

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号
特開2015-134874
 (P2015-134874A)

(43) 公開日 平成27年7月27日(2015.7.27)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
CO9K 11/06 (2006.01)	CO9K 11/06 645	3K107
HO1L 51/50 (2006.01)	HO5B 33/14 B	4C063
CO7D 401/14 (2006.01)	CO9K 11/06 655	
CO7D 413/14 (2006.01)	CO9K 11/06 650	
	CO7D 401/14	

審査請求 未請求 請求項の数 13 O L (全 51 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2014-6609 (P2014-6609)
 (22) 出願日 平成26年1月17日 (2014.1.17)

(71) 出願人 000004086
 日本化薬株式会社
 東京都千代田区丸の内二丁目1番1号
 (71) 出願人 504145342
 国立大学法人九州大学
 福岡県福岡市東区箱崎六丁目10番1号
 (74) 代理人 110000109
 特許業務法人特許事務所サイクス
 (72) 発明者 桑原 博一
 東京都北区志茂3-31-12 日本化薬株式会社 研究開発本部研究企画部内
 (72) 発明者 安達 千波矢
 福岡県福岡市東区箱崎六丁目10番1号
 国立大学法人九州大学内
 Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 CC04 CC45 DD66
 最終頁に続く

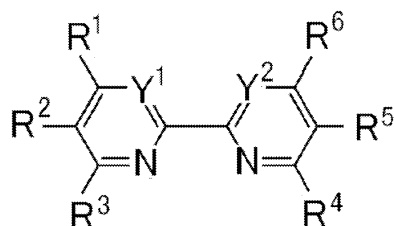
(54) 【発明の名称】 発光材料、有機発光素子および化合物

(57) 【要約】 (修正有)

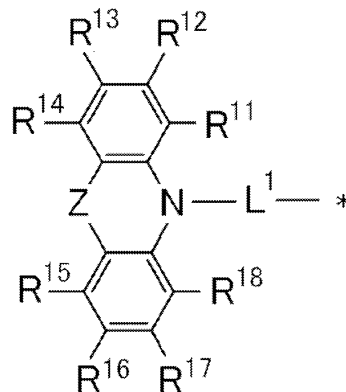
【課題】 発光効率が高く発光材料として有用な化合物の提供。

【解決手段】 一般式(1)で表されるピピリジン骨格に3級アミノ基を導入した発光材料。
 [Y¹およびY²は各々独立にN又はC(R⁷)を表し、R¹及びR²の少なくとも一方とR⁵及びR⁶の少なくとも一方は、一般式(2)で表される基；Zは連結鎖長が1原子である2価の連結基；L¹は単結合、又は置換もしくは無置換のアリーレン基]

一般式(1)



一般式(2)



【選択図】 なし

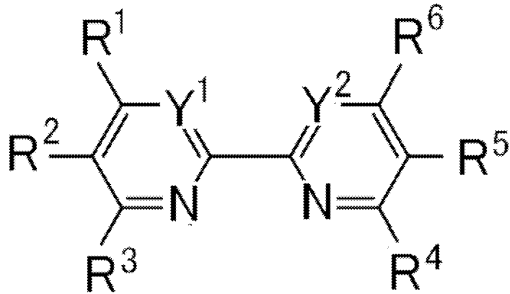
【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記一般式(1)で表される化合物からなる発光材料。

【化 1】

一般式(1)

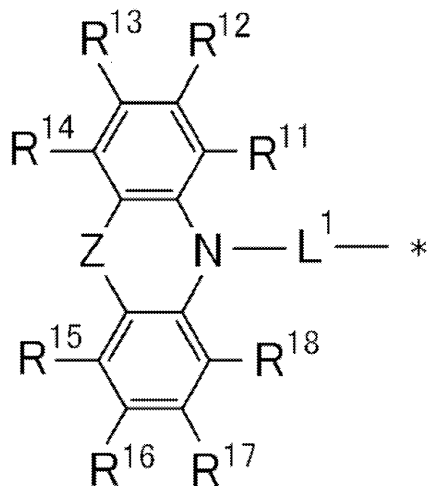


10

[一般式(1)において、Y¹およびY²は各々独立にNまたはC(R⁷)を表し、R¹~R⁷は各々独立に水素原子または置換基を表す。ただし、R¹およびR²の少なくとも一方とR⁵およびR⁶の少なくとも一方は、各々独立に下記一般式(2)で表される基を表す。]

【化 2】

一般式(2)



20

30

[一般式(2)において、Zは連結鎖長が1原子である2価の連結基を表す。L¹は単結合、または置換もしくは無置換のアリーレン基を表し、*は一般式(1)における複素環への結合部位を表す。R¹¹~R¹⁸は、各々独立に水素原子または置換基を表す。R¹¹とR¹²、R¹²とR¹³、R¹³とR¹⁴、R¹⁵とR¹⁶、R¹⁶とR¹⁷、R¹⁷とR¹⁸はそれぞれ互いに結合して環状構造を形成していてもよい。]

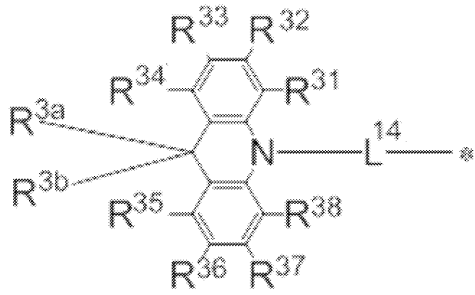
【請求項 2】

一般式(2)で表される基が、下記一般式(3)~(7)のいずれかで表される基であることを特徴とする請求項1に記載の発光材料。

40

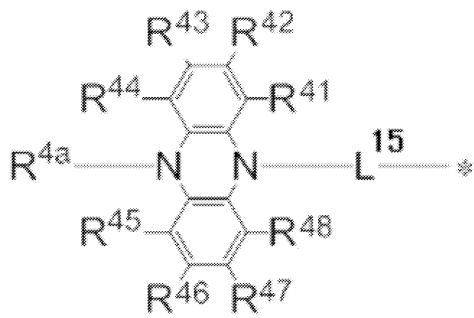
【化 3】

一般式 (3)



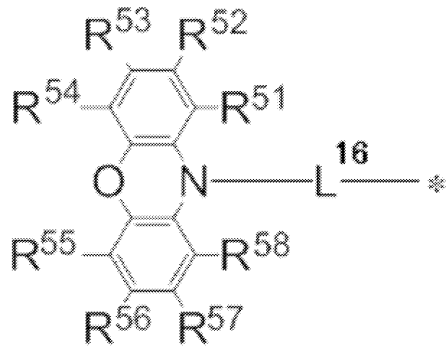
10

一般式 (4)



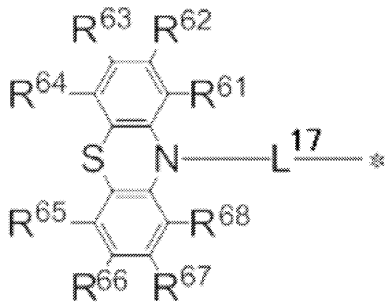
20

一般式 (5)



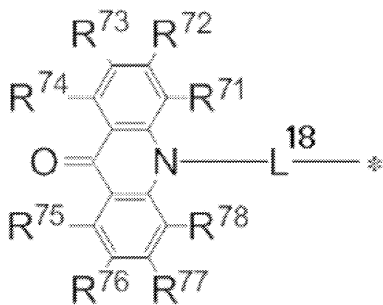
30

一般式 (6)



10

一般式 (7)



20

[一般式 (3) ~ (7) において、 $L^{14} \sim L^{18}$ は単結合、または置換もしくは無置換のアリーレン基を表し、* は一般式 (1) における複素環への結合部位を表す。 $R^{31} \sim R^{38}$ 、 R^{3a} 、 R^{3b} 、 $R^{41} \sim R^{48}$ 、 R^{4a} 、 $R^{51} \sim R^{58}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{78}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。 R^{31} と R^{32} 、 R^{32} と R^{33} 、 R^{33} と R^{34} 、 R^{35} と R^{36} 、 R^{36} と R^{37} 、 R^{37} と R^{38} 、 R^{3a} と R^{3b} 、 R^{41} と R^{42} 、 R^{42} と R^{43} 、 R^{43} と R^{44} 、 R^{45} と R^{46} 、 R^{46} と R^{47} 、 R^{47} と R^{48} 、 R^{51} と R^{52} 、 R^{52} と R^{53} 、 R^{53} と R^{54} 、 R^{55} と R^{56} 、 R^{56} と R^{57} 、 R^{57} と R^{58} 、 R^{61} と R^{62} 、 R^{62} と R^{63} 、 R^{63} と R^{64} 、 R^{65} と R^{66} 、 R^{66} と R^{67} 、 R^{67} と R^{68} 、 R^{71} と R^{72} 、 R^{72} と R^{73} 、 R^{73} と R^{74} 、 R^{75} と R^{76} 、 R^{76} と R^{77} 、 R^{77} と R^{78} はそれぞれ互いに結合して環状構造を形成していてもよい。]

【請求項 3】

一般式 (1) の R^2 および R^5 が各々独立に一般式 (2) で表される基であることを特徴とする請求項 1 または 2 に記載の発光材料。

【請求項 4】

一般式 (1) の Y^1 および Y^2 がともに N であるか、ともに C (R^7) であることを特徴とする請求項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の発光材料。

【請求項 5】

一般式 (2) の L^1 が単結合であることを特徴とする請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の発光材料。

【請求項 6】

分子中に存在する一般式 (2) で表される基が、すべて同一であることを特徴とする請求項 1 ~ 5 のいずれか 1 項に記載の発光材料。

【請求項 7】

分子が回転対称構造を有していることを特徴とする請求項 1 ~ 6 のいずれか 1 項に記載の発光材料。

【請求項 8】

分子が線対称構造を有していることを特徴とする請求項 1 ~ 6 のいずれか 1 項に記載の発光材料。

【請求項 9】

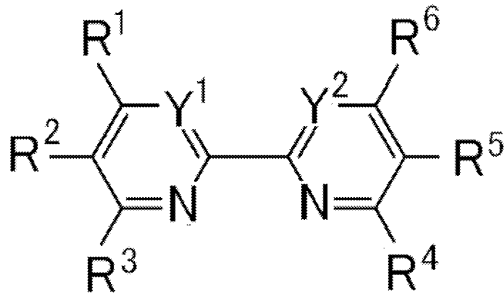
下記一般式 (1) で表される化合物からなる遅延蛍光体。

30

40

【化 4】

一般式 (1)

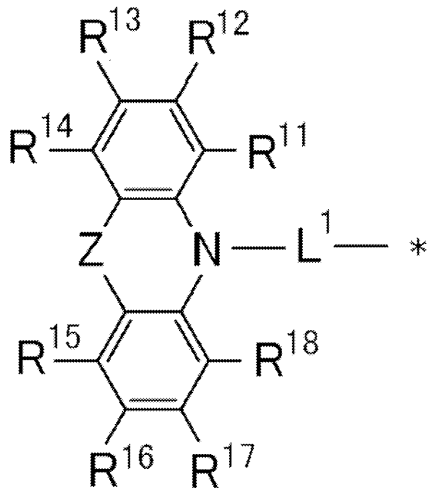


10

【一般式 (1) において、 Y^1 および Y^2 は各々独立に N または C (R^7) を表し、 $R^1 \sim R^7$ は各々独立に水素原子または置換基を表す。ただし、 R^1 および R^2 の少なくとも一方と R^5 および R^6 の少なくとも一方は、各々独立に下記一般式 (2) で表される基を表す。】

【化 5】

一般式 (2)



20

30

【一般式 (2) において、 Z は連結鎖長が 1 原子である 2 価の連結基を表す。 L^1 は単結合、または置換もしくは無置換のアリーレン基を表し、 $*$ は一般式 (1) における複素環への結合部位を表す。 $R^{11} \sim R^{18}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。 R^{11} と R^{12} 、 R^{12} と R^{13} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{17} と R^{18} はそれぞれ互いに結合して環状構造を形成していてもよい。】

【請求項 10】

請求項 1 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の発光材料を含むことを特徴とする有機発光素子。

【請求項 11】

遅延蛍光を放射することを特徴とする請求項 10 に記載の有機発光素子。

【請求項 12】

有機エレクトロルミネッセンス素子であることを特徴とする請求項 10 または 11 に記載の有機発光素子。

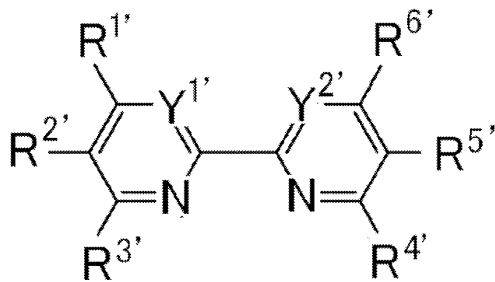
40

【請求項 13】

下記一般式 (1') で表される化合物。

【化 6】

一般式 (1')

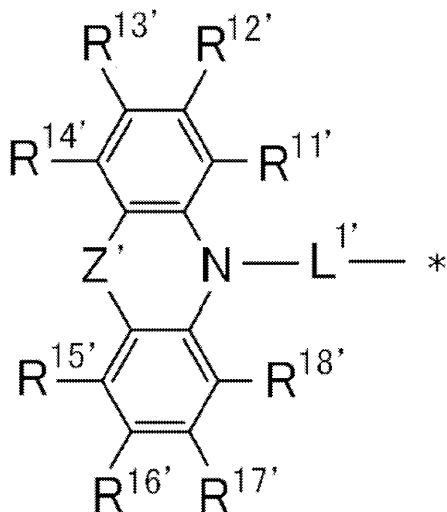


10

[一般式 (1') において、 $Y^{1'}$ および $Y^{2'}$ は各々独立に N または C ($R^{7'}$) を表し、 $R^{1'}$ ~ $R^{6'}$ は各々独立に水素原子または置換基を表す。ただし、 $R^{1'}$ および $R^{2'}$ の少なくとも一方と $R^{5'}$ および $R^{6'}$ の少なくとも一方は、各々独立に下記一般式 (2') で表される基を表す。]

【化 7】

一般式 (2')



20

30

[一般式 (2') において、 Z' は連結鎖長が 1 原子である 2 価の連結基を表す。 $L^{1'}$ は単結合、または置換もしくは無置換のアリーレン基を表し、* は一般式 (1) における複素環への結合部位を表す。 $R^{11'}$ ~ $R^{18'}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。 $R^{11'}$ と $R^{12'}$ 、 $R^{12'}$ と $R^{13'}$ 、 $R^{13'}$ と $R^{14'}$ 、 $R^{15'}$ と $R^{16'}$ 、 $R^{16'}$ と $R^{17'}$ 、 $R^{17'}$ と $R^{18'}$ はそれぞれ互いに結合して環状構造を形成していてもよい。]

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、発光材料として有用な化合物およびそれを用いた有機発光素子に関する。

40

【背景技術】

【0002】

有機エレクトロルミネッセンス素子 (有機 EL 素子) などの有機発光素子の発光効率を高める研究が盛んに行われている。特に、有機エレクトロルミネッセンス素子を構成する電子輸送材料、正孔輸送材料、発光材料などを新たに開発することにより、発光効率を高める工夫が種々なされてきている。その中には、ピリジン環を含む環状構造に 3 級アミノ基が結合した構造を有する化合物を利用した有機エレクトロルミネッセンス素子に関する研究も見受けられる。

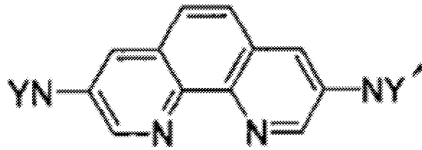
【0003】

特許文献 1 には、下記一般式で表される 3 級アミノ基 NY、NY を導入したフェナン

50

トロリン誘導体が提案されている。ここでは、フェノキサジニル基やフェノチアジニル基等の三環構造を有する3級アミノ基を導入したフェナントロリン誘導体について発光特性を確認したことが記載されている。

【化1】



また、非特許文献1においても、フェノキサジニル基やフェノチアジニル基等の3級アミノ基を導入したフェナントロリン誘導体について可視領域での発光特性や電気化学特性を検討した結果が記載されている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0004】

【特許文献1】特開2004-331586号公報

【非特許文献】

【0005】

【非特許文献1】Inorganica Chimica Acta 357 (2004) 4335-4340

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

上記のように、特許文献1および非特許文献1には、フェノキサジニル基等の3級アミノ基を導入したフェナントロリン誘導体が可視領域で発光することが記載されている。しかしながら、本発明者らが、3級アミノ基を導入したフェナントロリン誘導体の発光特性を実際に評価したところ、発光特性は十分に満足しうるものではなく、より優れた発光特性を有する発光材料を提供する必要があることが判明した。

そこで本発明者らは、ピリジン環と3級アミノ基を有する化合物群について種々の検討を始め、多数の類似骨格の中からピピリジン骨格に3級アミノ基を導入した化合物群に発光材料として有用性があることを初めて見出し、さらに検討を進めることにした。上記のように、フェナントロリン骨格を有する化合物については、特許文献1および非特許文献1において可視領域での発光特性が確認されている。しかし、これらの文献にはピピリジン骨格に3級アミノ基を導入した化合物については記載されていない。このため、ピピリジン骨格に3級アミノ基を導入した化合物の発光材料としての有用性は全く予測がつかない。

【0007】

このような状況下において本発明者らは、ピピリジン骨格に3級アミノ基を導入した化合物の発光材料としての有用性についてさらに検討を進め、発光特性が優れた化合物を見出すことを目指して研究を重ねた。そして、発光材料として有用な化合物の一般式を導きだし、発光効率が高い有機発光素子の構成を一般化することを目的として鋭意検討を進めた。

【課題を解決するための手段】

【0008】

鋭意検討を進めた結果、本発明者らは、特定の構造を有するピピリジン誘導体が発光材料として優れた性質を有することを見出した。また、そのような化合物群の中に、遅延蛍光材料として有用なものがあることを見出し、発光効率が高い有機発光素子を安価に提供しうることを明らかにした。本発明者らは、これらの知見に基づいて、上記の課題を解決する手段として、以下の本発明を提供するに至った。

【0009】

[1] 下記一般式(1)で表される化合物からなる発光材料。

10

20

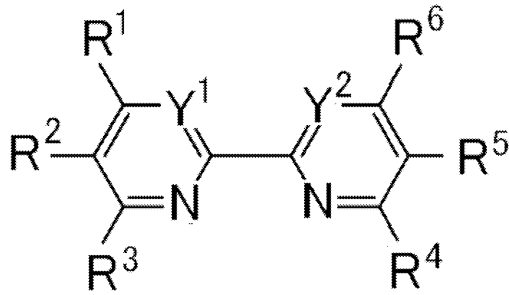
30

40

50

【化 2】

一般式 (1)

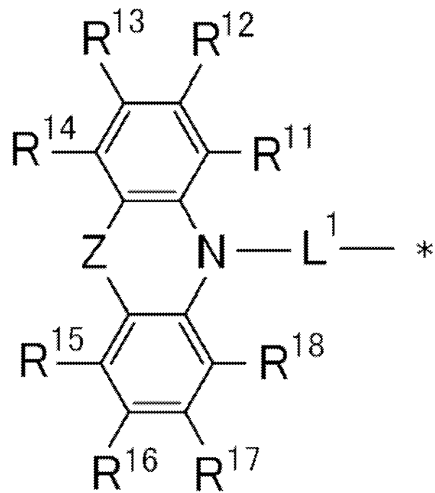


10

[一般式 (1) において、Y¹および Y²は各々独立に N または C (R⁷) を表し、R¹ ~ R⁷ は各々独立に水素原子または置換基を表す。ただし、R¹ および R² の少なくとも一方と R⁵ および R⁶ の少なくとも一方は、各々独立に下記一般式 (2) で表される基を表す。]

【化 3】

一般式 (2)



