

(19)日本国特許庁(JP)

## (12)特許公報(B2)

(11)特許番号  
特許第7646327号  
(P7646327)

(45)発行日 令和7年3月17日(2025.3.17)

(24)登録日 令和7年3月7日(2025.3.7)

(51)国際特許分類

C 0 7 D 493/04 (2006.01)	F I	C 0 7 D 493/04	C S P
C 0 7 D 495/04 (2006.01)		C 0 7 D 495/04	
C 0 9 K 11/06 (2006.01)		C 0 9 K 11/06	6 3 5
H 1 0 K 50/10 (2023.01)		H 0 5 B 33/14	B

請求項の数 18 (全51頁)

(21)出願番号 特願2020-187223(P2020-187223)  
 (22)出願日 令和2年11月10日(2020.11.10)  
 (65)公開番号 特開2022-76703(P2022-76703A)  
 (43)公開日 令和4年5月20日(2022.5.20)  
 審査請求日 令和5年11月8日(2023.11.8)

(73)特許権者 000001007  
 キヤノン株式会社  
 東京都大田区下丸子3丁目30番2号  
 (74)代理人 100110870  
 弁理士 山口 芳広  
 100096828  
 弁理士 渡辺 敬介  
 西出 洋祐  
 東京都大田区下丸子3丁目30番2号  
 キヤノン株式会社内  
 (72)発明者 宮下 広和  
 東京都大田区下丸子3丁目30番2号  
 キヤノン株式会社内  
 山田 直樹  
 東京都大田区下丸子3丁目30番2号  
 最終頁に続く

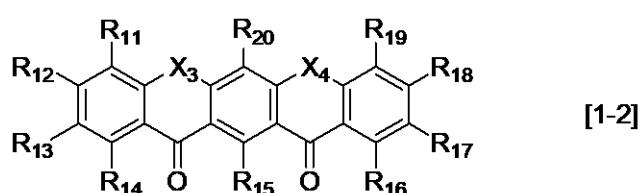
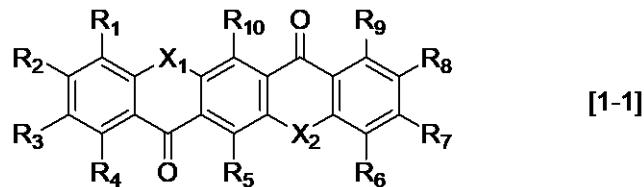
(54)【発明の名称】 有機化合物及び有機発光素子

## (57)【特許請求の範囲】

## 【請求項1】

下記一般式 [1-1] または [1-2] に示されることを特徴とする有機化合物。

## 【化1】



一般式 [1-1] または [1-2]において、R<sub>1</sub>乃至R<sub>20</sub>は、水素原子、ハロゲン原子、置換あるいは無置換のアルキル基、置換あるいは無置換のアルコキシ基、置換あるいは無置換のアミノ基、置換あるいは無置換の芳香族炭化水素基、置換あるいは無置換の複

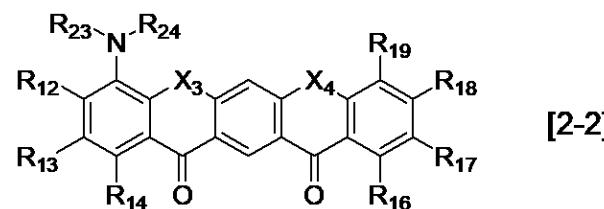
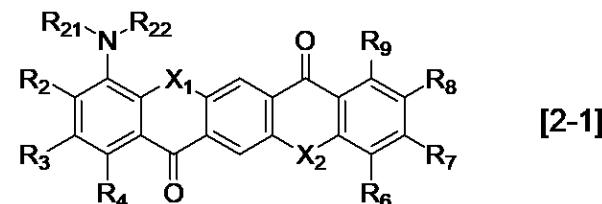
素環基、置換あるいは無置換のアリールオキシ基、シリル基、シアノ基からそれぞれ独立に選ばれる。但し、前記 R<sub>1</sub>乃至 R<sub>4</sub>及び R<sub>6</sub>乃至 R<sub>9</sub>の一つのみ、前記 R<sub>11</sub>乃至 R<sub>14</sub>及び R<sub>16</sub>乃至 R<sub>19</sub>の一つのみは、置換あるいは無置換のアミノ基である。置換のアミノ基の窒素原子に結合する基同士が結合し、環構造を形成しても良い。

X<sub>1</sub>乃至 X<sub>4</sub>は、酸素、硫黄、セレン、テルルのいずれかを表し、同じであっても異なつてもよい。

### 【請求項 2】

下記一般式 [2-1] または [2-2] に示されることを特徴とする請求項 1 に記載の有機化合物。

#### 【化 2】

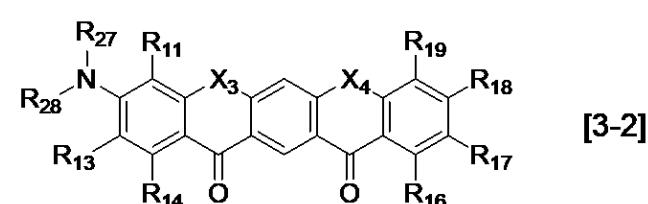
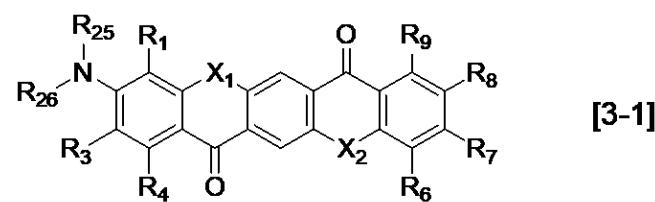


一般式 [2-1] または [2-2]において、R<sub>21</sub>乃至 R<sub>24</sub>は、水素原子、ハロゲン原子、置換あるいは無置換のアルキル基、置換あるいは無置換の芳香族炭化水素基、置換あるいは無置換の複素環基からそれぞれ独立に選ばれる。前記 R<sub>21</sub>と R<sub>22</sub>または前記 R<sub>23</sub>と R<sub>24</sub>が結合し、環構造を形成しても良い。

### 【請求項 3】

下記一般式 [3-1] または [3-2] に示されることを特徴とする請求項 1 に記載の有機化合物。

#### 【化 3】



一般式 [3-1] または [3-2]において、R<sub>25</sub>乃至 R<sub>28</sub>は、水素原子、ハロゲン原子、置換あるいは無置換のアルキル基、置換あるいは無置換の芳香族炭化水素基、置換あるいは無置換の複素環基からそれぞれ独立に選ばれる。前記 R<sub>25</sub>と R<sub>26</sub>または前記 R<sub>27</sub>と R<sub>28</sub>が結合し、環構造を形成しても良い。

10

20

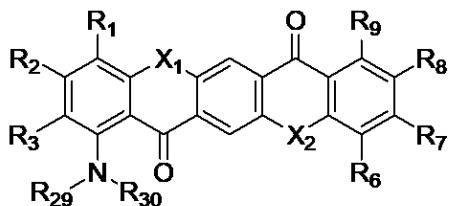
30

40

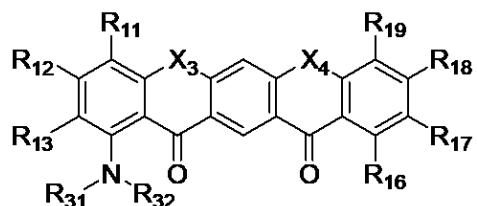
50

**【請求項 4】**

下記一般式 [ 4 - 1 ] または [ 4 - 2 ] に示されることを特徴とする請求項 1 に記載の有機化合物。

**【化 4】**

[4-1]

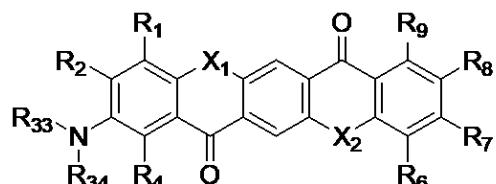


[4-2]

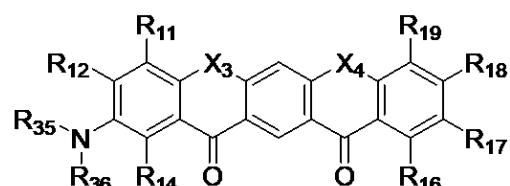
一般式 [ 4 - 1 ] または [ 4 - 2 ] において、R<sub>29</sub>乃至R<sub>32</sub>は、水素原子、ハロゲン原子、置換あるいは無置換のアルキル基、置換あるいは無置換の芳香族炭化水素基、置換あるいは無置換の複素環基からそれぞれ独立に選ばれる。前記R<sub>29</sub>とR<sub>30</sub>または前記R<sub>31</sub>とR<sub>32</sub>が結合し、環構造を形成しても良い。

**【請求項 5】**

下記一般式 [ 5 - 1 ] または [ 5 - 2 ] に示されることを特徴とする請求項 1 に記載の有機化合物。

**【化 5】**

[5-1]



[5-2]

一般式 [ 5 - 1 ] または [ 5 - 2 ] において、R<sub>33</sub>乃至R<sub>36</sub>は、水素原子、ハロゲン原子、置換あるいは無置換のアルキル基、置換あるいは無置換の芳香族炭化水素基、置換あるいは無置換の複素環基からそれぞれ独立に選ばれる。前記R<sub>33</sub>とR<sub>34</sub>または前記R<sub>35</sub>とR<sub>36</sub>が結合し、環構造を形成しても良い。

**【請求項 6】**

陽極と陰極と、

前記陽極と前記陰極との間に配置される有機化合物層と、を有する有機発光素子において、

前記有機化合物層の少なくとも一層は、請求項 1 乃至 5 のいずれか一項に記載の有機化合物を有することを特徴とする有機発光素子。

**【請求項 7】**

前記有機化合物を有する層が発光層であることを特徴とする請求項 6 に記載の有機発光素子。

**【請求項 8】**

前記発光層は、さらにホスト材料を有することを特徴とする請求項 7 に記載の有機発光素子。

**【請求項 9】**

前記ホスト材料は、炭化水素化合物であることを特徴とする請求項 8 に記載の有機発光素子。

**【請求項 10】**

前記発光層は、さらに発光材料を有することを特徴とする請求項 8 または 9 に記載の有機発光素子。 10

**【請求項 11】**

前記発光材料は、炭化水素化合物であ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】**

前記発光層は、緑色発光または赤色発光することを特徴とする請求項 7 乃至 11 のいずれか一項に記載の有機発光素子。

**【請求項 13】**

複数の画素を有し、前記複数の画素の少なくとも一つが、請求項 6 乃至 12 のいずれか一項に記載の有機発光素子と、前記有機発光素子に接続されたトランジスタと、を有することを特徴とする表示装置。 20

**【請求項 14】**

複数のレンズを有する光学部と、前記光学部を通過した光を受光する撮像素子と、前記撮像素子が撮像した画像を表示する表示部と、を有し、

前記表示部は請求項 6 乃至 12 のいずれか一項に記載の有機発光素子を有することを特徴とする光電変換装置。

**【請求項 15】**

請求項 6 乃至 12 のいずれか一項に記載の有機発光素子を有する表示部と、前記表示部が設けられた筐体と、前記筐体に設けられ、外部と通信する通信部と、を有することを特徴とする電子機器。 30

**【請求項 16】**

請求項 6 乃至 12 のいずれか一項に記載の有機発光素子を有する光源と、前記光源が発する光を透過する光拡散部または光学フィルタと、を有することを特徴とする照明装置。

**【請求項 17】**

請求項 6 乃至 12 のいずれか一項に記載の有機発光素子を有する灯具と、前記灯具が設けられた機体と、を有することを特徴とする移動体。

**【請求項 18】**

請求項 6 乃至 12 のいずれか一項に記載の有機発光素子を有することを特徴とする電子写真方式の画像形成装置の露光光源。

**【発明の詳細な説明】**

**【技術分野】**

**【0001】**

本発明は、有機化合物及びこれ用いた有機発光素子に関する。

**【背景技術】**

**【0002】**

有機発光素子（以下、「有機エレクトロルミネッセンス素子」あるいは「有機 E L 素子」と称する場合がある）は、一対の電極とこれら電極間に配置される有機化合物層とを有する電子素子である。これら一対の電極から電子及び正孔を注入することにより、有機化合物層中の発光性有機化合物の励起子を生成し、該励起子が基底状態に戻る際に、有機発光素子は光を放出する。 50

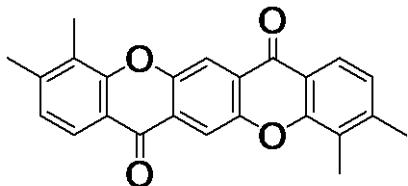
有機発光素子の最近の進歩は著しく、低駆動電圧、多様な発光波長、高速応答性、発光デバイスの薄型化・軽量化が可能であることが挙げられる。

発光素子の高効率化に関しては、熒光発光材料や遅延蛍光材料等の高効率化材料を用いた素子が報告されている。

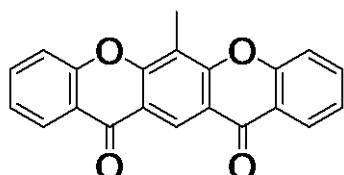
非特許文献1には下記化合物1-aが、非特許文献2には下記化合物1-bが、非特許文献3には下記化合物2-aが記載されている。

【0003】

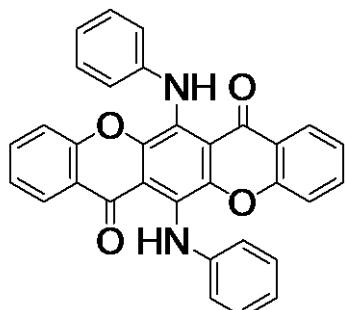
【化1】



1-a



1-b



2-a

【先行技術文献】

【非特許文献】

【0004】

【文献】Journal of the Chemical Society (1953), 2434-9.

【文献】Journal of Organic Chemistry (1962), 27, 1211-16.

【文献】Justus Liebigs Annalen der Chemie (1934), 513, 156-79.

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

非特許文献1乃至3に記載の化合物1-a、1-b及び2-aを有機発光素子中の発光層に用いた場合、発光効率に課題がある。

本発明は、上記課題を解決するためになされるものであり、その目的は、発光効率に優れる有機化合物及び有機発光素子を提供することである。また本発明の他の目的は、駆動耐久特性の優れる有機発光素子を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【0006】

本発明の有機化合物は、下記一般式[1-1]または[1-2]に示されることを特徴とする。

【0007】

10

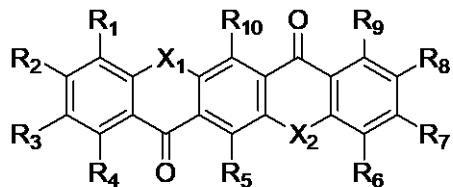
20

30

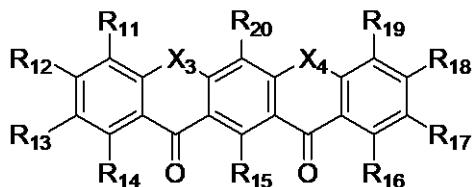
40

50

## 【化 2】



[1-1]



[1-2]

10

20

一般式 [ 1 - 1 ] または [ 1 - 2 ] において、R<sub>1</sub>乃至R<sub>20</sub>は、水素原子、ハロゲン原子、置換あるいは無置換のアルキル基、置換あるいは無置換のアルコキシ基、置換あるいは無置換のアミノ基、置換あるいは無置換の芳香族炭化水素基、置換あるいは無置換の複素環基、置換あるいは無置換のアリールオキシ基、シリル基、シアノ基からそれぞれ独立に選ばれる。但し、前記R<sub>1</sub>乃至R<sub>4</sub>及びR<sub>6</sub>乃至R<sub>9</sub>の一つのみ、前記R<sub>11</sub>乃至R<sub>14</sub>及びR<sub>16</sub>乃至R<sub>19</sub>の一つのみは、置換あるいは無置換のアミノ基である。置換のアミノ基の窒素原子に結合する基同士が結合し、環構造を形成しても良い。

X<sub>1</sub>乃至X<sub>4</sub>は、酸素、硫黄、セレン、テルルのいずれかを表し、同じであっても異なってもよい。

## 【発明の効果】

## 【0008】

本発明に係る有機化合物は、分子の構造により励起状態の準位を制御でき、分子会合を低減することができる。このため、本発明に係る有機化合物を有機発光素子に用いた場合、発光効率及び駆動耐久特性に優れる有機発光素子を提供することができる。

## 【図面の簡単な説明】

## 【0009】

30

【図1】本発明の一実施形態に係る有機発光素子を用いた表示装置の一例の概略断面図である。

【図2】本発明の一実施形態に係る表示装置の一例を表す模式図である。

【図3】( a ) 本発明の一実施形態に係る撮像装置の一例を表す模式図である。( b ) 本発明の一実施形態に係る電子機器の一例を表す模式図である。

【図4】( a ) 本発明の一実施形態に係る表示装置の一例を表す模式図である。( b ) 折り曲げ可能な表示装置の一例を表す模式図である。

【図5】( a ) 本発明の一実施形態に係る照明装置の一例を示す模式図である。( b ) 本発明の一実施形態に係る車両用灯具を有する自動車の一例を示す模式図である。

【図6】本発明の一実施形態に係る画像形成装置の一例を表す模式図である。

40

【図7】本発明の一実施形態に係る画像形成装置の露光源の一例を表す模式図である。

## 【発明を実施するための形態】

## 【0010】

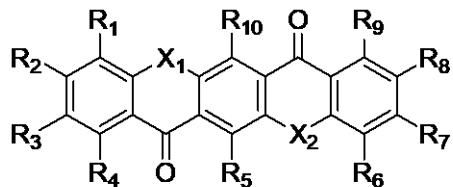
## 有機化合物

まず本実施形態に係る有機化合物について説明する。本実施形態の有機化合物は、下記一般式 [ 1 - 1 ] または [ 1 - 2 ] に示される。

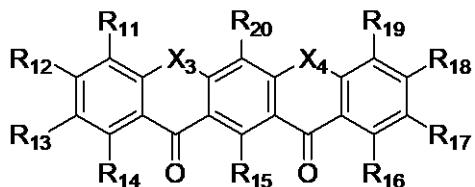
## 【0011】

50

## 【化3】



[1-1]



[1-2]

10

## 【0012】

< R<sub>1</sub> 乃至 R<sub>20</sub> >

R<sub>1</sub> 乃至 R<sub>20</sub> は、水素原子、ハロゲン原子、置換あるいは無置換のアルキル基、置換あるいは無置換のアルコキシ基、置換あるいは無置換のアミノ基、置換あるいは無置換の芳香族炭化水素基、置換あるいは無置換の複素環基、置換あるいは無置換のアリールオキシ基、シリル基、シアノ基からそれぞれ独立に選ばれる。但し、R<sub>1</sub> 乃至 R<sub>4</sub> 及び R<sub>6</sub> 乃至 R<sub>9</sub> の少なくとも一つ、R<sub>11</sub> 乃至 R<sub>14</sub> 及び R<sub>16</sub> 乃至 R<sub>19</sub> の少なくとも一つは、置換あるいは無置換のアミノ基である。置換あるいは無置換のアミノ基の窒素原子に結合する基同士が結合し、環構造を形成しても良い。

20

## 【0013】

ハロゲン原子としては、例えば、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

## 【0014】

アルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、ノルマルプロピル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、ターシャリーブチル基、セカンダリーブチル基、オクチル基、シクロヘキシリル基、1 - アダマンチル基、2 - アダマンチル基等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。アルキル基としては、炭素原子数1以上10以下のアルキル基が好ましい。

