(19)日本国特許庁(JP)　(12)特　許　公　報(B2)　(11)特許番号

特許第6873048号
(P6873048)

(45)発行日　令和3年5月19日(2021.5.19)　(24)登録日　令和3年4月22日(2021.4.22)

(51)Int.Cl.		F I		
H01L 27/32	(2006.01)	H01L	27/32	
H01L 51/50	(2006.01)	H05B	33/14	B
G09F 9/30	(2006.01)	G09F	9/30	365
C07D 209/88	(2006.01)	C07D	209/88	
C07D 401/14	(2006.01)	C07D	401/14	

請求項の数 12　(全 97 頁)　最終頁に続く

(21)出願番号　特願2017-558903(P2017-558903)
(86)(22)出願日　平成28年12月2日(2016.12.2)
(86)国際出願番号　PCT/JP2016/085840
(87)国際公開番号　WO2017/115608
(87)国際公開日　平成29年7月6日(2017.7.6)
審査請求日　令和1年6月20日(2019.6.20)
(31)優先権主張番号　特願2015-256970(P2015-256970)
(32)優先日　平成27年12月28日(2015.12.28)
(33)優先権主張国・地域又は機関
日本国(JP)

前置審査

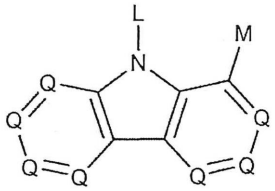
(73)特許権者　506427679
メルク、パテント、ゲゼルシャフト、ミット、ベシュレンクテル、ハフツング
Ｍｅｒｃｋ　Ｐａｔｅｎｔ　ＧｍｂＨ
ドイツ連邦共和国ダルムシュタット、フランクフルター、シュトラーセ、２５０
(74)代理人　110002952
特許業務法人鷲田国際特許事務所
(72)発明者　宮田　康生
東京都千代田区丸の内二丁目７番２号　コニカミノルタ株式会社内
(72)発明者　杉野　元昭
東京都千代田区丸の内二丁目７番２号　コニカミノルタ株式会社内

最終頁に続く

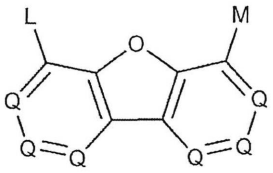
(54)【発明の名称】有機エレクトロルミネッセンス素子、表示装置及び照明装置

(57)【特許請求の範囲】
【請求項１】
陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に設けられた発光層とを含み、
前記発光層の少なくとも一層が、
下記一般式（１）、（２）、（３）、（４）および（６）のいずれか１つで表される構造を有する、アシストドーパント材料と、
蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物の少なくとも一方と、
ホスト化合物と、
を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

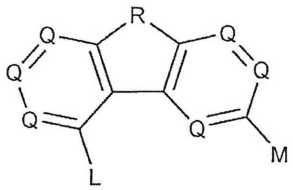
【化１】



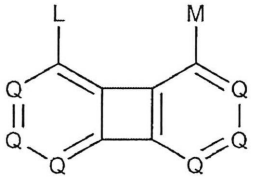
(1)



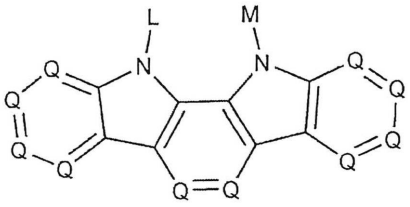
(2)



(3)



(4)



(6)

（一般式（１）、（２）、（３）、（４）および（６）中、

ＬとＭは各々独立に、電子供与性基Ｄ又は電子求引性基Ａを表し、

前記電子供与性基Ｄは、電子供与性基で置換されたアリール基、置換されていてもよい電子供与性基の複素環基、及び置換されていてもよいアミノ基からなる群より選ばれる基であり、

前記電子求引性基Ａは、置換されていてもよいカルボニル基、置換されていてもよいスルホニル基、置換されていてもよいホスフィンオキサイド基、置換されていてもよいボリル基、電子求引性基で置換されていてもよいアリール基、電子求引性基で置換されている電子供与性の複素環基、及び置換されていてもよい電子求引性の複素環基からなる群より選ばれる基であり、

Ｑは各々独立に、置換されてもよい炭素原子又は窒素原子を表し、

炭素原子の置換基は、水素原子、重水素原子、フッ素原子、シアノ基、フッ素で置換されていてもよいアルキル基、電子供与性基又は電子求引性基で置換されていてもよいアリール基、置換されていてもよい電子供与性基の複素環基、置換されていてもよいアミノ基、置換されていてもよい電子求引性基の複素環基、置換されていてもよいカルボニル基、置換されていてもよいスルホニル基、置換されていてもよいホスフィンオキサイド基、及び置換されていてもよいボリル基からなる群より選ばれる基であり、

