

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2019-6763

(P2019-6763A)

(43) 公開日 平成31年1月17日(2019.1.17)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
C O 7 D 491/048 (2006.01)	C O 7 D 491/048	C S P 3 K 1 0 7
H O 1 L 51/50 (2006.01)	H O 5 B 33/14	B 4 C O 5 O
C O 9 K 11/06 (2006.01)	C O 9 K 11/06	6 5 5
	C O 9 K 11/06	6 9 0

審査請求 未請求 請求項の数 21 O L (全 104 頁)

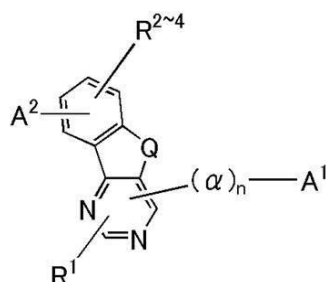
(21) 出願番号	特願2018-103603 (P2018-103603)	(71) 出願人	000153878
(22) 出願日	平成30年5月30日 (2018. 5. 30)		株式会社半導体エネルギー研究所
(31) 優先権主張番号	特願2017-122567 (P2017-122567)		神奈川県厚木市長谷 3 9 8 番地
(32) 優先日	平成29年6月22日 (2017. 6. 22)	(72) 発明者	栗原 美樹
(33) 優先権主張国	日本国 (JP)		神奈川県厚木市長谷 3 9 8 番地 株式会社半導体エネルギー研究所内
		(72) 発明者	原 朋香
			神奈川県厚木市長谷 3 9 8 番地 株式会社半導体エネルギー研究所内
		(72) 発明者	吉住 英子
			神奈川県厚木市長谷 3 9 8 番地 株式会社半導体エネルギー研究所内
		(72) 発明者	渡部 智美
			神奈川県厚木市長谷 3 9 8 番地 株式会社半導体エネルギー研究所内
			最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機化合物、発光素子、発光装置、電子機器、および照明装置

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】縮合環が直接結合したベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格を有する化合物、該化合物を有する発光素子、または、該発光素子を有する表示装置、電子機器、及び照明装置の提供。

【解決手段】式 (G 1) で表される有機化合物。



(G1)

10

(Q : O , S 。 : 置換 / 無置換 C 6 ~ 1 3 のアリーレン。 n : 0 ~ 4 の整数。 A ¹ : アリール、ヘテロアリールを含む C 6 ~ 1 0 0 の基。 R ¹ ~ R ⁴ : H、置換 / 無置換 C 1 ~ 6 のアルキル、置換 / 無置換 C 3 ~ 7 のシクロアルキル、置換 / 無置換 C 6 ~ 1 3 のアリーレン。 A ² : 縮合環)

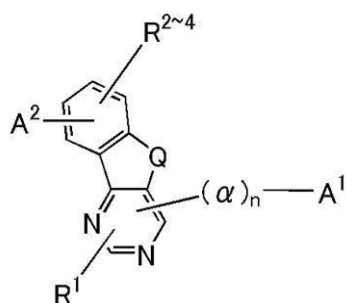
20

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

一般式 (G 1) で表される有機化合物。

【化 1】



(G1)

10

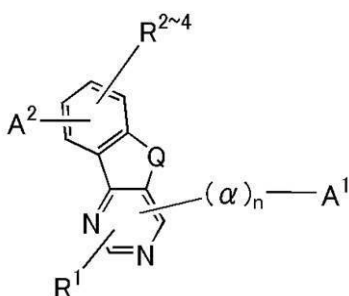
(式中、Q は酸素または硫黄を表す。また、 A^2 は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、 A^1 はアリール基またはヘテロアリール基を含む炭素数 6 乃至 100 の基を表す。また、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれかーを表す。また、 A^2 は縮合環を表す。)

20

【請求項 2】

一般式 (G 2) で表される有機化合物。

【化 2】



(G2)

30

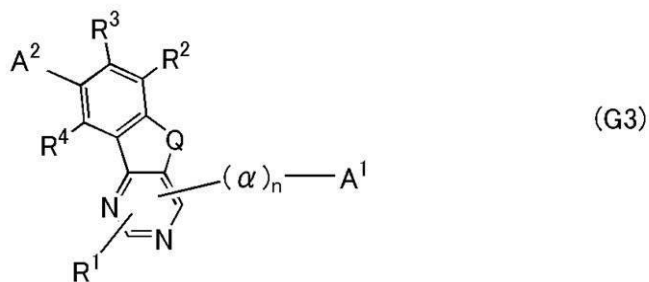
(式中、Q は酸素または硫黄を表す。また、 A^2 は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が 6 ~ 100 の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が 6 ~ 100 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれかーを表す。また、 A^2 は縮合環を表す。)

40

【請求項 3】

一般式 (G 3) で表される有機化合物。

【化 3】



10

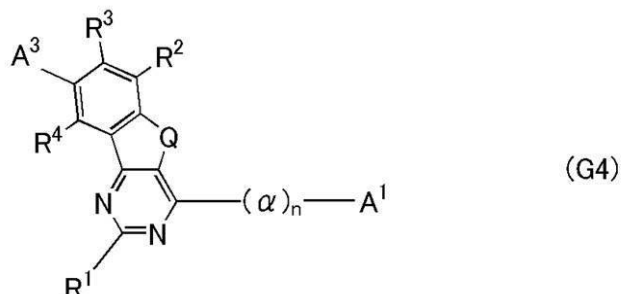
(式中、Qは酸素または硫黄を表す。また、 A^2 は置換もしくは無置換の炭素数6乃至13のアリーレン基を表し、 n は0乃至4の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が6～100の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が6～100の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数1乃至6のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数3乃至7のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数6乃至13のアリール基、のいずれかーを表す。また、 A^2 は縮合環を表す。)

【請求項 4】

一般式 (G4) で表される有機化合物。

【化 4】

20



30

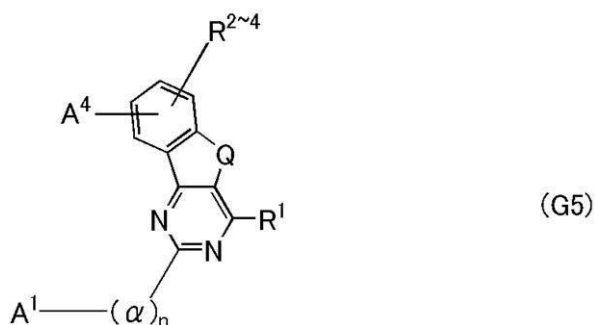
(式中、Qは酸素または硫黄を表す。また、 A^3 は置換もしくは無置換の炭素数6乃至13のアリーレン基を表し、 n は0乃至4の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が6～100の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が6～100の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数1乃至6のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数3乃至7のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数6乃至13のアリール基、のいずれかーを表す。また、 A^3 は縮合環を表す。)

【請求項 5】

一般式 (G5) で表される有機化合物。

40

【化 5】



10

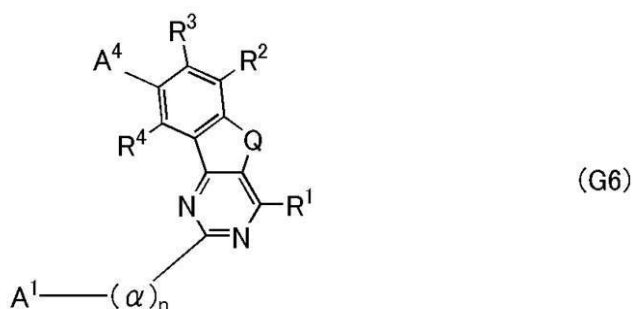
(式中、Qは酸素または硫黄を表す。また、 — は置換もしくは無置換の炭素数6乃至13のアリーレン基を表し、 n は0乃至4の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が6～100の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が6～1000の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $R^1 \sim R^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数1乃至6のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数3乃至7のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数6乃至13のアリール基、のいずれか—を表す。また、 A^4 は縮合環を表す。)

20

【請求項 6】

一般式 (G6) で表される有機化合物。

【化 6】



30

(式中、Qは酸素または硫黄を表す。また、 — は置換もしくは無置換の炭素数6乃至13のアリーレン基を表し、 n は0乃至4の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が6～100の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が6～1000の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $R^1 \sim R^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数1乃至6のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数3乃至7のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数6乃至13のアリール基、のいずれか—を表す。また、 A^4 は縮合環を表す。)

40

【請求項 7】

請求項 1 乃至請求項 6 において、

A^1 は、正孔輸送性の骨格を有することを特徴とする有機化合物。

【請求項 8】

請求項 7 において、前記正孔輸送性の骨格は、ジアリールアミノ基または縮合芳香族炭化水素環または過剰型の縮合複素芳香環のいずれかである有機化合物。

【請求項 9】

請求項 2 乃至請求項 6 において、

50

A¹ は、置換もしくは無置換の縮合芳香族炭化水素環、または、置換もしくは無置換の過剰型の縮合複素芳香環であることを特徴とする有機化合物。

【請求項 10】

請求項 2 乃至請求項 6 において、

A¹ は、ジベンゾチオフェン骨格、ジベンゾフラン骨格、カルバゾール骨格のいずれか一を有する置換もしくは無置換の縮合複素芳香環であることを特徴とする有機化合物。

【請求項 11】

請求項 1 乃至請求項 10 において、

A²、A³、および A⁴ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の縮合芳香族炭化水素環、または、置換もしくは無置換の過剰型の縮合複素芳香環であることを特徴とする有機化合物。

10

【請求項 12】

請求項 1 乃至請求項 10 において、

A²、A³、および A⁴ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン骨格、置換もしくは無置換のジベンゾフラン骨格、置換もしくは無置換のカルバゾール骨格、置換もしくは無置換のナフタレン骨格、置換もしくは無置換のフルオレン骨格、置換もしくは無置換のトリフェニレン骨格、置換もしくは無置換のフェナントレン骨格、または置換もしくは無置換のナフタレン骨格のいずれか一を有する縮合環であることを特徴とする有機化合物。

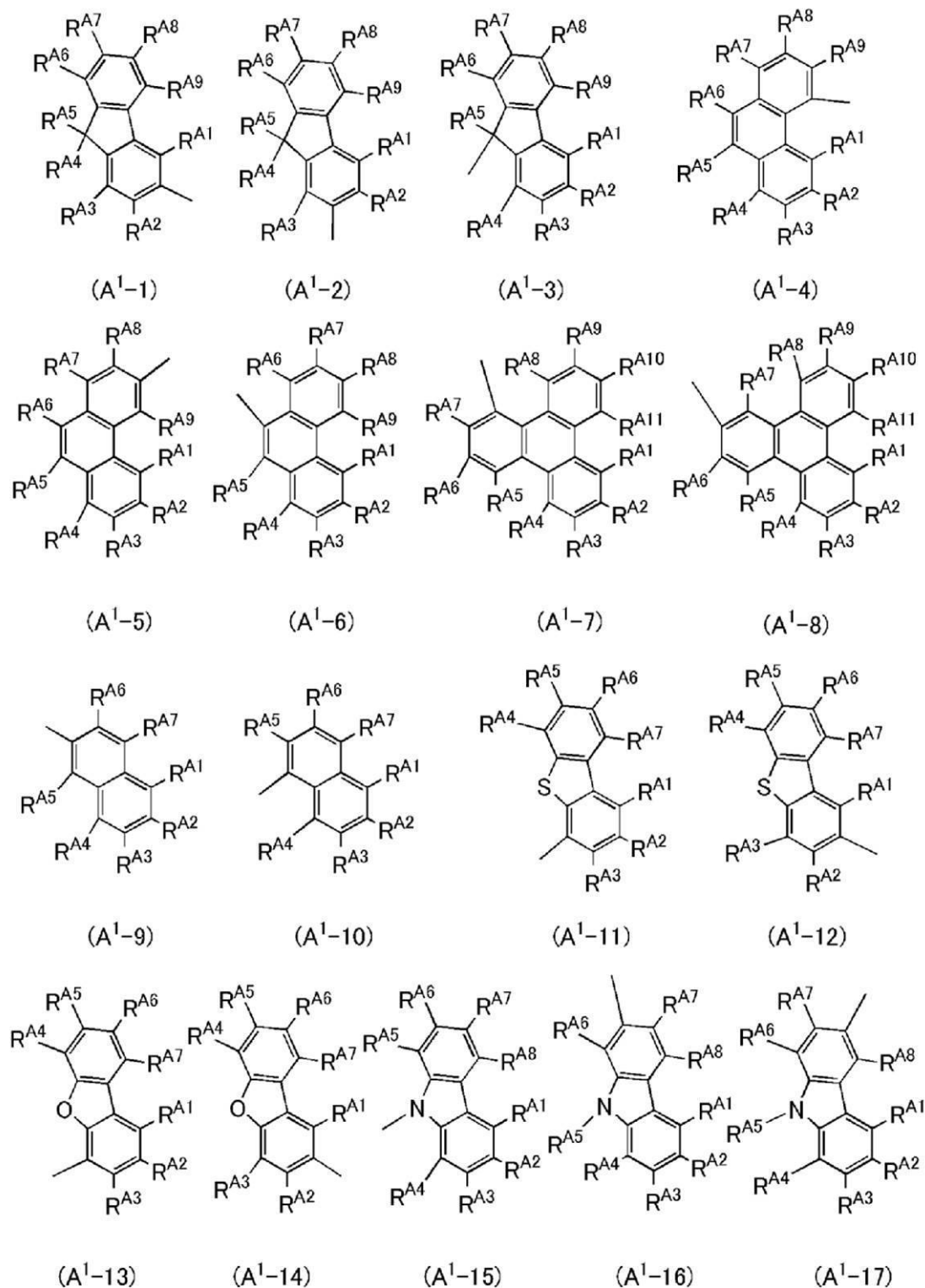
20

【請求項 13】

請求項 1 乃至請求項 12 において、

前記一般式 (G1) 乃至一般式 (G6) の前記 A¹、A²、A³、および A⁴ は、それぞれ独立に、下記一般式 (A¹-1) 乃至一般式 (A¹-17) のいずれか一であることを特徴とする有機化合物。

【化 7】



10

20

30

40

(式中、R^{A1} ~ R^{A11}は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数1乃至6のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数3乃至7のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数6乃至13のアリール基、のいずれかを表す。)

【請求項 14】

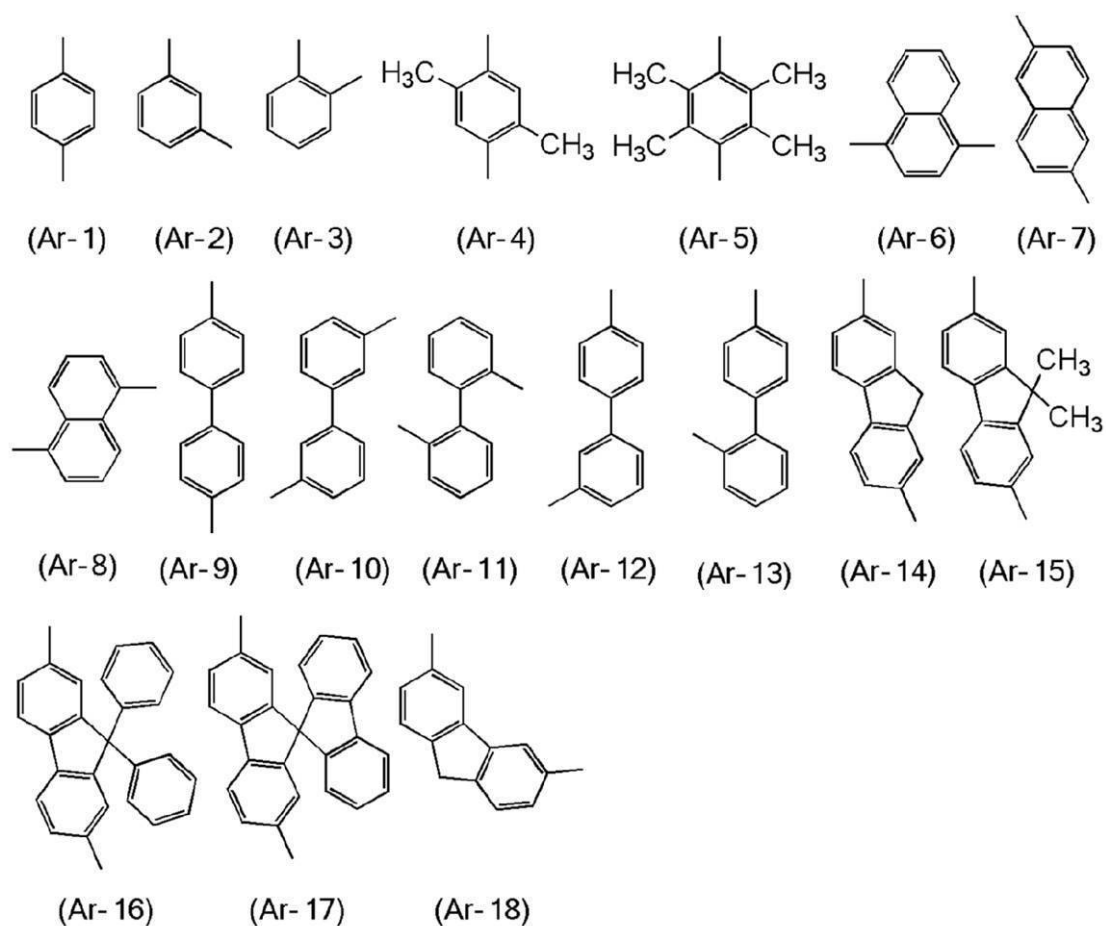
請求項1乃至請求項12において、

前記一般式(G1)乃至前記一般式(G6)中の は、下記一般式(Ar-1)乃至一

50

般式 (Ar - 18) のいずれかである有機化合物。

【化 8】



10

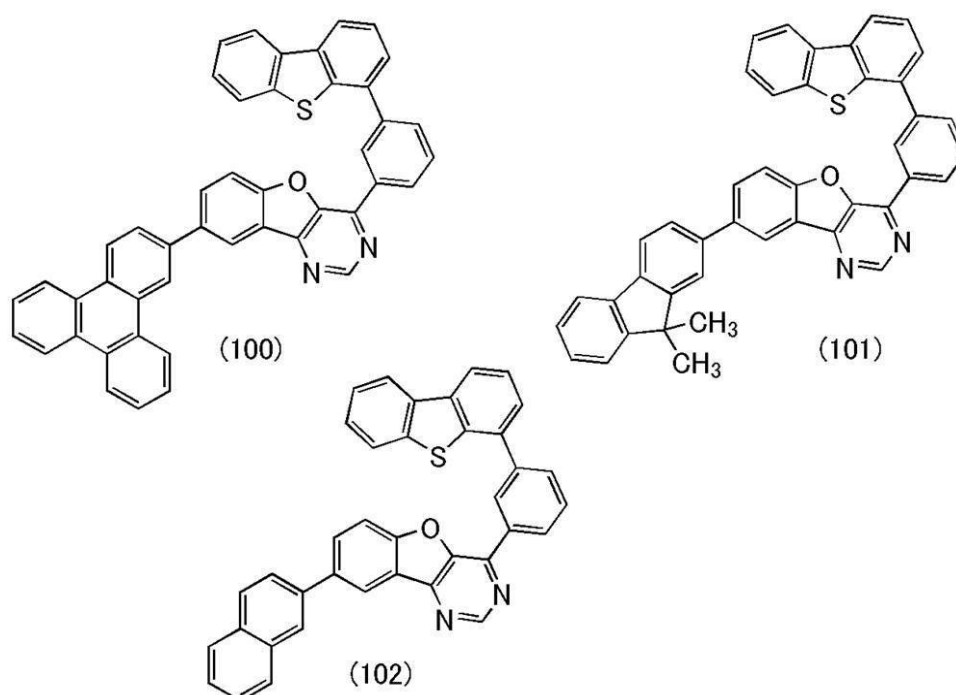
20

【請求項 15】

構造式 (100)、構造式 (101) または (102) で表される有機化合物。

30

【化 9】



10

20

【請求項 16】

請求項 1 乃至請求項 15 のいずれか一に記載の有機化合物を用いた発光素子。

【請求項 17】

一对の電極間に E L 層を有し、

前記 E L 層は、請求項 1 乃至請求項 15 のいずれか一に記載の有機化合物を有する発光素子。

【請求項 18】

一对の電極間に E L 層を有し、

前記 E L 層は、発光層を有し、

前記発光層は、請求項 1 乃至請求項 15 のいずれか一に記載の有機化合物を有する発光素子。

30

【請求項 19】

請求項 16 乃至請求項 18 のいずれか一に記載の発光素子と、

トランジスタ、または基板の少なくとも一と、

を有する発光装置。

【請求項 20】

請求項 19 に記載の発光装置と、

マイク、カメラ、操作ボタン、外部接続部、または、スピーカの少なくとも一と、

を有する電子機器。

40

【請求項 21】

請求項 16 乃至請求項 18 のいずれか一に記載の発光素子と、

筐体、カバー、または、支持台の少なくとも一と、

を有する照明装置。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明の一態様は、縮合環が直接結合したベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格を有する化合物に関する。または、該化合物を有する発光素子に関する。

50

または、該発光素子を有する表示装置、電子機器、及び照明装置に関する。

【 0 0 0 2 】

本発明の一態様は、有機化合物、発光素子、発光装置、電子機器、および照明装置に関する。但し、本発明の一態様は、上記の技術分野に限定されない。すなわち、本発明の一態様は、物、方法、製造方法、または駆動方法に関する。または、本発明の一態様は、プロセス、マシン、マニファクチャ、または、組成物（コンポジション・オブ・マター）に関する。また、具体的には、半導体装置、表示装置、液晶表示装置などを一例として挙げることができる。

【背景技術】

【 0 0 0 3 】

一对の電極間に E L 層を挟んでなる発光素子（有機 E L 素子ともいう）は、薄型軽量、入力信号に対する高速な応答性、低消費電力などの特性を有することから、これらを適用したディスプレイは、次世代のフラットパネルディスプレイとして注目されている。

【 0 0 0 4 】

発光素子は、一对の電極間に電圧を印加することにより、各電極から注入された電子およびホールが E L 層において再結合し、E L 層に含まれる発光物質（有機化合物）が励起状態となり、その励起状態が基底状態に戻る際に発光する。なお、励起状態の種類としては、一重項励起状態（ S^* ）と三重項励起状態（ T^* ）とがあり、一重項励起状態からの発光が蛍光、三重項励起状態からの発光が燐光と呼ばれている。また、発光素子におけるこれらの統計的な生成比率は、 $S^* : T^* = 1 : 3$ であると考えられている。発光物質から得られる発光スペクトルはその発光物質特有のものであり、異なる種類の有機化合物を発光物質として用いることによって、様々な発光色の発光素子を得ることができる。

【 0 0 0 5 】

このような発光素子に関しては、その素子特性を向上させる為に、素子構造の改良や材料開発等が盛んに行われている（例えば、特許文献 1 参照。）。

【先行技術文献】

【特許文献】

【 0 0 0 6 】

【特許文献 1】特開 2 0 1 0 - 1 8 2 6 9 9 号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【 0 0 0 7 】

発光素子の開発において、発光素子に用いる有機化合物は、その特性を高める上で非常に重要である。そこで、本発明の一態様では、新規な有機化合物を提供する。すなわち、素子特性や信頼性を高める上で有効な新規の有機化合物を提供する。また、本発明の一態様では、発光素子に用いることができる新規な有機化合物を提供する。また、本発明の一態様では、発光素子の E L 層に用いることができる、新規な有機化合物を提供する。また、本発明の一態様である新規な有機化合物を用いた高効率で信頼性の高い新規な発光素子を提供する。また、新規な発光装置、新規な電子機器、または新規な照明装置を提供する。なお、これらの課題の記載は、他の課題の存在を妨げるものではない。なお、本発明の一態様は、必ずしも、これらの課題の全てを解決する必要はない。なお、これら以外の課題は、明細書、図面、請求項などの記載から、自ずと明らかとなるものであり、明細書、図面、請求項などの記載から、これら以外の課題を抽出することが可能である。

【課題を解決するための手段】

【 0 0 0 8 】

本発明の一態様は、ベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格を有し、下記一般式（G 1）で表される有機化合物である。

【 0 0 0 9 】

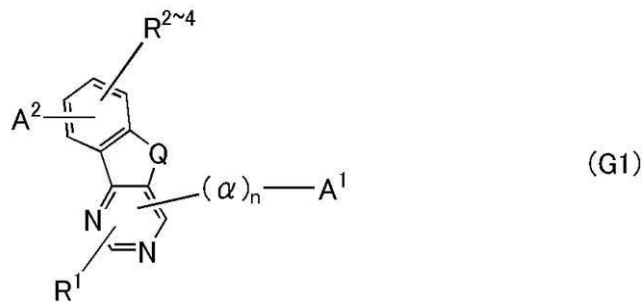
10

20

30

40

【化 1】



10

【0010】

一般式 (G1) において、Q は酸素または硫黄を表す。また、 A^2 は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、 n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、 A^1 はアリール基またはヘテロアリール基を含む炭素数 6 乃至 100 の基を表す。また、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれか一を表す。また、 A^2 は縮合環を表す。

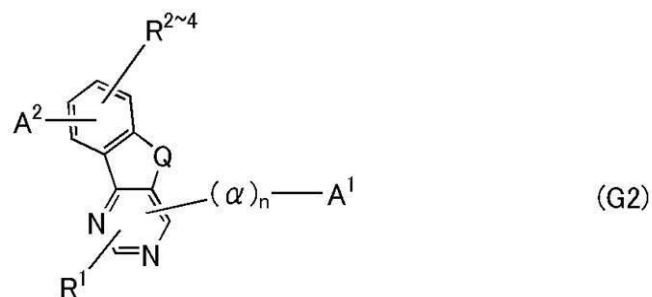
【0011】

また、本発明の別の一態様は、下記一般式 (G2) で表される有機化合物である。

20

【0012】

【化 2】



30

【0013】

一般式 (G2) において、Q は酸素または硫黄を表す。また、 A^2 は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、 n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれか一を表す。また、 A^2 は縮合環を表す。

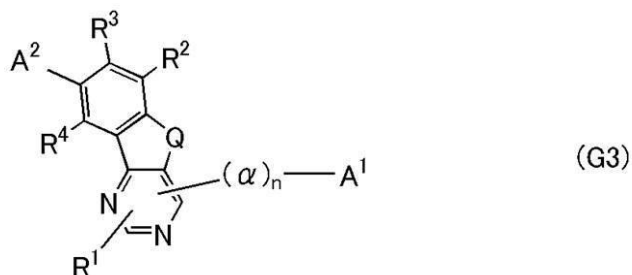
【0014】

また、本発明の別の一態様は、下記一般式 (G3) で表される有機化合物である。

40

【0015】

【化 3】



10

【0016】

一般式 (G3) において、Q は酸素または硫黄を表す。また、 α は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $R^1 \sim R^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基、のいずれかーを表す。また、 A^2 は縮合環を表す。

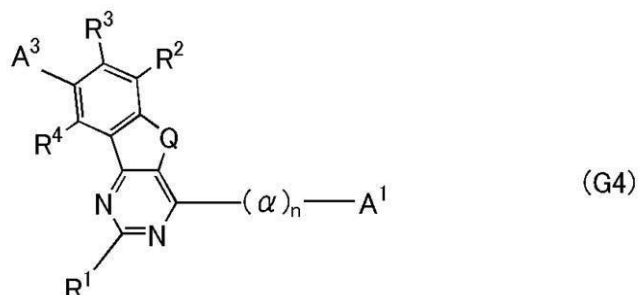
【0017】

また、本発明の別の一態様は、下記一般式 (G4) で表される有機化合物である。

20

【0018】

【化 4】



30

【0019】

一般式 (G4) において、Q は酸素または硫黄を表す。また、 α は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $R^1 \sim R^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基、のいずれかーを表す。また、 A^3 は縮合環を表す。

40

【0020】

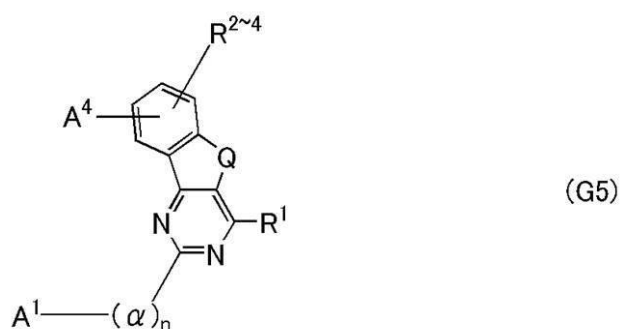
一般式 (G4) において、 A^3 はナフタレン骨格、フルオレン骨格、フェナントレン骨格、トリフェニレン骨格等を有する縮合芳香族炭化水素基であることが好ましい。

【0021】

また、本発明の別の一態様は、下記一般式 (G5) で表される有機化合物である。

【0022】

【化 5】



10

【0023】

一般式 (G5) において、Q は酸素または硫黄を表す。また、 A^4 は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、 n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれか一を表す。また、 A^4 は縮合環を表す。

20

【0024】

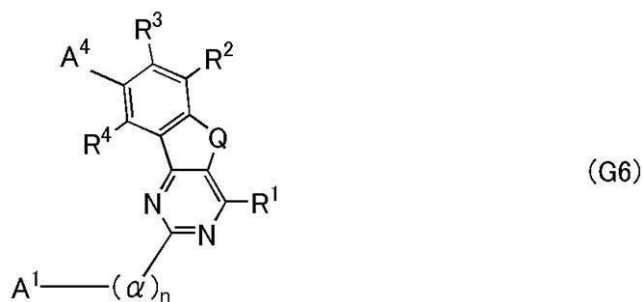
一般式 (G5) において、 A^4 はナフタレン骨格、フルオレン骨格、フェナントレン骨格、トリフェニレン骨格等を有する縮合芳香族炭化水素基であることが好ましい。

【0025】

また、本発明の別の態様は、下記一般式 (G6) で表される有機化合物である。

【0026】

【化 6】



30

【0027】

一般式 (G6) において、Q は酸素または硫黄を表す。また、 A^4 は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、 n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれか一を表す。また、 A^4 は縮合環を表す。

40

【0028】

なお、一般式 (G3) (G4) (G6) に示したように、前記縮合環は、ベンゾフロ[3, 2-d]ピリミジン、もしくはベンゾチエノ[3, 2-d]ピリミジン骨格の 8 位に結合することが、寿命の長い発光素子を得る観点で好ましい。

50

【0029】

また、上記一般式 (G 1) 乃至一般式 (G 6) において、 A^1 は正孔輸送性を有する骨格を持つことを特徴とする。正孔輸送性の骨格としては、ジアリールアミノ基または縮合芳香族炭化水素環または過剰型の縮合複素芳香環のいずれかであることが好ましい。

【0030】

また、上記一般式 (G 2) 乃至一般式 (G 6) において、 A^1 は、置換もしくは無置換の縮合芳香族炭化水素環、または、置換もしくは無置換の過剰型の縮合複素芳香環であることが好ましい。特に、正孔輸送性を考量すると、過剰型の縮合複素芳香環が好ましく、中でもジベンゾチオフエン骨格、ジベンゾフラン骨格、カルバゾール骨格のいずれかを有する置換もしくは無置換の縮合複素芳香環が最適である。

10

【0031】

一方、上記一般式 (G 1) 乃至一般式 (G 6) において、 A^2 、 A^3 、および A^4 の縮合環は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の縮合芳香族炭化水素環、または、置換もしくは無置換の過剰型の縮合複素芳香環であることを特徴とする。具体的には、 A^2 、 A^3 、および A^4 は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のジベンゾチオフエン骨格、置換もしくは無置換のジベンゾフラン骨格、置換もしくは無置換のカルバゾール骨格、置換もしくは無置換のナフタレン骨格、置換もしくは無置換のフルオレン骨格、置換もしくは無置換のトリフェニレン骨格、置換もしくは無置換のフェナントレン骨格のいずれかを有する縮合環であることを特徴とする。但し、上記縮合芳香族炭化水素環としては、不飽和の縮合芳香族炭化水素環であることが好ましい。不飽和の縮合芳香族炭化水素環としては、環を構成する炭素が sp^3 結合を有さない縮合芳香族炭化水素環が好ましく、具体的には、ナフタレン環、トリフェニレン環、フェナントレン環などである。

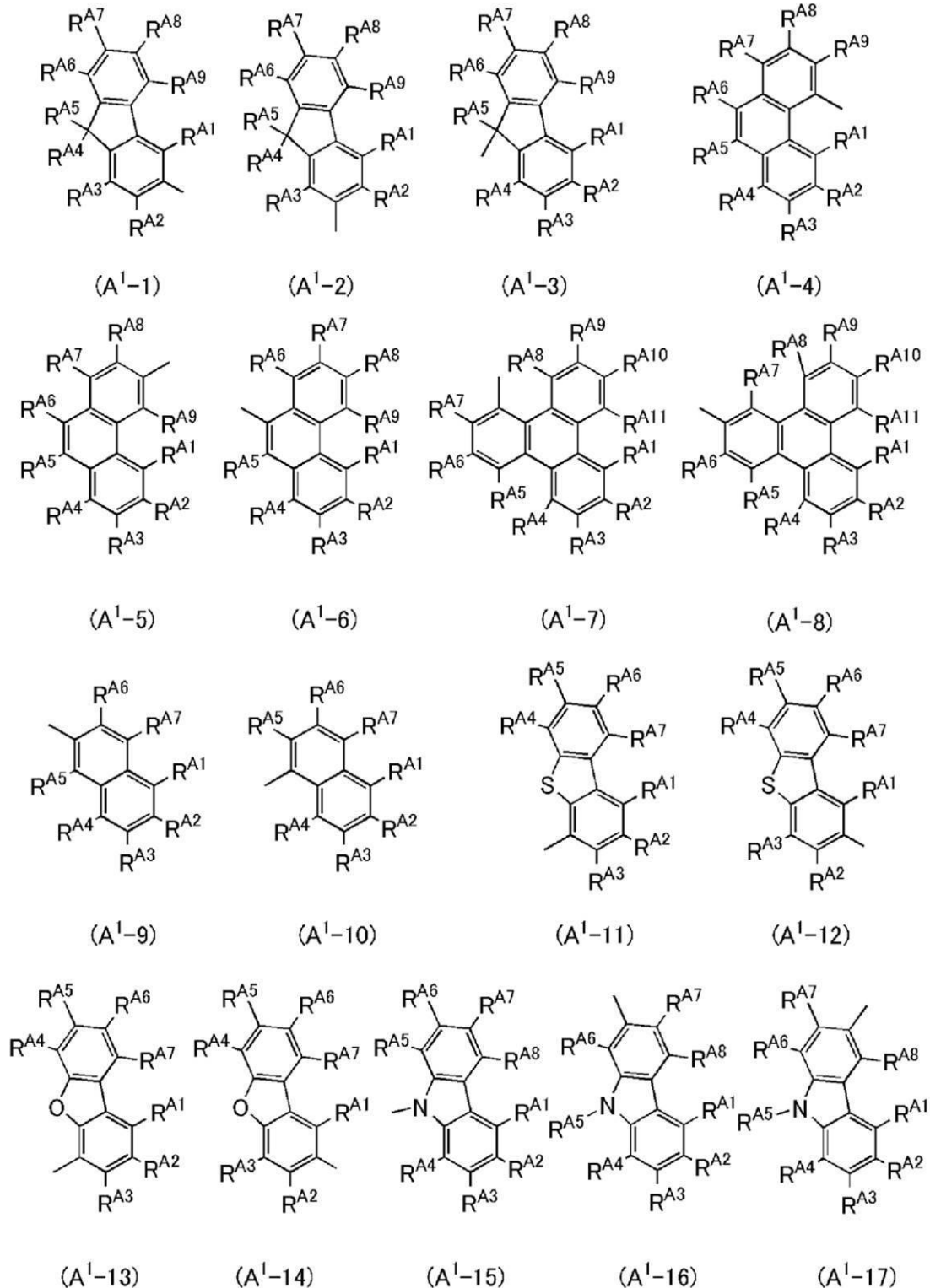
20

【0032】

上記一般式 (G 1) 乃至一般式 (G 6) における A^1 、 A^2 、 A^3 、および A^4 は、それぞれ独立に、下記一般式 ($A^1 - 1$) 乃至一般式 ($A^1 - 17$) のいずれかであることを特徴とする。

【0033】

【化 7】



【0034】

上記一般式 (A¹-1) 乃至一般式 (A¹-17) において、R^{A1} ~ R^{A11} は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれか一を表す。

【0035】

上記一般式 (G1) 乃至一般式 (G6) における は、下記一般式 (Ar-1) 乃至一般

10

20

30

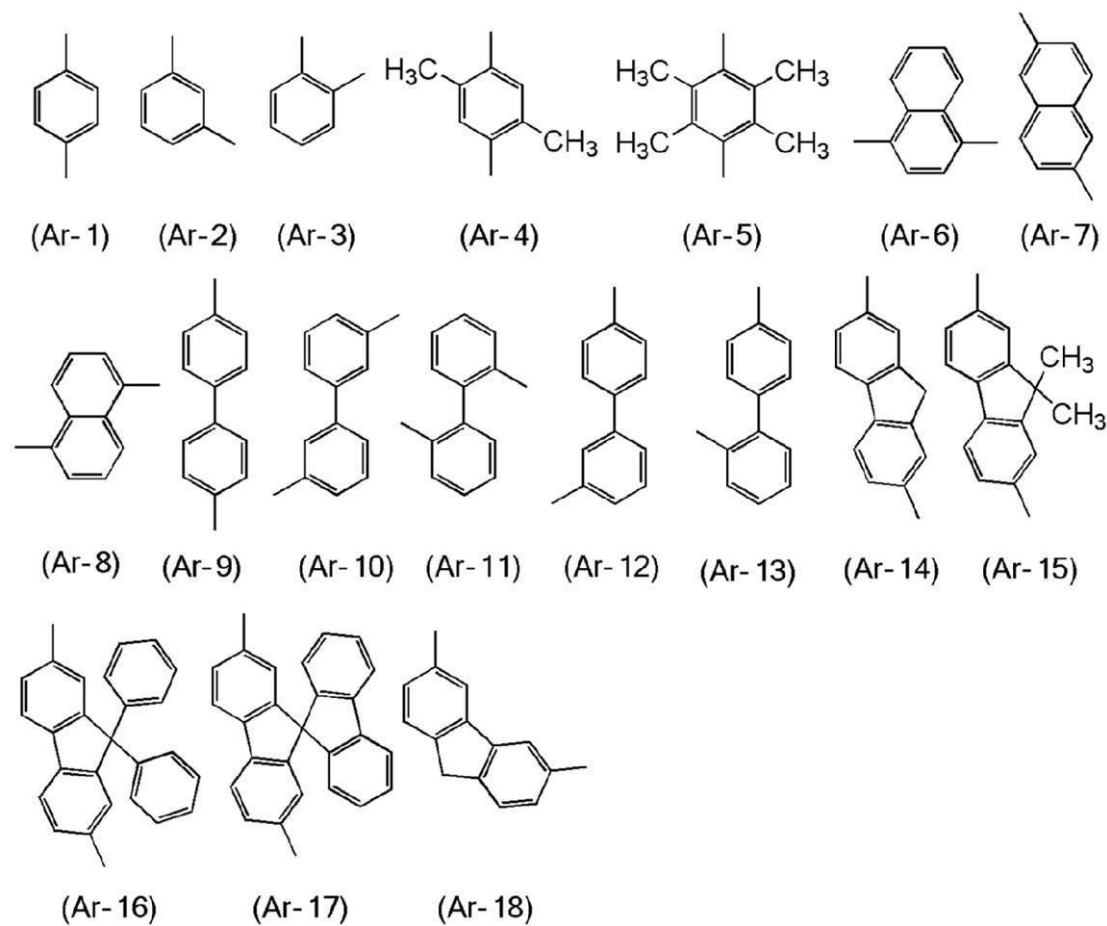
40

50

式 (Ar-18) のいずれかーで表される有機化合物。

【0036】

【化8】



10

20

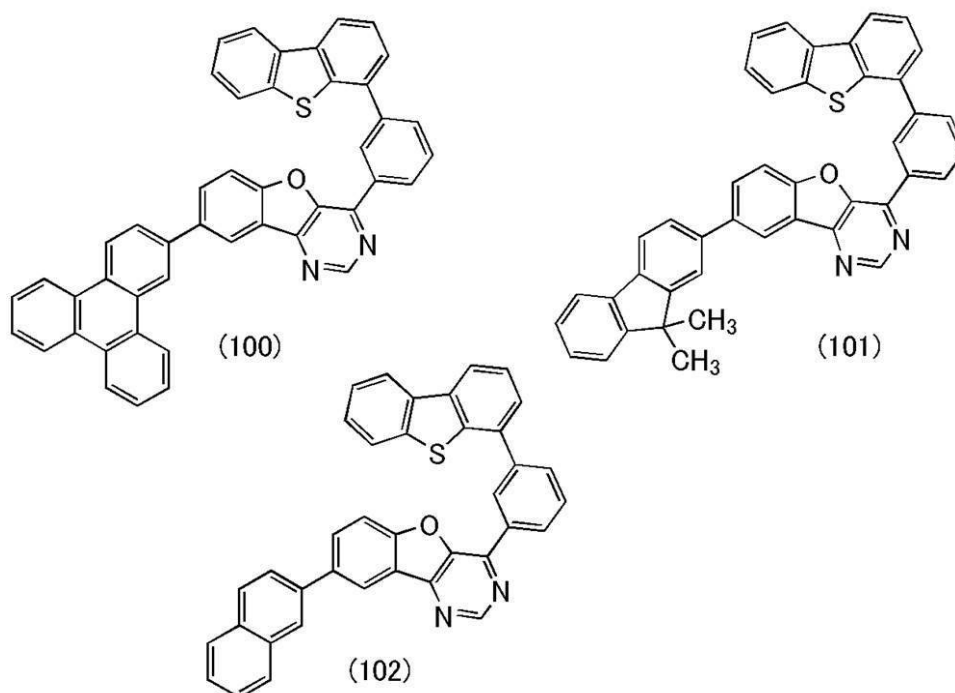
30

【0037】

本発明の別の態様は、構造式 (100)、構造式 (101) または構造式 (102) で表される有機化合物である。

【0038】

【化 9】



10

20

【0039】

本発明の別の一態様は、上述した本発明の一態様である有機化合物を用いた発光素子である。なお、上記有機化合物に加えてホスト材料を有する発光素子も本発明に含める。

【0040】

本発明の別の一態様は、上述した本発明の一態様である有機化合物を用いた発光素子である。なお、一对の電極間に有するEL層や、EL層に含まれる発光層に本発明の一態様である有機化合物を用いて形成された発光素子も本発明に含まれることとする。また、発光素子に加えて、トランジスタ、基板などを有する発光装置も発明の範疇に含める。さらに、これらの発光装置に加えて、マイク、カメラ、操作ボタン、外部接続部、筐体、カバー、支持台または、スピーカ等を有する電子機器や照明装置も発明の範疇に含める。

30

【0041】

また、本発明の一態様は、発光素子を有する発光装置を含み、さらに発光装置を有する照明装置も範疇に含めるものである。従って、本明細書中における発光装置とは、画像表示デバイス、または光源（照明装置含む）を指す。また、発光装置に、例えばFPC（Flexible printed circuit）もしくはTCP（Tape Carrier Package）等のコネクタが取り付けられたモジュール、TCPの先にプリント配線板が設けられたモジュール、または発光素子にCOG（Chip On Glass）方式によりIC（集積回路）が直接実装されたモジュールも全て発光装置に含むものとする。

40

【発明の効果】

【0042】

本発明の一態様は、新規な有機化合物を提供することができる。すなわち、素子特性を高める上で有効な新規の有機化合物を提供することができる。また、本発明の一態様では、発光素子に用いることができる新規な有機化合物を提供することができる。また、本発明の一態様では、発光素子のEL層に用いることができる、新規な有機化合物を提供することができる。また、本発明の一態様である新規な有機化合物を用いた高効率で信頼性の高い新規な発光素子を提供することができる。また、新規な発光装置、新規な電子機器、または新規な照明装置を提供することができる。なお、これらの効果の記載は、他の効果の存在を妨げるものではない。なお、本発明の一態様は、必ずしも、これらの効果の全てを

50

有する必要はない。なお、これら以外の効果は、明細書、図面、請求項などの記載から、自ずと明らかとなるものであり、明細書、図面、請求項などの記載から、これら以外の効果を抽出することが可能である。

