

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第5484690号  
(P5484690)

(45) 発行日 平成26年5月7日 (2014.5.7)

(24) 登録日 平成26年2月28日 (2014.2.28)

(51) Int. Cl.

F I

H O 1 L 51/50 (2006.01)

C O 9 K 11/06 (2006.01)

C O 7 D 209/86 (2006.01)

H O 5 B 33/14 B

C O 9 K 11/06 6 9 0

C O 9 K 11/06 6 6 0

C O 7 D 209/86

H O 5 B 33/22 B

請求項の数 8 (全 66 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2008-126130 (P2008-126130)  
 (22) 出願日 平成20年5月13日 (2008.5.13)  
 (65) 公開番号 特開2009-277790 (P2009-277790A)  
 (43) 公開日 平成21年11月26日 (2009.11.26)  
 審査請求日 平成23年3月23日 (2011.3.23)  
 (31) 優先権主張番号 特願2007-133112 (P2007-133112)  
 (32) 優先日 平成19年5月18日 (2007.5.18)  
 (33) 優先権主張国 日本国 (JP)  
 (31) 優先権主張番号 特願2008-105096 (P2008-105096)  
 (32) 優先日 平成20年4月14日 (2008.4.14)  
 (33) 優先権主張国 日本国 (JP)

(73) 特許権者 512253626  
 ユー・ディー・シー アイルランド リミ  
 テッド  
 アイルランド ダブリン 4 ボールスブ  
 リッジ ザ スウィープステークス アレ  
 クサンドラ ハウス  
 (74) 代理人 100107515  
 弁理士 廣田 浩一  
 (74) 代理人 100107733  
 弁理士 流 良広  
 (74) 代理人 100115347  
 弁理士 松田 奈緒子  
 (72) 発明者 武田 玲  
 神奈川県足柄上郡開成町牛島577番地  
 富士フイルム株式会社内  
 最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機電界発光素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

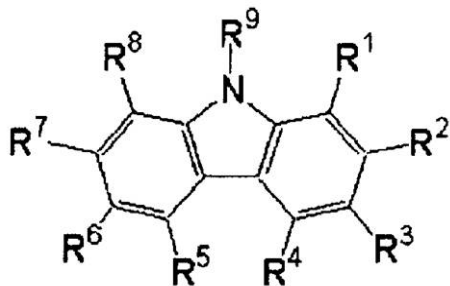
一対の電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、

前記有機層のいずれかに下記一般式 (I) で表される化合物の少なくとも一種を含有し

、  
 前記発光層が、下記一般式 (VI) で表されるイリジウム錯体系燐光発光材料の少なくとも一種を含有することを特徴とする有機電界発光素子。

一般式 (I)

【化 1】

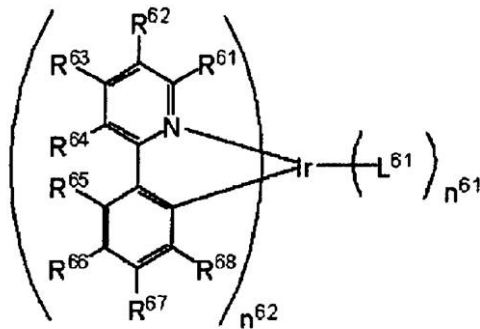


(一般式 (I) 中、 $R^1 \sim R^8$  は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $R^1 \sim R^8$  は隣接する置換基どうしで縮合環を形成してもよい。 $R^9$  はアルキル基、アルケニル

基、アリール基、ヘテロアリール基、またはシリル基を表し、それぞれ置換基で置換されていてもよい。 $R^1 \sim R^9$ の少なくともひとつは重水素原子、もしくは重水素原子を含む置換基である。)

一般式 (V I)

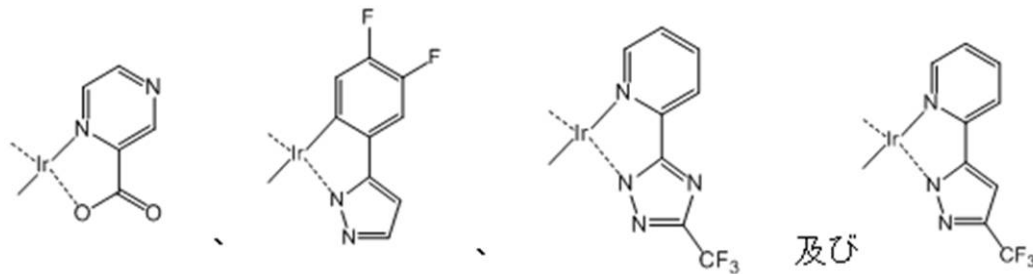
【化 2】



10

(一般式 (V I) 中、 $R^{61} \sim R^{68}$  は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $L^{61}$  は下記から選択される 2 価の配位子を表し、 $n^{62}$  は 1 ~ 2 の整数を表し、 $n^{61}$  は 1 ~ 4 の整数を表す。)

【化 3】



20

【請求項 2】

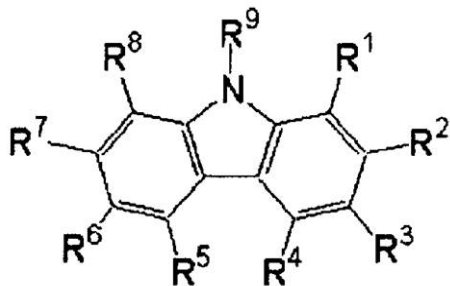
一对の電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、

前記有機層のいずれかに下記一般式 (I) で表される化合物の少なくとも一種を含有し

前記発光層が下記一般式 (IV) で表されるピラゾール骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体系燐光発光材料の少なくとも一種を含有することを特徴とする有機電界発光素子。

一般式 (I)

【化 4】



40

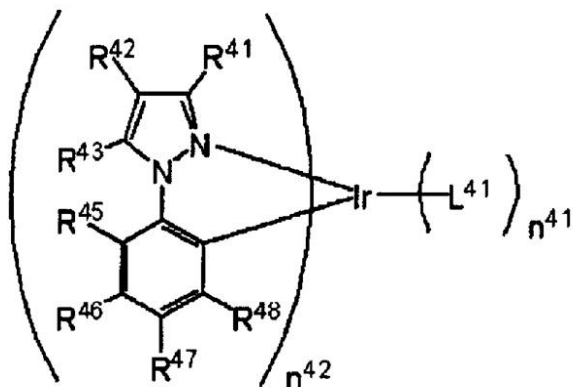
(一般式 (I) 中、 $R^1 \sim R^8$  は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $R^1 \sim R^8$  は隣接する置換基どうしで縮合環を形成してもよい。 $R^9$  はアルキル基、アルケニル基、アリール基、ヘテロアリール基、またはシリル基を表し、それぞれ置換基で置換され

50

ていてもよい。 $R^1 \sim R^9$ の少なくともひとつは重水素原子、もしくは重水素原子を含む置換基である。)

一般式 (I V)

【化 5】



10

(一般式 (I V) 中、 $R^{41} \sim R^{43}$  及び  $R^{45} \sim R^{48}$  は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $L^{41}$  は配位子を表し、 $n^{42}$  は 1 ~ 3 の整数を表し、 $n^{41}$  は 0 ~ 4 の整数を表す。ただし、 $n^{42}$  が 3 及び  $n^{41}$  が 0 のとき、 $R^{41} \sim R^{43}$  及び  $R^{45} \sim R^{48}$  の少なくとも 1 つがフェニル基であり、かつ、 $n^{42}$  が 1 または 2 の整数及び  $n^{41}$  が 1 ~ 4 の整数のとき、 $L^{41}$  は、ピラゾール骨格、トリアゾール骨格、またはピリジン骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する 2 価の配位子を表す。)

20

【請求項 3】

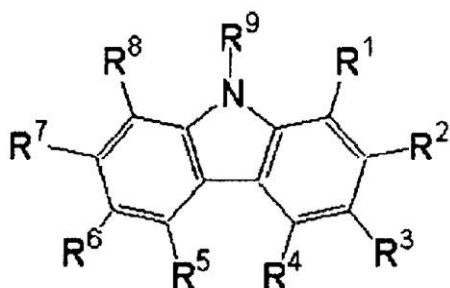
一対の電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、

前記有機層のいずれかに下記一般式 (I) で表される化合物の少なくとも一種を含有し

、  
前記発光層が下記一般式 (V) で表されるピラゾール骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体系発光材料の少なくとも一種を含有することを特徴とする有機電界発光素子。

一般式 (I)

【化 6】

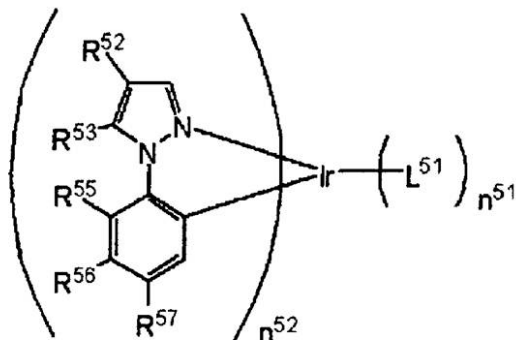


(一般式 (I) 中、 $R^1 \sim R^8$  は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $R^1 \sim R^8$  は隣接する置換基どうしで縮合環を形成してもよい。 $R^9$  はアルキル基、アルケニル基、アリール基、ヘテロアリール基、またはシリル基を表し、それぞれ置換基で置換されていてもよい。 $R^1 \sim R^9$ の少なくともひとつは重水素原子、もしくは重水素原子を含む置換基である。)

40

一般式 (V)

## 【化 7】



10

(一般式 (V) 中、 $R^{52} \sim R^{53}$  は各々独立して、水素原子、アルキル基、またはアリール基を表し、 $R^{55} \sim R^{57}$  は各々独立して、水素原子、フッ素原子、アルキル基、またはシアノ基を表す。また、 $R^{55}$  と  $R^{56}$ 、もしくは、 $R^{56}$  と  $R^{57}$  は互いに結合した縮環構造である。 $L^{51}$  は配位子を表し、 $n^{52}$  は 1 ~ 3 の整数を表し、 $n^{51}$  は 0 ~ 4 の整数を表す。)

## 【請求項 4】

一対の電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、

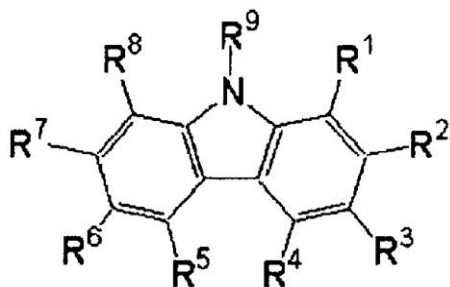
前記有機層のいずれかに下記一般式 (I) で表される化合物の少なくとも一種を含有し

20

、  
前記発光層が下記一般式 (II) で表されるカルベンでイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体系燐光発光材料の少なくとも一種を含有することを特徴とする有機電界発光素子。

一般式 (I)

## 【化 8】



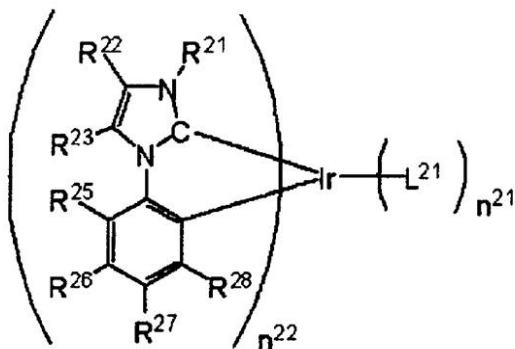
30

(一般式 (I) 中、 $R^1 \sim R^8$  は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $R^1 \sim R^8$  は隣接する置換基どうして縮合環を形成してもよい。 $R^9$  はアルキル基、アルケニル基、アリール基、ヘテロアリール基、またはシリル基を表し、それぞれ置換基で置換されていてもよい。 $R^1 \sim R^9$  の少なくともひとつは重水素原子、もしくは重水素原子を含む置換基である。)

一般式 (II)

40

## 【化 9】



10

(一般式 (I I) 中、 $R^{21} \sim R^{23}$  及び  $R^{25} \sim R^{28}$  は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $L^{21}$  は 2 つのピリジン環を有する 2 価の配位子を表し、 $n^{22}$  は 1 ~ 3 の整数を表し、 $n^{21}$  は 0 ~ 4 の整数を表す。C はカルベン炭素を表し、イリジウムに配位する。)

## 【請求項 5】

一对の電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、

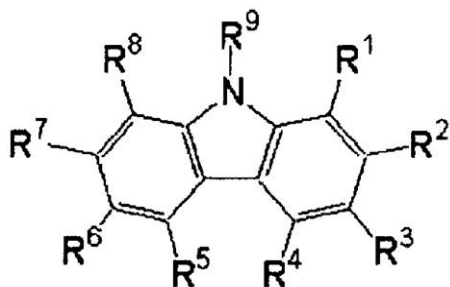
前記有機層のいずれかに下記一般式 (I) で表される化合物の少なくとも一種を含有し

20

前記発光層が下記一般式 (I I I) で表されるカルベンでイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体系燐光発光材料の少なくとも一種を含有することを特徴とする有機電界発光素子。

一般式 (I)

## 【化 10】

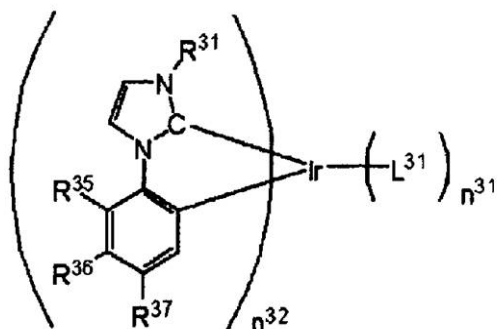


30

(一般式 (I) 中、 $R^1 \sim R^8$  は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $R^1 \sim R^8$  は隣接する置換基どうして縮合環を形成してもよい。 $R^9$  はアルキル基、アルケニル基、アリール基、ヘテロアリール基、またはシリル基を表し、それぞれ置換基で置換されていてもよい。 $R^1 \sim R^9$  の少なくともひとつは重水素原子、もしくは重水素原子を含む置換基である。)

一般式 (I I I)

## 【化 11】



40

50

(一般式(ⅠⅠⅠ)中、 $R^{31}$ はアルキル基、もしくはアリール基を表し、 $R^{35} \sim R^{37}$ は各々独立して、水素原子、フッ素原子、アルキル基、またはシアノ基を表す。また、 $R^{35}$ と $R^{36}$ 、もしくは、 $R^{36}$ と $R^{37}$ は互いに結合した縮環構造である。 $L^{31}$ は配位子を表し、 $n^{32}$ は1～3の整数を表し、 $n^{31}$ は0～4の整数を表す。 $C$ はカルベン炭素を表し、イリジウムに配位する。)

【請求項6】

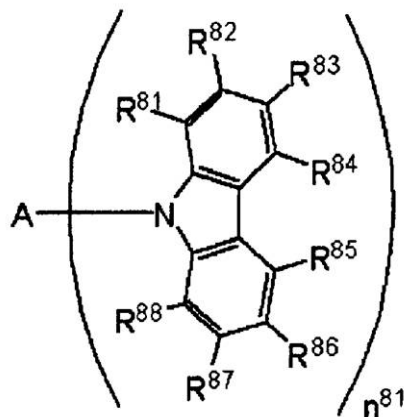
前記イリジウム錯体系燐光発光材料の最大発光波長が470nmより小さいことを特徴とする請求項1～5のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【請求項7】

前記一般式(Ⅰ)で表される化合物が、下記一般式(ⅤⅠⅠⅠ)で表されることを特徴とする請求項1から6のいずれかに記載の有機電界発光素子。

一般式(ⅤⅠⅠⅠ)

【化12】



(一般式(ⅤⅠⅠⅠ)中、 $R^{81} \sim R^{88}$ は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $R^{81} \sim R^{88}$ は隣接する置換基どうしで縮合環を形成してもよい。 $A$ は連結基を表し、 $n^{81}$ は2～6の整数を表す。一般式(ⅤⅠⅠⅠ)で表される化合物は、少なくともひとつの重水素原子を含む。)

【請求項8】

前記一般式(Ⅰ)及び(ⅤⅠⅠⅠ)で表される化合物の少なくとも一種を発光層に含有することを特徴とする請求項1から7のいずれかに記載の有機電界発光素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、電気エネルギーを光に変換して発光できる有機電界発光素子(以下、「有機EL素子」、「発光素子」又は「素子」ともいう。)に関するものであり、特に発光特性および耐久性に優れる有機電界発光素子に関するものである。

【背景技術】

【0002】

今日、有機発光材料を用いる種々の表示素子(有機発光素子)に関する研究開発が活発であり、中でも有機EL素子は、低電圧で高輝度の発光を得ることができ、有望な表示素子として注目されている。

【0003】

また、近年、燐光発光材料を用いることにより、素子の高効率化が進んでいる。燐光発光材料としてはイリジウム錯体や白金錯体などが知られている(例えば、特許文献1、2、3等参照)。

【0004】

前記特許文献3の発光層では、ドーパントとしてIr(ppy)<sub>3</sub>(イリジウムトリス(フェニルピリジン))を用い、ホスト材料としてはCBP(4,4'-ジカルバゾールピフ

10

20

30

40

50

エニル)を組み合わせている。

【0005】

特許文献4では、重水素原子を含む有機化合物を用いているが、燐光発光性金属錯体材料と併用した場合の効果に関しては何ら記述がない。

【0006】

特許文献5では、常温燐光を有する重水素原子を含むカルバゾール材料を用いているが、燐光発光性金属錯体材料と併用した場合の効果に関しては何ら記述がない。

【特許文献1】米国特許第6303238号明細書

【特許文献2】国際公開第00/57676号パンフレット

【特許文献3】国際公開第00/70655号パンフレット

【特許文献4】国際特許第02/047440号パンフレット

【特許文献5】特開2005-48004公報

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0007】

本発明の目的は、効率(消費電力)に優れ、かつ耐久性に優れる発光素子の提供にある。

【課題を解決するための手段】

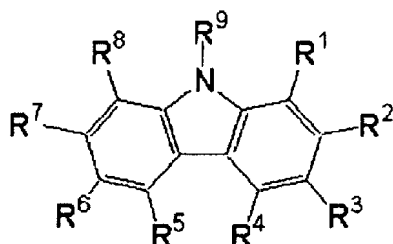
【0008】

この課題は下記手段によって達成された。

1) 一对の電極間に発光層を含む少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、有機層のいずれかに下記一般式(I)で表される化合物の少なくとも一種を含有し、発光層にイリジウム錯体系燐光発光材料の少なくとも一種を含有することを特徴とする有機電界発光素子。

一般式(I)

【化101】



(一般式(I)中、 $R^1 \sim R^8$ は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $R^1 \sim R^8$ は隣接する置換基どうしで縮合環を形成してもよい。 $R^9$ はアルキル基、アルケニル基、アリール基、ヘテロアリール基、またはシリル基を表し、それぞれ置換基で置換されていてもよい。 $R^1 \sim R^9$ の少なくともひとつは重水素原子、もしくは重水素原子を含む置換基である。)

2) 前記一般式(I)で表される化合物が一般式(VIII)で表されることを特徴とする上記1)に記載の有機電界発光素子。

一般式(VIII)

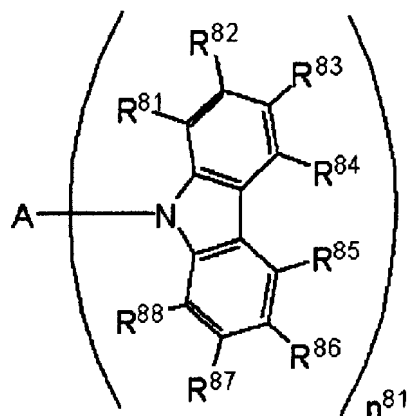
10

20

30

40

## 【化 1 0 2】



10

(一般式(VIII)中、 $R^{81} \sim R^{88}$ は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $R^{81} \sim R^{88}$ は隣接する置換基どうしで縮合環を形成してもよい。Aは連結基を表し、 $n^{81}$ は2～6の整数を表す。一般式(VIII)で表される化合物は、少なくともひとつの重水素原子を含む。)

3) 前記一般式(I)または(VIII)で表される化合物の少なくとも一種を発光層に含有することを特徴とする上記1)または2)に記載の有機電界発光素子。

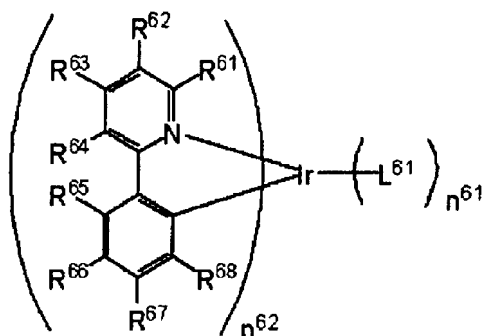
20

4) 前記イリジウム錯体系燐光発光材料が、ピリジン骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むことを特徴とする上記1)～3)のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

5) 前記ピリジン骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体系燐光発光材料が、一般式(VI)で表されることを特徴とする上記4)に記載の有機電界発光素子。

一般式(VI)

## 【化 1 0 3】



30

(一般式(VI)中、 $R^{61} \sim R^{68}$ は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $L^{61}$ は配位子を表し、 $n^{62}$ は1～3の整数を表し、 $n^{61}$ は0～4の整数を表す。)

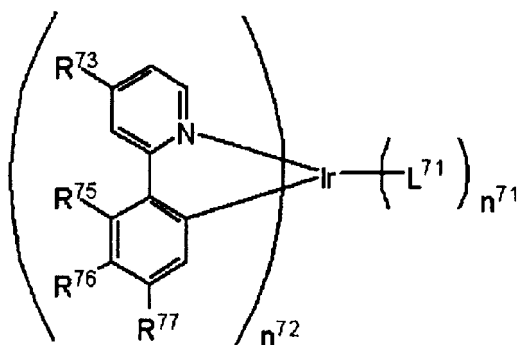
40

6) 前記ピリジン骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体系燐光発光材料が、一般式(VII)で表されることを特徴とする上記4)または5)に記載の有機電界発光素子。

一般式(VII)



## 【化 1 0 4】



10

(一般式(VII)中、 $R^{73}$ は水素原子、アルキル基、アミノ基、またはアルコキシ基を表し、 $R^{75} \sim R^{77}$ は各々独立して、水素原子、フッ素原子、シアノ基、またはアルキル基を表し、 $L^{71}$ は配位子を表し、 $n^{72}$ は1～3の整数を表し、 $n^{71}$ は0～4の整数を表す。)

7) 前記一般式(VII)中、 $n^{72}$ は2または3を表し、 $n^{71}$ は0または1を表すことを特徴とする上記6)に記載の有機電界発光素子。

8) 前記一般式(VII)中、 $n^{72}$ は2を表し、 $n^{71}$ は1を表し、 $L^{71}$ は含窒素ヘテロ環配位子を表すことを特徴とする上記7)に記載の有機電界発光素子。

20

9) 前記一般式(VII)中、 $L^{71}$ はフェニルピリジン配位子を表すことを特徴とする上記8)に記載の有機電界発光素子。

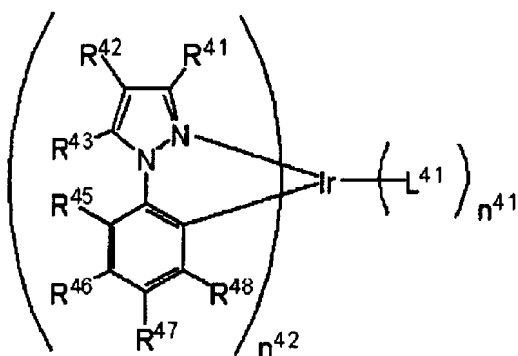
10) 前記イリジウム錯体系燐光発光材料が、ピラゾール骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むことを特徴とする上記1)～3)のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

11) 前記ピラゾール骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体系燐光発光材料が、一般式(IV)で表されることを特徴とする上記10)に記載の有機電界発光素子。

一般式(IV)

## 【化 1 0 5】

30



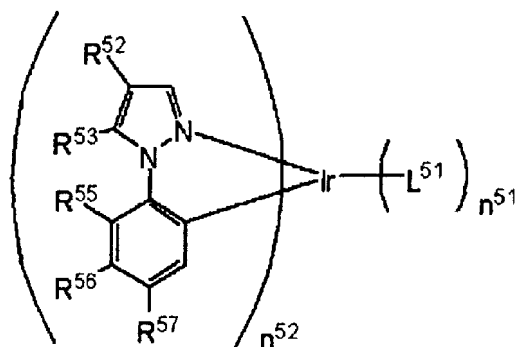
40

(一般式(IV)中、 $R^{41} \sim R^{43}$ 及び $R^{45} \sim R^{48}$ は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $L^{41}$ は配位子を表し、 $n^{42}$ は1～3の整数を表し、 $n^{41}$ は0～4の整数を表す。)

12) 前記ピラゾール骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体系燐光発光材料が、一般式(V)で表されることを特徴とする上記10)または11)に記載の有機電界発光素子。

一般式(V)

## 【化 1 0 6】



10

(一般式(V)中、 $R^{52} \sim R^{53}$ は各々独立して、水素原子、アルキル基、またはアリール基を表し、 $R^{55} \sim R^{57}$ は各々独立して、水素原子、フッ素原子、アルキル基、またはシアノ基を表す。また、 $R^{55}$ と $R^{56}$ 、もしくは、 $R^{56}$ と $R^{57}$ は互いに結合した縮環構造であってもよい。 $L^{51}$ は配位子を表し、 $n^{52}$ は1～3の整数を表し、 $n^{51}$ は0～4の整数を表す。)

