

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2015-526886

(P2015-526886A)

(43) 公表日 平成27年9月10日(2015.9.10)

| (51) Int. Cl. | F I | テーマコード (参考) |
|-----------------------------|-------------|-------------|
| H01L 51/50 (2006.01) | H05B 33/14 | B 3K107 |
| C09K 11/06 (2006.01) | C09K 11/06 | 690 4C063 |
| C07D 403/14 (2006.01) | C09K 11/06 | 660 |
| C07D 215/04 (2006.01) | C07D 403/14 | |
| | C07D 215/04 | |

審査請求 有 予備審査請求 未請求 (全 115 頁)

| | | | |
|---------------|------------------------------|----------|---|
| (21) 出願番号 | 特願2015-517224 (P2015-517224) | (71) 出願人 | 503055897 |
| (86) (22) 出願日 | 平成24年6月14日 (2012.6.14) | | ユニバーサル ディスプレイ コーポレイ ション |
| (85) 翻訳文提出日 | 平成27年2月12日 (2015.2.12) | | アメリカ合衆国、ニュージャージー、ユー イング、 フィリップス プールバード |
| (86) 国際出願番号 | PCT/US2012/042356 | | 375 |
| (87) 国際公開番号 | W02013/187894 | (71) 出願人 | 000183646 |
| (87) 国際公開日 | 平成25年12月19日 (2013.12.19) | | 出光興産株式会社 東京都千代田区丸の内3丁目1番1号 |
| | | (74) 代理人 | 100108453 |
| | | | 弁理士 村山 靖彦 |
| | | (74) 代理人 | 100064908 |
| | | | 弁理士 志賀 正武 |

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 O L E D発光領域のためのビスカルバゾール誘導体ホスト物質及び赤色発光体

(57) 【要約】

本発明の有機エレクトロルミネッセンスデバイスは、デバイスの発光領域において、リン光ホスト物質としてのビスカルバゾール誘導体化合物と赤色リン光ドーパント物質としての有機リン光物質との新規な組み合わせを利用しており、そのビスカルバゾール誘導体化合物は式(1)で表され、赤色リン光ドーパント物質は式(D1)、(D2)、及び(D3)によって表される部分化学構造のうちの一つによって表される置換された化学構造を有するリン光有機金属錯体である。

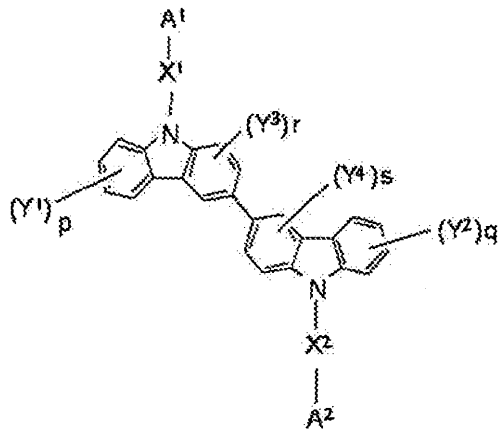
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

カソード、アノード、及び前記カソードとアノードの間に備えられた複数の有機薄膜層を含み、前記の複数の有機薄膜層が少なくとも1つの発光層を含む有機エレクトロルミネッセンスデバイスであって、

前記発光層の少なくとも1つが、赤色リン光ドーパント物質と下記式(1)：

【化 1】



(1)

10

20

30

40

(式中、 A^1 は、1～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環基を表し；

A^2 は、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、又は1～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環基を表し；

X^1 及び X^2 はそれぞれ連結基であり、かつ独立に、単結合、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基、あるいは2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族ヘテロ環基を表し；

$Y^1 \sim Y^4$ は独立に、水素原子、フッ素原子、シアノ基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキル基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアルコキシ基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のハロアルキル基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のハロアルコキシ基、1～10の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキルシリル、6～30の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールシリル、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基、あるいは、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族ヘテロ環基を表し；

$Y^1 \sim Y^4$ のうちの隣接するものは、互いに結合して環構造を形成していてもよく；

p 及び q は1～4の整数を表し；

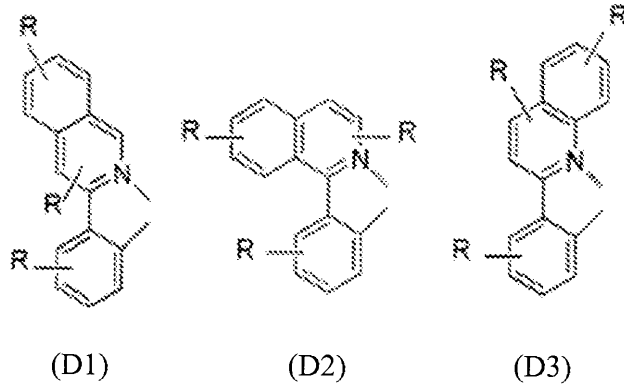
r 及び s は1～3の整数を表し；

p 及び q が2～4の整数であり、 r 及び s が2～3の整数である場合は、複数の $Y^1 \sim Y^4$ が同じであるか異なっていてよい。))

で表されるビスカルバゾール誘導体化合物であるホスト物質とを含み、

前記赤色リン光ドーパント物質が、下記式(D1)、(D2)、及び(D3)：

【化 2】



10

(式中、Rは独立に、H、アルキル、アルケニル、アルキニル、アルキルアリアル、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、CO₂R、C(O)R、NR₂、NO₂、OR、ハロ、アリール、ヘテロアリール、置換アリール、置換ヘテロアリール、又はヘテロ環基からなる群から選択される。)

によって表される部分構造のうちの一つによって表される置換された化学構造を有するリン光有機金属錯体である、有機エレクトロルミネッセンスデバイス。

【請求項 2】

式(1)中のA¹が、置換又は非置換のピリジン環、置換又は非置換のピリミジン環、及び置換又は非置換のトリアジン環からなる群から選択される、請求項1に記載のデバイス。

20

【請求項 3】

式(1)中のA¹が、置換又は非置換のピリミジン環あるいは置換又は非置換のトリアジン環から選択される、請求項1に記載のデバイス。

【請求項 4】

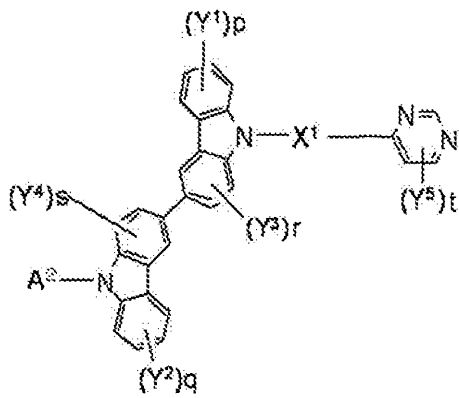
式(1)中のA¹が置換又は非置換のピリミジン環である、請求項1に記載のデバイス

【請求項 5】

前記ビスカルバゾール誘導体化合物が、下記式(2)で表される化合物である、請求項1に記載のデバイス。

30

【化 3】



40

式(2)中、A²、X¹、Y¹~Y⁴、p、q、r、及びsは、前記式(1)のA²、X¹、Y¹~Y⁴、p、q、r、及びsと同じものを表し；

Y⁵は式(1)のY¹~Y⁴と同じものを表し；

tは1~3の範囲の整数を表し；かつ、

tが2~3の整数である場合は、複数あるY⁵は同じか又は異なっていてよい。

【請求項 6】

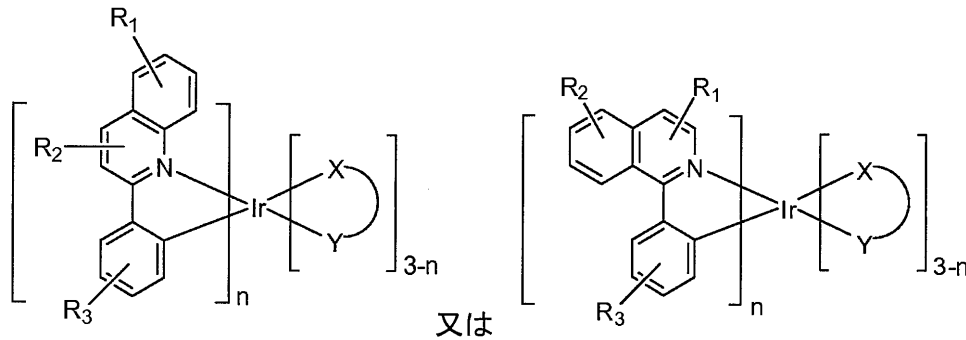
50

式(1)中のA¹が置換又は非置換のキナゾリン環である、請求項1に記載のデバイス

【請求項7】

前記赤色リン光ドーパント物質が下記式：

【化4】



10

(式中、nは、1、2、又は3であり；

R₁、R₂、及びR₃のそれぞれは独立に、水素であるか、あるいはアルキル又はアリールによるモノ、ジ、トリ、テトラ、又はペンタ置換であり、但し、R₃はジアルキル又はジアリールであり；かつ、

X - Yは補助配位子である。)

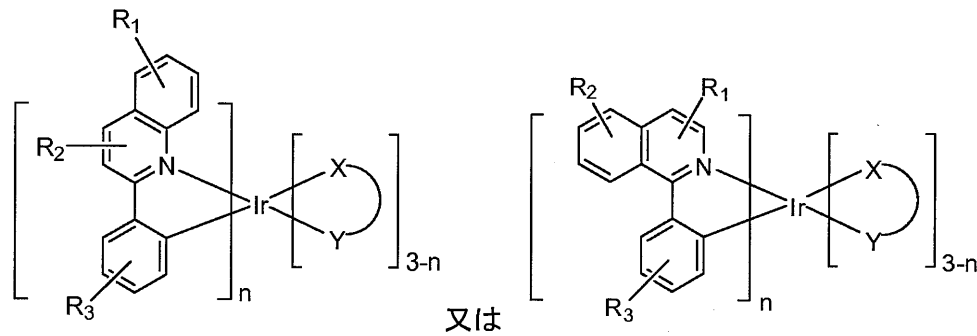
20

を有するイリジウム化合物である、請求項1に記載のデバイス。

【請求項8】

前記赤色リン光ドーパント物質が下記式：

【化5】



30

(式中、nは、1、2、又は3であり；

R₁、R₂、及びR₃のそれぞれは独立に、水素であるか、あるいはアルキル又はアリールによるモノ、ジ、トリ、テトラ、又はペンタ置換であり；

R₁、R₂、及びR₃のうち少なくとも1つが、少なくとも4つの炭素原子を含む分岐アルキルであり；かつ、

X - Yは補助配位子である。)

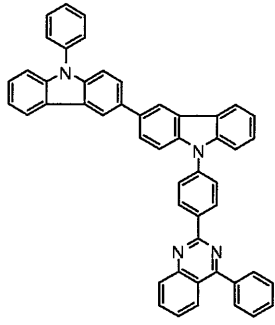
40

を有するイリジウム化合物である、請求項1に記載のデバイス。

【請求項9】

前記ホスト物質が下記式(H1)：

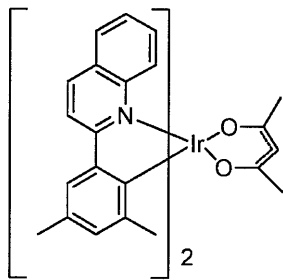
【化 6】



10

で表されるビスカルバゾール誘導体化合物であり；
前記赤色リン光ドーパント物質が、

【化 7】



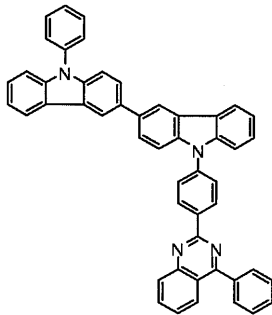
20

である、請求項 1 に記載のデバイス。

【請求項 10】

前記ホスト物質が下記式 (H 1) ；

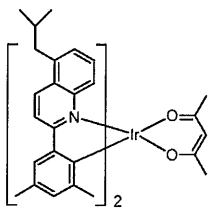
【化 8】



30

で表されるビスカルバゾール誘導体化合物であり；
前記赤色リン光ドーパント物質が、

【化 9】



40

である、請求項 1 に記載のデバイス。

【請求項 11】

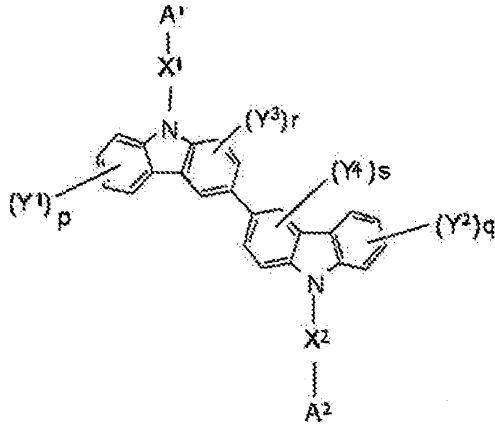
カソード、アノード、及び前記カソードとアノードの間に備えられた複数の有機薄膜層
を含み、前記の複数の有機薄膜層が少なくとも 1 つの発光層を含む有機エレクトロルミネ

50

ッセンスデバイスであって、

前記発光層の少なくとも1つが、第一のホスト物質、前記第一のホスト物質とは異なる第二のホスト物質、及び赤色リン光発光物質を含み、前記第一のホスト物質が下記式(1)：

【化10】



(1)

10

(式中、 A^1 は、1～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環基を表し；

A^2 は、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、又は1～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環基を表し；

20

X^1 及び X^2 はそれぞれ連結基であり、かつ独立に、単結合、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基、あるいは2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族ヘテロ環基を表し；

$Y^1 \sim Y^4$ は独立に、水素原子、フッ素原子、シアノ基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキル基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアルコキシ基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のハロアルキル基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のハロアルコキシ基、1～10の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキルシリル、6～30の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールシリル、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基、あるいは、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族ヘテロ環基を表し；

30

$Y^1 \sim Y^4$ のうちの隣接するものは、互いに結合して環構造を形成していてもよく；

p 及び q は1～4の整数を表し；

r 及び s は1～3の整数を表し；

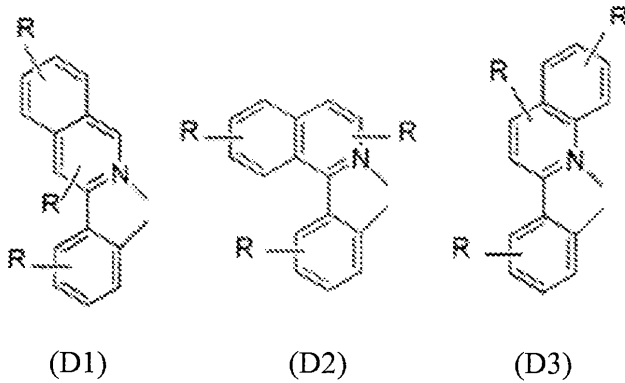
p 及び q が2～4の整数であり、 r 及び s が2～3の整数である場合は、複数の $Y^1 \sim Y^4$ は同じであるか異なっていてよい。))

40

で表されるビスカルバゾール誘導体化合物であり、

前記赤色リン光ドーパント物質が、下記式(D1)、(D2)、及び(D3)：

【化 1 1】



10

(式中、各 R は独立に、H、アルキル、アルケニル、アルキニル、アルキルアリール、 CN 、 CF_3 、 C_nF_{2n+1} 、トリフルオロビニル、 CO_2R 、 $C(O)R$ 、 NR_2 、 NO_2 、 OR 、ハロ、アリール、ヘテロアリール、置換アリール、置換ヘテロアリール、又はヘテロ環基からなる群から選択される。)

によって表される部分構造のうちの一つによって表される置換された化学構造を有するリン光有機金属錯体である、有機エレクトロルミネッセンスデバイス。

【請求項 1 2】

式(1)中の A^1 が、置換又は非置換のピリジン環、置換又は非置換のピリミジン環、及び置換又は非置換のトリアジン環からなる群から選択される、請求項 1 1 に記載のデバイス。

20

【請求項 1 3】

式(1)中の A^1 が、置換又は非置換のピリミジン環及び置換又は非置換のトリアジン環からなる群から選択される、請求項 1 1 に記載のデバイス。

【請求項 1 4】

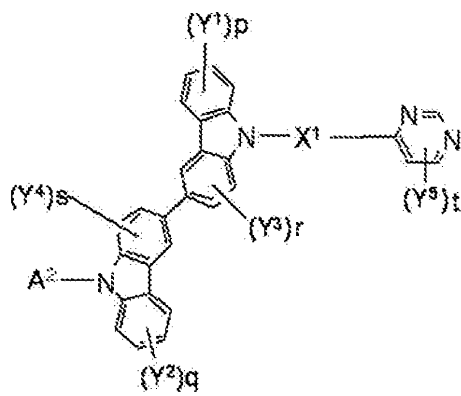
式(1)中の A^1 が置換又は非置換のピリミジン環である、請求項 1 1 に記載のデバイス。

【請求項 1 5】

前記第一のホスト物質が、下記式(2)で表されるビスカルバゾール誘導体化合物である、請求項 1 1 に記載のデバイス。

30

【化 1 2】



40

式(2)中、 A^2 、 X^1 、 $Y^1 \sim Y^4$ 、 p 、 q 、 r 、及び s は、前記式(1)の A^2 、 X^1 、 $Y^1 \sim Y^4$ 、 p 、 q 、 r 、及び s と同じものを表し；

Y^5 は式(1)の $Y^1 \sim Y^4$ と同じものを表し；

t は 1 ~ 3 の範囲の整数を表し；かつ、

t が 2 ~ 3 の整数である場合は、複数ある Y^5 は同じか又は異なっていてよい。

【請求項 1 6】

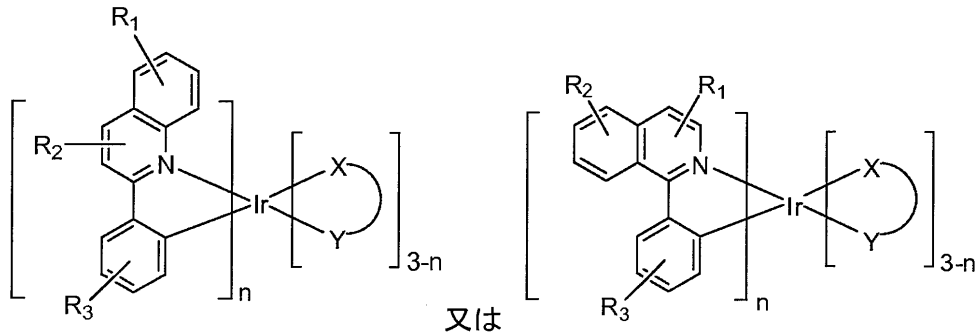
50

式(1)中のA¹が置換又は非置換のキナゾリン環である、請求項11に記載のデバイス。

【請求項17】

前記赤色リン光発光物質が下記式：

【化13】



10

(式中、nは、1、2、又は3であり；

R₁、R₂、及びR₃のそれぞれは独立に、水素であるか、あるいはアルキル又はアリールによるモノ、ジ、トリ、テトラ、又はペンタ置換であり、但し、R₃はジアルキル又はジアリールであり；かつ、

X - Yは補助配位子である。)

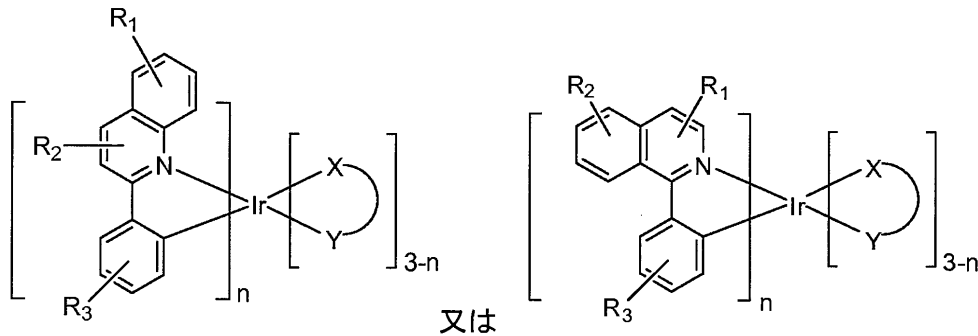
を有するイリジウム化合物である、請求項16に記載のデバイス。

20

【請求項18】

前記赤色リン光発光物質が下記式：

【化14】



30

(式中、nは、1、2、又は3であり；

R₁、R₂、及びR₃のそれぞれは独立に、水素であるか、あるいはアルキル又はアリールによるモノ、ジ、トリ、テトラ、又はペンタ置換であり；

R₁、R₂、及びR₃のうち少なくとも1つが、少なくとも4つの炭素原子を含む分岐アルキルであり；かつ、

X - Yは補助配位子である。)

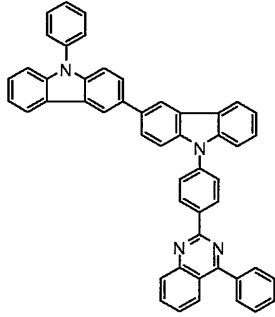
を有するイリジウム化合物である、請求項16に記載のデバイス。

40

【請求項19】

前記第一のホスト物質が下記式(H1)：

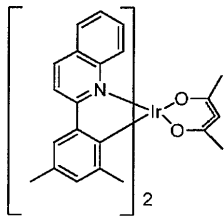
【化 1 5】



10

で表されるビスカルバゾール誘導体化合物であり；
前記赤色リン光ドーパント物質が、

【化 1 6】



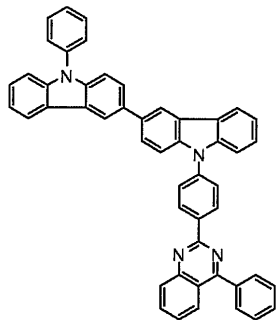
20

である、請求項 1 1 に記載のデバイス。

【請求項 2 0】

前記第一のホスト物質が下記式 (H 1) ；

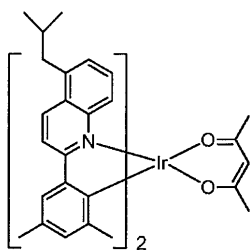
【化 1 7】



30

で表されるビスカルバゾール誘導体であり；
前記赤色リン光ドーパント物質が、

【化 1 8】



40

である、請求項 1 1 に記載のデバイス。

【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 (EL) デバイス、例えば、有機発光デバイス (以下では OLED と略する)、及びそのような OLED に用いることができる物質に

50

関する。特に、本発明は、赤色光を発する発光層を含むOLEDと、発光層に用いられるOLED用物質に関する。

【背景技術】

【0002】

アノードとカソードの間に配置された発光層を含む有機薄膜層を含むOLEDは、当技術分野において公知である。そのようなデバイスにおいては、発光は、発光層に注入された正孔と電子の再結合によって生み出される励起子エネルギーから得ることができる。

【0003】

一般に、OLEDはいくつかの有機層を含んでなり、その層のうちの少なくとも一つが、そのデバイスを横切る電圧を印加することによって電界発光をするように作られることができる。電圧がデバイスを横切って印加された場合、カソードはそれに隣接する有機層を有効に還元し（すなわち、電子を注入し）、アノードはそれに隣接する有機層を有効に酸化する（すなわち、正孔を注入する）。正孔と電子は、それら各々と反対に帯電した電極に向かってデバイスを横切って移動する。正孔と電子が同一分子上で出会った場合、再結合が起こるといわれ、励起子が形成される。発光性化合物中での正孔と電子の再結合には発光放出が伴い、それによって電界発光（エレクトロルミネッセンス）が生み出される。

10

【0004】

正孔と電子のスピン状態に応じて、正孔と電子の再結合によって生じる励起子は一重項又は三重項のスピン状態のいずれかを有することができる。一重項励起子からの発光は蛍光をもたらし、その一方、三重項励起子からの発光はリン光をもたらし。統計的には、OLEDに一般に用いられる有機物質については、励起子の四分の一が一重項であり、残りの四分の三が三重項である（Baldoら、Phys. Rev. B, 1999, 60, 14422を参照されたい）。実用的な電界リン光OLEDを作製するために用いることができる特定のリン光物質が存在するという発見（米国特許第6,303,238号明細書）、及びそれに続いての、そのような電界リン光OLEDが100%までの理論的量子効率（すなわち三重項及び一重項の両方の全部の収穫）を有することができることが実証されるまでは、最も効率的なOLEDは一般に、蛍光発光する物質に基づいていた。蛍光物質は、わずか25%の最大理論量子効率（OLEDの量子効率とは、正孔と電子が再結合して発光を生じる効率をいう）でしか発光せず、なぜなら、リン光発光の三重項から基底状態への遷移は形式的にはスピン禁制過程だからである。現在は、電界リン光OLEDは、電界蛍光OLEDと比較して、優れた全デバイス効率を有することが示されている（Baldoら、Nature, 1998, 395, 151、及びBaldoら、Appl. Phys. Lett. 1999, 75(3), 4を参照されたい）。

20

30

【0005】

一重項 - 三重項状態の混合をもたらし強いスピン - 軌道カップリングによって、重金属錯体はしばしば、室温においてそのような三重項からの効率的なリン光発光を示す。したがって、そのような錯体を含むOLEDは75%より大きな内部量子効率を有することが示されている（Adachiら、Appl. Phys. Lett., 2000, 77, 904）。特定の有機金属イリジウム錯体が強いリン光を有することが報告されており（Lamanskyら、Inorganic Chemistry, 2001, 40, 1704）、緑から赤のスペクトルで発光する効率的なOLEDがそれらの錯体を用いて作られている（Lamanskyら、J. Am. Chem. Soc., 2001, 123, 4304）。リン光重金属有機金属錯体及びそれらそれぞれのデバイスは、米国特許第6,830,828号及び同6,902,830号、米国特許出願公開第2006/0202194号公報及び同2006/0204785号公報、及び米国特許第7,001,536号、同6,911,271号、同6,939,624号、及び同6,835,469号の主題である。

40

【0006】

OLEDは、上述したように、一般に、優れた発光効率、優れた画像品質、優れた電力消費、及び薄いデザインの製品、例えば、フラットスクリーンに組み込まれうる能力を備え、したがって、従来技術、例えば陰極線デバイスに対して多くの利点をもっている。

【0007】

50

しかし、例えば、より大きな電流効率を有するOLEDを作ることを含めて、改良されたOLEDが望ましい。これに関連して、発光物質（リン光物質）が開発されてきており、それにおいては、内部量子効率を高めるために発光は三重項励起子から得られる。

【0008】

上で論じたように、そのようなOLEDは発光層中にそのようなリン光物質を用いること（リン光層）によって100%までの理論的内部量子効率を有することができ、その結果得られるOLEDは高効率及び低い電力消費を有する。そのようなリン光物質は、そのような発光層に含まれるホスト物質中のドーパントとして用いることができる。

【0009】

リン光物質などの発光物質でドーブすることによって形成された発光層中では、励起子は、ホスト物質に注入された電荷から効率的に生成されうる。生じた励起子の励起子エネルギーはドーパントに移されることができ、高効率でドーパントからの発光を得ることができる。励起子は、ホスト物質上で、あるいはドーパント上で直接形成されうる。

10

【0010】

高いデバイス効率でホスト物質からリン光ドーパントへの分子間のエネルギー移動を達成するためには、ホスト物質の励起三重項エネルギー E_{gH} は、リン光ドーパントの励起三重項エネルギー E_{gD} よりも大きくなければならない。

【0011】

ホスト物質からリン光ドーパントへの分子間のエネルギー移動を行わせるためには、ホスト物質の励起三重項エネルギー $E_{g(T)}$ は、リン光ドーパントの励起三重項エネルギー $E_{g(S)}$ よりも大きくなければならない。

20

【0012】

CBP（4,4'-ビス（N-カルbazolイル）ピフェニル）は、効率的かつ大きな励起三重項エネルギーを有する物質の代表例として知られている。たとえば米国特許第6,939,624号明細書を参照されたい。CBPをホスト物質として用いる場合、所定の発光波長、例えば緑を有するリン光ドーパントにエネルギーが移動されることができ、高効率を有するOLEDを得ることができる。CBPをホスト物質として用いる場合、発光率はリン光発光によって顕著に高められる。しかし、CBPは非常に短い寿命をもつことが知られており、そのため、OLEDなどのELデバイスにおける実用的使用には適していない。科学的理論には束縛されないが、これは、分子構造に関してCBPはその酸化安定性が高くないため、正孔によって大きく劣化されうるためと考えられる。

30

【0013】

国際特許出願公開WO2005/112519号は、窒素含有環を有する縮合環誘導体（例えばカルbazol）などを、緑色リン光を示すリン光層のためのホスト物質として用いる方法を開示している。この方法によって電流効率及び寿命は改善されているが、実用のためにはいくつかの場合には満足できるものではない。

【0014】

一方、蛍光発光を示す蛍光ドーパントのための多種多様なホスト物質（蛍光ホスト）が知られており、蛍光ドーパントと組み合わせて優れた発光効率と寿命を示す蛍光層を形成しうる様々なホスト物質が提示されうる。

40

【0015】

蛍光ホストにおいては、励起一重項エネルギー $E_{g(S)}$ は蛍光ドーパントにおけるものよりも大きい、そのようなホストの励起三重項エネルギー $E_{g(T)}$ は必ずしもより大きくはない。したがって、蛍光ホストをホスト物質としてリン光ホストに単純に用いてリン光発光層をもたらすことはできない。

【0016】

例えば、アントラセン誘導体は蛍光ホストとして良く知られている。しかし、アントラセン誘導体の励起状態三重項エネルギー $E_{g(T)}$ は約1.9 eVほどの小ささでありうる。したがって、500 nmから720 nmの可視光領域内に発光波長をもつリン光ドーパントへのエネルギー移動はそのようなホストを用いて達成することはできず、なぜなら

50

励起状態の三重項エネルギーがそのような低い三重項エネルギーを有するホストによって消光されるかもしれないからである。したがって、アントラセン誘導体はリン光ホストとして適していない。

【0017】

ペリレン誘導体、ピレン誘導体、及びナフタセン誘導体は同じ理由によってリン光ホストとして好ましくない。

【0018】

リン光ホストとして芳香族炭化水素化合物を使用することが、特開2003-142267号公報に記載されている。この特許出願は、ベンゼン骨格コアとメタ位に結合した2つの芳香族置換基をもつリン光ホスト化合物を開示している。

10

【0019】

しかし、特開2003-142267号公報に記載された芳香族炭化水素化合物は、良好な対称性を有する剛体分子構造であると推測され、5つの芳香環を備えており、分子が中心のベンゼン骨格に対して左右対称の配置をとっている。そのような配置は発光層が結晶化しやすいという欠点をもっている。

【0020】

その一方で、様々な芳香族炭化水素化合物が用いられているOLEDは、国際特許出願公開WO2007/046685号、特開2006-151966号公報、特開2005-8588号公報、特開2005-19219号公報、及び特開2004-75567号公報に開示されている。しかし、リン光ホストとしてのこれらの物質の有効性は記載されていない。

20

【0021】

加えて、様々な蛍光化合物を用いて調製したOLEDが、特開2004-043349号公報、特開2007-314506号公報、特開2004-042485号公報に記載されている。しかし、リン光ホストとしてのこれらの物質の有効性は記載されていない。

【0022】

さらに、特開2004-042485号公報は、縮合した多環式の芳香族環がフルオレン環に直接結合した炭化水素化合物を開示している。しかし、そのような物質とリン光物質とを組み合わせることで調製したOLEDの有効性は記載されておらず、また、この出願は縮合した多環式の芳香族環として、小さな三重項エネルギー準位を有することが知られているペリレン及びピレン環を開示しており、これらはリン光デバイスの発光層として用いるためには好ましくなく、リン光デバイスのために有効な物質を選択していない。

30

【先行技術文献】

【特許文献】

【0023】

【特許文献1】米国特許第6,303,238号明細書

【特許文献2】米国特許第6,830,828号明細書

【特許文献3】米国特許第6,902,830号明細書

【特許文献4】米国特許出願公開第2006/0202194号公報

【特許文献5】米国特許出願公開第2006/0204785号公報

40

【特許文献6】米国特許第7,001,536号明細書

【特許文献7】米国特許第6,911,271号明細書

【特許文献8】米国特許第6,939,624号明細書

【特許文献9】米国特許第6,835,469号明細書

【特許文献10】米国特許第6,939,624号明細書

【特許文献11】国際公開第2005/112519号

【特許文献12】特開2003-142267号公報

【特許文献13】国際公開第2007/046685号

【特許文献14】特開2006-151966号公報

【特許文献15】特開2005-8588号公報

50

- 【特許文献16】特開2005-19219号公報
 【特許文献17】特開2004-75567号公報
 【特許文献18】特開2004-043349号公報
 【特許文献19】特開2007-314506号公報
 【特許文献20】特開2004-042485号公報
 【特許文献21】米国特許第6,548,956号明細書
 【特許文献22】特開平9-3448号公報
 【特許文献23】特開2000-173774号公報
 【特許文献24】米国特許出願公開第2011/0278555号公報
 【非特許文献】

10

- 【0024】
 【非特許文献1】Baldoら, Phys. Rev. B, 1999, 60, 14422
 【非特許文献2】Baldoら, Nature, 1998, 395, 151
 【非特許文献3】Baldoら, Appl. Phys. Lett. 1999, 75(3), 4
 【非特許文献4】Adachiら, Appl. Phys. Lett., 2000, 77, 904
 【非特許文献5】Lamanskyら, Inorganic Chemistry, 2001, 40, 1704
 【非特許文献6】Lamanskyら, J. Am. Chem. Soc., 2001, 123, 4304
 【非特許文献7】J. Bergman, A. Brynolf, B. Elman, 及びE. Vuorinen, Tetrahedron, 42, 3697-3706 (1986)

20

- 【発明の概要】
 【発明が解決しようとする課題】

【0025】
 OLED技術の最近の進歩にもかかわらず、高効率でリン光物質にエネルギーを移動させることができ、延長された寿命をもつホスト物質に対するニーズが依然として存在する。

- 【課題を解決するための手段】

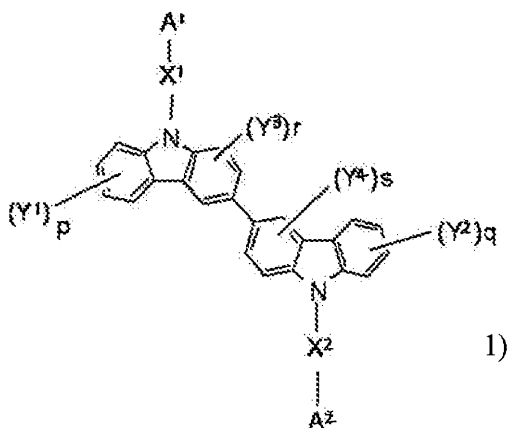
【0026】

[本発明のまとめ]

ここでの開示の一つの態様は、デバイスの発光領域中のホスト化合物としてのビスカルバゾール誘導体化合物とデバイスの発光領域中のドーパントとしての有機金属リン光物質との新規な組み合わせを利用するOLEDなどの有機エレクトロルミネセンスデバイスを提供する。ここで開示する有機エレクトロルミネセンスデバイスは、カソード、アノード、及びそのカソードとアノードの間に備えられた複数の有機薄膜層を含む。その複数の有機薄膜層は少なくとも1つの発光層を含む。その発光層の少なくとも1つが、赤色リン光ドーパント物質と下記式(1)：

30

【化1】



40

(式中、A¹は、1~30の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環基

50

を表し；

A²は、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、又は1～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環基を表し；

X¹及びX²はそれぞれ連結基であり、かつ独立に、単結合、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基、あるいは2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族ヘテロ環基を表し；

Y¹～Y⁴は独立に、水素原子、フッ素原子、シアノ基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキル基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアルコキシ基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のハロアルキル基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のハロアルコキシ基、1～10の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキルシリル、6～30の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールシリル、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基、あるいは、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族ヘテロ環基を表し；

Y¹～Y⁴のうちの隣接するものは、互いに結合して環構造を形成していてもよく；

p及びqは1～4の整数を表し；

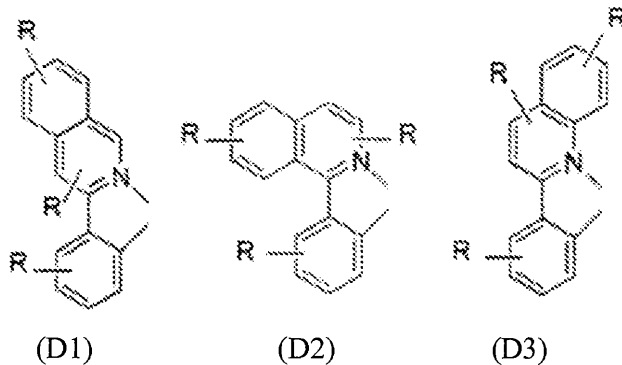
r及びsは1～3の整数を表し；

p及びqが2～4の整数であり、r及びsが2～3の整数である場合は、複数のY¹～Y⁴が同じであるか異なっていてよい。）

で表されるビスカルパゾール誘導体化合物であるホスト物質とを含み、

前記赤色リン光ドーパント物質が、下記式(D1)、(D2)、及び(D3)；

【化2】



(式中、Rは独立に、H、アルキル、アルケニル、アルキニル、アルキルアリール、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、CO₂R、C(O)R、NR₂、NO₂、OR、ハロ、アリール、ヘテロアリール、置換アリール、置換ヘテロアリール、又はヘテロ環基からなる群から選択される。)

によって表される部分構造のうちの一つによって表される置換された化学構造を有するリン光有機金属錯体である。

【0027】

本明細書においては、「水素原子」には、水素の同位体、例えば、プロチウム、ジューテリウム、及びトリチウムが含まれる。

【0028】

別の態様では、有機エレクトロルミネセンスデバイスは、カソード、アノード、及びそのカソードとアノードの間に備えられた複数の有機薄膜層を含む。その複数の有機薄膜層は少なくとも一つの発光層を含み、その発光層の少なくとも一つが、第一のホスト物質、その第一のホスト物質とは異なる第二のホスト物質、及び赤色リン光ドーパント物質を含

10

20

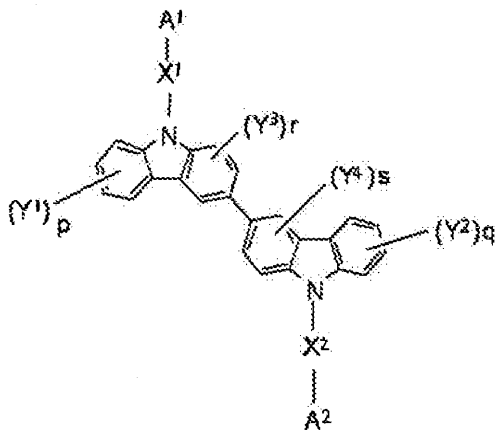
30

40

50

む。その第一のホスト物質が下記式(1)：

【化3】



(1)

(式中、 A^1 は、1～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環基を表し；

A^2 は、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、又は1～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環基を表し；

X^1 及び X^2 はそれぞれ連結基であり、かつ独立に、単結合、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基、あるいは2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族ヘテロ環基を表し；

$Y^1 \sim Y^4$ は独立に、水素原子、フッ素原子、シアノ基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキル基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアルコキシ基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のハロアルキル基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のハロアルコキシ基、1～10の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキルシリル、6～30の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールシリル、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基、あるいは、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族ヘテロ環基を表し；

$Y^1 \sim Y^4$ のうちの隣接するものは、互いに結合して環構造を形成していてもよく；

p及びqは1～4の整数を表し；

r及びsは1～3の整数を表し；

p及びqが2～4の整数であり、r及びsが2～3の整数である場合は、複数の $Y^1 \sim Y^4$ が同じであるか異なっていてよい。))

で表されるビスカルバゾール誘導体化合物であり、

前記赤色リン光ドーパント物質が、下記式(D1)、(D2)、及び(D3)：

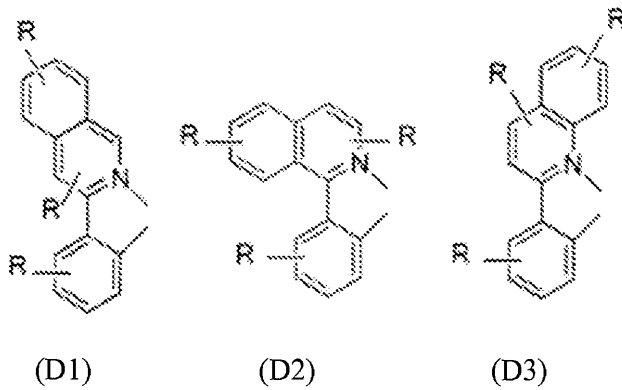
10

20

30

40

【化 4】



10

(式中、Rは独立に、H、アルキル、アルケニル、アルキニル、アルキルアリール、CN、CF₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、CO₂R、C(O)R、NR₂、NO₂、OR、ハロ、アリール、ヘテロアリール、置換アリール、置換ヘテロアリール、又はヘテロ環基からなる群から選択される。)

によって表される部分化学構造のうちの一つによって表される置換された化学構造を有するリン光有機金属錯体である。

【0029】

本発明者は、ここでの開示にしたがうホスト物質とリン光ドーパント物質の組み合わせ物を含む有機ELデバイスが、低い電圧しか必要とせず高い発光効率を示すことを発見した。さらに、ここでの開示にしたがい発光層中に共ホスト物質(co-host materials)とリン光ドーパント物質との組み合わせを含むデバイスは、単一ホストの例示デバイスと比較したときに、3倍よりも長い向上した寿命という追加の利点を示すことが予期される。

20

【0030】

多層型有機ELデバイスの発光効率と寿命は、有機ELデバイス全体のキャリアバランスに左右される。キャリアバランスを制御する主な要因は、有機層(複数)のそれぞれのキャリア輸送能力と、個々の有機層(複数)の界面領域におけるキャリア注入能力である。共ホスト物質と燐光ドーパント物質の組み合わせは、正孔輸送性物質と電子輸送性物質の2つを一緒にすることによって、有機ELデバイス全体の改善された電荷キャリアバランスをもたらすことができる。そのような共ホスト物質の規定は、隣接する層への電荷キャリアの侵入による劣化を低減することができる。

30

【0031】

たとえば、ここでの開示で示した発光体ホスト物質は、発光層中の単一ホストとしてだけでなく、それらとは異なる第二のホスト物質と組み合わせる共ホスト物質としてもうまく機能することができる。発光層中のホスト物質として2種の化合物を備えることによって、発光層における隣接する層へのキャリア注入能力を均衡(バランス)させることができる。

