発明によれば、駆動電圧を低減することができ、高効率かつ長寿命な燐光発光性の有機EL素子を実現する有機EL素子用材料を提供することができる。

【図面の簡単な説明】

50

【 0 0 2 0 】

【 図 1 】 本発明の実施形態における有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の概略構成を示す図である。

【 発明を実施するための形態 】

【 0 0 2 1 】

以下、本発明の実施形態について説明する。

【 0 0 2 2 】

(有機 E L 素子の構成)

以下、本発明の有機 E L 素子の素子構成について説明する。

有機 E L 素子の代表的な素子構成としては、

- (1) 陽極 / 発光層 / 陰極
- (2) 陽極 / 正孔注入層 / 発光層 / 陰極
- (3) 陽極 / 発光層 / 電子注入・輸送層 / 陰極
- (4) 陽極 / 正孔注入層 / 発光層 / 電子注入・輸送層 / 陰極
- (5) 陽極 / 有機半導体層 / 発光層 / 陰極
- (6) 陽極 / 有機半導体層 / 電子障壁層 / 発光層 / 陰極
- (7) 陽極 / 有機半導体層 / 発光層 / 付着改善層 / 陰極
- (8) 陽極 / 正孔注入・輸送層 / 発光層 / 電子注入・輸送層 / 陰極
- (9) 陽極 / 絶縁層 / 発光層 / 絶縁層 / 陰極
- (1 0) 陽極 / 無機半導体層 / 絶縁層 / 発光層 / 絶縁層 / 陰極
- (1 1) 陽極 / 有機半導体層 / 絶縁層 / 発光層 / 絶縁層 / 陰極
- (1 2) 陽極 / 絶縁層 / 正孔注入・輸送層 / 発光層 / 絶縁層 / 陰極
- (1 3) 陽極 / 絶縁層 / 正孔注入・輸送層 / 発光層 / 電子注入・輸送層 / 陰極

などの構造を挙げることができる。

上記の中で (8) の素子構成が好ましく用いられるが、もちろんこれらに限定されるものではない。

【 0 0 2 3 】

図 1 に、本発明の実施形態における有機 E L 素子の一例の概略構成を示す。

有機 E L 素子 1 は、透明な基板 2 と、陽極 3 と、陰極 4 と、陽極 3 と陰極 4 との間に配置された有機薄膜層 1 0 とを有する。

有機薄膜層 1 0 は、燐光ホストおよび燐光ドーパントを含む燐光発光層 5 を有するが、燐光発光層 5 と陽極 3 との間に正孔注入・輸送層 6 等、燐光発光層 5 と陰極 4 との間に電子注入・輸送層 7 等を備えていてもよい。

また、燐光発光層 5 の陽極 3 側に電子障壁層を、燐光発光層 5 の陰極 4 側に正孔障壁層を、それぞれ設けてもよい。

これにより、電子や正孔を燐光発光層 5 に閉じ込めて、燐光発光層 5 における励起子の生成確率を高めることができる。

【 0 0 2 4 】

なお、本明細書において、蛍光ホストおよび燐光ホストの用語は、蛍光ドーパントと組み合わせられたときには蛍光ホストと称し、燐光ドーパントと組み合わせられたときには燐光ホストと称するものであり、分子構造のみから一義的に蛍光ホストや燐光ホストに限定的に区分されるものではない。

言い換えると、本明細書において、蛍光ホストとは、蛍光ドーパントを含有する蛍光発光層を構成する材料を意味し、蛍光材料のホストにしか利用できないものを意味しているわけではない。

同様に燐光ホストとは、燐光ドーパントを含有する燐光発光層を構成する材料を意味し、燐光発光材料のホストにしか利用できないものを意味しているわけではない。

【 0 0 2 5 】

また、本明細書中で「正孔注入・輸送層」は「正孔注入層および正孔輸送層の少なくともいずれか 1 つ」を意味し、「電子注入・輸送層」は「電子注入層および電子輸送層の少

10

20

30

40

50

なくともいずれか1つ」を意味する。

【0026】

(透光性基板)

本発明の有機EL素子は、透光性の基板上に作製する。ここでいう透光性基板は有機EL素子を支持する基板であり、400～700nmの可視領域の光の透過率が50%以上で平滑な基板が好ましい。

具体的には、ガラス板、ポリマー板等が挙げられる。

ガラス板としては、特にソーダ石灰ガラス、バリウム・ストロンチウム含有ガラス、鉛ガラス、アルミノケイ酸ガラス、ホウケイ酸ガラス、バリウムホウケイ酸ガラス、石英等が挙げられる。

またポリマー板としては、ポリカーボネート系樹脂、アクリル系樹脂、ポリエチレンテレフタレート系樹脂、ポリエーテルサルファイド系樹脂、ポリサルフォン系樹脂等を原料として用いてなるものを挙げる事ができる。

【0027】

(陽極及び陰極)

有機EL素子の陽極は、正孔を、正孔注入層、正孔輸送層又は発光層に注入する役割を担うものであり、4.5eV以上の仕事関数を有することが効果的である。

陽極材料の具体例としては、酸化インジウム錫合金(ITO)、酸化錫(NESA)、酸化インジウム亜鉛酸化物、金、銀、白金、銅等が挙げられる。

陽極はこれらの電極物質を蒸着法やスパッタリング法等の方法で薄膜を形成させることにより作製することができる。

本実施形態のように、発光層からの発光を陽極から取り出す場合、陽極の可視領域の光の透過率を10%より大きくすることが好ましい。また、陽極のシート抵抗は、数百Ω以下が好ましい。陽極の膜厚は、材料にもよるが、通常10nm～1μm、好ましくは10～200nmの範囲で選択される。

【0028】

陰極としては、電子注入層、電子輸送層又は発光層に電子を注入する目的で、仕事関数の小さい材料が好ましい。

陰極材料は特に限定されないが、具体的にはインジウム、アルミニウム、マグネシウム、マグネシウム-インジウム合金、マグネシウム-アルミニウム合金、アルミニウム-リチウム合金、アルミニウム-スカンジウム-リチウム合金、マグネシウム-銀合金等が使用できる。

陰極も、陽極と同様に、蒸着法やスパッタリング法等の方法で薄膜を形成させることにより作製することができる。また、陰極側から、発光を取り出す態様を採用することもできる。

【0029】

(発光層)

有機EL素子の発光層は以下の機能を併せ持つものである。

すなわち、

(1) 注入機能；電界印加時に陽極又は正孔注入層より正孔を注入することができ、陰極又は電子注入層より電子を注入することができる機能、

(2) 輸送機能；注入した電荷(電子と正孔)を電界の力で移動させる機能、

(3) 発光機能；電子と正孔の再結合の場を提供し、これを発光につなげる機能、がある。

【0030】

ただし、正孔の注入されやすさと電子の注入されやすさに違いがあってもよく、また、正孔と電子の移動度で表される輸送能に大小があってもよい。

【0031】

この発光層を形成する方法としては、例えば蒸着法、スピンコート法、LB法等の公知の方法を適用することができる。

10

20

30

40

50

発光層は、分子堆積膜であることが好ましい。

ここで分子堆積膜とは、気相状態の材料化合物から沈着され形成された薄膜や、溶液状態又は液相状態の材料化合物から固体化され形成された膜のことであり、通常この分子堆積膜は、LB法により形成された薄膜（分子累積膜）とは凝集構造、高次構造の相違や、それに起因する機能的な相違により区分することができる。

【0032】

また、特開昭57-51781号公報に開示されているように、樹脂等の結着剤と材料化合物とを溶剤に溶かして溶液とした後、これをスピコート法等により薄膜化することによっても、発光層を形成することができる。

さらに、発光層の膜厚は、好ましくは5～50nm、より好ましくは7～50nm、最も好ましくは10～50nmである。5nm未満では発光層形成が困難となり、色度の調整が困難となる恐れがあり、50nmを超えると駆動電圧が上昇する恐れがある。

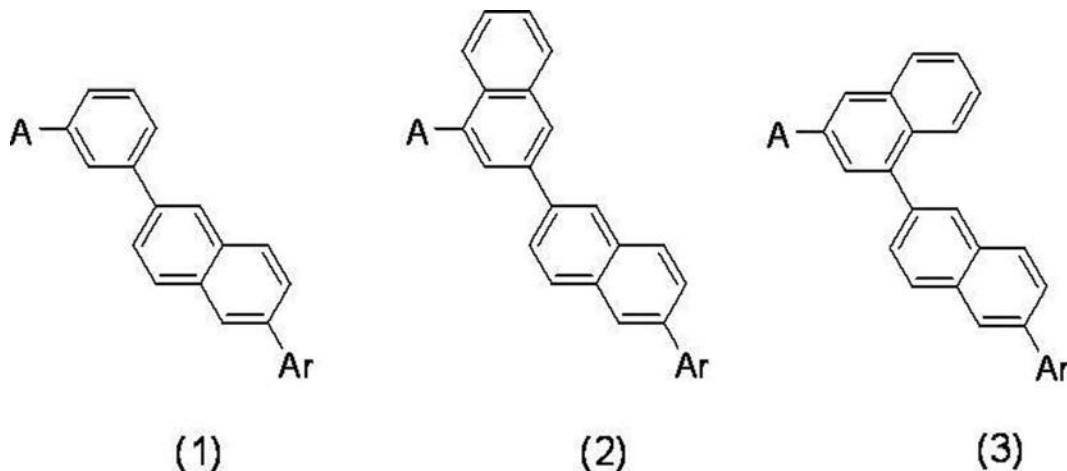
【0033】

(有機EL素子用材料)

本発明の有機EL素子における有機薄膜層の少なくとも1層は、下記式(1)、式(2)、及び式(3)のうちのいずれかの一般式で示される有機EL素子用材料と、少なくとも1種の燐光発光を示す燐光発光材料とを含む。ここで、有機EL素子用材料は、置換基を有しても良い。

【0034】

【化2】



【0035】

(式中、Aは、3-フルオランテニル基、5-ベンゾ[c]フェナントレニル基、6-ベンゾ[c]フェナントレニル基、10-ベンゾ[g]クリセニル基から選択される基を表し；

Arは、3重項エネルギーが2.10eV以上の炭素数10～30の縮合芳香族環を表す。)

本発明の有機EL素子用材料が置換基を有する場合、前記式(1)、式(2)、及び式(3)中のA、Ar、フェニレン環、及びナフチレン環のうちの少なくともいずれかが置換基を有する。

本発明の有機EL素子用材料が有しても良い置換基としては、本発明の効果を奏する置換基であれば特に制限はなく、例えば、炭素数1～20のアルキル基、炭素数1～20のハロアルキル基、炭素数3～18のシクロアルキル基、炭素数3～20のシリル基、シアノ基、及びハロゲン原子等であることが好ましい。

アルキル基としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、1-メチルプロピル基、1-プロピルブチル基などが挙げられる。

ハロアルキル基としては、2,2,2-トリフルオロエチル基などが挙げられる。

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、シクロオクチル基などが挙げられる。

シリル基としては、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基などが挙げられる。

ハロゲン原子としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素などが挙げられる。

また、これらの置換基は、A、Ar、フェニレン環、及びナフチレン環の芳香族炭化水素環の2つを連結するように設けられていてもよい。

また、本発明の有機EL素子用材料において、前記A又は前記Arは置換基を有しても良く、具体的には、前記A又は前記Arは、フェニル基又はナフチル基を置換基として有しても良い。

【0036】

上記3重項エネルギーが2.10 eV以上の炭素数10~30の縮合芳香族環とは、Ar-Hとした場合の炭素数10~30の縮合芳香族環の3重項エネルギーが2.10 eV以上であることを意味し、これらの3重項エネルギー準位は、後述する3重項エネルギーの測定方法によって測定できる。上記Arの3重項エネルギーの上限は、本願の効果を奏する範囲であればよく、好ましくは2.8 eV以下である。

10

上記2.1 eV以上の炭素数10~30の縮合芳香族環の例としては、ナフタレン、フェナントレン、フルオランテン、トリフェニレン、クリセン、ピセン、ベンゾ[c]フェナントレン、ジベンゾ[c, g]フェナントレン、ベンゾ[g]クリセン、ベンゾ[b]フルオランテン等が挙げられる。

ここで、Arの「炭素数10~30の縮合芳香族環」とは、縮合芳香族環を形成する炭素数が10~30であることを示す。

【0037】

20

本発明の有機EL素子における有機薄膜層の少なくとも1層は、発光層であり、この発光層は上記式(1)、式(2)、及び式(3)のうちのいずれかの一般式で示される有機EL素子用材料と、少なくとも1種の燐光発光を示す燐光発光材料とを含むことができる。

本発明の式(1)、式(2)、及び(3)のうちのいずれかの一般式で示される有機EL素子用材料は、3重項エネルギーが大きいことから、燐光ドーパントに対してエネルギー移動させて燐光発光させるホストとして利用することができる。

また、蛍光ホストとしてよく知られたアントラセン誘導体では赤色発光の燐光ドーパントにもホストとして不適であるが、本発明の有機EL素子用材料では3重項エネルギーが大きいことから、有効に赤色の発光を示す燐光ドーパントを発光させることができる。

30

ただし、従来よく知られた燐光ホストであるCBPでは緑よりもさらに短波長の燐光ドーパントに対してもホストとして機能するが、本発明の有機EL素子用材料では、緑色の発光を示す燐光ドーパントまでしか発光させることができない。

また、本発明では、有機EL素子用材料の骨格を窒素原子を含まない多環式縮合環で構成することにより、分子の安定性を高くし素子寿命を長くすることができる。

このとき、骨格部の核原子数が少なすぎると分子の安定性が十分に高くない。一方、本発明の化合物を構成する多環式縮合環の縮合する環の数が多くなりすぎると共役が伸びすぎてHOMO-LUMOギャップが狭くなって、結果的に3重項エネルギーも小さくなり、有用な発光波長に満たなくなる。この点、本発明の有機EL素子用材料は、適度な核原子数を有するので、有用な発光波長を示し安定性も高い燐光発光層の燐光ホストとして好適に利用することができる。

40

さらに、本発明の有機EL素子用材料では、末端に低電圧化に寄与する特定の構造を有する縮合芳香族炭化水素を有するため、有機EL素子の駆動電圧の低減を図ることができる。

【0038】

従来は、緑から赤色までの幅広い波長領域において燐光ドーパントに広く適用できる燐光ドーパントに対応するホスト材料を選定していたため、3重項エネルギーEg(T)が大きいCBP等をホストとしていた。

しかし、CBPでは確かに3重項エネルギーEg(T)は大きいですが、寿命が短いという問題があった。

50

この点、本発明の有機EL素子用材料では、青ほどワイドギャップな燐光ドーパントのホストには適用できないが、赤又は緑の燐光ドーパントに対してはホストとして機能する。さらには、CBPのように3重項エネルギー $E_g(T)$ が大きいと、赤色燐光ドーパントとのエネルギー差が大きすぎて分子間エネルギー移動が効率的に行われないう問題がある。しかし、本発明のホストによれば、赤色又は緑色燐光ドーパントに対しては励起されるエネルギーの値が適合しているため、効率的にホストの励起子から燐光ドーパントにエネルギー移動させることができ、非常に高効率の燐光発光層を構成することができる。また、燐光発光性ドーパントが直接励起された場合でも、本発明の有機EL素子用材料は、燐光発光性ドーパントの3重項エネルギーに比べて十分大きな3重項エネルギーを有するため、エネルギーを発光層内に効率よく閉じ込めることができる。

10

このように、本発明によれば、高効率かつ長寿命の燐光発光層を構成することができる。

【0039】

ここで、有機EL素子を構成する材料の3重項エネルギー： $E_g(T)$ は、燐光発光スペクトルに基づいて規定することが例として挙げられ、例えば、本発明にあっては以下のように規定することが例として挙げられる。

すなわち、各材料をEPA溶媒（容積比でジエチルエーテル：イソペンタン：エタノール＝5：5：2）に10 μ モル/リットルで溶解し、燐光測定用試料とする。

そして、燐光測定用試料を石英セルに入れ、77Kに冷却し、励起光を照射し、放射される燐光の波長を測定する。

20

得られた燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、この接線とベースラインとの交点の波長値をエネルギーに換算した値を3重項エネルギー $E_g(T)$ とする。

なお、測定には、例えば、市販のSPEX社FLUOROLOG IIを用いることができる。

ただし、このような規定によらず、本発明の趣旨を逸脱しない範囲で3重項エネルギーとして定義できる値であればよい。

【0040】

本発明の上記式(1)、式(2)、及び式(3)のうちのいずれかの一般式で表される有機EL素子用材料は、3重項エネルギーが、2.0 eV以上2.5 eV以下であることが好ましい。

30

3重項エネルギーが2.0 eV以上であれば、520 nm以上720 nm以下で発光する燐光発光材料へのエネルギー移動が可能である。2.5 eVを越えると発光層内の赤色ドーパントとの3重項エネルギーとホスト材料の3重項エネルギーの差が大きくなり、その結果、駆動電圧が高くなる場合がある。

なお、本発明の有機EL素子用材料の3重項エネルギーは、2.1 eV以上2.5 eV以下であることがより好ましく、2.2 eV以上2.5 eV以下であることがさらに好ましい。

【0041】

また、本発明の上記式(1)、式(2)、及び式(3)のうちのいずれかの一般式で表される有機EL素子用材料において、Aが無置換の3-フルオランテニル基、5-ベンゾ[c]フェナントレニル基、6-ベンゾ[c]フェナントレニル、10-ベンゾ[g]クリセニル基から選択される基であることが好ましい。

40

本明細書の「無置換」とは、水素原子が置換したことを意味する。また本明細書の化合物の水素原子には、軽水素、重水素が含まれる。

そして、本発明の有機EL素子用材料において、Arが、それぞれ独立に、ナフチル基、フルオランテニル基、フェナントレニル基、ベンゾフェナントレニル基、ベンゾ[g]クリセニル基から選択される基であることが好ましい。

さらに、本発明の有機EL素子用材料において、Arが、2-ナフチル基、3-フルオランテニル基、8-フルオランテニル基、9-フェナントレニル基、5-ベンゾ[c]フ

50

エナントレニル基、6-ベンゾ[c]フェナントレニル基、10-ベンゾ[g]クリセニル基から選択される基であることが好ましい。

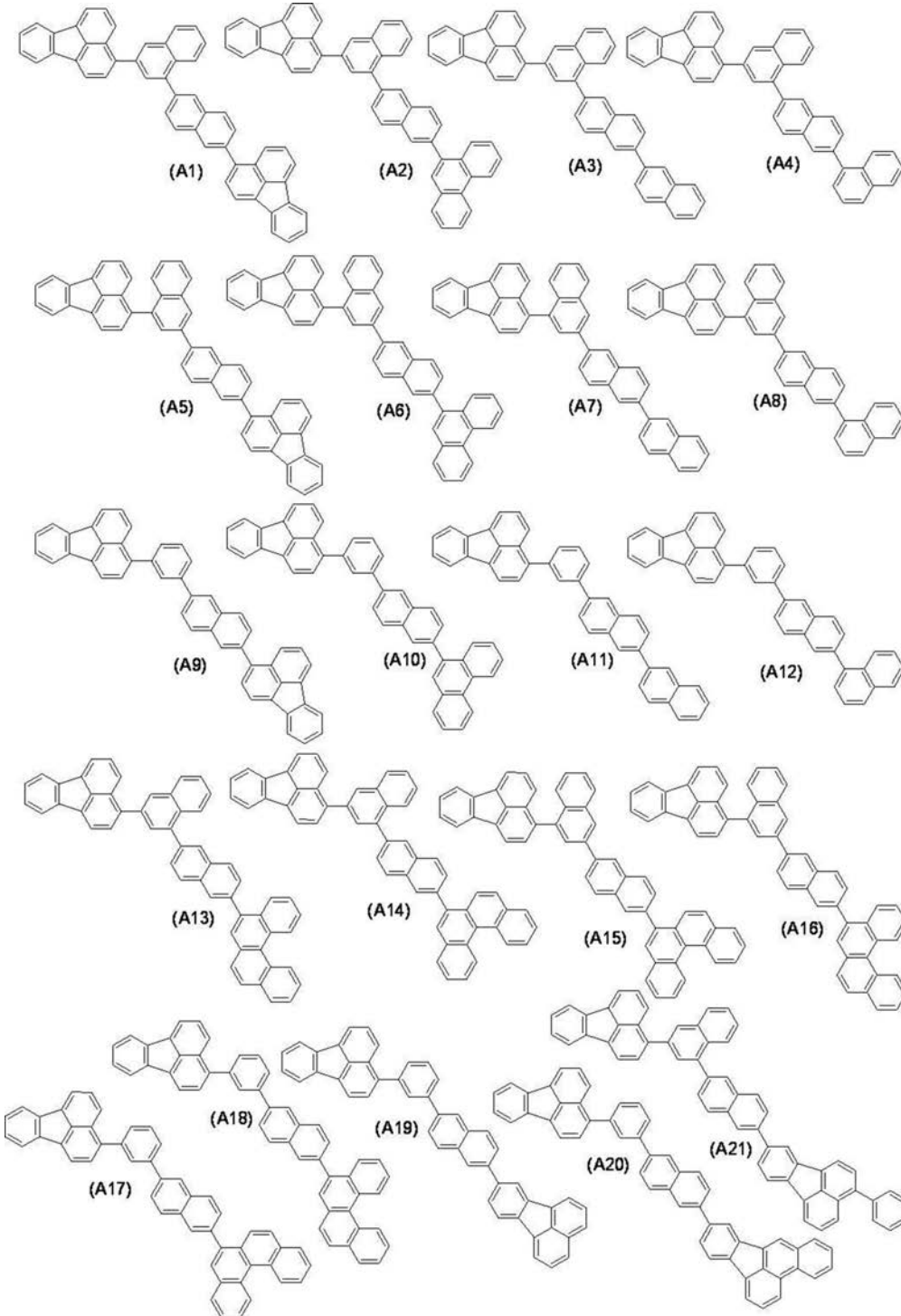
【0042】

このように、本発明の有機EL素子用材料のA、Arで表される基を、それぞれ特定の構造を有する基にすることにより、3重項エネルギーを最適な大きさとすることができると同時に、駆動電圧を低下させることができる。

上記式(1)、式(2)、及び式(3)のうちのいずれか的一般式で表される有機EL素子用材料としては、例えば、以下に示す化合物が具体例として挙げられる。

【0043】

【化3】



【0044】

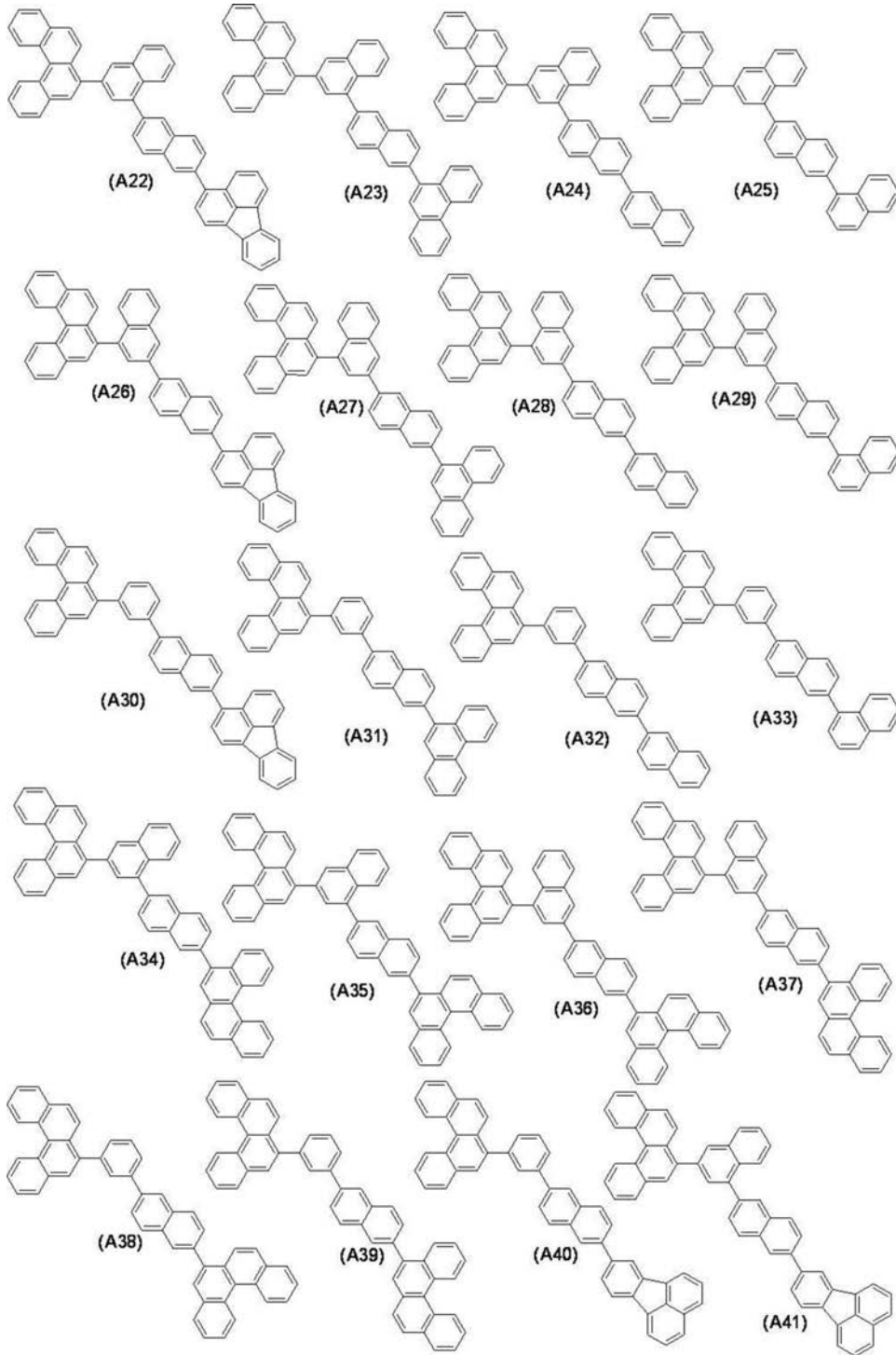
10

20

30

40

【化4】



10

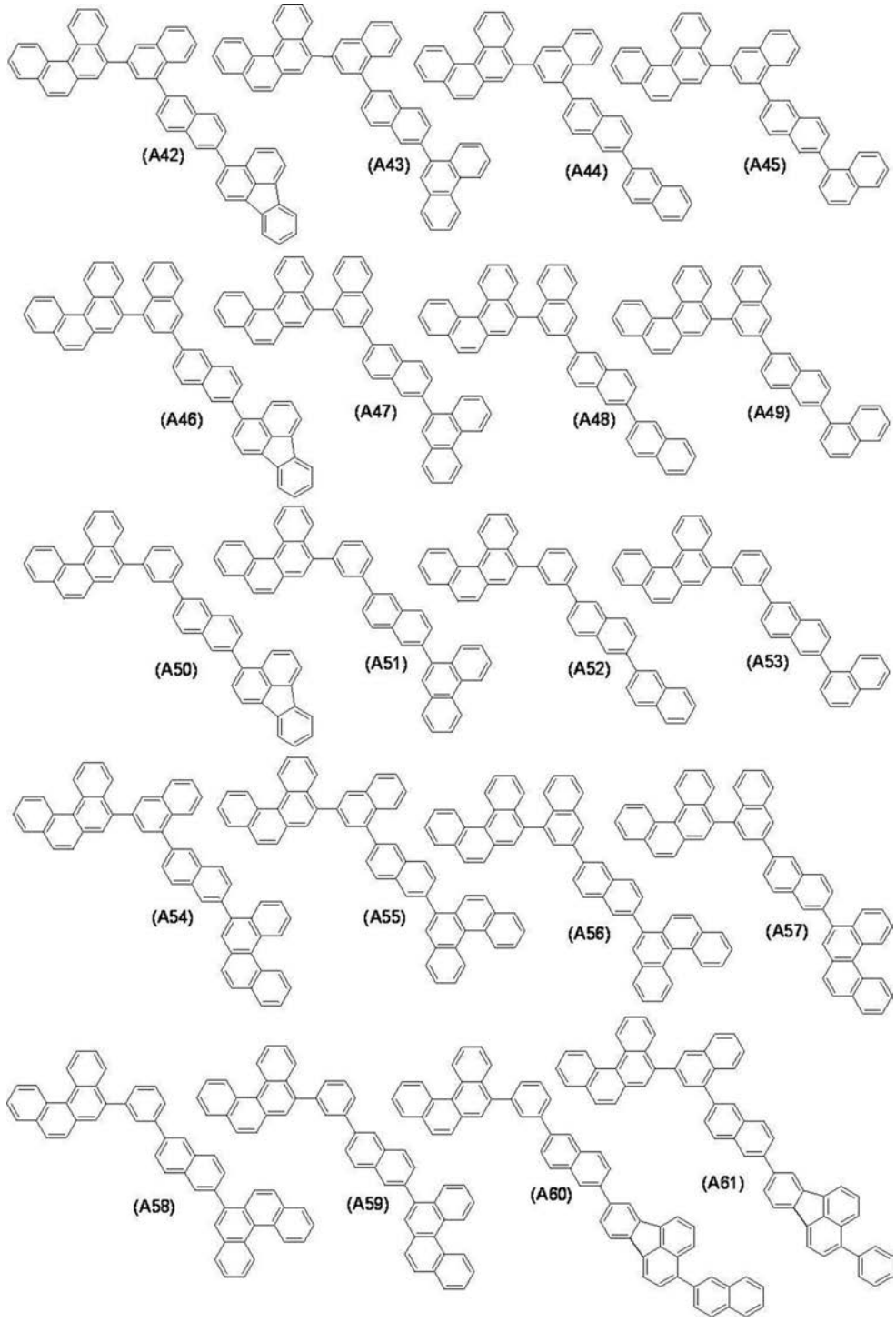
20

30

【0045】

40

【化5】



10

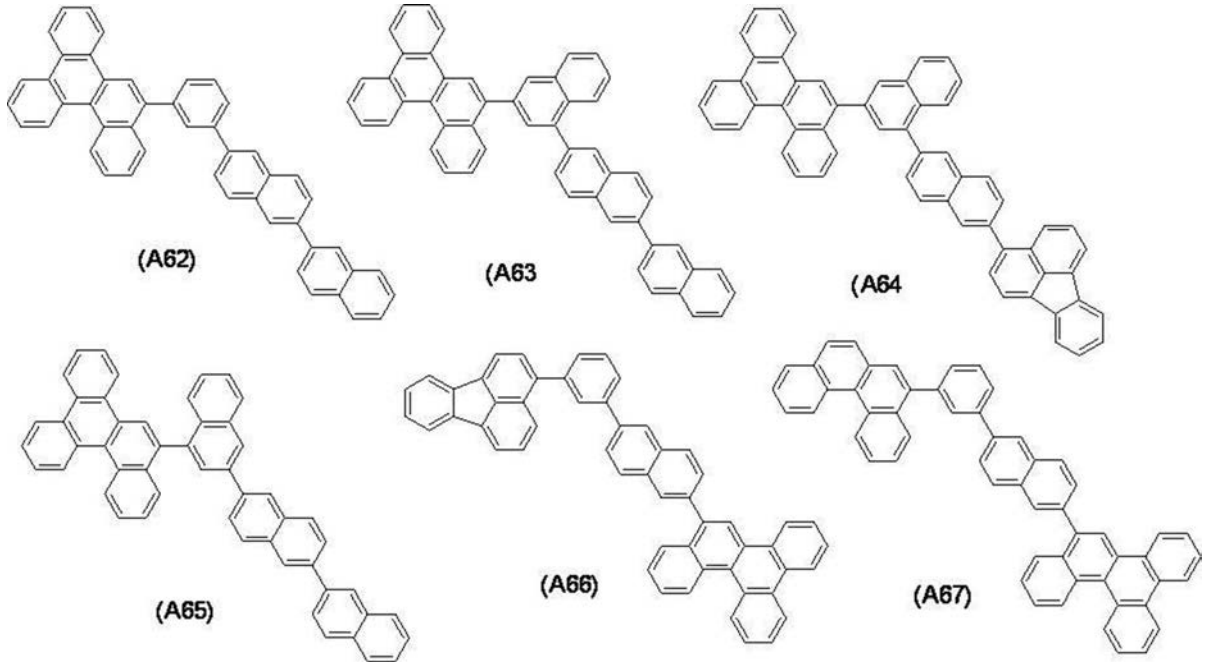
20

30

【0046】

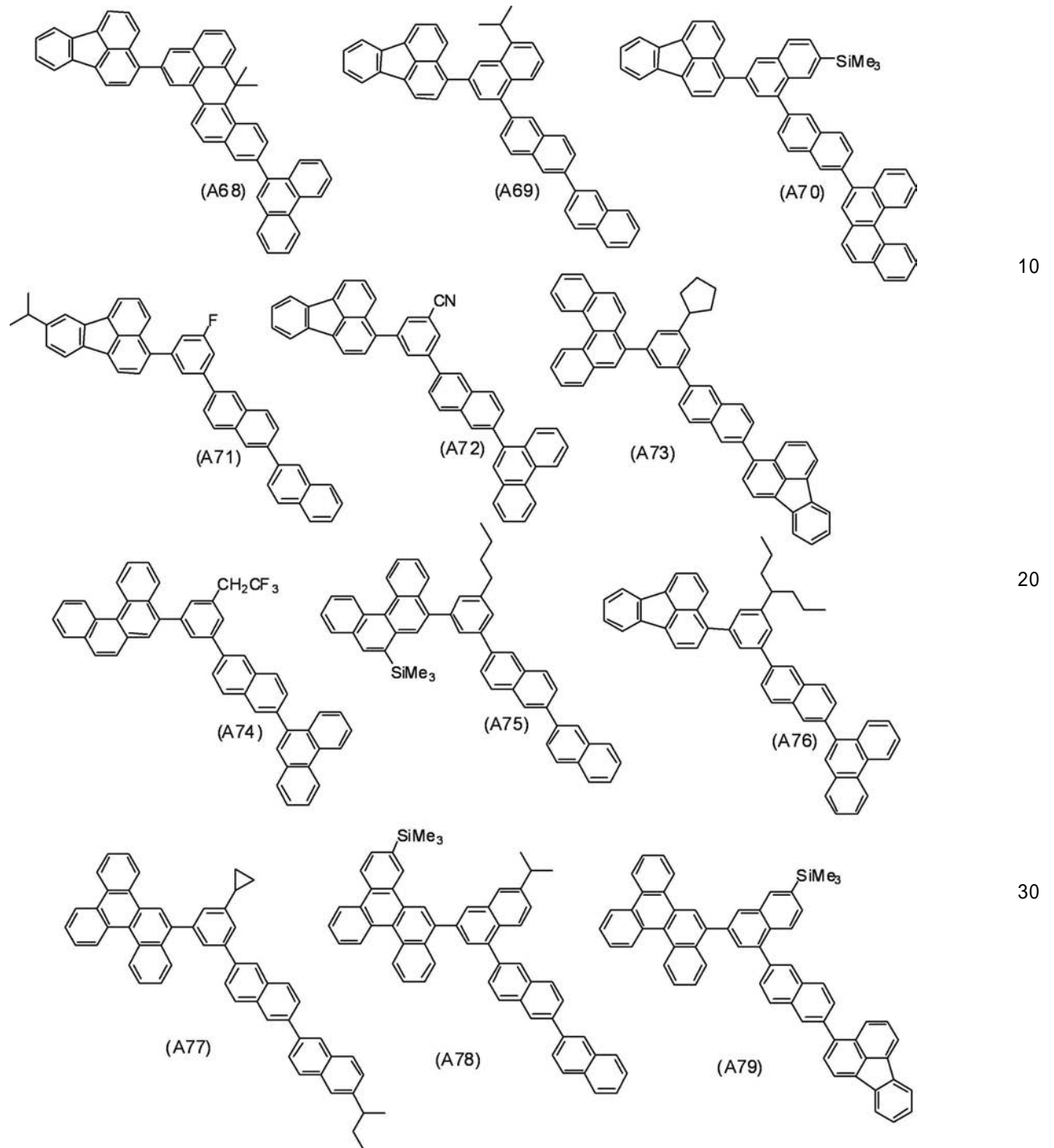
40

【化6】



【0047】

【化7】



【0048】

(燐光発光材料)