一般式（３）中、

Ｒは置換されてもよい炭素原子、酸素原子、置換されてもよい窒素原子、硫黄原子、置換されてもよいホウ素原子又は置換されてもよいケイ素原子を表し、

前記Ｒの置換基は、アルキル基、シクロアルキル基、アリール基、芳香族複素環基、アルコキシ基、シクロアルコキシ基、アミノ基、ハロゲン原子、フッ化炭化水素基、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、メルカプト基、シリル基、ホスホノ基からなる群より選ばれる基である。）

【請求項２】

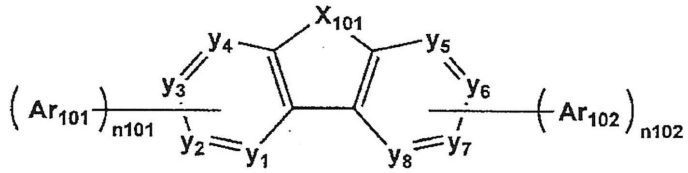
一般式（１）、（２）、（３）、（４）および（６）において、前記ＬとＭの一方が前記電子供与性基Ｄであり、他方が前記電子求引性基Ａである、請求項１に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項３】

前記電子供与性基Ｄは、電子供与性基で置換されたアリール基又は置換されていてもよい電子供与性の複素環基である、請求項１又は２に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

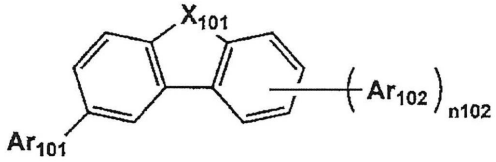
【請求項４】
前記電子求引性基Ａは、電子求引性基で置換されていてもよいアリール基、電子求引性基で置換されている電子供与性の複素環基、又は置換されていてもよい電子求引性の複素環基である、請求項１～３のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
【請求項５】
前記アシストドーパント材料の最低励起一重項準位と最低励起三重項準位とのエネルギー差の絶対値であるΔＥ$_{ＳＴ}$が、０．５０ｅＶ以下である、請求項１～４のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
【請求項６】
前記アシストドーパント材料が、励起子を生成する、請求項１～５のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
【請求項７】
前記アシストドーパント材料が、蛍光を放射する、請求項１～６のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
【請求項８】
前記アシストドーパント材料が、遅延蛍光を放射する、請求項７に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
【請求項９】
前記ホスト化合物が、下記一般式（Ｉ）で表される構造を有する、請求項１～８のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
【化２】

一般式(I)



（一般式（Ｉ）中、
Ｘ$_{１０１}$は、ＮＲ$_{１０１}$、酸素原子、硫黄原子、スルフィニル基、スルホニル基、ＣＲ$_{１０２}$Ｒ$_{１０３}$又はＳｉＲ$_{１０４}$Ｒ$_{１０５}$を表し、
ｙ$_{１}$～ｙ$_{８}$は、それぞれ独立に、ＣＲ$_{１０６}$又は窒素原子を表し、
Ｒ$_{１０１}$～Ｒ$_{１０６}$は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、互いに結合して環を形成してもよく、
Ａｒ$_{１０１}$及びＡｒ$_{１０２}$は、それぞれ独立に、置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表し、
ｎ１０１及びｎ１０２は、各々０～４の整数を表す。
ただし、Ｒ$_{１０１}$が水素原子の場合は、ｎ１０１は１～４の整数を表す。）
【請求項１０】
前記一般式（Ｉ）で表される構造を有するホスト化合物が、下記一般式（II）で表される構造を有する、請求項９に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
【化３】

一般式(II)