20

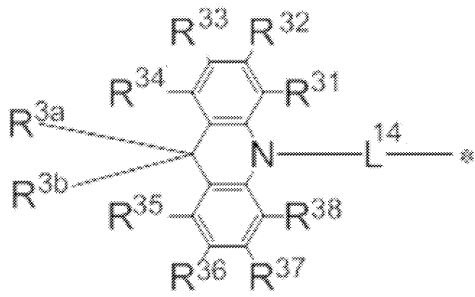
[一般式 (2) において、Z は連結鎖長が 1 原子である 2 価の連結基を表す。L¹ は単結合、または置換もしくは無置換のアリーレン基を表し、* は一般式 (1) における複素環への結合部位を表す。R¹¹ ~ R¹⁸ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。R¹¹ と R¹²、R¹² と R¹³、R¹³ と R¹⁴、R¹⁵ と R¹⁶、R¹⁶ と R¹⁷、R¹⁷ と R¹⁸ はそれぞれ互いに結合して環状構造を形成していてもよい。]

30

[2] 一般式 (2) で表される基が、下記一般式 (3) ~ (7) のいずれかで表される基であることを特徴とする [1] に記載の発光材料。

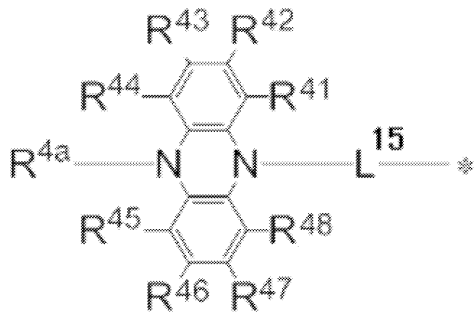
【化 4】

一般式 (3)



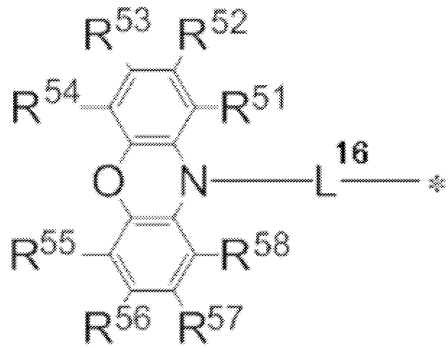
10

一般式 (4)



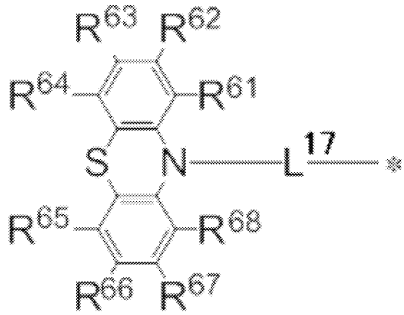
20

一般式 (5)



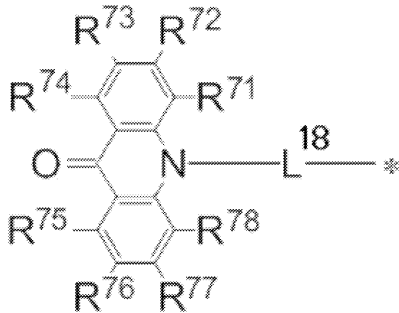
30

一般式 (6)



10

一般式 (7)



20

[一般式 (3) ~ (7) において、 $L^{14} \sim L^{18}$ は単結合、または置換もしくは無置換のアリーレン基を表し、* は一般式 (1) における複素環への結合部位を表す。 $R^{31} \sim R^{38}$ 、 R^{3a} 、 R^{3b} 、 $R^{41} \sim R^{48}$ 、 R^{4a} 、 $R^{51} \sim R^{58}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{78}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。 R^{31} と R^{32} 、 R^{32} と R^{33} 、 R^{33} と R^{34} 、 R^{35} と R^{36} 、 R^{36} と R^{37} 、 R^{37} と R^{38} 、 R^{3a} と R^{3b} 、 R^{41} と R^{42} 、 R^{42} と R^{43} 、 R^{43} と R^{44} 、 R^{45} と R^{46} 、 R^{46} と R^{47} 、 R^{47} と R^{48} 、 R^{51} と R^{52} 、 R^{52} と R^{53} 、 R^{53} と R^{54} 、 R^{55} と R^{56} 、 R^{56} と R^{57} 、 R^{57} と R^{58} 、 R^{61} と R^{62} 、 R^{62} と R^{63} 、 R^{63} と R^{64} 、 R^{65} と R^{66} 、 R^{66} と R^{67} 、 R^{67} と R^{68} 、 R^{71} と R^{72} 、 R^{72} と R^{73} 、 R^{73} と R^{74} 、 R^{75} と R^{76} 、 R^{76} と R^{77} 、 R^{77} と R^{78} はそれぞれ互いに結合して環状構造を形成していてもよい。]

[3] 一般式 (1) の R^2 および R^5 が各々独立に一般式 (2) で表される基であることを特徴とする [1] または [2] に記載の発光材料。 30

[4] 一般式 (1) の Y^1 および Y^2 がともに N であるか、ともに C (R^7) であることを特徴とする [1] ~ [3] のいずれか 1 項に記載の発光材料。

[5] 一般式 (2) の L^1 が単結合であることを特徴とする [1] ~ [4] のいずれか 1 項に記載の発光材料。

[6] 分子中に存在する一般式 (2) で表される基が、すべて同一であることを特徴とする [1] ~ [5] のいずれか 1 項に記載の発光材料。

[7] 分子が回転対称構造を有していることを特徴とする [1] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の発光材料。

[8] 分子が線対称構造を有していることを特徴とする [1] ~ [6] のいずれか 1 項に記載の発光材料。 40

[9] 上記一般式 (1) で表される化合物からなる遅延蛍光体。

[10] [1] ~ [8] のいずれか 1 項に記載の発光材料を含むことを特徴とする有機発光素子。

[11] 遅延蛍光を放射することを特徴とする [10] に記載の有機発光素子。

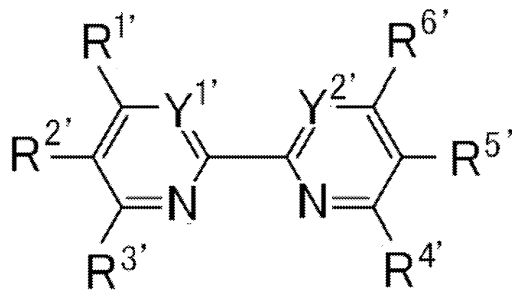
[12] 有機エレクトロルミネッセンス素子であることを特徴とする [10] または [11] に記載の有機発光素子。

【 0010 】

[13] 下記一般式 (1') で表される化合物。

【化 5】

一般式 (1')

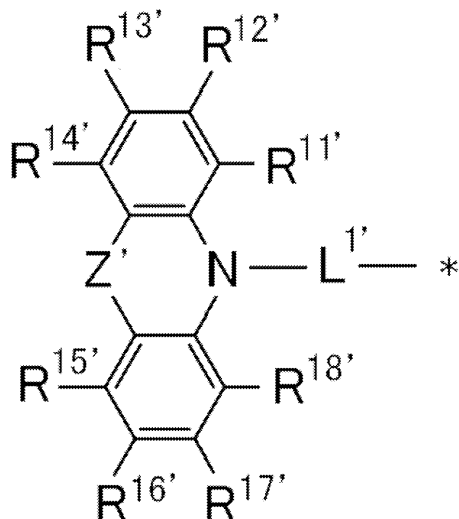


10

[一般式 (1') において、 $Y^{1'}$ および $Y^{2'}$ は各々独立に N または C ($R^{7'}$) を表し、 $R^{1'}$ ~ $R^{7'}$ は各々独立に水素原子または置換基を表す。ただし、 $R^{1'}$ および $R^{2'}$ の少なくとも一方と $R^{5'}$ および $R^{6'}$ の少なくとも一方は、各々独立に下記一般式 (2') で表される基を表す。]

【化 6】

一般式 (2')



20

30

[一般式 (2') において、 Z' は連結鎖長が 1 原子である 2 価の連結基を表す。 $L^{1'}$ は単結合、または置換もしくは無置換のアリーレン基を表し、* は一般式 (1) における複素環への結合部位を表す。 $R^{11'}$ ~ $R^{18'}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。 $R^{11'}$ と $R^{12'}$ 、 $R^{12'}$ と $R^{13'}$ 、 $R^{13'}$ と $R^{14'}$ 、 $R^{15'}$ と $R^{16'}$ 、 $R^{16'}$ と $R^{17'}$ 、 $R^{17'}$ と $R^{18'}$ はそれぞれ互いに結合して環状構造を形成していてもよい。]

【発明の効果】

【0011】

本発明の化合物は、発光材料として有用である。また、本発明の化合物の中には遅延蛍光を放射するものが含まれている。本発明の化合物を発光材料として用いた有機発光素子は、高い発光効率を実現しうる。

40

【図面の簡単な説明】

【0012】

【図 1】有機エレクトロルミネッセンス素子の層構成例を示す概略断面図である。

【図 2】実施例 1 の化合物 1 のトルエン溶液の発光スペクトルである。

【図 3】実施例 1 の化合物 1 のトルエン溶液の過渡減衰曲線である。

【図 4】実施例 2 の化合物 4 の薄膜型有機フォトルミネッセンス素子の発光スペクトルである。

【図 5】実施例 2 の化合物 4 の薄膜型有機フォトルミネッセンス素子の過渡減衰曲線であ

50

る。

【図 6】比較例 1 の比較化合物 1 の薄膜型有機フォトルミネッセンス素子の発光スペクトルである。

【図 7】比較例 1 の比較化合物 1 の薄膜型有機フォトルミネッセンス素子の過渡減衰曲線である。

【図 8】実施例 3 の化合物 1 の有機エレクトロルミネッセンス素子の発光スペクトルである。

【図 9】実施例 3 の化合物 1 の有機エレクトロルミネッセンス素子の電圧 - 電流密度特性を示すグラフである。

【図 10】実施例 3 の化合物 1 の有機エレクトロルミネッセンス素子の電流密度 - 外部量子効率特性を示すグラフである。

10

【発明を実施するための形態】

【0013】

以下において、本発明の内容について詳細に説明する。以下に記載する構成要件の説明は、本発明の代表的な実施態様や具体例に基づいてなされることがあるが、本発明はそのような実施態様や具体例に限定されるものではない。なお、本明細書において「～」を用いて表される数値範囲は、「～」の前後に記載される数値を下限値および上限値として含む範囲を意味する。また、本発明に用いられる化合物の分子内に存在する水素原子の同位体種は特に限定されず、例えば分子内の水素原子がすべて¹Hであってもよいし、一部または全部が²H（デューテリウム D）であってもよい。

20

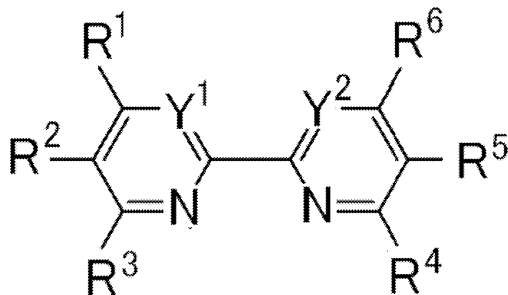
【0014】

[一般式(1)で表される化合物]

本発明の発光材料は、下記一般式(1)で表される化合物からなることを特徴とする。

【化 7】

一般式(1)



30

【0015】

一般式(1)において、Y¹およびY²は各々独立にNまたはC(R⁷)を表す。ここで、Y¹およびY²は、いずれか一方がNであり、他方がC(R⁷)であってもよいし、Y¹およびY²がともにNであるか、ともにC(R⁷)であってもよいが、Y¹およびY²がともにNであるか、ともにC(R⁷)であることが好ましく、Y¹およびY²がともにC(R⁷)であることがより好ましい。

40

R¹～R⁷は各々独立に水素原子または置換基を表す。ただし、R¹およびR²の少なくとも一方とR⁵およびR⁶の少なくとも一方は、各々独立に下記一般式(2)で表される基である。R¹およびR²のうち下記一般式(2)で表される基は、R¹およびR²のいずれか一方であってもよいし、R¹およびR²の両方であってもよいが、R¹およびR²のいずれか一方であることが好ましい。R⁵およびR⁶のうち下記一般式(2)で表される基は、R⁵およびR⁶のいずれか一方であってもよいし、R⁵およびR⁶の両方であってもよいが、R⁵およびR⁶のいずれか一方であることが好ましい。R¹およびR²のうち一般式(2)で表される基の数と、R⁵およびR⁶のうち一般式(2)で表される基の数は同じであっても異なってもよいが、同じであることが好ましい。好ましい化合物は、一般式(1)のR¹とR⁶が一般式(2)で表される基である化合物、一般式(1)のR²とR⁵が一般式(2)

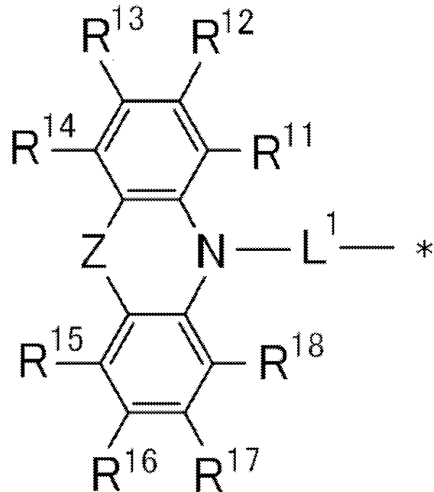
50

)で表される基である化合物であり、より好ましい化合物は、一般式(1)の R^2 と R^5 が一般式(2)で表される基である化合物である。一般式(1)中に存在する複数の一般式(2)で表される基は、同一であっても異なってもよいが、同一であることが好ましい。また、一般式(1)で表される化合物は回転対称構造をとっていることも好ましい。すなわち、 Y^1 と Y^2 がともにNであり、 R^1 と R^4 、 R^2 と R^5 、 R^3 と R^6 は、それぞれ同一であることが好ましい。また、一般式(1)で表される化合物は線対称構造をとっていることも好ましい。すなわち、 Y^1 と Y^2 、 R^1 と R^6 、 R^2 と R^5 、 R^3 と R^4 は、それぞれ同一であることが好ましい。

【0016】

【化8】

一般式(2)



10

20

【0017】

一般式(2)において、Zは連結鎖長が1原子である2価の連結基を表す。連結基は、連結鎖長が1原子である2価の連結基であれば特に制限されない。好ましい連結基はベンゼン環のCに連結される原子がC、N、O、Sである連結基であり、より好ましい連結基はC(R^{3a})(R^{3b})、C=O、N(R^{4a})、O、Sである。ここで、 R^{3a} 、 R^{3b} 、 R^{4a} は、下記一般式(3)における R^{3a} 、 R^{3b} 、下記一般式(4)における R^{4a} とそれぞれ同義である。

30

L^1 は単結合、または置換もしくは無置換のアリーレン基を表し、単結合であることが好ましい。*は一般式(1)における複素環への結合部位を表す。 L^1 がアリーレン基であるとき、アリーレン基としては炭素数6~18のアリーレン基であることが好ましい。炭素数6~18のアリーレン基としては、フェニレン基、ピフェニレン基、フルオレニレン基、トリフェニレニレン基等を挙げることができ、より好ましい連結基はフェニレン基であり、さらに好ましい連結基は1,4-フェニレン基である。アリーレン基が置換基を有するときの置換基の説明と好ましい範囲については、下記の R^1 ~ R^7 等がとりうる置換基の説明と好ましい範囲を参照することができる。

40

【0018】

一般式(2)において、 R^{11} ~ R^{18} は各々独立に水素原子または置換基を表す。置換基の数は特に制限されず、 R^{11} ~ R^{18} のすべてが無置換(すなわち水素原子)であってもよい。 R^{11} ~ R^{18} のうち2つ以上が置換基である場合、複数の置換基は互いに同一であっても異なってもよい。

【0019】

R^{11} ~ R^{18} がとりうる置換基と、 R^1 ~ R^7 がとりうる置換基として、例えばヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、炭素数1~20のアルキル基、炭素数1~20のアルコキシ基、炭素数1~20のアルキルチオ基、炭素数1~20のアルキル置換アミノ基、炭素数2~20のアシル基、炭素数6~40のアリール基、炭素数3~40のヘテロアリール基、炭素数2~10のアルケニル基、炭素数2~10のアルキニル基、炭素数2~10の

50

アルコキシカルボニル基、炭素数 1 ~ 10 のアルキルスルホニル基、炭素数 1 ~ 10 のハロアルキル基、アミド基、炭素数 2 ~ 10 のアルキルアミド基、炭素数 3 ~ 20 のトリアルキルシリル基、炭素数 4 ~ 20 のトリアルキルシリルアルキル基、炭素数 5 ~ 20 のトリアルキルシリルアルケニル基、炭素数 5 ~ 20 のトリアルキルシリルアルキニル基およびニトロ基等が挙げられる。これらの具体例のうち、さらに置換基により置換可能なものは置換されていてもよい。より好ましい置換基は、ハロゲン原子、シアノ基、炭素数 1 ~ 20 の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基、炭素数 6 ~ 40 の置換もしくは無置換のアリール基、炭素数 3 ~ 40 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基、炭素数 1 ~ 20 のジアルキル置換アミノ基である。さらに好ましい置換基は、フッ素原子、塩素原子、シアノ基、炭素数 1 ~ 10 の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数 1 ~ 10 の置換もしくは無置換のアルコキシ基、炭素数 6 ~ 15 の置換もしくは無置換のアリール基、炭素数 3 ~ 12 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基である。

10

【0020】

R^{11} と R^{12} 、 R^{12} と R^{13} 、 R^{13} と R^{14} 、 R^{15} と R^{16} 、 R^{16} と R^{17} 、 R^{17} と R^{18} は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。環状構造は芳香環であっても脂肪環であってもよく、またヘテロ原子を含むものであってもよく、さらに環状構造は2環以上の縮合環であってもよい。ここでいうヘテロ原子としては、窒素原子、酸素原子および硫黄原子からなる群より選択されるものであることが好ましい。形成される環状構造の例として、ベンゼン環、ナフタレン環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、ピロール環、イミダゾール環、ピラゾール環、トリアゾール環、イミダゾリン環、オキサゾール環、イソオキサゾール環、チアゾール環、イソチアゾール環、シクロヘキサジエン環、シクロヘキセン環、シクロペンタエン環、シクロヘプタトリエン環、シクロヘプタジエン環、シクロヘプタエン環などを挙げるができる。

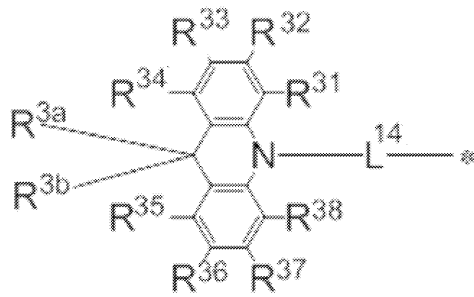
20

【0021】

一般式(2)で表される基は、下記一般式(3)~(7)のいずれかで表される基であることが好ましい。

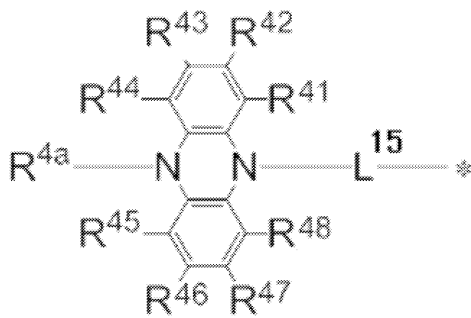
【化 9】

一般式 (3)



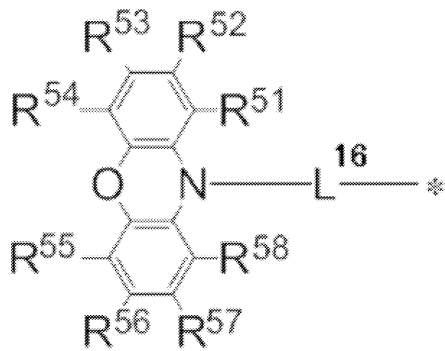
10

一般式 (4)