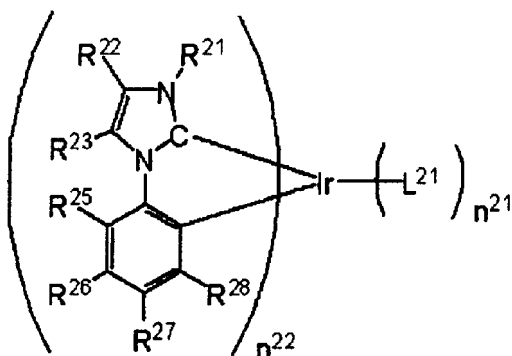
13) 前記イリジウム錯体系燐光発光材料が、カルベンでイリジウム原子と結合する配位子を含むことを特徴とする上記1)～3)のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

20

14) 前記カルベンでイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体系燐光発光材料が、一般式(II)で表されることを特徴とする上記13)に記載の有機電界発光素子。

一般式(II)

## 【化 1 0 7】



30

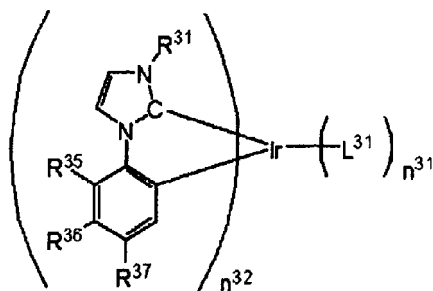
(一般式(II)中、 $R^{21} \sim R^{23}$ 及び $R^{25} \sim R^{28}$ は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $L^{21}$ は配位子を表し、 $n^{22}$ は1～3の整数を表し、 $n^{21}$ は0～4の整数を表す。Cはカルベン炭素を表し、イリジウムに配位する。)

15) 前記カルベンでイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体系燐光発光材料が、一般式(III)で表されることを特徴とする上記13)または14)に記載の有機電界発光素子。

40

一般式(III)

## 【化 1 0 8】



10

(一般式(ⅠⅠⅠ)中、 $R^{31}$ はアルキル基、もしくはアリール基を表し、 $R^{35} \sim R^{37}$ は各々独立して、水素原子、フッ素原子、アルキル基、またはシアノ基を表す。また、 $R^{35}$ と $R^{36}$ 、もしくは、 $R^{36}$ と $R^{37}$ は互いに結合した縮環構造であってもよい。 $L^{31}$ は配位子を表し、 $n^{32}$ は1～3の整数を表し、 $n^{31}$ は0～4の整数を表す。Cはカルベン炭素を表し、イリジウムに配位する。)

16) 前記イリジウム錯体系燐光発光材料の最大発光波長が470nmより小さいことを特徴とする上記1)～15)のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

## 【発明の効果】

## 【0025】

20

本発明によれば、効率(消費電力)及び耐久性に優れた有機電界発光素子を提供することができる。

## 【発明を実施するための最良の形態】

## 【0026】

本発明の有機電界発光素子(以下、「本発明の素子」と呼ぶことがある。)は、一対の電極間に、発光層を含む少なくとも一層の有機層(有機化合物のみからなる層であってもよいし、無機化合物を含有する有機層であってもよい)を有する有機電界発光素子であって、有機層のいずれかに下記一般式(Ⅰ)で表される化合物の少なくとも一種を含有し、発光層にイリジウム錯体系燐光発光材料の少なくとも一種を含有する。

本発明の下記一般式(Ⅰ)で表される化合物は、化学的な安定性に優れ、素子駆動中における材料の分解等の変質が少なく、当該分解物による、イリジウム錯体系燐光発光材料を用いた有機電界発光素子の効率低下や素子寿命の低下を防ぐことができる。

30

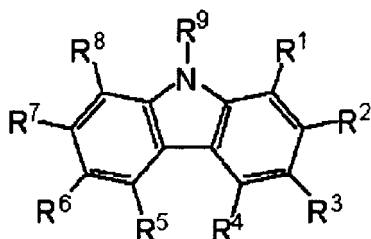
## 【0027】

以下、一般式(Ⅰ)で表される化合物について説明する。

## 【0028】

一般式(Ⅰ)

## 【化 9】



40

## 【0029】

(一般式(Ⅰ)中、 $R^1 \sim R^8$ は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $R^1 \sim R^8$ は隣接する置換基どうして縮合環を形成してもよい。 $R^9$ はアルキル基、アルケニル基、アリール基、ヘテロアリール基、またはシリル基を表し、それぞれ置換基で置換されていてもよい。 $R^1 \sim R^9$ の少なくともひとつは重水素原子、もしくは重水素原子を含む置換基である。)

50

## 【 0 0 3 0 】

$R^1 \sim R^8$ で表される置換基としては特に限定されないが、例えば、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、ヘテロアリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、ヘテロ環オキシ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アシルオキシ基、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、アリールオキシカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、スルファモイル基、カルバモイル基、アルキルチオ基、アリールチオ基、ヘテロ環チオ基、スルホニル基、スルフィニル基、ウレイド基、リン酸アミド基、ヒドロキシ基、メルカプト基、ハロゲン基、シアノ基、スルホ基、カルボキシ基、ニトロ基、ヒドロキサム酸基、スルフィノ基、ヒドラジノ基、イミノ基、ヘテロ環基、シリル基、シリルオキシ基、重水素原子などが挙げられる。これらの置換基は、更に他の置換基によって置換されてもよく、また、これらの置換基同士が結合し、環を形成していてもよい。

10

## 【 0 0 3 1 】

ここで、アルキル基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメチル、エチル、n - プロピル、iso - プロピル、n - ブチル、tert - ブチル、n - オクチル、n - ノニル、n - デシル、n - ドデシル、n - オクタデシル、n - ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロオクチル、1 - アダマンチル、トリフルオロメチルなどが挙げられる。

## 【 0 0 3 2 】

また、アルケニル基としては、好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばビニル、アリル、1 - プロペニル、1 - イソプロペニル、1 - ブテニル、2 - ブテニル、3 - ペンテニルなどが挙げられる。

20

## 【 0 0 3 3 】

また、アルキニル基としては、好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばエチニル、プロパルギル、1 - プロピニル、3 - ペンチニルなどが挙げられる。

## 【 0 0 3 4 】

また、アリール基としては、好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニル、o - メチルフェニル、m - メチルフェニル、p - メチルフェニル、2, 6 - キシリル、p - クメニル、メシチル、ナフチル、アントラニル、などが挙げられる。

30

## 【 0 0 3 5 】

また、ヘテロアリール基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子、具体的には例えばイミダゾリル、ピラゾリル、ピリジル、ピラジル、ピリミジル、トリアジニル、キノリル、イソキノリニル、ピロリル、インドリル、フリル、チエニル、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル、アゼピニルなどが挙げられる。

## 【 0 0 3 6 】

また、アミノ基としては、好ましくは炭素数 0 ~ 30、より好ましくは炭素数 0 ~ 20、特に好ましくは炭素数 0 ~ 10 であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノなどが挙げられる。

40

## 【 0 0 3 7 】

また、アルコキシ基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2 - エチルヘキシロキシなどが挙げられる。

## 【 0 0 3 8 】

また、アリールオキシ基としては、好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数

50

6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシ、1 - ナフチルオキシ、2 - ナフチルオキシなどが挙げられる。

【0039】

また、ヘテロ環オキシ基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジルオキシ、ピラジロキシ、ピリミジロキシ、キノリルオキシなどが挙げられる。

【0040】

また、アシル基としては、好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、ピバロイルなどが挙げられる。

10

【0041】

また、アルコキシカルボニル基としては、好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。

【0042】

また、アリーロキシカルボニル基としては、好ましくは炭素数 7 ~ 30、より好ましくは炭素数 7 ~ 20、特に好ましくは炭素数 7 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシカルボニルなどが挙げられる。

【0043】

また、アシルオキシ基としては、好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。

20

【0044】

また、アシルアミノ基としては、好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。

【0045】

また、アルコキシカルボニルアミノ基としては、好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。

30

【0046】

また、アリーロキシカルボニルアミノ基としては、好ましくは炭素数 7 ~ 30、より好ましくは炭素数 7 ~ 20、特に好ましくは炭素数 7 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。

【0047】

また、スルホニルアミノ基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。

【0048】

また、スルファモイル基としては、好ましくは炭素数 0 ~ 30、より好ましくは炭素数 0 ~ 20、特に好ましくは炭素数 0 ~ 12 であり、例えばスルファモイル、メチルスルファモイル、ジメチルスルファモイル、フェニルスルファモイルなどが挙げられる。

40

【0049】

また、カルバモイル基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばカルバモイル、メチルカルバモイル、ジエチルカルバモイル、フェニルカルバモイルなどが挙げられる。

【0050】

また、アルキルチオ基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。

50

## 【0051】

また、アリールチオ基としては、好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。

## 【0052】

また、ヘテロ環チオ基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジルチオ、2 - ベンズイミダゾリルチオ、2 - ベンズオキサゾリルチオ、2 - ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。

## 【0053】

また、スルホニル基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメシル、トシル、トリフルオロメタンスルホニルなどが挙げられる。

10

## 【0054】

また、スルフィニル基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメタンスルフィニル、ベンゼンスルフィニルなどが挙げられる。

## 【0055】

また、ウレイド基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばウレイド、メチルウレイド、フェニルウレイドなどが挙げられる。

20

## 【0056】

また、リン酸アミド基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばジエチルリン酸アミド、フェニルリン酸アミドなどが挙げられる。

## 【0057】

また、ハロゲン原子としては、例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子などが挙げられる。

## 【0058】

また、ヘテロ環基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子、具体的には例えば、ピペリジル、モルホリノ、ピロリジルなどが挙げられる。

30

## 【0059】

また、シリル基としては、好ましくは炭素数 3 ~ 40、より好ましくは炭素数 3 ~ 30、特に好ましくは炭素数 3 ~ 24 であり、例えばトリメチルシリル、トリエチルシリル、トリイソプロピルシリル、ジメチル *tert* - ブチルシリル、ジメチルフェニルシリル、ジフェニル *tert* - ブチルシリル、トリフェニルシリル、トリ - 1 - ナフチルシリル、トリ - 2 - ナフチルシリルなどが挙げられる。

## 【0060】

また、シリルオキシ基としては、好ましくは炭素数 3 ~ 40、より好ましくは炭素数 3 ~ 30、特に好ましくは炭素数 3 ~ 24 であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。

40

## 【0061】

$R^1 \sim R^8$  の置換基として好ましくは重水素原子、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、ハロゲン基、シアノ基、シリル基であり、より好ましくは重水素原子、アルキル基、ヘテロアリール基、ハロゲン基、シアノ基、シリル基であり、特に好ましくは重水素原子、アルキル基、ヘテロアリール基、シリル基である。これらの置換基は、更に他の置換基によって置換されてもよく、また、これらの置換基同士が結合し、環を形成していてもよい。

## 【0062】

$R^1 \sim R^8$  のアルキル基として好ましくはメチル、エチル、*n* - プロピル、イソプロピル

50

、*n*-ブチル、*tert*-ブチル、*n*-オクチル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシル、1-アダマンチル、トリフルオロメチルであり、より好ましくはメチル、イソプロピル、*tert*-ブチル、*n*-オクチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、1-アダマンチル、トリフルオロメチルであり、特に好ましくは*tert*-ブチル、シクロヘキシル、1-アダマンチル、トリフルオロメチルである。これらの置換基は、更に他の置換基によって置換されてもよく、また、これらの置換基同士が結合し、環を形成していてもよい。

【0063】

$R^1 \sim R^8$ のヘテロアリアル基として好ましくはイミダゾリル、ピラゾリル、ピリジル、キノリル、イソキノリニル、ピロリル、インドリル、フリル、チエニル、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル、アゼピニルであり、より好ましくはイミダゾリル、ピラゾリル、キノリル、インドリル、フリル、チエニル、ベンズイミダゾリル、カルバゾリル、アゼピニルであり、特に好ましくはインドリル、フリル、チエニル、ベンズイミダゾリル、カルバゾリル、アゼピニルである。これらの置換基は、更に他の置換基によって置換されてもよく、縮環構造を形成していてもよく、また、これらの置換基同士が結合し、環を形成していてもよい。

10

【0064】

$R^1 \sim R^8$ のシリル基として好ましくはトリメチルシリル、トリエチルシリル、トリイソプロピルシリル、ジメチル *tert*-ブチルシリル、ジメチルフェニルシリル、メチルジフェニルシリル、ジフェニル *tert*-ブチルシリル、トリフェニルシリルであり、より好ましくはトリメチルシリル、トリイソプロピルシリル、ジメチル *tert*-ブチルシリル、ジフェニル *tert*-ブチルシリル、トリフェニルシリルであり、特に好ましくはトリメチルシリル、ジメチル *tert*-ブチルシリル、トリフェニルシリルである。これらの置換基は、更に他の置換基によって置換されてもよく、また、これらの置換基同士が結合し、環を形成していてもよい。

20

【0065】

$R^2$ 、 $R^7$ は、置換基として特に好ましいのは、アルキル基、アリアル基、シリル基、重水素原子であり、より好ましいのは、アルキル基、シリル基、重水素原子であり、特に好ましいのは、*tert*-ブチル基、アダマンチル基、トリメチルシリル基、トリフェニルシリル基、重水素原子である。

30

【0066】

$R^3$ 、 $R^6$ は、置換基として特に好ましいのは、アルキル基、アリアル基、シリル基、重水素原子であり、より好ましいのは、アルキル基、シリル基、重水素原子であり、特に好ましいのは、*tert*-ブチル基、アダマンチル基、トリメチルシリル基、トリフェニルシリル基、重水素原子である。

【0067】

$R^1 \sim R^8$ からなる置換基の組み合わせの具体例を以下に列挙するが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。以下、構造式中のDは重水素原子を表す。

【0068】

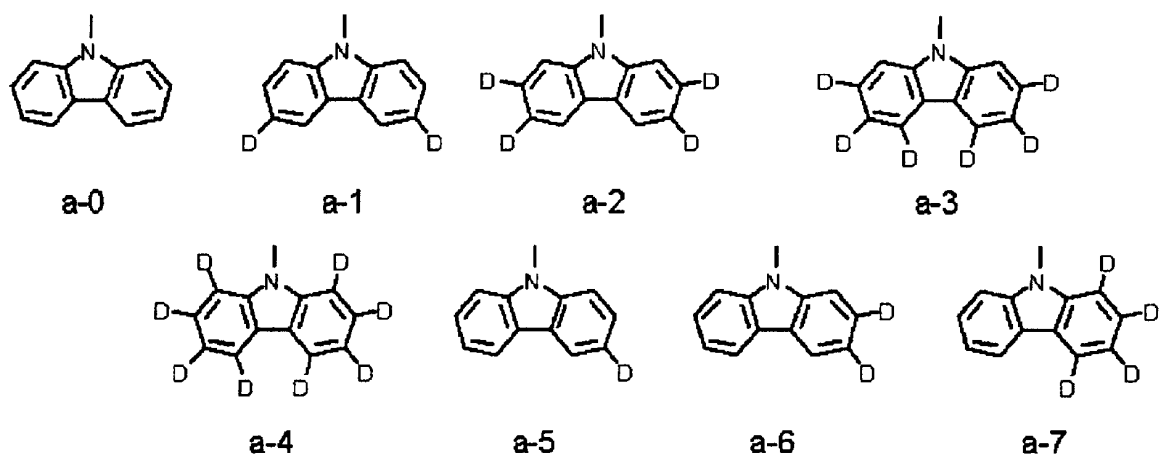
例えば、(a-0)は、 $R^1 \sim R^8$ のすべてが水素原子であることを表し、(a-1)は、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^4$ 、 $R^5$ 、 $R^7$ 、 $R^8$ が水素原子で、 $R^3$ 、 $R^6$ が重水素原子であることを表し、(a-4)は、 $R^1 \sim R^8$ のすべてが重水素原子であることを表している。

40

なお、下記(a-0)～(k-0)(重水素原子を含まない)は、一般式(I)を満たさないが、これら以外は一般式(I)を満たす。

【0069】

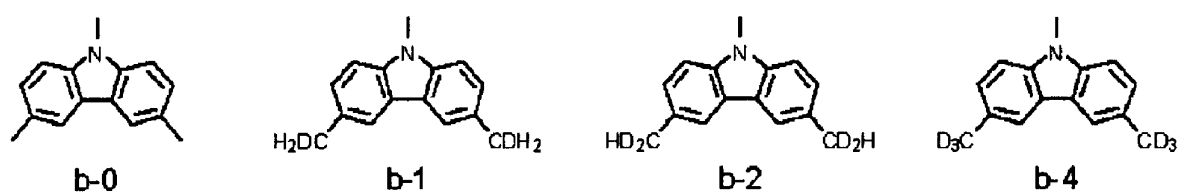
## 【化 1 0】



10

## 【 0 0 7 0】

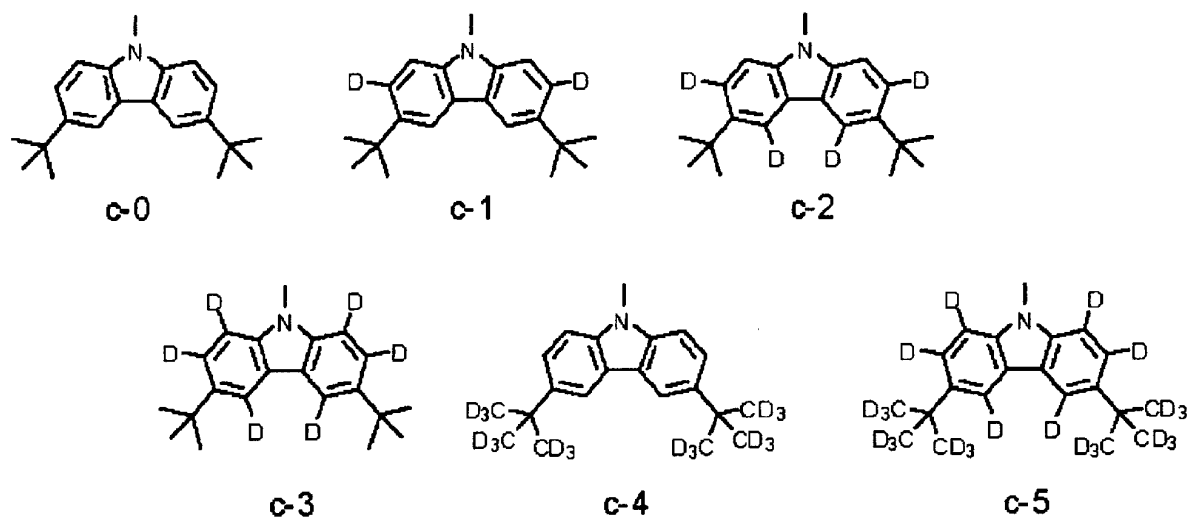
## 【化 1 1】



20

## 【 0 0 7 1】

## 【化 1 2】



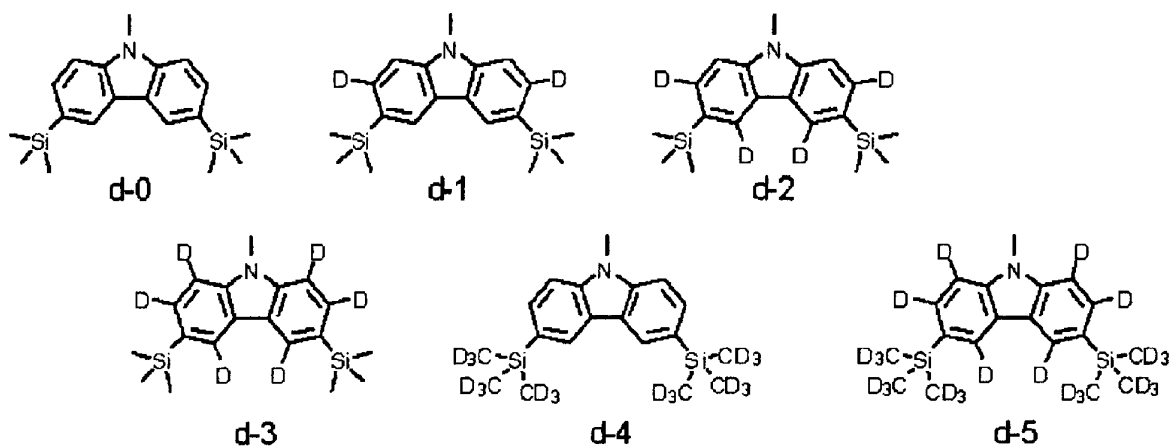
30

## 【 0 0 7 2】

40



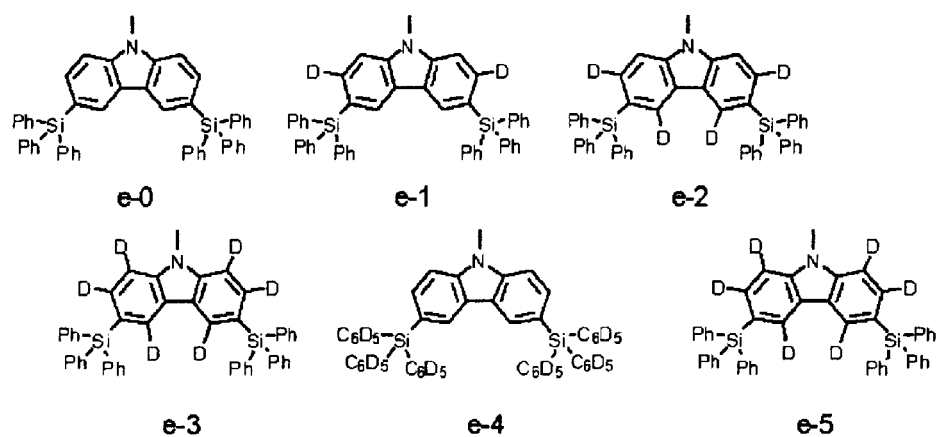
## 【化 1 3】



10

## 【 0 0 7 3】

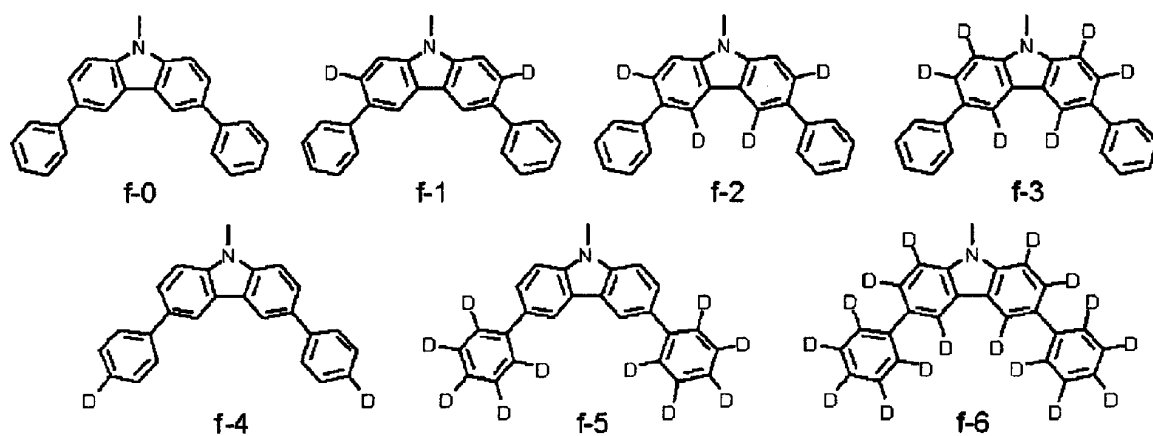
## 【化 1 4】



20

## 【 0 0 7 4】

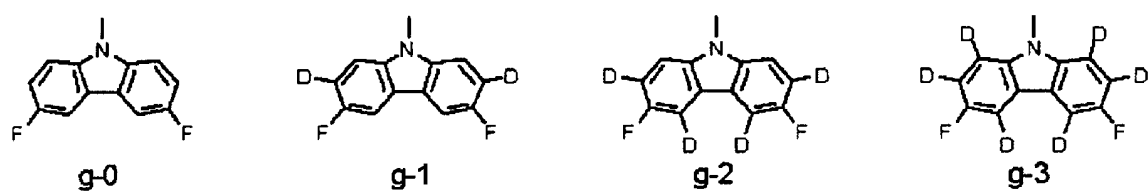
## 【化 1 5】



40

## 【 0 0 7 5】

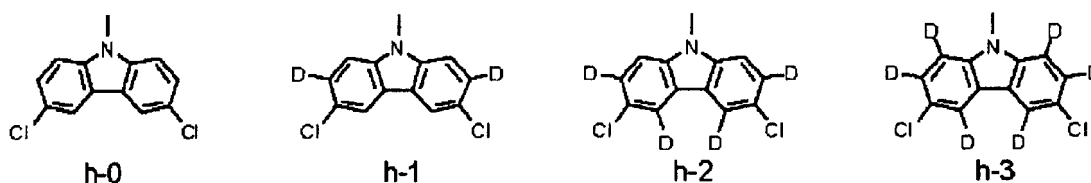
## 【化 1 6】



50

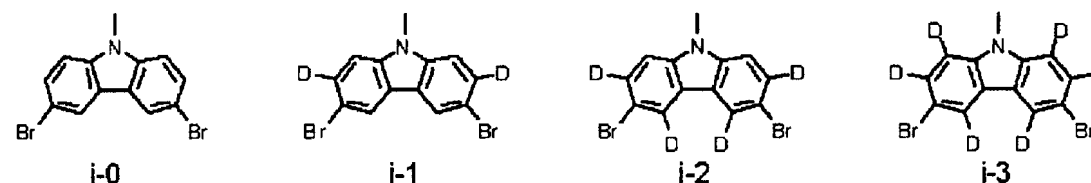
【 0 0 7 6 】

【 化 1 7 】



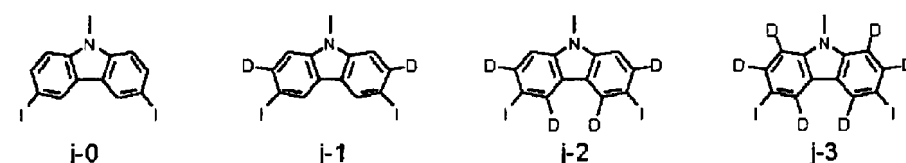
【 0 0 7 7 】

【 化 1 8 】



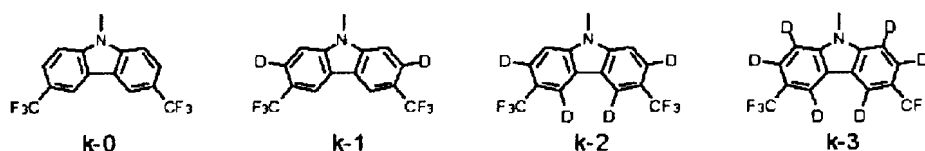
【 0 0 7 8 】

【 化 1 9 】



【 0 0 7 9 】

【 化 2 0 】



【 0 0 8 0 】

$R^9$ はアルキル基、アルケニル基、アリール基、ヘテロアリール基、シリル基を表し、好ましくは、アリール基、ヘテロアリール基、シリル基であり、より好ましくは、アリール基、ヘテロアリール基であり、特に好ましくは、アリール基である。