【0032】

ここで開示した発光層のホスト物質と赤色リン光ドーパント物質の組み合わせは、向上した寿命を有する有機ELデバイスをもたらした。

40

【図面の簡単な説明】

【0033】

【図1】図1は、ここで開示した例示の態様にしたがうOLEDについての例示の配置の略図である。

【発明を実施するための形態】

【0034】

本発明のOLEDは、アノードとカソードの間に配置された複数の層を含むことができる。本発明による代表的なOLEDは、それらには限定されないが、以下に記載した構成の層を有する構成を含む。

50

【0035】

- (1) アノード / 発光層 / カソード ;
- (2) アノード / 正孔注入層 / 発光層 / カソード ;
- (3) アノード / 発光層 / 電子注入・輸送層 / カソード ;
- (4) アノード / 正孔注入層 / 発光層 / 電子注入・輸送層 / カソード ;
- (5) アノード / 有機半導体層 / 発光層 / カソード ;
- (6) アノード / 有機半導体層 / 電子阻止層 / 発光層 / カソード ;
- (7) アノード / 有機半導体層 / 発光層 / 接着性向上層 / カソード ;
- (8) アノード / 正孔注入・輸送層 / 発光層 / 電子注入・輸送層 / カソード ;
- (9) アノード / 絶縁層 / 発光層 / 絶縁層 / カソード ;
- (10) アノード / 無機半導体層 / 絶縁層 / 発光層 / 絶縁層 / カソード ;
- (11) アノード / 有機半導体層 / 絶縁層 / 発光層 / 絶縁層 / カソード ;
- (12) アノード / 絶縁層 / 正孔注入・輸送層 / 発光層 / 絶縁層 / カソード ; 及び
- (13) アノード / 絶縁層 / 正孔注入・輸送層 / 発光層 / 電子注入・輸送層 / カソード

10

【0036】

上述した O L E D の構成の構造のなかで、構成構造 (8) が好ましい構造であるが、本発明はこれらの開示した構成構造に限定されない。

【0037】

図 1 は一つの態様による O L E D 1 を示している。O L E D 1 は、透明基板 2、アノード 3、カソード 4、アノード 3 とカソード 4 の間に配置された複数の有機薄膜層 10 を含んでいる。複数の有機薄膜層 10 のうち少なくとも 1 つの層が、1 つ以上のリン光ホスト物質とリン光ドーパント物質を含むリン光発光層 5 である。

20

【0038】

複数の有機薄膜層 10 は、リン光発光層 5 とアノード 3 との間に正孔注入・輸送層 6 などのその他の層を含むことができる。複数の有機薄膜層 10 はまた、リン光発光層 5 とカソード 4 との間に電子注入・輸送層 7 などの層を含むこともできる。

【0039】

さらに、アノード 3 とリン光発光層 5 との間に配置された電子阻止層、及びカソード 4 とリン光発光層 5 との間に配置された正孔阻止層をそれぞれ備えていてもよい。これは、電子と正孔をリン光発光層 5 内に封じ込めて、リン光発光層 5 内での励起子の生成率を高めることを可能にする。

30

【0040】

ここでの開示では、「リン光ホスト」の語は、リン光ドーパントと組み合わせた場合にリン光ホストとして機能するホスト物質をいうために用いられ、分子構造のみに基づくホスト物質の分類に限定されるべきではない。

【0041】

したがって、リン光ホストとは、リン光ドーパントを含むリン光発光層を構成する物質を意味し、リン光物質のホストのためにのみ用いることができる物質を意味しない。リン光発光層はまた、本明細書では発光層をいう。

【0042】

本明細書中、「正孔注入・輸送層」は、正孔注入層及び正孔輸送層の少なくともいずれか一つを意味し、「電子注入・輸送層」は、電子注入層及び電子輸送層の少なくともいずれか一つを意味する。

40

【0043】

[基材]

ここで開示する O L E D は、基材上に作ることができる。基材はこの場合、O L E D を支えるための基材であり、それは約 400 ~ 約 700 nm の可視領域の光が少なくとも約 50 % の透過率を有する平坦な基板であることが好ましい。

【0044】

基材には、ガラス板、ポリマーの板などが含まれる。特に、ガラス板には、ソーダラ

50

イムガラス、バリウム・ストロンチウム含有ガラス、鉛ガラス、アルミノシリケートガラス、ボロシリケートガラス、バリウムボロシリケートガラス、石英などが含まれる。ポリマーの板には、ポリカーボネート、アクリル、ポリエチレンテレフタレート、ポリエーテルサルファイド、ポリスルホンなどが含まれる。

【0045】

[アノード及びカソード]

ここで開示したOLED中のアノードは、正孔を正孔注入層、正孔輸送層、又は発光層へと注入する役割を担っている。典型的には、アノードは4.5 eV以上の仕事関数を有する。

【0046】

アノードとして用いるのに適した物質の具体例には、インジウムスズオキド合金(ITO)、酸化スズ(NESAガラス)、インジウム亜鉛オキド、金、銀、白金、銅などが含まれる。アノードは、気相蒸着法、スパッタリング法などによって、上で論じたものなどの電極物質の薄膜を形成させることによって調製することができる。

【0047】

発光層から光が放射される場合、アノードにおける可視光領域中の光の透過率は10%より大きいことが好ましい。アノードのシート抵抗は数百 Ω/\square 以下であることが好ましい。アノードの膜厚はその物質に応じて選択され、典型的には約10 nmから約1 μm の範囲、好ましくは約10 nmから約200 nmの範囲である。

【0048】

カソードは、電子を電子注入層、電子輸送層、又は発光層に注入する目的のために小さな仕事関数を有する物質を含むことが好ましい。カソードとして用いるために適した物質には、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-銀合金などが含まれるがこれらに限定されない。透明又は上面発光型デバイスのためには、米国特許第6,548,956号明細書に記載されているものなどのTOLEDカソードが好ましい。

【0049】

カソードは、アノードの場合と同様に、気相蒸着法、スパッタリング法などの方法によって薄膜を形成させることにより調製できる。さらに、発光をカソード側から取り出す態様も同様に用いることができる。

【0050】

[第一の態様による発光層]

ここでの開示によるOLED中の発光層は、以下の機能の一つ又は組み合わせて行うことができる。

(1) 注入機能：電場を適用中に、正孔がアノード又は正孔注入層から注入されることでき、電子がカソード又は電子注入層から注入されることのできる機能、

(2) 輸送機能：注入された電荷(電子及び正孔)が電場の力によって輸送される機能、及び

(3) 発光機能：電子及び正孔の再結合のための領域を提供することができ、発光をもたらす機能。

【0051】

正孔の注入の容易さと電子の注入の容易さとの間に違いが存在してもよく、正孔及び電子の移動度によって示される輸送能力に違いが存在してもよい。

【0052】

例えば、気相蒸着、スピンコーティング、ラングミュア・プロジェクト法などを含めた公知の方法を用いて発光層を作ることができる。発光層は分子を堆積させた膜であることが好ましい。これに関連して、「分子を堆積させた膜」の語は、気相から化合物を堆積させることによって形成された薄膜、及び溶液状態又は液相状態中の物質化合物を固体化させることによって形成された膜を意味し、通常は、上述した分子堆積膜は、凝集構造及び

10

20

30

40

50

より高次の構造における相違及びそれに由来する機能の相違によって、LB法によって形成された薄膜（分子積層膜）から区別できる。

【0053】

好ましい態様では、発光層の膜厚は約5～約50nmであることが好ましく、さらに好ましくは約7～約50nm、最も好ましくは約10～約50nmである。膜厚が5nm未満である場合には、発光層を形成すること及びその色度を制御することが困難になるおそれがある。一方、膜厚が約50nmを超えると、作動電圧が高くなるおそれがある。

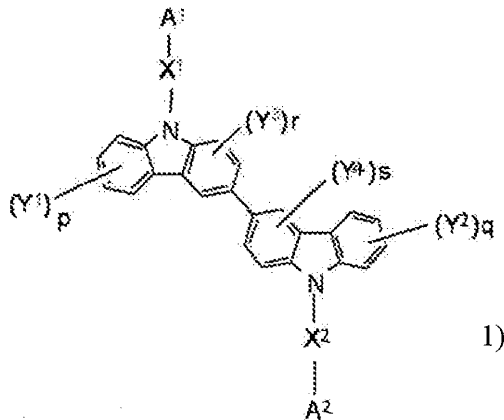
【0054】

[単一ホストデバイス中でのホスト物質としてのビスカルバゾール誘導体]

ここでの開示による態様にしたがうOLED1中の複数の有機薄膜の層10は、少なくとも1つの発光層を含む。発光層のうち少なくとも1つは、デバイスの発光領域中のホスト物質としてのビスカルバゾール誘導体と、その発光領域中のドーパントとしての有機金属赤色リン光物質との新規な組み合わせを含む。その発光層の少なくとも1つは、赤色リン光ドーパント物質と下記式(1)で表されるビスカルバゾール誘導体化合物であるホスト物質を含む。

【0055】

【化5】



【0056】

上記式中、 A^1 は、1～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環基を表し；

A^2 は、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、あるいは1～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環基を表し；

X^1 及び X^2 はそれぞれ連結基であり、かつ独立に、単結合、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基、あるいは2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族ヘテロ環基を表し；

$Y^1 \sim Y^4$ は独立に、水素原子、フッ素原子、シアノ基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキル基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアルコキシ基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のハロアルキル基、1～20の炭素原子を有する置換又は非置換のハロアルコキシ基、1～10の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキルシリル、6～30の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールシリル、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基、あるいは、2～30の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族ヘテロ環基を表し；

$Y^1 \sim Y^4$ のうちの隣接するものは、互いに結合して環構造を形成していてもよく；

p 及び q は 1 ~ 4 の整数を表し；
 r 及び s は 1 ~ 3 の整数を表し；
 p 及び q が 2 ~ 4 の整数であり、r 及び s が 2 ~ 3 の整数である場合は、複数の $Y^1 \sim Y^4$ は同じであるか異なっていてよい。

【0057】

ここでの開示の別の側面によれば、式(1)のホスト物質の A^1 は、置換又は非置換のピリジン環、置換又は非置換のピリミジン環、及び置換又は非置換のトリアジン環からなる群から選択されることが好ましい。式(1)のホスト物質の A^1 は、置換もしくは非置換のピリミジン環または置換もしくは非置換のトリアジン環から選択されることがさらに好ましい。式(1)のホスト物質の A^1 は、置換又は非置換のキナゾリン環であることが特に好ましい。

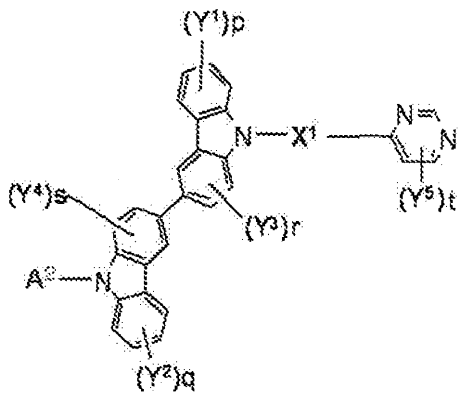
10

【0058】

ここで開示する側面によれば、ホスト物質は下記式(2)で表されるビスカルバゾール誘導体化合物であることが好ましい。

【0059】

【化6】



20

【0060】

式(2)中、 A^2 、 X^1 、 $Y^1 \sim Y^4$ 、p、q、r、及びsは、式(1)の A^2 、 X^1 、 $Y^1 \sim Y^4$ 、p、q、r、及びsと同じものを表し； Y^5 は式(1)の $Y^1 \sim Y^4$ と同じものを表し；tは1~3の範囲の整数を表し；かつ、tが2~3の整数である場合は、複数ある Y^5 は同じか又は異なっていてよい。

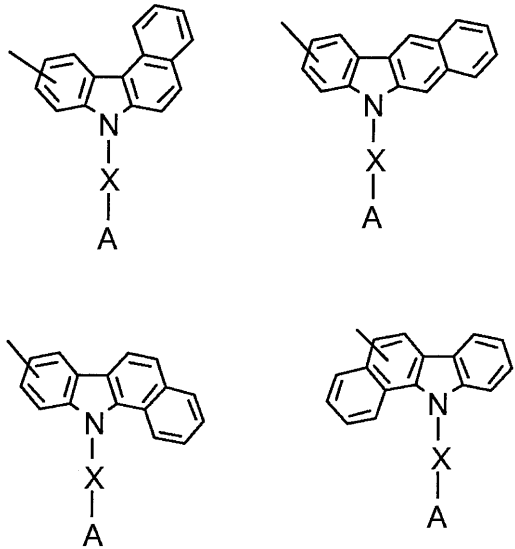
30

【0061】

式(1)及び(2)のホスト物質中、 $Y^1 \sim Y^4$ が互いに結合して環構造を形成する場合、その環構造として以下の式の1つで表される構造が例示できる。

【0062】

【化 7】



10

【0063】

ホスト物質についての式(2)において、 A^2 は窒素含有ヘテロ環基であることが好ましい。さらに好ましくは、 A^2 は、2~30の環炭素原子を有する置換もしくは非置換の芳香族ヘテロ環基、又は2~30の環炭素原子を有する置換もしくは非置換の縮合芳香族ヘテロ環基である。

20

【0064】

ホスト物質についての式(1)及び(2)において、 X^1 は、好ましくは、単結合、又は6~30の環炭素原子を有する置換もしくは非置換の二価の芳香族炭化水素基、さらに好ましくは、6~30の環炭素原子を有する置換又は非置換の二価の芳香族炭化水素基、特に好ましくは、ベンゼン環又はナフタレン環である。

【0065】

式(1)及び(2)において X^1 が置換又は非置換のベンゼン環である場合は、 X^1 に結合している A^1 及びカルbazolリル基は、好ましくはメタ位又はパラ位にある。特に好ましくは、 X^1 は非置換のパラフェニレンである。

30

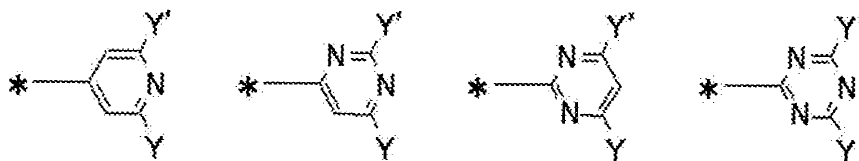
【0066】

ホスト物質についての式(1)及び(2)において、上記ピリジン環、ピリミジン環、及びトリアジン環は下記の式で表されることがさらに好ましい。式中、 Y 及び Y' は置換基を表す。置換基の例は上述した $Y^1 \sim Y^4$ によって表されるものと同じ基である。 Y 及び Y' は同じであっても、異なってもよい。それらの好ましい例は、6~30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、及び2~30の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基である。以下の式中、*は X^1 又は X^2 への結合位置を表す。

【0067】

40

【化 8】



【0068】

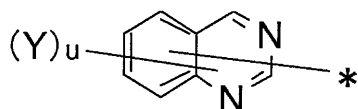
ホスト物質についての式(1)及び(2)において、上記キナゾリン環は下記の式で表される。 Y は置換基を表す。 u は1~5の整数を表す。 u が2~5の整数である場合は、

50

複数の Y は同じであるか、又は異なっていてよい。置換基 Y としては、上述した Y¹ ~ Y⁴ に対するものと同じ基が使用でき、そのなかでそれらの好ましい例は、6 ~ 30 の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、及び 2 ~ 30 の環炭素原子を有する置換または非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基である。また、以下の式において、* は X¹ 又は X² への結合位置を表す。

【0069】

【化9】



10

【0070】

ホスト物質についての式(1)及び(2)中、Y¹ ~ Y⁵ で表されるアルキル基、アルコキシ基、ハロアルキル基、ハロアルコキシ基、及びアルキルシリル基は、直鎖状、分岐状、又は環状であってよい。

【0071】

ホスト物質についての式(1)及び(2)中、1 ~ 20 の炭素原子を有するアルキル基の例は、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、s-ブチル基、イソブチル基、t-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、n-ヘプチル基、n-オクチル基、n-ノニル基、n-デシル基、n-ウンデシル基、n-ドデシル基、n-トリデシル基、n-テトラデシル基、n-ペンタデシル基、n-ヘキサデシル基、n-ヘプタデシル基、n-オクタデシル基、ネオペンチル基、1-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基、3-メチルペンチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、及び3,5-テトラメチルシクロヘキシル基である。1 ~ 10 の炭素原子を有するアルキル基の例は、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、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、及びシクロヘプチル基である。

20

【0072】

1 ~ 20 の炭素原子を有するアルコキシ基としては、1 ~ 6 の炭素原子を有するアルコキシ基が好ましく、その具体例は、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、及びヘキシルオキシ基である。

30

【0073】

1 ~ 20 の炭素原子を有するハロアルキル基は、1 ~ 20 の炭素原子を有するアルキル基を1つ又は複数のハロゲン原子で置換することによってもたらされるハロアルキル基によって例示される。ハロゲン原子の好ましいものはフッ素である。ハロアルキル基の例は、トリフルオロメチル基及び2,2,2-トリフルオロエチル基である。

【0074】

1 ~ 20 の炭素原子を有するハロアルコキシ基は、1 ~ 20 の炭素原子を有するアルコキシ基を1つ又は複数のハロゲン原子で置換することによってもたらされるハロアルコキシ基によって例示される。

40

【0075】

1 ~ 10 の炭素原子を有するアルキルシリル基のいくつかの例は、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリブチルシリル基、ジメチルエチルシリル基、ジメチルイソプロピルシリル基、ジメチルプロピルシリル基、ジメチルブチルシリル基、ジメチル-tert-ブチルシリル基、及びジエチルイソプロピルシリル基である。

【0076】

6 ~ 30 の炭素原子を有するアリアルシリル基のいくつかの例は、フェニルジメチルシリル基、ジフェニルメチルシリル基、ジフェニル-tert-ブチルシリル基、及びトリフェニルシリル基である。

50

【 0 0 7 7 】

2 ~ 3 0 の環炭素原子を有する芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基のいくつかの例は、ピロリル基、ピラジニル基、ピリジニル基、インドリル基、イソインドリル基、フリル基、ベンゾフラニル基、イソベンゾフラニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、キノリル基、イソキノリル基、キノキサリニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、チエニル基；及び、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環、インドール環、キノリン環、アクリジン環、ピロリジン環、ジオキササン環、ピペリジン環、モルホリン環、ピペラジン環、カルバゾール環、フラン環、チオフェン環、オキサゾール環、オキサジアゾール環、ベンゾオキサゾール環、チアゾール環、チアジアゾール環、ベンゾチアゾール環、トリアゾール環、イミダゾール環、ベンゾイミダゾール環、ピラン環、及びジベンゾフラン環から形成される基である。これらのうち、2 ~ 1 0 の環炭素原子を有する芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基が好ましい。

10

【 0 0 7 8 】

6 ~ 3 0 の環炭素原子を有する芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基のいくつかの例は、フェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、ピフェニル基、ターフェニル基、クアテルフェニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、フェナントレニル基、プレニル基、クリセニル基、フルオレニル基、及び9, 9 - ジメチルフルオレニル基である。これらのうち、6 ~ 2 0 の環炭素原子を有する芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基が好ましい。

20

【 0 0 7 9 】

式(1)から(2)の A^1 、 A^2 、 X^1 、 X^2 、及び $Y^1 \sim Y^5$ がそれぞれ1つ又は複数の置換基を有する場合は、その置換基は、好ましくは、1 ~ 2 0 の炭素原子を有する直鎖状、分岐状、又は環状のアルキル基；1 ~ 2 0 の炭素原子を有する直鎖状、分岐状、又は環状のアルコキシ基；1 ~ 2 0 の炭素原子を有する直鎖状、分岐状、又は環状のハロアルキル基；1 ~ 1 0 の炭素原子を有する直鎖状、分岐状、又は環状のアルキルシリル基；6 ~ 3 0 の環炭素原子を有するアリールシリル基；シアノ基；ハロゲン原子；6 ~ 3 0 の環炭素原子を有する芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基；あるいは、2 ~ 3 0 の環炭素原子を有する芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基である。

30

【 0 0 8 0 】

1 ~ 2 0 の炭素原子を有する直鎖状、分岐状、又は環状のアルキル基；1 ~ 2 0 の炭素原子を有する直鎖状、分岐状、又は環状のアルコキシ基；1 ~ 2 0 の炭素原子を有する直鎖状、分岐状、又は環状のハロアルキル基；1 ~ 1 0 の炭素原子を有する直鎖状、分岐状、又は環状のアルキルシリル基；6 ~ 3 0 の環炭素原子を有するアリールシリル基；6 ~ 3 0 の環炭素原子を有する芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基；及び2 ~ 3 0 の環炭素原子を有する芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基のいくつかの例は、上述した基である。ハロゲン原子の例はフッ素原子である。

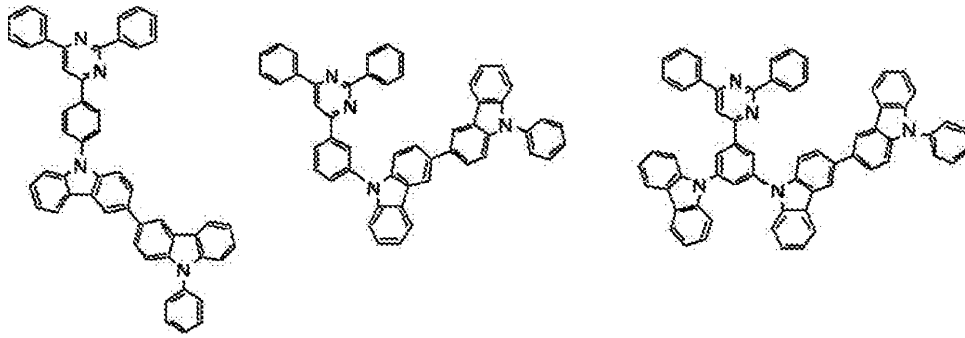
【 0 0 8 1 】

式(1)又は(2)で表される例示の態様によるビスカルバゾール誘導体についての化合物のいくつかの例は以下のとおりである。

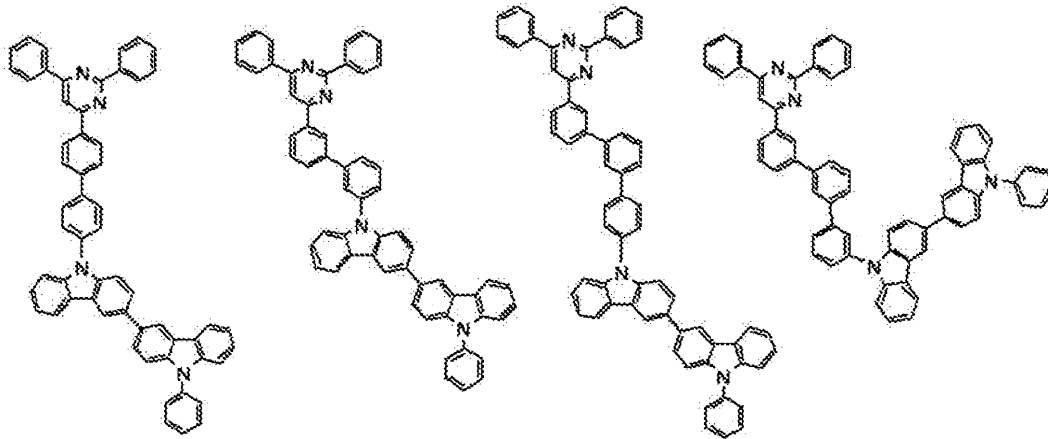
40

【 0 0 8 2 】

【化 1 0】



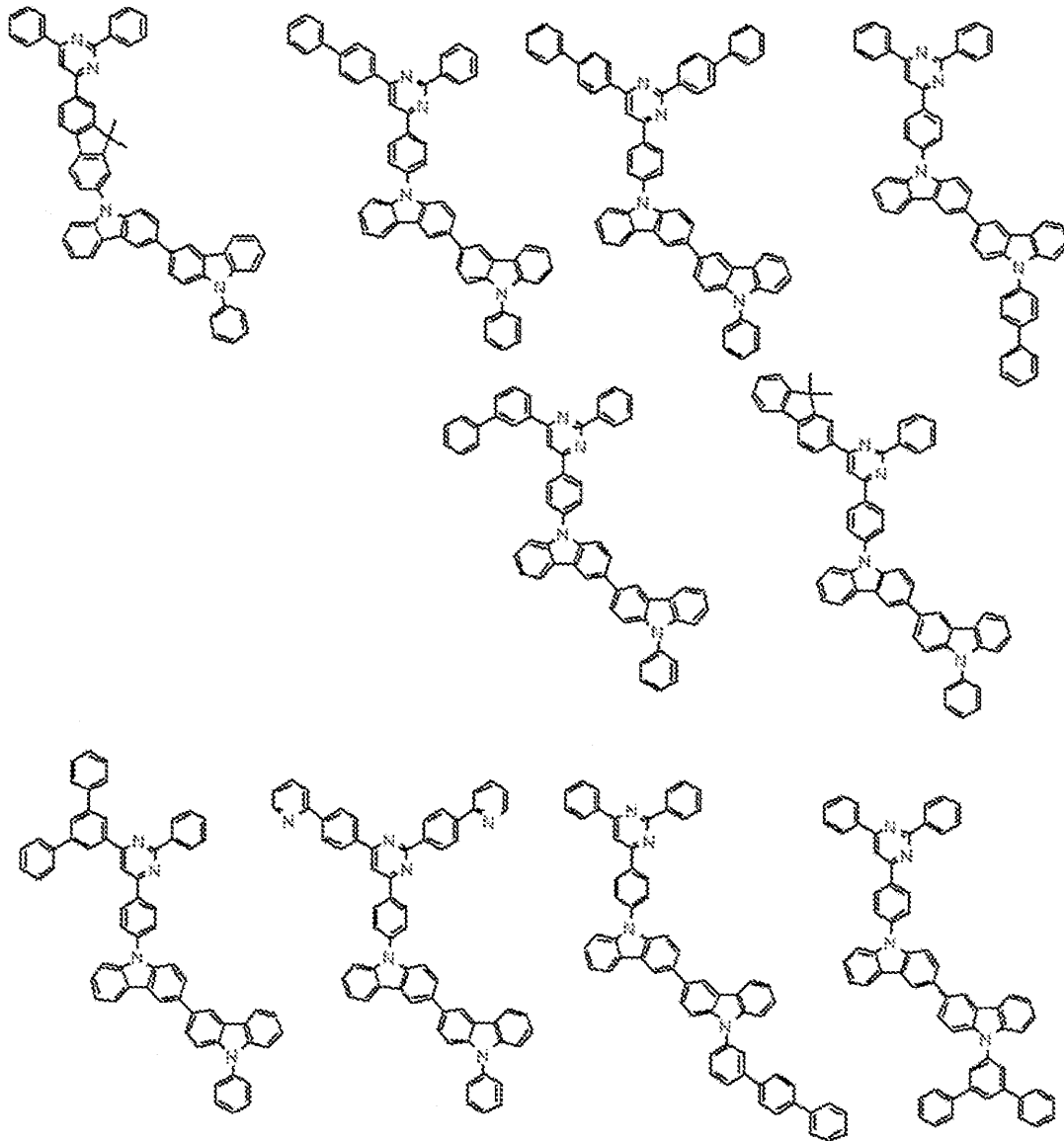
10



20

【 0 0 8 3】

【化 1 1】



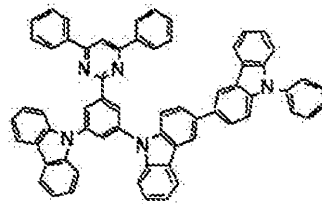
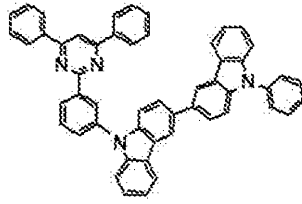
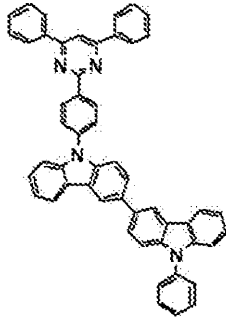
10

20

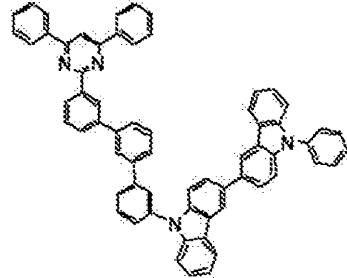
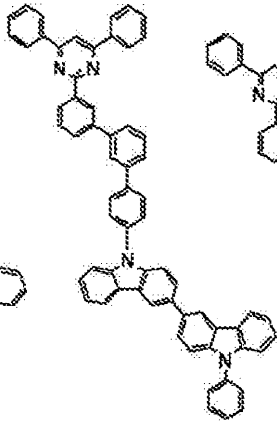
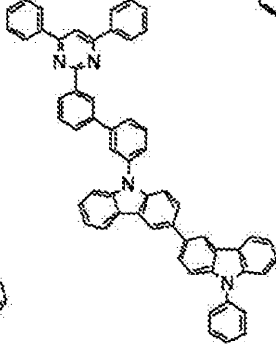
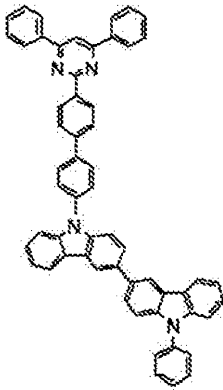
30

【 0 0 8 4 】

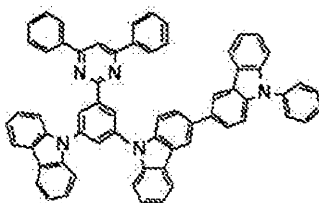
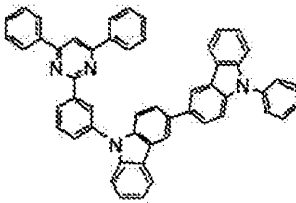
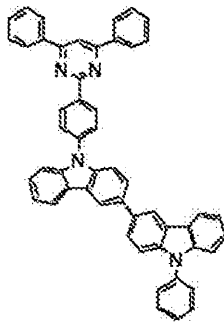
【化 1 2】



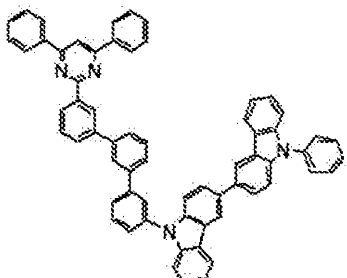
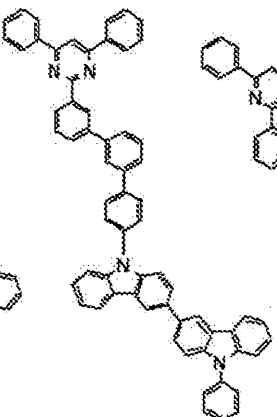
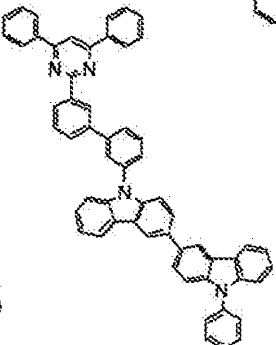
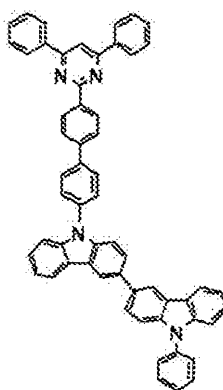
10



20



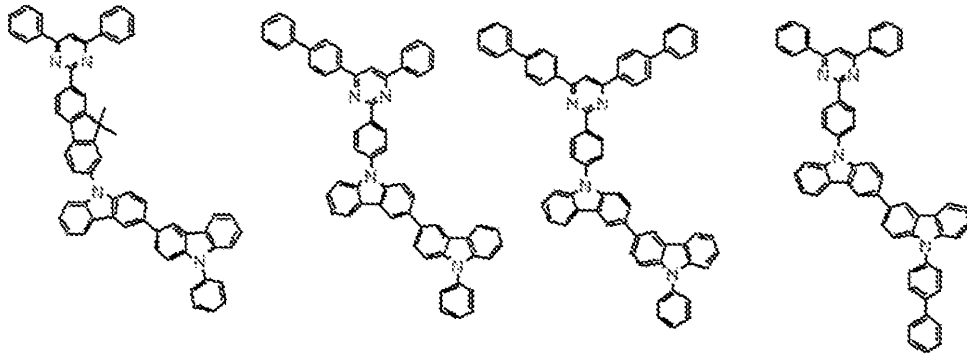
30



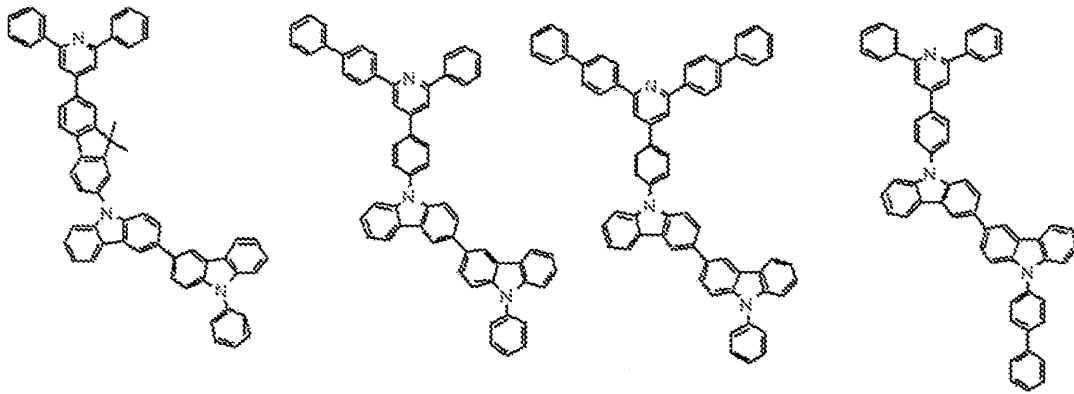
40

【 0 0 8 5 】

【化 1 3】



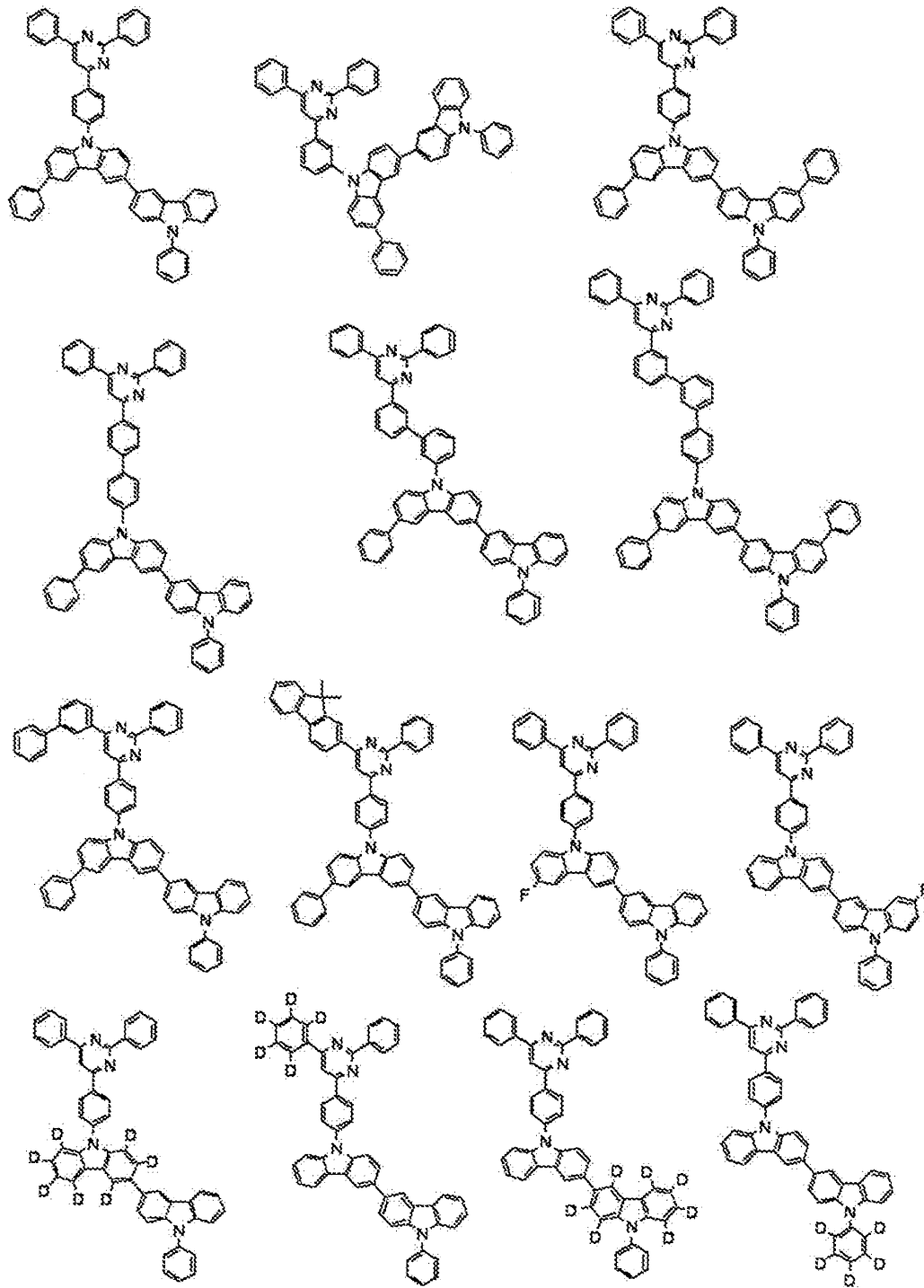
10



20

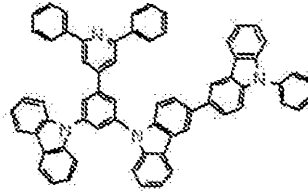
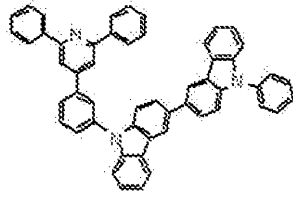
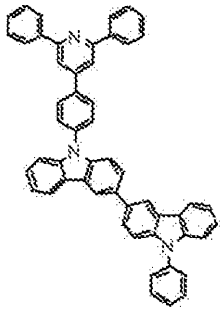
【 0 0 8 6 】

【化 1 4】

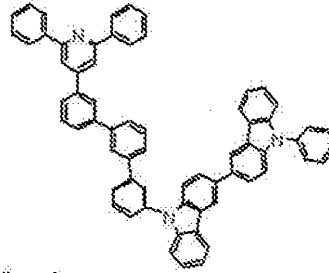
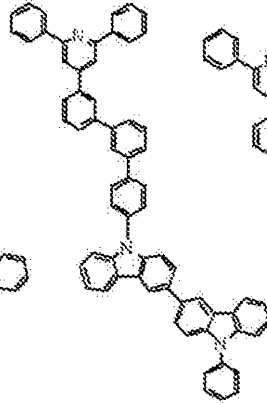
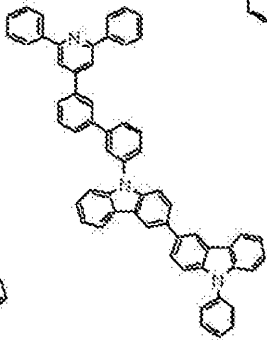
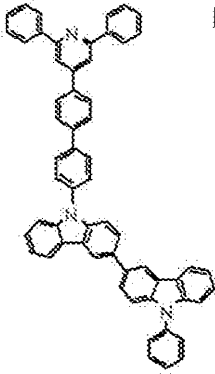


【 0 0 8 7 】

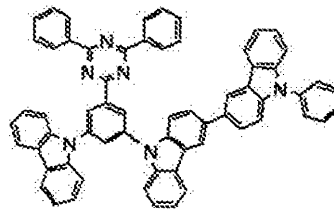
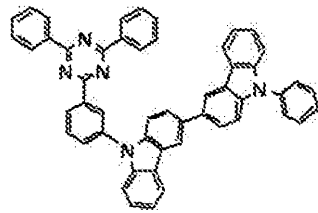
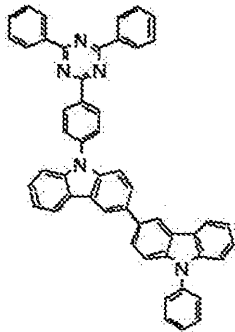
【化 1 5】



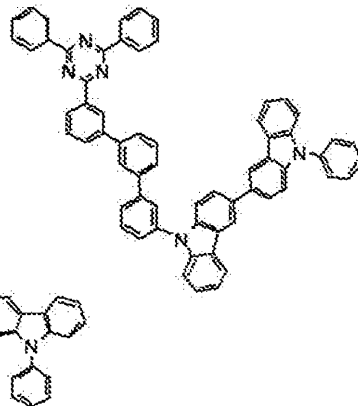
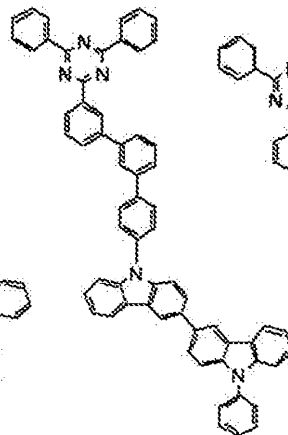
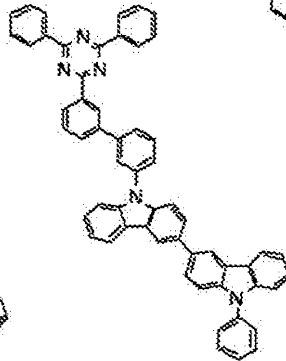
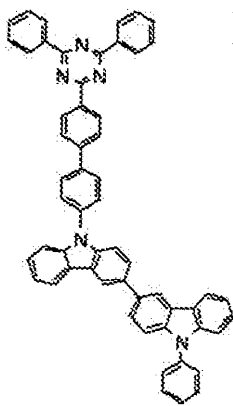
10



