

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】第 7 部門第 2 区分

【発行日】平成21年12月24日(2009.12.24)

【公開番号】特開2009-267245(P2009-267245A)

【公開日】平成21年11月12日(2009.11.12)

【年通号数】公開・登録公報2009-045

【出願番号】特願2008-117546(P2008-117546)

【国際特許分類】

H 0 1 L 51/50 (2006.01)

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

【F I】

H 0 5 B 33/14 B

C 0 9 K 11/06 6 6 0

C 0 9 K 11/06 6 8 0

【手続補正書】

【提出日】平成21年9月25日(2009.9.25)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

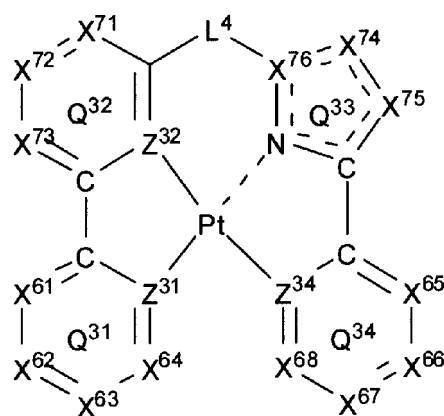
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

一対の電極間に、少なくとも発光層を含む有機層を有する有機電界発光素子であって、  
下記一般式(II-a)で表される化合物を前記有機層の少なくともいずれかの層に含有  
する有機電界発光素子。

【化 1】



一般式(II-a)

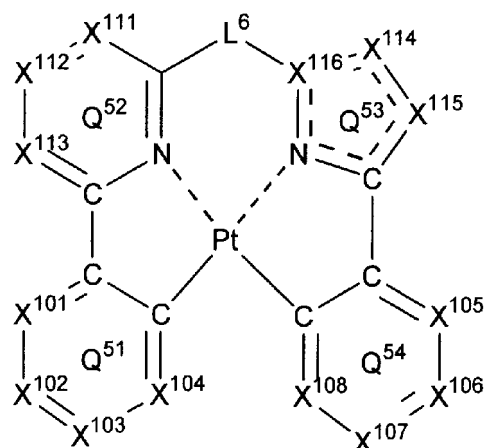
式中、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、 $X^{67}$ 、 $X^{68}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{76}$ 、 $Z^{31}$ 、 $Z^{32}$ 、及び $Z^{34}$ は、各々独立に炭素原子、窒素原子又はリン原子を表し、 $X^{74}$ 、及び $X^{75}$ は各々独立に炭素原子、窒素原子、酸素原子又は硫黄原子を表す。 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、 $X^{67}$ 、 $X^{68}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、及び $X^{75}$ がさらに置換可能な場合は各々独立に置換基を有していてもよい。環 $Q^{31}$ は5員環を表し、5員環を形成する原子間の結合は単結合または二重結合である。環 $Q^{33}$ とPtの結合を表す破線は配位結合を表し、Pt

-  $Z^{31}$ 、 $Pt - Z^{32}$ 、及び  $Pt - Z^{34}$  は配位結合又は共有結合を表す。 $L^4$  は二価の連結基を表す。

【請求項 2】

前記一般式 (II-a) で表される化合物が、下記一般式 (II-a-1) で表される化合物であることを特徴とする請求項 1 に記載の有機電界発光素子。

【化 2】



一般式(II-a-1)