【 0 0 8 1 】

$R^9$ のアリール基として好ましくはフェニル、*o*-メチルフェニル、2,6-キシリル、メシチルであり、より好ましくはフェニル、メシチルであり、特に好ましくはフェニル基である。これらの置換基は、縮環構造を形成していてもよく、また、これらの置換基同士が結合し、環を形成していてもよく、例えば、ビフェニル、ナフチル、アントラニル、フェナントリル、ピレニル、ナフタセニル等が挙げられる。これらの置換基は、更に他の置換基によって置換されてもよい。

【 0 0 8 2 】

$R^9$ には、カルバゾールと $R^1 \sim R^8$ とからなる構造が、複数結合していてもよく、好ましくは1~6個結合していてもよく、より好ましくは1~3個結合していてもよく、特に好ましくは1~2個結合していてもよい。

【 0 0 8 3 】

例えば、カルバゾールと $R^1 \sim R^8$ とからなる構造が、1個結合する $R^9$ の置換基の具体例を以下に列挙するが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。以下の図における\*印は、カルバゾールの窒素原子が結合する部分を表す。なお、上記(a-0)~(k-0)(重水素原子を含まない)と下記(1A-0)~(1Q-0)(重水素原子を含み

10

20

30

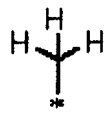
40

50

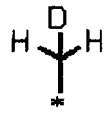
ない)との組み合わせは、一般式(Ⅰ)を満たさないが、これら以外の同様な両群の組み合わせは一般式(Ⅰ)を満たす。

【0084】

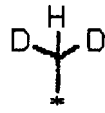
【化21】



1A-0



1A-1



1A-2



1A-3

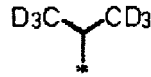
10

【0085】

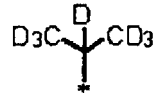
【化22】



1B-0



1B-1



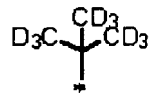
1B-2

【0086】

【化23】



1C-0



1C-1

20

【0087】

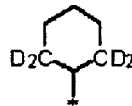
【化24】



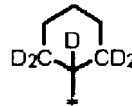
1D-0



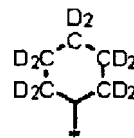
1D-1



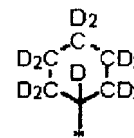
1D-2



1D-3



1D-4



1D-5

30

【0088】

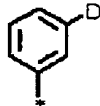
【化25】



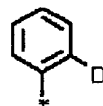
1E-0



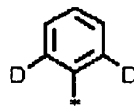
1E-1



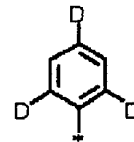
1E-2



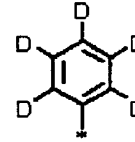
1E-3



1E-4



1E-5

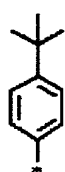


1E-6

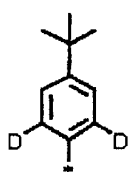
40

【0089】

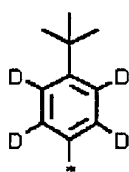
## 【化 2 6】



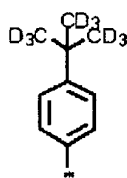
1F-0



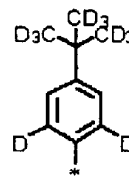
1F-1



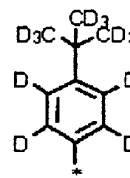
1F-2



1F-3



1F-4

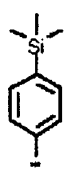


1F-5

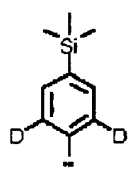
## 【 0 0 9 0】

## 【化 2 7】

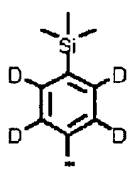
10



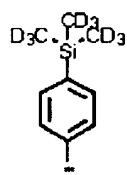
1G-0



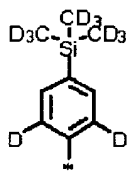
1G-1



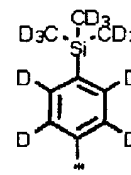
1G-2



1G-3



1G-4

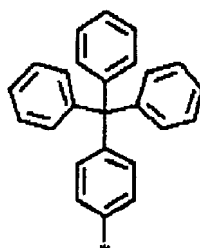


1G-5

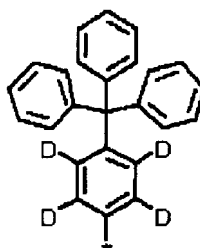
## 【 0 0 9 1】

## 【化 2 8】

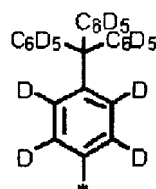
20



1H-0



1H-1

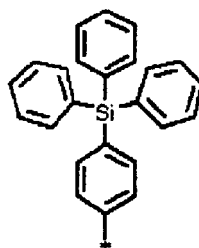


1H-2

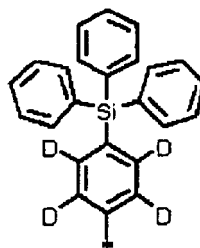
## 【 0 0 9 2】

## 【化 2 9】

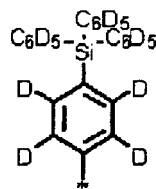
30



1I-0



1I-1

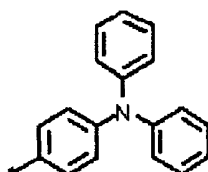


1I-2

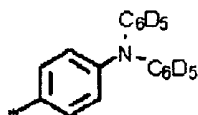
## 【 0 0 9 3】

## 【化 3 0】

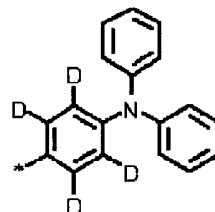
40



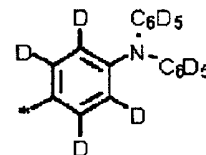
1J-0



1J-1



1J-2

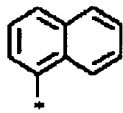


1J-3

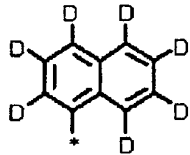
## 【 0 0 9 4】

50

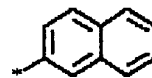
## 【化 3 1】



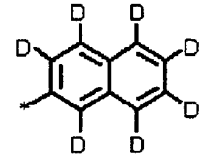
1K-0



1K-1



1L-0

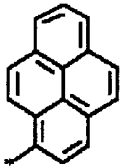


1L-1

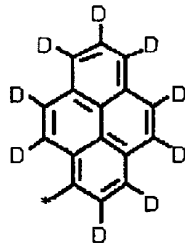
## 【 0 0 9 5 】

## 【化 3 2】

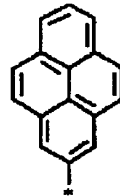
10



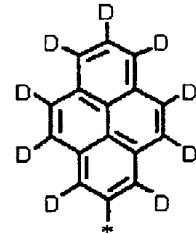
1M-0



1M-1



1N-0



1N-1

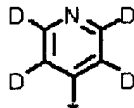
## 【 0 0 9 6 】

## 【化 3 3】

20



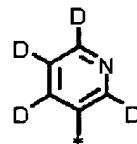
1O-0



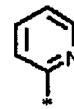
1O-1



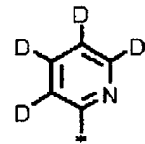
1P-0



1P-1



1Q-0



1Q-1

## 【 0 0 9 7 】

例えば、カルバゾールと  $R^1 \sim R^8$  とからなる構造が、2個結合する  $R^9$  の置換基の具体例を以下に列挙するが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。以下の図における \* 印は、カルバゾールの窒素原子が結合する部分を表す。なお、上記 (a-0) ~ (k-0) (重水素原子を含まない) と下記 (2A-0) ~ (2M-0) (重水素原子を含まない) との組み合わせは、一般式 (I) を満たさないが、これら以外の同様な両群の組み合わせは一般式 (I) を満たす。

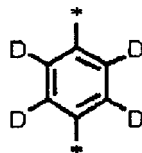
30

## 【 0 0 9 8 】

## 【化 3 4】



2A-0

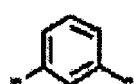


2A-1

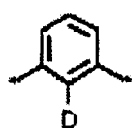
40

## 【 0 0 9 9 】

【化 3 5】



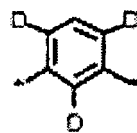
2B-0



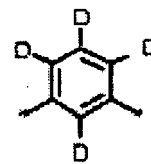
2B-1



2B-2



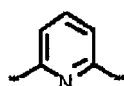
2B-3



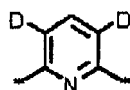
2B-4

【 0 1 0 0】

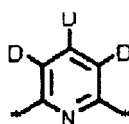
【化 3 6】



2C-0



2C-1

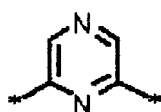


2C-2

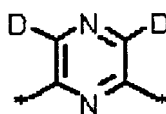
10

【 0 1 0 1】

【化 3 7】



2D-0

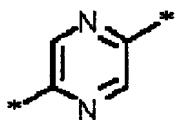


2D-1

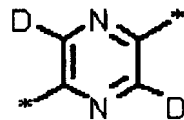
20

【 0 1 0 2】

【化 3 8】



2E-0



2E-1

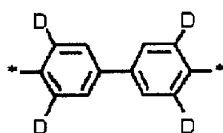
30

【 0 1 0 3】

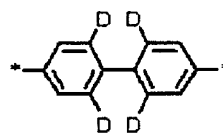
【化 3 9】



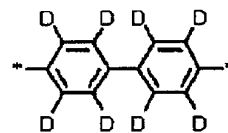
2F-0



2F-1



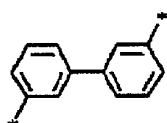
2F-2



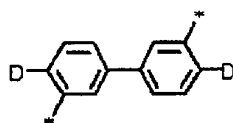
2F-3

【 0 1 0 4】

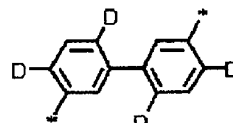
【化 4 0】



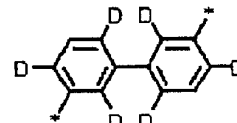
2G-0



2G-1



2G-2

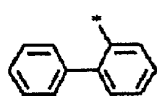


2G-3

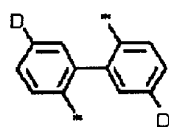
40

【 0 1 0 5】

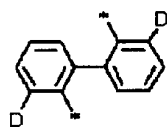
【化 4 1】



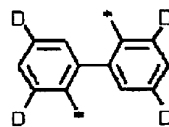
2H-0



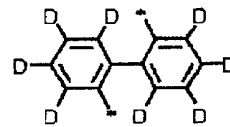
2H-1



2H-2



2H-3

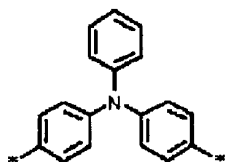


2H-4

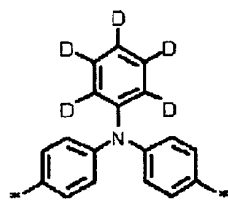
【 0 1 0 6 】

【化 4 2】

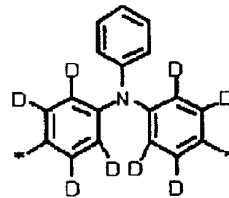
10



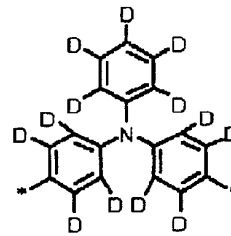
2I-0



2I-1



2I-2

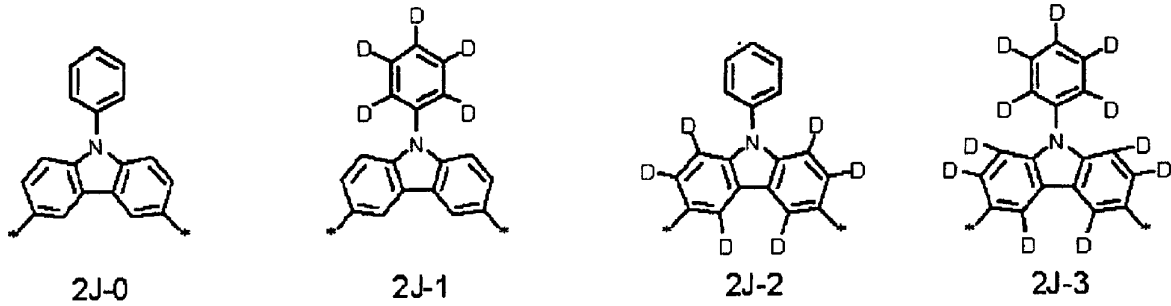


2I-3

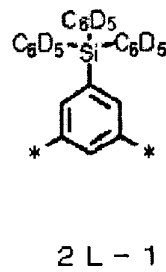
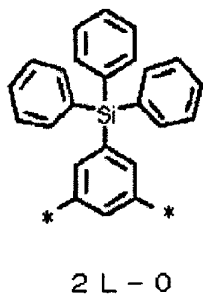
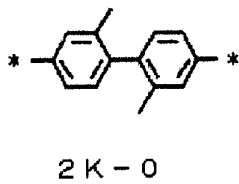
【 0 1 0 7 】

20

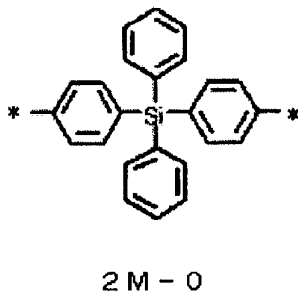
## 【化 4 3】



10



20



30

## 【0108】

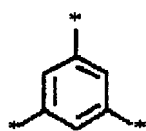
例えば、カルバゾールと  $R^1 \sim R^8$  とからなる構造が、3個結合する  $R^9$  の置換基の具体例を以下に列挙するが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。以下の図における \* 印は、カルバゾールの窒素原子が結合する部分を表す。なお、上記 (a-0) ~ (k-0) (重水素原子を含まない) と下記 (3A-0) ~ (3C-0) (重水素原子を含まない) との組み合わせは、一般式 (I) を満たさないが、これら以外の同様な両群の組み合わせは一般式 (I) を満たす。

40

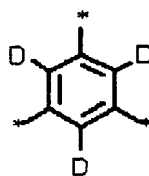
## 【0109】



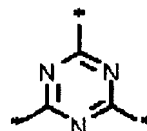
## 【化 4 4】



3A-0



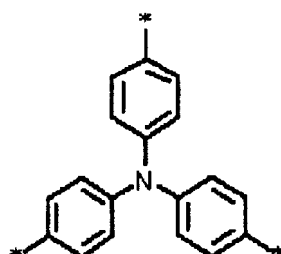
3A-1



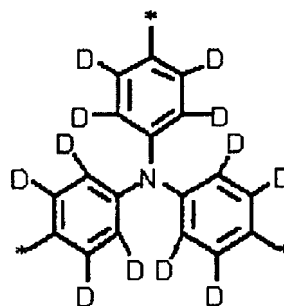
3B-0

## 【 0 1 1 0】

## 【化 4 5】



3C-0



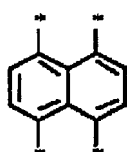
3C-1

## 【 0 1 1 1】

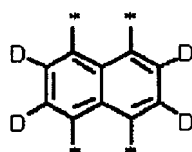
例えば、カルバゾールと  $R^1 \sim R^8$  とからなる構造が、4 個結合する  $R^9$  の置換基の具体例を以下に列挙するが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。以下の図における \* 印は、カルバゾールの窒素原子が結合する部分を表す。なお、上記 (a-0) ~ (k-0) (重水素原子を含まない) と下記 (4A-0) ~ (4C-0) (重水素原子を含まない) との組み合わせは、一般式 (I) を満たさないが、これら以外の同様な両群の組み合わせは一般式 (I) を満たす。

## 【 0 1 1 2】

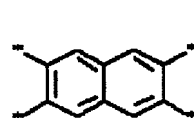
## 【化 4 6】



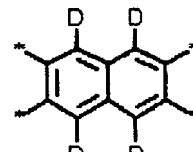
4A-0



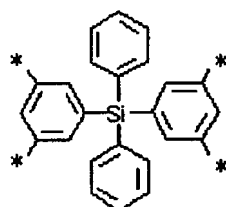
4A-1



4B-0



4B-1



4C-0

## 【 0 1 1 3】

例えば、カルバゾールと  $R^1 \sim R^8$  とからなる構造が、6 個結合する  $R^9$  の置換基の具体例を以下に列挙するが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。以下の図における \* 印は、カルバゾールの窒素原子が結合する部分を表す。なお、上記 (a-0) ~ (k-0) (重水素原子を含まない) と下記 (6A-0) との組み合わせは、一般式 (I) を満たさないが、これら以外の同様な両群の組み合わせは一般式 (I) を満たす。

10

20

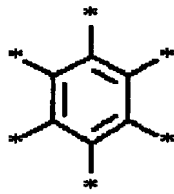
30

40

50

【 0 1 1 4 】

【 化 4 7 】



6A-0

10

【 0 1 1 5 】

一般式 ( I ) において、 $R^1 \sim R^9$  の少なくともひとつは重水素原子、もしくは重水素原子を含む置換基である。

本発明において、 $R^1 \sim R^9$  の少なくともひとつが重水素原子、もしくは重水素原子を含む置換基であるとは、重水素原子が結合した位置において、重水素原子と水素原子の比率 (重水素原子の原子数 : 水素原子の原子数) が、 $100 : 0$  から  $1 : 99$  の範囲に含まれていることを意味する。

このことは、一般式 ( I ) 表される化合物で、水素原子と重水素原子以外の構造が同一のものにおいて、特定の位置において水素原子を含むものと重水素原子を含むものが、上記の範囲で混合されていることを意味する。

20

【 0 1 1 6 】

一般式 ( I ) において、重水素原子と水素原子の比率 (重水素原子の原子数 : 水素原子の原子数) が、 $100 : 0$  から  $1 : 99$  の範囲に含まれていることが好ましく、 $100 : 0$  から  $50 : 50$  の範囲に含まれていることがより好ましく、 $100 : 0$  から  $80 : 20$  の範囲に含まれていることが特に好ましい。

【 0 1 1 7 】

重水素原子と水素原子の比率の範囲として、好ましくは  $100 : 0$  から  $5 : 95$  であり、より好ましくは  $100 : 0$  から  $50 : 50$  であり、特に好ましくは  $100 : 0$  から  $80 : 20$  である。

【 0 1 1 8 】

$R^1 \sim R^8$  について、好ましくは  $R^1 \sim R^8$  のうちのひとつ以上が重水素原子であり、より好ましくは  $R^1 \sim R^8$  のうちのふたつ以上が重水素原子であり、特に好ましくは  $R^1 \sim R^8$  のすべてが重水素原子である。

30

【 0 1 1 9 】

$R^1 \sim R^8$  について、重水素原子であるのは、好ましくは  $R^2 \sim R^7$  であり、より好ましくは  $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^6$ 、 $R^7$  であり、特に好ましくは  $R^3$ 、 $R^6$  である。

【 0 1 2 0 】

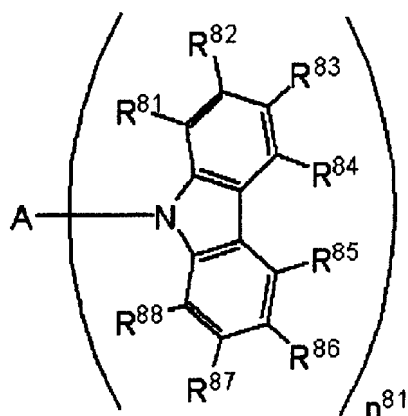
本発明の一般式 ( I ) で表される化合物の特に好ましい例は、一般式 ( V I I I ) で表される化合物である。以下、一般式 ( V I I I ) で表される化合物について説明する。

【 0 1 2 1 】

一般式 ( V I I I )

40

## 【化 4 8】



10

## 【 0 1 2 2 】

(一般式(V I I I)中、 $R^{81} \sim R^{88}$ は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $R^{81} \sim R^{88}$ は隣接する置換基どうしで縮合環を形成してもよい。Aは連結基を表し、 $n^{81}$ は2～6の整数を表す。一般式(V I I I)で表される化合物は、少なくともひとつの重水素原子を含む。)

## 【 0 1 2 3 】

20

$R^{81} \sim R^{88}$ は、前記 $R^1 \sim R^8$ とそれぞれ同義であり、好ましい範囲も同じである。ここで、 $R^{81} \sim R^{88}$ と $R^1 \sim R^8$ の対応関係は、前者の一の位の番号が同じ組の対応関係を意味する。他の同様の対応記載も同じ意味である。

## 【 0 1 2 4 】

$n^{81}$ として好ましくは、2～4であり、より好ましくは、2～3であり、特に好ましくは2である。

## 【 0 1 2 5 】

Aで表される連結基として好ましくは、アルキレン、アリーレン、ヘテロアリーレン、シリレンであり、より好ましくは、アリーレン、ヘテロアリーレンであり、特に好ましくは、アリーレンであり、これらの連結基は、例えば、前述の $R^1$ で表される置換基により、更に置換されていてもよい。

30

Aで表される連結基としては、前記(2A-0)～(6A-0)(重水素原子を含まないもの、及び重水素原子を含むもの)で記載したものも包含される。

## 【 0 1 2 6 】

アリーレンとして好ましくは、フェニレン、ナフチレン、ピフェニレン、ターフェニレンであり、より好ましくは、フェニレン、ピフェニレンであり、特に好ましくは、フェニレンである。

## 【 0 1 2 7 】

フェニレンとして好ましくは、1,2,3,4,5,6 六置換フェニレン、1,2,4,5 四置換フェニレン、1,3,5 三置換フェニレン、1,2 二置換フェニレン、1,3 二置換フェニレン、1,4 二置換フェニレンであり、より好ましくは、1,2 二置換フェニレン、1,3 二置換フェニレン、1,4 二置換フェニレンであり、特に好ましくは、1,3 二置換フェニレン、1,4 二置換フェニレンである。ここで、三置換以上の場合は、カルバゾールの他に、前述の $R^1$ で表される置換基が置換されていてもよい。

40

## 【 0 1 2 8 】

一般式(V I I I)で表される化合物において、重水素原子を含むとは、重水素原子が結合した位置において、重水素原子と水素原子の比率(重水素原子の原子数：水素原子の原子数)が、100：0から1：99の範囲に含まれていることを意味する。

## 【 0 1 2 9 】

重水素原子と水素原子の比率の範囲として、好ましくは100：0から5：95であり

50

、より好ましくは100:0から50:50であり、特に好ましくは100:0から80:20である。

【0130】

本発明の一般式(I)で表される化合物は低分子化合物であっても良く、また、オリゴマー化合物、一般式(I)で表される構造を主鎖または側鎖に有するポリマー化合物(質量平均分子量(ポリスチレン換算)は好ましくは1000~5000000、より好ましくは2000~1000000、さらに好ましくは3000~1000000である。)であってもよい。本発明の一般式(I)で表される化合物は低分子化合物が好ましい。

本発明の一般式(I)で表される化合物が、オリゴマー化合物または一般式(I)で表される構造を主鎖または側鎖に有するポリマー化合物の場合、主鎖としては、 $R^1 \sim R^9$ の複数が含まれ、より好ましくは $R^3$ 、 $R^6$ 、 $R^9$ のいずれか複数が含まれ、特に好ましくは $R^3$ 、 $R^6$ が含まれる。側鎖として含まれる場合は、 $R^1 \sim R^9$ のいずれかが含まれ、より好ましくは $R^3$ 、 $R^6$ 、 $R^9$ のいずれが含まれ、特に好ましくは $R^9$ が含まれる。

【0131】

本発明において本発明の一般式(I)で表される化合物は、その用途が限定されることはなく、有機層内のいずれの層に含有されてもよい。本発明の一般式(I)で表される化合物の導入層としては、発光層、正孔注入層、正孔輸送層、電子輸送層、電子注入層、励起子ブロック層、電荷ブロック層のいずれか、もしくは複수에含有されるのが好ましい。本発明の一般式(I)で表される化合物は、正孔の注入輸送を担う観点から、発光層、正孔注入層、正孔輸送層に含まれることが好ましく、電子と正孔が再結合して発生する励起状態に対する材料の安定性の観点からは、発光層に含まれることが特に好ましい。

本発明では、一般式(I)で表される化合物を発光層および発光層に隣接する層のいずれかに含有することが好ましく、また、一般式(I)で表される化合物を発光層および隣接する層の両層に含有させてもよい。

発光層中において、本発明の一般式(I)で表される化合物は1~100質量%含まれることが好ましく、50~100質量%含まれることがより好ましく、80~100質量%含まれることがより好ましい。

また、本発明の一般式(I)で表される化合物を発光層以外の層に含有する場合は、1~100質量%含まれることが好ましく、50~100質量%含まれることがより好ましく、80~100質量%含まれることがより好ましい。