（一般式（II）中、
X_{101}は、NR_{101}、酸素原子、硫黄原子、スルフィニル基、スルホニル基、$CR_{102}R_{103}$又は$SiR_{104}R_{105}$を表し、
R_{101}～R_{105}は、各々水素原子又は置換基を表し、互いに結合して環を形成してもよく、
Ar_{101}及びAr_{102}は、それぞれ独立に、置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表し、
ｎ１０２は０～４の整数を表す。）
【請求項１１】
請求項１～１０のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、表示装置。
【請求項１２】
請求項１～１０のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、照明装置。
【発明の詳細な説明】
【技術分野】
【０００１】
本発明は、π共役系化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子材料、発光材料、電荷輸送材料、発光性薄膜、有機エレクトロルミネッセンス素子、その有機エレクトロルミネッセンス素子が具備された表示装置及び照明装置に関する。より詳しくは、発光効率が改良されたπ共役系化合物等に関する。
【背景技術】
【０００２】
有機材料のエレクトロルミネッセンス（Ｅｌｅｃｔｒｏ　Ｌｕｍｉｎｅｓｃｅｎｃｅ：以下「ＥＬ」と略記する。）を利用した有機ＥＬ素子（「有機電界発光素子」ともいう。）は、平面発光を可能とする新しい発光システムとして既に実用化されている技術である。有機ＥＬ素子は、電子ディスプレイはもとより、最近では照明機器にも適用され、その発展が期待されている。
【０００３】
有機ＥＬ素子の発光方式としては、三重項励起状態から基底状態に戻る際に光を発する「リン光発光」と、一重項励起状態から基底状態に戻る際に光を発する「蛍光発光」の二通りがある。
有機ＥＬ素子に電界をかけると、陽極と陰極からそれぞれ正孔と電子が注入され、発光層において再結合し励起子を生じる。このとき一重項励起子と三重項励起子とが２５％：７５％の割合で生成するため、三重項励起子を利用するリン光発光の方が、蛍光発光に比べ、理論的に高い内部量子効率が得られることが知られている。
しかしながら、リン光発光方式において実際に高い量子効率を得るためには、中心金属にイリジウムや白金などの希少金属を用いた錯体を用いる必要があり、将来的に希少金属の埋蔵量や金属自体の値段が産業上大きな問題となることが懸念される。
【０００４】
一方で、蛍光発光型においても発光効率を向上させるために様々な開発がなされており、近年新しい動きが出てきた。
例えば、特許文献１には、二つの三重項励起子の衝突により一重項励起子が生成する現象（Ｔｒｉｐｌｅｔ－Ｔｒｉｐｌｅｔ　Ａｎｎｉｈｉｌａｔｉｏｎ：以下、適宜「ＴＴＡ」と略記する。また、Ｔｒｉｐｌｅｔ－Ｔｒｉｐｌｅｔ　Ｆｕｓｉｏｎ：「ＴＴＦ」ともいう。）に着目し、ＴＴＡを効率的に起こして蛍光素子の高効率化を図る技術が開示されている。この技術により蛍光発光材料の発光効率は従来の蛍光発光材料の２～３倍まで向上しているが、ＴＴＡにおける理論的な一重項励起子生成効率は４０％程度にとどまるため、依然としてリン光発光に比べ高発光効率化の問題を有している。
【０００５】

さらに近年では、三重項励起子から一重項励起子への逆項間交差（Ｒｅｖｅｒｓｅ Ｉｎｔｅｒｓｙｓｔｅｍ Ｃｒｏｓｓｉｎｇ：以下、適宜「ＲＩＳＣ」と略記する。）が生じる現象を利用した現象（熱活性型遅延蛍光（「熱励起型遅延蛍光」ともいう：Ｔｈｅｒｍａｌｌｙ Ａｃｔｉｖａｔｅｄ Ｄｅｌａｙｅｄ Ｆｌｕｏｒｅｓｃｅｎｃｅ：以下、適宜「ＴＡＤＦ」と略記する。）を利用した蛍光発光材料と、有機ＥＬ素子への利用の可能性が報告されている（例えば、特許文献２、非特許文献１、非特許文献２参照。）。このＴＡＤＦ機構による遅延蛍光を利用すると、電界励起による蛍光発光においても、理論的にはリン光発光と同等の１００％の内部量子効率が可能となる。

【０００６】

ＴＡＤＦ現象発現のためには、室温又は発光素子中の発光層温度で電界励起により生じた７５％の三重項励起子から一重項励起子への逆項間交差が起こる必要がある。さらに、逆項間交差により生じた一重項励起子が、直接励起により生じた２５％の一重項励起子と同様に蛍光発光することにより、１００％の内部量子効率が理論上可能となる。この逆項間交差が起こるためには、最低励起一重項エネルギー準位（S_1）と最低三重項励起エネルギー準位（T_1）の差の絶対値（以降、ΔE_{ST}と呼ぶ。）が極めて小さいことが必須である。

【０００７】

さらに、ホスト化合物と発光性化合物からなる発光層に、ＴＡＤＦ性を示す化合物を第三成分（アシストドーパント）として発光層に含めると、高発光効率発現に有効であることが知られている（非特許文献３参照。）。アシストドーパント上に２５％の一重項励起子と７５％の三重項励起子を電界励起により発生させることによって、三重項励起子は逆項間交差（ＲＩＳＣ）を伴って一重項励起子を生成することができる。一重項励起子のエネルギーは、発光性化合物へエネルギー移動し、発光性化合物が移動してきたエネルギーにより発光することが可能となる。従って、理論上１００％の励起子エネルギーを利用して、発光性化合物を発光させることが可能となり、高発光効率が発現する。