本発明において用いられる燐光発光材料は、燐光発光を示すものであり、金属錯体を含むものが好ましい。該金属錯体としては、Ir, Pt, Os, Au, ReおよびRuから選択される金属原子と配位子とを有するものが好ましい。特に、前記配位子は、オルトメタル結合を有することが好ましい。

燐光量子収率が高く、発光素子の外部量子効率をより向上させることができるという点で、イリジウム(Ir)、オスmium(Os)および白金(Pt)から選ばれる金属を含む化合物であると好ましく、イリジウム錯体、オスmium錯体、白金錯体等の金属錯体であるとさらに好ましく、中でもイリジウム錯体及び白金錯体がより好ましく、オルトメタル化イリジウム錯体が最も好ましい。

金属錯体の具体例を、以下に示すが、この中で緑～赤に発光する金属錯体が特に好まし

10

20

30

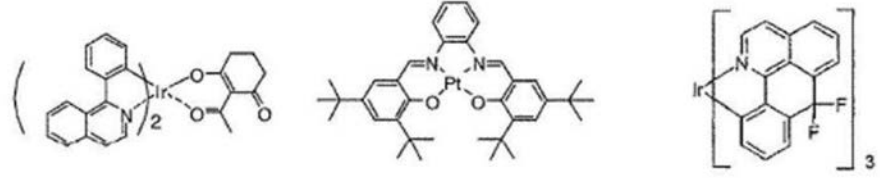
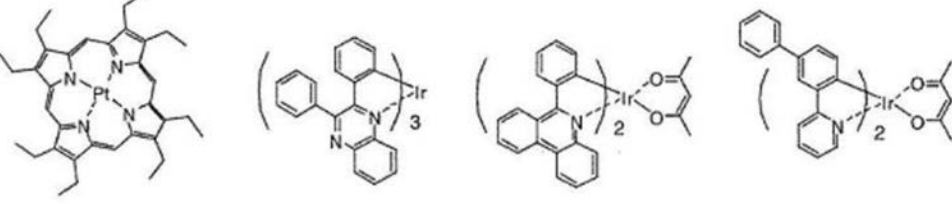
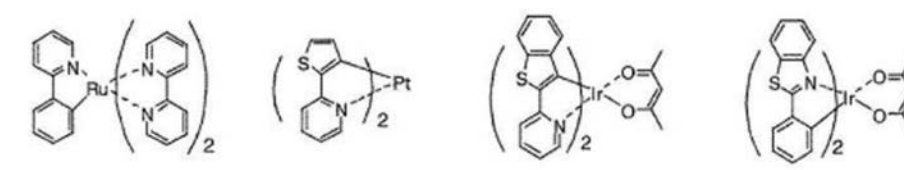
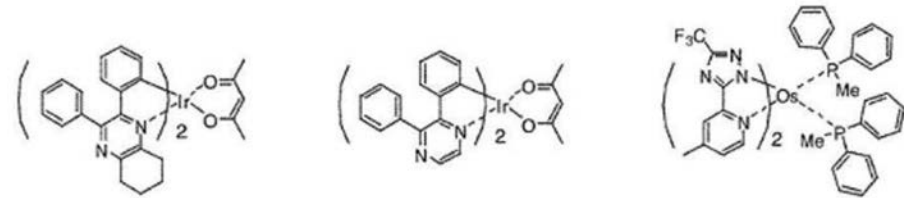
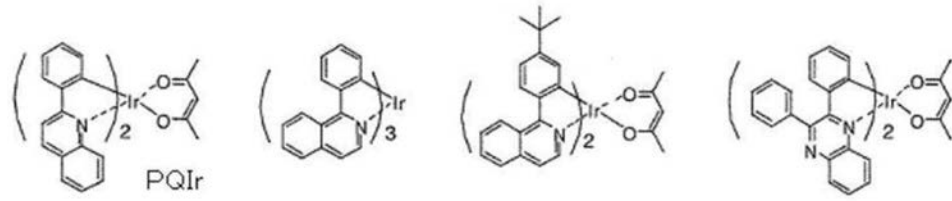
40

50

い。

【 0 0 4 9 】

【 化 8 】



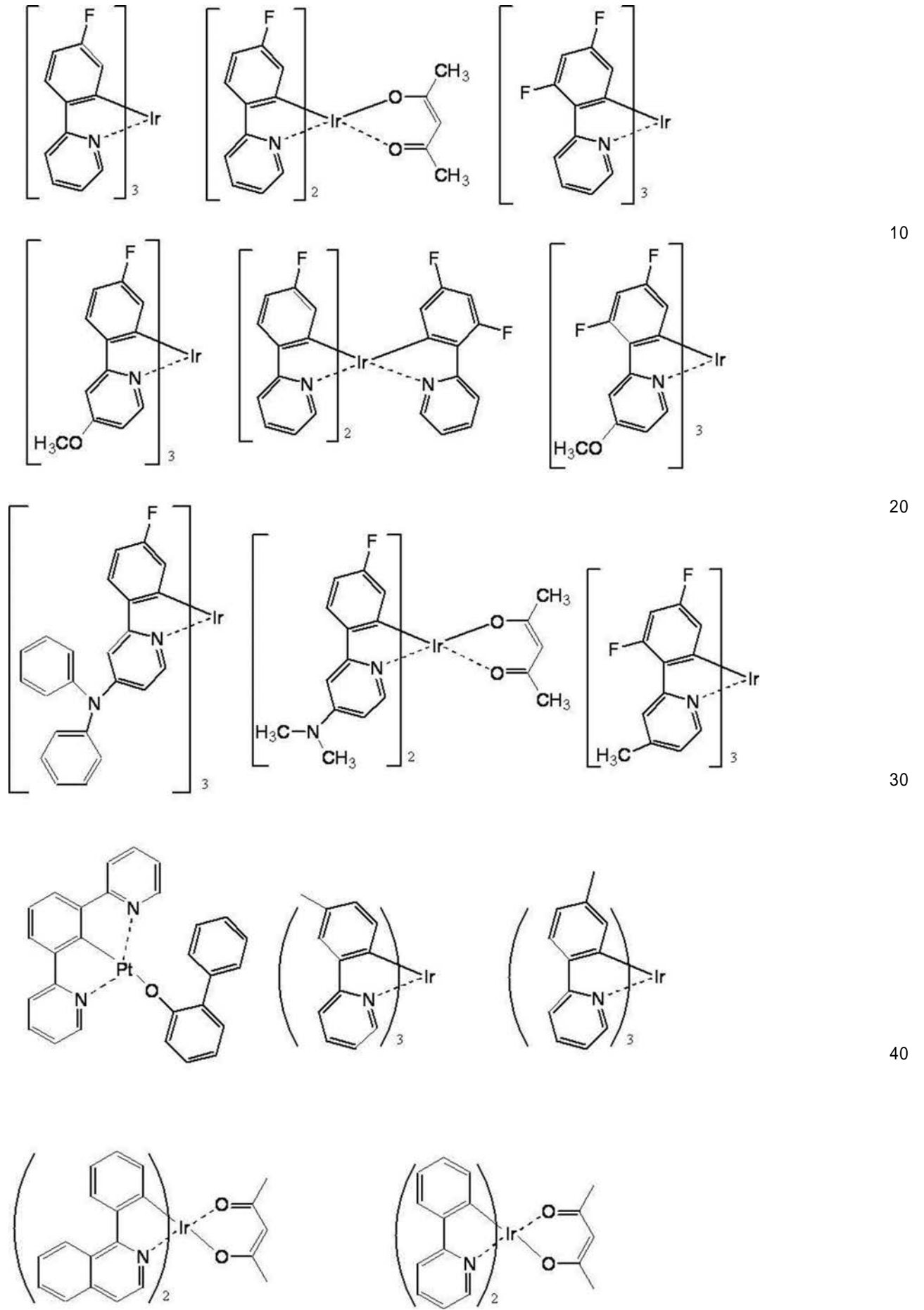
【 0 0 5 0 】

10

20

30

【化9】



【0051】

10

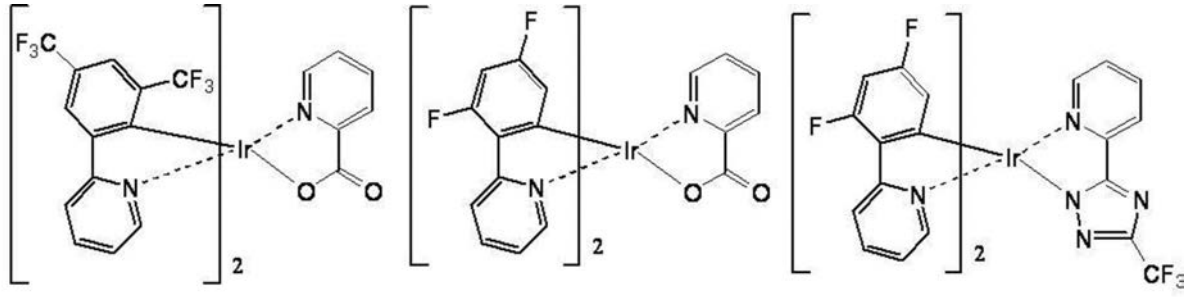
20

30

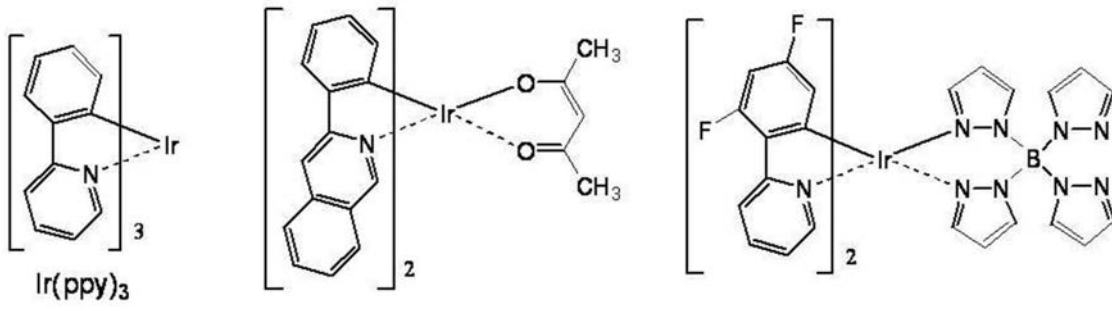
40

50

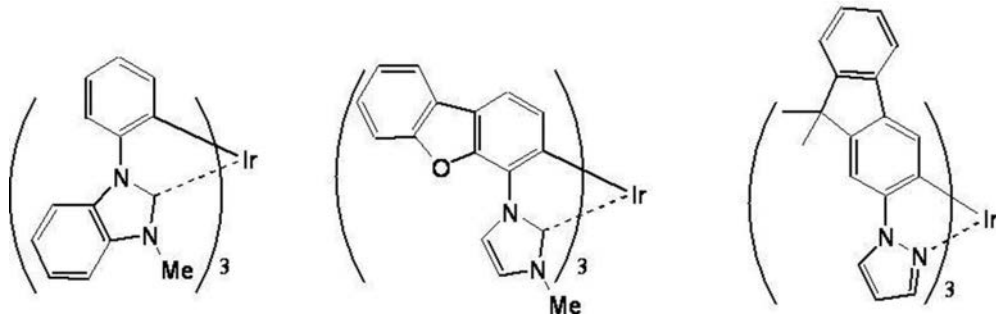
【化 1 0】



10



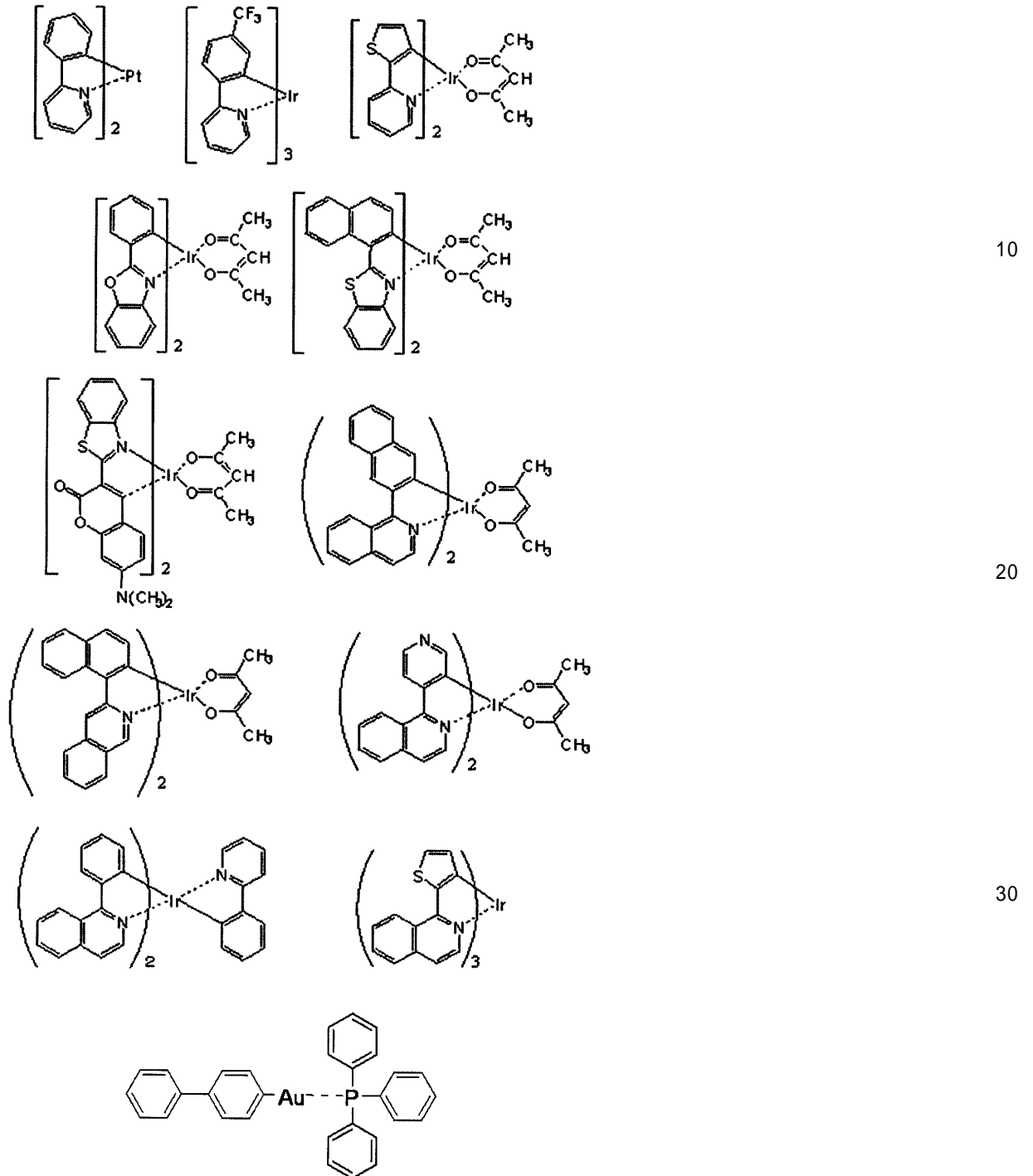
20



【 0 0 5 2】

30

【化 1 1】



【 0 0 5 3 】

本発明では、前記発光層に含まれる前記燐光発光材料のうち少なくとも1種は、発光波長の極大値が520nm以上720nm以下であることが好ましく、570nm以上720nm以下であることがより好ましい。

このような発光波長の燐光発光材料（燐光ドーパント）を、本発明で用いる特定のホスト材料にドーブして発光層を構成することにより、高効率な有機EL素子とできる。

【 0 0 5 4 】

本発明の有機EL素子は、正孔輸送層（正孔注入層）を有していてもよく、該正孔輸送層（正孔注入層）が上記式（1）、式（2）、及び式（3）のうちのいずれかの一般式で表される有機EL素子用材料を含有しても好ましい。

また、本発明の有機EL素子は、電子輸送層（電子注入層）を有していてもよく、該電

子輸送層（電子注入層）が上記式（１）、式（２）、及び式（３）のうちのいずれかの一般式で表される有機ＥＬ素子用材料を含有しても好ましい。

さらに、本発明の有機ＥＬ素子は、電子障壁層や正孔障壁層を有していてもよく、これら電子障壁層や正孔障壁層は、上記式（１）、式（２）、及び式（３）のうちのいずれかの一般式で表される有機ＥＬ素子用材料を含有しても好ましい。

【００５５】

本発明の有機ＥＬ素子は、陰極と有機薄膜層との界面領域に還元性ドーパントを有することも好ましい。

このような構成によれば、有機ＥＬ素子における発光輝度の向上や長寿命化が図られる。

還元性ドーパントとしては、アルカリ金属、アルカリ金属錯体、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属錯体、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属錯体、及び希土類金属化合物等から選ばれた少なくとも一種類が挙げられる。

【００５６】

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

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

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

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

【００５７】

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

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

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

【００５８】

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

【００５９】

還元性ドーパントの添加形態としては、界面領域に層状又は島状に形成すると好ましい。形成方法としては、抵抗加熱蒸着法により還元性ドーパントを蒸着しながら、界面領域を形成する発光材料や電子注入材料である有機物を同時に蒸着させ、有機物中に還元ドーパントを分散する方法が好ましい。分散濃度はモル比で有機物：還元性ドーパント = 10

10

20

30

40

50

0 : 1 ~ 1 : 1 0 0、好ましくは5 : 1 ~ 1 : 5である。

還元性ドーパントを層状に形成する場合は、界面の有機層である発光材料や電子注入材料を層状に形成した後に、還元ドーパントを単独で抵抗加熱蒸着法により蒸着し、好ましくは層の厚み0.1 ~ 15 nmで形成する。

還元性ドーパントを島状に形成する場合は、界面の有機層である発光材料や電子注入材料を島状に形成した後に、還元ドーパントを単独で抵抗加熱蒸着法により蒸着し、好ましくは島の厚み0.05 ~ 1 nmで形成する。

また、本発明の有機EL素子における、主成分と還元性ドーパントの割合としては、モル比で主成分 : 還元性ドーパント = 5 : 1 ~ 1 : 5であると好ましく、2 : 1 ~ 1 : 2であるとさらに好ましい。

10

【0060】

本発明の有機EL素子は、発光層と陰極との間に電子輸送層又は電子注入層を有し、該電子輸送層又は電子注入層は、上記有機EL素子用材料を含むことが好ましく、主成分として含むことがより好ましい。ここで、電子注入層は電子輸送層として機能する層であってもよい。

なお、「主成分として」とは、電子注入層が50質量%以上の有機EL素子用材料を含有していることを意味する。

電子注入層又は電子輸送層は、発光層への電子の注入を助ける層であって、電子移動度が大きい。電子注入層はエネルギーレベルの急な変化を緩和する等、エネルギーレベルを調整するために設ける。

20

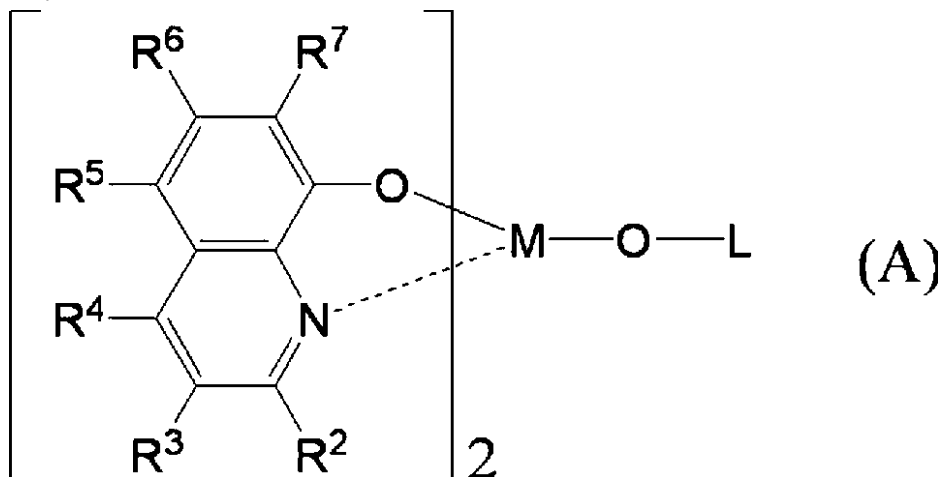
電子輸送層又は電子注入層に用いる電子輸送性材料としては、分子内にヘテロ原子を1個以上含有する芳香族ヘテロ環化合物が好ましく用いられ、特に含窒素環誘導体が好ましい。また、含窒素環誘導体としては、含窒素6員環もしくは5員環骨格を有する芳香族環、又は含窒素6員環もしくは5員環骨格を有する縮合芳香族環化合物が好ましい。

【0061】

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

【0062】

【化12】



30

40

【0063】

R² ~ R⁷ は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、オキシ基、アミノ基、炭素数1 ~ 40の炭化水素基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アルコキシカルボニル基、又は、複素環基であり、これらは置換されていてもよい。

ハロゲン原子としては、例えば、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素等が挙げられる。また、置換されていてもよいアミノ基の例としては、アルキルアミノ基、アリールアミノ基、アラキルアミノ基が挙げられる。

炭素数1 ~ 40の炭化水素基としては、置換もしくは無置換のアルキル基、アルケニル

50

基、シクロアルキル基、アリール基、アラルキル基等が挙げられる。

【0064】

アルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*s*-ブチル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、*n*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、*n*-ノニル基、*n*-デシル基、*n*-ウンデシル基、*n*-ドデシル基、*n*-トリデシル基、*n*-テトラデシル基、*n*-ペンタデシル基、*n*-ヘキサデシル基、*n*-ヘプタデシル基、*n*-オクタデシル基、ネオペンチル基、1-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基、3-メチルペンチル基、ヒドロキシメチル基、1-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシエチル基、2-ヒドロキシイソブチル基、1, 2-ジヒドロキシエチル基、1, 3-ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3-ジヒドロキシ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1-クロロエチル基、2-クロロエチル基、2-クロロイソブチル基、1, 2-ジクロロエチル基、1, 3-ジクロロイソプロピル基、2, 3-ジクロロ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリクロロプロピル基、ブロモメチル基、1-ブロモエチル基、2-ブロモエチル基、2-ブロモイソブチル基、1, 2-ジブロモエチル基、1, 3-ジブロモイソプロピル基、2, 3-ジブロモ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリブロモプロピル基、ヨードメチル基、1-ヨードエチル基、2-ヨードエチル基、2-ヨードイソブチル基、1, 2-ジヨードエチル基、1, 3-ジヨードイソプロピル基、2, 3-ジヨード-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1-アミノエチル基、2-アミノエチル基、2-アミノイソブチル基、1, 2-ジアミノエチル基、1, 3-ジアミノイソプロピル基、2, 3-ジアミノ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1-シアノエチル基、2-シアノエチル基、2-シアノイソブチル基、1, 2-ジシアノエチル基、1, 3-ジシアノイソプロピル基、2, 3-ジシアノ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1-ニトロエチル基、2-ニトロエチル基、1, 2-ジニトロエチル基、2, 3-ジニトロ-*t*-ブチル基、1, 2, 3-トリニトロプロピル基等が挙げられる。

10

20

【0065】

これらの中でも好ましくは、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*s*-ブチル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、*n*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、*n*-ノニル基、*n*-デシル基、*n*-ウンデシル基、*n*-ドデシル基、*n*-トリデシル基、*n*-テトラデシル基、*n*-ペンタデシル基、*n*-ヘキサデシル基、*n*-ヘプタデシル基、*n*-オクタデシル基、ネオペンチル基、1-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、又は、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基である。

30

【0066】

アルケニル基としては、例えば、ビニル基、アリル基、1-ブテニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、1, 3-ブタンジエニル基、1-メチルビニル基、スチリル基、2, 2-ジフェニルビニル基、1, 2-ジフェニルビニル基、1-メチルアリル基、1, 1-ジメチルアリル基、2-メチルアリル基、1-フェニルアリル基、2-フェニルアリル基、3-フェニルアリル基、3, 3-ジフェニルアリル基、1, 2-ジメチルアリル基、1-フェニル-1-ブテニル基、3-フェニル-1-ブテニル基等が挙げられ、好ましくは、スチリル基、2, 2-ジフェニルビニル基、1, 2-ジフェニルビニル基等が挙げられる。

40

【0067】

シクロアルキル基としては、例えば、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロオクチル基、3, 5-テトラメチルシクロヘキシル基等が挙げられ、シクロヘキシル基、シクロオクチル基、および、3, 5-テトラメチルシクロヘキシル基が好ましい。

アルコキシ基は-OYと表される基である。Yの具体例としては、前記アルキル基で説明したものと同様のものが挙げられ、好ましい例も同様である。

50

【0068】

非縮合アリール基としては、例えば、フェニル基、ビフェニル - 2 - イル基、ビフェニル - 3 - イル基、ビフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、4' - メチルビフェニルイル基、4'' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基、o - クメニル基、m - クメニル基、p - クメニル基、2, 3 - キシリル基、3, 4 - キシリル基、2, 5 - キシリル基、メシチル基、および、m - クウォーターフェニル基等が挙げられる。

10

【0069】

これらの中でも好ましくは、フェニル基、ビフェニル - 2 - イル基、ビフェニル - 3 - イル基、ビフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、p - トリル基、3, 4 - キシリル基、m - クウォーターフェニル - 2 - イル基である。

縮合アリール基としては、例えば、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基が挙げられる。

【0070】

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

20

30

【0071】

アラルキル基としては、例えば、ベンジル基、1 - フェニルエチル基、2 - フェニルエチル基、1 - フェニルイソプロピル基、2 - フェニルイソプロピル基、フェニル - t - ブチル基、 α - ナフチルメチル基、1 - α - ナフチルエチル基、2 - α - ナフチルエチル基、1 - β - ナフチルイソプロピル基、2 - β - ナフチルイソプロピル基、 α - ナフチルメチル基、1 - β - ナフチルエチル基、2 - β - ナフチルエチル基、1 - γ - ナフチルイソプロピル基、2 - γ - ナフチルイソプロピル基、p - メチルベンジル基、m - メチルベンジル基、o - メチルベンジル基、p - クロロベンジル基、m - クロロベンジル基、o - クロロベンジル基、p - プロモベンジル基、m - プロモベンジル基、o - プロモベンジル基、p - ヨードベンジル基、m - ヨードベンジル基、o - ヨードベンジル基、p - ヒドロキシベンジル基、m - ヒドロキシベンジル基、o - ヒドロキシベンジル基、p - アミノベンジル基、m - アミノベンジル基、o - アミノベンジル基、p - ニトロベンジル基、m - ニトロベンジル基、o - ニトロベンジル基、p - シアノベンジル基、m - シアノベンジル基、o - シアノベンジル基、1 - ヒドロキシ - 2 - フェニルイソプロピル基、1 - クロロ - 2 - フェニルイソプロピル基等が挙げられる。

40

【0072】

これらの中でも好ましくは、ベンジル基、p - シアノベンジル基、m - シアノベンジル基、o - シアノベンジル基、1 - フェニルエチル基、2 - フェニルエチル基、1 - フェニ

50

ルイソプロピル基、2 - フェニルイソプロピル基である。

【0073】

アリールオキシ基は、-OY' と表され、Y' の例としてはフェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ビレニル基、2 - ビレニル基、4 - ビレニル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニルイル基、4'' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基等が挙げられる。

10

【0074】

アリールオキシ基のうちヘテロアリールオキシ基は、-OZ' と表され、Z' の例としては2 - ピロリル基、3 - ピロリル基、ピラジニル基、2 - ピリジニル基、3 - ピリジニル基、4 - ピリジニル基、2 - インドリル基、3 - インドリル基、4 - インドリル基、5 - インドリル基、6 - インドリル基、7 - インドリル基、1 - イソインドリル基、3 - イソインドリル基、4 - イソインドリル基、5 - イソインドリル基、6 - イソインドリル基、7 - イソインドリル基、2 - フリル基、3 - フリル基、2 - ベンゾフラニル基、3 - ベンゾフラニル基、4 - ベンゾフラニル基、5 - ベンゾフラニル基、6 - ベンゾフラニル基、7 - ベンゾフラニル基、1 - イソベンゾフラニル基、3 - イソベンゾフラニル基、4 - イソベンゾフラニル基、5 - イソベンゾフラニル基、6 - イソベンゾフラニル基、7 - イソベンゾフラニル基、2 - キノリル基、3 - キノリル基、4 - キノリル基、5 - キノリル基、6 - キノリル基、7 - キノリル基、8 - キノリル基、1 - イソキノリル基、3 - イソキノリル基、4 - イソキノリル基、5 - イソキノリル基、6 - イソキノリル基、7 - イソキノリル基、8 - イソキノリル基、2 - キノキサリニル基、5 - キノキサリニル基、6 - キノキサリニル基、1 - カルバゾリル基、2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、1 - フェナンスリジニル基、2 - フェナンスリジニル基、3 - フェナンスリジニル基、4 - フェナンスリジニル基、6 - フェナンスリジニル基、7 - フェナンスリジニル基、8 - フェナンスリジニル基、9 - フェナンスリジニル基、10 - フェナンスリジニル基、1 - アクリジニル基、2 - アクリジニル基、3 - アクリジニル基、4 - アクリジニル基、9 - アクリジニル基、1, 7 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 1 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、2, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、2, 9 - フェナンスロ

