

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第3部門第2区分

【発行日】平成23年3月24日(2011.3.24)

【公開番号】特開2008-247895(P2008-247895A)

【公開日】平成20年10月16日(2008.10.16)

【年通号数】公開・登録公報2008-041

【出願番号】特願2008-53379(P2008-53379)

【国際特許分類】

C 07 D 213/22 (2006.01)

H 01 L 51/50 (2006.01)

C 07 D 401/14 (2006.01)

C 09 K 11/06 (2006.01)

【F I】

C 07 D 213/22

H 05 B 33/14 A

H 05 B 33/22 B

C 07 D 401/14

C 09 K 11/06 6 4 5

【手続補正書】

【提出日】平成23年2月8日(2011.2.8)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

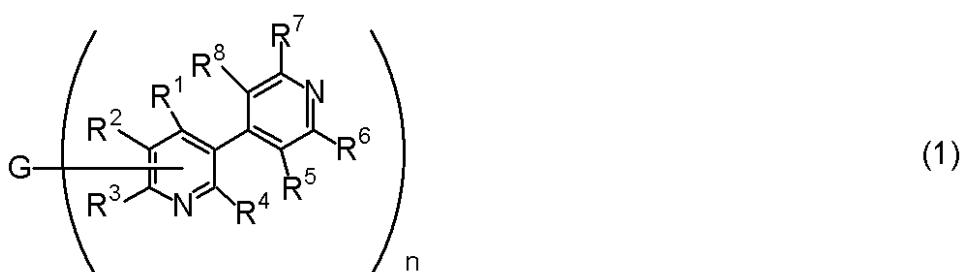
【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記の式(1)で表される化合物。



式中、Gはn価の連結基であり、nは2~4の整数であり；

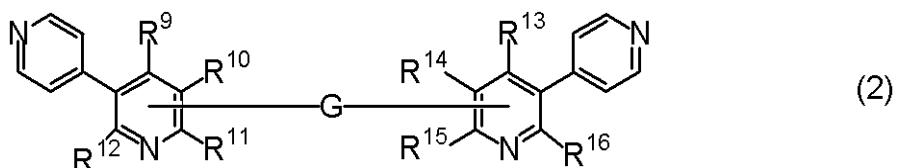
R¹~R⁴は独立して水素、1価の基またはGに結合する遊離原子価であり、R⁵~R⁸は独立して水素または1価の基であるが、R¹~R⁴の1つはGに結合する遊離原子価であり；そして、n個の3,4'-ビピリジル基は同一でもよく、異なっていてもよい。

【請求項2】

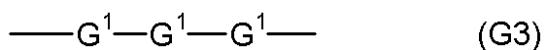
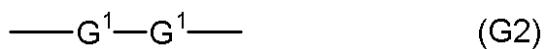
R¹~R⁴の1つがGに結合する遊離原子価であり、それ以外が水素であり、R⁵~R⁸が水素である、請求項1に記載の化合物。

【請求項3】

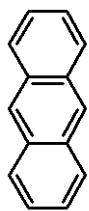
下記の式(2)で表される、請求項2に記載の化合物。



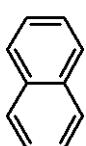
式中、Gは下記の式(G1)～(G3)で表される連結基の群から選択される1つであり；R⁹～R¹²の1つはGに結合する遊離原子価であり、それ以外は水素であり；そして、R¹³～R¹⁶の1つはGに結合する遊離原子価であり、それ以外は水素である。



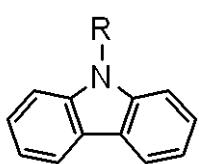
式中、G¹は独立して、下記の式(A-1)～(A-21)および式(B-1)～(B-41)で表される化合物の群から選択される1つから誘導される2価の基である。



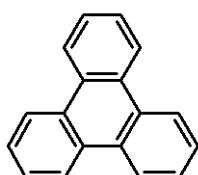
(A-1)



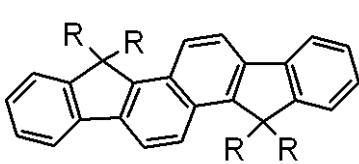
(A-2)



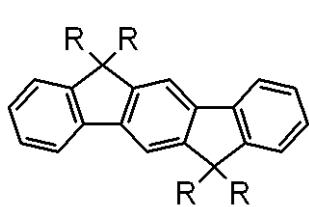
(A-3)



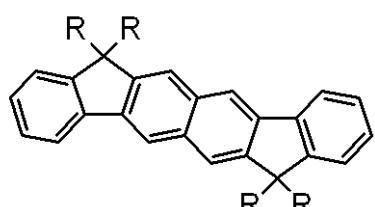
(A-4)



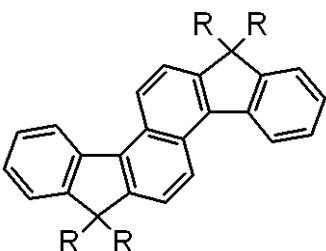
(A-5)



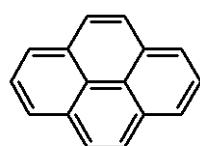
(A-6)



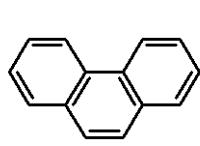
(A-7)



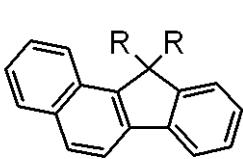
(A-8)



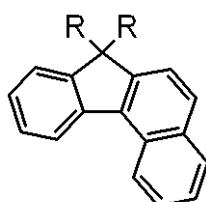
(A-9)



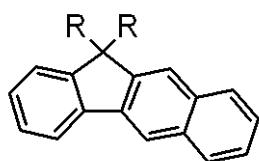
(A-10)



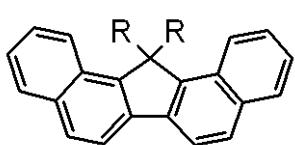
(A-11)



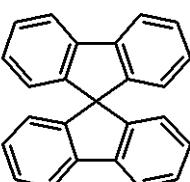
(A-12)



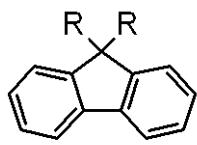
(A-13)



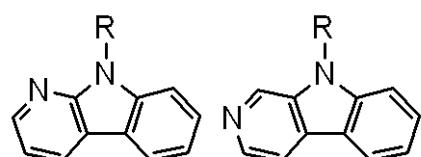
(A-14)



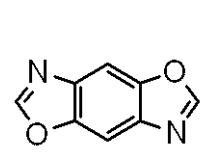
(A-15)



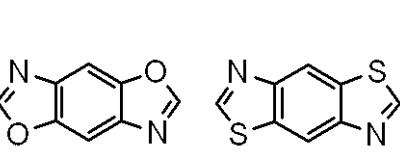
(A-16)



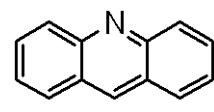
(A-17)



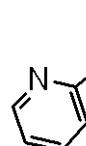
(A-18)



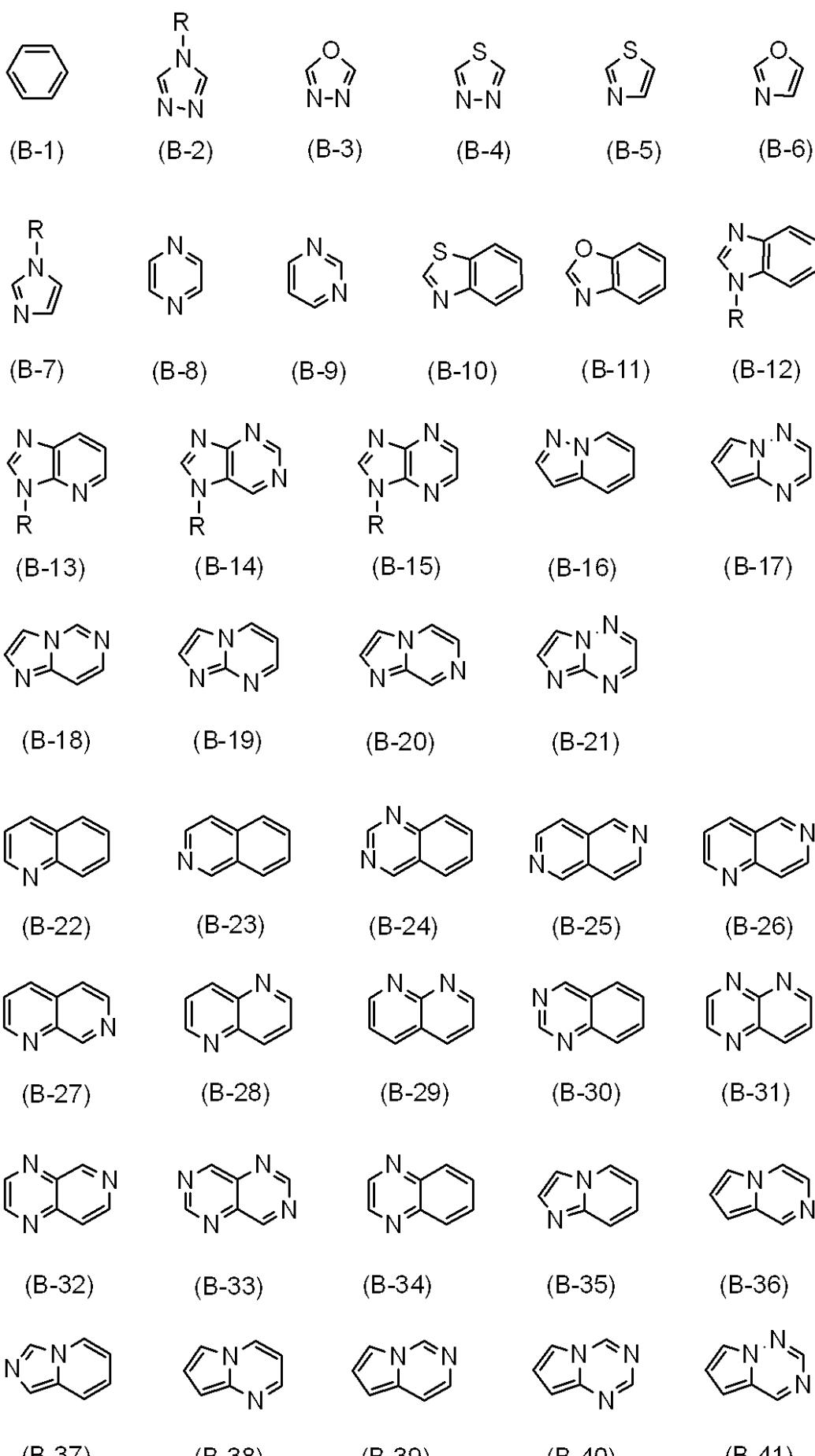
(A-19)