式中、 $X^{101}$ 、 $X^{102}$ 、 $X^{103}$ 、 $X^{104}$ 、 $X^{105}$ 、 $X^{106}$ 、 $X^{107}$ 、 $X^{108}$ 、 $X^{111}$ 、 $X^{112}$ 、 $X^{113}$ 、及び  $X^{116}$  は、各々独立に炭素原子又は窒素原子を表し、 $X^{114}$ 、及び  $X^{115}$  は各々独立に炭素原子、窒素原子、酸素原子又は硫黄原子を表す。 $X^{101}$ 、 $X^{102}$ 、 $X^{103}$ 、 $X^{104}$ 、 $X^{105}$ 、 $X^{106}$ 、 $X^{107}$ 、 $X^{108}$ 、 $X^{111}$ 、 $X^{112}$ 、 $X^{113}$ 、 $X^{114}$ 、及び  $X^{115}$  がさらに置換可能な場合は各々独立に置換基を有していてもよい。環  $Q^{53}$  は 5 員環を表し、5 員環を形成する原子間の結合は単結合または二重結合である。環  $Q^{51}$ 、環  $Q^{52}$ 、環  $Q^{53}$ 、及び環  $Q^{54}$  と  $Pt$  の結合を表す実線は共有結合を表し、破線は配位結合を表す。 $L^6$  は二価の連結基を表す。

【請求項 3】

一般式 (II-a-1) 中、 $X^{101}$ 、 $X^{102}$ 、 $X^{103}$ 、 $X^{105}$ 、 $X^{106}$ 、 $X^{107}$ 、 $X^{112}$  は、各々独立に、置換基を有していてもよい炭素原子であり、 $X^{104}$ 、 $X^{108}$ 、 $X^{111}$ 、 $X^{113}$  は、各々独立に、無置換の炭素原子であり、 $X^{114}$ 、及び  $X^{115}$  は各々独立に、置換基を有していてもよい炭素原子又は窒素原子であり、 $X^{116}$  は炭素原子であることを特徴とする請求項 2 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 4】

一般式 (II-a-1) 中、 $X^{105}$ 、 $X^{106}$ 、 $X^{107}$ 、 $X^{112}$  が、各々独立に、無置換の炭素原子であり、 $X^{114}$  が無置換の炭素原子であり、 $X^{115}$  が置換基を有していてもよい窒素原子であることを特徴とする請求項 2 又は 3 に記載の有機電界発光素子。

【請求項 5】

前記置換基が、メチル基、トリフルオロメチル基、フッ素原子、メトキシ基、アリール基、シアノ基であることを特徴とする請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

【請求項 6】

前記  $L^4$ 、 $L^6$  が、それぞれ、 $-C(R^{81})(R^{82})-$  又は  $-N(R^{89})-$  であり、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$  が、それぞれ、水素原子、アルキル基又はアリール基であり、 $R^{89}$  が、それぞれ、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であることを特徴とする請求項 1 ~ 5 のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

## 【請求項 7】

一般式 ( I I - a )、一般式 ( I I - a - 1 ) で表される化合物の少なくともいずれかを前記発光層に含有することを特徴とする請求項 1 ~ 6 のいずれかに記載の有機電界発光素子。

## 【請求項 8】

重水素原子を少なくとも 1 つ有する材料を、前記有機層の少なくともいずれかの層に含有することを特徴とする請求項 1 ~ 7 のいずれかに記載の有機電界発光素子。

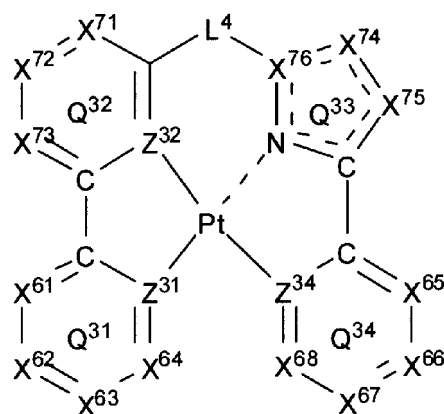
## 【請求項 9】

前記重水素原子を少なくとも 1 つ有する材料が、重水素原子を少なくとも 1 つ有する、カルバゾール骨格またはインドール骨格のいずれかを含む材料であることを特徴とする請求項 8 に記載の有機電界発光素子。