【0132】

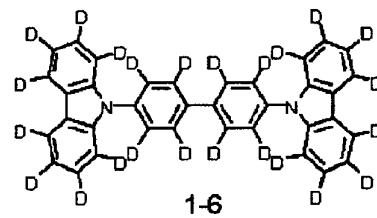
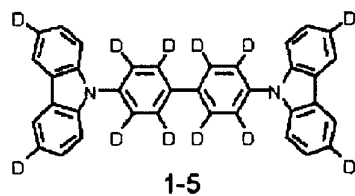
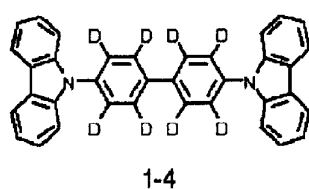
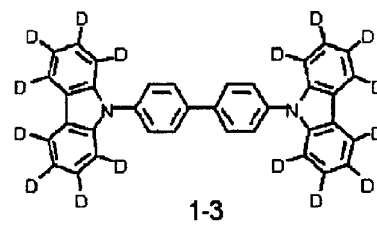
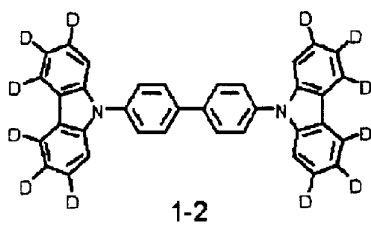
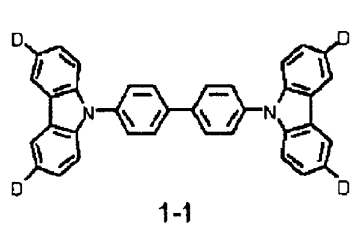
一般式(I)で表される化合物の具体例を以下に列挙するが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。

【0133】

例えば、例示化合物(1-1)は、上記、(a-1)と(2F-0)の組み合わせを表し、例示化合物(1-6)は、上記、(a-4)と(2F-3)の組み合わせを表す。

【0134】

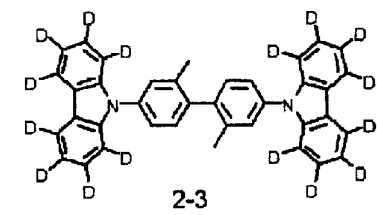
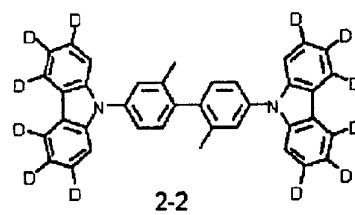
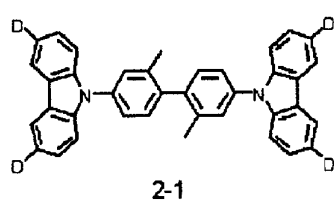
## 【化 4 9】



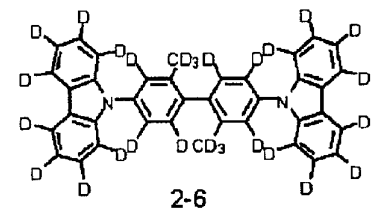
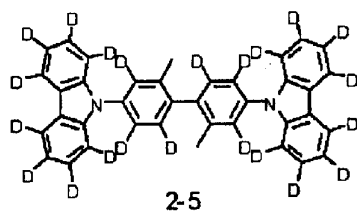
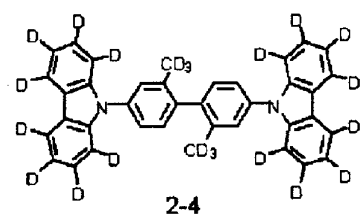
10

## 【 0 1 3 5】

## 【化 5 0】



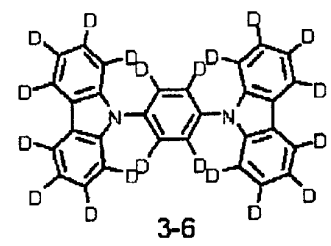
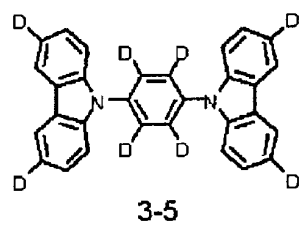
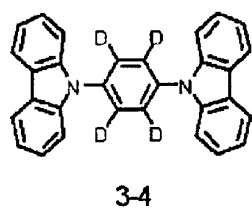
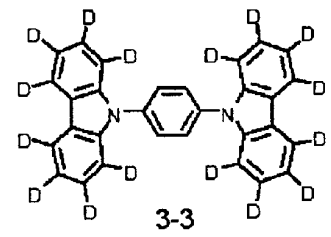
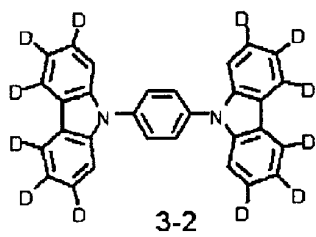
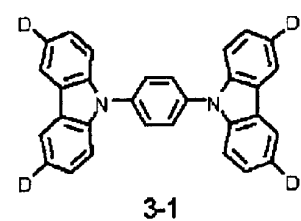
20



30

## 【 0 1 3 6】

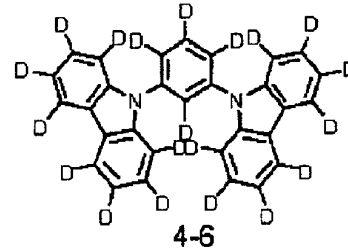
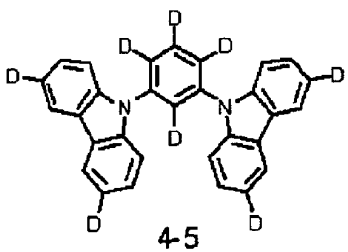
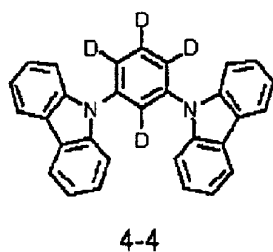
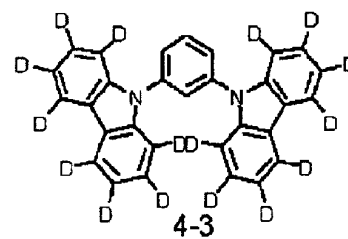
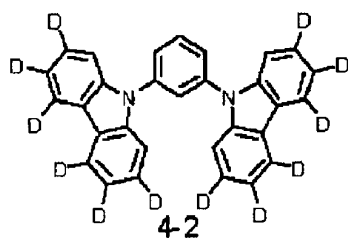
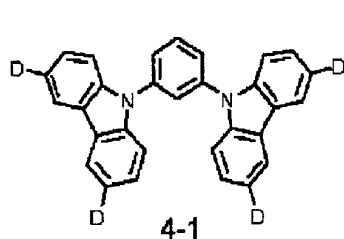
## 【化 5 1】



40

## 【 0 1 3 7】

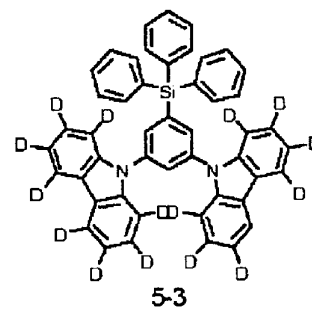
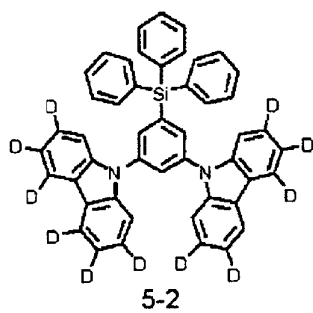
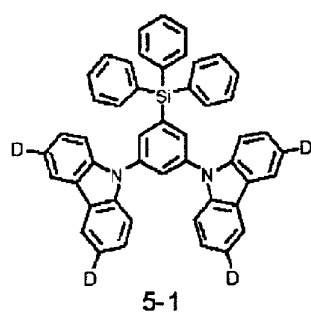
## 【化 5 2】



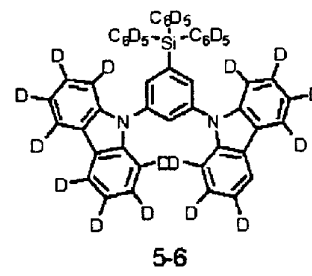
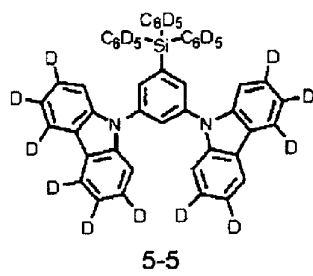
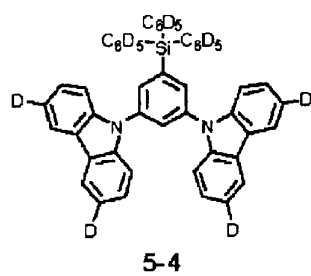
10

## 【 0 1 3 8 】

## 【化 5 3】



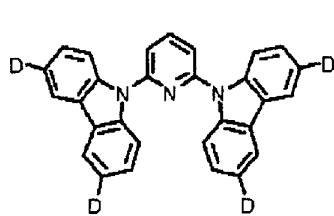
20



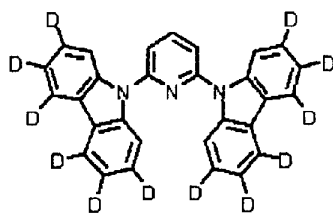
30

## 【 0 1 3 9 】

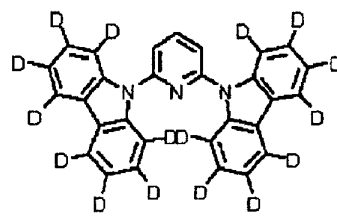
【化 5 4】



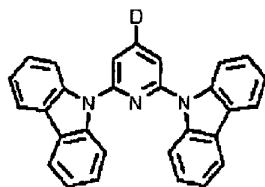
6-1



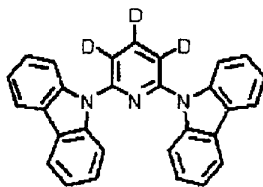
6-2



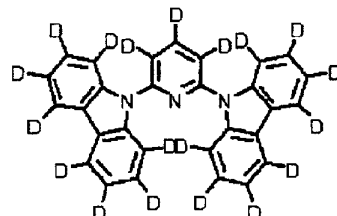
6-3



6-4



6-5

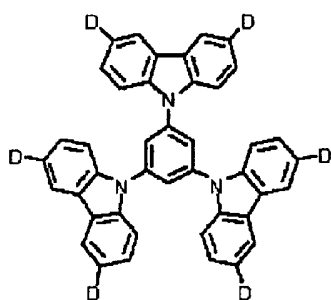


6-6

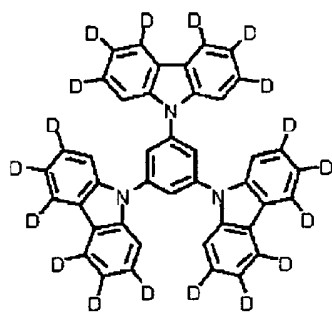
10

【 0 1 4 0 】

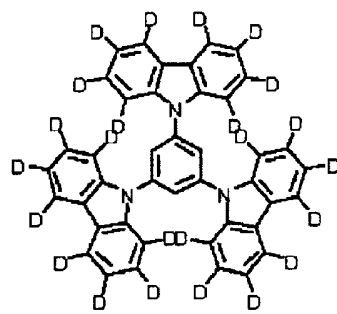
【化 5 5】



7-1

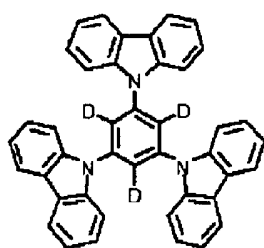


7-2

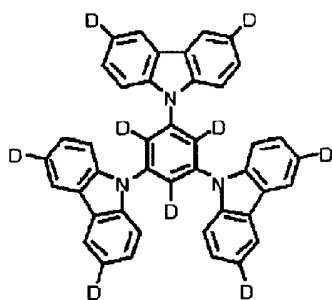


7-3

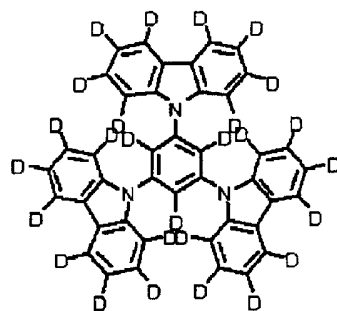
20



7-4



7-5



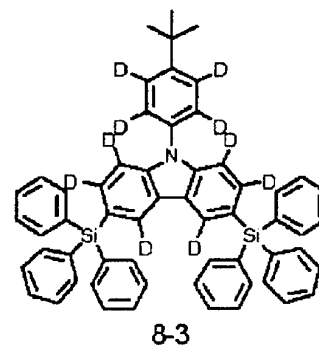
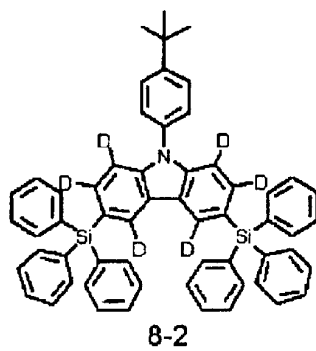
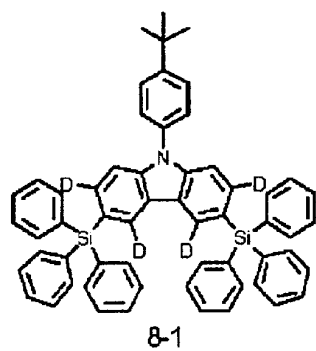
7-6

30

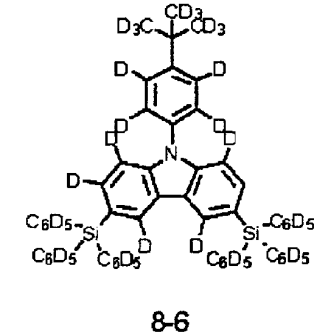
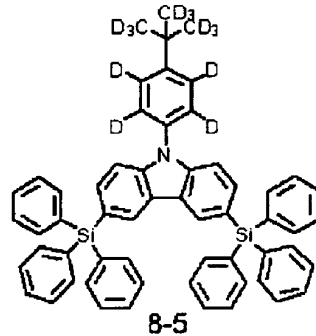
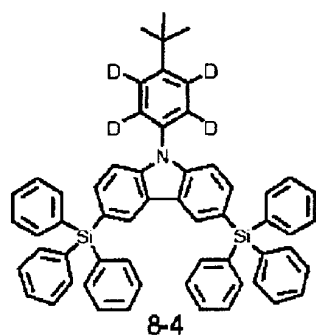
【 0 1 4 1 】

40

## 【化 5 6】



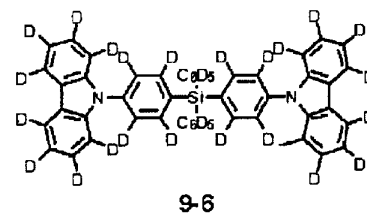
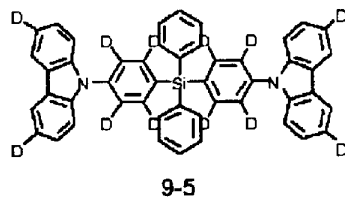
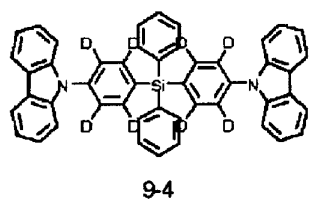
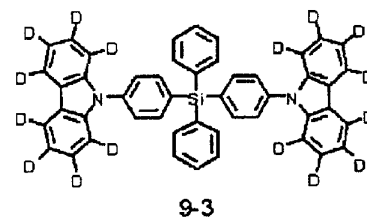
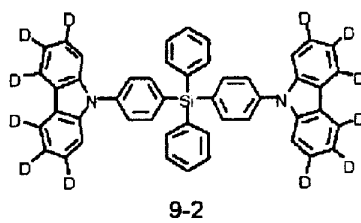
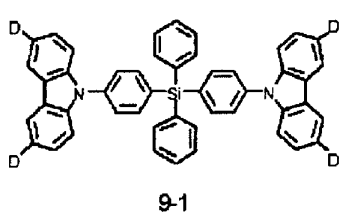
10



20

## 【 0 1 4 2】

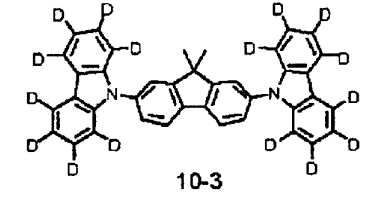
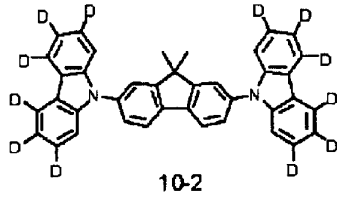
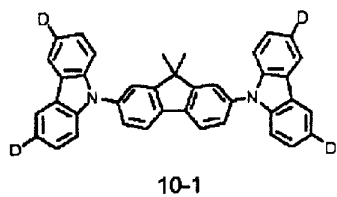
## 【化 5 7】



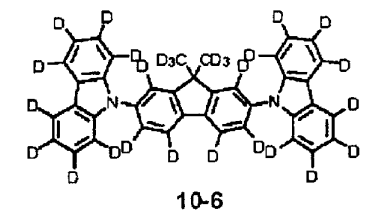
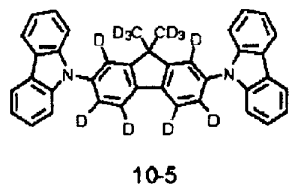
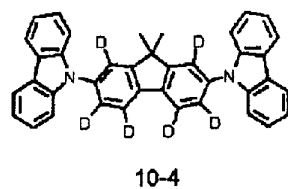
30

## 【 0 1 4 3】

## 【化 5 8】



40

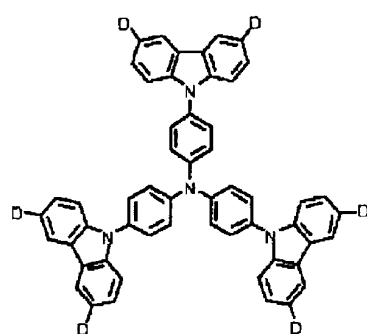


50

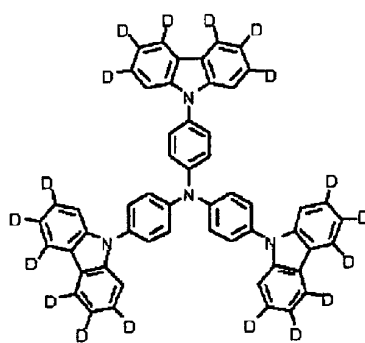


【 0 1 4 4 】

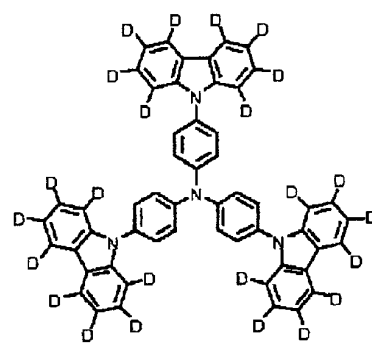
【 化 5 9 】



11-1

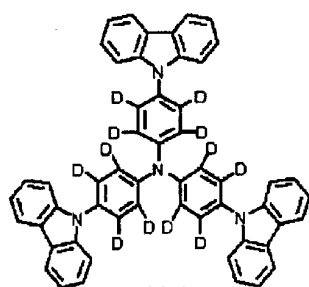


11-2

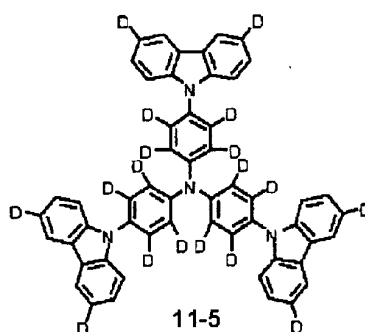


11-3

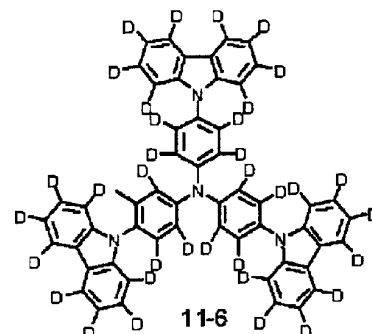
10



11-4



11-5

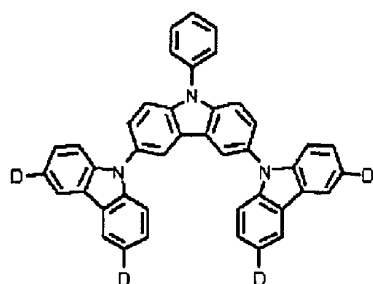


11-6

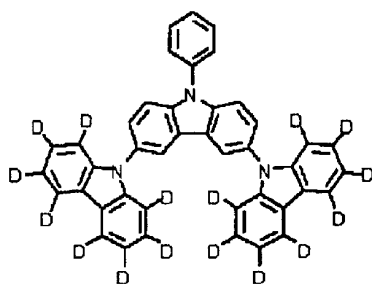
20

【 0 1 4 5 】

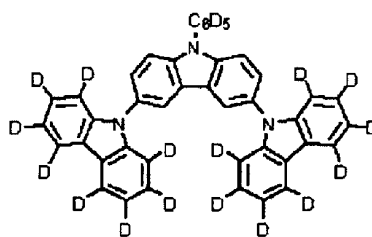
【 化 6 0 】



12-1

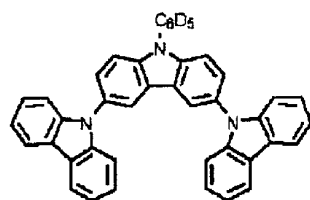


12-2

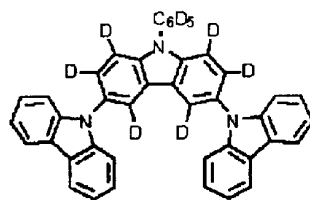


12-3

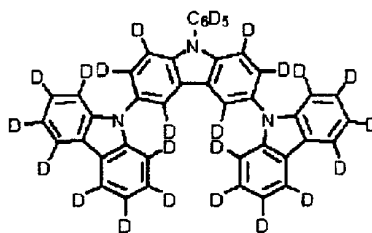
30



12-4



12-5

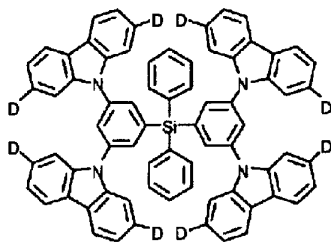


12-6

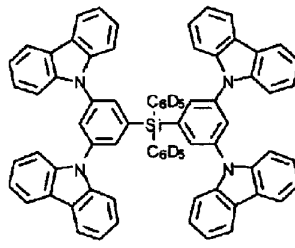
40

【 0 1 4 6 】

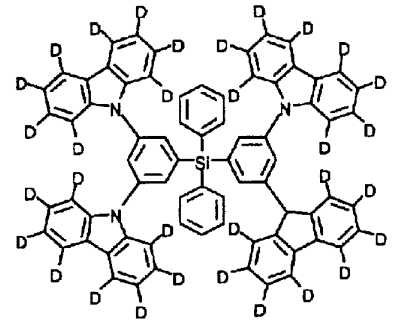
## 【化 6 1】



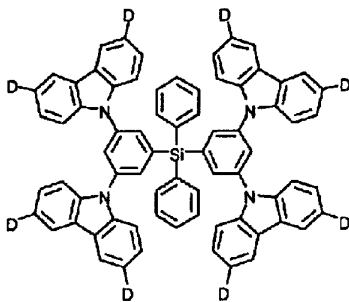
14-1



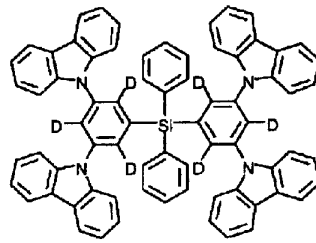
14-2



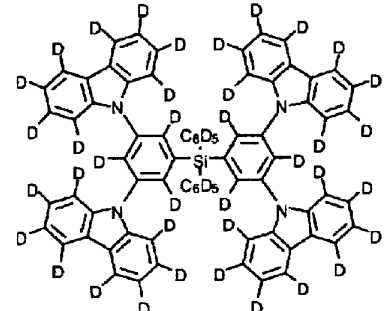
14-3



14-4



14-5



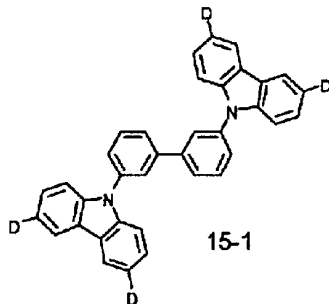
14-6

10

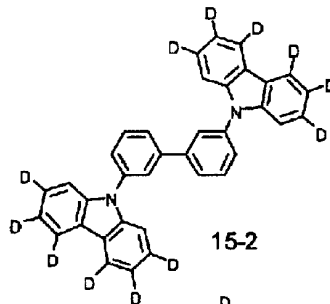
20

## 【 0 1 4 7 】

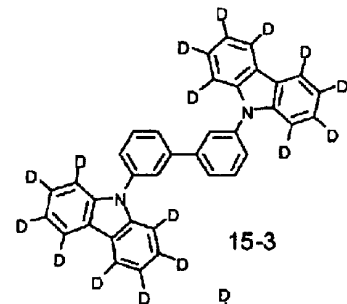
## 【化 6 2】



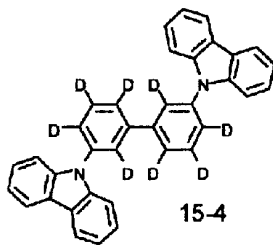
15-1



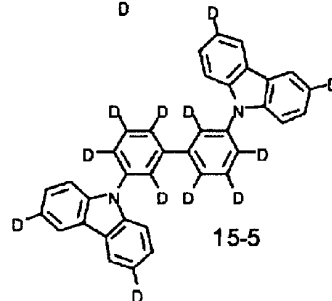
15-2



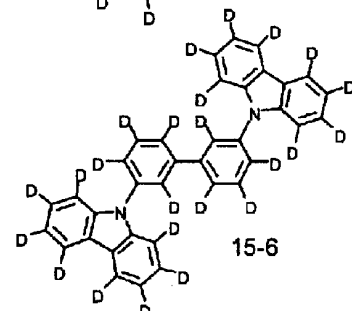
15-3



15-4



15-5



15-6

30

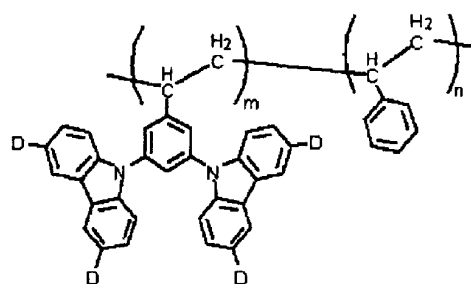
## 【 0 1 4 8 】

一般式(I)で表される化合物を含むポリマー化合物、オリゴマー化合物の具体例を以下に挙げるが、本発明はこれらの化合物に限定されることはない。ポリマー化合物の場合、ホモポリマー化合物であっても良く、共重合体であっても良く、共重合体はランダム共重合体、交互共重合体、ブロック共重合体のいずれでもよい。図中、 $m:n$ はポリマーに含まれる各モノマーのモル比を表し、 $m$ は1~100、 $n$ は0~99の数値を表し、 $m$ と $n$ の和は100である。