30

## 【0015】

アルコキシ基としては、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、2 - エチル - オクチルオキシ基、ベンジルオキシ基等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。アルコキシ基としては、炭素原子数1以上10以下のアルコキシ基が好ましい。

## 【0016】

アミノ基としては、例えば、N - メチルアミノ基、N - エチルアミノ基、N, N - ジメチルアミノ基、N, N - ジエチルアミノ基、N - メチル - N - エチルアミノ基、N - ベンジルアミノ基、N - メチル - N - ベンジルアミノ基、N, N - ジベンジルアミノ基、アニリノ基、N, N - ジフェニルアミノ基、N, N - ジナフチルアミノ基、N, N - ジフルオレニルアミノ基、N - フェニル - N - トリルアミノ基、N, N - ジトリルアミノ基、N - メチル - N - フェニルアミノ基、N, N - ジアニソリルアミノ基、N - メシチル - N - フェニルアミノ基、N, N - ジメシチルアミノ基、N - フェニル - N - (4 - ターシャリーブチルフェニル)アミノ基、N - フェニル - N - (4 - トリフルオロメチルフェニル)アミノ基、N - ピペリジル基、カルバゾリル基、アクリジル基等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

40

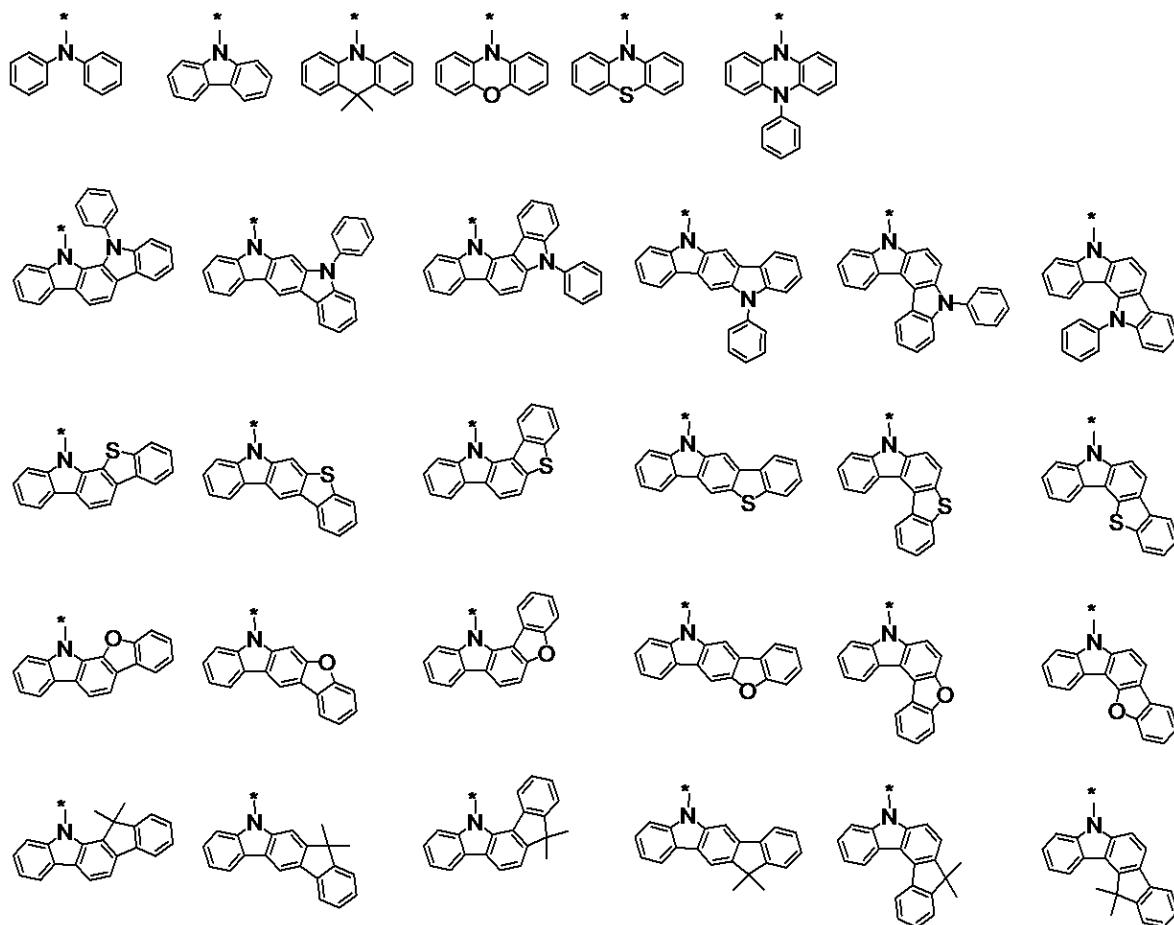
## 【0017】

また、アミノ基としては、下記いずれかの構造を有するアミノ基が挙げられる。下記構造式中、\*は結合位置を表す。

50

## 【0018】

## 【化4】



10

20

30

40

50

## 【0019】

芳香族炭化水素基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基、インデニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、フルオレニル基、フェナントリル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、アントラニル基、ペリレニル基、クリセニル基、フルオランテニル基等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。芳香族炭化水素基としては、炭素原子数6以上60以下の芳香族炭化水素基が好ましい。

## 【0020】

複素環基としては、例えば、ピリジル基、ピリミジル基、ピラジル基、トリアジル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、チアゾリル基、チアジアゾリル基、カルバゾリル基、アクリジニル基、フェナントロリル基等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。複素環基としては、炭素原子数3以上60以下の複素環基が好ましい。

## 【0021】

アリールオキシ基としては、例えば、フェノキシ基等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

## 【0022】

シリル基としては、例えば、トリメチルシリル基、トリフェニルシリル基等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

## 【0023】

上記アルキル基、アルコキシ基、アミノ基、芳香族炭化水素基、複素環基、アリールオキシ基がさらに有してもよい置換基としては、例えば、メチル基、エチル基、ノルマルブロピル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、ターシャリープチル基等のアルキル基、ベンジル基等のアラルキル基、フェニル基、ビフェニル基、ナフチル基等の芳香族炭化水

素基、ピリジル基、ピロリル基、ピラジル基、トリアジル基等の複素環基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジベンジルアミノ基、ジフェニルアミノ基、ジトリルアミノ基等のアミノ基、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基等のアルコキシ基、フェノキシ基等のアリールオキシ基、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素等のハロゲン原子、シアノ基等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

#### 【0024】

< X<sub>1</sub>乃至 X<sub>4</sub> >

X<sub>1</sub>乃至 X<sub>4</sub>は、酸素、硫黄、セレン、テルルのいずれかを表し、同じであっても異なつてもよい。本実施形態の有機化合物において、基本骨格内のカルコゲン原子は非共有電子対を有しているため、縮環した基本骨格の安定性を高める効果がある。したがって、本実施形態の有機化合物を有機発光素子に用いた場合、良好な耐久特性を提供することができる。尚、本実施形態における基本骨格とは、一般式 [1-1] または [1-2] で表される化合物の R<sub>1</sub>乃至 R<sub>20</sub>がすべて水素原子である骨格である。

10

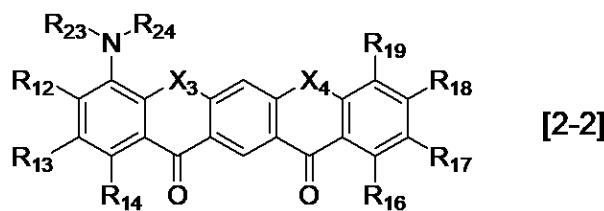
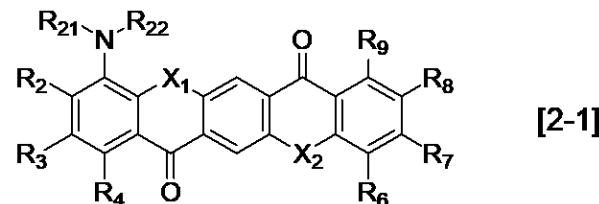
#### 【0025】

本実施形態の有機化合物としては、例えば、下記一般式 [2-1] または [2-2] に示される有機化合物、下記一般式 [3-1] または [3-2] に示される有機化合物、下記一般式 [4-1] または [4-2] に示される有機化合物、下記一般式 [5-1] または [5-2] に示される有機化合物等が挙げられる。

#### 【0026】

#### 【化5】

20



30

#### 【0027】

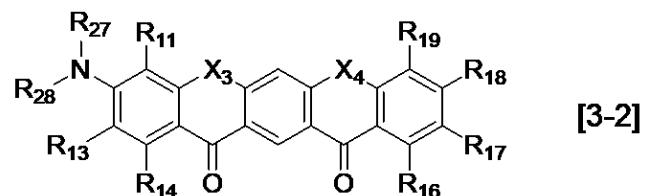
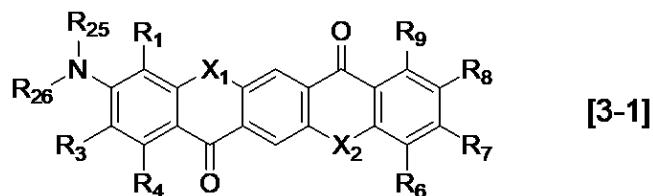
一般式 [2-1] または [2-2] において、R<sub>21</sub>乃至 R<sub>24</sub>は、水素原子、ハロゲン原子、置換あるいは無置換のアルキル基、置換あるいは無置換の芳香族炭化水素基、置換あるいは無置換の複素環基からそれぞれ独立に選ばれる。R<sub>21</sub>と R<sub>22</sub>または R<sub>23</sub>と R<sub>24</sub>が結合し、環構造を形成しても良い。

#### 【0028】

40

50

## 【化6】



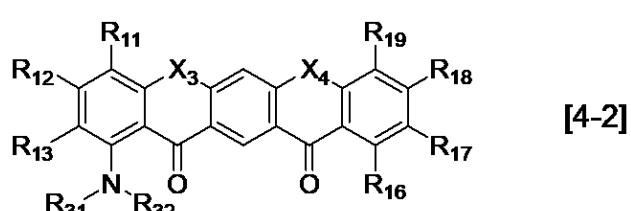
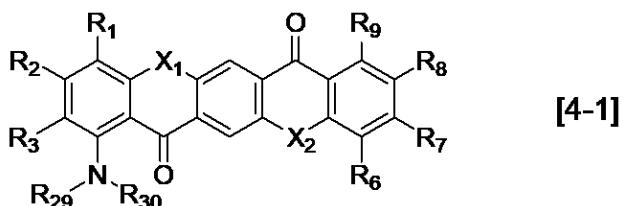
## 【0029】

一般式 [3-1] または [3-2]において、R<sub>25</sub>乃至R<sub>28</sub>は、水素原子、ハロゲン原子、置換あるいは無置換のアルキル基、置換あるいは無置換の芳香族炭化水素基、置換あるいは無置換の複素環基からそれぞれ独立に選ばれる。R<sub>25</sub>とR<sub>26</sub>またはR<sub>27</sub>とR<sub>28</sub>が結合し、環構造を形成しても良い。

10

## 【0030】

## 【化7】



## 【0031】

一般式 [4-1] または [4-2]において、R<sub>29</sub>乃至R<sub>32</sub>は、水素原子、ハロゲン原子、置換あるいは無置換のアルキル基、置換あるいは無置換の芳香族炭化水素基、置換あるいは無置換の複素環基からそれぞれ独立に選ばれる。R<sub>29</sub>とR<sub>30</sub>またはR<sub>31</sub>とR<sub>32</sub>が結合し、環構造を形成しても良い。

20

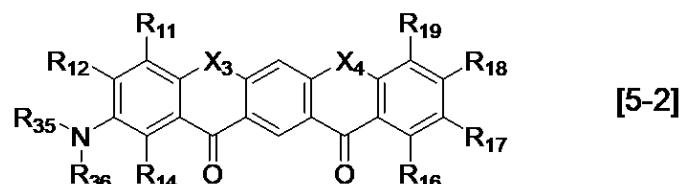
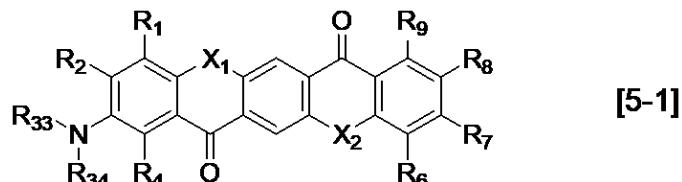
## 【0032】

30

40

50

## 【化 8】



## 【0033】

一般式 [5-1] または [5-2]において、R<sub>33</sub>乃至R<sub>36</sub>は、水素原子、ハロゲン原子、置換あるいは無置換のアルキル基、置換あるいは無置換の芳香族炭化水素基、置換あるいは無置換の複素環基からそれぞれ独立に選ばれる。R<sub>33</sub>とR<sub>34</sub>またはR<sub>35</sub>とR<sub>36</sub>が結合し、環構造を形成しても良い。

## 【0034】

R<sub>21</sub>乃至R<sub>36</sub>で表される、ハロゲン原子、アルキル基、芳香族炭化水素基、複素環基の具体例としては、R<sub>1</sub>乃至R<sub>20</sub>で説明したものと同様のものが挙げられるが、これらに限定されるものではない。アルキル基としては、炭素原子数1以上10以下のアルキル基が好ましい。芳香族炭化水素基としては、炭素原子数6以上60以下の芳香族炭化水素基が好ましい。複素環基としては、炭素原子数3以上60以下の複素環基が好ましい。また、アルキル基、芳香族炭化水素基、複素環基がさらに有してもよい置換基の具体例としては、R<sub>1</sub>乃至R<sub>20</sub>で説明したものと同様のものが挙げられるが、これらに限定されるものではない。

## 【0035】

次に、本実施形態に係る有機化合物の合成方法を説明する。本実施形態に係る有機化合物は、例えば、下記に示す反応スキームに従って合成される。

## 【0036】

10

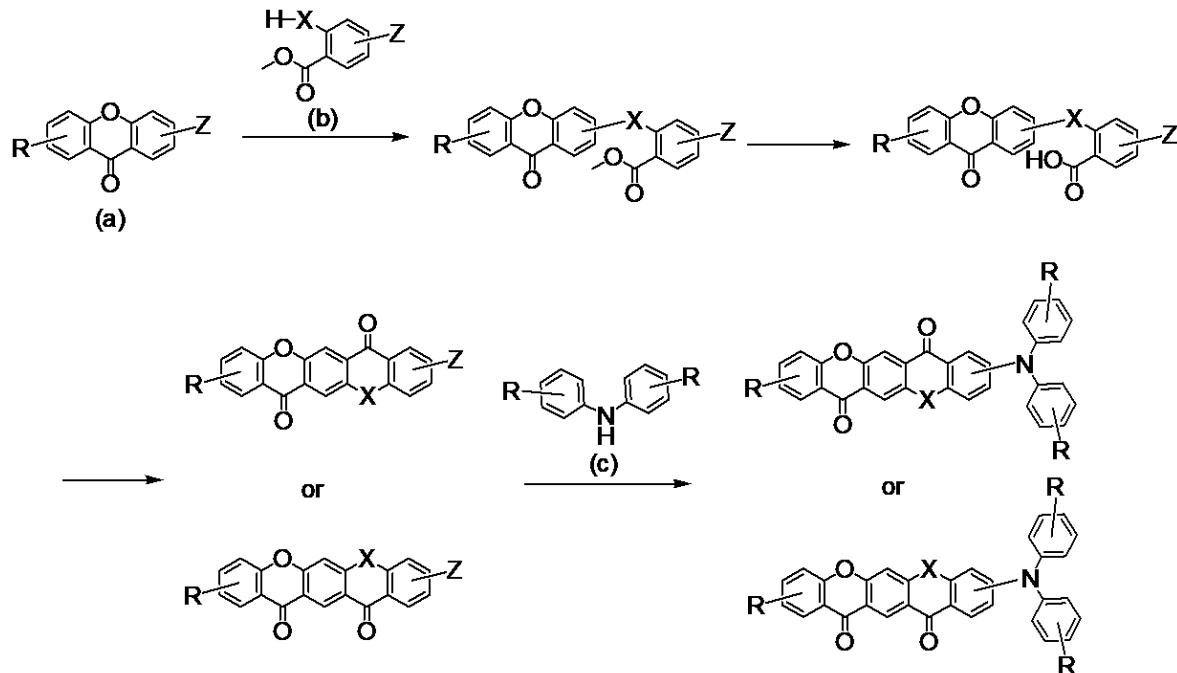
20

30

40

50

## 【化9】



## 【0037】

ここで上記(a)乃至(c)に示される化合物を適宜変更することにより、一般式[1-1]または[1-2]で表される化合物を得ることができる。なお、合成法についてこれらに限定されるものではない。

## 【0038】

次に、本実施形態に係る有機化合物は、以下のような特徴を有するため、有機発光素子中に用いることで高効率発光と駆動耐久特性の優れる有機発光素子を提供する。以下、本実施形態の例示化合物AA1、AB1、AC1、AD1、BA1、BB1、BC1、BD1を用いて、非特許文献1に記載の比較化合物1-a、非特許文献2に記載の比較化合物1-b、非特許文献3に記載の比較化合物2-aと比較しながら本実施形態の特徴について説明する。

30

## 【0039】

(1) 基本骨格として、6員環5つからなる縮環骨格に電子吸引性であるカルボニル基が2つ含有され、さらに電子供与性のアミノ基を少なくとも1つ有することでS<sub>1</sub>とT<sub>1</sub>のエネルギー差が小さい。

## 【0040】

励起一重項状態(S<sub>1</sub>)と励起三重項状態(T<sub>1</sub>)のエネルギー差が小さいことで一重項励起子と三重項励起子が1:3で生成した励起子について、通常、熱失活していた三重項励起子を一重項励起状態から発光させる遅延蛍光型の発光に使用できるためである。三重項励起子を一重項励起状態へ変換する逆項間交差には、S<sub>1</sub>とT<sub>1</sub>のエネルギー差が小さい方がエネルギー障壁が小さくなるため、有利である。本実施形態の化合物はその条件に有利になるため、高効率発光の素子を提供することができる。

40

## 【0041】

本発明者らは、一般式[1-1]または[1-2]に示される有機化合物を創出するにあたり、化合物のHOMO(最高被占軌道)とLUMO(最低空軌道)の電子分布に注目した。

## 【0042】

表1に示すように、本実施形態の例示化合物AA1、AB1、AC1、BA1、BB1、BC1は、HOMOの電子軌道分布を占める部分と、LUMOの電子軌道分布を占める部分が分離される。つまり、HOMOとLUMOの軌道が重複している部分は少ないと

50

がわかる。このことは、重なり積分が小さく、 $S_1$ と $T_1$ のエネルギー差が小さいことに繋がる。

#### 【0043】

上記特徴は、基本骨格が6員環5つからなる縮環骨格に電子吸引性であるカルボニル基が2つ含有されることと、さらに電子供与性のアミノ基を少なくとも1つ有することによる効果である。これは、基本骨格がカルボニル基2つ含有による強い電子吸引性及び6員環5つからなる縮環構造であることにより、アミノ置換基上のHOMOと基本骨格上のLUMO軌道が空間的に分離するためである。また、LUMOが縮環構造全体に広がることにより、励起状態で励起子が安定化する効果もある。これにより、有機発光素子の発光層に用いた場合に、耐久特性が向上する。

10

#### 【0044】

一方、比較化合物1-a、1-bのようにアミノ基が置換されていない構造は、HOMOとLUMOの軌道が分離されない。このため、 $S_1$ と $T_1$ のエネルギー差が大きくなる。