20



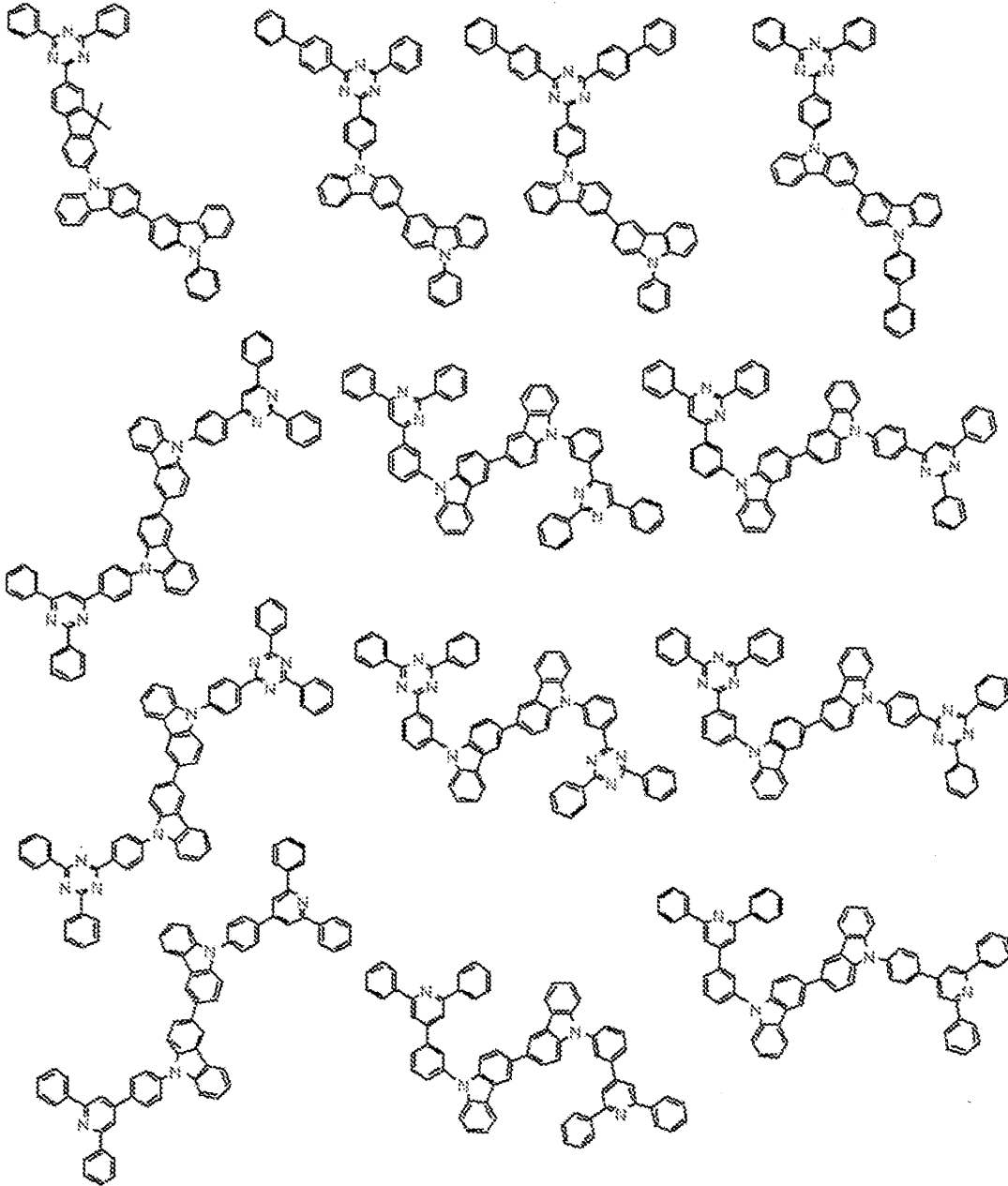
30



40

【 0 0 8 8 】

【化 1 6】



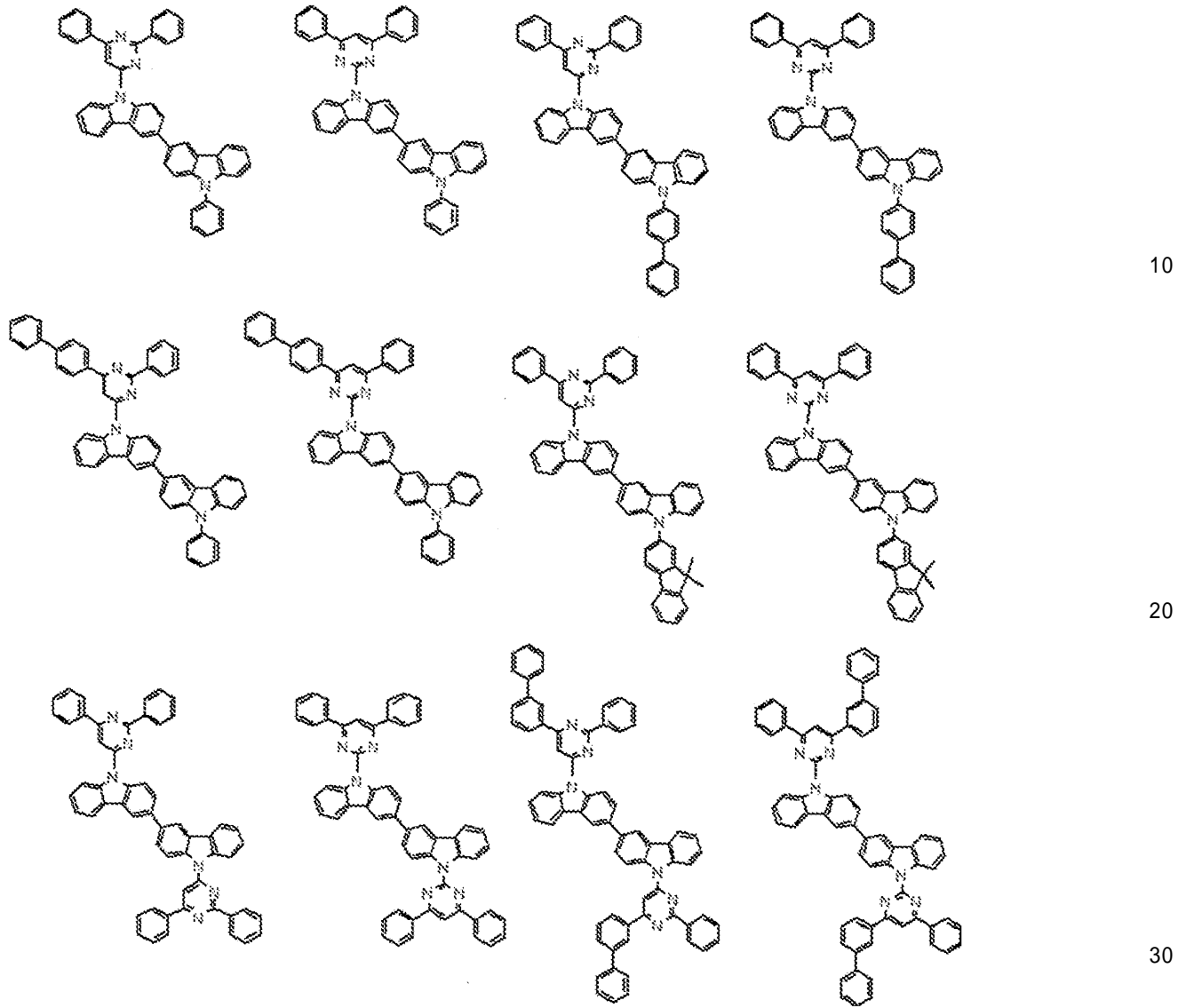
10

20

30

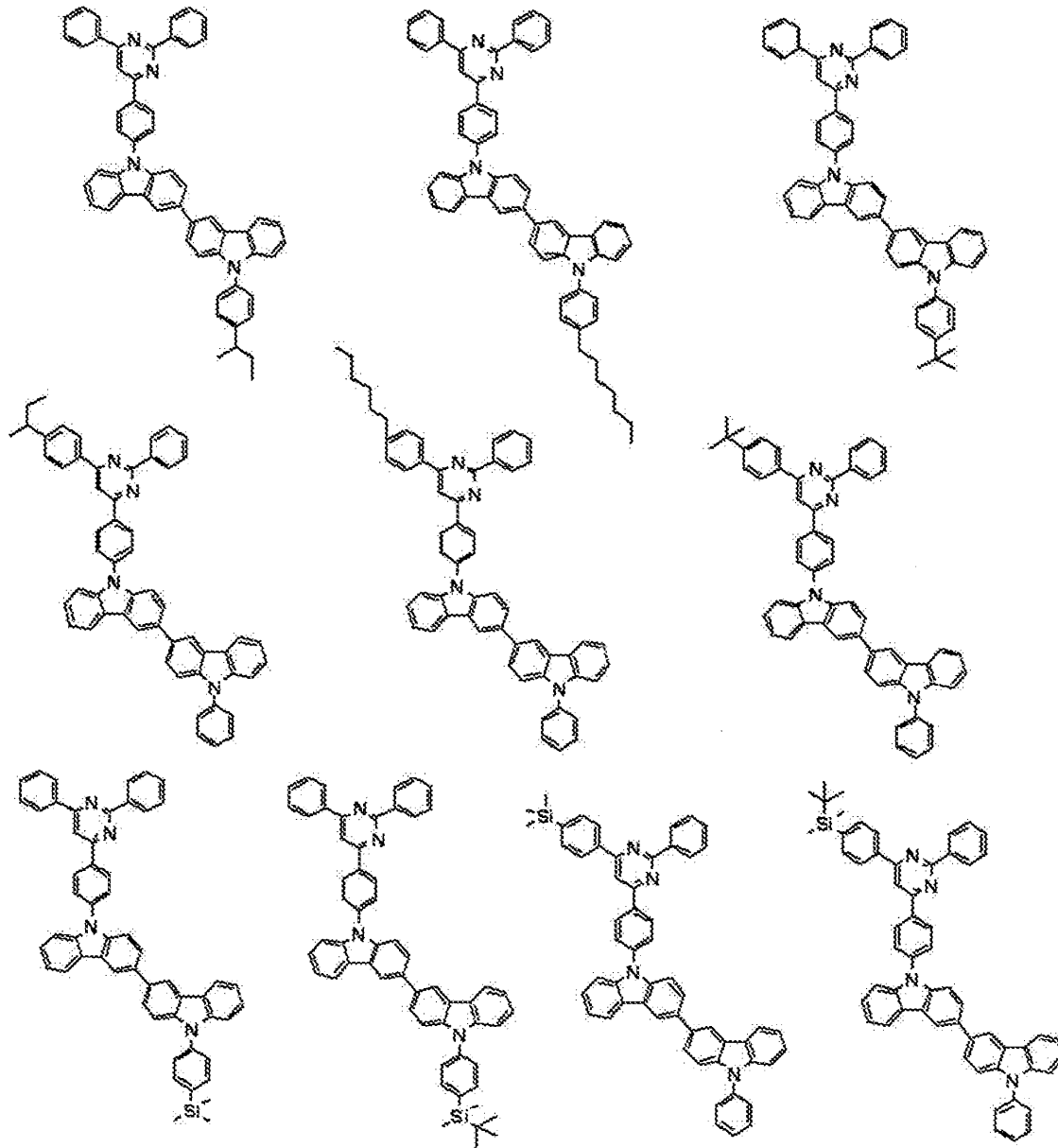
【 0 0 8 9 】

【化 17】



【 0 0 9 0 】

【化 1 8】



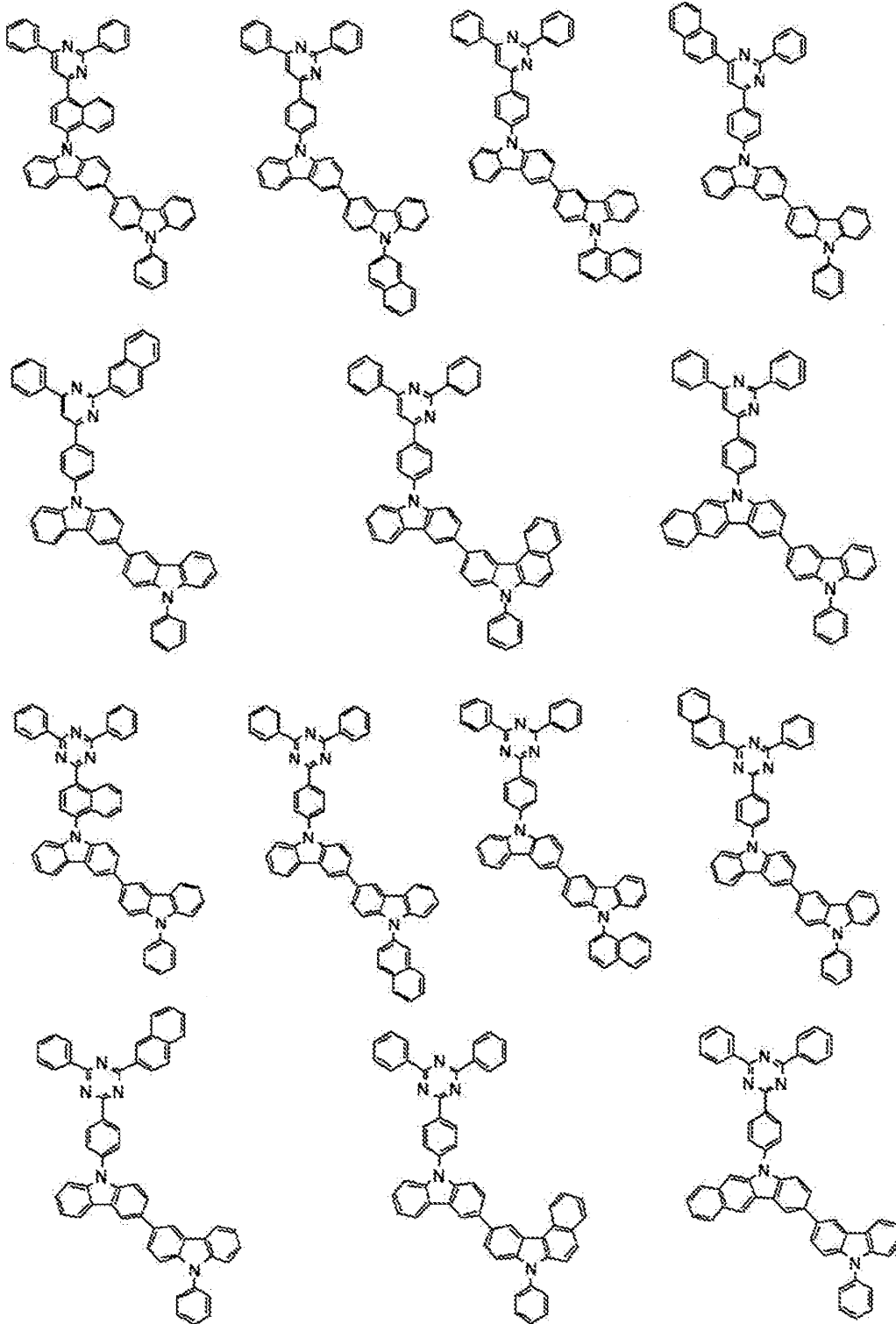
10

20

30

【 0 0 9 1 】

【化 19】



10

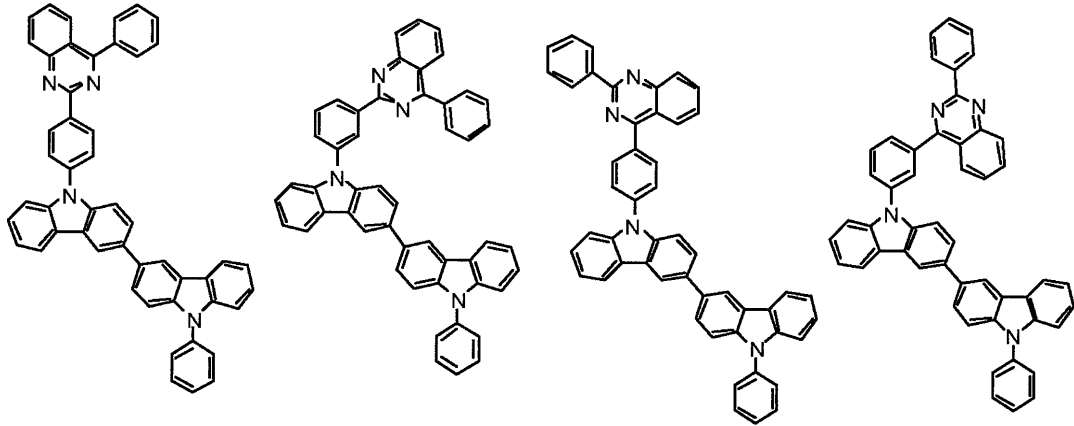
20

30

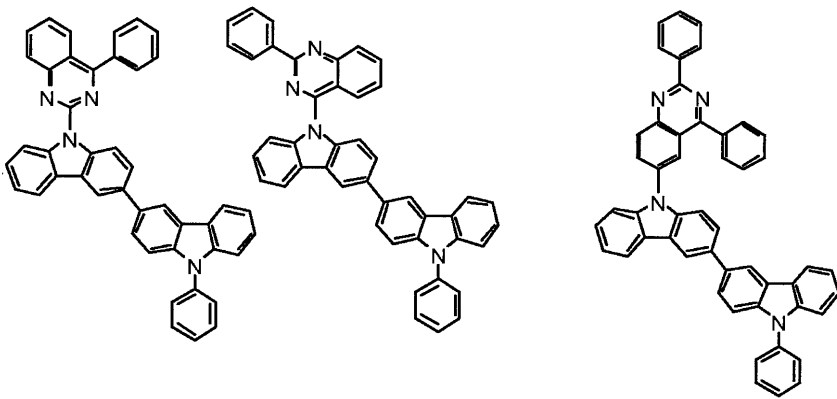
40

【 0 0 9 2 】

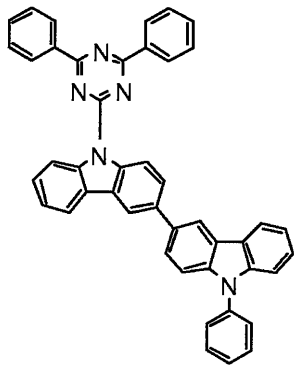
【化 2 0】



10



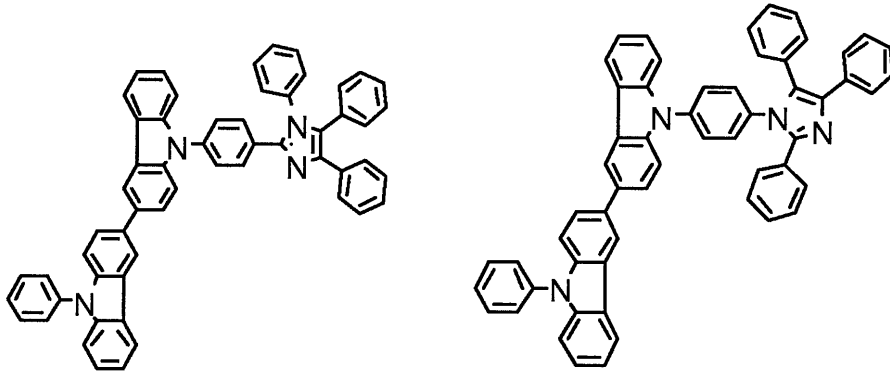
20



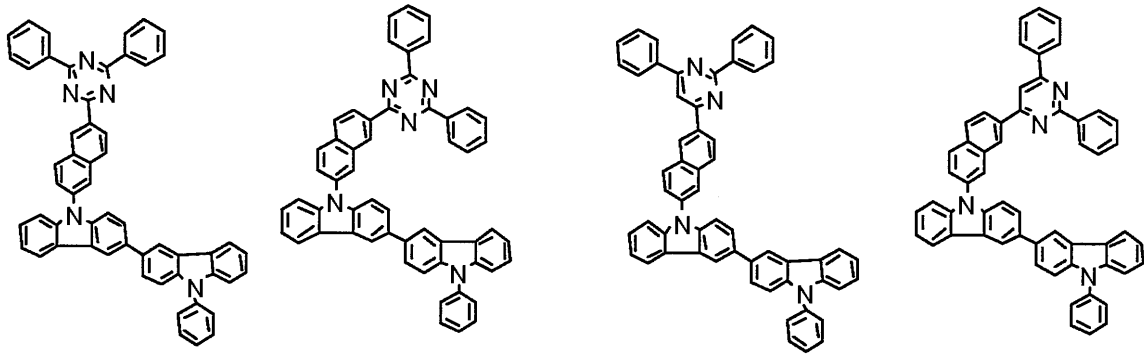
30

【 0 0 9 3】

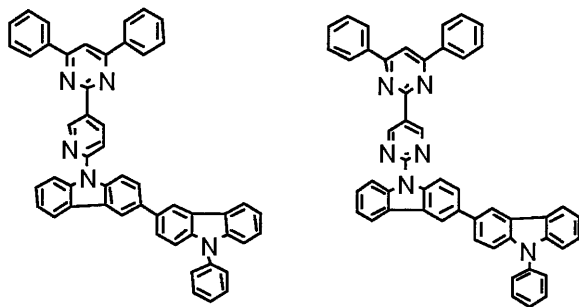
【化 2 1】



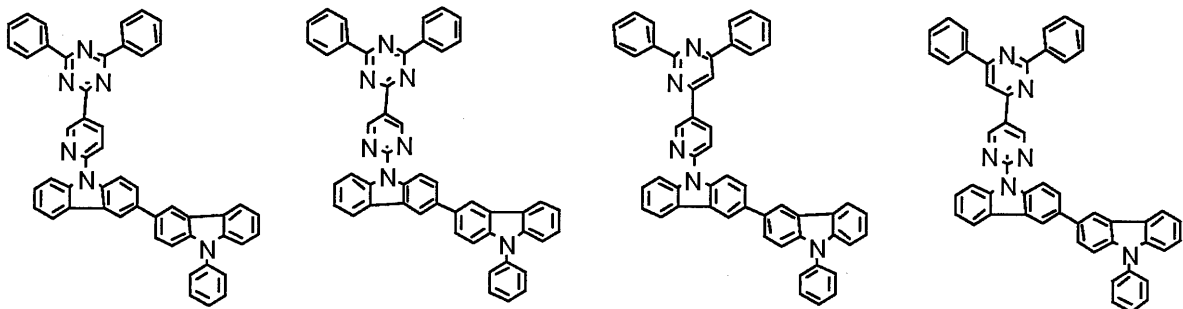
10



20



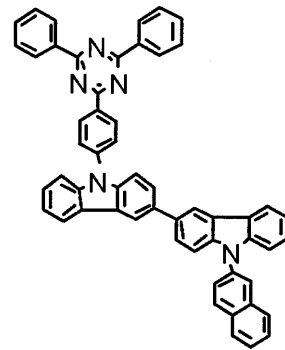
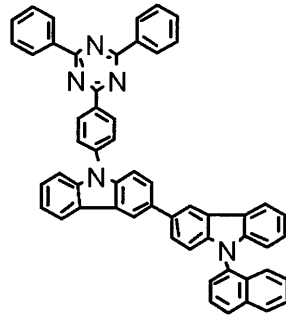
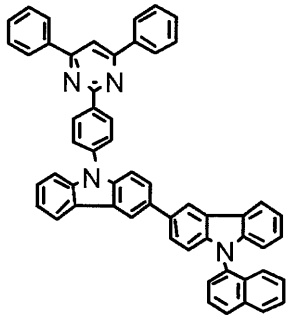
30



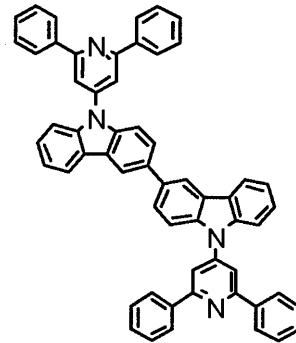
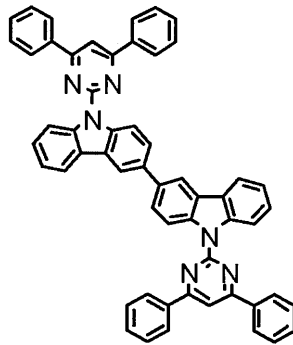
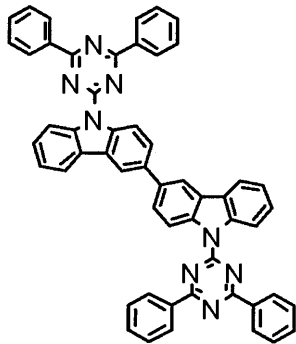
40

【 0 0 9 4 】

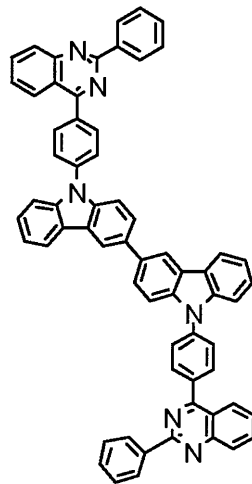
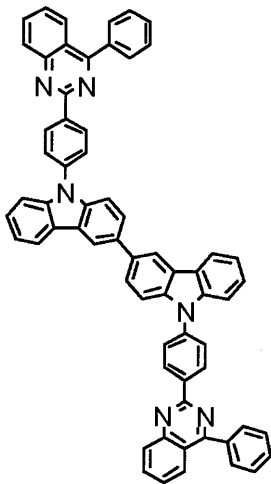
【化 2 2】



10



20



30

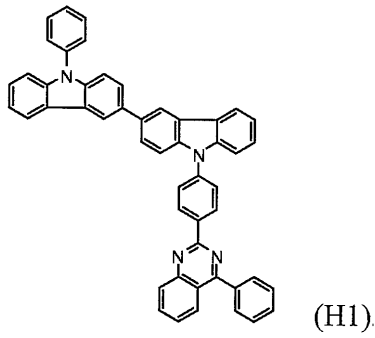
【0095】

40

上述したように、有機ELデバイスの発光層中のホスト物質は、式(1)又は(2)によって表される上に挙げた例のいずれか一つによって表されるビスカルバゾール誘導体化合物を含む。別の態様によれば、有機ELデバイス中のホスト物質は、下記の式(H1)によって表されるビスカルバゾール誘導体であることがさらに好ましい。

【0096】

【化 2 3】



10

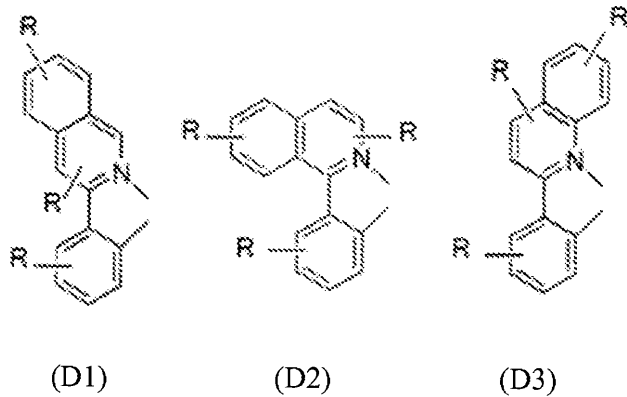
【 0 0 9 7】

[リン光ドーパント物質]

ここで開示する有機 E L デバイスにおいて、赤色リン光ドーパント物質は、下記の式 (D 1)、(D 2)、及び (D 3) によって表される以下の部分化学構造のうちの一つによって表される置換された化学構造を有するリン光有機金属錯体である。

【 0 0 9 8】

【化 2 4】



20

30

【 0 0 9 9】

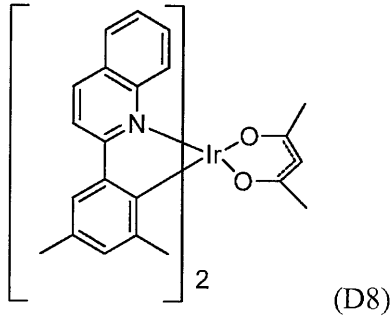
式中、各 R は独立に、H、アルキル、アルケニル、アルキニル、アルキルアリール、C N、C F₃、C_nF_{2n+1}、トリフルオロビニル、C O₂R、C(O)R、N R₂、N O₂、O R、ハロ、アリール、ヘテロアリール、置換アリール、置換ヘテロアリール、又はヘテロ環基からなる群から選択される。

【 0 1 0 0】

ここでの開示の別の側面によれば、赤色リン光ドーパント物質は、下記式で表されるイリジウム化合物である。

【 0 1 0 1】

【化 27】



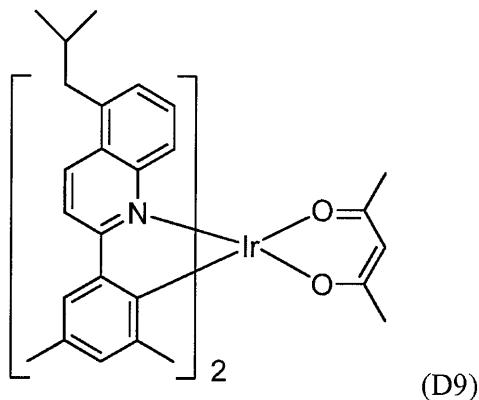
10

【0108】

ここでの開示の別の側面によれば、赤色リン光ドーパント物質は、下記式(D9)を有するイリジウム化合物であることが好ましい。

【0109】

【化 28】



20

【0110】

ここでの開示の別の側面によれば、エレクトロルミネセンスデバイス中のホスト物質は、ビスカルバゾール誘導体化合物(H1)と、式(D8)又は(D9)を有する赤色リン光ドーパント物質とを含む。

30

【0111】

[EIL/ETL]

電子を発光層に注入することを助ける電子注入層又は電子輸送層は、大きな電子移動度を有する。電子注入層はエネルギー準位を調節するために設けられ、それによって、例えば、エネルギー準位の突然の変化を低減することができる。

【0112】

この態様による有機ELデバイスは、発光層とカソードの間に電子注入層を含むことが好ましく、その電子注入層は主成分として窒素含有環状誘導体を含むことが好ましい。その電子注入層は電子輸送層として働くことができる。「主成分として」は、窒素含有環状誘導体が電子注入層中に50質量%以上の含有量で含まれていることを意味することに留意すべきである。

40

【0113】

電子注入層を形成するための電子輸送物質の好ましい例は、少なくとも1つのヘテロ原子を分子内に有する芳香族ヘテロ環化合物である。特に、窒素含有環状誘導体が好ましい。この窒素含有環状誘導体は、窒素含有6員又は5員環骨格を有する芳香族環、あるいは窒素含有6員又は5員環骨格を有する縮合芳香族環状化合物であることが好ましい。

【0114】

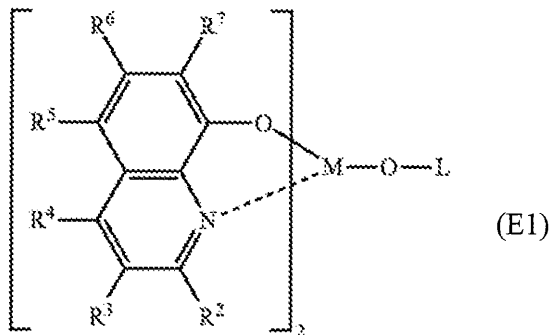
窒素含有環状誘導体は、下記式(E1)で表される窒素含有環状金属キレート錯体によ

50

って好ましくは例示される。

【0115】

【化29】



10

【0116】

式(E1)中の $R^2 \sim R^7$ 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、1~40の炭素原子を有する炭化水素基、アルコキシ基、アリアルコキシ基、アルコキシカルボニル基、又は芳香族ヘテロ環基を表す。これらの基は置換されていても非置換でもよい。

【0117】

ハロゲン原子の例には、フッ素、塩素、臭素、及びヨウ素が含まれる。さらに、置換又は非置換のアミノ基の例には、アルキルアミノ基、アリアルアミノ基、及びアラルキルアミノ基が含まれる。

20

【0118】

アルコキシカルボニル基は $-COOY$ で表される。Yの例は、アルキル基の例と同じである。アルキルアミノ基及びアラルキルアミノ基は $-NQ^1Q^2$ で表される。Q¹及びQ²のそれぞれの例は、アルキル基及びアラルキル基と関連して説明した例と同じであり、Q¹及びQ²のそれぞれについての好ましい例も、アルキル基及びアラルキル基と関連して説明した例と同じである。Q¹及びQ²のうちのいずれ1つが水素原子であってもよい。

【0119】

アリアルアミノ基は $-NAr^1Ar^2$ で表される。Ar¹及びAr²のそれぞれの例は、非縮合芳香族炭化水素基及び縮合芳香族炭化水素基と関連して説明した例と同じである。Ar¹及びAr²のいずれか1つが水素原子であってもよい。

30

【0120】

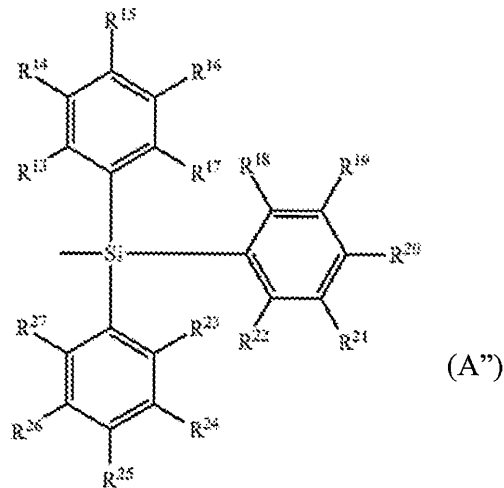
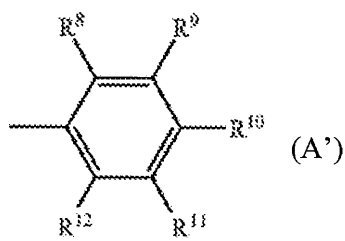
式(E1)中のMは、アルミニウム(Al)、ガリウム(Ga)、又はインジウム(In)を表し、それらの中ではInが好ましい。

【0121】

式(E1)中のLは、下記式(A)又は(A')によって表される基を表す。

【0122】

【化 3 0】



10

【 0 1 2 3】

式 (A') 中、R⁸ ~ R¹² はそれぞれ独立に、水素原子、又は 1 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換の炭化水素基を表す。隣接する基は環状構造を形成してもよい。式 (A'') 中、R¹³ ~ R²⁷ はそれぞれ独立に、水素原子、又は 1 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換の炭化水素基を表す。隣接する基は環状構造を形成してもよい。

20

【 0 1 2 4】

式 (A') 及び (A'') 中の R⁸ ~ R¹² 及び R¹³ ~ R²⁷ のそれぞれによって表される 1 ~ 40 の炭素原子を有する炭化水素基の例は、式 (E 1) 中の R² ~ R⁷ のものと同じである。

【 0 1 2 5】

R⁸ ~ R¹² 及び R¹³ ~ R²⁷ の隣接する組が環状構造を形成する場合に形成される二価の基の例は、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 - ジイル基などである。

30

【 0 1 2 6】

さらに、ある態様によれば、電子輸送層は、式 (1)、(2)、又は (H 1) で表されるビスカルバゾール誘導体化合物を含んでいてもよい。

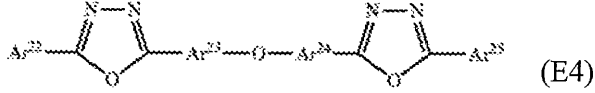
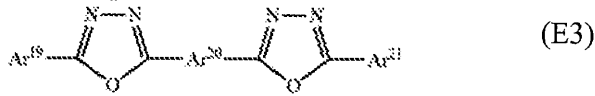
【 0 1 2 7】

電子注入層又は電子輸送層のための電子輸送化合物としては、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、及び窒素含有ヘテロ環誘導体が好ましい。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は、オキシシ (典型的には 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である。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。オキサジアゾール誘導体の例は下記式で表される。

40

【 0 1 2 8】

【化 3 1】



【 0 1 2 9】

上の式中、 Ar^{17} 、 Ar^{18} 、 Ar^{19} 、 Ar^{21} 、 Ar^{22} 、及び Ar^{25} はそれぞれ、6～40の環炭素原子を有する置換もしくは非置換の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基を表す。 Ar^{17} 、 Ar^{19} 、及び Ar^{22} はそれぞれ Ar^{18} 、 Ar^{21} 、及び Ar^{25} と同じであるか、異なってもよい。6～40の環炭素原子を有する芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素の例は、フェニル基、ピフェニル基、アントラニル基、ペリレニル基、及びピレニル基である。それらのための置換基の例は、1～10の炭素原子を有するアルキル基、1～10の炭素原子を有するアルコキシ基、及びシアノ基である。

【 0 1 3 0】

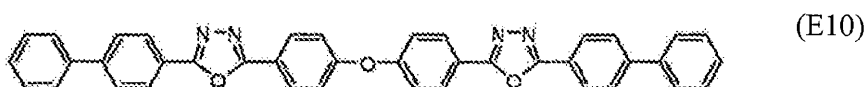
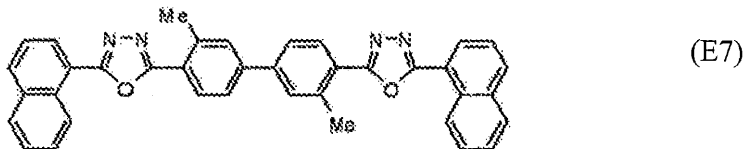
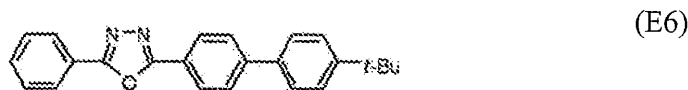
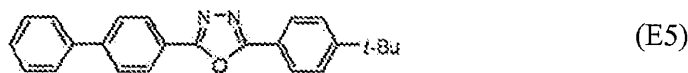
Ar^{20} 、 Ar^{23} 、及び Ar^{24} はそれぞれ、6～40の環炭素原子を有する置換又は非置換の二価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基を表す。 Ar^{23} 及び Ar^{24} は互いに同じであっても異なってもよい。6～40の環炭素原子を有する二価の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基の例は、フェニレン基、ナフチレン基、ピフェニレン基、アントラニレン基、ペリレニレン基、及びピレニレン基である。それらへの置換基の例は、1～10の炭素原子を有するアルキル基、1～10の炭素原子を有するアルコキシ基、及びシアノ基である。

【 0 1 3 1】

好ましくは、そのような電子輸送化合物は薄膜（1又は複数）に都合よく形成されることができる。電子輸送化合物のいくつかの例は以下のとおりである。

【 0 1 3 2】

【化 3 2】



10

20

30

40

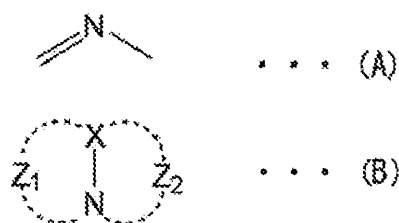
50

【0133】

電子輸送化合物としての窒素含有ヘテロ環誘導体の例は、金属錯体ではない窒素含有化合物であり、その誘導体は下記の一般式のうちの1つによって表される有機化合物から形成される。窒素含有ヘテロ環誘導体の例は、下記式(A)によって表される骨格を有する5員又は6員環誘導体と、下記式(B)で表される構造を有する誘導体である。

【0134】

【化33】



10

【0135】

上の式(B)において、Xは炭素原子又は窒素原子を表す。Z₁及びZ₂はそれぞれ独立に、窒素含有ヘテロ環を形成することができる原子群を表す。

【0136】

好ましくは、上記窒素含有ヘテロ環誘導体は、5員又は6員環を有する窒素含有芳香族多環式基を有する有機化合物である。窒素含有ヘテロ環誘導体が、複数の窒素原子を有するそのような窒素含有芳香族多環列を含む場合、窒素含有ヘテロ環誘導体は、式(A)及び(B)によってそれぞれ表される骨格の組み合わせによって、あるいは式(A)及び(C)によってそれぞれ表される骨格の組み合わせによって形成される骨格を有する窒素含有芳香族多環式有機化合物であってよい。

20

【0137】

【化34】



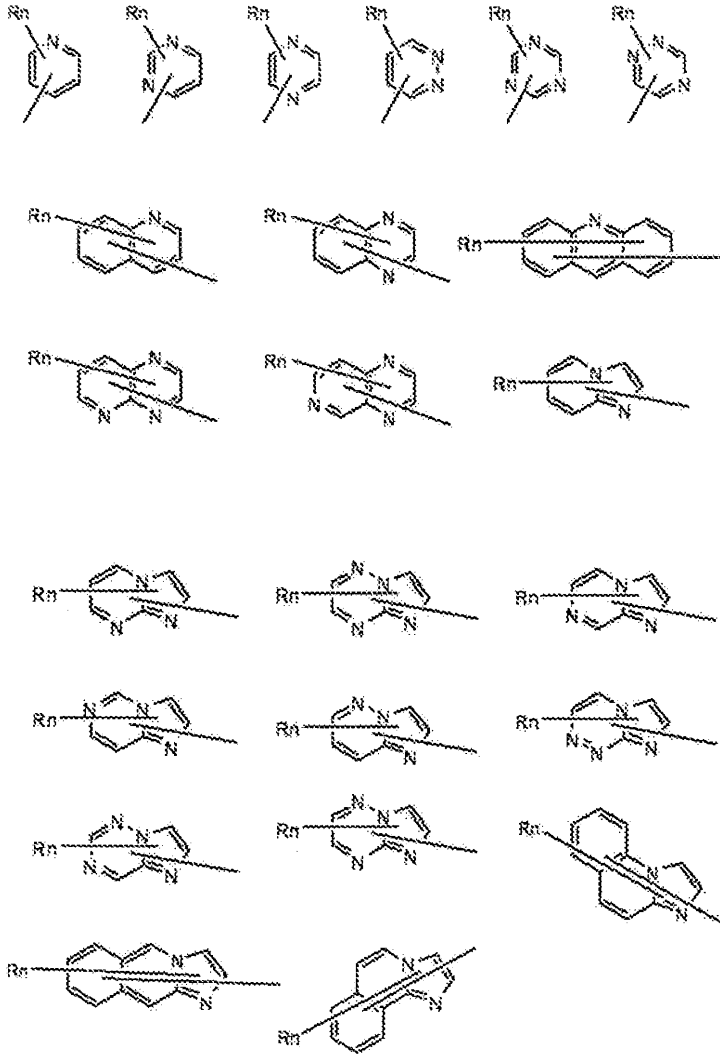
30

【0138】

窒素含有芳香族多環式有機化合物の窒素含有基は、以下の一般式でそれぞれ表される窒素含有ヘテロ環基から選択される。

【0139】

【化 3 5】



10

20

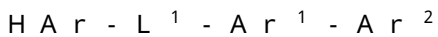
30

【0140】

式中、Rは、6～40の環炭素原子を有する芳香族炭化水素又は縮合芳香族炭化水素基、2～40の環炭素原子を有する芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基、1～20の炭素原子を有するアルキル基、又は1～20の炭素原子を有するアルコキシ基を表し、nは0～5の範囲の整数を表す。nが2以上の整数である場合は、複数のRは互いに同じであっても異なってもよい。