【０００８】

有機化合物においてΔE_{ST}を極小化するには、分子内の最高被占分子軌道（ＨＯＭＯ）と最低空分子軌道（ＬＵＭＯ）を混在させずに局在化させることが望ましい。

【０００９】

図１及び図２は、ＴＡＤＦ現象を発現する化合物（ＴＡＤＦ化合物）と一般的な蛍光発光性化合物のエネルギーダイヤグラム示した模式図である。例えば、図１に示す構造を有する２ＣｚＰＮでは、ベンゼン環上の１位と２位のカルバゾリル基にＨＯＭＯが局在し、４位と５位のシアノ基にＬＵＭＯが局在している。そのため、２ＣｚＰＮのＨＯＭＯとＬＵＭＯを分離することができ、ΔE_{ST}が極めて小さくなってＴＡＤＦ現象を発現する。一方、２ＣｚＰＮの４位と５位のシアノ基をメチル基に置き換えた２ＣｚＸｙ（図２）では、構造は類似しているが、２ＣｚＰＮでみられるＨＯＭＯとＬＵＭＯの明確な分離ができないために、ΔE_{ST}を小さくすることはできず、ＴＡＤＦ現象を発現させるには至らない。

【００１０】

従来技術では、ＨＯＭＯとＬＵＭＯを明確に分離するには、強力な電子供与性基又は電子求引性基を用いる手法が知られている。しかしながら、強力な電子供与性基又は電子求引性基を用いることは、強い分子内電荷移動（ＣＴ）性の励起状態を形成するため、吸収スペクトルや発光スペクトルが長波長化する要因となり、発光波長の制御が困難であるという課題が生じている。逆に、発光波長を制御するために電子供与性又は電子求引性を弱めると、ＴＡＤＦ現象の発現に支障をきたすことになる。そのため、発光波長の制御しながら、ＴＡＤＦ現象を発現させる新たな手法が望まれている。

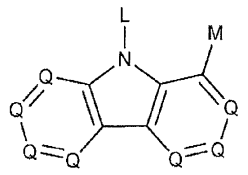
【先行技術文献】

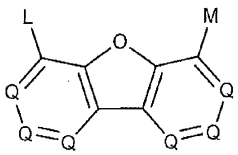
【特許文献】

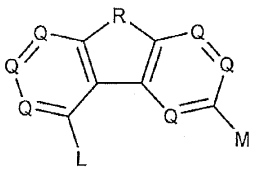
【００１１】

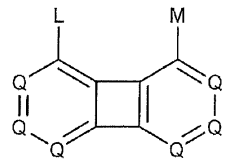
【特許文献１】国際公開第２０１０／１３４３５０号

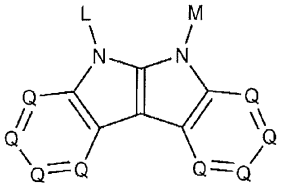
【特許文献２】特開２０１３－１１６９７５号公報
【非特許文献】
【００１２】
【非特許文献１】Ｈ．Ｕｏｙａｍａ，ｅｔ　ａｌ．，Ｎａｔｕｒｅ，２０１２，４９２，２３４－２３８
【非特許文献２】Ｑ．Ｚｈａｎｇ　ｅｔ　ａｌ．，Ｎａｔｕｒｅ，Ｐｈｏｔｏｎｉｃｓ，２０１４，８，３２６－３３２
【非特許文献３】Ｈ．Ｎａｋａｎｏｔａｎｉ，ｅｔ　ａｌ．，Ｎａｔｕｒｅ　Ｃｏｍｍｕｎｉｃａｉｏｎ，２０１４，５，４０１６－４０２２．
【発明の概要】
【発明が解決しようとする課題】
【００１３】
本発明は、上記問題・状況に鑑みてなされたものであり、その解決課題は、例えば有機エレクトロルミネッセンス素子の発光効率を高めうる新たなπ共役系化合物を提供することである。また、当該π共役系化合物を用いた、有機エレクトロルミネッセンス素子材料、発光材料、電荷輸送材料、発光性薄膜、有機エレクトロルミネッセンス素子、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子が具備された表示装置及び照明装置を提供することである。
【課題を解決するための手段】
【００１４】
本発明者は、上記課題を解決すべく、上記問題の原因等について検討した結果、電子供与性基Ｄ同士、電子求引性基Ａ同士、又は電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａの間に、３～５個の原子が存在し、これら３～５原子が全て含まれる２個又は３個の環構造を有するπ共役系化合物が、例えば有機エレクトロルミネッセンス素子の発光効率を向上できることを新たに見出して本発明に至った。
すなわち、本発明に係る上記課題は、以下の手段により解決される。
【００１５】
［１］　下記一般式（１）～（６）のいずれか１つで表される構造を有する、π共役系化合物。
【化１】

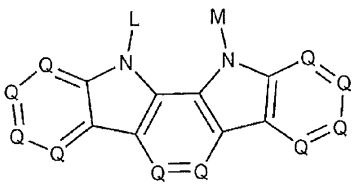

(1)


(2)


(3)


(4)


(5)