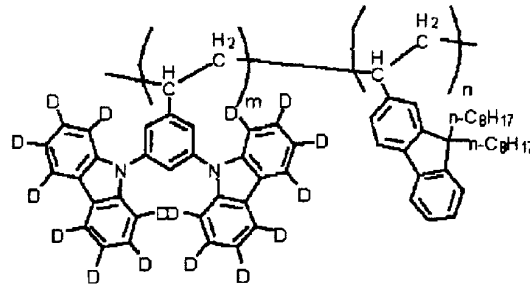
## 【 0 1 4 9 】

40

## 【化 6 3】



13-1



13-2

10

## 【 0 1 5 0 】

本発明の重水素原子を含む一般式 (I) で表される化合物は、種々の公知の合成法にて合成することが可能である。例えば、特開 2004 - 11400 および特開 2004 - 46066 に記載の方法を用いることにより、一般式 (I) で表される化合物の水素原子を重水素原子に変換することができる。また、重水素原子を含む原料を用いて、本発明の重水素原子を含む一般式 (I) で表される化合物を合成することもできる。重水素原子を含む原料として具体的には、重プロモベンゼン-d5 (CAS No. 4165-57-5)、重ヨウ化メチル-d3 (CAS No. 865-50-9) や、J.Am.Chem.Soc. vol.126, No.40, 13033-03043項(2004年)に記載の方法で合成できるレゾルシノール-d6および、そのスルホン酸エステル誘導体などが挙げられる。

20

## 【 0 1 5 1 】

発光材料としては、本発明ではイリジウム錯体系燐光発光材料を用いるが、他の燐光発光材料を併用してもよい。

イリジウム錯体系燐光材料を用いることにより、効率の向上、および耐久性向上の効果がある。

## 【 0 1 5 2 】

イリジウム錯体系燐光材料としては、カルベンでイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体、ピラゾール骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体、ピリジン骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体が特に好ましく、カルベンでイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体、ピラゾール骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体がより好ましく、ピラゾール骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体が特に好ましい。

30

## 【 0 1 5 3 】

配位子とイリジウム原子が結合するとは、配位子とイリジウム原子間の結合が共有結合・配位結合・イオン結合のいずれであってもよいことを表す。

## 【 0 1 5 4 】

イリジウム原子に配位するカルベンとしては、一酸化炭素、イソニトリル基、ヘテロ原子で安定化された炭素カルベンが挙げられる。

40

## 【 0 1 5 5 】

カルベンでイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体系燐光発光材料としては、下記一般式 (II) で表されるイリジウム錯体が好ましい。

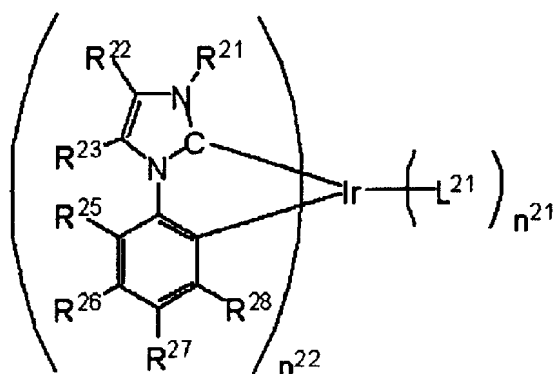
## 【 0 1 5 6 】

一般式 (II) について説明する。

## 【 0 1 5 7 】

一般式 (II)

## 【化 6 4】



10

## 【 0 1 5 8】

(一般式(II)中、 $R^{21} \sim R^{23}$ 及び $R^{25} \sim R^{28}$ は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $L^{21}$ は配位子を表し、 $n^{22}$ は1～3の整数を表し、 $n^{21}$ は0～4の整数を表す。Cはカルベン炭素を表し、イリジウムに配位する。)

## 【 0 1 5 9】

$R^{21} \sim R^{23}$ 及び $R^{25} \sim R^{28}$ は各々独立して水素原子、もしくは置換基を表す。置換基としては、例えば、アルキル基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～10であり、例えばメチル、エチル、i s o - プロピル、t e r t - ブチル、n - オクチル、n - デシル、n - ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシルなどが挙げられる。)、アルケニル基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばビニル、アリル、2 - プテニル、3 - ペンテニルなどが挙げられる。)、アルキニル基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばプロパルギル、3 - ペンチニルなどが挙げられる。)、アリール基(好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、特に好ましくは炭素数6～12であり、例えばフェニル、p - メチルフェニル、ナフチル、アントラニルなどが挙げられる。)、アミノ基(好ましくは炭素数0～30、より好ましくは炭素数0～20、特に好ましくは炭素数0～10であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシ基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～10であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2 - エチルヘキシロキシなどが挙げられる。)、アリールオキシ基(好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、特に好ましくは炭素数6～12であり、例えばフェニルオキシ、1 - ナフチルオキシ、2 - ナフチルオキシなどが挙げられる。)、ヘテロ環オキシ基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばピリジルオキシ、ピラジルオキシ、ピリミジルオキシ、キノリルオキシなどが挙げられる。)、アシル基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～12であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、ピバロイルなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニル基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～12であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。)、アリールオキシカルボニル基(好ましくは炭素数7～30、より好ましくは炭素数7～20、特に好ましくは炭素数7～12であり、例えばフェニルオキシカルボニルなどが挙げられる。)、アシルオキシ基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。)、アシルアミノ基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素

20

30

40

50

数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、アリーロキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数 7 ~ 30、より好ましくは炭素数 7 ~ 20、特に好ましくは炭素数 7 ~ 12 であり、例えばフェニロキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、スルホニルアミノ基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。)、スルファモイル基(好ましくは炭素数 0 ~ 30、より好ましくは炭素数 0 ~ 20、特に好ましくは炭素数 0 ~ 12 であり、例えばスルファモイル、メチルスルファモイル、ジメチルスルファモイル、フェニルスルファモイルなどが挙げられる。)、カルバモイル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばカルバモイル、メチルカルバモイル、ジエチルカルバモイル、フェニルカルバモイルなどが挙げられる。)、アルキルチオ基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。)、アリールチオ基(好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロ環チオ基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、スルホニル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメシル、トシルなどが挙げられる。)、スルフィニル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメタンスルフィニル、ベンゼンスルフィニルなどが挙げられる。)、ウレイド基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばウレイド、メチルウレイド、フェニルウレイドなどが挙げられる。)、リン酸アミド基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばジエチルリン酸アミド、フェニルリン酸アミドなどが挙げられる。)、ヒドロキシ基、メルカプト基、ハロゲン原子(例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子)、シアノ基、スルホ基、カルボキシル基、ニトロ基、ヒドロキサム酸基、スルフィノ基、ヒドラジノ基、イミノ基、ヘテロ環基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子、具体的には例えばイミダゾリル、ピリジル、キノリル、フリル、チエニル、ピペリジル、モルホリノ、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、カルバゾリル基、アゼピニル基などが挙げられる。)、シリル基(好ましくは炭素数 3 ~ 40、より好ましくは炭素数 3 ~ 30、特に好ましくは炭素数 3 ~ 24 であり、例えばトリメチルシリル、トリフェニルシリルなどが挙げられる。)、シリルオキシ基(好ましくは炭素数 3 ~ 40、より好ましくは炭素数 3 ~ 30、特に好ましくは炭素数 3 ~ 24 であり、例えばトリメチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。)などが挙げられる。これらの置換基は更に置換されてもよい。

#### 【0160】

$R^{21}$ と $R^{22}$ 、あるいは、 $R^{22}$ と $R^{23}$ は、それぞれ結合して環構造を形成していてもよい。

#### 【0161】

$R^{21}$ は、置換基として好ましくは、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基であり、より好ましくは、アルキル基、アリール基であり、特に好ましくは、メチル基、tert-ブチル基、フェニル基、メシチル基、2-o-キシリル基である。

#### 【0162】

$R^{22}$ 、 $R^{23}$ は、置換基として好ましくは、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基であり、より好ましくは、アルキル基、アリール基であり、特に好ましくは、メチル基、tert-ブチル基、フェニル基である。

## 【 0 1 6 3 】

$R^{25} \sim R^{27}$ は、置換基として好ましくは、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、ハロゲン基、シアノ基であり、より好ましくは、アルキル基、アリール基ハロゲン基、シアノ基であり、特に好ましくは、メチル基、tert-ブチル基、フェニル基、フッ素原子、シアノ基である。

## 【 0 1 6 4 】

$L^{21}$ は配位子を表す。配位子としては、例えば、「Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds」Springer-Verlag社 H.Yersin著 1987年発行、「有機金属化学 - 基礎と応用 - 」裳華房社 山本明夫著 1982年発行 等に記載の配位子が挙げられ、好ましくは、ハロゲン配位子（好ましくは塩素配位子、フッ素配位子）、含窒素ヘテロ環配位子（例えばピピリジル、フェナントロリン、フェニルピリジン、ピラゾリルピリジン、ベンズイミダゾリルピリジン、フェニルピラゾール、ピコリン酸、ジピコリン酸など）、ジケトン配位子、ニトリル配位子、CO配位子、イソニトリル配位子、りん配位子（例えば、ホスフィン誘導体、亜りん酸エステル誘導体、ホスフィニン誘導体など）、カルボン酸配位子（例えば酢酸配位子など）であり、より好ましくは、含窒素ヘテロ環配位子（例えばピピリジル、フェナントロリン、フェニルピリジン、ピラゾリルピリジン、ベンズイミダゾリルピリジン、フェニルピラゾール）である。

## 【 0 1 6 5 】

含窒素ヘテロ環配位子における含窒素ヘテロ環としてはピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、トリアゾール環、チアゾール環、オキサゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、アザホスフィニン環が好ましく、ピリジン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環がより好ましく、ピリジン環、ピラゾール環、イミダゾール環がさらに好ましい。

含窒素ヘテロ環配位子は、置換基を有していてもよい。置換基としては前記 $R^{11}$ で説明した基が挙げられ、例えば、アルキル基、アリール基、アルコキシ基、フッ素原子、シアノ基、置換アミノ基等が好ましい。

## 【 0 1 6 6 】

$n^{22}$ として好ましくは、2～3であり、特に好ましくは、3である。 $n^{21}$ が2～3の時は、複数の $L^{21}$ は同じであっても異なってもよい。 $n^{22}$ が2～3の時は、 $n^{22}$ によって数が決定される配位子は、同じであっても異なってもよい。

## 【 0 1 6 7 】

カルベンでイリジウム原子と結合する配位子を含む一般式(II)で表されるイリジウム錯体系燐光発光材料としては、下記、一般式(III)で表されるイリジウム錯体系燐光発光材料がより好ましい。

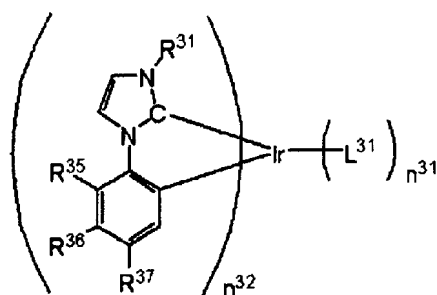
## 【 0 1 6 8 】

一般式(III)について説明する。

## 【 0 1 6 9 】

一般式(III)

## 【 化 6 5 】



## 【 0 1 7 0 】

(一般式(III)中、 $R^{31}$ はアルキル基、もしくはアリール基を表し、 $R^{35} \sim R^{37}$ は各々

独立して、水素原子、フッ素原子、アルキル基、またはシアノ基を表す。また、 $R^{35}$ と $R^{36}$ 、もしくは、 $R^{36}$ と $R^{37}$ は互いに結合した縮環構造であってもよい。 $L^{31}$ は配位子を表し、 $n^{32}$ は1～3の整数を表し、 $n^{31}$ は0～4の整数を表す。 $C$ はカルベン炭素を表し、イリジウムに配位する。)

【0171】

$R^{31}$ はアルキル基、もしくは、アリール基を表し、より好ましくは、アルキル基を表す。

【0172】

$R^{31}$ のアルキル基としては、メチル基、エチル基、tert-ブチル基、シクロヘキシル基が好ましく、メチル基、tert-ブチル基がより好ましく、メチル基が特に好ましい。

10

【0173】

$R^{31}$ のアリール基としては、フェニル基、p-メチルフェニル基、2-キシリル基、5-キシリル基、メシチル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、アントラニル基が好ましく、フェニル基、p-メチルフェニル基、2-キシリル基、5-キシリル基、メシチル基がより好ましく、フェニル基が特に好ましい。

【0174】

$R^{35}$ と前記 $R^{25}$ 、 $R^{36}$ と前記 $R^{26}$ 、および、 $R^{37}$ と前記 $R^{27}$ はそれぞれ同義である。

【0175】

$R^{35}$ は水素原子、フッ素原子、アルキル基、シアノ基が好ましく、水素原子、フッ素原子、シアノ基がより好ましく、フッ素原子が特に好ましい。

20

【0176】

$R^{36}$ は水素原子、フッ素原子、アルキル基、シアノ基が好ましく、水素原子、フッ素原子、シアノ基がより好ましく、シアノ基が特に好ましい。

【0177】

$R^{37}$ は水素原子、フッ素原子、アルキル基、シアノ基が好ましく、フッ素原子、シアノ基がより好ましく、シアノ基が特に好ましい。

【0178】

$R^{35}$ 、 $R^{36}$ 、 $R^{37}$ のアルキル基としては、メチル基、エチル基、tert-ブチル基、シクロヘキシル基、トリフルオロメチル基、パーフルオロブチル基、が好ましく、メチル基、tert-ブチル基、トリフルオロメチル基、パーフルオロブチル基、がより好ましく、トリフルオロメチル基が特に好ましい。

30

【0179】

$R^{35}$ と $R^{36}$ 、もしくは、 $R^{36}$ と $R^{37}$ が互いに結合して形成するベンゾ縮環構造は、ジベンゾフラニル、ジベンゾチオフエニル、N-フェニルカルバゾリル、N-メチルカルバゾリル、9,9-ジメチルフルオレニル、N-フェニルインドリル、N-メチルインドリル、ベンゾチエニル、1,1-ジメチルインデニルが好ましく、ジベンゾフリル、ジベンゾチオフエニル、N-フェニルカルバゾリル、N-メチルカルバゾリル、9,9-ジメチルフルオレニルがより好ましく、ジベンゾフラニルが特に好ましい。

40

【0180】

$R^{35}$ と $R^{36}$ 、もしくは、 $R^{36}$ と $R^{37}$ が互いに結合して形成するジベンゾフラニル構造、もしくは、ジベンゾチオフエニル構造は、 $R^{35}$ 、もしくは、 $R^{37}$ の位置で酸素原子や硫黄原子と結合するものが好ましく、 $R^{35}$ の位置で酸素原子や硫黄原子と結合するものが特に好ましい。

【0181】

$L^{31}$ は前記 $L^{21}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0182】

$n^{31}$ と前記 $n^{21}$ 、および、 $n^{32}$ と前記 $n^{22}$ はそれぞれ同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0183】

50

ピラゾール骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体系  
 燐光発光材料としては、下記一般式(Ⅳ)で表されるイリジウム錯体が好ましい。

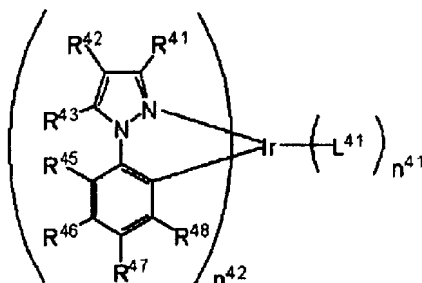
【0184】

一般式(Ⅳ)について説明する。

【0185】

一般式(Ⅳ)

【化66】



10

【0186】

(一般式(Ⅳ)中、 $R^{41} \sim R^{43}$ 及び $R^{45} \sim R^{48}$ は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $L^{41}$ は配位子を表し、 $n^{42}$ は1～3の整数を表し、 $n^{41}$ は0～4の整数を表す。  
 )

20

【0187】

$R^{41} \sim R^{43}$ 及び $R^{45} \sim R^{48}$ は前記 $R^{21} \sim R^{23}$ 及び $R^{25} \sim R^{28}$ と同義である。

【0188】

$R^{41} \sim R^{43}$ は、置換基として好ましくは、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基であり、より好ましくは、アルキル基、アリール基であり、特に好ましくは、メチル基、tert-ブチル基、フェニル基である。

【0189】

$R^{45} \sim R^{47}$ は、置換基として好ましくは、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、ハロゲン基、シアノ基であり、より好ましくは、アルキル基、アリール基ハロゲン基、シアノ基であり、特に好ましくは、メチル基、tert-ブチル基、フェニル基、フッ素原子、シアノ基である。

30

【0190】

$R^{45}$ と $R^{46}$ 、あるいは、 $R^{46}$ と $R^{47}$ は、それぞれ結合して環構造を形成していてもよい。

【0191】

$L^{41}$ は前記 $L^{21}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0192】

$n^{41}$ と前記 $n^{21}$ 、および、 $n^{42}$ と前記 $n^{22}$ はそれぞれ同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0193】

ピラゾール骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含む一般式(Ⅳ)で表されるイリジウム錯体系燐光発光材料としては、下記、一般式(Ⅴ)で表されるイリジウム錯体系燐光発光材料がより好ましい。

40

【0194】

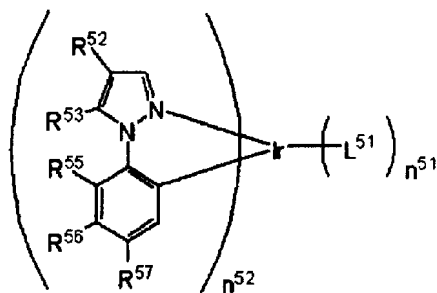
一般式(Ⅴ)について説明する。

【0195】

一般式(Ⅴ)



## 【化 6 7】



10

## 【 0 1 9 6 】

(一般式(V)中、 $R^{52} \sim R^{53}$ は各々独立して、水素原子、アルキル基、またはアリール基を表し、 $R^{55} \sim R^{57}$ は各々独立して、水素原子、フッ素原子、アルキル基、またはシアノ基を表す。また、 $R^{55}$ と $R^{56}$ 、もしくは、 $R^{56}$ と $R^{57}$ は互いに結合した縮環構造であってもよい。 $L^{51}$ は配位子を表し、 $n^{52}$ は1～3の整数を表し、 $n^{51}$ は0～4の整数を表す。)

## 【 0 1 9 7 】

$R^{52}$ 、 $R^{53}$ としては、水素原子、アルキル基、アリール基が好ましく、水素原子、メチル基、tert-ブチル基、フェニル基がより好ましく、水素原子が特に好ましい。

## 【 0 1 9 8 】

$R^{55}$ と前記 $R^{35}$ 、 $R^{56}$ と前記 $R^{36}$ 、および、 $R^{57}$ と前記 $R^{37}$ はそれぞれ同義であり、好ましい範囲も同じである。

20

## 【 0 1 9 9 】

$L^{51}$ は前記 $L^{21}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

## 【 0 2 0 0 】

$n^{51}$ と前記 $n^{21}$ 、および、 $n^{52}$ と前記 $n^{22}$ はそれぞれ同義であり、好ましい範囲も同じである。

## 【 0 2 0 1 】

ピリジン骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含むイリジウム錯体系燐光発光材料としては、下記一般式(VI)で表されるイリジウム錯体が好ましい。

30

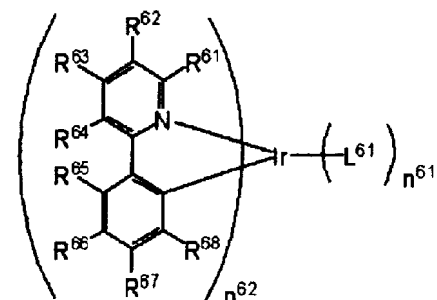
## 【 0 2 0 2 】

一般式(VI)について説明する。

## 【 0 2 0 3 】

一般式(VI)

## 【化 6 8】



40

## 【 0 2 0 4 】

(一般式(VI)中、 $R^{61} \sim R^{68}$ は各々独立して水素原子、もしくは置換基であり、 $L^{61}$ は配位子を表し、 $n^{62}$ は1～3の整数を表し、 $n^{61}$ は0～4の整数を表す。)

## 【 0 2 0 5 】

$R^{61} \sim R^{63}$ 及び $R^{65} \sim R^{68}$ は前記 $R^{21} \sim R^{23}$ 及び $R^{25} \sim R^{28}$ と同義である。 $R^{64}$ は、 $R$

50

<sup>23</sup>と同義である。

【0206】

R<sup>61</sup> ~ R<sup>64</sup>は、置換基として好ましくは、アルキル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、ヘテロアリールオキシ基、置換アミノ基であり、より好ましくは、アルキル基、アルコキシ基、アリールオキシ基、置換アミノ基であり、特に好ましくは、メチル基、tert-ブチル基、メトキシ基、フェノキシ基、ジメチルアミノ基、ジフェニルアミノ基である。

【0207】

R<sup>61</sup>とR<sup>62</sup>、あるいは、R<sup>62</sup>とR<sup>63</sup>、あるいは、R<sup>63</sup>とR<sup>64</sup>は、それぞれ結合して環構造を形成していてもよい。

10

【0208】

R<sup>65</sup> ~ R<sup>68</sup>は、置換基として好ましくは、アルキル基、アリール基、ヘテロアリール基、ハロゲン基、シアノ基であり、より好ましくは、アルキル基、アリール基ハロゲン基、シアノ基であり、特に好ましくは、メチル基、tert-ブチル基、フェニル基、フッ素原子、シアノ基である。

【0209】

R<sup>65</sup>とR<sup>66</sup>、あるいは、R<sup>66</sup>とR<sup>67</sup>、あるいは、R<sup>67</sup>とR<sup>68</sup>は、それぞれ結合して環構造を形成していてもよい。

【0210】

L<sup>61</sup>は前記L<sup>21</sup>と同義であり、好ましい範囲も同じである。

20

【0211】

n<sup>61</sup>と前記n<sup>21</sup>、および、n<sup>62</sup>と前記n<sup>22</sup>はそれぞれ同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0212】

ピリジン骨格の窒素原子でイリジウム原子と結合する配位子を含む一般式(VI)で表されるイリジウム錯体系燐光発光材料としては、下記、一般式(VII)で表されるイリジウム錯体系燐光発光材料がより好ましい。

【0213】

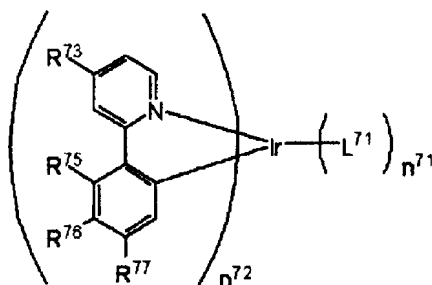
一般式(VII)について説明する。

【0214】

一般式(VII)

30

【化69】



40

【0215】

(一般式(VII)中、R<sup>73</sup>は水素原子、アルキル基、アミノ基、またはアルコキシ基を表し、R<sup>75</sup> ~ R<sup>77</sup>は各々独立して、水素原子、フッ素原子、シアノ基、またはアルキル基を表し、L<sup>71</sup>は配位子を表し、n<sup>72</sup>は1 ~ 3の整数を表し、n<sup>71</sup>は0 ~ 4の整数を表す。)

【0216】

R<sup>73</sup>としては、アルキル基、アミノ基、アルコキシ基が好ましく、メチル基、tert-ブチル基、ジメチルアミノ基、ジフェニルアミノ基、メトキシ基、tert-ブトキシ基、フェノキシ基がより好ましく、メトキシ基が特に好ましい。

【0217】

50

$R^{75}$ は水素原子、フッ素原子、アルキル基、シアノ基が好ましく、水素原子、フッ素原子、シアノ基がより好ましく、フッ素原子が特に好ましい。

【0218】

$R^{76}$ は水素原子、フッ素原子、アルキル基、シアノ基が好ましく、水素原子、フッ素原子、シアノ基がより好ましく、シアノ基が特に好ましい。

【0219】

$R^{77}$ は水素原子、フッ素原子、アルキル基、シアノ基が好ましく、フッ素原子、シアノ基がより好ましく、フッ素原子が特に好ましい。

【0220】

$R^{75}$ 、 $R^{76}$ 、 $R^{77}$ のアルキル基としては、メチル基、エチル基、tert-ブチル基、シクロヘキシル基、トリフルオロメチル基、パーフルオロブチル基、が好ましく、メチル基、tert-ブチル基、トリフルオロメチル基、パーフルオロブチル基、がより好ましく、トリフルオロメチル基が特に好ましい。