【0141】

好ましい具体的な化合物の例は、下記式：



で表される窒素含有ヘテロ環誘導体である。

40

【0142】

式中、HArは、1～40の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環基を表し；L¹は、単結合、6～40の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、あるいは2～40の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基を表し；Ar¹は、6～40の環炭素原子を有する置換又は非置換の二価の芳香族炭化水素基を表し；Ar²は、6～40の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、あるいは2～40の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基を表す。

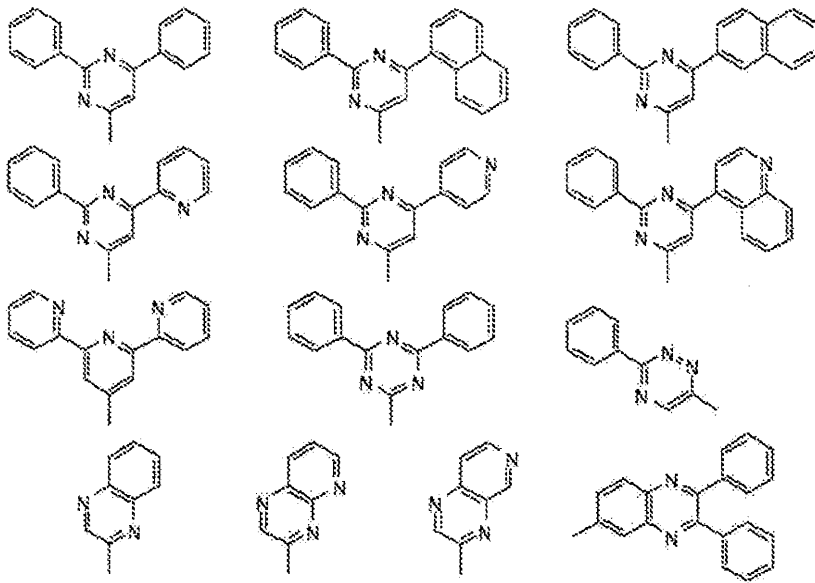
【0143】

50

H A r の例は、以下の群から選択されうる。

【 0 1 4 4 】

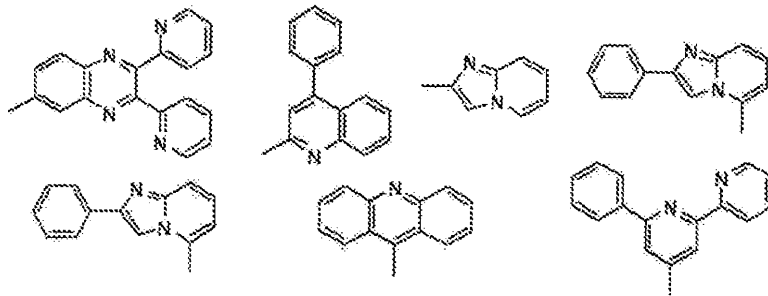
【 化 3 6 】



10

【 0 1 4 5 】

【 化 3 7 】



20

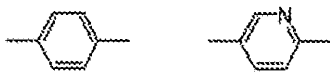
30

【 0 1 4 6 】

L¹ の例は、以下の群から選択されうる。

【 0 1 4 7 】

【 化 3 8 】



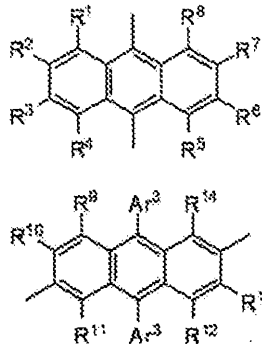
【 0 1 4 8 】

A r¹ の例は、以下の群から選択されうる。

【 0 1 4 9 】

40

【化39】



10

【0150】

式中、R¹ ~ R¹⁴ はそれぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、1 ~ 20 の炭素原子を有するアルキル基、1 ~ 20 の炭素原子を有するアルコキシ基、6 ~ 40 の環炭素原子を有するアリールオキシ基、6 ~ 40 の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、あるいは、2 ~ 40 の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基を表し；Ar³ は、6 ~ 40 の環炭素原子を有する芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、あるいは2 ~ 40 の環炭素原子を有する芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基を表す。窒素含有ヘテロ環誘導体のR¹ ~ R⁸ の全てが水素原子であってもよい。

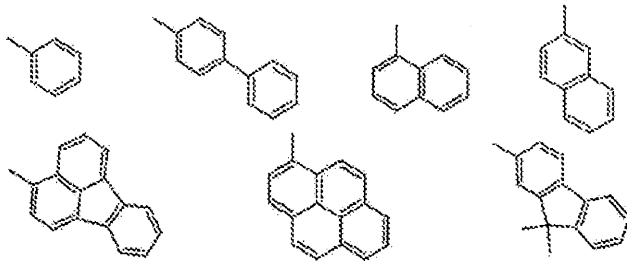
20

【0151】

Ar² の例は以下の群から選択されうる。

【0152】

【化40】



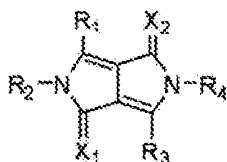
30

【0153】

上の例に加えて、以下の窒素含有芳香族多環式有機化合物（特開平9-3448号公報を参照されたい）を電子輸送化合物として好ましく使用できる。

【0154】

【化41】



40

【0155】

式中、R₁ ~ R₄ はそれぞれ独立に、水素原子、置換又は非置換の脂肪族基、置換又は非置換の脂環式基、置換又は非置換の炭素環式芳香族環状基、あるいは置換又は非置換のヘテロ環基を表し；X₁ 及び X₂ はそれぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、又はジシアノメチレン基を表す。

【0156】

50

電子輸送物質として用いることができる化合物の追加の例は、特開 2000-173774 号公報に見ることができる。

【0157】

電子注入層は、好ましくは、上記の窒素含有環状誘導体に加えて、無機化合物、例えば、絶縁体又は半導体を含む。そのような絶縁体又は半導体は、電子注入層に含まれる場合、電流漏えいを効果的に防止でき、それによって電子注入層の電子注入機能を高めることができる。

【0158】

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、アルカリ金属ハロゲン化物、及びアルカリ土類金属ハロゲン化物からなる群から選択される少なくとも1つの金属化合物を用いることが好ましい。アルカリ金属カルコゲニドなどから電子注入層を形成することによって、電子注入機能を好ましいことにさらに高めることができる。特に、アルカリ金属カルコゲニドの好ましい例は、 Li_2O 、 K_2O 、 Na_2S 、 Na_2Se 、及び Na_2O であり、アルカリ土類金属カルコゲニドの好ましい例は、 CaO 、 BaO 、 SrO 、 BeO 、 BaS 、及び CaSe である。アルカリ金属のハロゲン化物の好ましい例は、 LiF 、 NaF 、 KF 、 LiCl 、 KCl 、及び NaCl である。アルカリ土類金属のハロゲン化物の好ましい例は、フッ化物、例えば、 CaF_2 、 BaF_2 、 SrF_2 、 MgF_2 、及び BeF_2 、並びにフッ化物以外のハロゲン化物である。

【0159】

半導体の例は、 Ba 、 Ca 、 Sr 、 Yb 、 Al 、 Ga 、 In 、 Li 、 Na 、 Cd 、 Mg 、 Si 、 Ta 、 Sb 、及び Zn から選択される少なくとも1種の元素を含む、酸化物、窒化物、又は酸窒化物の1つであるか又は2つ以上の組み合わせである。電子注入層を形成するための無機化合物は、好ましくは、微結晶又は非晶質の半導体膜である。電子注入層がそのような絶縁体膜で形成されている場合には、より均一な薄膜が形成でき、それによって暗点などの画素の欠陥を低減できる。そのような無機化合物の例は、上述した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である。

【0160】

電子注入層がそのような絶縁体又はそのような半導体を含む場合、その厚さは好ましくは約0.1 nm ~ 15 nmの範囲である。この例示態様における電子注入層は、上述した還元を引き起こすドーパントを含むことが好ましい。

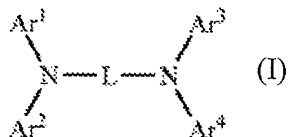
【0161】

[HIL/HTL]

正孔注入層又は正孔輸送層（正孔注入/輸送層を含む）は、芳香族アミン化合物、例えば下記一般式（I）で表される芳香族アミン誘導体を含んでいてもよい。

【0162】

【化42】



【0163】

式（I）中、 $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^4$ はそれぞれ、6 ~ 50 の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、2 ~ 40 の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基、あるいは前記の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基を前記の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基と結合させることによって形成される基を表す。

【0164】

一般式（I）で表される化合物のいくつかの例は、例えば、米国特許出願公開第 201

10

20

30

40

50

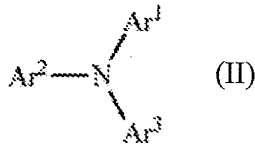
1 / 0 2 7 8 5 5 5 号公報に見ることができ、その開示を本明細書に援用する。しかし、一般式 (I) で表される化合物はそれらに限定されない。

【 0 1 6 5 】

下記式 (I I) で表される芳香族アミンも、正孔注入層又は正孔輸送層を形成するために用いることができる。

【 0 1 6 6 】

【 化 4 3 】



10

【 0 1 6 7 】

式 (I I) 中、 $Ar^1 \sim Ar^3$ はそれぞれ、上記式 (I) の $Ar^1 \sim Ar^4$ と同じものを表す。一般式 (I I) で表される化合物のいくつかの例は、例えば、米国特許出願公開第 2 0 1 1 / 0 2 7 8 5 5 5 号公報に見ることができ、その開示を本明細書に援用する。しかし、一般式 (I I) で表される化合物はそれらに限定されない。

【 0 1 6 8 】

ここに記載した様々な態様の有機 E L デバイスの各層を形成する方法は特に限定されない。真空蒸着又はスピコーティングなどの従来公知の方法を、それらの層を形成するために用いることができる。この例示態様による有機 E L デバイスに用いられる式 (1 A) 又は (1 B) で表される化合物を含む有機薄膜層は、慣用されているコーティング法、例えば、真空蒸着、分子ビームエピタキシー (M B E 法)、及び溶液を用いるコーティング法、例えば、ディッピング、スピコーティング、キャストリング、パーコーティング、及びロールコーティングによって形成することができる。

20

【 0 1 6 9 】

この例示態様による有機 E L デバイスの各有機層の厚さは特に限定されないが、その厚さは数ナノメートルから $1 \mu m$ の範囲であることが一般的に好ましく、なぜなら、過度に薄くした膜はピンホールなどの欠点を伴うおそれがあり、その一方で過度に厚くした膜は高電圧を印加することを必要とし、効率が低下するからである。

30

【 0 1 7 0 】

ここでの開示による O L E D の態様においては、カソードとアノードの間に複数の有機薄膜層が備えられ；その複数の有機薄膜層が、少なくとも 1 つのリン光ドーパント物質と少なくとも 1 つのビスカルバゾール誘導体ホスト物質を含む少なくとも 1 つのリン光発光層を含み、これは以下に説明するとおりである。

【 0 1 7 1 】

上述したように、高効率及び長寿命を有するリン光発光層は本発明の教示にしたがって調製することができ、特に、高い作動温度において高い安定性を有する。

【 0 1 7 2 】

これに関し、ここで開示する O L E D を構成する物質の励起三重項エネルギーギャップ $E_g(T)$ はそのリン光発光スペクトルに基づいて規定することができ、エネルギーギャップが (通常用いられているように) 以下のように規定されうることを、ここでの開示において例として示されている。

40

【 0 1 7 3 】

それぞれの物質を E P A 溶媒 (体積比で、ジエチルエーテル : イソペンタン : エタノール = 5 : 5 : 2) 中に $10 \mu mol/L$ の濃度で溶かして、リン光を測定するためのサンプルを調製する。このリン光測定用サンプルを石英セルに入れ、 $77 K$ に冷やし、次に励起光を照射して、放射されたリン光の波長を測定する。

【 0 1 7 4 】

そうして短波長側で得られるリン光発光スペクトルの増大に基づいて接線を引き、その

50

接線と基線との交点の波長の値をエネルギー値に変換し、これが励起三重項エネルギーギャップ $E_g(T)$ として設定される。市販されている測定装置 F-4500 (日立社製) をその測定に使用することができる。

【0175】

しかし、三重項エネルギーギャップとして定義されることができる値は、それが本発明の範囲から離れない限り、上記の方法によることなく用いることができる。

【0176】

[共ホストデバイス中のホスト物質としてのビスカルバゾール誘導体]

別の態様によれば、有機エレクトロルミネッセンスデバイスは、カソード、アノード、及びそのアノードとカソードの間に備えられた複数の有機薄膜層を含む。その複数の有機薄膜層は、少なくとも1つの発光層を含み、かつ発光層のうち少なくとも1つが第一のホスト物質、その第一のホスト物質とは異なる第二のホスト物質、及び赤色リン光ドーパント物質を含む。

10

【0177】

第一のホスト物質は、上述したように、上記式(1)で表される、そして好ましくは上記式(2)で表されるビスカルバゾール誘導体化合物である。ここでの開示の別の側面によれば、より好ましくは、第一のホスト物質は、上述した式(H1)で表されるビスカルバゾール誘導体化合物である。この態様における赤色リン光ドーパント物質は、上述した式(D1)、(D2)、及び(D3)によって表される部分化学構造のうちの一つによって表される置換化学構造を有するリン光有機金属錯体である。

20

【0178】

しかし、上で先に述べたとおり、多層型有機ELデバイスの発光効率及び寿命は、その有機ELデバイス全体のキャリアバランスに左右される。キャリアバランスを制御するための主な因子は、有機層(複数)のそれぞれのキャリア輸送能と、別々の有機層(複数)の間の界面領域におけるキャリア注入能である。発光層(再結合領域)において、隣接する層へのキャリア注入能のバランスをとるためには、複数のホスト物質によってキャリアバランスを調節することが好ましい。特に、第一のホスト物質に加えて、第二のホスト物質が、発光層中の共ホストとして適切に選択されることが好ましい。ここで開示している組み合わせ物の共ホストシステムは、そのような強化をもたらすことを発見した。

30

【0179】

ここでの開示の別の側面によれば、この態様における赤色リン光ドーパント物質は、上述したように、式(D4)、(D5)、(D6)、又は(D7)によって表されるイリジウム化合物であることが好ましい。ここでの開示の別の側面によれば、この態様における赤色リン光ドーパント物質は、上述したように、式(D8)又は(D9)で表されるイリジウム化合物であることがさらに好ましい。

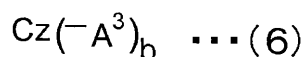
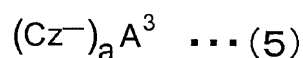
【0180】

低い電子注入能力を有する物質(例えば、金属キレート錯体)をカソードとして用いる場合は、発光層中でのキャリアバランスは、カソードのほうにシフトするようになる。そのような不利な点を改善するためには、第二のホスト物質として、高い電子輸送能を有する物質を選択することが好ましい。特に、この態様の第二のホスト物質は、以下に示す式(5)又は(6)で表されることが好ましい。

40

【0181】

【化44】



【0182】

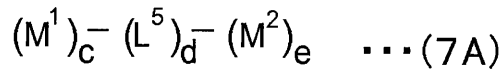
式(5)及び(6)において: Czは、置換又は非置換のアリールカルバゾリル基又は

50

カルバゾリルアリアル基を表し； A^3 は、下の式（7A）で表される基を表し； a 及び b はそれぞれ 1 ~ 3 の整数を表す。

【0183】

【化45】



【0184】

式（7A）において、 M^1 及び M^2 はそれぞれ独立に、2 ~ 40 の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有芳香族ヘテロ環基又は窒素含有縮合芳香族ヘテロ環基を表し； M^1 及び M^2 は同じであるか異なっていてよく； L^5 は、単結合、6 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、5 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換のシクロアルキレン基、2 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基、あるいは2 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族ヘテロ環基を表し； c は 0 ~ 2 の整数を表し； d は 1 ~ 2 の整数を表し； e は 0 ~ 2 の整数を表し； 且つ、 $c + e$ は 1 以上を表す。

10

【0185】

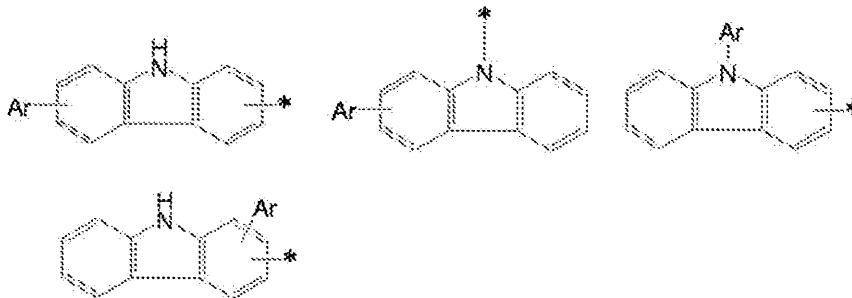
[式（5）及び（6）で表される化合物]

Cz は、置換もしくは非置換のアリアルカルバゾリル基、又は置換もしくは非置換のカルバゾリルアリアル基である。アリアルカルバゾリル基とは、置換基として少なくとも1つのアリアル基又はヘテロアリアル基を有するカルバゾリル基を意味し、この場合、そのアリアル基又はヘテロアリアル基が置換している位置はどこでもよい。具体例は以下のものである。以下の化学式中、Ar はアリアル基又はヘテロアリアル基を表す。* は別の基が結合している位置を表す。

20

【0186】

【化46】



30

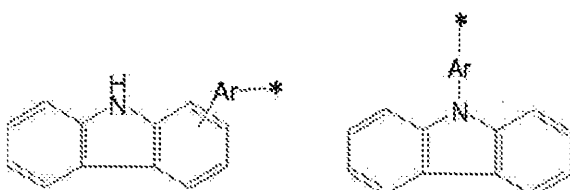
【0187】

カルバゾリルアリアル基とは、置換基として少なくとも1つのカルバゾリル基を有するアリアル基を意味し、この場合、そのアリアル基が置換されている位置はどこでもよい。具体例は以下のとおりである。下記の化学式中、Ar はアリアル基を表し、* は別の基が結合している位置を表す。

40

【0188】

【化47】



50

【0189】

置換アリールカルバゾリル基とは、置換位置に関係なく少なくとも1つの置換基を有するアリールカルバゾリル基を意味する。置換カルバゾリルアリール基とは、置換位置に関係なく少なくとも1つの置換基を有するカルバゾールアリール基を意味する。

【0190】

式(5)及び(6)において、a及びbはそれぞれ1~3の整数を表す。アリールカルバゾリル基又はカルバゾリルアリール基中のアリール基は、6~30の炭素原子を有することが好ましい。そのアリール基の例は、フェニル基、ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、ナфтаセニル基、ピレニル基、フルオレニル基、ピフェニル基、及びターフェニル基であり、それらのうち、フェニル基、ナフチル基、ピフェニル基、及びターフェニル基が好ましい。

10

【0191】

アリールカルバゾリル基中のヘテロアリール基の例は、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、アジリジン、アザインドリジン、インドリジン、イミダゾール、インドール、イソインドール、インダゾール、プリン、プテリジン、 β -カルボリン、ナフチリジン、キノキサリン、ターピリジン、ピピリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、及びイミダゾピリジンの環に基づいて形成される基であり、これらの環のなかでは、ピリジン、ターピリジン、ピリミジン、イミダゾピリジン、及びトリアジンの環が好ましい。

20

【0192】

式(5)及び(6)中の A^3 は、式(7A)で表される基である。

【0193】

式(7A)中、 M^1 及び M^2 はそれぞれ独立に、2~40の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環基を表す。 M^1 及び M^2 は同じであっても異なってもよい。

【0194】

アリールカルバゾリル基中の窒素含有ヘテロ環の例は、ピリジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、アジリジン、アザインドリジン、インドリジン、イミダゾール、インドール、イソインドール、インダゾール、プリン、プテリジン、 β -カルボリン、ナフチリジン、キノキサリン、ターピリジン、ピピリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、及びイミダゾピリジンの環に基づいて形成される基であり、これらのなかでも、ピリジン、ターピリジン、ピリミジン、イミダゾピリジン、及びトリアジンの環が好ましい。

30

【0195】

L^5 は、単結合、6~30の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、5~30の炭素原子を有する置換又は非置換のシクロアルキレン基、あるいは2~30の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基を表す。cは0~2の整数を表し、dは1~2の整数を表し、eは0~2の整数を表し、c+eは1以上を表す。

【0196】

6~30の炭素原子を有する芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基の例は、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アントラニル基、フェナントリル基、ピレニル基、クリセニル基、フルオランテニル基、及びパーフルオロアリール基、フルオレニル基、及び9,9-ジメチルフルオレニル基であり、これらのなかでも、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、及びパーフルオロアリール基が好ましい。

40

【0197】

5~30の炭素原子を有するシクロアルキレン基の例は、シクロペンチレン基、シクロヘキシレン基、及びシクロヘプチレン基であり、これらのなかでも、シクロヘキシレン基が好ましい。

【0198】

50

2 ~ 30 の炭素原子を有する芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基の例は、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、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、9 - カルバゾリル基、1 - フェナントリジニル基、2 - フェナントリジニル基、3 - フェナントリジニル基、4 - フェナントリジニル基、6 - フェナントリジニル基、7 - フェナントリジニル基、8 - フェナントリジニル基、9 - フェナントリジニル基、10 - フェナントリジニル基、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 - フェナントロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 3 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 5 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 8 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 9 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 10 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 3 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 4 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 5 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 6 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 7 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 9 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 10 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 2 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 4 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 6 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 8 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナントロリン - 2 - イル基、1, 10 - フェナントロリン - 3 - イル基、1, 10 - フェナントロリン - 4 - イル基、1, 10 - フェナントロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 1 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 3 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 4 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 6 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 7 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 8 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 10 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 1 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 3 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 4 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 5 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 6 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 7 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 9 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 10 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 1 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 3 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 4 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 5 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 6 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 8 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 9 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 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 -

10

20

30

40

50

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、及び 4 - t - ブチル - 3 - インドリル基、であり、これらのなかでも、ピリジニル基及びキノリル基が好ましい。

【0199】

式(5)、(6)、及び(7A)中のCz、M¹、及びM²への置換基のいくつかの例は、ハロゲン原子、例えば、塩素、臭素、及びフッ素、カルバゾール基、ヒドロキシル基、置換又は非置換のアミノ基、ニトロ基、シアノ基、シリル基、トリフルオロメチル基、カルボニル基、カルボキシル基、置換又は非置換のアルキル基、置換又は非置換のアルケニル基、置換又は非置換のアリールアルキル基、置換又は非置換の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基、置換又は非置換のアラルキル基、置換又は非置換のアリールオキシ基、及び置換又は非置換のアルキルオキシ基である。これらのうち、フッ素原子、メチル基、パーフルオロフェニレン基、フェニル基、ナフチル基、ピリジル基、ピラジル基、ピリミジル基、アダマンチル基、ベンジル基、シアノ基、及びシリル基が好ましい。

【0200】

式(5)又は(6)で表される化合物の結合パターンを、a及びbの値にしたがって、以下の表1に示す。

【0201】

【表1】

[表1]

| a = b = 1 | a = 2 | a = 3 | b = 2 | b = 3 |
|-------------------|-----------------------|----------------------------------|-----------------------------------|--|
| Cz-A ³ | Cz-A ³ -Cz | Cz-A ³ -Cz Cz | A ³ -Cz-A ³ | A ³ -Cz-A ³ A ³ |

【0202】

式(7A)で表される化合物の結合パターンを、c、d、及びeの値にしたがって以下の表2及び3に示す。

【0203】

10

20

30

【表2】

[表2]

| No | c | d | e | 結合パターン |
|------|---|---|---|---|
| (1) | 0 | 1 | 1 | $L^5 - M^2$ |
| (2) | 0 | 1 | 2 | $L^5 - M^2 - M^2, M^2 - L^5 - M^2$ |
| (3) | 0 | 2 | 1 | $L^5 - L^5 - M^2, L^5 - M^2 - L^5$ |
| (4) | 0 | 2 | 2 | $L^5 - L^5 - M^2 - M^2, M^2 - L^5 - L^5 - M^2,$ $L^5 - M^2 - M^2 - L^5, M^2 - L^5 - M^2, L^5 - M^2 - L^5$ $\begin{matrix} L^5 & & L^5 & & L^5 & & L^5 \\ & & & & & & \\ L^5 & & L^5 & & L^5 & & M^2 \end{matrix}$ |
| (5) | 1 | 1 | 0 | [1]と同じ (M2をM1で置き換えた) |
| (6) | 1 | 1 | 1 | $M^1 - L^5 - M^2$ |
| (7) | 1 | 1 | 2 | $M^1 - L^5 - M^2$ $M^1 - L^5 - M^2 - M^2, \begin{matrix} M^1 - L^5 - M^2 \\ \\ M^2 \end{matrix}$ |
| (8) | 1 | 2 | 0 | [3]と同じ (M2をM1で置き換えた) |
| (9) | 1 | 2 | 1 | $M^1 - L^5 - L^5 - M^2, L^5 - M^1 - L^5 - M^2,$ $L^5 - M^1 - L^5 - M^2$ |
| (10) | 1 | 2 | 2 | $M^1 - L^5 - L^5 - M^2 - M^2, M^2 - L^5 - M^1 - L^5 - M^2,$ $M^1 - L^5 - L^5$ $M^2 - M^2 - L^5 - M^1 - L^5, \begin{matrix} M^1 - L^5 - L^5 \\ \\ M^2 \end{matrix} M^2$ $M^1 - L^5 - L^5 - M^2$ $\begin{matrix} M^1 - L^5 - L^5 - M^2 \\ \\ M^2 \end{matrix}$ $L^5 - L^5 - M^2 - M^2, L^5 - M^1 - L^5 - M^2, \begin{matrix} M^2 \\ \\ M^1 - L^5 - L^5 \\ \\ 2 \end{matrix}$ |
| (11) | 2 | 1 | 0 | [2]と同じ (M2をM1で置き換えた) |
| (12) | 2 | 1 | 1 | [7]と同じ (M2をM1で置き換えた) |
| (13) | 2 | 1 | 2 | $M^1 - M^1 - L^5 - M^2 - M^2, \begin{matrix} M^2 \\ \\ M^1 - L^5 - M^1 \\ \\ M^2 \end{matrix}, \begin{matrix} M^1 - L^5 - M^2 - M^2 \\ \\ M^1 \end{matrix}$ |

10

20

30

40

【0204】

【表3】

[表3]

| No | c | d | e | 結合パターン |
|------|---|---|---|---|
| [14] | 2 | 2 | 0 | [4]と同じ(M2をM1で置き換えた) |
| [15] | 2 | 2 | 1 | [10]と同じ(M2をM1で置き換えた) |
| [16] | 2 | 2 | 2 | $M^1 - M^1 - L^5 - L^5 - M^2 - M^2, \quad \begin{array}{c} M^1 - M^1 - L^5 - M^2 - M^2 \\ \\ L^5 \end{array}$ $\begin{array}{c} M^1 \\ \\ M^1 - L^5 - L^5 - M^2 - M^2 \\ \\ M^1 \end{array}, \quad \begin{array}{c} M^1 \\ \\ M^1 - L^5 - L^5 \\ \quad \\ M^2 \quad M^2 \end{array},$ $M^1 - M^1 - L^5 - L^5 - M^2, \quad \begin{array}{c} M^1 \\ \\ L^5 - L^5 - M^2 - M^2 \\ \\ M^1 \end{array},$ $\begin{array}{c} M^1 - L^5 - L^5 - M^1 \\ \quad \\ M^2 \quad M^2 \end{array}$ |

10

20

【0205】

A³に結合したCzは、A³を表わしている式(7A)のM¹、L⁵、及びM²のいずれかに結合していることができる。

【0206】

例えば、式(5)又は(6)において、a = b = 1であり、Cz - A³ - Czが示され、式(A)において表2の[6](c = d = e = 1)が示される場合、Cz - M¹ - L⁵ - M²、M¹ - L⁵(Cz) - M²、及びM¹ - L⁵ - M² - Czの3つの結合パターンが挙げられる。

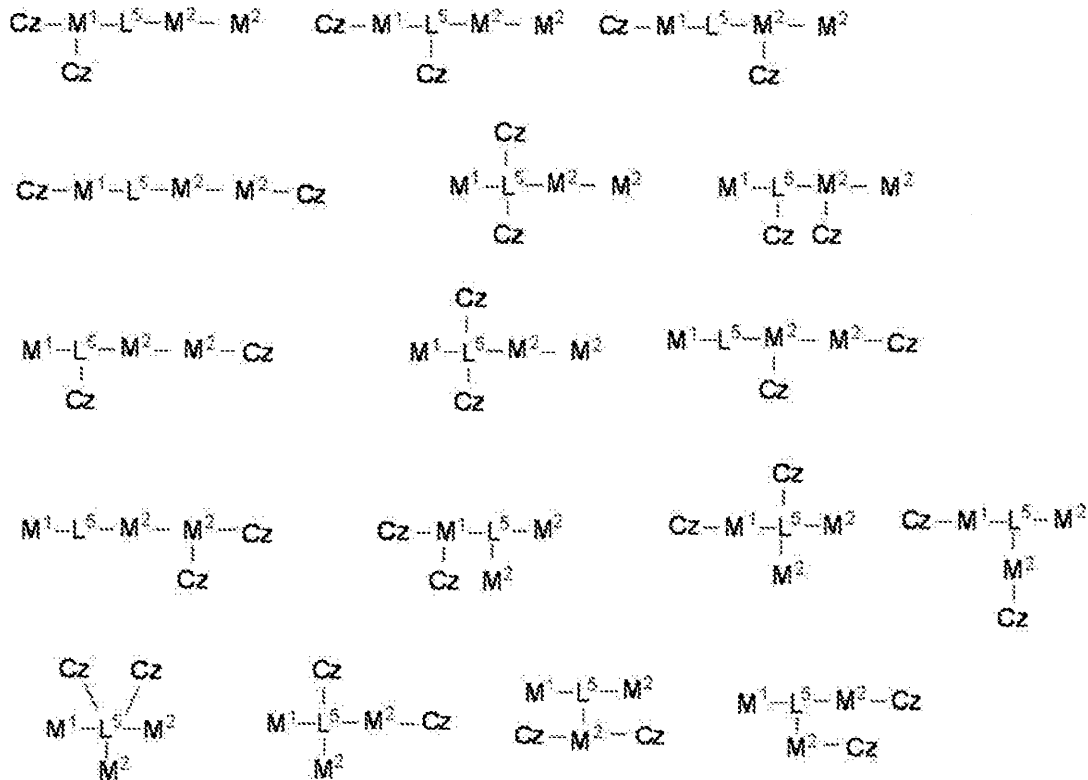
【0207】

さらに、例えば、式(5)においてa = 2であり、Cz - A³ - Czが示され、式(7A)において表2の[7](c = d = 1、e = 2)が示される場合、以下の結合パターンが挙げられる。

30

【0208】

【化 4 8】



10

20

【0209】

式(5)、(6)、及び(7A)の結合パターン並びに上述した基の組み合わせ例においては、以下の[1]~[4]で表される化合物が好ましい。

【0210】

[1]

式(5)において $a = 1$ であり、式(7A)において $c = 1$ 及び $d = 0$ である。式(5)において、 Cz は、置換もしくは非置換のアリールカルボゾリル基、又は置換もしくは非置換のカルボゾリルアリール基である。式(7A)において、 M^1 は、4~5の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有6員又は7員ヘテロ環、2~4の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有5員ヘテロ環、8~11の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環、置換又は非置換のイミダゾピリジニル環であり； L^5 は、6~30の炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基又は芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、及び2~30の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基である。

30

【0211】

[2]

式(5)において $a = 2$ であり、式(7A)において $c = 1$ 及び $e = 0$ である。式(5)において、 Cz は、置換もしくは非置換のアリールカルボゾリル基、又は置換もしくは非置換のカルボゾリルアリール基である。式(7A)において、 M^1 は、4~5の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有6員又は7員ヘテロ環、2~4の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有5員ヘテロ環、8~11の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環、置換又は非置換のイミダゾピリジニル環であり； L^5 は、6~30の炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基又は芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、及び2~30の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基である。

40

【0212】

[3]

50

式(5)において $a = 1$ であり、式(7A)において $c = 2$ 及び $e = 0$ である。式(5)において、 Cz は、置換もしくは非置換のアリールカルボシル基、又は置換もしくは非置換のカルボシルアリール基である。式(7A)において、 M^1 は、4～5の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有6員又は7員ヘテロ環、2～4の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有5員ヘテロ環、8～11の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環、置換又は非置換のイミダゾピリジニル環であり； L^5 は、6～30の炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基又は芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、及び2～30の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基である。

【0213】

10

[4]

式(6)において $b = 2$ であり、式(7A)において $c = d = 1$ である。式(6)において、 Cz は、置換もしくは非置換のアリールカルボシル基、又は置換もしくは非置換のカルボシルアリール基である。式(7A)において、 M^1 は、4～5の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有6員又は7員ヘテロ環、2～4の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有5員ヘテロ環、8～11の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環、置換又は非置換のイミダゾピリジニル環であり； L^5 は、6～30の炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基又は芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、及び2～30の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基である。

20

【0214】

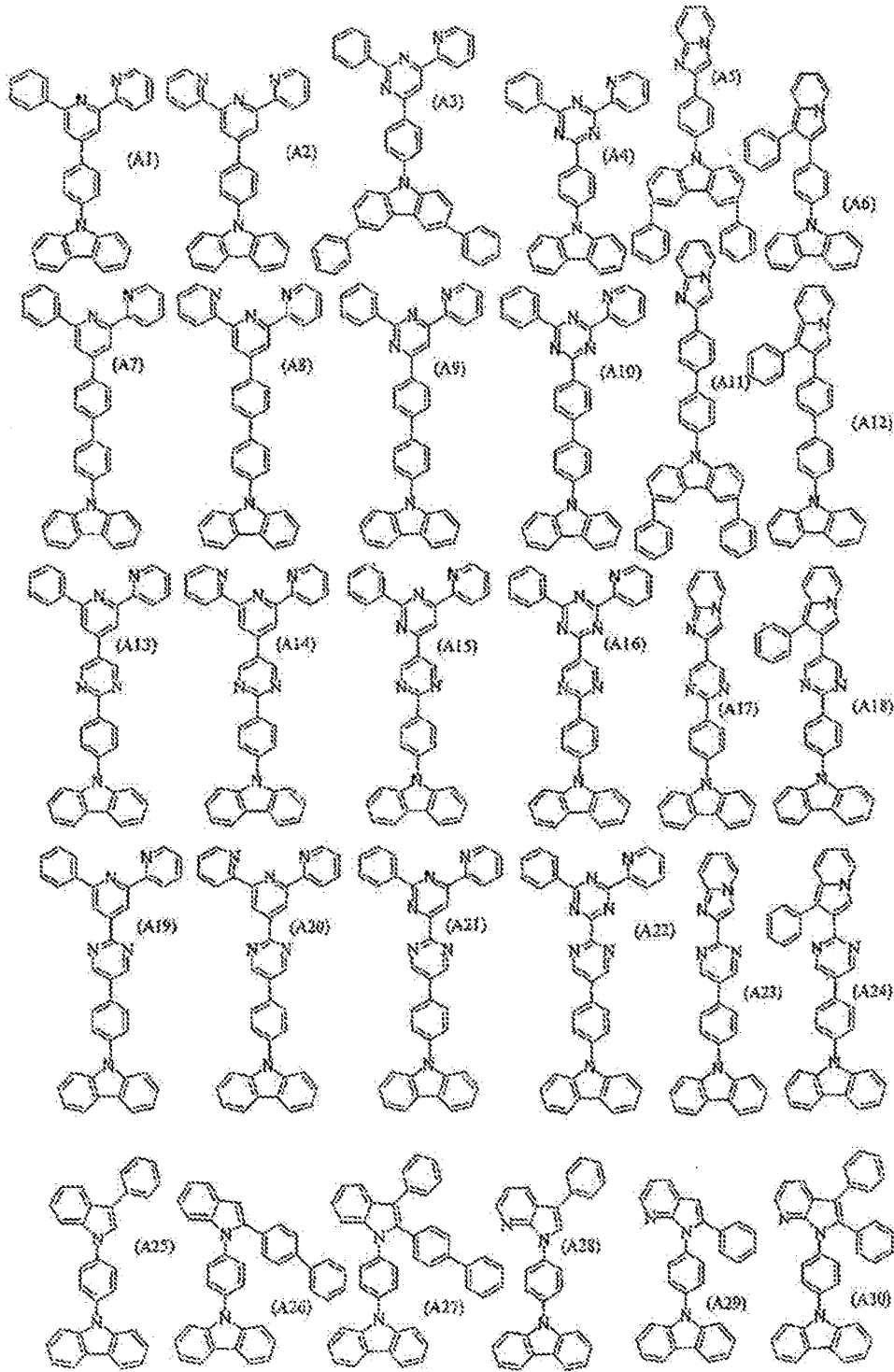
式(5)及び(6)において、 Cz は、好ましくは置換又は非置換のアリールカルボシル基、より好ましくはフェニルカルボシル基である。さらに、そのアリールカルボシル基のアリール部分がカルボシル基で置換されていることが好ましい。