20

30

40

50

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

10

20

【0075】

アルコキシカルボニル基は $-COOY'$ と表され、 Y' の例としては前記アルキル基と同様のものが挙げられる。

【0076】

アルキルアミノ基およびアラルキルアミノ基は $-NQ^1Q^2$ と表される。 Q^1 及び Q^2 の具体例としては、それぞれ独立に、前記アルキル基、前記アラルキル基で説明したものと同様のものが挙げられ、好ましい例も同様である。 Q^1 および Q^2 の一方は水素原子であってもよい。

アリールアミノ基は $-NAr^1Ar^2$ と表され、 Ar^1 および Ar^2 の具体例としては、それぞれ独立に前記非縮合アリール基および縮合アリールで説明した基と同様である。 Ar^1 および Ar^2 の一方は水素原子であってもよい。

30

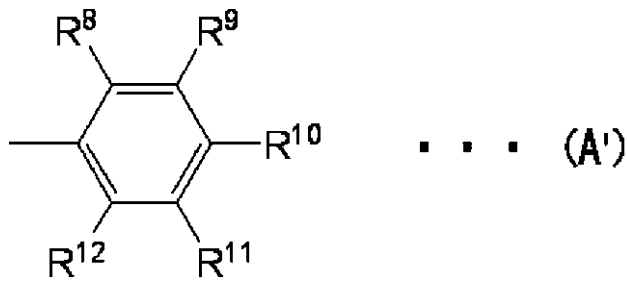
【0077】

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

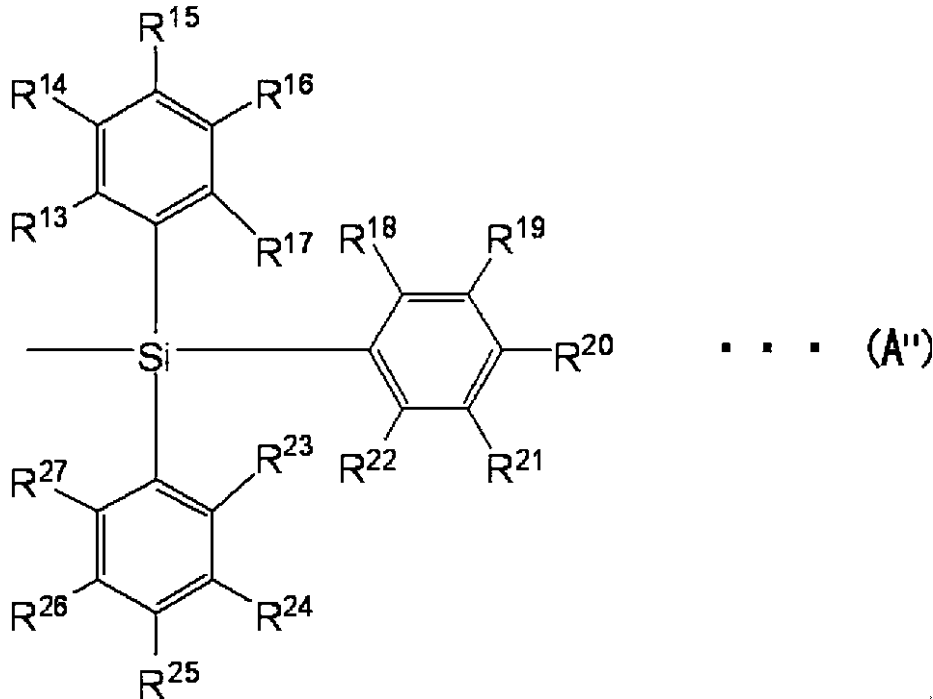
上記式 (A) の L は、下記式 (A') 又は (A'') で表される基である。

【0078】

【化13】



10



20

【0079】

前記式中、 $R^8 \sim R^{12}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換もしくは無置換の炭素数1～40の炭化水素基であり、互いに隣接する基が環状構造を形成していてもよい。また、 $R^{13} \sim R^{27}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換もしくは無置換の炭素数1～40の炭化水素基であり、互いに隣接する基が環状構造を形成していてもよい。

30

【0080】

前記式(A')及び式(A'')の $R^8 \sim R^{12}$ 及び $R^{13} \sim R^{27}$ が示す炭素数1～40の炭化水素基としては、 $R^2 \sim R^7$ の具体例と同様のものが挙げられる。

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

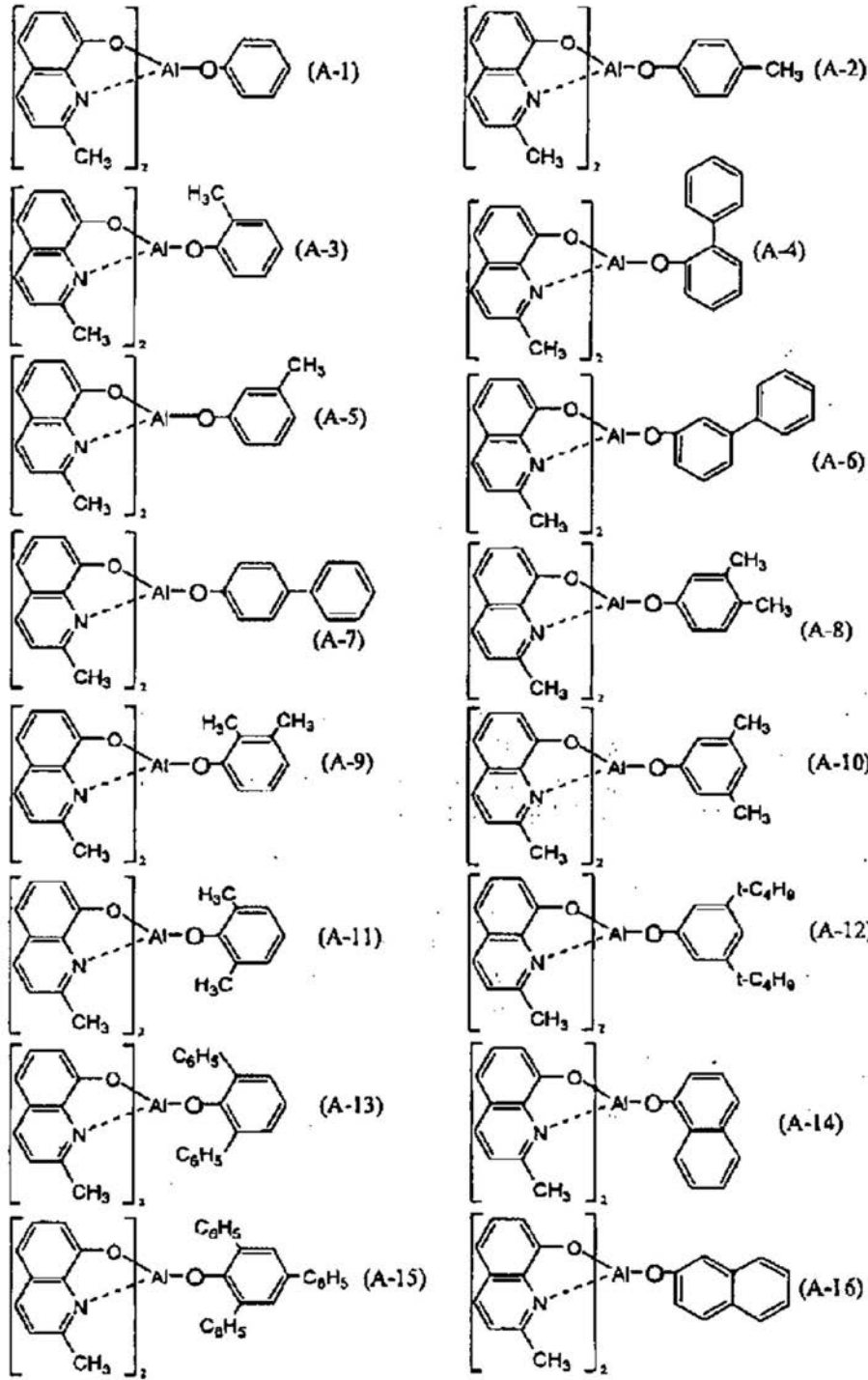
40

【0081】

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

【0082】

【化 1 4】



【 0 0 8 3 】

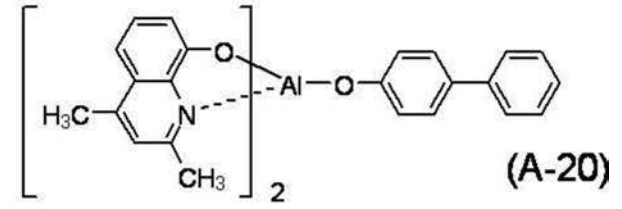
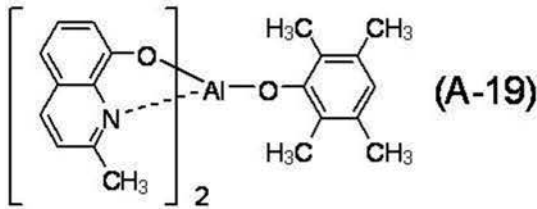
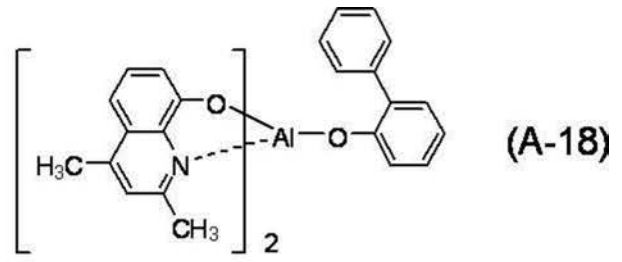
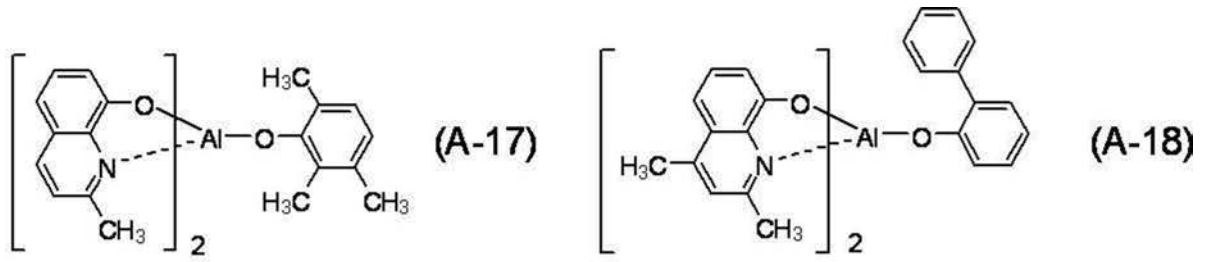
10

20

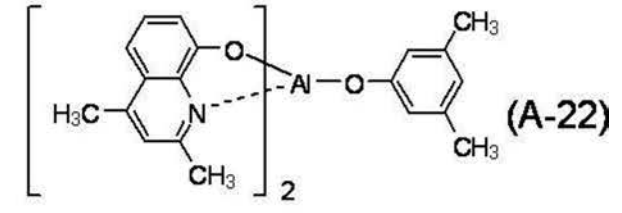
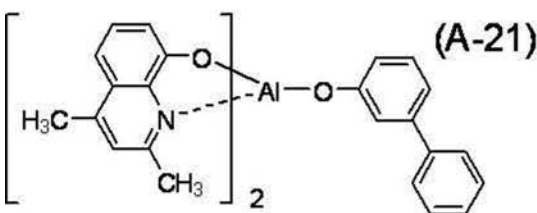
30

40

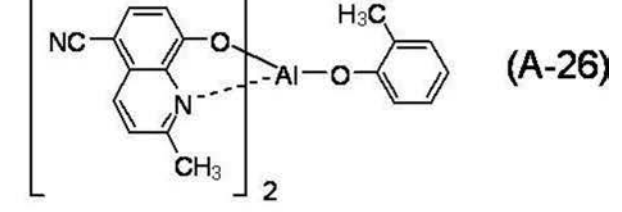
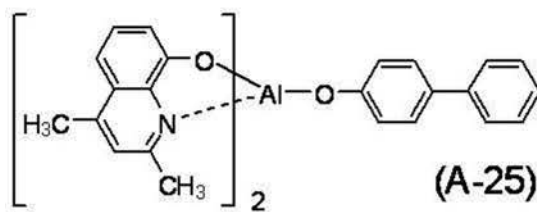
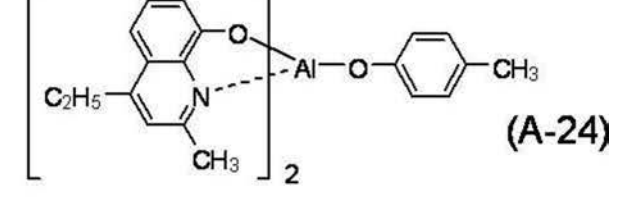
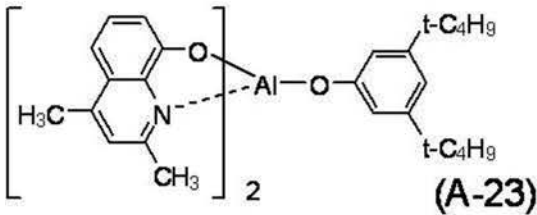
【化15】



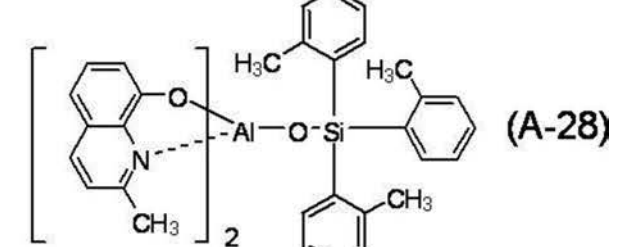
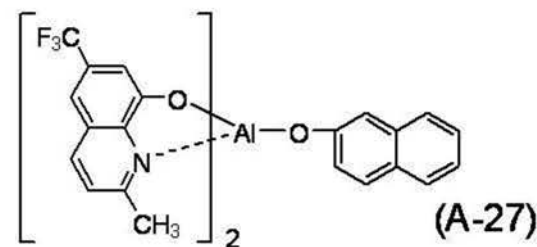
10



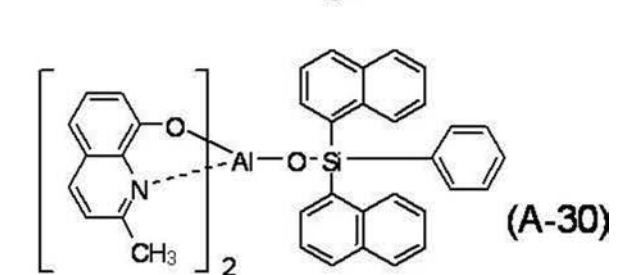
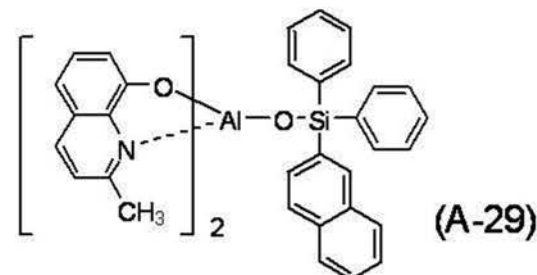
20



30

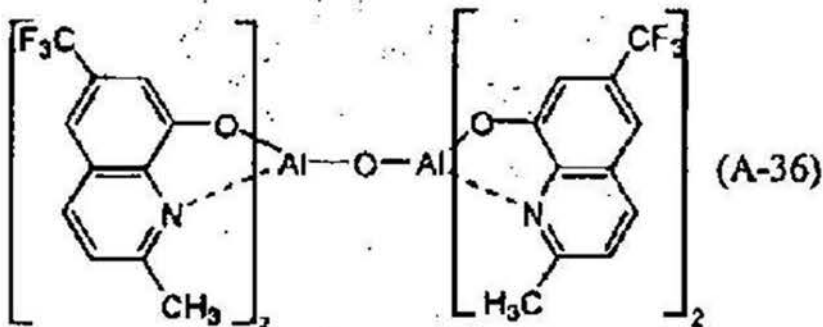
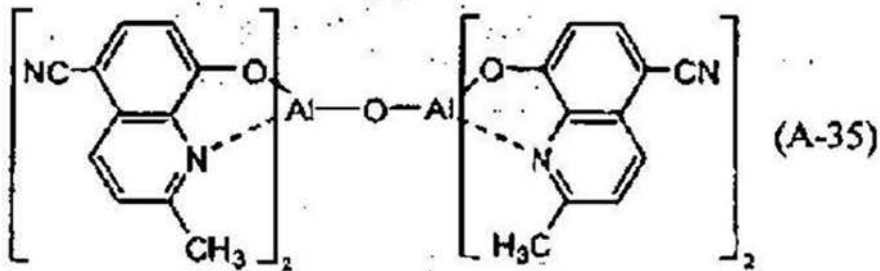
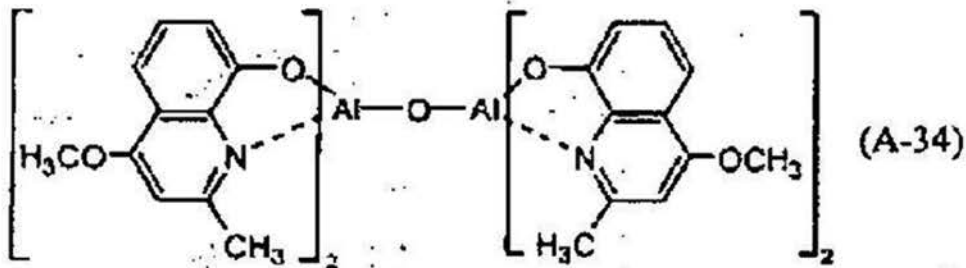
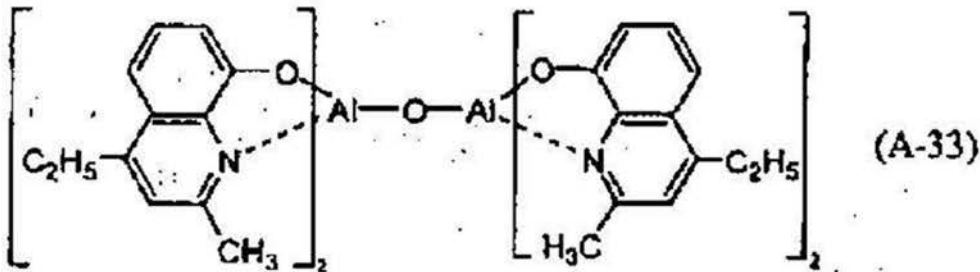
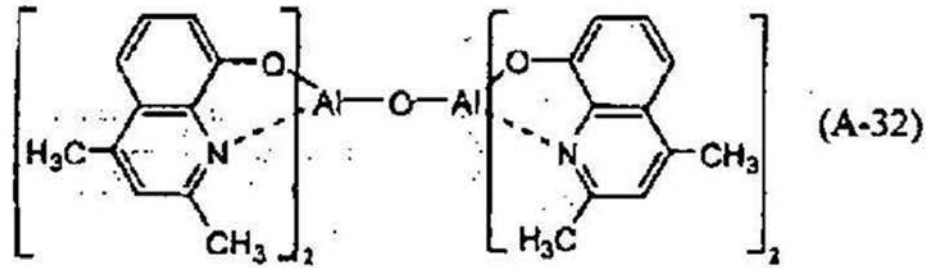
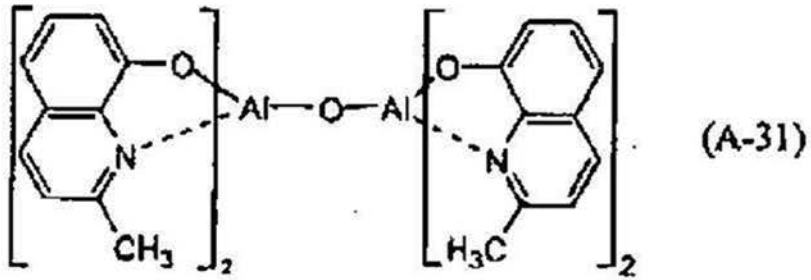


40



【0084】

【化 1 6】



【 0 0 8 5 】

10

20

30

40

50

本発明では、電子注入層や電子輸送層は、含窒素複素環誘導体を含むことが好ましい。

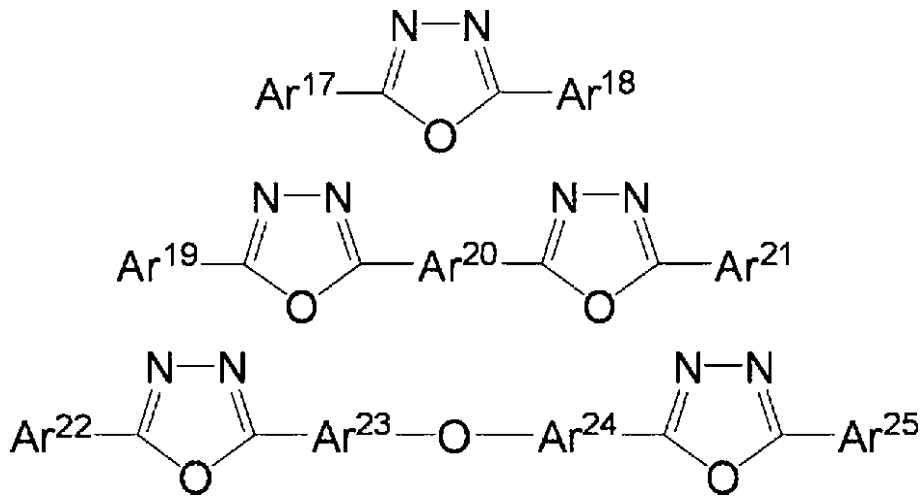
【0086】

電子注入層又は電子輸送層は、発光層への電子の注入を助ける層であって、電子移動度が大きい。電子注入層はエネルギーレベルの急な変化を緩和する等、エネルギーレベルを調整するために設ける。電子注入層又は電子輸送層に用いられる材料としては、8-ヒドロキシキノリン又はその誘導体の金属錯体、オキサジアゾール誘導体、含窒素複素環誘導体が好適である。上記8-ヒドロキシキノリン又はその誘導体の金属錯体の具体例としては、オキシシ（一般に8-キノリノール又は8-ヒドロキシキノリン）のキレートを含む金属キレートオキシノイド化合物、例えばトリス（8-キノリノール）アルミニウムを用いることができる。そして、オキサジアゾール誘導体としては、下記のを挙げるこ

10

【0087】

【化17】



20

【0088】

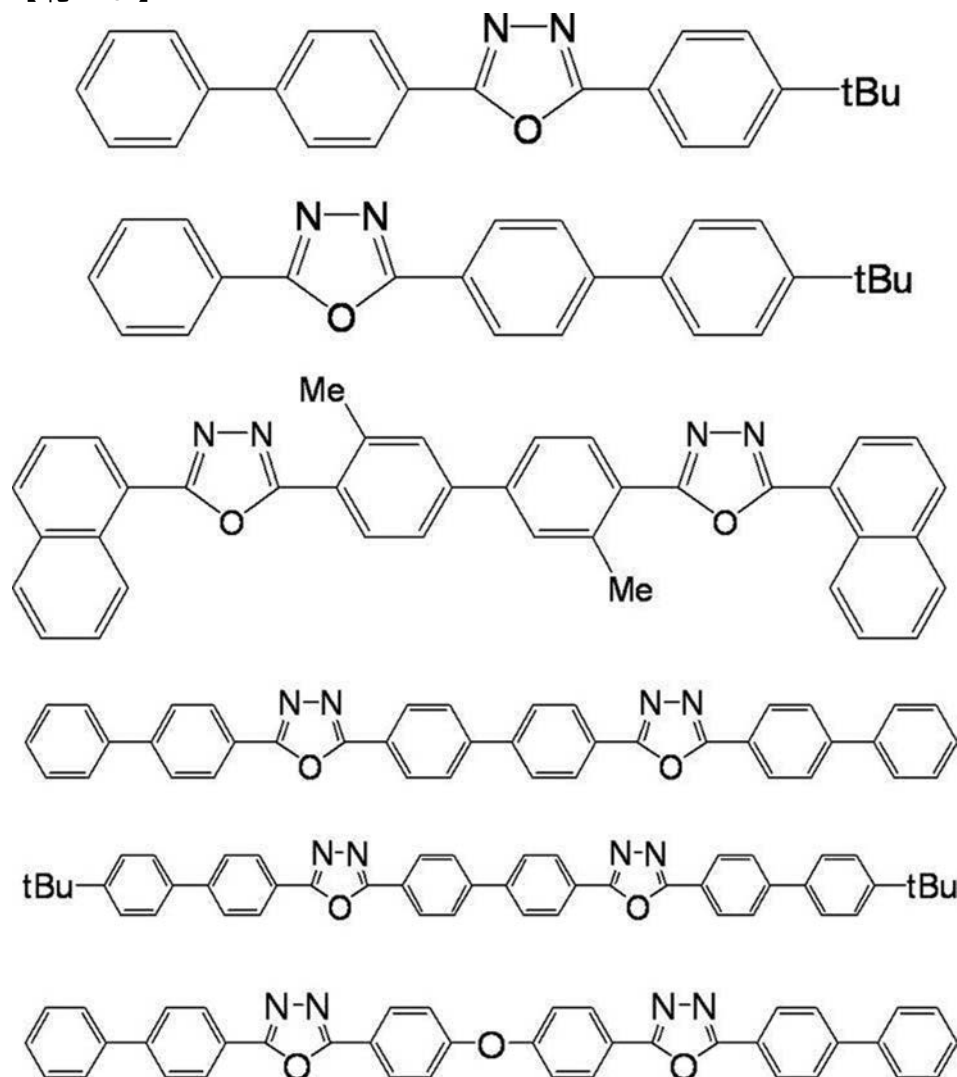
前記式中、Ar¹⁷、Ar¹⁸、Ar¹⁹、Ar²¹、Ar²²及びAr²⁵は、それぞれ置換基を有する若しくは有しないアリール基を示し、Ar¹⁷とAr¹⁸、Ar¹⁹とAr²¹、Ar²²とAr²⁵は、たがいに同一でも異なってもよい。Ar²⁰、Ar²³及びAr²⁴は、それぞれ置換基を有する若しくは有しないアリーレン基を示し、Ar²³とAr²⁴は、たがいに同一でも異なってもよい。

30

また、アリーレン基としては、フェニレン基、ナフチレン基、ピフェニレン基、アントラニレン基、ペリレニレン基、ピレニレン基などが挙げられる。そして、これらへの置換基としては炭素数1~10のアルキル基、炭素数1~10のアルコキシ基又はシアノ基等が挙げられる。この電子伝達化合物は、薄膜形成性の良好なものが好ましく用いられる。そして、これら電子伝達性化合物の具体例としては、下記のを挙げるこ

【0089】

【化18】



10

20

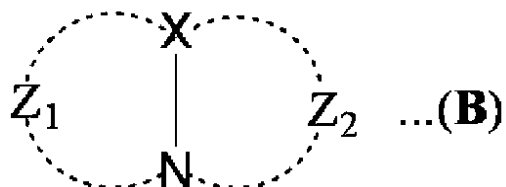
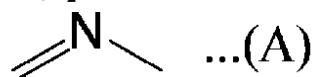
30

【0090】

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

【0091】

【化19】



40

【0092】

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

【0093】

【化20】



【0094】

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

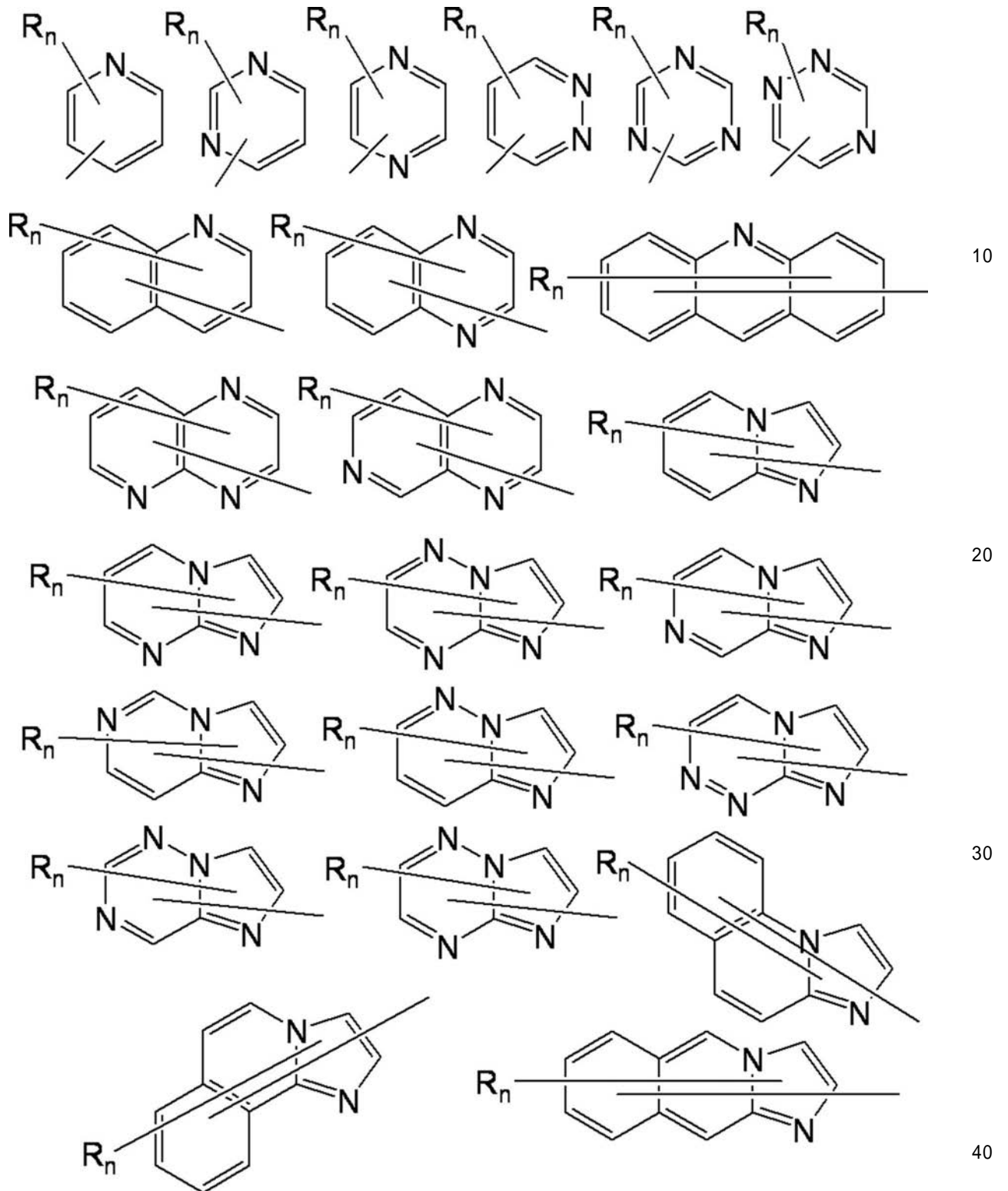
10

【0095】

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

【0096】

【化 2 1】



【0097】

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

【0098】

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

【0099】

【化22】



【0100】

前記式中、HArは、置換基を有していてもよい炭素数3～40の含窒素複素環であり、L¹は単結合、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリーレン基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリーレン基であり、Ar¹は置換基を有していてもよい炭素数6～40の2価の芳香族炭化水素基であり、Ar²は置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基である。