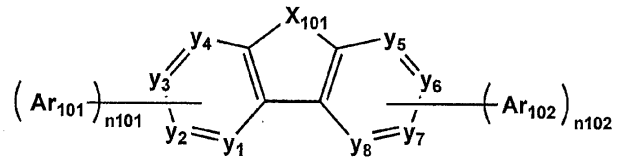

(6)

（一般式（１）～（６）中、
ＬとＭは各々独立に、電子供与性基Ｄ又は電子求引性基Ａを表し、
前記電子供与性基Ｄは、電子供与性基で置換されたアリール基、置換されていてもよい電子供与性基の複素環基、及び置換されていてもよいアミノ基からなる群より選ばれる基であり、
前記電子求引性基Ａは、置換されていてもよいカルボニル基、置換されていてもよいス

ルホニル基、置換されていてもよいホスフィンオキサイド基、置換されていてもよいボリル基、電子求引性基で置換されていてもよいアリール基、電子求引性基で置換されている電子供与性の複素環基、及び置換されていてもよい電子求引性の複素環基からなる群より選ばれる基であり、
Ｑは各々独立に、炭素原子又は窒素原子を表し、
一般式（３）中、
Ｒは炭素原子、酸素原子、窒素原子、硫黄原子、ホウ素原子又はケイ素原子を表す。）
［２］　一般式（１）～（６）において、ＬとＭの一方が前記電子供与性基Ｄであり、他方が前記電子求引性基Ａである、［１］に記載のπ共役系化合物。
［３］　前記電子供与性基Ｄは、電子供与性基で置換されたアリール基又は置換されていてもよい電子供与性基の複素環基である、［１］又は［２］に記載のπ共役系化合物。
［４］　前記電子求引性基Ａは、電子求引性基で置換されていてもよいアリール基、電子求引性基で置換されている電子供与性の複素環基、又は置換されていてもよい電子求引性の複素環基である、［１］～［３］のいずれかに記載のπ共役系化合物。
［５］　最低励起一重項準位と最低励起三重項準位とのエネルギー差の絶対値ΔE_{ST}が０．５０ｅＶ以下である、［１］～［４］のいずれかに記載のπ共役系化合物。
【００１６】
［６］　［１］～［５］のいずれかに記載のπ共役系化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子材料。
［７］　［１］～［５］のいずれかに記載のπ共役系化合物を含み、前記π共役系化合物が蛍光を放射する、発光材料。
【００１７】
［８］　前記π共役系化合物が、遅延蛍光を放射する、［７］に記載の発光材料。
［９］　［１］～［５］のいずれかに記載のπ共役系化合物を含み、前記π共役系化合物が遅延蛍光を放射する、電荷輸送材料。
［１０］　［１］～［５］のいずれかに記載のπ共役系化合物を含む、発光性薄膜。
［１１］　前記π共役系化合物が、遅延蛍光を放射する、［１０］に記載の発光性薄膜。
［１２］　陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に設けられた発光層とを含み、
前記発光層の少なくとも一層が、［１］～［５］のいずれかに記載のπ共役系化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。
［１３］　前記π共役系化合物が、励起子を生成する、［１２］に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
［１４］　前記π共役系化合物が、蛍光を放射する、［１２］又は［１３］に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
［１５］　前記π共役系化合物が、遅延蛍光を放射する、［１４］に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
［１６］　前記発光層が、前記π共役系化合物と、ホスト化合物と、を含む、［１２］～［１５］のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
［１７］　前記発光層は、前記π共役系化合物と、蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物の少なくとも一方とを含む、［１２］～［１６］のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
［１８］　前記発光層は、前記π共役系化合物と、蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物の少なくとも一方と、ホスト化合物とを含む、［１２］～［１６］のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。
【００１８】
［１９］　前記ホスト化合物が、下記一般式（Ｉ）で表される構造を有する、［１６］又は［１８］に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化２】

一般式(I)



（一般式（Ｉ）中、

Ｘ$_{101}$は、ＮＲ$_{101}$、酸素原子、硫黄原子、スルフィニル基、スルホニル基、ＣＲ$_{102}$Ｒ$_{103}$又はＳｉＲ$_{104}$Ｒ$_{105}$を表し、

ｙ$_{1}$～ｙ$_{8}$は、それぞれ独立に、ＣＲ$_{106}$又は窒素原子を表し、

Ｒ$_{101}$～Ｒ$_{106}$は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、互いに結合して環を形成してもよく、

Ａｒ$_{101}$及びＡｒ$_{102}$は、それぞれ独立に、置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表し、

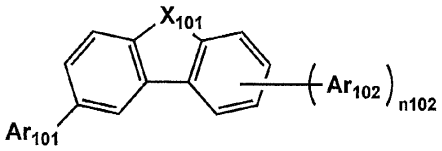
ｎ１０１及びｎ１０２は、各々０～４の整数を表す。

ただし、Ｒ$_{101}$が水素原子の場合は、ｎ１０１は１～４の整数を表す。）

［２０］　前記一般式（Ｉ）で表される構造を有するホスト化合物が、下記一般式（II）で表される構造を有する、［１９］に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化３】