【0215】

式(5)で表される第二の宿主物質のための化合物のいくつかの具体例を以下に示す。しかし、式(5)で表される化合物はそれらに限定されない。

【0216】

【化 4 9】



10

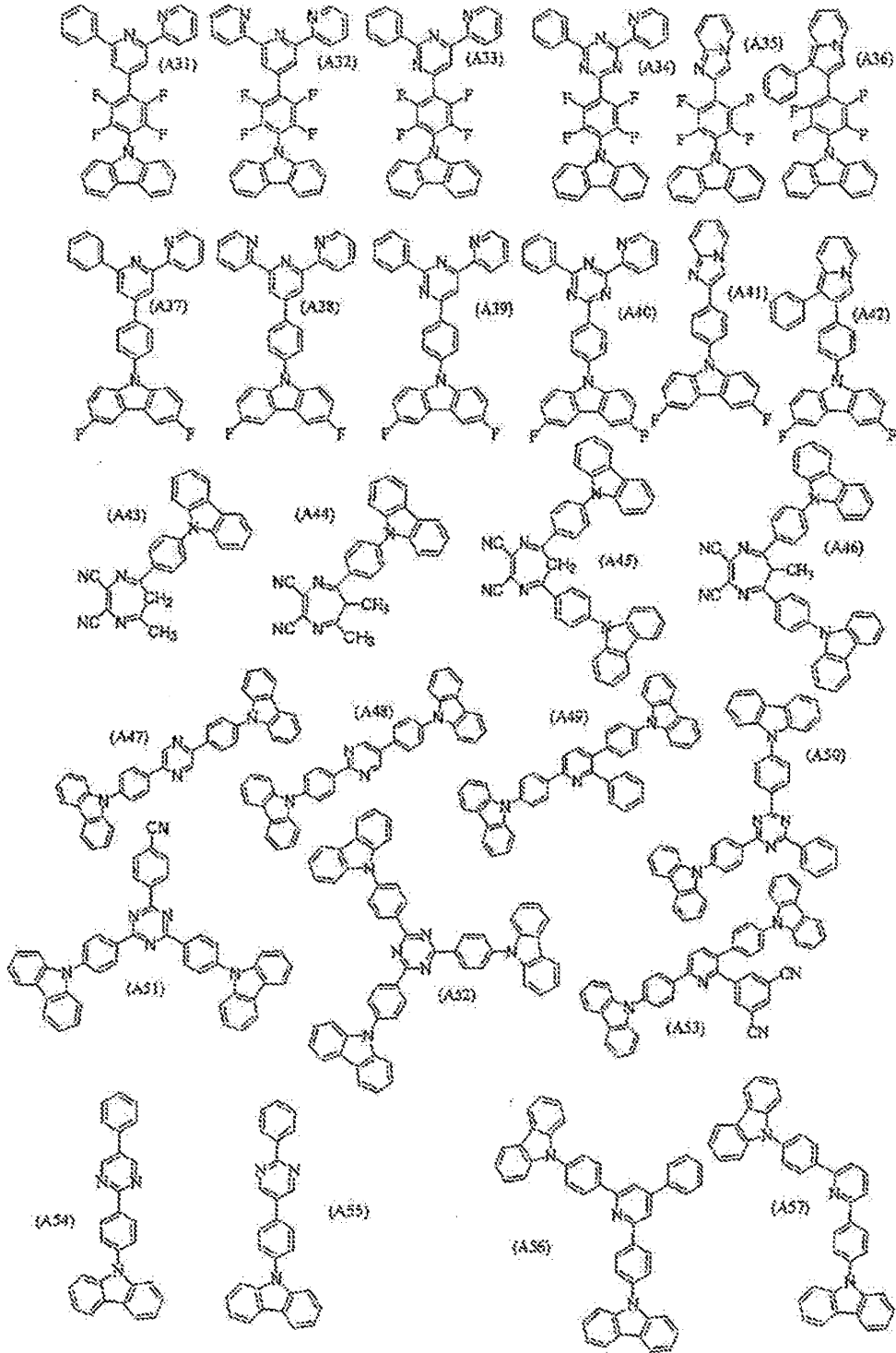
20

30

40

【 0 2 1 7 】

【化 5 0】



10

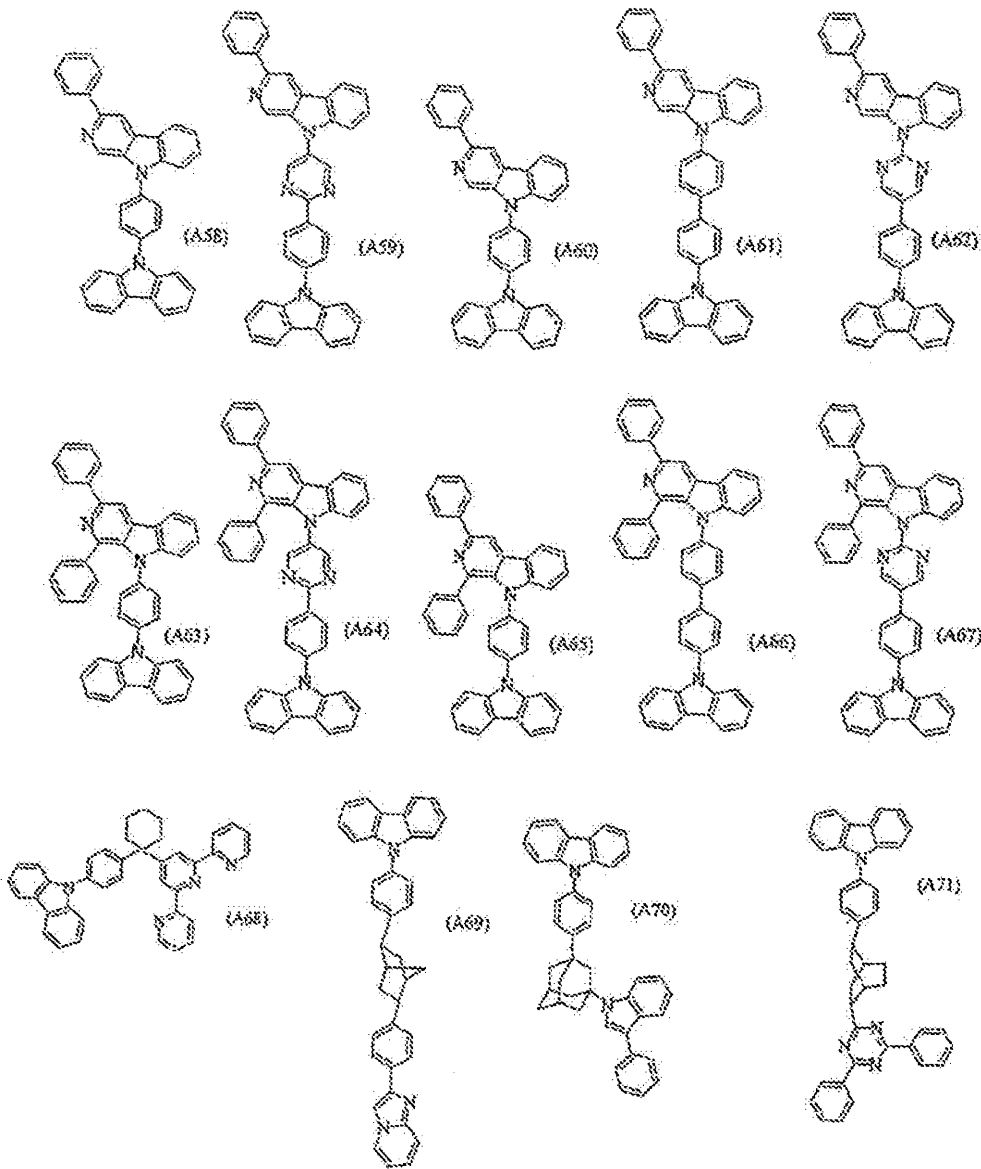
20

30

40

【 0 2 1 8 】

【化 5 1】



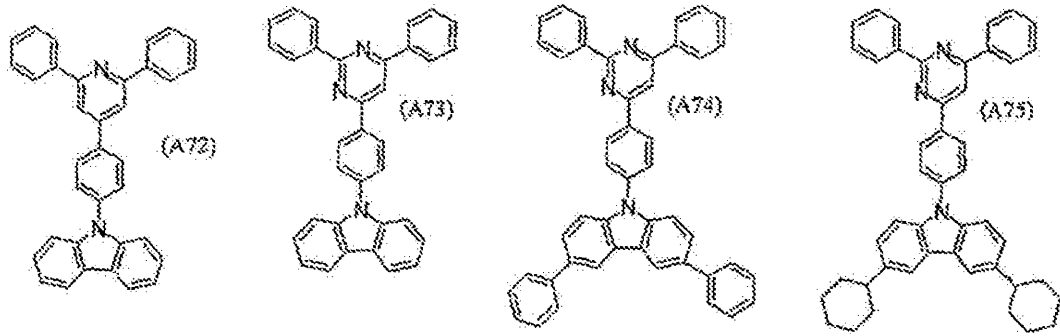
10

20

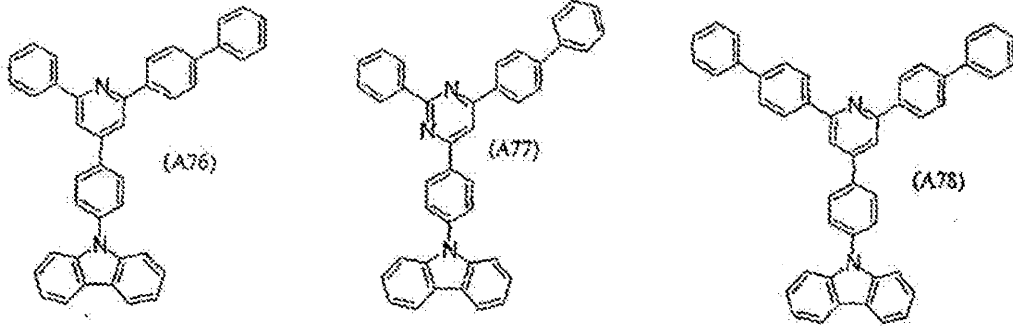
30

【 0 2 1 9 】

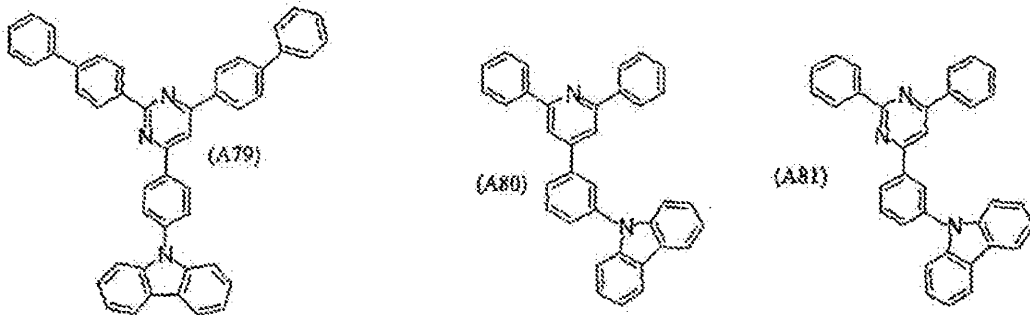
【化 5 2】



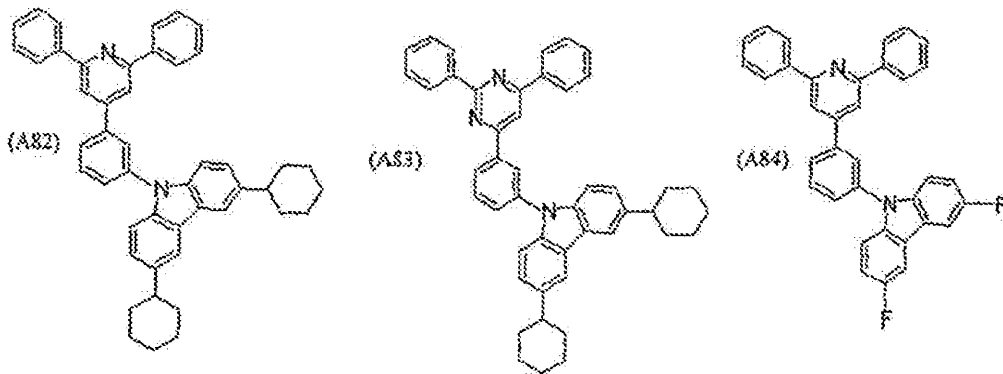
10



20



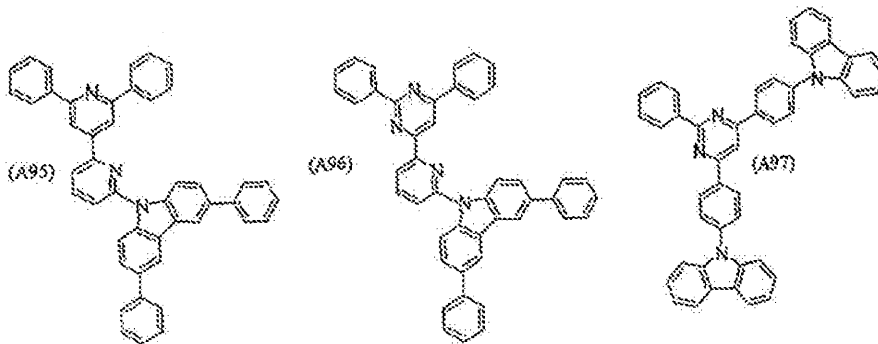
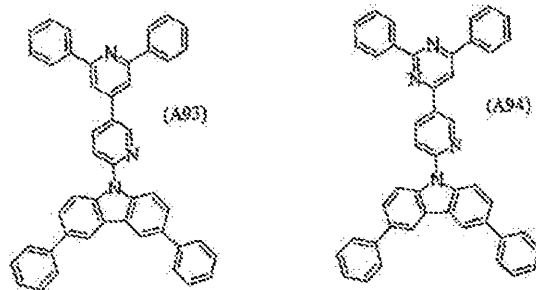
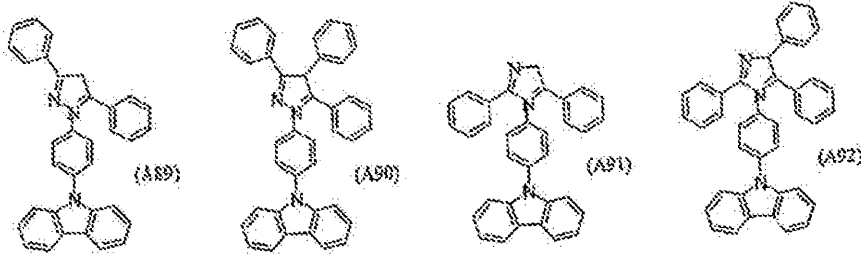
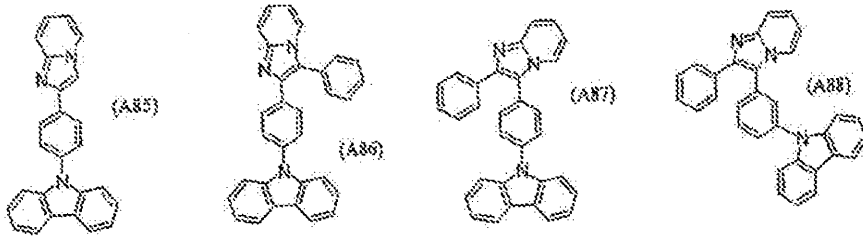
30



40

【 0 2 2 0 】

【化 5 3】



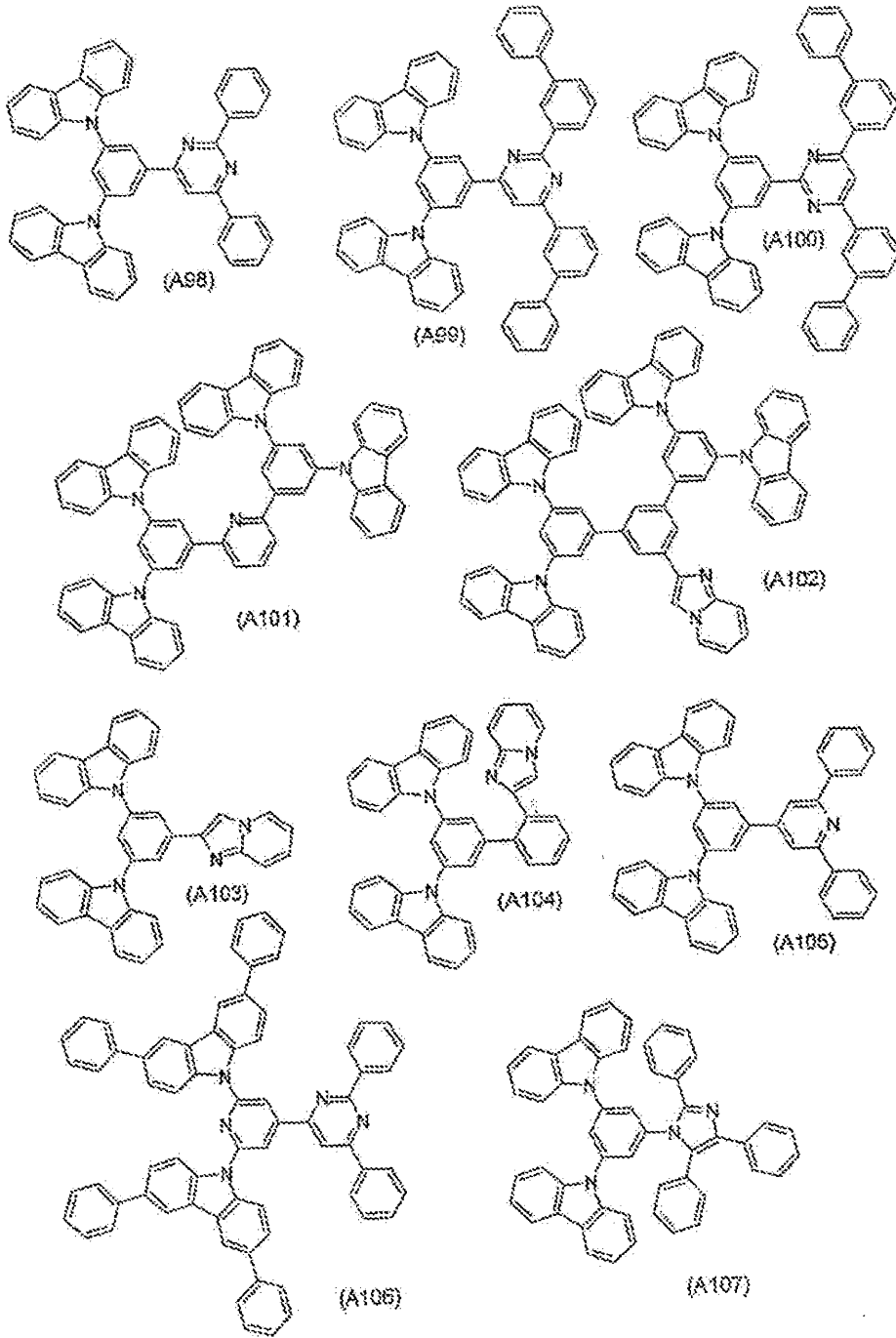
10

20

30

【 0 2 2 1 】

【化 5 4】



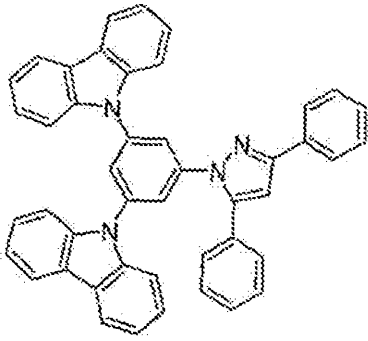
10

20

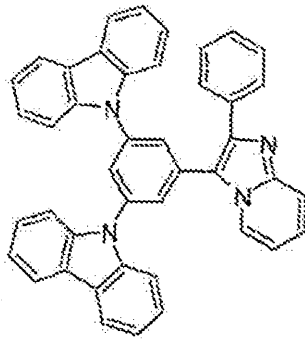
30

【 0 2 2 2 】

【化 5 5】

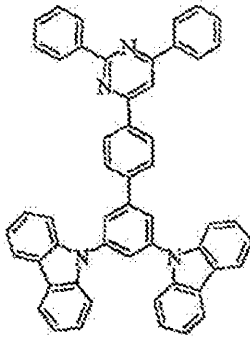


(A108)

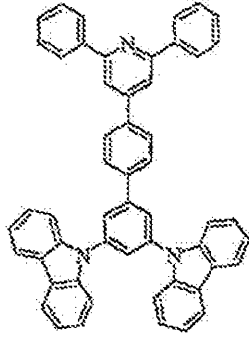


(A109)

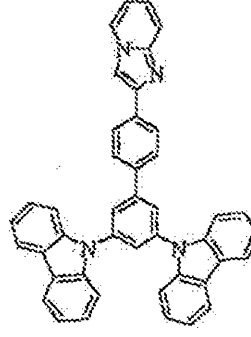
10



(A110)

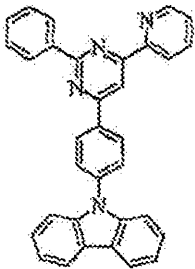


(A111)

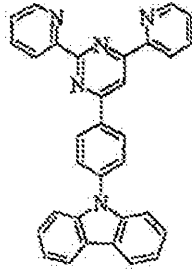


(A112)

20



(A113)



(A114)

30

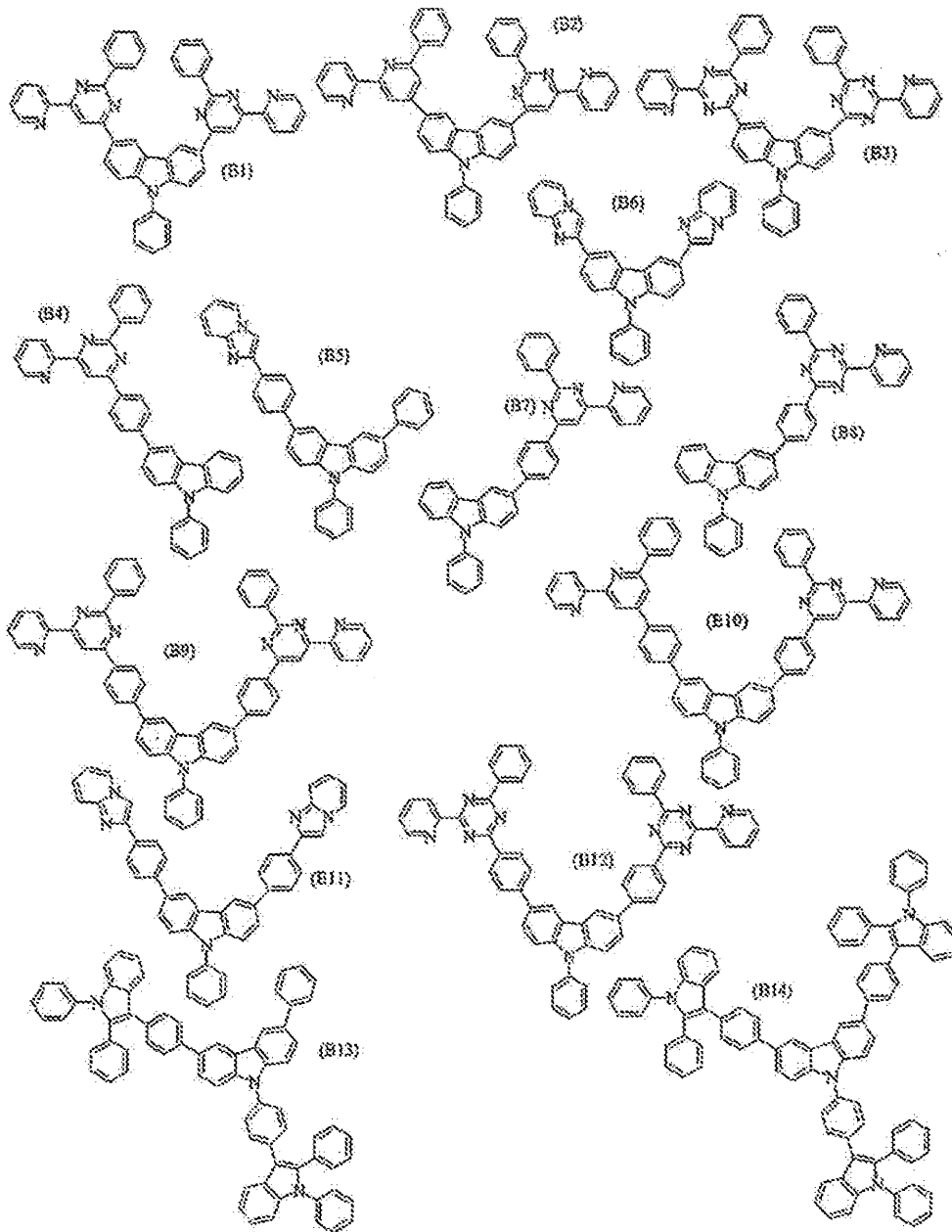
【 0 2 2 3 】

式(6)で表される第二のホスト物質のための化合物のいくつかの具体例を下に示す。
しかし、式(6)で表される化合物はこれらに限定されない。

【 0 2 2 4 】

40

【化 5 6】



10

20

30

40

【0225】

この例示の態様における式(5)又は(6)で表される化合物は、 $2.5\text{ eV} \sim 3.3\text{ eV}$ 、好ましくは $2.5\text{ eV} \sim 3.2\text{ eV}$ の三重項エネルギーギャップを有する。

【0226】

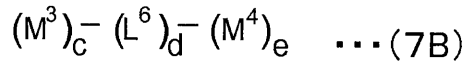
この例示の態様における式(5)又は(6)で表される化合物は、 $2.8\text{ eV} \sim 3.8\text{ eV}$ 、好ましくは $2.9\text{ eV} \sim 3.7\text{ eV}$ の一重項エネルギーギャップを有する。

【0227】

別の態様によれば、有機ELデバイスの発光層のための第二のホスト物質は、式(5)又は(6)中の A^3 が下記の式(7B)によって表される基である化合物である。これは、低い電子注入能を有する第二のホスト物質をもたらす。電極からの優れた電子注入能を有する物質(すなわち、LiF)をカソードとして用いた場合、発光層におけるキャリアバランスは、アノードの方へシフトするようになる。第二のホスト物質として低い電子注入能を有する物質を選択することによって、キャリアバランスを改善することができる。

【0228】

【化 5 7】



【0 2 2 9】

式(7B)中、 M^3 及び M^4 はそれぞれ独立に、6~40の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基を表し； M^3 及び M^4 は同じか異なり； L^6 は、単結合、6~30の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6~30の炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、又は5~30の炭素原子を有する置換又は非置換のシクロアルキレン基を表し、

10

c は、0~2の整数を表し； d は1~2の整数を表し； e は0~2の整数を表し； $c+e$ は1以上を表す。

【0 2 3 0】

式(7B)中、 M^3 及び M^4 のための芳香族炭化水素基、並びに L^6 のための芳香族炭化水素基、縮合芳香族炭化水素基、及びシクロアルキレン基として、式(7A)によって表されるものを用いることができる。式(7B)によって表される基の結合パターンとして、式(7A)のものと同じ結合パターンを用いることができる。特に、式(7A)の結合パターンにおいて、 M^1 、 L^5 、及び M^2 はそれぞれ M^3 、 L^6 、及び M^4 でそれぞれ置き換えることができる。

20

【0 2 3 1】

上述した式(5)、(6)、及び(7B)、並びに例示した基の組み合わせの結合パターンにおいて、以下の[5]~[8]で表される化合物が好ましい。

【0 2 3 2】

[5]

式(5)において $a=1$ であり、式(7B)において $c=1$ かつ $d=0$ である。式(5)において、 Cz は、置換もしくは非置換のアリールカルバゾリル基、又は置換もしくは非置換のカルバゾリルアリール基である。式(7B)において、 M^3 は、4~5の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有6員又は7員ヘテロ環、2~4の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有5員ヘテロ環、8~11の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環、置換又は非置換のイミダゾピリジニル環であり； L^6 は、6~30の炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基又は芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、及び2~30の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基である。

30

【0 2 3 3】

[6]

式(5)において $a=2$ であり、式(7B)において $c=1$ かつ $e=0$ である。式(5)において、 Cz は、置換もしくは非置換のアリールカルバゾリル基、又は置換もしくは非置換のカルバゾリルアリール基である。式(7B)において、 M^3 は、4~5の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有6員又は7員ヘテロ環、2~4の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有5員ヘテロ環、8~11の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環、置換又は非置換のイミダゾピリジニル環であり； L^6 は、6~30の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、及び2~30の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基である。

40

【0 2 3 4】

[7]

式(5)において $a=1$ であり、式(7B)において $c=2$ かつ $e=0$ である。式(5)において、 Cz は、置換もしくは非置換のアリールカルバゾリル基、又は置換もしくは非置換のカルバゾリルアリール基である。式(7B)において、 M^3 は、4~5の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有6員又は7員ヘテロ環、2~4の環炭素原子を有

50

する置換又は非置換の窒素含有 5 員ヘテロ環、8 ~ 11 の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環、置換又は非置換のイミダゾピリジニル環であり； L^6 は、6 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、及び 2 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基である。

【0235】

[8]

式(6)において $b = 2$ であり、式(7B)において $c = d = 1$ である。式(6)において、 Cz は、置換もしくは非置換のアリールカルbazolリル基、又は置換もしくは非置換のカルbazolリルアリール基である。式(7B)において、 M^3 は、4 ~ 5 の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有 6 員又は 7 員ヘテロ環、2 ~ 4 の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有 5 員ヘテロ環、8 ~ 11 の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有ヘテロ環、置換又は非置換のイミダゾピリジニル環であり； L^6 は、6 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基又は縮合芳香族炭化水素基、及び 2 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基又は縮合芳香族ヘテロ環基である。

10

【0236】

式(5)及び(6)において、 Cz は、好ましくは置換又は非置換のアリールカルbazolリル基、より好ましくはフェニルカルbazolリル基である。さらに、そのアリールカルbazolリル基のアリール部分がカルbazolリル基で置換されていることが好ましい。

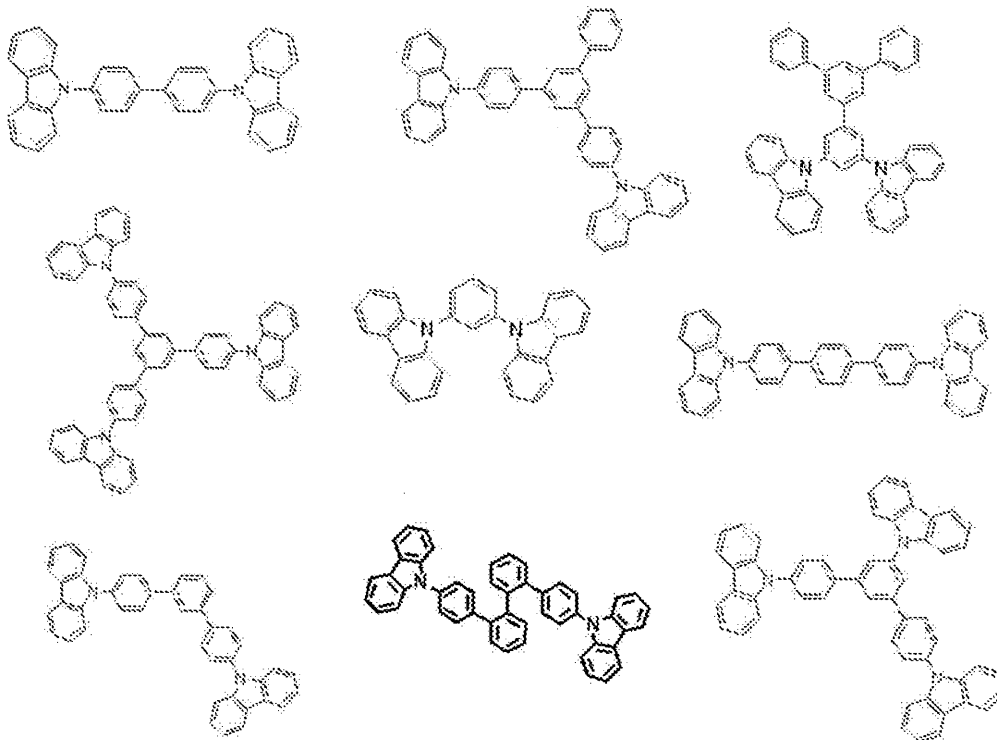
20

【0237】

式(5)又は(6)において A^3 が式(7B)で表される基である化合物の例を以下に挙げる。

【0238】

【化58】

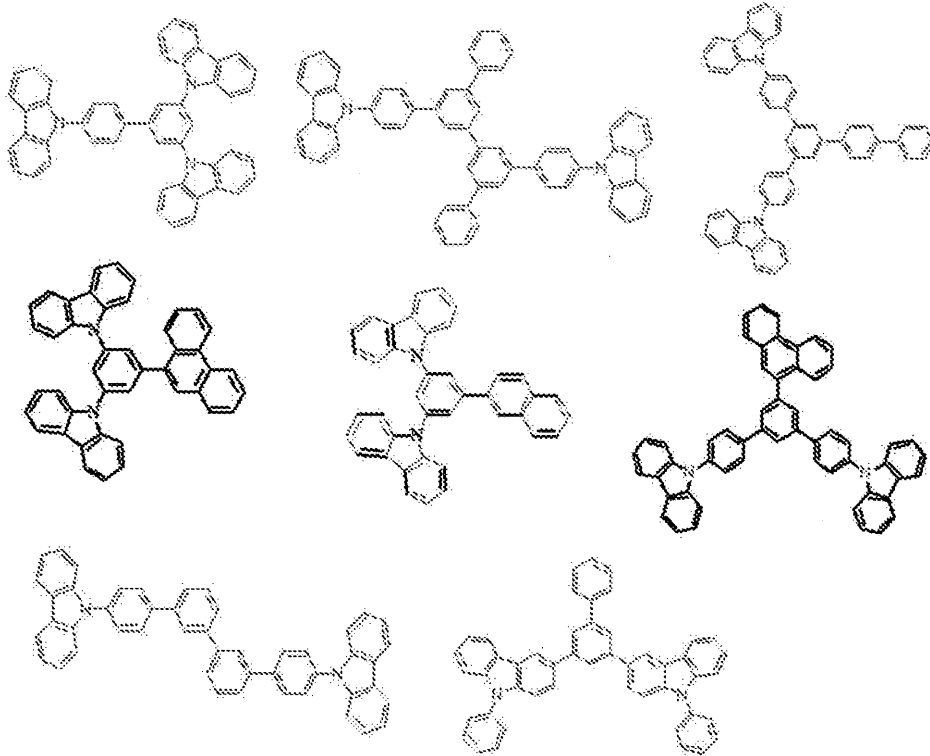


30

40

【0239】

【化 5 9】



10

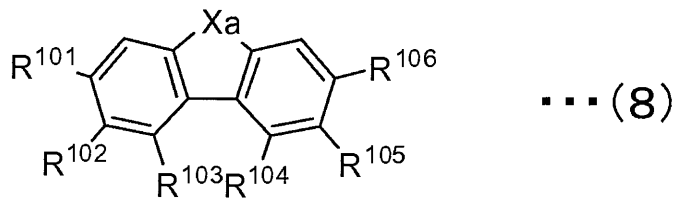
20

【 0 2 4 0】

別の態様では、有機 EL デバイス中の発光層のための第二のホスト物質は、下の式 (8) で表される化合物であることができる。

【 0 2 4 1】

【化 6 0】



30

【 0 2 4 2】

式 (8) において、 $R^{101} \sim R^{106}$ はそれぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、1 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキル基、3 ~ 15 の炭素原子を有する置換又は非置換のシクロアルキル基、3 ~ 20 の炭素原子を有する置換又は非置換のヘテロ環基、1 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアルコキシ基、6 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基、6 ~ 20 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールオキシ基、7 ~ 20 の炭素原子を有する置換又は非置換のアラルキル基、6 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールアミノ基、1 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキルアミノ基、7 ~ 60 の炭素原子を有する置換又は非置換のアラルキルアミノ基、7 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールカルボニル基、6 ~ 20 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールチオ基、1 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のハロゲン化アルキル基、あるいはシアノ基を表し；

40

$R^{101} \sim R^{106}$ のうち少なくとも1つは、置換又は非置換の9 - カルバゾリル基、2 ~ 5 の窒素原子を有する置換又は非置換のアザカルバゾリル基、あるいは - L - 9 - カルバゾリル基であり；

L は、1 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキル基、3 ~ 15 の炭素原子

50

を有する置換又は非置換のシクロアルキル基、3～20の炭素原子を有する置換又は非置換のヘテロ環基、1～40の炭素原子を有する置換又は非置換のアルコキシ基、6～40の炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基、6～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールオキシ基、7～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアラルキル基、6～40の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールアミノ基、1～40の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキルアミノ基、7～60の炭素原子を有する置換又は非置換のアラルキルアミノ基、7～40の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールカルボニル基、6～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールチオ基、あるいは、1～40の炭素原子を有する置換又は非置換のハロゲン化アルキル基を表し；

X^aは、硫黄原子、酸素原子、又はN-R¹⁰⁸を表し；

R¹⁰⁸は、R¹⁰¹～R¹⁰⁶と同じものを表す。

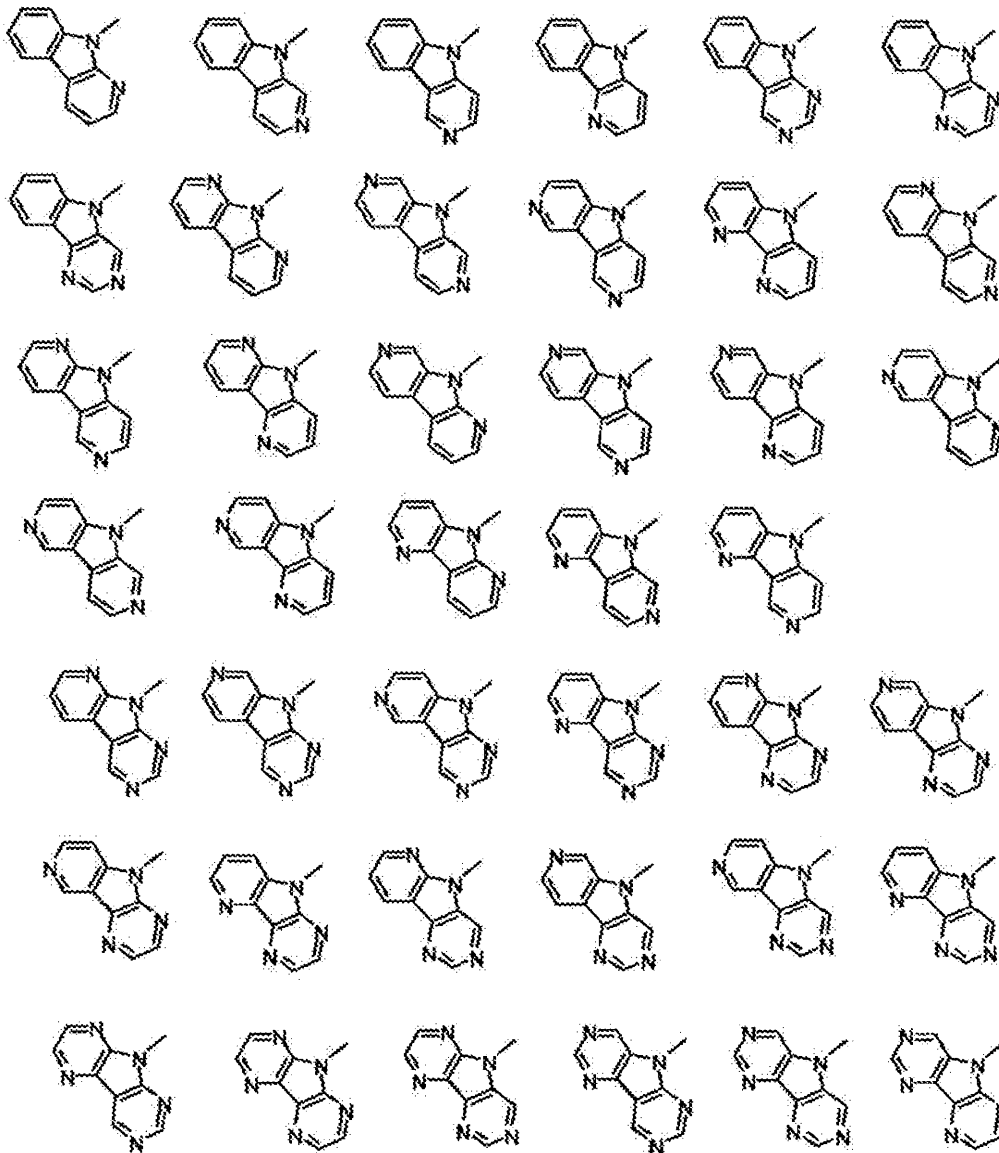
10

【0243】

上記の2～5の窒素原子を有する置換又は非置換のアザカルバゾリル基のいくつかの具体例を下に示す（置換基は省略している）が、置換又は非置換のアザカルバゾリル基はそれらに限定されない。

【0244】

【化61】



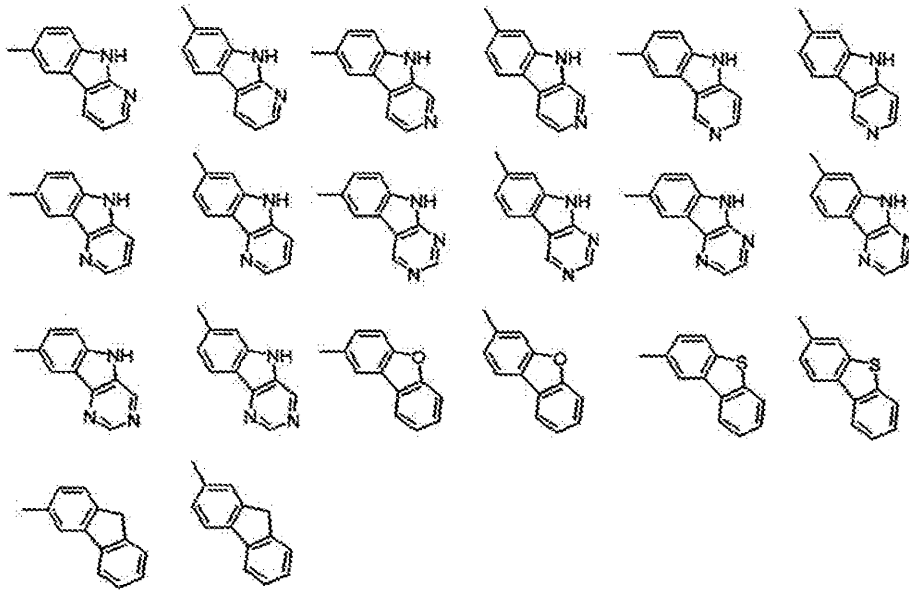
20

30

40

【0245】

【化 6 2】



10

【 0 2 4 6】

上記のハロゲン原子のいくつかの例には、フッ素、塩素、臭素、及びヨウ素が含まれる。

20

【 0 2 4 7】

1 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキル基のいくつかの例には、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*s*-ブチル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、*n*-ヘプチル基、*n*-オクチル基、*n*-ノニル基、*n*-デシル基、*n*-ウンデシル基、*n*-ドデシル基、*n*-トリデシル基、*n*-テトラデシル基、*n*-ペンタデシル基、*n*-ヘキサデシル基、*n*-ヘプタデシル基、*n*-オクタデシル基、ネオペンチル基、1-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基、3-メチルペンチル基、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-トリアミノプロピル基、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、及び1, 2, 3-トリニトロプロピル基、が含まれ、これらのなかでも、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*

30

40

50

- 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、1 - ブチルペンチル基、1 - ヘプチルオクチル基が好ましい。アルキル基（置換基を除いて）は好ましくは1 ~ 10の炭素原子を有する。

【0248】

3 ~ 15の炭素原子を有する置換又は非置換のシクロアルキル基のいくつかの例には、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロオクチル基、及び3, 3, 5, 5 - テトラメチルシクロヘキシル基が含まれる。シクロヘキシル基、シクロオクチル基、及び3, 3, 5, 5 - テトラメチルシクロヘキシル基が好ましい。このシクロアルキル基（置換基を除いて）は好ましくは3 ~ 12の炭素原子を有する。

【0249】

3 ~ 20の炭素原子を有する置換又は非置換のヘテロ環基のいくつかの例は、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、1 - イミダゾリル、2 - イミダゾリル、1 - ピラゾリル、1 - インドリジニル、2 - インドリジニル、3 - インドリジニル、5 - インドリジニル、6 - インドリジニル、7 - インドリジニル、8 - インドリジニル、2 - イミダゾピリジニル、3 - イミダゾピリジニル、5 - イミダゾピリジニル、6 - イミダゾピリジニル、7 - イミダゾピリジニル、8 - イミダゾピリジニル、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、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、9 - カルバゾリル基、アザカルバゾリル - 1 - イル、アザカルバゾリル - 2 - イル、アザカルバゾリル - 3 - イル、アザカルバゾリル - 4 - イル、アザカルバゾリル - 5 - イル、アザカルバゾリル - 6 - イル、アザカルバゾリル - 7 - イル、アザカルバゾリル - 8 - イル、アザカルバゾリル - 9 - イル、1 - フェナントリジニル基、2 - フェナントリジニル基、3 - フェナントリジニル基、4 - フェナントリジニル基、6 - フェナントリジニル基、7 - フェナントリジニル基、8 - フェナントリジニル基、9 - フェナントリジニル基、10 - フェナントリジニル基、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 - フェナントロリン - 2 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 3 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 4 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 5 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 6 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 8 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 9 - イル基、1, 7 - フェナントロリン - 10 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 2 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 3 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 4 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 5 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 6 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 7 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 9 - イル基、1, 8 - フェナントロリン - 10 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 2 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 3 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 4 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 5 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 6 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 7 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 8 - イル基、1, 9 - フェナントロリン - 10 - イル基、1, 10 - フェナントロリン - 2 - イル基、1, 10 - フェナントロリン - 3 - イル基、1, 10 - フェナントロリン - 4 - イル基、1, 10 - フェナントロリン - 5 - イル

10

20

30

40

50

基、2, 9 - フェナントロリン - 1 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 3 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 4 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 5 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 6 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 7 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 8 - イル基、2, 9 - フェナントロリン - 10 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 1 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 3 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 4 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 5 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 6 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 7 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 9 - イル基、2, 8 - フェナントロリン - 10 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 1 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 3 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 4 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 5 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 6 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 8 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 9 - イル基、2, 7 - フェナントロリン - 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、1 - ジベンゾフラニル基、2 - ジベンゾフラニル基、3 - ジベンゾフラニル基、4 - ジベンゾフラニル基、1 - ジベンゾチオフエニル基、2 - ジベンゾチオフエニル基、3 - ジベンゾチオフエニル基、4 - ジベンゾチオフエニル基、1 - シラフルオレニル基、2 - シラフルオレニル基、3 - シラフルオレニル基、4 - シラフルオレニル基、1 - ゲルマフルオレニル基、2 - ゲルマフルオレニル基、3 - ゲルマフルオレニル基、及び 4 - ゲルマフルオレニル基、である。