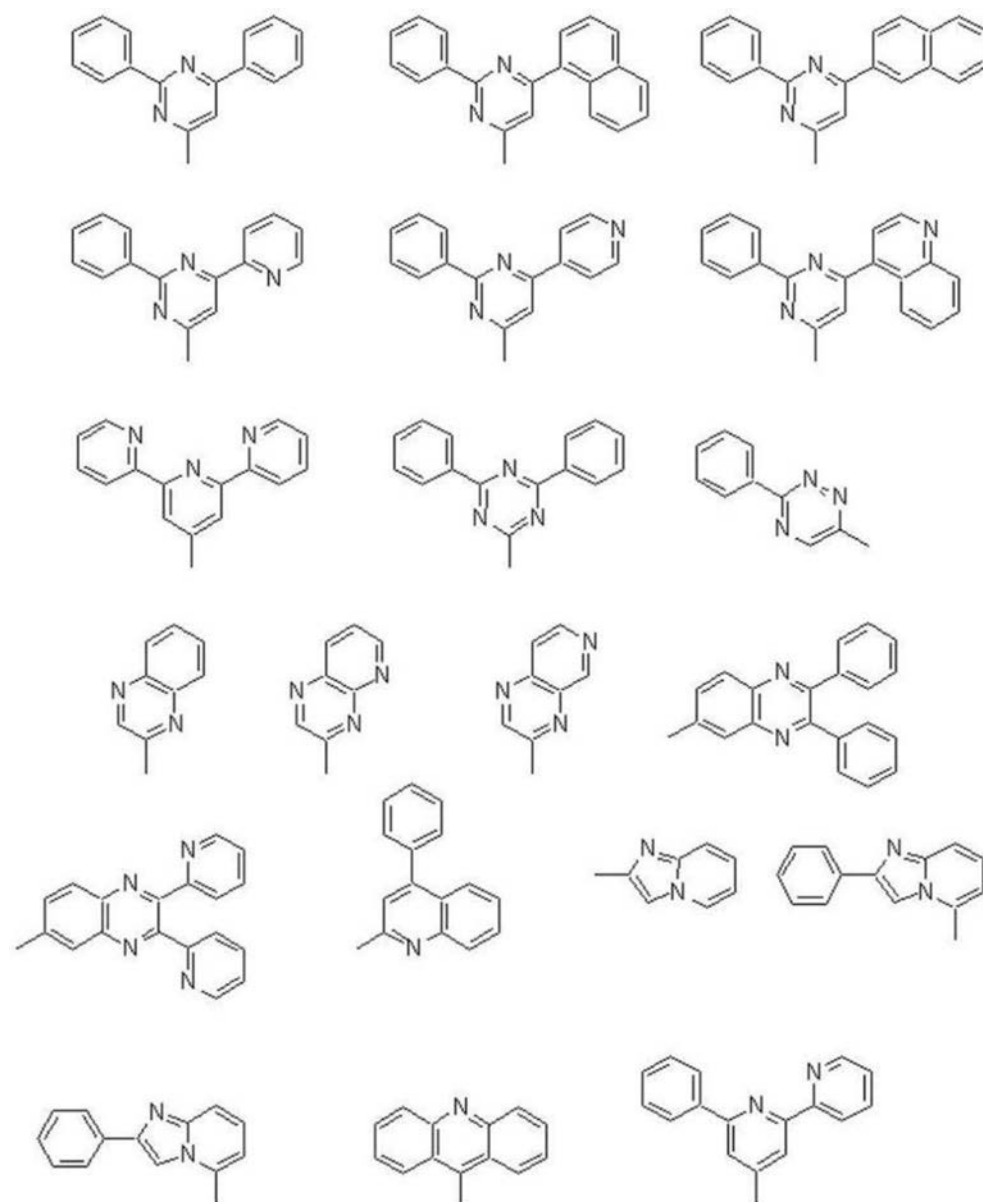
10

【0101】

HArは、例えば、下記の群から選択される。

【0102】

【化23】



20

30

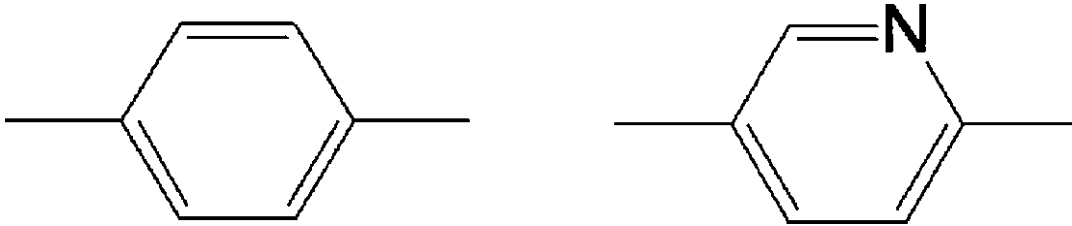
40

【0103】

L¹は、例えば、下記の群から選択される。

【0104】

【化24】

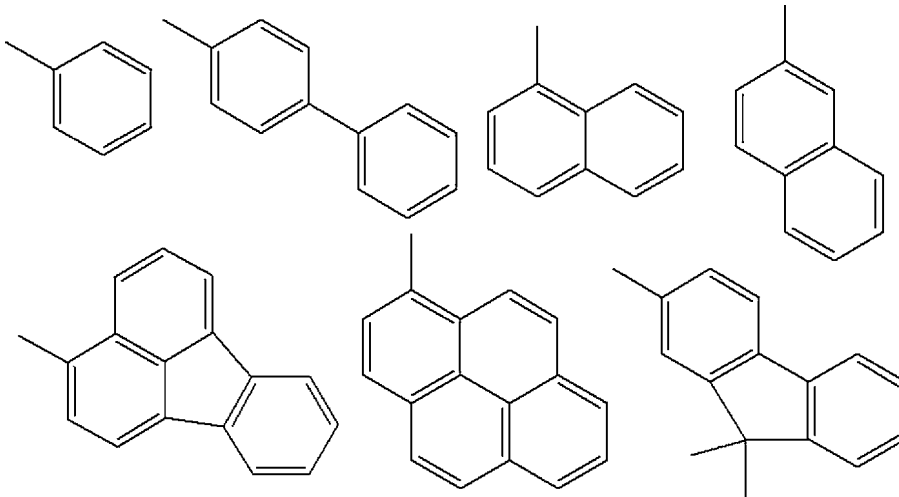


【0105】

Ar^2 は、例えば、下記の群から選択される。

【0106】

【化25】

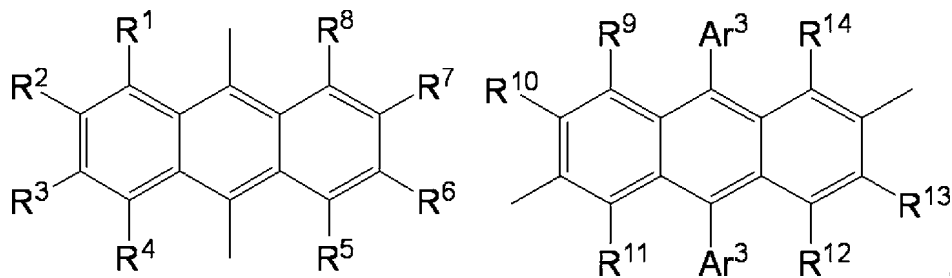


【0107】

Ar^1 は、例えば、下記のアリールアントラニル基から選択される。

【0108】

【化26】



【0109】

前記式中、 $R^1 \sim R^{14}$ は、それぞれ独立して、水素原子、ハロゲン原子、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、炭素数 6 ~ 40 のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 40 のアリール基又は炭素数 3 ~ 40 のヘテロアリール基であり、 Ar^3 は、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 40 のアリール基又は炭素数 3 ~ 40 のヘテロアリール基である。

また、上記式で表される Ar^1 において、 $R^1 \sim R^8$ は、いずれも水素原子である含窒素複素環誘導体である。

【0110】

この他、下記の化合物（特開平 9 - 3448 号公報参照）も好適に用いられる。

【0111】

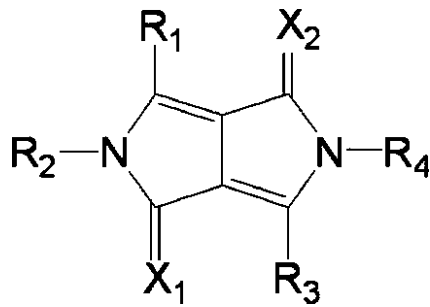
10

20

30

40

【化27】



【0112】

前記式中、R₁ ~ R₄ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは未置換の脂肪族基、置換もしくは未置換の脂肪族式環基、置換もしくは未置換の炭素環式芳香族環基、置換もしくは未置換の複素環基を表し、X₁、X₂ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子もしくはジシアノメチレン基を表す。

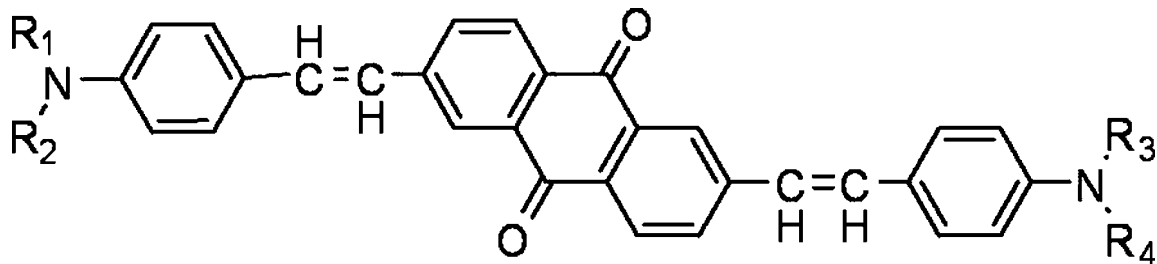
10

【0113】

また、下記の化合物（特開2000-173774号公報参照）も好適に用いられる。

【0114】

【化28】



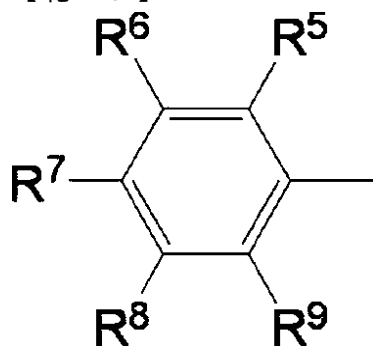
20

【0115】

前記式中、R¹、R²、R³ 及び R⁴ は互いに同一の又は異なる基であって、下記式で表わされるアリール基である。

【0116】

【化29】



30

【0117】

前記式中、R⁵、R⁶、R⁷、R⁸ 及び R⁹ は互いに同一の又は異なる基であって、水素原子、或いはそれらの少なくとも1つが飽和又は不飽和アルコキシル基、アルキル基、アミノ基又はアルキルアミノ基である。

40

【0118】

さらに、該含窒素複素環基もしくは含窒素複素環誘導体を含む高分子化合物であってもよい。

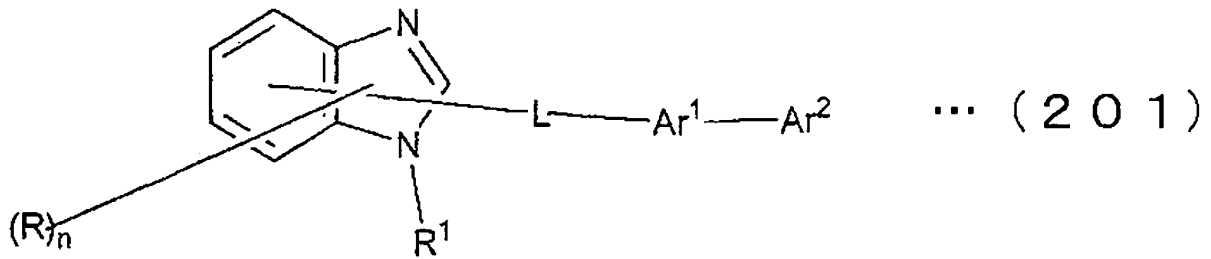
【0119】

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

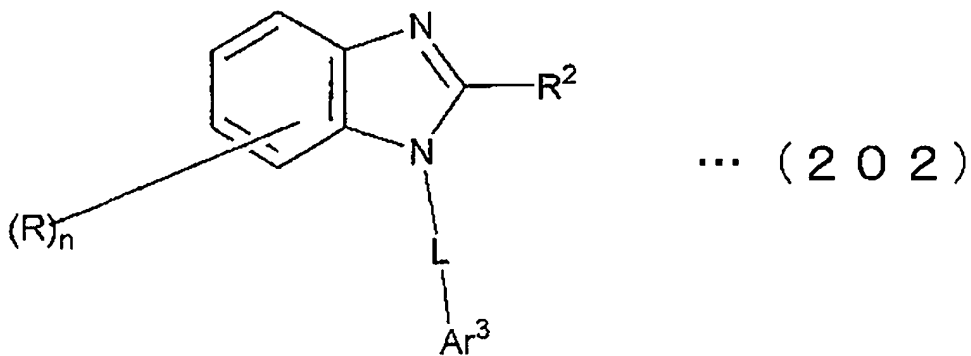
【0120】

50

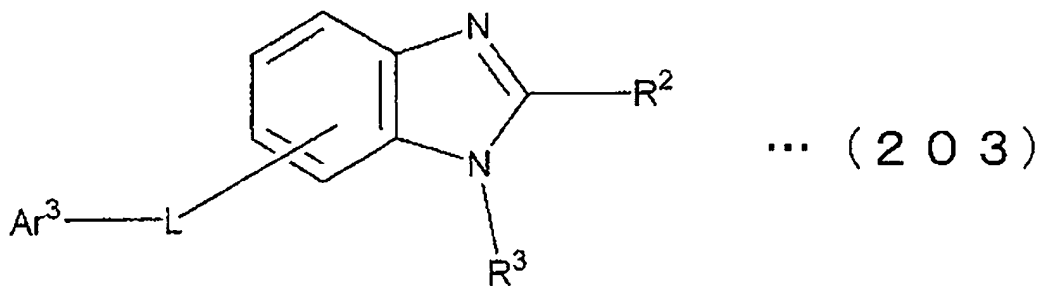
【化30】



10



20



30

【0121】

前記式(201)~(203)中、Rは、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数6~60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルコキシ基で、nは0~4の整数であり、R¹は、置換基を有していてもよい炭素数6~60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は炭素数1~20のアルコキシ基であり、R²及びR³は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数6~60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルコキシ基であり、Lは、置換基を有していてもよい炭素数6~60のアリーレン基、置換基を有していてもよいピリジニレン基、置換基を有していてもよいキノリニレン基又は置換基を有していてもよいフルオレニレン基であり、Ar¹は、置換基を有していてもよい炭素数6~60のアリーレン基、置換基を有していてもよいピリジニレン基又は置換基を有していてもよいキノリニレン基であり、Ar²は、置換基を有していてもよい炭素数6~60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリ

40

50

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

Ar^3 は、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 60 のアリアル基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、又は $-Ar^1 - Ar^2$ で表される基 (Ar^1 及び Ar^2 は、それぞれ前記と同じ) である。

【0122】

なお、前記式 (201) ~ (203) において、R は、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数 6 ~ 60 のアリアル基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基である。

【0123】

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

【0124】

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

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

【0125】

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

ハロゲン原子としては、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素等が挙げられる。

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

【0126】

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

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

10

20

30

40

50

、トリアゾール基等が挙げられる。

nは0～4の整数であり、0～2であると好ましい。

【0127】

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

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

【0128】

前記式(202)及び式(203)において、 R^2 及び R^3 は、それぞれ独立に、水素原子、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基である。

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

【0129】

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

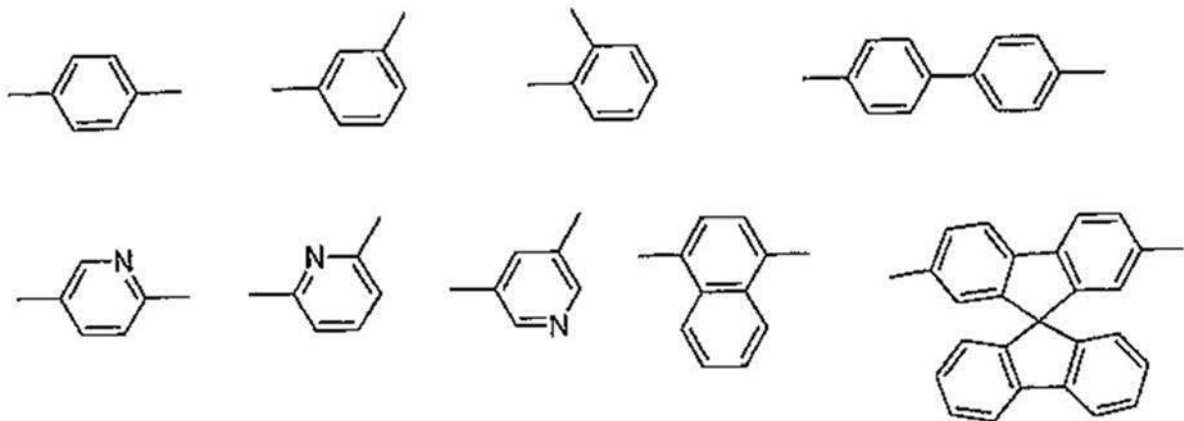
炭素数6～60のアリーレン基としては、炭素数6～40のアリーレン基が好ましく、炭素数6～20のアリーレン基がさらに好ましく、具体的には、前記Rについて説明したアリール基から水素原子1個を除去して形成される2価の基が挙げられる。Lの示す各基の置換基としては、前記Rについて説明したものと同様である。

【0130】

また、Lは、下記からなる群から選択される基であると好ましい。

【0131】

【化31】



【0132】

前記式(201)において、 Ar^1 は、置換基を有していてもよい炭素数6～60のアリーレン基、置換基を有していてもよいピリジニレン基又は置換基を有していてもよいキノリニレン基である。 Ar^1 及び Ar^3 の示す各基の置換基としては、それぞれ前記Rについて説明したものと同様である。

また、 Ar^1 は、下記式(101)～(110)で表される縮合環基から選択されるいずれかの基であると好ましい。

【0133】

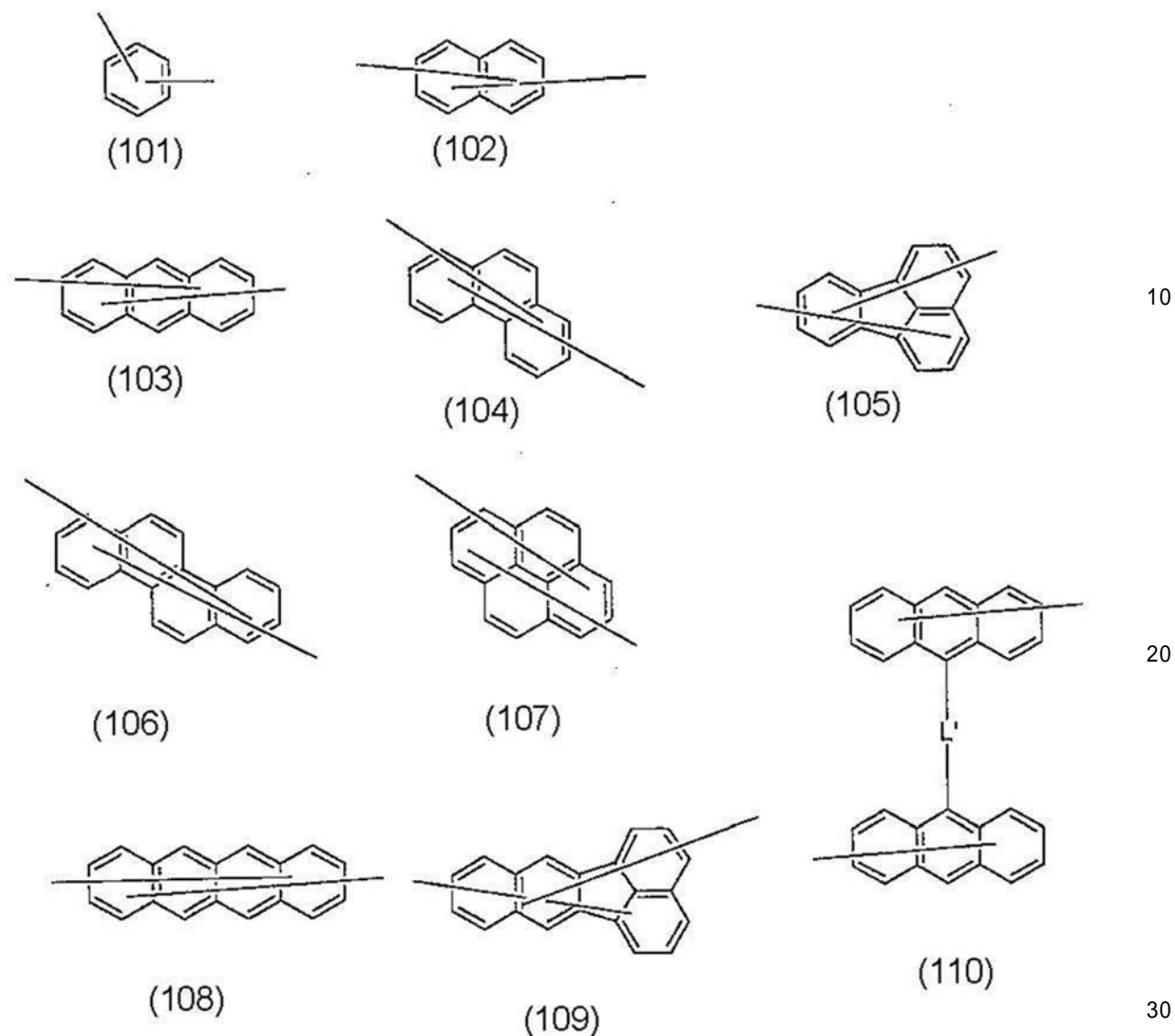
10

20

30

40

【化 3 2】



【 0 1 3 4】

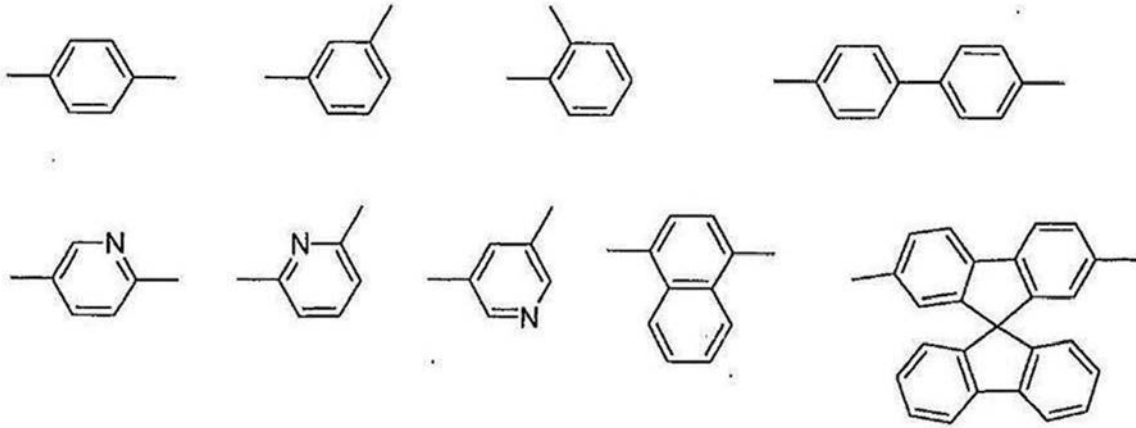
前記式(101)～(110)中、それぞれの縮合環は、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1～20のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6～40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3～40のヘテロアリール基からなる結合基が結合していてもよく、該結合基が複数ある場合は、該結合基は互いに同一でも異なってもよい。これら各基の具体例としては、前記と同様のものが挙げられる。

前記式(110)において、L'は、単結合、又は下記からなる群から選択される基である。

【 0 1 3 5】

40

【化 3 3】



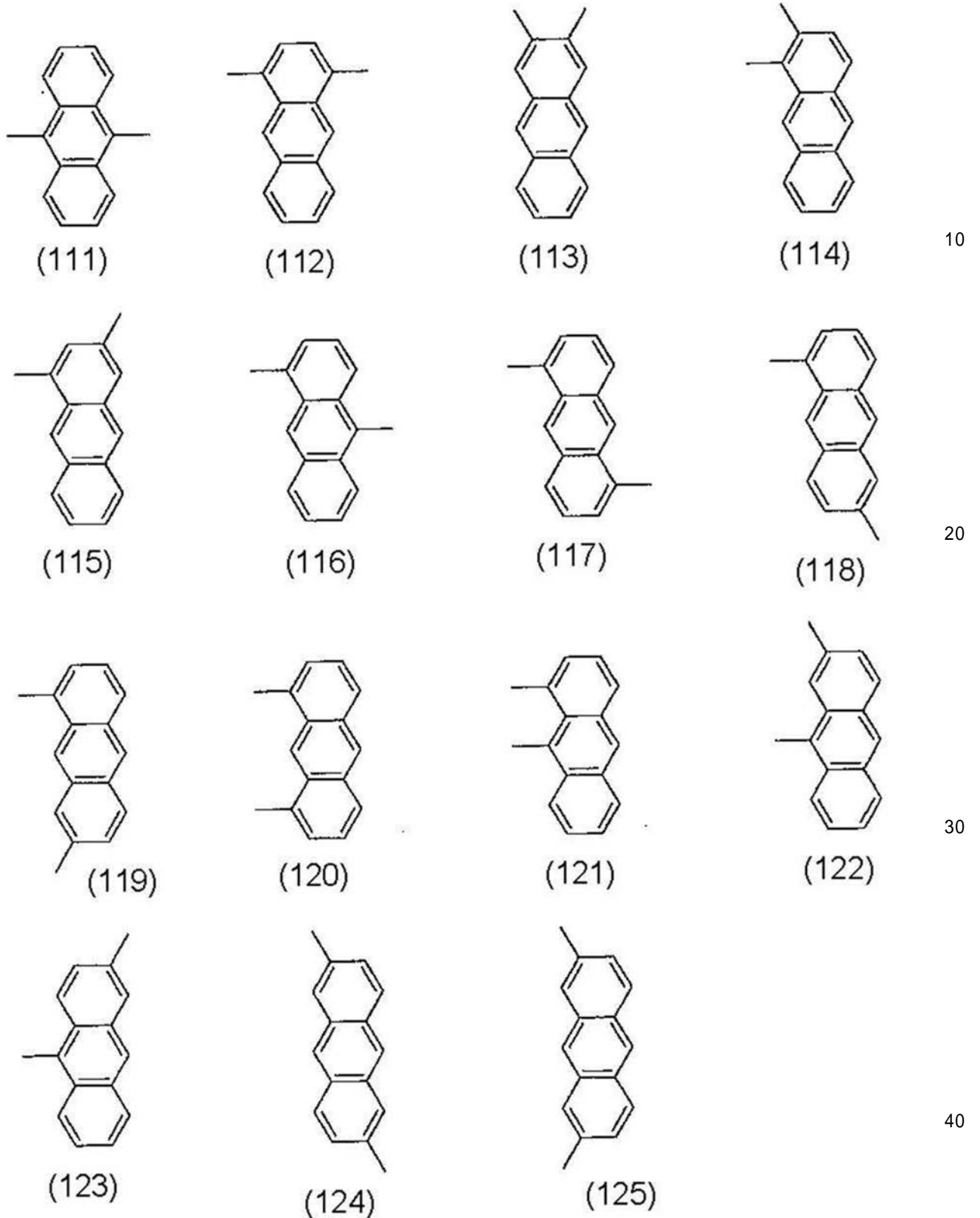
10

【0136】

Ar¹の示す前記式(103)が、下記式(111)~(125)で表される縮合環基であると好ましい。

【0137】

【化 3 4】



【 0 1 3 8 】

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

と同様のものが挙げられる。

【0139】

前記式(201)において、 Ar^2 は、置換基を有していてもよい炭素数6~60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基又は置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルコキシ基である。

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

【0140】

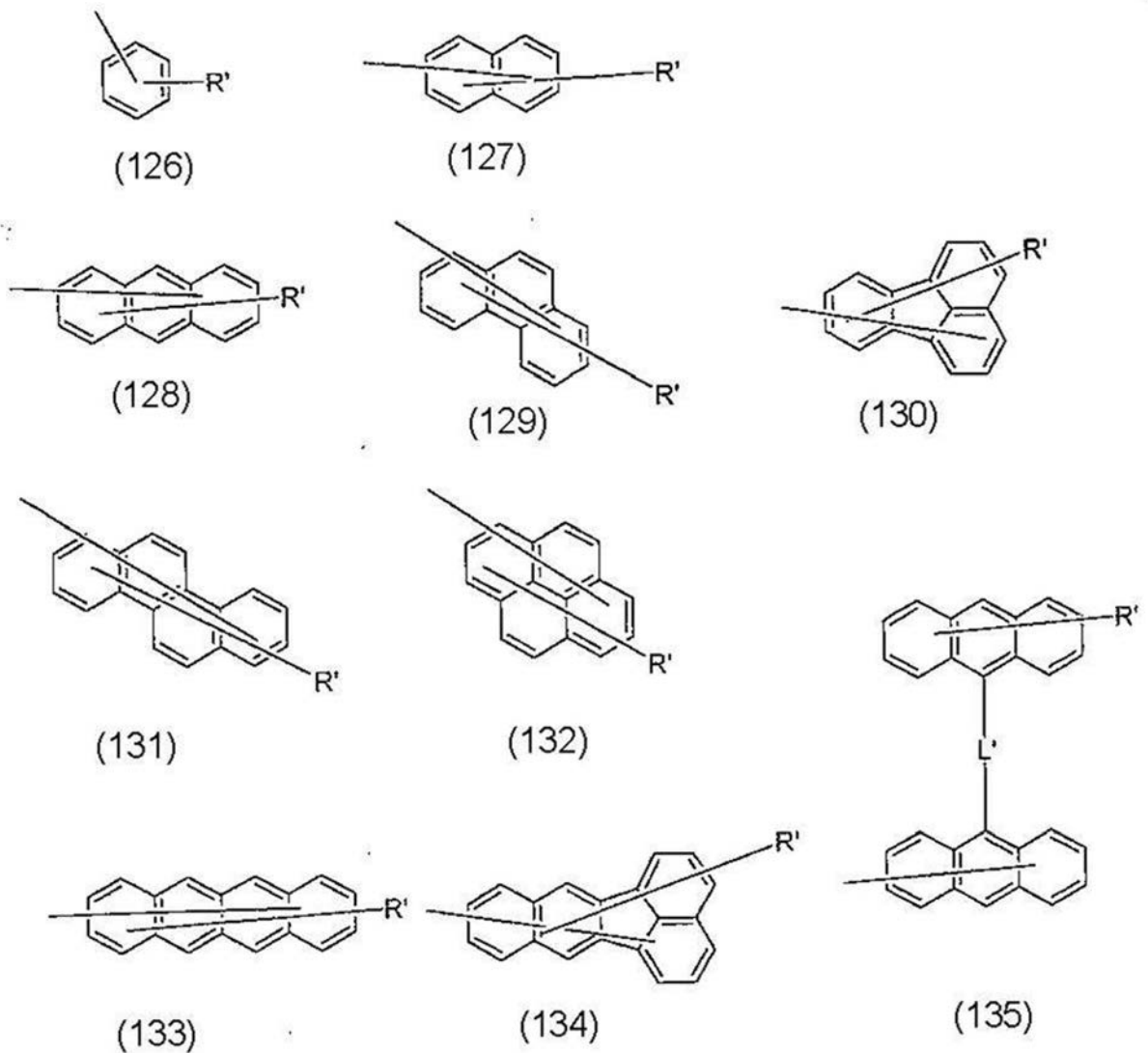
前記式(202)及び式(203)において、 Ar^3 は、置換基を有していてもよい炭素数6~60のアリール基、置換基を有していてもよいピリジル基、置換基を有していてもよいキノリル基、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルコキシ基、又は $-Ar^1-Ar^2$ で表される基(Ar^1 及び Ar^2 は、それぞれ前記と同じ)である。