一般式(II)



（一般式（II）中、

Ｘ$_{101}$は、ＮＲ$_{101}$、酸素原子、硫黄原子、スルフィニル基、スルホニル基、ＣＲ$_{102}$Ｒ$_{103}$又はＳｉＲ$_{104}$Ｒ$_{105}$を表し、

Ｒ$_{101}$～Ｒ$_{105}$は、各々水素原子又は置換基を表し、互いに結合して環を形成してもよく、

Ａｒ$_{101}$及びＡｒ$_{102}$は、それぞれ独立に、置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表し、

ｎ１０２は０～４の整数を表す。）

【００１９】

［２１］　［１２］～［２０］のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、表示装置。

［２２］　［１２］～［２０］のいずれかに記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を含む、照明装置。

【発明の効果】

【００２０】

本発明の上記手段により、例えば有機エレクトロルミネッセンス素子の発光効率を改良しうる新たなπ共役系化合物を提供することができる。さらに、本発明の上記手段により、発光効率の改良を実現した新たな有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することができる。また、当該π共役系化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子材料、発光性薄膜、発光材料、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子が具備された表示装置及び照明装置を提供することができる。

【図面の簡単な説明】

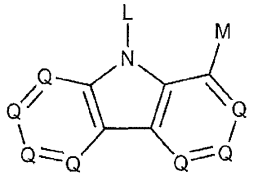
【００２１】

【図１】ＴＡＤＦ化合物のエネルギーダイヤグラム示した模式図である。

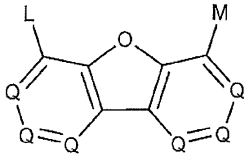
【図２】一般的な蛍光発光性化合物のエネルギーダイヤグラム示した模式図である。
【図３】π共役系化合物がアシストドーパント材料として機能する場合のエネルギーダイヤグラムを示した模式図である。
【図４】π共役系化合物がホスト材料として機能する場合のエネルギーダイヤグラムを示した模式図である。
【図５】有機ＥＬ素子から構成される表示装置の一例を示した模式図である。
【図６】アクティブマトリクス方式による表示装置の模式図である。
【図７】画素の回路を示した概略図である。
【図８】パッシブマトリクス方式による表示装置の模式図である。
【図９】照明装置の概略図である。
【図１０】照明装置の模式図である。
【図１１】実施例で作製した、本発明のπ共役系化合物を用いた共蒸着膜６－１について、蛍光減衰測定を行った際の励起光照射からの時間と光子数との関係を示すグラフである。

【発明を実施するための形態】
【００２２】
以下、本発明とその構成要素、及び本発明を実施するための形態・態様について詳細な説明をする。なお、本願において、「～」は、その前後に記載される数値を下限値及び上限値として含む意味で使用する。
【００２３】
本発明者は、電子供与性基Ｄ及び／又は電子求引性基Ａを含むπ共役系化合物において、電子供与性基Ｄ同士、電子求引性基Ａ同士、又は電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａの間に３～５個の原子が存在し、これらの３～５個の原子の全てが環構成原子として含まれる２個又は３個の環構造を有する分子設計を行うことで、ＴＡＤＦ現象をより発現させることができることを見いだした。但し、２つの電子供与性基Ｄの間に３～５個の原子が存在し、これらの原子の全てを環構成原子として含む２個又は３個の環構造が形成される場合、該環構造は電子求引性の環である。同様に、２つの電子求引性基Ａの間に３～５個の原子が存在し、これらの原子の全てを環構成原子として含む２個又は３個の環構造が形成される場合、該環構造は電子供与性の環である。２個又は３個の環構造とは、２個又は３個の単環式芳香族環が縮合した縮合環を意味する。
ＴＡＤＦ現象をより発現させるためには、ＨＯＭＯとＬＵＭＯを分離してＣＴ性の励起状態を形成する必要があることが知られている。本願手法では、電子供与性基Ｄ同士、電子求引性基Ａ同士、又は電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａの間に、３～５個の原子を含む、２個又は３個の環構造を配置することで、ＨＯＭＯとＬＵＭＯを分離し、ΔE_{ST}を極小化することに成功している。更に本発明における特定の構造においては、電子供与性基Ｄ同士、電子求引性基Ａ同士、又は電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａは、平行に近い角度で空間的に対面することが可能となるため、ＣＴ性の励起状態を効果的に形成し、安定化することで、無輻射失活を抑制できると考えられる。このようなΔE_{ST}の極小化と無輻射失活の抑制とによって、本願化合物の発光効率が向上できたものと考えられる。
【００２４】
また、ＴＡＤＦを発現するＣＴ性の励起状態では、電子供与部と電子求引部が電荷分離した状態であることが知られている。化合物が高い発光量子収率を発現するためには、電荷分離状態を安定化させることが重要である。
【００２５】
（同種同士の組み合わせ）
本発明のπ共役系化合物が２つの電子供与性基Ｄ又は２つの電子求引性基Ａを有する場合、電子供与性基Ｄ同士又は電子求引性基Ａ同士の間に３～５原子を含んだ環構造を有する分子設計では、電子供与性基Ｄ同士又は電子求引性基Ａ同士が、励起状態において空間的に共鳴して正電荷又は負電荷を安定化し、分子全体としてＣＴ性の励起状態を安定に形成できるので、無輻射失活が抑制でき、発光効率を高めることができると考えられる。