10

20

30

【0250】

上のもののうち、ヘテロ環基は、好ましくは、2 - ピリジニル基、1 - インドリジニル、2 - インドリジニル、3 - インドリジニル、5 - インドリジニル、6 - インドリジニル、7 - インドリジニル、8 - インドリジニル、2 - イミダゾピリジニル、3 - イミダゾピリジニル、5 - イミダゾピリジニル、6 - イミダゾピリジニル、7 - イミダゾピリジニル、8 - イミダゾピリジニル、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、9 - カルバゾリル基、1 - ジベンゾフラニル基、2 - ジベンゾフラニル基、3 - ジベンゾフラニル基、4 - ジベンゾフラニル基、1 - ジベンゾチオフエニル基、2 - ジベンゾチオフエニル基、3 - ジベンゾチオフエニル基、4 - ジベンゾチオフエニル基、1 - シラフルオレニル基、2 - シラフルオレニル基、3 - シラフルオレニル基、4 - シラフルオレニル基、1 - ゲルマフルオレニル基、2 - ゲルマフルオレニル基、3 - ゲルマフルオレニル基、4 - ゲルマフルオレニル基、アザカルバゾリル - 1 - イル基、アザカルバゾリル - 2 - イル基、アザカルバゾリル - 3 - イル基、アザカルバゾリル - 4 - イル基、アザカルバゾリル - 5 - イル基、アザカルバゾリル - 6 - イル基、アザカルバゾリル - 7 - イル基、アザカルバゾリル - 8 - イル基、及びアザカルバゾリル - 9 - イル基、である。ヘテロ環基（置換基を除く）は好ましくは 3 ~ 14 の炭素原子を有する。

40

【0251】

50

1 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアルコキシ基は、- O Y で表される基である。Y の例は上でアルキル基と関連して説明したものと同一である。好ましい例も同一である。

【0252】

6 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基（縮合芳香族炭化水素基及び環が集合した芳香族炭化水素基を含む）のいくつかの例は、フェニル基、2 - ビフェニル基、3 - ビフェニル基、4 - ビフェニル基、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、及び m - クアテルフェニル基である。上述したもののうち、置換又は非置換アリール基は、好ましくは、フェニル基、2 - ビフェニル基、3 - ビフェニル基、4 - ビフェニル基、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、3, 4 - キシリル基、m - クアテルフェニル - 2 - イル基、1 - ナフチル基、2 - ナフチル基、1 - フェナントレニル基、2 - フェナントレニル基、3 - フェナントレニル基、4 - フェナントレニル基、9 - フェナントレニル基、1 - トリフェニレニル基、2 - トリフェニレニル基、3 - トリフェニレニル基、4 - トリフェニレニル基、1 - クリセニル基、2 - クリセニル基、3 - クリセニル基、4 - クリセニル基、5 - クリセニル基、及び 6 - クリセニル基である。アリール基（置換基を除く）は好ましくは 6 ~ 24 の炭素原子を有する。アリール基は、さらに 9 - カルパゾリル基を置換基として含むことが好ましい。

【0253】

6 ~ 20 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールオキシ基は - O A r で表される基である。A r の例は上記のアリール基との関連で説明したものと同一である。好ましい例も同一である。

【0254】

7 ~ 20 の炭素原子を有する置換又は非置換のアラルキル基のいくつかの例は、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などである。これらのなかで、好ましいものは、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 - フェニルイソプロピル基、及び 2 - フェニルイソプロピル基である。このアラルキル基のアルキル部分は好ましくは 1 ~ 8 の炭素原子を有する。それらのアリール部分（これにはヘテロアリールも含まれる）は好ましくは 6 ~ 18 の炭素原子を有する。

【0255】

上記 6 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールアミノ基、上記 1 ~ 40 の

炭素原子を有する置換又は非置換のアルキルアミノ基、及び7～60の炭素原子を有する置換又は非置換のアラルキルアミノ基は、それぞれ、-NQ₁Q₂で表される。Q₁及びQ₂の例はそれぞれ独立に、上記のアルキル、アリール、及びアラルキル基と関連して説明したものと同一である。好ましい例も同一である。

【0256】

7～40の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールカルボニル基は、-COAr₂で表される。Ar₂の例は、上記のアリールと関連して説明したものと同一である。好ましい例も同一である。

【0257】

6～20の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールチオ基は、-OArで表される。上記アリールオキシ基の酸素原子を硫黄原子で置き換えて得られる基が例示される。Arの好ましい例も同一である。

10

【0258】

1～40の炭素原子を有する置換又は非置換のハロゲン化アルキル基は、上記アルキル基の少なくとも1つの水素原子がハロゲン原子で置き換えられたハロゲン化アルキル基によって例示される。アルキル基の好ましい例も同一である。

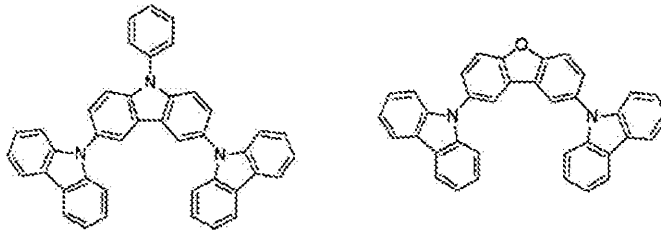
【0259】

一般式(8)で表される化合物は、好ましくは、2.2 eV～3.2 eVの三重項エネルギーギャップを有する。式(8)のいくつかの具体例を以下に示す。

【0260】

20

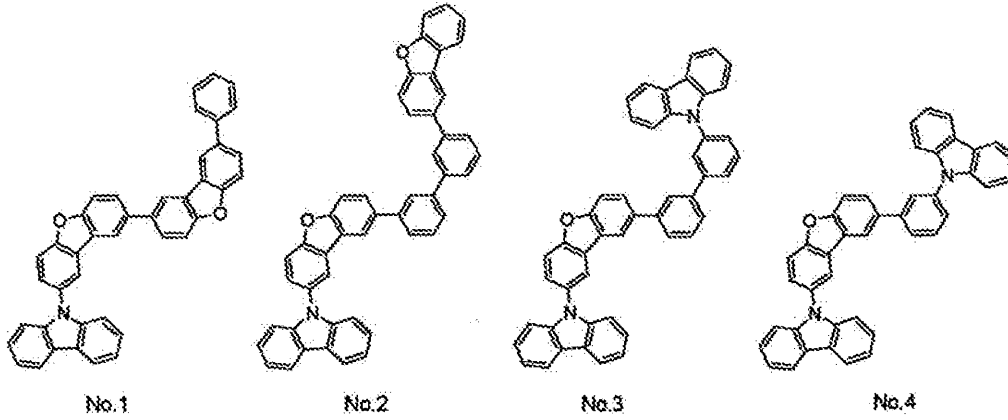
【化63】



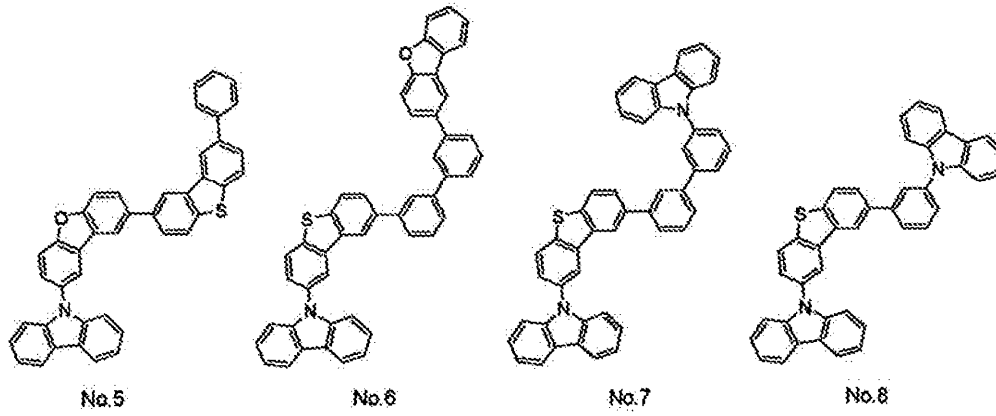
【0261】

30

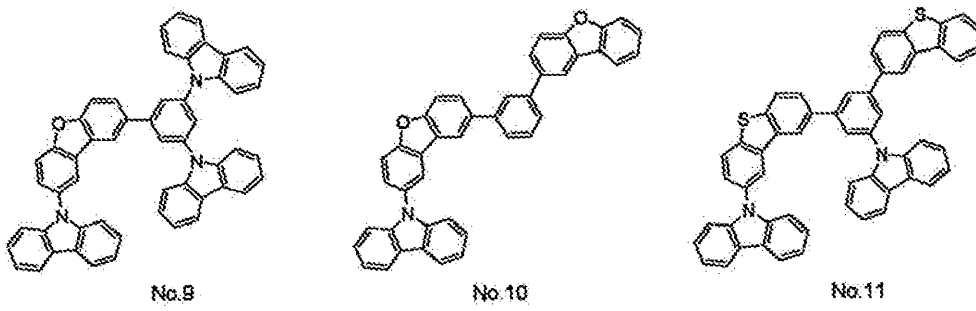
【化 6 4】



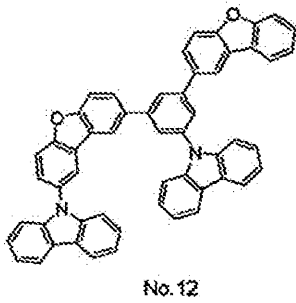
10



20



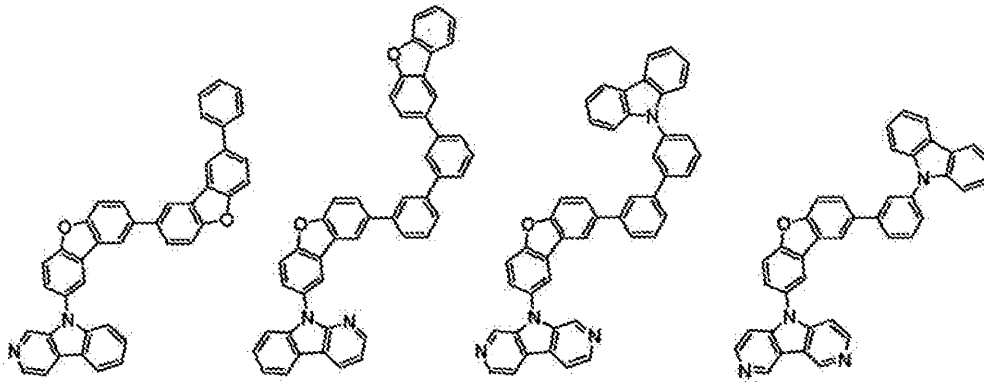
30



40

【 0 2 6 2 】

【化 6 5】



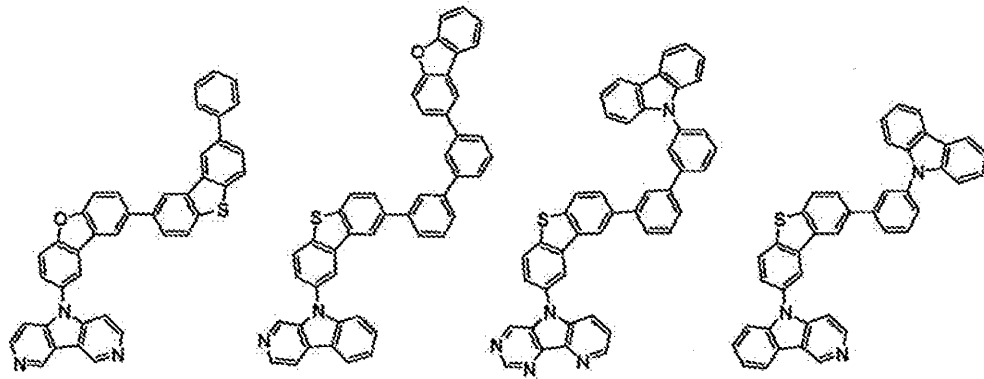
No.13

No.14

No.15

No.16

10



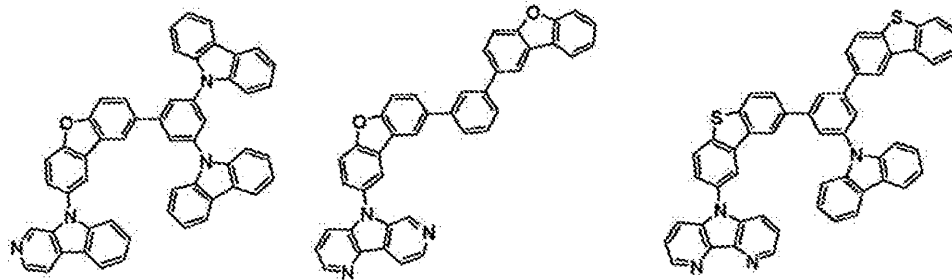
No.17

No.18

No.19

No.20

20

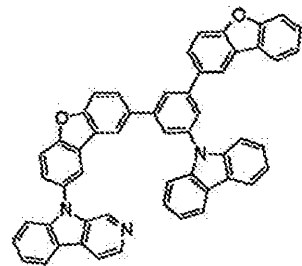


No.21

No.22

No.23

30

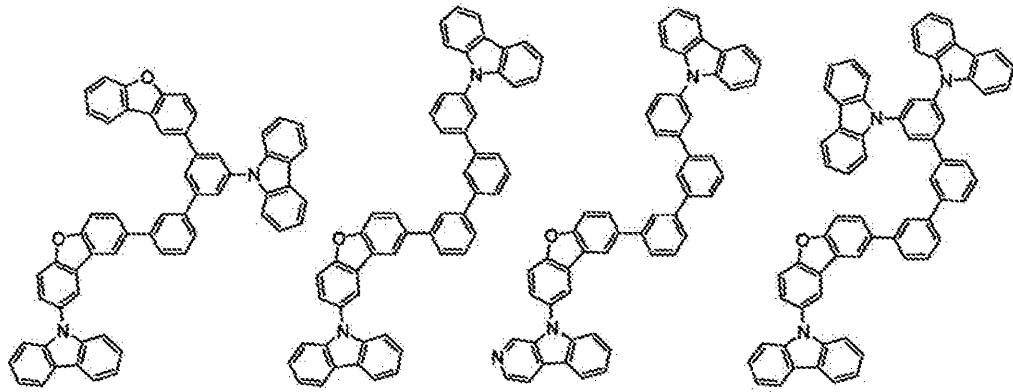


No.24

40

【 0 2 6 3 】

【化 6 6】



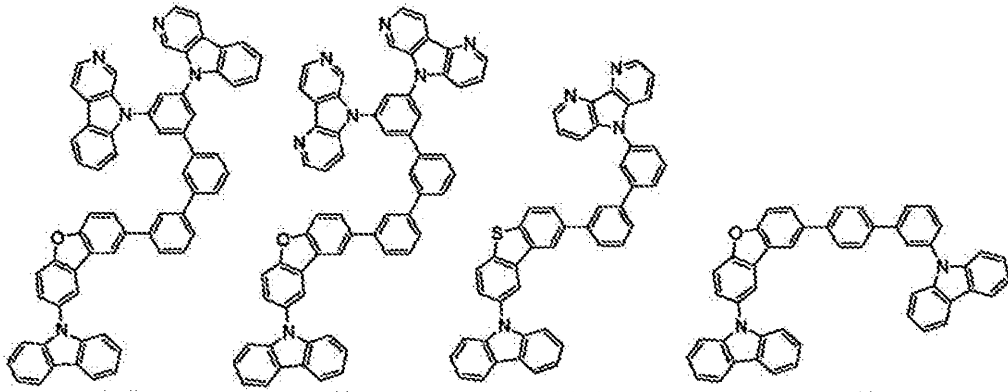
No.25

No.26

No.27

No.28

10



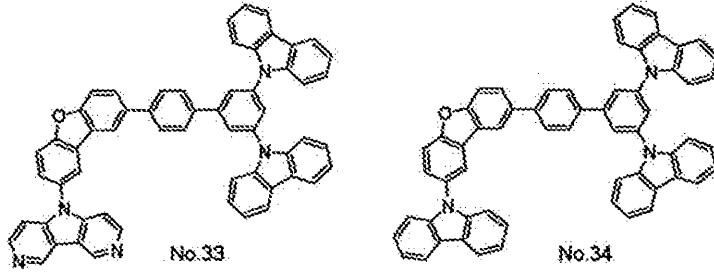
No.29

No.30

No.31

No.32

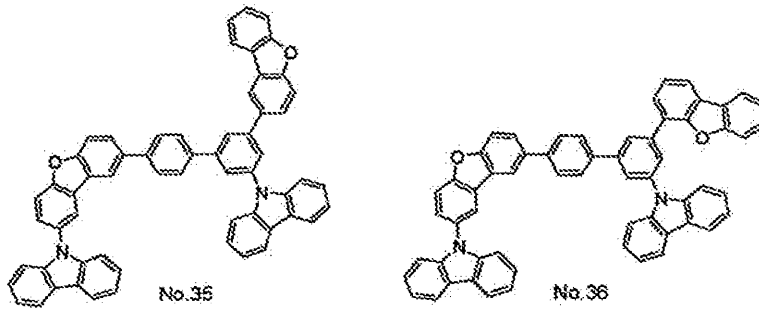
20



No.33

No.34

30



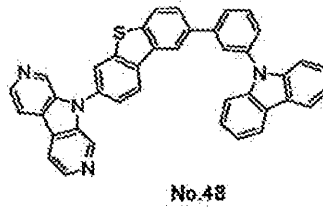
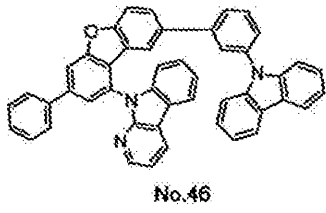
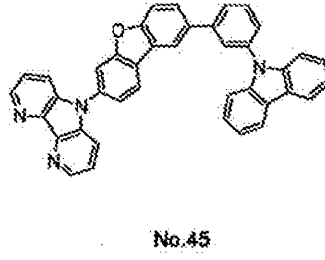
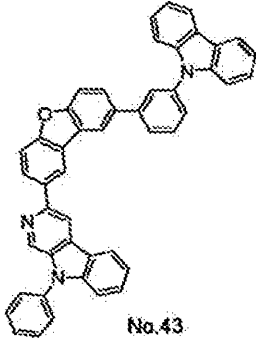
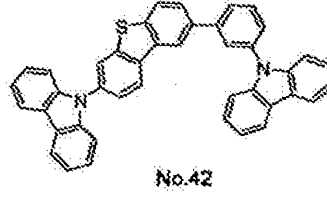
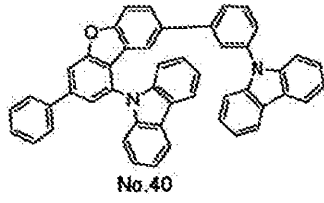
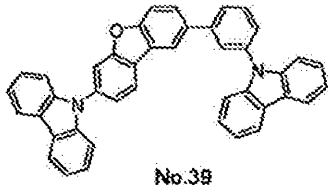
No.35

No.36

40

【 0 2 6 4 】

【化 6 7】

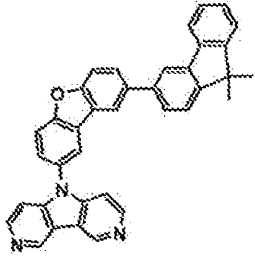


【 0 2 6 5 】

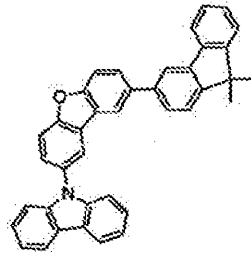
10

20

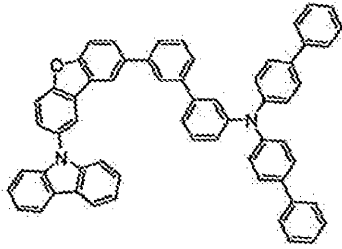
【化 6 8】



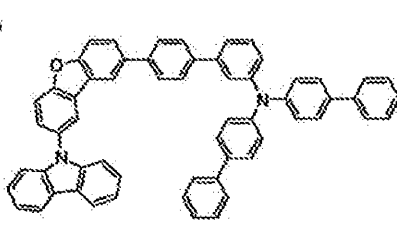
No.49



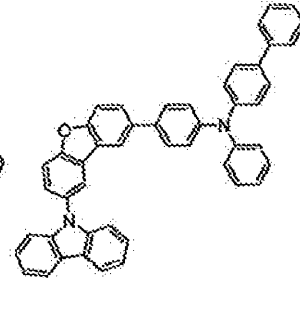
No.50



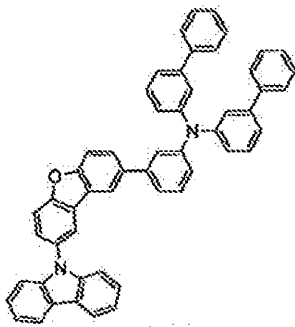
No.51



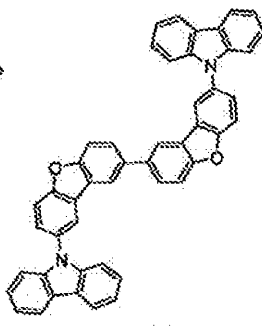
No.52



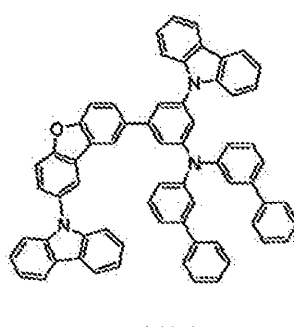
No.53



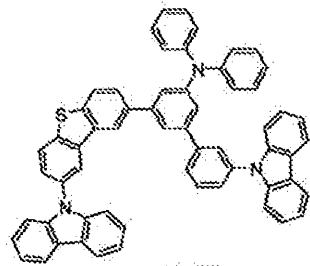
No.54



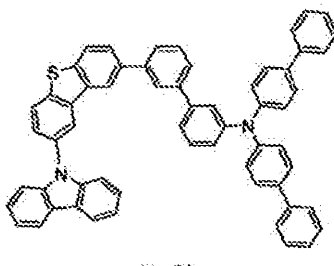
No.55



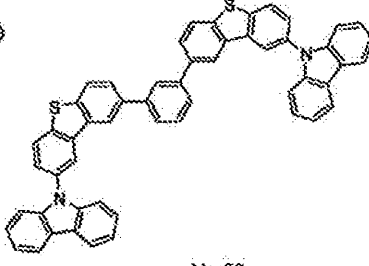
No.56



No.57



No.58



No.59

【 0 2 6 6 】

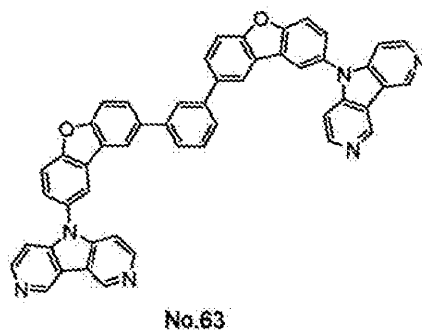
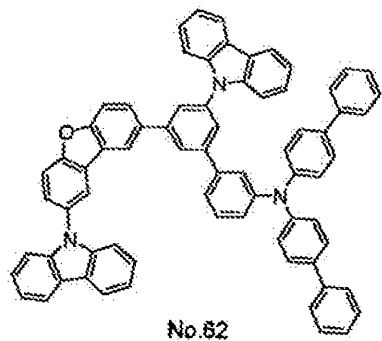
10

20

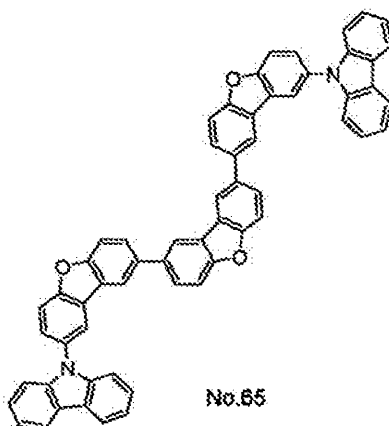
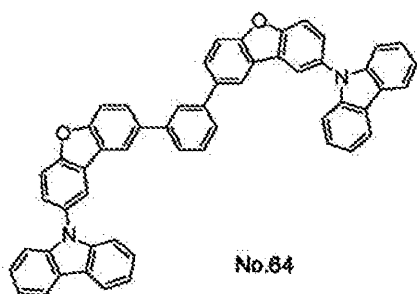
30

40

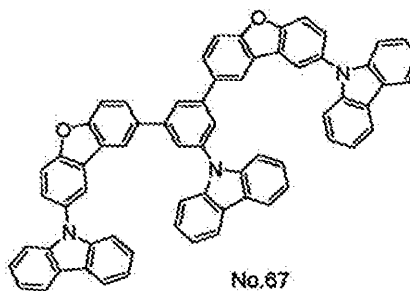
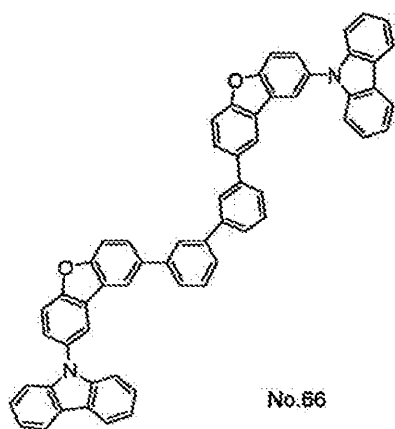
【化69】



10



20



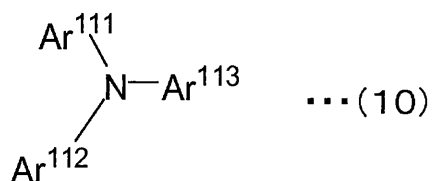
30

【0267】

別の態様では、第二のホスト物質は、下の式(10)~(12)のいずれか1つにより表されるモノアミン誘導体であることができる。

【0268】

【化70】



40

【0269】

式(10)において、 Ar^{111} 、 Ar^{112} 、及び Ar^{113} はそれぞれ、置換又は非置換のアリール基又はヘテロアリール基である。アリール基は6~50の環炭素原子(

50

好ましくは6～30の環炭素原子、さらに好ましくは6～20の環炭素原子)を有する。アリアル基の例は、フェニル基、ナフチル基、フェナントレニル基、ベンゾフェナントレニル基、ジベンゾフェナントレニル基、ベンゾクリセニル基、ジベンゾクリセニル基、フルオランテニル基、ベンゾフルオランテニル基、トリフェニレニル基、ベンゾトリフェニレニル基、ジベンゾトリフェニレニル基、ピセニル基、ベンゾピセニル基、ジベンゾピセニル基、フェナレニル基、アセナフテニル基、及びジアザフェナントレニル基である。なかでもフェニル基又はナフチル基が好ましい。

【0270】

上記ヘテロアリアル基は5～50の環原子、好ましくは6～30の環原子、さらに好ましくは6～20の環原子を有する。ヘテロアリアル基の例は、ピリミジル基及びジアザフェナントレニル基である。

10

【0271】

Ar^{111} 、 Ar^{112} 、及び Ar^{113} のうち少なくとも1つが、フェナントレニル基、ベンゾフェナントレニル基、ジベンゾフェナントレニル基、ベンゾクリセニル基、ジベンゾクリセニル基、フルオランテニル基、ベンゾフルオランテニル基、トリフェニレニル基、ベンゾトリフェニレニル基、ジベンゾトリフェニレニル基、ピセニル基、ベンゾピセニル基、ジベンゾピセニル基、フェナレニル基、及びジアザフェナントレニル基から選択された縮合芳香族炭化水素基であることが好ましい。なかでも、ベンゾクリセニル基、トリフェニレニル基、又はフェナントレニル基がさらに好ましい。好ましくは、上記縮合芳香族炭化水素基は非置換である。

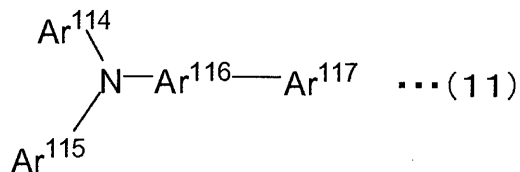
20

【0272】

式(10)によって表されるモノアミン誘導体において、 Ar^{111} 及び Ar^{112} はそれぞれ、フェニル基又はナフチル基であることが好ましく、 Ar^{113} は、ベンゾクリセニル基、トリフェニレニル基、又はフェナントレニル基であることが好ましい。

【0273】

【化71】



30

【0274】

式(11)中、 Ar^{114} 、 Ar^{115} 、及び Ar^{117} はそれぞれ、置換又は非置換のアリアル基又はヘテロアリアル基である。アリアル基又はヘテロアリアル基の例は、 Ar^{111} のアリアル基又はヘテロアリアル基として定義したものと同一であり、なかでもフェニル基又はナフチル基が好ましい。 Ar^{116} は、置換又は非置換のアリーレン基又はヘテロアリーレン基である。

【0275】

上記のアリーレン基は6～50の環炭素原子(好ましくは6～30の環炭素原子、さらに好ましくは6～20の環炭素原子)を有する。アリーレン基のいくつかの例は、フェニレン基、ナフチレン基、フェナントレニレン基、ナフタセニレン基、ピレニレン基、ピフェニレン基、ターフェニレニレン基、ベンゾフェナントレニレン基、ジベンゾフェナントレニレン基、ベンゾクリセニレン基、ジベンゾクリセニレン基、フルオランテニレン基、ベンゾフルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ベンゾトリフェニレニレン基、ジベンゾトリフェニレニレン基、ピセニレン基、ベンゾピセニレン基、及びジベンゾピセニレン基である。なかでも、フェニレン基又はナフチレン基が好ましい。

40

【0276】

上記のヘテロアリアル基は5～50の環原子(好ましくは6～30の環原子、より好ましくは6～20の環原子)を有する。ヘテロアリアル基のいくつかの例は、ピリジレン基

50

、ピリミジレン基、ジベンゾフラニレン基、及びジベンゾチオフェニレン基である。

【0277】

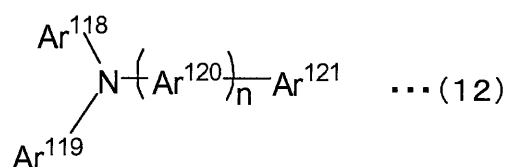
Ar^{117} は、好ましくは、フェナントレニル基、ベンゾフェナントレニル基、ジベンゾフェナントレニル基、ベンゾクリセニル基、ジベンゾクリセニル基、フルオランテニル基、ベンゾフルオランテニル基、トリフェニレニル基、ベンゾトリフェニレニル基、ジベンゾトリフェニレニル基、ピセニル基、ベンゾピセニル基、及びジベンゾピセニル基から選択される縮合芳香族炭化水素基である。なかでも、ベンゾクリセニル基、トリフェニレニル基、又はフェナントレニル基がさらに好ましい。好ましくは、この縮合芳香族炭化水素基は非置換である。

【0278】

式(II)のモノアミン誘導体において、さらに好ましくは、 Ar^{114} 及び Ar^{115} はそれぞれ、フェニル基又はナフチル基であり、 Ar^{116} はフェニル基又はナフチル基であり、 Ar^{117} はベンゾクリセニル基、トリフェニレニル基、又はフェナントレニル基である。

【0279】

【化72】



【0280】

式(12)中、 Ar^{118} 、 Ar^{119} 、及び Ar^{121} は、置換又は非置換のアリール基又はヘテロアリール基である。アリール基又はヘテロアリール基の例は、 Ar^{111} についてアリール基又はヘテロアリール基として定義したものと同じであり、また、フェニル基であることが好ましい。 Ar^{120} は、置換又は非置換のアリーレン基又はヘテロアリーレン基であり、 Ar^{116} についてアリーレン基又はヘテロアリーレン基として定義したものと同じである。 Ar^{120} は、好ましくは、フェニレン基又はナフチレン基である。 n は2~5、好ましくは2~4、さらに好ましくは2~3の整数である。 n が2以上である場合、 Ar^{120} は互いに同じであるか異なっていてよい。

【0281】

Ar^{121} は、フェニル基、又は、ナフチル基、フェナントレニル基、ベンゾフェナントレニル基、ジベンゾフェナントレニル基、ベンゾクリセニル基、ジベンゾクリセニル基、フルオランテニル基、ベンゾフルオランテニル基、トリフェニレニル基、ベンゾトリフェニレニル基、ジベンゾトリフェニレニル基、ピセニル基、ベンゾピセニル基、ジベンゾピセニル基、フェナレニル基、及びジアザフェナントレニル基から選択される縮合炭化水素基であることが好ましい。なかでも、ベンゾクリセニル基、トリフェニレニル基、又はフェナントレニル基がさらに好ましい。

【0282】

具体的態様では、式(12)の第二の宿主物質について、 Ar^{118} 及び Ar^{119} はそれぞれ、フェニル基又はナフチル基であることが好ましく； Ar^{120} は、好ましくは、フェニレン基又はナフチレン基であり；かつ、 Ar^{121} は、好ましくは、ベンゾクリセニル基、トリフェニレニル基、又はフェナントレニル基である。

【0283】

Ar^{101} ~ Ar^{121} が置換基(1つ又は複数)を有する場合は、その置換基(1つ又は複数)は、好ましくは、1~20の炭素原子を有するアルキル基、1~20の炭素原子を有するハロアルキル基、3~18の炭素原子を有するシクロアルキル基、6~30の環炭素原子を有するアリール基、3~20の炭素原子を有するシリル基、シアノ基、及びハロゲン原子である。

10

20

30

40

50

【0284】

アルキル基のいくつかの例は、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、及び1-プロピルブチル基である。アリアル基の例は、Ar¹⁰¹に対してのものと同じである。

【0285】

ハロアルキル基は、2,2,2-トリフルオロエチル基によって例示される。

【0286】

シクロアルキル基のいくつかの例は、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、及びシクロオクチル基である。

【0287】

シリル基のいくつかの例は、トリメチルシリル基及びトリエチルシリル基である。

10

【0288】

ハロゲン原子のいくつかの例は、フッ素、塩素、臭素、及びヨウ素である。

【0289】

式(10)~(12)で表されるモノアミン誘導体が置換基を有しない場合、それは水素原子が置換していることを意味する。式(10)~(12)によって表されるモノアミン誘導体の水素原子には、軽水素及び重水素が含まれる。「環を形成している炭素原子(環炭素原子)」は、飽和環、不飽和環、又は芳香族環を形成している炭素原子を意味する。「環を形成している原子(環原子)」は、飽和環、不飽和環、又は芳香族環を含めた環を形成している炭素原子及びヘテロ原子を意味する。

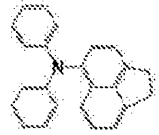
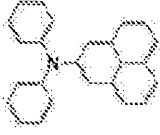
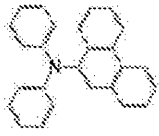
20

【0290】

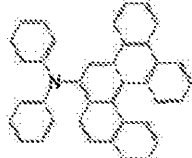
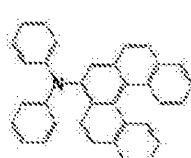
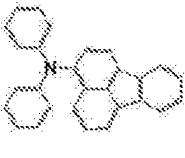
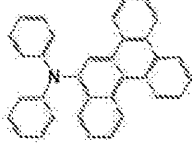
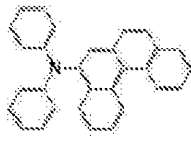
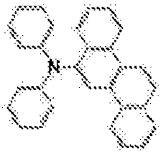
式(10)で表されるモノアミン誘導体のいくつかの具体例を以下に示す。

【0291】

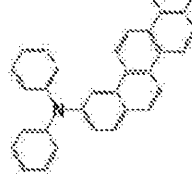
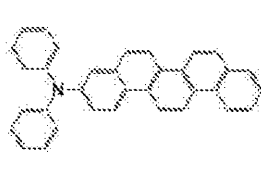
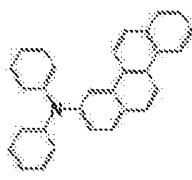
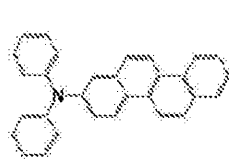
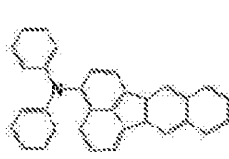
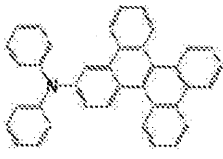
【化 7 3】



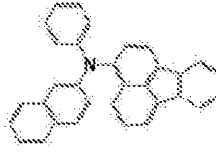
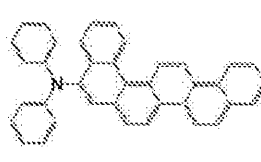
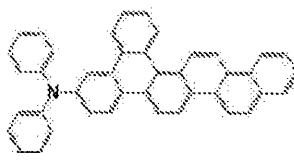
10



20



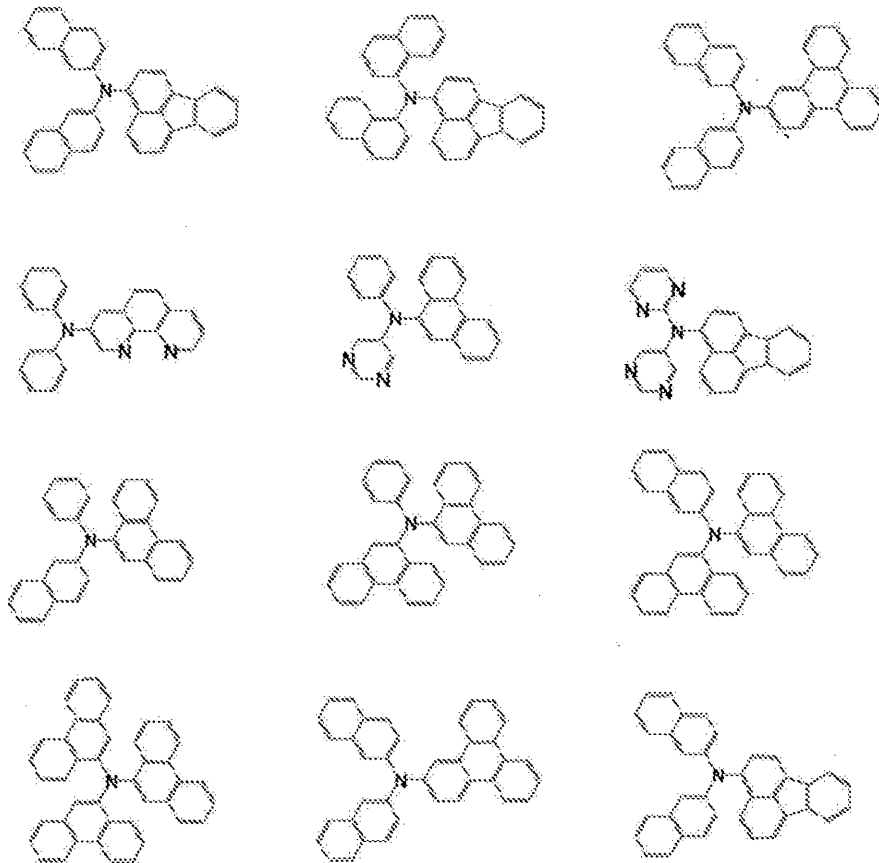
30



40

【 0 2 9 2 】

【化74】



10

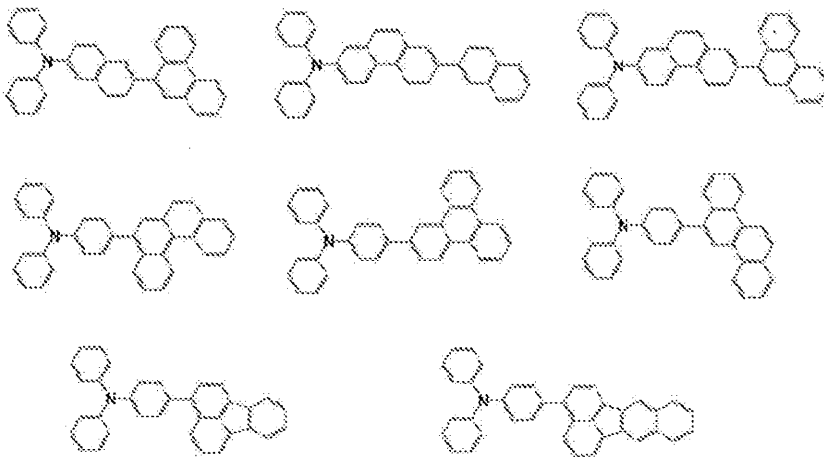
20

【0293】

式(11)で表されるモノアミン誘導体のいくつかの具体例を以下に示す。

【0294】

【化75】

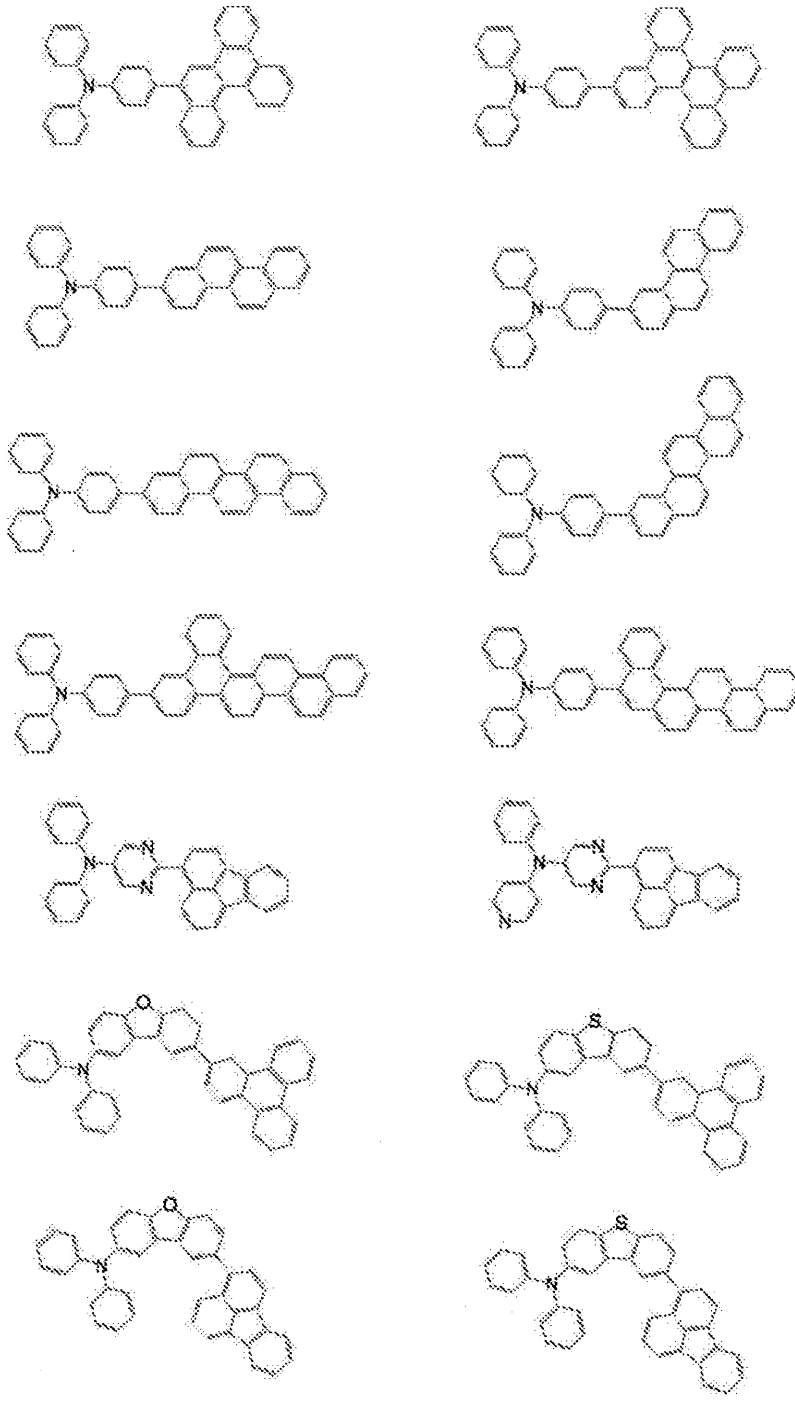


30

40

【0295】

【化 7 6】



10

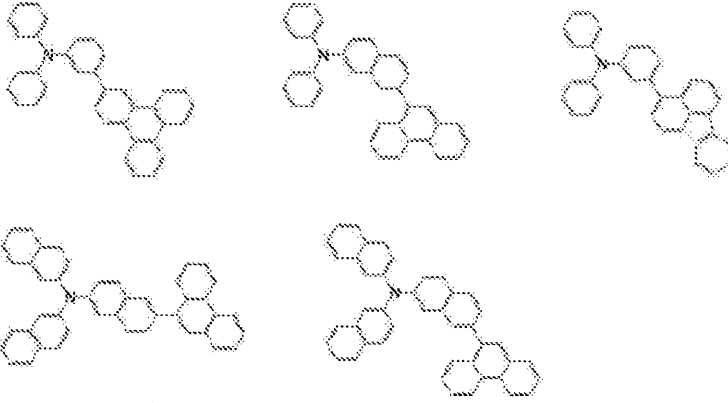
20

30

40

【 0 2 9 6 】

【化 7 7】



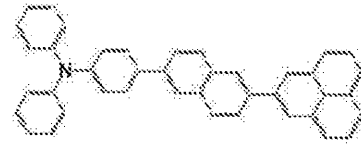
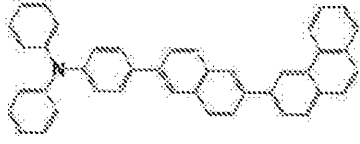
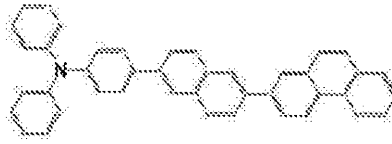
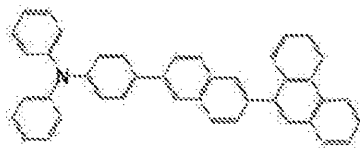
10