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

また、 Ar^3 は、下記式(126)~(135)で表される縮合環基から選択されるいずれかの基であると好ましい。

【0141】

【化35】



【0142】

10

20

30

40

50

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

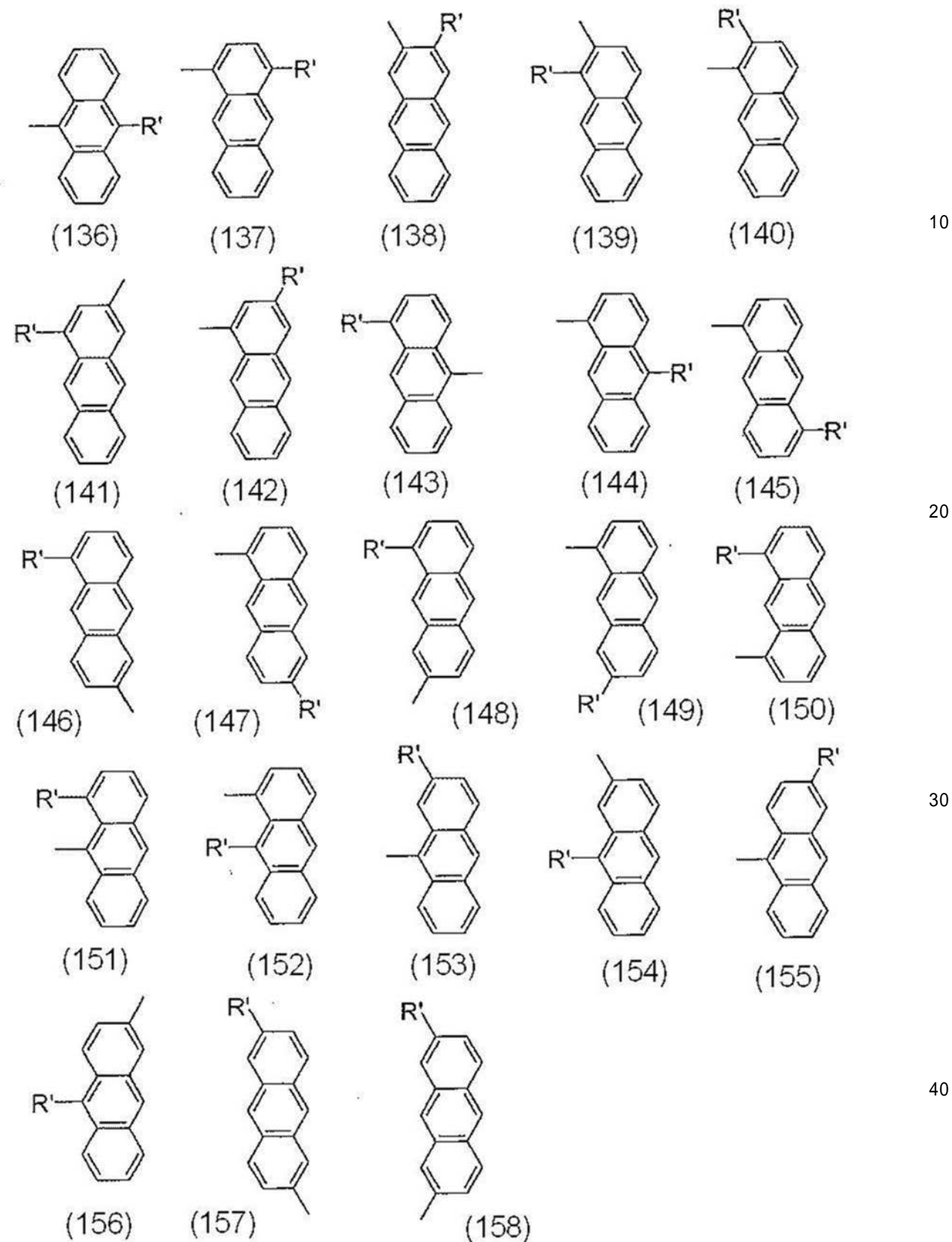
前記式(135)において、L'は、前記と同じである。

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

Ar³の示す(128)が、下記式(136)~(158)で表される縮合環基であると好ましい。

【0143】

【化 3 6】



【 0 1 4 4】

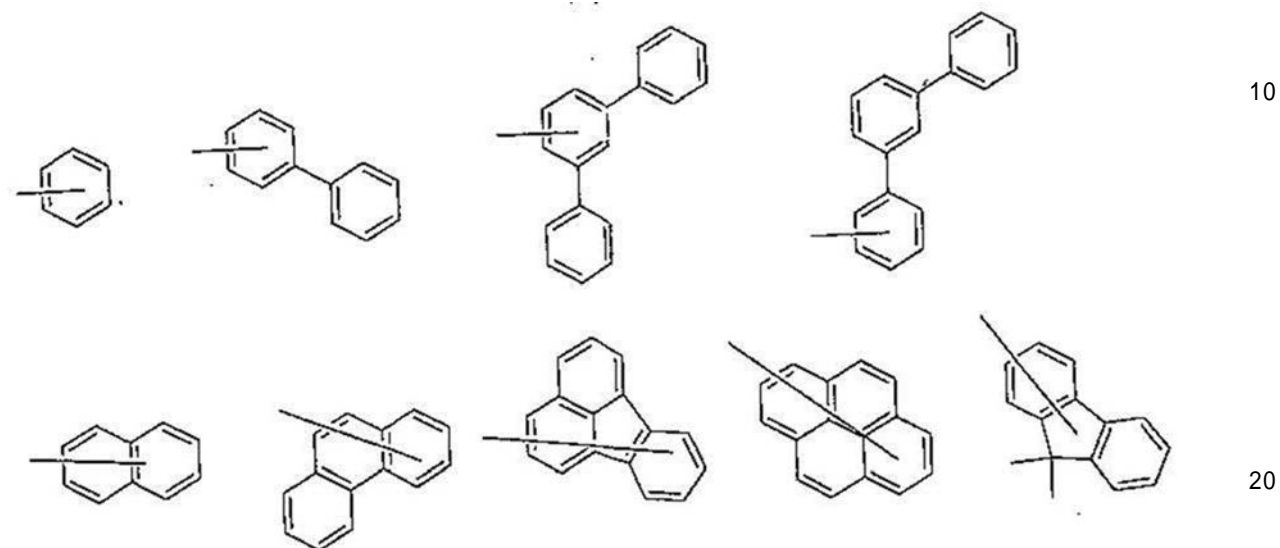
前記式(136)~(158)中、それぞれの縮合環は、ハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルキル基、置換基を有していてもよい炭素数1~20のアルコキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6~40のアリールオキシ基、置換基を有していてもよい炭素数6~40のアリール基又は置換基を有していてもよい炭素数3~

40のヘテロアリール基からなる結合基が結合していてもよく、該結合基が複数ある場合は、該結合基は互いに同一でも異なってもよい。これら各基の具体例としては、前記と同様のものが挙げられる。R'は、前記と同じである。

また、Ar²及びAr³は、それぞれ独立に、下記からなる群から選択される基であると好ましい。

【0145】

【化37】



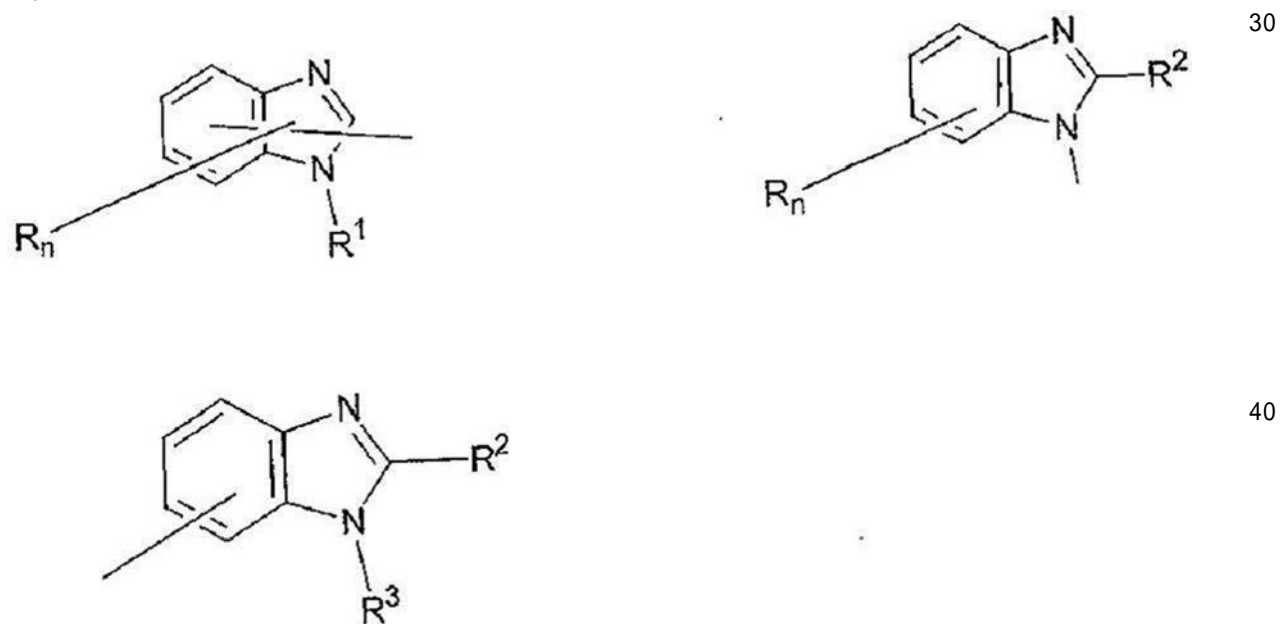
【0146】

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

なお、下記表において、HArは、前記式(201)~(203)における、下記構造を示す。

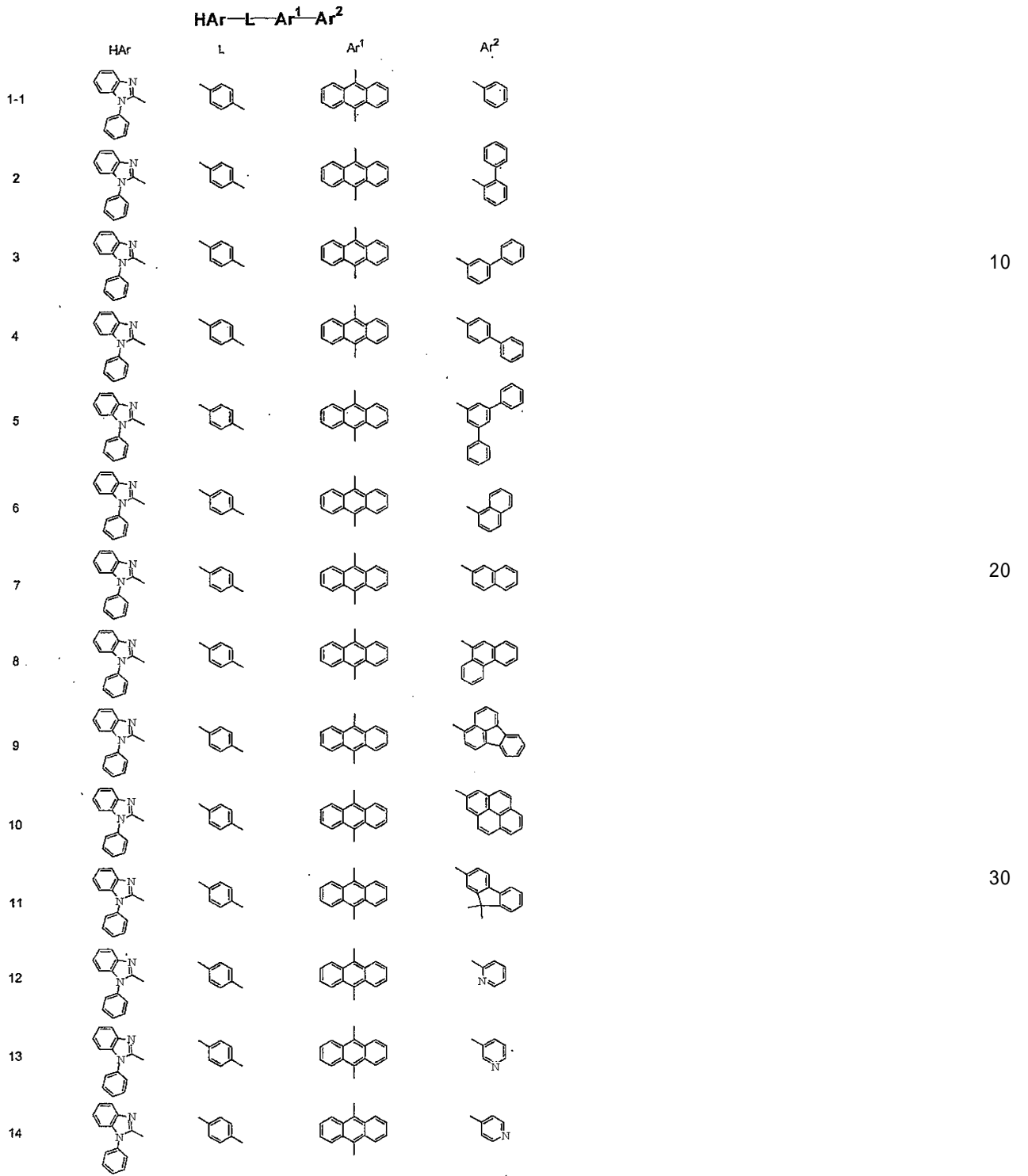
【0147】

【化38】



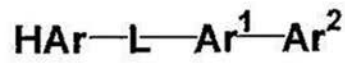
【0148】

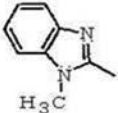
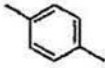
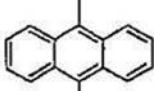
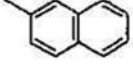
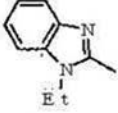
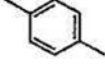
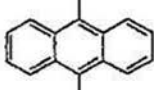
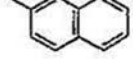
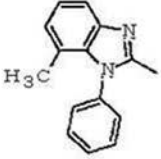
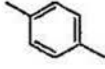
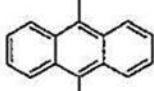
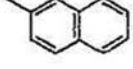
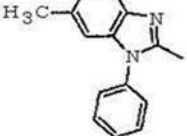
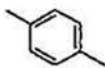
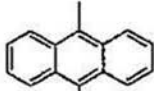
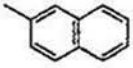
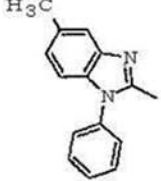
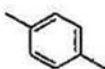
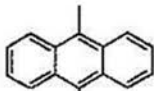
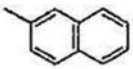
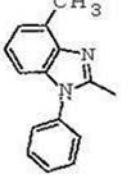
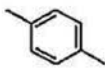
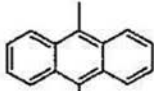
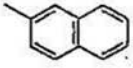
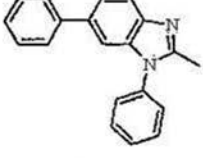
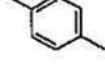
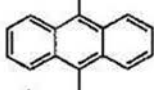
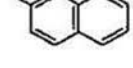
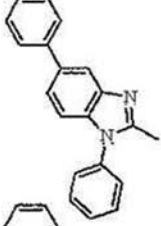
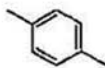
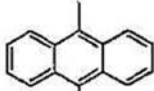
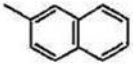
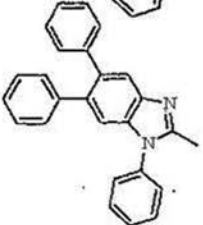
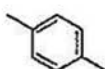
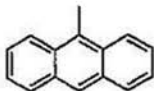
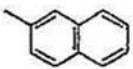
【化 3 9】



【 0 1 4 9 】

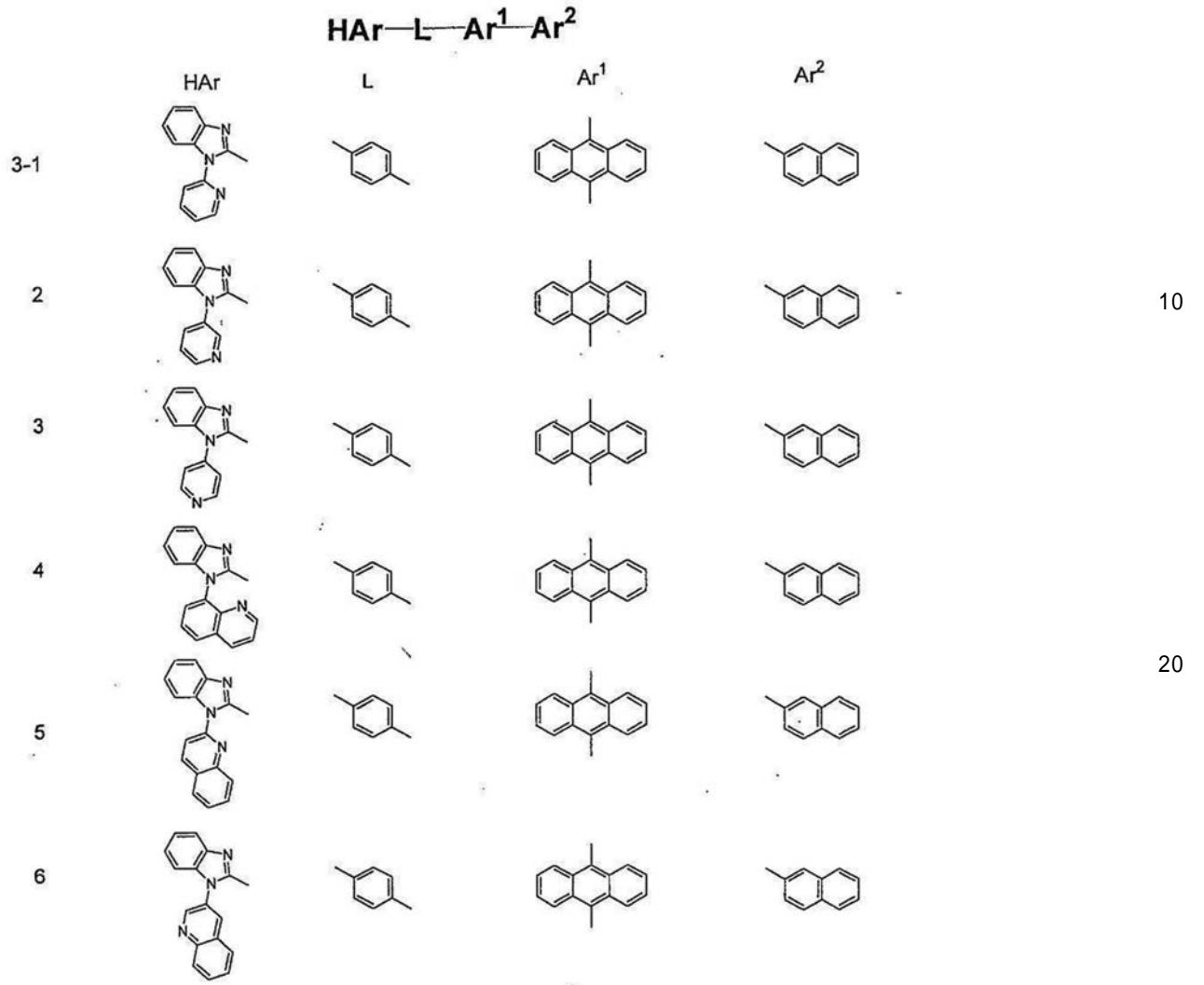
【化40】



	HAr	L	Ar ¹	Ar ²	
2-1					
2					10
3					
4					20
5					
6					30
7					
8					40
9					

【0150】

【化 4 1】



【 0 1 5 1 】

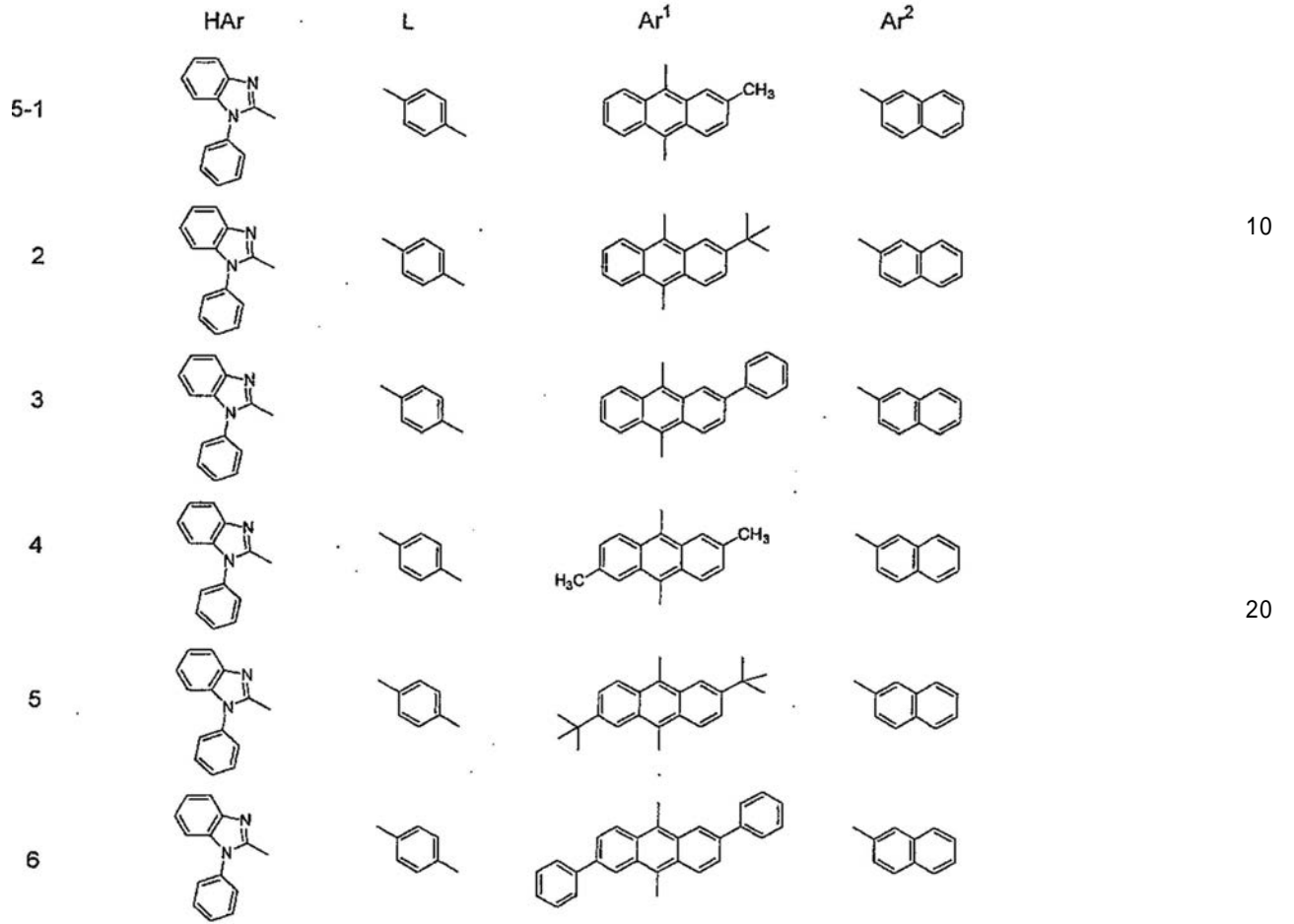
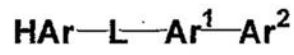
30