#### 【0045】

また、比較化合物2-aのように、アミノ基が置換されていても置換位置が2つのカルボニル基の間である構造は、HOMOとLUMOの軌道が近くなり、分離度合が小さい。このため、 $S_1$ と $T_1$ のエネルギー差が大きくなる。つまり、一般式[1-1]または[1-2]のR<sub>5</sub>、R<sub>10</sub>、R<sub>15</sub>、R<sub>20</sub>にアミノ基を導入すると効率が低下する。

#### 【0046】

【表1】

20

名称	構造	HOMO軌道分布	LUMO軌道分布	$S_1$ と $T_1$ のエネルギー差(eV)
例示化合物AA1				0.08
例示化合物AB1				0.19
例示化合物AC1				0.16
例示化合物BA1				0.10
例示化合物BB1				0.27
例示化合物BC1				0.15
比較化合物1-a				0.67
比較化合物1-b				0.43
比較化合物2-a				0.57

30

#### 【0047】

上記の効果は、実施例(表10)に示す有機発光素子のE.Q.E.の比較においても

40

50

、本実施形態の例示化合物 B A 1、B B 1、B C 1の方が、比較化合物 1 - a、1 - b、2 - aよりも高効率であることを示している。

#### 【 0 0 4 8 】

以上より、一般式 [ 1 - 1 ] 及び [ 1 - 2 ] で表される化合物は、S<sub>1</sub>とT<sub>1</sub>のエネルギー差が小さい特徴を有するため、比較化合物 1 - a、1 - b、2 - aよりも高効率の発光素子を提供することができる。

#### 【 0 0 4 9 】

尚、上記のHOMOとLUMOの電子軌道分布、及びS<sub>1</sub>、T<sub>1</sub>エネルギーは、分子軌道計算を用いて可視化した。分子軌道計算法の計算手法は、現在広く用いられている密度汎関数法 (Density Functional Theory, DFT) を用いた。10 汎関数はB3LYP、基底関数は6-31G\*を用いた。尚、分子軌道計算法は、現在広く用いられている Gaussian09 (Gaussian09, Revision C.01, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.)により実施した。以降、本明細書における分子軌道計算は同じ手法を用いる。20

#### 【 0 0 5 0 】

(2) アミノ基を有し、分子アスペクト比が小さくなることで、分子会合が低減される。

#### 【 0 0 5 1 】

分子の平面性が高いと、分子同士のスタッツが生じやすい。言い換えると、分子会合が生じやすくなるため好ましくない。なぜなら、有機発光素子において、分子会合は濃度消光による効率低下を招くためである。また、逆項間交差にも不利となる。なぜなら、分子間で行われる三重項励起子のエネルギー移動による励起子消滅 (TTA) が起こりやすくなり、一重項励起子への逆項間交差が起こりにくくなるからである。40

#### 【 0 0 5 2 】

本発明者らは、一般式 [ 1 - 1 ] または [ 1 - 2 ] に示される有機化合物を創出するにあたり、化合物の平面性に着目した。本実施形態の化合物の基本骨格は、五員環を有する縮環骨格に電子吸引性であるカルボニル基が縮合した構造であるため、平面性が高い構造である。そこで、本発明者らは、置換基として例えばアミノ基を導入することを見出した。アミノ基を導入することで、分子アスペクト比を低下させ、分子会合を低減することができる。

#### 【 0 0 5 3 】

10

20

30

40

50

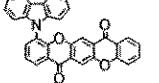
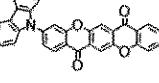
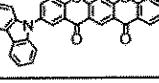
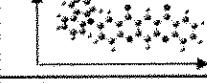
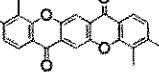
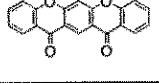
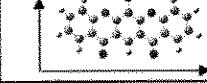
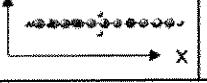
ここで、本実施形態における分子アスペクト比とは、基本骨格を含むx y 平面の最大の分子長（分子直径）と、この基本骨格を含むx y 平面に直交するz 軸方向の分子長（分子厚み）との比であり、分子アスペクト比 = (分子直径) / (分子厚み) と定義する。すなわち、分子アスペクト比が大きいほど、平面性が高くなり、好ましくない。一方、分子アスペクト比が小さいほど、平面性が低く、分子会合を低減できるので好ましい。具体的には、分子アスペクト比は5 . 0 以下が好ましい。さらに好ましくは、3 . 0 以下が好ましい。尚、分子直径と分子厚みのそれぞれの分子長は、最適化構造計算により得られた分子構造を用いて、ポール & ボンドタイプ表示における分子長から算出した。

#### 【0054】

ここで、分子アスペクト比の比較を行った結果を表2に示す。表2より、本実施形態の例示化合物であるAA1、AB1、BC1の分子アスペクト比がそれぞれ1 . 7、2 . 7、2 . 4であるのに対して、比較化合物1-a、1-bはそれぞれ7 . 2、6 . 2と大きい。これは例示化合物AA1、AB1、BC1が、アミノ基を有するためである。

#### 【0055】

【表2】

名称	構造	分子垂直方向	分子平面方向	分子アスペクト比
例示化合物 AA1				1.7
例示化合物 AB1				2.7
例示化合物 BC1				2.4
比較化合物 1-a				7.2
比較化合物 1-b				6.2

#### 【0056】

以上より、本実施形態に係る化合物は、分子アスペクト比が低く、分子同士のスタッツクが生じにくいため、分子会合が生じにくい。

#### 【0057】

また、上記特徴は、有機化合物のアモルファス性向上にも効果がある。本実施形態の化合物を有機発光素子の有機層で用いた場合、結晶化しにくく、安定したアモルファス膜を形成し、長期駆動させても結晶化することなく、高耐久性に優れる有機発光素子を得る。

#### 【0058】

さらに、上記特徴は昇華性を向上する効果もある。昇華性の向上は、昇華精製による材料の高純度化や、蒸着による有機発光素子の作製を可能にする。これにより、有機発光素子中に含まれる不純物を減少することができ、不純物による発光効率の低下、駆動耐久の低下を招くことを防ぐことができる。

#### 【0059】

さらに、本実施形態の有機化合物のアミノ基の位置の特徴について、比較化合物2-aと比較しながら、表3と共に以下に説明する。表3は、例示化合物AA1、AB1、AC1、AD1、BA1、BB1、BC1、BD1、比較化合物2-aの分子軌道計算により算出した、S<sub>1</sub>、T<sub>1</sub>、S<sub>1</sub>とT<sub>1</sub>のエネルギー差、LUMOの値を示す。

10

20

30

40

50

## 【0060】

【表3】

名称	構造	S1 calc. (eV)	T1 calc. (eV)	S1とT1の エネルギー差(eV)	LUMO calc. (eV)
例示化合物 A A 1		2.45	2.37	0.08	-2.59
例示化合物 A B 1		2.71	2.52	0.19	-2.56
例示化合物 A C 1		2.44	2.28	0.16	-2.62
例示化合物 A D 1		2.24	2.15	0.09	-2.57
例示化合物 B A 1		2.83	2.73	0.10	-2.28
例示化合物 B B 1		3.01	2.74	0.27	-2.25
例示化合物 B C 1		2.72	2.57	0.15	-2.30
例示化合物 B D 1		2.47	2.35	0.12	-2.26
比較化合物 2-a		2.00	1.43	0.57	-2.42

## 【0061】

比較化合物2-aは、S<sub>1</sub>が2.00 eVであり、発光波長が大きく長波長化するため、赤色より短波長の発光材料（例えば緑色発光材料）としては使用できない。さらに、発光素子のホストやアシストとして使用する場合にも、S<sub>1</sub>が小さく赤色発光材料へのエネルギー移動も制限される。つまり、効率が低下する。また、N-H基はプロトンを放出しやすく、発光素子の特に発光層に用いた場合に、クエンチャーとなりやすいが、例示化合物A A 1、A B 1、A C 1、A D 1、B A 1、B B 1、B C 1、B D 1は分子内にN-H基を有さないため、素子耐久特性が優れる。以上より、一般式[1-1]または[1-2]のR<sub>5</sub>、R<sub>10</sub>、R<sub>15</sub>、R<sub>20</sub>の置換位置にアミノ基を導入すると、効率、素子耐久共に悪化する。

## 【0062】

(3)一般式[2-1]または[2-2]で示される化合物、つまり、R<sub>1</sub>、R<sub>6</sub>、R<sub>11</sub>、R<sub>19</sub>がアミノ基である化合物が、表3に示す様に、より小さいS<sub>1</sub>とT<sub>1</sub>のエネルギー差を有することを見出した。R<sub>1</sub>、R<sub>6</sub>、R<sub>11</sub>、R<sub>19</sub>がアミノ基であると、S<sub>1</sub>とT<sub>1</sub>のエネルギー差が小さくなる。したがって、本実施形態の有機化合物の中でも、有機発光素子に用いた場合、発光効率が高くなるため好ましい。

## 【0063】

10

20

30

40

50

(4) 一般式 [3-1] または [3-2] で示される化合物、つまり、R<sub>2</sub>、R<sub>7</sub>、R<sub>12</sub>、R<sub>18</sub>がアミノ基である化合物が、表3に示す様に、より大きいS<sub>1</sub>を有することを見出した。したがって、青色から緑色の有機発光素子に好適に用いることができるため好ましい。

#### 【0064】

(5) 一般式 [4-1] または [4-2] で示される化合物、つまり、R<sub>4</sub>、R<sub>9</sub>、R<sub>14</sub>、R<sub>16</sub>がアミノ基である化合物が、表3に示す様に、より小さいS<sub>1</sub>を有することを見出した。したがって、緑色から赤色の有機発光素子に好適に用いることができるため好ましい。

#### 【0065】

(6) 一般式 [5-1] または [5-2] で示される化合物、つまり、R<sub>3</sub>、R<sub>8</sub>、R<sub>13</sub>、R<sub>17</sub>がアミノ基である化合物が、表3に示す様に、よりLUMO準位が低いため好ましい。LUMO準位が低い（真空準位から遠い）ことにより、例えば、有機発光素子の発光材料として用いた場合に、より電子をトラップすることで発光層内に電荷を閉じ込めることができるため、発光効率及び素子耐久寿命が向上する。これは、電子供与基であるアミノ基の位置に対して電子吸引基のカルボニルの位置はメタ位にあり、LUMOを担うカルボニル基が電子供与性のアミノ基の影響を受けにくいためである。

#### 【0066】

さらに、本実施形態の化合物は有機発光素子中の発光層で用いることが好ましく、その場合、以下の特徴を有する。

(7) 本実施形態の化合物を発光層中でホスト材料と混合することで本実施形態の化合物が励起子再結合を起こしやすくなり、高効率の発光素子を提供する。

(8) 本実施形態の化合物を発光層中でホスト材料と混合し、さらに発光材料を有することで高効率、高色純度の発光素子を提供する。

(9) 発光材料が炭化水素化合物である場合、高効率かつ耐久特性の良好な発光素子を提供する。

#### 【0067】

以下、上記(7)乃至(9)の特徴について説明する。

(7) 本実施形態の化合物を発光層中でホスト材料と混合することで本実施形態の化合物が励起子再結合を起こしやすくなり、高効率の発光素子を提供する。

#### 【0068】

本実施形態の化合物は電子吸引性であるカルボニル基と、電子供与性のアミノ基を有する化合物である。このため、有機発光素子の発光層でホスト材料と混合することにより、電子吸引性の寄与により電子トラップ性の発光層、あるいは、電子供与性の寄与により、ホールトラップ性の発光層となる。

#### 【0069】

従って、発光層中で輸送層から供給された電子またはホールは本実施形態の化合物でトラップされ、励起子再結合が行われる。本実施形態の化合物は上記特徴(1)で述べたように、S<sub>1</sub>とT<sub>1</sub>のエネルギー差が小さいため、発光層中で効率良く遅延蛍光型の発光を生じさせ、三重項励起子をより多く、発光に利用できる。

#### 【0070】

特に、ホスト材料が炭化水素化合物の場合、本実施形態の化合物のLUMOはホスト材料より低いレベル（真空準位から遠い）になりやすく、または本実施形態の化合物のHOMOはホスト材料より高いレベル（真空準位に近い）になりやすい。そのため、より電子やホールをトラップしやすくなるため効果が大きい。炭化水素化合物とは分子中に炭素と水素のみから構成される化合物である。

#### 【0071】

さらに本実施形態の化合物は上記特徴(2)で述べたように分子会合が生じにくいため、ホスト材料中で濃度消光を生じにくい。この効果は本実施形態の化合物が励起状態にあるとき、励起子同士の相互作用による消光を防ぐことにつながり、発光層中で効率良く遅延

10

20

30

40

50

延蛍光型の発光を生じさせることに有効である。

【 0 0 7 2 】

( 8 ) 本実施形態の化合物を発光層中でホスト材料と混合し、さらに発光材料を有することで高効率、高色純度の発光素子を提供する。

【 0 0 7 3 】

本実施形態の化合物を発光層中に用い、さらに発光材料として用いられる発光量子収率の高い発光材料や発光スペクトルが高色純度を示すのに適したスペクトルを持つ発光材料をドープすることでさらに高効率で高色純度の発光素子を提供する。この場合、本実施形態の化合物は励起子再結合を起こしやすくするため、発光層中に電子や正孔を優先的にトラップできる程度の濃度で構成する必要があり、本実施形態に係る有機化合物の濃度は、発光層全体に対して 0 . 1 % 以上 4 5 % 以下であることが好ましく、1 % 以上 3 0 % 以下であることがより好ましい。

10

【 0 0 7 4 】

一方、発光材料としてドープ濃度は少ないほうが分子同士の相互作用による濃度消光や発光スペクトルの変化の影響を受けないため、発光層中に本実施形態の化合物以外に発光材料をドープすることが好ましい。発光材料の濃度は、発光層全体に対して 0 . 0 1 % 以上 2 0 % 以下であることが好ましく、1 % 以上 1 5 % 以下であることがより好ましい。以上により、高効率、高色純度の発光素子を提供することができる。

20

【 0 0 7 5 】

( 9 ) 発光材料が炭化水素化合物である場合、高効率かつ耐久特性の良好な発光素子を提供する。

【 0 0 7 6 】

本実施形態の化合物は強い電子吸引性のカルボニル基を有するため、上記特徴 ( 8 ) で記載したドープする発光材料は電子供与基であるアミノ基を有さない発光材料が好ましく、炭化水素化合物が好ましい。その理由はアミノ基を有する発光材料の場合、発光層中で本実施形態の化合物のカルボニル基と相互作用し、エキサイプレックス形成による発光効率低下や発光材料の発光スペクトルが変化する事により発光素子の色純度が悪化する可能性があるからである。

【 0 0 7 7 】

さらにアミノ基を有する発光材料はイオン化ポテンシャルが低いため酸化されやすく、素子耐久性が悪い。そのため、発光材料は炭化水素化合物が好ましく、より好ましくは 5 員環を有する縮合多環化合物が好ましい。イオン化ポテンシャルがより高いことで酸化されにくい構造であるからである。炭化水素化合物とは分子中に炭素と水素のみから構成される化合物である。

30

【 0 0 7 8 】

以上により、本実施形態の化合物を発光層中でホスト材料と混合することで高効率発光の有機発光素子を得ることができる。この時、発光材料は本実施形態の化合物でも良く、さらに発光材料を混合し、本実施形態の化合物をアシスト材料として機能させても良い。色純度の良い発光材料を用いることで高効率かつ高色純度の有機発光素子を得ることができる。さらにホスト材料は炭化水素化合物である場合、本実施形態の化合物が電子や正孔をトラップしやすくなるため高効率化の効果が大きく好ましい。

40

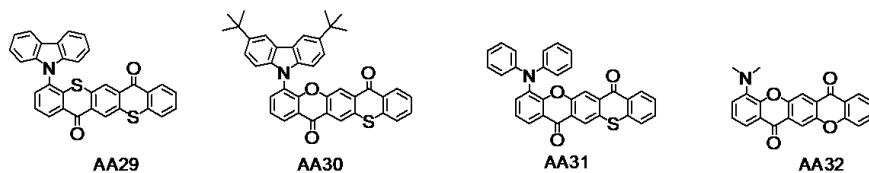
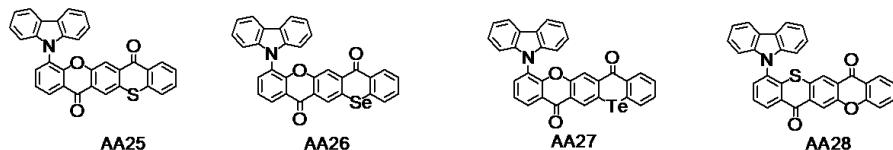
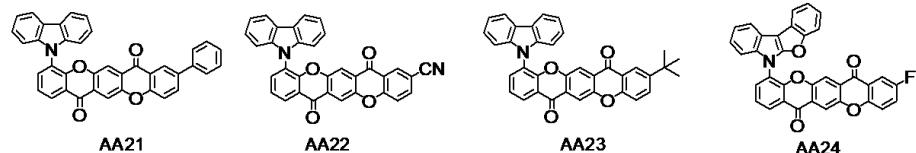
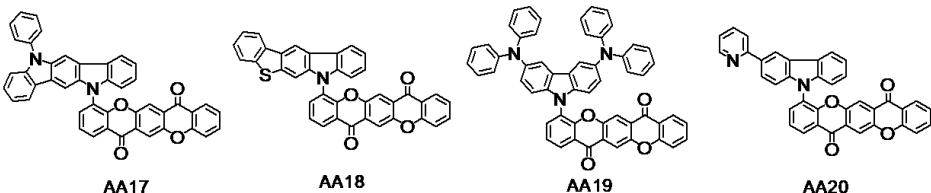
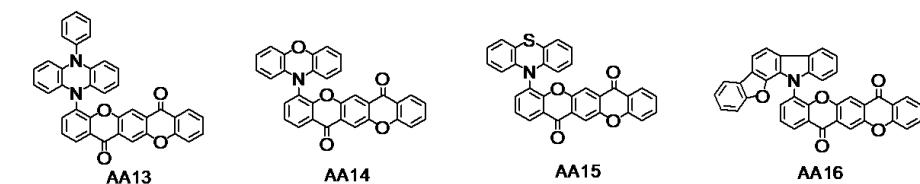
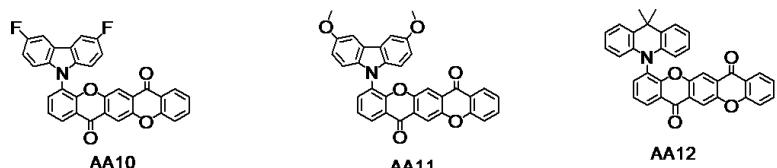
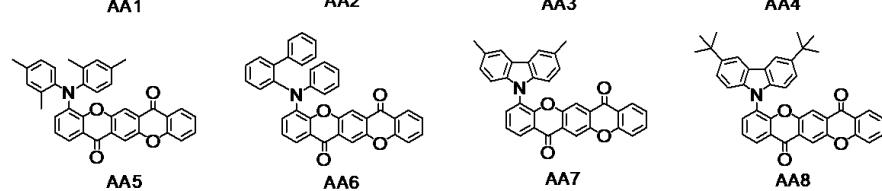
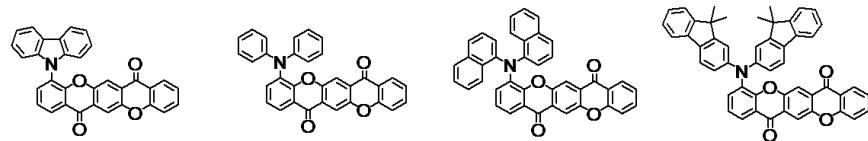
【 0 0 7 9 】