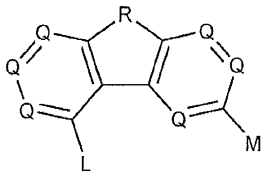
【００２６】
（異種同士の組み合わせ）
本発明のπ共役系化合物が電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａとを有する場合、電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａの間に３～５原子を含んだ環構造を有する分子設計では、電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａが、励起状態において平行に近い角度で空間的に対面しうるので、電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａとの間でＣＴ性の励起状態を効果的に形成し、安定化することができる。その結果、無輻射失活を抑制でき、発光効率を高めることができると考えられる。また、そのようなπ共役系化合物は、ΔE_{ST}を極小としうるので、発光効率をさらに高めることができると考えられる。
【００２７】
具体的には、次のように考えられる。従来技術では、電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａを直接連結し、且つそれらが空間的に作用しにくい位置にあることにより、スルーボンドのみでＣＴ性励起状態を形成させる手法が知られている。しかし、このような従来技術では、励起状態の安定化にあまり寄与しないため、基底状態、一重項励起状態、三重項励起状態で化合物の構造がそれぞれ変化し、無輻射失活が生じるという問題がある。一方、本発明のように電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａとが空間上で平行に近い角度で対面すると、ごく近傍に位置する電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａとの間（即ち、スルースペース）でＣＴ性の励起状態が形成されると考えられる。その結果、ＣＴ性の励起状態が安定化し、従来技術よりも無輻射失活を抑制することができるため、有機エレクトロルミネッセンス素子による高発光効率の発現において有利になると考えられる。
【００２８】
中でも、本発明のπ共役系化合物においては、一般式（１）～（６）において、ＬとＭの一方が電子供与性基Ｄであり、他方が電子求引性基Ａであること、即ち、化合物が電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａの両方を有することが、ΔE_{ST}を小さくすることができ、高い発光効率を達成する上で好ましい。また、本発明のπ共役系化合物のように電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａとが対面する構造であると、強力な電子供与性基や電子求引性基を使用しなくとも、高い発光効率を達成しうるため好ましい。それにより、吸収スペクトルや発光スペクトルの長波長化も抑制できると考えられる。
【００２９】
１．π共役系化合物
本発明のπ共役系化合物は、下記一般式（１）～（６）のいずれか１つで表される構造を有する、化合物である。
【００３０】
【化４】



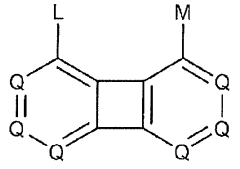
(1)



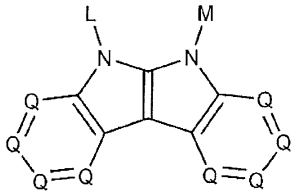
(2)



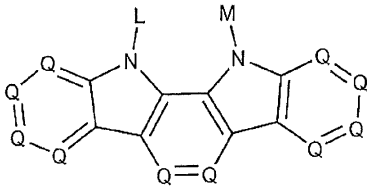
(3)



(4)



(5)



(6)

【００３１】
一般式（１）～（６）において、ＬとＭはそれぞれ独立して電子供与性基Ｄ又は電子求

引性基Ａを表す。

【００３２】

（電子供与性基Ｄ）

一般式（１）～（６）において、Ｌ又はＭで表される電子供与性基Ｄは、「電子供与性基で置換されたアリール基」、「置換されていてもよい電子供与性基の複素環基」、又は「置換されていてもよいアミノ基」でありうる。

【００３３】

Ｄで表される「電子供与性基で置換されたアリール基」における「アリール基」としては、炭素数が６～２４の芳香族炭化水素環から誘導される基であることが好ましい。そのような芳香族炭化水素環の例には、ベンゼン環、インデン環、ナフタレン環、アズレン環、フルオレン環、フェナントレン環、アントラセン環、アセナフチレン環、ビフェニレン環、ナフタセン環、ピレン環、ペンタレン環、アセアントリレン環、ヘプタレン環、トリフェニレン環、ａｓ－インダセン環、クリセン環、ｓ－インダセン環、プレイアデン環、フェナレン環、フルオランテン環、ペリレン環、アセフェナントリレン環、ビフェニル環、ターフェニル環、テトラフェニル環などを挙げられる。より好ましくは、ベンゼン環、ナフタレン環、フルオレン環、フェナントレン環、アントラセン環、ビフェニレン環、クリセン環、ピレン環、トリフェニレン環、クリセン環、フルオランテン環、ペリレン環、ビフェニル環、ターフェニル環が挙げられる。