(A-20)



(A-21)

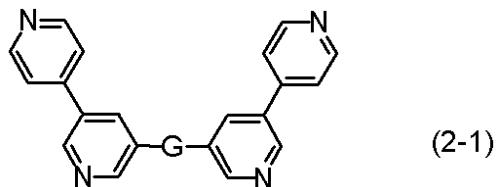


上記の式中、Rは独立して水素、炭素数1～8のアルキル、炭素数3～10のシクロアルキル、または炭素数6～20のアリールであり；式(A-1)～(A-21)および式(

B - 1) ~ (B - 4 1) で表される化合物から誘導される 2 値の基は、遊離原子価を持つ原子以外の位置に置換基を有していてもよい。

【請求項 4】

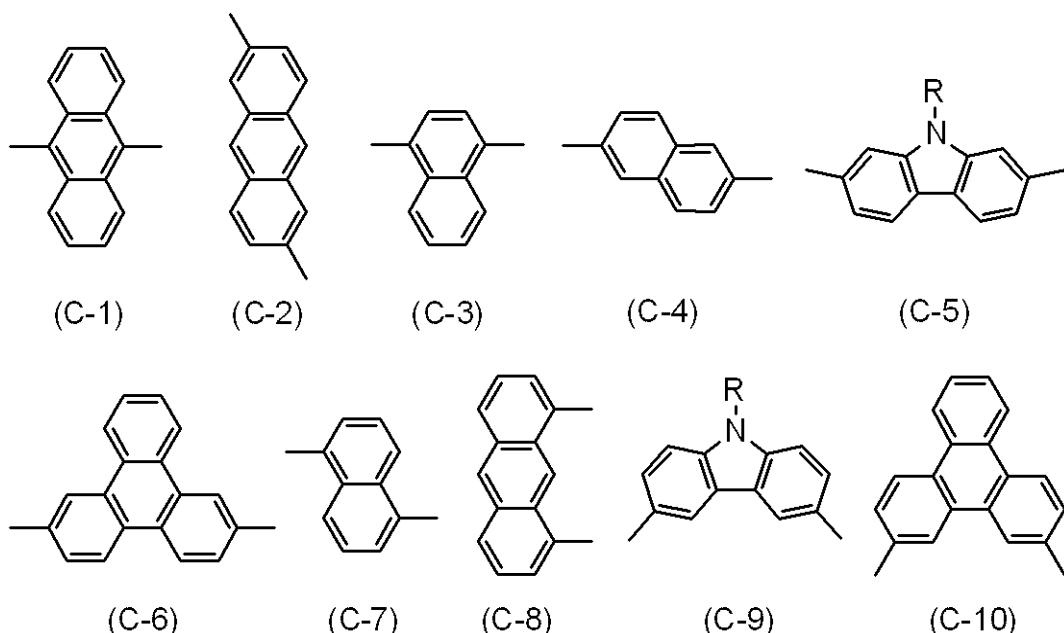
下記の式 (2 - 1) で表される、請求項 3 に記載の化合物。



式中、G の定義は請求項 3 に記載の式 (2) における G と同じである。

【請求項 5】

G が請求項 3 に記載の式 (G 1) で表される連結基であり、式 (G 1) 中 G¹ が下記の式 (C - 1) ~ (C - 1 0) で表される 2 値の基の群から選択される 1 つである、請求項 4 に記載の化合物。



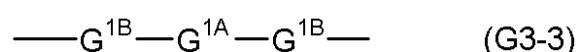
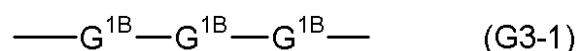
式中、R は独立して水素、メチル、エチル、ヘキシル、シクロヘキシル、フェニル、1 - ナフチルまたは 2 - ナフチルであり；式 (C - 1) ~ (C - 1 0) で表される 2 値の基は、遊離原子価をもつ原子以外の位置に置換基を有していてもよい。

【請求項 6】

G が請求項 3 に記載の式 (G 2) で表される連結基であり、式 (G 2) 中 G¹ が式 (A - 1) ~ (A - 2 1) および式 (B - 1) ~ (B - 4 1) で表される化合物の群から選択される 1 つから誘導される同一の 2 値の基である、請求項 4 に記載の化合物。

【請求項 7】

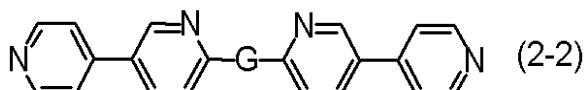
G が下記の式 (G 3 - 1) ~ (G 3 - 3) で表される基の群から選択される 1 つである、請求項 4 に記載の化合物。



式中、 G^{1A} は独立して、請求項 3 に記載の式 (A-1) ~ (A-21) で表される化合物の群から選択される 1 つから誘導される 2 倍の基であり； G^{1B} は独立して、請求項 3 に記載の式 (B-1) ~ (B-41) で表される化合物の群から選択される 1 つから誘導される 2 倍の基である。

【請求項 8】

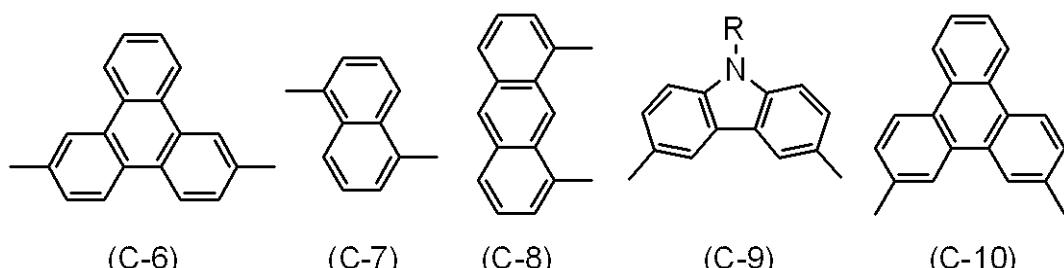
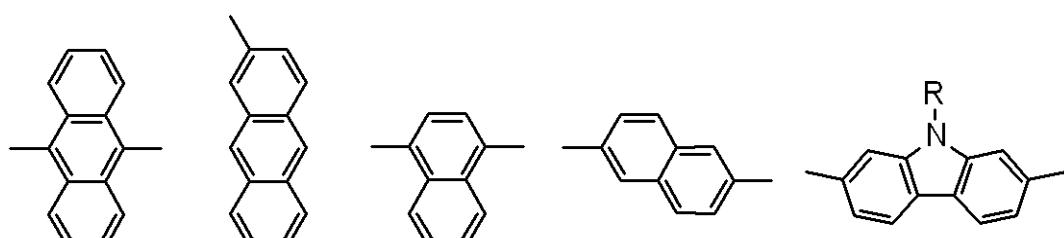
下記の式 (2-2) で表される、請求項 3 に記載の化合物。



式中、G の定義は請求項 3 に記載の式 (2) における G と同じである。

【請求項 9】

G が請求項 3 に記載の式 (G1) で表される連結基であり、式 (G1) 中 G^1 が下記の式 (C-1) ~ (C-10) で表される 2 倍の基の群から選択される 1 つである、請求項 8 に記載の化合物。



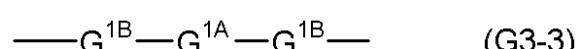
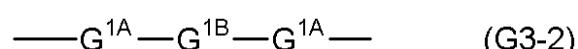
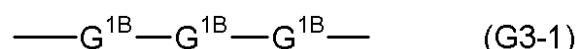
式中、R は独立して水素、メチル、エチル、ヘキシル、シクロヘキシル、フェニル、1 - ナフチルまたは 2 - ナフチルであり；式 (C-1) ~ (C-10) で表される 2 倍の基は、遊離原子価をもつ原子以外の位置に置換基を有していてもよい。