本実施形態に係る有機化合物の具体例を以下に示す。しかし、本発明はこれらに限られるものではない。

【 0 0 8 0 】

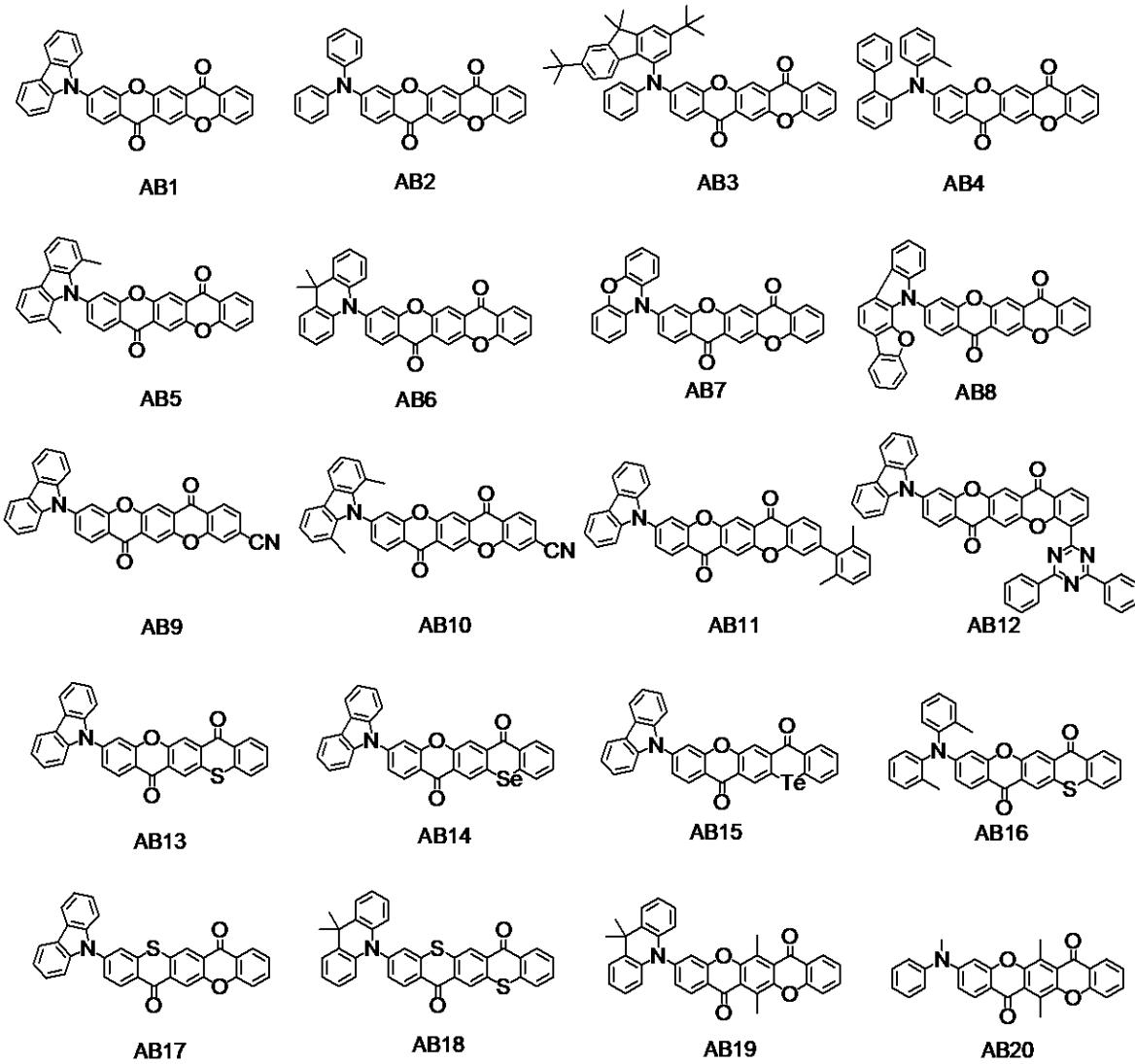
50

【化 1 0】



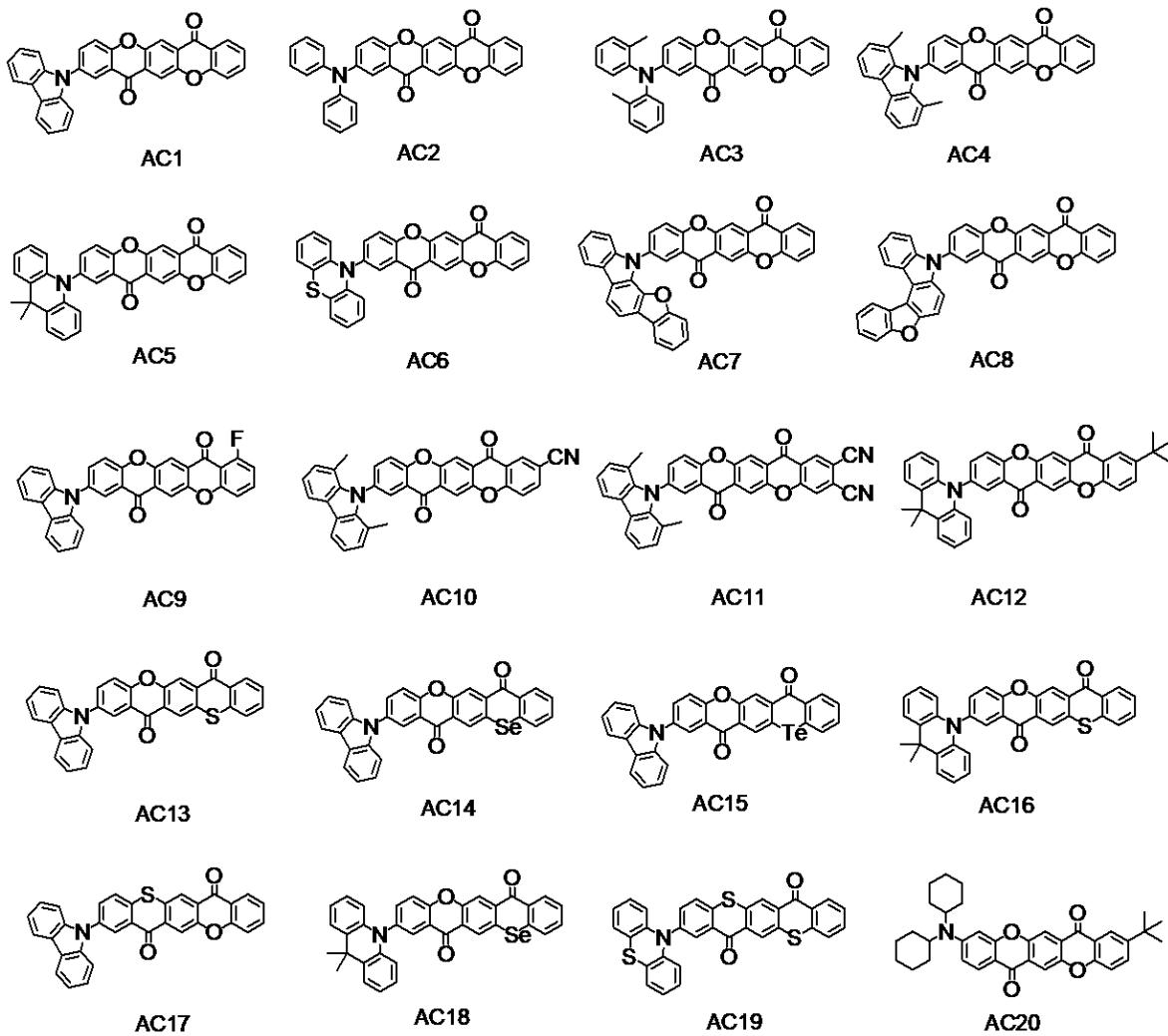
【 0 0 8 1 】

【化 1 1】



【 0 0 8 2 】

【化 1 2】



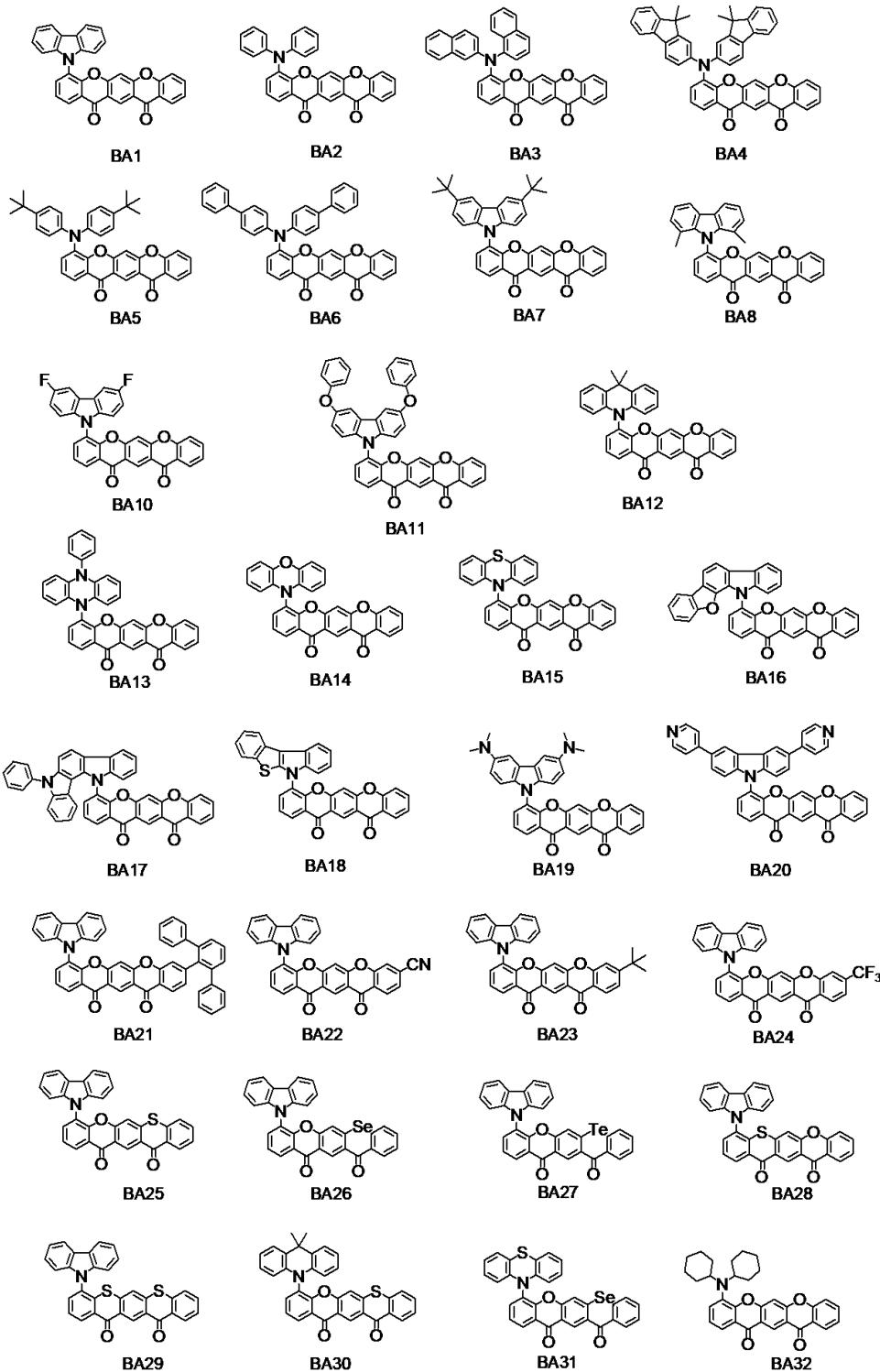
【0083】

30

40

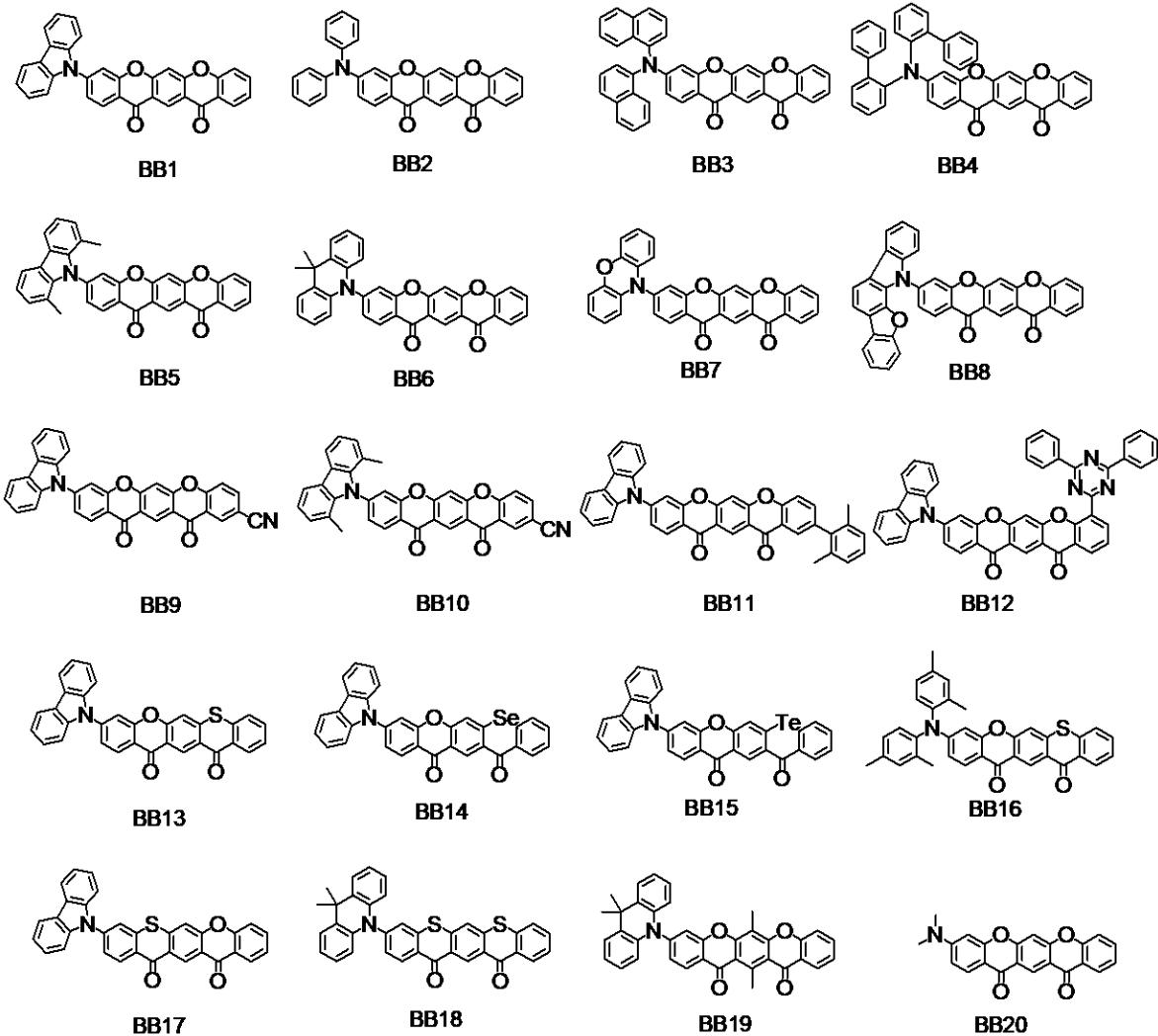
50

## 【化 1 3】



## 【0 0 8 4】

【化 1 4】



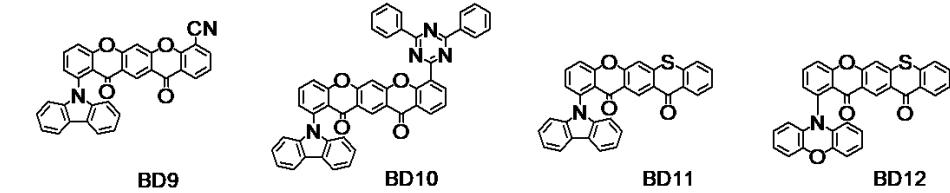
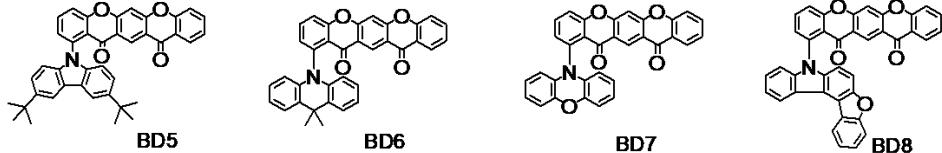
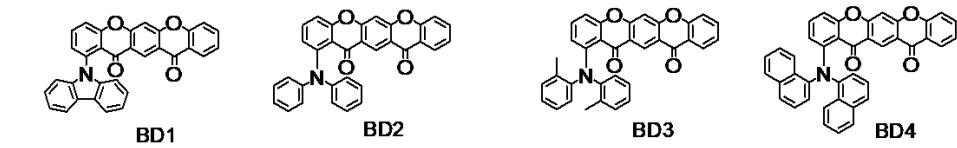
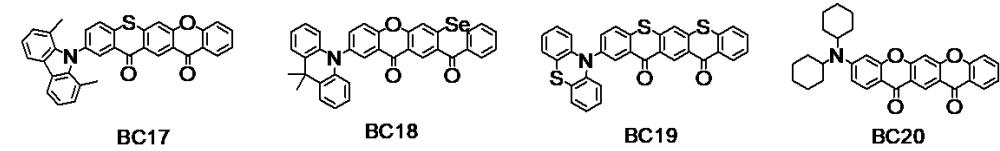
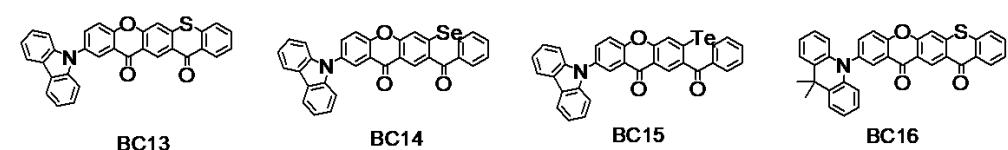
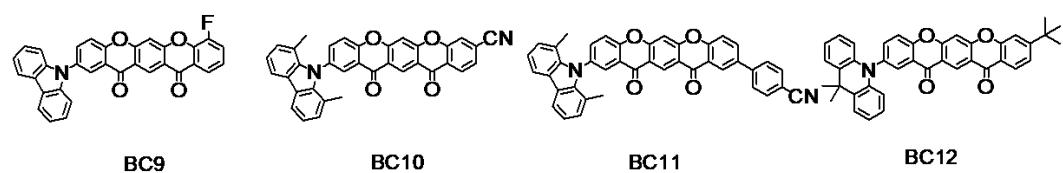
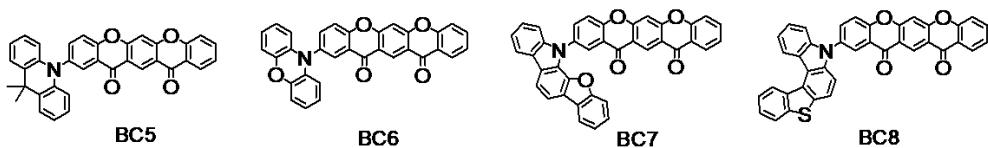
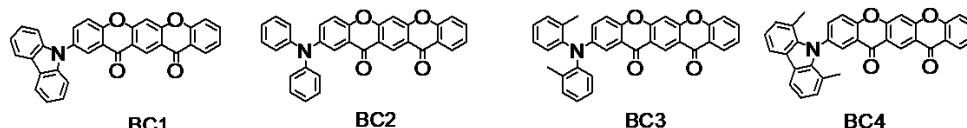
【0085】