【図面の簡単な説明】

【0043】

【図1】発光素子の構造について説明する図。

【図2】発光装置について説明する図。

【図3】発光装置について説明する図。

【図4】電子機器について説明する図。

【図5】電子機器について説明する図。

10

【図6】自動車について説明する図。

【図7】照明装置について説明する図。

【図8】照明装置について説明する図。

【図9】構造式(100)に示す有機化合物の ^1H -NMRチャート。

【図10】構造式(100)に示す有機化合物の紫外・可視吸収スペクトル及び発光スペクトル。

【図11】構造式(100)に示す有機化合物のMSスペクトル。

【図12】構造式(101)に示す有機化合物の ^1H -NMRチャート。

【図13】構造式(101)に示す有機化合物の紫外・可視吸収スペクトル及び発光スペクトル。

20

【図14】構造式(101)に示す有機化合物のMSスペクトル。

【図15】構造式(102)に示す有機化合物の ^1H -NMRチャート。

【図16】構造式(102)に示す有機化合物の紫外・可視吸収スペクトル及び発光スペクトル。

【図17】構造式(102)に示す有機化合物のMSスペクトル。

【図18】発光素子について説明する図。

【図19】発光素子1、発光素子2および発光素子3の電流密度・輝度特性を示す図。

【図20】発光素子1、発光素子2および発光素子3の電圧・輝度特性を示す図。

【図21】発光素子1、発光素子2および発光素子3の輝度・電流効率特性を示す図。

【図22】発光素子1、発光素子2および発光素子3の電圧・電流特性を示す図。

30

【図23】発光素子1、発光素子2および発光素子3の発光スペクトルを示す図。

【図24】発光素子1、発光素子2および発光素子3の信頼性を示す図。

【図25】発光素子4および比較発光素子5の電流密度・輝度特性を示す図。

【図26】発光素子4および比較発光素子5の電圧・輝度特性を示す図。

【図27】発光素子4および比較発光素子5の輝度・電流効率特性を示す図。

【図28】発光素子4および比較発光素子5の電圧・電流特性を示す図。

【図29】発光素子4および比較発光素子5の発光スペクトルを示す図。

【図30】発光素子4および比較発光素子5の信頼性を示す図。

【図31】構造式(103)に示す有機化合物の ^1H -NMRチャート。

【図32】構造式(116)に示す有機化合物の ^1H -NMRチャート。

40

【図33】発光素子6および発光素子7の電流密度・輝度特性を示す図。

【図34】発光素子6および発光素子7の電圧・輝度特性を示す図。

【図35】発光素子6および発光素子7の輝度・電流効率特性を示す図。

【図36】発光素子6および発光素子7の電圧・電流特性を示す図。

【図37】発光素子6および発光素子7の発光スペクトルを示す図。

【図38】発光素子6および発光素子7の信頼性を示す図。

【図39】発光素子8の電流密度・輝度特性を示す図。

【図40】発光素子8の電圧・輝度特性を示す図。

【図41】発光素子8の輝度・電流効率特性を示す図。

【図42】発光素子8の電圧・電流特性を示す図。

50

【図４３】発光素子８の発光スペクトルを示す図。

【発明を実施するための形態】

【００４４】

以下、本発明の実施の態様について図面を用いて詳細に説明する。但し、本発明は以下の説明に限定されず、本発明の趣旨及びその範囲から逸脱することなくその形態及び詳細を様々に変更し得ることが可能である。従って、本発明は以下に示す実施の形態の記載内容に限定して解釈されるものではない。

【００４５】

なお、図面等において示す各構成の、位置、大きさ、範囲などは、理解の簡単のため、実際の位置、大きさ、範囲などを表していない場合がある。このため、開示する発明は、必ずしも、図面等を開示された位置、大きさ、範囲などに限定されない。

10

【００４６】

また、本明細書等において、図面を用いて発明の構成を説明するにあたり、同じものを指す符号は異なる図面間でも共通して用いる。

【００４７】

（実施の形態１）

本実施の形態では、本発明の一態様である有機化合物について説明する。

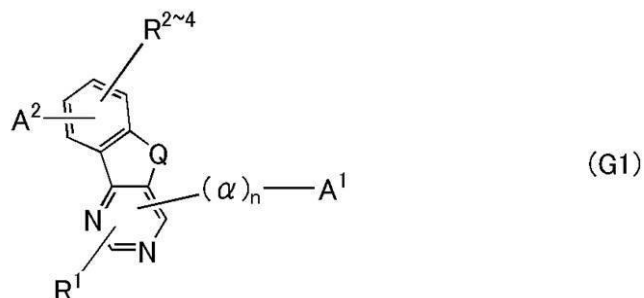
【００４８】

なお、本発明の一態様は、ベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格を有し、下記一般式（Ｇ１）で表される有機化合物である。

20

【００４９】

【化１０】



30

【００５０】

なお、一般式（Ｇ１）において、Ｑは酸素または硫黄を表す。また、 A^2 は置換もしくは無置換の炭素数６乃至１３のアリーレン基を表し、 n は０乃至４の整数を表す。また、 A^1 はアリールまたはヘテロアリールを含む炭素数６乃至１００の基を表す。また、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数１乃至６のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数３乃至７のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数６乃至１３のアリール基、のいずれか一を表す。また、 A^2 は縮合環を表す。

【００５１】

40

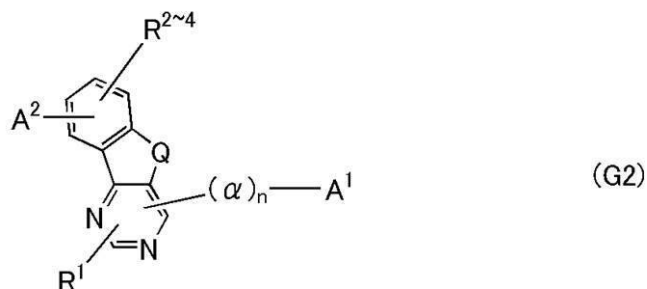
一般式（Ｇ１）において、ベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格のベンゼン側に縮合環（ A^2 ）を直接結合させることにより、熱物性が向上し、発光素子の信頼性を向上させることができる。

【００５２】

また、本発明の別の一態様は、下記一般式（Ｇ２）で表される有機化合物である。

【００５３】

【化 1 1】



10

【0054】

一般式 (G2) において、Q は酸素または硫黄を表す。また、 A^2 は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、 n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれかーを表す。また、 A^2 は縮合環を表す。

20

【0055】

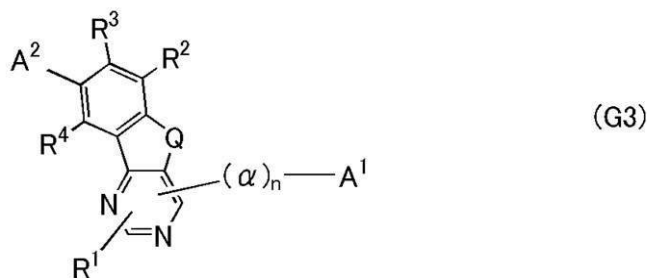
一般式 (G2) において、ベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格のベンゼン側に縮合環 (A^2) を直接結合させることにより、熱物性が向上し、発光素子の信頼性を向上させることができる。

【0056】

また、本発明の別の一態様は、下記一般式 (G3) で表される有機化合物である。

【0057】

【化 1 2】



30

【0058】

一般式 (G3) において、Q は酸素または硫黄を表す。また、 A^2 は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、 n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれかーを表す。また、 A^2 は縮合環を表す。

40

【0059】

一般式 (G3) に示すように、ベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格の 8 位に縮合環を付けると、素子の特性や信頼性に悪影響を与えるハロゲン化物のような不純物が低減した材料を容易に合成でき、原料の価格の面でも有利である。すなわち、駆動寿命の長い発光素子を得ることができる。なお、一般式 (G4) の A^3 や、一般式 (G6) の A^4 も同様の効果をもたらす。

50

【 0 0 6 0 】

また、一般式 (G 3) で示すように、ベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格の 8 位に縮合環を付けると、電気化学的な安定性や膜質に優れるだけでなく、高い T 1 準位を発現することができる。なお、一般式 (G 4) の A ³ や、一般式 (G 6) の A ⁴ も同様の効果をもたらす。

【 0 0 6 1 】

また、一般式 (G 3) 中の n は 1 または 2 であることが好ましい。

【 0 0 6 2 】

一般式 (G 3) において、ベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格のベンゼン側に縮合環 (A ²) を直接結合させることにより、熱物性が向上し、発光素子の信頼性を向上させることができる。

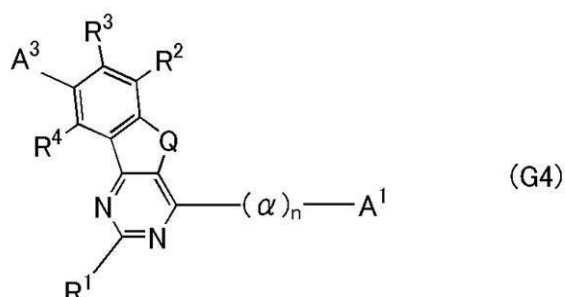
10

【 0 0 6 3 】

また、本発明の別の一態様は、下記一般式 (G 4) で表される有機化合物である。

【 0 0 6 4 】

【 化 1 3 】



20

【 0 0 6 5 】

一般式 (G 4) において、Q は酸素または硫黄を表す。また、は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、A ¹ は総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、R ¹ ~ R ⁴ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれか一を表す。また、A ³ は縮合環を表す。

30

【 0 0 6 6 】

一般式 (G 4) において、A ³ はナフタレン骨格、フルオレン骨格、フェナントレン骨格、トリフェニレン骨格等を有する縮合芳香族炭化水素基であることがより好ましい。

【 0 0 6 7 】

また、一般式 (G 4) において、A ¹ はジベンゾチオフェン骨格、ジベンゾフラン骨格、カルバゾール骨格を有する置換もしくは無置換の過剰型の縮合複素芳香環であることが好ましい。

40

【 0 0 6 8 】

また、一般式 (G 4) において、n は 1 または 2 であることが好ましい。

【 0 0 6 9 】

一般式 (G 4) において、ベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格のベンゼン側に縮合環 (A ³) を直接結合させることにより、熱物性が向上し、発光素子の信頼性を向上させることができる。

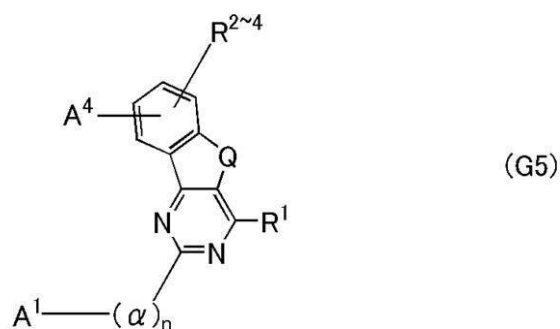
【 0 0 7 0 】

また、本発明の別の一態様は、下記一般式 (G 5) で表される有機化合物である。

【 0 0 7 1 】

50

【化 1 4】



10

【0072】

一般式 (G5) において、Q は酸素または硫黄を表す。また、 A^4 は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、 n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれかーを表す。また、 A^4 は縮合環を表す。

20

【0073】

一般式 (G5) において、 A^4 はナフタレン骨格、フルオレン骨格、フェナントレン骨格、トリフェニレン骨格等を有する縮合芳香族炭化水素基であることがより好ましい。

【0074】

また、一般式 (G5) において、 A^1 はジベンゾチオフェン骨格、ジベンゾフラン骨格、カルバゾール骨格を有する置換もしくは無置換の過剰型の縮合複素芳香環であることが好ましい。

【0075】

また、一般式 (G5) において、 n は 1 または 2 であることが好ましい。

30

【0076】

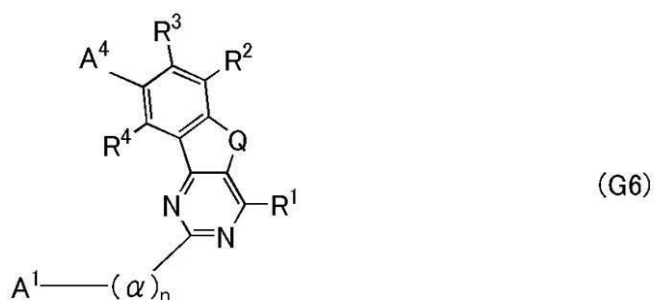
一般式 (G5) において、ベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格のベンゼン側に縮合環 (A^4) を直接結合させることにより、熱物性が向上し、発光素子の信頼性を向上させることができる。

【0077】

また、本発明の別の態様は、下記一般式 (G6) で表される有機化合物である。

【0078】

【化 1 5】



40

【0079】

一般式 (G6) において、Q は酸素または硫黄を表す。また、 A^4 は置換もしくは無置換の

50

炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、 n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、 A^1 は総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表す。また、 $R^1 \sim R^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれかーを表す。また、 A^4 は縮合環を表す。

【0080】

一般式 (G6) において、 A^4 はジベンゾチオフェン骨格、ジベンゾフラン骨格、カルバゾール骨格等を有する 過剰型の縮合複素芳香環であることが好ましい。

【0081】

また、一般式 (G6) において、 A^4 はベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格の 8 位に置換することが好ましい。

【0082】

また、一般式 (G6) において、 A^1 はジベンゾチオフェン骨格、ジベンゾフラン骨格、カルバゾール骨格を有する置換もしくは無置換の 過剰型の縮合複素芳香環であることが好ましい。

【0083】

また、一般式 (G6) において、 n は 1 または 2 であることが好ましい。

【0084】

一般式 (G6) において、ベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格のベンゼン側に縮合環 (A^4) を直に結合させることにより、熱物性が向上し、発光素子の信頼性を向上させることができる。

【0085】

ここで、本発明の一態様では、上記一般式 (G1) 乃至一般式 (G6) において、 A^1 が正孔輸送性を有する骨格を持つことを特徴とする。上記一般式 (G1) 乃至一般式 (G6) の化合物は、ベンゾフロ [3, 2-d] ピリミジン、もしくはベンゾチエノ [3, 2-d] ピリミジン骨格に由来する電子輸送性を有するが、これに対して正孔輸送性の骨格を更に付与することにより、パイポーラな化合物を提供することができる。これにより、正孔・電子の双方に対して安定な化合物が得られる。また、発光素子のホストに用いた際に、キャリアの再結合領域を広げる作用もあり、発光素子の長寿命化をもたらす。正孔輸送性を有する骨格にはたとえば、ジアリールアミノ基または縮合芳香族炭化水素環または 過剰型の縮合複素芳香環、などが挙げられる。

【0086】

このような観点から、上記一般式 (G2) 乃至一般式 (G6) において、 A^1 は、置換もしくは無置換の縮合芳香族炭化水素環、または、置換もしくは無置換の 過剰型の縮合複素芳香環であることが好ましい。特に、正孔輸送性を考量すると、 過剰型の縮合複素芳香環が好ましく、中でもジベンゾチオフェン骨格、ジベンゾフラン骨格、カルバゾール骨格のいずれかーを有する置換または無置換の縮合複素芳香環が最適である。このような 5 員環を含む縮合複素芳香環は、高い正孔輸送性と化学的安定性を両立させる。

【0087】

また、本実施の形態に示す有機化合物において、 $R^1 \sim R^4$ が、すべて水素である場合、合成の容易さや原料の価格の面でも有利であり、さらに、比較的分子量の化合物となるため、真空蒸着に適した構造となり、特に好ましい。

【0088】

一方、上記一般式 (G1) 乃至一般式 (G6) において、 A^2 、 A^3 、および A^4 の縮合環は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の縮合芳香族炭化水素環、または、置換もしくは無置換の 過剰型の縮合複素芳香族環であることを特徴とする。縮合環の中でも、これら芳香族性を有する縮合環を適用することにより、共鳴安定化による化学的な安定性が得られる。これは、発光素子にした時の素子寿命に直結する。また、熱物性 (耐熱性) の観点からも好ましい。

10

20

30

40

50

【 0 0 8 9 】

具体的には、上記一般式 (G 1) 乃至一般式 (G 6) において、 A^2 、 A^3 、および A^4 は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換のジベンゾチオフェン骨格、置換もしくは無置換のジベンゾフラン骨格、置換もしくは無置換のカルバゾール骨格、置換もしくは無置換のナフタレン骨格、置換もしくは無置換のフルオレン骨格、置換もしくは無置換のトリフェニレン骨格、置換もしくは無置換のフェナントレン骨格のいずれか一を有する縮合環であることを特徴とする。

【 0 0 9 0 】

但し、上述した縮合芳香族炭化水素環としては、環のひずみが小さい不飽和の縮合芳香族炭化水素環であることが、化学的安定性の観点から好ましい。不飽和の縮合芳香族炭化水素環としては、環を構成する炭素が sp^3 結合を有さない縮合芳香族炭化水素環が好ましく、具体的には、ナフタレン環、トリフェニレン環、フェナントレン環である。

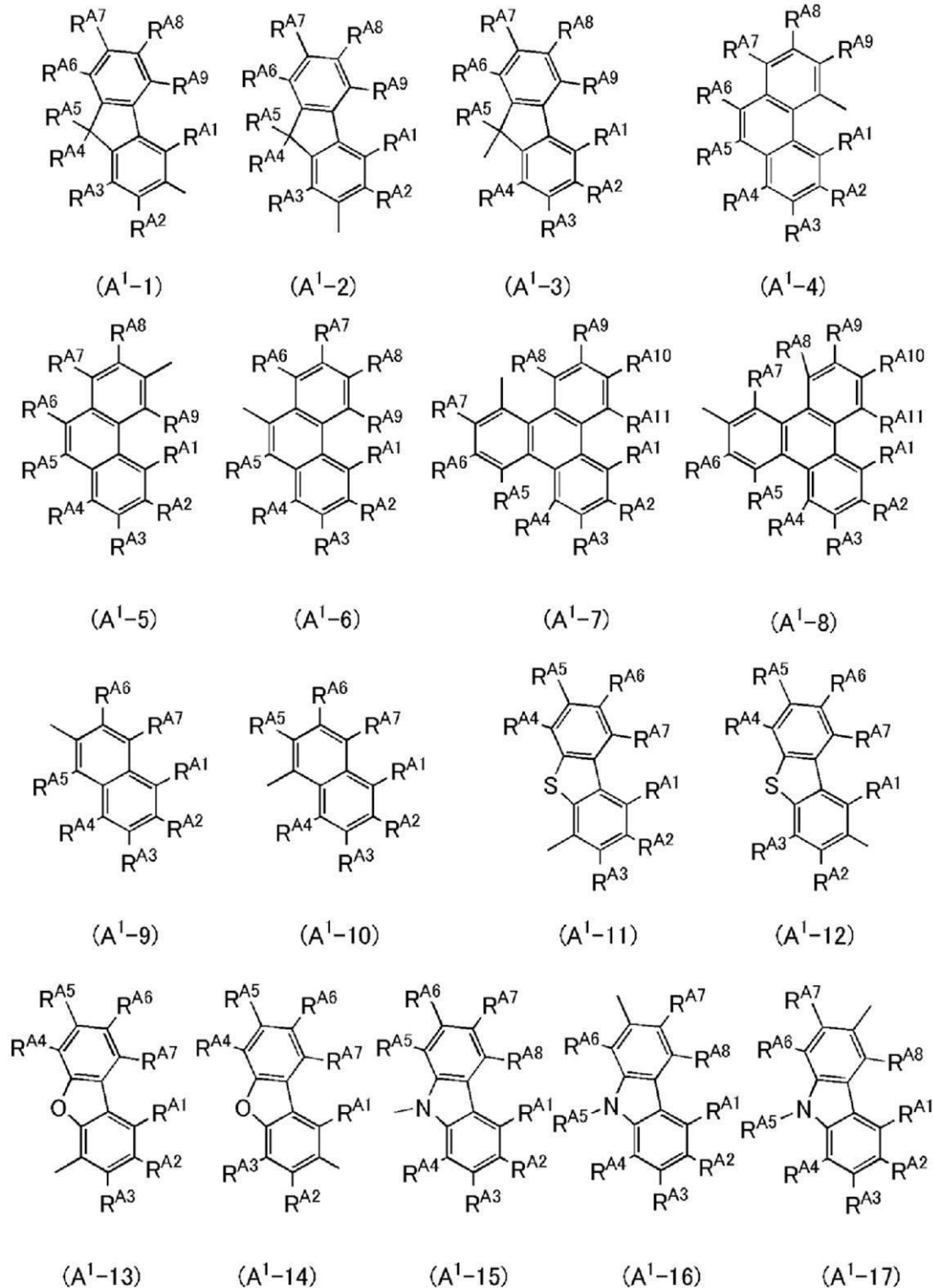
10

【 0 0 9 1 】

上記一般式 (G 1) 乃至一般式 (G 6) において、 A^1 、 A^2 、 A^3 、および A^4 は、それぞれ独立に、下記一般式 (A¹ - 1) 乃至一般式 (A¹ - 17) のいずれか一であることを特徴とする。

【 0 0 9 2 】

【化 1 6】



【0093】

上記一般式 (A¹-1) 乃至一般式 (A¹-17) において、R^{A1} ~ R^{A11} は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれかーを表す。

【0094】

上記一般式 (G1) 乃至一般式 (G6) において、前記 は、下記一般式 (Ar-1) 乃至一般式 (Ar-18) のいずれかーであることを特徴とする。

10

20

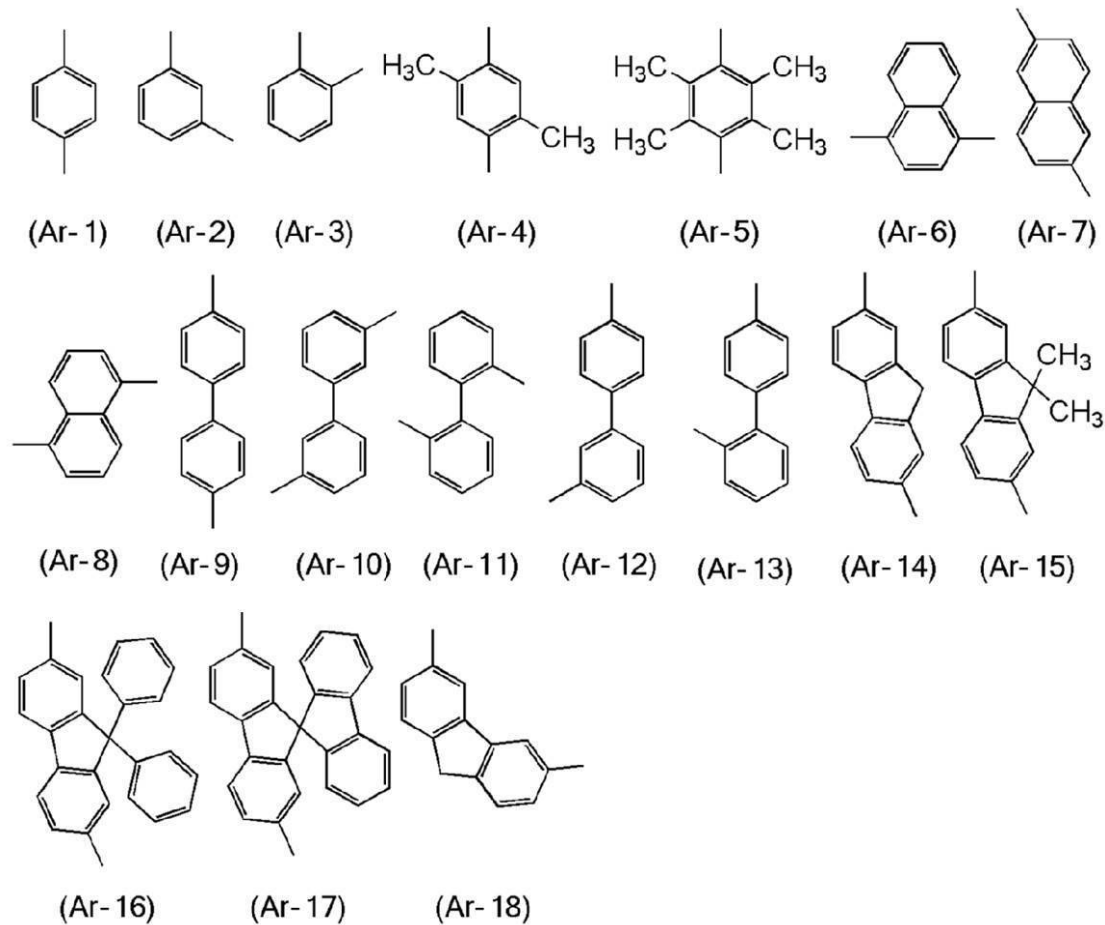
30

40

50

【 0 0 9 5 】

【 化 1 7 】



10

20

【 0 0 9 6 】

30

また、上記一般式 (G 1) ~ (G 6) において、置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のジアリールアミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、または置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 20 の単環式飽和炭化水素基、置換もしくは無置換の炭素数 7 乃至 10 の多環式飽和炭化水素基のいずれか、が置換基を有する場合、該置換基としてはメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、イソブチル基、*sec*-ブチル基、*tert*-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基のような炭素数 1 乃至 7 のアルキル基や、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、8, 9, 10-トリノルボルナニル基、のような炭素数 5 ~ 7 のシクロアルキル基や、フェニル基、ナフチル基、ピフェニル基のような炭素数 6 乃至 12 のアリール基、等が挙げられる。

【 0 0 9 7 】

40

また、上記一般式 (G 1) ~ (G 6) における炭素数 3 乃至 20 の単環式飽和炭化水素基の具体例としては、シクロプロピル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、2-メチルシクロヘキシル基、シクロオクチル基、シクロノニル基、シクロデシル基、シクロイコシル基等が挙げられる。

【 0 0 9 8 】

また、上記一般式 (G 1) ~ (G 6) における炭素数 7 乃至 10 の多環式飽和炭化水素基の具体例としては、8, 9, 10-トリノルボルナニル基、デカヒドロナフチル基、アダマンチル基等が挙げられる。

【 0 0 9 9 】

また、上記一般式 (G 1) ~ (G 6) における炭素数 6 乃至 13 のアリール基の具体例と

50

しては、フェニル基、*o*-トリル基、*m*-トリル基、*p*-トリル基、メシチル基、*o*-ビフェニル基、*m*-ビフェニル基、*p*-ビフェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、フルオレニル基、9,9-ジメチルフルオレニル基等が挙げられる。

【0100】

また、上記一般式 (G1) ~ (G6) における炭素数1乃至7のアルキル基の具体例としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、*sec*-ブチル基、イソブチル基、*tert*-ブチル基、ペンチル基、イソペンチル基、*sec*-ペンチル基、*tert*-ペンチル基、ネオペンチル基、ヘキシル基、イソヘキシル基、3-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、2-エチルブチル基、1,2-ジメチルブチル基、2,3-ジメチルブチル基、*n*-ヘブチル基等が挙げられる。

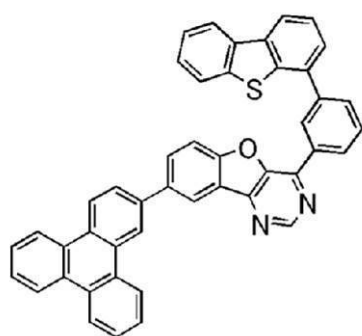
10

【0101】

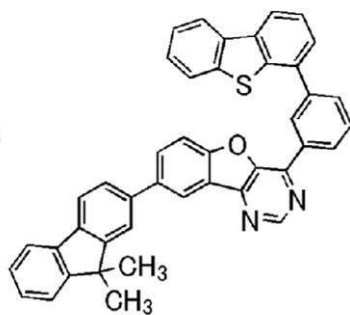
次に、上述した本発明の一態様である有機化合物の具体的な構造式を下記に示す。ただし、本発明はこれらに限定されることはない。

【0102】

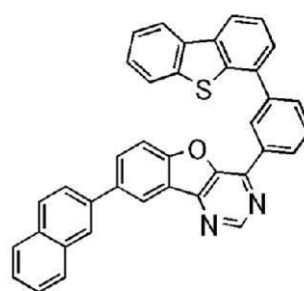
【化 1 8】



(100)

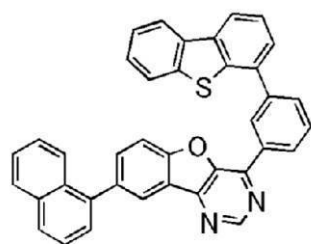


(101)

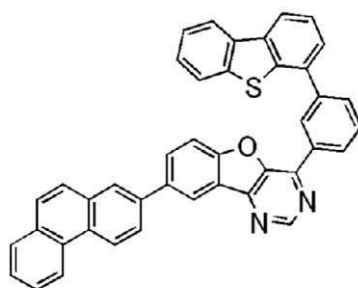


(102)

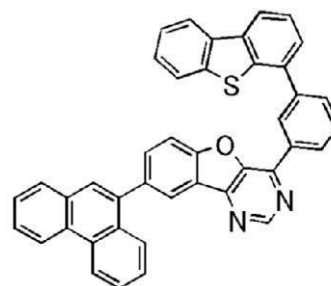
10



(103)

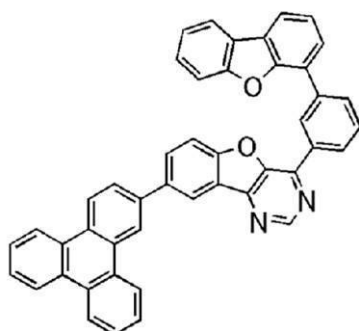


(104)

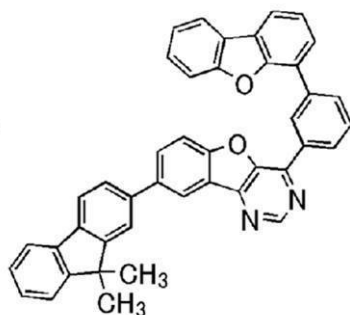


(105)

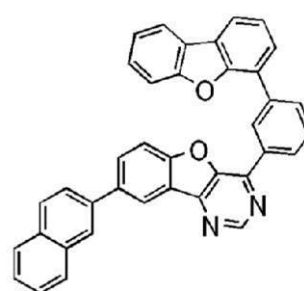
20



(106)



(107)

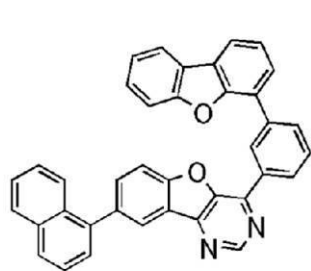


(108)

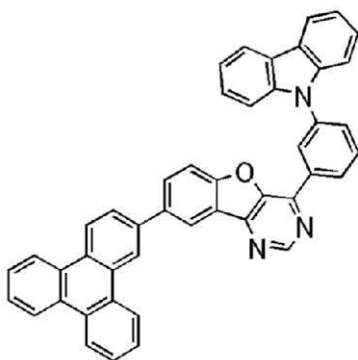
30

【 0 1 0 3 】

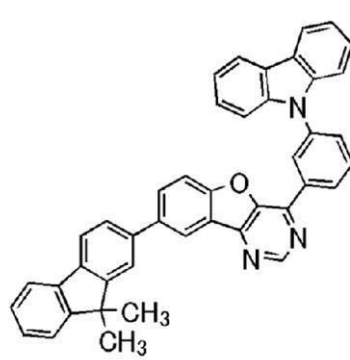
【化 1 9】



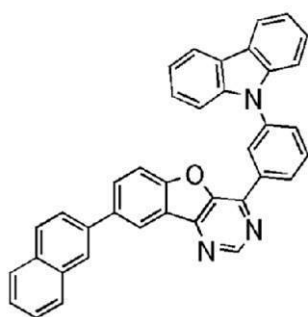
(109)



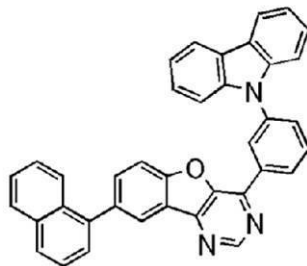
(110)



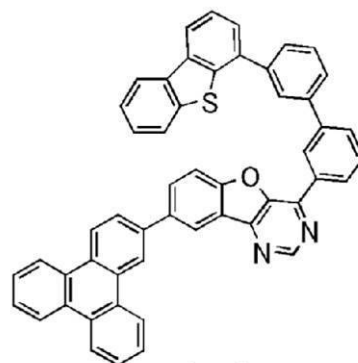
(111)



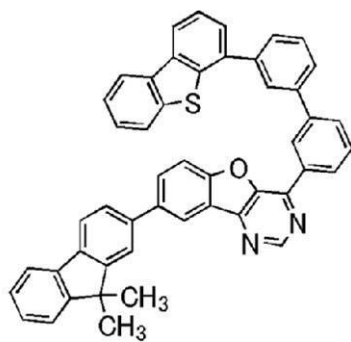
(112)



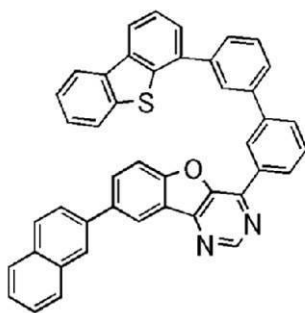
(113)



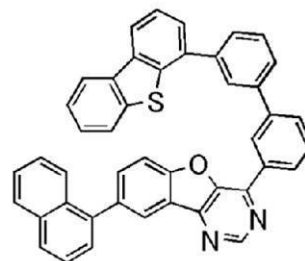
(114)



(115)



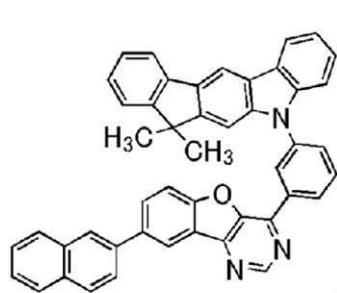
(116)



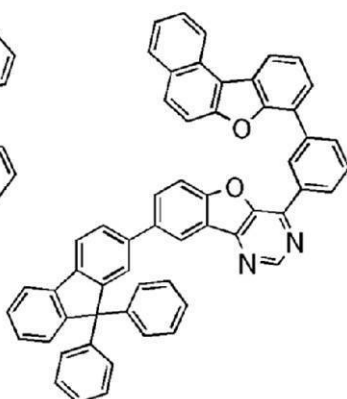
(117)

【 0 1 0 4】

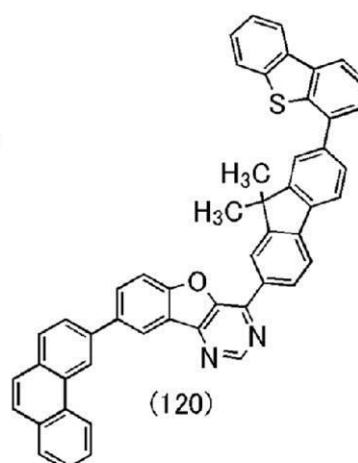
【化 20】



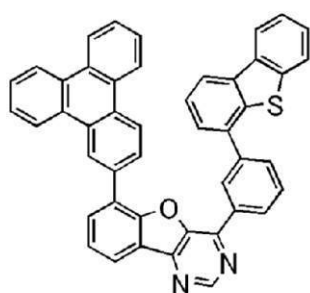
(118)



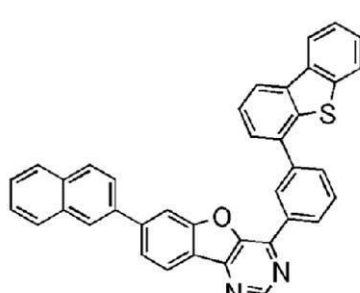
(119)



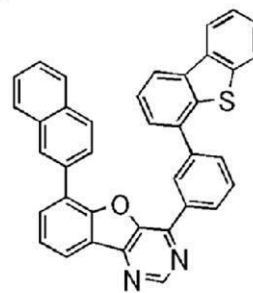
(120)



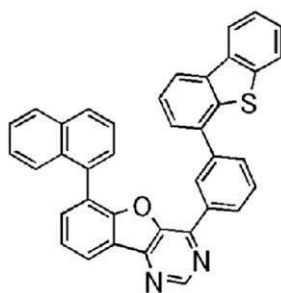
(121)



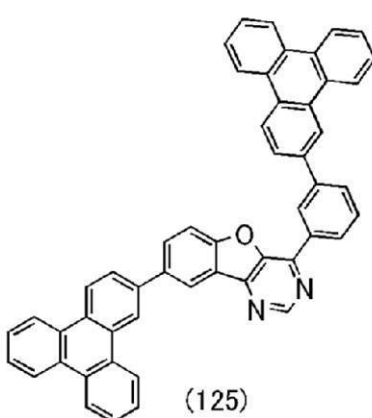
(122)



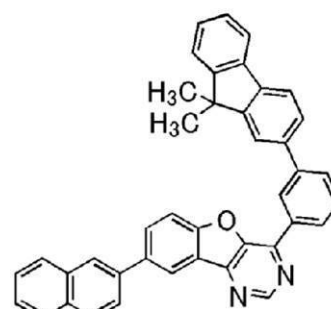
(123)



(124)



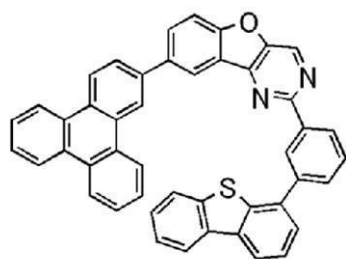
(125)



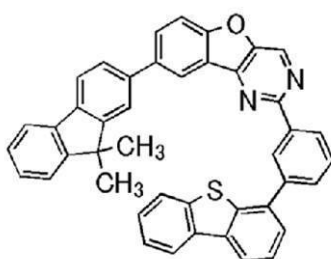
(126)

【 0 1 0 5 】

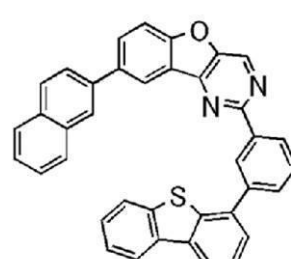
【化 2 1】



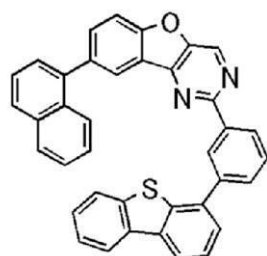
(127)



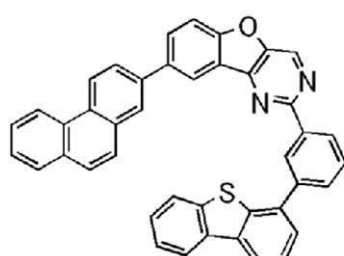
(128)



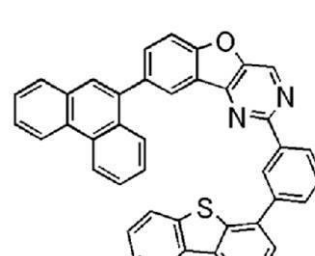
(129)



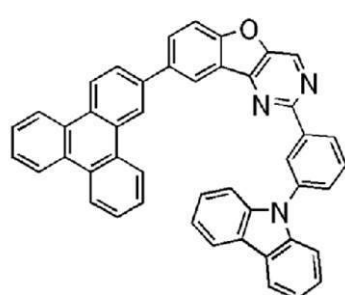
(130)



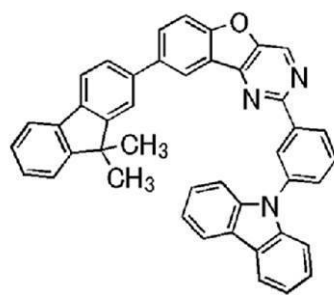
(131)



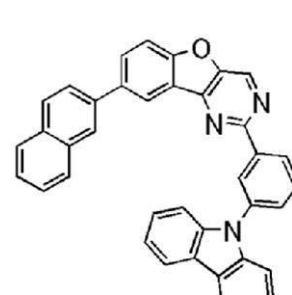
(132)



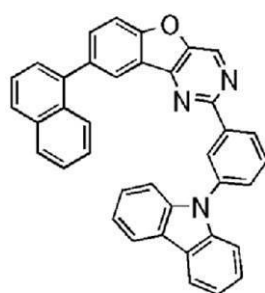
(133)



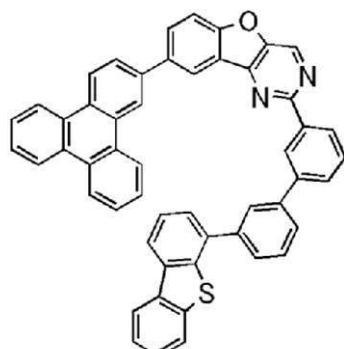
(134)



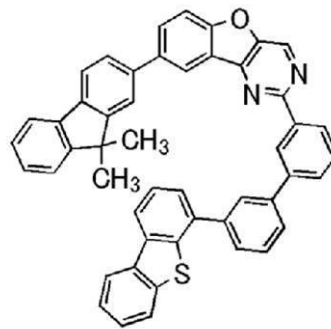
(135)



(136)



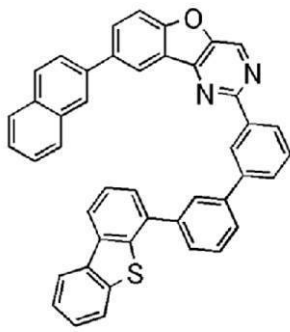
(137)



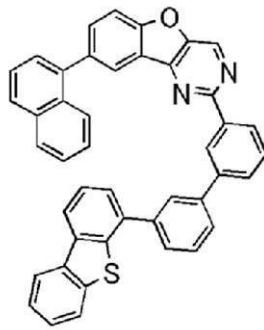
(138)

【 0 1 0 6 】

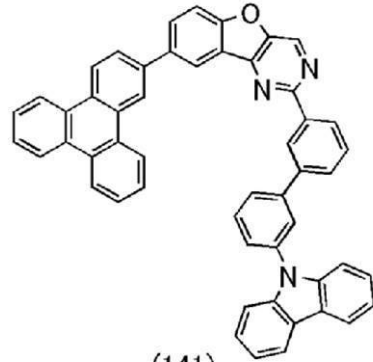
【化 2 2】



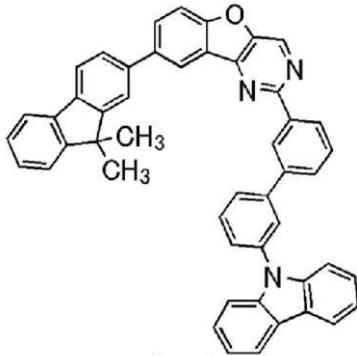
(139)



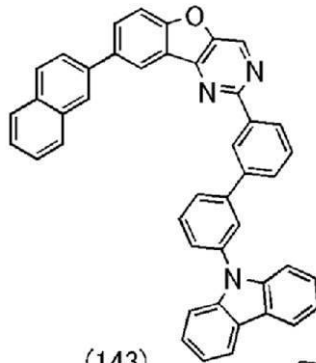
(140)



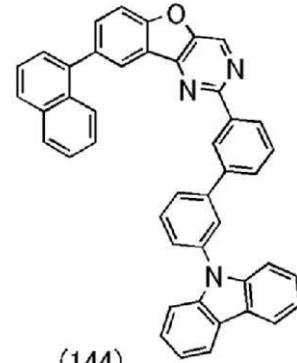
(141)



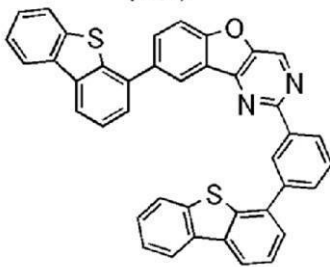
(142)



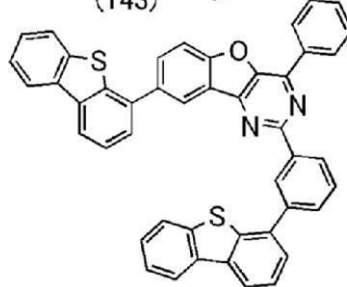
(143)



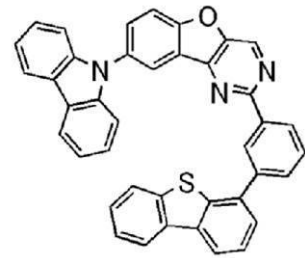
(144)



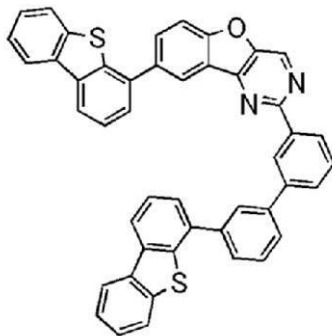
(145)



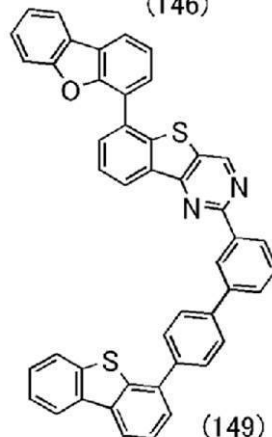
(146)



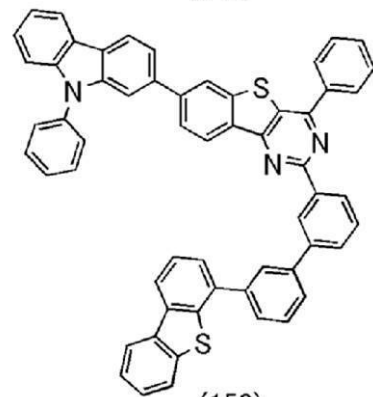
(147)



(148)



(149)



(150)

【 0 1 0 7 】

なお、上記構造式(100)～(150)で表される有機化合物は、上記一般式(G1)～(G6)で表される有機化合物に含まれる一例であり、本発明の一態様である有機化合物は、これに限られない。