10

【0221】

$L^{71}$ は前記 $L^{21}$ と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0222】

$n^{71}$ と前記 $n^{21}$ 、および、 $n^{72}$ と前記 $n^{22}$ はそれぞれ同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0223】

イリジウム錯体燐光発光材料の最大発光波長とは、発光スペクトルの極大値において、発光強度が最大であるところの波長である。最大発光波長としては、450nm~470nmであることが好ましく、450nm~465nmであることがより好ましく、450nm~460nmであることが特に好ましい。

20

【0224】

イリジウム錯体燐光発光材料としては、国際公開第00-70655号、国際公開第01-41512号、国際公開第02-5645号、特開2002-117978、国際公開第04-085450号、国際公開第06-121811号、国際公開第05-019373号、国際公開第05-113704号、国際公開第04-016711号、Coordination Chemistry Reviews 250(2006)2093-2126、に記載の化合物が挙げられる。

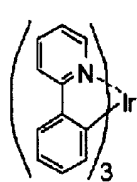
【0225】

イリジウム錯体燐光発光材料として、具体例を以下に列挙するが、本発明はこれらの例に限定されるものではない。

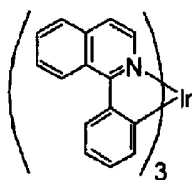
30

【0226】

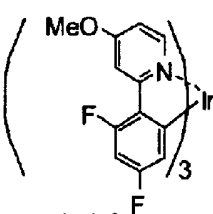
【化 7 0】



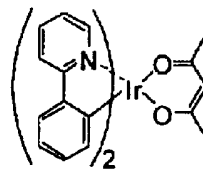
Ir-1-1



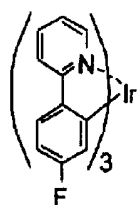
Ir-1-2



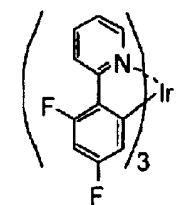
Ir-1-3



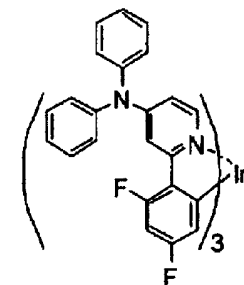
Ir-1-4



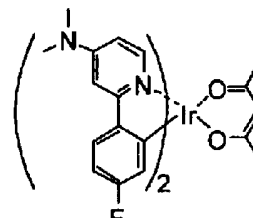
Ir-1-5



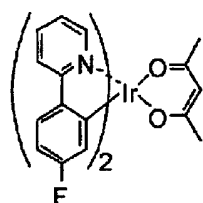
Ir-1-6



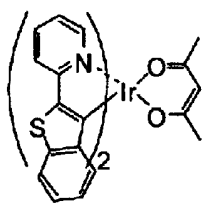
Ir-1-7



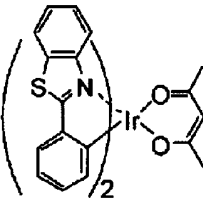
Ir-1-8



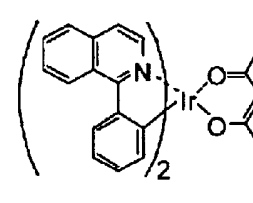
Ir-1-9



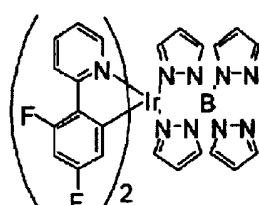
Ir-1-10



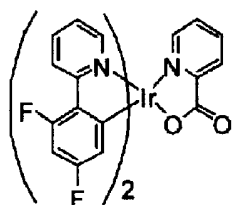
Ir-1-11



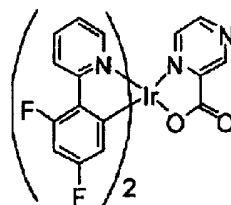
Ir-1-12



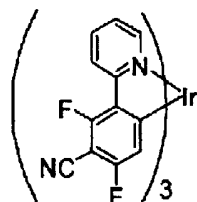
Ir-1-13



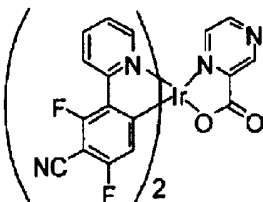
Ir-1-14



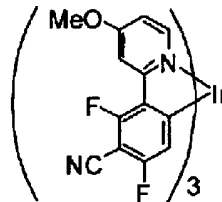
Ir-1-15



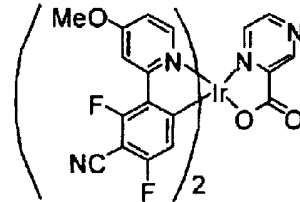
Ir-1-16



Ir-1-17



Ir-1-18



Ir-1-19

【 0 2 2 7 】

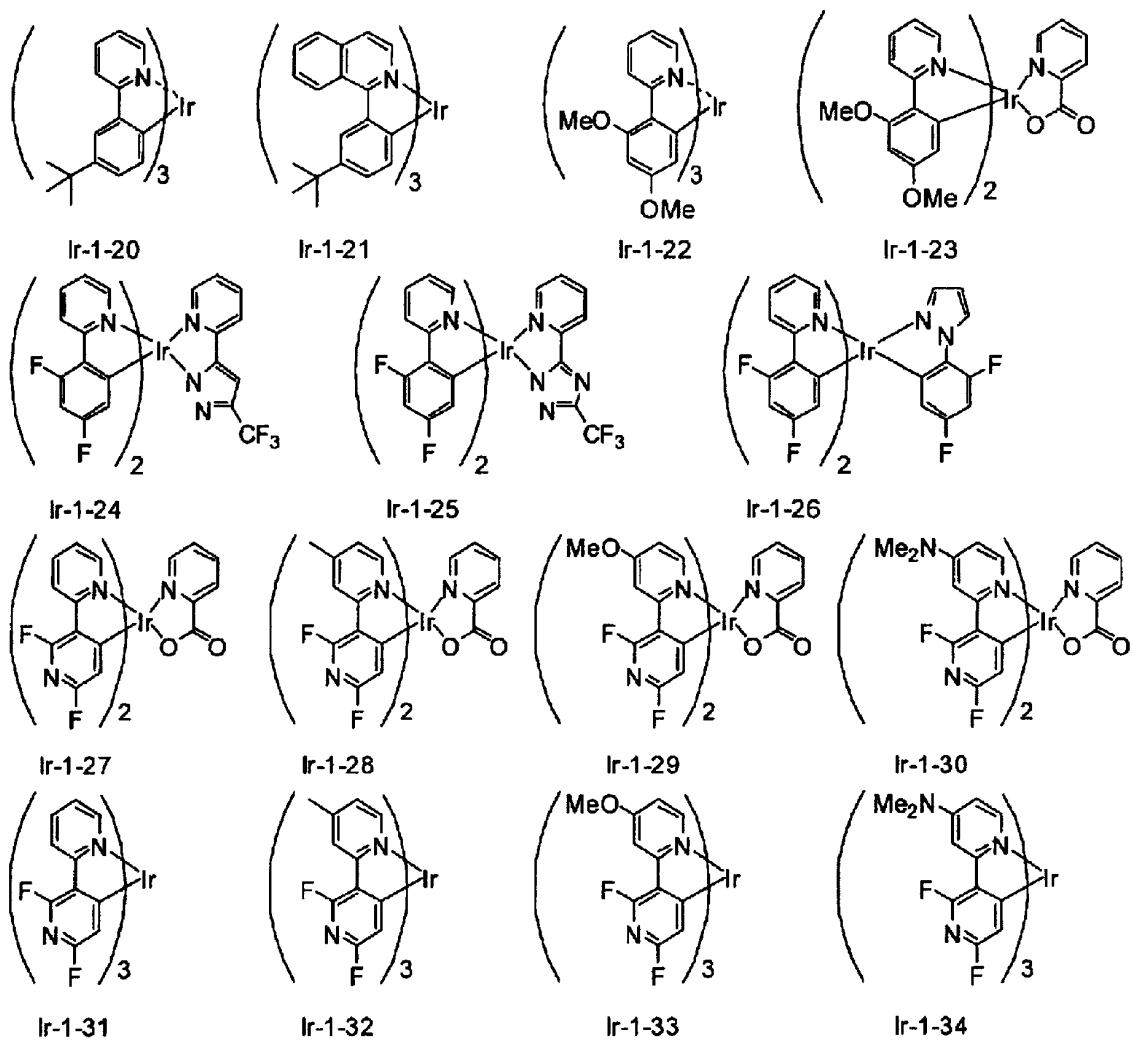
10

20

30

40

【化 7 1】



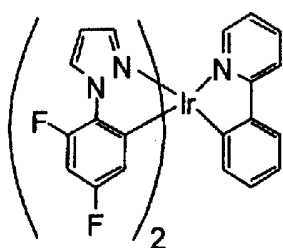
【 0 2 2 8 】

10

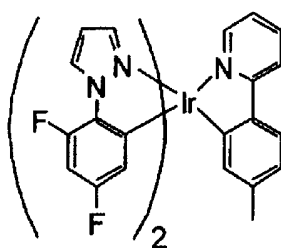
20

30

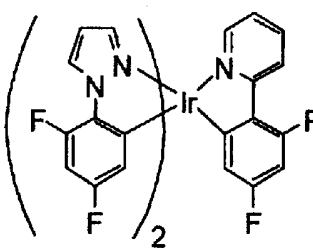
【化 7 2】



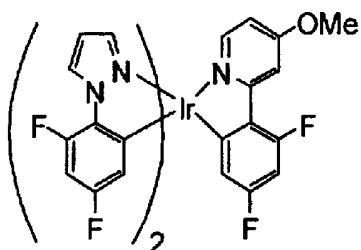
Ir-2-1



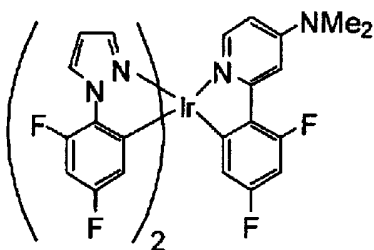
Ir-2-2



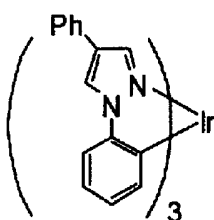
Ir-2-3



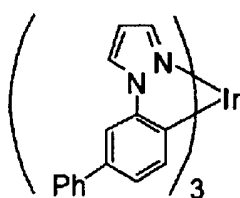
Ir-2-4



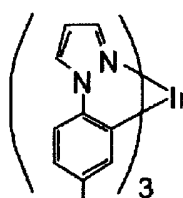
Ir-2-5



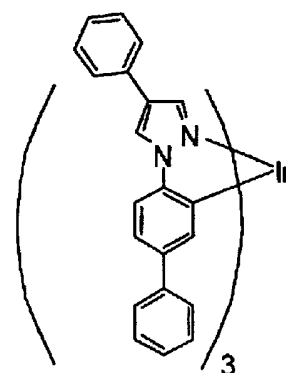
Ir-2-6



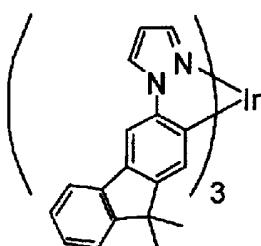
Ir-2-7



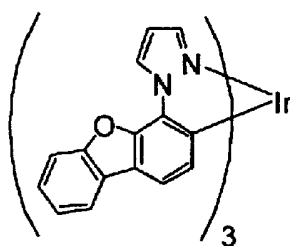
Ir-2-8



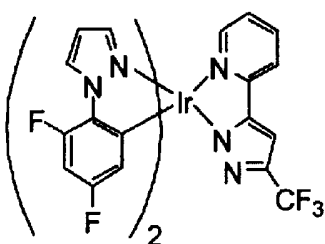
Ir-2-9



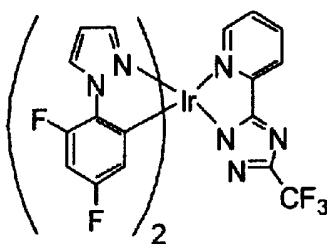
Ir-2-10



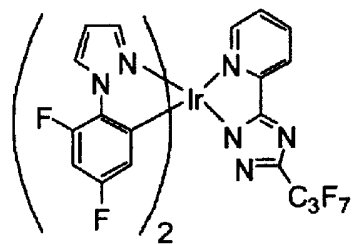
Ir-2-11



Ir-2-12



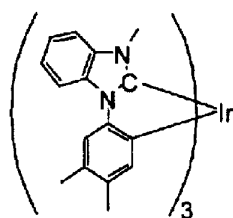
Ir-2-13



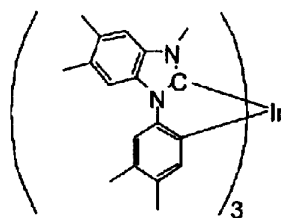
Ir-2-14

【 0 2 2 9 】

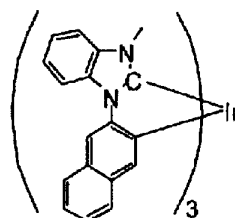
【化 7 3】



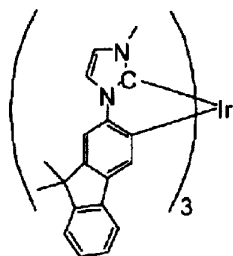
Ir-3-1



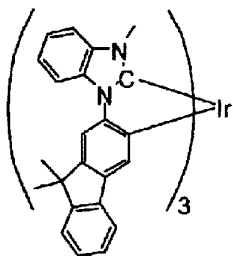
Ir-3-2



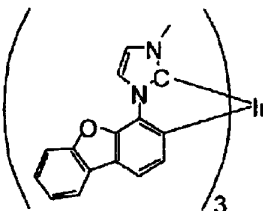
Ir-3-3



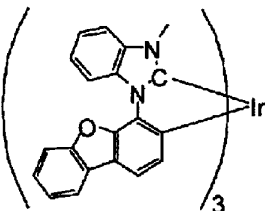
Ir-3-4



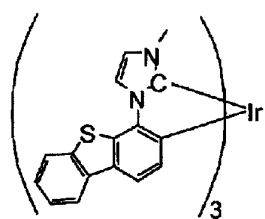
Ir-3-5



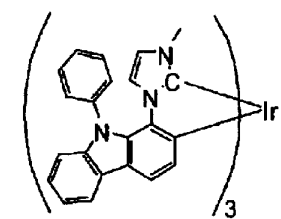
Ir-3-6



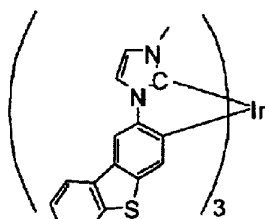
Ir-3-7



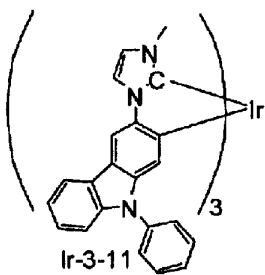
Ir-3-8



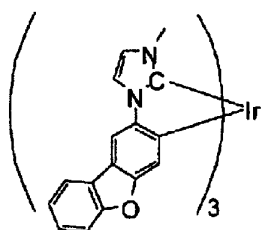
Ir-3-9



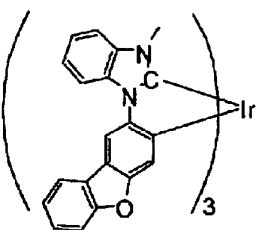
Ir-3-10



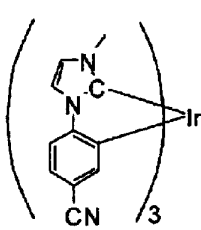
Ir-3-11



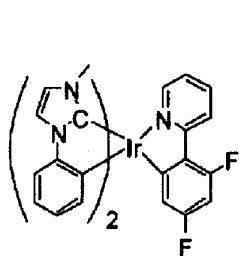
Ir-3-12



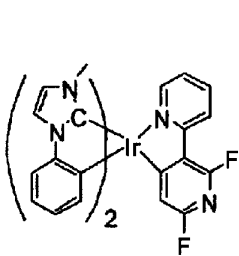
Ir-3-13



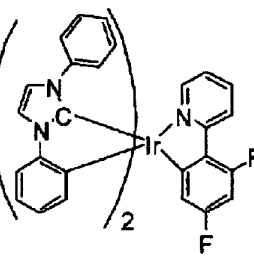
Ir-3-14



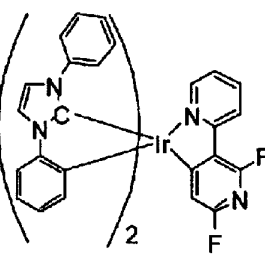
Ir-3-15



Ir-3-16



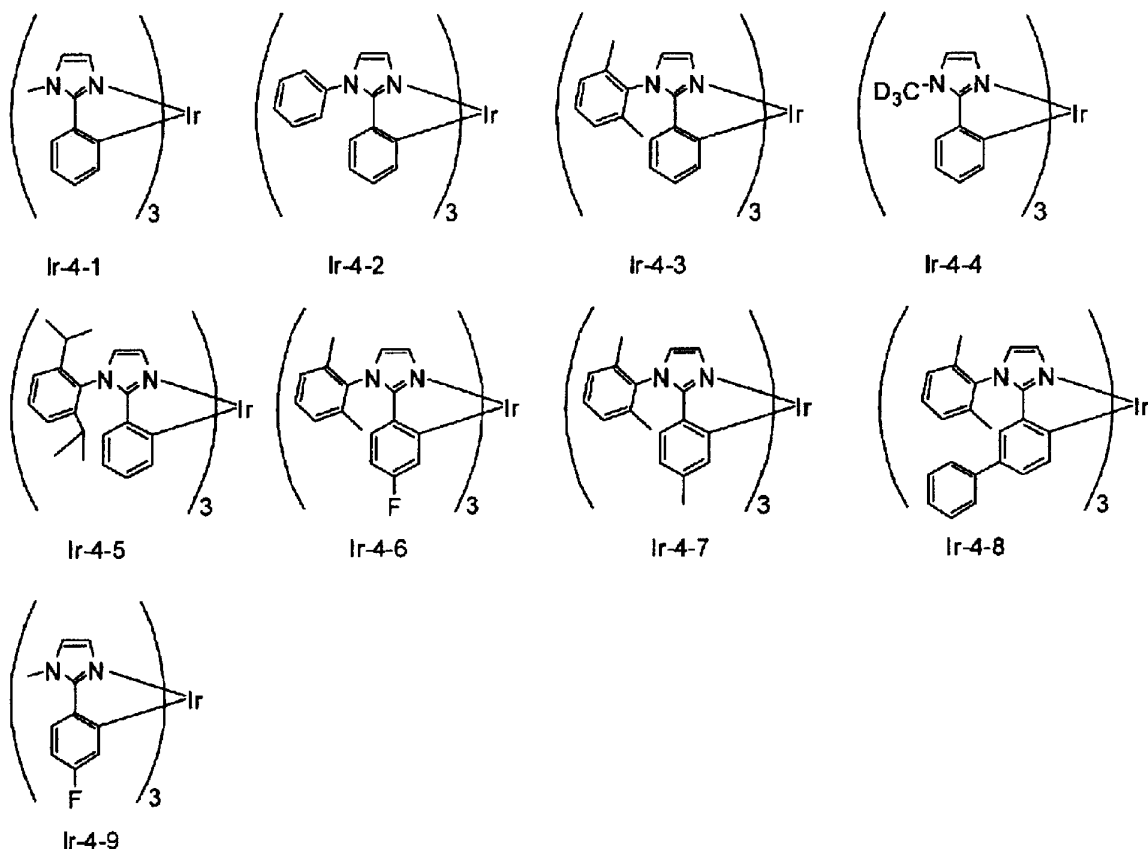
Ir-3-17



Ir-3-18

【 0 2 3 0 】

## 【化 7 4】



## 【0 2 3 1】

上記錯体化合物として例示した化合物は、例えば以下に示す工程により製造することができる。

## 【0 2 3 2】

上記の金属錯体化合物は、Journal of Organic Chemistry 53, 786, (1988)、G. R. Newkome et al. の、789 頁、左段 53 行～右段 7 行に記載の方法、790 頁、左段 18 行～38 行に記載の方法、790 頁、右段 19 行～30 行に記載の方法およびその組み合わせ、Chemische Berichte 113, 2749 (1980)、H. Lexy ほか) の、2752 頁、26 行～35 行に記載の方法等、種々の手法で合成できる。

例えば、配位子、またはその解離体と金属化合物を溶媒（例えば、ハロゲン系溶媒、アルコール系溶媒、エーテル系溶媒、エステル系溶媒、ケトン系溶媒、ニトリル系溶媒、アミド系溶媒、スルホン系溶媒、スルホキサイド系溶媒、水などが挙げられる）の存在下、もしくは、溶媒非存在下、塩基の存在下（無機、有機の種々の塩基、例えば、ナトリウムメトキシド、*t*-ブトキシカリウム、トリエチルアミン、炭酸カリウムなどが挙げられる）、もしくは、塩基非存在下、室温以下、もしくは加熱し（通常の加熱以外にもマイクロウェーブで加熱する手法も有効である）得ることができる。

## 【0 2 3 3】

本発明において、イリジウム錯体は、発光材料として用いることが好ましいが、発光層以外に用いてもよい。

## 【0 2 3 4】

イリジウム錯体は、発光層中に一般的に発光層を形成する全化合物質量に対して、0.1 質量%～50 質量%含有されるが、耐久性、外部量子効率の観点から 1 質量%～50 質量%含有されることが好ましく、2 質量%～40 質量%含有されることがより好ましい。

## 【0 2 3 5】

本発明の素子を構成する各要素について詳細に説明する。

## 【0 2 3 6】

10

20

30

40

50



## 〔有機電界発光素子〕

以下、本発明の素子について詳細に説明する。

本発明の発光素子は基板上に陰極と陽極を有し、両電極の間に有機発光層（以下、単に「発光層」と称する場合がある）を含む有機層（有機化合物のみからなる層であってもよいし、無機化合物を含有する有機層であってもよい）を有する。従って、本発明では有機層として発光層のみの構成であってもよい。発光素子の性質上、陽極及び陰極のうち少なくとも一方の電極は、透明であることが好ましい。

## 【0237】

本発明における有機層の積層の態様としては、陽極側から、正孔輸送層、発光層、電子輸送層の順に積層されている態様が好ましい。更に、正孔輸送層と発光層との間、又は、発光層と電子輸送層との間には、電荷ブロック層等を有していてもよい。陽極と正孔輸送層との間に、正孔注入層を有してもよく、陰極と電子輸送層との間には、電子注入層を有してもよい。尚、各層は複数の二次層に分かれていてもよい。

10

## 【0238】

次に、本発明の発光素子を構成する要素について、詳細に説明する。

## 【0239】

## &lt;基板&gt;

本発明で使用する基板としては、有機層から発せられる光を散乱又は減衰させない基板であることが好ましい。その具体例としては、ジルコニア安定化イットリウム（YSZ）、ガラス等の無機材料、ポリエチレンテレフタレート、ポリブチレンフタレート、ポリエチレンナフタレート等のポリエステル、ポリスチレン、ポリカーボネート、ポリエーテルスルホン、ポリアリレート、ポリイミド、ポリシクロオレフィン、ノルボルネン樹脂、ポリ（クロロトリフルオロエチレン）等の有機材料が挙げられる。

20

例えば、基板としてガラスを用いる場合、その材質については、ガラスからの溶出イオンを少なくするため、無アルカリガラスを用いることが好ましい。また、ソーダライムガラスを用いる場合には、シリカなどのバリアコートを施したものを使用することが好ましい。有機材料の場合には、耐熱性、寸法安定性、耐溶剤性、電気絶縁性、及び加工性に優れていることが好ましい。

## 【0240】

基板の形状、構造、大きさ等については、特に制限はなく、発光素子の用途、目的等に応じて適宜選択することができる。一般的には、基板の形状としては、板状であることが好ましい。基板の構造としては、単層構造であってもよいし、積層構造であってもよく、また、単一部材で形成されていてもよいし、2以上の部材で形成されていてもよい。

30

## 【0241】

基板は、無色透明であっても、有色透明であってもよいが、有機発光層から発せられる光を散乱又は減衰等させることがない点で、無色透明であることが好ましい。

## 【0242】

基板には、その表面又は裏面に透湿防止層（ガスバリア層）を設けることができる。

透湿防止層（ガスバリア層）の材料としては、窒化珪素、酸化珪素などの無機物が好適に用いられる。透湿防止層（ガスバリア層）は、例えば、高周波スパッタリング法などにより形成することができる。

40

熱可塑性基板を用いる場合には、更に必要に応じて、ハードコート層、アンダーコート層などを設けてもよい。

## 【0243】

## &lt;陽極&gt;

陽極は、通常、有機層に正孔を供給する電極としての機能を有していればよく、その形状、構造、大きさ等については特に制限はなく、発光素子の用途、目的に応じて、公知の電極材料の中から適宜選択することができる。前述のごとく、陽極は、通常透明陽極として設けられる。