30

40

50

## 【化 15】



## 【0086】

10

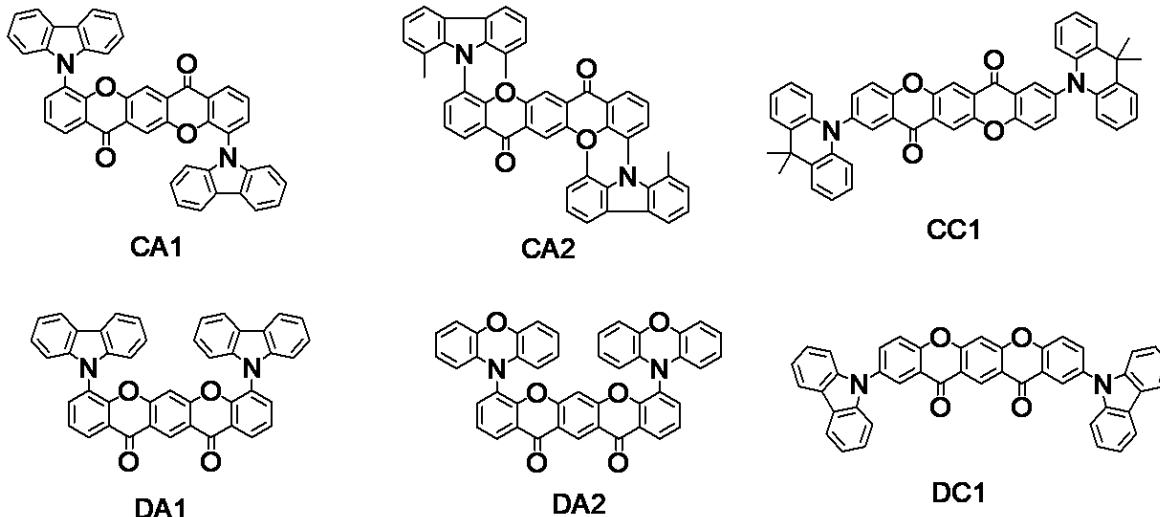
20

30

40

50

## 【化16】



## 【0087】

A A 群に属する化合物及び C A 1、C A 2 は、一般式 [ 2 - 1 ] に示される化合物である。B A 群に属する化合物及び D A 1、D A 2 は、一般式 [ 2 - 2 ] に示される化合物である。上述したように、本実施形態の化合物の中でも S<sub>1</sub>と T<sub>1</sub>のエネルギー差が小さいため、例えば有機発光素子に用いた場合、高い発光効率を提供できるため好ましい。

## 【0088】

A B 群に属する化合物（A B 1 9、A B 2 1 を除く）は、一般式 [ 3 - 1 ] に示される化合物である。B B 群に属する化合物（B B 1 9 を除く）は、一般式 [ 3 - 2 ] に示される化合物である。上述したように、本実施形態の中でも S<sub>1</sub>が大きいため、例えば有機発光素子に用いた場合、青色から緑色の発光を提供できるため好ましい。

## 【0089】

A D 群に属する化合物は、一般式 [ 4 - 1 ] に示される化合物である。B D 群に属する化合物は、一般式 [ 4 - 2 ] に示される化合物である。上述したように、本実施形態の中でも S<sub>1</sub>が小さいため、例えば有機発光素子に用いた場合、緑色から赤色の発光を提供できるため好ましい。

## 【0090】

A C 群に属する化合物及び C C 1 は、一般式 [ 5 - 1 ] に示される化合物である。B C 群に属する化合物及び D C 1 は、一般式 [ 5 - 2 ] に示される化合物である。上述したように、本実施形態の中でも L U M O が低いため、例えば有機発光素子に用いた場合、良好な耐久特性を提供できるため好ましい。

## 【0091】

A A 1 乃至 A A 8、A A 1 0 乃至 A A 2 4、A A 3 2、A B 1 乃至 A B 1 2、A B 1 9、A B 2 0、A C 1 乃至 A C 1 2、A C 2 0、A D 1 乃至 A D 1 0、B A 1 乃至 B A 8、B A 1 0 乃至 B A 2 4、B A 3 2、B B 1 乃至 B B 1 2、B B 1 9、B B 2 0、B C 1 乃至 B C 1 2、B D 1 乃至 B D 1 0 は、一般式 [ 1 - 1 ] または [ 1 - 2 ] において X が酸素である化合物である。X が酸素であることにより酸化等の化学反応が生じにくく、化学的に安定な化合物を提供する。

## 【0092】

A A 2 5、A A 2 8 乃至 A A 3 1、A B 1 3、A B 1 6 乃至 A B 1 8、A C 1 3、A C 1 6、A C 1 7、A C 1 9、A D 1 1、A D 1 2、B A 2 5、B A 2 8 乃至 B A 3 0、B B 1 3、B B 1 6 乃至 B B 1 8、B C 1 3、B C 1 6、B C 1 7、B C 1 9、B D 1 1、B D 1 2 は、一般式 [ 1 - 1 ] または [ 1 - 2 ] において X のうち少なくとも一つが硫黄である化合物である。X が硫黄であることにより、酸素より、元素の半径が大きいため、形成しる 6 員環が歪む構造になり、分子の平面性が崩れる。そのため、さらに濃度消光し

10

20

30

40

50

にくい。

**【 0 0 9 3 】**

A A 2 6、A A 2 7、A B 1 4、A B 1 5、A C 1 4、A C 1 5、A C 1 8、B A 2 6、B A 2 7、B B 1 4、B B 1 5、B C 1 4、B C 1 5、B C 1 8 は、一般式 [ 1 - 1 ] または [ 1 - 2 ] において X のうち少なくとも一つがセレンまたはテルルである化合物である。X がセレンまたはテルルの場合、d 軌道を有し、金属性を有する元素のため、電子の移動度が高くなる。

**【 0 0 9 4 】**

**有機発光素子**

次に、本実施形態の有機発光素子について説明する。

10

**【 0 0 9 5 】**

本実施形態の有機発光素子は、一対の電極である陽極と陰極と、これら電極間に配置される有機化合物層と、を少なくとも有する。本実施形態の有機発光素子において、有機化合物層は発光層を有していれば単層であってもよいし複数層からなる積層体であってもよい。ここで有機化合物層が複数層からなる積層体である場合、有機化合物層は、発光層の他に、ホール注入層、ホール輸送層、電子ブロッキング層、ホール・エキシトンブロッキング層、電子輸送層、電子注入層等を有してもよい。また発光層は、単層であってもよいし、複数の層からなる積層体であってもよい。

**【 0 0 9 6 】**

本実施形態の有機発光素子において、有機化合物層の少なくとも一層に本実施形態に係る有機化合物が含まれている。具体的には、本実施形態に係る有機化合物は、上述した発光層、ホール注入層、ホール輸送層、電子ブロッキング層、発光層、ホール・エキシトンブロッキング層、電子輸送層、電子注入層等のいずれかに含まれている。本実施形態の係る有機化合物は、好ましくは、発光層に含まれる。発光層は、緑色発光または赤色発光することができるが、発光色はこれらに限定されない。

20

**【 0 0 9 7 】**

本実施形態の有機発光素子において、本実施形態に係る有機化合物が発光層に含まれる場合、発光層は、本実施形態に係る有機化合物のみからなる層であってもよいし、本実施形態に係る有機化合物と他の化合物とからなる層であってもよい。ここで、発光層が本実施形態に係る有機化合物と他の化合物とからなる層である場合、本実施形態に係る有機化合物は、発光層のホストとして使用してもよいし、ゲストとして使用してもよい。また発光層に含まれ得るアシスト材料として使用してもよい。ここでホストとは、発光層を構成する化合物の中で質量比が最も大きい化合物である。またゲストとは、発光層を構成する化合物の中で質量比がホストよりも小さい化合物であって、主たる発光を担う化合物である。またアシスト材料とは、発光層を構成する化合物の中で質量比がホストよりも小さく、ゲストの発光を補助する化合物である。

30

**【 0 0 9 8 】**

ここで、本実施形態に係る有機化合物を発光層のゲストとして用いる場合、ゲストの濃度は、発光層全体に対して 0 . 0 1 % 以上 2 0 % 以下であることが好ましく、1 % 以上 1 5 % 以下であることがより好ましい。本実施形態に係る有機化合物を発光層のアシスト材料として用いる場合、アシスト材料の濃度は、発光層全体に対して 0 . 1 % 以上 4 5 % 以下であることが好ましく、1 % 以上 3 0 % 以下であることがより好ましい。

40

**【 0 0 9 9 】**

また本実施形態に係る有機化合物を発光層のゲストとして用いる際には、本実施形態に係る有機化合物よりも L U M O が高い材料 ( L U M O が真空準位により近い材料 ) をホストとして用いることが好ましい。というのも本実施形態に係る有機化合物は L U M O が低い傾向にあるため、本実施形態に係る有機化合物よりも L U M O が高い材料をホストにすることで、発光層のホストに供給される電子を本実施形態に係る有機化合物がより受領できるからである。

**【 0 1 0 0 】**

50

また本実施形態に係る有機化合物を発光層のアシスト材料として用いる際には、本実施形態に係る有機化合物よりも LUMO が高い材料（LUMO が真空準位により近い材料）をゲストとして用いることが好ましい。というのも本実施形態に係る有機化合物は LUMO が低い傾向にある。そのため、本実施形態に係る有機化合物よりも LUMO が高い材料を発光材料（ゲスト）にすることで、発光層のホストに供給される電子を本実施形態に係る有機化合物がより受領し、励起子再結合をアシスト材料が担う。その結果、効率良く発光材料（ゲスト）へエネルギー移動を起こすことが可能になる。

#### 【0101】

本発明者らは種々の検討を行い、本実施形態に係る有機化合物を、発光層のホスト、ゲストまたはアシスト材料として、特に、発光層のゲストとして用いると、高効率で高輝度な光出力を呈し、かつ極めて耐久性が高い素子が得られることを見出した。さらに、発光層のアシスト材料として用いると、高効率で高輝度な光出力を呈し、かつ極めて耐久性が高い素子が得られることを見出した。この発光層は単層でも複層でも良いし、複数の発光材料を含むことも可能である。複層とは発光層と別の発光層とが積層している状態でも良く複数の発光層の間に中間層を積層しても良い。また、蛍光発光でも良いし、燐光発光でも良い。また、タンデム素子やスタッツク素子でも良い。これらの場合、有機発光素子の発光色は単色に限られない。より具体的には、白色でもよいし、中間色でもよい。また、製膜方法も蒸着もしくは塗布製膜で製膜を行う。この詳細については、後述する実施例で詳しく説明する。

#### 【0102】

本実施形態に係る有機化合物は、本実施形態の有機発光素子を構成する発光層以外の有機化合物層の構成材料として使用することができる。具体的には、電子輸送層、電子注入層、ホール輸送層、ホール注入層、ホールブロッキング層等の構成材料として用いてよい。

#### 【0103】

ここで、本実施形態に係る有機化合物以外にも、必要に応じて従来公知の低分子系及び高分子系のホール注入性化合物あるいはホール輸送性化合物、ホストとなる化合物、発光性化合物、電子注入性化合物あるいは電子輸送性化合物等と一緒に使用することができる。以下にこれらの化合物例を挙げる。

#### 【0104】

ホール注入輸送性材料としては、陽極からのホールの注入を容易にして、かつ注入されたホールを発光層へ輸送できるようにホール移動度が高い材料が好ましい。また有機発光素子中において結晶化等の膜質の劣化を低減するために、ガラス転移点温度が高い材料が好ましい。ホール注入輸送性能を有する低分子及び高分子系材料としては、トリアリールアミン誘導体、アリールカルバゾール誘導体、フェニレンジアミン誘導体、スチルベン誘導体、フタロシアニン誘導体、ポルフィリン誘導体、ポリ(ビニルカルバゾール)、ポリ(チオフェン)、その他導電性高分子が挙げられる。さらに上記のホール注入輸送性材料は、電子ブロッキング層にも好適に使用される。以下に、ホール注入輸送性材料として用いられる化合物の具体例を示すが、もちろんこれらに限定されるものではない。

#### 【0105】

10

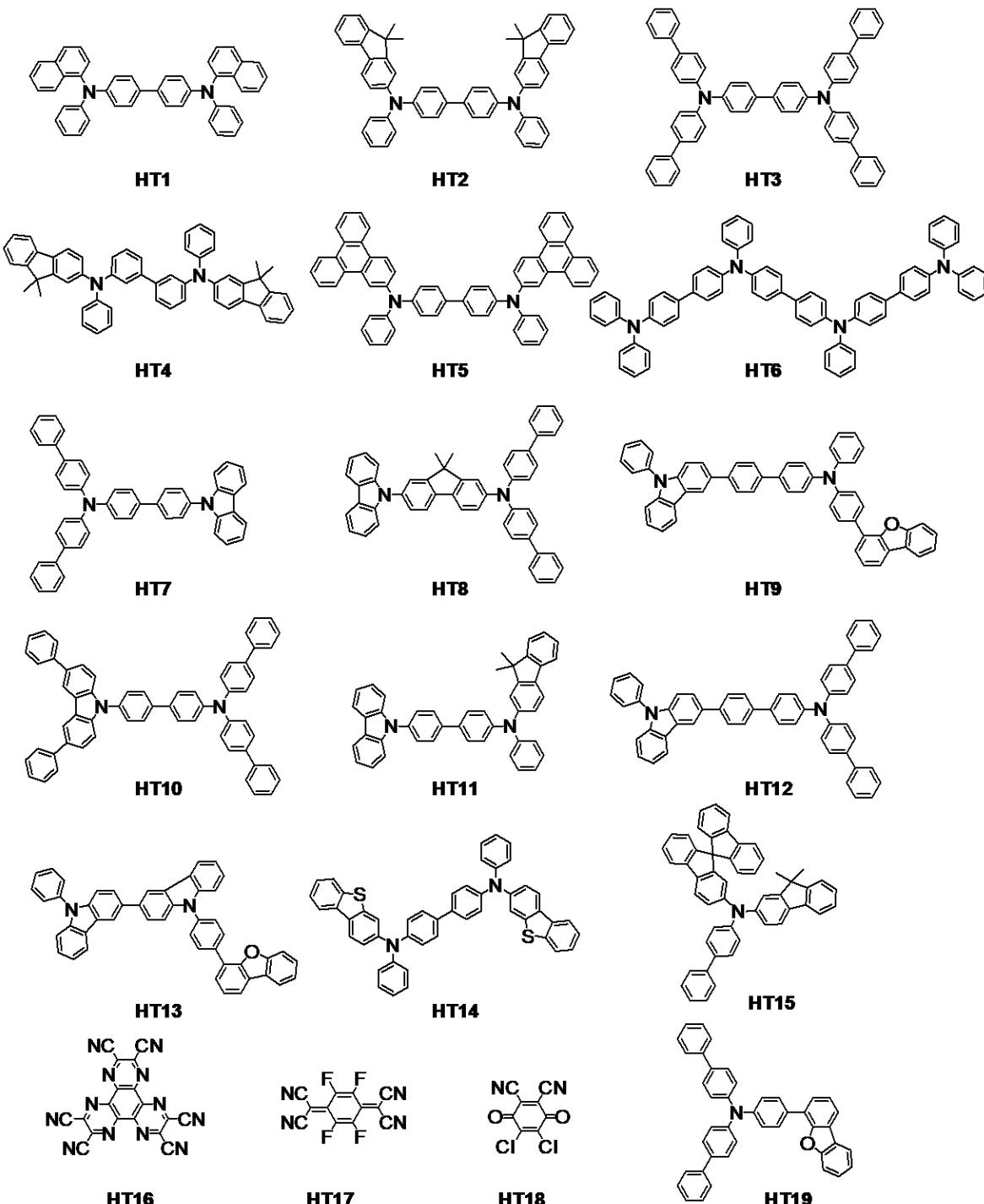
20

30

40

50

## 【化 1 7】



## 【0 1 0 6】

正孔輸送材料としてあげた中でも、HT16乃至HT18は、陽極に接する層に用いることで駆動電圧を低減することができる。HT16は広く有機発光素子に用いられている。HT16に隣接する有機化合物層に、HT2、HT3、HT4、HT5、HT6、HT10、HT12を用いてよい。また、一つの有機化合物層に複数の材料を用いててもよい。

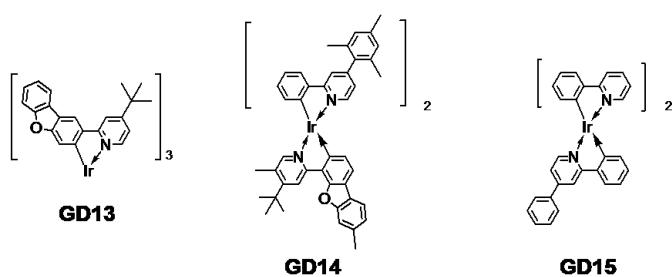
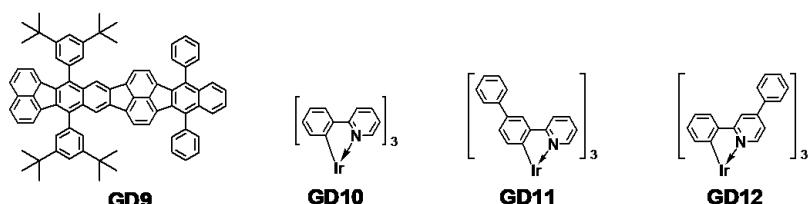
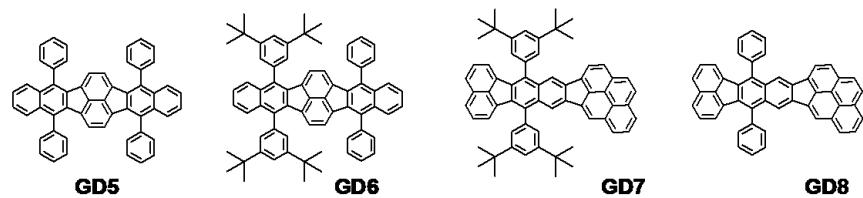
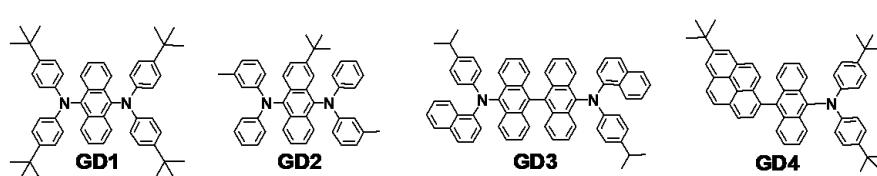
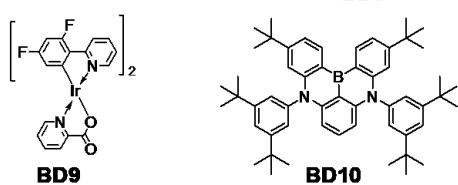
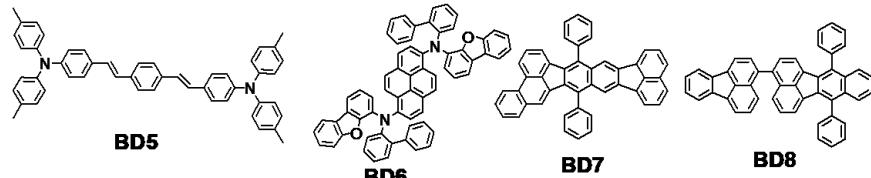
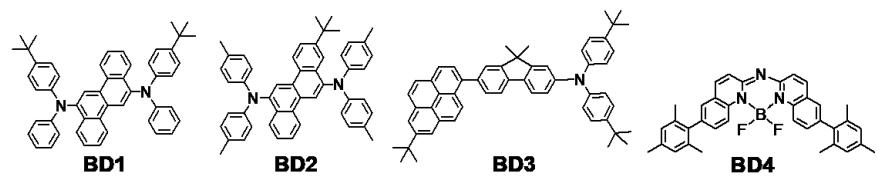
## 【0 1 0 7】