## 【請求項 10】

下記一般式 ( I I - a ) で表される化合物。

## 【化 3】



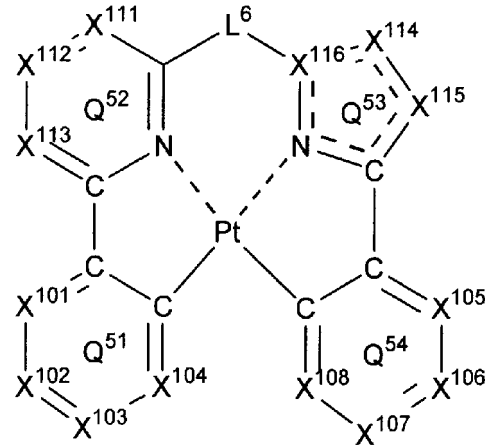
一般式(II-a)

式中、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、 $X^{67}$ 、 $X^{68}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、 $X^{75}$ 、 $Z^{31}$ 、 $Z^{32}$ 、及び  $Z^{34}$  は、各々独立に炭素原子、窒素原子又はリン原子を表し、 $X^{74}$ 、及び  $X^{75}$  は各々独立に炭素原子、窒素原子、酸素原子又は硫黄原子を表す。 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、 $X^{67}$ 、 $X^{68}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、及び  $X^{75}$  がさらに置換可能な場合は各々独立に置換基を有していてもよい。環  $Q^{31}$  は 5 員環を表し、5 員環を形成する原子間の結合は単結合または二重結合である。環  $Q^{32}$  と Pt の結合を表す破線は配位結合を表し、Pt -  $Z^{31}$ 、Pt -  $Z^{32}$ 、及び Pt -  $Z^{34}$  は配位結合又は共有結合を表す。 $L^4$  は二価の連結基を表す。

## 【請求項 11】

下記一般式 ( I I - a - 1 ) で表される化合物。

## 【化 4】



一般式(II-a-1)

式中、 $X^{101}$ 、 $X^{102}$ 、 $X^{103}$ 、 $X^{104}$ 、 $X^{105}$ 、 $X^{106}$ 、 $X^{107}$ 、 $X^{108}$ 、 $X^{111}$ 、 $X^{112}$ 、 $X^{113}$ 、及び $X^{116}$ は、各々独立に炭素原子又は窒素原子を表し、 $X^{114}$ 、及び $X^{115}$ は各々独立に炭素原子、窒素原子、酸素原子又は硫黄原子を表す。 $X^{101}$ 、 $X^{102}$ 、 $X^{103}$ 、 $X^{104}$ 、 $X^{105}$ 、 $X^{106}$ 、 $X^{107}$ 、 $X^{108}$ 、 $X^{111}$ 、 $X^{112}$ 、 $X^{113}$ 、 $X^{114}$ 、及び $X^{115}$ がさらに置換可能な場合は各々独立に置換基を有していてもよい。環 $Q^{53}$ は5員環を表し、5員環を形成する原子間の結合は単結合または二重結合である。環 $Q^{51}$ 、環 $Q^{52}$ 、環 $Q^{53}$ 、及び環 $Q^{54}$ とPtの結合を表す実線は共有結合を表し、破線は配位結合を表す。 $L^6$ は二価の連結基を表す。

## 【請求項 12】

前記置換基が、メチル基、トリフルオロメチル基、フッ素原子、メトキシ基、アリール基、シアノ基であることを特徴とする請求項 10 又は 11 に記載の化合物。

## 【請求項 13】

前記 $L^4$ 、 $L^6$ が、それぞれ、 $-C(R^{81})(R^{82})-$ 又は $-N(R^{89})-$ であり、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ が、それぞれ、水素原子、アルキル基又はアリール基であり、 $R^{89}$ が、それぞれ、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であることを特徴とする請求項 10 ~ 12 のいずれかに 1 項に記載の化合物。