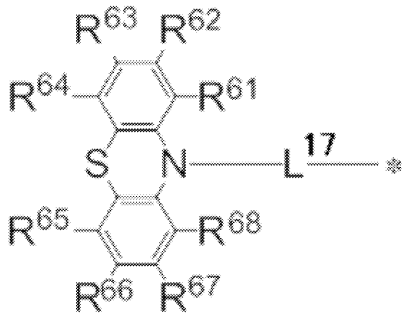
20

一般式 (5)



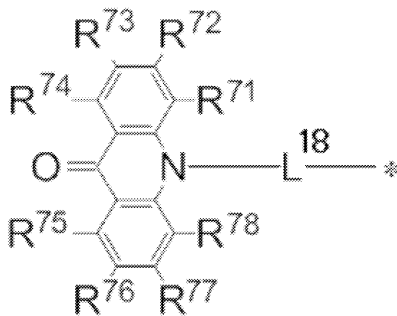
30

一般式 (6)



10

一般式 (7)



20

【0022】

一般式(3)～(7)において、 $L^{14} \sim L^{18}$ は単結合、または置換もしくは無置換のアリーレン基を表し、*は一般式(1)における複素環への結合部位を表す。 $L^{14} \sim L^{18}$ がアリーレン基であるときのアリーレン基の説明と好ましい範囲については、 L^1 がアリーレン基であるときのアリーレン基の説明と好ましい範囲を参照することができる。

$R^{31} \sim R^{38}$ 、 R^{3a} 、 R^{3b} 、 $R^{41} \sim R^{48}$ 、 R^{4a} 、 $R^{51} \sim R^{58}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{78}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。ここでいう置換基の説明と好ましい範囲については、上記の $R^1 \sim R^7$ 等がとりうる置換基の説明と好ましい範囲を参照することができる。また、 $R^{31} \sim R^{38}$ 、 R^{3a} 、 R^{3b} 、 $R^{41} \sim R^{48}$ 、 R^{4a} 、 $R^{51} \sim R^{58}$ 、 $R^{61} \sim R^{68}$ 、 $R^{71} \sim R^{78}$ は、各々独立に上記一般式(3)～(7)のいずれかで表される基であることも好ましい。一般式(3)～(7)における置換基の数は特に制限されない。すべてが無置換(すなわち水素原子)である場合も好ましい。また、 R^{3a} および R^{3b} は置換もしくは無置換のアルキル基、置換もしくは無置換のアリール基であることが好ましく、炭素数1～6の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数6～18の置換もしくはアリール基であることがより好ましい。また、一般式(3)～(7)のそれぞれにおいて置換基が2つ以上ある場合、それらの置換基は同一であっても異なってもよい。一般式(3)～(7)に置換基が存在している場合、その置換基は一般式(3)であれば $R^{32} \sim R^{37}$ 、 R^{3a} 、 R^{3b} のいずれかであることが好ましく、 R^{3a} および R^{3b} の少なくとも1つであることがより好ましく、一般式(4)であれば $R^{42} \sim R^{47}$ 、 R^{4a} のいずれかであることが好ましく、一般式(5)であれば $R^{52} \sim R^{57}$ のいずれかであることが好ましく、一般式(6)であれば $R^{62} \sim R^{67}$ のいずれかであることが好ましく、一般式(7)であれば $R^{72} \sim R^{77}$ のいずれかであることが好ましい。

30

40

【0023】

一般式(3)～(7)において、 R^{31} と R^{32} 、 R^{32} と R^{33} 、 R^{33} と R^{34} 、 R^{35} と R^{36} 、 R^{36} と R^{37} 、 R^{37} と R^{38} 、 R^{3a} と R^{3b} 、 R^{41} と R^{42} 、 R^{42} と R^{43} 、 R^{43} と R^{44} 、 R^{45} と R^{46} 、 R^{46} と R^{47} 、 R^{47} と R^{48} 、 R^{51} と R^{52} 、 R^{52} と R^{53} 、 R^{53} と R^{54} 、 R^{55} と R^{56} 、 R^{56} と R^{57} 、 R^{57} と R^{58} 、 R^{61} と R^{62} 、 R^{62} と R^{63} 、 R^{63} と R^{64} 、 R^{65} と R^{66} 、 R^{66} と R^{67} 、 R^{67} と R^{68} 、 R^{71} と R^{72} 、 R^{72} と R^{73} 、 R^{73} と R^{74} 、 R^{75} と R^{76} 、 R^{76} と R^{77} 、 R^{77} と R^{78} は互いに結合して環状構造を形成していてもよい。環状構造の説明と好ましい例につい

50

ては、上記の一般式(2)において、 R^{11} と R^{12} 等が互いに結合して形成する環状構造の説明と好ましい例を参照することができる。

【0024】

一般式(1)中に存在する一般式(2)で表される基は、すべてが一般式(3)~(7)のいずれか1つの一般式で表される基であることが好ましい。例えば、すべてが一般式(5)で表される基である場合を好ましく例示することができる。

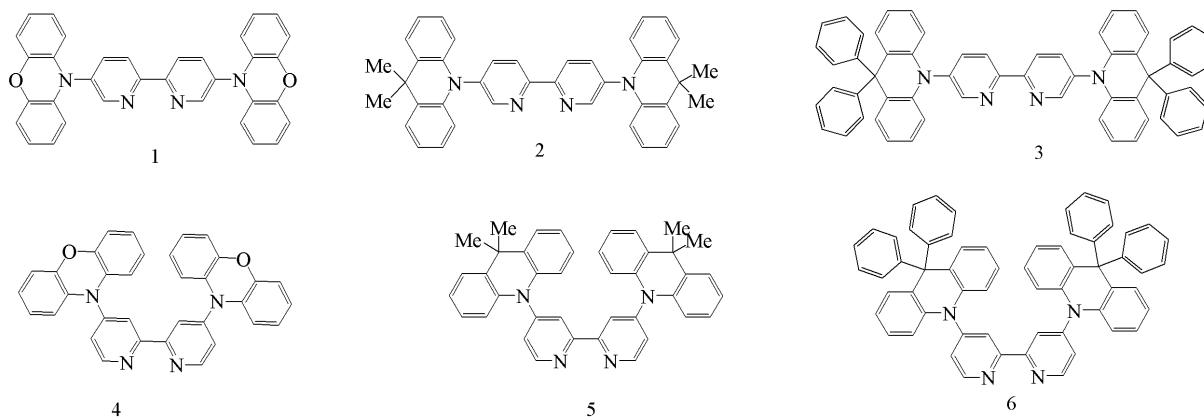
【0025】

以下において、一般式(1)で表される化合物の具体例を例示する。ただし、本発明において用いることができる一般式(1)で表される化合物はこれらの具体例によって限定的に解釈されるべきものではない。なお、下記式において、Meはメチル基を表す。

10

【0026】

【化10】



20

【0027】

一般式(1)で表される化合物の分子量は、例えば一般式(1)で表される化合物を含む有機層を蒸着法により製膜して利用することを意図する場合には、1500以下であることが好ましく、1200以下であることがより好ましく、1000以下であることがさらに好ましく、800以下であることがさらに好ましい。分子量の下限値は、一般式(1)で表される最小化合物の分子量である。

30

一般式(1)で表される化合物は、分子量にかかわらず塗布法で成膜してもよい。塗布法を用いれば、分子量が比較的大きな化合物であっても成膜することが可能である。

【0028】

本発明を応用して、分子内に一般式(1)で表される構造を複数個含む化合物を、発光材料として用いることも考えられる。

例えば、一般式(1)で表される構造中にあらかじめ重合性基を存在させておいて、その重合性基を重合させることによって得られる重合体を、発光材料として用いることが考えられる。具体的には、一般式(1)の $R^1 \sim R^7$ のいずれかに重合性官能基を含むモノマーを用意して、これを単独で重合させるか、他のモノマーとともに共重合させることにより、繰り返し単位を有する重合体を得て、その重合体を発光材料として用いることが考えられる。あるいは、一般式(1)で表される構造を有する化合物どうしを反応させることにより、二量体や三量体を得て、それらを発光材料として用いることも考えられる。

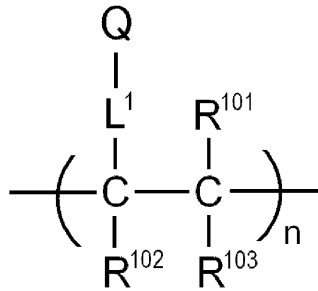
40

【0029】

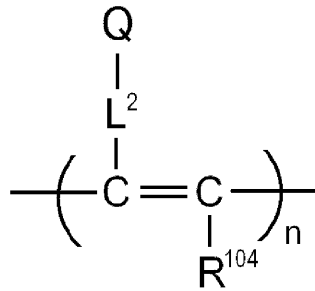
一般式(1)で表される構造を含む繰り返し単位を有する重合体の例として、下記一般式(8)または(9)で表される構造を含む重合体を挙げることができる。

【化 1 1】

一般式 (8)



一般式 (9)



10

【0030】

一般式 (8) または (9) において、Q は一般式 (1) で表される構造を含む基を表し、 L^1 および L^2 は連結基を表す。連結基の炭素数は、好ましくは 0 ~ 20 であり、より好ましくは 1 ~ 15 であり、さらに好ましくは 2 ~ 10 である。連結基は $-X^{11}-L^{11}-$ で表される構造を有するものであることが好ましい。ここで、 X^{11} は酸素原子または硫黄原子を表し、酸素原子であることが好ましい。 L^{11} は連結基を表し、置換もしくは無置換のアルキレン基、または置換もしくは無置換のアリーレン基であることが好ましく、炭素数 1 ~ 10 の置換もしくは無置換のアルキレン基、または置換もしくは無置換のフェニレン基であることがより好ましい。

一般式 (8) または (9) において、 R^{101} 、 R^{102} 、 R^{103} および R^{104} は、各々独立に置換基を表す。好ましくは、炭素数 1 ~ 6 の置換もしくは無置換のアルキル基、炭素数 1 ~ 6 の置換もしくは無置換のアルコキシ基、ハロゲン原子であり、より好ましくは炭素数 1 ~ 3 の無置換のアルキル基、炭素数 1 ~ 3 の無置換のアルコキシ基、フッ素原子、塩素原子であり、さらに好ましくは炭素数 1 ~ 3 の無置換のアルキル基、炭素数 1 ~ 3 の無置換のアルコキシ基である。

L^1 および L^2 で表される連結基は、Q を構成する一般式 (1) の構造の $R^1 \sim R^7$ のいずれか、一般式 (2) の構造の $R^{11} \sim R^{18}$ のいずれか、一般式 (3) の構造の $R^{31} \sim R^{38}$ 、 R^{3a} 、 R^{3b} のいずれか、一般式 (4) の構造の $R^{41} \sim R^{48}$ 、 R^{4a} のいずれか、一般式 (5) の構造の $R^{51} \sim R^{58}$ のいずれか、一般式 (6) の構造の $R^{61} \sim R^{68}$ のいずれか、一般式 (7) の構造の $R^{71} \sim R^{78}$ のいずれかに結合することができる。1 つの Q に対して連結基が 2 つ以上連結して架橋構造や網目構造を形成していてもよい。

【0031】

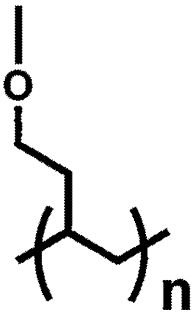
繰り返し単位の具体的な構造例として、下記式 (10) ~ (13) で表される構造を挙げることができる。

20

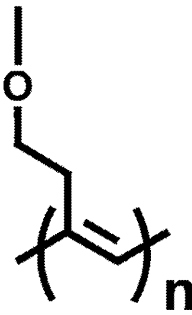
30

【化 1 2】

式(10)

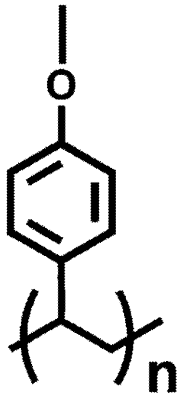


式(11)

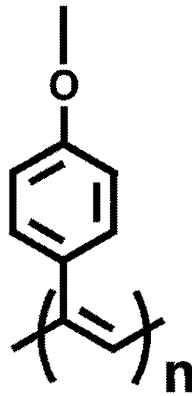


10

式(12)



式(13)



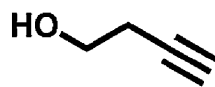
20

【0032】

これらの式(10)~(13)を含む繰り返し単位を有する重合体は、一般式(1)の構造のR¹~R⁷のいずれかにヒドロキシ基を導入しておき、それをリンカーとして下記化合物を反応させて重合性基を導入し、その重合性基を重合させることにより合成することができる。

30

【化 1 3】



40

【0033】

分子内に一般式(1)で表される構造を含む重合体は、一般式(1)で表される構造を有する繰り返し単位のみからなる重合体であってもよいし、それ以外の構造を有する繰り返し単位を含む重合体であってもよい。また、重合体の中に含まれる一般式(1)で表さ

50

れる構造を有する繰り返し単位は、単一種であってもよいし、2種以上であってもよい。一般式(1)で表される構造を有さない繰り返し単位としては、通常の共重合に用いられるモノマーから誘導されるものを挙げるができる。例えば、エチレン、スチレンなどのエチレン性不飽和結合を有するモノマーから誘導される繰り返し単位を挙げるができる。

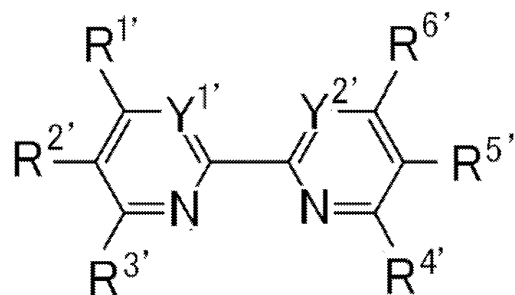
【0034】

[一般式(1')で表される化合物]

一般式(1')で表される化合物は新規化合物である。

【化14】

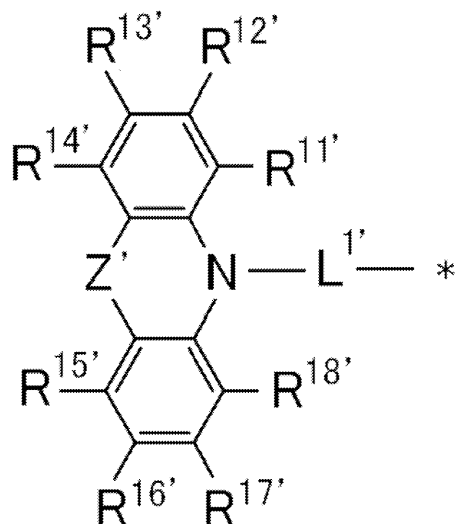
一般式(1')



一般式(1')において、Y^{1'}およびY^{2'}は各々独立にNまたはC(R^{7'})を表し、R^{1'}~R^{7'}は各々独立に水素原子または置換基を表す。ただし、R^{1'}およびR^{2'}の少なくとも一方とR^{5'}およびR^{6'}の少なくとも一方は、各々独立に下記一般式(2')で表される基を表す。

【化15】

一般式(2')



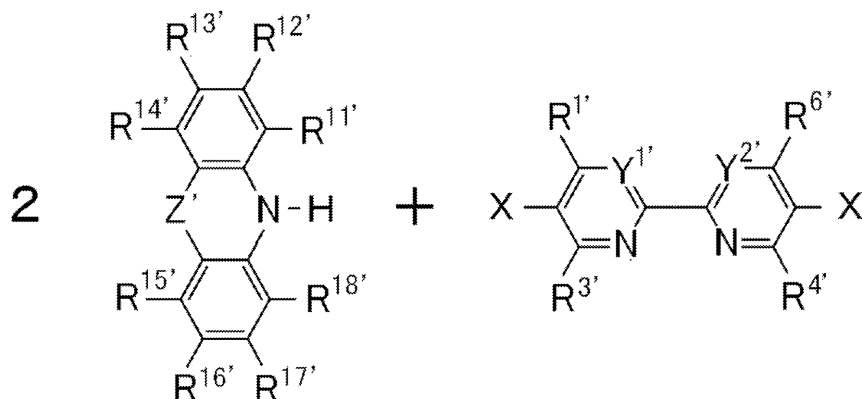
一般式(2')において、Z'は連結鎖長が1原子である2価の連結基を表す。L^{1'}は単結合、または置換もしくは無置換のアリーレン基を表し、*は一般式(1)における複素環への結合部位を表す。R^{11'}~R^{18'}は、各々独立に水素原子または置換基を表す。R^{11'}とR^{12'}、R^{12'}とR^{13'}、R^{13'}とR^{14'}、R^{15'}とR^{16'}、R^{16'}とR^{17'}、R^{17'}とR^{18'}はそれぞれ互いに結合して環状構造を形成していてもよい。

一般式(1')におけるY^{1'}、Y^{2'}、R^{1'}~R^{7'}とZ'、L^{1'}、とR^{11'}~R^{18'}の説明と好ましい範囲については、一般式(1)で表される化合物の説明を参照することができる。

【0035】

[一般式(1')で表される化合物の合成方法]

一般式(1')で表される化合物は、既知の反応を組み合わせることによって合成することができる。例えば、一般式(1')のR^{2'}とR^{5'}が一般式(2')で表される基である化合物は、以下の2つの化合物を反応させることにより合成することが可能である。
【化16】



10

【0036】

上記の反応式におけるR^{1'}、R^{3'}、R^{4'}、R^{6'}、R^{11'}～R^{18'}の説明については、一般式(1')における対応する記載を参照することができる。Xはハロゲン原子を表し、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子を挙げることができ、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子が好ましい。

20

上記の反応は、ウルマン(Ullmann)反応やブッフバルド-ハートウィッグ(Buchwald-Hartwig)反応などの公知の反応を応用したものであり、公知の反応条件を適宜選択して用いることができる。上記の反応の詳細については、後述の合成例を参考にすることができる。また、一般式(1')で表される化合物は、その他の公知の合成反応を組み合わせることによっても合成することができる。

また、中間体のピピリジンのジプロモ体およびアミン誘導体は、市販品として入手してもよいし、合成品を使用してもよい。ピピリジンのジプロモ体は、例えばTetrahedron Letters, 36(36), 6471-4; 1995に記載の方法により合成することができ、アミン誘導体は、Journal of Organic Chemistry, 76(9), 2976-2993; 2011に記載の方法により合成することができる。

30

【0037】

[有機発光素子]

本発明の一般式(1)で表される化合物は、有機発光素子の発光材料として有用である。このため、本発明の一般式(1)で表される化合物は、有機発光素子の発光層に発光材料として効果的に用いることができる。一般式(1)で表される化合物の中には、遅延蛍光を放射する遅延蛍光材料(遅延蛍光体)が含まれている。すなわち本発明は、一般式(1)で表される構造を有する遅延蛍光体の発明と、一般式(1)で表される化合物を遅延蛍光体として使用する発明と、一般式(1)で表される化合物を用いて遅延蛍光を発光させる方法の発明も提供する。そのような化合物を発光材料として用いた有機発光素子は、遅延蛍光を放射し、発光効率が高いという特徴を有する。その原理を、有機エレクトロルミネッセンス素子を例にとって説明すると以下ようになる。

40

【0038】

有機エレクトロルミネッセンス素子においては、正負の両電極より発光材料にキャリアを注入し、励起状態の発光材料を生成し、発光させる。通常、キャリア注入型の有機エレクトロルミネッセンス素子の場合、生成した励起子のうち、励起一重項状態に励起されるのは25%であり、残り75%は励起三重項状態に励起される。従って、励起三重項状態からの発光であるリン光を利用するほうが、エネルギーの利用効率が高い。しかしながら、励起三重項状態は寿命が長いため、励起状態の飽和や励起三重項状態の励起子との相互作用によるエネルギーの失活が起こり、一般にリン光の量子収率が高くないことが多い。一方、遅延蛍光材料は、項間交差等により励起三重項状態へとエネルギーが遷移した後、