【請求項 10】

G が請求項 3 に記載の式 (G2) で表される連結基であり、式 (G2) 中 G^1 が式 (A-1) ~ (A-21) および式 (B-1) ~ (B-41) で表される化合物の群から選択される 1 つから誘導される同一の 2 倍の基である、請求項 14 に記載の化合物。

【請求項 11】

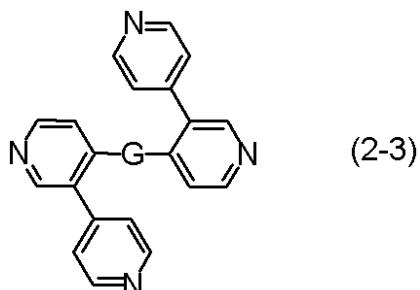
G が下記の式 (G3-1) ~ (G3-3) で表される連結基の群から選択される 1 つである、請求項 8 に記載の化合物。



式中、 G^{1A} は独立して、請求項 3 に記載の式 (A-1) ~ (A-21) で表される化合物の群から選択される 1 つから誘導される 2 倍の基であり； G^{1B} は独立して、請求項 3 に記載の式 (B-1) ~ (B-41) で表される化合物の群から選択される 1 つから誘導される 2 倍の基である。

【請求項 12】

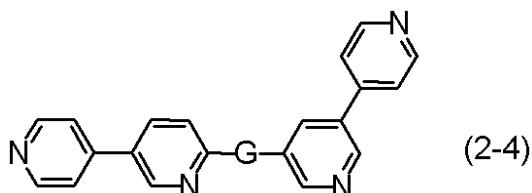
下記の式 (2-3) で表される、請求項 3 に記載の化合物。



式中、G の定義は請求項 3 に記載の式 (2) における G と同じである。

【請求項 13】

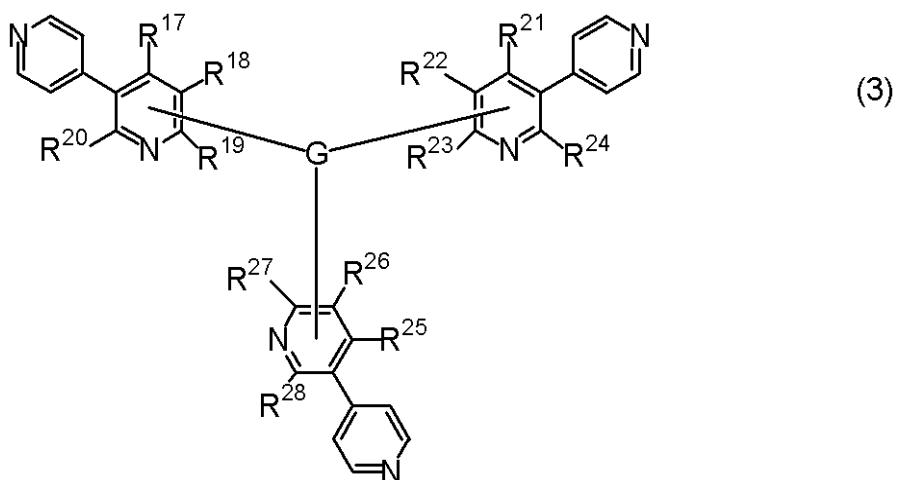
下記の式 (2-4) で表される、請求項 3 に記載の化合物。



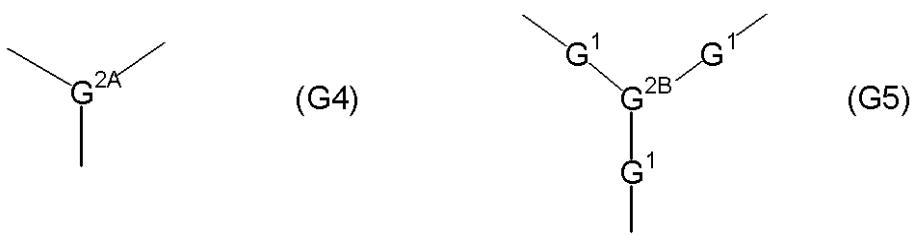
式中、G の定義は請求項 3 に記載の式 (2) における G と同じである。

【請求項 14】

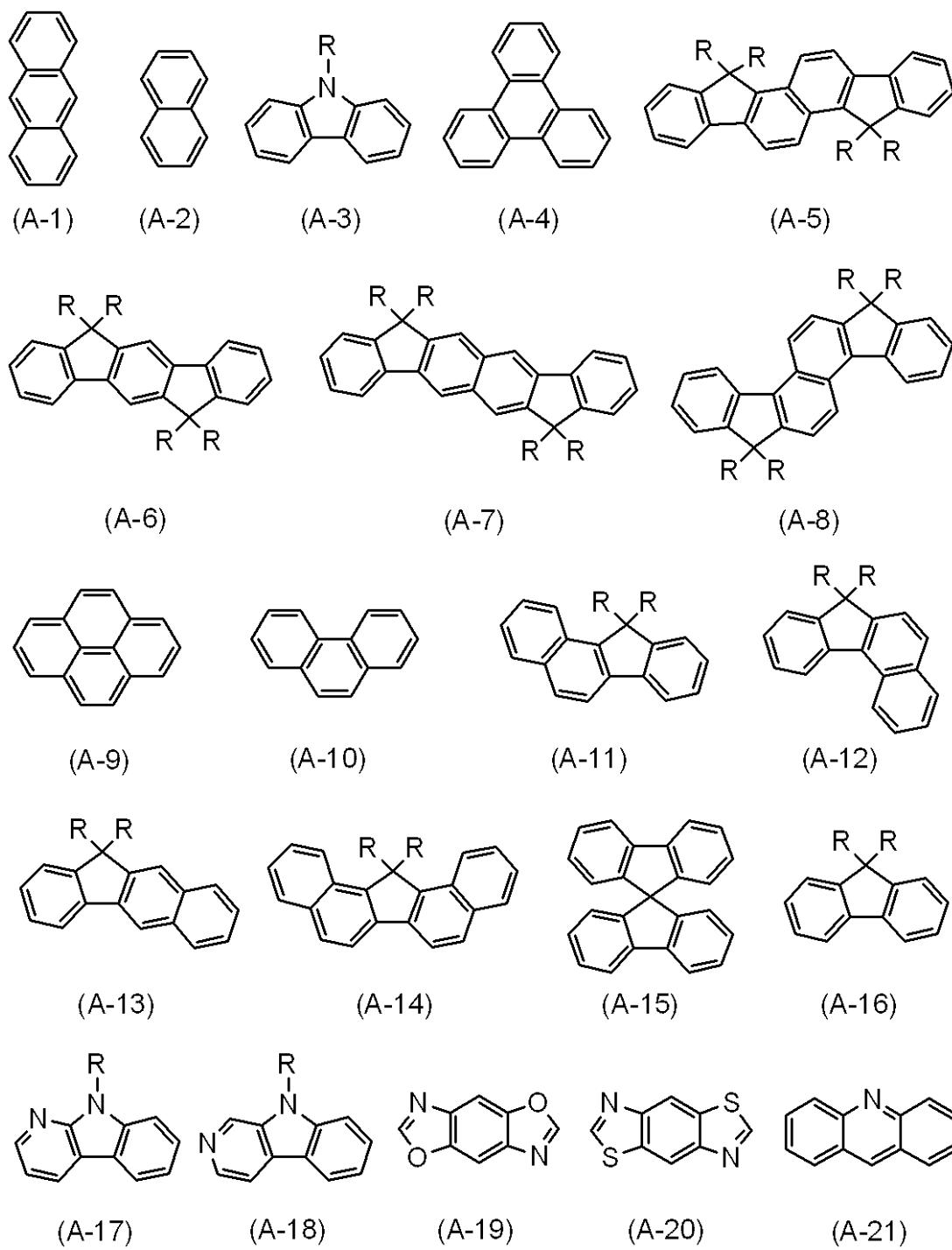
下記の式 (3) で表される、請求項 2 に記載の化合物。

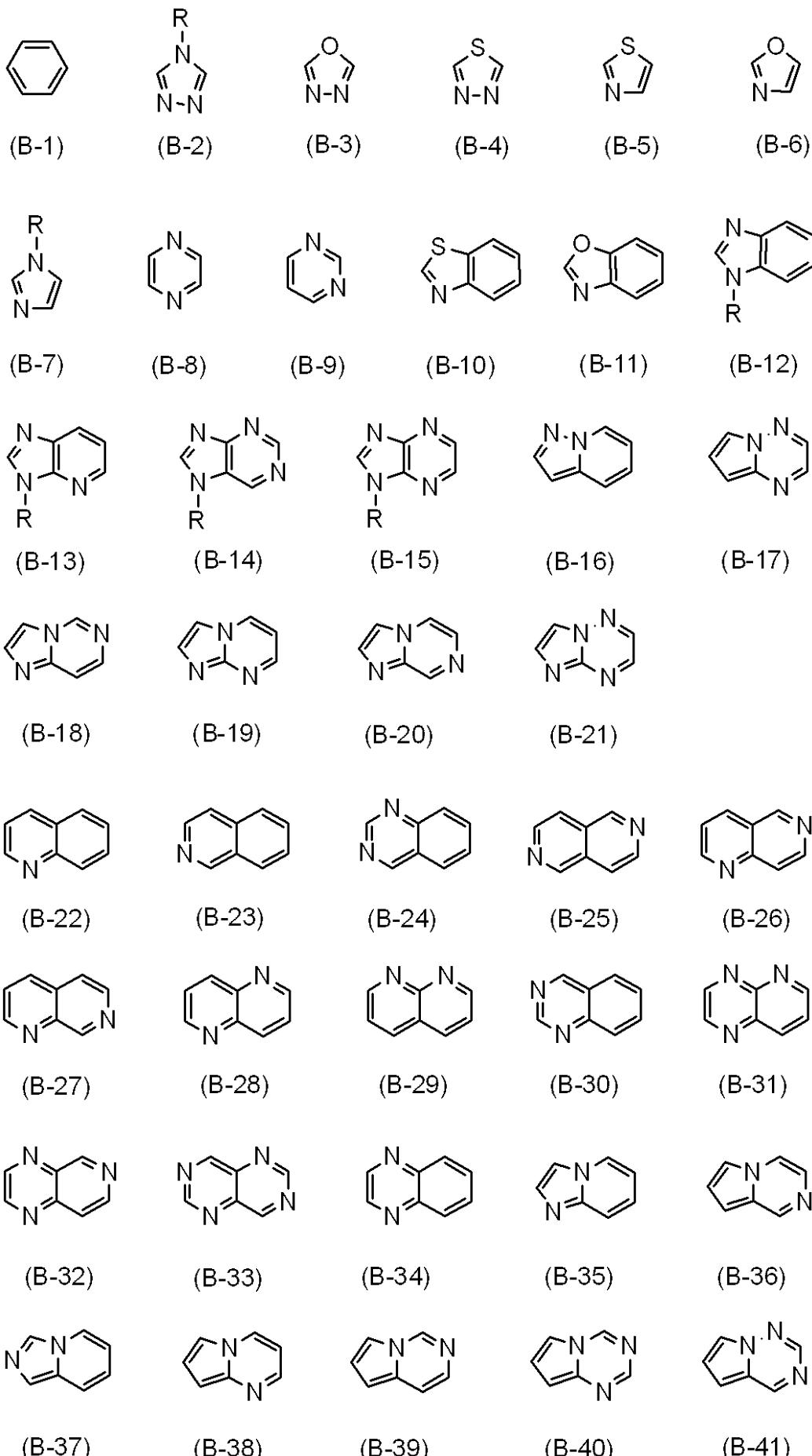


式中、G は下記の式 (G4) または (G5) で表される連結基であり； $R^{17} \sim R^{20}$ の 1 つは G に結合する遊離原子価であり、それ以外は水素であり； $R^{21} \sim R^{24}$ の 1 つは G に結合する遊離原子価であり、それ以外は水素であり； $R^{25} \sim R^{28}$ の 1 つは G に結合する遊離原子価であり、それ以外は水素である。



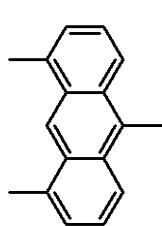