## 【請求項 14】

請求項 10 又は 11 に記載の一般式 (II-a) あるいは一般式 (II-a-1) で表される発光材料。

## 【請求項 15】

請求項 10 又は 11 に記載の一般式 (II-a)、一般式 (II-a-1) で表される化合物のいずれかを含有する発光層。

## 【請求項 16】

請求項 1 ~ 9 のいずれかに記載の有機電界発光素子を用いた表示素子。

## 【請求項 17】

請求項 1 ~ 9 のいずれかに記載の有機電界発光素子を用いたディスプレイ。

## 【請求項 18】

請求項 1 ~ 9 のいずれかに記載の有機電界発光素子を用いた照明光源。

## 【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0007

【補正方法】削除

【補正の内容】

## 【手続補正 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0008

【補正方法】削除

【補正の内容】

## 【手続補正 4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0009

【補正方法】削除

【補正の内容】

## 【手続補正 5】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0010

【補正方法】削除

【補正の内容】

## 【手続補正 6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0011

【補正方法】削除

【補正の内容】

## 【手続補正 7】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0012

【補正方法】削除

【補正の内容】

## 【手続補正 8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0013

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0013】

〔1〕 一対の電極間に、少なくとも発光層を含む有機層を有する有機電界発光素子であって、下記一般式（ⅠⅠ-a）で表される化合物を前記有機層の少なくともいずれかの層に含有する有機電界発光素子。

## 【手続補正 9】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0016

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0016】

〔2〕 前記一般式（ⅠⅠ-a）で表される化合物が、下記一般式（ⅠⅠ-a-1）で表される化合物であることを特徴とする前記〔1〕に記載の有機電界発光素子。

## 【手続補正 10】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0018

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0018】

式中、 $X^{101}$ 、 $X^{102}$ 、 $X^{103}$ 、 $X^{104}$ 、 $X^{105}$ 、 $X^{106}$ 、 $X^{107}$ 、 $X^{108}$ 、 $X^{111}$ 、 $X^{112}$ 、 $X^{113}$ 、及び  $X^{116}$  は、各々独立に炭素原子又は窒素

原子を表し、 $X^{114}$ 、及び $X^{115}$ は各々独立に炭素原子、窒素原子、酸素原子又は硫黄原子を表す。 $X^{101}$ 、 $X^{102}$ 、 $X^{103}$ 、 $X^{104}$ 、 $X^{105}$ 、 $X^{106}$ 、 $X^{107}$ 、 $X^{108}$ 、 $X^{111}$ 、 $X^{112}$ 、 $X^{113}$ 、 $X^{114}$ 、及び $X^{115}$ がさらに置換可能な場合は各々独立に置換基を有していてもよい。環 $Q^{53}$ は5員環を表し、5員環を形成する原子間の結合は単結合または二重結合である。環 $Q^{51}$ 、環 $Q^{52}$ 、環 $Q^{53}$ 、及び環 $Q^{54}$ とPtの結合を表す実線は共有結合を表し、破線は配位結合を表す。 $L^6$ は二価の連結基を表す。

〔3〕一般式(II-a-1)中、 $X^{101}$ 、 $X^{102}$ 、 $X^{103}$ 、 $X^{105}$ 、 $X^{106}$ 、 $X^{107}$ 、 $X^{112}$ は、各々独立に、置換基を有していてもよい炭素原子であり、 $X^{104}$ 、 $X^{108}$ 、 $X^{111}$ 、 $X^{113}$ は、各々独立に、無置換の炭素原子であり、 $X^{114}$ 、及び $X^{115}$ は各々独立に、置換基を有していてもよい炭素原子又は窒素原子であり、 $X^{116}$ は炭素原子であることを特徴とする〔2〕に記載の有機電界発光素子。

〔4〕一般式(II-a-1)中、 $X^{105}$ 、 $X^{106}$ 、 $X^{107}$ 、 $X^{112}$ が、各々独立に、無置換の炭素原子であり、 $X^{114}$ が無置換の炭素原子であり、 $X^{115}$ が置換基を有していてもよい窒素原子であることを特徴とする〔2〕又は〔3〕に記載の有機電界発光素子。

〔5〕前記置換基が、メチル基、トリフルオロメチル基、フッ素原子、メトキシ基、アリール基、シアノ基であることを特徴とする〔1〕～〔4〕のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