50

三重項 - 三重項消滅あるいは熱エネルギーの吸収により、励起一重項状態に逆項間交差され蛍光を放射する。有機エレクトロルミネッセンス素子においては、なかでも熱エネルギーの吸収による熱活性化型の遅延蛍光材料が特に有用であると考えられる。有機エレクトロルミネッセンス素子に遅延蛍光材料を利用した場合、励起一重項状態の励起子は通常通り蛍光を放射する。一方、励起三重項状態の励起子は、デバイスが発する熱を吸収して励起一重項へ項間交差され蛍光を放射する。このとき、励起一重項からの発光であるため蛍光と同波長での発光でありながら、励起三重項状態から励起一重項状態への逆項間交差により、生じる光の寿命（発光寿命）は通常の蛍光やりん光よりも長くなるため、これらよりも遅延した蛍光として観察される。これを遅延蛍光として定義できる。このような熱活性化型の励起子移動機構を用いれば、キャリア注入後に熱エネルギーの吸収を経ることにより、通常は25%しか生成しなかった励起一重項状態の化合物の比率を25%以上に引き上げることが可能となる。100未満の低い温度でも強い蛍光および遅延蛍光を発する化合物を用いれば、デバイスの熱で十分に励起三重項状態から励起一重項状態への項間交差が生じて遅延蛍光を放射するため、発光効率を飛躍的に向上させることができる。

【0039】

本発明の一般式(1)で表される化合物を発光層の発光材料として用いることにより、有機フォトルミネッセンス素子(有機PL素子)や有機エレクトロルミネッセンス素子(有機EL素子)などの優れた有機発光素子を提供することができる。このとき、本発明の一般式(1)で表される化合物は、いわゆるアシストドーバントとして、発光層に含まれる他の発光材料の発光をアシストする機能を有するものであってもよい。すなわち、発光層に含まれる本発明の一般式(1)で表される化合物は、発光層に含まれるホスト材料の最低励起一重項エネルギー準位と発光層に含まれる他の発光材料の最低励起一重項エネルギー準位との間の最低励起一重項エネルギー準位を有するものであってもよい。

有機フォトルミネッセンス素子は、基板上に少なくとも発光層を形成した構造を有する。また、有機エレクトロルミネッセンス素子は、少なくとも陽極、陰極、および陽極と陰極の間に有機層を形成した構造を有する。有機層は、少なくとも発光層を含むものであり、発光層のみからなるものであってもよいし、発光層の他に1層以上の有機層を有するものであってもよい。そのような他の有機層として、正孔輸送層、正孔注入層、電子阻止層、正孔阻止層、電子注入層、電子輸送層、励起子阻止層などを挙げることができる。正孔輸送層は正孔注入機能を有した正孔注入輸送層でもよく、電子輸送層は電子注入機能を有した電子注入輸送層でもよい。具体的な有機エレクトロルミネッセンス素子の構造例を図1に示す。図1において、1は基板、2は陽極、3は正孔注入層、4は正孔輸送層、5は発光層、6は電子輸送層、7は陰極を表わす。

以下において、有機エレクトロルミネッセンス素子の各部材および各層について説明する。なお、基板と発光層の説明は有機フォトルミネッセンス素子の基板と発光層にも該当する。

【0040】

(基板)

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、基板に支持されていることが好ましい。この基板については、特に制限はなく、従来から有機エレクトロルミネッセンス素子に慣用されているものであればよく、例えば、ガラス、透明プラスチック、石英、シリコンなどからなるものを用いることができる。

【0041】

(陽極)

有機エレクトロルミネッセンス素子における陽極としては、仕事関数の大きい(4 eV以上)金属、合金、電気伝導性化合物およびこれらの混合物を電極材料とするものが好ましく用いられる。このような電極材料の具体例としてはAu等の金属、CuI、インジウムチンオキド(ITO)、SnO₂、ZnO等の導電性透明材料が挙げられる。また、IDIXO(In₂O₃-ZnO)等非晶質で透明導電膜を作製可能な材料を用いてもよい。陽極はこれらの電極材料を蒸着やスパッタリング等の方法により、薄膜を形成させ、フ

オトリソグラフィ法で所望の形状のパターンを形成してもよく、あるいはパターン精度をあまり必要としない場合は(100 μm以上程度)、上記電極材料の蒸着やスパッタリング時に所望の形状のマスクを介してパターンを形成してもよい。あるいは、有機導電性化合物のように塗布可能な材料を用いる場合には、印刷方式、コーティング方式等湿式成膜法を用いることもできる。この陽極より発光を取り出す場合には、透過率を10%より大きくすることが望ましく、また陽極としてのシート抵抗は数百 / 以下が好ましい。さらに膜厚は材料にもよるが、通常10~1000 nm、好ましくは10~200 nmの範囲で選ばれる。

【0042】

(陰極)

一方、陰極としては、仕事関数の小さい(4 eV以下)金属(電子注入性金属と称する)、合金、電気伝導性化合物およびこれらの混合物を電極材料とするものが用いられる。このような電極材料の具体例としては、ナトリウム、ナトリウム-カリウム合金、マグネシウム、リチウム、マグネシウム/銅混合物、マグネシウム/銀混合物、マグネシウム/アルミニウム混合物、マグネシウム/インジウム混合物、アルミニウム/酸化アルミニウム(Al_2O_3)混合物、インジウム、リチウム/アルミニウム混合物、希土類金属等が挙げられる。これらの中で、電子注入性および酸化等に対する耐久性の点から、電子注入性金属とこれより仕事関数の値が大きく安定な金属である第二金属との混合物、例えば、マグネシウム/銀混合物、マグネシウム/アルミニウム混合物、マグネシウム/インジウム混合物、アルミニウム/酸化アルミニウム(Al_2O_3)混合物、リチウム/アルミニウム混合物、アルミニウム等が好適である。陰極はこれらの電極材料を蒸着やスパッタリング等の方法により薄膜を形成させることにより、作製することができる。また、陰極としてのシート抵抗は数百 / 以下が好ましく、膜厚は通常10 nm~5 μm、好ましくは50~200 nmの範囲で選ばれる。なお、発光した光を透過させるため、有機エレクトロルミネッセンス素子の陽極または陰極のいずれか一方が、透明または半透明であれば発光輝度が向上し好都合である。

また、陽極の説明で挙げた導電性透明材料を陰極に用いることで、透明または半透明の陰極を作製することができ、これを応用することで陽極と陰極の両方が透過性を有する素子を作製することができる。

【0043】

(発光層)

発光層は、陽極および陰極のそれぞれから注入された正孔および電子が再結合することにより励起子が生成した後、発光する層であり、発光材料を単独で発光層に使用しても良いが、好ましくは発光材料とホスト材料を含む。発光材料としては、一般式(1)で表される本発明の化合物群から選ばれる1種または2種以上を用いることができる。本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子および有機フォトルミネッセンス素子が高い発光効率を発現するためには、発光材料に生成した一重項励起子および三重項励起子を、発光材料中に閉じ込めることが重要である。従って、発光層中に発光材料に加えてホスト材料を用いることが好ましい。ホスト材料としては、励起一重項エネルギー、励起三重項エネルギーの少なくとも何れか一方が本発明の発光材料よりも高い値を有する有機化合物を用いることができる。その結果、本発明の発光材料に生成した一重項励起子および三重項励起子を、本発明の発光材料の分子中に閉じ込めることが可能となり、その発光効率を十分に引き出すことが可能となる。もっとも、一重項励起子および三重項励起子を十分に閉じ込めることができなくても、高い発光効率を得ることが可能な場合もあるため、高い発光効率を実現しうるホスト材料であれば特に制約なく本発明に用いることができる。本発明の有機発光素子または有機エレクトロルミネッセンス素子において、発光は発光層に含まれる本発明の発光材料から生じる。この発光は蛍光発光および遅延蛍光発光の両方を含む。但し、発光の一部或いは部分的にホスト材料からの発光があってもかまわない。

ホスト材料を用いる場合、発光材料である本発明の化合物が発光層中に含有される量は0.1重量%以上であることが好ましく、1重量%以上であることがより好ましく、また

10

20

30

40

50

、50重量%以下であることが好ましく、20重量%以下であることがより好ましく、10重量%以下であることがさらに好ましい。

発光層におけるホスト材料としては、正孔輸送能、電子輸送能を有し、かつ発光の長波長化を防ぎ、なおかつ高いガラス転移温度を有する有機化合物であることが好ましい。

【0044】

(注入層)

注入層とは、駆動電圧低下や発光輝度向上のために電極と有機層間に設けられる層のことで、正孔注入層と電子注入層があり、陽極と発光層または正孔輸送層の間、および陰極と発光層または電子輸送層との間に存在させてもよい。注入層は必要に応じて設けることができる。

10

【0045】

(阻止層)

阻止層は、発光層中に存在する電荷(電子もしくは正孔)および/または励起子の発光層外への拡散を阻止することができる層である。電子阻止層は、発光層および正孔輸送層の間に配置されることができ、電子が正孔輸送層の方に向かって発光層を通過することを阻止する。同様に、正孔阻止層は発光層および電子輸送層の間に配置されることができ、正孔が電子輸送層の方に向かって発光層を通過することを阻止する。阻止層はまた、励起子が発光層の外側に拡散することを阻止するために用いることができる。すなわち電子阻止層、正孔阻止層はそれぞれ励起子阻止層としての機能も兼ね備えることができる。本明細書でいう電子阻止層または励起子阻止層は、一つの層で電子阻止層および励起子阻止層の機能を有する層を含む意味で使用される。

20

【0046】

(正孔阻止層)

正孔阻止層とは広い意味では電子輸送層の機能を有する。正孔阻止層は電子を輸送しつつ、正孔が電子輸送層へ到達することを阻止する役割があり、これにより発光層中での電子と正孔の再結合確率を向上させることができる。正孔阻止層の材料としては、後述する電子輸送層の材料を必要に応じて用いることができる。

【0047】

(電子阻止層)

電子阻止層とは、広い意味では正孔を輸送する機能を有する。電子阻止層は正孔を輸送しつつ、電子が正孔輸送層へ到達することを阻止する役割があり、これにより発光層中での電子と正孔が再結合する確率を向上させることができる。

30

【0048】

(励起子阻止層)

励起子阻止層とは、発光層内で正孔と電子が再結合することにより生じた励起子が電荷輸送層に拡散することを阻止するための層であり、本層の挿入により励起子を効率的に発光層内に閉じ込めることが可能となり、素子の発光効率を向上させることができる。励起子阻止層は発光層に隣接して陽極側、陰極側のいずれにも挿入することができ、両方同時に挿入することも可能である。すなわち、励起子阻止層を陽極側に有する場合、正孔輸送層と発光層の間に、発光層に隣接して該層を挿入することができ、陰極側に挿入する場合、発光層と陰極との間に、発光層に隣接して該層を挿入することができる。また、陽極と、発光層の陽極側に隣接する励起子阻止層との間には、正孔注入層や電子阻止層などを有することができ、陰極と、発光層の陰極側に隣接する励起子阻止層との間には、電子注入層、電子輸送層、正孔阻止層などを有することができる。阻止層を配置する場合、阻止層として用いる材料の励起一重項エネルギーおよび励起三重項エネルギーの少なくともいずれか一方は、発光材料の励起一重項エネルギーおよび励起三重項エネルギーよりも高いことが好ましい。

40

【0049】

(正孔輸送層)

正孔輸送層とは正孔を輸送する機能を有する正孔輸送材料からなり、正孔輸送層は単層

50

または複数層設けることができる。

正孔輸送材料としては、正孔の注入または輸送、電子の障壁性のいずれかを有するものであり、有機物、無機物のいずれであってもよい。使用できる公知の正孔輸送材料としては例えば、トリアゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、カルバゾール誘導体、インドロカルバゾール誘導体、ポリアリールアルカン誘導体、ピラゾリン誘導体およびピラズロン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、アリールアミン誘導体、アミノ置換カルコン誘導体、オキサゾール誘導体、スチリルアントラセン誘導体、フルオレノン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、シラザン誘導体、アニリン系共重合体、また導電性高分子オリゴマー、特にチオフエンオリゴマー等が挙げられるが、ポルフィリン化合物、芳香族第3級アミン化合物およびスチリルアミン化合物を用いることが好ましく、芳香族第3級アミン化合物を用いることがより好ましい。

10

【0050】

(電子輸送層)

電子輸送層とは電子を輸送する機能を有する材料からなり、電子輸送層は単層または複数層設けることができる。

電子輸送材料(正孔阻止材料を兼ねる場合もある)としては、陰極より注入された電子を発光層に伝達する機能を有していればよい。使用できる電子輸送層としては例えば、ニトロ置換フルオレン誘導体、ジフェニルキノ誘導体、チオピランジオキシド誘導体、カルボジイミド、フレオレニリデンメタン誘導体、アントラキノジメタンおよびアントロン誘導体、オキサジアゾール誘導体等が挙げられる。さらに、上記オキサジアゾール誘導体において、オキサジアゾール環の酸素原子を硫黄原子に置換したチアジアゾール誘導体、電子吸引基として知られているキノキサリン環を有するキノキサリン誘導体も、電子輸送材料として用いることができる。さらにこれらの材料を高分子鎖に導入した、またはこれらの材料を高分子の主鎖とした高分子材料を用いることもできる。

20

【0051】

有機エレクトロルミネッセンス素子を作製する際には、一般式(1)で表される化合物を発光層に用いるだけでなく、発光層以外の層にも用いてもよい。その際、発光層に用いる一般式(1)で表される化合物と、発光層以外の層に用いる一般式(1)で表される化合物は、同一であっても異なってもよい。例えば、上記の注入層、阻止層、正孔阻止層、電子阻止層、励起子阻止層、正孔輸送層、電子輸送層などにも一般式(1)で表される化合物を用いてもよい。これらの層の製膜方法は特に限定されず、ドライプロセス、ウェットプロセスのどちらで作製してもよい。

30

【0052】

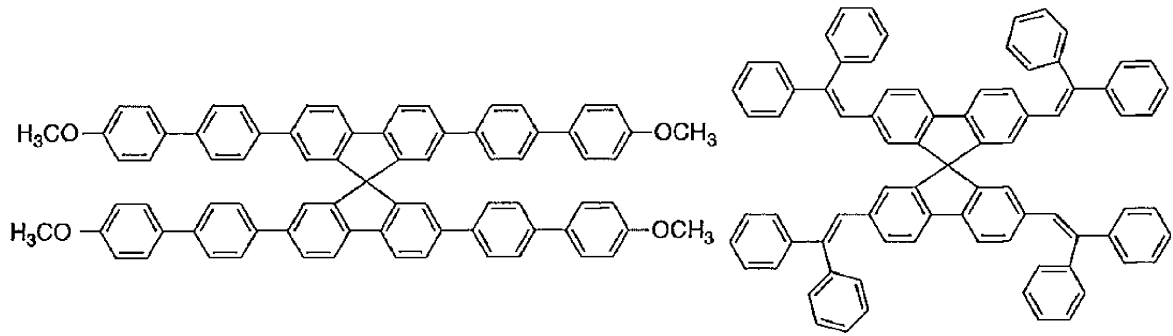
以下に、有機エレクトロルミネッセンス素子に用いることができる好ましい材料を具体的に例示する。ただし、本発明において用いることができる材料は、以下の例示化合物によって限定的に解釈されることはない。また、特定の機能を有する材料として例示した化合物であっても、その他の機能を有する材料として転用することも可能である。なお、以下の例示化合物の構造式におけるR、 $R_1 \sim R_{10}$ は、各々独立に水素原子または置換基を表す。nは3~5の整数を表す。