## 【0244】

50

陽極の材料としては、例えば、金属、合金、金属酸化物、導電性化合物、又はこれらの混合物が好適に挙げられる。陽極材料の具体例としては、アンチモンやフッ素等をドーパした酸化錫（ATO、FTO）、酸化錫、酸化亜鉛、酸化インジウム、酸化インジウム錫（ITO）、酸化亜鉛インジウム（IZO）等の導電性金属酸化物、金、銀、クロム、ニッケル等の金属、さらにこれらの金属と導電性金属酸化物との混合物又は積層物、ヨウ化銅、硫化銅などの無機導電性物質、ポリアニリン、ポリチオフェン、ポリピロールなどの有機導電性材料、及びこれらとITOとの積層物などが挙げられる。この中で好ましいのは、導電性金属酸化物であり、特に、生産性、高導電性、透明性等の点からはITOが好ましい。

#### 【0245】

10

陽極は、例えば、印刷方式、コーティング方式等の湿式方式、真空蒸着法、スパッタリング法、イオンプレーティング法等の物理的方式、CVD、プラズマCVD法等の化学的方式などの中から、陽極を構成する材料との適性を考慮して適宜選択した方法に従って、前記基板上に形成することができる。例えば、陽極の材料として、ITOを選択する場合には、陽極の形成は、直流又は高周波スパッタ法、真空蒸着法、イオンプレーティング法等に従って行うことができる。

#### 【0246】

本発明の素子において、陽極の形成位置としては特に制限はなく、発光素子の用途、目的に応じて適宜選択することができる。が、前記基板上に形成されるのが好ましい。この場合、陽極は、基板における一方の表面の全部に形成されていてもよく、その一部に形成されていてもよい。

20

#### 【0247】

なお、陽極を形成する際のパターニングとしては、フォトリソグラフィーなどによる化学的エッチングによって行ってもよいし、レーザーなどによる物理的エッチングによって行ってもよく、また、マスクを重ねて真空蒸着やスパッタ等をして行ってもよいし、リフトオフ法や印刷法によって行ってもよい。

#### 【0248】

陽極の厚みとしては、陽極を構成する材料により適宜選択することができ、一概に規定することはできないが、通常、10nm～50μm程度であり、50nm～20μmが好ましい。

30

#### 【0249】

陽極の抵抗値としては、 $10^3$  Ω以下が好ましく、 $10^2$  Ω以下がより好ましい。陽極が透明である場合は、無色透明であっても、有色透明であってもよい。透明陽極側から発光を取り出すためには、その透過率としては、60%以上が好ましく、70%以上がより好ましい。

#### 【0250】

なお、透明陽極については、沢田豊監修「透明電極膜の新展開」シーエムシー刊（1999）に詳述があり、ここに記載される事項を本発明に適用することができる。耐熱性の低いプラスチック基材を用いる場合は、ITO又はIZOを使用し、150℃以下の低温で成膜した透明陽極が好ましい。

40

#### 【0251】

<陰極>

陰極は、通常、有機層に電子を注入する電極としての機能を有していればよく、その形状、構造、大きさ等については特に制限はなく、発光素子の用途、目的に応じて、公知の電極材料の中から適宜選択することができる。

#### 【0252】

陰極を構成する材料としては、例えば、金属、合金、金属酸化物、電気伝導性化合物、これらの混合物などが挙げられる。具体例としてはアルカリ金属（たとえばLi、Na、K、Cs等）、アルカリ土類金属（たとえばMg、Ca等）、金、銀、鉛、アルミニウム、ナトリウム - カリウム合金、リチウム - アルミニウム合金、マグネシウム - 銀合金、

50

インジウム、イッテルビウム等の希土類金属、などが挙げられる。これらは、1種単独で使用してもよいが、安定性と電子注入性とを両立させる観点からは、2種以上を好適に併用することができる。

【0253】

これらの中でも、陰極を構成する材料としては、電子注入性の点で、アルカリ金属やアルカリ土類金属が好ましく、保存安定性に優れる点で、アルミニウムを主体とする材料が好ましい。

アルミニウムを主体とする材料とは、アルミニウム単独、アルミニウムと0.01~10質量%のアルカリ金属又はアルカリ土類金属との合金若しくはこれらの混合物（例えば、リチウム-アルミニウム合金、マグネシウム-アルミニウム合金など）をいう。

10

【0254】

なお、陰極の材料については、特開平2-15595号公報、特開平5-121172号公報に詳述されており、これらの広報に記載の材料は、本発明においても適用することができる。

【0255】

陰極の形成方法については、特に制限はなく、公知の方法に従って行うことができる。例えば、印刷方式、コーティング方式等の湿式方式、真空蒸着法、スパッタリング法、イオンプレーティング法等の物理的方式、CVD、プラズマCVD法等の化学的方式などの中から、前記した陰極を構成する材料との適性を考慮して適宜選択した方法に従って形成することができる。例えば、陰極の材料として、金属等を選択する場合には、その1種又は2種以上を同時又は順次にスパッタ法等に従って行うことができる。

20

【0256】

陰極を形成するに際してのパターニングは、フォトリソグラフィなどによる化学的エッチングによって行ってもよいし、レーザーなどによる物理的エッチングによって行ってもよく、マスクを重ねて真空蒸着やスパッタ等をして行ってもよいし、リフトオフ法や印刷法によって行ってもよい。

【0257】

本発明において、陰極形成位置は特に制限はなく、有機層上の全部に形成されていてもよく、その一部に形成されていてもよい。

また、陰極と前記有機層との間に、アルカリ金属又はアルカリ土類金属のフッ化物、酸化物等による誘電体層を0.1~5nmの厚みで挿入してもよい。この誘電体層は、一種の電子注入層と見ることにもできる。誘電体層は、例えば、真空蒸着法、スパッタリング法、イオンプレーティング法等により形成することができる。

30

【0258】

陰極の厚みは、陰極を構成する材料により適宜選択することができ、一概に規定することはできないが、通常10nm~5μm程度であり、50nm~1μmが好ましい。

また、陰極は、透明であってもよいし、不透明であってもよい。なお、透明な陰極は、陰極の材料を1~10nmの厚さに薄く成膜し、更にITOやIZO等の透明な導電性材料を積層することにより形成することができる。

【0259】

40

<有機層>

本発明における有機層について説明する。

本発明の素子は、発光層を含む少なくとも一層の有機層を有しており、有機発光層以外の他の有機層としては、前述したごとく、正孔輸送層、電子輸送層、電荷ブロック層、正孔注入層、電子注入層等の各層が挙げられる。

【0260】

- 有機層の形成 -

本発明の素子において、有機層を構成する各層は、蒸着法やスパッタ法等の乾式製膜法、転写法、印刷法等いずれによっても好適に形成することができる。

【0261】

50

- 発光層 -

発光層は、電界印加時に、陽極、正孔注入層、又は正孔輸送層から正孔を受け取り、陰極、電子注入層、又は電子輸送層から電子を受け取り、正孔と電子の再結合の場を提供して発光させる機能を有する層である。発光層は1層であっても2層以上であってもよく、2層以上の場合は、それぞれの層が異なる発光色で発光してもよい。

本発明における発光層は、発光材料のみで構成されていても良く、ホスト材料と発光材料の混合層とした構成でもよい。

【0262】

ここで、ホスト材料とは、発光層を構成する材料のうち、発光材料以外のものであり、発光材料を分散して層中に保持する機能、陽極や正孔輸送層等から正孔を受け取る機能、陰極や電子輸送層等から電子を受け取る機能、正孔及び/または電子を輸送する機能、正孔と電子の再結合の場を提供する機能、再結合により生成した励起子のエネルギーを発光材料に移動させる機能、及び正孔及び/または電子を発光材料に輸送する機能のうち少なくとも一種の機能を有する材料を意味する。

ホスト材料は電荷輸送材料であることが好ましい。ホスト材料は1種であっても2種以上であっても良く、例えば、電子輸送性のホスト材料とホール輸送性のホスト材料を混合した構成が挙げられる。さらに、発光層中に電荷輸送性を有さず、発光しない材料を含んでいてもよい。

【0263】

また、本発明における発光層に含有されるホスト材料としては、例えば、カルバゾール骨格を有するもの、ジアリールアミン骨格を有するもの、ピリジン骨格を有するもの、ピラジン骨格を有するもの、トリアジン骨格を有するもの及びアリアルシラン骨格を有するものや、後述の正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層の項で例示されている材料が挙げられる。

【0264】

本発明に使用できる蛍光発光材料の例としては、例えば、ベンゾオキサゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、ベンゾチアゾール誘導体、スチリルベンゼン誘導体、ポリフェニル誘導体、ジフェニルブタジエン誘導体、テトラフェニルブタジエン誘導体、ナフタリイミド誘導体、クマリン誘導体、縮合芳香族化合物、ペリノン誘導体、オキサジアゾール誘導体、オキサジン誘導体、アルダジン誘導体、ピラリジン誘導体、シクロペンタジエン誘導体、ビススチリルアントラセン誘導体、キナクリドン誘導体、ピロロピリジン誘導体、チアジアゾロピリジン誘導体、シクロペンタジエン誘導体、スチリルアミン誘導体、ジケトピロロピロール誘導体、芳香族ジメチリディン化合物、8-キノリノール誘導体の金属錯体やピロメテン誘導体の金属錯体に代表される各種金属錯体等、ポリチオフェン、ポリフェニレン、ポリフェニレンビニレン等のポリマー化合物、有機シラン誘導体などの化合物等が挙げられる。

【0265】

また、本発明に併用あるいは使用できる燐光発光材料は、例えば、遷移金属原子又はランタノイド原子を含む錯体が挙げられる。

遷移金属原子としては、特に限定されないが、好ましくは、ルテニウム、ロジウム、パラジウム、タングステン、レニウム、オスミウム、イリジウム、及び白金が挙げられ、より好ましくは、レニウム、イリジウム、及び白金である。

ランタノイド原子としては、ランタン、セリウム、プラセオジム、ネオジム、サマリウム、ユーロピウム、ガドリニウム、テルビウム、ジスプロシウム、ホルミウム、エルビウム、ツリウム、イッテルビウム、ルテシウムが挙げられる。これらのランタノイド原子の中でも、ネオジム、ユーロピウム、及びガドリニウムが好ましい。

【0266】

錯体の配位子としては、例えば、G.Wilkinson等著、Comprehensive Coordination Chemistry, Pergamon Press社1987年発行、H.Yersin著、「Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds」Springer-Verlag社1987年発行、山本明夫著「有

10

20

30

40

50

機金属化学 - 基礎と応用 - 」裳華房社 1982 年発行等に記載の配位子などが挙げられる。

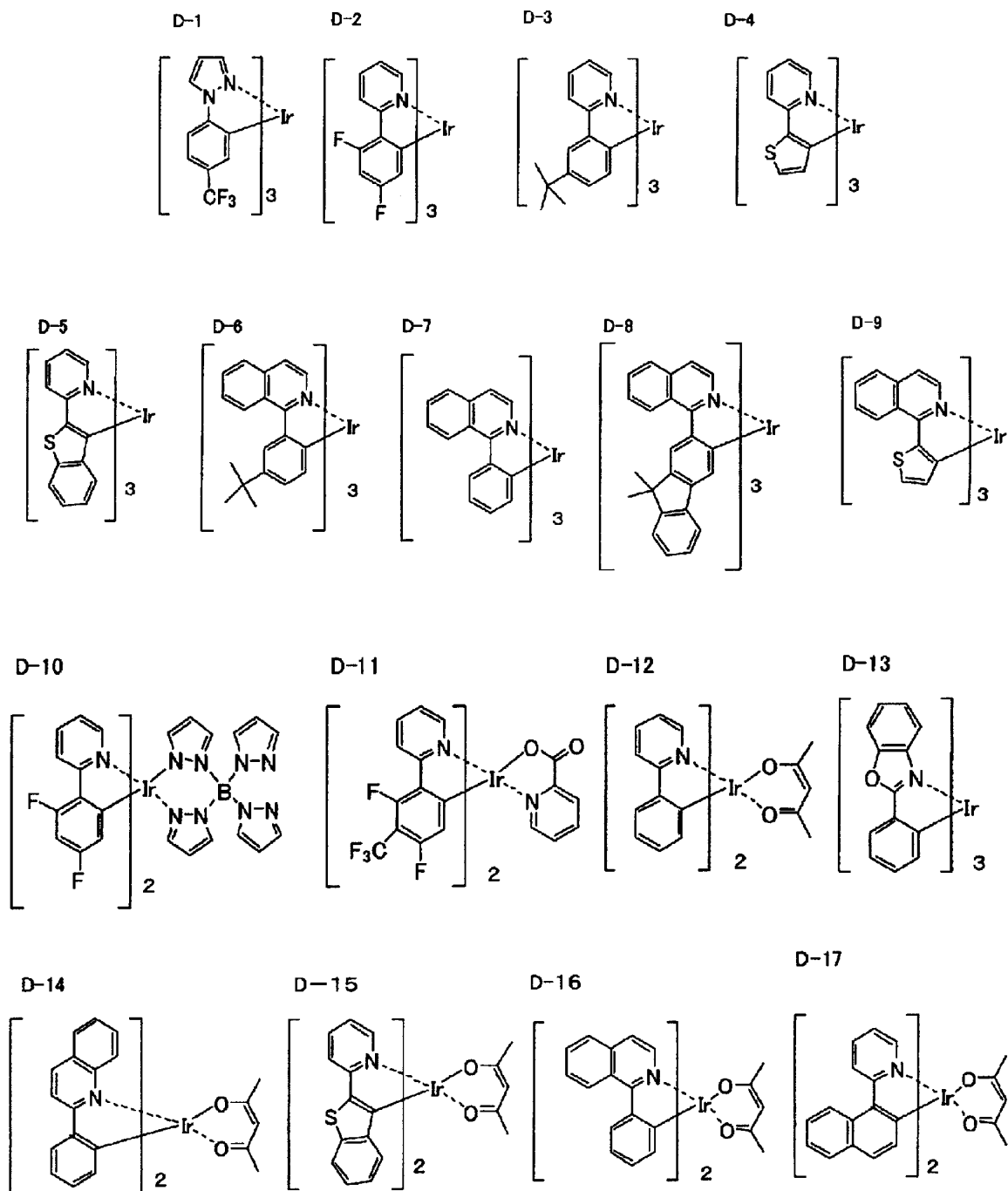
具体的な配位子としては、好ましくは、ハロゲン配位子（好ましくは塩素配位子）、含窒素ヘテロ環配位子（例えば、フェニルピリジン、ベンゾキノリン、キノリノール、ピピリジル、フェナントリンなど）、ジケトン配位子（例えば、アセチルアセトンなど）、カルボン酸配位子（例えば、酢酸配位子など）、一酸化炭素配位子、イソニトリル配位子、シアノ配位子であり、より好ましくは、含窒素ヘテロ環配位子である。上記錯体は、化合物中に遷移金属原子を一つ有してもよいし、また、2つ以上有するいわゆる複核錯体であってもよい。異種の金属原子を同時に含有していてもよい。

【0267】

前記イリジウム錯体燐光発光材料と併用可能な発光材料の具体例としては、例えば下記のもの挙げられるが、これらに限定されない。

【0268】

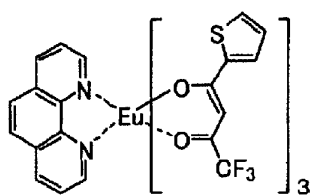
【化75】



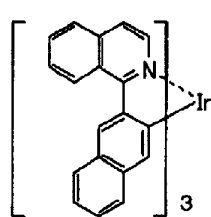
【 0 2 6 9 】

【 化 7 6 】

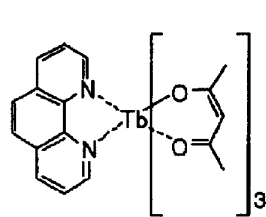
D-18



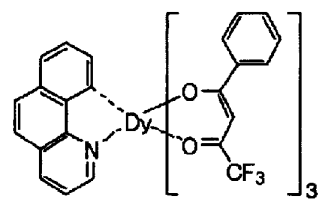
D-19



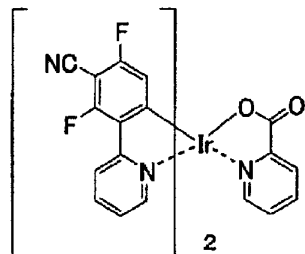
D-20



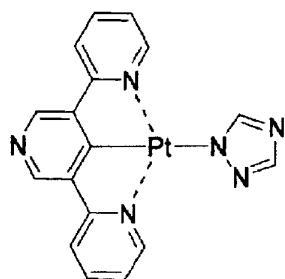
D-21



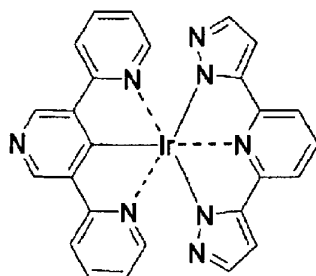
D-22



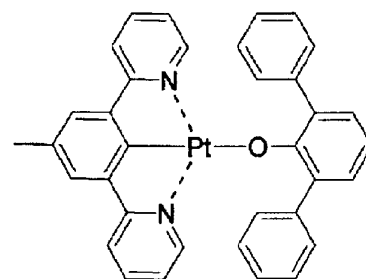
D-23



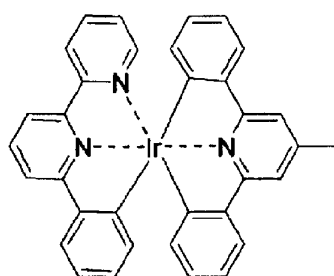
D-24



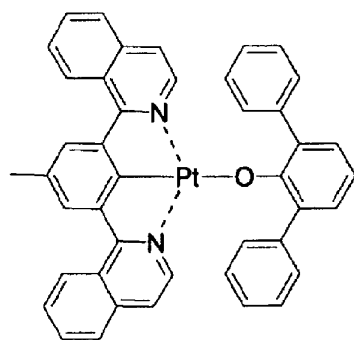
D-25



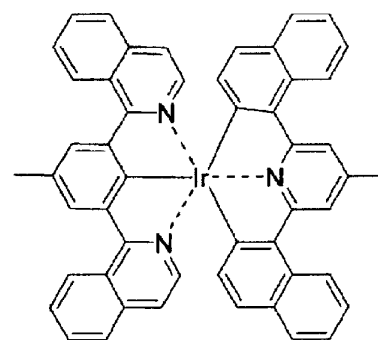
D-26



D-27



D-28



【 0 2 7 0 】

10

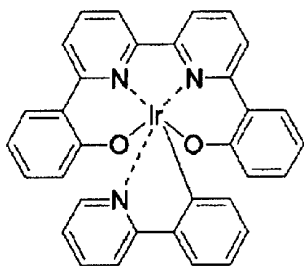
20

30

40

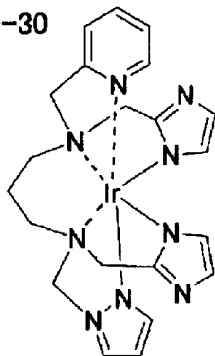
## 【化 77】

D-29

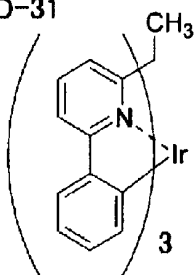


10

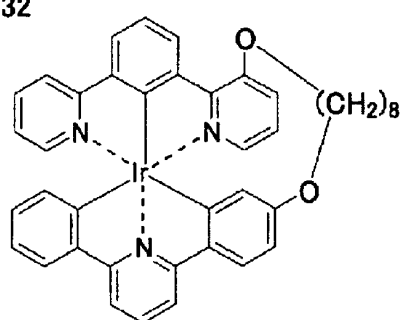
D-30



D-31

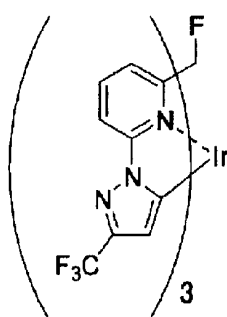


D-32

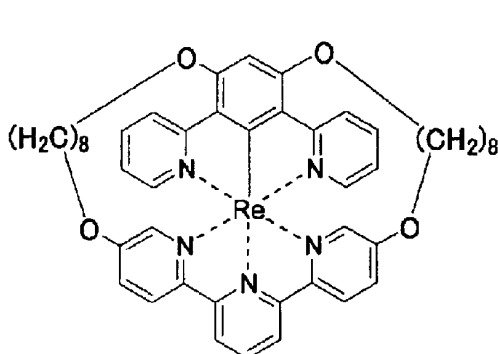


20

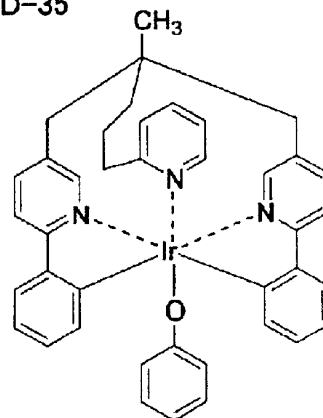
D-33



D-34



D-35



30

## 【0271】

本発明のイリジウム錯体系燐光発光材料を包含する燐光発光材料は、発光層中に、0.1～40質量%含有されることが好ましく、0.5～20質量%含有されることがより好ましい。本発明において本発明の燐光発光材料以外の燐光発光材料を併用する場合、本発明の燐光発光材料は燐光発光材料全量に対して50質量%以上が好ましく、80質量%以上が更に好ましい。

## 【0272】

また、本発明における発光層に含有されるホスト材料としては、一般式(I)で表される化合物が挙げられるが、本発明は、これ以外のホスト材料を併用することができる。例えば、本発明以外でカルバゾール骨格を有するもの、ジアリールアミン骨格を有するもの、ピリジン骨格を有するもの、ピラジン骨格を有するもの、トリアジン骨格を有するもの及びアリールシラン骨格を有するものや、後述の正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層の項で例示されている材料が挙げられる。併用し得るホスト材料は発光層にて、一般式(I)で表される化合物の90質量%以下で用いられることが好ましく、50質量%以下で用いられることがより好ましく、10質量%以下で用いられることが特に好ましい。

## 【0273】

40

50

発光層の厚さは、特に限定されるものではないが、通常、1 nm ~ 500 nmであるのが好ましく、5 nm ~ 200 nmであるのがより好ましく、10 nm ~ 100 nmであるのが更に好ましい。

【0274】

- 正孔注入層、正孔輸送層 -

正孔注入層、正孔輸送層は、陽極又は陽極側から正孔を受け取り陰極側に輸送する機能を有する層である。正孔注入層、正孔輸送層は、具体的には、カルバゾール誘導体、トリアゾール誘導体、オキサゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、ポリアリールアルカン誘導体、ピラゾリン誘導体、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、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、芳香族第三級アミン化合物、スチリルアミン化合物、芳香族ジメチリデン系化合物、ボルフィリン系化合物、有機シラン誘導体、カーボン、フェニルアゾールやフェニルアジンを配位子に有するIr錯体に代表される各種金属錯体等を含有する層であることが好ましい。

10

正孔注入層、正孔輸送層の厚さは、駆動電圧を下げるという観点から、各々500 nm以下であることが好ましい。

正孔輸送層の厚さとしては、1 nm ~ 500 nmであるのが好ましく、5 nm ~ 200 nmであるのがより好ましく、10 nm ~ 100 nmであるのが更に好ましい。また、正孔注入層の厚さとしては、0.1 nm ~ 200 nmであるのが好ましく、0.5 nm ~ 100 nmであるのがより好ましく、1 nm ~ 100 nmであるのが更に好ましい。

20

正孔注入層、正孔輸送層は、上述した材料の1種又は2種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

【0275】

- 電子注入層、電子輸送層 -

電子注入層、電子輸送層は、陰極又は陰極側から電子を受け取り陽極側に輸送する機能を有する層である。電子注入層、電子輸送層は、具体的には、トリアゾール誘導体、オキサゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、フルオレノン誘導体、アントラキノジメタン誘導体、アントロン誘導体、ジフェニルキノン誘導体、チオピランジオキシド誘導体、カルボジイミド誘導体、フルオレニリデンメタン誘導体、ジスチリルピラジン誘導体、ナフタレン、ペリレン等の芳香環テトラカルボン酸無水物、フタロシアニン誘導体、8-キノリノール誘導体の金属錯体やメタルフタロシアニン、ベンゾオキサゾールやベンゾチアゾールを配位子とする金属錯体に代表される各種金属錯体、有機シラン誘導体、等を含有する層であることが好ましい。

30

【0276】

電子注入層、電子輸送層の厚さは、駆動電圧を下げるという観点から、各々500 nm以下であることが好ましい。

電子輸送層の厚さとしては、1 nm ~ 500 nmであるのが好ましく、5 nm ~ 200 nmであるのがより好ましく、10 nm ~ 100 nmであるのが更に好ましい。また、電子注入層の厚さとしては、0.1 nm ~ 200 nmであるのが好ましく、0.2 nm ~ 100 nmであるのがより好ましく、0.5 nm ~ 50 nmであるのが更に好ましい。

40

電子注入層、電子輸送層は、上述した材料の1種又は2種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

【0277】

- 正孔ブロック層 -

正孔ブロック層は、陽極側から発光層に輸送された正孔が、陰極側に通りぬけることを防止する機能を有する層である。本発明において、発光層と陰極側で隣接する有機層として、正孔ブロック層を設けることができる。

正孔ブロック層を構成する有機化合物の例としては、BA1q等のアルミニウム錯体、トリアゾール誘導体、BCP等のフェナントロリン誘導体、等が挙げられる。正孔ブロッ

50



ク層の厚さとしては、1 nm ~ 500 nmであるのが好ましく、5 nm ~ 200 nmであるのがより好ましく、10 nm ~ 100 nmであるのが更に好ましい。