〔6〕前記 $L^4$ 、 $L^6$ が、それぞれ、 $-C(R^{81})(R^{82})-$ 又は $-N(R^{89})-$ であり、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$ が、それぞれ、水素原子、アルキル基又はアリール基であり、 $R^{89}$ が、それぞれ、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であることを特徴とする〔1〕～〔5〕のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【手続補正11】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0019

【補正方法】削除

【補正の内容】

【手続補正12】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0020

【補正方法】削除

【補正の内容】

【手続補正13】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0021

【補正方法】削除

【補正の内容】

【手続補正14】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0022

【補正方法】削除

【補正の内容】

【手続補正15】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0023

【補正方法】削除

【補正の内容】

【手続補正16】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】 0 0 2 4

【補正方法】 削除

【補正の内容】

【手続補正 1 7】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0 0 2 5

【補正方法】 削除

【補正の内容】

【手続補正 1 8】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0 0 2 6

【補正方法】 削除

【補正の内容】

【手続補正 1 9】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0 0 2 7

【補正方法】 削除

【補正の内容】

【手続補正 2 0】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0 0 2 8

【補正方法】 削除

【補正の内容】

【手続補正 2 1】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0 0 2 9

【補正方法】 削除

【補正の内容】

【手続補正 2 2】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0 0 3 0

【補正方法】 削除

【補正の内容】

【手続補正 2 3】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0 0 3 1

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【 0 0 3 1】

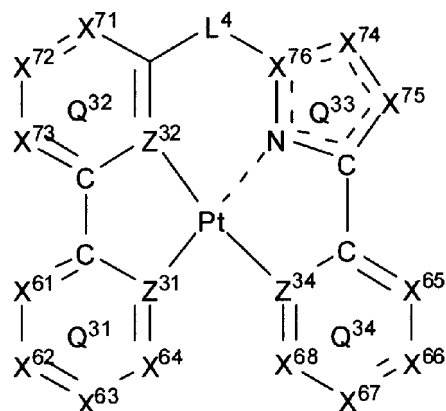
〔 7 〕 一般式 ( II - a )、一般式 ( II - a - 1 ) で表される化合物の少なくともいずれかを前記発光層に含有することを特徴とする前記〔 1 〕～〔 6 〕のいずれかに記載の有機電界発光素子。

〔 8 〕 重水素原子を少なくとも 1 つ有する材料を、前記有機層の少なくともいずれかの層に含有することを特徴とする前記〔 1 〕～〔 7 〕のいずれかに記載の有機電界発光素子。

〔 9 〕 前記重水素原子を少なくとも 1 つ有する材料が、重水素原子を少なくとも 1 つ有する、カルバゾール骨格またはインドール骨格のいずれかを含む材料であることを特徴とする前記〔 8 〕に記載の有機電界発光素子。

〔 1 0 〕 下記一般式 ( I I - a ) で表される化合物。

## 【化 1】

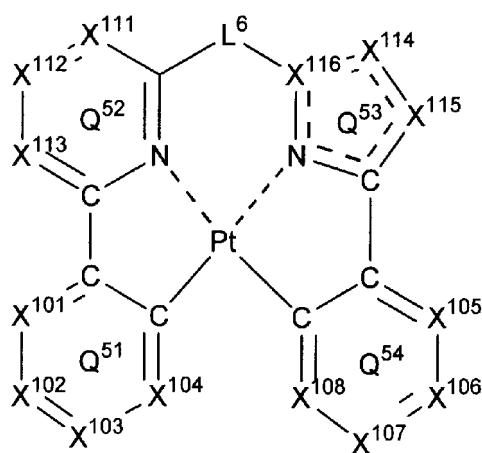


一般式(II-a)