【0053】

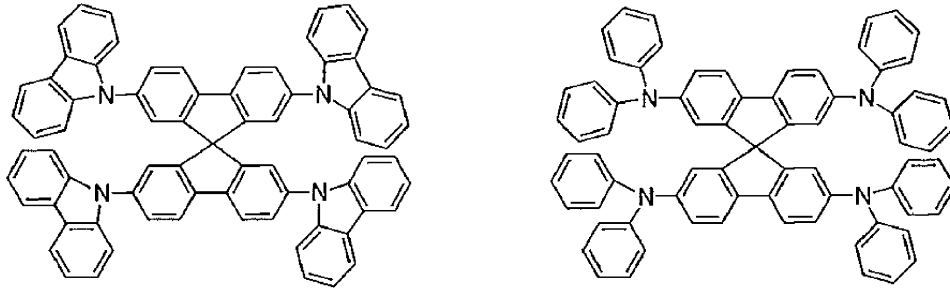
まず、発光層のホスト材料としても用いることができる好ましい化合物を挙げる。

40

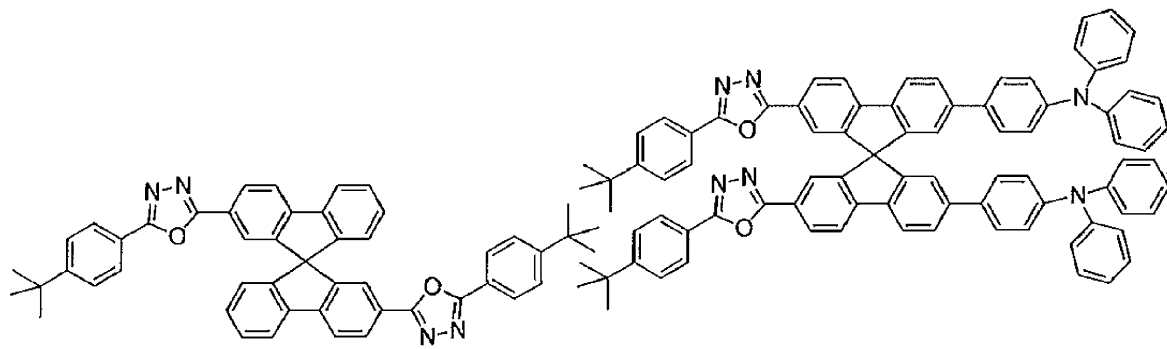
【化 1 7】



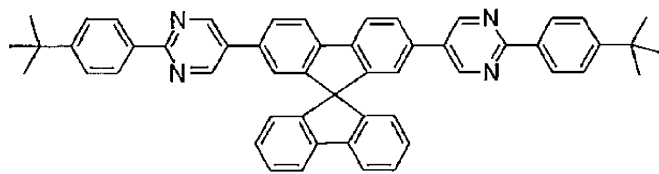
10



20

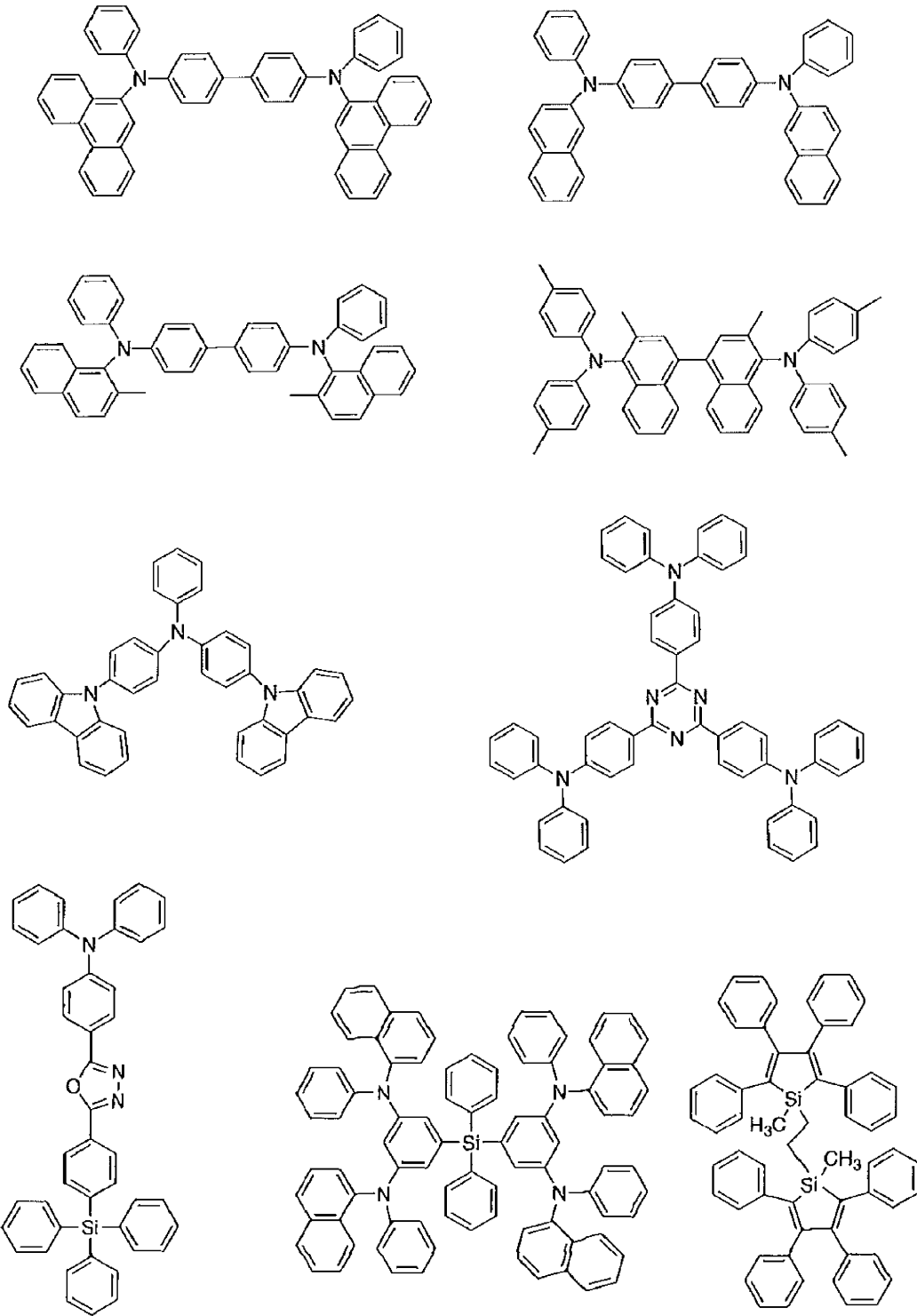


30



【 0 0 5 4 】

【化 1 8】

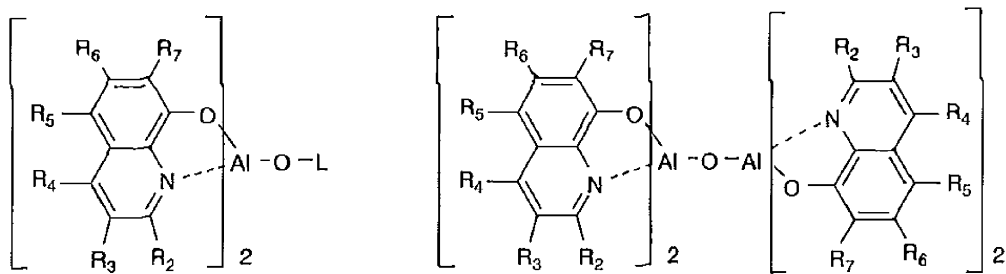


10

20

30

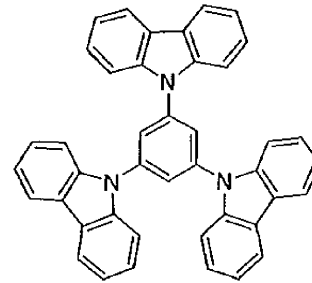
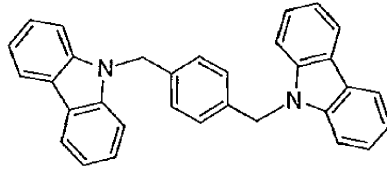
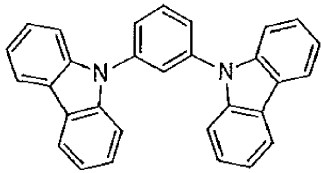
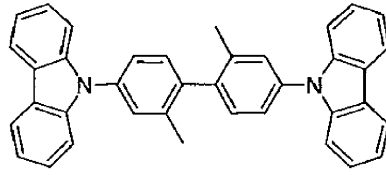
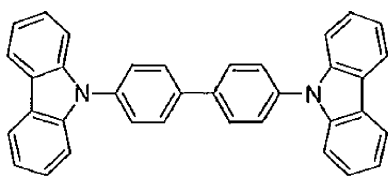
40



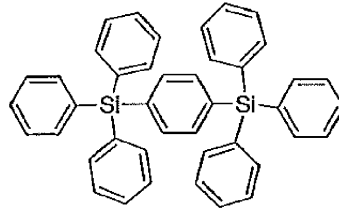
【 0 0 5 5 】

50

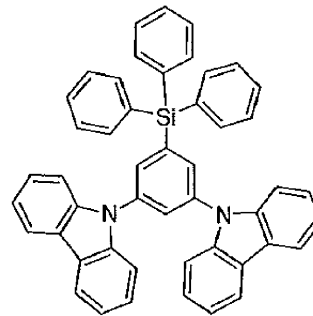
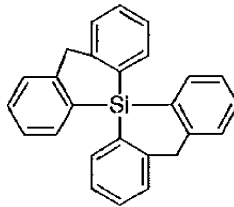
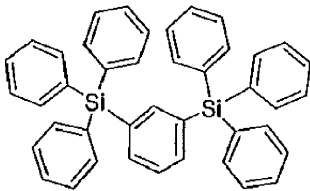
【化 1 9】



10



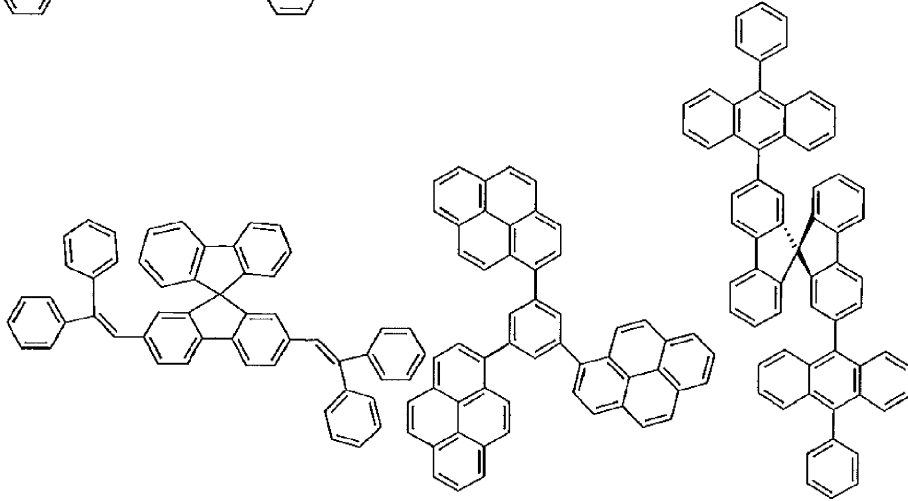
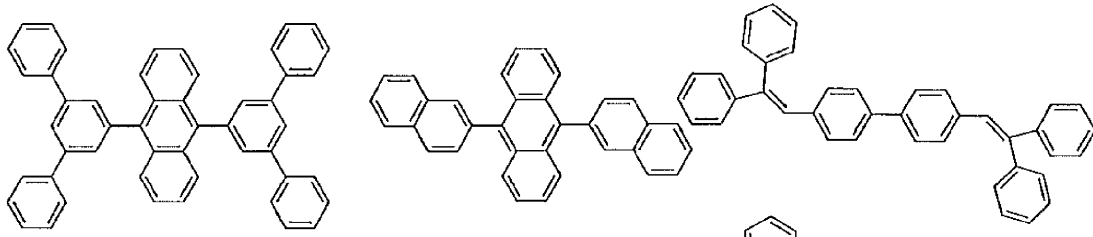
20



30

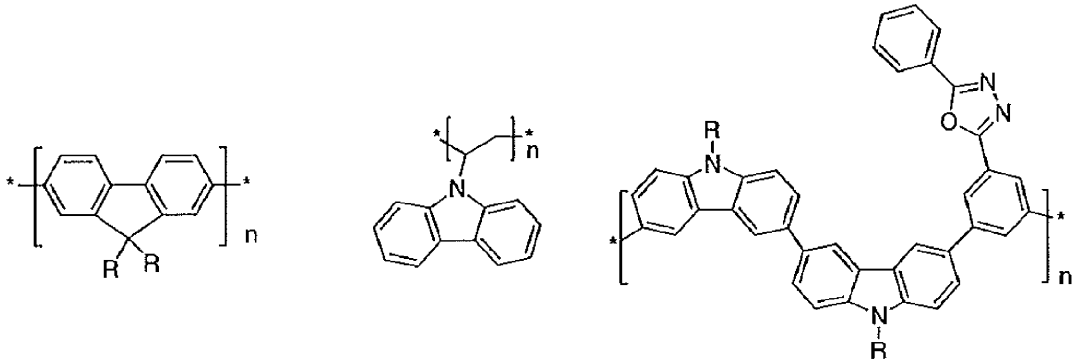
【 0 0 5 6 】

【化 2 0】



10

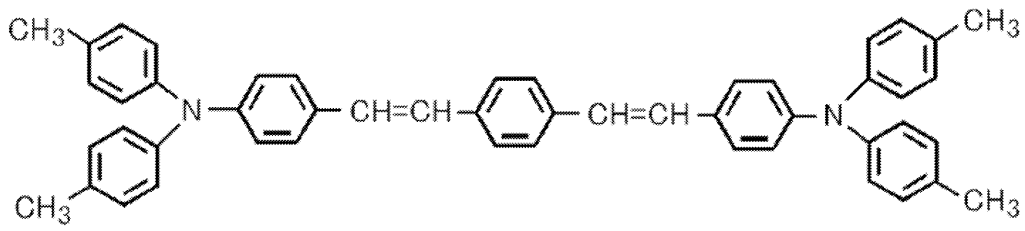
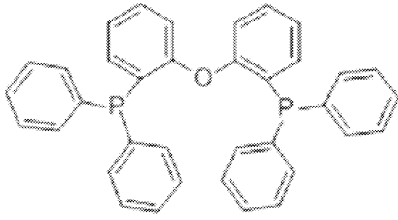
20



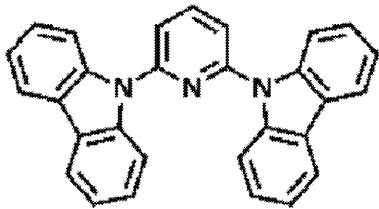
30

【 0 0 5 7 】

【化 2 1】



10



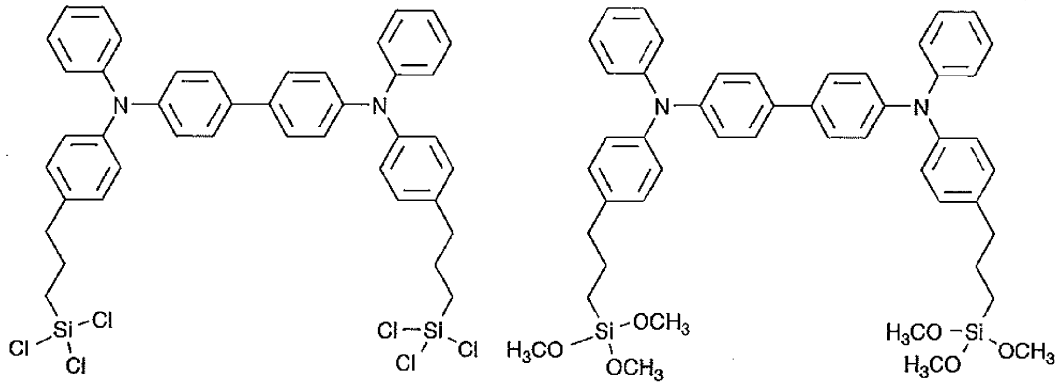
20

【 0 0 5 8 】

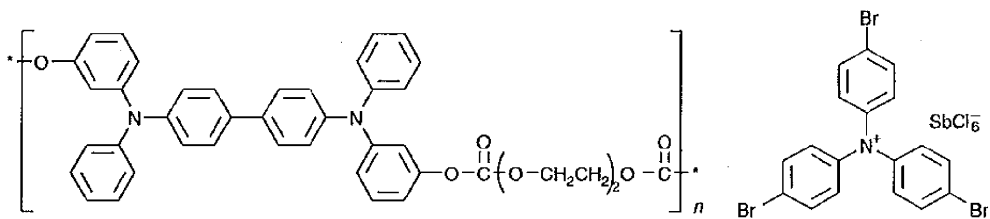
次に、正孔注入材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

【 0 0 5 9 】

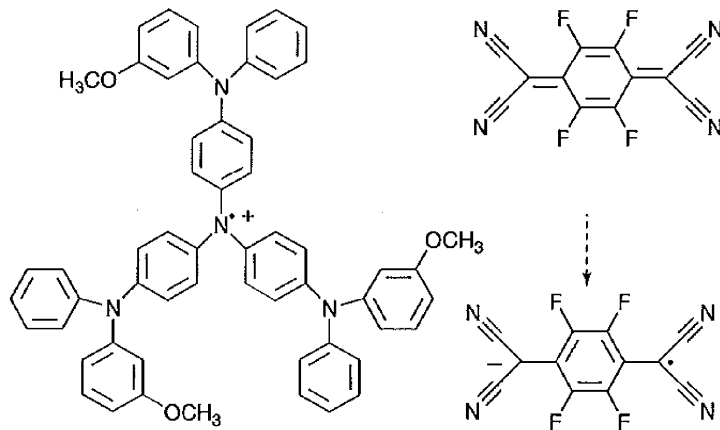
【化 2 2】



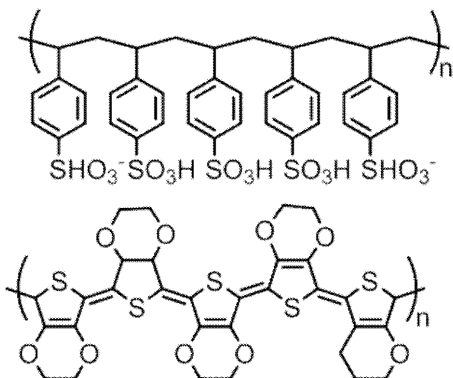
10



20



30



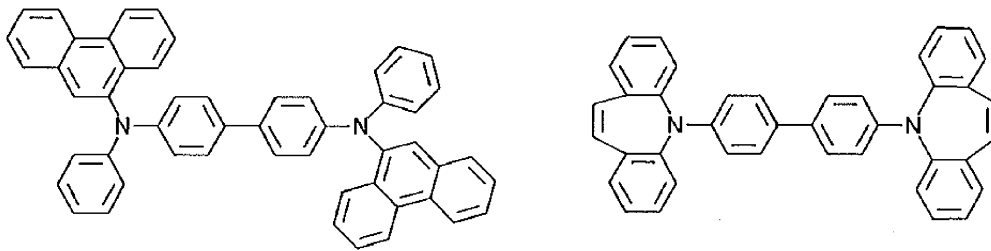
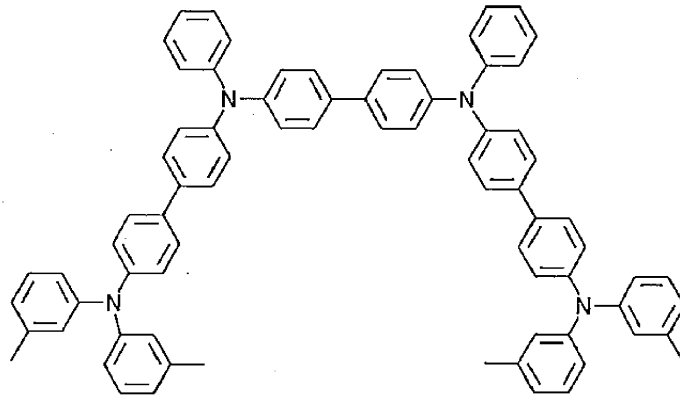
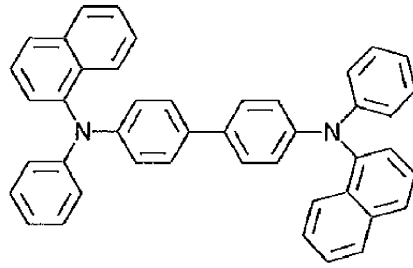
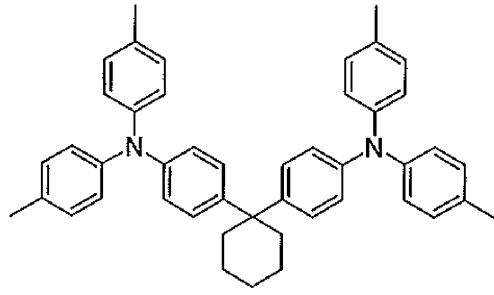
40

【 0 0 6 0】

次に、正孔輸送材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

【 0 0 6 1】

【化 2 3】



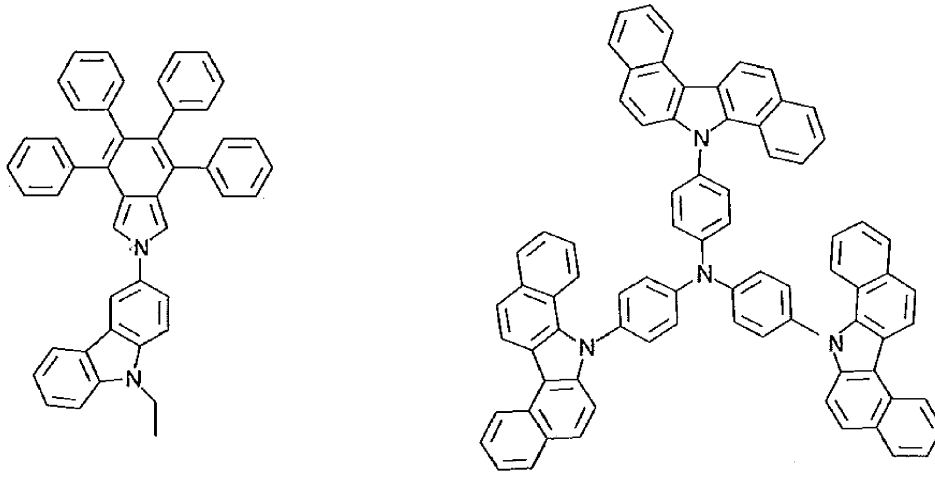
【 0 0 6 2】

10

20

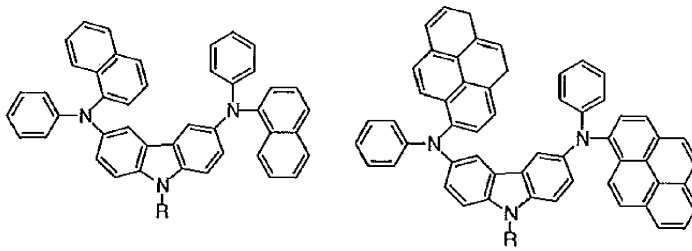
30

【化 2 4】

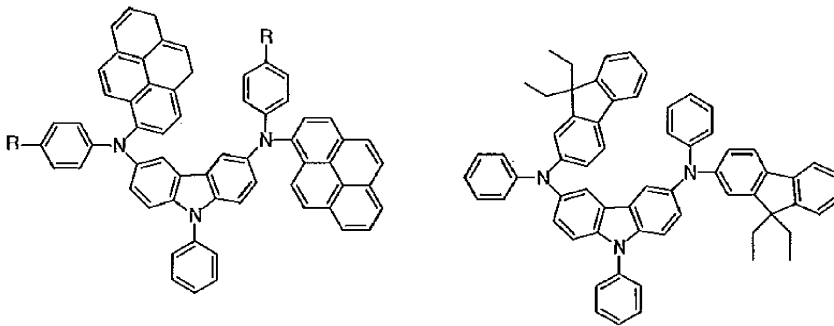


10

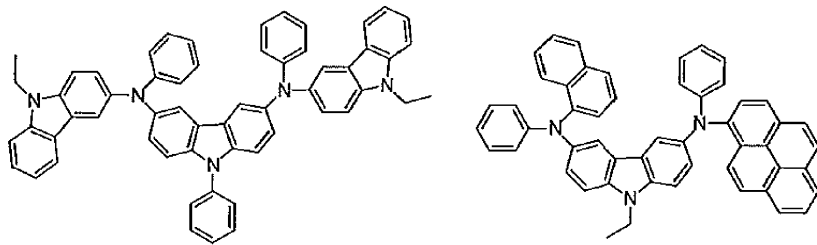
20



30

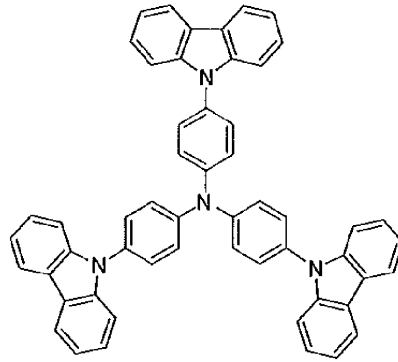
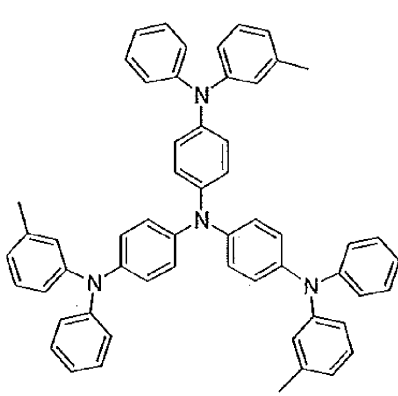