主に発光機能に関わる発光材料としては、一般式[1]、[2]で表わされる有機化合物の他に、縮環化合物（例えばフルオレン誘導体、ナフタレン誘導体、ピレン誘導体、ペリレン誘導体、テトラセン誘導体、アントラセン誘導体、ルブレン等）、キナクリドン誘導体、クマリン誘導体、スチルベン誘導体、トリス（8-キノリノラート）アルミニウム等の有機アルミニウム錯体、イリジウム錯体、白金錯体、レニウム錯体、銅錯体、ユーロ

ピウム錯体、ルテニウム錯体、及びポリ(フェニレンビニレン)誘導体、ポリ(フルオレン)誘導体、ポリ(フェニレン)誘導体等の高分子誘導体が挙げられる。以下に、発光材料として用いられる化合物の具体例を示すが、もちろんこれらに限定されるものではない。

【0108】

【化18】



【0109】

10

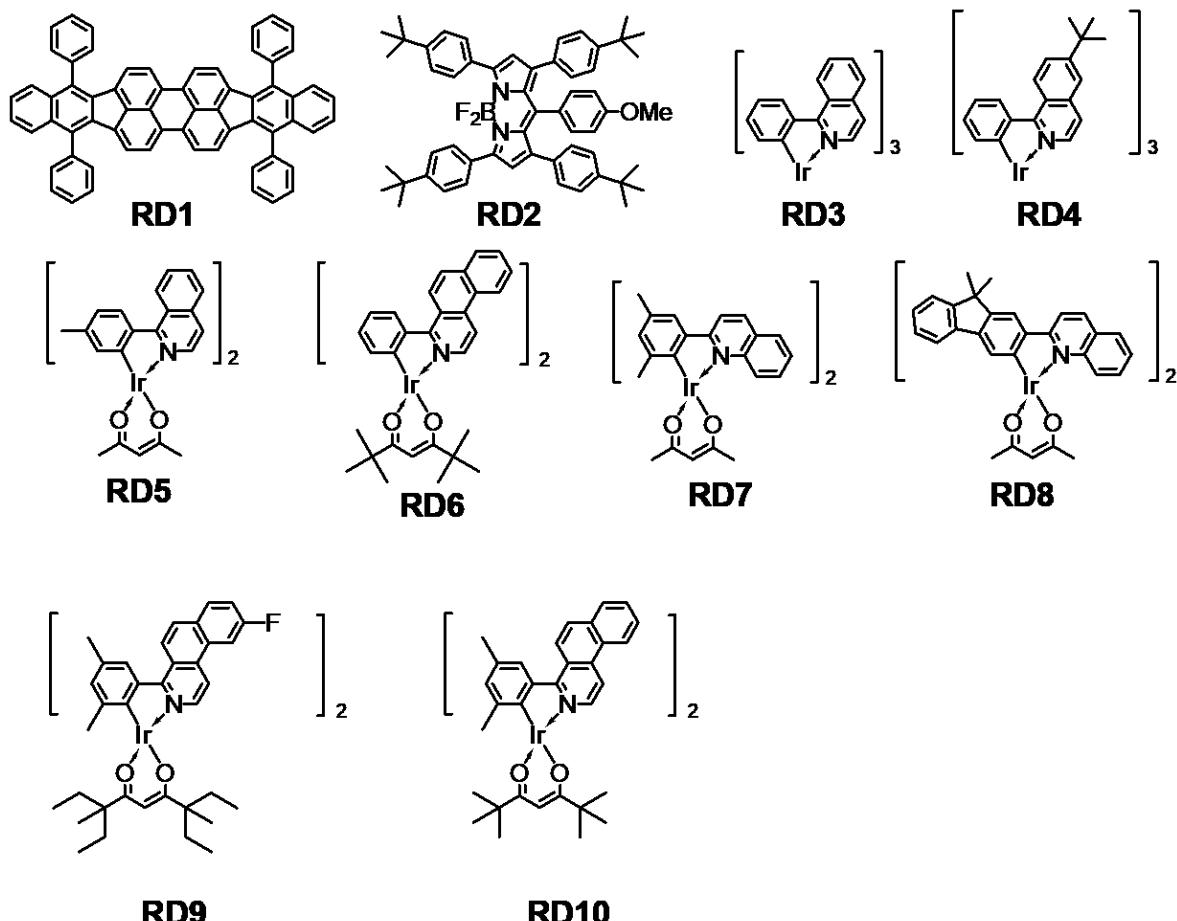
20

30

40

50

## 【化19】



## 【0110】

発光材料は炭化水素化合物である場合、エキサイプレックス形成による発光効率低下や発光材料の発光スペクトル変化による色純度悪化を防ぎ、好ましい。炭化水素化合物とは炭素と水素のみで構成される化合物であり、BD7、BD8、GD5乃至GD9、RD1が相当する。発光材料は5員環を含む縮合多環である場合、イオン化ポテンシャルが高いため、酸化しにくく、高耐久な寿命の素子を提供するためさらに好ましい。BD7、BD8、GD5乃至GD9、RD1が相当する。

## 【0111】

発光層に含まれる発光層ホストあるいは発光アシスト材料としては、芳香族炭化水素化合物もしくはその誘導体の他、カルバゾール誘導体、ジベンゾフラン誘導体、ジベンゾチオフェン誘導体、トリス(8-キノリノラート)アルミニウム等の有機アルミニウム錯体、有機ベリリウム錯体等が挙げられる。以下に、発光層に含まれる発光層ホストあるいは発光アシスト材料として用いられる化合物の具体例を示すが、もちろんこれらに限定されるものではない。

## 【0112】

10

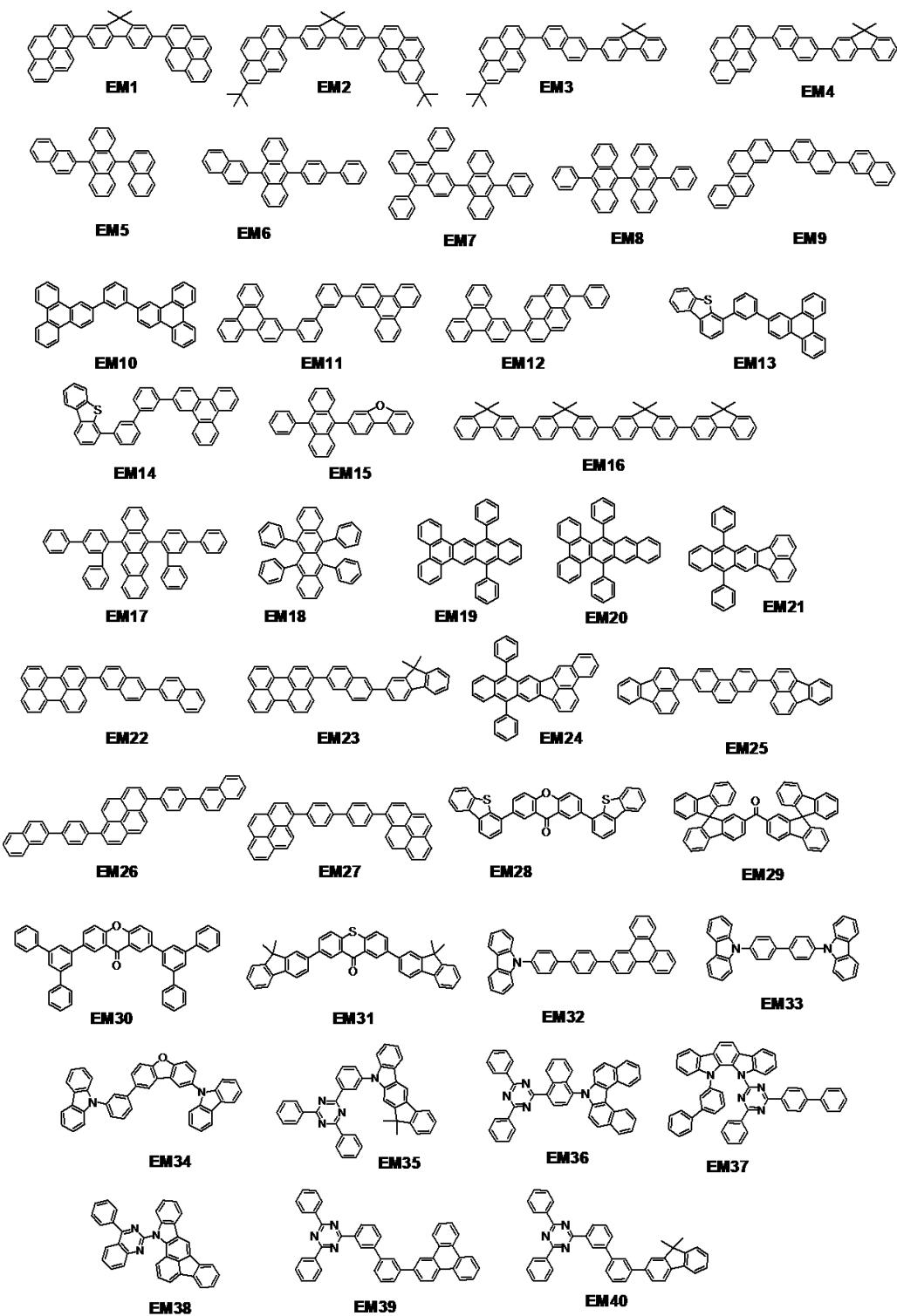
20

30

40

50

## 【化 2 0】



## 【0 1 1 3】

ホスト材料は炭化水素化合物である場合、本実施形態の化合物が電子や正孔をトラップしやすくなるため高効率化の効果が大きく好ましい。炭化水素化合物とは炭素と水素のみで構成される化合物であり、EM1乃至EM12及びEM16乃至EM27が相当する。

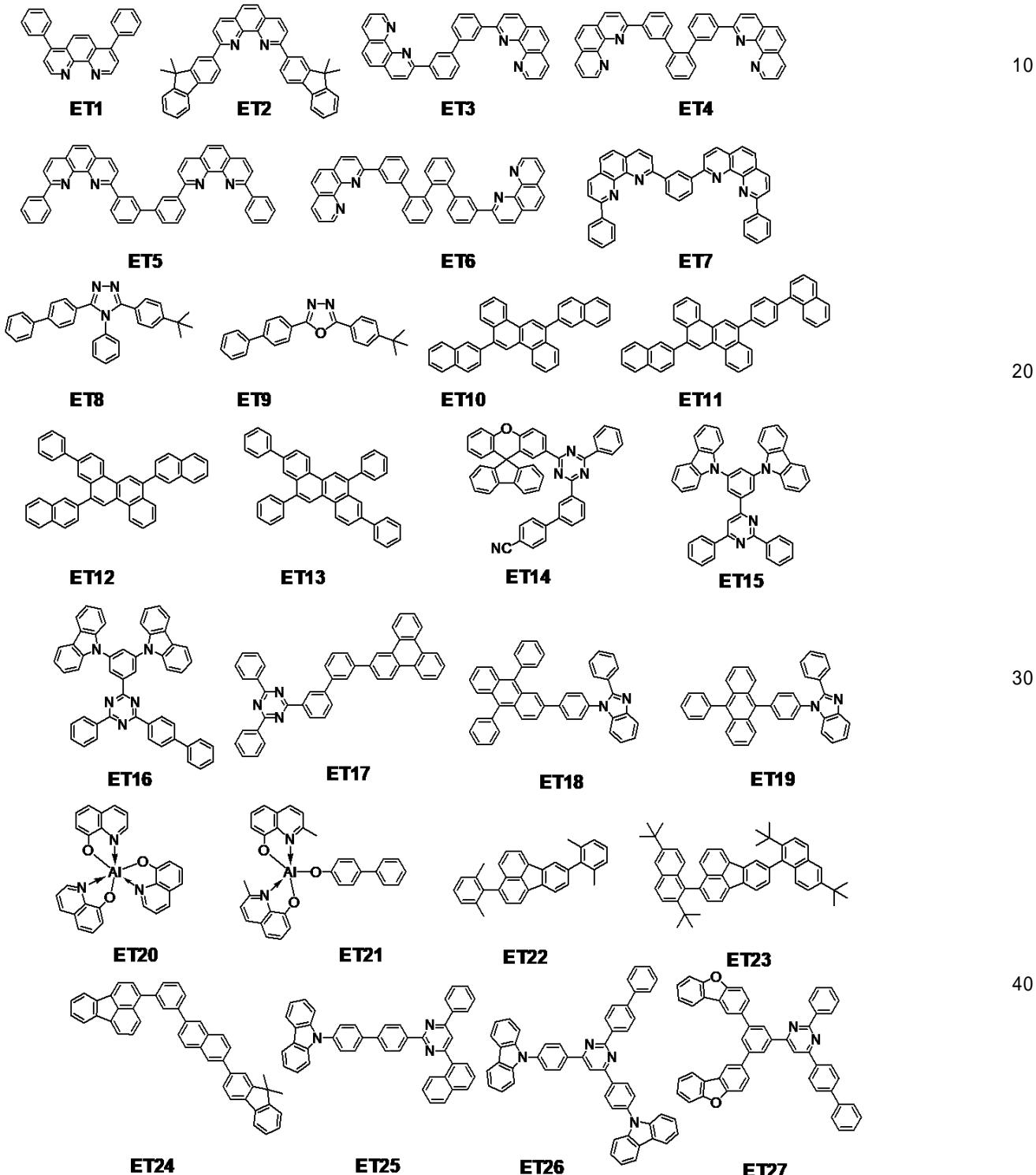
## 【0 1 1 4】

電子輸送性材料としては、陰極から注入された電子を発光層へ輸送することができるものから任意に選ぶことができ、ホール輸送性材料のホール移動度とのバランス等を考慮して選択される。電子輸送性能を有する材料としては、オキサジアゾール誘導体、オキサゾール誘導体、ピラジン誘導体、トリアゾール誘導体、トリアジン誘導体、キノリン誘導体

、キノキサリン誘導体、フェナントロリン誘導体、有機アルミニウム錯体、縮環化合物（例えばフルオレン誘導体、ナフタレン誘導体、クリセン誘導体、アントラセン誘導体等）が挙げられる。さらに上記の電子輸送性材料は、ホールブロッキング層にも好適に使用される。以下に、電子輸送性材料として用いられる化合物の具体例を示すが、もちろんこれらに限定されるものではない。

## 【0115】

## 【化21】



## 【0116】

電子注入性材料としては、陰極からの電子注入が容易に可能なものから任意に選ぶことができ、正孔注入性とのバランス等を考慮して選択される。有機化合物としてn型ドーパ

ント及び還元性ドーパントも含まれる。例えば、フッ化リチウム等のアルカリ金属を含む化合物、リチウムキノリノール等のリチウム錯体、ベンゾイミダゾリデン誘導体、イミダゾリデン誘導体、フルバレン誘導体、アクリジン誘導体があげられる。

#### 【0117】

<有機発光素子の構成>

有機発光素子は、基板の上に、陽極、有機化合物層、陰極を形成して設けられる。陰極の上には、保護層、カラーフィルタ等を設けてよい。カラーフィルタを設ける場合は、保護層との間に平坦化層を設けてよい。平坦化層はアクリル樹脂等で構成することができる。

#### 【0118】

[基板]

基板は、石英、ガラス、シリコンウエハ、樹脂、金属等が挙げられる。また、基板上には、トランジスタなどのスイッチング素子や配線を備え、その上に絶縁層を備えてもよい。絶縁層としては、陽極と配線の導通を確保するために、コンタクトホールを形成可能で、かつ接続しない配線との絶縁を確保できれば、材料は問わない。例えば、ポリイミド等の樹脂、酸化シリコン、窒化シリコンなどを用いることができる。

#### 【0119】

[電極]

電極は、一対の電極を用いることができる。一対の電極は、陽極と陰極であってよい。有機発光素子が発光する方向に電界を印加する場合に、電位が高い電極が陽極であり、他方が陰極である。また、発光層にホールを供給する電極が陽極であり、電子を供給する電極が陰極であるということもできる。

#### 【0120】

陽極の構成材料としては仕事関数がなるべく大きいものが良い。例えば、金、白金、銀、銅、ニッケル、パラジウム、コバルト、セレン、バナジウム、タンゲステン、等の金属単体やこれらを含む混合物、あるいはこれらを組み合わせた合金、酸化錫、酸化亜鉛、酸化インジウム、酸化錫インジウム(ITO)、酸化亜鉛インジウム等の金属酸化物が使用できる。またポリアニリン、ポリピロール、ポリチオフェン等の導電性ポリマーも使用できる。

#### 【0121】

これらの電極物質は一種類を単独で使用してもよいし、二種類以上を併用して使用してもよい。また、陽極は一層で構成されていてもよく、複数の層で構成されていてもよい。

#### 【0122】

反射電極として用いる場合には、例えばクロム、アルミニウム、銀、チタン、タンゲステン、モリブデン、又はこれらの合金、積層したものなどを用いることができる。また、透明電極として用いる場合には、酸化インジウム錫(ITO)、酸化インジウム亜鉛などの酸化物透明導電層などを用いることができるが、これらに限定されるものではない。電極の形成には、フォトリソグラフィ技術を用いることができる。

#### 【0123】

一方、陰極の構成材料としては仕事関数の小さなものがよい。例えばリチウム等のアルカリ金属、カルシウム等のアルカリ土類金属、アルミニウム、チタニウム、マンガン、銀、鉛、クロム等の金属単体またはこれらを含む混合物が挙げられる。あるいはこれら金属単体を組み合わせた合金も使用することができる。例えばマグネシウム-銀、アルミニウム-リチウム、アルミニウム-マグネシウム、銀-銅、亜鉛-銀等が使用できる。酸化錫インジウム(ITO)等の金属酸化物の利用も可能である。これらの電極物質は一種類を単独で使用してもよいし、二種類以上を併用して使用してもよい。また陰極は一層構成でもよく、多層構成でもよい。中でも銀を用いることが好ましく、銀の凝集を低減するため、銀合金とすることがさらに好ましい。銀の凝集が低減できれば、合金の比率は問わない。例えば、1:1であってよい。

#### 【0124】

陰極は、ITOなどの酸化物導電層を使用してトップエミッション素子としてもよいし

10

20

30

40

50

、アルミニウム（A1）などの反射電極を使用してボトムエミッショソ子としてもよいし、特に限定されない。陰極の形成方法としては、特に限定されないが、直流及び交流スパッタリング法などを用いると、膜のカバレッジがよく、抵抗を下げやすいためより好ましい。