【化42】



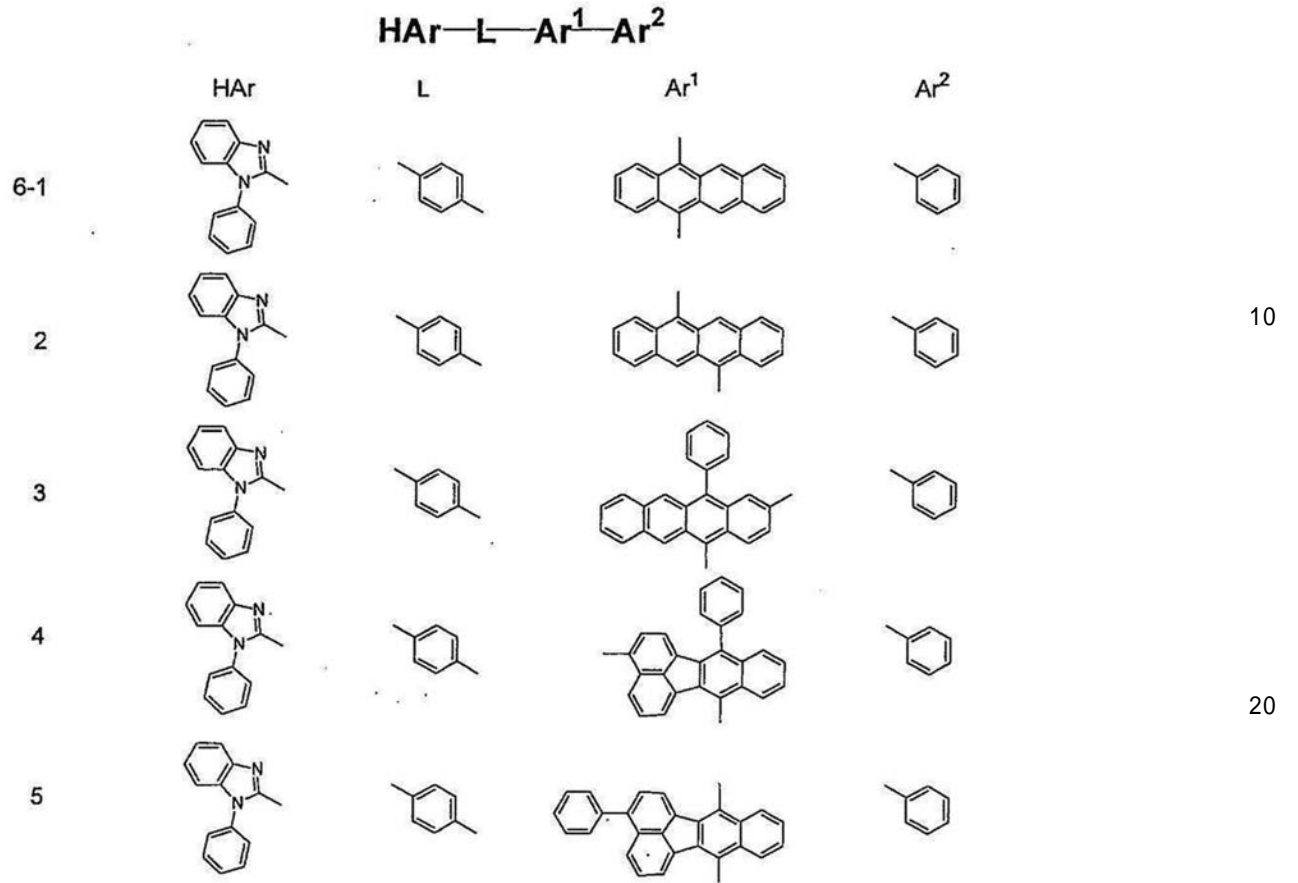
【0152】

【化 4 3】



【 0 1 5 3 】

【化 4 4】



【 0 1 5 4】

【化 4 5】



【 0 1 5 5 】

50

【化 4 6】



【 0 1 5 6 】

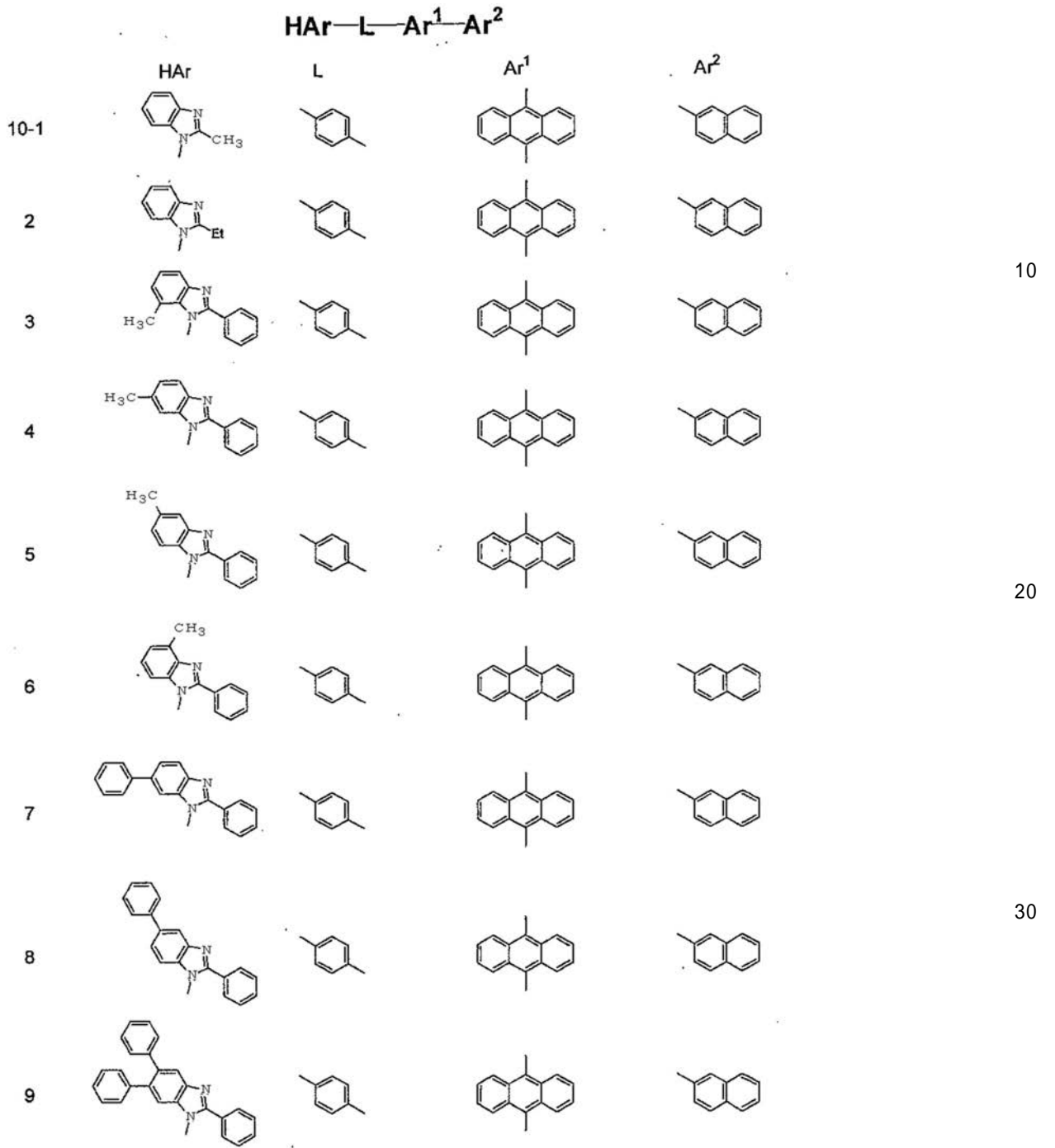
【化 4 7】



【 0 1 5 7 】

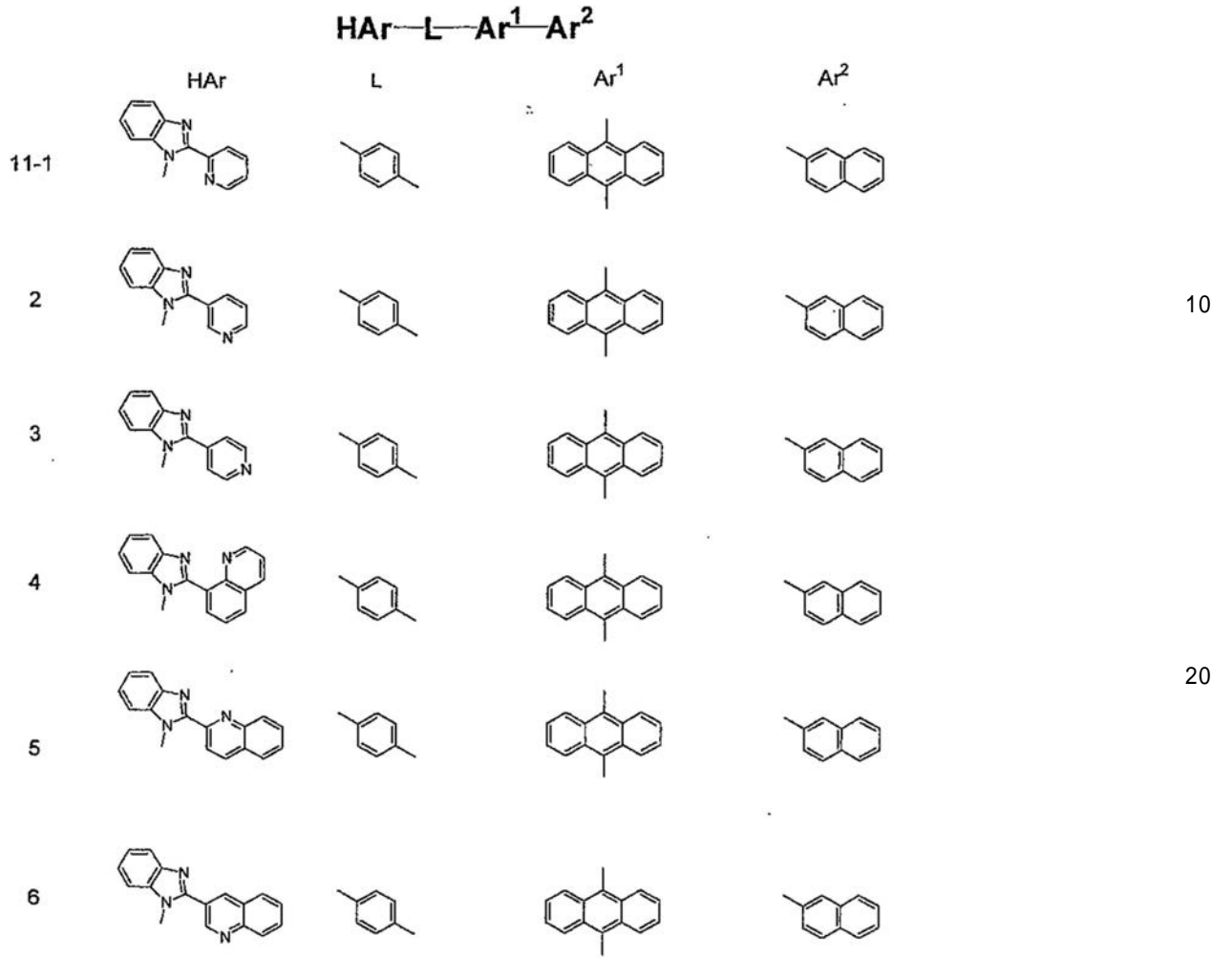
50

【化 4 8】



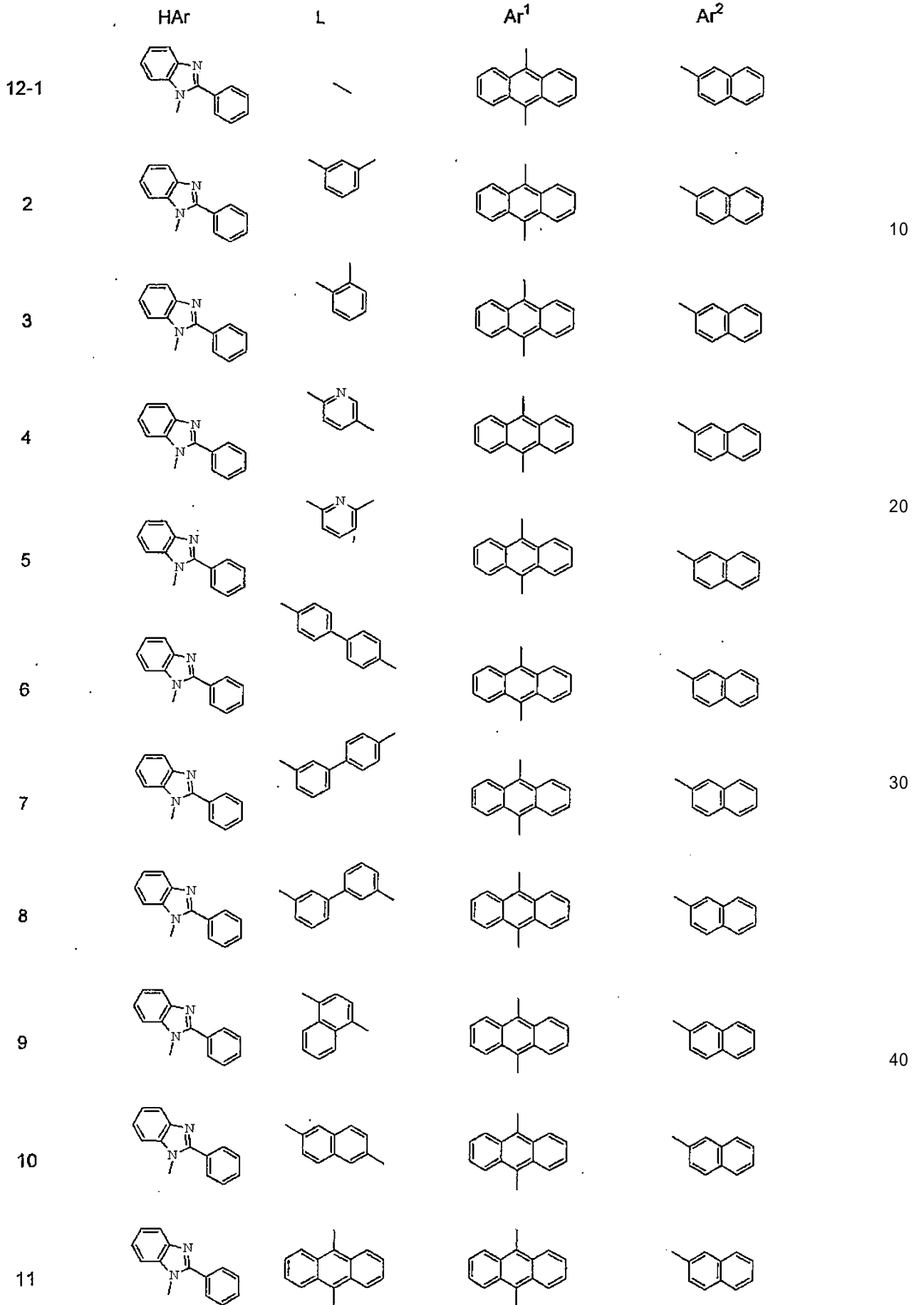
【 0 1 5 8 】

【化 4 9】



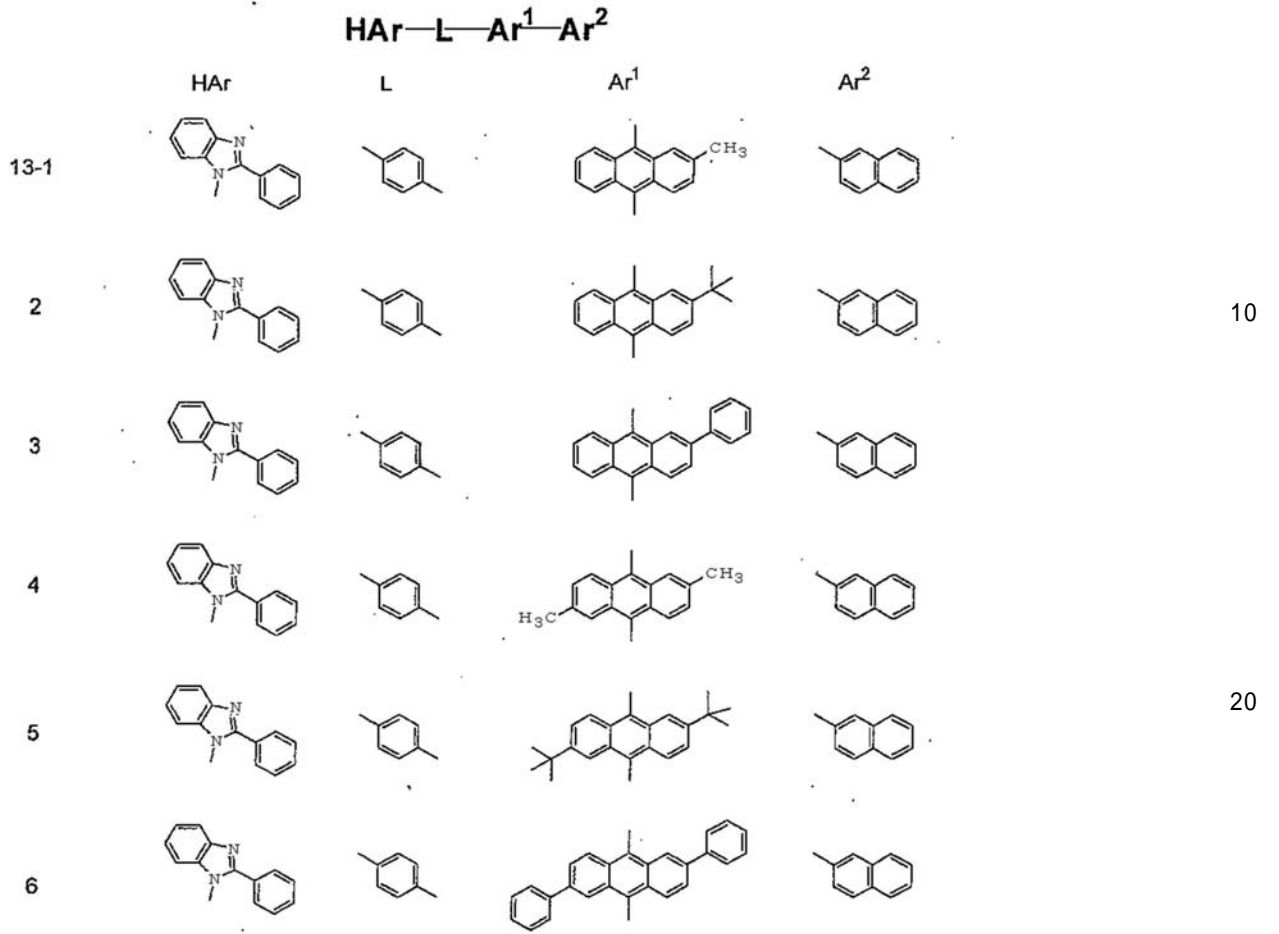
【 0 1 5 9 】

【化 5 0】



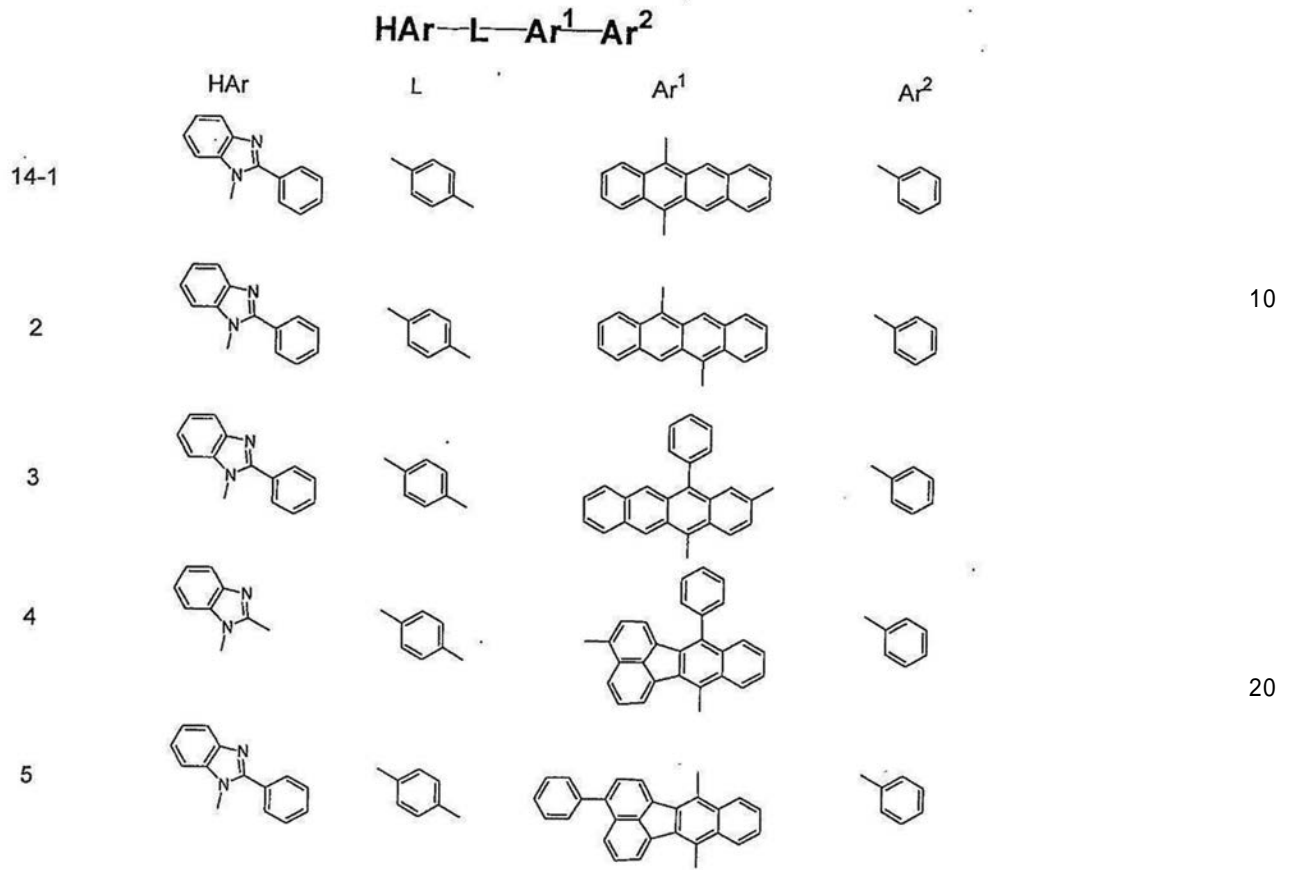
【 0 1 6 0】

【化 5 1】



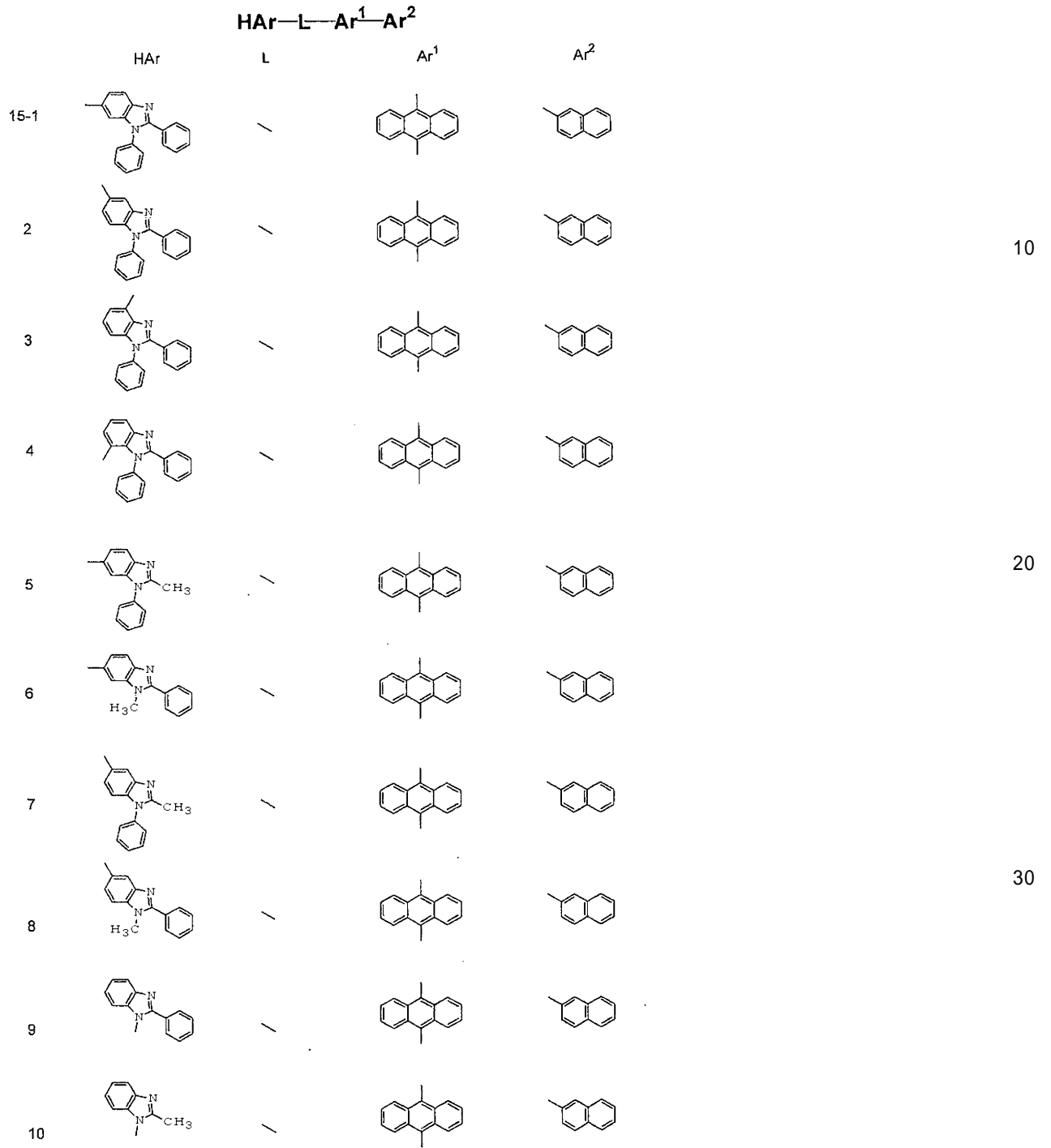
【 0 1 6 1】

【化52】



【0162】

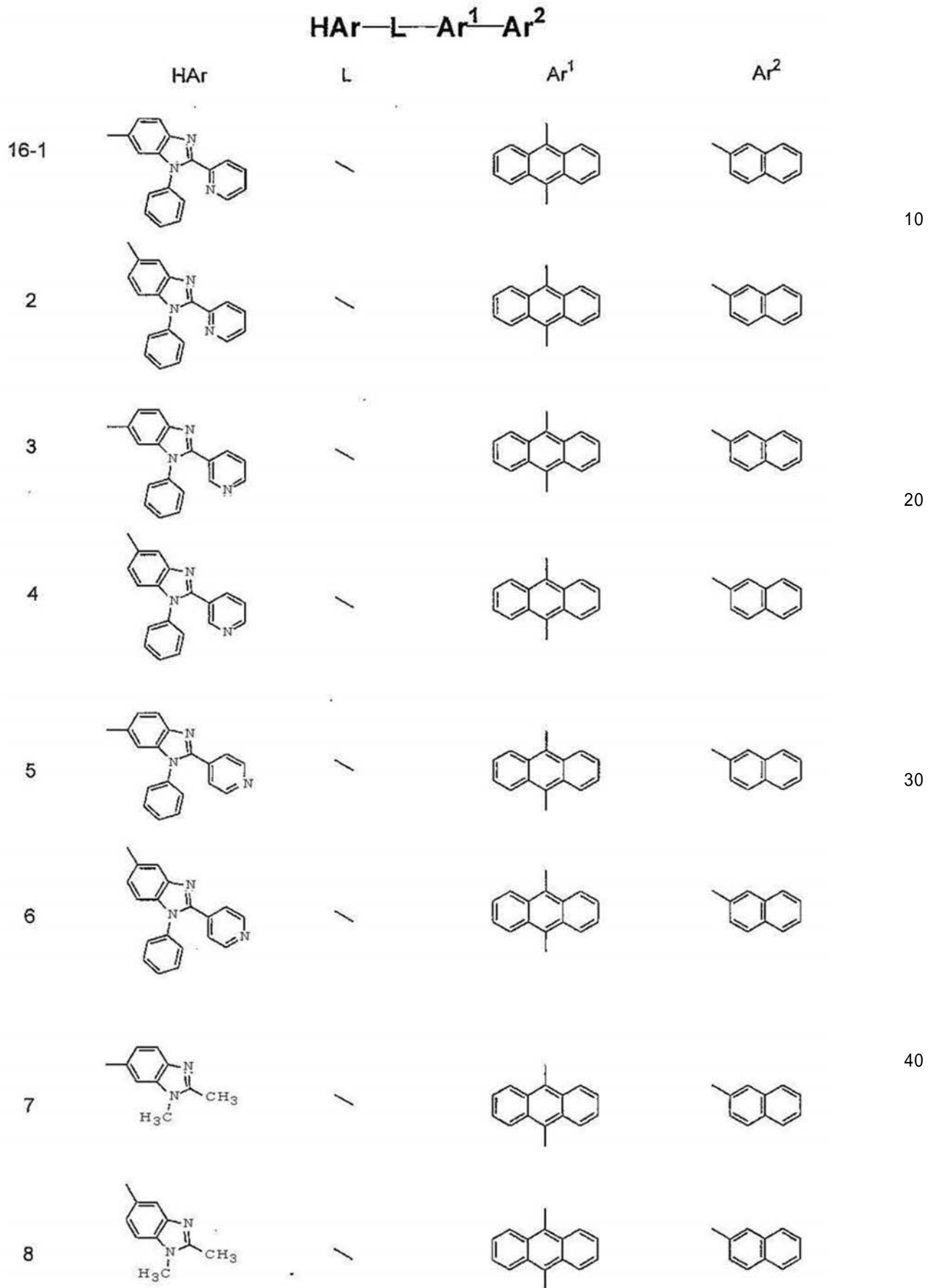
【化53】



【0163】

40

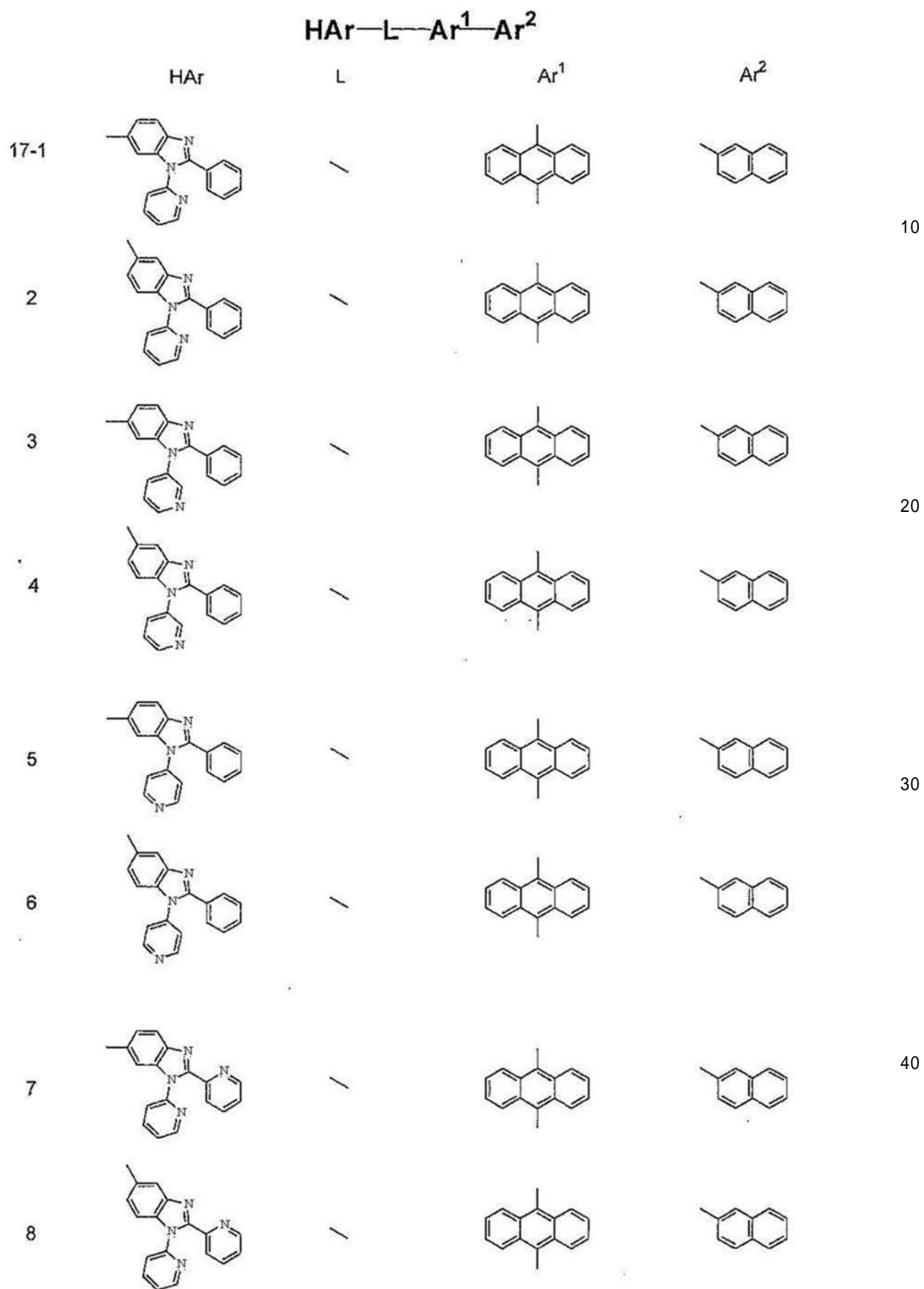
【化54】



【0164】

50

【化 5 5】



【 0 1 6 5 】

50

以上の具体例のうち、特に、(1-1)、(1-5)、(1-7)、(2-1)、(3-1)、(4-2)、(4-6)、(7-2)、(7-7)、(7-8)、(7-9)、(9-1)、(9-7)が好ましい。

【0166】

なお、電子注入層又は電子輸送層の膜厚は、特に限定されないが、好ましくは、1~100nmである。

【0167】

また、電子注入層の構成成分として、含窒素環誘導体の他に無機化合物として、絶縁体又は半導体を使用することが好ましい。電子注入層が絶縁体や半導体で構成されていれば、電流のリークを有効に防止して、電子注入性を向上させることができる。

このような絶縁体としては、アルカリ金属カルコゲニド、アルカリ土類金属カルコゲニド、アルカリ金属のハロゲン化物及びアルカリ土類金属のハロゲン化物からなる群から選択される少なくとも一つの金属化合物を使用するのが好ましい。電子注入層がこれらのアルカリ金属カルコゲニド等で構成されていれば、電子注入性をさらに向上させることができる点で好ましい。具体的に、好ましいアルカリ金属カルコゲニドとしては、例えば、 Li_2O 、 K_2O 、 Na_2S 、 Na_2Se 及び Na_2O が挙げられ、好ましいアルカリ土類金属カルコゲニドとしては、例えば、 CaO 、 BaO 、 SrO 、 BeO 、 BaS 及び $CaSe$ が挙げられる。また、好ましいアルカリ金属のハロゲン化物としては、例えば、 LiF 、 NaF 、 KF 、 $LiCl$ 、 KCl 及び $NaCl$ 等が挙げられる。また、好ましいアルカリ土類金属のハロゲン化物としては、例えば、 CaF_2 、 BaF_2 、 SrF_2 、 MgF_2 及び BeF_2 等のフッ化物や、フッ化物以外のハロゲン化物が挙げられる。

また、半導体としては、 Ba 、 Ca 、 Sr 、 Yb 、 Al 、 Ga 、 In 、 Li 、 Na 、 Cd 、 Mg 、 Si 、 Ta 、 Sb 及び Zn の少なくとも一つの元素を含む酸化物、窒化物又は酸化窒化物等の一種単独又は二種以上の組み合わせが挙げられる。また、電子注入層を構成する無機化合物が、微結晶又は非晶質の絶縁性薄膜であることが好ましい。電子注入層がこれらの絶縁性薄膜で構成されていれば、より均質な薄膜が形成されるために、ダークスポット等の画素欠陥を減少させることができる。なお、このような無機化合物としては、アルカリ金属カルコゲニド、アルカリ土類金属カルコゲニド、アルカリ金属のハロゲン化物及びアルカリ土類金属のハロゲン化物等が挙げられる。

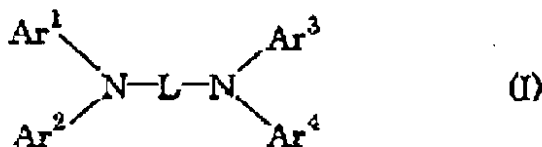
このような絶縁体又は半導体を使用する場合、その層の好ましい厚みは、0.1nm~15nm程度である。また、本発明における電子注入層は、前述の還元性ドーパントを含有していても好ましい。

【0168】

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

【0169】

【化56】



【0170】

前記(I)において、 Ar^1 ~ Ar^4 は置換もしくは無置換の核炭素数6~50のアリール基又は置換もしくは無置換の核原子数5~50のヘテロアリール基を表す。

【0171】

置換もしくは無置換の核炭素数6~50のアリール基としては、例えば、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、1-アントリル基、2-アントリル基、9-アントリル基、1-フェナントリル基、2-フェナントリル基、3-フェナントリル基、4-フェ

10

20

30

40

50

ナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナフタセニル基、2 - ナフタセニル基、9 - ナフタセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニルイル基、4'' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基、フルオランテニル基、フルオレニル基などが挙げられる。

【0172】

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

10

20

30

40

50

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

10

20

【0173】

Lは連結基である。具体的には置換もしくは無置換の核炭素数6~50のアリーレン基、置換もしくは無置換の核原子数5~50のヘテロアリーレン基、又は、2個以上のアリーレン基もしくはヘテロアリーレン基を単結合、エーテル結合、チオエーテル結合、炭素数1~20のアルキレン基、炭素数2~20のアルケニレン基、アミノ基で結合して得られる2価の基である。核炭素数6~50のアリーレン基としては、例えば、1, 4 - フェニレン基、1, 2 - フェニレン基、1, 3 - フェニレン基、1, 4 - ナフチレン基、2, 6 - ナフチレン基、1, 5 - ナフチレン基、9, 10 - アントラニレン基、9, 10 - フェナントレニレン基、3, 6 - フェナントレニレン基、1, 6 - ピレニレン基、2, 7 - ピレニレン基、6, 12 - クリセニレン基、4, 4' - ビフェニレン基、3, 3' - ビフェニレン基、2, 2' - ビフェニレン基、2, 7 - フルオレニレン基等が挙げられる。核原子数5~50のアリーレン基としては、例えば、2, 5 - チオフェニレン基、2, 5 - シローリレン基、2, 5 - オキサジアゾーリレン基等が挙げられる。好ましくは1, 4 - フェニレン基、1, 2 - フェニレン基、1, 3 - フェニレン基、1, 4 - ナフチレン基、9, 10 - アントラニレン基、6, 12 - クリセニレン基、4, 4' - ビフェニレン基、3, 3' - ビフェニレン基、2, 2' - ビフェニレン基、2, 7 - フルオレニレン基である。

30

【0174】

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

40

【0175】

$Ar^1 \sim Ar^4$ およびLの置換基としては、置換もしくは無置換の核炭素数6~50のアリール基、置換もしくは無置換の核原子数5~50のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数3~50のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~50のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数7~50のアラルキル基、置換もしくは無置換の核炭素数6~50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の核原子数5~50のヘテロアリールオキシ基、置換もしくは

50

無置換の核炭素数 6 ~ 50 のアリールチオ基、置換もしくは無置換の核原子数 5 ~ 50 のヘテロアリールチオ基、置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルコキシカルボニル基、置換もしくは無置換の核炭素数 6 ~ 50 のアリール基又は置換もしくは無置換の核原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基で置換されたアミノ基、ハロゲン基、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基等である。

【0176】

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

10

【0177】

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

20

30

40

50

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

【0178】

置換又は無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、s - ブチル基、イソブチル基、t - ブチル基、n - ペンチル基、n - ヘキシル基、n - ヘプチル基、n - オクチル基、ヒドロキシメチル基、1 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシイソブチル基、1, 2 - ジヒドロキシエチル基、1, 3 - ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3 - ジヒドロキシ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1 - クロロエチル基、2 - クロロエチル基、2 - クロロイソブチル基、1, 2 - ジクロロエチル基、1, 3 - ジクロロイソプロピル基、2, 3 - ジクロロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリクロロプロピル基、プロモメチル基、1 - プロモエチル基、2 - プロモエチル基、2 - プロモイソブチル基、1, 2 - ジプロモエチル基、1, 3 - ジプロモイソプロピル基、2, 3 - ジプロモ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリプロモプロピル基、ヨードメチル基、1 - ヨードエチル基、2 - ヨードエチル基、2 - ヨードイソブチル基、1, 2 - ジヨードエチル基、1, 3 - ジヨードイソプロピル基、2, 3 - ジヨード - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1 - アミノエチル基、2 - アミノエチル基、2 - アミノイソブチル基、1, 2 - ジアミノエチル基、1, 3 - ジアミノイソプロピル基、2, 3 - ジアミノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基、2 - シアノイソブチル基、1, 2 - ジシアノエチル基、1, 3 - ジシアノイソプロピル基、2, 3 - ジシアノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1 - ニトロエチル基、2 - ニトロエチル基、2 - ニトロイソブチル基、1, 2 - ジニトロエチル基、1, 3 - ジニトロイソプロピル基、2, 3 - ジニトロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリニトロプロピル基等が挙げられる。

【 0 1 7 9 】

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 5 0 のシクロアルキル基の例としては、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、4 - メチルシクロヘキシル基、1 - アダマンチル基、2 - アダマンチル基、1 - ノルボルニル基、2 - ノルボルニル基等が挙げられる。