式中、 G^1 は独立して、下記の式 (A-1) ~ (A-21) および式 (B-1) ~ (B-41) で表される化合物の群から選択される 1 つから誘導される 2 値の基であり； G^{2A} は、下記の式 (E-1) ~ (E-9) で表される 3 値の基の群から選択される 1 つであり、 G^{2B} はホウ素、ホスホリル基、または式 (E-1) ~ (E-9) で表される 3 値の基の群から選択される 1 つである。



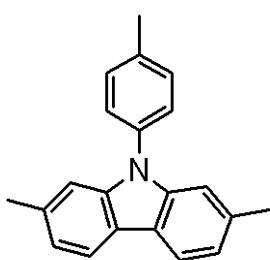


上記の式中、Rは独立して水素、炭素数1～8のアルキル、炭素数3～10のシクロアル

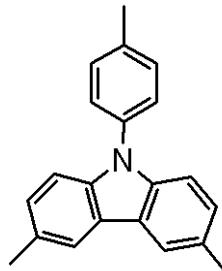
キル、または炭素数 6 ~ 20 のアリールであり；式 (A - 1) ~ (A - 21) および式 (B - 1) ~ (B - 41) で表される化合物から誘導される 2 倍の基は、遊離原子価を持つ原子以外の位置に置換基を有していてもよい。



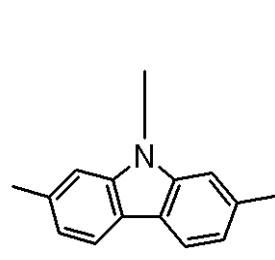
(E-1)



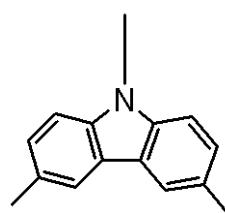
(E-2)



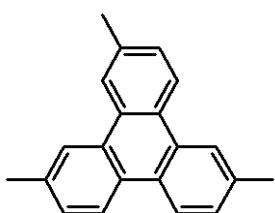
(E-3)



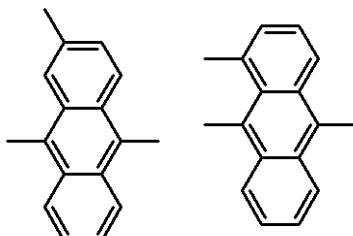
(E-4)



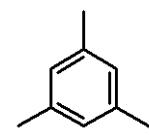
(E-5)



(E-6)



(E-7)

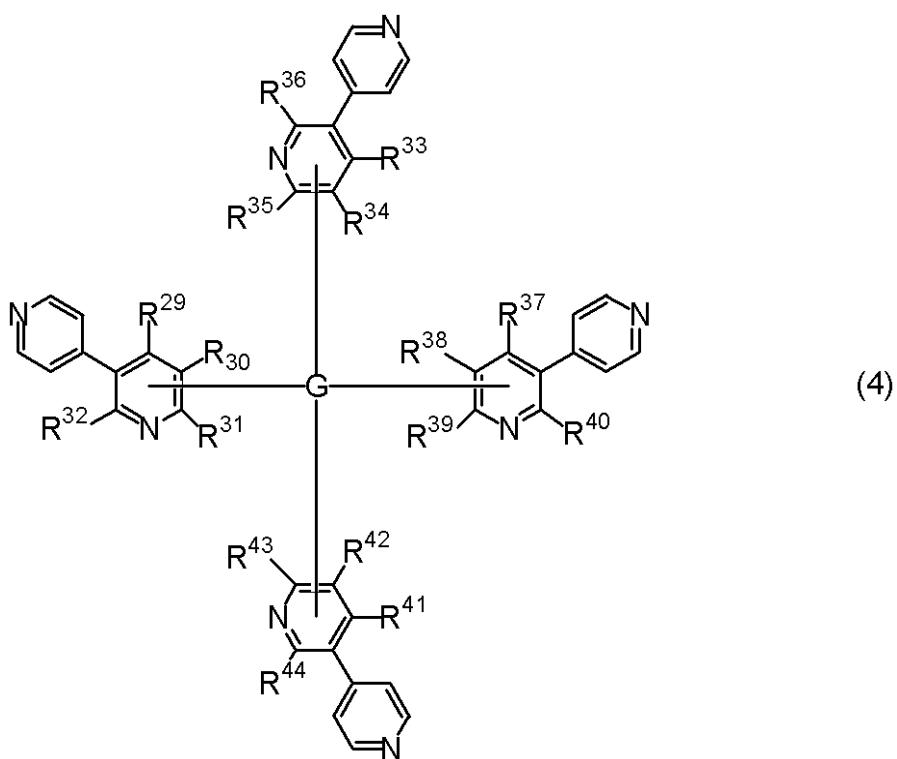


(E-8)

(E-9)

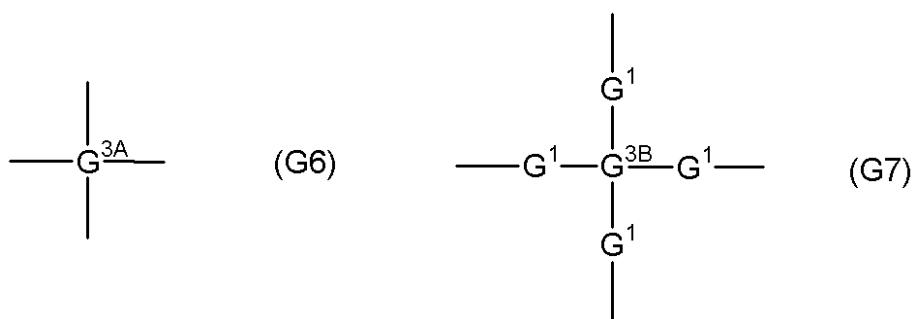
【請求項 15】

下記の式 (4) で表される、請求項 2 に記載の化合物。

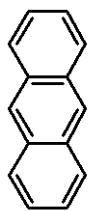


式中、G は下記の式 (G 6) または (G 7) で表される連結基であり；R^{2~9} ~ R^{3~2} の 1 つは G に結合する遊離原子価であり、それ以外は水素であり；R^{3~3} ~ R^{3~6} の 1 つは G に結合する遊離原子価であり、それ以外は水素であり；R^{3~7} ~ R^{4~0} の 1 つは G に結合する遊離原子価であり、それ以外は水素であり；R^{4~1} ~ R^{4~4} の 1 つは G に結合する