【 0 2 9 7 】

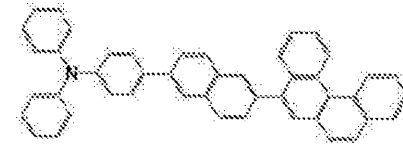
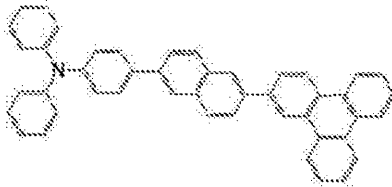
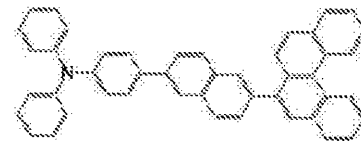
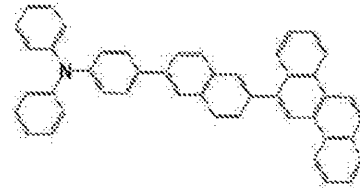
式 (1 2) で表されるモノアミン誘導体のいくつかの具体例を以下に示す。

【 0 2 9 8 】

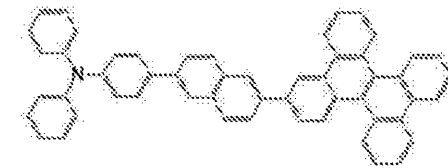
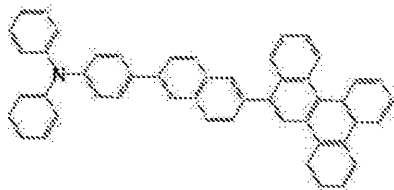
【化 7 8】



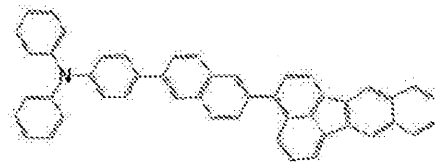
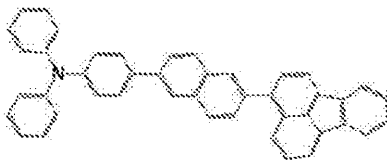
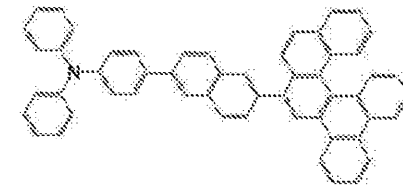
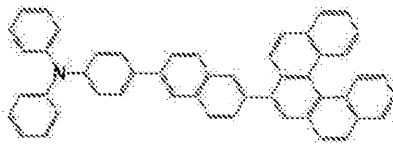
10



20



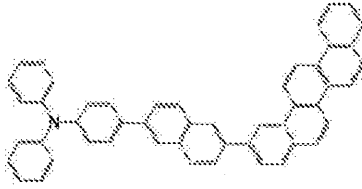
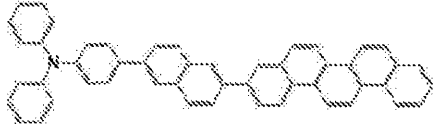
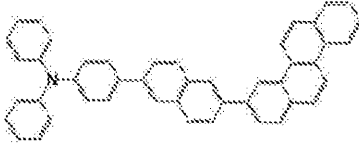
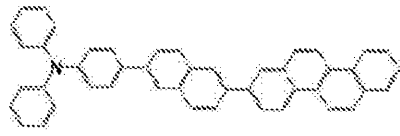
30



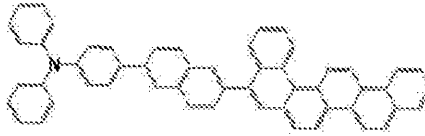
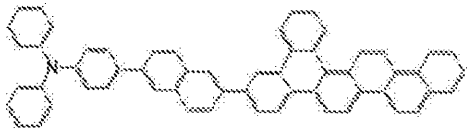
40

【 0 2 9 9 】

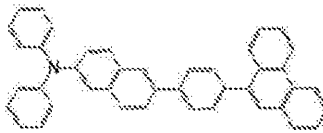
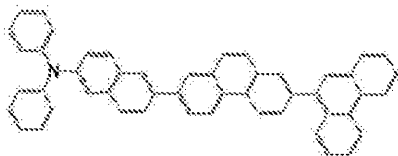
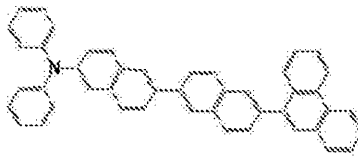
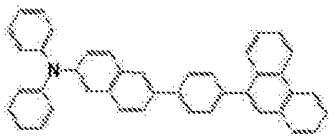
【化 7 9】



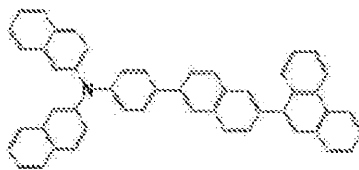
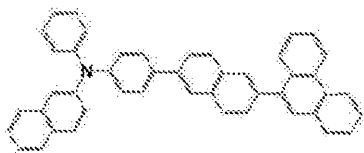
10



20

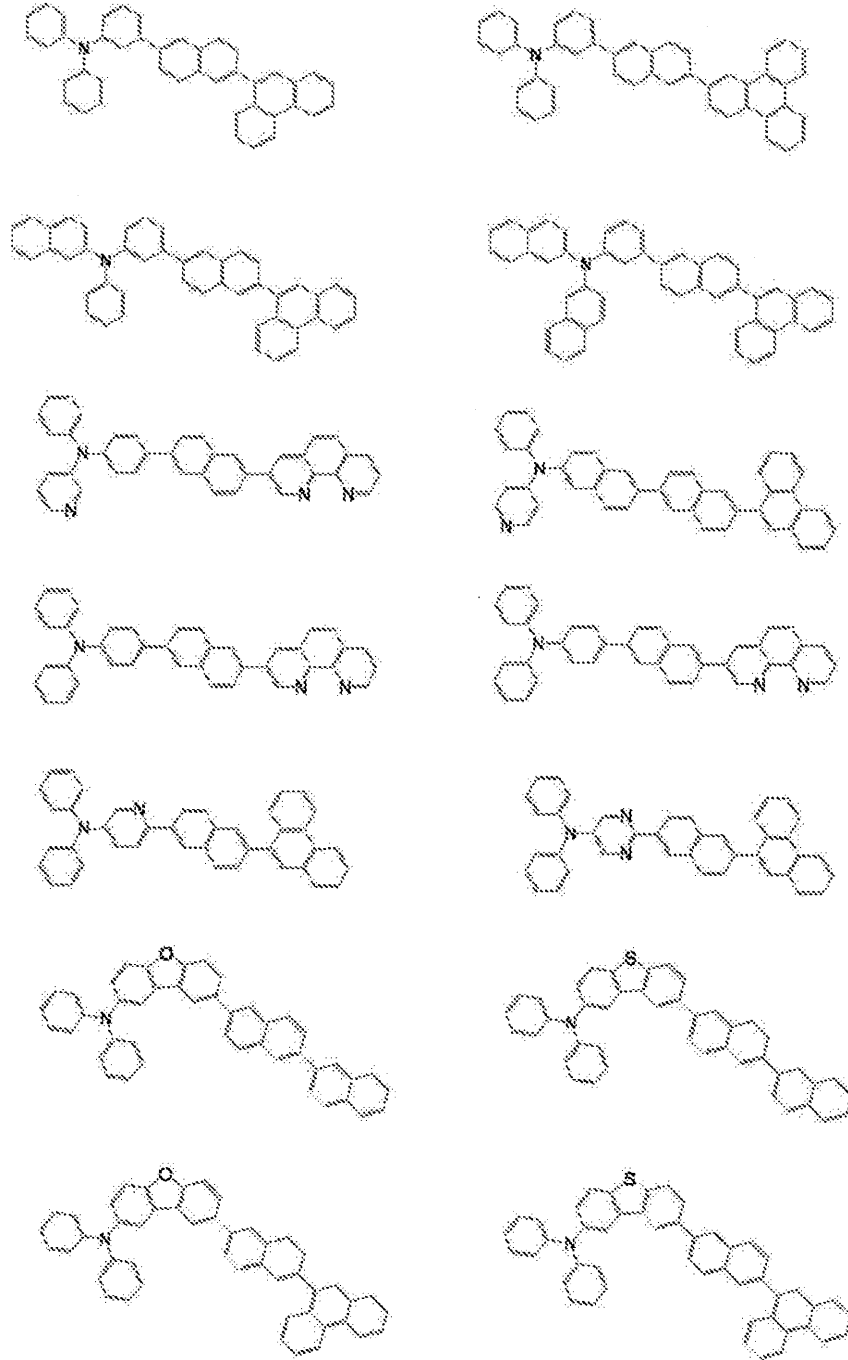


30



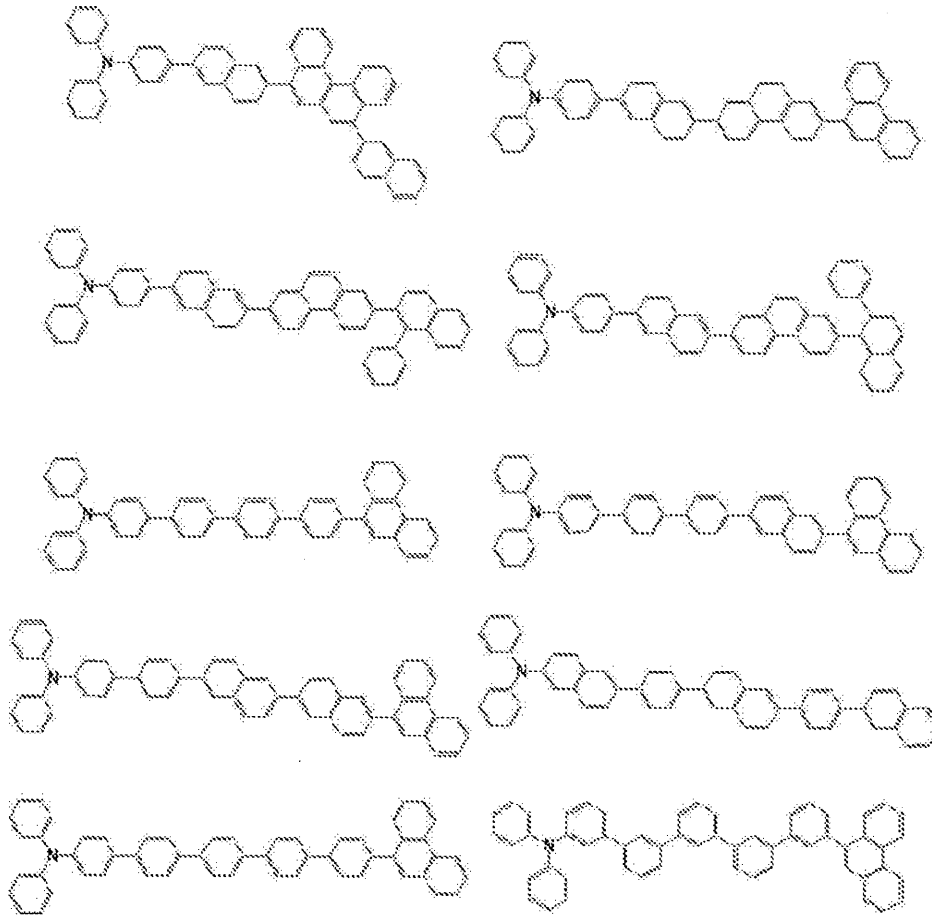
【 0 3 0 0 】

【化 8 0】



【 0 3 0 1】

【化 8 1】



10

20

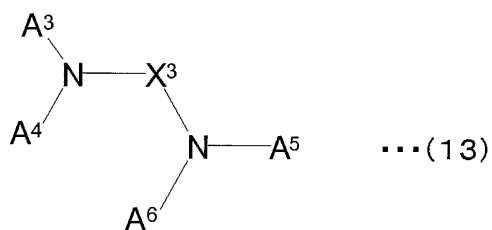
【0302】

別の態様では、第二の宿主物質は芳香族アミン化合物である。その芳香族アミン化合物の例は、好ましくは、式(13)又は(14)で表される化合物である。

【0303】

30

【化 8 2】



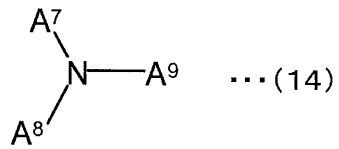
【0304】

40

式(13)において： X^3 は、10～40の環炭素原子を有する置換又は非置換のアリレン基を表し； $A^3 \sim A^6$ は6～60の環炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基、又は6～60の環原子を有するヘテロアリール基を表す。

【0305】

【化 8 3】



【 0 3 0 6 】

式(14)中、 $\text{A}^7 \sim \text{A}^9$ は、6～60の環炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基、又は6～60の環原子を有するヘテロアリール基を表す。

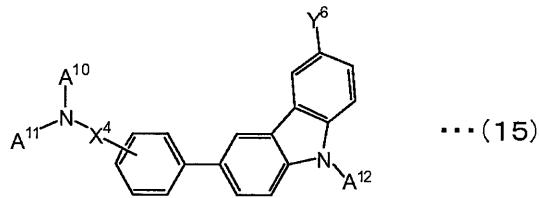
10

【 0 3 0 7 】

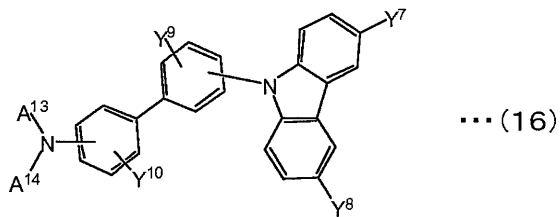
式(13)又は(14)で表される第二のホスト物質は、式(15)～(19)によって表されることが好ましい。

【 0 3 0 8 】

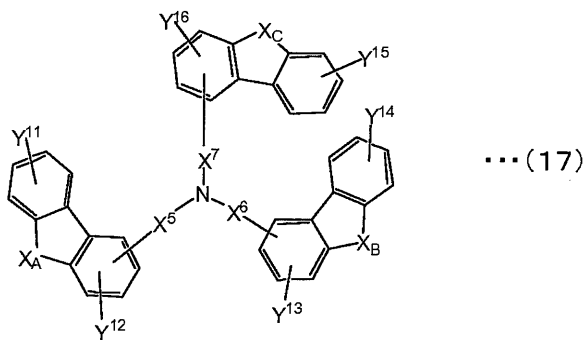
【化 8 4】



20

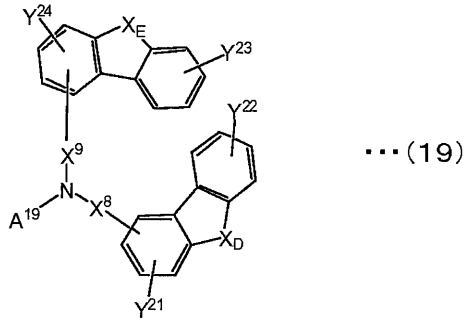
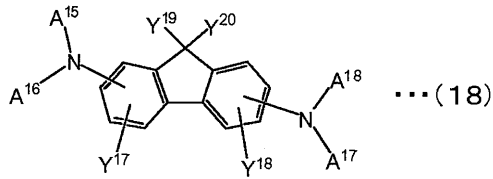


30



【 0 3 0 9 】

【化 8 5】



10

【 0 3 1 0】

式 (1 5) ~ (1 9) において、 $A^{10} \sim A^{19}$ はそれぞれ、6 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基；2 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基；芳香族アミノ基と結合した、8 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基；あるいは、芳香族ヘテロ環基と結合した、8 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基を表し；

20

A^{10} 、 A^{13} 、 A^{15} 、及び A^{17} は、それぞれ、 A^{11} 、 A^{14} 、 A^{16} 、及び A^{18} と結合して環を形成するように適合されており；

$X^4 \sim X^9$ は、単結合、又は 1 ~ 30 の炭素原子を有する連結基を表し；

$Y^6 \sim Y^{24}$ は、水素原子、ハロゲン原子、1 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキル基、3 ~ 20 の炭素原子を有する置換又は非置換のヘテロ環基、6 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリール基、7 ~ 20 の炭素原子を有する置換又は非置換のアラルキル基、2 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアルケニル基、1 ~ 40 炭素原子を有する置換又は非置換のアルキルアミノ基、7 ~ 60 の炭素原子を有する置換又は非置換のアラルキルアミノ基、3 ~ 20 の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキルシリル基、8 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールシリル基、8 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のアラルキルシリル基、あるいは、1 ~ 40 の炭素原子を有する置換又は非置換のハロゲン化アルキル基を表し；かつ

30

X_A 、 X_B 、 X_C 、 X_D 、 X_E はそれぞれ、硫黄原子、酸素原子、又はモノアリール置換窒素原子を表す。

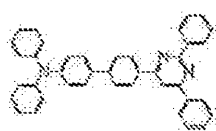
【 0 3 1 1】

式 (1 3)、(1 4)、及び (1 5) ~ (1 9) で表される化合物のいくつかの例は以下のとおりである。

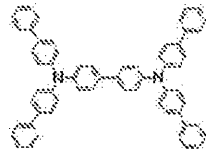
40

【 0 3 1 2】

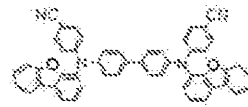
【化 8 6】



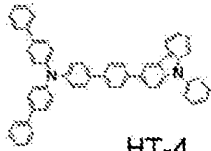
HT-1



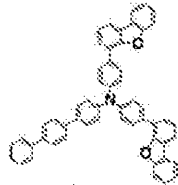
HT-2



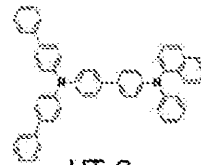
HT-3



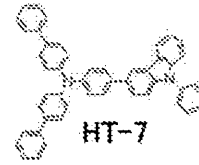
HT-4



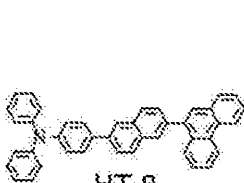
HT-5



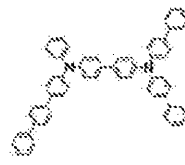
HT-6



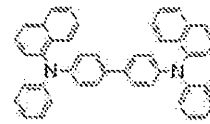
HT-7



HT-8



HT-9



HT-10

10

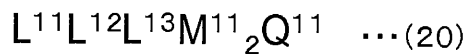
20

【 0 3 1 3 】

別の態様によれば、第二の宿主物質は金属錯体である。金属錯体は、好ましくは、下の式(20)で表される。

【 0 3 1 4 】

【化 8 7】

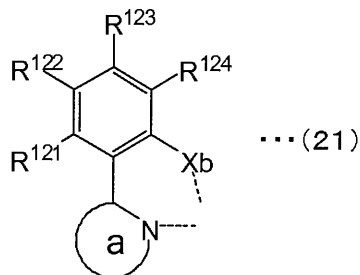


【 0 3 1 5 】

上記式中、 L^{11} 、 L^{12} 、及び L^{13} は独立に、下の式(21)で表される構造から選択され； M^{11} は二価の金属であり；かつ、 Q^{11} は、無機又は有機酸から誘導される一価のアニオンである。

【 0 3 1 6 】

【化 8 8】



...(21)

30

40

【 0 3 1 7 】

配位子中、 Xb は、 O 、 S 、又は Se であり； a -環は、オキサゾール、チアゾール、イミダゾール、オキサジアゾール、チアジアゾール、ベンゾオキサゾール、ベンゾチアゾール、ベンゾイミダゾール、ピリジン、又はキノリンであり；

$R^{121} \sim R^{124}$ は独立に、水素、1~5の炭素原子を有するアルキル基、ハロゲン、シリル基、又は6~20の炭素原子を有するアリール基（これらはアルキレン又はアル

50

ケニレンを介して隣接する置換基と結合して縮合環を形成していてもよい)である。そのピリジン及びキノリンは R^{121} 又は R^{122} と結合して縮合環を形成していてもよい。

【0318】

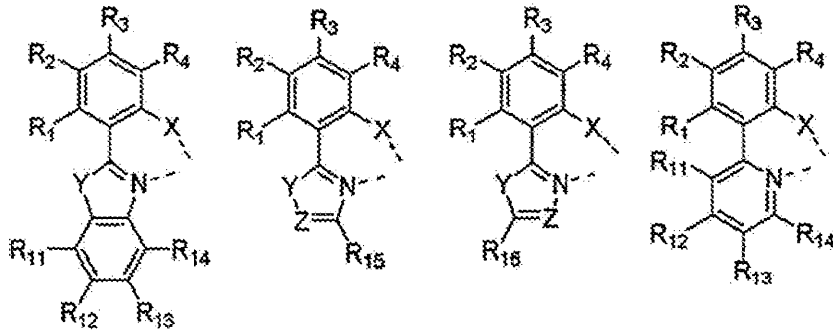
a-環及び $R^{121} \sim R^{124}$ に対するアリール基は、C1～C5アルキル基、ハロゲン、ハロゲン置換基を有するC1～C5アルキル基、フェニル基、ナフチル基、シリル基、又はアミノ基でさらに置換されていてもよい。

【0319】

配位子 L^{11} 、 L^{12} 、及び L^{13} は、独立に、下記構造から選択される。

【0320】

【化89】



10

20

【0321】

上記配位子において：X及び $R_1 \sim R_4$ は、式(21)におけるXb及び $R^{121} \sim R^{124}$ と同じものを表し；Yは、O、S、又は NR_{21} であり；ZはCH又はNであり； $R_{11} \sim R_{16}$ は独立に、水素、C1～C5アルキル基、ハロゲン、ハロゲン置換基を有するC1～C5アルキル基、フェニル基、ナフチル基、シリル基、又はアミノ基であり；かつ、 $R_{11} \sim R_{14}$ は隣接する置換基とアルキレン又はアルケニレンを介して結合して縮合環を形成していてもよい。

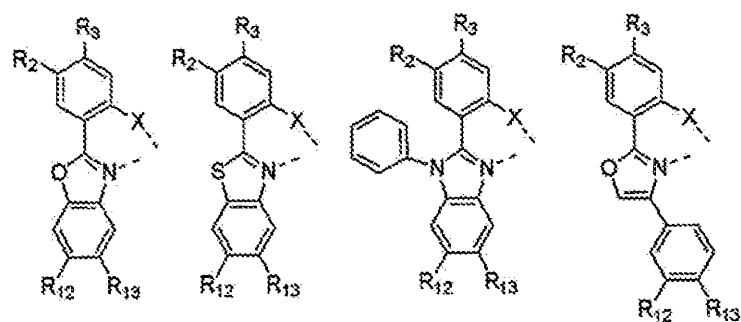
【0322】

上記化合物の配位子 L^{11} 、 L^{12} 、及び L^{13} は同じであってもよく、以下の構造から選択することができる。

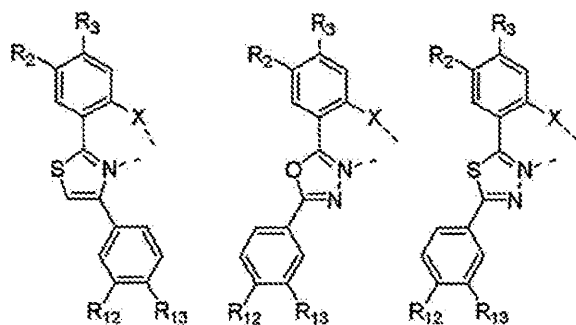
30

【0323】

【化 9 0】



10



20

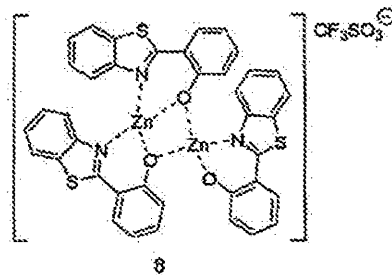
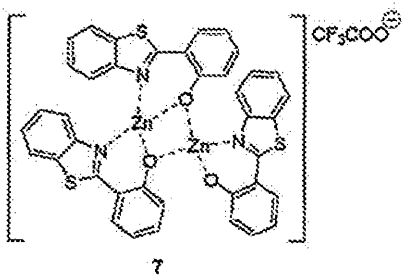
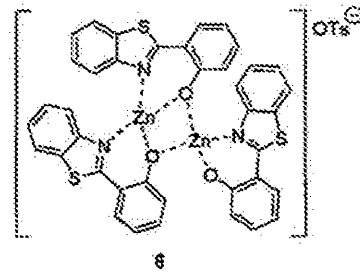
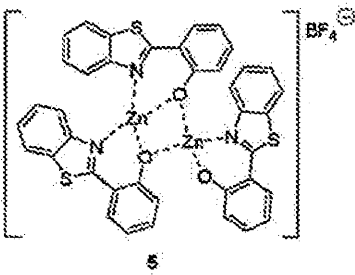
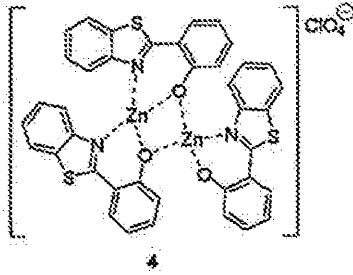
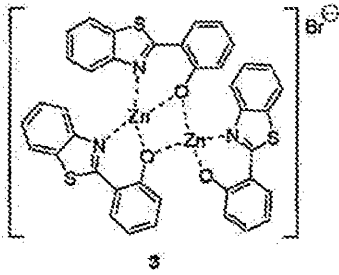
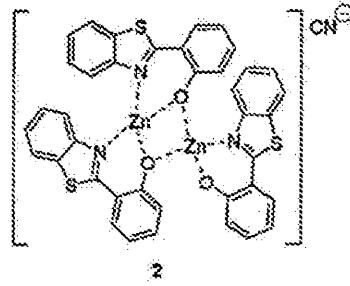
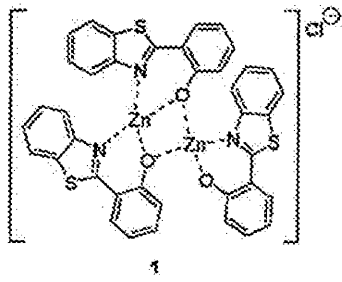
【 0 3 2 4】

上記配位子において：Xは、O、S、又はSeであり； R_2 、 R_3 、 R_{12} 、及び R_{13} は独立に、水素、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、フッ素、塩素、トリフルオロメチル、フェニル、ナフチル、フルオレニル、トリメチルシリル、トリフェニルシリル、*t*-ブチルジメチルシリル、ジメチルアミン、ジエチルアミン、又はジフェニルアミンである。フェニル、ナフチル、フルオレニルは、フッ素、塩素、トリメチルシリル、トリフェニルシリル、*t*-ブチルジメチルシリル、ジメチルアミン、ジエチルアミン、又はジフェニルアミンでさらに置換されている。さらに、この例示態様においては、金属錯体は好ましくは亜鉛錯体である。そのような好ましい亜鉛錯体のいくつかの例を以下に示す。

30

【 0 3 2 5】

【化 9 1】



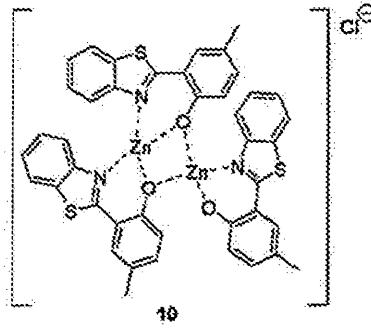
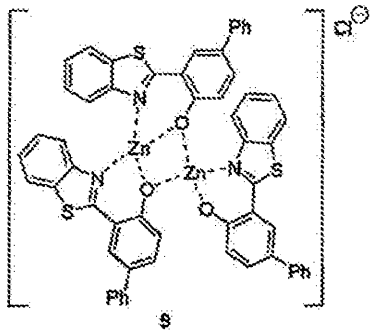
【 0 3 2 6 】

10

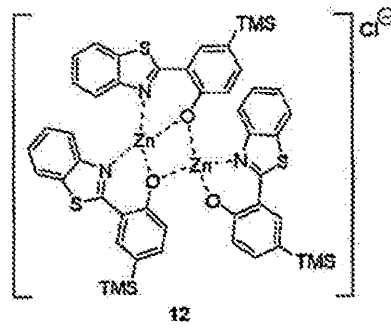
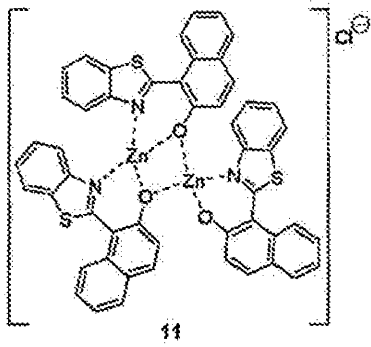
20

30

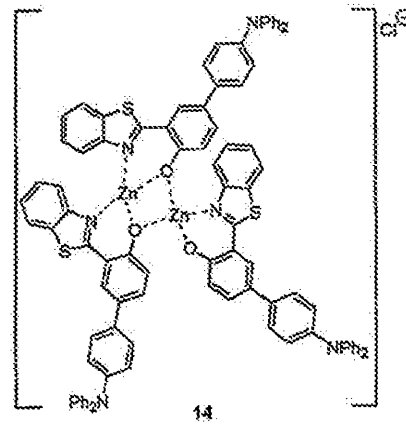
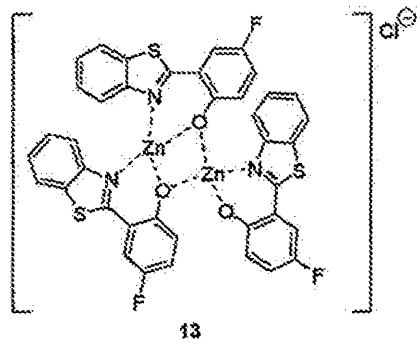
【化 9 2】



10



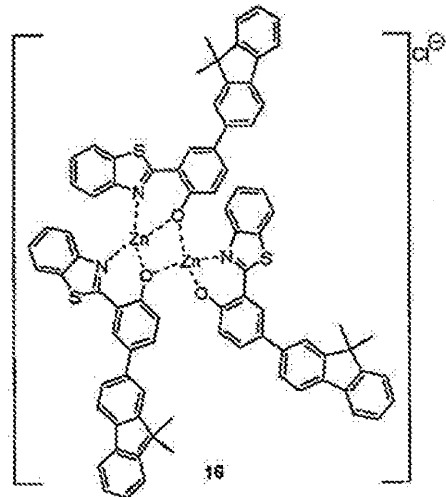
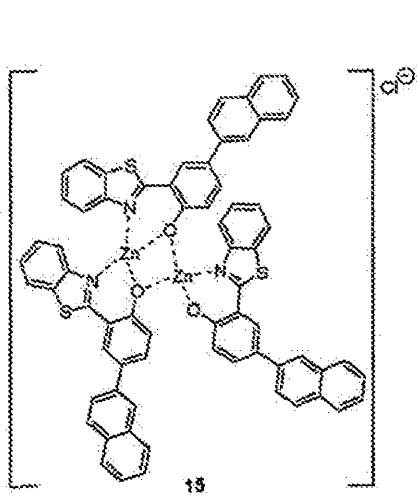
20



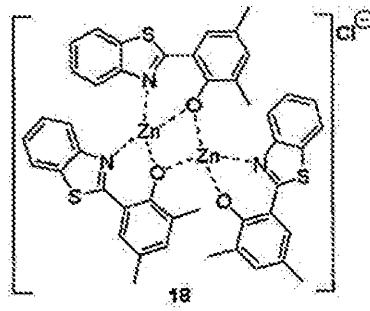
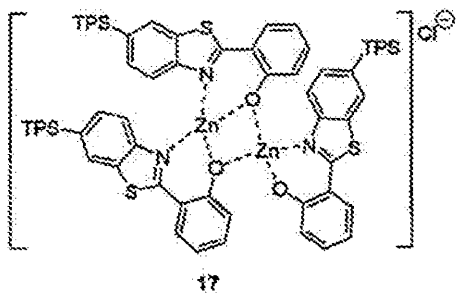
30

【 0 3 2 7 】

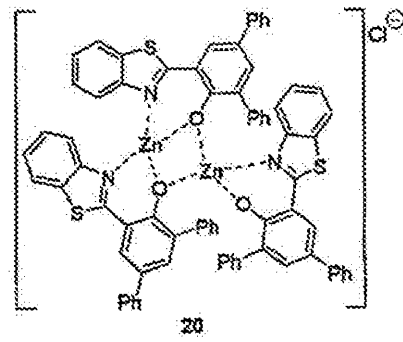
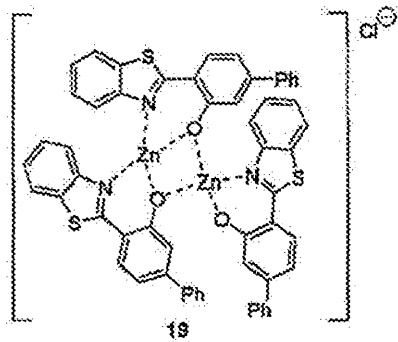
【化 9 3】



10



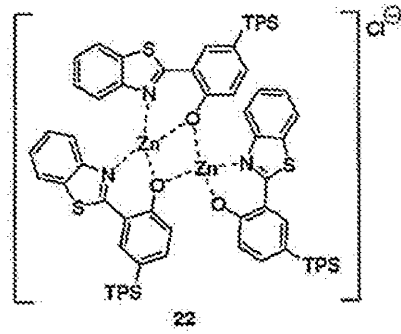
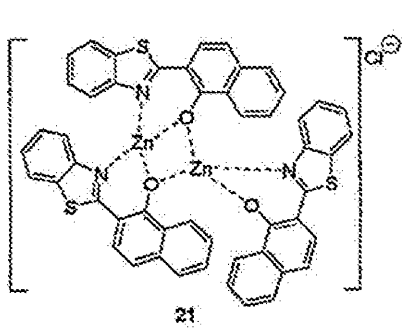
20



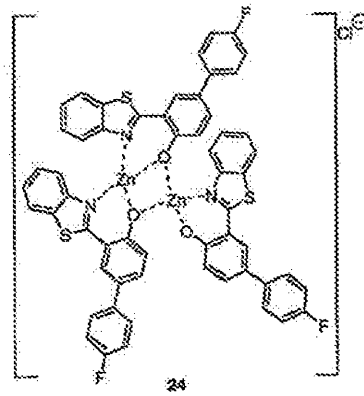
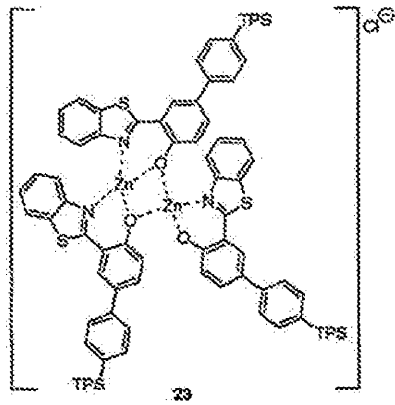
30

【 0 3 2 8】

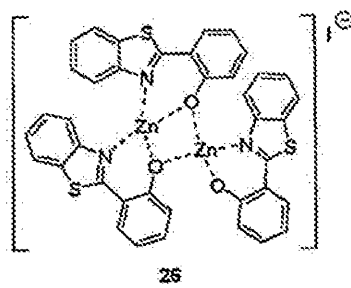
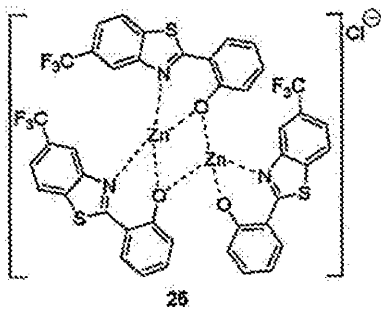
【化 9 4】



10



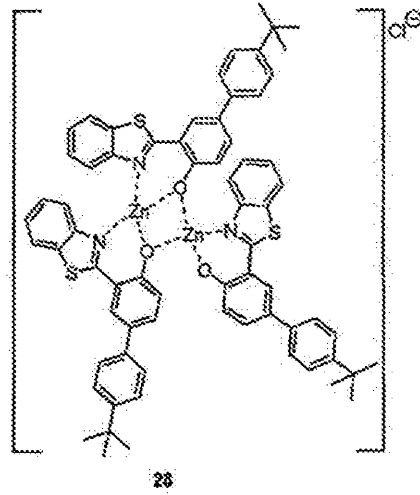
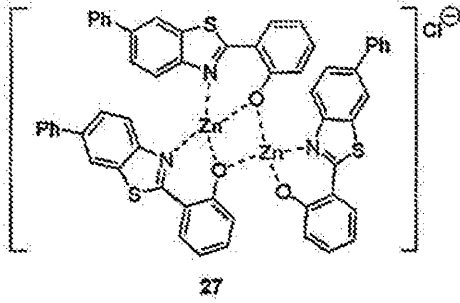
20



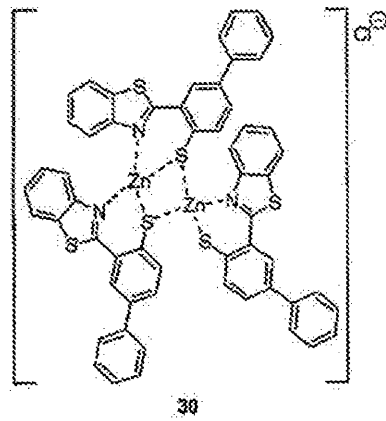
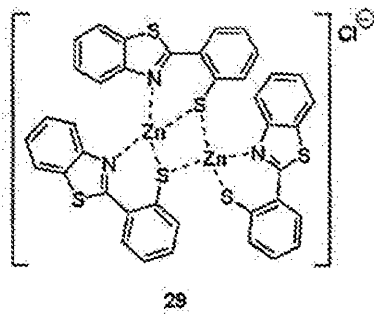
30

【 0 3 2 9 】

【化 9 5】



10

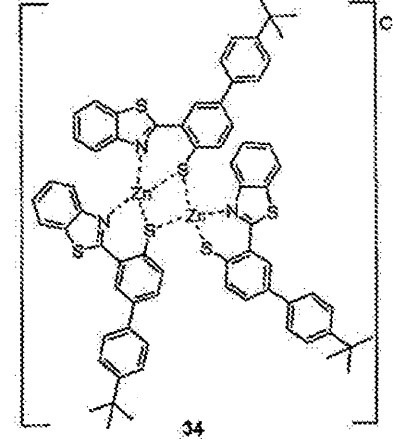
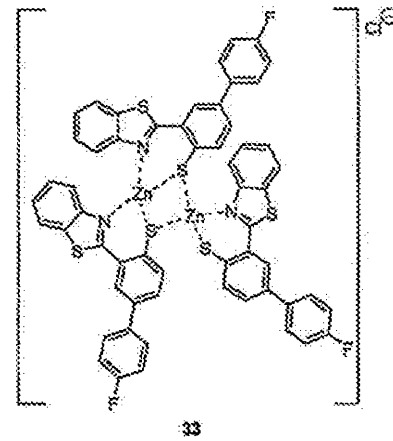
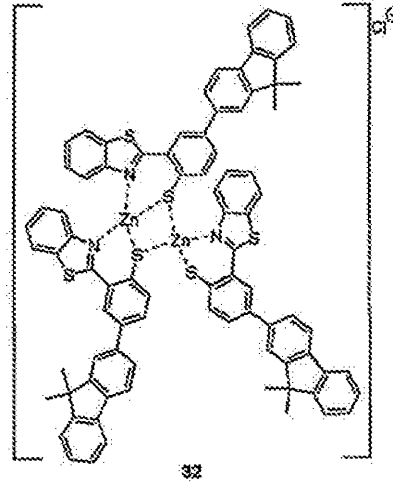
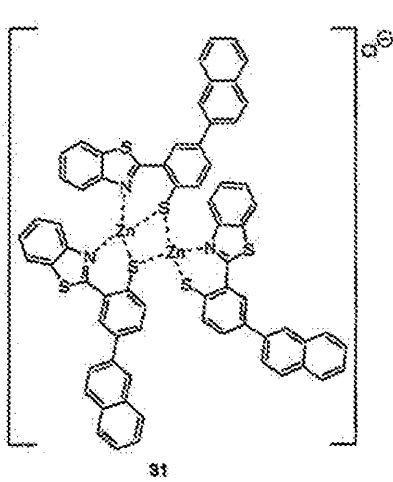