【 0 1 0 8 】

次に、本発明の一態様であり、下記一般式(G1)で表される有機化合物の合成方法の一例について説明する。

【 0 1 0 9 】

10

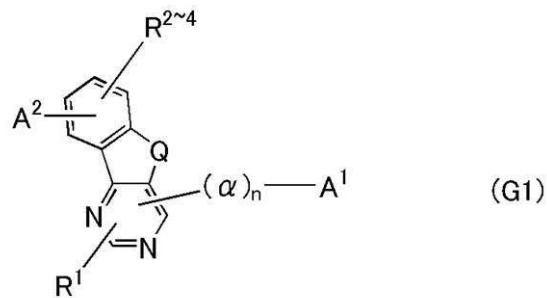
20

30

40

50

【化 2 3】



10

【0 1 1 0】

一般式 (G1) において、Q は酸素または硫黄を表す。また、 A^2 は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、 n は 0 乃至 4 の整数を表す。また、 A^1 はアリーールまたはヘテロアリーールを含む炭素数 6 乃至 100 の基を表す。また、 $\text{R}^1 \sim \text{R}^4$ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーール基、のいずれか一を表す。また、 A^2 は縮合環を表す。

20

【0 1 1 1】

一般式 (G1) で表される有機化合物の合成方法

上記一般式 (G1) で表される有機化合物は、ベンゾフロピリミジン誘導体、またはベンゾチエノピリミジン誘導体であり、その合成方法としては、種々の反応を適用することができる。例えば、以下のような簡便な合成スキームにより一般式 (G1) で表される有機化合物を合成することができる。

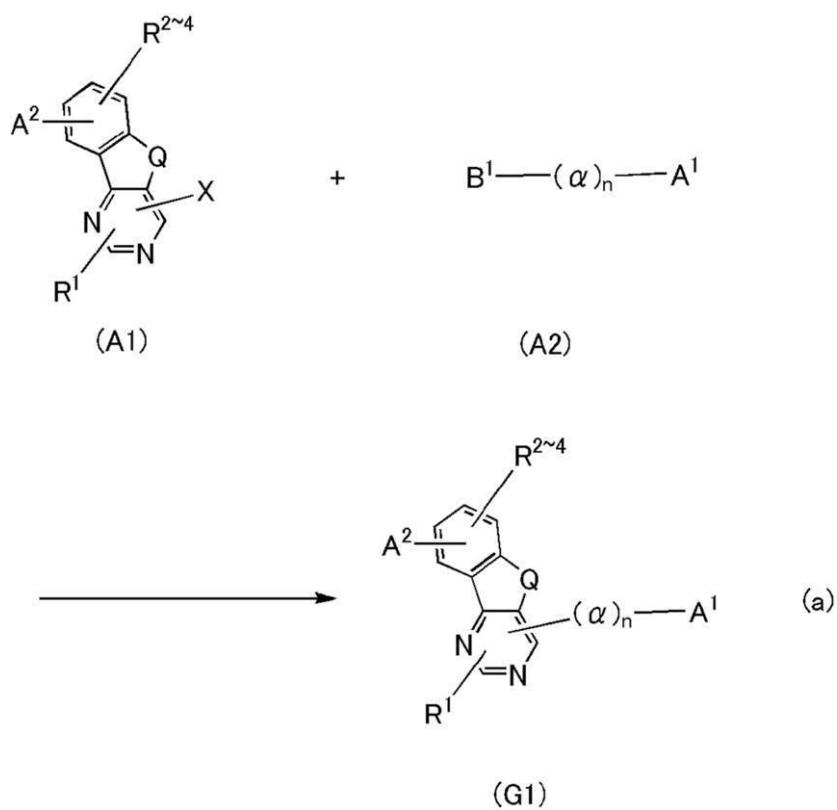
【0 1 1 2】

例えば、下記スキーム (a) に示すように、置換もしくは無置換のベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格を含むハロゲン化合物 (A^1) と、置換もしくは無置換のアリーール基を含む縮合環 (A^2) を反応させることにより得られる。

【0 1 1 3】

30

【化 2 4】



10

20

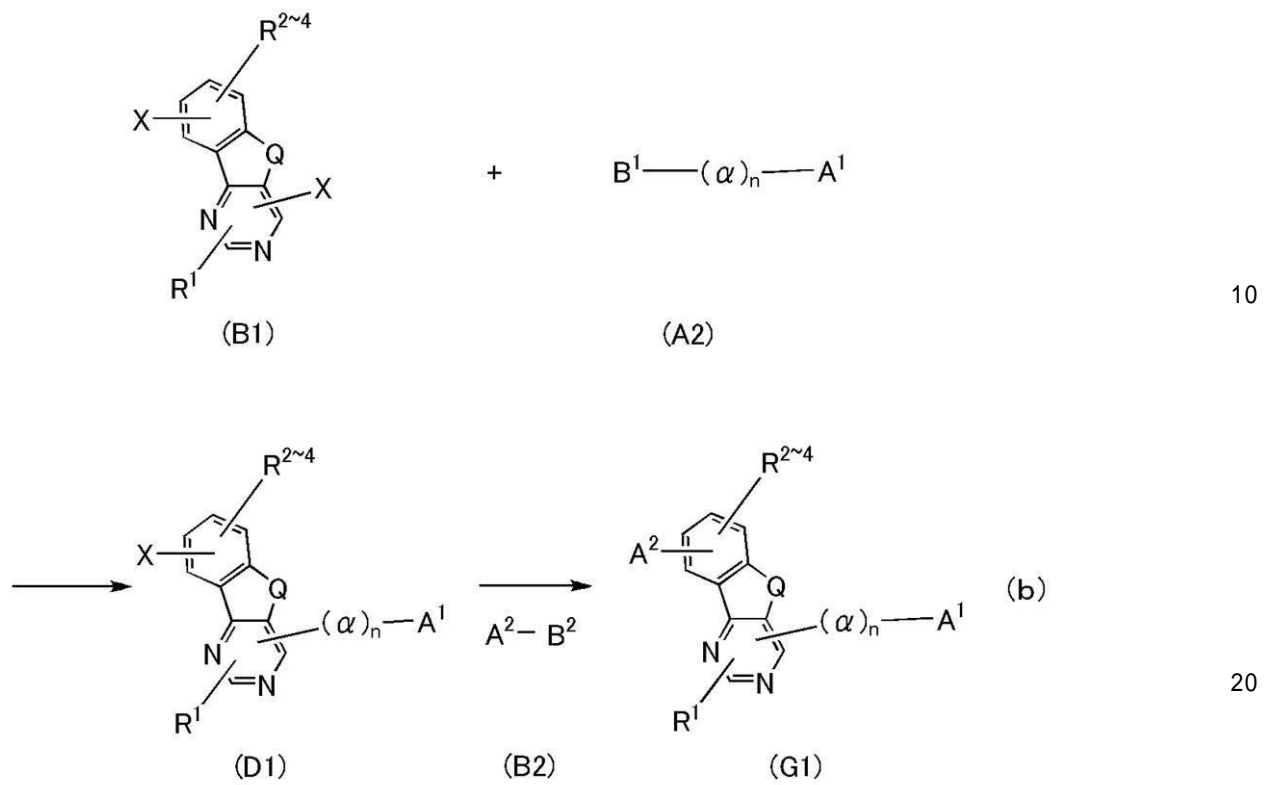
【0114】

このとき、下記スキーム (b) に示すように、置換もしくは無置換のベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格を含むジハロゲン化合物 (B1) と、置換もしくは無置換のアリール基を含む縮合環のボロン酸化合物 (A2) との反応を経由し、中間体 (D1) を得た後、置換もしくは無置換の縮合環のボロン酸化合物 (B2) を反応させても良い。

30

【0115】

【化 2 5】



【0116】

または、下記スキーム(c)に示すように、ハロゲンで置換されたアリールボロン酸化合物(C1)との合成反応を経由し、中間体(D2)を得た後、置換もしくは無置換の縮合環のボロン酸化合物(C2)との反応を経由し、中間体(D3)を得た後、置換もしくは無置換の縮合環のボロン酸化合物(B2)を反応させても良い。なお、 B^1 乃至 B^4 はボロン酸またはボロン酸エステルまたは環状トリオールボレート塩等を表す。また、環状トリオールボレート塩はリチウム塩の他に、カリウム塩、ナトリウム塩を用いても良い。

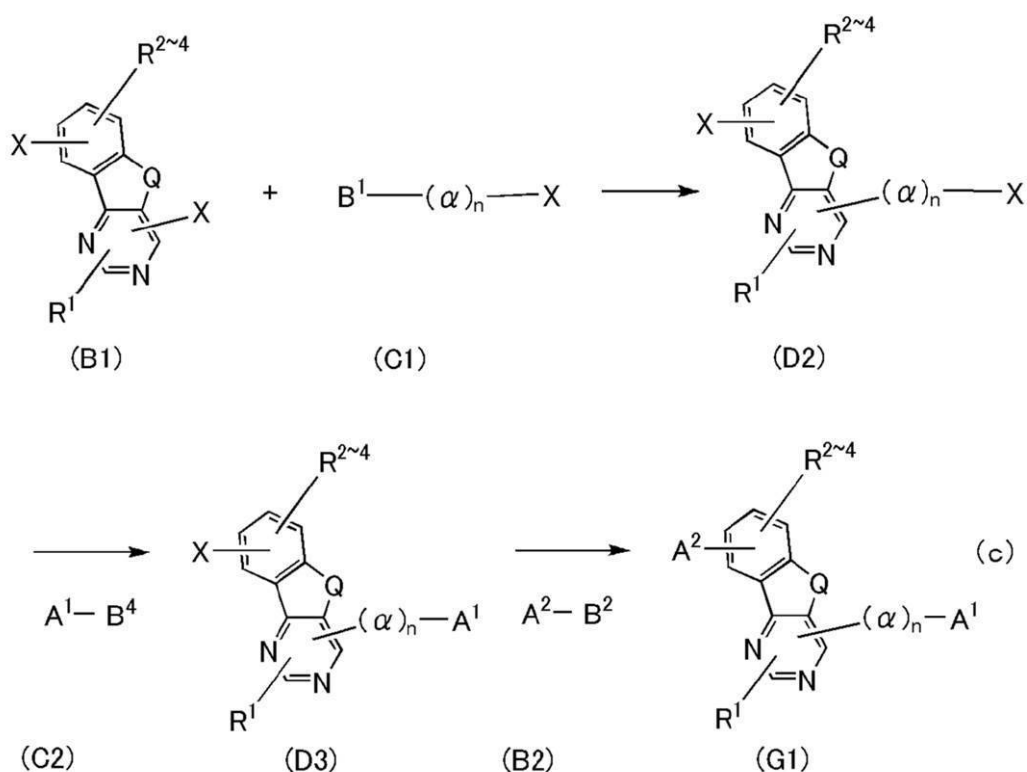
【0117】

10

20

30

【化 2 6】



10

20

【0118】

なお、合成スキーム (a)、(b)、及び (c) において、X はハロゲン基又はトリフレート基を表し、Q は、酸素または硫黄を表し、A¹ は総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のアリール基、または総炭素数が 6 乃至 100 の置換もしくは無置換のヘテロアリール基を表し、A² は縮合環を表し、R¹ ~ R⁴ は、それぞれ独立に、水素、置換もしくは無置換の炭素数 1 乃至 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 3 乃至 7 のシクロアルキル基、または置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリール基、のいずれか一を表し、 α は置換もしくは無置換の炭素数 6 乃至 13 のアリーレン基を表し、n は 0 乃至 4 の整数を表す。

30

【0119】

上述の化合物 (A1)、(A2)、(B1)、(B2)、(C1)、及び (C2) は、様々な種類が市販されているか、あるいは合成可能であるため、一般式 (G1) で表されるベンゾフロピリミジン誘導体、またはベンゾチエノピリミジン誘導体は数多くの種類を合成することができる。したがって、本発明の一態様の化合物は、バリエーションが豊富であるという特徴がある。

40

【0120】

なお、上記合成スキーム (a) 及び (b)、(c) において、パラジウム触媒を用いた鈴木-宮浦クロスカップリング反応を行う場合、X はハロゲン基又はトリフレート基を表し、ハロゲンとしては、ヨウ素又は臭素又は塩素が好ましい。当該反応では、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0)、酢酸パラジウム (II) 等のパラジウム化合物と、ジ (1-アダマンチル) - n - ブチルホスフィン、2' - (ジシクロヘキシルホスフィノ) アセトフェノンエチレンケタール等の配位子を用いることができる。また、ナトリウム tert - ブトキシド等の有機塩基や、フッ化セシウム、りん酸三カリウム、炭酸カリウム等の無機塩基等を用いることができる。また、溶媒として、トルエン、キシレン、ベンゼン、テトラヒドロフラン、メシチレン、diglyme 等を用いることができる。なお、当該反応で用いることができる試薬類は、これらの試薬類に限られるものでは

50

ない。

【0121】

以上、本発明の一態様の化合物であるベンゾフロピリミジン誘導体、またはベンゾチエノピリミジン誘導体の合成方法の一例について説明したが、本発明はこれに限定されることはなく、他のどのような合成方法によって合成されても良い。

【0122】

また、本発明の一態様である有機化合物を用いることで、発光効率の高い発光素子、発光装置、電子機器、または照明装置を実現することができる。また、消費電力が低い発光素子、発光装置、電子機器、または照明装置を実現することができる。

【0123】

なお、本実施の形態において、本発明の一態様について述べた。また、他の実施の形態において、本発明の一態様について述べる。ただし、本発明の一態様は、これらに限定されない。つまり、本実施の形態および他の実施の形態では、様々な発明の態様が記載されているため、本発明の一態様は、特定の態様に限定されない。

【0124】

本実施の形態に示す構成は、他の実施の形態に示した構成と適宜組み合わせる用いることができる。

【0125】

(実施の形態2)

本実施の形態では、実施の形態1で示した有機化合物を用いた発光素子について図1を用いて説明する。

【0126】

発光素子の基本的な構造

まず、発光素子の基本的な構造について説明する。図1(A)には、一对の電極間に発光層を含むEL層を有する発光素子を示す。具体的には、第1の電極101と第2の電極102との間にEL層103が挟まれた構造を有する。

【0127】

また、図1(B)には、一对の電極間に複数(図1(B)では、2層)のEL層(103a、103b)を有し、EL層の間に電荷発生層104を有する積層構造(タンデム構造)の発光素子を示す。タンデム構造の発光素子は、低電圧駆動が可能で消費電力が低い発光装置を実現することができる。

【0128】

電荷発生層104は、第1の電極101と第2の電極102に電圧を印加したときに、一方のEL層(103aまたは103b)に電子を注入し、他方のEL層(103bまたは103a)に正孔を注入する機能を有する。従って、図1(B)において、第1の電極101に第2の電極102よりも電位が高くなるように電圧を印加すると、電荷発生層104からEL層103aに電子が注入され、EL層103bに正孔が注入されることとなる。

【0129】

なお、電荷発生層104は、光の取り出し効率の点から、可視光に対して透光性を有する(具体的には、電荷発生層104に対する可視光の透過率が、40%以上)ことが好ましい。また、電荷発生層104は、第1の電極101や第2の電極102よりも低い導電率であっても機能する。

【0130】

また、図1(C)には、本発明の一態様である発光素子のEL層103の積層構造を示す。但し、この場合、第1の電極101は陽極として機能するものとする。EL層103は、第1の電極101上に、正孔(ホール)注入層111、正孔(ホール)輸送層112、発光層113、電子輸送層114、電子注入層115が順次積層された構造を有する。なお、図1(B)に示すタンデム構造のように複数のEL層を有する場合であっても、各EL層が、陽極側から上記のように順次積層される構造とする。また、第1の電極101が

10

20

30

40

50

陰極で、第 2 の電極 102 が陽極の場合は、積層順は逆になる。

【0131】

EL 層 (103、103a、103b) に含まれる発光層 113 は、それぞれ発光物質や複数の物質を適宜組み合わせることで有しており、所望の発光色を呈する蛍光発光や燐光発光が得られる構成とすることができる。また、発光層 113 を発光色の異なる積層構造としてもよい。なお、この場合、積層された各発光層に用いる発光物質やその他の物質は、それぞれ異なる材料を用いればよい。また、図 1 (B) に示す複数の EL 層 (103a、103b) から、それぞれ異なる発光色が得られる構成としても良い。この場合も各発光層に用いる発光物質やその他の物質を異なる材料とすればよい。

【0132】

また、本発明の一態様である発光素子において、例えば、図 1 (C) に示す第 1 の電極 101 を反射電極とし、第 2 の電極 102 を半透過・半反射電極とし、微小光共振器 (マイクロキャビティ) 構造とすることにより、EL 層 103 に含まれる発光層 113 から得られる発光を両電極間で共振させ、第 2 の電極 102 から得られる発光を強めることができる。

【0133】

なお、発光素子の第 1 の電極 101 が、反射性を有する導電性材料と透光性を有する導電性材料 (透明導電膜) との積層構造からなる反射電極である場合、透明導電膜の膜厚を制御することにより光学調整を行うことができる。具体的には、発光層 113 から得られる光の波長 λ に対して、第 1 の電極 101 と、第 2 の電極 102 との電極間距離が $m \cdot \lambda / 2$ (ただし、 m は自然数) 近傍となるように調整するのが好ましい。

【0134】

また、発光層 113 から得られる所望の光 (波長: λ) を増幅させるために、第 1 の電極 101 から発光層 113 の所望の光が得られる領域 (発光領域) までの光学距離と、第 2 の電極 102 から発光層 113 の所望の光が得られる領域 (発光領域) までの光学距離と、をそれぞれ $(2m' + 1) \cdot \lambda / 4$ (ただし、 m' は自然数) 近傍となるように調節するのが好ましい。なお、ここでいう発光領域とは、発光層 113 における正孔 (ホール) と電子との再結合領域を示す。

【0135】

このような光学調整を行うことにより、発光層 113 から得られる特定の単色光のスペクトルを狭線化させ、色純度の良い発光を得ることができる。

【0136】

但し、上記の場合、第 1 の電極 101 と第 2 の電極 102 との光学距離は、厳密には第 1 の電極 101 における反射領域から第 2 の電極 102 における反射領域までの総厚とすることができる。しかし、第 1 の電極 101 や第 2 の電極 102 における反射領域を厳密に決定することは困難であるため、第 1 の電極 101 と第 2 の電極 102 の任意の位置を反射領域と仮定することで十分に上述の効果をj得ることができるものとする。また、第 1 の電極 101 と、所望の光が得られる発光層との光学距離は、厳密には第 1 の電極 101 における反射領域と、所望の光が得られる発光層における発光領域との光学距離であるといことができる。しかし、第 1 の電極 101 における反射領域や、所望の光が得られる発光層における発光領域を厳密に決定することは困難であるため、第 1 の電極 101 の任意の位置を反射領域、所望の光が得られる発光層の任意の位置を発光領域と仮定することで十分に上述の効果をj得ることができるものとする。

【0137】

図 1 (C) に示す発光素子は、マイクロキャビティ構造を有するため、同じ EL 層を有していても異なる波長の光 (単色光) を取り出すことができる。従って、異なる発光色を得るための塗り分け (例えば、RGB) が不要となる。従って、高精細化を実現することが容易である。また、着色層 (カラーフィルタ) との組み合わせも可能である。さらに、特定波長の正面方向の発光強度を強めることが可能となるため、低消費電力化を図ることができる。

10

20

30

40

50

【0138】

図1(E)に示す発光素子は、図1(B)に示したタンデム構造の発光素子の一例であり、図に示すように、3つのEL層(103a、103b、103c)が電荷発生層(104a、104b)を挟んで積層される構造を有する。なお、3つのEL層(103a、103b、103c)は、それぞれに発光層(113a、113b、113c)を有しており、各発光層の発光色は、自由に組み合わせることができる。例えば、発光層113aを青色、発光層113bを赤色、緑色、または黄色のいずれか、発光層113cを青色とすることができるが、発光層113aを赤色、発光層113bを青色、緑色、または黄色のいずれか、発光層113cを赤色とすることもできる。

【0139】

なお、上述した本発明の一態様である発光素子において、第1の電極101と第2の電極102の少なくとも一方は、透光性を有する電極(透明電極、半透過・半反射電極など)とする。透光性を有する電極が透明電極の場合、透明電極の可視光の透過率は、40%以上とする。また、半透過・半反射電極の場合、半透過・半反射電極の可視光の反射率は、20%以上80%以下、好ましくは40%以上70%以下とする。また、これらの電極は、抵抗率が 1×10^{-2} cm以下とするのが好ましい。

【0140】

また、上述した本発明の一態様である発光素子において、第1の電極101と第2の電極102の一方が、反射性を有する電極(反射電極)である場合、反射性を有する電極の可視光の反射率は、40%以上100%以下、好ましくは70%以上100%以下とする。また、この電極は、抵抗率が 1×10^{-2} cm以下とするのが好ましい。

【0141】

発光素子の具体的な構造および作製方法

次に、本発明の一態様である発光素子の具体的な構造および作製方法について、図1を用いて説明する。また、ここでは、図1(B)に示すタンデム構造を有し、マイクロキャビティ構造を備えた発光素子についても図1(D)を用いて説明する。図1(D)に示す発光素子がマイクロキャビティ構造を有する場合は、第1の電極101を反射電極として形成し、第2の電極102を半透過・半反射電極として形成する。従って、所望の電極材料を単数または複数用い、単層または積層して形成することができる。なお、第2の電極102は、EL層103bを形成した後、上記と同様に材料を選択して形成する。また、これらの電極の作製には、スパッタ法や真空蒸着法を用いることができる。

【0142】

<第1の電極および第2の電極>

第1の電極101および第2の電極102を形成する材料としては、上述した両電極の機能が満たせるのであれば、以下に示す材料を適宜組み合わせて用いることができる。例えば、金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを適宜用いることができる。具体的には、In-Sn酸化物(ITOともいう)、In-Si-Sn酸化物(ITSOともいう)、In-Zn酸化物、In-W-Zn酸化物が挙げられる。その他、アルミニウム(Al)、チタン(Ti)、クロム(Cr)、マンガン(Mn)、鉄(Fe)、コバルト(Co)、ニッケル(Ni)、銅(Cu)、ガリウム(Ga)、亜鉛(Zn)、インジウム(In)、スズ(Sn)、モリブデン(Mo)、タンタル(Ta)、タングステン(W)、パラジウム(Pd)、金(Au)、白金(Pt)、銀(Ag)、イットリウム(Y)、ネオジム(Nd)などの金属、およびこれらを適宜組み合わせて含む合金を用いることもできる。その他、上記例示のない元素周期表の第1族または第2族に属する元素(例えば、リチウム(Li)、セシウム(Cs)、カルシウム(Ca)、ストロンチウム(Sr)、ユウロピウム(Eu)、イッテルビウム(Yb)などの希土類金属およびこれらを適宜組み合わせて含む合金、その他グラフェン等)を用いることができる。

【0143】

図1(D)に示す発光素子において、第1の電極101が陽極である場合、第1の電極101上にEL層103aの正孔注入層111aおよび正孔輸送層112aが真空蒸着法に

10

20

30

40

50

より順次積層形成される。E L 層 1 0 3 a および電荷発生層 1 0 4 が形成された後、電荷発生層 1 0 4 上に E L 層 1 0 3 b の正孔注入層 1 1 1 b および正孔輸送層 1 1 2 b が同様に順次積層形成される。

【0144】

< 正孔注入層および正孔輸送層 >

正孔注入層 (1 1 1、1 1 1 a、1 1 1 b) は、陽極である第 1 の電極 1 0 1 や電荷発生層 (1 0 4) から E L 層 (1 0 3、1 0 3 a、1 0 3 b) に正孔 (ホール) を注入する層であり、正孔注入性の高い材料を含む層である。

【0145】

正孔注入性の高い材料としては、モリブデン酸化物やバナジウム酸化物、ルテニウム酸化物、タングステン酸化物、マンガン酸化物等の遷移金属酸化物が挙げられる。その他、フタロシアニン (略称 : H_2Pc) や銅フタロシアニン (略称 : $CuPC$) 等のフタロシアニン系の化合物、4, 4' - ビス [N - (4 - ジフェニルアミノフェニル) - N - フェニルアミノ] ビフェニル (略称 : DPAB)、N, N' - ビス { 4 - [ビス (3 - メチルフェニル) アミノ] フェニル } - N, N' - ジフェニル - (1, 1' - ビフェニル) - 4, 4' - ジアミン (略称 : DNTPD) 等の芳香族アミン化合物、またはポリ (3, 4 - エチレンジオキシチオフェン) / ポリ (スチレンスルホン酸) (略称 : PEDOT / PSS) 等の高分子等を用いることができる。

【0146】

また、正孔注入性の高い材料としては、正孔輸送性材料とアクセプター性材料 (電子受容性材料) を含む複合材料を用いることもできる。この場合、アクセプター性材料により正孔輸送性材料から電子が引き抜かれて正孔注入層 (1 1 1、1 1 1 a、1 1 1 b) で正孔が発生し、正孔輸送層 (1 1 2、1 1 2 a、1 1 2 b) を介して発光層 (1 1 3、1 1 3 a、1 1 3 b) に正孔が注入される。なお、正孔注入層 (1 1 1、1 1 1 a、1 1 1 b) は、正孔輸送性材料とアクセプター性材料 (電子受容性材料) を含む複合材料からなる単層で形成しても良いが、正孔輸送性材料とアクセプター性材料 (電子受容性材料) とをそれぞれ別の層で積層して形成しても良い。

【0147】

正孔輸送層 (1 1 2、1 1 2 a、1 1 2 b) は、正孔注入層 (1 1 1、1 1 1 a、1 1 1 b) によって、第 1 の電極 1 0 1 や電荷発生層 (1 0 4) から注入された正孔を発光層 (1 1 3、1 1 3 a、1 1 3 b) に輸送する層である。なお、正孔輸送層 (1 1 2、1 1 2 a、1 1 2 b) は、正孔輸送性材料を含む層である。正孔輸送層 (1 1 2、1 1 2 a、1 1 2 b) に用いる正孔輸送性材料は、特に正孔注入層 (1 1 1、1 1 1 a、1 1 1 b) の HOMO 準位と同じ、あるいは近い HOMO 準位を有するものを用いることが好ましい。

【0148】

正孔注入層 (1 1 1、1 1 1 a、1 1 1 b) に用いるアクセプター性材料としては、元素周期表における第 4 族乃至第 8 族に属する金属の酸化物を用いることができる。具体的には、酸化モリブデン、酸化バナジウム、酸化ニオブ、酸化タンタル、酸化クロム、酸化タングステン、酸化マンガン、酸化ルテニウムが挙げられる。中でも特に、酸化モリブデンは大気中でも安定であり、吸湿性が低く、扱いやすいため好ましい。その他、キノジメタン誘導体やクロラニル誘導体、ヘキサザトリフェニレン誘導体などの有機アクセプターを用いることができる。具体的には、7, 7, 8, 8 - テトラシアノ - 2, 3, 5, 6 - テトラフルオロキノジメタン (略称 : $F_4 - TCNQ$)、クロラニル、2, 3, 6, 7, 10, 11 - ヘキサシアノ - 1, 4, 5, 8, 9, 12 - ヘキサザトリフェニレン (略称 : $HAT-CN$) 等を用いることができる。特に、 $HAT-CN$ のように複素原子を複数有する縮合芳香環に電子吸引基が結合している化合物が、熱的に安定であり好ましい。また、電子吸引基 (特にフルオロ基のようなハロゲン基やシアノ基) を有する [3] ラジアレン誘導体は、電子受容性が非常に高いため好ましく、具体的には、, , ' ' - 1, 2, 3 - シクロプロパントリイリデントリス [4 - シアノ - 2, 3, 5, 6 - テトラフルオロベンゼンアセトニトリル]、, , ' ' - 1, 2, 3 - シクロプロパントリ

10

20

30

40

50

【 0 1 4 9 】

【 0 1 5 0 】

N - (4 - ビフェニル) - N - (9 , 9 - ジメチル - 9 H - フルオレン - 2 - イル) - 9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - アミン (略称 : P C B i F) 、 N - (1 , 1 ' - ビフェニル - 4 - イル) - N - [4 - (9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) フェニル] - 9 , 9 - ジメチル - 9 H - フルオレン - 2 - アミン (略称 : P C B B i F) 、 4 , 4 ' - ジフェニル - 4 ' ' - (9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) トリフェニルアミン (略称 : P C B B i 1 B P) 、 4 - (1 - ナフチル) - 4 ' - (9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) トリフェニルアミン (略称 : P C B A N B) 、 4 , 4 ' - ジ (1 - ナフチル) - 4 ' ' - (9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) トリフェニルアミン (略称 : P C B N B B) 、 9 , 9 - ジメチル - N - フェニル - N - [4 - (9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) フェニル] フルオレン - 2 - アミン (略称 : P C B A F) 、 N - フェニル - N - [4 - (9 - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) フェニル] スピロ - 9 , 9 ' - ビフルオレン - 2 - アミン (略称 : P C B A S F) 、 4 , 4 ' , 4 ' ' - トリス (カルバゾール - 9 - イル) トリフェニルアミン (略称 : T C T A) 、 4 , 4 ' , 4 ' ' - トリス (N , N - ジフェニルアミノ) トリフェニルアミン (略称 : T D A T A) 、 4 , 4 ' , 4 ' ' - トリス [N - (3 - メチルフェニル) - N - フェニルアミノ] トリフェニルアミン (略称 : M T D A T A) などの芳香族アミン骨格を有する化合物、 1 , 3 - ビス (N - カルバゾリル) ベンゼン (略称 : m C P) 、 4 , 4 ' - ジ (N - カルバゾリル) ビフェニル (略称 : C B P) 、 3 , 6 - ビス (3 , 5 - ジフェニルフェニル) - 9 - フェニルカルバゾール (略称 : C z T P) 、 3 , 3 ' - ビス (9 - フェニル - 9 H - カルバゾール) (略称 : P C C P) 、 3 - [N - (9 - フェニルカルバゾール - 3 - イル) - N - フェニルアミノ] - 9 - フェニルカルバゾール (略称 : P C z P C A 1) 、 3 , 6 - ビス [N - (9 - フェニルカルバゾール - 3 - イル) - N - フェニルアミノ] - 9 - フェニルカルバゾール (略称 : P C z P C A 2) 、 3 - [N - (1 - ナフチル) - N - (9 - フェニルカルバゾール - 3 - イル) アミノ] - 9 - フェニルカルバゾール (略称 : P C z P C N 1) 、 1 , 3 , 5 - トリス [4 - (N - カルバゾリル) フェニル] ベンゼン (略称 : T C P B) 、 9 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントラセニル) フェニル] - 9 H - カルバゾール (略称 : C z P A) などのカルバゾール骨格を有する化合物、 4 , 4 ' , 4 ' ' - (ベンゼン - 1 , 3 , 5 - トリイル) トリ (ジ

骨格を有する化合物、4, 4', 4'' - (ベンゼン - 1, 3, 5 - トリイル)トリ(ジ

ベンゾチオフェン) (略称: DBT3P-III)、2, 8-ジフェニル-4-[4-(9-フェニル-9H-フルオレン-9-イル)フェニル]ジベンゾチオフェン(略称: DBTFLP-III)、4-[4-(9-フェニル-9H-フルオレン-9-イル)フェニル]-6-フェニルジベンゾチオフェン(略称: DBTFLP-IV)などのチオフェン骨格を有する化合物、4, 4', 4''-(ベンゼン-1, 3, 5-トリイル)トリ(ジベンゾフラン)(略称: DBF3P-III)、4-{3-[3-(9-フェニル-9H-フルオレン-9-イル)フェニル]フェニル}ジベンゾフラン(略称: mmDBFFLBi-III)などのフラン骨格を有する化合物が挙げられる。

【0151】

さらに、ポリ(N-ビニルカルバゾール)(略称: PVK)、ポリ(4-ビニルトリフェニルアミン)(略称: PVTPA)、ポリ[N-(4-{N'-[4-(4-ジフェニルアミノ)フェニル]フェニル-N'-フェニルアミノ}フェニル)メタクリルアミド](略称: PTPDMA)、ポリ[N, N'-ビス(4-ブチルフェニル)-N, N'-ビス(フェニル)ベンジジン](略称: Poly-TPD)などの高分子化合物を用いることもできる。

10

【0152】

但し、正孔輸送性材料は、上記に限られることなく公知の様々な材料を1種または複数種組み合わせる正孔輸送性材料として正孔注入層(111、111a、111b)および正孔輸送層(112、112a、112b)に用いることができる。なお、正孔輸送層(112、112a、112b)は、各々複数の層から形成されていても良い。すなわち、例えば第1の正孔輸送層と第2の正孔輸送層とが積層されていても良い。

20

【0153】

図1(D)に示す発光素子においては、EL層103aの正孔輸送層112a上に発光層113aが真空蒸着法により形成される。また、EL層103aおよび電荷発生層104が形成された後、EL層103bの正孔輸送層112b上に発光層113bが真空蒸着法により形成される。

【0154】

<発光層>

発光層(113、113a、113b、113c)は、発光物質を含む層である。なお、発光物質としては、青色、紫色、青紫色、緑色、黄緑色、黄色、橙色、赤色などの発光色を呈する物質を適宜用いる。また、複数の発光層(113a、113b、113c)に異なる発光物質を用いることにより異なる発光色を呈する構成(例えば、補色の関係にある発光色を組み合わせる得られる白色発光)とすることができる。さらに、一つの発光層が異なる発光物質を有する積層構造であっても良い。

30

【0155】

また、発光層(113、113a、113b、113c)は、発光物質(ゲスト材料)に加えて、1種または複数種の有機化合物(ホスト材料、アシスト材料)を有していても良い。また、1種または複数種の有機化合物としては、本実施の形態で説明する正孔輸送性材料や電子輸送性材料の一方または両方を用いることができる。

【0156】

発光層(113、113a、113b、113c)に用いることができる発光物質としては、一重項励起エネルギーを可視光領域の発光に変える発光物質、または三重項励起エネルギーを可視光領域の発光に変える発光物質を用いることができる。

40

【0157】

なお、他の発光物質としては、例えば、以下のようなものが挙げられる。

【0158】

一重項励起エネルギーを発光に変える発光物質としては、蛍光を発する物質(蛍光材料)が挙げられ、例えば、ピレン誘導体、アントラセン誘導体、トリフェニレン誘導体、フルオレン誘導体、カルバゾール誘導体、ジベンゾチオフェン誘導体、ジベンゾフラン誘導体、ジベンゾキノキサリン誘導体、キノキサリン誘導体、ピリジン誘導体、ピリミジン誘導

50

体、フェナントレン誘導体、ナフタレン誘導体などが挙げられる。特にピレン誘導体は発光量子収率が高いので好ましい。ピレン誘導体の具体例としては、N, N' - ビス(3 - メチルフェニル) - N, N' - ビス[3 - (9 - フェニル - 9H - フルオレン - 9 - イル)フェニル]ピレン - 1, 6 - ジアミン(略称: 1, 6 m M e m F L P A P r n)、N, N' - ジフェニル - N, N' - ビス[4 - (9 - フェニル - 9H - フルオレン - 9 - イル)フェニル]ピレン - 1, 6 - ジアミン(略称: 1, 6 F L P A P r n)、N, N' - ビス(ジベンゾフラン - 2 - イル) - N, N' - ジフェニルピレン - 1, 6 - ジアミン(略称: 1, 6 F r A P r n)、N, N' - ビス(ジベンゾチオフェン - 2 - イル) - N, N' - ジフェニルピレン - 1, 6 - ジアミン(略称: 1, 6 T h A P r n)、N, N' - (ピレン - 1, 6 - ジイル)ビス[(N - フェニルベンゾ[b]ナフト[1, 2 - d]フラン) - 6 - アミン](略称: 1, 6 B n f A P r n)、N, N' - (ピレン - 1, 6 - ジイル)ビス[(N - フェニルベンゾ[b]ナフト[1, 2 - d]フラン) - 8 - アミン](略称: 1, 6 B n f A P r n - 02)、N, N' - (ピレン - 1, 6 - ジイル)ビス[(6, N - ジフェニルベンゾ[b]ナフト[1, 2 - d]フラン) - 8 - アミン](略称: 1, 6 B n f A P r n - 03)などが挙げられる。

10

20

30

40

50

【0159】

その他にも、5, 6 - ビス[4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル)フェニル] - 2, 2' - ビピリジン(略称: P A P 2 B P y)、5, 6 - ビス[4' - (10 - フェニル - 9 - アントリル)ピフェニル - 4 - イル] - 2, 2' - ビピリジン(略称: P A P P 2 B P y)、N, N' - ビス[4 - (9H - カルバゾール - 9 - イル)フェニル] - N, N' - ジフェニルスチルベン - 4, 4' - ジアミン(略称: Y G A 2 S)、4 - (9H - カルバゾール - 9 - イル) - 4' - (10 - フェニル - 9 - アントリル)トリフェニルアミン(略称: Y G A P A)、4 - (9H - カルバゾール - 9 - イル) - 4' - (9, 10 - ジフェニル - 2 - アントリル)トリフェニルアミン(略称: 2 Y G A P P A)、N, 9 - ジフェニル - N - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル)フェニル] - 9H - カルバゾール - 3 - アミン(略称: P C A P A)、4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) - 4' - (9 - フェニル - 9H - カルバゾール - 3 - イル)トリフェニルアミン(略称: P C B A P A)、4 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル)フェニル] - 4' - (9 - フェニル - 9H - カルバゾール - 3 - イル)トリフェニルアミン(略称: P C B A P B A)、ペリレン、2, 5, 8, 11 - テトラ(tert - ブチル)ペリレン(略称: T B P)、N, N' - (2 - tert - ブチルアントラセン - 9, 10 - ジイルジ - 4, 1 - フェニレン)ビス[N, N', N' - トリフェニル - 1, 4 - フェニレンジアミン](略称: D P A B P A)、N, 9 - ジフェニル - N - [4 - (9, 10 - ジフェニル - 2 - アントリル)フェニル] - 9H - カルバゾール - 3 - アミン(略称: 2 P C A P P A)、N - [4 - (9, 10 - ジフェニル - 2 - アントリル)フェニル] - N, N', N' - トリフェニル - 1, 4 - フェニレンジアミン(略称: 2 D P A P P A)等を用いることができる。

【0160】

また、三重項励起エネルギーを発光に変える発光物質としては、例えば、燐光を発する物質(燐光材料)や熱活性化遅延蛍光を示す熱活性化遅延蛍光(Thermally activated delayed fluorescence: TADF)材料が挙げられる。

【0161】

燐光材料としては、有機金属錯体、金属錯体(白金錯体)、希土類金属錯体等が挙げられる。これらは、物質ごとに異なる発光色(発光ピーク)を示すため、必要に応じて適宜選択して用いる。

【0162】

青色または緑色を呈し、発光スペクトルのピーク波長が450nm以上570nm以下である燐光材料としては、以下のような物質が挙げられる。

【0163】

例えば、トリス〔 2 - [5 - (2 - メチルフェニル) - 4 - (2 , 6 - ジメチルフェニル) - 4 H - 1 , 2 , 4 - トリアゾール - 3 - イル - N 2] フェニル - C 〕イリジウム (I I I) (略称 : [I r (m p p t z - d m p) ₃])、トリス (5 - メチル - 3 , 4 - ジフェニル - 4 H - 1 , 2 , 4 - トリアゾラト) イリジウム (I I I) (略称 : [I r (M p t z) ₃])、トリス [4 - (3 - ビフェニル) - 5 - イソプロピル - 3 - フェニル - 4 H - 1 , 2 , 4 - トリアゾラト] イリジウム (I I I) (略称 : [I r (i P r p t z - 3 b) ₃]) トリス [3 - (5 - ビフェニル) - 5 - イソプロピル - 4 - フェニル - 4 H - 1 , 2 , 4 - トリアゾラト] イリジウム (I I I) (略称 : I r (i P r 5 b t z) ₃])、のような 4 H - トリアゾール骨格を有する有機金属錯体、トリス [3 - メチル - 1 - (2 - メチルフェニル) - 5 - フェニル - 1 H - 1 , 2 , 4 - トリアゾラト] イリジウム (I I I) (略称 : [I r (M p t z 1 - m p) ₃])、トリス (1 - メチル - 5 - フェニル - 3 - プロピル - 1 H - 1 , 2 , 4 - トリアゾラト) イリジウム (I I I) (略称 : [I r (P r p t z 1 - M e) ₃]) のような 1 H - トリアゾール骨格を有する有機金属錯体、f a c - トリス [1 - (2 , 6 - ジイソプロピルフェニル) - 2 - フェニル - 1 H - イミダゾール] イリジウム (I I I) (略称 : [I r (i P r p m i) ₃])、トリス [3 - (2 , 6 - ジメチルフェニル) - 7 - メチルイミダゾ [1 , 2 - f] フェナントリジナト] イリジウム (I I I) (略称 : [I r (d m p i m p t - M e) ₃]) のようなイミダゾール骨格を有する有機金属錯体、ビス [2 - (4 ' , 6 ' - ジフルオロフェニル) ピリジナト - N , C ² '] イリジウム (I I I) テトラキス (1 - ピラゾリル) ボラート (略称 : F I r 6)、ビス [2 - (4 ' , 6 ' - ジフルオロフェニル) ピリジナト - N , C ² '] イリジウム (I I I) ピコリナート (略称 : F I r p i c)、ビス { 2 - [3 ' , 5 ' - ビス (トリフルオロメチル) フェニル] ピリジナト - N , C ² ' } イリジウム (I I I) ピコリナート (略称 : [I r (C F ₃ p p y) ₂ (p i c)])、ビス [2 - (4 ' , 6 ' - ジフルオロフェニル) ピリジナト - N , C ² '] イリジウム (I I I) アセチルアセトナート (略称 : F I r (a c a c)) のように電子吸引基を有するフェニルピリジン誘導体を配位子とする有機金属錯体等が挙げられる。

10

20

【 0 1 6 4 】

緑色または黄色を呈し、発光スペクトルのピーク波長が 4 9 5 n m 以上 5 9 0 n m 以下である燐光材料としては、以下のような物質が挙げられる。

【 0 1 6 5 】

例えば、トリス (4 - メチル - 6 - フェニルピリミジナト) イリジウム (I I I) (略称 : [I r (m p p m) ₃])、トリス (4 - t - ブチル - 6 - フェニルピリミジナト) イリジウム (I I I) (略称 : [I r (t B u p p m) ₃])、(アセチルアセトナト) ビス (6 - メチル - 4 - フェニルピリミジナト) イリジウム (I I I) (略称 : [I r (m p p m) ₂ (a c a c)])、(アセチルアセトナト) ビス (6 - t e r t - ブチル - 4 - フェニルピリミジナト) イリジウム (I I I) (略称 : [I r (t B u p p m) ₂ (a c a c)])、(アセチルアセトナト) ビス [6 - (2 - ノルボルニル) - 4 - フェニルピリミジナト] イリジウム (I I I) (略称 : [I r (n b p p m) ₂ (a c a c)])、(アセチルアセトナト) ビス [5 - メチル - 6 - (2 - メチルフェニル) - 4 - フェニルピリミジナト] イリジウム (I I I) (略称 : [I r (m p m p p m) ₂ (a c a c)])、(アセチルアセトナト) ビス { 4 , 6 - ジメチル - 2 - [6 - (2 , 6 - ジメチルフェニル) - 4 - ピリミジニル - N 3] フェニル - C } イリジウム (I I I) (略称 : [I r (d m p p m - d m p) ₂ (a c a c)])、(アセチルアセトナト) ビス (4 , 6 - ジフェニルピリミジナト) イリジウム (I I I) (略称 : [I r (d p p m) ₂ (a c a c)]) のようなピリミジン骨格を有する有機金属イリジウム錯体、(アセチルアセトナト) ビス (3 , 5 - ジメチル - 2 - フェニルピラジナト) イリジウム (I I I) (略称 : [I r (m p p r - M e) ₂ (a c a c)])、(アセチルアセトナト) ビス (5 - イソプロピル - 3 - メチル - 2 - フェニルピラジナト) イリジウム (I I I) (略称 : [I r (m p p r - i P r) ₂ (a c a c)]) のようなピラジン骨格を有する有機金属イリジウム錯体、トリス (2 - フェニルピリジナト - N , C ² ') イリジウム (I I I)

30

40

50

(略称: $[\text{Ir}(\text{ppy})_3]$)、ビス(2-フェニルピリジナト-N, $\text{C}^{2'}$)イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称: $[\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{acac})]$)、ビス(ベンゾ[h]キノリナト)イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称: $[\text{Ir}(\text{bzq})_2(\text{acac})]$)、トリス(ベンゾ[h]キノリナト)イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(\text{bzq})_3]$)、トリス(2-フェニルキノリナト-N, $\text{C}^{2'}$)イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(\text{pq})_3]$)、ビス(2-フェニルキノリナト-N, $\text{C}^{2'}$)イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称: $[\text{Ir}(\text{pq})_2(\text{acac})]$)、[2-(4-フェニル-2-ピリジニル-N)フェニル-C]ビス[2-(2-ピリジニル-N)フェニル-C]イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(\text{ppy})_2(4\text{dppy})]$)、ビス[2-(2-ピリジニル-N)フェニル-C][2-(4-メチル-5-フェニル-2-ピリジニル-N)フェニル-C]のようなピリジン骨格を有する有機金属イリジウム錯体、ビス(2,4-ジフェニル-1,3-オキサゾラト-N, $\text{C}^{2'}$)イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称: $[\text{Ir}(\text{dpo})_2(\text{acac})]$)、ビス{2-[4'-(パーフルオロフェニル)フェニル]ピリジナト-N, $\text{C}^{2'}$ }イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称: $[\text{Ir}(\text{p-PF-ph})_2(\text{acac})]$)、ビス(2-フェニルベンゾチアゾラト-N, $\text{C}^{2'}$)イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称: $[\text{Ir}(\text{bt})_2(\text{acac})]$)などの有機金属錯体の他、トリス(アセチルアセトナト)(モノフェナントロリン)テルビウム(III)(略称: $[\text{Tb}(\text{acac})_3(\text{Phen})]$)のような希土類金属錯体が挙げられる。