正孔ブロック層は、上述した材料の1種又は2種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

#### 【0278】

##### <保護層>

本発明において、有機EL素子全体は、保護層によって保護されていてもよい。

保護層に含まれる材料としては、水分や酸素等の素子劣化を促進するものが素子内に入ることを抑止する機能を有しているものであればよい。

その具体例としては、In、Sn、Pb、Au、Cu、Ag、Al、Ti、Ni等の金属、MgO、SiO、SiO<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、GeO、NiO、CaO、BaO、Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、TiO<sub>2</sub>等の金属酸化物、SiN<sub>x</sub>、SiN<sub>x</sub>O<sub>y</sub>等の金属窒化物、MgF<sub>2</sub>、LiF、AlF<sub>3</sub>、CaF<sub>2</sub>等の金属フッ化物、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリメチルメタクリレート、ポリイミド、ポリウレア、ポリテトラフルオロエチレン、ポリクロトリフルオロエチレン、ポリジクロロジフルオロエチレン、クロロトリフルオロエチレンとジクロロジフルオロエチレンとの共重合体、テトラフルオロエチレンと少なくとも1種のコモノマーとを含むモノマー混合物を共重合させて得られる共重合体、共重合主鎖に環状構造を有する含フッ素共重合体、吸水率1%以上の吸水性物質、吸水率0.1%以下の防湿性物質等が挙げられる。

#### 【0279】

保護層の形成方法については、特に限定はなく、例えば、真空蒸着法、スパッタリング法、反応性スパッタリング法、MBE（分子線エピタキシ）法、クラスターイオンビーム法、イオンプレーティング法、プラズマ重合法（高周波励起イオンプレーティング法）、プラズマCVD法、レーザーCVD法、熱CVD法、ガスソースCVD法、コーティング法、印刷法、転写法を適用できる。

#### 【0280】

##### <封止容器>

さらに、本発明の素子は、封止容器を用いて素子全体を封止してもよい。

また、封止容器と発光素子の間の空間に水分吸収剤又は不活性液体を封入してもよい。水分吸収剤としては、特に限定されることはないが、例えば、酸化バリウム、酸化ナトリウム、酸化カリウム、酸化カルシウム、硫酸ナトリウム、硫酸カルシウム、硫酸マグネシウム、五酸化燐、塩化カルシウム、塩化マグネシウム、塩化銅、フッ化セシウム、フッ化ニオブ、臭化カルシウム、臭化バナジウム、モレキュラーシーブ、ゼオライト、酸化マグネシウム等を挙げることができる。不活性液体としては、特に限定されることはないが、例えば、パラフィン類、流動パラフィン類、パーフルオロアルカンやパーフルオロアミン、パーフルオロエーテル等のフッ素系溶剤、塩素系溶剤、シリコンオイル類が挙げられる。

#### 【0281】

##### <駆動方法>

本発明の素子は、陽極と陰極との間に直流（必要に応じて交流成分を含んでもよい）電圧（通常2ボルト～15ボルト）、又は直流電流を印加することにより、発光を得ることができる。

本発明の素子の駆動方法については、特開平2-148687号、同6-301355号、同5-29080号、同7-134558号、同8-234685号、同8-241047号の各公報、特許第2784615号、米国特許5828429号、同6023308号の各明細書、等に記載の駆動方法を適用することができる。

#### 【0282】

##### <その他>

本発明の素子は、表示素子、ディスプレイ、バックライト、電子写真、照明光源、記録光源、露光光源、読み取り光源、標識、看板、インテリア、光通信等に好適に利用できる

。

## 【実施例】

## 【0283】

以下、実施例により本発明をさらに詳細に説明するが、本発明はこれらに限定されるものではない。

## 【0284】

## &lt; 例示化合物の合成 &gt;

例示化合物(1-3)は、Heterocycles, vol.67, No.1, 353-359項(2006年)に記載の1~8位に重水素原子を含むカルバゾールを用いて、4,4'-ジブロモビフェニルと、パラジウム触媒や銅触媒を用いてカップリングさせることにより合成できる。

## 【0285】

例示化合物(4-3)は、前記、例示化合物(1-3)と同様に、1,3-ジブロモベンゼンとカップリングさせることにより合成できる。

## 【0286】

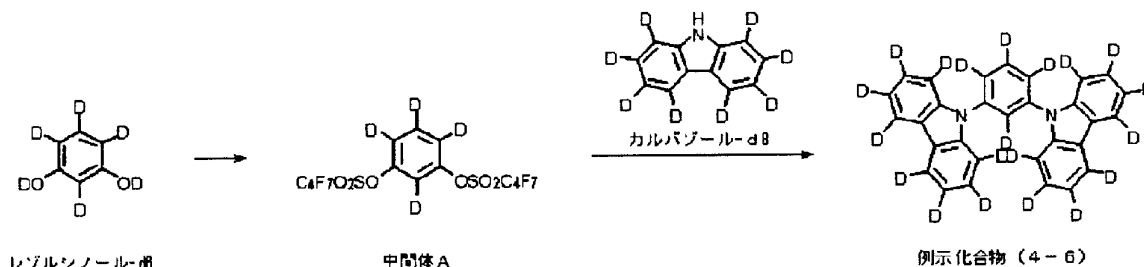
例示化合物(12-3)は、前記、例示化合物(1-3)と同様に、Tetrahedron, vol.54, No.42, 12707-12714項(1998年)に記載の3,6-ジブロモ-9-フェニルカルバゾールとカップリングさせることにより合成できる。

## 【0287】

例示化合物(4-6)は、以下の方法で合成できる。

## 【0288】

## 【化78】



## 【0289】

レゾルシノール-d6は、J. Am. Chem. Soc. vol.126, No.40, 13033-03043項(2004年)に記載の方法で合成できる。

## 【0290】

脱水アセトニトリル(40 mL)中で、レゾルシノール-d6(4.6 g)とトリエチルアミン(14 mL)を混合し、反応容器を水浴で冷却しながら、ノナフルオロブタンスルホン酸フルオリド(15.5 mL)を加えた。室温で3時間攪拌後、水を加えて、ヘキサン-酢酸エチル混合溶媒で抽出した。抽出後の有機層を希塩酸、水、飽和食塩水の順で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥後、溶媒を減圧留去することにより、中間体Aの粗生成物を25.9 g得た。

## 【0291】

中間体Aの粗生成物(13.6 g)、カルバゾール-d8(7.0 g)、ビス(ベンジリデンアセトン)パラジウム(0.56 g)、キサントホス(XantPhos, CAS No. 161265-03-8, 1.16 g)、炭酸ルビジウム(23 g)を、窒素雰囲気下、トルエン(200 mL)中で混合し、加熱還流した。8時間経過した時点で、ビス(ベンジリデンアセトン)パラジウム(0.28 g)を追加で加え、さらに、3時間加熱還流した。反応混合物を室温まで冷却後、水と酢酸エチルを加えて、不溶物をろ過して得られる有機層を、水と飽和食塩水で洗浄し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。有機層を減圧濃縮して得られた組成物を、シリカゲルカラムクロマトグラフィー(ヘキサン/酢酸エチルの体積比20の混合溶離液)で精製し、更に再結晶・昇華精製を行うことにより、例示化合物(4-6)を2.7 g得た。

## 【0292】

例示化合物(4-6)の重水素化率は、内部標準物質として1,2-ジブロモブタンを用いて、重クロロホルムと重ジメチルスルホキシドを溶媒にして、 $^1\text{H}$  NMRをそれぞれ測定した結果、すべての位置において96%であった。

## 【0293】

なお、上記に示した製造方法において、定義された置換基が、ある合成方法の条件下で変化するか、または該方法を実施するのに不適切な場合、官能基の保護、脱保護(例えば、プロテクティブ・グループス・イン・オーガニック・シンセシス(Protective Groups in Organic Synthesis)、グリーン(T. W. Greene)著、ジョン・ワイリー・アンド・サンズ・インコーポレイテッド(John Wiley & Sons Inc.)(1981年)等)等の手段により容易に製造が可能である。また、必要に応じて適宜置換基導入等の反応工程の順序を変化させることも可能である。

10

## 【0294】

<有機電界発光素子の作製と評価>

(1)比較例1の有機電界発光素子の作製

0.5mm厚み、2.5cm角のITO膜を有するガラス基板(ジオマテック社製、表面抵抗 $10^9 \Omega/\square$ )を洗浄容器に入れ、2-プロパノール中で超音波洗浄した後、30分間UV-オゾン処理を行った。この透明陽極(ITO膜)上に真空蒸着法にて以下の有機層を順次蒸着した。

本発明の実施例における蒸着速度は、特に断りのない場合は0.2nm/秒である。蒸着速度はULVAC社製水晶振動子成膜コントローラCRTM-9000を用いて測定した。以下に記載の膜厚も、CRTM-9000の数値と、Dektak型触針式膜厚計で測定した膜厚をもとに作成した検量線から算出したものである。

20

## 【0295】

<1>化合物A:膜厚80nm<2>化合物B:膜厚10nm<3>比較化合物1+発光材料A(10質量%)の共蒸着:膜厚60nm<4>化合物C:膜厚10nm<5>化合物D:膜厚30nm

## 【0296】

最後にフッ化リチウム0.1nmおよび金属アルミニウムをこの順に100nm蒸着し陰極とした。これを大気に触れさせることなく、アルゴンガスで置換したグローブボックス内に入れ、ステンレス製の封止缶及び紫外線硬化型の接着剤(XNR5516HV、長瀬チバ(株)製)を用いて封止し、比較例1の有機電界発光素子を得た。

30

## 【0297】

(2)比較例2~8と実施例1~8の有機電界発光素子の作製

下記の表に従い、発光材料Aを下記構造の発光材料B~Hに、比較化合物1を下記の比較化合物2、例示化合物(1-3)、例示化合物(4-6)に変更する以外は、比較例1と同様の方法で比較例2~8と実施例1~8の有機電界発光素子を作製した。

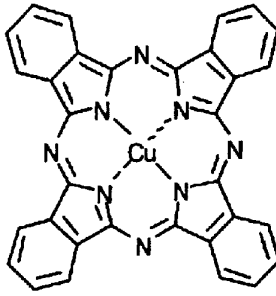
## 【0298】

上記、化合物A~化合物Dの化学構造は下記の通りである。

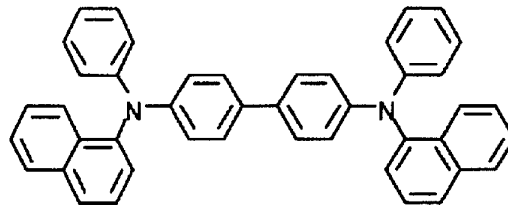
## 【0299】

40

## 【化 7 9】

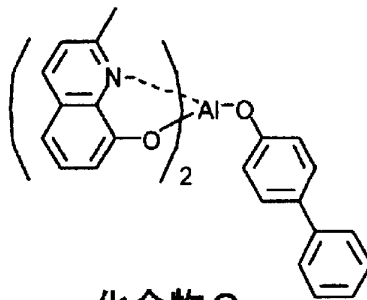


化合物 A

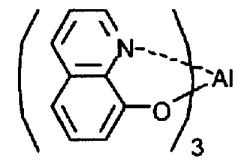


化合物 B

10



化合物 C



化合物 D

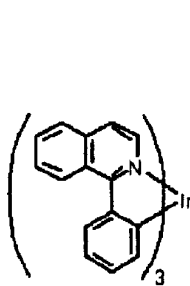
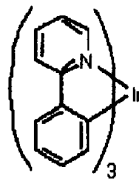
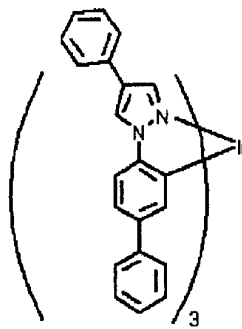
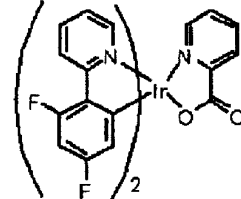
20

## 【 0 3 0 0】

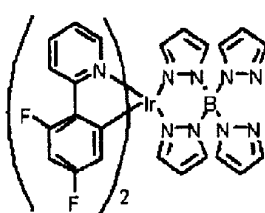
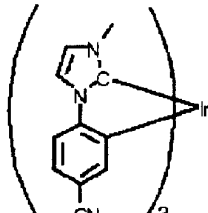
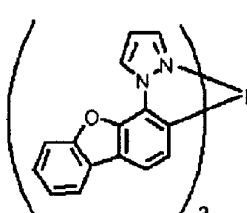
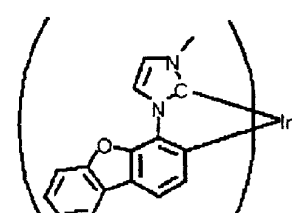
上記、発光材料 A ~ 発光材料 H の化学構造と溶液状態の発光波長は下記の通りである。

## 【 0 3 0 1】

## 【化 8 0】

発光材料 A  
620 nm発光材料 B  
514 nm発光材料 C  
478 nm発光材料 D  
466 nm

30

発光材料 E  
480 nm発光材料 F  
459 nm発光材料 G  
456 nm発光材料 H  
444 nm

40

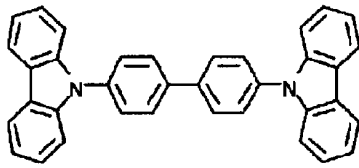
## 【 0 3 0 2】

上記、比較化合物 1 ~ 3 の化学構造は下記の通りである。

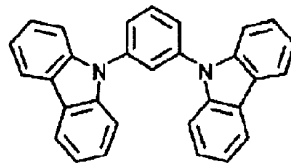
## 【 0 3 0 3】

50

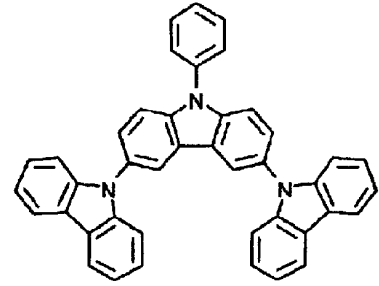
## 【化 8 1】



比較化合物1



比較化合物2



比較化合物3

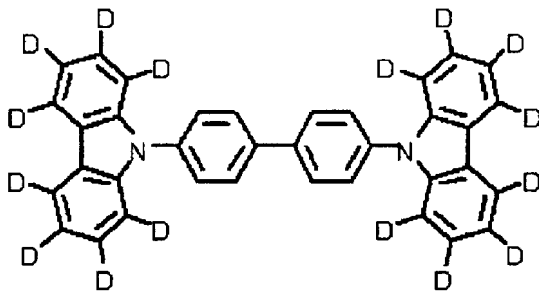
10

## 【0304】

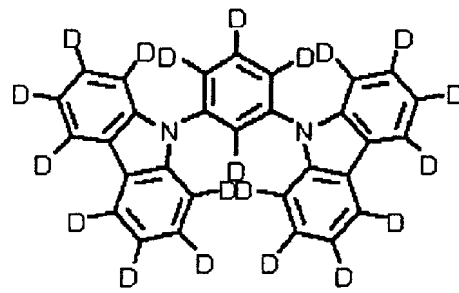
上記、例示化合物（1 - 3）、例示化合物（4 - 6）の化学構造は下記の通りである。

## 【0305】

## 【化 8 2】



例示化合物（1 - 3）



例示化合物（4 - 6）

20

## 【0306】

上記で得られた有機電界発光素子を以下の方法により評価した。

## 【0307】

## （1）駆動電圧の測定

有機電界発光素子を（株）島津製作所製の発光スペクトル測定システム（ELS1500）にセットし、これらの輝度が100Cd/m<sup>2</sup>時の印加電圧を測定した。

30

## 【0308】

## （2）駆動耐久性の評価

得られた有機電界発光素子を、東京システム開発（株）製のOLEDテストシステムST-D型にセットし、定電流モードにて正方向定電流0.4mAの条件で駆動し、輝度半減時間（輝度が初期輝度の50%に低下するまでの時間）を求めた。

## 【0309】

有機電界素子を評価した結果、以下の表のとおりになった。駆動電圧と輝度半減時間に関しては、同じ発光材料を用いた比較例と実施例の組み合わせで、実施例の結果として、比較例の結果を100とした相対値を示した。

40

## 【0310】

【表 1】

表 1

	発光材料	発光材料と共蒸着する材料	駆動電圧の相対値輝度半減時間の相対値	
比較例 1	発光材料 A	比較化合物 1	100	100
実施例 1	発光材料 A	例示化合物 (1-3)	95	110
比較例 2	発光材料 B	比較化合物 1	100	100
実施例 2	発光材料 B	例示化合物 (1-3)	97	115
比較例 3	発光材料 C	比較化合物 2	100	100
実施例 3	発光材料 C	例示化合物 (4-6)	95	112
比較例 4	発光材料 D	比較化合物 2	100	100
実施例 4	発光材料 D	例示化合物 (4-6)	90	140
比較例 5	発光材料 E	比較化合物 2	100	100
実施例 5	発光材料 E	例示化合物 (4-6)	92	135
比較例 6	発光材料 F	比較化合物 2	100	100
実施例 6	発光材料 F	例示化合物 (4-6)	90	160
比較例 7	発光材料 G	比較化合物 2	100	100
実施例 7	発光材料 G	例示化合物 (4-6)	80	210
比較例 8	発光材料 H	比較化合物 2	100	100
実施例 8	発光材料 H	例示化合物 (4-6)	85	180

10

## 【0311】

20

以上の結果から、前記一般式 (I) で表される化合物とイリジウム錯体燐光発光材料とを組み合わせた本発明の有機電界発光素子は、顕著な効果を有し、特に、発光波長がより短波長な発光材料との組み合わせほど、より顕著な効果を有することが示された。

## 【0312】

(2) 比較例 2 - 1 ~ 2 - 13 と実施例 2 - 1 ~ 2 - 7 の有機電界発光素子の作製と評価

比較例 1 の素子の発光材料 A と比較化合物 1 を、下記表 2 に示した発光材料と、発光材料と共蒸着する材料 (ホスト材料) の組み合わせに変更する以外は、比較例 1 と同じ方法で比較例 2 - 1 ~ 2 - 13 と実施例 2 - 1 ~ 2 - 7 の素子を作製し、同様に評価をおこなった結果を、表 2 に示す。ただし、比較例 2 - 5\* と実施例 2 - 5\*\* の素子は、比較例 1 の化合物 B の層と比較化合物 1 を含む層の間に、膜厚 3 nm の比較化合物 3 と例示化合物 1

30

## 【0313】

【表 2】

表 2

発光素子	発光材料	発光材料と 共蒸着する材料	駆動電圧 の相対値	輝度半減時間 の相対値
比較例 2-1	発光材料 E	比較化合物 4	100	100
実施例 2-1	発光材料 E	例示化合物 2-3	95	140
比較例 2-2	発光材料 E	比較化合物 5	100	100
実施例 2-2	発光材料 E	例示化合物 3-1	98	130
比較例 2-3	発光材料 E	比較化合物 6	100	100
実施例 2-3	発光材料 E	例示化合物 5-3	90	135
比較例 2-4	発光材料 G	比較化合物 7	100	100
実施例 2-4	発光材料 G	例示化合物 8-2	98	200
比較例 2-5*	発光材料 G	比較化合物 7	100	100
実施例 2-5**	発光材料 G	例示化合物 8-2	95	220
比較例 2-6	発光材料 G	比較化合物 8	100	100
実施例 2-6	発光材料 G	例示化合物 9-5	89	190
比較例 2-7	発光材料 G	比較化合物 9	100	100
実施例 2-7	発光材料 G	例示化合物 14-3	87	195
比較例 2-8	発光材料 I	比較化合物 1	100	100
比較例 2-9	発光材料 I	例示化合物 1-3	98	110
比較例 2-10	発光材料 J	比較化合物 4	100	100
比較例 2-11	発光材料 J	例示化合物 2-3	95	105
比較例 2-12	発光材料 K	比較化合物 2	100	100
比較例 2-13	発光材料 K	例示化合物 4-1	97	103

\*比較化合物 3 の膜厚 3nm の層を有する (本文参照)

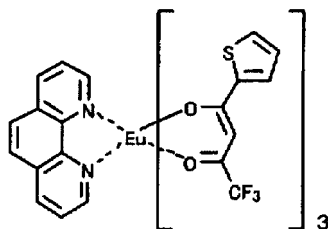
\*\*例示化合物 (12-2) の膜厚 3nm の層を有する (本文参照)

【0314】

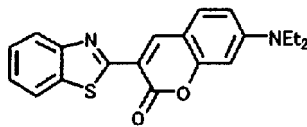
上記、発光材料 I ~ 発光材料 K の化学構造は下記の通りである。

【0315】

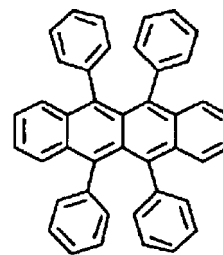
【化 83】



发光材料 I



发光材料 J



发光材料 K

【0316】

上記、比較化合物 4 ~ 9 の化学構造は下記の通りである。

【0317】

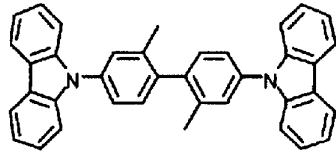
10

20

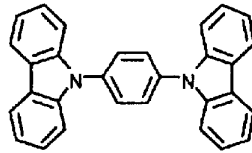
30

40

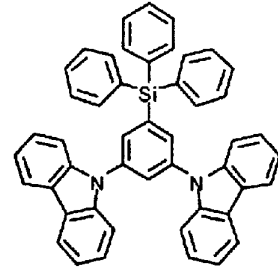
## 【化 8 4】



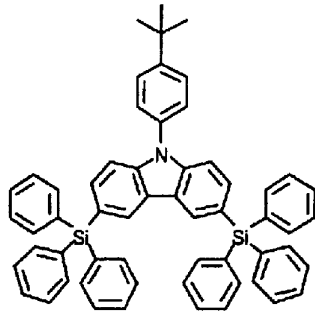
比較化合物 4



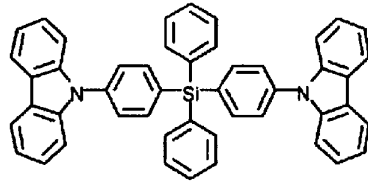
比較化合物 5



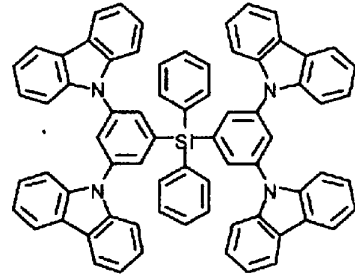
比較化合物 6



比較化合物 7



比較化合物 8



比較化合物 9

## 【0318】

上記表 2 の結果から、前記一般式 (I) で表される化合物とイリジウム錯体燐光発光材料とを組み合わせた態様において、本発明の有機電界発光素子は特に顕著な効果を有し、発光層以外に用いた場合にも効果を有することが示された。

## 【0319】

(3) 比較例 3 - 1 ~ 3 - 2 と実施例 3 - 1 ~ 3 - 2 の有機電界発光素子の作製と評価

比較例 1 の素子の化合物 B、比較化合物 1 を、下記表 3 に示した材料に変更した以外は、比較例 1 と同じ方法で比較例 3 - 1 ~ 3 - 2 と実施例 3 - 1 ~ 3 - 2 の素子を作製し、同様に評価を行った結果を、表 3 に示す。

## 【0320】

【表 3】

表 3

発光素子	化合物 B の層	比較化合物 1 の層	駆動電圧 の相対値	輝度半減時間 の相対値
比較例 3 - 1	比較化合物 5	比較化合物 1	100	100
実施例 3 - 1	例示化合物 3 - 3	比較化合物 1	97	130
比較例 3 - 2	比較化合物 5	比較化合物 1	100	100
実施例 3 - 2	例示化合物 3 - 3	例示化合物 1 - 3	89	205

## 【0321】

以上の結果から、本発明の効果は、発光層に隣接する有機層に一般式 (I) で表される化合物を用いることによって得られ、また、発光層と発光層に隣接する有機層のそれぞれに用いることによって、特に顕著な効果を得ることができることが示された。

## 【0322】

(4) 比較例 4 - 1 と比較例 4 - 2 の有機電界発光素子の作製と評価

比較例 1 の有機電界発光素子に用いた比較化合物 1 と化合物 C を、下記表 4 に示した材料に変更した以外は、比較例 1 と同じ方法で比較例 4 - 1 と比較例 4 - 2 の素子を作製し、同様に評価を行った結果を、表 4 に示す。

## 【0323】



【表 4】

表 4

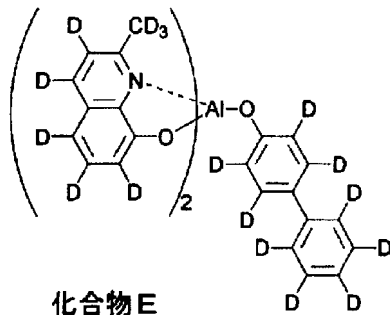
発光素子	比較化合物 1 の層	化合物 C の層	駆動電圧 の相対値	輝度半減時間 の相対値
比較例 4 - 1	比較化合物 2	化合物 C	1 0 0	1 0 0
比較例 4 - 2	比較化合物 2	化合物 E	9 8	1 0 3

【 0 3 2 4 】

上記化合物 E の化学構造は下記の通りである。

【化 8 5】

10



20

【 0 3 2 5 】

表 4 において、化合物 C を用いた場合と、化合物 C を重水素化した化合物 E を用いた場合は、駆動電圧及び輝度半減時間における効果に差が殆どみられない。

表 1 及び表 4 の結果より、本発明の効果は化合物の重水素化により得られたものではなく、特定の構造を有し、かつ、重水素原子を含む一般式 (I) で表される化合物を用いることにより得られた特有の効果であることが示された。

---

フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I  
H 0 5 B 33/22 D

審査官 越河 勉

(56)参考文献 特開2005-048004(JP,A)  
特開2006-199699(JP,A)  
特開2007-134503(JP,A)  
国際公開第2007/029426(WO,A1)  
国際公開第2007/069569(WO,A1)  
特開2008-147398(JP,A)  
特表2006-523231(JP,A)  
特表2008-538858(JP,A)  
特表2008-521946(JP,A)  
特開2009-004753(JP,A)  
国際公開第2006/112582(WO,A1)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)  
CAplus/REGISTRY(STN)  
H01L 51/50  
C07D 209/86  
C09K 11/06