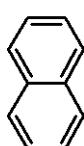
遊離原子価であり、それ以外は水素である。



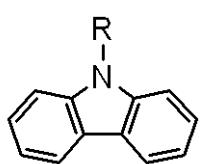
式中、 G^1 は独立して、式 $(A-1) \sim (A-2)$ および式 $(B-1) \sim (B-4)$ で表される化合物の群から選択される 1 つから誘導される 2 値の基であり； G^{3A} は、下記の式 $(F-1) \sim (F-8)$ で表される 4 値の基の群から選択される 1 つであり； G^{3B} は炭素、ケイ素、または式 $(F-1) \sim (F-8)$ で表される 4 値の基の群から選択される 1 つである。



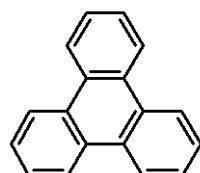
(A-1)



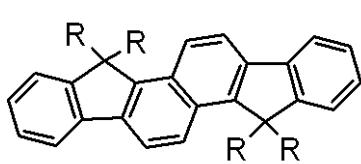
(A-2)



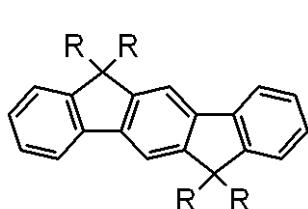
(A-3)



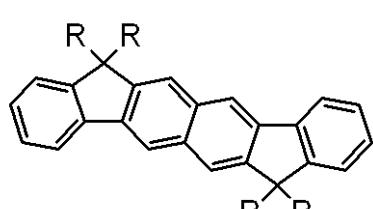
(A-4)



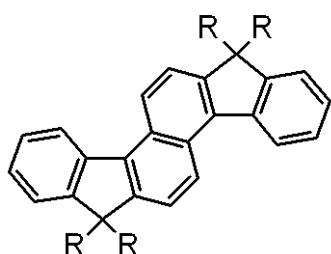
(A-5)



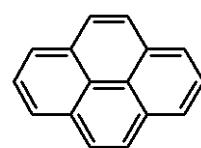
(A-6)



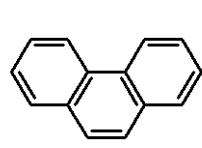
(A-7)



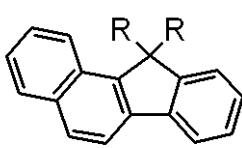
(A-8)



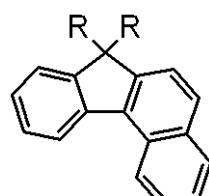
(A-9)



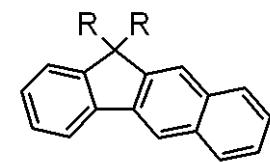
(A-10)



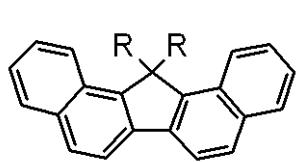
(A-11)



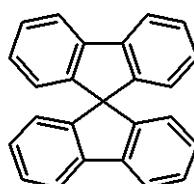
(A-12)



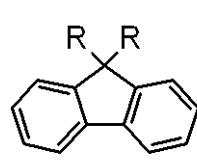
(A-13)



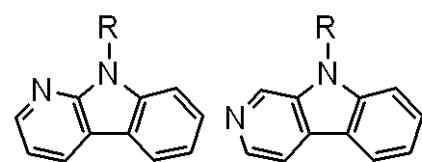
(A-14)



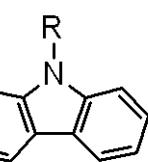
(A-15)



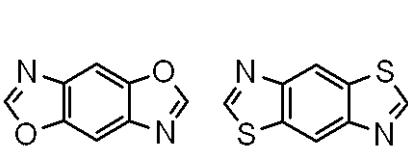
(A-16)



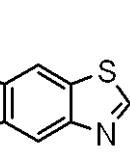
(A-17)



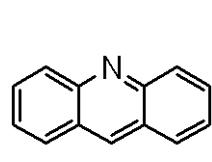
(A-18)



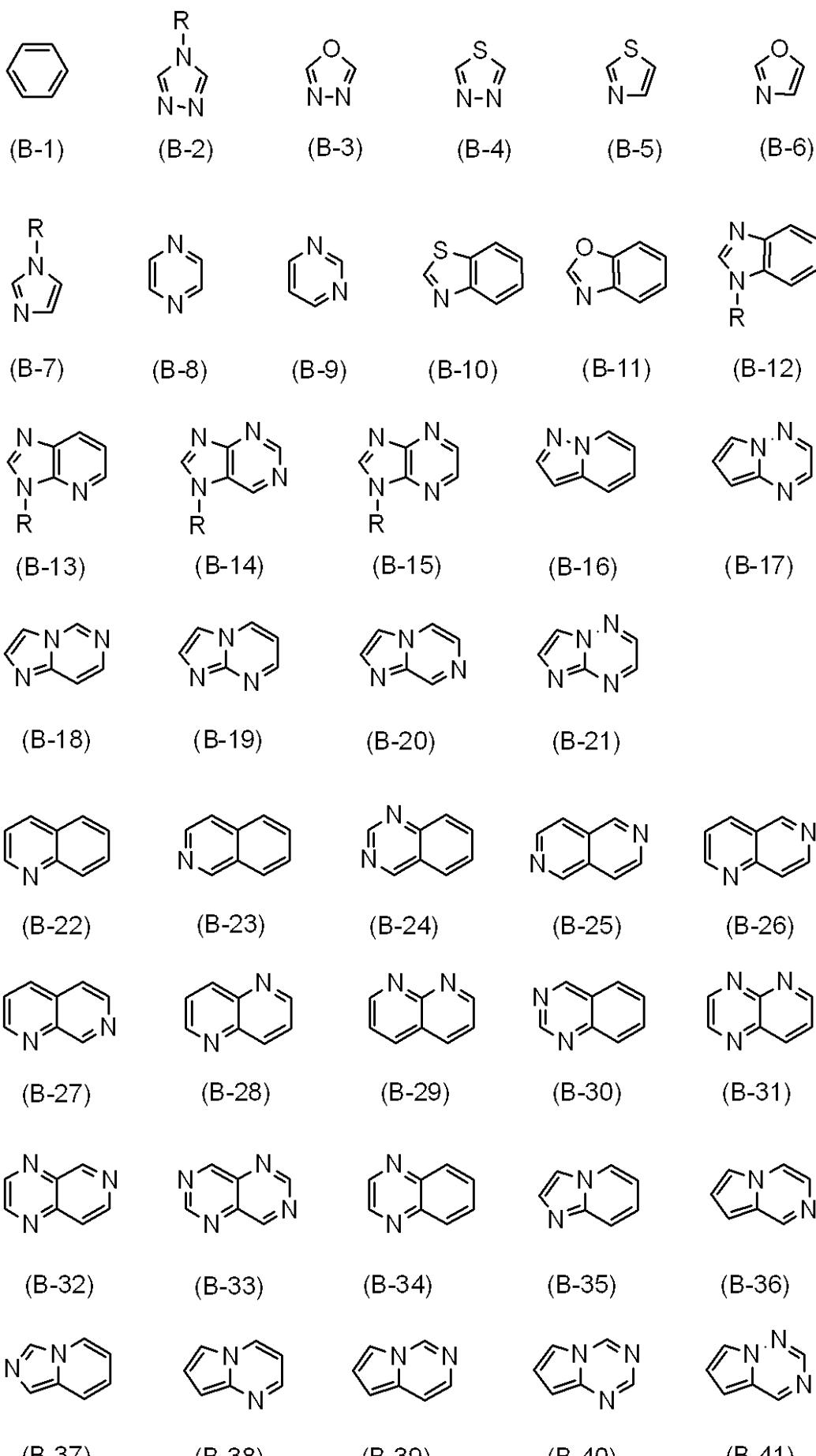
(A-19)



(A-20)

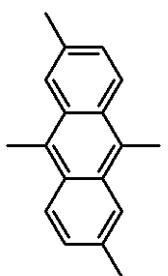


(A-21)

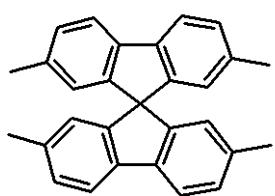


上記の式中、Rは独立して水素、炭素数1～8のアルキル、炭素数3～10のシクロアルキル、または炭素数6～20のアリールであり；式(A-1)～(A-21)および式(

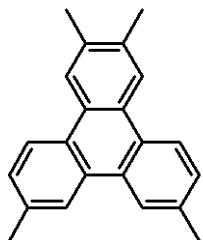
B - 1) ~ (B - 4 1) で表される化合物から誘導される 2 値の基は、遊離原子価を持つ原子以外の位置に置換基を有していてもよい。



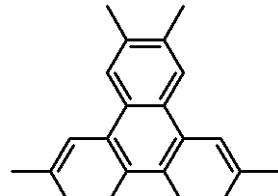
(F-1)



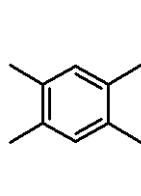
(F-2)



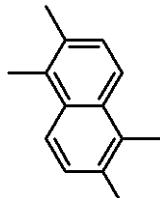
(F-3)



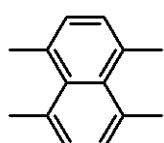
(F-4)



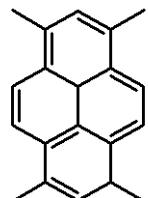
(F-5)



(F-6)