10

20

【0166】

黄色または赤色を呈し、発光スペクトルのピーク波長が570nm以上750nm以下である燐光材料としては、以下のような物質が挙げられる。

【0167】

例えば、(ジイソブチリルメタナト)ビス[4,6-ビス(3-メチルフェニル)ピリミジナト]イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(5\text{mdppm})_2(\text{dibm})]$)、ビス[4,6-ビス(3-メチルフェニル)ピリミジナト](ジピバロイルメタナト)イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(5\text{mdppm})_2(\text{dpm})]$)、ビス[4,6-ジ(ナフタレン-1-イル)ピリミジナト](ジピバロイルメタナト)イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(\text{d1npm})_2(\text{dpm})]$)のようなピリミジン骨格を有する有機金属錯体、(アセチルアセトナト)ビス(2,3,5-トリフェニルピラジナト)イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(\text{tppr})_2(\text{acac})]$)、ビス(2,3,5-トリフェニルピラジナト)(ジピバロイルメタナト)イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(\text{tppr})_2(\text{dpm})]$)、ビス{4,6-ジメチル-2-[3-(3,5-ジメチルフェニル)-5-フェニル-2-ピラジニル-N]フェニル-C}(2,6-ジメチル-3,5-ヘプタンジオナト- ^{2}O , O')イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(\text{dm dppr-P})_2(\text{dibm})]$)、ビス{4,6-ジメチル-2-[5-(4-シアノ-2,6-ジメチルフェニル)-3-(3,5-ジメチルフェニル)-2-ピラジニル-N]フェニル-C}(2,2,6,6-テトラメチル-3,5-ヘプタンジオナト- ^{2}O , O')イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(\text{dm dppr-dmCP})_2(\text{dpm})]$)、(アセチルアセトナト)ビス[2-メチル-3-フェニルキノキサリナト-N, $\text{C}^{2'}$]イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(\text{mpq})_2(\text{acac})]$)、(アセチルアセトナト)ビス(2,3-ジフェニルキノキサリナト-N, $\text{C}^{2'}$)イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(\text{dpq})_2(\text{acac})]$)、(アセチルアセトナト)ビス[2,3-ビス(4-フルオロフェニル)キノキサリナト]イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(\text{Fdpq})_2(\text{acac})]$)のようなピラジン骨格を有する有機金属錯体や、トリス(1-フェニルイソキノリナト-N, $\text{C}^{2'}$)イリジウム(III)(略称: $[\text{Ir}(\text{piq})_3]$)、ビス(1-フェニルイソキノリナト-N, $\text{C}^{2'}$)イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称: $[\text{Ir}(\text{piq})_2(\text{acac})]$)、ビス[4,6-ジメチル-2-(2-キノリニル-N)フェニル-C](2,4-ペン

30

40

50

タンジオナト - ^2O , O') イリジウム (I I I) のようなピリジン骨格を有する有機金属錯体、2, 3, 7, 8, 12, 13, 17, 18 - オクタエチル - 21H, 23H - ポルフィリン白金 (I I) (略称: [Pt O E P]) のような白金錯体、トリス (1, 3 - ジフェニル - 1, 3 - プロパンジオナト) (モノフェナントロリン) ユーロピウム (I I I) (略称: [Eu (D B M)₃ (P h e n)])、トリス [1 - (2 - テノイル) - 3, 3, 3 - トリフルオロアセトナト] (モノフェナントロリン) ユーロピウム (I I I) (略称: [Eu (T T A)₃ (P h e n)]) のような希土類金属錯体が挙げられる。

【0168】

発光層 (113、113a、113b、113c) に用いる有機化合物 (ホスト材料、アシスト材料) としては、発光物質 (ゲスト材料) のエネルギーギャップより大きなエネルギーギャップを有する物質を、一種もしくは複数種選択して用いればよい。発光層 (113、113a、113b、113c) に複数の有機化合物を用いる場合、励起錯体を形成する化合物を燐光発光物質と混合して用いることが好ましい。なお、このような構成とすることにより、励起錯体から発光物質へのエネルギー移動である E x T E T (E x c i p l e x - T r i p l e t E n e r g y T r a n s f e r) を用いた発光を得ることができる。この場合、様々な有機化合物を適宜組み合わせる用いることができるが、効率よく励起錯体を形成するためには、正孔を受け取りやすい化合物 (正孔輸送性材料) と、電子を受け取りやすい化合物 (電子輸送性材料) とを組み合わせることが特に好ましい。なお、本発明の一態様である有機化合物は、LUMO準位が低く、電子を受け取りやすい化合物として好適である。

10

20

【0169】

発光物質が蛍光材料である場合、ホスト材料としては一重項励起状態のエネルギー準位が大きく、三重項励起状態のエネルギー準位が小さい有機化合物を用いるのが好ましい。例えば、アントラセン誘導体やテトラセン誘導体を用いるのが好ましい。具体的には、9 - フェニル - 3 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) フェニル] - 9H - カルバゾール (略称: P C z P A)、3 - [4 - (1 - ナフチル) - フェニル] - 9 - フェニル - 9H - カルバゾール (略称: P C P N)、9 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントラセニル) フェニル] - 9H - カルバゾール (略称: C z P A)、7 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル) フェニル] - 7H - ジベンゾ [c, g] カルバゾール (略称: c g D B C z P A)、6 - [3 - (9, 10 - ジフェニル - 2 - アントリル) フェニル] - ベンゾ [b] ナフト [1, 2 - d] フラン (略称: 2 m B n f P P A)、9 - フェニル - 10 - { 4 - (9 - フェニル - 9H - フルオレン - 9 - イル) ビフェニル - 4' - イル } アントラセン (略称: F L P P A)、5, 12 - ジフェニルテトラセン、5, 12 - ビス (ビフェニル - 2 - イル) テトラセンなどが挙げられる。

30

40

【0170】

発光物質が燐光材料である場合、ホスト材料としては、発光物質の三重項励起エネルギー (基底状態と三重項励起状態とのエネルギー差) よりも三重項励起エネルギーの大きい有機化合物を選択すれば良い。なお、この場合には、亜鉛やアルミニウム系金属錯体の他、オキサジアゾール誘導体、トリアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、キノキサリン誘導体、ジベンゾキノキサリン誘導体、ジベンゾチオフエン誘導体、ジベンゾフラン誘導体、ピリミジン誘導体、トリアジン誘導体、ピリジン誘導体、ビピリジン誘導体、フェナントロリン誘導体等の他、芳香族アミンやカルバゾール誘導体等を用いることができる。

【0171】

ホスト材料として、より具体的には、例えば以下の正孔輸送性材料および電子輸送性材料を用いることができる。

【0172】

正孔輸送性の高いホスト材料としては、例えば、N, N' - ジ (p - トリル) - N, N' - ジフェニル - p - フェニレンジアミン (略称: D T D P P A)、4, 4' - ビス [N - (4 - ジフェニルアミノフェニル) - N - フェニルアミノ] ビフェニル (略称: D P A B

50

)、N,N'-ビス{4-[ビス(3-メチルフェニル)アミノ]フェニル}-N,N'-ジフェニル-(1,1'-ビフェニル)-4,4'-ジアミン(略称:DNTPD)、1,3,5-トリス[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]ベンゼン(略称:DPA3B)等の芳香族アミン化合物を挙げることができる。

【0173】

また、3-[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]-9-フェニルカルバゾール(略称:PCzDPA1)、3,6-ビス[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]-9-フェニルカルバゾール(略称:PCzDPA2)、3,6-ビス[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-(1-ナフチル)アミノ]-9-フェニルカルバゾール(略称:PCzTPN2)、3-[N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)-N-フェニルアミノ]-9-フェニルカルバゾール(略称:PCzPCA1)、3,6-ビス[N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)-N-フェニルアミノ]-9-フェニルカルバゾール(略称:PCzPCA2)、3-[N-(1-ナフチル)-N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)アミノ]-9-フェニルカルバゾール(略称:PCzPCN1)等のカルバゾール誘導体を挙げることができる。また、カルバゾール誘導体としては、他に、4,4'-ジ(N-カルバゾリル)ビフェニル(略称:CBP)、1,3,5-トリス[4-(N-カルバゾリル)フェニル]ベンゼン(略称:TCPB)、1,4-ビス[4-(N-カルバゾリル)フェニル]-2,3,5,6-テトラフェニルベンゼン等を用いることもできる。

【0174】

また、正孔輸送性の高いホスト材料としては、例えば、4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:NPBまたは-NPD)やN,N'-ビス(3-メチルフェニル)-N,N'-ジフェニル-[1,1'-ビフェニル]-4,4'-ジアミン(略称:TPD)、4,4',4''-トリス(カルバゾール-9-イル)トリフェニルアミン(略称:CTTA)、4,4',4''-トリス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン(略称:1-TNATA)、4,4',4''-トリス(N,N'-ジフェニルアミノ)トリフェニルアミン(略称:TDAATA)、4,4',4''-トリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン(略称:m-MTDAATA)、4,4'-ビス[N-(スピロ-9,9'-ビフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:BSPB)、4-フェニル-4'-(9-フェニルフルオレン-9-イル)トリフェニルアミン(略称:BPAPLP)、4-フェニル-3'-(9-フェニルフルオレン-9-イル)トリフェニルアミン(略称:mBPAPLP)、N-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-N-{9,9-ジメチル-2-[N'-フェニル-N'-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)アミノ]-9H-フルオレン-7-イル}フェニルアミン(略称:DFLADFL)、N-(9,9-ジメチル-2-ジフェニルアミノ-9H-フルオレン-7-イル)ジフェニルアミン(略称:DPNF)、2-[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]スピロ-9,9'-ビフルオレン(略称:DPA SF)、4-フェニル-4'-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)トリフェニルアミン(略称:PCBA1BP)、4,4'-ジフェニル-4''-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)トリフェニルアミン(略称:PCBBi1BP)、4-(1-ナフチル)-4'-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)トリフェニルアミン(略称:PCBANB)、4,4'-ジ(1-ナフチル)-4''-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)トリフェニルアミン(略称:PCBNBB)、4-フェニルジフェニル-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)アミン(略称:PCA1BP)、N,N'-ビス(9-フェニルカルバゾール-3-イル)-N,N'-ジフェニルベンゼン-1,3-ジアミン(略称:PCA2B)、N,N',N''-トリフェニル-N,N',N''-トリス(9-フェニルカルバゾール-3-イル)ベンゼン-1,3,5-トリアミン(略称:PCA3B)、N-(4-ビフェニル)-N-(9,9-ジメチル-9H-フルオレン-2-イル)-9-フェニル-9H-

10

20

30

40

50

カルバゾール - 3 - アミン (略称: PCBiF)、N - (1, 1' - ビフェニル - 4 - イル) - N - [4 - (9 - フェニル - 9H - カルバゾール - 3 - イル)フェニル] - 9, 9 - ジメチル - 9H - フルオレン - 2 - アミン (略称: PCBBiF)、9, 9 - ジメチル - N - フェニル - N - [4 - (9 - フェニル - 9H - カルバゾール - 3 - イル)フェニル]フルオレン - 2 - アミン (略称: PCBAF)、N - フェニル - N - [4 - (9 - フェニル - 9H - カルバゾール - 3 - イル)フェニル]スピロ - 9, 9' - ビフルオレン - 2 - アミン (略称: PCBA SF)、2 - [N - (9 - フェニルカルバゾール - 3 - イル) - N - フェニルアミノ]スピロ - 9, 9' - ビフルオレン (略称: PCASF)、2, 7 - ビス [N - (4 - ジフェニルアミノフェニル) - N - フェニルアミノ]スピロ - 9, 9' - ビフルオレン (略称: DPAS F)、N - [4 - (9H - カルバゾール - 9 - イル)フェニル] - N - (4 - フェニル)フェニルアニリン (略称: YGA1BP)、N, N' - ビス [4 - (カルバゾール - 9 - イル)フェニル] - N, N' - ジフェニル - 9, 9 - ジメチルフルオレン - 2, 7 - ジアミン (略称: YGA2F) などの芳香族アミン化合物等を用いることができる。また、3 - [4 - (1 - ナフチル) - フェニル] - 9 - フェニル - 9H - カルバゾール (略称: PCPN)、3 - [4 - (9 - フェナントリル) - フェニル] - 9 - フェニル - 9H - カルバゾール (略称: PCPPn)、3, 3' - ビス (9 - フェニル - 9H - カルバゾール) (略称: PCCP)、1, 3 - ビス (N - カルバゾリル)ベンゼン (略称: mCP)、3, 6 - ビス (3, 5 - ジフェニルフェニル) - 9 - フェニルカルバゾール (略称: CzTP)、4 - {3 - [3 - (9 - フェニル - 9H - フルオレン - 9 - イル)フェニル]フェニル}ジベンゾフラン (略称: mmDBFFLBi - II)、4, 4', 4'' - (ベンゼン - 1, 3, 5 - トリイル)トリ (ジベンゾフラン) (略称: DBF3P - II)、1, 3, 5 - トリ (ジベンゾチオフエン - 4 - イル)ベンゼン (略称: DBT3P - II)、2, 8 - ジフェニル - 4 - [4 - (9 - フェニル - 9H - フルオレン - 9 - イル)フェニル]ジベンゾチオフエン (略称: DBTFLP - III)、4 - [4 - (9 - フェニル - 9H - フルオレン - 9 - イル)フェニル] - 6 - フェニルジベンゾチオフエン (略称: DBTFLP - IV)、4 - [3 - (トリフェニレン - 2 - イル)フェニル]ジベンゾチオフエン (略称: mDBTPTp - II) 等のカルバゾール化合物、チオフエン化合物、フラン化合物、フルオレン化合物、トリフェニレン化合物、フェナントレン化合物等を用いることができる。

10

20

30

40

50

【0175】

電子輸送性の高いホスト材料としては、例えば、トリス (8 - キノリノラト) アルミニウム (III) (略称: Alq)、トリス (4 - メチル - 8 - キノリノラト) アルミニウム (III) (略称: Almq₃)、ビス (10 - ヒドロキシベンゾ [h] キノリノラト) ベリリウム (II) (略称: BeBq₂)、ビス (2 - メチル - 8 - キノリノラト) (4 - フェニルフェノラト) アルミニウム (III) (略称: BAlq)、ビス (8 - キノリノラト) 亜鉛 (II) (略称: Znq) など、キノリン骨格またはベンゾキノリン骨格を有する金属錯体等である。また、この他ビス [2 - (2 - ベンゾオキサゾリル)フェノラト] 亜鉛 (II) (略称: ZnPBO)、ビス [2 - (2 - ベンゾチアゾリル)フェノラト] 亜鉛 (II) (略称: ZnBTZ) などのオキサゾール系、チアゾール系配位子を有する金属錯体なども用いることができる。さらに、金属錯体以外にも、2 - (4 - ビフェニリル) - 5 - (4 - tert - ブチルフェニル) - 1, 3, 4 - オキサジアゾール (略称: PBD) や、1, 3 - ビス [5 - (p - tert - ブチルフェニル) - 1, 3, 4 - オキサジアゾール - 2 - イル]ベンゼン (略称: OXD - 7)、9 - [4 - (5 - フェニル - 1, 3, 4 - オキサジアゾール - 2 - イル)フェニル] - 9H - カルバゾール (略称: CO11) のようなオキサジアゾール誘導体や、3 - (4 - ビフェニリル) - 4 - フェニル - 5 - (4 - tert - ブチルフェニル) - 1, 2, 4 - トリアゾール (略称: TAZ) のようなトリアゾール誘導体や、2, 2', 2'' - (1, 3, 5 - ベンゼントリイル) トリス (1 - フェニル - 1H - ベンゾイミダゾール) (略称: TPBI)、2 - [3 - (ジベンゾチオフエン - 4 - イル)フェニル] - 1 - フェニル - 1H - ベンゾイミダゾール (略称: mDBTBIm - II) のようなイミダゾール骨格を有する化合物 (特にベ

ンゾイミダゾール誘導体)や、4, 4' - ビス(5 - メチルベンゾオキサゾール - 2 - イル)スチルベン(略称: B z O S)などのオキサゾール骨格を有する化合物(特にベンゾオキサゾール誘導体)や、バソフェナントロリン(略称: B p h e n)、バソキュプロイン(略称: B C P)、2, 9 - ビス(ナフタレン - 2 - イル) - 4, 7 - ジフェニル - 1, 10 - フェナントロリン(略称: N B p h e n)などのフェナントロリン誘導体や、2 - [3 - (ジベンゾチオフエン - 4 - イル)フェニル]ジベンゾ[f, h]キノキサリン(略称: 2 m D B T P D B q - I I)、2 - [3' - (ジベンゾチオフエン - 4 - イル)ビフェニル - 3 - イル]ジベンゾ[f, h]キノキサリン(略称: 2 m D B T B P D B q - I I)、2 - [3' - (9 H - カルバゾール - 9 - イル)ビフェニル - 3 - イル]ジベンゾ[f, h]キノキサリン(略称: 2 m C z B P D B q)、2 - [4 - (3, 6 - ジフェニル - 9 H - カルバゾール - 9 - イル)フェニル]ジベンゾ[f, h]キノキサリン(略称: 2 C z P D B q - I I I)、7 - [3 - (ジベンゾチオフエン - 4 - イル)フェニル]ジベンゾ[f, h]キノキサリン(略称: 7 m D B T P D B q - I I)、及び6 - [3 - (ジベンゾチオフエン - 4 - イル)フェニル]ジベンゾ[f, h]キノキサリン(略称: 6 m D B T P D B q - I I)、4, 6 - ビス[3 - (フェナントレン - 9 - イル)フェニル]ピリミジン(略称: 4, 6 m P n P 2 P m)、4, 6 - ビス[3 - (4 - ジベンゾチエニル)フェニル]ピリミジン(略称: 4, 6 m D B T P 2 P m - I I)、4, 6 - ビス[3 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル)フェニル]ピリミジン(略称: 4, 6 m C z P 2 P m)などのジアジン骨格を有する複素環化合物や、2 - {4 - [3 - (N - フェニル - 9 H - カルバゾール - 3 - イル) - 9 H - カルバゾール - 9 - イル]フェニル} - 4, 6 - ジフェニル - 1, 3, 5 - トリアジン(略称: P C C z P T z n)などのトリアジン骨格を有する複素環化合物や、3, 5 - ビス[3 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル)フェニル]ピリジン(略称: 3 5 D C z P P y)、1, 3, 5 - トリ[3 - (3 - ピリジル)フェニル]ベンゼン(略称: T m P y P B)などのピリジン骨格を有する複素環化合物も用いることができる。また、ポリ(2, 5 - ピリジンジイル)(略称: P P y)、ポリ[(9, 9 - ジヘキシルフルオレン - 2, 7 - ジイル) - c o - (ピリジン - 3, 5 - ジイル)](略称: P F - P y)、ポリ[(9, 9 - ジオクチルフルオレン - 2, 7 - ジイル) - c o - (2, 2' - ビピリジン - 6, 6' - ジイル)](略称: P F - B P y)のような高分子化合物を用いることもできる。

10

20

30

40

【0176】

また、ホスト材料として、アントラセン誘導体、フェナントレン誘導体、ピレン誘導体、クリセン誘導体、ジベンゾ[g, p]クリセン誘導体等の縮合多環芳香族化合物が挙げられ、具体的には、9, 10 - ジフェニルアントラセン(略称: D P A n t h)、N, N - ジフェニル - 9 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル)フェニル] - 9 H - カルバゾール - 3 - アミン(略称: C z A 1 P A)、4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル)トリフェニルアミン(略称: D P h P A)、Y G A P A、P C A P A、N, 9 - ジフェニル - N - {4 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル)フェニル]フェニル} - 9 H - カルバゾール - 3 - アミン(略称: P C A P B A)2 P C A P A、6, 12 - ジメトキシ - 5, 11 - ジフェニルクリセン、D B C 1、9 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントラセニル)フェニル] - 9 H - カルバゾール(略称: C z P A)、3, 6 - ジフェニル - 9 - [4 - (10 - フェニル - 9 - アントリル)フェニル] - 9 H - カルバゾール(略称: D P C z P A)、9, 10 - ビス(3, 5 - ジフェニルフェニル)アントラセン(略称: D P P A)、9, 10 - ジ(2 - ナフチル)アントラセン(略称: D N A)、2 - t e r t - ブチル - 9, 10 - ジ(2 - ナフチル)アントラセン(略称: t - B u D N A)、9, 9' - ビアントリル(略称: B A N T)、9, 9' - (スチルベン - 3, 3' - ジイル)ジフェナントレン(略称: D P N S)、9, 9' - (スチルベン - 4, 4' - ジイル)ジフェナントレン(略称: D P N S 2)、1, 3, 5 - トリ(1 - ピレニル)ベンゼン(略称: T P B 3)などを用いることができる。

【0177】

また、発光層(113、113a、113b、113c)に有機化合物を複数用いる場合

50

、励起錯体を形成する２種類の化合物（第１の化合物および第２の化合物）と、有機金属錯体とを混合して用いてもよい。この場合、様々な有機化合物を適宜組み合わせる用いることができるが、効率よく励起錯体を形成するためには、正孔を受け取りやすい化合物（正孔輸送性材料）と、電子を受け取りやすい化合物（電子輸送性材料）とを組み合わせることが特に好ましい。なお、正孔輸送性材料および電子輸送性材料の具体例については、本実施の形態で示す材料を用いることができる。この構成により、高効率、低電圧、長寿命を同時に実現できる。

【０１７８】

TADF材料とは、三重項励起状態をわずかな熱エネルギーによって一重項励起状態にアップコンバート（逆項間交差）が可能で、一重項励起状態からの発光（蛍光）を効率よく呈する材料のことである。また、熱活性化遅延蛍光が効率良く得られる条件としては、三重項励起準位と一重項励起準位のエネルギー差が 0 eV 以上 0.2 eV 以下、好ましくは 0 eV 以上 0.1 eV 以下であることが挙げられる。また、TADF材料における遅延蛍光とは、通常の蛍光と同様のスペクトルを持ちながら、寿命が著しく長い発光をいう。その寿命は、 10^{-6} 秒以上、好ましくは 10^{-3} 秒以上である。

10

【０１７９】

TADF材料としては、例えば、フラーレンやその誘導体、プロフラビン等のアクリジン誘導体、エオシン等が挙げられる。また、マグネシウム(Mg)、亜鉛(Zn)、カドミウム(Cd)、スズ(Sn)、白金(Pt)、インジウム(In)、もしくはパラジウム(Pd)等を含む金属含有ポルフィリンが挙げられる。金属含有ポルフィリンとしては、例えば、プロトポルフィリン-フッ化スズ錯体（略称： $\text{SnF}_2(\text{Proto IX})$ ）、メソポルフィリン-フッ化スズ錯体（略称： $\text{SnF}_2(\text{Meso IX})$ ）、ヘマトポルフィリン-フッ化スズ錯体（略称： $\text{SnF}_2(\text{Hemato IX})$ ）、コプロポルフィリンテトラメチルエステル-フッ化スズ錯体（略称： $\text{SnF}_2(\text{Copro IIII-4Me})$ ）、オクタエチルポルフィリン-フッ化スズ錯体（略称： $\text{SnF}_2(\text{OEP})$ ）、エチオポルフィリン-フッ化スズ錯体（略称： $\text{SnF}_2(\text{Etio I})$ ）、オクタエチルポルフィリン-塩化白金錯体（略称： PtCl_2OEP ）等が挙げられる。

20

【０１８０】

その他にも、2-(ピフェニル-4-イル)-4,6-ビス(12-フェニルインドロ[2,3-a]カルバゾール-11-イル)-1,3,5-トリアジン（略称：PIC-TRZ）、2-{4-[3-(N-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)-9H-カルバゾール-9-イル]フェニル}-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン（略称：PCCzPTzn）、2-[4-(10H-フェノキサジン-10-イル)フェニル]-4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン（略称：PXZ-TRZ）、3-[4-(5-フェニル-5,10-ジヒドロフェナジン-10-イル)フェニル]-4,5-ジフェニル-1,2,4-トリアゾール（略称：PPZ-3TPT）、3-(9,9-ジメチル-9H-アクリジン-10-イル)-9H-キサンテン-9-オン（略称：ACRXTN）、ビス[4-(9,9-ジメチル-9,10-ジヒドロアクリジン)フェニル]スルホン（略称：DMAC-DPS）、10-フェニル-10H,10'-H-スピロ[アクリジン-9,9'-アントラセン]-10'-オン（略称：ACRSA）、等の電子過剰型複素芳香環及び電子不足型複素芳香環を有する複素環化合物を用いることができる。なお、電子過剰型複素芳香環と電子不足型複素芳香環とが直接結合した物質は、電子過剰型複素芳香環のドナー性と電子不足型複素芳香環のアクセプター性が共に強くなり、一重項励起状態と三重項励起状態のエネルギー差が小さくなるため、特に好ましい。

30

40

【０１８１】

なお、TADF材料を用いる場合、他の有機化合物と組み合わせる用いることもできる。

【０１８２】

図１(D)に示す発光素子においては、EL層103aの発光層113a上に電子輸送層114aが真空蒸着法により形成される。また、EL層103aおよび電荷発生層104

50

が形成された後、E L 層 1 0 3 b の発光層 1 1 3 b 上に電子輸送層 1 1 4 b が真空蒸着法により形成される。

【0183】

< 電子輸送層 >

電子輸送層 (1 1 4 、 1 1 4 a 、 1 1 4 b) は、電子注入層 (1 1 5 、 1 1 5 a 、 1 1 5 b) によって、第 2 の電極 1 0 2 や電荷発生層 (1 0 4) から注入された電子を発光層 (1 1 3 、 1 1 3 a 、 1 1 3 b) に輸送する層である。なお、電子輸送層 (1 1 4 、 1 1 4 a 、 1 1 4 b) は、電子輸送性材料を含む層である。電子輸送層 (1 1 4 、 1 1 4 a 、 1 1 4 b) に用いる電子輸送性材料は、 $1 \times 10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{Vs}$ 以上の電子移動度を有する物質が好ましい。なお、正孔よりも電子の輸送性の高い物質であれば、これら以外のものを用いることができる。

10

【0184】

電子輸送性材料としては、キノリン配位子、ベンゾキノリン配位子、オキサゾール配位子、あるいはチアゾール配位子を有する金属錯体、オキサジアゾール誘導体、トリアゾール誘導体、フェナントロリン誘導体、ピリジン誘導体、ビピリジン誘導体などが挙げられる。その他、含窒素複素芳香族化合物のような電子不足型複素芳香族化合物を用いることもできる。

【0185】

具体的には、 Alq_3 、トリス (4 - メチル - 8 - キノリノラト) アルミニウム (I I I) (略称 : Almq_3)、ビス (1 0 - ヒドロキシベンゾ [h] キノリナト) ベリリウム (I I) (略称 : BeBq_2)、 BALq 、ビス [2 - (2 - ヒドロキシフェニル) ベンゾオキサゾラト] 亜鉛 (I I) (略称 : $\text{Zn}(\text{BOX})_2$)、ビス [2 - (2 - ヒドロキシフェニル) ベンゾチアゾラト] 亜鉛 (I I) (略称 : $\text{Zn}(\text{BTZ})_2$) などの金属錯体、2 - (4 - ビフェニル) - 5 - (4 - tert - ブチルフェニル) - 1 , 3 , 4 - オキサジアゾール (略称 : PBD)、OXD - 7、3 - (4 ' - tert - ブチルフェニル) - 4 - フェニル - 5 - (4 ' ' - ビフェニル) - 1 , 2 , 4 - トリアゾール (略称 : TAZ)、3 - (4 - tert - ブチルフェニル) - 4 - (4 - エチルフェニル) - 5 - (4 - ビフェニル) - 1 , 2 , 4 - トリアゾール (略称 : p-EtTAZ)、バソフェナントロリン (略称 : Bphen)、バソキュプロイン (略称 : BCP)、4 , 4 ' - ビス (5 - メチルベンゾオキサゾール - 2 - イル) スチルベン (略称 : BzOS) などの複素芳香族化合物、2 - [3 - (ジベンゾチオフエン - 4 - イル) フェニル] ジベンゾ [f , h] キノキサリン (略称 : 2mDBTPDBq-III)、2 - [3 ' - (ジベンゾチオフエン - 4 - イル) ビフェニル - 3 - イル] ジベンゾ [f , h] キノキサリン (略称 : 2mDBTBPD Bq-III)、2 - [4 - (3 , 6 - ジフェニル - 9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル] ジベンゾ [f , h] キノキサリン (略称 : 2CzPDBq-III)、7 - [3 - (ジベンゾチオフエン - 4 - イル) フェニル] ジベンゾ [f , h] キノキサリン (略称 : 7mDBTPDBq-III)、6 - [3 - (ジベンゾチオフエン - 4 - イル) フェニル] ジベンゾ [f , h] キノキサリン (略称 : 6mDBTPDBq-III) 等のキノキサリンないしはジベンゾキノキサリン誘導体を用いることができる。

20

30

【0186】

また、ポリ (2 , 5 - ピリジンジイル) (略称 : PPy)、ポリ [(9 , 9 - ジヘキシルフルオレン - 2 , 7 - ジイル) - co - (ピリジン - 3 , 5 - ジイル)] (略称 : PF-Py)、ポリ [(9 , 9 - ジオクチルフルオレン - 2 , 7 - ジイル) - co - (2 , 2 ' - ビピリジン - 6 , 6 ' - ジイル)] (略称 : PF-BPy) のような高分子化合物を用いることもできる。

40

【0187】

また、電子輸送層 (1 1 4 、 1 1 4 a 、 1 1 4 b) は、単層のものだけでなく、上記物質からなる層が 2 層以上積層した構造であってもよい。

【0188】

図 1 (D) に示す発光素子においては、E L 層 1 0 3 a の電子輸送層 1 1 4 a 上に電子注

50

入層 115a が真空蒸着法により形成される。その後、EL 層 103a および電荷発生層 104 が形成され、EL 層 103b の電子輸送層 114b まで形成された後、上に電子注入層 115b が真空蒸着法により形成される。

【0189】

< 電子注入層 >

電子注入層 (115、115a、115b) は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層 (115、115a、115b) には、フッ化リチウム (LiF)、フッ化セシウム (CsF)、フッ化カルシウム (CaF_2)、リチウム酸化物 (LiO_x) 等のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を用いることができる。また、フッ化エルビウム (ErF_3) のような希土類金属化合物を用いることができる。また、電子注入層 (115、115a、115b) にエレクトライドを用いてもよい。エレクトライドとしては、例えば、カルシウムとアルミニウムの混合酸化物に電子を高濃度添加した物質等が挙げられる。なお、上述した電子輸送層 (114、114a、114b) を構成する物質を用いることもできる。

10

20

30

40

50

【0190】

また、電子注入層 (115、115a、115b) に、有機化合物と電子供与体 (ドナー) とを混合してなる複合材料を用いてもよい。このような複合材料は、電子供与体によって有機化合物に電子が発生するため、電子注入性および電子輸送性に優れている。この場合、有機化合物としては、発生した電子の輸送に優れた材料であることが好ましく、具体的には、例えば上述した電子輸送層 (114、114a、114b) に用いる電子輸送性材料 (金属錯体や複素芳香族化合物等) を用いることができる。電子供与体としては、有機化合物に対し電子供与性を示す物質であればよい。具体的には、アルカリ金属やアルカリ土類金属や希土類金属が好ましく、リチウム、セシウム、マグネシウム、カルシウム、エルビウム、イッテルビウム等が挙げられる。また、アルカリ金属酸化物やアルカリ土類金属酸化物が好ましく、リチウム酸化物、カルシウム酸化物、バリウム酸化物等が挙げられる。また、酸化マグネシウムのようなルイス塩基を用いることもできる。また、テトラチアフルバレン (略称: TTF) 等の有機化合物を用いることもできる。

【0191】

なお、例えば、発光層 113b から得られる光を増幅させる場合には、第2の電極 102 と、発光層 113b との光学距離が、発光層 113b が呈する光の波長に対して $\lambda/4$ 未満となるように形成するのが好ましい。この場合、電子輸送層 114b または電子注入層 115b の膜厚を変えることにより、調整することができる。

【0192】

< 電荷発生層 >

電荷発生層 104 は、第1の電極 (陽極) 101 と第2の電極 (陰極) 102 との間に電圧を印加したときに、EL 層 103a に電子を注入し、EL 層 103b に正孔を注入する機能を有する。なお、電荷発生層 104 は、正孔輸送性材料に電子受容体 (アクセプター) が添加された構成であっても、電子輸送性材料に電子供与体 (ドナー) が添加された構成であってもよい。また、これらの両方の構成が積層されていても良い。なお、上述した材料を用いて電荷発生層 104 を形成することにより、EL 層が積層された場合における駆動電圧の上昇を抑制することができる。

【0193】

電荷発生層 104 において、正孔輸送性材料に電子受容体が添加された構成とする場合、正孔輸送性材料としては、本実施の形態で示した材料を用いることができる。また、電子受容体としては、7, 7, 8, 8 - テトラシアノ - 2, 3, 5, 6 - テトラフルオロキノジメタン (略称: $\text{F}_4\text{-TCNQ}$)、クロラニル等を挙げることができる。また元素周期表における第4族乃至第8族に属する金属の酸化物を挙げることができる。具体的には、酸化バナジウム、酸化ニオブ、酸化タンタル、酸化クロム、酸化モリブデン、酸化タンゲステン、酸化マンガン、酸化レニウムなどが挙げられる。

【0194】

電荷発生層 104 において、電子輸送性材料に電子供与体が添加された構成とする場合、電子輸送性材料としては、本実施の形態で示した材料を用いることができる。また、電子供与体としては、アルカリ金属またはアルカリ土類金属または希土類金属または元素周期表における第 2、第 13 族に属する金属およびその酸化物、炭酸塩を用いることができる。具体的には、リチウム (Li)、セシウム (Cs)、マグネシウム (Mg)、カルシウム (Ca)、イッテルビウム (Yb)、インジウム (In)、酸化リチウム、炭酸セシウムなどを用いることが好ましい。また、テトラシアナフタセンのような有機化合物を電子供与体として用いてもよい。

【0195】

なお、図 1 (E) の EL 層 103c は、上述した EL 層 (103、103a、103b) と同様の構成とすればよい。また、電荷発生層 104a、104b についても、上述した電荷発生層 104 と同様の構成とすればよい。

10

【0196】

< 基板 >

本実施の形態で示した発光素子は、様々な基板上に形成することができる。なお、基板の種類は、特定のものに限定されることはない。基板の一例としては、半導体基板 (例えば単結晶基板又はシリコン基板)、SOI 基板、ガラス基板、石英基板、プラスチック基板、金属基板、ステンレス・スチル基板、ステンレス・スチル・ホイルを有する基板、タングステン基板、タングステン・ホイルを有する基板、可撓性基板、貼り合わせフィルム、繊維状の材料を含む紙、又は基材フィルムなどが挙げられる。

20

【0197】

なお、ガラス基板の一例としては、バリウムホウケイ酸ガラス、アルミノホウケイ酸ガラス、又はソーダライムガラスなどが挙げられる。また、可撓性基板、貼り合わせフィルム、基材フィルムなどの一例としては、ポリエチレンテレフタレート (PET)、ポリエチレンナフタレート (PEN)、ポリエーテルサルフォン (PES) に代表されるプラスチック、アクリル等の合成樹脂、ポリプロピレン、ポリエステル、ポリフッ化ビニル、又はポリ塩化ビニル、ポリアミド、ポリイミド、アラミド、エポキシ、無機蒸着フィルム、又は紙類などが挙げられる。

【0198】

なお、本実施の形態で示す発光素子の作製には、蒸着法などの真空プロセスや、スピンコート法やインクジェット法などの溶液プロセスを用いることができる。蒸着法を用いる場合には、スパッタ法、イオンプレーティング法、イオンビーム蒸着法、分子線蒸着法、真空蒸着法などの物理蒸着法 (PVD 法) や、化学蒸着法 (CVD 法) 等を用いることができる。特に発光素子の EL 層に含まれる機能層 (正孔注入層 (111、111a、111b)、正孔輸送層 (112、112a、112b)、発光層 (113、113a、113b、113c)、電子輸送層 (114、114a、114b)、電子注入層 (115、115a、115b)、および電荷発生層 (104、104a、104b)) については、蒸着法 (真空蒸着法等)、塗布法 (ディップコート法、ダイコート法、バーコート法、スピンコート法、スプレーコート法等)、印刷法 (インクジェット法、スクリーン (孔版印刷) 法、オフセット (平版印刷) 法、フレキソ (凸版印刷) 法、グラビア法、マイクロコンタクト法等) などの方法により形成することができる。

30

40

【0199】

なお、本実施の形態で示す発光素子の EL 層 (103、103a、103b) を構成する各機能層 (正孔注入層 (111、111a、111b)、正孔輸送層 (112、112a、112b)、発光層 (113、113a、113b、113c)、電子輸送層 (114、114a、114b)、電子注入層 (115、115a、115b) や電荷発生層 (104、104a、104b)) は、上述した材料に限られることはなく、それ以外の材料であっても各層の機能を満たせるものであれば組み合わせて用いることができる。一例としては、高分子化合物 (オリゴマー、 dendromer、ポリマー等)、中分子化合物 (低分子と高分子の中間領域の化合物: 分子量 400 ~ 4000)、無機化合物 (量子ドット材

50

料等)等を用いることができる。なお、量子ドット材料としては、コロイド状量子ドット材料、合金型量子ドット材料、コア・シェル型量子ドット材料、コア型量子ドット材料などを用いることができる。

【0200】

本実施の形態に示す構成は、他の実施の形態に示す構成と適宜組み合わせて用いることができるものとする。

【0201】

(実施の形態3)

本実施の形態では、本発明の一態様である発光装置について説明する。なお、図2(A)に示す発光装置は、第1の基板201上のトランジスタ(FET)202と発光素子(203R、203G、203B、203W)が電氣的に接続されてなるアクティブマトリクス型の発光装置であり、複数の発光素子(203R、203G、203B、203W)は、共通のEL層204を有し、また、各発光素子の発光色に応じて、各発光素子の電極間の光学距離が調整されたマイクロキャピティ構造を有する。また、EL層204から得られた発光が第2の基板205に形成されたカラーフィルタ(206R、206G、206B)を介して射出されるトップエミッション型の発光装置である。

10

【0202】

図2(A)に示す発光装置は、第1の電極207を反射電極として機能するように形成する。また、第2の電極208を半透過・半反射電極として機能するように形成する。なお、第1の電極207および第2の電極208を形成する電極材料としては、他の実施形態の記載を参照し、適宜用いればよい。

20

【0203】

また、図2(A)において、例えば、発光素子203Rを赤色発光素子、発光素子203Gを緑色発光素子、発光素子203Bを青色発光素子、発光素子203Wを白色発光素子とする場合、図2(B)に示すように発光素子203Rは、第1の電極207と第2の電極208との間が光学距離200Rとなるように調整し、発光素子203Gは、第1の電極207と第2の電極208との間が光学距離200Gとなるように調整し、発光素子203Bは、第1の電極207と第2の電極208との間が光学距離200Bとなるように調整する。なお、図2(B)に示すように、発光素子203Rにおいて導電層210Rを第1の電極207に積層し、発光素子203Gにおいて導電層210Gを積層することにより、光学調整を行うことができる。

30

【0204】

第2の基板205には、カラーフィルタ(206R、206G、206B)が形成されている。なお、カラーフィルタは、可視光のうち特定の波長域を通過させ、特定の波長域を阻止するフィルタである。従って、図2(A)に示すように、発光素子203Rと重なる位置に赤の波長域のみを通過させるカラーフィルタ206Rを設けることにより、発光素子203Rから赤色発光を得ることができる。また、発光素子203Gと重なる位置に緑の波長域のみを通過させるカラーフィルタ206Gを設けることにより、発光素子203Gから緑色発光を得ることができる。また、発光素子203Bと重なる位置に青の波長域のみを通過させるカラーフィルタ206Bを設けることにより、発光素子203Bから青色発光を得ることができる。但し、発光素子203Wは、カラーフィルタを設けることなく白色発光を得ることができる。なお、1種のカラーフィルタの端部には、黒色層(ブラックマトリクス)209が設けられていてもよい。さらに、カラーフィルタ(206R、206G、206B)や黒色層209は、透明な材料を用いたオーバーコート層で覆われていても良い。

40

【0205】

図2(A)では、第2の基板205側に発光を取り出す構造(トップエミッション型)の発光装置を示したが、図2(C)に示すようにFET202が形成されている第1の基板201側に光を取り出す構造(ボトムエミッション型)の発光装置としても良い。なお、ボトムエミッション型の発光装置の場合には、第1の電極207を半透過・半反射電極と

50

して機能するように形成し、第２の電極２０８を反射電極として機能するように形成する。また、第１の基板２０１は、少なくとも透光性の基板を用いる。また、カラーフィルタ（２０６Ｒ'、２０６Ｇ'、２０６Ｂ'）は、図２（Ｃ）に示すように発光素子（２０３Ｒ、２０３Ｇ、２０３Ｂ）よりも第１の基板２０１側に設ければよい。

【０２０６】

また、図２（Ａ）において、発光素子が、赤色発光素子、緑色発光素子、青色発光素子、白色発光素子の場合について示したが、本発明の一態様である発光素子はその構成に限られることはなく、黄色の発光素子や橙色の発光素子を有する構成であっても良い。なお、これらの発光素子を作製するためにＥＬ層（発光層、正孔注入層、正孔輸送層、電子輸送層、電子注入層、電荷発生層など）に用いる材料としては、他の実施形態の記載を参照し、適宜用いればよい。なお、その場合には、また、発光素子の発光色に応じてカラーフィルタを適宜選択する必要がある。

10

【０２０７】

以上のような構成とすることにより、複数の発光色を呈する発光素子を備えた発光装置を得ることができる。

【０２０８】

なお、本実施の形態に示す構成は、他の実施の形態に示す構成と適宜組み合わせて用いることができるものとする。

【０２０９】

（実施の形態４）

20

本実施の形態では、本発明の一態様である発光装置について説明する。

【０２１０】

本発明の一態様である発光素子の素子構成を適用することで、アクティブマトリクス型の発光装置やパッシブマトリクス型の発光装置を作製することができる。なお、アクティブマトリクス型の発光装置は、発光素子とトランジスタ（ＦＥＴ）とを組み合わせた構成を有する。従って、パッシブマトリクス型の発光装置、アクティブマトリクス型の発光装置は、いずれも本発明の一態様に含まれる。なお、本実施の形態に示す発光装置には、他の実施形態で説明した発光素子を適用することが可能である。

【０２１１】

本実施の形態では、アクティブマトリクス型の発光装置について図３を用いて説明する。

30

【０２１２】

なお、図３（Ａ）は発光装置を示す上面図であり、図３（Ｂ）は図３（Ａ）を鎖線Ａ－Ａ'で切断した断面図である。アクティブマトリクス型の発光装置は、第１の基板３０１上に設けられた画素部３０２、駆動回路部（ソース線駆動回路）３０３と、駆動回路部（ゲート線駆動回路）（３０４ａ、３０４ｂ）を有する。画素部３０２および駆動回路部（３０３、３０４ａ、３０４ｂ）は、シール材３０５によって、第１の基板３０１と第２の基板３０６との間に封止される。

【０２１３】

また、第１の基板３０１上には、引き回し配線３０７が設けられる。引き回し配線３０７は、外部入力端子であるＦＰＣ３０８と接続される。なお、ＦＰＣ３０８は、駆動回路部（３０３、３０４ａ、３０４ｂ）に外部からの信号（例えば、ビデオ信号、クロック信号、スタート信号、リセット信号等）や電位を伝達する。また、ＦＰＣ３０８にはプリント配線基板（ＰＷＢ）が取り付けられていても良い。なお、これらＦＰＣやのＰＷＢが取り付けられた状態は、発光装置に含まれる。

40

【０２１４】

次に、図３（Ｂ）に断面構造を示す。

【０２１５】

画素部３０２は、ＦＥＴ（スイッチング用ＦＥＴ）３１１、ＦＥＴ（電流制御用ＦＥＴ）３１２、およびＦＥＴ３１２と電氣的に接続された第１の電極３１３を有する複数の画素により形成される。なお、各画素が有するＦＥＴの数は、特に限定されることはなく、必

50

要に応じて適宜設けることができる。

【0216】

FET309、310、311、312は、特に限定されることはなく、例えば、スタガ型や逆スタガ型などのトランジスタを適用することができる。また、トップゲート型やボトムゲート型などのトランジスタ構造であってもよい。

【0217】

なお、これらのFET309、310、311、312に用いることのできる半導体の結晶性については特に限定されず、非晶質半導体、結晶性を有する半導体（微結晶半導体、多結晶半導体、単結晶半導体、又は一部に結晶領域を有する半導体）のいずれを用いてもよい。なお、結晶性を有する半導体を用いることで、トランジスタ特性の劣化を抑制するため好ましい。

10

【0218】

また、これらの半導体としては、例えば、第14族の元素、化合物半導体、酸化物半導体、有機半導体などを用いることができる。代表的には、シリコンを含む半導体、ガリウムヒ素を含む半導体、インジウムを含む酸化物半導体などを適用することができる。