式中、 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、 $X^{67}$ 、 $X^{68}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{76}$ 、 $Z^{31}$ 、 $Z^{32}$ 、及び $Z^{34}$ は、各々独立に炭素原子、窒素原子又はリン原子を表し、 $X^{74}$ 、及び $X^{75}$ は各々独立に炭素原子、窒素原子、酸素原子又は硫黄原子を表す。 $X^{61}$ 、 $X^{62}$ 、 $X^{63}$ 、 $X^{64}$ 、 $X^{65}$ 、 $X^{66}$ 、 $X^{67}$ 、 $X^{68}$ 、 $X^{71}$ 、 $X^{72}$ 、 $X^{73}$ 、 $X^{74}$ 、及び $X^{75}$ がさらに置換可能な場合は各々独立に置換基を有していてもよい。環 $Q^{33}$ は5員環を表し、5員環を形成する原子間の結合は単結合または二重結合である。環 $Q^{33}$ とPtの結合を表す破線は配位結合を表し、Pt -  $Z^{31}$ 、Pt -  $Z^{32}$ 、及びPt -  $Z^{34}$ は配位結合又は共有結合を表す。 $L^4$ は二価の連結基を表す。

〔11〕下記一般式(II-a-1)で表される化合物。

## 【化 2】



一般式(II-a-1)

式中、 $X^{101}$ 、 $X^{102}$ 、 $X^{103}$ 、 $X^{104}$ 、 $X^{105}$ 、 $X^{106}$ 、 $X^{107}$ 、 $X^{108}$ 、 $X^{111}$ 、 $X^{112}$ 、 $X^{113}$ 、及び $X^{116}$ は、各々独立に炭素原子又は窒素原子を表し、 $X^{114}$ 、及び $X^{115}$ は各々独立に炭素原子、窒素原子、酸素原子又は硫黄原子を表す。 $X^{101}$ 、 $X^{102}$ 、 $X^{103}$ 、 $X^{104}$ 、 $X^{105}$ 、 $X^{106}$ 、 $X^{107}$ 、 $X^{108}$ 、 $X^{111}$ 、 $X^{112}$ 、 $X^{113}$ 、 $X^{114}$ 、及び $X^{115}$ がさらに置換可能な場合は各々独立に置換基を有していてもよい。環 $Q^{53}$ は5員環を表し、5員環を形成する原子間の結合は単結合または二重結合である。環 $Q^{51}$ 、環 $Q^{52}$ 、環 $Q^{53}$ 、及び環 $Q^{54}$ とPtの結合を表す実線は共有結合を表し、破線は配位結合を表す。 $L^6$ は二価の連結基を表す。



〔 1 2 〕 前記置換基が、メチル基、トリフルオロメチル基、フッ素原子、メトキシ基、アリール基、シアノ基であることを特徴とする〔 1 0 〕又は〔 1 1 〕に記載の化合物。

〔 1 3 〕 前記  $L^4$ 、 $L^6$  が、それぞれ、 $-C(R^{81})(R^{82})-$ 又は $-N(R^{89})-$ であり、 $R^{81}$ 、 $R^{82}$  が、それぞれ、水素原子、アルキル基又はアリール基であり、 $R^{89}$  が、それぞれ、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基又はアリール基であることを特徴とする〔 1 0 〕～〔 1 2 〕のいずれか 1 項に記載の化合物。

〔 1 4 〕 前記〔 1 0 〕又は〔 1 1 〕に一般式 ( I I - a )、一般式 ( I I - a - 1 ) で表される発光材料。

〔 1 5 〕 前記〔 1 0 〕又は〔 1 1 〕に一般式 ( I I - a )、一般式 ( I I - a - 1 ) で表される化合物のいずれかを含有する発光層。

〔 1 6 〕 前記請求項〔 1 〕～〔 9 〕のいずれかに記載の有機電界発光素子を用いた表示素子。

〔 1 7 〕 前記請求項〔 1 〕～〔 9 〕のいずれかに記載の有機電界発光素子を用いたディスプレイ。

〔 1 8 〕 前記請求項〔 1 〕～〔 9 〕のいずれかに記載の有機電界発光素子を用いた照明光源。

本発明は、上記〔 1 〕～〔 1 8 〕に係る発明であるが、以下、それ以外の事項についても記載している。