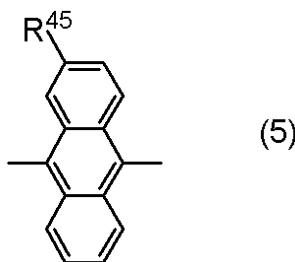
(F-7)



(F-8)

【請求項 1 6】

G が下記の式(5)で表される連結基である、請求項 4 に記載の化合物。

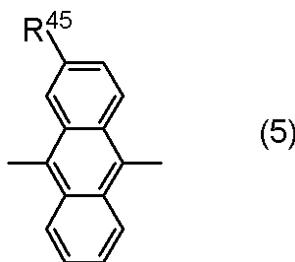


(5)

上記の式中、R⁴⁵ は水素、メチル、t - ブチル、シクロヘキシリル、フェニル、ナフチル、ビフェニリルまたはテルフェニリルである。

【請求項 1 7】

G が下記の式(5)で表される連結基である、請求項8に記載の化合物。

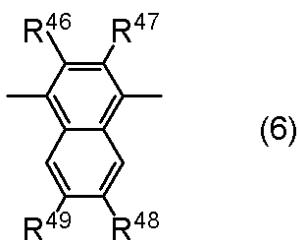


(5)

上記の式中、R⁴⁵ は水素、メチル、t - ブチル、シクロヘキシリル、フェニル、ナフチル、ビフェニリルまたはテルフェニリルである。

【請求項 1 8】

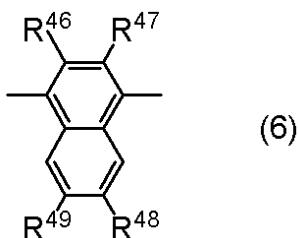
G が下記の式(6)で表される連結基である、請求項 4 に記載の化合物。



上記の式中、R⁴⁶～R⁴⁹は独立して水素、メチル、t-ブチル、シクロヘキシリル、フェニル、ナフチル、ビフェニリルまたはテルフェニリルである。

【請求項19】

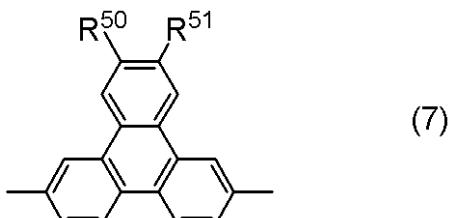
Gが下記の式(6)で表される連結基である、請求項8に記載の化合物。



上記の式中、R⁴⁶～R⁴⁹は独立して水素、メチル、t-ブチル、シクロヘキシリル、フェニル、ナフチル、ビフェニリルまたはテルフェニリルである。

【請求項20】

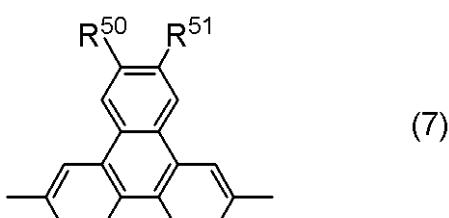
Gが下記の式(7)で表される連結基である、請求項4に記載の化合物。



上記の式中、R⁵⁰およびR⁵¹は独立して水素、メチル、t-ブチル、シクロヘキシリル、フェニル、ナフチル、ビフェニリルまたはテルフェニリルである。

【請求項21】

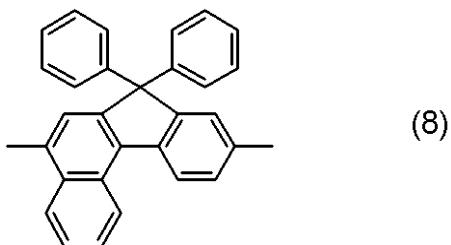
Gが下記の式(7)で表される連結基である、請求項8に記載の化合物。



上記の式中、R⁵⁰およびR⁵¹は独立して水素、メチル、t-ブチル、シクロヘキシリル、フェニル、ナフチル、ビフェニリルまたはテルフェニリルである。

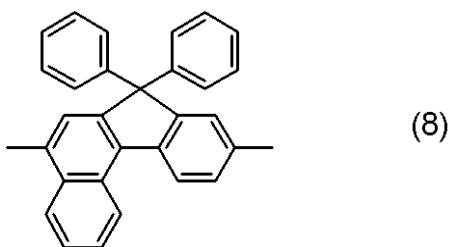
【請求項22】

Gが下記の式(8)で表される連結基である、請求項4に記載の化合物。



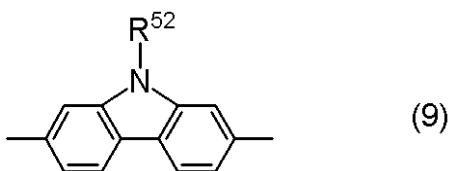
【請求項 2 3】

G が下記の式 (8) で表される連結基である、請求項 8 に記載の化合物。



【請求項 2 4】

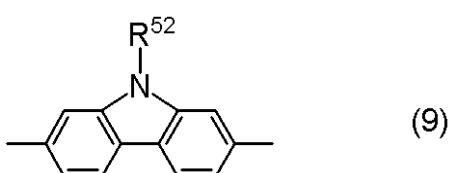
G が下記の式 (9) で表される連結基である、請求項 4 に記載の化合物。



上記の式中、R⁵²は独立してフェニル、ナフチル、ビフェニリルまたはテルフェニリルである。

【請求項 2 5】

G が下記の式 (9) で表される連結基である、請求項 8 に記載の化合物。



上記の式中、R⁵²は独立してフェニル、ナフチル、ビフェニリルまたはテルフェニリルである。

【請求項 2 6】

請求項 1 ~ 2 5 のいずれか 1 項に記載の化合物を含有する有機電界発光素子。

【請求項 2 7】

陽極および陰極により挟持された、少なくとも正孔輸送層、発光層、および電子輸送層を基板上に有する有機電界発光素子であって、該電子輸送層が、請求項 1 ~ 2 5 のいずれか 1 項に記載の化合物を含有する有機電界発光素子。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

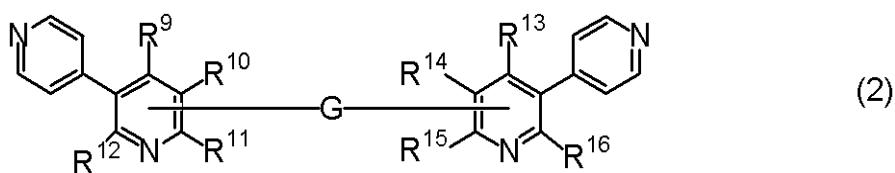
【補正対象項目名】0 0 0 6

【補正方法】変更

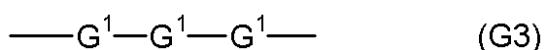
【補正の内容】

【0 0 0 6】

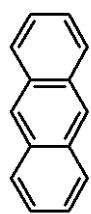
[3] 下記の式 (2) で表される、前記 [2] 項に記載の化合物。



式中、Gは下記の式(G1)～(G3)で表される連結基の群から選択される1つであり；R⁹～R¹²の1つはGに結合する遊離原子価であり、それ以外は水素であり；そして、R¹³～R¹⁶の1つはGに結合する遊離原子価であり、それ以外は水素である。



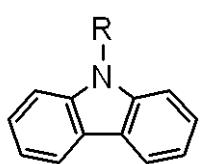
式中、G¹は独立して、下記の式(A-1)～(A-21)および式(B-1)～(B-41)で表される化合物の群から選択される1つから誘導される2価の基である。



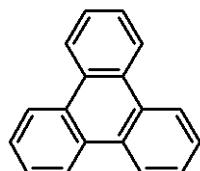
(A-1)



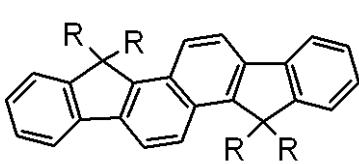
(A-2)



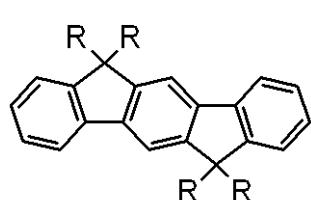
(A-3)



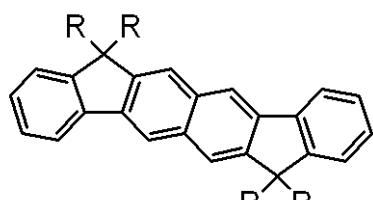
(A-4)



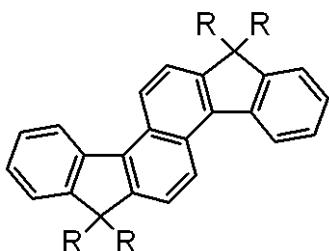
(A-5)



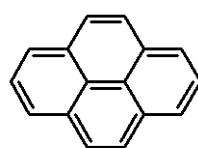
(A-6)



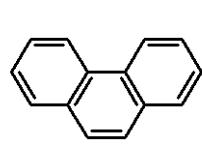
(A-7)



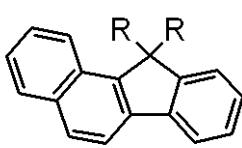
(A-8)



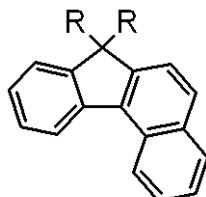
(A-9)



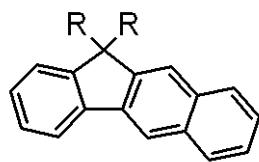
(A-10)