【0219】

駆動回路部303は、FET309とFET310とを有する。なお、FET309とFET310は、単極性（N型またはP型のいずれか一方のみ）のトランジスタを含む回路で形成されても良いし、N型のトランジスタとP型のトランジスタを含むCMOS回路で形成されても良い。また、外部に駆動回路を有する構成としても良い。

20

【0220】

第1の電極313の端部は、絶縁物314により覆われている。なお、絶縁物314には、ネガ型の感光性樹脂や、ポジ型の感光性樹脂（アクリル樹脂）などの有機化合物や、酸化シリコン、酸化窒化シリコン、窒化シリコン等の無機化合物を用いることができる。絶縁物314の上端部または下端部には、曲率を有する曲面を有するのが好ましい。これにより、絶縁部314の上層に形成される膜の被覆性を良好なものとすることができる。

【0221】

第1の電極313上には、EL層315及び第2の電極316が積層形成される。EL層315は、発光層、正孔注入層、正孔輸送層、電子輸送層、電子注入層、電荷発生層等を有する。

30

【0222】

なお、本実施の形態で示す発光素子317の構成は、他の実施の形態で説明した構成や材料を適用することができる。なお、ここでは図示しないが、第2の電極316は外部入力端子であるFPC308に電氣的に接続されている。

【0223】

また、図3(B)に示す断面図では発光素子317を1つのみ図示しているが、画素部302において、複数の発光素子がマトリクス状に配置されているものとする。画素部302には、3種類（R、G、B）の発光が得られる発光素子をそれぞれ選択的に形成し、フルカラー表示可能な発光装置を形成することができる。また、3種類（R、G、B）の発光が得られる発光素子の他に、例えば、ホワイト（W）、イエロー（Y）、マゼンタ（M）、シアン（C）等の発光が得られる発光素子を形成してもよい。例えば、3種類（R、G、B）の発光が得られる発光素子に上述の数種類の発光が得られる発光素子を追加することにより、色純度の向上、消費電力の低減等の効果が得ることができる。また、カラーフィルタと組み合わせることによってフルカラー表示可能な発光装置としてもよい。なお、カラーフィルタの種類としては、赤（R）、緑（G）、青（B）、シアン（C）、マゼンタ（M）、イエロー（Y）等を用いることができる。

40

【0224】

第1の基板301上のFET（309、310、311、312）や、発光素子317は、第2の基板306と第1の基板301とをシール材305により貼り合わせることにより、第1の基板301、第2の基板306、およびシール材305で囲まれた空間318

50

に備えられた構造を有する。なお、空間 318 には、不活性気体（窒素やアルゴン等）や有機物（シール材 305 を含む）で充填されていてもよい。

【0225】

シール材 305 には、エポキシ系樹脂やガラスフリットを用いることができる。なお、シール材 305 には、できるだけ水分や酸素を透過しない材料を用いることが好ましい。また、第 2 の基板 306 は、第 1 の基板 301 に用いることができるものを同様に用いることができる。従って、他の実施形態で説明した様々な基板を適宜用いることができるものとする。基板としてガラス基板や石英基板の他、FRP (Fiber-Reinforced Plastics)、PVF (ポリビニルフロライド)、ポリエステルまたはアクリル等からなるプラスチック基板を用いることができる。シール材としてガラスフリットを用いる場合には、接着性の観点から第 1 の基板 301 及び第 2 の基板 306 はガラス基板であることが好ましい。

10

【0226】

以上のようにして、アクティブマトリクス型の発光装置を得ることができる。

【0227】

また、アクティブマトリクス型の発光装置を可撓性基板に形成する場合、可撓性基板上に FET と発光素子とを直接形成しても良いが、剥離層を有する別の基板に FET と発光素子を形成した後、熱、力、レーザ照射などを与えることにより FET と発光素子を剥離層で剥離し、さらに可撓性基板に転載して作製しても良い。なお、剥離層としては、例えば、タンゲステン膜と酸化シリコン膜との無機膜の積層や、ポリイミド等の有機樹脂膜等を用いることができる。また可撓性基板としては、トランジスタを形成することが可能な基板に加え、紙基板、セロファン基板、アラミドフィルム基板、ポリイミドフィルム基板、布基板（天然繊維（絹、綿、麻）、合成繊維（ナイロン、ポリウレタン、ポリエステル）若しくは再生繊維（アセテート、キュブラ、レーヨン、再生ポリエステル）などを含む）、皮革基板、又はゴム基板などが挙げられる。これらの基板を用いることにより、耐久性や耐熱性に優れ、軽量化および薄型化を図ることができる。

20

【0228】

なお、本実施の形態に示す構成は、他の実施の形態に示した構成を適宜組み合わせて用いることができる。

【0229】

30

（実施の形態 5）

本実施の形態では、本発明の一態様である発光装置、本発明の一態様である発光素子を有する表示装置を適用して完成させた様々な電子機器や自動車の一例について、説明する。

【0230】

図 4 (A) ~ 図 4 (E) に示す電子機器は、筐体 7000、表示部 7001、スピーカ 7003、LED ランプ 7004、操作キー 7005（電源スイッチ、又は操作スイッチを含む）、接続端子 7006、センサ 7007（力、変位、位置、速度、加速度、角速度、回転数、距離、光、液、磁気、温度、化学物質、音声、時間、硬度、電場、電流、電圧、電力、放射線、流量、湿度、傾度、振動、におい、又は赤外線を測定する機能を含むもの）、マイクロフォン 7008、等を有することができる。

40

【0231】

図 4 (A) はモバイルコンピュータであり、上述したものの他に、スイッチ 7009、赤外線ポート 7010、等を有することができる。

【0232】

図 4 (B) は記録媒体を備えた携帯型の画像再生装置（たとえば、DVD 再生装置）であり、上述したものの他に、第 2 表示部 7002、記録媒体読込部 7011、等を有することができる。

【0233】

図 4 (C) はゴーグル型ディスプレイであり、上述したものの他に、第 2 表示部 7002、支持部 7012、イヤホン 7013、等を有することができる。

50

【 0 2 3 4 】

図 4 (D) はテレビ受像機能付きデジタルカメラであり、上述したものの他に、アンテナ 7 0 1 4、シャッターボタン 7 0 1 5、受像部 7 0 1 6、等を有することができる。

【 0 2 3 5 】

図 4 (E) は携帯電話機 (スマートフォンを含む) であり、筐体 7 0 0 0 に、表示部 7 0 0 1、マイクロフォン 7 0 1 9、スピーカ 7 0 0 3、カメラ 7 0 2 0、外部接続部 7 0 2 1、操作ボタン 7 0 2 2、等を有することができる。

【 0 2 3 6 】

図 4 (F) は、大型のテレビジョン装置 (テレビ、又はテレビジョン受信機ともいう) であり、筐体 7 0 0 0、表示部 7 0 0 1、等を有することができる。また、ここでは、スタンド 7 0 1 8 により筐体 7 0 0 0 を支持した構成を示している。また、テレビジョン装置の操作は、別体のリモコン操作機 7 1 1 1、等により行うことができる。なお、表示部 7 0 0 1 にタッチセンサを備えていてもよく、指等で表示部 7 0 0 1 に触れることで操作してもよい。リモコン操作機 7 1 1 1 は、当該リモコン操作機 7 1 1 1 から出力する情報を表示する表示部を有していてもよい。リモコン操作機 7 1 1 1 が備える操作キーまたはタッチパネルにより、チャンネル及び音量の操作を行うことができ、表示部 7 0 0 1 に表示される画像を操作することができる。

【 0 2 3 7 】

図 4 (A) ~ 図 4 (F) に示す電子機器は、様々な機能を有することができる。例えば、様々な情報 (静止画、動画、テキスト画像など) を表示部に表示する機能、タッチパネル機能、カレンダー、日付又は時刻などを表示する機能、様々なソフトウェア (プログラム) によって処理を制御する機能、無線通信機能、無線通信機能を用いて様々なコンピュータネットワークに接続する機能、無線通信機能を用いて様々なデータの送信又は受信を行う機能、記録媒体に記録されているプログラム又はデータを読み出して表示部に表示する機能、等を有することができる。さらに、複数の表示部を有する電子機器においては、一つの表示部を主として画像情報を表示し、別の一つの表示部を主として文字情報を表示する機能、または、複数の表示部に視差を考慮した画像を表示することで立体的な画像を表示する機能、等を有することができる。さらに、受像部を有する電子機器においては、静止画を撮影する機能、動画を撮影する機能、撮影した画像を自動または手動で補正する機能、撮影した画像を記録媒体 (外部又はカメラに内蔵) に保存する機能、撮影した画像を表示部に表示する機能、等を有することができる。なお、図 4 (A) 乃至図 4 (F) に示す電子機器が有することのできる機能はこれらに限定されず、様々な機能を有することができる。

【 0 2 3 8 】

図 4 (G) は、スマートウォッチであり、筐体 7 0 0 0、表示部 7 0 0 1、操作ボタン 7 0 2 2、7 0 2 3、接続端子 7 0 2 4、バンド 7 0 2 5、留め金 7 0 2 6、等を有する。

【 0 2 3 9 】

ベゼル部分を兼ねる筐体 7 0 0 0 に搭載された表示部 7 0 0 1 は、非矩形状の表示領域を有している。表示部 7 0 0 1 は、時刻を表すアイコン 7 0 2 7、その他のアイコン 7 0 2 8 等を表示することができる。また、表示部 7 0 0 1 は、タッチセンサ (入力装置) を搭載したタッチパネル (入出力装置) であってもよい。

【 0 2 4 0 】

なお、図 4 (G) に示すスマートウォッチは、様々な機能を有することができる。例えば、様々な情報 (静止画、動画、テキスト画像など) を表示部に表示する機能、タッチパネル機能、カレンダー、日付又は時刻などを表示する機能、様々なソフトウェア (プログラム) によって処理を制御する機能、無線通信機能、無線通信機能を用いて様々なコンピュータネットワークに接続する機能、無線通信機能を用いて様々なデータの送信又は受信を行う機能、記録媒体に記録されているプログラム又はデータを読み出して表示部に表示する機能、等を有することができる。

【 0 2 4 1 】

また、筐体 7 0 0 0 の内部に、スピーカ、センサ（力、変位、位置、速度、加速度、角速度、回転数、距離、光、液、磁気、温度、化学物質、音声、時間、硬度、電場、電流、電圧、電力、放射線、流量、湿度、傾度、振動、に問い又は赤外線を測定する機能を含むもの）、マイクロフォン等を有することができる。

【 0 2 4 2 】

なお、本発明の一態様である発光装置および本発明の一態様である発光素子を有する表示装置は、本実施の形態に示す電子機器の各表示部に用いることができ、長寿命な電子機器を実現できる。

【 0 2 4 3 】

また、発光装置を適用した電子機器として、図 5（A）～（C）に示すような折りたたみ可能な携帯情報端末が挙げられる。図 5（A）には、展開した状態の携帯情報端末 9 3 1 0 を示す。また、図 5（B）には、展開した状態又は折りたたんだ状態の一方から他方に変化する途中の状態の携帯情報端末 9 3 1 0 を示す。さらに、図 5（C）には、折りたたんだ状態の携帯情報端末 9 3 1 0 を示す。携帯情報端末 9 3 1 0 は、折りたたんだ状態では可搬性に優れ、展開した状態では、継ぎ目のない広い表示領域により表示の一覧性に優れる。

【 0 2 4 4 】

表示部 9 3 1 1 はヒンジ 9 3 1 3 によって連結された 3 つの筐体 9 3 1 5 に支持されている。なお、表示部 9 3 1 1 は、タッチセンサ（入力装置）を搭載したタッチパネル（入出力装置）であってもよい。また、表示部 9 3 1 1 は、ヒンジ 9 3 1 3 を介して 2 つの筐体 9 3 1 5 間を屈曲させることにより、携帯情報端末 9 3 1 0 を展開した状態から折りたたんだ状態に可逆的に変形させることができる。なお、本発明の一態様の発光装置は、表示部 9 3 1 1 に用いることができる。また、長寿命な電子機器を実現できる。表示部 9 3 1 1 における表示領域 9 3 1 2 は折りたたんだ状態の携帯情報端末 9 3 1 0 の側面に位置する表示領域である。表示領域 9 3 1 2 には、情報アイコンや使用頻度の高いアプリやプログラムのショートカットなどを表示させることができ、情報の確認やアプリなどの起動をスムーズに行うことができる。

【 0 2 4 5 】

また、発光装置を適用した自動車について、図 6（A）（B）に示す。すなわち、発光装置を、自動車と一体にして設けることができる。具体的には、図 6（A）に示す自動車の外側のライト 5 1 0 1（車体後部も含む）、タイヤのホイール 5 1 0 2、ドア 5 1 0 3 の一部または全体などに適用することができる。また、図 6（B）に示す自動車の内側の表示部 5 1 0 4、ハンドル 5 1 0 5、シフトレバー 5 1 0 6、座席シート 5 1 0 7、インナーリアビューミラー 5 1 0 8 等に適用することができる。その他、ガラス窓の一部に適用してもよい。

【 0 2 4 6 】

以上のようにして、本発明の一態様である発光装置や表示装置を適用した電子機器や自動車を得ることができる。なお、その場合には、長寿命な電子機器を実現できる。なお、適用できる電子機器や自動車は、本実施の形態に示したものに限らず、あらゆる分野において適用することが可能である。

【 0 2 4 7 】

なお、本実施の形態に示す構成は、他の実施の形態に示した構成と適宜組み合わせて用いることができる。

【 0 2 4 8 】

（実施の形態 6）

本実施の形態では、本発明の一態様である発光装置、またはその一部である発光素子を適用して作製される照明装置の構成について図 7 を用いて説明する。

【 0 2 4 9 】

図 7（A）、（B）、（C）、（D）には、照明装置の断面図の一例を示す。なお、図 7

10

20

30

40

50

(A)、(B)は基板側に光を取り出すボトムエミッション型の照明装置であり、図7(C)、(D)は、封止基板側に光を取り出すトップエミッション型の照明装置である。

【0250】

図7(A)に示す照明装置4000は、基板4001上に発光素子4002を有する。また、基板4001の外側に凹凸を有する基板4003を有する。発光素子4002は、第1の電極4004と、EL層4005と、第2の電極4006を有する。

【0251】

第1の電極4004は、電極4007と電氣的に接続され、第2の電極4006は電極4008と電氣的に接続される。また、第1の電極4004と電氣的に接続される補助配線4009を設けてもよい。なお、補助配線4009上には、絶縁層4010が形成されている。

10

【0252】

また、基板4001と封止基板4011は、シール材4012で接着されている。また、封止基板4011と発光素子4002の間には、乾燥剤4013が設けられていることが好ましい。なお、基板4003は、図7(A)のような凹凸を有するため、発光素子4002で生じた光の取り出し効率を向上させることができる。

【0253】

また、基板4003に代えて、図7(B)の照明装置4100のように、基板4001の外側に拡散板4015を設けてもよい。

【0254】

図7(C)の照明装置4200は、基板4201上に発光素子4202を有する。発光素子4202は第1の電極4204と、EL層4205と、第2の電極4206とを有する。

20

【0255】

第1の電極4204は、電極4207と電氣的に接続され、第2の電極4206は電極4208と電氣的に接続される。また第2の電極4206と電氣的に接続される補助配線4209を設けてもよい。また、補助配線4209の下部に、絶縁層4210を設けてもよい。

【0256】

基板4201と凹凸のある封止基板4211は、シール材4212で接着されている。また、封止基板4211と発光素子4202の間にバリア膜4213および平坦化膜4214を設けてもよい。なお、封止基板4211は、図7(C)のような凹凸を有するため、発光素子4202で生じた光の取り出し効率を向上させることができる。

30

【0257】

また、封止基板4211に代えて、図7(D)の照明装置4300のように、発光素子4202の上に拡散板4215を設けてもよい。

【0258】

なお、本実施の形態で示すように、本発明の一態様である発光装置、またはその一部である発光素子を適用することで、所望の色度を有する照明装置を提供することができる。

【0259】

なお、本実施の形態に示す構成は、他の実施の形態に示した構成と適宜組み合わせて用いることができる。

40

【0260】

(実施の形態7)

本実施の形態では、本発明の一態様である発光装置、またはその一部である発光素子を適用して作製される照明装置の応用例について、図8を用いて説明する。

【0261】

室内の照明装置としては、シーリングライト8001として応用できる。シーリングライト8001には、天井直付型や天井埋め込み型がある。なお、このような照明装置は、発光装置を筐体やカバーと組み合わせることにより構成される。その他にもコードペンダ

50

ト型（天井からのコード吊り下げ式）への応用も可能である。

【０２６２】

また、足元灯８００２は、床面に灯りを照射し、足元の安全性を高めることができる。例えば、寝室や階段や通路などに使用するのが有効である。その場合、部屋の広さや構造に応じて適宜サイズや形状を変えることができる。また、発光装置と支持台とを組み合わせる構成される据え置き型の照明装置とすることも可能である。

【０２６３】

また、シート状照明８００３は、薄型のシート状の照明装置である。壁面に張り付けて使用するため、場所を取らず幅広い用途に用いることができる。なお、大面積化も容易である。なお、曲面を有する壁面や筐体に用いることもできる。

10

【０２６４】

また、光源からの光が所望の方向のみに制御された照明装置８００４を用いることもできる。

【０２６５】

なお、上記以外にも室内に備えられた家具の一部に本発明の一態様である発光装置、またはその一部である発光素子を適用することにより、家具としての機能を備えた照明装置とすることができる。

【０２６６】

以上のように、発光装置を適用した様々な照明装置が得られる。なお、これらの照明装置は本発明の一態様に含まれるものとする。

20

【０２６７】

また、本実施の形態に示す構成は、他の実施の形態に示した構成と適宜組み合わせる用いることができる。

【実施例１】

【０２６８】

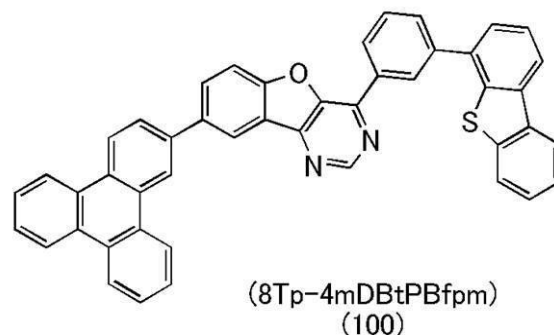
合成例１

本合成例では、実施の形態１の構造式（１００）で表される本発明の一態様である有機化合物、４-[３-(ジベンゾチオフェン-４-イル)フェニル]-８-(トリフェニレン-２-イル)-[１]ベンゾフロ[３,２-d]ピリミジン(略称: 8Tp-4mDBtPBfpm)の合成方法について説明する。なお、8Tp-4mDBtPBfpmの構造を以下に示す。

30

【０２６９】

【化２７】



40

【０２７０】

< 8Tp-4mDBtPBfpmの合成 >

まず、８-クロロ-４-[３-(ジベンゾチオフェン-４-イル)フェニル]-[１]ベンゾフロ[３,２-d]ピリミジン１．５ｇと、４,４,５,５-テトラメチル-２-(トリフェニレン-２-イル)-１,３,２-ジオキサボロラン１．５ｇと、りん酸三カリ

50

ウム 2.7 g と、diglyme 35 mL と、t-ブタノール 0.93 g を三口フラスコに加え、フラスコ内を窒素置換し、酢酸パラジウム (II) 15 mg と、ジ(1-アダマンチル)-n-ブチルホスフィン 47 mg を加え、窒素気流下にて 130 °C にて 6 時間加熱した。得られた反応物に水を加えてろ過し、水、エタノール、およびトルエンを順次用以てろ過物を洗浄した。

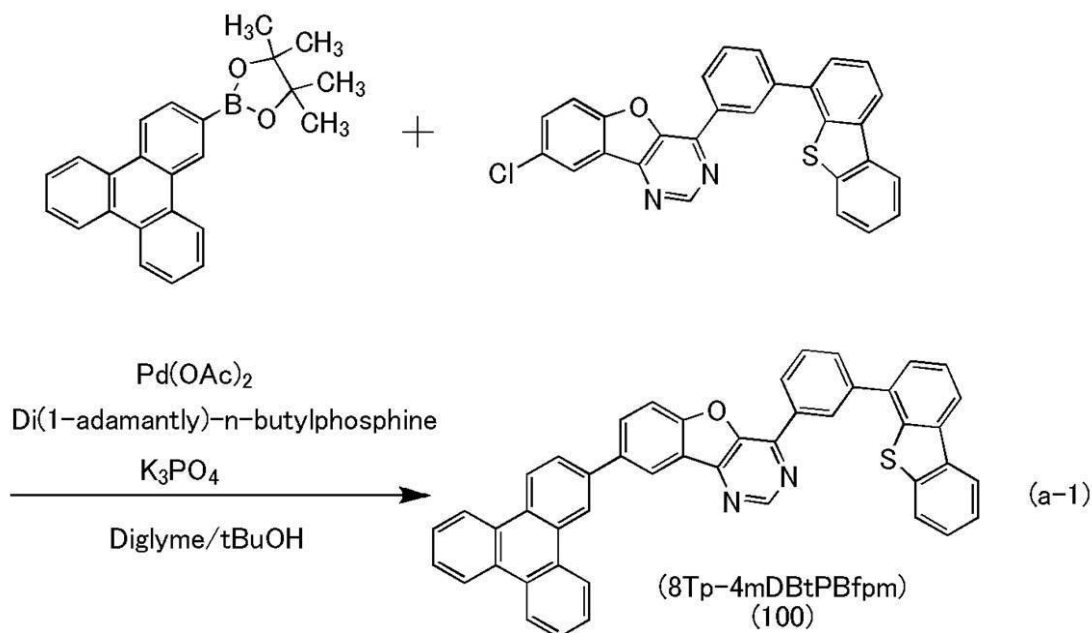
【0271】

次に、このろ過物を沸騰させたトルエンに溶解させ、ろ過した。さらに、得られたろ液の溶媒を濃縮させて再結晶することにより、目的物の淡い黄色固体を収量 0.52 g、収率 25 % で得た。合成スキームを下記式 (a-1) に示す。

【0272】

10

【化28】



20

30

【0273】

得られた淡い黄色固体 0.52 g を、トレインサブリメーション法により昇華精製した。昇華精製条件は、圧力 2.3 Pa、アルゴンガスを流量 10 mL/min で流しながら、360 °C で固体を加熱した。昇華精製後、目的物の黄色固体を 0.36 g、回収率 69 % で得た。

【0274】

得られた黄色固体の核磁気共鳴分光法 (^1H -NMR) による分析結果を下記に示す。また、 ^1H -NMR チャートを図 9 に示す。この結果から、本実施例において、上述の構造式 (100) で表される有機化合物、8Tp-4mDBtPBfpm が得られたことがわかった。

40

【0275】

^1H -NMR (TCE- d_2): 7.44 - 7.49 (m, 2H)、7.60 - 7.66 (m, 6H)、7.76 - 7.79 (t, 1H)、7.84 - 7.87 (t, 2H)、7.95 (d, 1H)、7.98 (d, 1H)、8.15 (d, 1H)、8.20 (d, 2H)、8.63 - 8.67 (m, 3H)、8.69 - 8.76 (m, 4H)、8.93 (s, 1H)、9.02 (s, 1H)、9.31 (s, 1H)。

【0276】

次に、トルエン溶液中の 8Tp-4mDBtPBfpm の吸収スペクトル及び発光スペクトルを図 10 (A) に示す。横軸は波長、縦軸は吸収強度および発光強度を表す。

50

【0277】

吸収スペクトルの測定には紫外可視分光光度計（日本分光株式会社製、V550型）を用いた。トルエン溶液中の8Tp-4mDBtPBfpmの吸収スペクトルは、8Tp-4mDBtPBfpmのトルエン溶液を石英セルに入れて測定して得られた吸収スペクトルから、トルエンを石英セルに入れて測定して得られた吸収スペクトルを差し引いて算出した。また、発光スペクトルの測定にはPL-EL測定装置（浜松ホトニクス社製）を用いた。トルエン溶液中の8Tp-4mDBtPBfpmの発光スペクトルは、8Tp-4mDBtPBfpmのトルエン溶液を石英セルに入れて測定した。

【0278】

図10(A)より、8Tp-4mDBtPBfpmのトルエン溶液では、283nm及び320nm、333nm付近に吸収ピークが見られ、409nm（励起波長：333nm）付近に発光波長のピークが見られた。

10

【0279】

次に、8Tp-4mDBtPBfpmの固体薄膜の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを測定した。固体薄膜は石英基板上に真空蒸着法にて作製した。また、薄膜の吸収スペクトルは、基板を含めた透過率と反射率から求めた吸光度（ $-\log_{10} [\%T / (100 - \%R)]$ ）より算出した。なお%Tは透過率、%Rは反射率を表す。吸収スペクトルの測定には、紫外可視分光光度計（（株）日立ハイテクノロジーズ製 U4100型）を用いた。また、発光スペクトルの測定には、蛍光光度計（（株）浜松ホトニクス製 FS920）を用いた。得られた固体薄膜の吸収スペクトルおよび発光スペクトルの測定結果を図10(B)に示す。横軸は波長、縦軸は吸収強度および発光強度を表す。

20

【0280】

図10(B)の結果より、8Tp-4mDBtPBfpmの固体薄膜では、245nm、270nm及び319nm付近に吸収ピークが見られ、440nm（励起波長：330nm）付近に発光波長のピークが見られた。

【0281】

次に、本実施例で得られた8Tp-4mDBtPBfpmを液体クロマトグラフ質量分析（Liquid Chromatography Mass Spectrometry、略称：LC/MS分析）によって分析した。

【0282】

LC/MS分析は、サーモフィッシャーサイエンティフィック社製Ultimate3000によりLC（液体クロマトグラフィー）分離を行い、サーモフィッシャーサイエンティフィック社製Q ExactiveによりMS分析（質量分析）を行った。

30

【0283】

LC分離は、任意のカラムを用いてカラム温度は40とし、送液条件は溶媒を適宜選択し、サンプルは任意の濃度の8Tp-4mDBtPBfpmを有機溶媒に溶かして調整し、注入量は5.0μLとした。

【0284】

Targeted-MS²法により、8Tp-4mDBtPBfpm由来のイオンである $m/z = 654.18$ のMS²測定を行なった。Targeted-MS²の設定は、ターゲットイオンの質量範囲を $m/z = 654.18 \pm 2.0$ （isolation window = 4）とし、検出はポジティブモードで行った。コリジョンセル内でターゲットイオンを加速するエネルギーNCE（Normalized Collision Energy）を70として測定した。得られたMSスペクトルを図11に示す。

40

【0285】

図11の結果から、8Tp-4mDBtPBfpmは、主として $m/z = 626$ 、591、471、451、394、369、341、315、286、271、260、226、197付近にプロダクトイオンが検出されることがわかった。なお、図11に示す結果は、8Tp-4mDBtPBfpmに由来する特徴的な結果を示すものであることから、混合物中に含まれる8Tp-4mDBtPBfpmを同定する上での重要なデータである

50

といえる。

【0286】

なお、 $m/z = 626$ 付近のプロダクトイオンは、ピリミジン環が開裂しニトリルの脱離により生成したカチオンと推定される。また、 $m/z = 394$ 付近のプロダクトイオンは、4 - フェニルジベンゾチオフェンの脱離により生成したカチオンと推定され、8Tp - 4mDBtPBfpmがフェニルジベンゾチオフェンを含んでいることを示唆するものである。

【0287】

また、 $m/z = 197$ 付近のプロダクトイオンは、ジベンゾチオフェニル基が脱離し、生成したカチオンと推定され、8Tp - 4mDBtPBfpmがジベンゾチオフェニル基を含んでいることを示唆するものである。

10

【実施例2】

【0288】

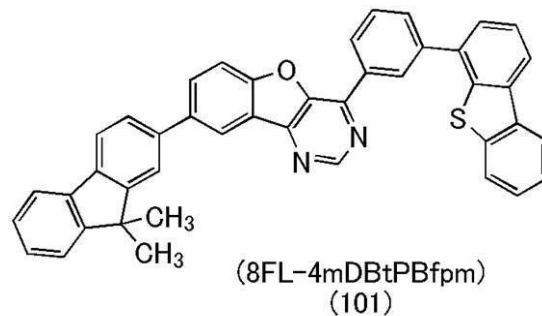
合成例2

本実施例では、本発明の一態様の有機化合物であり、実施の形態1において構造式(101)で表される、4 - [3 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル)フェニル] - 8 - (9, 9 - ジメチルフルオレン - 2 - イル) - [1]ベンゾフロ[3, 2 - d]ピリミジン(略称: 8FL - 4mDBtPBfpm)の合成方法について説明する。なお、8FL - 4mDBtPBfpmの構造式を以下に示す。

【0289】

20

【化29】



30

【0290】

< 4 - [3 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル)フェニル] - 8 - (9, 9 - ジメチルフルオレン - 2 - イル) - [1]ベンゾフロ[3, 2 - d]ピリミジン(略称: 8FL - 4mDBtPBfpm)の合成>

まず、8 - クロロ - 4 - [3 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル)フェニル] - [1]ベンゾフロ[3, 2 - d]ピリミジン 1.5 g と、9, 9 - ジメチルフルオレン - 2 - ボロン酸 1.0 g と、りん酸三カリウム 2.7 g と、diglyme 35 mL と、t - ブタノール 1.9 g を三口フラスコに加え、フラスコ内を窒素置換し、酢酸パラジウム(II) 28 mg と、ジ(1 - アダマンチル) - n - ブチルホスフィン 93 mg を加え、窒素気流下にて 135 °C にて 15 時間加熱した。得られた反応物に水を加えてろ過し、水、およびエタノールを順次用いてろ過物を洗浄した。

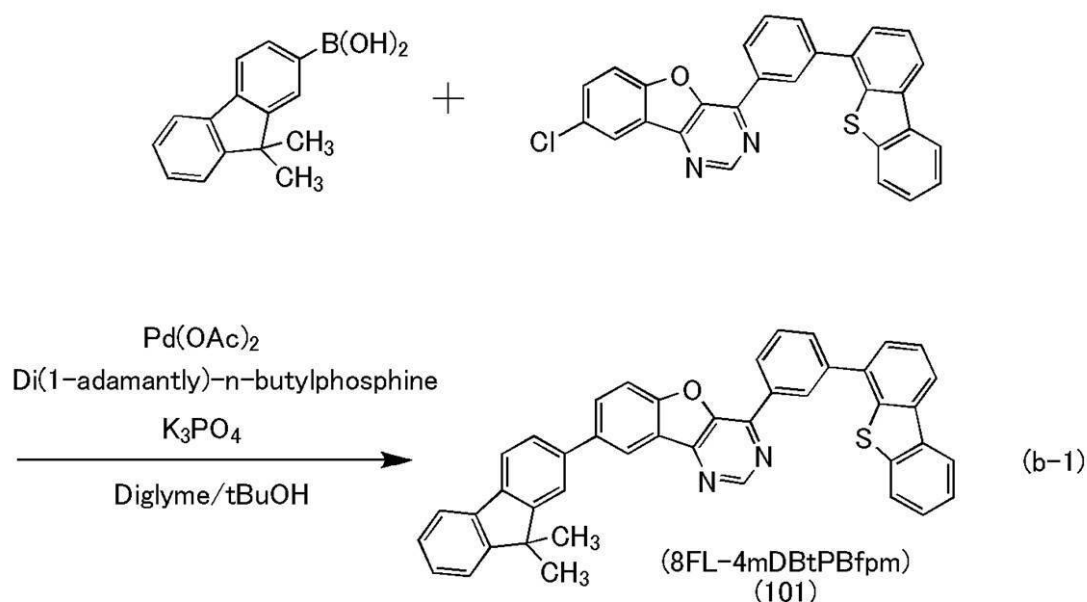
40

【0291】

次に、このろ過物を沸騰したトルエンに溶解させ、セライト、アルミナ、セライトの順に充填したろ過補助剤を用いてろ過した。得られた溶液を濃縮乾固し、トルエンとエタノールにて再結晶することにより目的物の黄白色固体を収量 1.6 g、収率 79% で得た。合成スキームを下記式(b - 1)に示す。

【0292】

【化 3 0】



10

20

【0293】

得られた黄白色固体 1.6 g を、トレインサブレーション法により昇華精製した。昇華精製条件は、圧力 2.8 Pa、アルゴンガスを流量 10 mL/min で流しながら、315℃ で固体を加熱した。昇華精製後、目的物の黄色固体を 1.0 g、回収率 63% で得た。

【0294】

得られた黄色固体の核磁気共鳴分光法 (^1H -NMR) による分析結果を下記に示す。また、 ^1H -NMR チャートを図 12 に示す。この結果から、本実施例において、上述の構造式 (101) で表される有機化合物、8FL-4mDBtPBfpm が得られたことがわかった。

30

【0295】

^1H -NMR (TCE- d_2): 1.50 (s, 6H)、7.27 - 7.32 (m, 2H)、7.40 - 7.47 (m, 3H)、7.56 - 7.63 (m, 3H)、7.69 - 7.79 (m, 5H)、7.82 (d, 1H)、7.92 (d, 1H)、8.00 (dd, 1H)、8.18 (dd, 2H)、8.55 (ds, 1H)、8.65 (d, 1H)、8.96 (s, 1H)、9.26 (s, 1H)。

【0296】

次に、トルエン溶液中の 8FL-4mDBtPBfpm の吸収スペクトル及び発光スペクトルを図 13 (A) に示す。横軸は波長、縦軸は吸収強度および発光強度を表す。

【0297】

吸収スペクトルの測定には紫外可視分光光度計 (日本分光株式会社製、V550 型) を用いた。トルエン溶液中の 8FL-4mDBtPBfpm の吸収スペクトルは、8FL-4mDBtPBfpm のトルエン溶液を石英セルに入れて測定して得られた吸収スペクトルから、トルエンを石英セルに入れて測定して得られた吸収スペクトルを差し引いて算出した。また、発光スペクトルの測定には PL-EL 測定装置 (浜松ホトニクス社製) を用いた。トルエン溶液中の 8FL-4mDBtPBfpm の発光スペクトルは、8FL-4mDBtPBfpm のトルエン溶液を石英セルに入れて測定した。

40

【0298】

図 13 (A) より、8FL-4mDBtPBfpm のトルエン溶液では、281 nm 及び 294 nm、320 nm、334 nm 付近に吸収ピークが見られ、422 nm (励起波長

50

: 331 nm) 付近に発光波長のピークが見られた。

【0299】

次に、8 FL - 4 m DB t P B f p m の固体薄膜の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを測定した。固体薄膜は石英基板上に真空蒸着法にて作製した。また、薄膜の吸収スペクトルは、基板を含めた透過率と反射率から求めた吸光度 ($-\log_{10} [\%T / (100 - \%R)]$) より算出した。なお %T は透過率、%R は反射率を表す。吸収スペクトルの測定には、紫外可視分光光度計 ((株) 日立ハイテクノロジーズ製 U4100 型) を用いた。また、発光スペクトルの測定には、蛍光光度計 ((株) 浜松ホトニクス製 FS920) を用いた。得られた固体薄膜の吸収スペクトルおよび発光スペクトルの測定結果を図 13 (B) に示す。横軸は波長、縦軸は吸収強度および発光強度を表す。

10

【0300】

図 13 (B) の結果より、8 FL - 4 m DB t P B f p m の固体薄膜では、213 nm、237 nm、290 nm、322 nm 及び 338 nm 付近に吸収ピークが見られ、437 nm (励起波長: 350 nm) 付近に発光波長のピークが見られた。

【0301】

次に、本実施例で得られた 8 FL - 4 m DB t P B f p m を液体クロマトグラフ質量分析 (Liquid Chromatography Mass Spectrometry, 略称: LC/MS 分析) によって分析した。

【0302】

LC/MS 分析は、サーモフィッシャーサイエンティフィック社製 Ultimate 3000 により LC (液体クロマトグラフィー) 分離を行い、サーモフィッシャーサイエンティフィック社製 Q Exact ive により MS 分析 (質量分析) を行った。

20

【0303】

LC 分離は、任意のカラムを用いてカラム温度は 40 とし、送液条件は溶媒を適宜選択し、サンプルは任意の濃度の 8 FL - 4 m DB t P B f p m を有機溶媒に溶かして調整し、注入量は 5.0 μ L とした。

【0304】

Targeted - MS² 法により、8 FL - 4 m DB t P B f p m 由来のイオンである $m/z = 621.19$ の MS² 測定を行なった。Targeted - MS² の設定は、ターゲットイオンの質量範囲を $m/z = 621.19 \pm 2.0$ (isolation window = 4) とし、検出はポジティブモードで行った。コリジョンセル内でターゲットイオンを加速するエネルギー NCE (Normalized Collision Energy) を 80 として測定した。得られた MS スペクトルを図 14 に示す。

30

【0305】

図 14 の結果から、8 FL - 4 m DB t P B f p m は、主として $m/z = 605$ 、578、421、344、319、284、265、241、197 付近にプロダクトイオンが検出されることがわかった。なお、図 14 に示す結果は、8 FL - 4 m DB t P B f p m に由来する特徴的な結果を示すものであることから、混合物中に含まれる 8 FL - 4 m DB t P B f p m を同定する上での重要なデータであるといえる。

【0306】

なお、 $m/z = 605$ 付近のプロダクトイオンは、8 FL - 4 m DB t P B f p m におけるメチル基の脱離により生成したカチオンと推定され、8 FL - 4 m DB t P B f p m がメチル基を含んでいることを示唆するものである。これ以外のプロダクトイオンは全て 8 FL - 4 m DB t P B f p m のメチル基が外れた状態からさらに脱離している。また、 $m/z = 343$ 付近のプロダクトイオンは、フェニル基とジベンゾチオフェニル基の脱離により生成したカチオンと推定され、8 FL - 4 m DB t P B f p m がフェニル基とジベンゾチオフェニル基を含んでいることを示唆するものである。

40

【0307】

また、 $m/z = 197$ 付近のプロダクトイオンは、ジベンゾチオフェニル基のカチオンと推定され、8 FL - 4 m DB t P B f p m がジベンゾチオフェニル基を含んでいることを

50

示唆するものである。

【実施例 3】

【0308】

合成例 3

本合成例では、実施の形態 1 の構造式 (102) で表される本発明の一態様である有機化合物、4 - [3 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) フェニル] - 8 - (ナフタレン - 2 - イル) - [1] ベンゾフロ [3 , 2 - d] ピリミジン (略称: 8 N - 4 m D B t P B f p m) の合成方法について説明する。なお、8 N - 4 m D B t P B f p m の構造式を以下に示す。

【0309】

10

【化 3 1】



(8β N-4mDBtPBfpm)
(102)

20

【0310】

< 4 - [3 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) フェニル] - 8 - (ナフタレン - 2 - イル) - [1] ベンゾフロ [3 , 2 - d] ピリミジン (略称: 8 N - 4 m D B t P B f p m) の合成 >

まず、8 - クロロ - 4 - [3 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) フェニル] - [1] ベンゾフロ [3 , 2 - d] ピリミジン 1.5 g と、2 - ナフタレンボロン酸 0.73 g と、フッ化セシウム 1.5 g と、メシチレン 32 mL を 100 mL の三口フラスコに加え、フラスコ内を窒素置換し、2' - (ジシクロヘキシルホスフィノ) アセトフェノンエチレンケタール 70 mg と、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジバラジウム (0) (略称: Pd₂(dba)₃) 89 mg を加え、窒素気流下にて 120 °C にて 5 時間加熱した。得られた反応物に水を加えてろ過し、水およびエタノールを順次用いてろ過物を洗浄した。

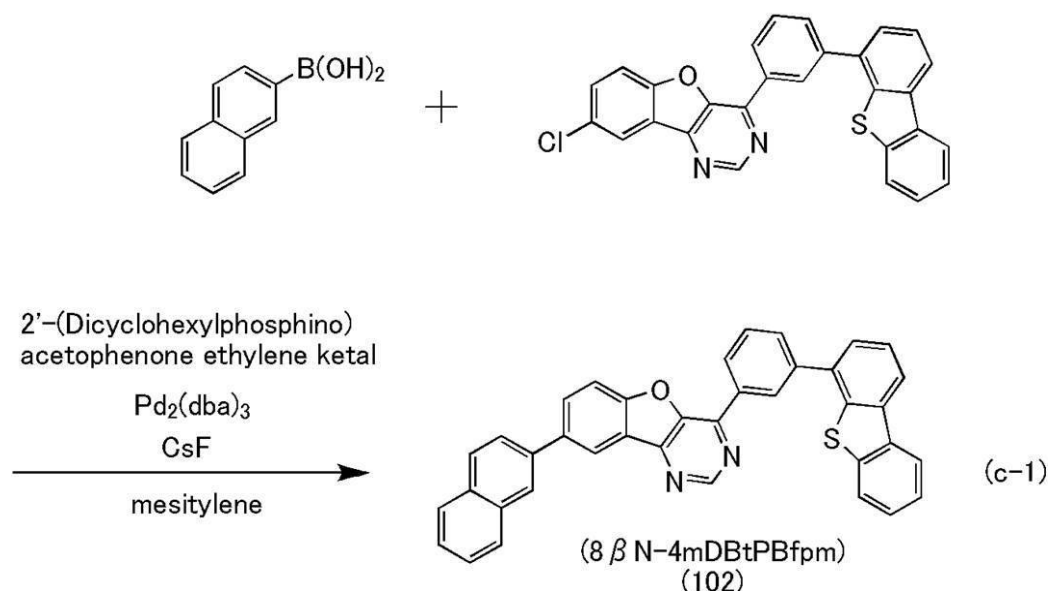
30

【0311】

このろ過物をトルエンに溶解させ、セライト、アルミナ、セライトの順に充填したろ過補助剤を用いてろ過した。得られた溶液の溶媒を濃縮して、再結晶することにより目的物の淡黄色固体を収量 1.5 g、収率 64% で得た。合成スキームを下記式 (c - 1) に示す。

【0312】

【化 3 2】



10

20

【0313】

得られた淡い黄色固体 1.5 g を、トレインサブレーション法により昇華精製した。昇華精製条件は、圧力 2.0 Pa、アルゴンガスを流量 10 mL/min で流しながら、290 °C で固体を加熱した。昇華精製後、目的物の黄色固体を 0.60 g、回収率 39% で得た。

【0314】

得られた黄色固体の核磁気共鳴分光法 (^1H -NMR) による分析結果を下記に示す。また、 ^1H -NMR チャートを図 15 に示す。この結果から、本実施例において、上述の構造式 (102) で表される有機化合物、8 N-4mDBtPBfpm が得られたことがわかった。

30

【0315】

^1H -NMR. (TCE- d_2): 7.45 - 7.50 (m, 4H)、7.57 - 7.62 (m, 2H)、7.72 - 7.93 (m, 8H)、8.03 (d, 1H)、8.10 (s, 1H)、8.17 (d, 2H)、8.60 (s, 1H)、8.66 (d, 1H)、8.98 (s, 1H)、9.28 (s, 1H)。

【0316】

次に、トルエン溶液中の 8 N-4mDBtPBfpm の吸収スペクトル及び発光スペクトルを図 16 (A) に示す。横軸は波長、縦軸は吸収強度および発光強度を表す。

【0317】

吸収スペクトルの測定には紫外可視分光光度計 (日本分光株式会社製、V550 型) を用いた。トルエン溶液中の 8 N-4mDBtPBfpm の吸収スペクトルは、8 N-4mDBtPBfpm のトルエン溶液を石英セルに入れて測定して得られた吸収スペクトルから、トルエンを石英セルに入れて測定して得られた吸収スペクトルを差し引いて算出した。また、発光スペクトルの測定には PL-EL 測定装置 (浜松ホトニクス社製) を用いた。トルエン溶液中の 8 N-4mDBtPBfpm の発光スペクトルは、8 N-4mDBtPBfpm のトルエン溶液を石英セルに入れて測定した。

40

【0318】

図 16 (A) より、8 N-4mDBtPBfpm のトルエン溶液では、283 nm 及び 290 nm、317 nm、333 nm 付近に吸収ピークが見られ、409 nm (励起波長: 337 nm) 付近に発光波長のピークが見られた。

50

【0319】

次に、8 N - 4 m D B t P B f p m の固体薄膜の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを測定した。固体薄膜は石英基板上に真空蒸着法にて作製した。また、薄膜の吸収スペクトルは、基板を含めた透過率と反射率から求めた吸光度 ($-\log_{10} [\%T / (100 - \%R)]$) より算出した。なお %T は透過率、%R は反射率を表す。吸収スペクトルの測定には、紫外可視分光光度計 ((株) 日立ハイテクノロジーズ製 U 4 1 0 0 型) を用いた。また、発光スペクトルの測定には、蛍光光度計 ((株) 浜松ホトニクス製 F S 9 2 0) を用いた。得られた固体薄膜の吸収スペクトルおよび発光スペクトルの測定結果を図 1 6 (B) に示す。横軸は波長、縦軸は吸収強度および発光強度を表す。

【0320】

図 1 6 (B) の結果より、8 N - 4 m D B t P B f p m の固体薄膜では、2 4 3 n m、2 6 6 n m、2 9 0 n m、3 1 4 n m 及び 3 4 1 n m 付近に吸収ピークが見られ、4 3 0 n m (励起波長: 3 3 0 n m) 付近に発光波長のピークが見られた。