【 0 1 8 0 】

置換又は無置換の炭素数 1 ~ 5 0 のアルコキシ基は、- O Y で表される基である。Y の例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、s - ブチル基、イソブチル基、t - ブチル基、n - ペンチル基、n - ヘキシル基、n - ヘプチル基、n - オクチル基、ヒドロキシメチル基、1 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシイソブチル基、1, 2 - ジヒドロキシエチル基、1, 3 - ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3 - ジヒドロキシ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1 - クロロエチル基、2 - クロロエチル基、2 - クロロイソブチル基、1, 2 - ジクロロエチル基、1, 3 - ジクロロイソプロピル基、2, 3 - ジクロロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリクロロプロピル基、プロモメチル基、1 - プロモエチル基、2 - プロモエチル基、2 - プロモイソブチル基、1, 2 - ジプロモエチル基、1, 3 - ジプロモイソプロピル基、2, 3 - ジプロモ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリプロモプロピル基、ヨードメチル基、1 - ヨードエチル基、2 - ヨードエチル基、2 - ヨードイソブチル基、1, 2 - ジヨードエチル基、1, 3 - ジヨードイソプロピル基、2, 3 - ジヨード - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1 - アミノエチル基、2 - アミノエチル基、2 - アミノイソブチル基、1, 2 - ジアミノエチル基、1, 3 - ジアミノイソプロピル基、2, 3 - ジアミノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基、2 - シアノイソブチル基、1, 2 - ジシアノエチル基、1, 3 - ジシアノイソプロピル基、2, 3 - ジシアノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1 - ニトロエチル基、2 - ニトロエチル基、2 - ニトロイソブチル基、1, 2 - ジニトロエチル基、1, 3 - ジニトロイソプロピル基、2, 3 - ジニトロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリニトロプロピル基等が挙げられる。

【 0 1 8 1 】

置換又は無置換の炭素数 7 ~ 5 0 のアラルキル基の例としては、ベンジル基、1 - フェニルエチル基、2 - フェニルエチル基、1 - フェニルイソプロピル基、2 - フェニルイソプロピル基、フェニル - t - ブチル基、 - ナフチルメチル基、1 - - ナフチルエチル基、2 - - ナフチルエチル基、1 - - ナフチルイソプロピル基、2 - - ナフチルイソプロピル基、 - ナフチルメチル基、1 - - ナフチルエチル基、2 - - ナフチルエチル基、1 - - ナフチルイソプロピル基、2 - - ナフチルイソプロピル基、1 - ピロリルメチル基、2 - (1 - ピロリル) エチル基、p - メチルベンジル基、m - メチルベンジル基、o - メチルベンジル基、p - クロロベンジル基、m - クロロベンジル基、o - クロロベンジル基、p - プロモベンジル基、m - プロモベンジル基、o - プロモベンジル基、p - ヨードベンジル基、m - ヨードベンジル基、o - ヨードベンジル基、p - ヒドロキシベンジル基、m - ヒドロキシベンジル基、o - ヒドロキシベンジル基、p - アミノベンジル基、m - アミノベンジル基、o - アミノベンジル基、p - ニトロベンジル基、m - ニトロベンジル基、o - ニトロベンジル基、p - シアノベンジル基、m - シアノベンジル基、o - シアノベンジル基、1 - ヒドロキシ - 2 - フェニルイソプロピル基、1 - クロロ - 2 - フェニルイソプロピル基等が挙げられる。

【 0 1 8 2 】

置換又は無置換の核炭素数 6 ~ 5 0 のアリーロキシ基は、- O Y ' と表され、Y ' の例としてはフェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニ

10

20

30

40

50

ル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - プチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニルイル基、4'' - t - プチル - p - ターフェニル - 4 - イル基等が挙げられる。

【0183】

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

10

20

30

40

50

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

【0184】

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

【0185】

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

10

20

30

40

50

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

【0186】

置換又は無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルコキシカルボニル基は - COOZ と表され、Z の例としてはメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、s - ブチル基、イソブチル基、t - ブチル基、n - ペンチル基、n - ヘキシル基、n - ヘプチル基、n - オクチル基、ヒドロキシメチル基、1 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシエチル基、2 - ヒドロキシイソブチル基、1, 2 - ジヒドロキシエチル基、1, 3 - ジヒドロキシイソプロピル基、2, 3 - ジヒドロキシ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヒドロキシプロピル基、クロロメチル基、1 - クロロエチル基、2 - クロロエチル基、2 - クロロイソブチル基、1, 2 - ジクロロエチル基、1, 3 - ジクロロイソプロピル基、2, 3 - ジクロロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリクロロプロピル基、プロモメチル基、1 - プロモエチル基、2 - プロモエチル基、2 - プロモイソブチル基、1, 2 - ジプロモエチル基、1, 3 - ジプロモイソプロピル基、2, 3 - ジプロモ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリプロモプロピル基、ヨードメチル基、1 - ヨードエチル基、2 - ヨードエチル基、2 - ヨードイソブチル基、1, 2 - ジヨードエチル基、1, 3 - ジヨードイソプロピル基、2, 3 - ジヨード - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリヨードプロピル基、アミノメチル基、1 - アミノエチル基、2 - アミノエチル基、2 - アミノイソブチル基、1, 2 - ジア

10

20

30

40

50

ミノエチル基、1, 3 - ジアミノイソプロピル基、2, 3 - ジアミノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリアミノプロピル基、シアノメチル基、1 - シアノエチル基、2 - シアノエチル基、2 - シアノイソブチル基、1, 2 - ジシアノエチル基、1, 3 - ジシアノイソプロピル基、2, 3 - ジシアノ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリシアノプロピル基、ニトロメチル基、1 - ニトロエチル基、2 - ニトロエチル基、2 - ニトロイソブチル基、1, 2 - ジニトロエチル基、1, 3 - ジニトロイソプロピル基、2, 3 - ジニトロ - t - ブチル基、1, 2, 3 - トリニトロプロピル基等が挙げられる。

【0187】

前記置換もしくは無置換の核炭素数6～50のアリール基又は置換もしくは無置換の核原子数5～50のヘテロアリール基で置換されたアミノ基は - NPQと表わされ、P、Qの例としては、フェニル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - アントリル基、2 - アントリル基、9 - アントリル基、1 - フェナントリル基、2 - フェナントリル基、3 - フェナントリル基、4 - フェナントリル基、9 - フェナントリル基、1 - ナфтаセニル基、2 - ナфтаセニル基、9 - ナфтаセニル基、1 - ピレニル基、2 - ピレニル基、4 - ピレニル基、2 - ビフェニルイル基、3 - ビフェニルイル基、4 - ビフェニルイル基、p - ターフェニル - 4 - イル基、p - ターフェニル - 3 - イル基、p - ターフェニル - 2 - イル基、m - ターフェニル - 4 - イル基、m - ターフェニル - 3 - イル基、m - ターフェニル - 2 - イル基、o - トリル基、m - トリル基、p - トリル基、p - t - ブチルフェニル基、p - (2 - フェニルプロピル)フェニル基、3 - メチル - 2 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - ナフチル基、4 - メチル - 1 - アントリル基、4' - メチルビフェニルイル基、4'' - t - ブチル - p - ターフェニル - 4 - イル基、2 - ピロリル基、3 - ピロリル基、ピラジニル基、2 - ピリジニル基、3 - ピリジニル基、4 - ピリジニル基、2 - インドリル基、3 - インドリル基、4 - インドリル基、5 - インドリル基、6 - インドリル基、7 - インドリル基、1 - イソインドリル基、3 - イソインドリル基、4 - イソインドリル基、5 - イソインドリル基、6 - イソインドリル基、7 - イソインドリル基、2 - フリル基、3 - フリル基、2 - ベンゾフラニル基、3 - ベンゾフラニル基、4 - ベンゾフラニル基、5 - ベンゾフラニル基、6 - ベンゾフラニル基、7 - ベンゾフラニル基、1 - イソベンゾフラニル基、3 - イソベンゾフラニル基、4 - イソベンゾフラニル基、5 - イソベンゾフラニル基、6 - イソベンゾフラニル基、7 - イソベンゾフラニル基、2 - キノリル基、3 - キノリル基、4 - キノリル基、5 - キノリル基、6 - キノリル基、7 - キノリル基、8 - キノリル基、1 - イソキノリル基、3 - イソキノリル基、4 - イソキノリル基、5 - イソキノリル基、6 - イソキノリル基、7 - イソキノリル基、8 - イソキノリル基、2 - キノキサリニル基、5 - キノキサリニル基、6 - キノキサリニル基、1 - カルバゾリル基、2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、1 - フェナンスリジニル基、2 - フェナンスリジニル基、3 - フェナンスリジニル基、4 - フェナンスリジニル基、6 - フェナンスリジニル基、7 - フェナンスリジニル基、8 - フェナンスリジニル基、9 - フェナンスリジニル基、10 - フェナンスリジニル基、1 - アクリジニル基、2 - アクリジニル基、3 - アクリジニル基、4 - アクリジニル基、9 - アクリジニル基、1, 7 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 7 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 9 - イル基、1, 8 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 4 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 6 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 8 - イル基、1, 9 - フェナンスロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナンスロリン - 2 - イル基、1,

10

20

30

40

50

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

10

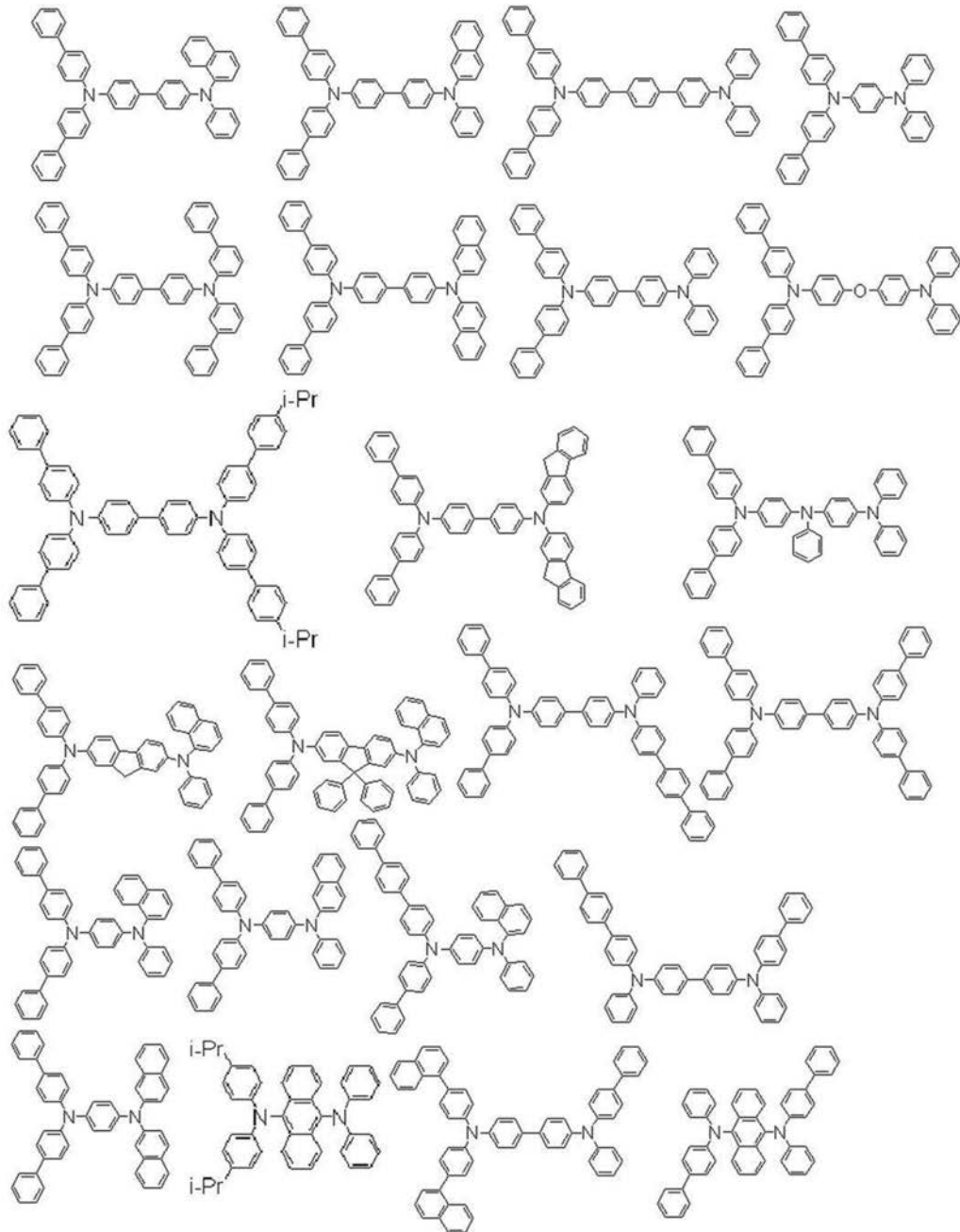
20

【0188】

前記(I)の化合物の具体例を以下に記すが、これらに限定されるものではない。

【0189】

【化57】



10

20

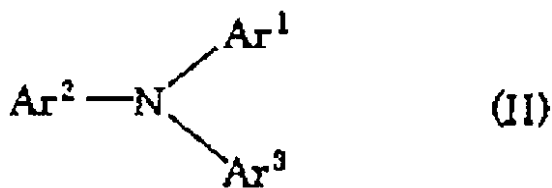
30

【0190】

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

【0191】

【化58】



40

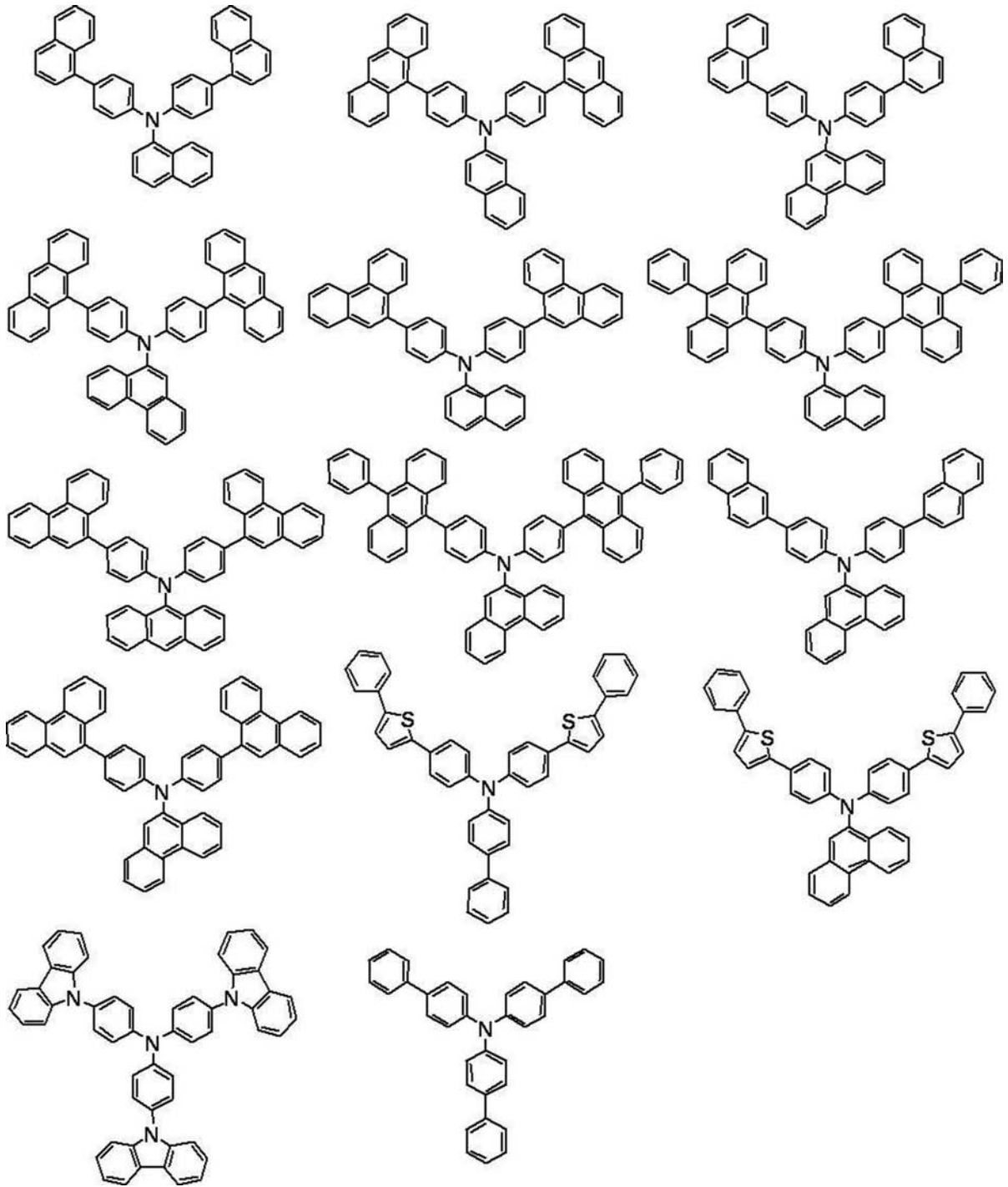
【0192】

前記(II)において、 $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^3$ の定義は前記(I)の $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^4$ の定義と同様である。以下に(II)の化合物の具体例を記すがこれらに限定されるものではない。

50

【 0 1 9 3 】

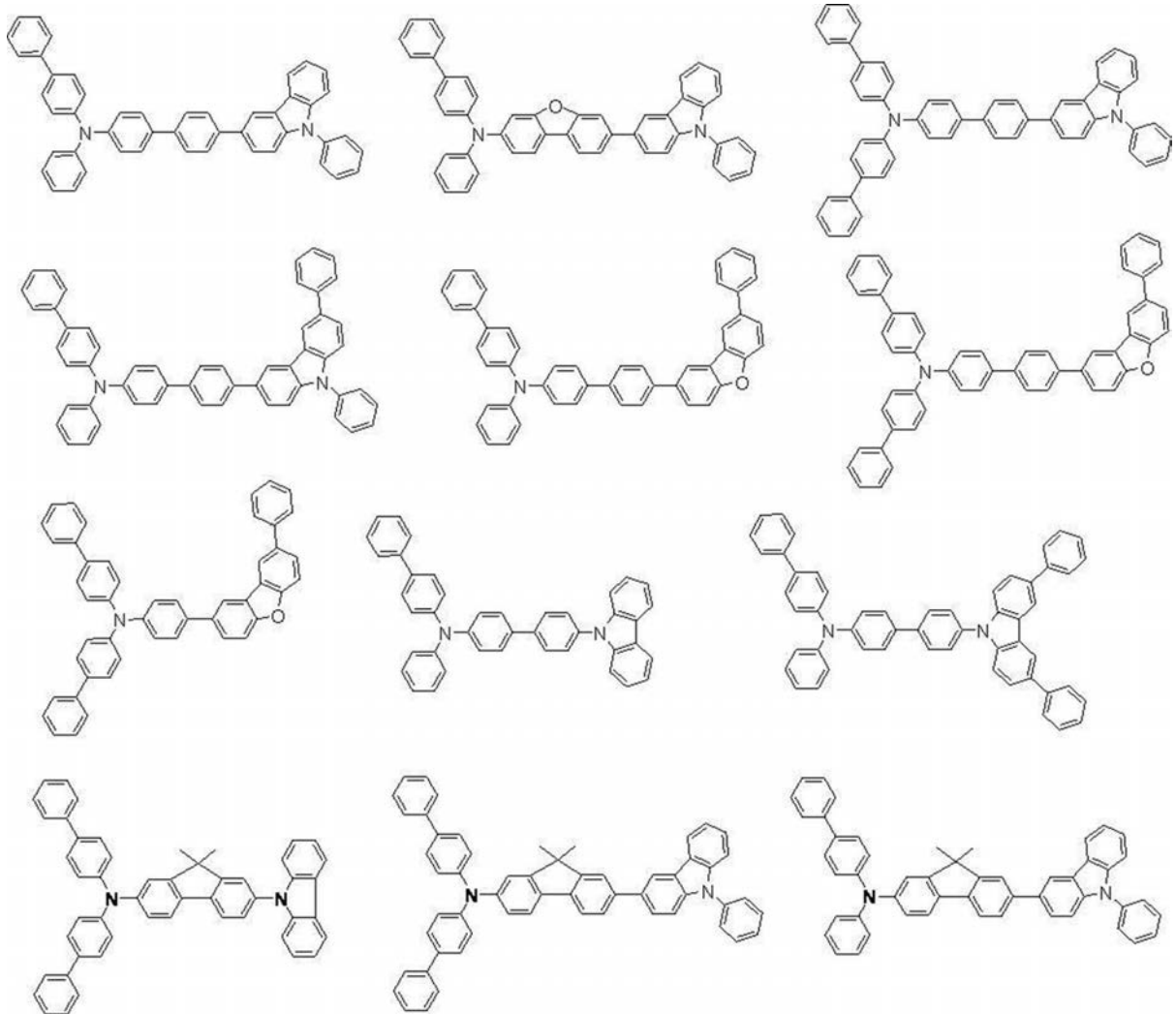
【 化 5 9 】



【 0 1 9 4 】

40

【化60】



10

20

【0195】

なお、本発明は、上記の説明に限られるものではなく、本発明の趣旨を逸脱しない範囲での変更は本発明に含まれる。

30

例えば次のような変更も本発明の好適な変形例である。

本発明では、前記発光層が電荷注入補助材を含有していることも好ましい。

エネルギーギャップが広いホスト材料を用いて発光層を形成した場合、ホスト材料のイオン化ポテンシャル (I p) と正孔注入・輸送層等の I p との差が大きくなり、発光層への正孔の注入が困難となり、十分な輝度を得るための駆動電圧が上昇するおそれがある。

【0196】

このような場合、発光層に、正孔注入・輸送性の電荷注入補助剤を含有させることで、発光層への正孔注入を容易にし、駆動電圧を低下させることができる。

電荷注入補助剤としては、例えば、一般的な正孔注入・輸送材料等が利用できる。

40

具体例としては、トリアゾール誘導体 (米国特許 3, 112, 197号明細書等参照)、オキサジアゾール誘導体 (米国特許 3, 189, 447号明細書等参照)、イミダゾール誘導体 (特公昭 37-16096号公報等参照)、ポリアリールアルカン誘導体 (米国特許 3, 615, 402号明細書、同第 3, 820, 989号明細書、同第 3, 542, 544号明細書、特公昭 45-555号公報、同 51-10983号公報、特開昭 51-93224号公報、同 55-17105号公報、同 56-4148号公報、同 55-108667号公報、同 55-156953号公報、同 56-36656号公報等参照)、ピラゾリン誘導体及びピラズロン誘導体 (米国特許第 3, 180, 729号明細書、同第 4, 278, 746号明細書、特開昭 55-88064号公報、同 55-88065号公報、同 49-105537号公報、同 55-51086号公報、同 56-80051号公報

50

、同56-88141号公報、同57-45545号公報、同54-112637号公報、同55-74546号公報等参照)、フェニレンジアミン誘導体(米国特許第3,615,404号明細書、特公昭51-10105号公報、同46-3712号公報、同47-25336号公報、特開昭54-53435号公報、同54-110536号公報、同54-119925号公報等参照)、アリアルアミン誘導体(米国特許第3,567,450号明細書、同第3,180,703号明細書、同第3,240,597号明細書、同第3,658,520号明細書、同第4,232,103号明細書、同第4,175,961号明細書、同第4,012,376号明細書、特公昭49-35702号公報、同39-27577号公報、特開昭55-144250号公報、同56-119132号公報、同56-22437号公報、西独特許第1,110,518号明細書等参照)、アミノ置換カルコン誘導体(米国特許第3,526,501号明細書等参照)、オキサゾール誘導体(米国特許第3,257,203号明細書等)に開示のもの)、スチリルアントラセン誘導体(特開昭56-46234号公報等参照)、フルオレノン誘導体(特開昭54-110837号公報等参照)、ヒドラゾン誘導体(米国特許第3,717,462号明細書、特開昭54-59143号公報、同55-52063号公報、同55-52064号公報、同55-46760号公報、同55-85495号公報、同57-11350号公報、同57-148749号公報、特開平2-311591号公報等参照)、スチルベン誘導体(特開昭61-210363号公報、同第61-228451号公報、同61-14642号公報、同61-72255号公報、同62-47646号公報、同62-36674号公報、同62-10652号公報、同62-30255号公報、同60-93455号公報、同60-94462号公報、同60-174749号公報、同60-175052号公報等参照)、シラザン誘導体(米国特許第4,950,950号明細書)、ポリシラン系(特開平2-204996号公報)、アニリン系共重合体(特開平2-282263号公報)、特開平1-211399号公報に開示されている導電性高分子オリゴマー(特にチオフェンオリゴマー)等を挙げるができる。

【0197】

正孔注入性の材料としては上記のものを挙げるができるが、ポルフィリン化合物(特開昭63-295695号公報等)に開示のもの)、芳香族第三級アミン化合物及びスチリルアミン化合物(米国特許第4,127,412号明細書、特開昭53-27033号公報、同54-58445号公報、同54-149634号公報、同54-64299号公報、同55-79450号公報、同55-144250号公報、同56-119132号公報、同61-295558号公報、同61-98353号公報、同63-295695号公報等参照)、特に芳香族第三級アミン化合物が好ましい。

【0198】

また、米国特許第5,061,569号に記載されている2個の縮合芳香族環を分子内に有する、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(以下NP Dと略記する)、また特開平4-308688号公報に記載されているトリフェニルアミンユニットが3つスターバースト型に連結された4,4',4"-トリス(N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ)トリフェニルアミン(以下MT D A T Aと略記する)等を挙げるができる。

また、特許公報第3614405号、3571977号又は米国特許4,780,536に記載されているヘキサアザトリフェニレン誘導体等も正孔注入性の材料として好適に用いることができる。

【0199】

また、p型Si、p型SiC等の無機化合物も正孔注入材料として使用することができる。

【0200】

本発明の有機EL素子の各層の形成方法は特に限定されない。従来公知の真空蒸着法、スピニング法等による形成方法を用いることができる。本発明の有機EL素子に用いる、前記式(1)で表される化合物を含有する有機薄膜層は、真空蒸着法、分子線蒸

10

20

30

40

50

着法（M B E法）あるいは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。

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

【実施例】

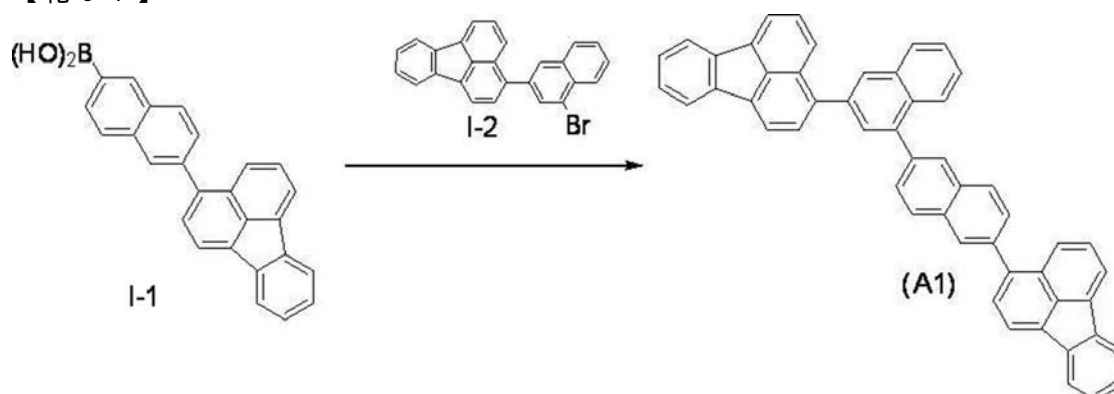
【0201】

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何ら制限されるものではない。

【0202】

合成実施例1（化合物（A1）の合成）

【化61】



【0203】

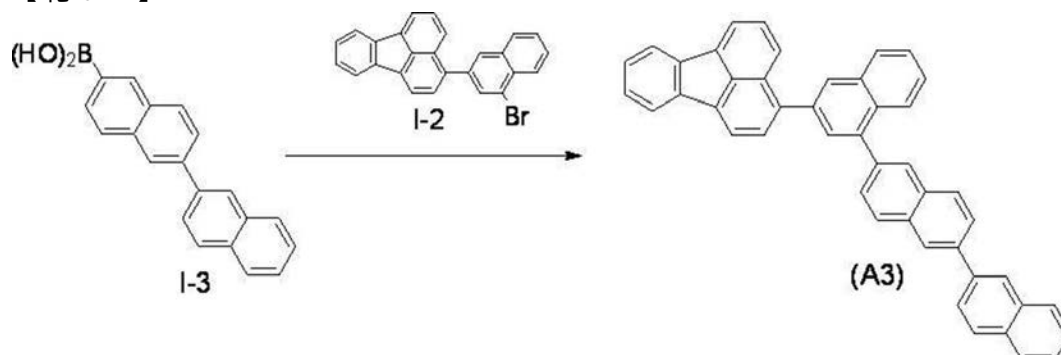
アルゴン雰囲気下、臭素化物I-2 7.33g（18mmol）、ボロン酸I-1 6.70g（18mmol）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）420mg（0.36mmol）、トルエン80ml、ジメトキシエタン80ml、2M炭酸ナトリウム水溶液26mlを加え、85 $^{\circ}$ Cにて、12時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで再結晶化することにより、化合物（A1）を6.48g（収率55%）得た。

F Dマス分析の結果、分子量654に対し、 $m/e = 654$ であった。

【0204】

合成実施例2（化合物（A3）の合成）

【化62】



【0205】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-2 7.33g（18mmol）、ボロン酸I-3 5.37g（18mmol）、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）420mg（0.36mmol）、トルエン80ml、ジメトキシエタン80ml、2M炭酸ナトリウム水溶液26mlを加え、85 $^{\circ}$ Cにて、12時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣

10

20

30

40

50

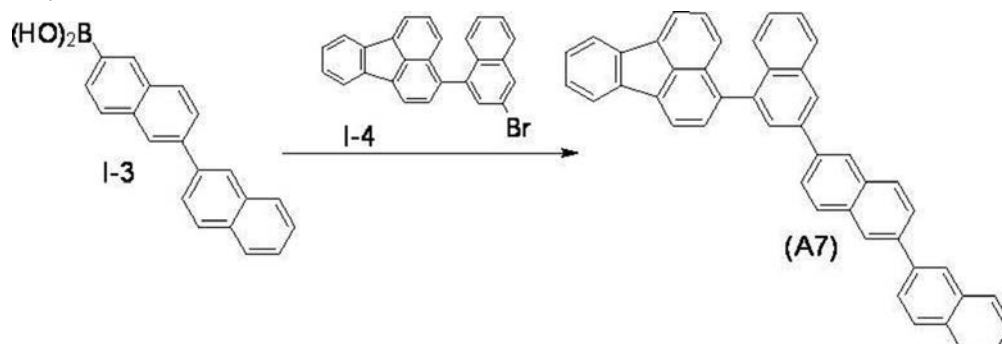
を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで再結晶化することにより、化合物(A3)を6.27g(収率60%)得た。

FDマス分析の結果、分子量580に対し、 $m/e = 580$ であった。

【0206】

合成実施例3(化合物(A7)の合成)

【化63】



10

【0207】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-4 7.33g(18mmol)、ボロン酸I-3 5.37g(18mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 420mg(0.36mmol)、トルエン80ml、ジメトキシエタン80ml、2M炭酸ナトリウム水溶液26mlを加え、85℃にて、14時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで3回再結晶化することにより、化合物(A7)を5.02g(収率48%)得た。

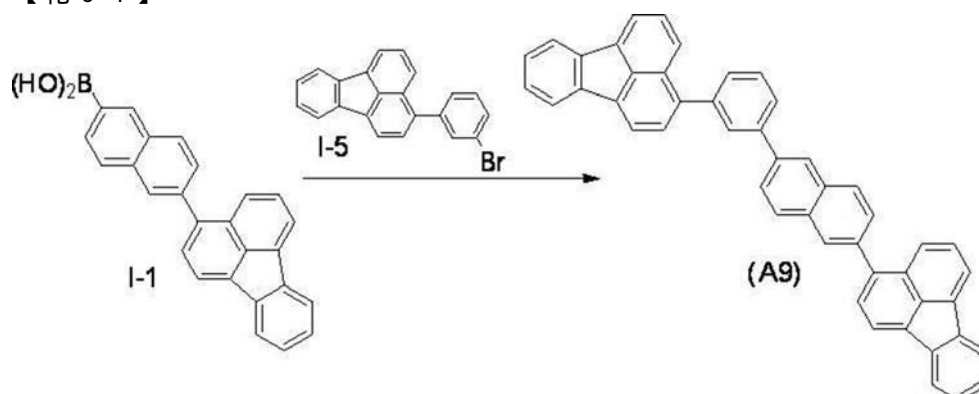
20

FDマス分析の結果、分子量580に対し、 $m/e = 580$ であった。

【0208】

合成実施例4(化合物(A9)の合成)