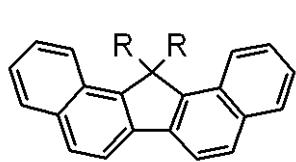
(A-11)



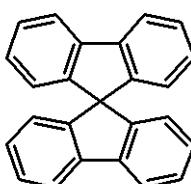
(A-12)



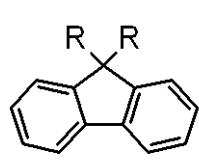
(A-13)



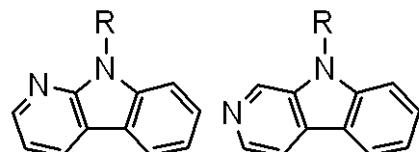
(A-14)



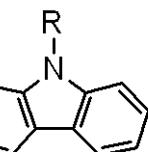
(A-15)



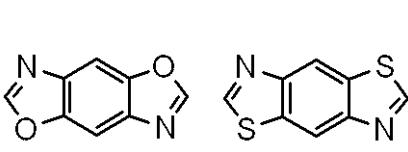
(A-16)



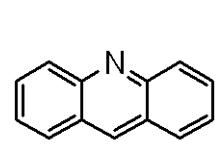
(A-17)



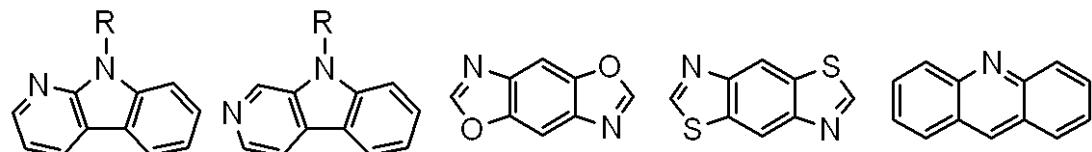
(A-18)



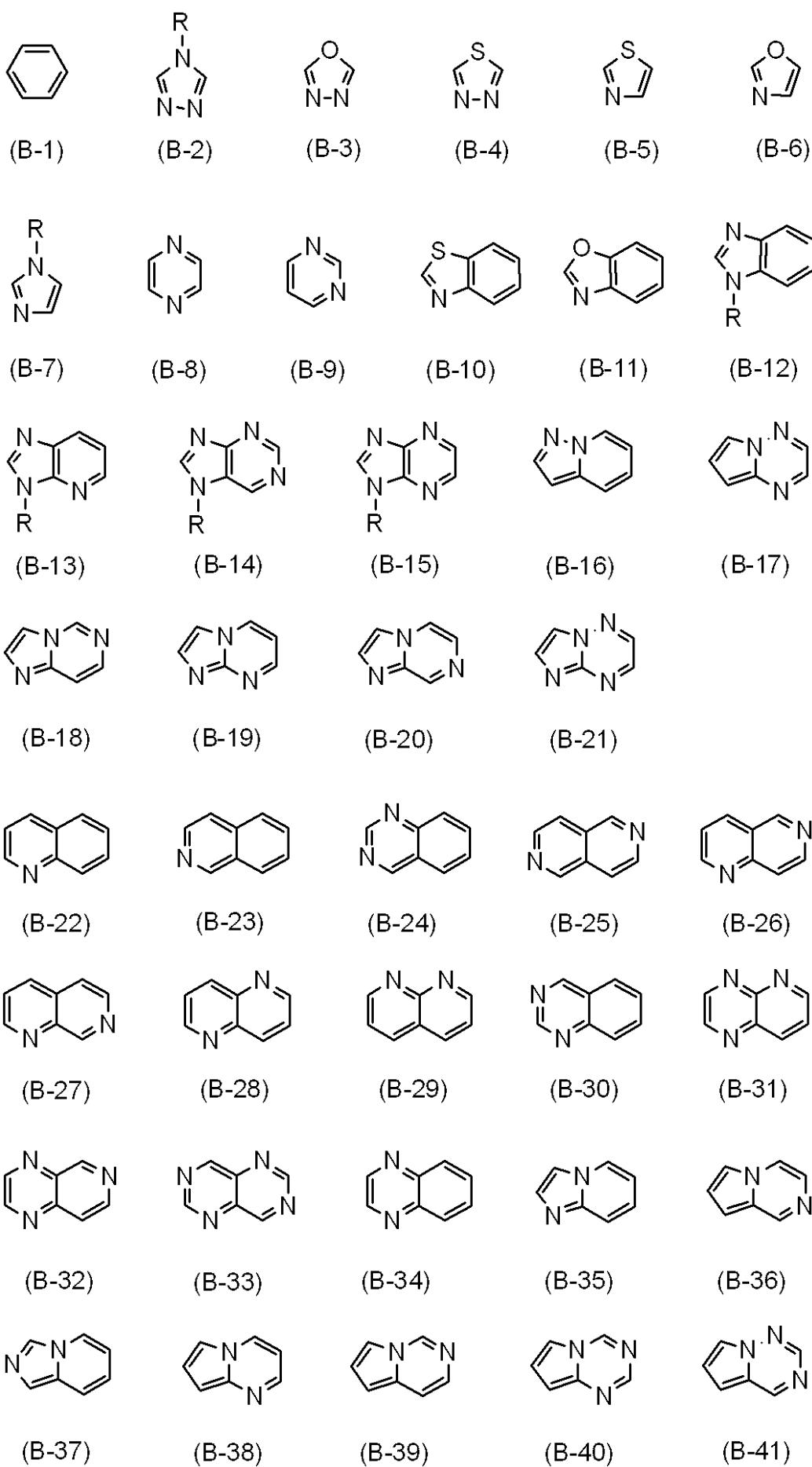
(A-19)



(A-20)



(A-21)



上記の式中、Rは独立して水素、炭素数1～8のアルキル、炭素数3～10のシクロアル

キル、または炭素数 6 ~ 20 のアリールであり；式 (A - 1) ~ (A - 21) および式 (B - 1) ~ (B - 41) で表される化合物から誘導される 2 倍の基は、遊離原子価を持つ原子以外の位置に置換基を有していてもよい。

【手続補正 3】

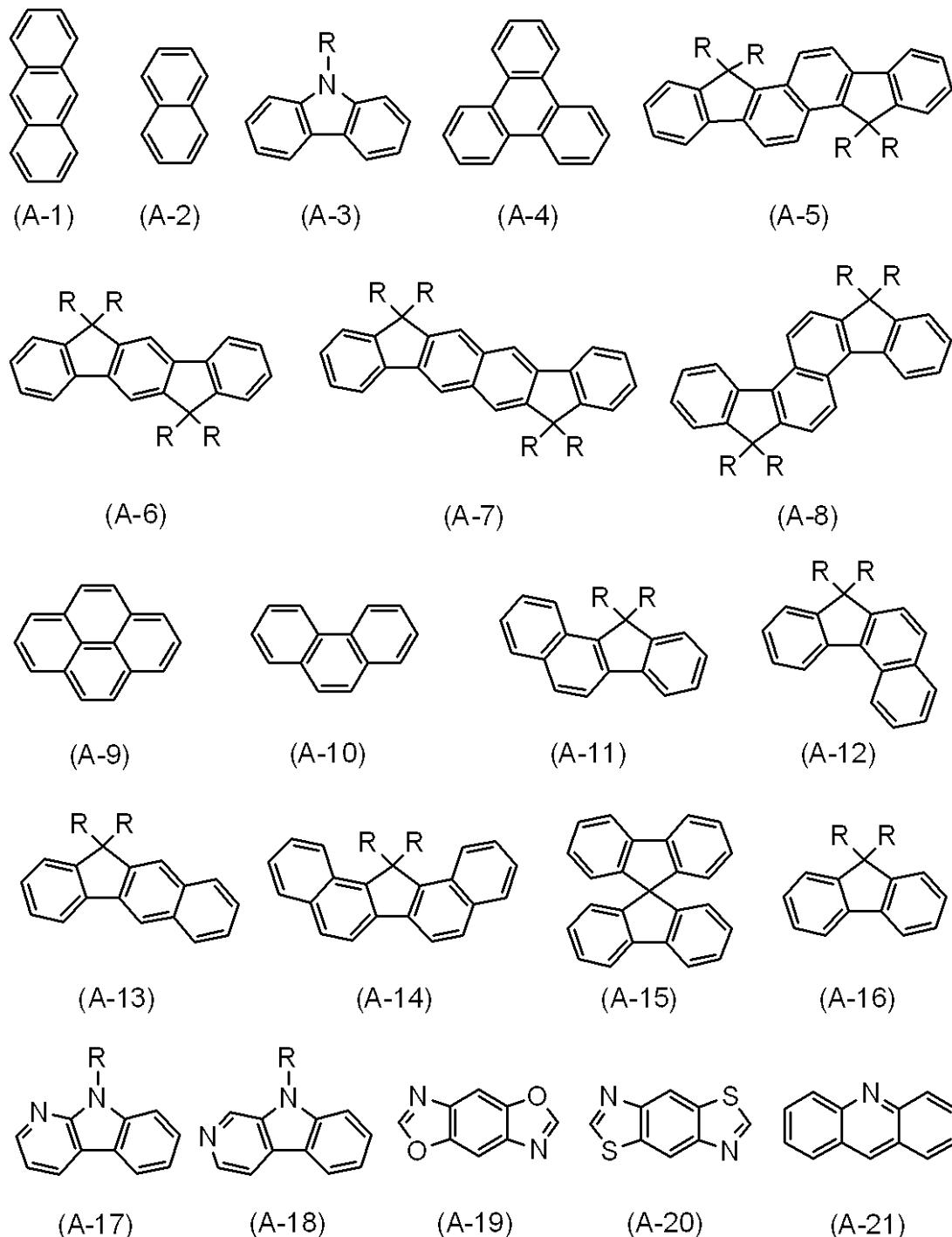
【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0027