【0321】

次に、本実施例で得られた 8 N - 4 m D B t P B f p m を液体クロマトグラフ質量分析 (Liquid Chromatography Mass Spectrometry, 略称: LC / MS 分析) によって分析した。

【0322】

LC / MS 分析は、サーモフィッシャーサイエンティフィック社製 Ultimate 3 0 0 により LC (液体クロマトグラフィー) 分離を行い、サーモフィッシャーサイエンティフィック社製 Q Exact ive により MS 分析 (質量分析) を行った。

【0323】

LC 分離は、任意のカラムを用いてカラム温度は 4 0 とし、送液条件は溶媒を適宜選択し、サンプルは任意の濃度の 8 N - 4 m D B t P B f p m を有機溶媒に溶かして調整し、注入量は 5 . 0 μ L とした。

【0324】

Targeted - MS² 法により、8 N - 4 m D B t P B f p m 由来のイオンである $m/z = 554.15$ の MS² 測定を行なった。Targeted - MS² の設定は、ターゲットイオンの質量範囲を $m/z = 554.15 \pm 2.0$ (isolation window = 4) とし、検出はポジティブモードで行った。コリジョンセル内でターゲットイオンを加速するエネルギー NCE (Normalized Collision Energy) を 6 5 とし測定した。得られた MS スペクトルを図 1 7 に示す。

【0325】

図 1 7 の結果から、8 N - 4 m D B t P B f p m は、主として $m/z = 528$ 、4 9 9、3 7 1、3 4 7、3 1 0、2 9 5、2 8 4、2 7 0、2 6 0、2 4 5、2 4 1、2 2 1、2 1 5、1 9 7 付近にプロダクトイオンが検出されることがわかった。なお、図 1 7 に示す結果は、8 N - 4 m D B t P B f p m に由来する特徴的な結果を示すものであることから、混合物中に含まれる 8 N - 4 m D B t P B f p m を同定する上での重要なデータであるといえる。

【0326】

なお、 $m/z = 371$ 付近のプロダクトイオンは、ジベンゾチオフェニル基の脱離により生成したカチオンと推定され、8 N - 4 m D B t P B f p m がジベンゾチオフェニル基を含んでいることを示唆するものである。

【実施例 4】

【0327】

本実施例では、本発明の一態様である発光素子として、実施例 1 で説明した 4 - [3 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) フェニル] - 8 - (トリフェニレン - 2 - イル) - [1] ベンゾフロ [3 , 2 - d] ピリミジン (略称: 8 T p - 4 m D B t P B f p m) (構造式 (1 0 0)) を発光層に用いた発光素子 1、実施例 2 で説明した 4 - [3 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) フェニル] - 8 - (9 , 9 - ジメチルフルオレン - 2 - イル) -

10

20

30

40

50

【 1 】ベンゾフロ[3 , 2 - d]ピリミジン (略称 : 8 F L - 4 m D B t P B f p m) (構造式 (1 0 1)) を発光層に用いた発光素子 2 、実施例 3 で説明した 4 - [3 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) フェニル] - 8 - (ナフタレン - 2 - イル) - [1] ベンゾフロ[3 , 2 - d]ピリミジン (略称 : 8 N - 4 m D B t P B f p m) (構造式 (1 0 2)) を発光層に用いた発光素子 3 、についてこれらの素子構造、作製方法およびその特性について説明する。なお、本実施例で用いる発光素子の素子構造を図 1 8 に示し、具体的な構成について表 1 に示す。また、本実施例で用いる材料の化学式を以下に示す。

【 0 3 2 8 】

【 表 1 】

	第1 の電極	正孔 注入層	正孔 輸送層	発光層	電子 輸送層		電子 注入層	第2 の電極
発光素子 1	ITSO (70nm)	DBT3P-II:MoO _x (2:1 50nm)	PCBBi1BP (20nm)	*	8Tp- 4mDBtPBfpm (20nm)	Bphen (15nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)
発光素子 2	ITSO (70nm)	DBT3P-II:MoO _x (2:1 50nm)	PCBBi1BP (20nm)	**	8FL- 4mDBtPBfpm (20nm)	Bphen (15nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)
発光素子 3	ITSO (70nm)	DBT3P-II:MoO _x (2:1 50nm)	PCBBi1BP (20nm)	***	8βN- 4mDBtPBfpm (20nm)	Bphen (15nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)

* 8Tp-4mDBtPBfpm:PCCP:Ir(ppy)₂(4dppy) (0.6:0.4:0.1 40nm)

** 8FL-4mDBtPBfpm:PCCP:Ir(ppy)₂(4dppy) (0.6:0.4:0.1 40nm)

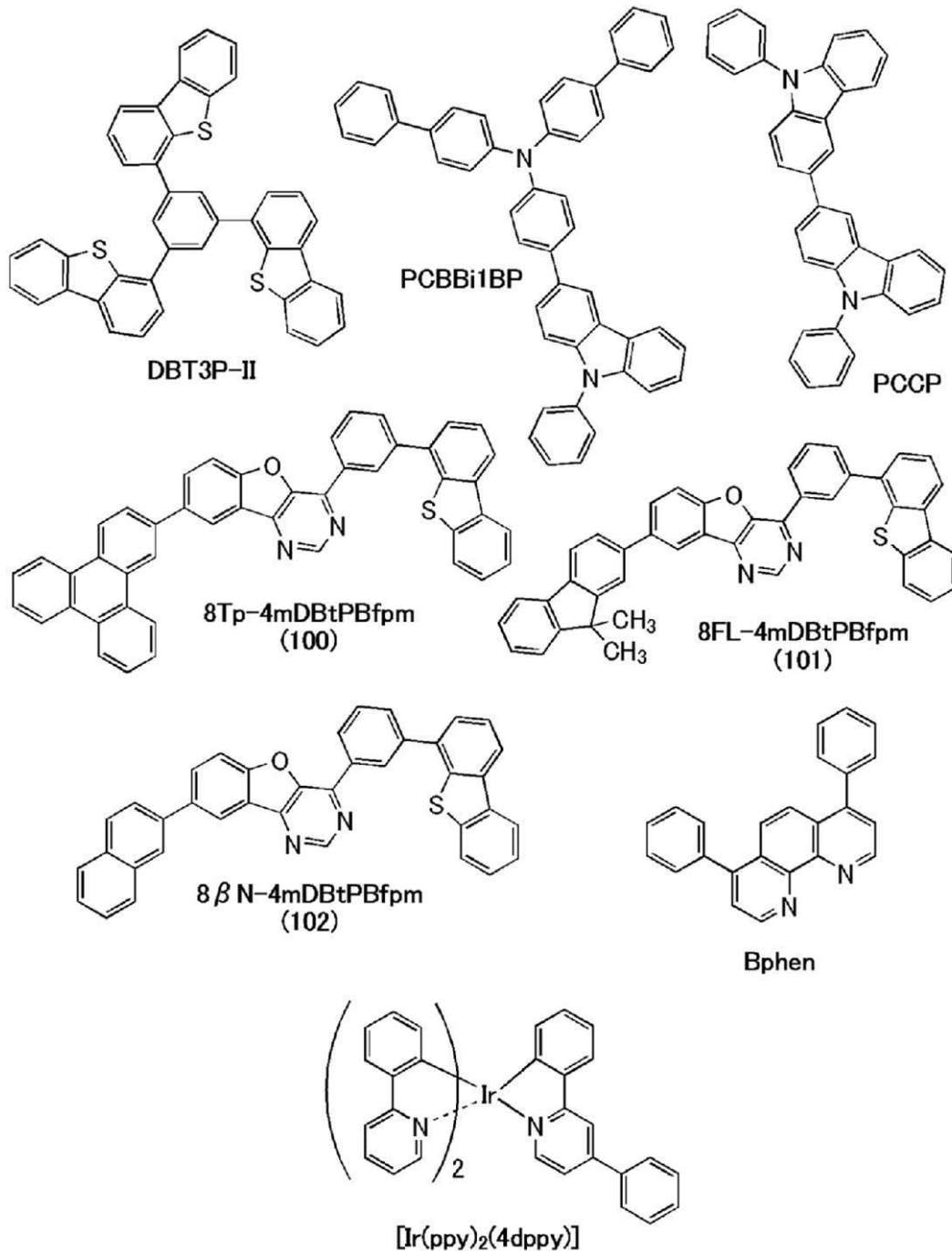
*** 8βN-4mDBtPBfpm:PCCP:Ir(ppy)₂(4dppy) (0.6:0.4:0.1 40nm)

【 0 3 2 9 】

10

20

【化 3 3】



【0330】

発光素子の作製

本実施例で示す発光素子は、図18に示すように基板900上に形成された第1の電極901上に正孔注入層911、正孔輸送層912、発光層913、電子輸送層914、電子注入層915が順次積層され、電子注入層915上に第2の電極903が積層された構造を有する。

【0331】

まず、基板900上に第1の電極901を形成した。電極面積は、 4 mm^2 ($2\text{ mm} \times 2\text{ mm}$)とした。また、基板900には、ガラス基板を用いた。また、第1の電極901は、酸化珪素を含むインジウム錫酸化物 (ITO) をスパッタリング法により、 70 nm の

膜厚で成膜して形成した。

【0332】

ここで、前処理として、基板の表面を水で洗浄し、200 で1時間焼成した後、UVオゾン処理を370秒行った。その後、 10^{-4} Pa程度まで内部が減圧された真空蒸着装置に基板を導入し、真空蒸着装置内の加熱室において、170 で60分間の真空焼成を行った後、基板を30分程度放冷した。

【0333】

次に、第1の電極901上に正孔注入層911を形成した。正孔注入層911は、真空蒸着装置内を 10^{-4} Paに減圧した後、DBT3P-I Iと酸化モリブデンとを、DBT3P-I I：酸化モリブデン=2：1（質量比）とし、膜厚が50nmとなるようにそれぞれ共蒸着して形成した。

10

【0334】

次に、正孔注入層911上に正孔輸送層912を形成した。正孔輸送層912は、PCBBi1BPを用い、膜厚が20nmになるように蒸着して形成した。

【0335】

次に、正孔輸送層912上に発光層913を形成した。

【0336】

発光層913は、発光素子1の場合は、ホスト材料として、8Tp-4mDBtPBfpmを用い、アシスト材料としてPCCP、ゲスト材料（燐光材料）として[Ir(pppy)₂(4dppy)]を用い、重量比が8Tp-4mDBtPBfpm：PCCP：[Ir(pppy)₂(4dppy)]=0.6：0.4：0.1となるように共蒸着した。なお、膜厚は、40nmとした。

20

【0337】

発光層913は、発光素子2の場合は、ホスト材料として、8FL-4mDBtPBfpmを用い、アシスト材料としてPCCP、ゲスト材料（燐光材料）として[Ir(pppy)₂(4dppy)]を用い、重量比が8FL-4mDBtPBfpm：PCCP：[Ir(pppy)₂(4dppy)]=0.6：0.4：0.1となるように共蒸着した。なお、膜厚は、40nmとした。

【0338】

発光層913は、発光素子3の場合は、ホスト材料として、8N-4mDBtPBfpmを用い、アシスト材料としてPCCP、ゲスト材料（燐光材料）として[Ir(pppy)₂(4dppy)]を用い、重量比が8N-4mDBtPBfpm：PCCP：[Ir(pppy)₂(4dppy)]=0.6：0.4：0.1となるように共蒸着した。なお、膜厚は、40nmとした。

30

【0339】

次に、発光層913上に電子輸送層914を形成した。電子輸送層914は、発光素子1の場合は、8Tp-4mDBtPBfpmの膜厚が20nm、Bphenの膜厚が15nmとなるように順次蒸着して形成した。また、発光素子2の場合は、8FL-4mDBtPBfpmの膜厚が20nm、Bphenの膜厚が15nmとなるように順次蒸着して形成した。発光素子3の場合は、8N-4mDBtPBfpmの膜厚が20nm、Bphenの膜厚が15nmとなるように順次蒸着して形成した。

40

【0340】

次に、電子輸送層914上に電子注入層915を形成した。電子注入層915は、フッ化リチウム(LiF)を用い、膜厚が1nmになるように蒸着して形成した。

【0341】

次に、電子注入層915上に第2の電極903を形成した。第2の電極903は、アルミニウムを蒸着法により、膜厚が200nmとなるように形成した。なお、本実施例において、第2の電極903は、陰極として機能する。

【0342】

以上の工程により、基板900上に一対の電極間にEL層を挟んでなる発光素子を形成し

50

た。なお、上記工程で説明した正孔注入層 9 1 1、正孔輸送層 9 1 2、発光層 9 1 3、電子輸送層 9 1 4、電子注入層 9 1 5 は、本発明の一態様における E L 層を構成する機能層である。また、上述した作製方法における蒸着工程では、全て抵抗加熱法による蒸着法を用いた。

【0343】

また、上記に示すように作製した発光素子は、別の基板（図示せず）により封止される。なお、別の基板（図示せず）を用いた封止の際は、窒素雰囲気グローブボックス内において、封止材を用いて別の基板（図示せず）を基板 9 0 0 上に固定し、シール材を基板 9 0 0 上に形成された発光素子の周囲に塗布し、封止時に 3 6 5 n m の紫外光を 6 J / c m² 照射し、8 0 にて 1 時間熱処理することにより行った。

10

【0344】

発光素子の動作特性

作製した各発光素子の動作特性について測定した。なお、測定は室温（2 5 に保たれた雰囲気）で行った。また、発光素子 1、発光素子 2、および発光素子 3 の動作特性の結果として電流密度 - 輝度特性を図 1 9、電圧 - 輝度特性を図 2 0、輝度 - 電流効率特性を図 2 1、電圧 - 電流特性を図 2 2 にそれぞれ示す。

【0345】

また、1 0 0 0 c d / m² 付近における各発光素子の主な初期特性値を以下の表 2 に示す。

【0346】

20

【表 2】

	電圧 (V)	電流 (mA)	電流密度 (mA/cm ²)	色度(x,y)	輝度 (cd/m ²)	電流効率 (cd/A)	パワー効率 (lm/W)	外部量子効率 (%)
発光素子 1	3.8	0.062	1.6	(0.45,0.54)	1100	70	57	21
発光素子 2	3.9	0.051	1.3	(0.45,0.54)	920	72	57	22
発光素子 3	3.6	0.054	1.4	(0.45,0.54)	980	72	62	22

30

【0347】

上記結果から、本実施例で作製した発光素子は、いずれも良好な素子特性を示すことが分かる。

【0348】

また、各発光素子に 2 . 5 m A / c m² の電流密度で電流を流した際の発光スペクトルを、図 2 3 に示す。図 2 3 に示す通り、各発光素子の発光スペクトルは、いずれも 5 6 0 n m 付近にピークを有しており、発光層 9 1 3 に含まれる、[I r (p p y)₂ (4 d p p y)] の発光に由来していることが示唆される。

40

【0349】

次に、各発光素子に対する信頼性試験を行った。信頼性試験の結果を図 2 4 に示す。図 2 4 において、縦軸は初期輝度を 1 0 0 % とした時の規格化輝度（%）を示し、横軸は素子の駆動時間（h）を示す。なお、信頼性試験は、2 m A における定電流駆動試験を行った。

【0350】

信頼性試験の結果より、本実施例で示した各発光素子は、いずれも良好な素子特性を示すことが分かる。

50

【 0 3 5 1 】

また、本実施例に示す各発光素子は、いずれも各発光層において励起錯体が形成され、励起錯体から発光物質である、 $[\text{Ir}(\text{ppy})_2(4\text{dppy})]$ へのエネルギー移動による発光が得られる(E x T E T)構成を有する。なお、このような構成において、本発明の一態様であり、本実施例で用いた、8Tp-4mDBtPBfpm、8FL-4mDBtPBfpm及び8-N-4mDBtPBfpmは、ベンゾフロピリミジン骨格を有し、LUMO準位が深いため、励起錯体を形成する上で好適である。従って、本実施例で示した各発光素子は、E x T E Tによる発光が得られ、駆動電圧を低減できるという特徴も有する。

【 実施例 5 】

10

【 0 3 5 2 】

本実施例では、本発明の一態様である発光素子として、実施例3で説明した8-N-4mDBtPBfpm(構造式(102))を発光層に用いた発光素子4、比較とする有機化合物、4,8-ビス[3-(ジベンゾチオフェン-4-イル)フェニル]-[1]ベンゾフロ[3,2-d]ピリミジン(略称:4,8mDBtP2Bfpm)(構造式(200))を発光層に用いた比較発光素子5、についてこれらの素子構造、作製方法およびその特性について説明する。なお、本実施例で用いる発光素子の素子構造を図18に示し、具体的な構成について表3に示す。また、本実施例で用いる材料の化学式を以下に示す。

【 0 3 5 3 】

20

【 表 3 】

	第1 の電極	正孔 注入層	正孔 輸送層	発光層	電子 輸送層		電子 注入層	第2 の電極
発光素子 4	ITSO (70nm)	DBT3P-II:MoOx (2:1 50nm)	PCBBi1BP (20nm)	*	8βN- 4mDBtPBfpm (20nm)	Bphen (15nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)
比較 発光素子 5	ITSO (70nm)	DBT3P-II:MoOx (2:1 50nm)	PCBBi1BP (20nm)	**	4,8mDBtP2Bfpm (20nm)	Bphen (15nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)

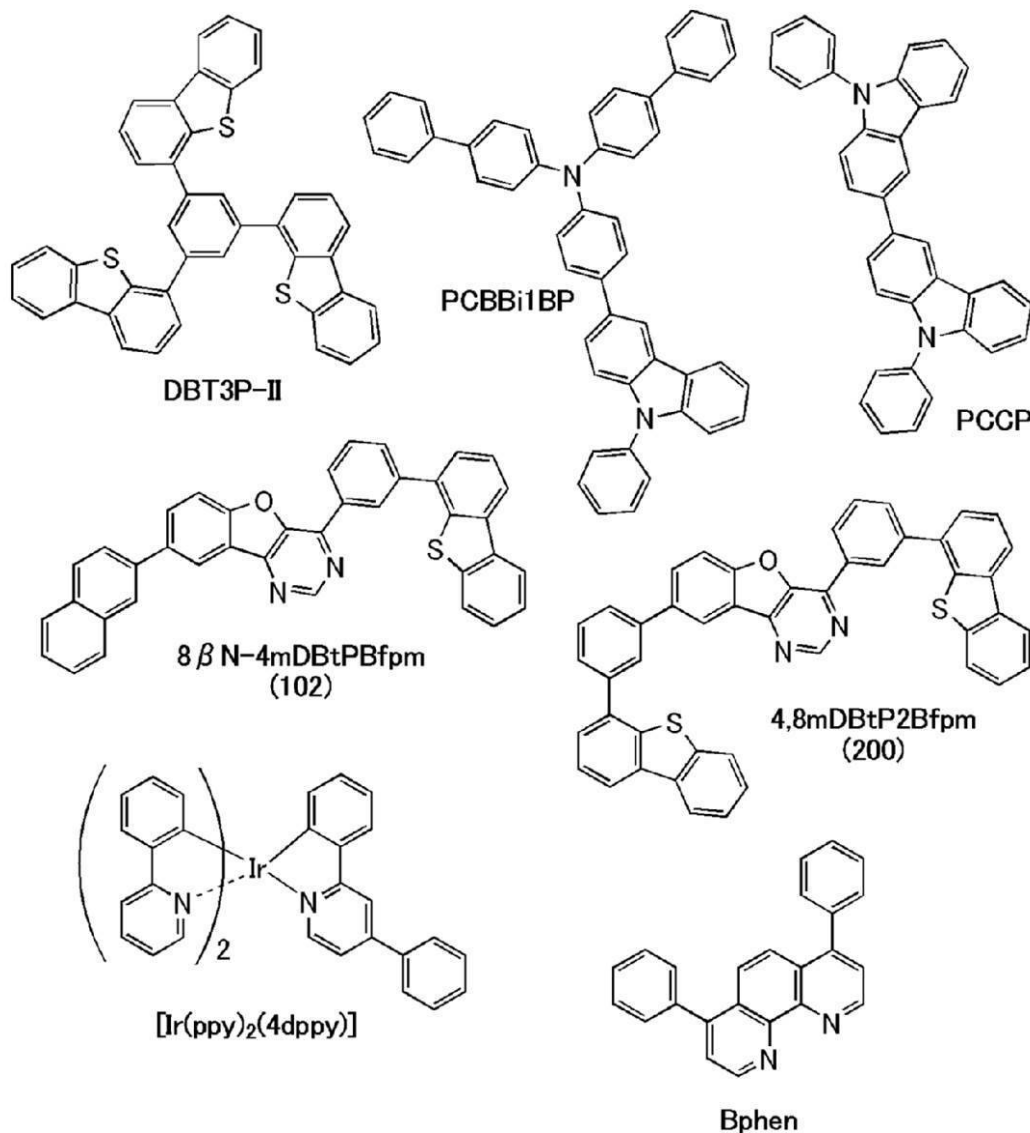
* 8βN-4mDBtPBfpm:PCCP:Ir(ppy)₂(4dppy) (0.6:0.4:0.1 40nm)

** 4,8mDBtP2Bfpm:PCCP:Ir(ppy)₂(4dppy) (0.6:0.4:0.1 40nm)

30

【 0 3 5 4 】

【化 3 4】



【 0 3 5 5 】

発光素子の作製

本実施例で示す発光素子は、図 1 8 に示すように基板 9 0 0 上に形成された第 1 の電極 9 0 1 上に正孔注入層 9 1 1、正孔輸送層 9 1 2、発光層 9 1 3、電子輸送層 9 1 4、電子注入層 9 1 5 が順次積層され、電子注入層 9 1 5 上に第 2 の電極 9 0 3 が積層された構造を有する。

【 0 3 5 6 】

まず、基板 9 0 0 上に第 1 の電極 9 0 1 を形成した。電極面積は、 4 mm^2 ($2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$) とした。また、基板 9 0 0 には、ガラス基板を用いた。また、第 1 の電極 9 0 1 は、酸化珪素を含むインジウム錫酸化物 (ITO) をスパッタリング法により、 70 nm の膜厚で成膜して形成した。

【 0 3 5 7 】

ここで、前処理として、基板の表面を水で洗浄し、 200°C で 1 時間焼成した後、UV オゾン処理を 370 秒行った。その後、 10^{-4} Pa 程度まで内部が減圧された真空蒸着装置に基板を導入し、真空蒸着装置内の加熱室において、 170°C で 60 分間の真空焼成を行った後、基板を 30 分程度放冷した。

【0358】

次に、第1の電極901上に正孔注入層911を形成した。正孔注入層911は、真空蒸着装置内を 10^{-4} Paに減圧した後、DBT3P-IIと酸化モリブデンとを、DBT3P-II：酸化モリブデン＝2：1（質量比）とし、膜厚が50 nmとなるようにそれぞれ共蒸着して形成した。

【0359】

次に、正孔注入層911上に正孔輸送層912を形成した。正孔輸送層912は、PCBBi1BPを用い、膜厚が20 nmになるように蒸着して形成した。

【0360】

次に、正孔輸送層912上に発光層913を形成した。

10

【0361】

発光層913は、発光素子4の場合は、ホスト材料として、8-N-4mDBtPBfp mを用い、アシスト材料としてPCCP、ゲスト材料（燐光材料）として $[\text{Ir}(\text{ppy})_2(4\text{dppy})]$ を用い、重量比が8-N-4mDBtPBfp m：PCCP： $[\text{Ir}(\text{ppy})_2(4\text{dppy})]$ ＝0.6：0.4：0.1となるように共蒸着した。なお、膜厚は、40 nmとした。

【0362】

発光層913は、比較発光素子5の場合は、ホスト材料として、4,8mDBtP2Bfp mを用い、アシスト材料としてPCCP、ゲスト材料（燐光材料）として $[\text{Ir}(\text{ppy})_2(4\text{dppy})]$ を用い、重量比が4,8mDBtP2Bfp m：PCCP： $[\text{Ir}(\text{ppy})_2(4\text{dppy})]$ ＝0.6：0.4：0.1となるように共蒸着した。なお、膜厚は、40 nmとした。

20

【0363】

次に、発光層913上に電子輸送層914を形成した。電子輸送層914は、発光素子4の場合は、8-N-4mDBtPBfp mの膜厚が20 nm、Bphenの膜厚が15 nmとなるように順次蒸着して形成した。比較発光素子5の場合は、4,8mDBtP2Bfp mの膜厚が20 nm、Bphenの膜厚が15 nmとなるように順次蒸着して形成した。

【0364】

次に、電子輸送層914上に電子注入層915を形成した。電子注入層915は、フッ化リチウム（LiF）を用い、膜厚が1 nmになるように蒸着して形成した。

30

【0365】

次に、電子注入層915上に第2の電極903を形成した。第2の電極903は、アルミニウムを蒸着法により、膜厚が200 nmとなるように形成した。なお、本実施例において、第2の電極903は、陰極として機能する。

【0366】

以上の工程により、基板900上に一对の電極間にEL層を挟んでなる発光素子を形成した。なお、上記工程で説明した正孔注入層911、正孔輸送層912、発光層913、電子輸送層914、電子注入層915は、本発明の一態様におけるEL層を構成する機能層である。また、上述した作製方法における蒸着工程では、全て抵抗加熱法による蒸着法を用いた。

40

【0367】

また、上記に示すように作製した発光素子は、別の基板（図示せず）により封止される。なお、別の基板（図示せず）を用いた封止の際は、窒素雰囲気グローブボックス内において、シール材を基板900上に形成された発光素子の周囲に塗布した後、乾燥剤を備えた別の基板（図示せず）を基板900上の所望の位置に重ね、365 nmの紫外光を6 J/cm²照射した。

【0368】

発光素子の動作特性

作製した発光素子4および比較発光素子5の動作特性について測定した。なお、測定は室

50

温（25℃に保たれた雰囲気）で行った。また、発光素子4および比較発光素子5の動作特性の結果として電流密度 - 輝度特性を図25、電圧 - 輝度特性を図26、輝度 - 電流効率特性を図27、電圧 - 電流特性を図28にそれぞれ示す。

【0369】

また、1000cd/m²付近における発光素子4および比較発光素子5の主な初期特性値を以下の表4に示す。

【0370】

【表4】

	電圧 (V)	電流 (mA)	電流密度 (mA/cm ²)	色度(x,y)	輝度 (cd/m ²)	電流効率 (cd/A)	ハーフ効率 (lm/W)	外部量子効率 (%)
発光素子 4	3.4	0.054	1.3	(0.44,0.55)	960	71	66	21
比較 発光素子 5	3.4	0.049	1.2	(0.45,0.54)	870	72	66	21

10

【0371】

上記結果から、本実施例で作製した発光素子4は、良好な素子特性を示すことが分かる。

20

【0372】

また、発光素子4および比較発光素子5に2.5mA/cm²の電流密度で電流を流した際の発光スペクトルを、図29に示す。図29に示す通り、各発光素子の発光スペクトルは、いずれも560nm付近にピークを有しており、発光層913に含まれる、[Ir(ppy)₂(4dppy)]の発光に由来していることが示唆される。

【0373】

次に、発光素子4および比較発光素子5に対する信頼性試験を行った。信頼性試験の結果を図30に示す。図30において、縦軸は初期輝度を100%とした時の規格化輝度(%)を示し、横軸は素子の駆動時間(h)を示す。なお、信頼性試験は、2mAにおける定電流駆動試験を行った。

30

【0374】

信頼性試験の結果より、本発明の一態様である発光素子4は、比較発光素子5よりも信頼性において優れた特性を示すことがわかった。特に、輝度が初期の90%に減衰する時間(LT90)を比較すると、比較発光素子5のLT90が78時間であるのに対し、発光素子4のLT90は215時間であり、約2.8倍もの長寿命化の効果が得られた。このことから、本発明の一態様である有機化合物、8-N-4mDBtPBfp_m(構造式(102))を用いることは発光素子の長寿命化に関して有用であると言える。また、本実施例の結果から、ベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格のベンゼン側に、縮合環を直接結合させることが、素子の長寿命化に直結していることが分かる。

【実施例6】

40

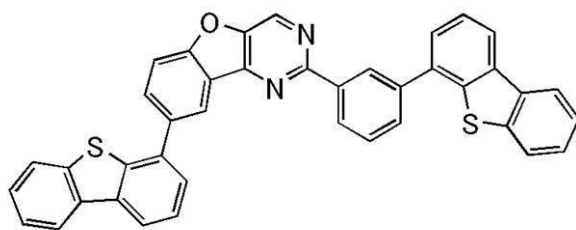
【0375】

合成例4

本合成例では、実施の形態1の構造式(145)で表される本発明の一態様である有機化合物、8-(ジベンゾチオフェン-4-イル)-2-[3-(ジベンゾチオフェン-4-イル)フェニル]-[1]ベンゾフロ[3,2-d]ピリミジン(略称:8DBt-2mDBtPBfp_m)の合成方法について説明する。なお、8DBt-2mDBtPBfp_mの構造式を以下に示す。

【0376】

【化 3 5】

(8DBt-2mDBtPBfpm)
(145)

10

【 0 3 7 7 】

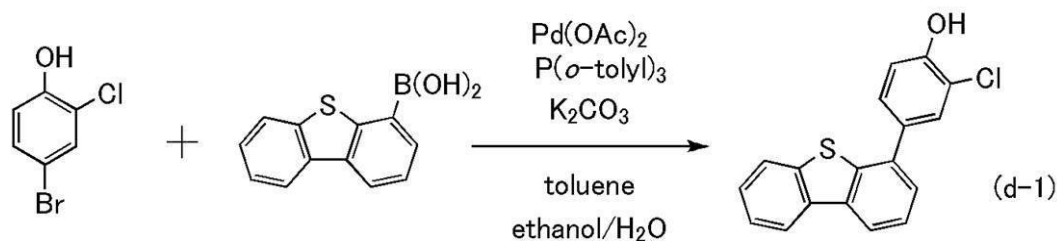
<ステップ 1：2 - クロロ - 4 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) フェノールの合成>
まず、4 - ジベンゾチオフェンボロン酸 3.4 g と、トリス(2 - メチルフェニル)ホスフィン(略称：P(o-tolyl)₃) 0.18 g と、炭酸カリウム 4.1 g と、トルエン 56 mL と、エタノール 19 mL と、水 15 mL を三口フラスコに入れ、減圧下で攪拌することにより脱気して窒素置換した。この混合物に 4 - プロモ - 2 - クロロフェノール 3.1 g と、酢酸パラジウム(II)(略称：Pd(OAc)₂) 67 mg を加え、90 で 14 時間攪拌した。所定時間経過後、この混合物に水を加えて酢酸エチルで抽出し、得られた有機層を水および飽和食塩水で洗浄して硫酸マグネシウムで乾燥した。この混合物をろ過し、ろ液を濃縮して褐色油状物を得た。この油状物をトルエンに溶かし、ヘキサン：酢酸エチル = 5 : 1 から徐々にヘキサンの量を減らし、最終的にヘキサン：酢酸エチル = 2 : 1 にしたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製したところ、目的物である淡黄色固体を収量 4.3 g、収率 91 % で得た。ステップ 1 の合成スキームを下記式(d-1)に示す。

20

【 0 3 7 8 】

【化 3 6】

30



40

【 0 3 7 9 】

<ステップ 2：4 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) - 2 - (4,4,5,5 - テトラメチル - 1,3,2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) フェノールの合成>
次に、上記ステップ 1 で合成した 2 - クロロ - 4 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) フェノール 0.31 g と、ビス(ピナコラート)ジボロン 0.28 g と、酢酸カリウム(AcOK) 0.30 g と、2 - ジシクロヘキシルホスフィノ - 2',6' - ジメトキシビフェニル(S-Phos) 17 mg と、1,4 - ジオキサン 2.5 mL を二口フラスコに入れ、減圧下で攪拌することにより脱気して窒素置換した。

【 0 3 8 0 】

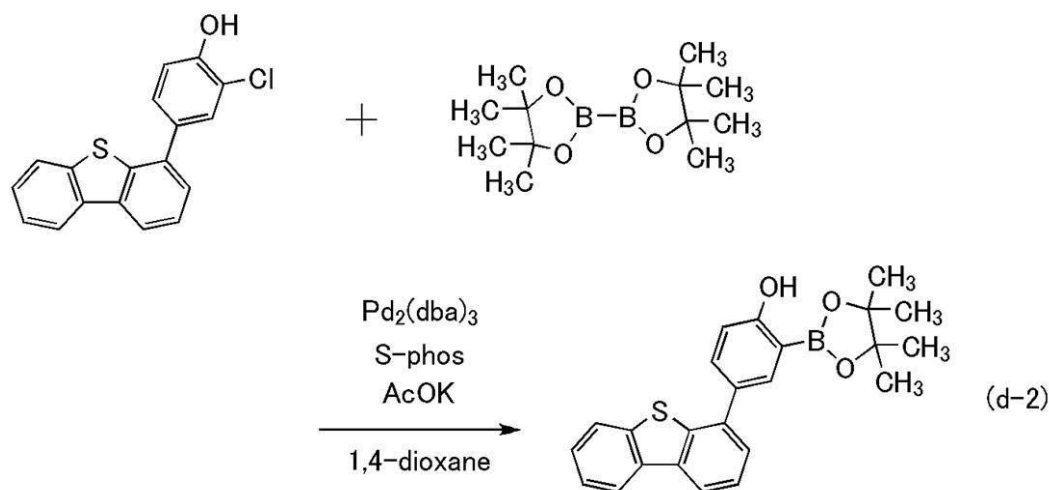
この混合物にトリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0)(略称：Pd₂(d

50

b a)₃) 18 mg を加え、100 で7時間攪拌した。所定時間経過後、この混合物に水を加えて酢酸エチルで抽出し、得られた有機層を水および飽和食塩水で洗浄して硫酸マグネシウムで乾燥した。この混合物を自然ろ過し、ろ液を濃縮して褐色油状物を得た。この油状物をトルエンに溶かし、ヘキサン：酢酸エチル = 5 : 1 を展開溶媒としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することにより、目的物である淡黄色固体を収量 0 . 20 g、収率 50 % で得た。ステップ 2 の合成スキームを下記式 (d - 2) に示す。

【 0 3 8 1 】

【 化 3 7 】



10

20

【 0 3 8 2 】

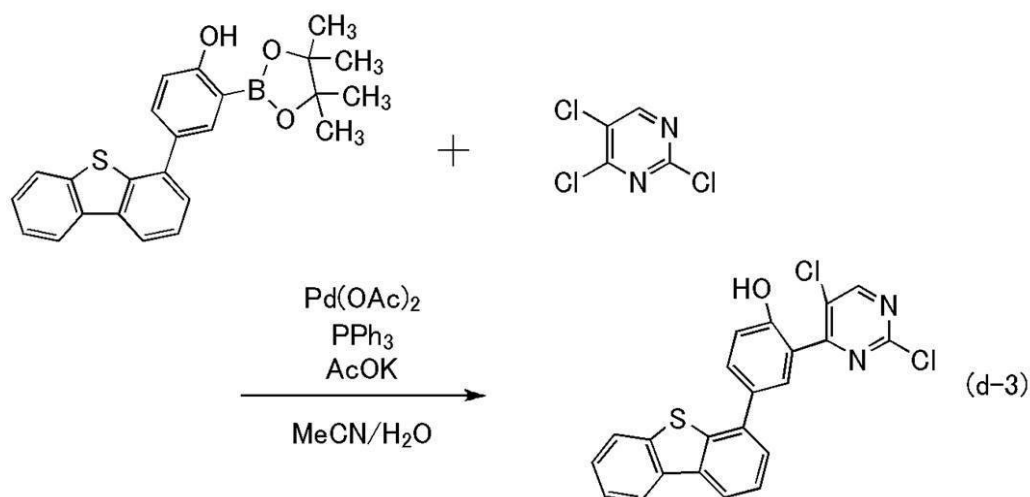
< ステップ 3 : 2 , 5 - ジクロロ - 4 - [2 - ヒドロキシ - 5 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) フェニル] ピリミジンの合成 >

次に、上記ステップ 2 で合成した 4 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) - 2 - (4 , 4 , 5 , 5 - テトラメチル - 1 , 3 , 2 - ジオキサボロラン - 2 - イル) フェノール 0 . 21 g と、トリフェニルホスフィン 13 mg と、酢酸カリウム 0 . 10 g と、アセトニトリル 1 . 9 mL と、水 0 . 48 mL を三口フラスコに加え、減圧下で攪拌することにより脱気して窒素置換した。この混合物に 2 , 4 , 5 - トリクロロピリミジン 62 μ L と、酢酸パラジウム (II) 7 . 0 mg を加え、室温で 18 時間攪拌した。所定時間経過後、この混合物に水を加えて酢酸エチルで抽出し、得られた有機層を水および飽和食塩水で洗浄して硫酸マグネシウムで乾燥した。この混合物を自然ろ過し、ろ液を濃縮して褐色油状物を得た。この油状物をトルエンに溶かし、ヘキサン：酢酸エチル = 5 : 1 を展開溶媒としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することにより、目的物である淡黄色固体を収量 0 . 12 g、収率 55 % で得た。ステップ 3 の合成スキームを下記式 (d - 3) に示す。

30

【 0 3 8 3 】

【化 3 8】



10

【 0 3 8 4】

<ステップ4：2 - クロロ - 8 - (ジベンゾチオフエン - 4 - イル) - [1] ベンゾフロ
[3 , 2 - d] ピリミジンの合成>

20

次に、上記ステップ3で合成した2, 5 - ジクロロ - 4 - [2 - ヒドロキシ - 5 - (ジベン
ゾチオフエン - 4 - イル) フェニル] ピリミジン 0.36 g と、ジメチルアセトアミド
(略称：DMAC) 34 mL を二口フラスコに加え、減圧下で攪拌することにより脱気し
て窒素置換した。この混合物にチオフエン - 2 - カルボン酸銅 (I) (略称：CuTC)
0.21 mg を加え、80 で9.5時間攪拌した。

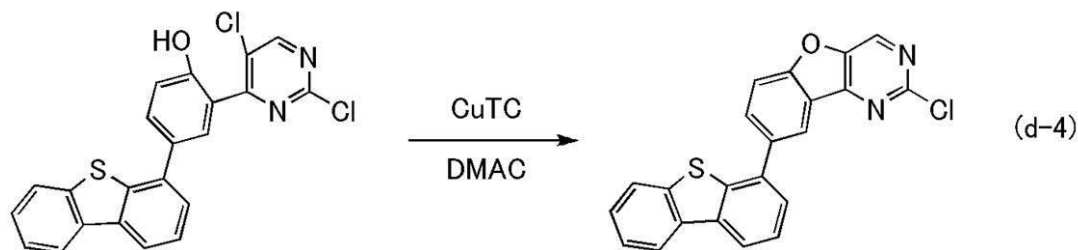
【 0 3 8 5】

所定時間経過後、食塩水を加えて酢酸エチルで抽出し、得られた有機層を水および飽和食
塩水で洗浄して硫酸マグネシウムで乾燥した。この混合物を自然ろ過し、ろ液を濃縮して
黄色固体を得た。この固体をトルエンに溶かし、ヘキサン：酢酸エチル = 5 : 1 を展開溶
媒としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製することにより、目的物である白色
固体を収量 0.16 g、収率 50 % で得た。ステップ4の合成スキームを下記式 (d - 4)

30

【 0 3 8 6】

【化 3 9】



40

【 0 3 8 7】

<ステップ5：8 - (ジベンゾチオフエン - 4 - イル) - 2 - [3 - (ジベンゾチオフエ
ン - 4 - イル) フェニル] - [1] ベンゾフロ [3 , 2 - d] ピリミジン (略称：8DB
t - 2mDBtPBfpm) の合成>

次に、上記ステップ4で合成した2 - クロロ - 8 - (ジベンゾチオフエン - 4 - イル) -
[1] ベンゾフロ [3 , 2 - d] ピリミジン 0.10 g と、3 - (ジベンゾチオフエン -

50

4 - イル)フェニルボロン酸 99 mg と、リン酸三カリウム 0.17 g と、diglyme 2.7 mL と、t - ブタノール 6.7 mg を三口フラスコに加え、減圧下で攪拌することにより脱気して窒素置換した。この混合物に酢酸パラジウム (II) 1.9 mg と、ジ(1 - アダマンチル) - n - ブチルホスフィン 6.0 mg を加え、窒素気流下にて 120 にて 7.5 時間攪拌し、次いで 140 にて 1.5 時間攪拌した。所定時間経過後、この混合物に水を加え、析出物を吸引ろ過し、エタノールを用いてろ物を洗浄した。

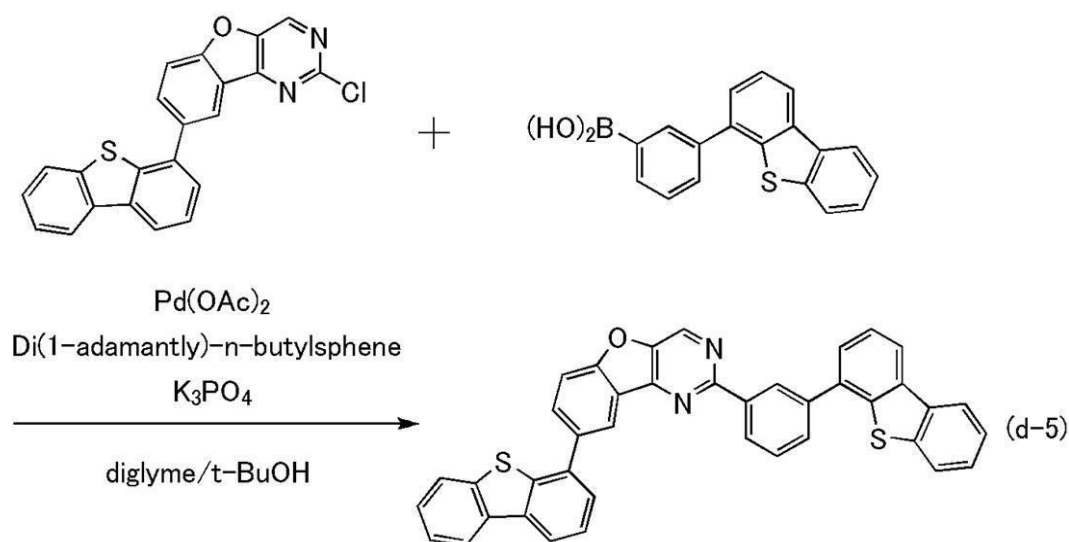
【0388】

得られたろ物に熱したトルエンを加えて溶かし、セライト、アルミナ、セライトの順に充填したろ過補助剤を用いてろ過した。得られた溶液の溶媒を濃縮乾固し、トルエンで再結晶することにより、本発明の 8 DB t - 2 m DB t P B f p m (略称) である白色固体を収量 0.040 g、収率 24 % で得た。ステップ 5 の合成スキームを下記式 (d - 5) に示す。

10

【0389】

【化 40】



20

30

【0390】

得られた白色固体の核磁気共鳴分光法 (^1H - NMR) による分析結果を下記に示す。この結果から、本実施例において、上述の構造式 (145) で表される有機化合物、8 DB t - 2 m DB t P B f p m が得られたことがわかった。

【0391】

^1H - NMR . (CDCl₃) : 7.42 - 7.52 (m, 4H)、7.59 (t, 3H)、7.64 (d, 1H)、7.69 (t, 1H)、7.82 - 7.85 (m, 3H)、7.90 (d, 1H)、8.12 (dd, 1H)、8.18 - 8.23 (m, 4H)、8.68 (dt, 1H)、8.70 (sd, 1H)、8.99 (st, 1H)、9.16 (s, 1H)。

40

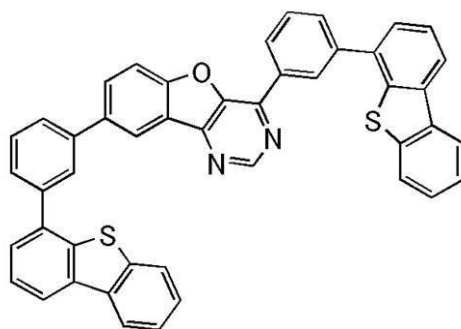
【0392】

< 参考合成例 >

本参考合成例では、実施例 5 で説明したベンゾフロピリミジン化合物である、4, 8 - ビス[3 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル)フェニル] - [1]ベンゾフロ[3, 2 - d]ピリミジン (略称: 4, 8 m DB t P 2 B f p m) (構造式 (200)) の合成方法について説明する。なお、4, 8 m DB t P 2 B f p m の構造を以下に示す。

【0393】

【化 4 1】

4,8mDBtP2Bfpm
(200)

10

【0394】

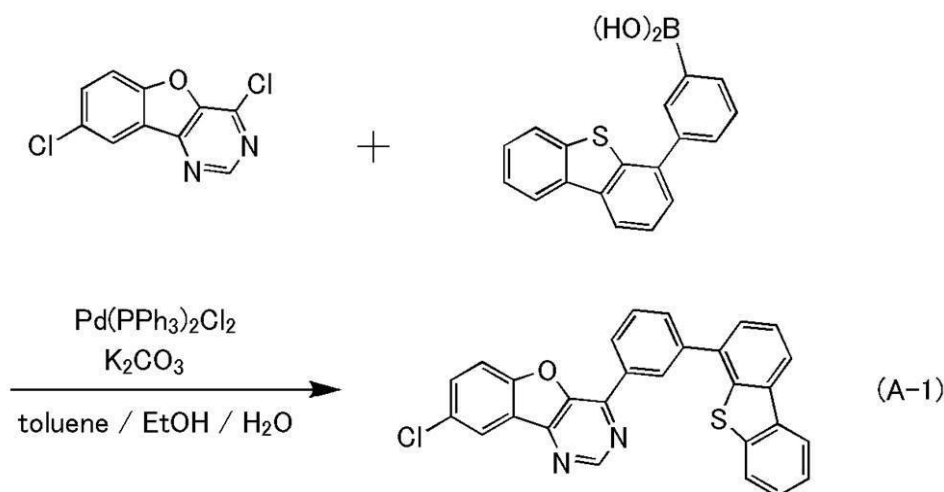
ステップ1：8-クロロ-4-[3-(ジベンゾチオフェン-4-イル)フェニル]-[1]ベンゾフロ[3,2-d]ピリミジンの合成

まず始めに、1.0 gの4,8-ジクロロ[1]ベンゾフロ[3,2-d]ピリミジンと、2.6 gの3-(ジベンゾチオフェン-4-イル)フェニル硼酸と、1.2 gの炭酸カリウムと、42 mLのトルエンと、4 mLのエタノールと、4 mLの水とを、還流管を付けた三口フラスコに入れ、フラスコ内を窒素で置換し、0.29 gのビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド(略称：Pd(PPh₃)₂Cl₂)を加え、窒素気流下にて80℃で8時間加熱した。得られた反応物をろ過し、水とエタノールにて洗浄することにより、目的物(灰色固体)を1.9 g、収率96%で得た。ステップ1の合成スキームを下記式(A-1)に示す。

20

【0395】

【化 4 2】



30

40

【0396】

なお、上記ステップ1で得られた灰色固体の核磁気共鳴分光法(¹H-NMR)による分析結果を下記に示す。これにより、8-クロロ-4-[3-(ジベンゾチオフェン-4-イル)フェニル]-[1]ベンゾフロ[3,2-d]ピリミジンが得られたことがわかった。

【0397】

¹H-NMR. (TCE-d₂) : 7.48 - 7.52 (m, 2H)、7.63 - 7.