#### 【0125】

##### [保護層]

陰極の上に、保護層を設けてもよい。例えば、陰極上に吸湿剤を設けたガラスを接着することで、有機化合物層に対する水等の浸入を抑え、表示不良の発生を抑えることができる。また、別の実施形態としては、陰極上に窒化ケイ素等のパッシベーション膜を設け、有機化合物層に対する水等の浸入を抑えてよい。例えば、陰極形成後に真空を破らずに別のチャンバーに搬送し、CVD法で厚さ $2\text{ }\mu\text{m}$ の窒化ケイ素膜を形成することで、保護層としてもよい。CVD法の成膜の後で原子堆積法（ALD法）を用いた保護層を設けてもよい。

10

#### 【0126】

##### [カラーフィルタ]

保護層の上にカラーフィルタを設けてもよい。例えば、有機発光素子のサイズを考慮したカラーフィルタを別の基板上に設け、それと有機発光素子を設けた基板と貼り合わせてもよいし、上記で示した保護層上にフォトリソグラフィ技術を用いて、カラーフィルタをパターニングしてもよい。カラーフィルタは、高分子で構成されてよい。

20

#### 【0127】

##### [平坦化層]

カラーフィルタと保護層との間に平坦化層を有してもよい。平坦化層は有機化合物で構成されてよく、低分子であっても、高分子であってもよいが、高分子であることが好ましい。

#### 【0128】

平坦化層は、カラーフィルタの上下に設けられてもよく、その構成材料は同じであっても異なってもよい。具体的には、ポリビニルカルバゾール樹脂、ポリカーボネート樹脂、ポリエステル樹脂、ABS樹脂、アクリル樹脂、ポリイミド樹脂、フェノール樹脂、エポキシ樹脂、シリコン樹脂、尿素樹脂等があげられる。

30

#### 【0129】

##### [対向基板]

平坦化層の上には、対向基板を有してもよい。対向基板は、前述の基板と対応する位置に設けられるため、対向基板と呼ばれる。対向基板の構成材料は、前述の基板と同じであってよい。

#### 【0130】

##### [有機層]

本発明の一実施形態に係る有機発光素子を構成する有機化合物層（正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、発光層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層等）は、以下に示す方法により形成される。

#### 【0131】

本発明の一実施形態に係る有機発光素子を構成する有機化合物層は、真空蒸着法、イオン化蒸着法、スパッタリング、プラズマ等のドライプロセスを用いることができる。またドライプロセスに代えて、適当な溶媒に溶解させて公知の塗布法（例えば、スピンドルティング、ディッピング、キャスト法、LB法、インクジェット法等）により層を形成するウェットプロセスを用いることもできる。

40

#### 【0132】

ここで真空蒸着法や溶液塗布法等によって層を形成すると、結晶化等が起こりにくく経時安定性に優れる。また塗布法で成膜する場合は、適当なバインダー樹脂と組み合わせて膜を形成することもできる。

#### 【0133】

50

上記バインダー樹脂としては、ポリビニルカルバゾール樹脂、ポリカーボネート樹脂、ポリエステル樹脂、A B S樹脂、アクリル樹脂、ポリイミド樹脂、フェノール樹脂、エポキシ樹脂、シリコン樹脂、尿素樹脂等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【0134】

また、これらバインダー樹脂は、ホモポリマー又は共重合体として一種類を単独で使用してもよいし、二種類以上を混合して使用してもよい。さらに必要に応じて、公知の可塑剤、酸化防止剤、紫外線吸収剤等の添加剤を併用してもよい。

【0135】

<本実施形態に係る有機発光素子の用途>

本発明の一実施形態に係る有機発光素子は、表示装置や照明装置の構成部材として用いることができる。他にも、電子写真方式の画像形成装置の露光光源や液晶表示装置のバックライト、白色光源にカラーフィルタを有する発光装置等の用途がある。

10

【0136】

表示装置は、エリアC C D、リニアC C D、メモリーカード等からの画像情報を入力する画像入力部を有し、入力された情報を処理する情報処理部を有し、入力された画像を表示部に表示する画像情報処理装置でもよい。表示装置は、複数の画素を有し、複数の画素の少なくとも一つが、本実施形態の有機発光素子と、有機発光素子に接続されたトランジスタと、を有してよい。

【0137】

また、撮像装置やインクジェットプリンタが有する表示部は、タッチパネル機能を有していてもよい。このタッチパネル機能の駆動方式は、赤外線方式でも、静電容量方式でも、抵抗膜方式であっても、電磁誘導方式であってもよく、特に限定されない。また表示装置はマルチファンクションプリンタの表示部に用いられてもよい。

20

【0138】

次に、図面を参照しながら本実施形態に係る表示装置について説明する。図1は、有機発光素子とこの有機発光素子に接続されるTFT素子とを有する表示装置の例を示す断面模式図である。TFT素子は、能動素子の一例である。

【0139】

図1の表示装置10は、ガラス等の基板11とその上部にTFT素子又は有機化合物層を保護するための防湿膜12が設けられている。また符号13は金属のゲート電極である。符号14はゲート絶縁膜であり、15は半導体層である。

30

【0140】

TFT素子18は、半導体層15とドレイン電極16とソース電極17とを有している。TFT素子18の上部には絶縁膜19が設けられている。コンタクトホール20を介して有機発光素子26を構成する陽極21とソース電極17とが接続されている。

【0141】

尚、有機発光素子26に含まれる電極（陽極21、陰極23）とTFT素子18に含まれる電極（ソース電極17、ドレイン電極16）との電気接続の方式は、図1に示される様に限られるものではない。つまり陽極21又は陰極23のうちいずれか一方とTFT素子18のソース電極17またはドレイン電極16のいずれか一方とが電気接続されればよい。

40

【0142】

図1の表示装置10では有機化合物層22を1つの層の如く図示をしているが、有機化合物層22は、複数層であってもよい。陰極23の上には有機発光素子26の劣化を低減するための第一の保護層24や第二の保護層25が設けられている。

【0143】

図1の表示装置10ではスイッチング素子としてトランジスタを使用しているが、これに代えてMIM素子をスイッチング素子として用いてもよい。

【0144】

また図1の表示装置10に使用されるトランジスタは、単結晶シリコンウエハを用いた

50

トランジスタに限らず、基板の絶縁性表面上に活性層を有する薄膜トランジスタでもよい。活性層として、単結晶シリコン、アモルファスシリコン、微結晶シリコンなどの非単結晶シリコン、インジウム亜鉛酸化物、インジウムガリウム亜鉛酸化物等の非単結晶酸化物半導体が挙げられる。尚、薄膜トランジスタは TFT 素子とも呼ばれる。

#### 【0145】

図1の表示装置10に含まれるトランジスタは、Si基板等の基板内に形成されていてもよい。ここで基板内に形成されることは、Si基板等の基板自体を加工してトランジスタを作製することを意味する。つまり、基板内にトランジスタを有することは、基板とトランジスタとが一体に形成されていると見ることもできる。

#### 【0146】

本実施形態に係る有機発光素子はスイッチング素子の一例であるTFTにより発光輝度が制御され、有機発光素子を複数面内に設けることでそれぞれの発光輝度により画像を表示することができる。尚、本実施形態に係るスイッチング素子は、TFTに限られず、低温ポリシリコンで形成されているトランジスタ、Si基板等の基板上に形成されたアクティブラチマトリクスドライバーであってもよい。基板上とは、その基板内ということもできる。基板内にトランジスタを設けるか、TFTを用いるかは、表示部の大きさによって選択され、例えば0.5インチ程度の大きさであれば、Si基板上に有機発光素子を設けることが好ましい。

#### 【0147】

図2は、本実施形態に係る表示装置の一例を表す模式図である。表示装置1000は、上部カバー1001と、下部カバー1009と、の間に、タッチパネル1003、表示パネル1005、フレーム1006、回路基板1007、バッテリー1008、を有してよい。タッチパネル1003および表示パネル1005は、フレキシブルプリント回路FPC1002、1004が接続されている。回路基板1007には、トランジスタがプリントされている。バッテリー1008は、表示装置が携帯機器でなければ、設けなくてもよいし、携帯機器であっても、別の位置に設けてよい。

#### 【0148】

本実施形態に係る表示装置は、複数のレンズを有する光学部と、当該光学部を通過した光を受光する撮像素子とを有する撮像装置等の光電変換装置の表示部に用いられてよい。撮像装置は、撮像素子が取得した情報を表示する表示部を有してよい。また、表示部は、撮像装置の外部に露出した表示部であっても、ファインダ内に配置された表示部であってよい。撮像装置は、デジタルカメラ、デジタルビデオカメラであってよい。

#### 【0149】

図3(a)は、本実施形態に係る撮像装置の一例を表す模式図である。撮像装置1100は、ビューファインダ1101、背面ディスプレイ1102、操作部1103、筐体1104を有してよい。ビューファインダ1101は、本実施形態に係る表示装置を有してよい。その場合、表示装置は、撮像する画像のみならず、環境情報、撮像指示等を表示してよい。環境情報には、外光の強度、外光の向き、被写体の動く速度、被写体が遮蔽物に遮蔽される可能性等であってよい。

#### 【0150】

撮像に好適なタイミングはわずかな時間なので、少しでも早く情報を表示した方がよい。したがって、本実施形態の有機発光素子を用いた表示装置を用いるのが好ましい。有機発光素子は応答速度が速いからである。有機発光素子を用いた表示装置は、表示速度が求められる、これらの装置、液晶表示装置よりも好適に用いることができる。

#### 【0151】

撮像装置1100は、不図示の光学部を有する。光学部は複数のレンズを有し、筐体1104内に収容されている撮像素子に結像する。複数のレンズは、その相対位置を調整することで、焦点を調整することができる。この操作を自動で行うこともできる。

#### 【0152】

本実施形態に係る表示装置は、赤色、緑色、青色を有するカラーフィルタを有してよい

10

20

30

40

50

。カラーフィルタは、当該赤色、緑色、青色がデルタ配列で配置されてよい。

#### 【0153】

本実施形態に係る表示装置は、携帯端末等の電子機器の表示部に用いられてもよい。その際には、表示機能と操作機能との双方を有してもよい。携帯端末としては、スマートフォン等の携帯電話、タブレット、ヘッドマウントディスプレイ等が挙げられる。

#### 【0154】

図3(b)は、本実施形態に係る電子機器の一例を表す模式図である。電子機器1200は、表示部1201と、操作部1202と、筐体1203を有する。筐体1203には、回路、当該回路を有するプリント基板、バッテリー、通信部、を有してよい。操作部1202は、ボタンであってもよいし、タッチパネル方式の反応部であってもよい。操作部は、指紋を認識してロックの解除等を行う、生体認識部であってもよい。通信部を有する電子機器は通信機器ということもできる。

10

#### 【0155】

図4は、本実施形態に係る表示装置の一例を表す模式図である。図4(a)は、テレビモニタやPCモニタ等の表示装置である。表示装置1300は、額縁1301を有し表示部1302を有する。表示部1302には、本実施形態に係る発光装置が用いられてよい。額縁1301と、表示部1302を支える土台1303を有している。土台1303は、図4(a)の形態に限られない。額縁1301の下辺が土台を兼ねてもよい。また、額縁1301および表示部1302は、曲がっていてもよい。その曲率半径は、5000mm以上6000mm以下であってよい。

20

#### 【0156】

図4(b)は本実施形態に係る表示装置の他の例を表す模式図である。図4(b)の表示装置1310は、折り曲げ可能に構成されており、いわゆるフォルダブルな表示装置である。表示装置1310は、第一表示部1311、第二表示部1312、筐体1313、屈曲点1314を有する。第一表示部1311と第二表示部1312とは、本実施形態に係る発光装置を有してよい。第一表示部1311と第二表示部1312とは、つなぎ目のない1枚の表示装置であってよい。第一表示部1311と第二表示部1312とは、屈曲点で分けることができる。第一表示部1311、第二表示部1312は、それぞれ異なる画像を表示してもよいし、第一および第二表示部とで一つの画像を表示してもよい。

30

#### 【0157】

図5(a)は、本実施形態に係る照明装置の一例を表す模式図である。照明装置1400は、筐体1401と、光源1402と、回路基板1403と、光源1402が発する光を透過する光学フィルタ1404と光拡散部1405と、を有してよい。光源1402は、本実施形態に係る有機発光素子を有してよい。光学フィルタ1404は光源の演色性を向上させるフィルタであってよい。光拡散部1405は、ライトアップ等、光源の光を効果的に拡散し、広い範囲に光を届けることができる。光学フィルタ1404、光拡散部1405は、照明の光出射側に設けられてよい。必要に応じて、最外部にカバーを設けてよい。

#### 【0158】

照明装置は例えば室内を照明する装置である。照明装置は白色、昼白色、その他青から赤のいずれの色を発光するものであってよい。それらを調光する調光回路を有してよい。照明装置は本実施形態の有機発光素子とそれに接続される電源回路を有してよい。電源回路は、交流電圧を直流電圧に変換する回路である。また、白とは色温度が4200Kで昼白色とは色温度が5000Kである。照明装置はカラーフィルタを有してもよい。

40

#### 【0159】

また、本実施形態に係る照明装置は、放熱部を有していてもよい。放熱部は装置内の熱を装置外へ放出するものであり、比熱の高い金属、液体シリコン等が挙げられる。

#### 【0160】

図5(b)は、本実施形態に係る移動体の一例である自動車の模式図である。当該自動車は灯具の一例であるテールランプを有する。自動車1500は、テールランプ1501

50

を有し、ブレーキ操作等を行った際に、テールランプを点灯する形態であってよい。

**【0161】**

テールランプ 1501 は、本実施形態に係る有機発光素子を有してよい。テールランプ 1501 は、有機発光素子を保護する保護部材を有してよい。保護部材はある程度高い強度を有し、透明であれば材料は問わないが、ポリカーボネート等で構成されることが好ましい。ポリカーボネートにフランジカルボン酸誘導体、アクリロニトリル誘導体等を混ぜてよい。

**【0162】**

自動車 1500 は、車体 1503 、それに取り付けられている窓 1502 を有してよい。窓 1502 は、自動車の前後を確認するための窓でなければ、透明なディスプレイであってもよい。当該透明なディスプレイは、本実施形態に係る有機発光素子を有してよい。この場合、有機発光素子が有する電極等の構成材料は透明な部材で構成される。

10

**【0163】**

本実施形態に係る移動体は、船舶、航空機、ドローン等であってよい。移動体は、機体と当該機体に設けられた灯具を有してよい。灯具は、機体の位置を知らせるための発光をしてよい。灯具は本実施形態に係る有機発光素子を有する。

**【0164】**

図 6 は、本実施形態に係る画像形成装置の一例を表す模式図である。画像形成装置 40 は電子写真方式の画像形成装置であり、感光体 27 、露光光源 28 、帯電部 30 、現像部 31 、転写器 32 、搬送ローラー 33 、定着器 35 を有する。露光光源 28 から光 29 が発せられ、感光体 27 の表面に静電潜像が形成される。この露光光源 28 が本実施形態に係る有機発光素子を有する。現像部 31 はトナー等を有する。帯電部 30 は感光体 27 を帯電させる。転写器 32 は現像された画像を記録媒体 34 に転写する。搬送ローラー 33 は記録媒体 34 を搬送する。記録媒体 34 は例えば紙である。定着器 35 は記録媒体 34 に形成された画像を定着させる。

20

**【0165】**

図 7 (a) および図 7 (b) は、露光光源 28 を示す図であり、発光部 36 が長尺状の基板に複数配置されている様子を示す模式図である。矢印 37 は有機発光素子が配列されている列方向を表わす。この列方向は、感光体 27 が回転する軸の方向と同じである。この方向は感光体 27 の長軸方向と呼ぶこともできる。図 7 (a) は発光部 36 を感光体 27 の長軸方向に沿って配置した形態である。図 7 (b) は、図 7 (a) とは異なる形態であり、第一の列と第二の列のそれぞれにおいて発光部 36 が列方向に交互に配置されている形態である。第一の列と第二の列は行方向に異なる位置に配置されている。第一の列は、複数の発光部 36 が間隔をあけて配置されている。第二の列は、第一の列の発光部 36 同士の間隔に対応する位置に発光部 36 を有する。すなわち、行方向にも、複数の発光部 36 が間隔をあけて配置されている。図 7 (b) の配置は、たとえば格子状に配置されている状態、千鳥格子に配置されている状態、あるいは市松模様と言い換えることもできる。

30

**【0166】**

以上説明した通り、本実施形態に係る有機発光素子を用いた装置を用いることにより、良好な画質で、長時間表示にも安定な表示が可能になる。

40

**【実施例】**

**【0167】**

以下、実施例により本発明を説明する。ただし本発明はこれらに限定されるものではない。

**【0168】**

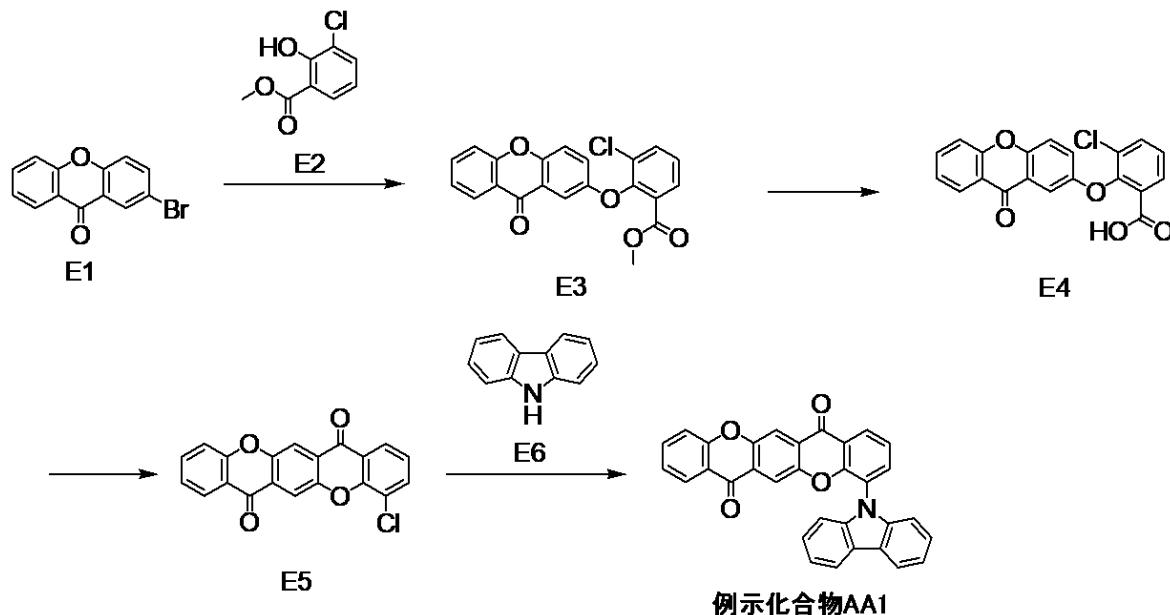
<実施例 1 (例示化合物 AA1 の合成)>

以下のスキームに従い、例示化合物 AA1 を合成した。

**【0169】**

50

## 【化22】



## 【0170】

## (1) 化合物E3の合成

500m1のナスフラスコに、以下に示す試薬、溶媒を仕込んだ。

化合物E1 : 5.0g (18.2mmol)

化合物E2 : 3.4g (18.2mmol)

炭酸カリウム : 5.0g (36.4mmol)

DMSO : 200m1

次に、反応溶液を、窒素気流下、120°で12時間加熱攪拌後した。酢酸エチルで抽出し、有機層を濃縮乾固し、固体を得た。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（トルエン：酢酸エチル混合）にて精製し、E3を3.1g（収率：45%）得た。

## 【0171】

## (2) 化合物E4の合成

300m1のナスフラスコに、以下に示す試薬、溶媒を仕込んだ。

化合物E3 : 3.0g (7.9mmol)