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0027】



【手続補正 4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0028

【補正方法】削除

【補正の内容】

【手続補正5】

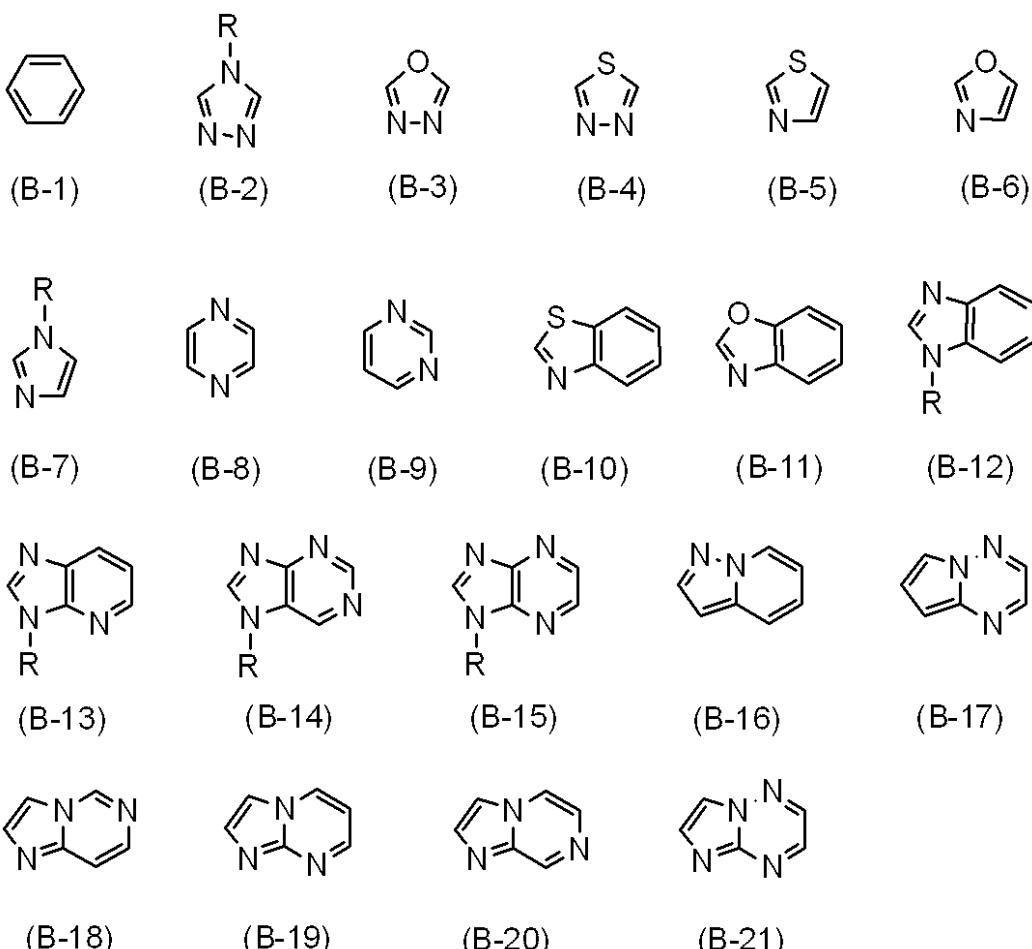
【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0029

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0029】



【手続補正6】

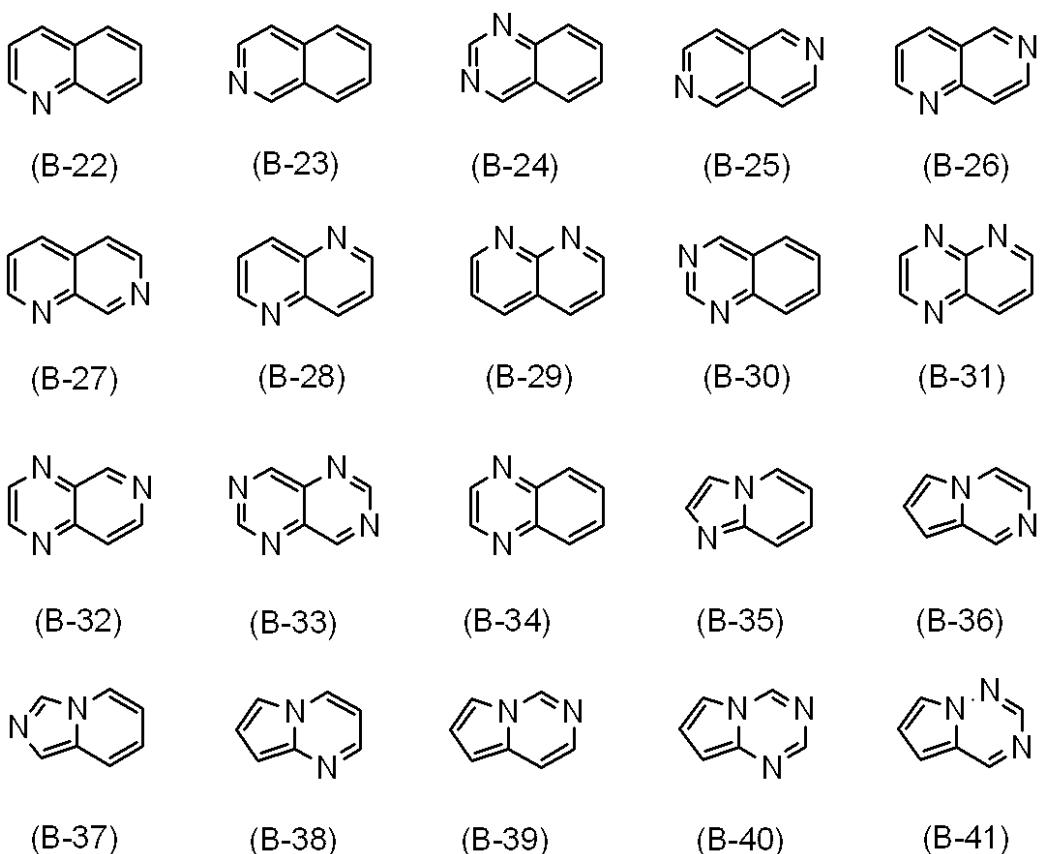
【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0030

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0030】



【手続補正7】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0108

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0108】

真空槽を 1×10^{-3} Paまで減圧し、銅フタロシアニンが入った蒸着用ポートを加熱して、膜厚 20 nm になるように蒸着して正孔注入層を形成し、次いで、NPD入りの蒸着用ポートを加熱して、膜厚 30 nm になるように NPD を蒸着して正孔輸送層を形成した。次に、化合物(A)を入れた蒸着用ポートと化合物(B)を入れた蒸着用ポートを同時に加熱して、膜厚 30 nm になるように蒸着して発光層を形成した。化合物(A)と化合物(B)の重量比がおよそ 95 対 5 になるように蒸着速度を調節した。次に化合物(2-1-2)入りの蒸着用ポートを加熱して、膜厚 20 nm になるように蒸着して電子輸送層を形成した。以上の蒸着速度は 0.001 ~ 3.0 nm / 秒であった。その後、弗化リチウム入りの蒸着用ポートを加熱して、膜厚 0.5 nm になるように 0.003 ~ 0.01 nm / 秒の蒸着速度で蒸着し、次いで、アルミニウム入りの蒸着用ポートを加熱して、膜厚 100 nm になるように 0.1 ~ 1.0 nm / 秒の蒸着速度で蒸着することにより、有機EL素子を得た。ITO電極を陽極、弗化リチウム / アルミニウム電極を陰極として、直流電圧を印加すると、約波長 455 nm の青色発光を得た。輝度 1000 cd / m² を得るための駆動電圧は 5.73 V で、80 時間経過時の輝度は 890 cd / m² だった。

【手続補正8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0116

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0116】

化合物(2-1-21)を上記化合物(C)(特許文献2に記載の化合物II-4)に替えた以外は実施例9と同様にして有機EL素子を得た。ITO電極を陽極、弗化リチウム /

アルミニウム電極を陰極として、初期輝度 $2\,000\text{ cd/m}^2$ を得るための電流密度により、定電流駆動試験を実施した。駆動試験開始電圧は 4.14 V で 80 時間経過時の輝度は $1\,375\text{ cd/m}^2$ であった。

【手続補正 9】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0117

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0117】

(比較例 4)

化合物 (2-1-21) をトリス(8-キノリノール)アルミニウム(A1q₃)に替えた以外は実施例 9 と同様にして有機EL素子を得た。ITO電極を陽極、弗化リチウム/アルミニウム電極を陰極として、初期輝度 $2\,000\text{ cd/m}^2$ を得るための電流密度により、定電流駆動試験を実施した。駆動試験開始電圧は 6.58 V で 80 時間経過時の輝度は $1\,562\text{ cd/m}^2$ であった。