50

7.1 (m, 4H)、7.77 - 7.80 (t, 1H)、7.85 (d, 1H)、7.96 (d, 1H)、8.22 - 8.23 (m, 2H)、8.28 (s, 1H)、8.65 (d, 1H)、8.96 (s, 1H)、9.29 (s, 1H)。

【0398】

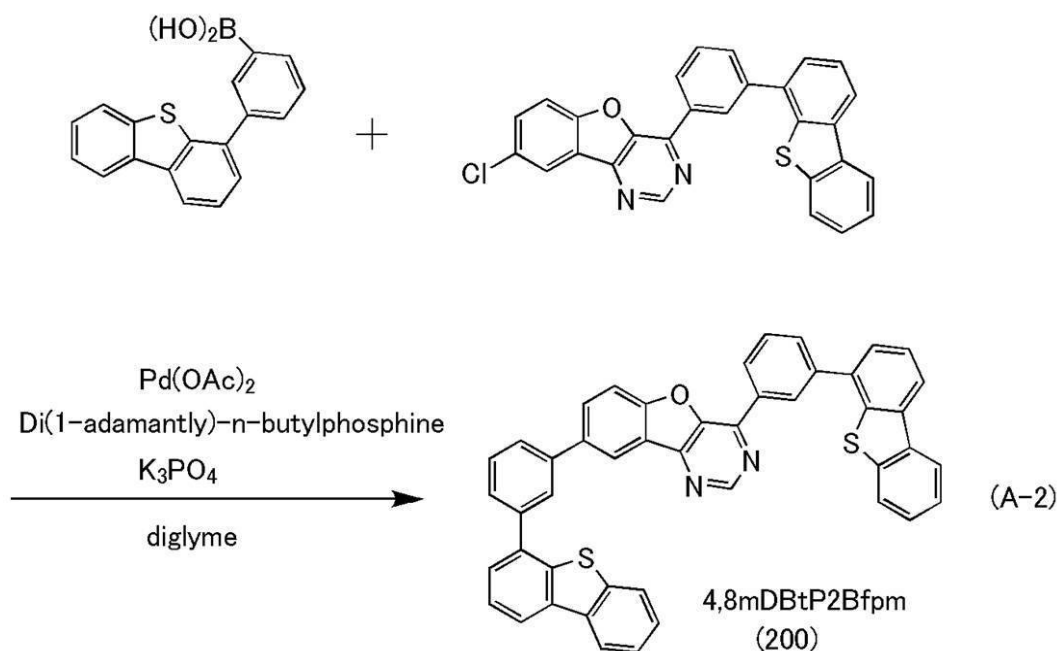
ステップ2：4, 8-ビス[3-(ジベンゾチオフェン-4-イル)フェニル]-[1]ベンゾフロ[3, 2-d]ピリミジン(略称：4, 8mDBtP2Bfpm)の合成
次に、上記ステップ1で合成した8-クロロ-4-[3-(ジベンゾチオフェン-4-イル)フェニル]-[1]ベンゾフロ[3, 2-d]ピリミジンのうち1.7gと、1.1gの3-(ジベンゾチオフェン-4-イル)フェニルボロン酸と、1.6gのリン酸カリウムと、60mLのジエチレングリコールジメチルエーテル(略称：diglyme)とをフラスコに入れ、フラスコ内を窒素置換し、90mgの酢酸パラジウムと、0.29gのジ(1-アダマンチル)-n-ブチルホスフィンとを加え、窒素気流下にて160にて12時間加熱した。得られた反応物をろ過し、水、次いでエタノールにて洗浄し、得られたる物をセライト、酸化アルミニウム、セライトの順に充填したろ過補助剤に通した。得られた溶液を再結晶することにより4, 8mDBtP2Bfpmを1.2g、収率47%で得た(黄白色固体)。この1.2gの黄白色固体を、トレインサブレーション法により昇華精製した。昇華精製条件は、圧力を2.6Paとし、アルゴンガスを流量5mL/minで流しながら、330で固体を加熱した。昇華精製後、目的物の黄白色固体を0.8g、回収率67%で得た。ステップ2の合成スキームを下記式(A-2)に示す。

10

20

【0399】

【化43】



30

40

【0400】

なお、上記ステップ2で得られた黄白色固体の核磁気共鳴分光法(^1H -NMR)による分析結果を下記に示す。これにより、4, 8mDBtP2Bfpmが得られたことがわかった。

【0401】

^1H -NMR. (TCE- d_2): 7.48 - 7.52 (t, 4H)、7.60 (s, 1H)、7.61 (d, 1H)、7.65 - 7.69 (m, 3H)、7.79 - 7.83 (m, 3H)、7.86 - 7.89 (m, 3H)、8.00 (d, 1H)、8.07 (s, 1H)、8.10 (d, 1H)、8.19 - 8.24 (m, 4H)、8.69 - 8.72 (t, 2H)、9.02 (s, 1H)、9.32 (s, 1H)。

50

【実施例 7】

【0402】

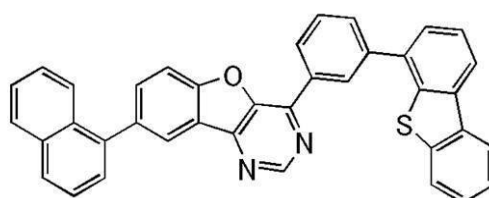
合成例 5

本合成例では、実施の形態 1 の構造式 (103) で表される本発明の一態様である有機化合物、4-[3-(ジベンゾチオフェン-4-イル)フェニル]-8-(ナフタレン-1-イル)-[1]ベンゾフロ[3,2-d]ピリミジン(略称: 8 N-4mDBtPBfpm)の合成方法について説明する。8 N-4mDBtPBfpmの構造式を下に示す。

【0403】

【化 4 4】

10



8 N-4mDBtPBfpm
(103)

20

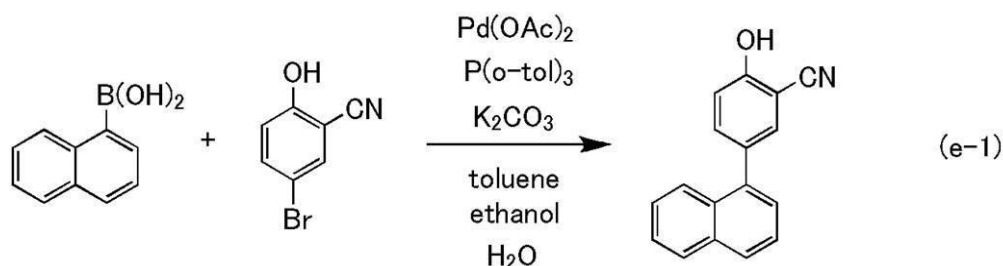
【0404】

<ステップ 1: 2-ヒドロキシ-5-(ナフタレン-1-イル)ベンゾニトリルの合成>
まず始めに、6-ブロモ-2-ヒドロキシベンゾニトリル 2.97 g、ナフタレン-1-ボロン酸 2.8 g、トリス(2-メチルフェニル)ホスフィン(P(o-tol)₃) 0.184 g、炭酸カリウム 4.15 g、トルエン 56 mL、エタノール 19 mL、水 15 mL を三口フラスコに加え、減圧下で攪拌することにより脱気して窒素置換した。この混合物に酢酸パラジウム(II)(Pd(OAc)₂) 69.3 mg を加え、100℃で 17.5 時間攪拌した。得られた反応物に水を加えて酢酸エチルで抽出し、得られた有機層を水および飽和食塩水で洗浄して硫酸マグネシウムで乾燥した。この混合物を自然ろ過し、ろ液を濃縮して淡褐色固体を得た。この固体を熱したトルエンと酢酸エチルの混合溶媒に溶かし、展開溶媒をヘキサン:酢酸エチル=3:1 から徐々にヘキサンの量を減らし、最終的にヘキサン:酢酸エチル=1:1 としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製したところ、目的物を収量 3.43 g (収率 93%、淡黄色固体) で得た。ステップ 1 の合成スキームを下記式 (e-1) に示す。

30

【0405】

【化 4 5】



40

【0406】

<ステップ 2: 3-アミノ-5-(ナフタレン-1-イル)ベンゾ[b]フラン-2-カルボン酸エチルの合成>

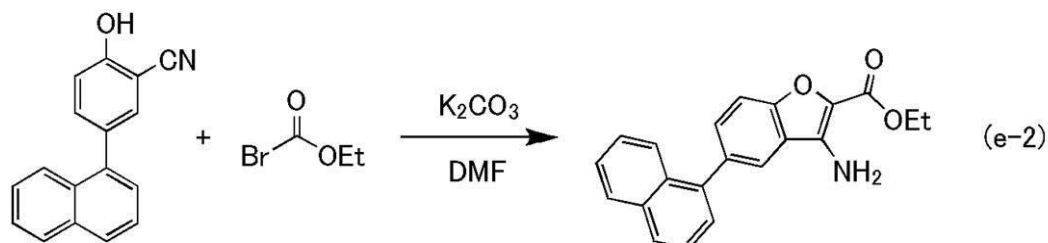
次に、上記ステップ 1 で合成した 2-ヒドロキシ-5-(ナフタレン-1-イル)ベンゾ

50

ニトリル 3.43 g、炭酸カリウム 3.87 g を三口フラスコに入れて窒素置換した。この混合物にブromo酢酸エチル 3.51 g、N, N - ジメチルホルムアミド (DMF) 18 mL を加え、100 で5時間攪拌した。得られた反応物を氷水に入れて1時間攪拌し、吸引ろ過により目的物を濃褐色のろ物として4.97 g 得た。ステップ2の合成スキームを下記式 (e - 2) に示す。

【0407】

【化46】



10

【0408】

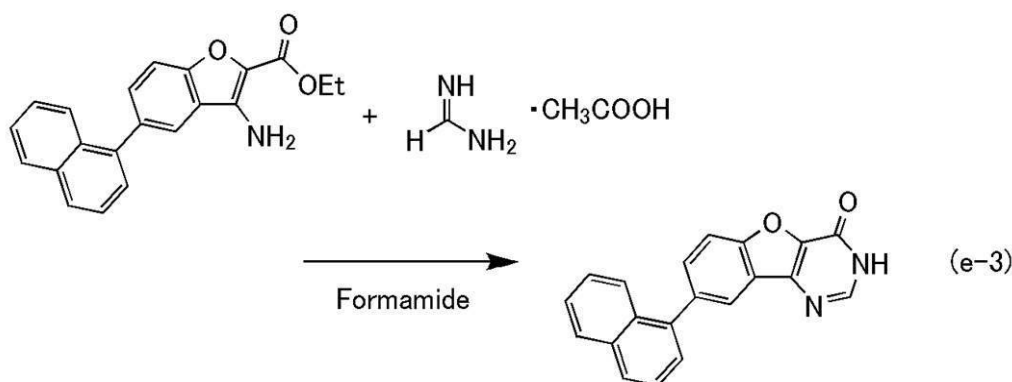
<ステップ3：8 - (ナフタレン - 1 - イル) - [1] ベンゾフロ [3, 2 - d] ピリミジン - 4 (3 H) - オンの合成 >

20

ステップ2で得られた濃褐色物 4.97 g、ホルムアミド 20 mL をナスフラスコに入れて150 で加熱した。この混合物にホルムアミジン酢酸塩 2.92 g を加え、160 で6.5時間攪拌した。得られた反応物に水を加えて吸引ろ過し、ろ物を得た。このろ物を酢酸エチル、ヘキサンで洗浄し、目的物を収量 2.98 g (ステップ2からステップ3の収率 68 %、薄茶色固体) で得た。ステップ3の合成スキームを下記式 (e - 3) に示す。

【0409】

【化47】



30

40

【0410】

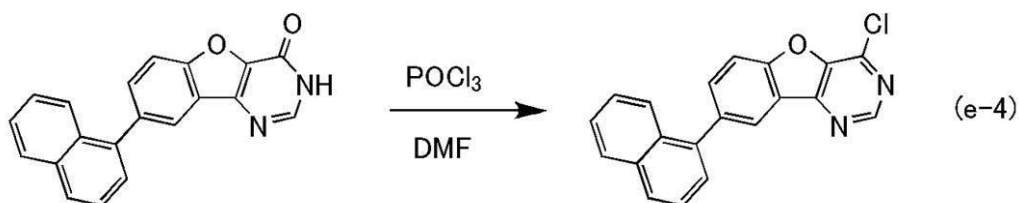
<ステップ4：4 - クロロ - 8 - (ナフタレン - 1 - イル) - [1] ベンゾフロ [3, 2 - d] ピリミジンの合成 >

ステップ3で合成した 8 - (ナフタレン - 1 - イル) - [1] ベンゾフロ [3, 2 - d] ピリミジン - 4 (3 H) - オン 2.98 g と、N, N - ジメチルホルムアミド (DMF) 74 μL を三口フラスコへ入れ、攪拌した。この混合物に塩化ホスホリル 31.8 g を加え、90 で11時間攪拌した。得られた反応物から塩化ホスホリルを留去し、この混合物を氷水へ入れて、飽和重曹水を用いて中和し、1時間攪拌した。この混合物を吸引ろ過し、ろ物をエタノールで洗浄したところ、目的物を収量 3.12 g (収率 99 %、薄茶色固体) で得た。ステップ4の合成スキームを下記式 (e - 4) に示す。

50

【 0 4 1 1 】

【 化 4 8 】



10

【 0 4 1 2 】

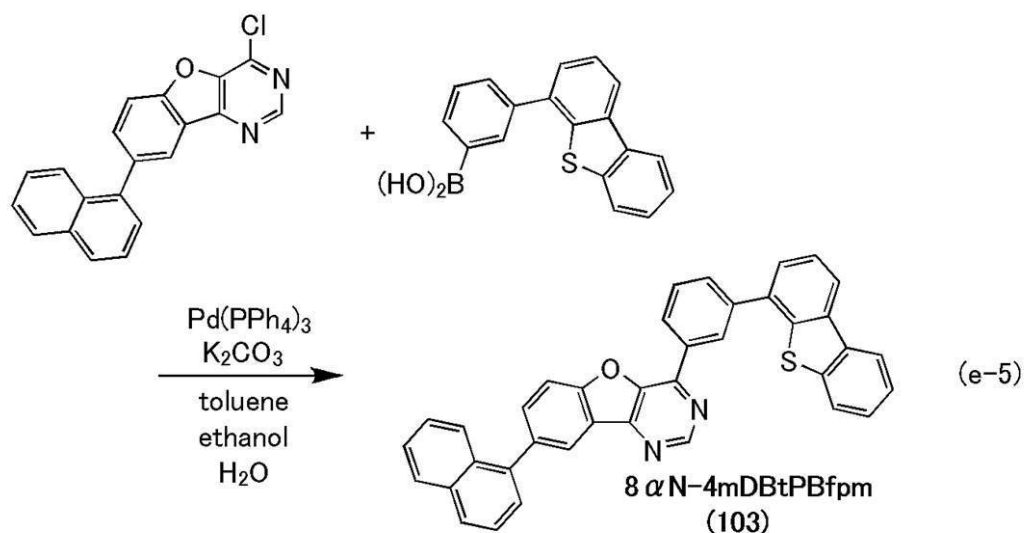
<ステップ5：8 N - 4 m D B t P B f p m の合成>

4 - クロロ - 8 - (ナフタレン - 1 - イル) - [1] ベンゾフロ [3 , 2 - d] ピリミジン 3 . 1 2 g、3 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) フェニルボロン酸 3 . 4 4 g、炭酸カリウム 2 . 6 1 g、トルエン 3 6 m L、エタノール 1 2 m L、水 9 . 5 m L を三口フラスコへ入れ、減圧下で攪拌することにより脱気して窒素置換した。この混合物にテトラキストリフェニルホスフィンパラジウム (I I) ($\text{Pd}(\text{PPh}_4)_2$) 0 . 3 2 4 g を加えて 1 0 0 ° で 2 7 . 5 時間攪拌した。得られた反応物に水を加え、吸引ろ過した。得られたる物を水及び酢酸エチルで洗浄し、熱したトルエンに溶かしてセライト、アルミナ、セライトの順に充填したろ過補助剤に通した。得られた溶液を濃縮、乾固し、トルエンにて再結晶することにより目的物を収量 3 . 0 g (収率 5 7 %、白色固体) で得た。この白色固体 3 . 0 0 g を、トレインサブレーション法により昇華精製した。昇華精製条件は、圧力 3 . 7 P a、アルゴンガスを流量 1 5 m L / m i n で流しながら、2 9 0 ° で固体を加熱した。昇華精製後、目的物の白色固体を 1 . 8 6 g、回収率 6 2 % で得た。ステップ5の合成スキームを下記式 (e - 5) に示す。

20

【 0 4 1 3 】

【 化 4 9 】



30

40

【 0 4 1 4 】

なお、上記ステップ5で得られた白色固体の核磁気共鳴分光法 (^1H - N M R) による分析結果を下記に示す。また、 ^1H - N M R チャートを図 3 1 に示す。これにより、8 N - 4 m D B t P B f p m が得られたことがわかった。

【 0 4 1 5 】

^1H - N M R . (CDCl_3) : 7 . 4 5 - 7 . 5 5 (m , 5 H) , 7 . 5 9 (t , 1 H) , 7 . 6 3 - 7 . 6 7 (m , 2 H) , 7 . 8 2 (t , 1 H) , 7 . 8 5 - 8 . 0 0 (

50

m, 7H), 8.24 (d, 2H), 8.44 (s, 1H), 8.50 (d, 1H), 9.08 (s, 1H), 9.32 (s, 1H)。

【実施例 8】

【0416】

合成例 6

本合成例では、実施の形態 1 の構造式 (116) で表される本発明の一態様である有機化合物、4-[3'-(ジベンゾチオフェン-4-イル)ビフェニル-3-イル]-8-(ナフタレン-2-イル)-[1]ベンゾフロ[3,2-d]ピリミジン(略称: 8 N-4mDBtBPBfpm)の合成方法について説明する。8 N-4mDBtBPBfpm の構造式を下に示す。

10

【0417】

【化 50】



8β N-4mDBtBPBfpm
(116)

20

【0418】

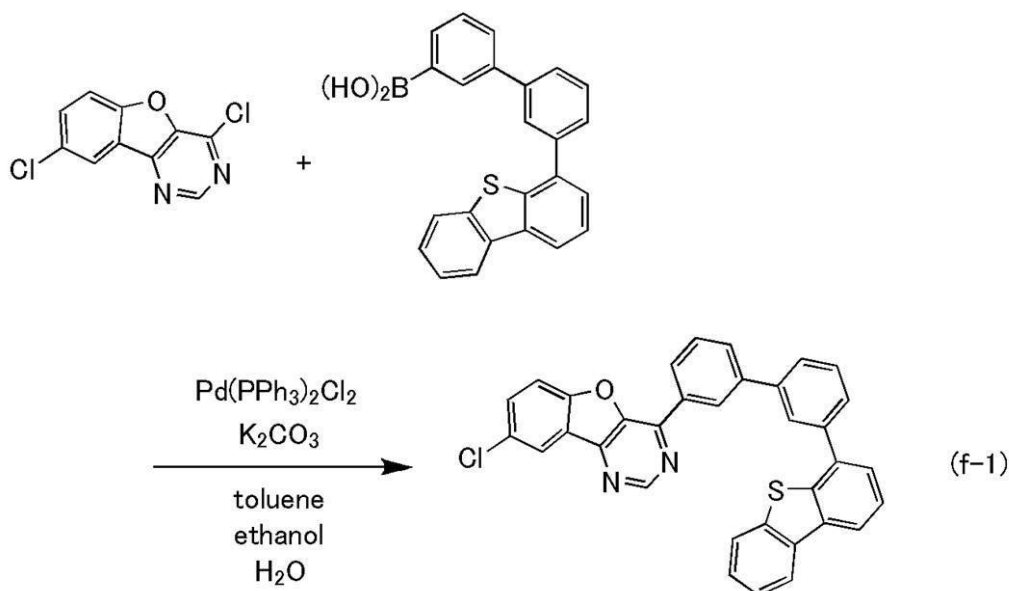
<ステップ 1: 8-クロロ-4-[3'-(ジベンゾチオフェン-4-イル)ビフェニル-3-イル]-[1]ベンゾフロ[3,2-d]ピリミジンの合成>

4,8-ジクロロ[1]ベンゾフロ[3,2-d]ピリミジン 7.65 g、3'-(ジベンゾチオフェン-4-イル)ビフェニル-3-ボロン酸 17.0 g、炭酸カリウム 12.4 g、トルエン 360 mL、エタノール 36 mL、水 45 mL を三口フラスコに入れ、減圧下撹拌することで脱気し、窒素置換した。この混合物にビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド(略称: Pd(PPh₃)₂Cl₂) 2.25 g を加え、80 で 6 時間撹拌した。得られた反応物に水を加えて吸引ろ過し、得られたる物を水およびエタノールで洗浄した。このろ物を熱したトルエンで溶解し、セライト、アルミナ、セライトの順に充填したろ過補助剤に通した。得られた溶液を濃縮、乾固し、トルエンにて再結晶することにより目的物を収量 14.7 g (収率 85%、淡黄色固体) で得た。ステップ 1 の合成スキームを下記式 (f-1) に示す。

30

【0419】

【化 5 1】



10

20

【0420】

<ステップ2：8 N - 4 m D B t B P B f p m の合成>

次に、上記ステップ1で合成した8 - クロロ - 4 - [3 ' - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) ピフェニル - 3 - イル] - [1] ベンゾフロ [3 , 2 - d] ピリミジン 7 . 0 1 g、ナフタレン - 2 - ボロン酸 3 . 1 3 g、フッ化セシウム 5 . 9 3 g、メシチレン 1 3 0 m L を三口フラスコに入れ、減圧下撹拌することで脱気して、窒素置換した。この混合物にトリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) ($Pd_2(dba)_3$) 0 . 3 5 8 g、2 ' - (ジシクロヘキシルホスフィノ) アセトフェノンエチレンケタール 0 . 2 8 3 g を加え、1 2 0 °C で 1 7 . 5 時間撹拌した。この混合物にトリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) 0 . 3 5 8 g、2 ' - (ジシクロヘキシルホスフィノ) アセトフェノンエチレンケタール 0 . 2 8 2 g を加え、1 2 0 °C で 1 6 時間撹拌した。

30

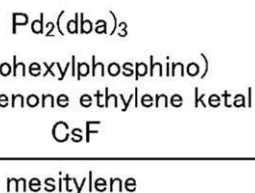
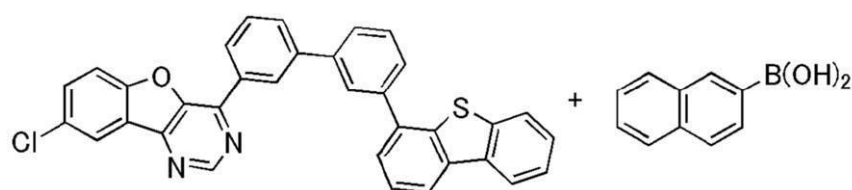
【0421】

得られた反応物に水を加えて吸引ろ過し、得られたろ物を水および酢酸エチルで洗浄した。このろ物を熱したトルエンで溶解し、セライト、アルミナ、セライトの順に充填したろ過補助剤に通した。得られた溶液を濃縮、乾固し、トルエンにて再結晶することにより本発明の 8 N - 4 m D B t B P B f p m (略称) を 6 . 7 5 g 得た (収率 : 8 2 %、白色固体)。この白色固体 2 . 4 7 g を、トレインサブレーション法により昇華精製した。昇華精製条件は、圧力 3 . 7 P a、アルゴンガスを流量 1 5 m L / m i n で流しながら、3 4 0 °C で固体を加熱した。昇華精製後、目的物の淡茶色固体を 2 . 2 0 g、回収率 8 9 % で得た。ステップ2の合成スキームを下記式 (f - 2) に示す。

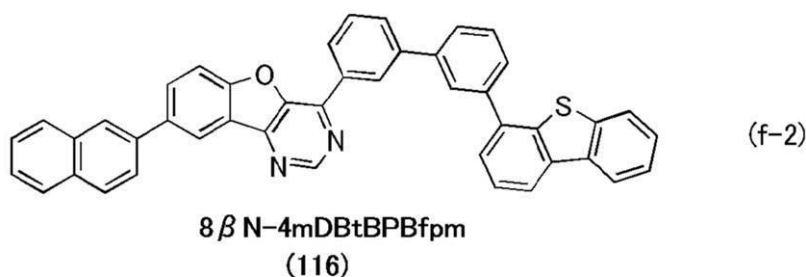
40

【0422】

【化 5 2】



10



20

【0 4 2 3】

なお、上記ステップ 2 で得られた淡茶色固体の核磁気共鳴分光法 (^1H -NMR) による分析結果を下記に示す。また、 ^1H -NMR チャートを図 3 2 に示す。これにより、8 N - 4 m D B t B P B f p m が得られたことがわかった。

【0 4 2 4】

^1H -NMR. (CDCl_3): 7.46 - 7.57 (m, 4H), 7.61 - 7.63 (m, 2H), 7.70 (t, 1H), 7.76 (t, 1H), 7.79 - 7.83 (m, 3H), 7.86 (d, 2H), 7.91 - 7.95 (m, 3H), 8.00 (d, 1H), 8.05 (d, 1H), 8.18 (d, 2H), 8.21 - 8.24 (m, 2H), 8.65 - 8.66 (m, 2H), 8.99 (s, 1H), 9.33 (s, 1H)。

30

【実施例 9】

【0 4 2 5】

本実施例では、本発明の一態様である発光素子として、実施例 7 で説明した、8 N - 4 m D B t P B f p m (構造式 (103)) を発光層に用いた発光素子 6、実施例 8 で説明した、8 N - 4 m D B t B P B f p m (構造式 (116)) を発光層に用いた発光素子 7 をそれぞれ作製し、その特性について測定した結果を示す。

40

【0 4 2 6】

なお、本実施例で用いる発光素子の素子構造は、実施例 4 で示した図 1 8 と同様の構造であるが、素子構造を構成する各層の具体的な構成については表 5 に示す通りである。また、本実施例で用いる材料の化学式を以下に示す。

【0 4 2 7】

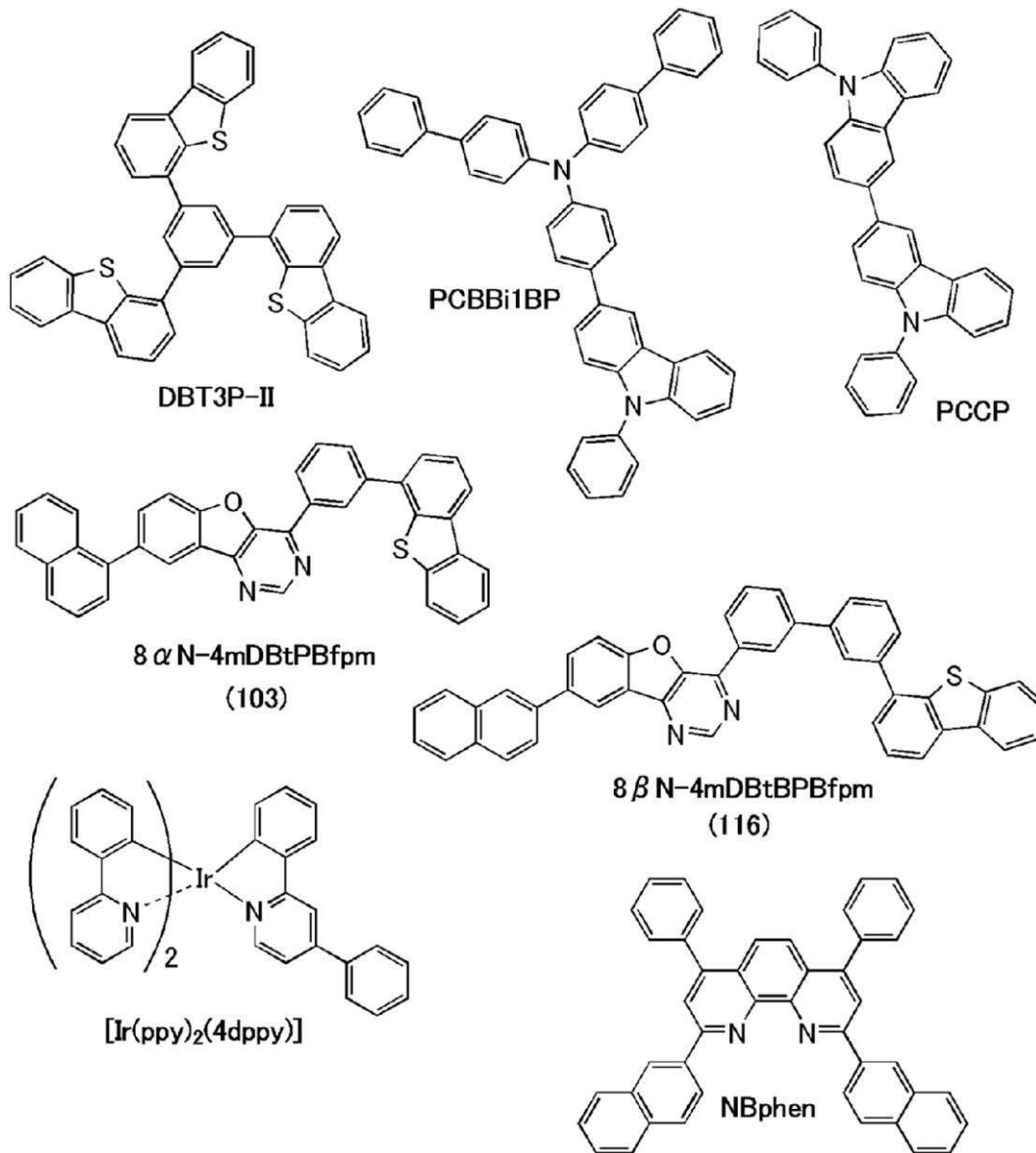
【表 5】

	第1 の電極	正孔 注入層	正孔 輸送層	発光層	電子 輸送層		電子 注入層	第2 の電極
発光素子 6	ITO (70nm)	DBT3P-II:MoO _x (2:1 50nm)	PCBBi1BP (20nm)	*	8 α N- 4mDBtPBfpm (20nm)	NBphen (15nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)
発光素子 7	ITO (70nm)	DBT3P-II:MoO _x (2:1 50nm)	PCBBi1BP (20nm)	**	8 β N- 4mDBtBPBfpm (20nm)	NBphen (15nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)

* 8 α N-4mDBtPBfpm:PCCP:[Ir(ppy)₂(4dppy)] (0.6:0.4:0.1 40nm)** 8 β N-4mDBtBPBfpm:PCCP:[Ir(ppy)₂(4dppy)] (0.6:0.4:0.1 40nm)

【 0 4 2 8 】

【 化 5 3 】



【 0 4 2 9 】

発光素子の動作特性

作製した発光素子 6 および発光素子 7 の動作特性について測定した。なお、測定は室温で行った。また、結果を図 3 3 ~ 図 3 6 に示す。

【 0 4 3 0 】

また、 1000 cd/m^2 付近における各発光素子の主な初期特性値を以下の表 6 に示す。

【 0 4 3 1 】

【表 6】

	電圧 (V)	電流 (mA)	電流密度 (mA/cm ²)	色度(x,y)	輝度 (cd/m ²)	電流効率 (cd/A)	パワー効率 (lm/W)	外部量子効率 (%)
発光素子 6	3.6	0.046	1.2	(0.44,0.55)	960	83	72	24
発光素子 7	3.6	0.055	1.4	(0.45,0.54)	1100	82	71	24

10

【 0 4 3 2 】

上記結果から、本実施例で作製した各発光素子は、良好な素子特性を示すことが分かる。

【 0 4 3 3 】

また、各発光素子に 2.5 mA/cm^2 の電流密度で電流を流した際の発光スペクトルを、図 3 7 に示す。図 3 7 に示す通り、各発光素子の発光スペクトルは、いずれも 558 nm 付近にピークを有しており、発光層 9 1 3 に含まれる、 $[\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{dppy})]$ の発光に由来していることが示唆される。

【 0 4 3 4 】

次に、発光素子 6 および発光素子 7 に対する信頼性試験を行った。信頼性試験の結果を図 3 8 に示す。図 3 8 において、縦軸は初期輝度を 100% とした時の規格化輝度 (%) を示し、横軸は素子の駆動時間 (h) を示す。なお、信頼性試験は、 2 mA における定電流駆動試験を行った。

20

30

【 0 4 3 5 】

信頼性試験の結果より、本発明の一態様である発光素子 6 および発光素子 7 は、いずれも信頼性において優れた特性を示すことがわかった。このことから、本発明の一態様である有機化合物、 8-N-4mDBtPBfp m (構造式 (103)) および 8-N-4mDBtBPBfp m (構造式 (116)) を用いることは発光素子の長寿命化に関して有用であると言える。また、本実施例の結果から、ベンゾフロピリミジン骨格またはベンゾチエノピリミジン骨格のベンゼン側に、縮合環を直接結合させることが、素子の長寿命化に直結していることが分かる。

【実施例 10】

【 0 4 3 6 】

本実施例では、本発明の一態様である発光素子として、実施例 6 で説明した、 8DBt-2mDBtPBfp m (構造式 (145)) を発光層に用いた発光素子 8 を作製し、その特性について測定した結果を示す。

【 0 4 3 7 】

なお、本実施例で用いる発光素子の素子構造は、実施例 4 で示した図 1 8 と同様の構造であるが、素子構造を構成する各層の具体的な構成については表 7 に示す通りである。また、本実施例で用いる材料の化学式を以下に示す。

【 0 4 3 8 】

40

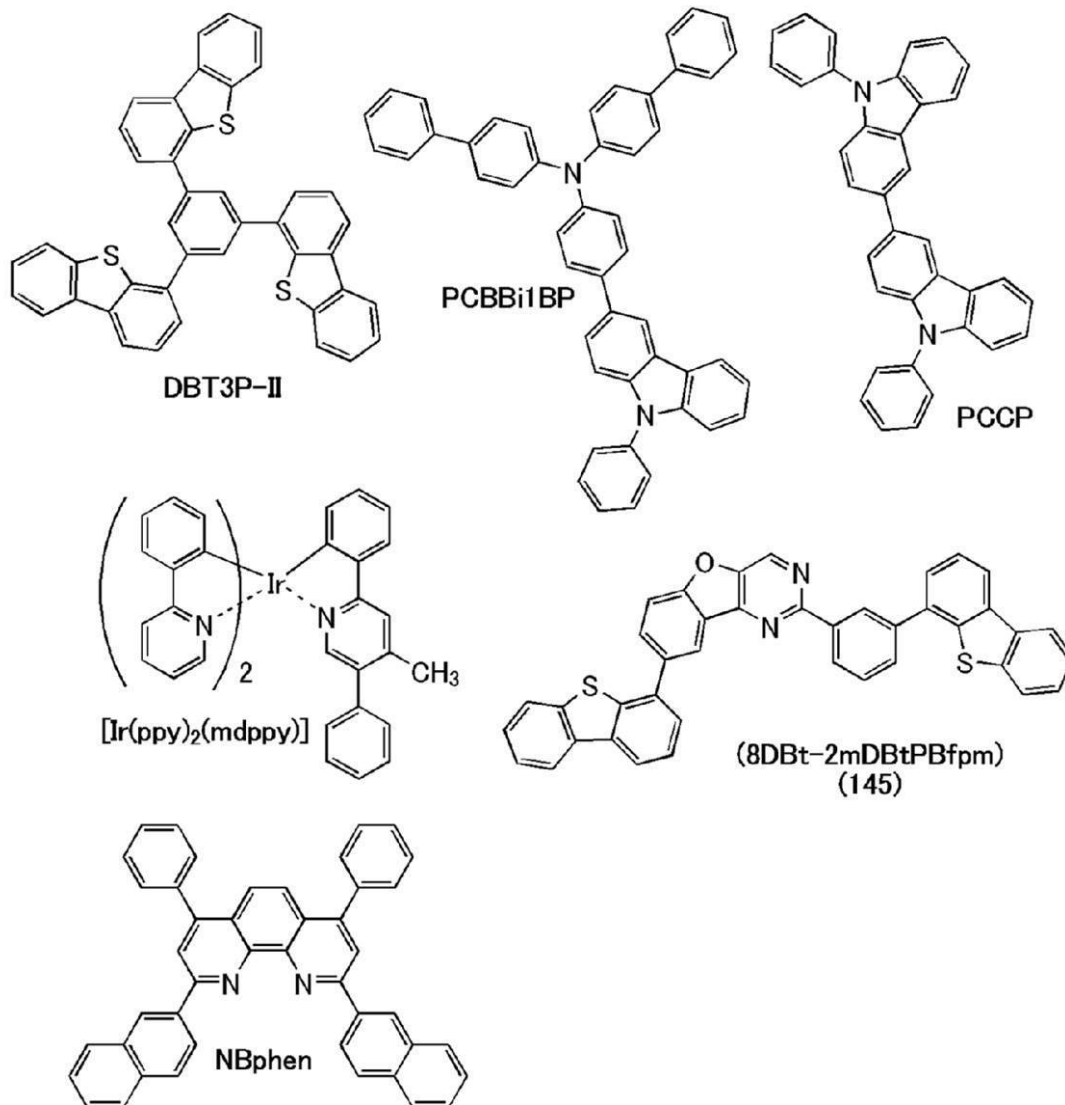
【表 7】

	第1 の電極	正孔 注入層	正孔 輸送層	発光層	電子 輸送層		電子 注入層	第2 の電極
発光素子 8	ITO (70nm)	DBT3P-II:MoO _x (2:1 45nm)	PCBBi1BP (20nm)	*	8DBt- 2mDBtPBfpm (20nm)	NBphen (10nm)	LiF (1nm)	Al (200nm)

* 8DBt-2mDBtPBfpm:PCCP:[Ir(ppy)₂(mdppy)] (0.7:0.3:0.1 40nm)

【0439】

【化54】



【0440】

発光素子の動作特性

作製した発光素子8の動作特性について測定した。なお、測定は室温で行った。結果を図39～図42に示す。

【0441】

また、1000 cd/m²付近における発光素子8の主な初期特性値を以下の表8に示す。

10

20

30

40

50

【 0 4 4 2 】

【 表 8 】

	電圧 (V)	電流 (mA)	電流密度 (mA/cm ²)	色度(x,y)	輝度 (cd/m ²)	電流効率 (cd/A)	パワー効率 (lm/W)	外部量子効率 (%)
発光素子 8	3.3	0.047	1.2	(0.34,0.63)	1100	92	87	26

10

【 0 4 4 3 】

上記結果から、本実施例で作製した発光素子 8 は、良好な素子特性を示すことが分かる。

【 0 4 4 4 】

また、発光素子 8 に 2.5 mA/cm^2 の電流密度で電流を流した際の発光スペクトルを、図 4 3 に示す。図 4 3 に示す通り、発光素子 8 の発光スペクトルは、 524 nm 付近にピークを有しており、発光層 9 1 3 に含まれる、 $[\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{mdppy})]$ の発光に由来していることが示唆される。

【 実施例 1 1 】

【 0 4 4 5 】

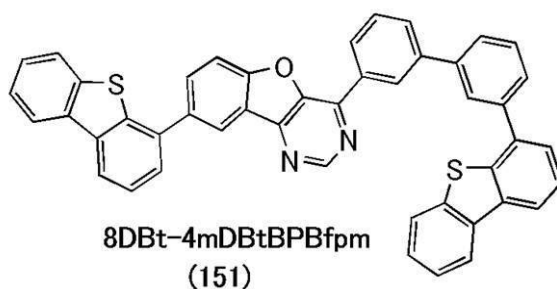
合成例 7

20

本合成例では、本発明の一態様である有機化合物、8 - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) - 4 - [3' - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) ビフェニル - 3 - イル] - [1] ベンゾフロ[3, 2 - d]ピリミジン (略称: 8DBt-4mDBtBPBfpm) (構造式 (151)) の合成方法について説明する。8DBt-4mDBtBPBfpm の構造式を下に示す。

【 0 4 4 6 】

【 化 5 5 】



30

【 0 4 4 7 】

8 - クロロ - 4 - [3' - (ジベンゾチオフェン - 4 - イル) ビフェニル - 3 - イル] - [1] ベンゾフロ[3, 2 - d]ピリミジン 7.00 g 、ジベンゾチオフェン - 4 - ボロン酸 3.56 g 、2' - (ジシクロヘキシルホスフィノ) アセトフェノンエチレンケタール 0.281 g 、フッ化セシウム 6.00 g 、メシチレン 65 mL を三口フラスコに入れ、減圧下攪拌することで脱気して、窒素置換した。この混合物にトリス (ジベンジリデン アセトン) ジパラジウム (0) ($\text{Pd}_2(\text{dba})_3$) 0.359 g を加え、 120°C で 1 時間攪拌した。この混合物に脱気したメシチレン 65 mL を加え、 120°C で 9.5 時間攪拌した。さらにこの混合物に脱気したメシチレン 30 mL を加えて、 120°C で 7 時間攪拌した。この混合物に $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.360 g 、2' - (ジシクロヘキシルホスフィノ) アセトフェノンエチレンケタール 0.284 g を加え、 130°C で 15 時間、次いで 140°C で 6 時間攪拌した。この混合物にジベンゾチオフェン - 4 - ボロン酸

40

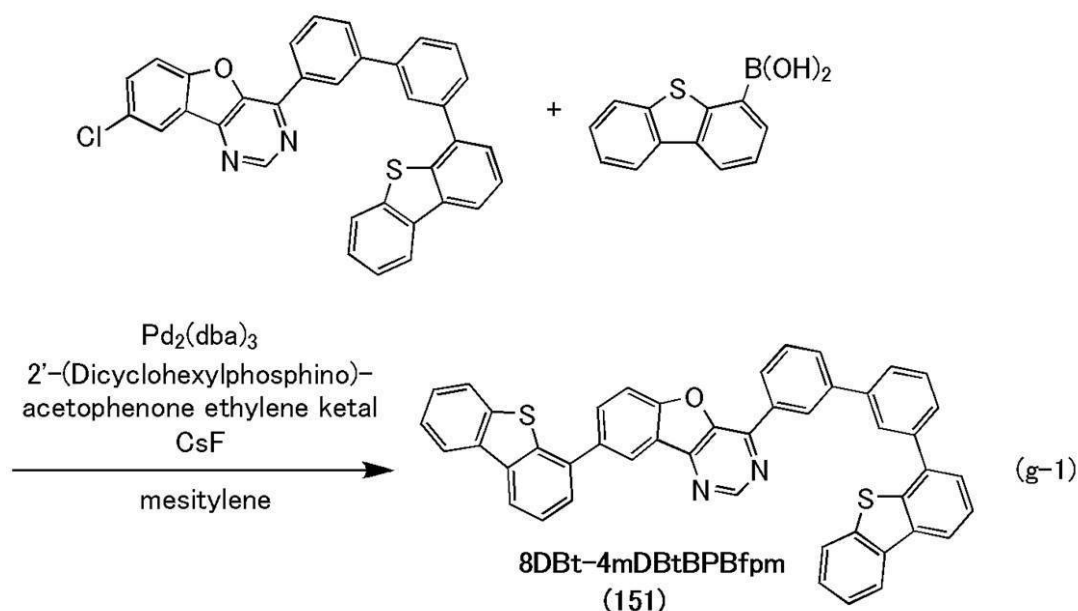
50

2.37 g、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.359 g、2'-(ジシクロヘキシルホスフィノ)アセトフェノンエチレンケタル 0.283 g を加え、140 で40時間攪拌した。得られた反応物に水を加えて吸引ろ過し、得られたる物を水および酢酸エチルで洗浄した。このろ物を熱したトルエンで溶解し、セライト、アルミナ、セライトの順に充填したろ過補助剤に通した。得られた溶液を濃縮、乾固し、トルエンにて再結晶することにより 8DBt-4mDBtBPBfpm (略称) を 5.56 g 得た (収率: 62%、白色固体)。この白色固体 1.95 g を、トレインサブレーション法により昇華精製した。昇華精製条件は、圧力 2.8 Pa、アルゴンガスを流量 15 mL/min で流しながら、355 で固体を加熱した。昇華精製後、目的物の淡茶色固体を 1.46 g、回収率 75% で得た。合成スキームを下記式 (g-1) に示す。