40

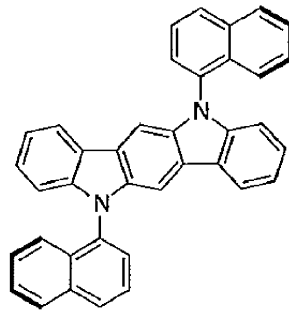
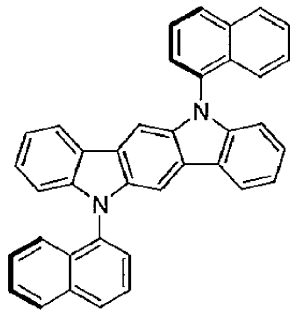


【 0 0 6 3 】

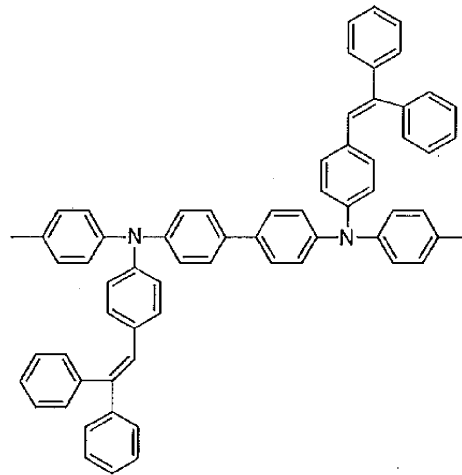
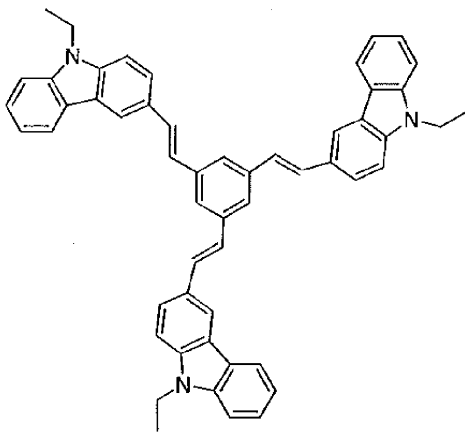
【化 2 5】



10



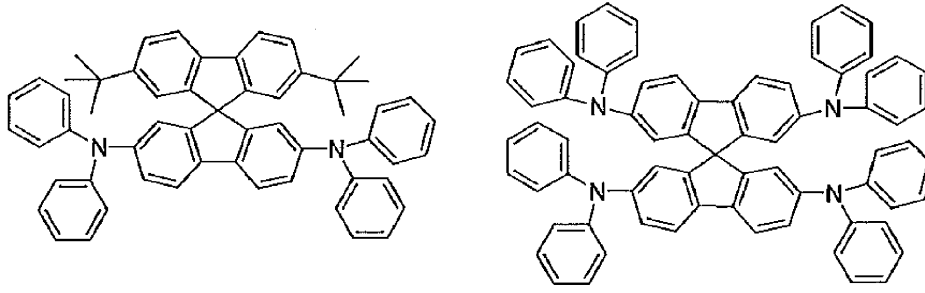
20



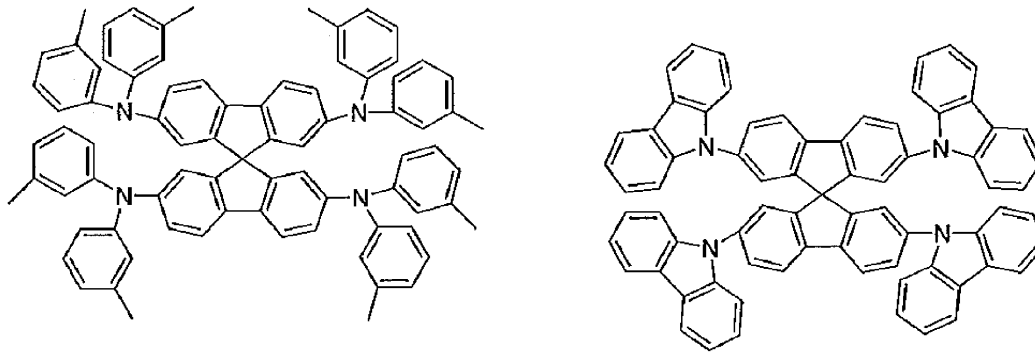
30

【 0 0 6 4 】

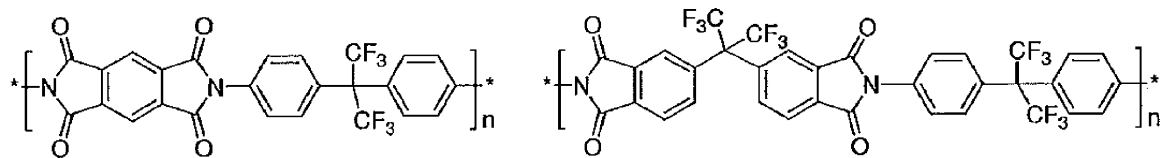
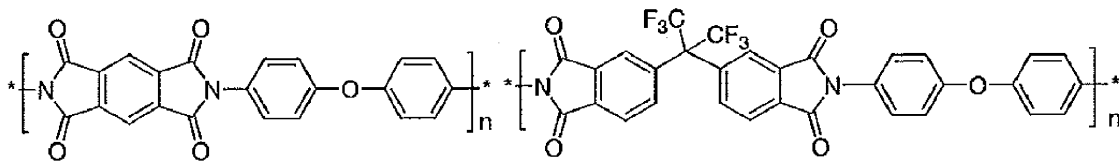
【化 2 6】



10



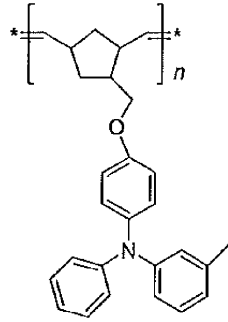
20



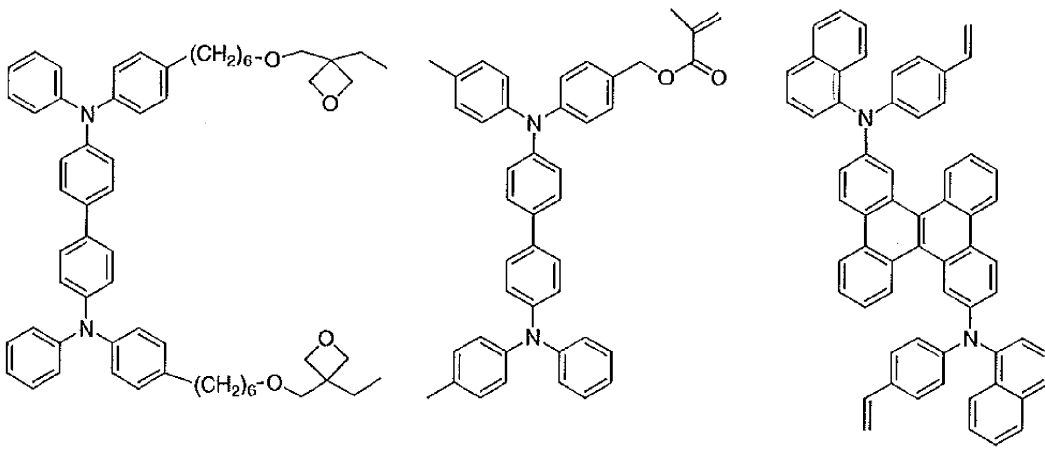
30

【 0 0 6 5】

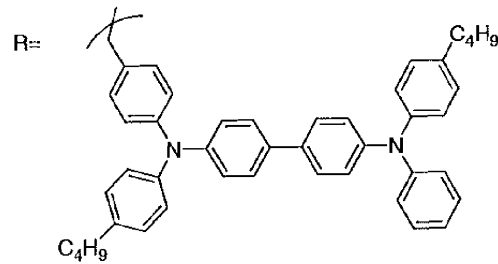
【化 2 7】



10



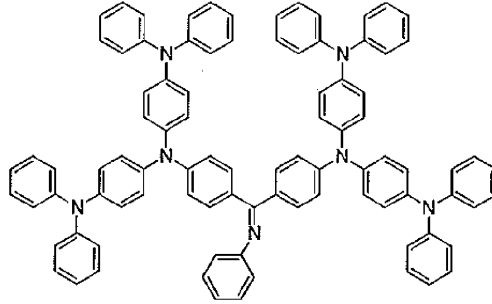
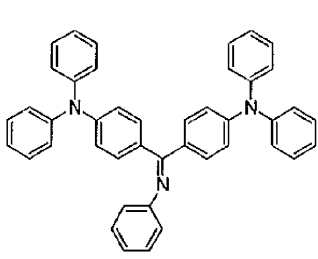
20



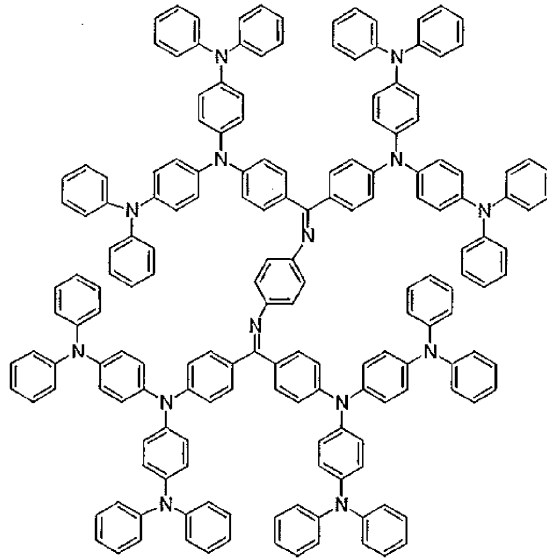
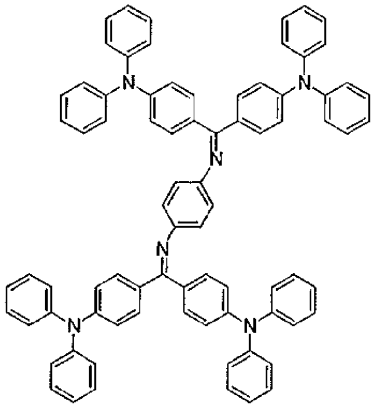
30

【 0 0 6 6 】

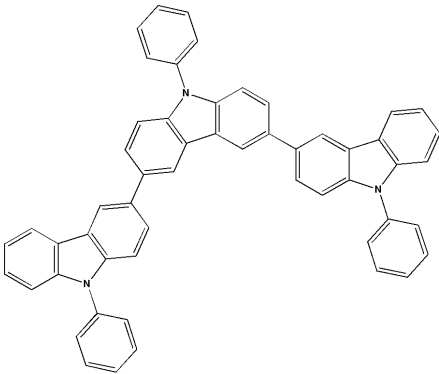
【化 2 8】



10



20



30

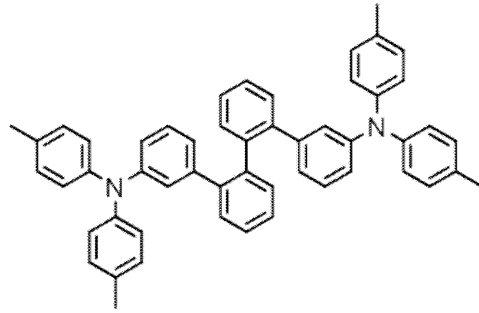
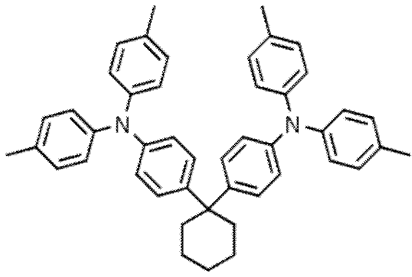
【 0 0 6 7】

次に、電子阻止材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

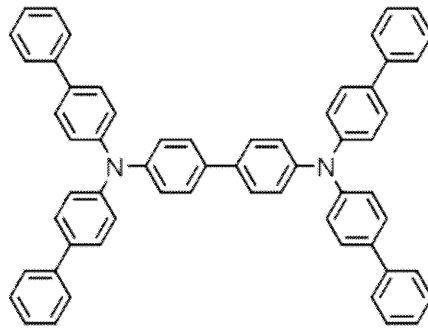
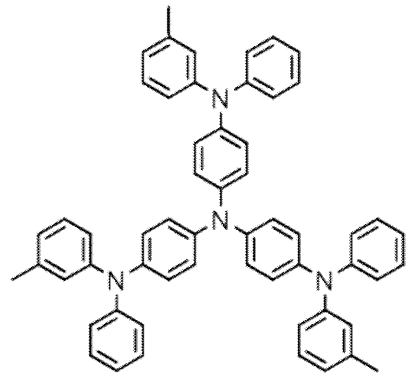
40

【 0 0 6 8】

【化 2 9】



10



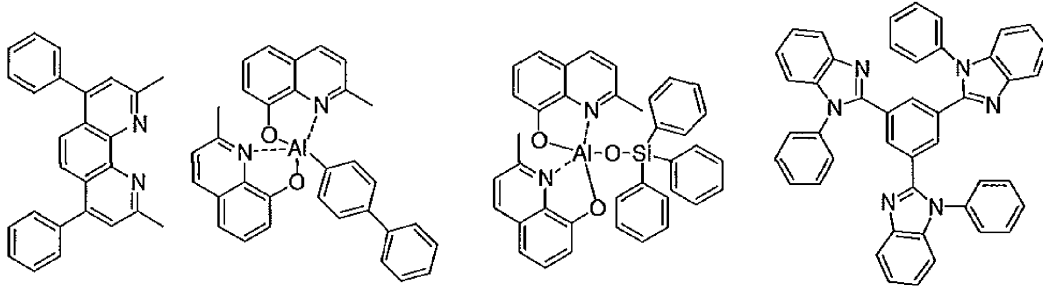
20

【 0 0 6 9】

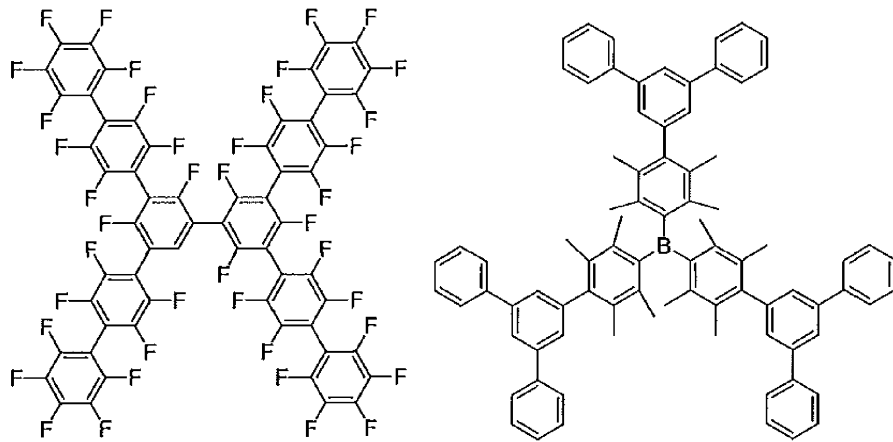
次に、正孔阻止材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

【 0 0 7 0】

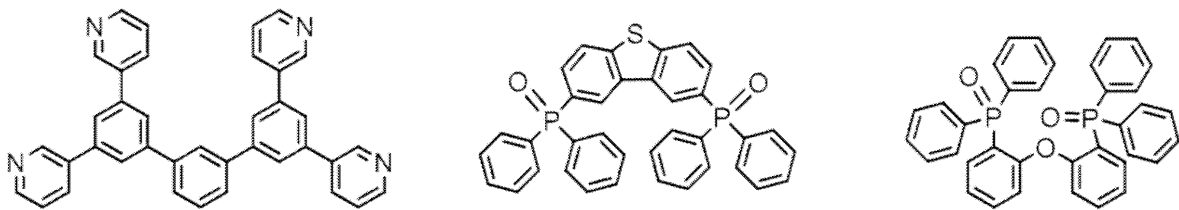
【化 3 0】



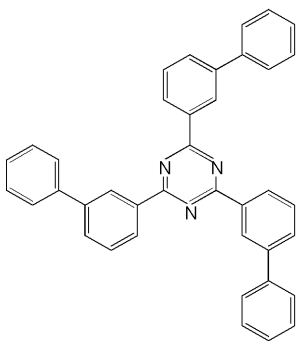
10



20



30



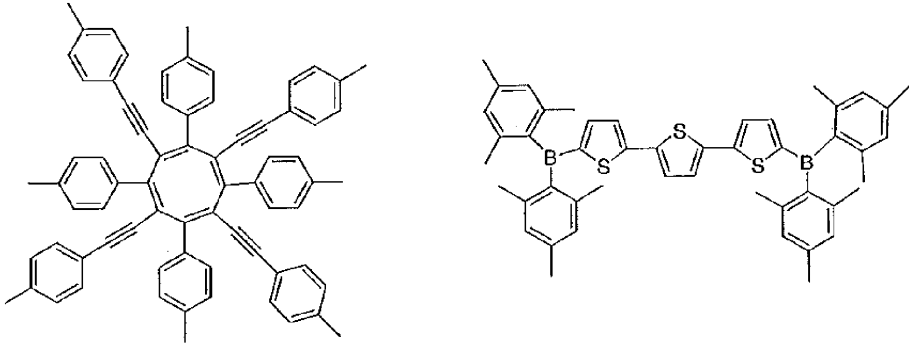
40

【 0 0 7 1】

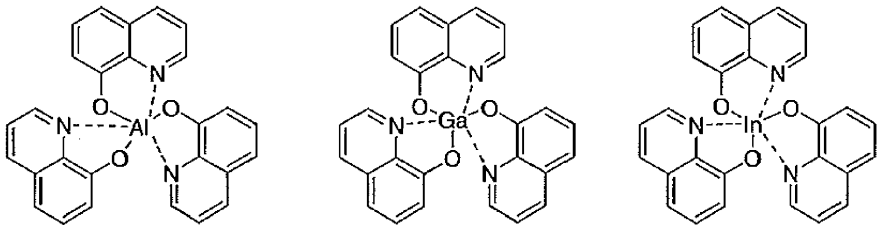
次に、電子輸送材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