塩化メチレン : 150m1

次に、反応溶液を、窒素気流下、0°で三臭化ホウ素（1M、ジクロロメタン溶液）を15m1滴下した。滴下後、反応液を室温下、8時間攪拌した。反応液を氷水にあけ、トルエンで抽出し、有機層を濃縮乾固し、固体を得た。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（トルエン：酢酸エチル混合）にて精製し、E4を2.4g（収率：82%）得た。

## 【0172】

## (3) 化合物E5の合成

100m1のナスフラスコに、以下に示す試薬、溶媒を仕込んだ。

化合物E4 : 2.3g (6.30mmol)

硫酸 : 30m1

次に、反応溶液を、窒素気流下、100°で7時間攪拌した。反応終了後、反応液を氷水にあけ濾過した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（クロロベンゼン：酢酸エチル混合）にて精製し、E5を0.8g（収率：38%）得た。

## 【0173】

## (4) 例示化合物AA1の合成

500m1のナスフラスコに、以下に示す試薬、溶媒を仕込んだ。

化合物E5 : 0.8g (2.29mmol)

10

20

30

40

50

化合物 E 6 : 0 . 5 g ( 2 . 7 5 m m o l )  
 ナトリウムターシャリブトキシド : 0 . 4 g ( 4 . 5 8 m m o l )  
 P d ( d b a )<sub>2</sub> : 1 3 2 m g ( 0 . 2 3 m m o l )  
 x p h o s : 3 2 9 m g ( 0 . 6 9 m m o l )  
 オルトキシレン : 4 0 m l

次に、反応溶液を、窒素気流下、140°で5時間加熱攪拌した。反応終了後、セライ  
 トろ過を行い、濃縮乾固した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(ク  
 ロロベンゼン:酢酸エチル混合)にて精製し、淡黄固体 AA 1 を 0 . 7 8 g ( 収率 : 7 1  
 % ) 得た。

## 【 0 1 7 4 】

例示化合物 AA 1 について、M A L D I - T O F - M S ( B r u k e r 社製 A u t o f  
 l e x L R F ) を用いて質量分析を行った。

## [ M A L D I - T O F - M S ]

実測値 : m / z = 4 7 9 計算値 : C<sub>32</sub>H<sub>17</sub>N<sub>1</sub>O<sub>4</sub> = 4 7 9

## 【 0 1 7 5 】

< 実施例 2 至及 3 1 ( 例示化合物の合成 ) >

表 4 乃至 6 に示す様に、実施例 2 乃至 3 1 に示す例示化合物について、実施例 1 の原料  
 E 1 を原料 1 、原料 E 2 を原料 2 、 E 6 を原料 3 に変えた他は実施例 1 と同様にして例示  
 化合物を合成した。また、実施例 1 と同様にして測定した質量分析結果の実測値 ( m / z  
 ) を示す。

## 【 0 1 7 6 】

10

20

30

40

50

【表4】

実施例	例示化合物	原料1	原料2	原料3	m/z
2	AA2				482
3	AA8				592
4	AA12				522
5	AA14				495
6	AA16				570
7	AA22				505
8	AA23				536
9	AA25				496
10	AB1				479
11	AB6				522
12	AB13				496

【0177】

【表 5】

実施例	例示化合物	原料1	原料2	原料3	m/z
13	AC1				479
14	AC2				482
15	AC5				522
16	AC6				512
17	AD1				479
18	BA1				479
19	BA2				482
20	BA6				634
21	BA12				522
22	BA14				495
23	BA25				496

【0178】

10

20

30

40

50

【表 6】

実施例	例示化合物	原料 1	原料 2	原料 3	m/z
24	BB1				479
25	BB6				522
26	BC1				479
27	BC5				522
28	BC6				495
29	BC13				496
30	BD1				479
31	DC1				645

## 【0179】

## &lt;実施例 32&gt;

本実施例では、基板上に、陽極、正孔注入層、正孔輸送層、電子ブロッキング層、発光層、正孔ブロッキング層、電子輸送層、電子注入層、陰極が順次形成されたボトムエミッション型構造の有機EL素子を作製した。

## 【0180】

先ずガラス基板上にITOを成膜し、所望のパターニング加工を施すことによりITO電極（陽極）を形成した。この時、ITO電極の膜厚を100nmとした。このようにITO電極が形成された基板をITO基板として、以下の工程で使用した。次に、真空チャンバー内における抵抗加熱による真空蒸着を行って、上記ITO基板上に、表7に示す有機化合物層及び電極層を連続成膜した。尚、この時、対向する電極（金属電極層、陰極）の電極面積が3mm<sup>2</sup>となるようにした。

## 【0181】

10

20

30

40

【表 7】

	材料		膜厚 (nm)
陰極	A 1		1 0 0
電子注入層 (E I L)	L i F		1
電子輸送層 (E T L)	E T 2		1 5
正孔プロッキング層 (H B L)	E T 1 1		1 5
発光層 (EML)	ホスト	発光材料	2 0
	E M 1 4	A A 1	
発光層 比率%	8 8	1 2	
電子プロッキング層 (E B L)	H T 1 2		1 5
正孔輸送層 (H T L)	H T 3		3 0
正孔注入層 (H I L)	H T 1 6		5

## 【0182】

得られた素子について、素子の特性を測定・評価した。発光に関する初期特性として最大外部量子効率 (E . Q . E .) が 6 . 1 % の緑色発光を得られた。測定装置は、具体的には電流電圧特性をヒューレットパッカード社製・微小電流計 4140B で測定し、発光輝度は、トプコン社製 BM7 で測定した。さらに、電流密度 5 0 m A / c m<sup>2</sup>での連続駆動試験を行い、輝度劣化率が 5 % に達した時の時間 (L T 9 5 ) を測定したところ、9 6 時間であった。

## 【0183】

<実施例 3 3 乃至 3 7 >

実施例 3 2 において、表 8 に示される化合物に適宜変更する以外は、実施例 3 2 と同様の方法により有機発光素子を作製した。得られた素子について実施例 3 2 と同様に素子の特性を測定・評価した。測定の結果を表 8 示す。

## 【0184】

10

20

30

40

50

【表 8】

	HTL	EBL	EML		HBL	ETL	E.Q. E [%]	LT95 [h]	発光 色
			ホスト	発光 材料					
実施例33	HT3	HT12	EM14	AA2	ET10	ET2	6.3	95	黄
実施例34	HT3	HT9	EM11	AB6	ET12	ET2	4.8	92	緑
実施例35	HT3	HT12	EM9	AC5	ET12	ET2	4.9	110	黄
実施例36	HT2	HT11	EM6	AD1	ET22	ET2	5.0	82	赤
実施例37	HT2	HT10	EM10	BA6	ET12	ET5	6.4	99	緑

## 【0185】

&lt;実施例38&gt;

表9に示す有機化合物層及び電極層を連続成膜した以外は、実施例32と同様の方法により有機発光素子を作製した。

## 【0186】

【表9】

	材料			膜厚 (nm)
陰極	A 1			1 0 0
電子注入層 (E I L)	L i F			1
電子輸送層 (E T L)	E T 2			1 5
正孔ブロッキング層 (H B L)	E T 1 1			1 5
発光層 (E M L)	ホスト	アシスト 材料	発光材料	2 0
	EM11	AA8	R D 1	
発光層 比率%	8 2	1 5	3	
電子ブロッキング層 (E B L)	H T 1 2			1 5
正孔輸送層 (H T L)	H T 3			3 0
正孔注入層 (H I L)	H T 1 6			5

## 【0187】

10

20

30

40

50

得られた素子について、実施例32と同様に素子の特性を測定・評価した。発光に関する初期特性として、最大外部量子効率（E.Q.E.）は7.5%の赤色発光を得られた。さらに、電流密度50mA/cm<sup>2</sup>での連続駆動試験を行い、輝度劣化率が5%に達した時の時間（LT95）を測定したところ、168時間であった。

【0188】

＜実施例39乃至53、比較例1乃至3＞

実施例38において、表10に示される化合物に適宜変更する以外は、実施例38と同様の方法により有機発光素子を作製した。得られた素子について実施例38と同様に素子の特性を測定・評価した。測定の結果を表10示す。

【0189】

【表10】

	HTL	EBL	EML			HBL	ETL	E.Q. E [%]	LT95 [h]	発光 色
			本ト	アシスト	発光 材料					
実施例39	HT3	HT12	EM11	AA12	RD1	ET12	ET2	7.4	160	赤
実施例40	HT3	HT11	EM11	AA14	RD1	ET12	ET2	7.1	165	赤
実施例41	HT3	HT12	EM10	AA25	RD2	ET12	ET2	7.0	159	赤
実施例42	HT2	HT11	EM9	AB6	GD6	ET12	ET2	5.5	143	緑
実施例43	HT2	HT10	EM10	AC5	RD1	ET16	ET5	6.2	189	赤
実施例44	HT3	HT11	EM14	AC6	RD1	ET12	ET2	6.0	192	赤
実施例45	HT3	HT12	EM11	AD1	RD1	ET11	ET2	6.3	150	赤
実施例46	HT3	HT11	EM14	BA1	GD1	ET12	ET2	7.9	162	緑
実施例47	HT3	HT12	EM14	BA6	GD6	ET11	ET2	8.0	170	緑
実施例48	HT2	HT11	EM11	BA12	GD9	ET16	ET7	7.9	169	緑
実施例49	HT2	HT12	EM11	BB1	GD6	ET12	ET2	5.4	145	緑
実施例50	HT3	HT10	EM9	BB6	GD6	ET12	ET2	5.6	141	緑
実施例51	HT2	HT12	EM14	BC1	GD6	ET11	ET5	6.4	188	緑
実施例52	HT3	HT10	EM9	BC6	GD1	ET12	ET2	6.2	180	緑
実施例53	HT2	HT12	EM14	BD1	GD6	ET11	ET5	6.1	151	緑
比較例1	HT3	HT11	EM14	比較 化合物 1-a	GD9	ET12	ET2	1.9	30	緑
比較例2	HT3	HT11	EM14	比較 化合物 1-b	GD9	ET12	ET2	2.1	35	緑
比較例3	HT3	HT11	EM14	比較 化合物 2-a	RD2	ET12	ET2	2.3	15	赤

【0190】

10

20

30

40

50

表10より、比較例1及び2の最大外部量子効率(E.Q.E.)は1.9及び2.1%と低い。また、5%劣化寿命(LT95)は30時間及び35時間であり、耐久特性が悪かった。効率が低い要因は、S<sub>1</sub>とT<sub>1</sub>の差が大きいことにより、遅延蛍光による発光成分がないことによる。加えて、分子アスペクト比が大きいため、分子会合による濃度消光によるものと推察される。また、耐久悪化の要因は、分子アスペクト比が大きいため、分子会合が生じやすく、膜性が悪く、結晶化しやすい化合物であるためと考えられる。

#### 【0191】

また、比較例3の最大外部量子効率(E.Q.E.)は2.3%と低い。また、5%劣化寿命(LT95)は15時間であり、耐久特性が悪かった。効率が低い要因は、S<sub>1</sub>とT<sub>1</sub>の差が大きいことにより、遅延蛍光による発光成分がないことによる。

10

#### 【0192】

一方、本実施形態の化合物を用いた素子は、高効率と良好な耐久特性を示した。本実施形態の化合物は、基本骨格としてカルボニル基を2個有する縮合環を有し、これにアミノ基を有する。そのため、S<sub>1</sub>とT<sub>1</sub>のエネルギーギャップが小さく、かつ、分子アスペクト比が小さいため、濃度消光を低減することができ、遅延蛍光による発光により高効率発光を示したと考えられる。また、平面性の高い基本骨格に、分子平面性を低下させるアミノ基を有する。そのため、分子アスペクト比が小さくなりアモルファス性の高い膜となることで、良好な耐久特性を示したと考えられる。

#### 【符号の説明】

#### 【0193】

10：表示装置、11：基板、12：防湿膜、13：ゲート電極、14：ゲート絶縁膜、15：半導体層、16：ドレイン電極、17：ソース電極、18：TFT素子、19：絶縁膜、20：コンタクトホール、21：陽極、22：有機化合物層、23：陰極、24：第一の保護層、25：第二の保護層、26：有機発光素子

20

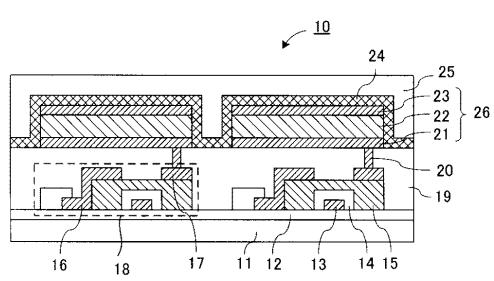
30

40

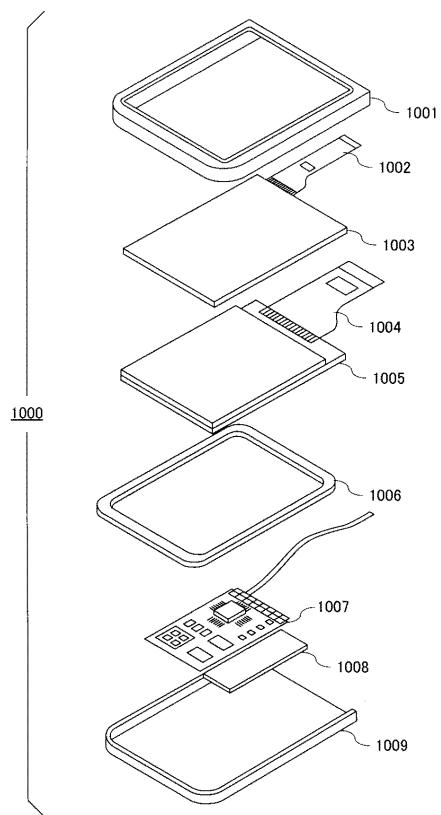
50

【図面】

【図1】



【図2】



10

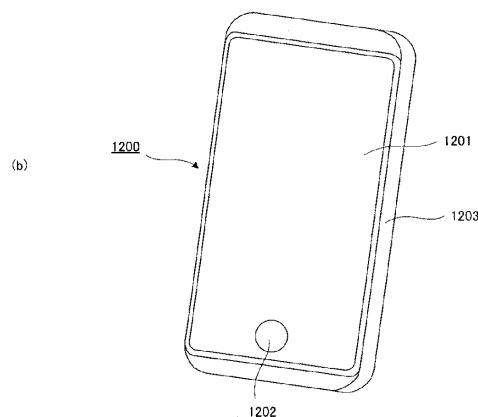
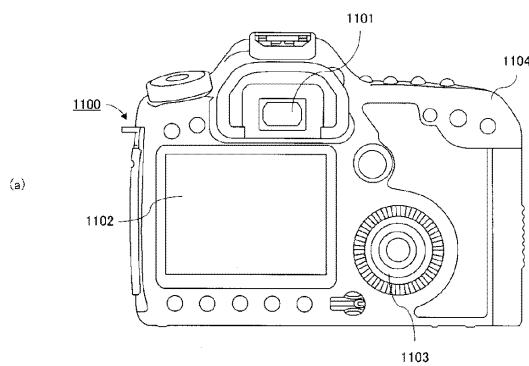
20

30

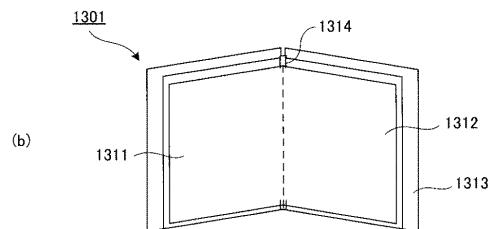
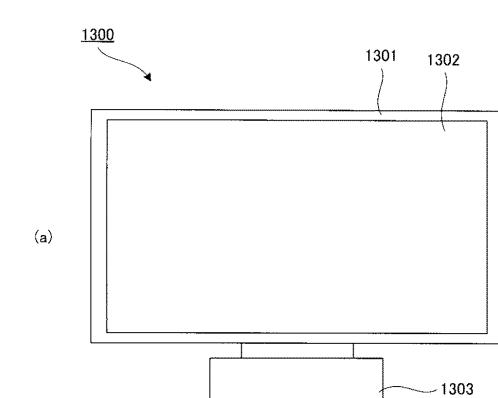
40

50

【図3】



【図4】



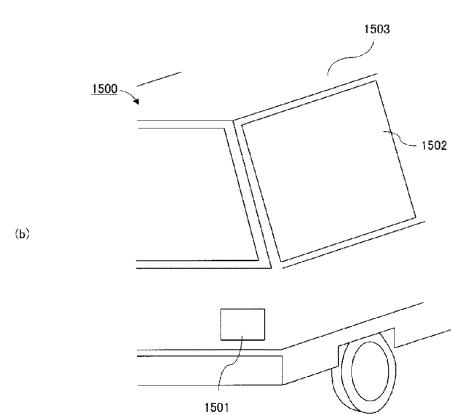
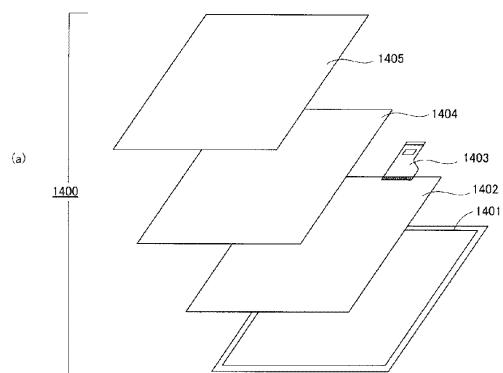
10

20

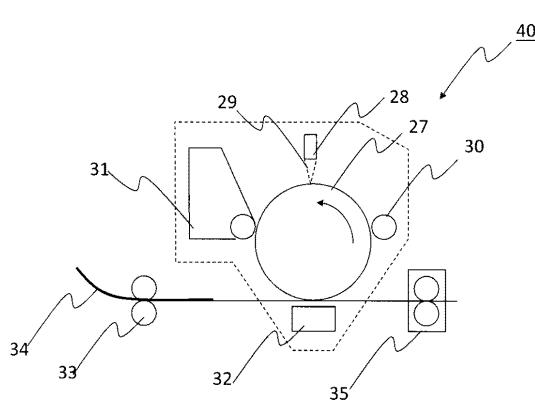
30

40

【図5】



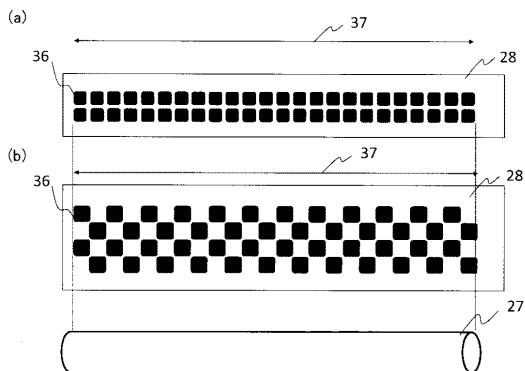
【図6】



50

50

【図 7】



10

20

30

40

50

---

フロントページの続き

キヤノン株式会社内

(72)発明者 鎌谷 淳

東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤノン株式会社内

審査官 宮田 透

(56)参考文献 特開2018-145109 (JP, A)

特開2001-043975 (JP, A)

特開平11-087057 (JP, A)

特開平11-054279 (JP, A)

米国特許第03082215 (US, A)

米国特許出願公開第2020/0044159 (US, A1)

Martani, Alfio, Some derivatives of linear dithioxanthones, Annali di Chimica (Rome, Italy)  
, 1958年, 48, 643-649

(58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)

C07D、H05B、H10K、C09K

C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)