10

【0448】

【化56】



20

30

【0449】

なお、上記で得られた淡茶色固体の核磁気共鳴分光法 (^1H -NMR) による分析結果を下記に示す。これにより、8DBt-4mDBtBPBfpm が得られたことがわかった。

【0450】

^1H -NMR. (CDCl_3): 7.47 - 7.51 (m, 4H), 7.59 - 7.65 (m, 4H), 7.70 (t, 1H), 7.76 - 7.87 (m, 6H), 7.95 (d, 1H), 8.09 (d, 1H), 8.21 - 8.24 (m, 5H), 8.66 - 8.68 (m, 2H), 9.01 (s, 1H), 9.34 (s, 1H)。

【符号の説明】

40

【0451】

101 第1の電極
 102 第2の電極
 103 EL層
 103a、103b、103c EL層
 104 電荷発生層
 111、111a、111b 正孔注入層
 112、112a、112b 正孔輸送層
 113、113a、113b、113c 発光層
 114、114a、114b 電子輸送層

50

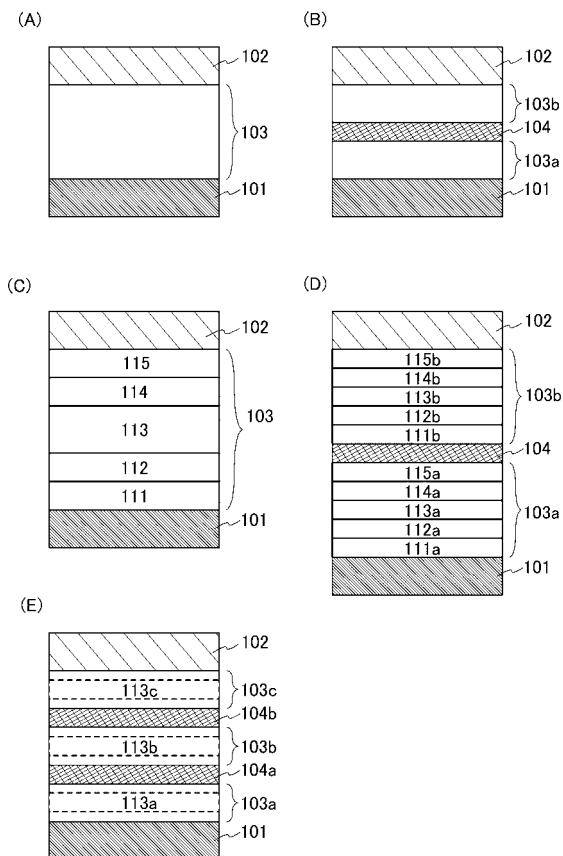
1 1 5、1 1 5 a、1 1 5 b	電子注入層	
2 0 0 R、2 0 0 G、2 0 0 B	光学距離	
2 0 1	第 1 の基板	
2 0 2	トランジスタ (F E T)	
2 0 3 R、2 0 3 G、2 0 3 B、2 0 3 W	発光素子	
2 0 4	E L 層	
2 0 5	第 2 の基板	
2 0 6 R、2 0 6 G、2 0 6 B	カラーフィルタ	
2 0 6 R'、2 0 6 G'、2 0 6 B'	カラーフィルタ	
2 0 7	第 1 の電極	10
2 0 8	第 2 の電極	
2 0 9	黒色層 (ブラックマトリックス)	
2 1 0 R、2 1 0 G	導電層	
3 0 1	第 1 の基板	
3 0 2	画素部	
3 0 3	駆動回路部 (ソース線駆動回路)	
3 0 4 a、3 0 4 b	駆動回路部 (ゲート線駆動回路)	
3 0 5	シール材	
3 0 6	第 2 の基板	
3 0 7	引き回し配線	20
3 0 8	F P C	
3 0 9	F E T	
3 1 0	F E T	
3 1 1	F E T	
3 1 2	F E T	
3 1 3	第 1 の電極	
3 1 4	絶縁物	
3 1 5	E L 層	
3 1 6	第 2 の電極	
3 1 7	発光素子	30
3 1 8	空間	
9 0 0	基板	
9 0 1	第 1 の電極	
9 0 2	E L 層	
9 0 3	第 2 の電極	
9 1 1	正孔注入層	
9 1 2	正孔輸送層	
9 1 3	発光層	
9 1 4	電子輸送層	
9 1 5	電子注入層	40
4 0 0 0	照明装置	
4 0 0 1	基板	
4 0 0 2	発光素子	
4 0 0 3	基板	
4 0 0 4	第 1 の電極	
4 0 0 5	E L 層	
4 0 0 6	第 2 の電極	
4 0 0 7	電極	
4 0 0 8	電極	
4 0 0 9	補助配線	50

4 0 1 0	絶縁層	
4 0 1 1	封止基板	
4 0 1 2	シール材	
4 0 1 3	乾燥剤	
4 0 1 5	拡散板	
4 1 0 0	照明装置	
4 2 0 0	照明装置	
4 2 0 1	基板	
4 2 0 2	発光素子	
4 2 0 4	第 1 の電極	10
4 2 0 5	E L 層	
4 2 0 6	第 2 の電極	
4 2 0 7	電極	
4 2 0 8	電極	
4 2 0 9	補助配線	
4 2 1 0	絶縁層	
4 2 1 1	封止基板	
4 2 1 2	シール材	
4 2 1 3	バリア膜	
4 2 1 4	平坦化膜	20
4 2 1 5	拡散板	
4 3 0 0	照明装置	
5 1 0 1	ライト	
5 1 0 2	ホイール	
5 1 0 3	ドア	
5 1 0 4	表示部	
5 1 0 5	ハンドル	
5 1 0 6	シフトレバー	
5 1 0 7	座席シート	
5 1 0 8	インナーリアビューミラー	30
7 0 0 0	筐体	
7 0 0 1	表示部	
7 0 0 2	第 2 表示部	
7 0 0 3	スピーカ	
7 0 0 4	L E D ランプ	
7 0 0 5	操作キー	
7 0 0 6	接続端子	
7 0 0 7	センサ	
7 0 0 8	マイクロフォン	
7 0 0 9	スイッチ	40
7 0 1 0	赤外線ポート	
7 0 1 1	記録媒体読込部	
7 0 1 2	支持部	
7 0 1 3	イヤホン	
7 0 1 4	アンテナ	
7 0 1 5	シャッターボタン	
7 0 1 6	受像部	
7 0 1 8	スタンド	
7 0 1 9	マイクロフォン	
7 0 2 0	カメラ	50

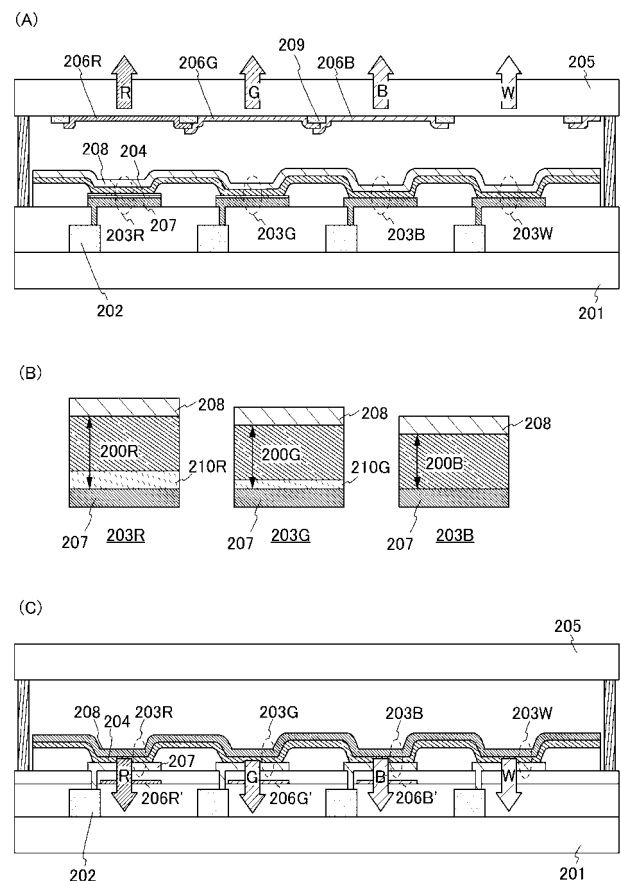
7 0 2 1	外部接続部
7 0 2 2、7 0 2 3	操作ボタン
7 0 2 4	接続端子
7 0 2 5	バンド
7 0 2 6	留め金
7 0 2 7	時刻を表すアイコン
7 0 2 8	その他のアイコン
8 0 0 1	照明装置
8 0 0 2	照明装置
8 0 0 3	照明装置
8 0 0 4	照明装置
9 3 1 0	携帯情報端末
9 3 1 1	表示部
9 3 1 2	表示領域
9 3 1 3	ヒンジ
9 3 1 5	筐体

10

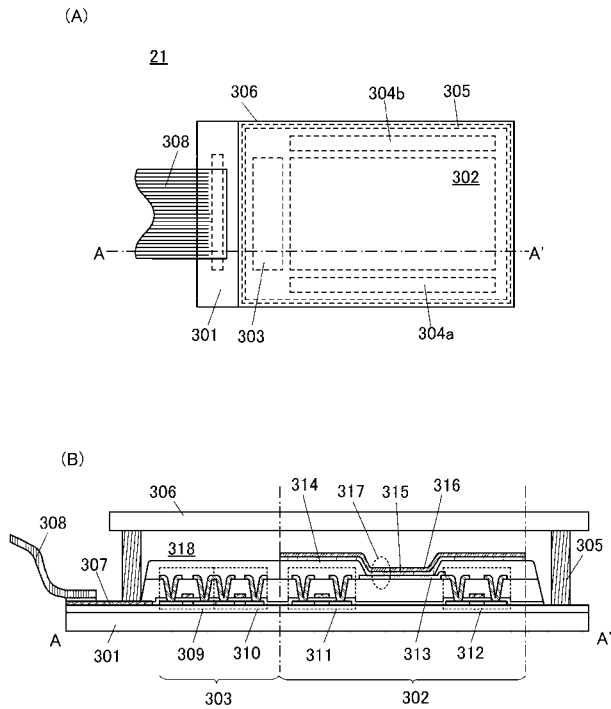
【図 1】



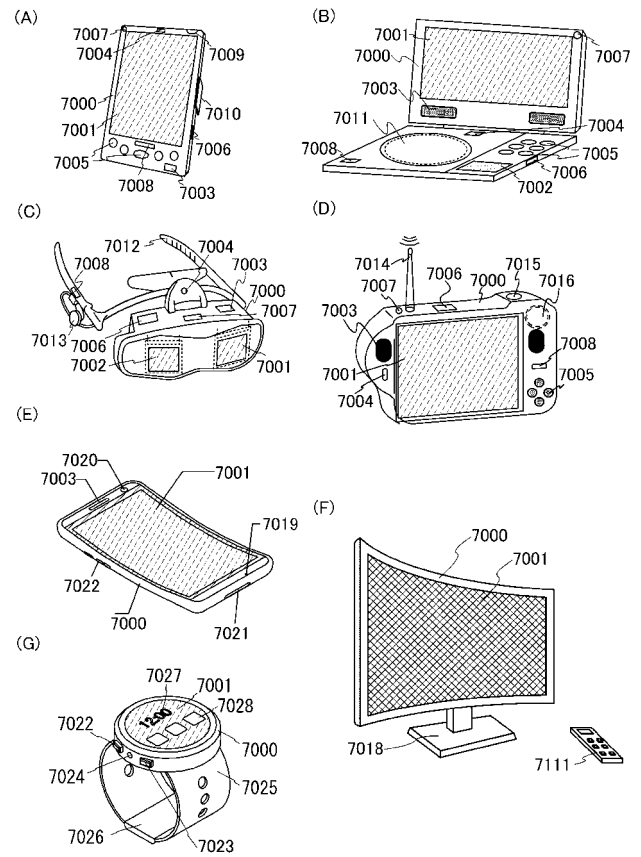
【図 2】



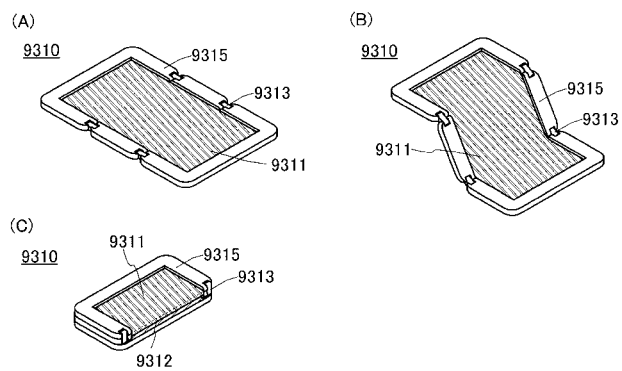
【図 3】



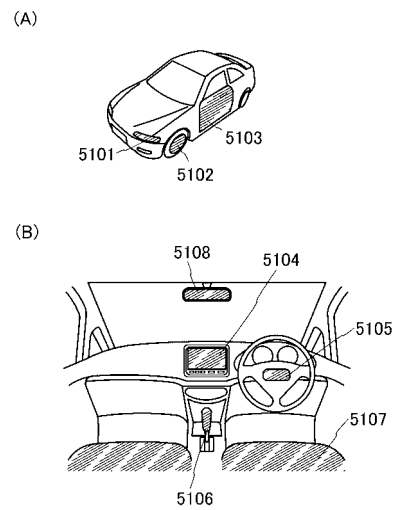
【図 4】



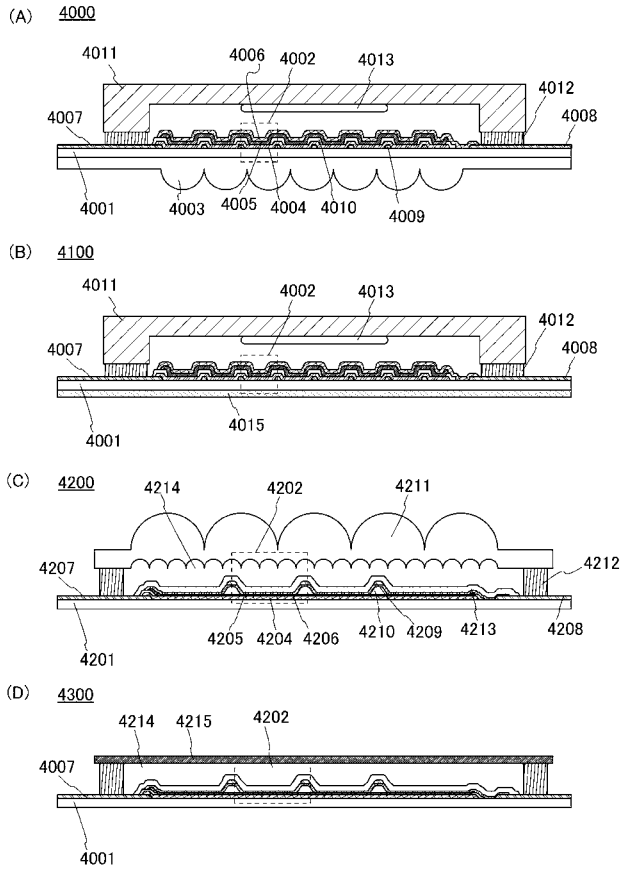
【図 5】



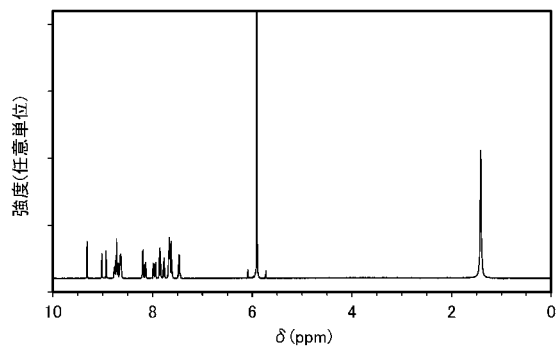
【図 6】



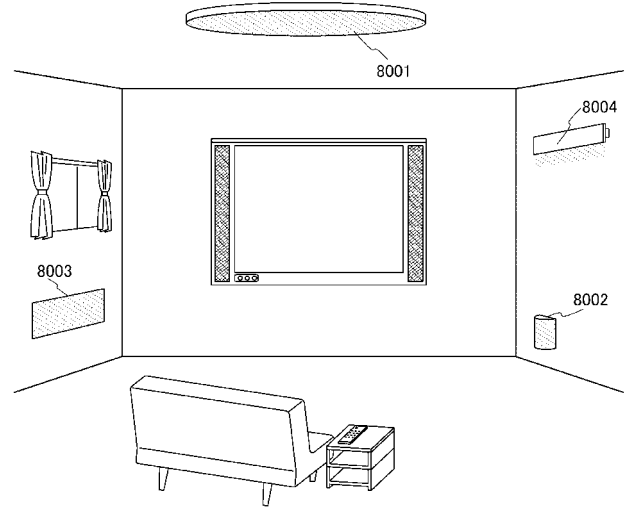
【図 7】



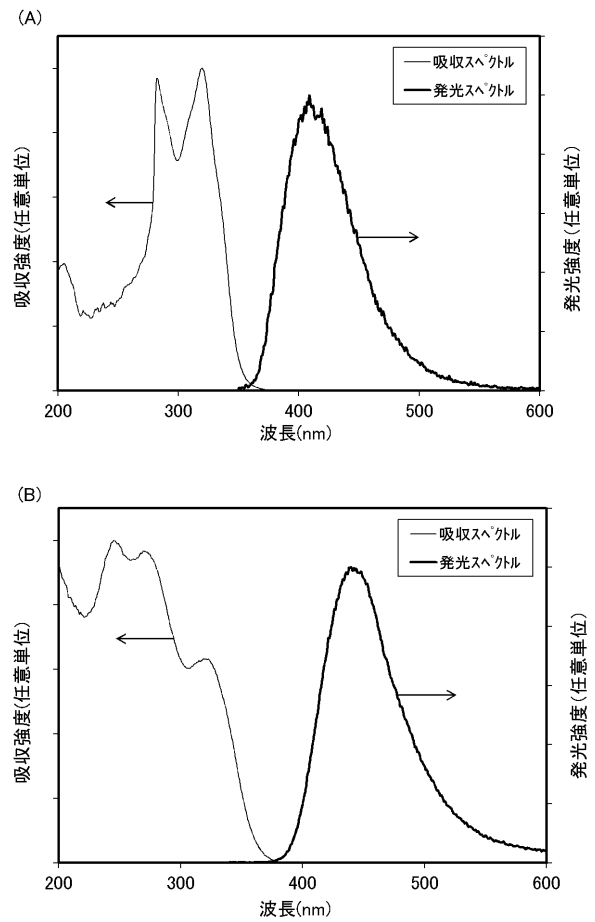
【図 9】



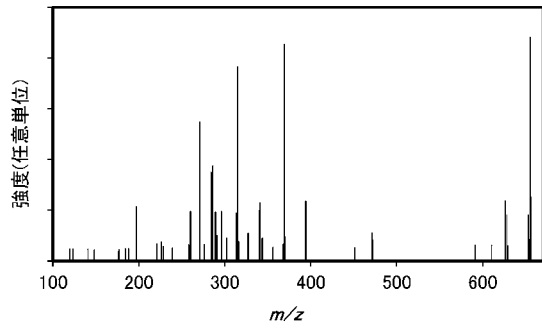
【図 8】



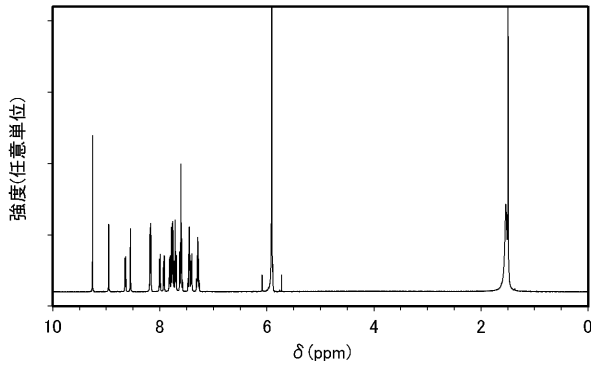
【図 10】



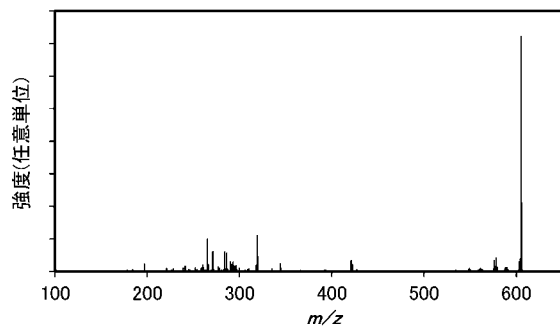
【図 1 1】



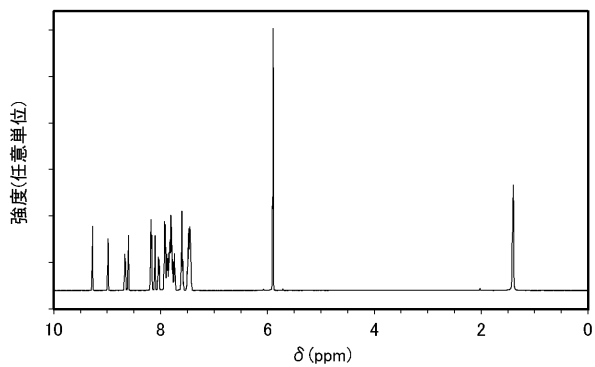
【図 1 2】



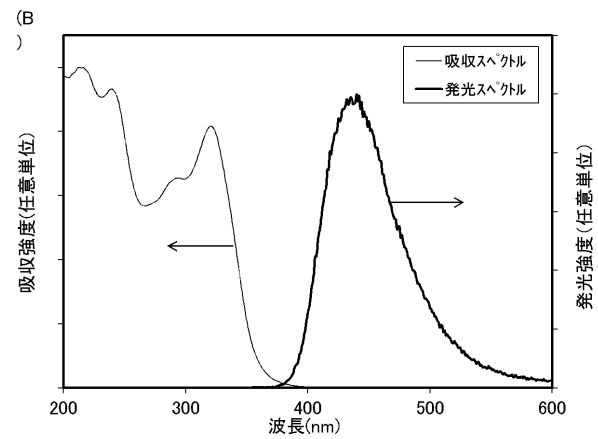
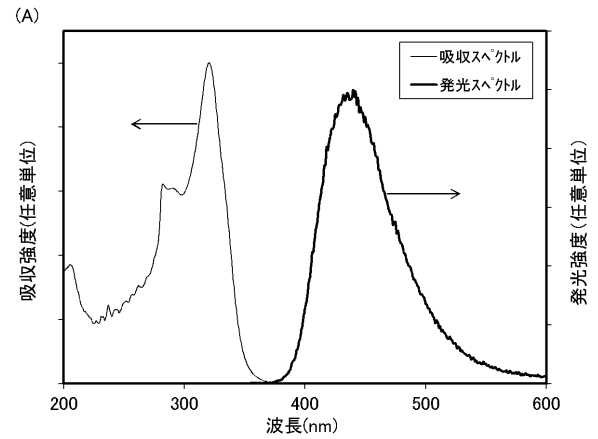
【図 1 4】



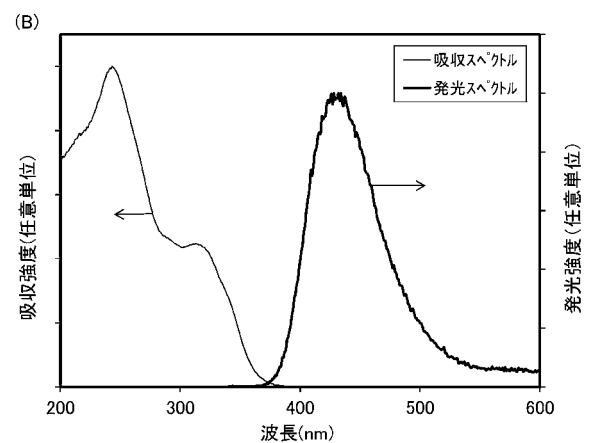
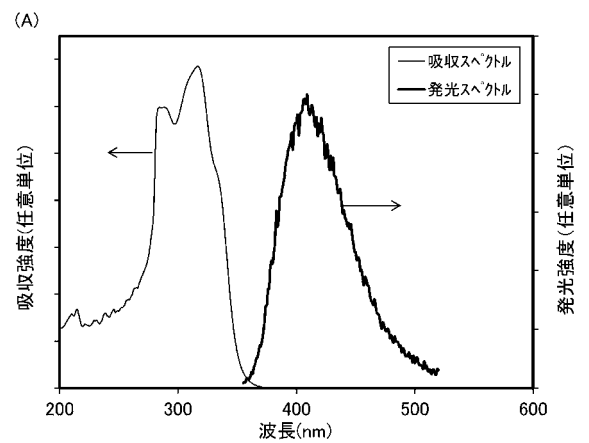
【図 1 5】



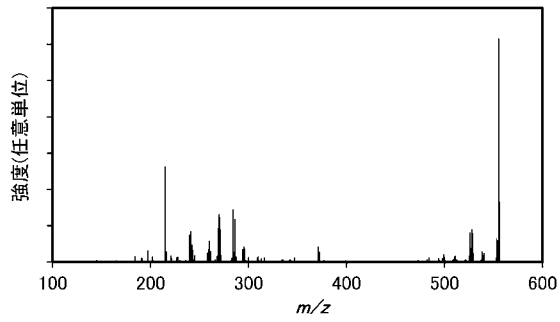
【図 1 3】



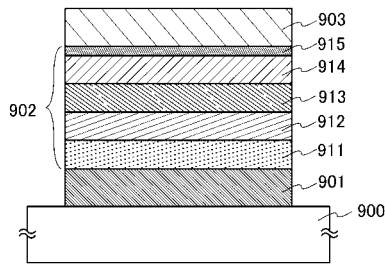
【図 1 6】



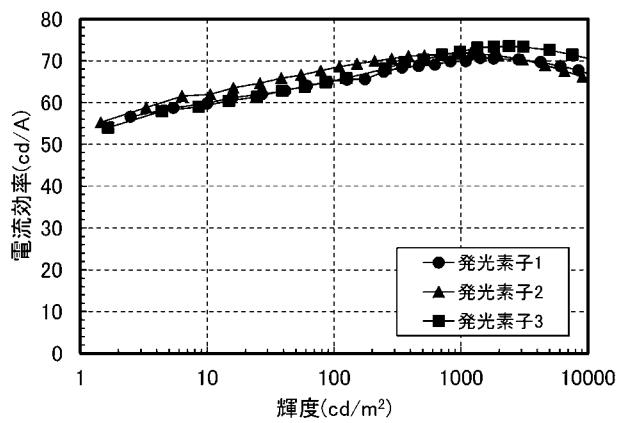
【図 17】



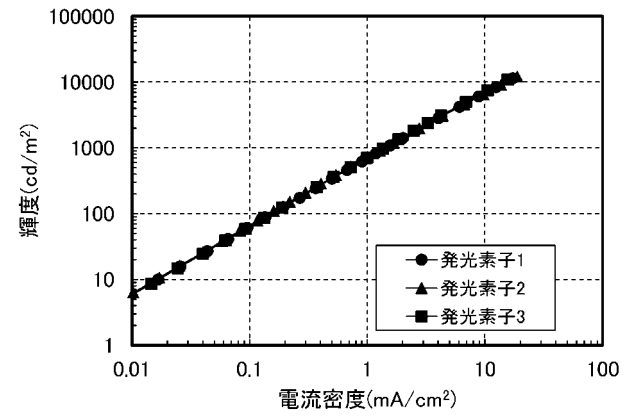
【図 18】



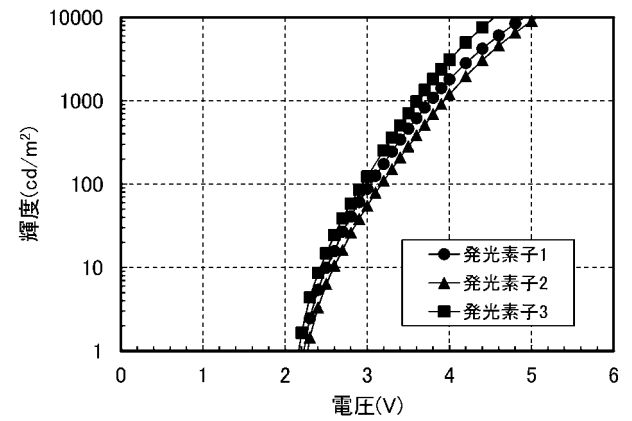
【図 21】



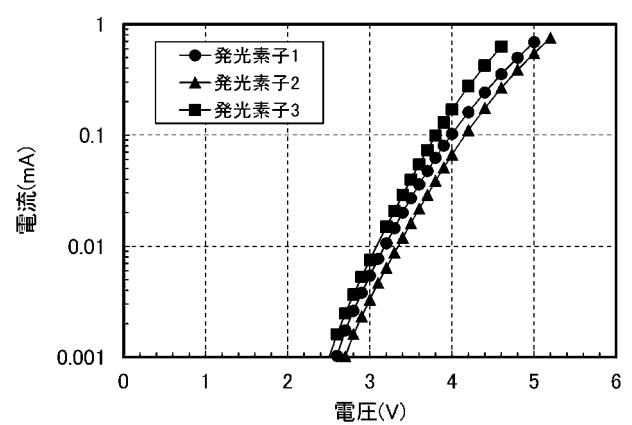
【図 19】



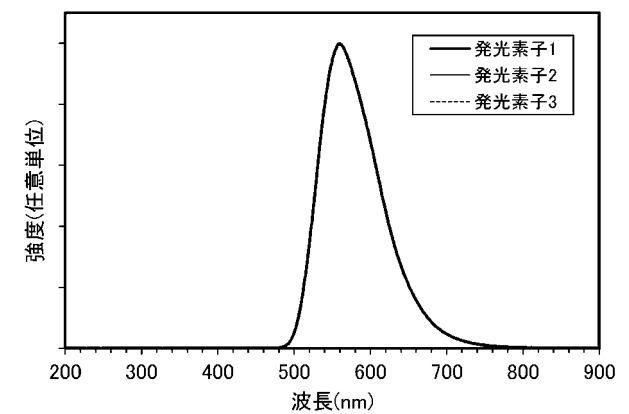
【図 20】



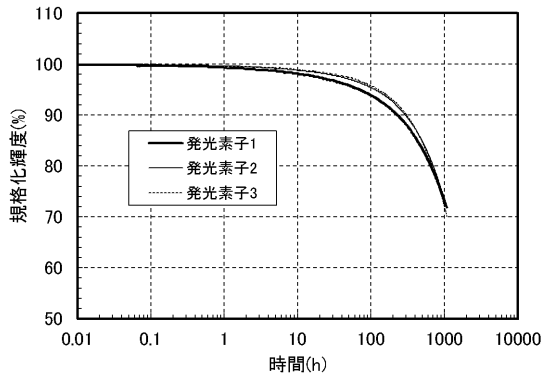
【図 22】



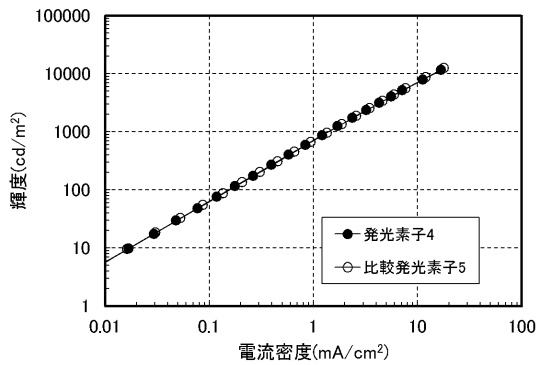
【図 23】



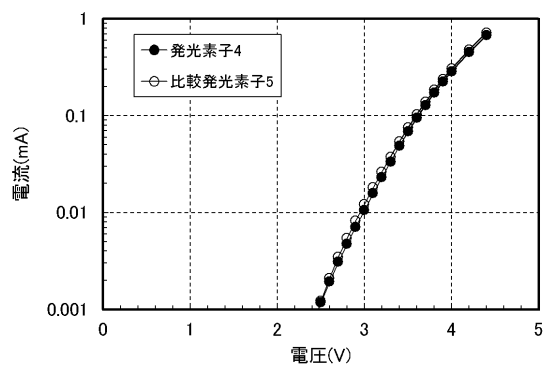
【図 2 4】



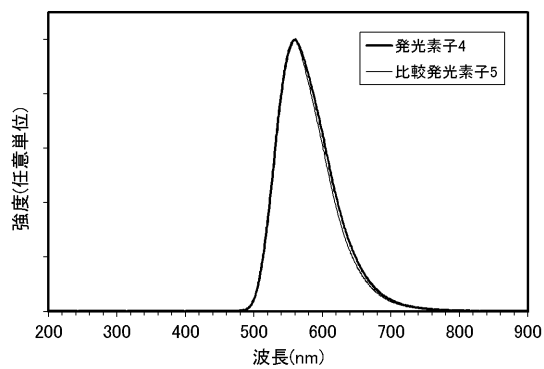
【図 2 5】



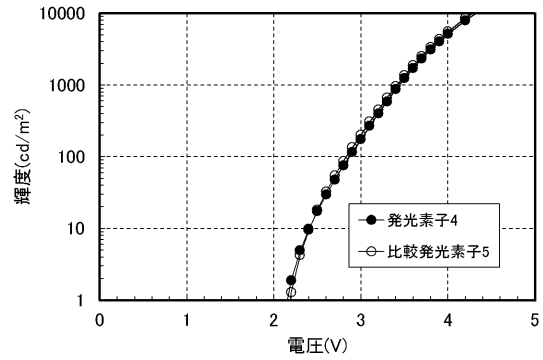
【図 2 8】



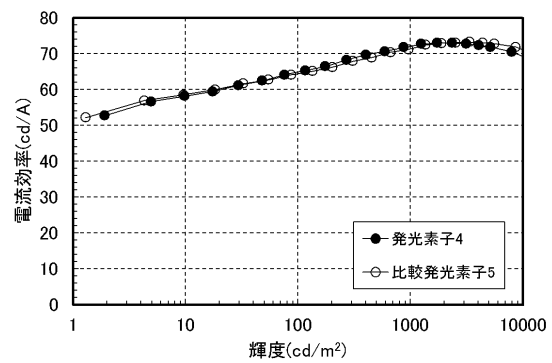
【図 2 9】



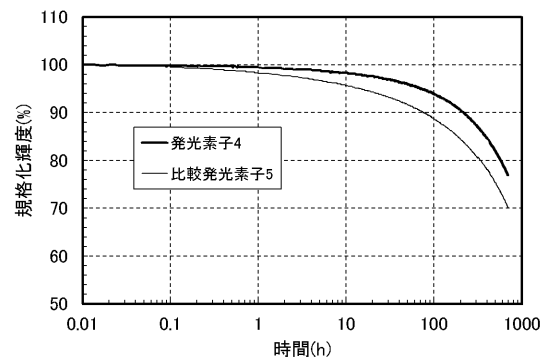
【図 2 6】



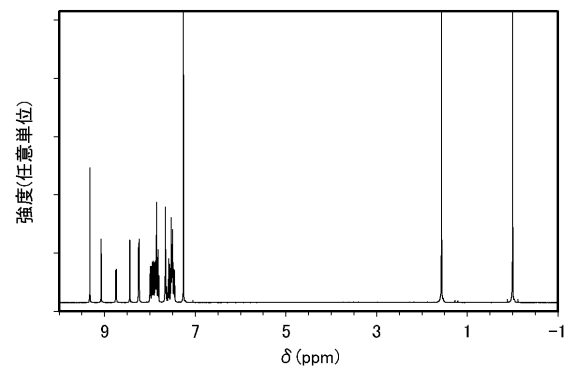
【図 2 7】



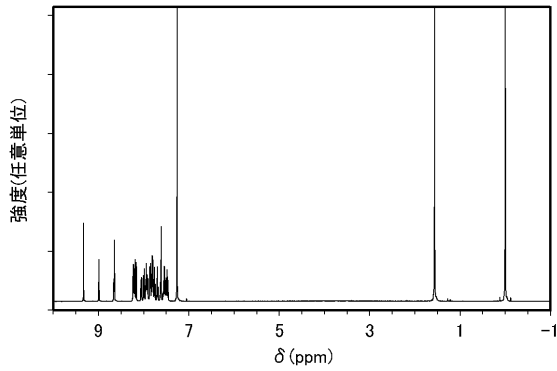
【図 3 0】



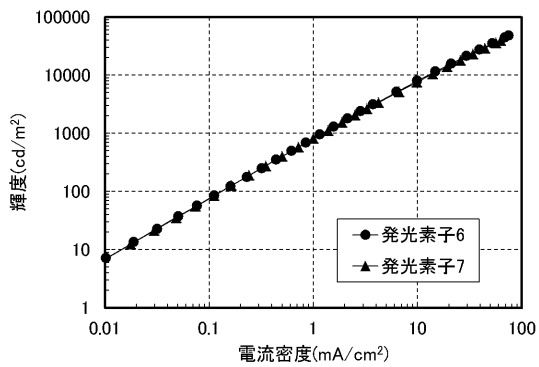
【図 3 1】



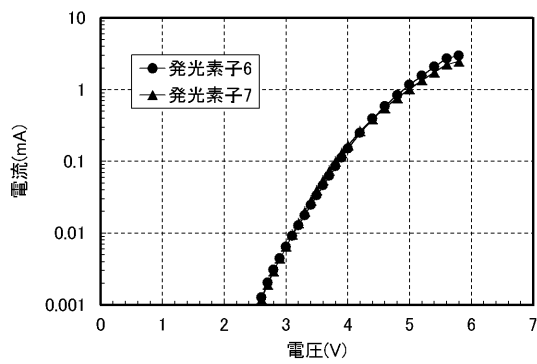
【図 3 2】



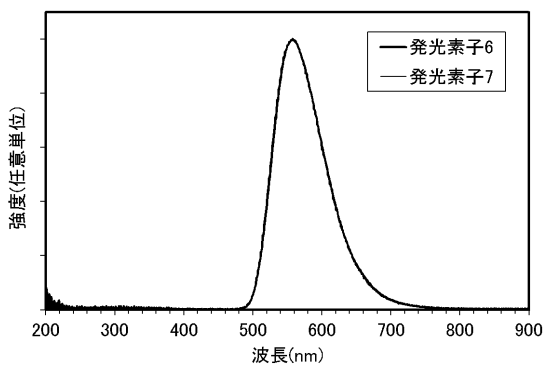
【図 3 3】



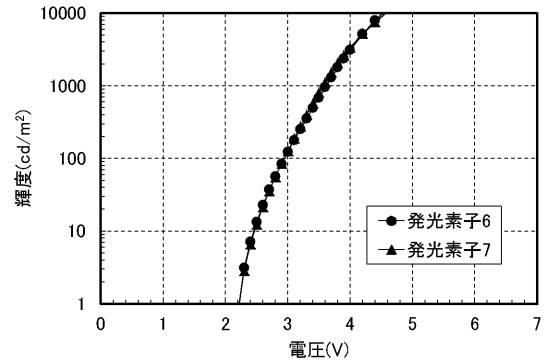
【図 3 6】



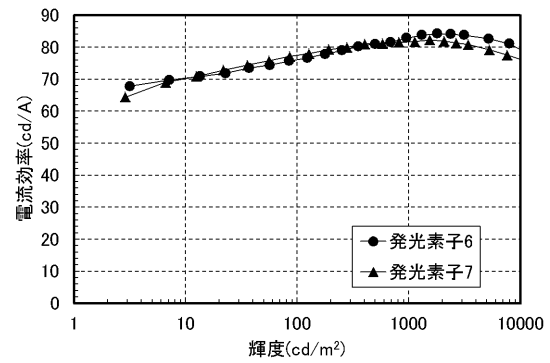
【図 3 7】



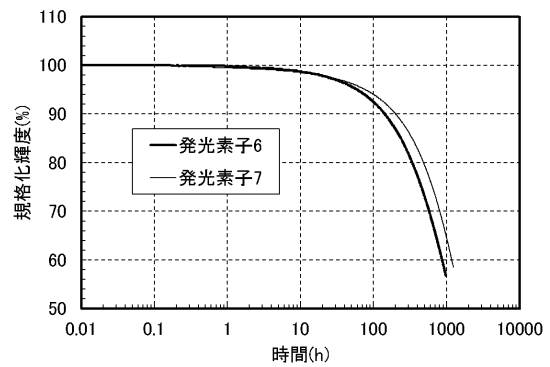
【図 3 4】



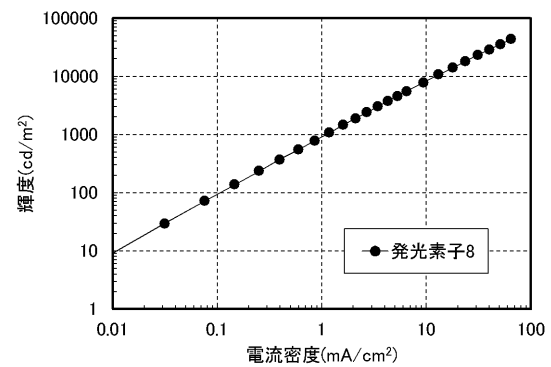
【図 3 5】



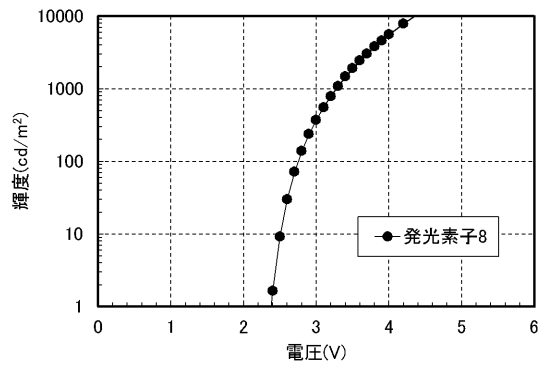
【図 3 8】



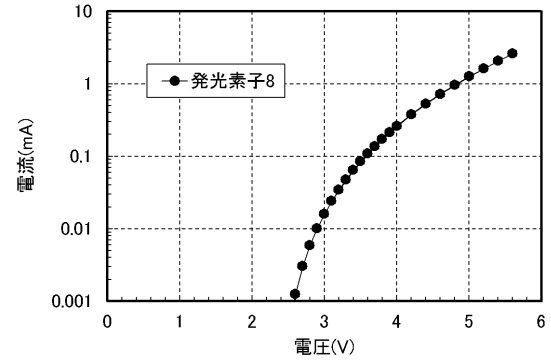
【図 3 9】



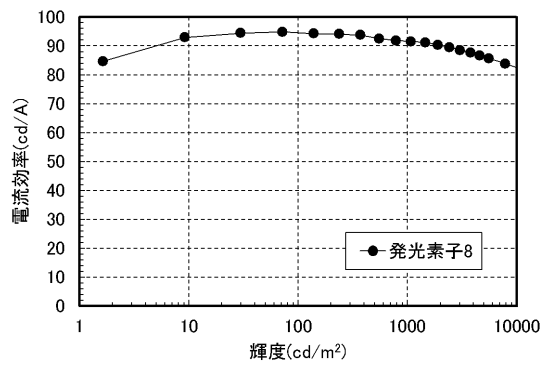
【図 4 0】



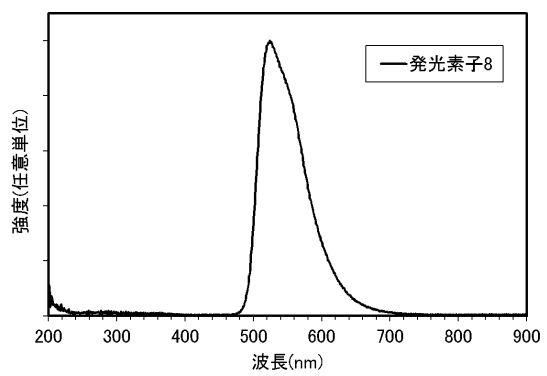
【図 4 2】



【図 4 1】



【図 4 3】



フロントページの続き

(72)発明者 木戸 裕允

神奈川県厚木市長谷 3 9 8 番地 株式会社半導体エネルギー研究所内

(72)発明者 瀬尾 哲史

神奈川県厚木市長谷 3 9 8 番地 株式会社半導体エネルギー研究所内

F ターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 BB06 BB07 BB08 CC21 DD53 DD59 DD67

DD68 EE03 EE61 EE63

4C050 AA01 AA07 BB08 CC16 EE02 FF05 GG01 HH03

【要約の続き】

【選択図】なし