【 0 0 7 2】

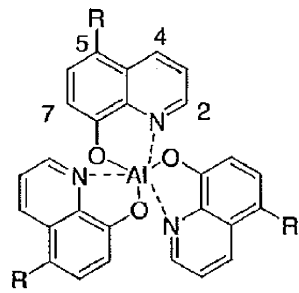
【化 3 1】



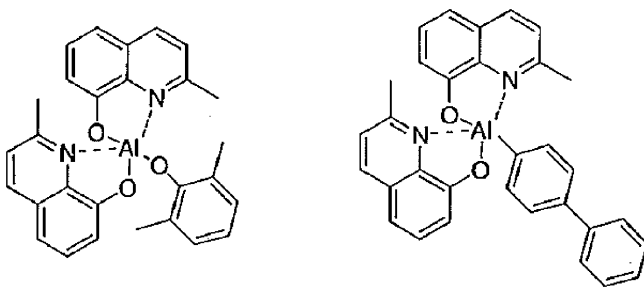
10



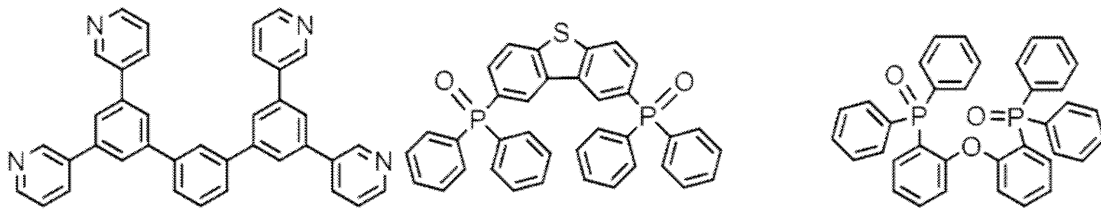
20



30

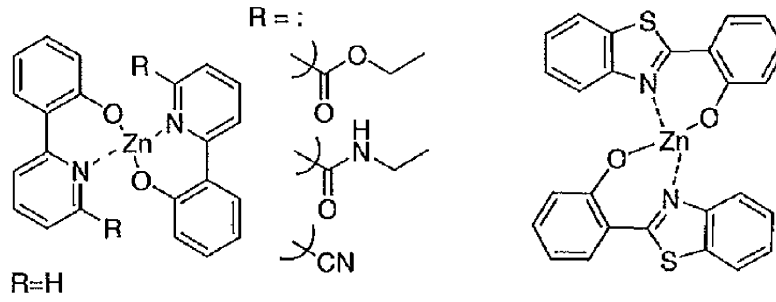


40

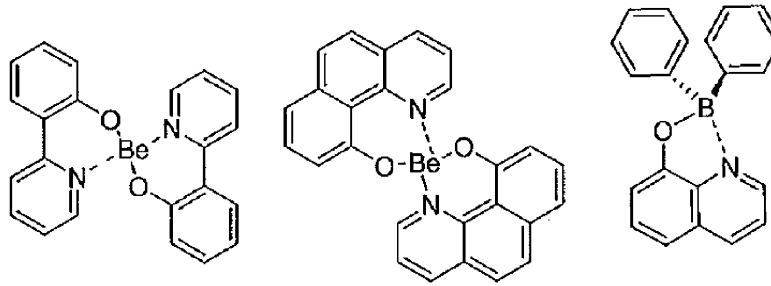


【 0 0 7 3 】

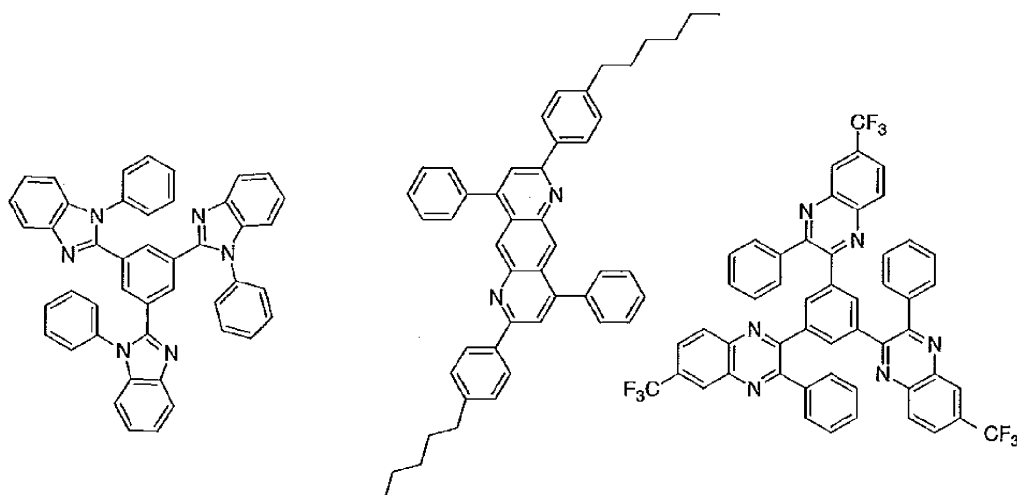
【化 3 2】



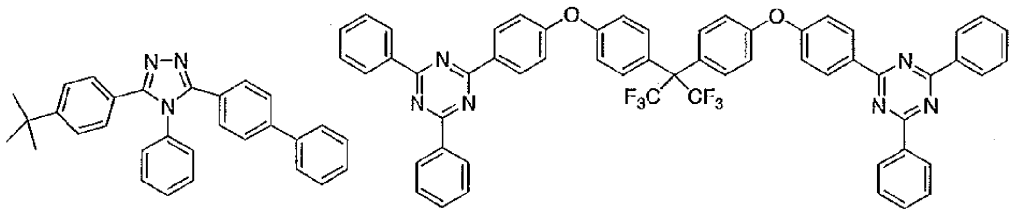
10



20



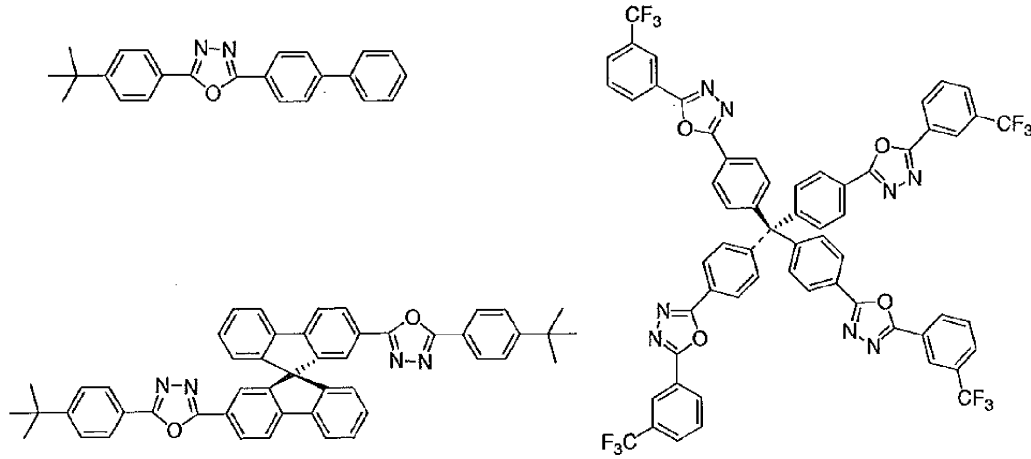
30



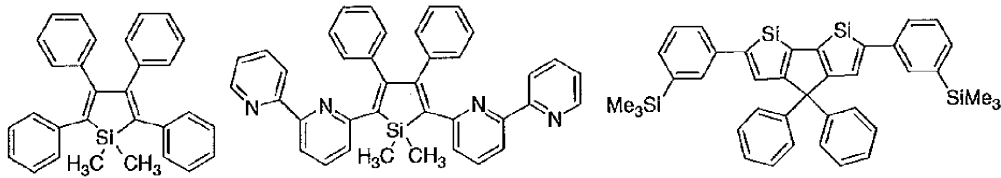
40

【 0 0 7 4 】

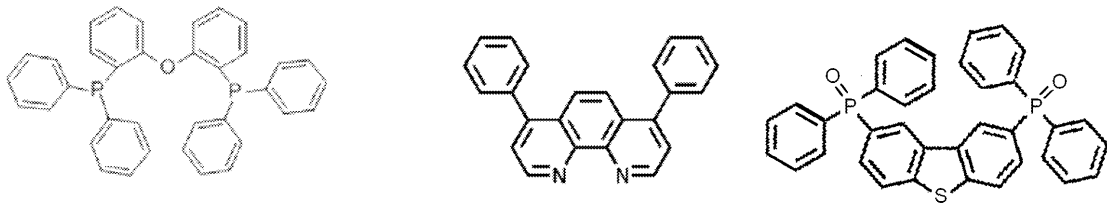
【化 3 3】



10



20



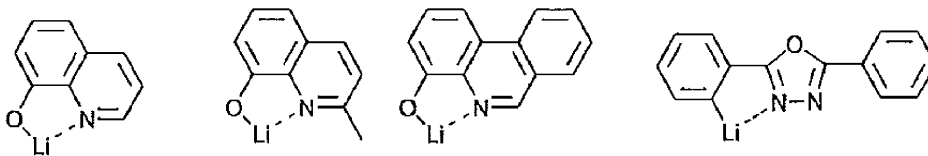
30

【0075】

次に、電子注入材料として用いることができる好ましい化合物例を挙げる。

【0076】

【化 3 4】



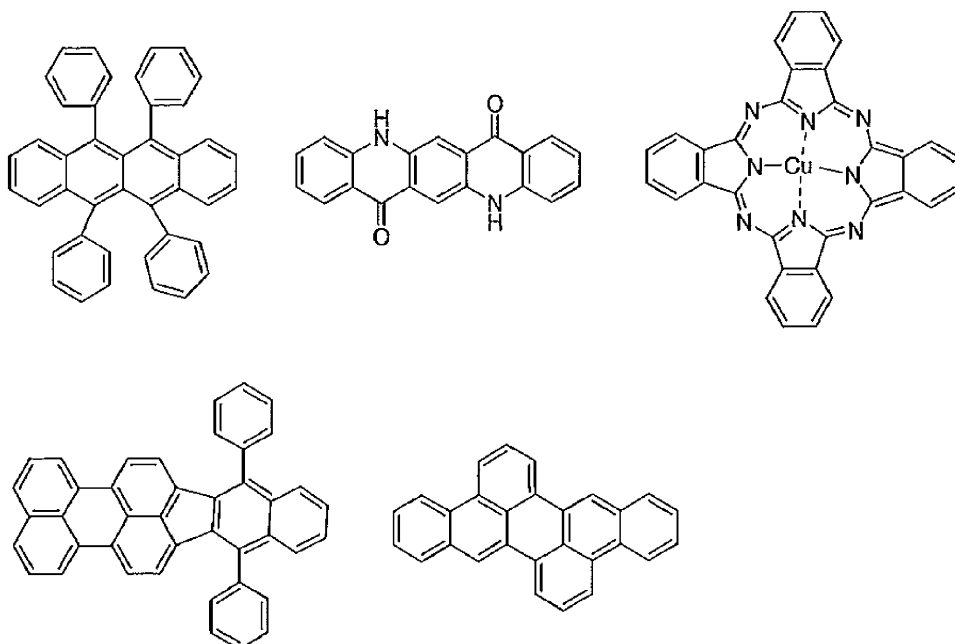
【0077】

さらに添加可能な材料として好ましい化合物例を挙げる。例えば、安定化材料として添加すること等が考えられる。

【0078】

40

【化 3 5】



10

【0079】

上述の方法により作製された有機エレクトロルミネッセンス素子は、得られた素子の陽極と陰極の間に電界を印加することにより発光する。このとき、励起一重項エネルギーによる発光であれば、そのエネルギーレベルに応じた波長の光が、蛍光発光および遅延蛍光発光として確認される。また、励起三重項エネルギーによる発光であれば、そのエネルギーレベルに応じた波長が、りん光として確認される。通常の蛍光は、遅延蛍光発光よりも蛍光寿命が短いため、発光寿命は蛍光と遅延蛍光で区別できる。

20

一方、りん光については、本発明の化合物のような通常の有機化合物では、励起三重項エネルギーは不安定で熱等に変換され、寿命が短く直ちに失活するため、室温では殆ど観測できない。通常の有機化合物の励起三重項エネルギーを測定するためには、極低温の条件での発光を観測することにより測定可能である。

【0080】

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、単一の素子、アレイ状に配置された構造からなる素子、陽極と陰極が X - Y マトリックス状に配置された構造のいずれにおいても適用することができる。本発明によれば、発光層に一般式(1)で表される化合物を含有させることにより、発光効率が大きく改善された有機発光素子が得られる。本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子などの有機発光素子は、さらに様々な用途へ応用することが可能である。例えば、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子を用いて、有機エレクトロルミネッセンス表示装置を製造することが可能であり、詳細については、時任静士、安達千波矢、村田英幸共著「有機ELディスプレイ」(オーム社)を参照することができる。また、特に本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、需要が大きい有機エレクトロルミネッセンス照明やバックライトに応用することもできる。

30

40

【実施例】

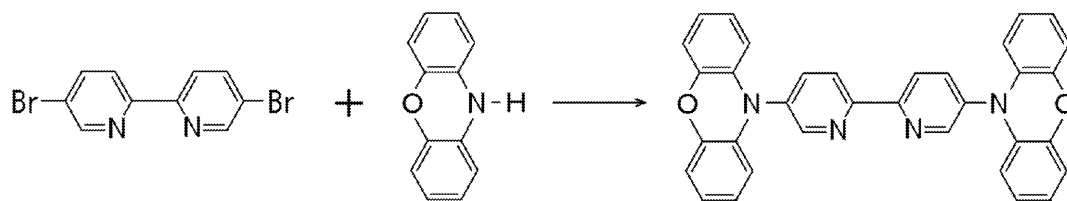
【0081】

以下に合成例および実施例を挙げて本発明の特徴をさらに具体的に説明する。以下に示す材料、処理内容、処理手順等は、本発明の趣旨を逸脱しない限り適宜変更することができる。したがって、本発明の範囲は以下に示す具体例により限定的に解釈されるべきものではない。

【0082】

(合成例1) 化合物1の合成

【化 3 6】



化合物 1

4,4'-ジブロモピリジン (3.14 g, 10 mmol) と、フェノキサジン (4.40 g, 24 mmol) と、ビス(ジベンジリデンアセトン)パラジウム (Pd(dba)₂: 0.46 g, 0.8 mmol) と、ナトリウム tert-ブトキシ (NaOt-Bu: 2.88 g, 30 mmol) と、トリ(tert-ブチル)ホスホニウムテトラフルオロボレート (tBu₃P·HBF₄: 0.116 g, 0.4 mmol) を脱水トルエン 50 ml に加え、内温を 100 に保ちながら 24 時間加熱した。放冷した反応液に、水 200 ml を加え、分液した。このうち有機層を濃縮し、濃縮物を SiO₂ カラムクロマトグラフィーにより、クロロホルム:ヘキサン = 1:1 の混合溶媒を展開溶媒に用いて精製した。これにより、化合物 1 を収量 3.10 g、収率 60% で得た。更に、この化合物 1 の精製物を 320、1 Pa 以下の条件で昇華精製した。

10

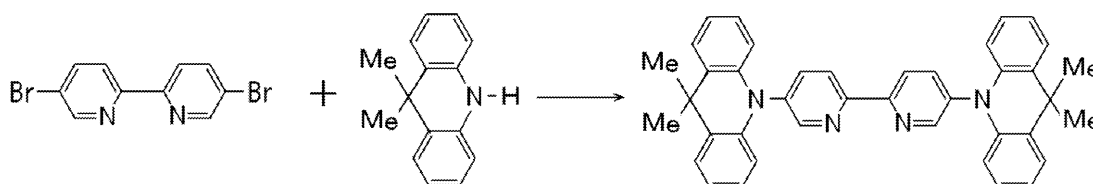
¹H NMR (600 MHz, CDCl₃) δ 8.9 - 8.5 (2H), 7.8 - 7.5 (2H)、7.4 - 6.8 (18H); MS (70 eV, EI) m/z = 518 (M⁺)

20

【0083】

(合成例 2) 化合物 2 の合成

【化 3 7】



化合物 2

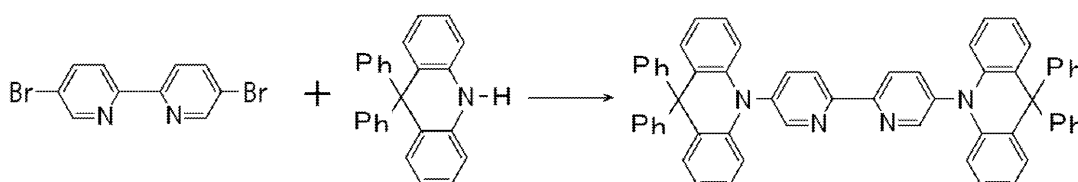
30

¹H NMR (600 MHz, CDCl₃) δ 8.9 - 8.6 (2H), 7.9 - 7.5 (2H)、7.4 - 6.5 (18H)、1.5 - 1.9 (12H); MS (70 eV, EI) m/z = 570 (M⁺)、555 (M⁺ - 15)

【0084】

(合成例 3) 化合物 3 の合成

【化 3 8】



化合物 3

40

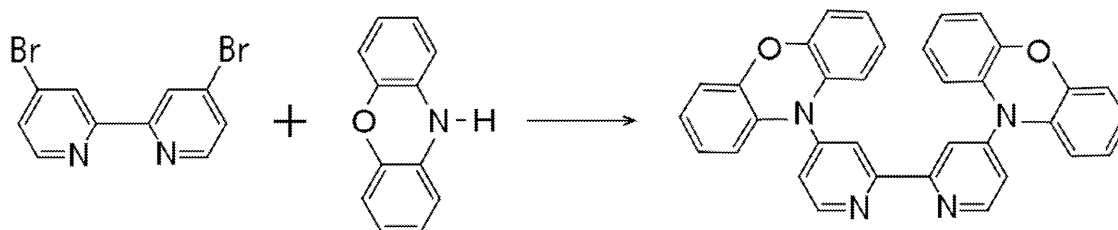
4,4'-ジブロモピリジン (3.14 g, 10 mmol) とフェノキサジン (4.40 g, 24 mmol) の代わりに、4,4'-ジブロモピリジン (1.57 g, 5 mmol) とジフェニルアクリダン (4.00 g, 12 mmol) を用いる以外は、合成例 1 と同様の合成工程およびカラムクロマトグラフィーによる精製を行い、化合物 3 を収量

50

2.25 g, 収率 55% で得た。その後、化合物 3 の精製物を 320、1 Pa 以下の条件で昇華精製した。

^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) d 8.9 - 8.6 (2H), 7.9 - 7.5 (2H)、7.4 - 6.5 (3.8H); MS (70 eV, EI) $m/z = 819$ (M^+)
【0085】

(合成例 4) 化合物 4 の合成
【化 39】



10

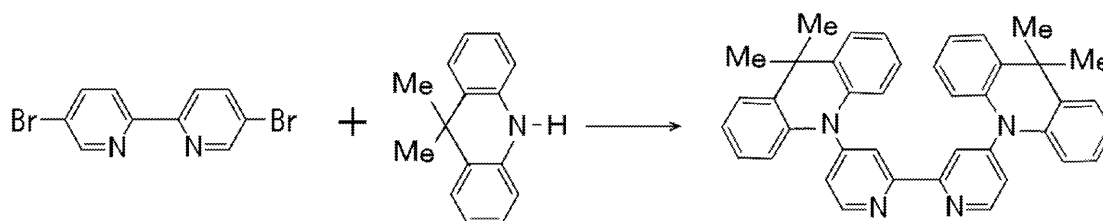
化合物 4

4,4'-ジブロモピリジン (3.14 g, 10 mmol) の代わりに、5,5'-ジブロモピリジン (3.14 g, 10 mmol) を用いる以外は、合成例 1 と同様の合成工程およびカラムクロマトグラフィーによる精製を行い、化合物 4 を収量 2.33 g、収率 45% で得た。その後、化合物 4 の精製物を 320、1 Pa 以下の条件で昇華精製した。

20

^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) d 8.6 - 8.1 (2H), 8.0 - 7.6 (2H)、7.4 - 6.5 (1.8H); MS (70 eV, EI) $m/z = 518$ (M^+)
【0086】

(合成例 5) 化合物 5 の合成
【化 40】



30

化合物 5

4,4'-ジブロモピリジン (3.14 g, 10 mmol) とフェノキサジン (4.40 g, 24 mmol) の代わりに、5,5'-ジブロモピリジン (3.14 g, 10 mmol) とジメチルアクリダン (5.02 g, 24 mmol) を用いる以外は、合成例 1 と同様の合成工程およびカラムクロマトグラフィーによる精製を行い、化合物 5 を収量 1.71 g、収率 30% で得た。その後、化合物 5 の精製物を 320、1 Pa 以下の条件で昇華精製した。