20

【 0 3 3 0 】

30

【化 9 6】



10

20

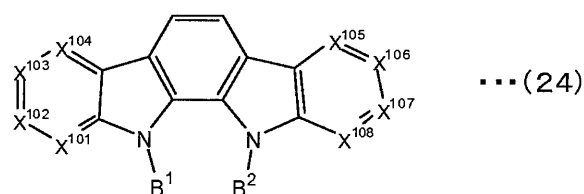
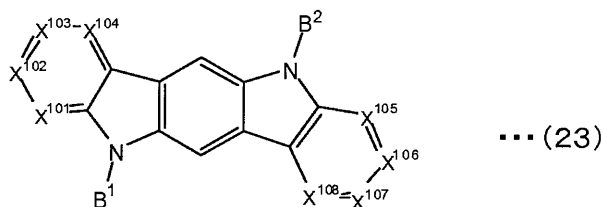
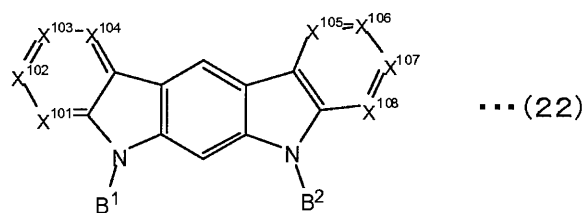
30

【 0 3 3 1】

別の態様では、第二のホスト物質は下の式(22)~(24)によって表される化合物であることができる。

【 0 3 3 2】

【化 9 7】



10

20

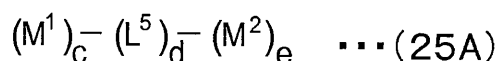
【 0 3 3 3 】

式 (22) ~ (24) において： $X^{101} \sim X^{108}$ は、窒素原子又は C - Ar¹³¹ である。Ar¹³¹ は、水素原子、フッ素原子、シアノ基、1 ~ 20 の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキル基、1 ~ 20 の炭素原子を有する置換又は非置換のアルコキシ基、1 ~ 20 の炭素原子を有する置換又は非置換のハロアルキル基、1 ~ 20 の炭素原子を有する置換又は非置換のハロアルコキシ基、1 ~ 10 の炭素原子を有する置換又は非置換のアルキルシリル基、6 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換のアリールシリル基、6 ~ 30 の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6 ~ 30 の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、2 ~ 30 の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基、あるいは 2 ~ 30 の環炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族ヘテロ環基を表す。 $X^{101} \sim X^{108}$ のうち隣接するものは互いに結合して環構造を形成してもよい。B¹ 及び B² は下の式 (25A) 又は (25B) で表される基を表す。

30

【 0 3 3 4 】

【化 9 8】



【 0 3 3 5 】

式 (25A) 中：M¹ 及び M² は互いに独立に、2 ~ 40 の環炭素原子を有する置換又は非置換の窒素含有芳香族ヘテロ環基又は窒素含有縮合芳香族ヘテロ環基を表し；M¹ 及び M² は同じであっても異なってもよく；L⁵ は、単結合、6 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、5 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換のシクロアルキレン基、2 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族ヘテロ環基、あるいは 2 ~ 30 の炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族ヘテロ環基を表し；

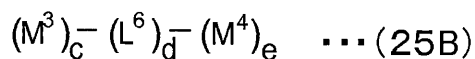
40

c は 0 ~ 2 の整数を表し；d は 1 ~ 2 の整数を表し；e は 0 ~ 2 の整数を表し；かつ、c + e は 1 以上を表す。

【 0 3 3 6 】

50

【化 9 9】



【0337】

式(25B)中、 M^3 及び M^4 はそれぞれ独立に、2~40の環炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基を表し； M^3 及び M^4 は同じでも異なってもよく； L^6 は、単結合、6~30の炭素原子を有する置換又は非置換の芳香族炭化水素基、6~30の炭素原子を有する置換又は非置換の縮合芳香族炭化水素基、あるいは5~30の炭素原子を有する置換又は非置換のシクロアルキレン基を表し；
cは0~2の整数を表し；dは1~2の整数を表し；eは0~2の整数を表し；かつ、 $c + e$ は1以上を表す。

10

【0338】

式(25A)及び(7A)はそれぞれ式(25B)及び(7B)と同じである。 $M^1 \sim M^4$ 及び $L^5 \sim L^6$ は式(7A)及び(7B)と関連して記載したものと同一である。

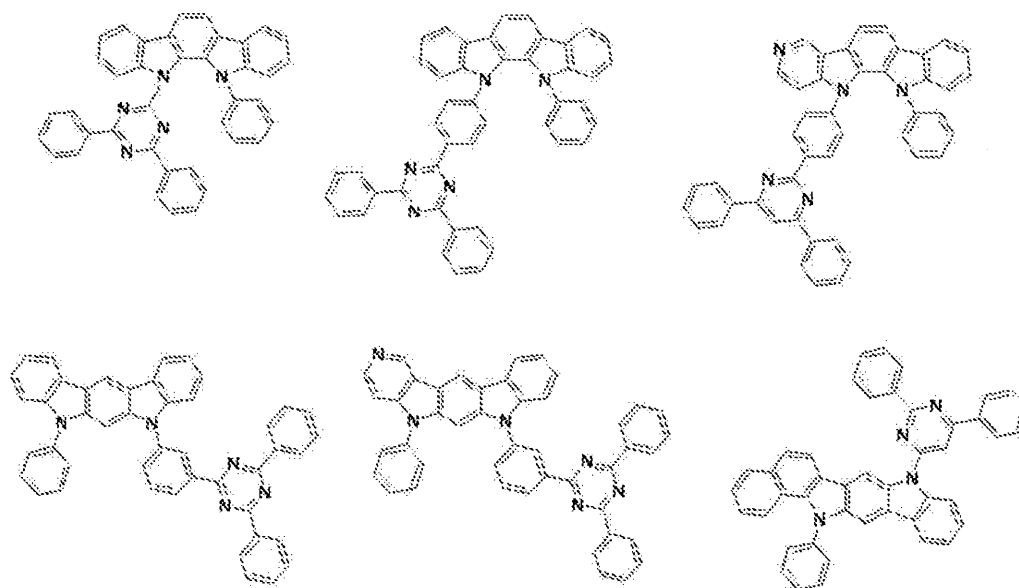
【0339】

式(22)~(24)で表される化合物のいくつかの具体例を下に示す。

【0340】

【化100】

20



30

【0341】

別の態様では、第二のホスト物質は、式(1)で表され、かつ、上記の第一のホスト物質とは異なる構造を有する化合物であることができる。

【0342】

本発明は上記の記載に限定されず、任意の修飾が本発明の範囲及び概念のうちにある限りそのような修飾も含まれることに注意すべきである。

40

【0343】

[第一のホスト物質のための例示化合物H1の合成]

化合物H1の合成のために、文献(J. Bergman, A. Brynolf, B. Elman, 及びE. Vuorinen, Tetrahedron, 42, 3697-3706 (1986))に記載された方法を適用することによって、中間体H1-1を最初に合成した。具体的には、三口フラスコ(500 ml)に、1 Mのフェニルマグネシウムプロマイドのテトラヒドロフラン溶液(100 ml, 100 mmol)を入れた。無水エーテル(100 ml)をさらに添加し、油浴中、45 で加熱し還流させた。2-シアノアニリン(5.91 g, 50 mmol)の無水エーテル溶液(50 ml)を30分にわたり滴下して

50

加えた。さらに 1.5 時間還流させた後、その反応溶液を氷水浴中で 0 に冷やした。次に、4 - プロモベンゾエトクロライド (13.2 g, 60 mmol) の無水エーテル溶液 (100 ml) をその反応溶液に 10 分かけて滴下して加え、45 の油浴中で 2 時間加熱して還流させた。反応後、その反応溶液を氷水浴中で 0 に冷やした。飽和塩化アンモニウムの水溶液を添加した。沈殿した固体を濾過によって分離した。次に、得られたものを少量のメタノールで洗い、真空乾燥させて、中間体 H 1 - 1 を得た (10.8 g, 60% の収率)。

【 0 3 4 4 】

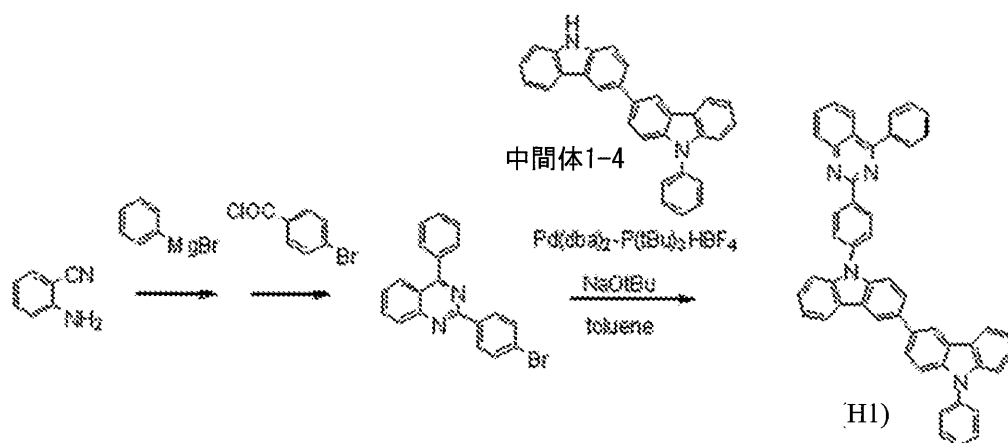
次に、窒素雰囲気下で、その中間体 (H 1 - 1) (1.4 g, 3.9 mmol)、中間体 1 - 4 (1.6 g, 3.9 mmol)、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0.071 g, 0.078 mmol)、トリ - t - ブチルホスホニウムテトラフルオロボレート (0.091 g, 0.31 mmol)、ナトリウム t - ブトキシド (0.53 g, 5.5 mmol)、及び無水トルエン (20 mL) を順に混合し、8 時間加熱し還流させた。その反応溶液を室温まで冷やした後、有機層をとり、有機溶媒を減圧下で留去させた。得られた残留物を、シリカゲルカラムクロマトグラフィーによって精製して、化合物 H 1 (2.0 g, 75% の収率) を得た。FD - MS 分析の結果は 688 に等しい m/e を示し、一方、計算した分子量は 688 だった。

10

化合物 H 1 の合成スキームを下に示す。

【 0 3 4 5 】

【 化 1 0 1 】



20

30

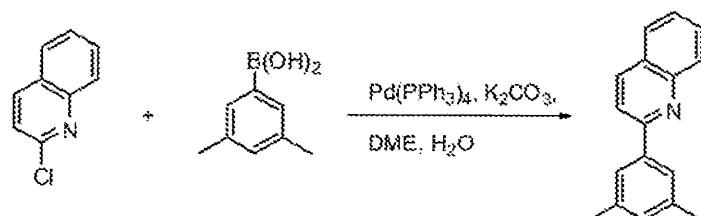
【 0 3 4 6 】

[赤色リン光ドーパント化合物 D 8 の合成]

【 0 3 4 7 】

【 化 1 0 2 】

ステップ 1



40

【 0 3 4 8 】

500 mL の丸底フラスコに、9.0 g (54.4 mmol) の 2 - クロロキノリン、9.2 g (59.8 mmol) の 3, 5 - ジメチルフェニルボロン酸、1.8 g (1.5 mmol) のトリス (トリフェニルホスフィン) パラジウム、22.4 g (163 mmol) の K_2CO_3 、150 mL の 1, 2 - ジメトキシエタン、及び 150 mL の水を仕込んだ。この反応混合物を窒素下で夜通し加熱し還流させた。反応混合物を冷やし、有機抽出物をシリカゲルカラ

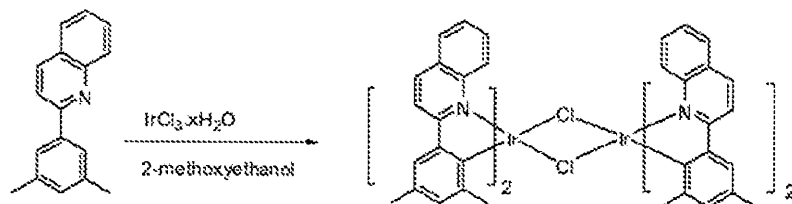
50

ムクロマトグラフィー（溶出液としてヘキサン中10%酢酸エチル）によって精製した。得られた物質を185 mmHgでの真空蒸留（クーゲルロール）によってさらに精製して、12.2 g（95%収率）の生成物を無色液体として得た。

【0349】

【化103】

ステップ2



10

【0350】

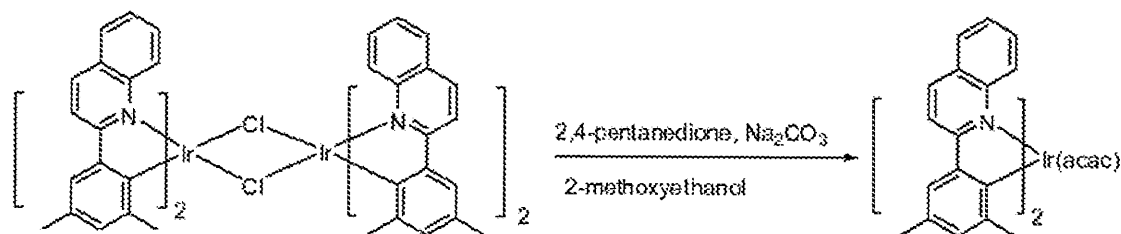
ステップ1からの生成物4.6 g（197.4 mmol）、53.6 mLの2-メトキシエタノール、及び17.8 mLの水を、1000 mLの三口フラスコに仕込んだ。45分間、撹拌しながら、反応混合物に窒素をバブリングさせた。次に3.2 g（86.2 mmol）の $\text{IrCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ をその混合物に添加し、窒素下で17時間、加熱し還流させた（100~105℃）。その反応混合物を冷やして濾過した。その黒灰色の固体をメタノール（4×150 mL）、次にヘキサン（3×300 mL）で洗った。真空オープン中で乾燥させた後、36.5 gのダイマーが得られた。そのダイマーはさらに精製することなく次のステップで用いた。

20

【0351】

【化104】

ステップ3



30

(8)

【0352】

3.6 gの上記ダイマー（26 mmol）、12.0 gの2,4-ペンタンジオン（1200 mmol）、6.6 g（622 mmol）の炭酸ナトリウム、及び約500 mLの2-メトキシエタノールを、1000 mLの丸底フラスコに入れた。反応混合物を室温で24時間激しく撹拌した。反応混合物を次に吸引濾過し、メタノール（3×250 mL）、次にヘキサン（4×300 mL）で洗った。固体を集め、約1000 mLの溶媒混合物（900 mLの塩化メチレン及び100 mLのトリエチルアミン）中で約10分間撹拌した。次に、その混合物を、ワットマン品質1番円形ろ紙を用いて重力式濾過をした。ろ液中の溶媒を蒸発させた後、約2.0 gの赤色の最終生成物である化合物D8（52%収率）が得られた（非酸性HPLCカラムで99.5%純度）。

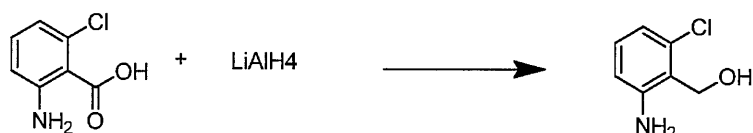
40

【0353】

[赤色リン光ドーパント化合物D9の合成]

【0354】

【化105】



【0355】

(2-アミノ-6-クロロフェニル)メタノールの合成

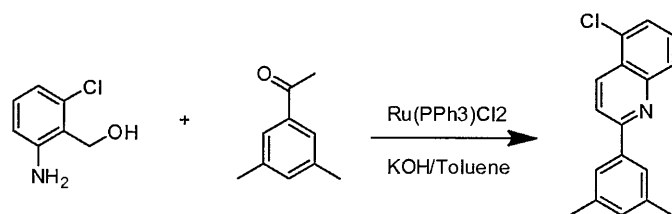
2-アミノ-6-クロロ安息香酸 (25.0 g, 143 mmol) を、500 mL の二口丸底フラスコ中で120 mL の無水THFに溶かした。その溶液を氷水浴中で冷やした。1.0 Mの水素化アルミニウムリチウム (LAH) のテトラヒドロフラン (THF) 溶液 215 mL を次に滴下により添加した。全てのLAHを添加した後、反応混合物を室温まで温まるようさせておき、次に室温で夜通し攪拌した。約10 mLの水をその反応混合物に添加し、次に7 gの15% NaOHを添加した。20 gの追加の水を、反応混合物に添加した。有機THF相をデカンテーションし、固体に約200 mLの酢酸エチルを攪拌しながら加えた。一緒に合わせた酢酸エチル有機部分とTHF部分に Na_2SO_4 を乾燥剤として添加した。その混合物を濾過し、溶媒を蒸発させた。約20 gの黄色固体が得られ、さらに精製することなく次のステップで用いた。

10

【0356】

【化106】

20



【0357】

5-クロロ-2-(3,5-ジメチルフェニル)キノリンの合成

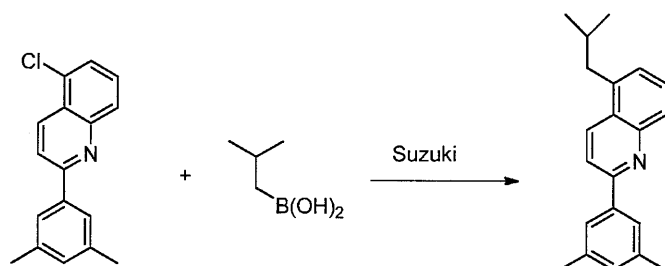
(2-アミノ-6-クロロフェニル)メタノール (16 g, 102 mmol)、3,5-ジメチルアセトフェノン (22.6 g, 152 mmol)、 $\text{RuCl}_2(\text{PPh}_3)_3$ (0.973 g, 1.015 mmol)、及び KOH (10.25 g, 183 mmol) を、270 mLのトルエン中で18時間、還流させた。ディーン-スタークトラップを使用して反応系から水を集めた。その反応混合物を室温まで冷えるようにさせておき、シリカゲルの詰め物を通して濾過し、ヘキサン中5%酢酸エチルで溶出させた。生成物をクーゲルロール蒸留によってさらに精製して、23.5 gの粗生成物を得て、これを60 mLのMeOHから結晶化させて、8.6 g (32%収率)の所望する生成物を得た。

30

【0358】

【化107】

40



【0359】

2-(3,5-ジメチルフェニル)-5-イソブチルキノリンの合成

5-クロロ-2-(3,5-ジメチルフェニル)キノリン (4.3 g, 16.06 mmol)、イ

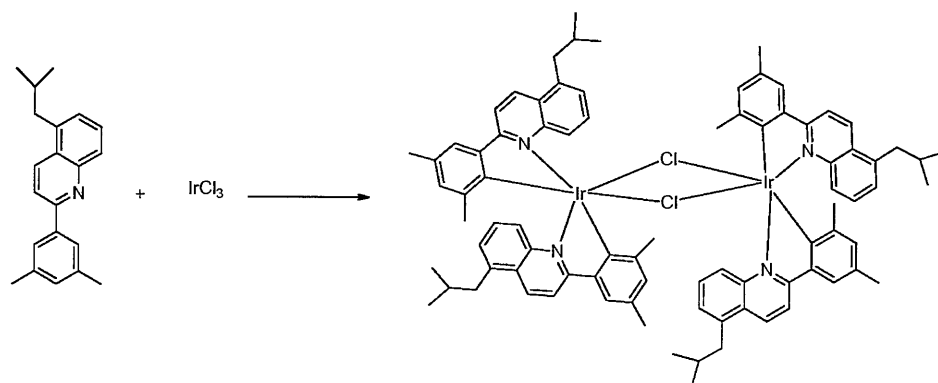
50

ソブチルボロン酸 (3.2 g, 31.4 mmol)、ジシクロヘキシル (2, 6 - ジメトキシ - [1, 1 - ビフェニル] - 2 - イル) ホスフィン (0.538 g, 1.31 mmol)、及びリン酸カリウム・一水和物 (18.3 g, 79 mmol) を、114 mL のトルエン中で混合した。その系を20分間、脱ガスした。Pd₂(dba)₃ を次に添加し、その系を夜通し還流させた。室温まで冷やした後、反応混合物を、セライト (登録商標) の詰め物を通して濾過し、ジクロロメタンで溶出させた。生成物を、クーゲルロール蒸留によってさらに精製し、次に、ヘキサン中5%酢酸エチルを用いるカラムクロマトグラフィーによってさらに精製した。その次にさらにクーゲルロール蒸留を行って、3.2 g (72%収率) の生成物を得た。

【0360】

10

【化108】



20

【0361】

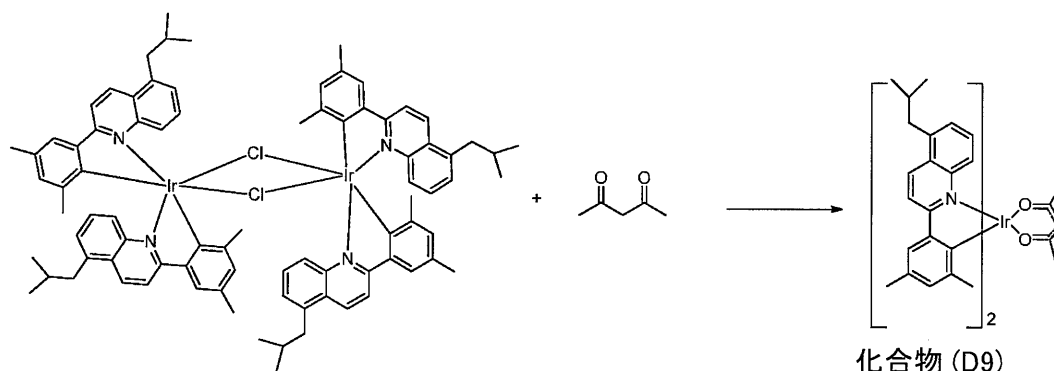
イリジウムダイマーの合成

2 - (3, 5 - ジメチルフェニル) - 5 - イソブチルキノリン (3.2 g, 11.06 mmol)、IrCl₃ · 4H₂O (1.79 g, 4.83 mmol)、2 - エトキシエタノール (45 mL)、及び水 (105 mL) の混合物を、窒素下で夜通し還流させた。その反応混合物を濾過し、MeOH (3 × 10 mL) で洗った。真空乾燥の後、約2.9 g のダイマーが得られた。このダイマーはさらに精製することなく次のステップで用いた。

30

【0362】

【化109】



40

【0363】

化合物 D9 の合成

ダイマー (2.9 g, 1.80 mmol)、ペンタン - 2, 4 - ジオン (1.80 g, 18.02 mmol)、K₂CO₃ (2.49 g, 18.02 mmol)、及び2 - エトキシエタノール (22 mL) を、室温で24時間攪拌した。沈殿物を濾過し、メタノールで洗った。その固体を、シリカゲルの詰め物 (ヘキサン中15%のトリエチルアミン (TEA) で前処理したもの) にそれを通して、塩化メチレンで溶出させて、さらに精製した。2 - プロパノールをその濾液に添加した

50

。その濾液を濃縮したが、完全には乾燥させなかった。濾過の後で 1.6 g の生成物が得られた。その固体を、高真空下で 240 °C にて 2 回昇華させて、1.0 g (64%) の化合物 D9 を得た。

【0364】

[有機 EL デバイス例 1 の製造]

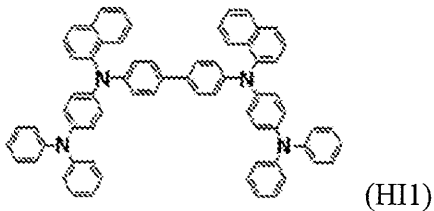
例 1 では、有機 EL デバイスを以下のとおり製造した。ITO 透明電極 (アノード、130 nm 厚さ) を有するガラス基板 (大きさ: 25 mm x 75 mm x 1.1 mm 厚さ、Geomatec Co., Ltd. 製) を、イソプロピルアルコール中で 5 分間、超音波洗浄し、次に 30 分間、UV / オゾン洗浄した。

【0365】

透明電極線を有する上記ガラス基板を清浄にした後、そのガラス基板を、真空蒸着装置の基板ホルダーに取り付け、化合物 HI1 を蒸発させてそのガラス基板の表面上に 20 nm の厚さの HI1 膜を形成させた。ここでそのガラス基板において、透明電極線は透明電極を覆うように備え付けられている。HI1 膜は正孔注入層としてはたらく。その正孔注入層の化合物 HI1 は以下の式で表される。

【0366】

【化 110】

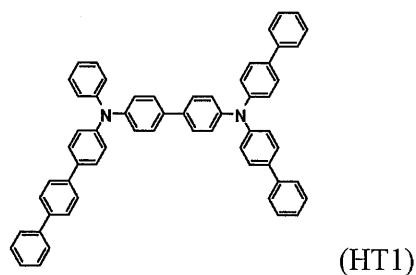


【0367】

化合物 HT1 を上記正孔注入層の上に蒸着させて、185 nm の厚さの HT1 膜を形成させ、これは第一の正孔輸送層としてはたらく。次に、化合物 HT2 をその HT1 膜の上に蒸着させて、20 nm の厚さの HT2 膜を形成させ、これは第二の正孔輸送層としてはたらく。第一の正孔輸送層の化合物 HT1 は以下の式で表される。

【0368】

【化 111】



【0369】

上記第二の正孔輸送層の化合物 HT2 は以下の式で表される。

【0370】

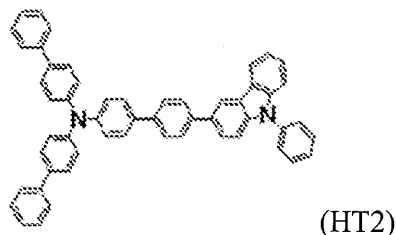
10

20

30

40

【化 1 1 2】



【 0 3 7 1】

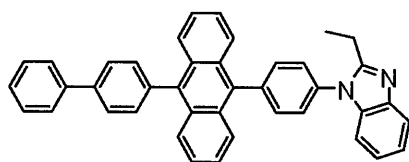
10

そのHT2の膜の上に、ホスト物質H1と赤色リン光ドーパント物質D8を共蒸着させた。そうして、赤色発光のための45nmの厚さの発光層が形成された。リン光ドーパント物質の濃度は10質量%に設定し、ホスト物質の濃度は90質量%に設定した。化合物ET1をその発光層の上に蒸着させて30nmの電子輸送層を形成させた。さらに、LiFを、その電子輸送層の上に1/分の速度で蒸着させて1nmの電子注入層を形成させた。さらに、金属アルミニウムをその電子注入層の上に蒸着させて、80nmの厚さのカソードを形成させた。電子輸送層の化合物ET1は以下の式で表される。

【 0 3 7 2】

【化 1 1 3】

20



【 0 3 7 3】

[有機ELデバイス例1の評価]

作製した有機ELデバイスを、作動電圧、外部量子効率(EQE)、及び寿命に関して評価した。その結果を表4に示す。

【 0 3 7 4】

30

作動電圧：電流密度が10mA/cm²になるようにITOとAlに間に電圧を印加し、その電圧(単位V)を測定した。

【 0 3 7 5】

外部量子効率EQE：電流密度が10mA/cm²になるようにそれぞれの有機ELデバイスに電圧を印加し、分光放射計(コニカミノルタホールディング製CS-1000)を使用して、分光放射スペクトルを測定した。外部量子効率EQE(単位%)は、ランベルト放射が起こると仮定して、得られた分光放射スペクトルから計算した。

【 0 3 7 6】

寿命：20000cd/cm²の初期発光強度で一定電流にてデバイスを作動させ、発光強度が50%まで低下するまでかかった時間(LT₅₀)を得た。

40

【 0 3 7 7】

[例2及び比較例1~4]

例2及び比較例1~4において、例1で用いた物質を表4にまとめたものと置き換えたことを除いて、有機ELデバイスを実施例1と同様の方法で作った。これらの有機ELデバイスを、例1と同様の方法で評価した。その結果を表4に示す。

【 0 3 7 8】

【表 4】

| | 発光体 | ホスト | 電流密度 | 電圧 | 輝度 | L/J | η | EQE | CIE | | λ_p | LT_{50} |
|-------|----------------------|-----|-----------------------|------|----------------------|--------|--------|------|-------|-------|-------------|-----------|
| | | | (mA/cm ²) | (V) | (cd/m ²) | (cd/A) | (lm/W) | (%) | x | y | (nm) | (hrs) |
| 例 1 | D8 | H1 | 1 | 4.48 | 184 | 18.4 | 12.9 | 17.3 | 0.671 | 0.328 | 622 | 140 |
| | | | 10 | 7.45 | 1721 | 17.2 | 7.3 | 16.1 | 0.671 | 0.328 | 622 | |
| 比較例 1 | | CBP | 1 | 5.30 | 164 | 16.4 | 9.7 | 14.8 | 0.669 | 0.330 | 621 | 3 |
| | | | 10 | 8.58 | 1401 | 14.0 | 5.1 | 12.6 | 0.669 | 0.331 | 621 | |
| 例 2 | D9 | H1 | 1 | 4.28 | 219 | 21.9 | 16.1 | 20.3 | 0.671 | 0.329 | 621 | 220 |
| | | | 10 | 7.15 | 2042 | 20.4 | 9.0 | 18.7 | 0.670 | 0.330 | 621 | |
| 比較例 2 | | CBP | 1 | 4.77 | 146 | 14.6 | 9.6 | 13.7 | 0.671 | 0.329 | 622 | 3 |
| | | | 10 | 7.63 | 1156 | 11.6 | 4.8 | 10.6 | 0.670 | 0.330 | 622 | |
| 比較例 3 | Ir(piq) ₃ | H1 | 1 | 4.26 | 96 | 9.6 | 7.1 | 12.1 | 0.676 | 0.323 | 625 | 0 |
| | | | 10 | 7.09 | 929 | 9.3 | 4.1 | 11.6 | 0.676 | 0.323 | 625 | |
| 比較例 4 | | CBP | 1 | 5.61 | 64 | 6.4 | 3.6 | 8.0 | 0.676 | 0.323 | 624 | 0 |
| | | | 10 | 8.96 | 609 | 6.1 | 2.1 | 7.6 | 0.675 | 0.324 | 624 | |

10

【0379】

表 4 は、デバイス例 1 及びデバイス例 2（これらの発光層はここでの開示による発光体ホスト物質（1つ又は複数）と赤色リン光ドーパント物質との新規な組み合わせを含む）は、顕著に、より長い発光半減期（ LT_{50} ）と、より高いEQE及び発光効率（ L/J ）を示すとともに、比較デバイス 1～4 と比べてより低い作動電圧を可能にしている。

【0380】

例えば、H1ホスト化合物を赤色リン光ドーパント物質D8とともに用いる赤色PHOLED（デバイス例1）は、16.1%のEQEと、10mA/cm²において7.45Vの作動電圧と、20000cd/m²において140時間の LT_{50} を示した。それに対して、CBPホスト化合物を赤色リン光ドーパント物質D8とともに用いる比較の赤色PHOLED（比較例1）は、12.6%のEQEと、10mA/cm²において8.54Vの作動電圧と、20000cd/m²において3時間の LT_{50} を示した。

【0381】

H1ホスト化合物を赤色リン光ドーパント物質D9とともに用いる赤色PHOLED（デバイス例2）は、18.7%のEQEと、10mA/cm²において7.15Vの作動電圧と、20000cd/m²において220時間の LT_{50} を示した。それに対して、CBPホスト化合物を赤色リン光ドーパント物質D9とともに用いる比較の赤色PHOLED（比較例2）は、10.6%のEQEと、10mA/cm²において7.63Vの作動電圧と、20000cd/m²において3時間の LT_{50} を示した。H1ホスト化合物を、リン光ドーパント物質としてのIr(piq)₃とともに用いる比較の赤色PHOLED（比較例3）は、11.6%のEQEと、10mA/cm²において7.09Vの作動電圧を示した。CBPホスト化合物をリン光ドーパント物質としてのIr(piq)₃とともに用いる比較の赤色PHOLED（比較例4）は、7.6%のEQEと、10mA/cm²において8.96Vの作動電圧を示した。リン光ドーパントとしてIr(piq)₃を用いる比較デバイス3及び4についての20000cd/m²での LT_{50} のデータはなく、なぜなら、それらは20000cd/m²に達することができなかったからである。

【0382】

有機ELデバイスの発光層が共ホスト物質とリン光ドーパント物質の上記の組み合わせを含むここで開示した態様によれば、高められたEQE、より低い作動電圧、及びより長い LT_{50} が予測される。

【0383】

ここでの開示の別の側面によれば、ここに開示した発明の範囲には、ここに記載した有機エレクトロルミネッセンスデバイスの様々な態様の1つ以上を組み込んでいる照明装置及び/又はディスプレイ装置が含まれる。そのようなディスプレイ装置のいくつかの例は、テレビのスクリーン、コンピュータのディスプレイのスクリーン、携帯電話のディスプ

20

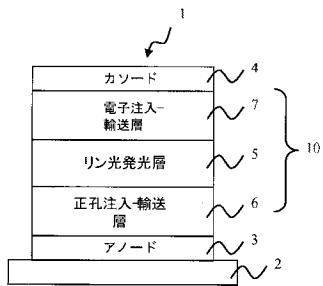
30

40



50

レイのスクリーン、広告用掲示板のスクリーンなどである。

【 図 1 】



【 国際調査報告 】

| INTERNATIONAL SEARCH REPORT | | International application No. PCT/US2012/042356 |
|---|--|--|
| A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/54(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i | | |
| According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC | | |
| B. FIELDS SEARCHED | | |
| Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C09K 11/06; C07D 403/14; H01L 27/32; H01J 1/62; H01L 51/50; H01L 51/54 | | |
| Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Korean utility models and applications for utility models Japanese utility models and applications for utility models | | |
| Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) eKOMPASS(KIPO internal) & Keywords: OLED, biscarbazole, red phosphorescent dopant | | |
| C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT | | |
| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages | Relevant to claim No. |
| X Y | US 2011-0279020 A1 (INOUE TETSUYA.) 17 November 2011 See the whole document, especially, claims and [0163]-[0166]. | 1-6, 8, 11-16, 18 7, 9, 10, 17, 19, 20 |
| Y A | WO 2011-019156 A1 (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 17 February 2011 See [54]-[70], [147], [150], Tabel 2. | 7, 9, 10, 17, 19, 20 1-6, 8, 11-16, 18 |
| A | WO 2007-119816 A1 (KONICA MINOLTA HOLDINGS, INC.) 25 October 2007 See the whole document. | 1-20 |
| A | WO 2011-055934 A2 (CHEIL INDUSTRIES INC.) 12 May 2011 See the whole document. | 1-20 |
| <input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex. | | |
| <p>* Special categories of cited documents:</p> <p>"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance</p> <p>"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date</p> <p>"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of citation or other special reason (as specified)</p> <p>"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means</p> <p>"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed</p> <p>"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention</p> <p>"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone</p> <p>"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art</p> <p>"&" document member of the same patent family</p> | | |
| Date of the actual completion of the international search 30 August 2013 (30.08.2013) | | Date of mailing of the international search report 30 August 2013 (30.08.2013) |
| Name and mailing address of the ISA/KR  Korean Intellectual Property Office 189 Cheongsu-ro, Seo-gu, Daejeon Metropolitan City, 302-701, Republic of Korea Facsimile No. +82-42-472-7140 | | Authorized officer OH Se Zu Telephone No. +82-42-481-5596  |

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/US2012/042356

| Patent document cited in search report | Publication date | Patent family member(s) | Publication date |
|--|------------------|-------------------------|------------------|
| US 2011-0279020 A1 | 17/11/2011 | CN 102421772 A | 18/04/2012 |
| | | CN 102439004 A | 02/05/2012 |
| | | EP 2415769 A1 | 08/02/2012 |
| | | EP 2415769 A4 | 13/02/2013 |
| | | EP 2423209 A1 | 29/02/2012 |
| | | EP 2423209 A4 | 13/02/2013 |
| | | JP 05-074627B2 | 14/11/2012 |
| | | JP 2013-030781A | 07/02/2013 |
| | | KR 10-2012-0034648 A | 12/04/2012 |
| | | KR 10-2012-0057561 A | 05/06/2012 |
| | | KR 10-2012-0127746 A | 23/11/2012 |
| | | TW 201141989 A | 01/12/2011 |
| | | TW 201141990 A | 01/12/2011 |
| | | US 2011-0278555 A1 | 17/11/2011 |
| | | US 2012-0138911 A1 | 07/06/2012 |
| | | US 2012-0138912 A1 | 07/06/2012 |
| | | WO 2011-132683 A1 | 27/10/2011 |
| | | WO 2011-132684 A1 | 27/10/2011 |
| WO 2011-019156 A1 | 17/02/2011 | CN 102918134 A | 06/02/2013 |
| | | KR 10-2011-0015836 A | 17/02/2011 |
| | | TW 201120186 A | 16/06/2011 |
| | | US 2012-0235123 A1 | 20/09/2012 |
| WO 2007-119816 A1 | 25/10/2007 | JP 05-055818B2 | 24/10/2012 |
| | | JP 2007-288035A | 01/11/2007 |
| | | US 2009-0302745 A1 | 10/12/2009 |
| | | US 8247089 B2 | 21/08/2012 |
| WO 2011-055934 A2 | 12/05/2011 | CN 102597158 A | 18/07/2012 |
| | | EP 2497811 A2 | 12/09/2012 |
| | | JP 2013-510141A | 21/03/2013 |
| | | KR 10-2011-0048840 A | 12/05/2011 |
| | | US 2012-0211736 A1 | 23/08/2012 |
| | | US 2012-0305900 A1 | 06/12/2012 |
| | | WO 2011-055934 A3 | 03/11/2011 |
| | | WO 2011-055934 A9 | 26/10/2012 |

フロントページの続き

(81) 指定国 AP(BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), EA(AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), EP(AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OA(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA

(72) 発明者 山本 均
アメリカ合衆国・ニュージャージー・08618・ユーイング・フィリップス・ブルヴァード・375

(72) 発明者 マイケル・エス・ウィーヴァー
アメリカ合衆国・ニュージャージー・08618・ユーイング・フィリップス・ブルヴァード・375

(72) 発明者 ジュリア・ジェイ・ブラウン
アメリカ合衆国・ニュージャージー・08618・ユーイング・フィリップス・ブルヴァード・375

(72) 発明者 西村 和樹
東京都千代田区丸の内3丁目1-1

(72) 発明者 岩隈 俊裕
東京都千代田区丸の内3丁目1-1

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 BB06 CC04 CC12 CC21 DD53 DD59 DD64
DD68 DD69
4C063 AA03 BB06 CC31 DD08 EE10

| | | | |
|----------------|--|---------|------------|
| 专利名称(译) | 用于OLED发光区域的双咪唑衍生物主体材料和红光发射体 | | |
| 公开(公告)号 | JP2015526886A | 公开(公告)日 | 2015-09-10 |
| 申请号 | JP2015517224 | 申请日 | 2012-06-14 |
| [标]申请(专利权)人(译) | 环球展览公司 出光兴産株式会社 | | |
| 申请(专利权)人(译) | 通用显示器公司 出光兴産株式会社 | | |
| [标]发明人 | 山本均 マイケルエスウィーヴァー ジュリアジェイブラウン 西村和樹 岩隈俊裕 | | |
| 发明人 | 山本 均 マイケル・エス・ウィーヴァー ジュリア・ジェイ・ブラウン 西村 和樹 岩隈 俊裕 | | |
| IPC分类号 | H01L51/50 C09K11/06 C07D403/14 C07D215/04 | | |
| CPC分类号 | H01L51/5016 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/185 H01L51/0072 H01L51/0085 H01L51/009 H01L51/0092 | | |
| FI分类号 | H05B33/14.B C09K11/06.690 C09K11/06.660 C07D403/14 C07D215/04 | | |
| F-TERM分类号 | 3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/BB06 3K107/CC04 3K107/CC12 3K107/CC21 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD64 3K107/DD68 3K107/DD69 4C063/AA03 4C063/BB06 4C063/CC31 4C063/DD08 4C063/EE10 | | |
| 代理人(译) | 村山彦 | | |
| 外部链接 | Espacenet | | |

| | | |
|--|---|---|
| 摘要(译) 有机电致发光器件利用双咪唑衍生化合物作为磷光体主体材料和有机磷光材料的新组合作为器件发光区域中的红色磷光掺杂剂材料，其中双咪唑衍生化合物由式(1)表示;其中红色磷光掺杂剂材料是磷光有机金属配合物，其具有由式(D1)，(D2)和(D3)表示的部分化学结构之一表示的取代化学结构。 | (21) 出願番号 特願2015-517224 (P2015-517224) (66) (22) 出願日 平成24年6月14日 (2012.6.14) (85) 翻訳文提出日 平成27年2月12日 (2015.2.12) (86) 国際出願番号 PCT/US2012/042356 (87) 国際公開番号 WO2013/187894 (87) 国際公開日 平成25年12月19日 (2013.12.19) | (71) 出願人 503055897 ユニバーサル ディスプレイ コーポレイション アメリカ合衆国、ニュージャージー、ユアイング、フィリップス プールバード 375 (71) 出願人 000183646 出光興産株式会社 東京都千代田区丸の内3丁目1番1号 (74) 代理人 100108453 弁理士 村山 彦彦 (74) 代理人 100064908 弁理士 志賀 正武 |
| | 最終頁に続く | |