【化64】



30

【0209】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-5 5.36g(15mmol)、ボロン酸I-1 5.58g(15mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 350mg(0.30mmol)、トルエン60ml、ジメトキシエタン50ml、2M炭酸ナトリウム水溶液22mlを加え、85℃にて、10時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで2回再結晶化することにより、化合物(A9)を3.72g(収率41%)得た。

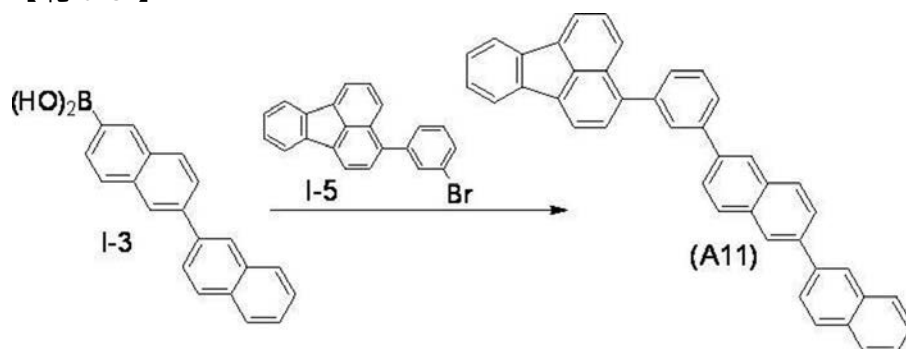
40

FDマス分析の結果、分子量604に対し、 $m/e = 604$ であった。

【0210】

合成実施例5(化合物(A11)の合成)

【化65】



10

【0211】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-5 5.36 g (15 mmol)、ボロン酸I-3 4.47 g (15 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 350 mg (0.30 mmol)、トルエン60 ml、ジメトキシエタン50 ml、2 M 炭酸ナトリウム水溶液22 mlを加え、85℃にて、12時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで2回再結晶化することにより、化合物(A11)を4.70 g (収率59%)得た。

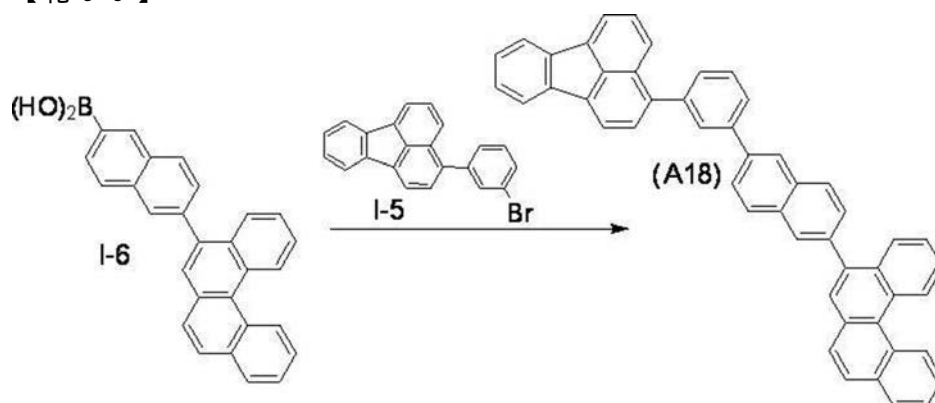
FDマス分析の結果、分子量530に対し、 $m/e = 530$ であった。

20

【0212】

合成実施例6(化合物(A18)の合成)

【化66】



30

【0213】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-5 6.43 g (18 mmol)、ボロン酸I-6 7.17 g (18 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 420 mg (0.36 mmol)、トルエン80 ml、ジメトキシエタン80 ml、2 M 炭酸ナトリウム水溶液26 mlを加え、85℃にて、11時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで2回再結晶化することにより、化合物(A18)を4.31 g (収率38%)得た。

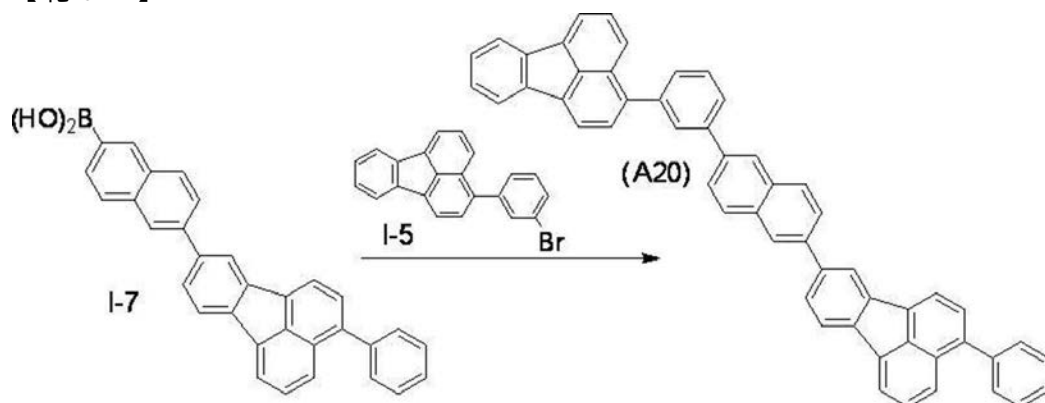
40

FDマス分析の結果、分子量630に対し、 $m/e = 630$ であった。

【0214】

合成実施例7(化合物(A20)の合成)

【化67】



10

【0215】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-5 6.43 g (18 mmol)、ボロン酸I-7 8.07 g (18 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 420 mg (0.36 mmol)、トルエン80 ml、ジメトキシエタン80 ml、2 M 炭酸ナトリウム水溶液26 mlを加え、85℃にて、12時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで2回再結晶化することにより、化合物(A20)を4.29 g (収率35%)得た

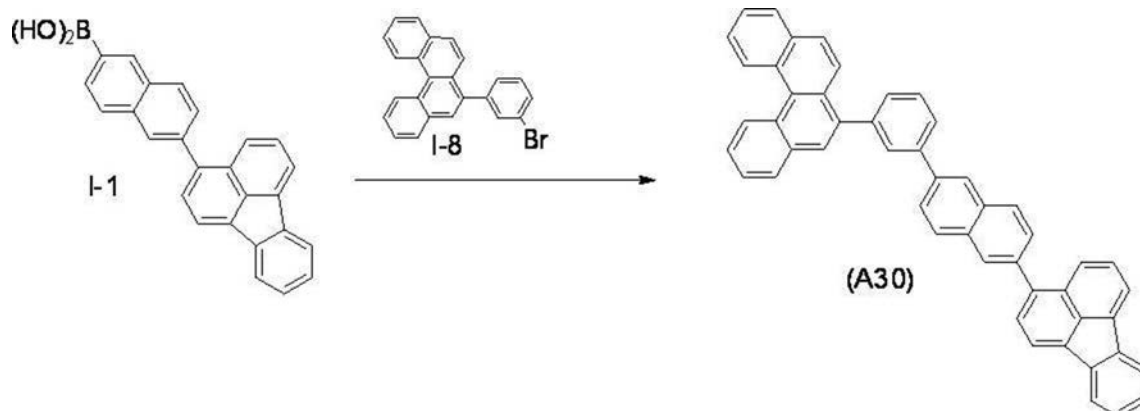
20

FDマス分析の結果、分子量680に対し、 $m/e = 680$ であった。

【0216】

合成実施例8(化合物(A30)の合成)

【化68】



30

【0217】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-8 6.90 g (18 mmol)、ボロン酸I-1 6.70 g (18 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 420 mg (0.36 mmol)、トルエン80 ml、ジメトキシエタン80 ml、2 M 炭酸ナトリウム水溶液26 mlを加え、85℃にて、12時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで3回再結晶化することにより、化合物(A30)を3.18 g (収率28%)得た

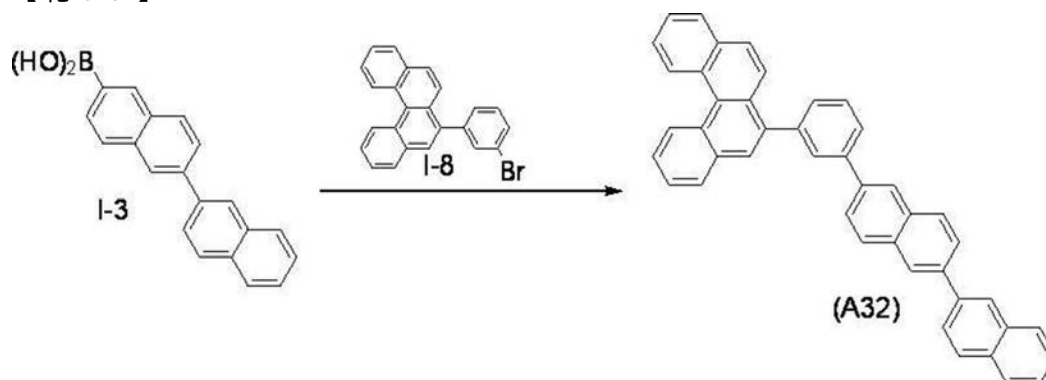
40

FDマス分析の結果、分子量630に対し、 $m/e = 630$ であった。

【0218】

合成実施例9(化合物(A32)の合成)

【化69】



10

【0219】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-8 5.75 g (15 mmol)、ボロン酸I-3 4.47 g (15 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 350 mg (0.30 mmol)、トルエン60 ml、ジメトキシエタン60 ml、2 M 炭酸ナトリウム水溶液22 mlを加え、85 °Cにて、13時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで3回再結晶化することにより、化合物(A32)を3.26 g (収率39%)得た。

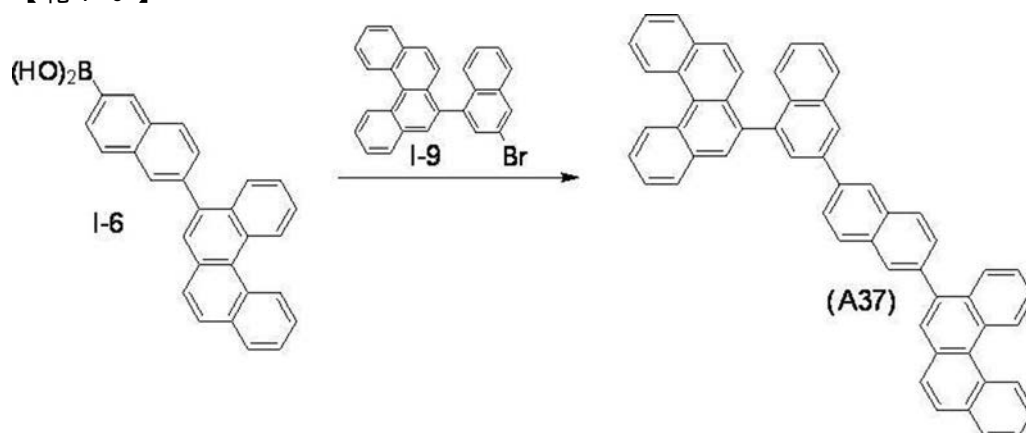
20

FDマス分析の結果、分子量556に対し、 $m/e = 556$ であった。

【0220】

合成実施例10 (化合物(A37)の合成)

【化70】



30

【0221】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-9 6.50 g (15 mmol)、ボロン酸I-6 5.97 g (15 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 350 mg (0.30 mmol)、トルエン60 ml、ジメトキシエタン60 ml、2 M 炭酸ナトリウム水溶液22 mlを加え、85 °Cにて、12時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで2回再結晶化することにより、化合物(A37)を4.77 g (収率45%)得た。

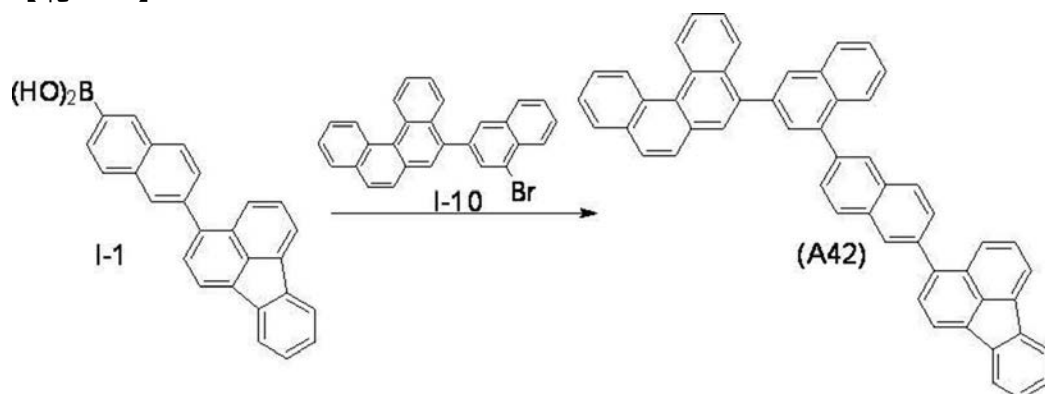
40

FDマス分析の結果、分子量706に対し、 $m/e = 706$ であった。

【0222】

合成実施例11 (化合物(A42)の合成)

【化71】



10

【0223】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-10 6.50 g (15 mmol)、ボロン酸I-1 5.58 g (15 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 350 mg (0.30 mmol)、トルエン60 ml、ジメトキシエタン60 ml、2 M炭酸ナトリウム水溶液22 mlを加え、85℃にて、12時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで2回再結晶化することにより、化合物(A42)を4.49 g (収率44%)得た。

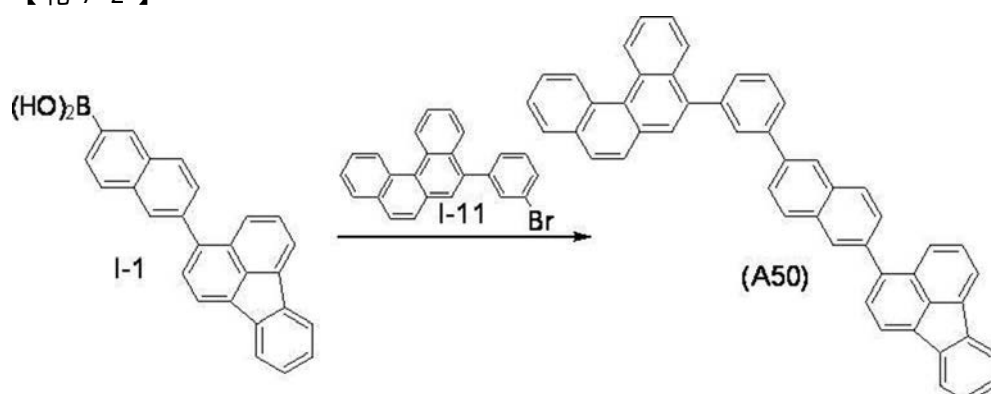
20

FDマス分析の結果、分子量680に対し、 $m/e = 680$ であった。

【0224】

合成実施例12 (化合物(A50)の合成)

【化72】



30

【0225】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-11 5.75 g (15 mmol)、ボロン酸I-1 5.58 g (15 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 350 mg (0.30 mmol)、トルエン60 ml、ジメトキシエタン60 ml、2 M炭酸ナトリウム水溶液22 mlを加え、85℃にて、13時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで2回再結晶化することにより、化合物(A50)を4.92 g (収率52%)得た。

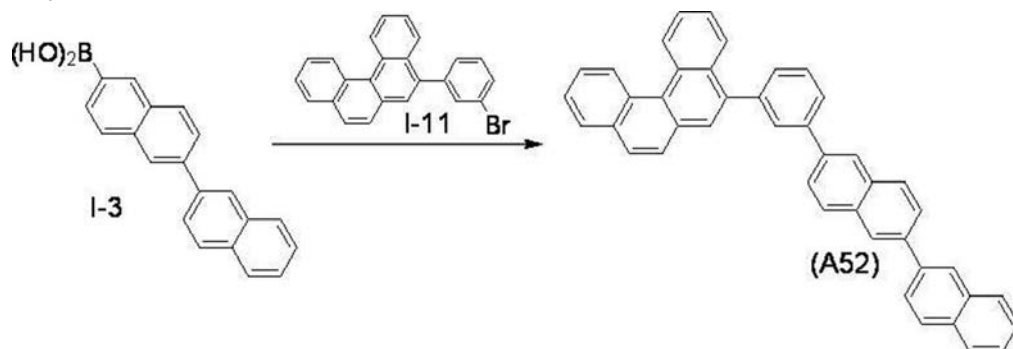
40

FDマス分析の結果、分子量630に対し、 $m/e = 630$ であった。

【0226】

合成実施例13 (化合物(A52)の合成)

【化73】



10

【0227】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-11 5.75 g (15 mmol)、ボロン酸I-3 4.47 g (15 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 350 mg (0.30 mmol)、トルエン60 ml、ジメトキシエタン60 ml、2 M炭酸ナトリウム水溶液22 mlを加え、85℃にて、12時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで2回再結晶化することにより、化合物(A52)を3.01 g (収率36%)を得た。

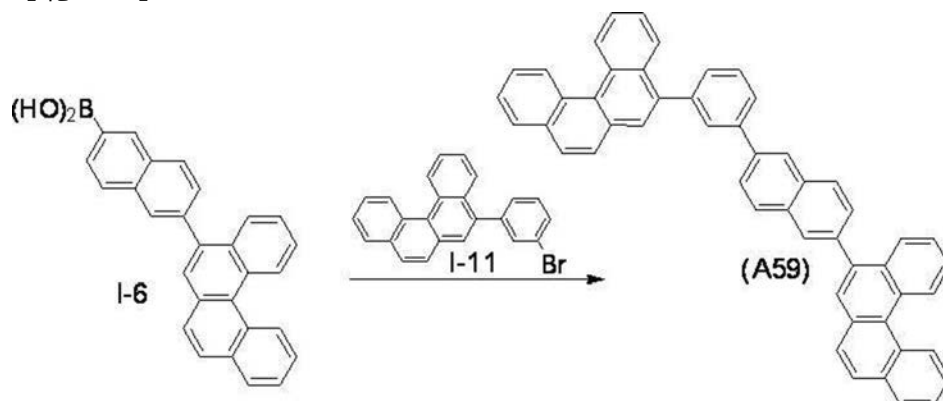
FDマス分析の結果、分子量556に対し、 $m/e = 556$ であった。

20

【0228】

合成実施例14 (化合物(A59)の合成)

【化74】



30

【0229】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-11 5.75 g (15 mmol)、ボロン酸I-6 5.97 g (15 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 350 mg (0.30 mmol)、トルエン60 ml、ジメトキシエタン60 ml、2 M炭酸ナトリウム水溶液22 mlを加え、85℃にて、12時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで3回再結晶化することにより、化合物(A59)を4.53 g (収率46%)を得た。

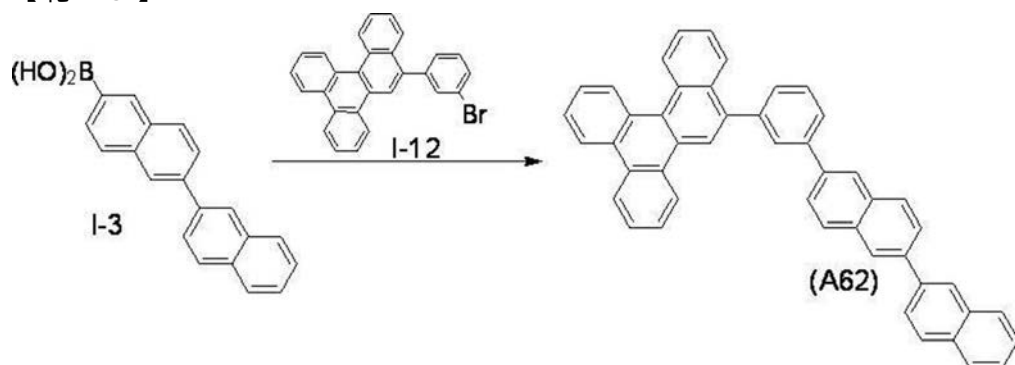
40

FDマス分析の結果、分子量656に対し、 $m/e = 656$ であった。

【0230】

合成実施例15 (化合物(A62)の合成)

【化75】



10

【0231】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-12 6.50 g (15 mmol)、ボロン酸I-3 4.47 g (15 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 350 mg (0.30 mmol)、トルエン60 ml、ジメトキシエタン60 ml、2 M炭酸ナトリウム水溶液22 mlを加え、85℃にて、12時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで2回再結晶化することにより、化合物(A62)を4.87 g (収率54%)得た。

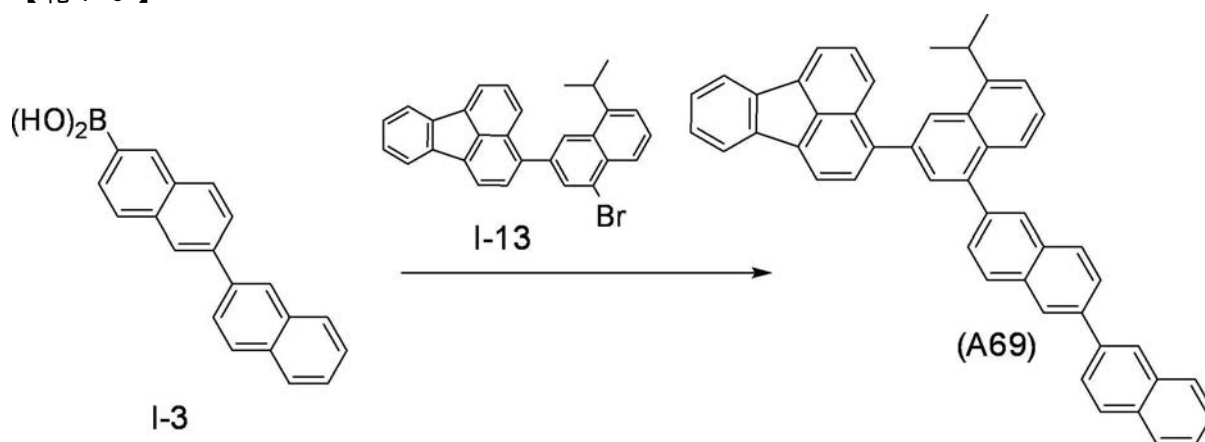
20

FDマス分析の結果、分子量556に対し、 $m/e = 556$ であった。

【0232】

合成実施例16 (化合物(A69)の合成)

【化76】



30

【0233】

アルゴン雰囲気下、臭素化物I-13 6.74 g (15 mmol)、ボロン酸I-3 4.47 g (15 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 350 mg (0.30 mmol)、トルエン70 ml、ジメトキシエタン70 ml、2 M炭酸ナトリウム水溶液23 mlを加え、85℃にて、14時間攪拌した。反応混合物を室温まで放冷し、水を加え、水相を除去し、有機相を濃縮後、ニトロベンゼンを加えて残渣を加熱溶解してろ過した。その後シリカゲルカラムクロマトグラフィーにより精製し、トルエンで再結晶化することにより、化合物(A69)を4.80 g (収率51%)得た。

40

FDマス分析の結果、分子量622に対し、 $m/e = 622$ であった。

【0234】

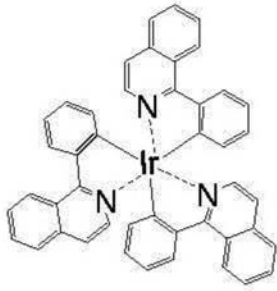
合成実施例17 (化合物(A79)の合成)

発光端)を求めた。この波長をエネルギー値に換算して、有機EL素子用材料の3重項エネルギー($E_g(T)$)を測定した。なお、試料は全て昇華精製等の精製物を用いた。

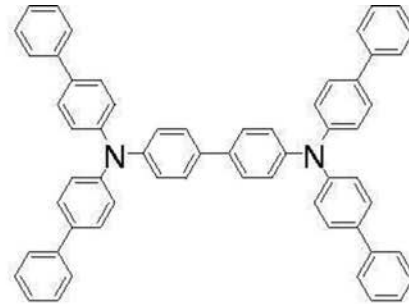
これらの評価の結果を表1に示す。

【0239】

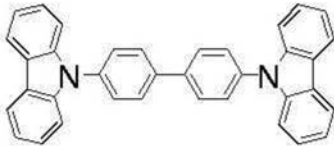
【化78】



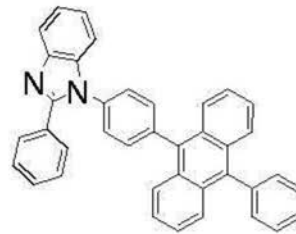
Ir(piq)₃



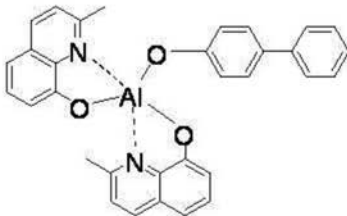
HT1



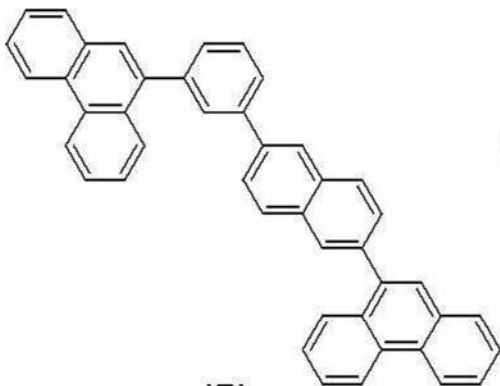
CBP



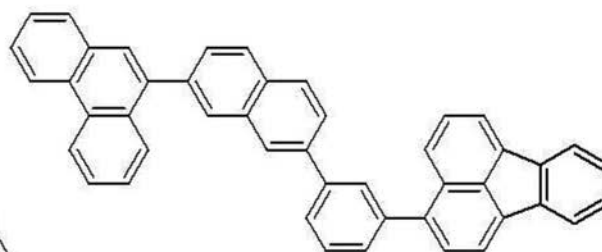
ET1



BAlq



(P)



(Q)

【0240】

10

20

30

40

50

【表 1】

	化合物	化合物の E _g (T) (eV)	電圧 (V)	発光効率 (cd/A)	輝度 半減寿命 (時間)
実施例1	(A1)	2.24	3.5	12.3	13000
実施例2	(A3)	2.26	3.6	12.6	13900
実施例3	(A7)	2.27	3.6	13.0	12800
実施例4	(A9)	2.22	3.5	12.0	13300
実施例5	(A11)	2.27	3.4	12.6	14000
実施例6	(A18)	2.32	3.5	12.5	12800
実施例7	(A20)	2.20	3.6	12.3	12500
実施例8	(A30)	2.34	3.4	13.2	12700
実施例9	(A32)	2.45	3.5	13.1	13300
実施例10	(A37)	2.40	3.5	12.8	12500
実施例11	(A42)	2.32	3.5	12.4	13000
実施例12	(A50)	2.36	3.4	14.0	13700
実施例13	(A52)	2.44	3.4	12.6	13500
実施例14	(A59)	2.42	3.5	12.7	14100
実施例15	(A62)	2.37	3.5	12.5	14700
実施例16	(A69)	2.26	3.6	11.4	11900
実施例17	(A79)	2.33	3.4	12.0	12800
比較例1	CBP	2.81	5.7	6.3	1200
比較例2	BAIq	2.28	5.3	7.0	2300
比較例3	(P)	2.47	4.3	12.3	12500
比較例4	(Q)	2.38	4.4	10.0	10500

【0241】

表1より明らかのように、発光効率について、本発明の有機EL素子用材料を用いて構成した実施例1～17の有機EL素子は、駆動電圧が低く、外部量子効率が高く、寿命が格段に長いことが示された。

これに対し、比較例1～2は、電圧が比較的高く、発光効率が低く、寿命が短いことがわかる。比較例3～4は、発光効率はほぼ同等であるが、駆動電圧が実施例1～17に比べて0.7～1.0V高い。

【0242】

本発明の材料の特徴は、有機EL素子のホスト材料として用いた場合、ホスト材料の3重項エネルギーと燐光発光性ドーパントの3重項エネルギーが適切であるため発光効率が向上することと、材料の分子骨格に含窒素環、窒素原子等が含まれていないため、有機EL素子用材料が正孔、電子に対し高い耐性を持っており、これにより、従来知られていた組合せよりも発光素子が長寿命化することである。さらに、特定の部分構造と分子の特定の結合様式を選択することによって、駆動電圧が著しく低下し、消費電力を著しく改善できることを特徴とする。

10

20

30

40

50

【産業上の利用可能性】

【0243】

本発明は、駆動電圧を低減することができ、高効率かつ長寿命な燐光発光性の有機EL素子用材料として利用できる。

この明細書に記載の文献の内容を全てここに援用する。

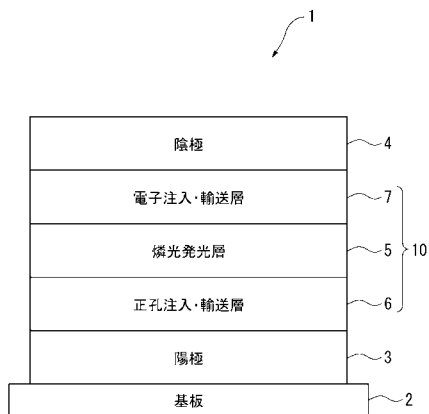
【符号の説明】

【0244】

- 1 有機エレクトロルミネッセンス素子
- 2 基板
- 3 陽極
- 4 陰極
- 5 燐光発光層
- 6 正孔注入・輸送層
- 7 電子注入・輸送層
- 10 有機薄膜層

10

【図1】



フロントページの続き

(51) Int.Cl. F I
C 0 7 F 7/08 (2006.01) C 0 7 F 7/08 C

(56) 参考文献 米国特許出願公開第 2 0 0 9 / 0 0 0 8 6 0 5 (U S , A 1)
国際公開第 2 0 0 9 / 0 0 8 2 1 5 (W O , A 1)
国際公開第 2 0 0 9 / 0 0 8 1 9 9 (W O , A 1)
国際公開第 2 0 0 9 / 0 0 8 2 0 5 (W O , A 1)
国際公開第 2 0 0 9 / 0 0 8 2 0 0 (W O , A 1)
国際公開第 2 0 0 9 / 0 0 8 3 5 6 (W O , A 1)

(58) 調査した分野(Int.Cl. , DB名)

H 0 1 L 5 1 / 5 0 - 5 1 / 5 6
H 0 1 L 2 7 / 3 2
H 0 5 B 3 3 / 0 0 - 3 3 / 2 8
C 0 9 K 1 1 / 0 6
C 0 7 C 1 3 / 6 6
C 0 7 C 1 5 / 2 0
C 0 7 C 1 5 / 3 8
C 0 7 F 7 / 0 8
CApl us / REGISTRY (STN)

专利名称(译)	用于有机电致发光器件的材料		
公开(公告)号	JP5431602B2	公开(公告)日	2014-03-05
申请号	JP2013040011	申请日	2013-02-28
[标]申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
当前申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
[标]发明人	岩隈俊裕 高嶋頼由 伊藤光則 荻原俊成		
发明人	岩隈 俊裕 高嶋 頼由 伊藤 光則 荻原 俊成		
IPC分类号	H01L51/50 C09K11/06 C07C13/66 C07C15/38 C07C15/20 C07F7/08		
CPC分类号	C09K11/06 C07C13/66 C07C2603/40 C07C2603/42 C09K2211/1011 C09K2211/185 H01L51/0058 H01L51/006 H01L51/0081 H01L51/0085 H01L51/5016 H05B33/14		
FI分类号	H05B33/14.B C09K11/06.690 C07C13/66 C07C15/38 C07C15/20 C07F7/08.C		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC03 3K107/CC12 3K107/CC21 3K107/CC23 3K107/CC45 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD67 3K107/DD68 4H006/AA03 4H006/AB92 4H049/VN01 4H049/VP01 4H049/VQ08 4H049/VR24 4H049/VS08 4H049/VT17 4H049/VT30 4H049/VU29 4H049/VW02		
审查员(译)	中山 佳美		
优先权	2009092523 2009-04-06 JP		
其他公开文献	JP2013141006A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

一种有机电致发光器件，包括：阴极;阳极;和有机薄膜层，包括至少一层并设置在阴极和阳极之间。至少一层有机薄膜层包括：由下式(1)，(2)和(3)中的任一个表示的有机电致发光器件材料;和至少一种磷光材料，其中有机电致发光器件材料可以具有取代基。A或Ar可以被苯基或萘基取代。