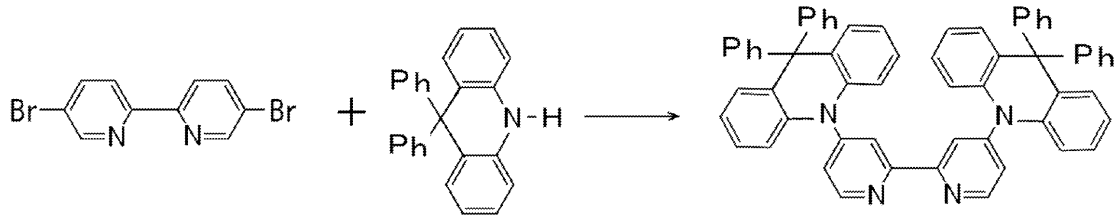
40

^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) d 8.6 - 8.1 (2H), 8.0 - 7.6 (2H)、7.4 - 6.5 (1.8H)、1.5 - 1.9 (1.2H); MS (70 eV, EI) $m/z = 570$ (M^+)、555 ($M^+ - 15$)

【0087】

(合成例 6) 化合物 6 の合成

【化 4 1】



化合物 6

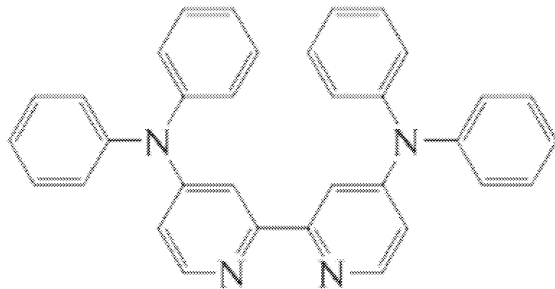
4, 4' - ジブロモピリジン (3 . 1 4 g , 1 0 m m o l) とフェノキサジン (4 . 4 0 g , 2 4 m m o l) の代わりに、5, 5' - ジブロモピリジン (1 . 5 7 g , 5 m m o l) とジフェニルアクリダンを (4 . 0 0 g , 1 2 m m o l) を用いる以外は、合成例 1 と同様の合成工程およびカラムクロマトグラフィーによる精製を行い、化合物 6 を収量 1 . 9 7 g、収率 4 8 % で得た。その後、化合物 6 の精製物を 3 2 0 、 1 P a 以下の条件で昇華精製した。

$^1\text{H NMR}$ (6 0 0 M H z , CDCl_3) d 8 . 6 - 8 . 1 (2 H) , 8 . 0 - 7 . 5 (2 H)、7 . 4 - 6 . 5 (3 8 H) ; MS (7 0 e V , E I) $m/z = 8 1 9 (M +)$

【 0 0 8 8 】

(比較合成例 1) 比較化合物 1 の合成

【化 4 2】



比較化合物 1

4, 4' - ジブロモピリジン (3 . 1 4 g , 1 0 m m o l) とフェノキサジン (4 . 4 0 g , 2 4 m m o l) の代わりに、5, 5' - ジブロモピリジン (3 . 1 4 g , 1 0 m m o l) とジフェニルアミン (4 . 0 6 g , 2 4 m m o l) を用いる以外は、合成例 1 と同様の合成工程およびカラムクロマトグラフィーによる精製を行い、比較化合物 1 を収量 4 . 9 1 g、収率 8 0 % で得た。その後、比較化合物 1 の精製物を 3 2 0 、 1 P a 以下の条件で昇華精製した。

$^1\text{H NMR}$ (6 0 0 M H z , CDCl_3) d 8 . 5 - 8 . 1 (2 H) , 8 . 0 - 7 . 6 (2 H)、7 . 4 - 6 . 5 (2 2 H) ; MS (7 0 e V , E I) $m/z = 4 9 0 (M +)$

【 0 0 8 9 】

(実施例 1) 化合物 1 のトルエン溶液の調製と評価

A r 雰囲気グローブボックス中で化合物 1 のトルエン溶液 (濃度 $1 0^{-5} \text{mol/L}$) を調製した。

化合物 1 のトルエン溶液について、337 nm 励起光による発光スペクトルを測定し、さらに空気中および窒素バブリングによる窒素置換後にフォトルミネッセンス量子効率を測定した。測定した発光スペクトルは、蛍光スペクトル (P L) とりん光スペクトル (p h o s) である。これらスペクトルを図 2 に併せて示す。フォトルミネッセンス量子効率は、空気中で 1 8 %、窒素置換後で 8 8 % であった。

また、化合物 1 のトルエン溶液について、空気中および窒素置換後に過渡減衰曲線を測定した。測定された過渡減衰曲線を図 3 に示す。この過渡減衰曲線は、化合物に励起光を当てて発光強度が失活してゆく過程を測定した発光寿命測定結果を示すものである。通常

10

20

30

40

50

の成分の発光（蛍光もしくはリン光）では発光強度は単一指数関数的に減衰する。これは、グラフの縦軸がセミlogである場合には、直線的に減衰することを意味している。図3に示す化合物1の過渡減衰曲線では、観測初期にこのような直線的成分（蛍光）が観測されているが、数 μ 秒以降には直線性から外れる成分が現れている。これは遅延成分の発光であり、初期の成分と加算される信号は、長時間側に裾をひくゆるい曲線になる。このように発光寿命を測定することによって、化合物1は蛍光成分のほかに遅延成分を含む発光体であることが確認された。即時蛍光の発光寿命 τ_1 は、空气中で0.00636 ns、窒素置換後で0.0192 μ sであった。遅延蛍光の発光寿命 τ_2 は、窒素置換後で2.54 μ sであった。

【0090】

（実施例2） 化合物4の薄膜型有機フォトルミネセンス素子の調製と評価

石英基板上に真空蒸着法にて、真空度 10^{-4} Pa以下の条件にて化合物4とmCPとを異なる蒸着源から蒸着し、化合物4の濃度が6.0重量%である薄膜を100 nmの厚さで形成して薄膜型有機フォトルミネセンス素子とした。

化合物4の有機フォトルミネセンス素子について、337 nm励起光による蛍光スペクトルおよび過渡減衰曲線を測定した。測定された蛍光スペクトルを図4に示し、過渡減衰曲線を図5に示す。フォトルミネセンス量子効率、空气中で47%、窒素置換後で50%であった。また、化合物4の薄膜型有機フォトルミネセンス素子の発光寿命は、即時蛍光 τ_1 が59.6 ns、遅延蛍光 τ_2 が2.88 μ sであった。

【0091】

（比較例1） 比較化合物1の薄膜型有機フォトルミネセンス素子の調製と評価

化合物4のかわりに比較化合物1を用いる以外は、実施例2と同様にして薄膜型有機フォトルミネセンス素子を作製した。

比較化合物1の有機フォトルミネセンス素子について、337 nm励起光による蛍光スペクトルおよび過渡減衰曲線を測定した。測定された蛍光スペクトルを図6に示し、過渡減衰曲線を図7に示す。蛍光スペクトルでは、422 nmの他に550 nmにもピークが認められた。フォトルミネセンス量子効率は、空气中で18%、窒素置換後で19%であった。比較化合物1の薄膜型有機フォトルミネセンス素子の発光寿命は即時蛍光 τ_1 が3.06 nsであり、遅延蛍光は観測されなかった。

【0092】

（実施例3） 化合物1の有機エレクトロルミネセンス素子の調製と評価

膜厚100 nmのインジウム・スズ酸化物（ITO）からなる陽極が形成されたガラス基板上に、各薄膜を真空蒸着法にて、真空度 10^{-3} Pa以下で積層した。まず、ITO上にHAT-CNを10 nmの厚さに形成し、Tris-PCzを30 nmの厚さに形成した。次に、化合物1とmCBPを異なる蒸着源から共蒸着し、30 nmの厚さの層を形成して発光層とした。この時、化合物1の濃度は6.0重量%とした。次に、T2Tを10 nmの厚さに形成し、Bpy-TP2を40 nmの厚さに形成し、さらにフッ化リチウム（LiF）を0.8 nm真空蒸着し、次いでアルミニウム（Al）を100 nmの厚さに蒸着することにより陰極を形成し、有機エレクトロルミネセンス素子とした。

製造した有機エレクトロルミネセンス素子の発光スペクトルを図8に示し、電圧-電流密度特性を図9に示し、電流密度-外部量子効率特性を図10に示す。化合物1を発光材料として用いた有機エレクトロルミネセンス素子は12.7%の高い外部量子効率を達成した。仮に発光量子効率が100%の蛍光材料を用いてバランスの取れた理想的な有機エレクトロルミネセンス素子を試作したとすると、光取り出し効率が20~30%であれば、蛍光発光の外部量子効率は5~7.5%となる。この値が一般に、蛍光材料を用いた有機エレクトロルミネセンス素子の外部量子効率の理論限界値とされている。化合物1を用いた本発明の有機エレクトロルミネセンス素子は、理論限界値を超える高い外部量子効率を実現している点で極めて優れている。

【0093】

上記の実施例で用いた化合物は、いずれも遅延蛍光を放射する遅延蛍光体であった。一

10

20

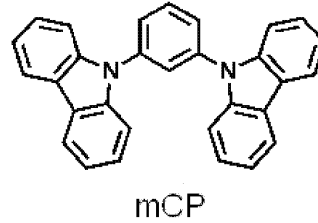
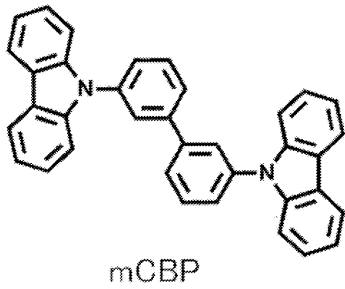
30

40

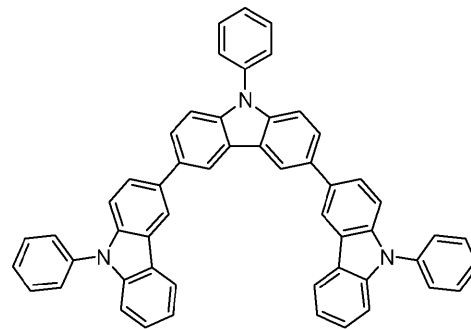
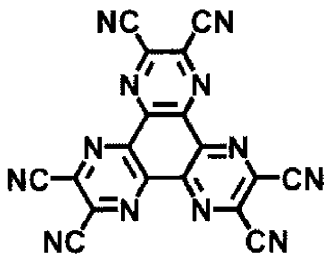
50

般式(1)で表される化合物は、いずれも発光量子効率が高く、発光材料として優れた特性を示す。これに対して、比較化合物1は、実施例の化合物に比べて発光量子効率が低く、遅延蛍光も観測されなかった。これは、ドナー部であるアミノ基で、ベンゼン環同士の間には橋かけ構造がなく、環が形成されていないことに起因するものと推測される。

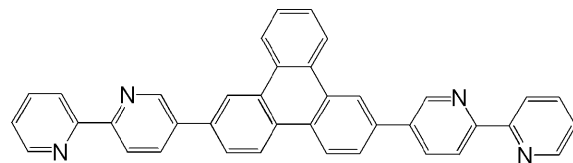
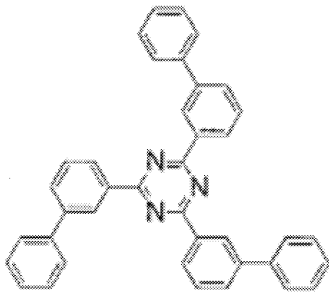
【化43】



10



20



30

【産業上の利用可能性】

40

【0094】

本発明の化合物は発光材料として有用である。このため本発明の化合物は、有機エレクトロルミネッセンス素子などの有機発光素子用の発光材料として効果的に用いられる。本発明の化合物の中には、遅延蛍光が放射するものも含まれているため、発光効率が高い有機発光素子を提供することも可能である。このため、本発明は産業上の利用可能性が高い。

【符号の説明】

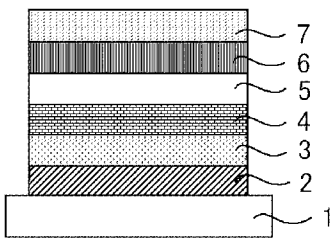
【0095】

- 1 基板
- 2 陽極

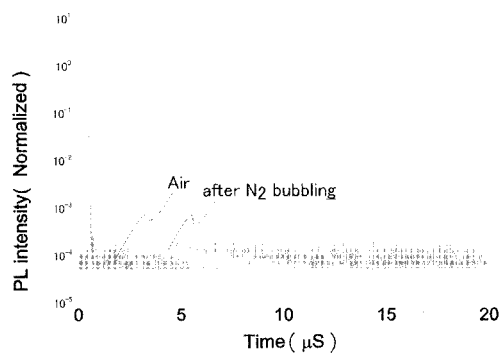
50

- 3 正孔注入層
- 4 正孔輸送層
- 5 發光層
- 6 電子輸送層
- 7 陰極

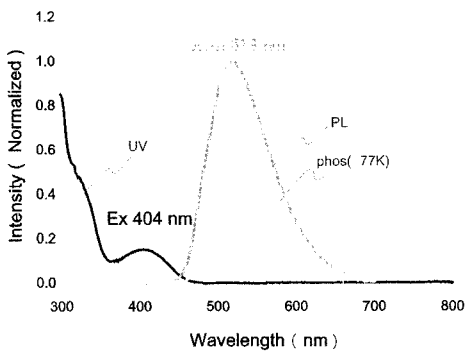
【 図 1 】



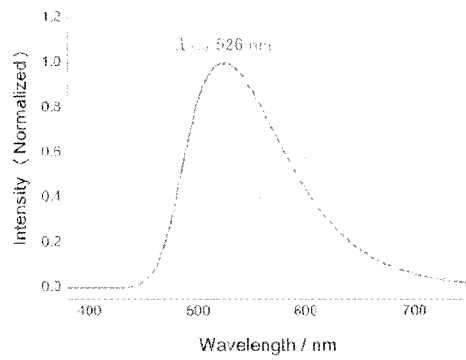
【 図 3 】



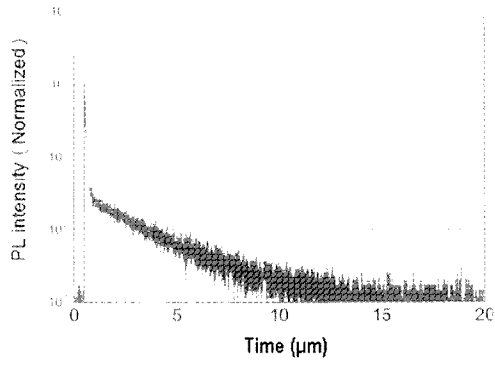
【 図 2 】



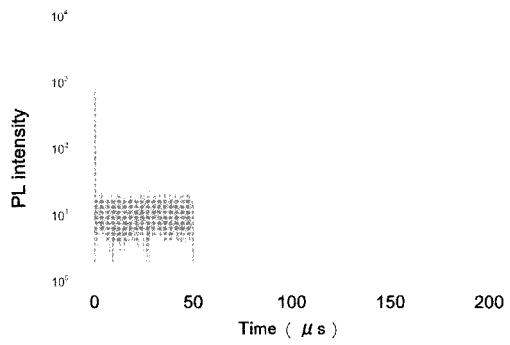
【 図 4 】



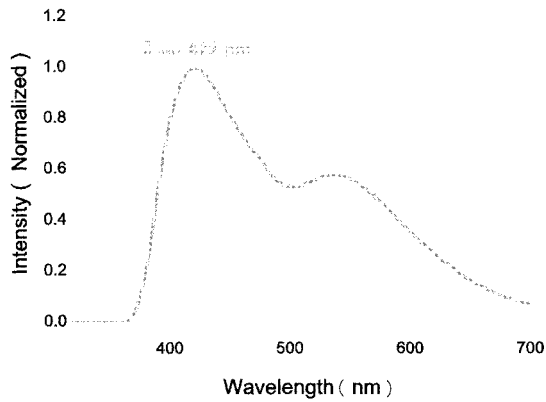
【 図 5 】



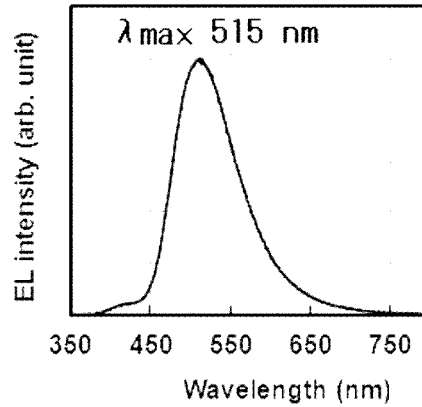
【 図 7 】



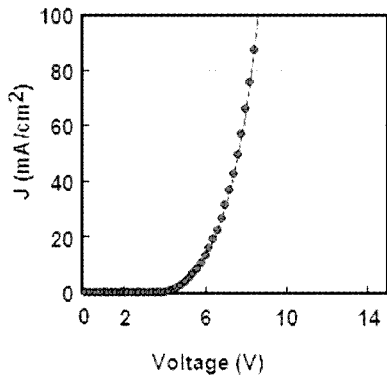
【 図 6 】



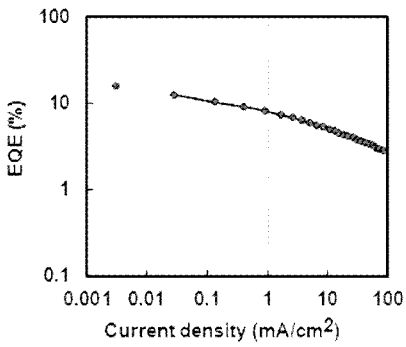
【 図 8 】



【 図 9 】



【 図 10 】



フロントページの続き

(51)Int.Cl.

F I

テーマコード(参考)

C 0 7 D 413/14

Fターム(参考) 4C063 AA05 BB02 CC16 CC54 DD12 EE10

专利名称(译)	发光材料，有机发光元件和化合物		
公开(公告)号	JP2015134874A	公开(公告)日	2015-07-27
申请号	JP2014006609	申请日	2014-01-17
[标]申请(专利权)人(译)	日本化药有限公司 国立大学法人九州大学		
申请(专利权)人(译)	日本化药有限公司 国立大学法人九州大学		
[标]发明人	桑原博一 安達千波矢		
发明人	桑原 博一 安達 千波矢		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 C07D401/14 C07D413/14		
CPC分类号	H01L51/0067 C07D401/14 C07D413/14 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1029 C09K2211/1033 C09K2211/1074 C09K2211/1077 H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/5012		
FI分类号	C09K11/06.645 H05B33/14.B C09K11/06.655 C09K11/06.650 C07D401/14 C07D413/14 C07D401/14.CSP C09K11/06.640		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/CC04 3K107/CC45 3K107/DD66 4C063/AA05 4C063/BB02 4C063/CC16 4C063/CC54 4C063/DD12 4C063/EE10		
其他公开文献	JP6284370B2		
外部链接	Espacenet		

摘要(译) 要解决的问题：提供一种具有高发光效率并且可用作发光材料的化合物。将叔氨基引入通式(1)表示的联吡啶骨架中的发光材料。[Y1和Y2分别独立表示N或C(R7)，以及R1和R2中的至少一个，以及R5和R6中的至少一个 一个是由通式(2)表示的基团；Z是具有1个原子的连接链长度的二价连接基团；L1是一个单键，或者是取代的或未取代的亚芳基] [选择图]无	(21) 出願番号	特願2014-6609 (P2014-6609)	(71) 出願人	00004086
	(22) 出願日	平成26年1月17日 (2014.1.17)	(71) 出願人	日本化薬株式会社 東京都千代田区丸の内二丁目1番1号
			(71) 出願人	504145342 国立大学法人九州大学 福岡県福岡市東区箱崎六丁目10番1号
			(74) 代理人	110000109 特許業務法人特許事務所サイクス
			(72) 発明者	桑原 博一 東京都北区志茂3-31-12 日本化薬株式会社 研究開発本部研究企画部内
			(72) 発明者	安達 千波矢 福岡県福岡市東区箱崎六丁目10番1号 国立大学法人九州大学内
			Fターム(参考)	3K107 AA01 BB01 CC04 CC45 DD66 最終頁に続く