【００３４】

Ｄで表される「電子供与性基で置換されたアリール基」における「電子供与性基」としては、アルキル基、アルコキシ基、置換されていてもよいアミノ基、置換されていてもよい電子供与性の複素環基などが挙げられる。好ましくは、置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよい電子供与性基の複素環基が挙げられる。

【００３５】

Ｄで表される「電子供与性基で置換されたアリール基」における「電子供与性基」の「アルキル基」としては、直鎖、分岐、又は環状のいずれでもよく、例えば、炭素数１～２０の直鎖、分岐、又は環状のアルキル基が挙げられ、具体的には、メチル基、エチル基、ｎ－プロピル基、イソプロピル基、ｎ－ブチル基、ｓ－ブチル基、ｔ－ブチル基、ｎ－ペンチル基、ネオペンチル基、ｎ－ヘキシル基、シクロヘキシル基、２－エチルヘキシル基、ｎ－ヘプチル基、ｎ－オクチル基、２－ヘキシルオクチル基、ｎ－ノニル基、ｎ－デシル基、ｎ－ウンデシル基、ｎ－ドデシル基、ｎ－トリデシル基、ｎ－テトラデシル基、ｎ－ペンタデシル基、ｎ－ヘキサデシル基、ｎ－ヘプタデシル基、ｎ－オクタデシル基、ｎ－ノナデシル基、ｎ－イコシル基が挙げられる。好ましくは、メチル基、エチル基、イソプロピル基、ｔ－ブチル基、シクロヘキシル基、２－エチルヘキシル基、２－ヘキシルオクチル基が挙げられる。

【００３６】

Ｄで表される「電子供与性基で置換されたアリール基」の「電子供与性基」の「アルコシキ基」としては、直鎖、分岐、又は環状のいずれでもよく、例えば、炭素数１～２０の直鎖、分岐、又は環状のアルキル基が挙げられ、具体的には、メトキシ基、エトキシ基、ｎ－プロポキシ基、イソプロポキシ基、ｎ－ブトキシ基、イソブトキシ基、ｔ－ブトキシ基、ｎ－ペンチルオキシ基、ネオペンチルオキシ基、ｎ－ヘキシルオキシ基、シクロヘキシルオキシ基、ｎ－ヘプチルオキシ基、ｎ－オクチルオキシ基、２－エチルヘキシルオキシ基、ノニルオキシ基、デシルオキシ基、３，７－ジメチルオクチルオキシ基、ｎ－ウンデシルオキシ基、ｎ－ドデシルオキシ基、ｎ－トリデシルオキシ基、ｎ－テトラデシルオキシ基、２－ｎ－ヘキシル－ｎ－オクチルオキシ基、ｎ－ペンタデシルオキシ基、ｎ－ヘキサデシルオキシ基、ｎ－ヘプタデシルオキシ基、ｎ－オクタデシルオキシ基、ｎ－ノナデシルオキシ基、ｎ－イコシルオキシ基が挙げられ、メトキシ基、エトキシ基、イソプロポキシ基、ｔ－ブトキシ基、シクロヘキシルオキシ基、２－エチルヘキシルオキシ基、２－ヘキシルオクチルオキシ基が好ましい。

【００３７】

Ｄで表される「電子供与性基で置換されたアリール基」の「電子供与性基」の「置換されていてもよいアミノ基」の置換基としては、アルキル基、アルキル基で置換されていてもよいアリール基が挙げられ、アルキル基及びアリール基は、それぞれ前述のアルキル基及びアリール基と同義である。

【００３８】

Ｄで表される「置換されていてもよい電子供与性の複素環基」における「電子供与性の複素環基」としては、炭素数が４～２４の電子供与性の複素環から誘導される基であることが好ましい。そのような複素環の例には、ピロール環、インドール環、カルバゾール環、アザカルバゾール環、ジアザカルバゾール環、インドロインドール環、９，１０－ジヒドロアクリジン環、１０，１１－ジヒドロジベンゾアゼピン、５，１０－ジヒドロジベンゾアザシリン、フェノキサジン環、フェノチアジン環、ジベンゾチオフェン環、ベンゾフリルインドール環、ベンゾチエノインドール環、インドロカルバゾール環、ベンゾフリルカルバゾール環、ベンゾチエノカルバゾール環、ベンゾチエノベンゾチオフェン環、ベンゾカルバゾール環、又はジベンゾカルバゾール環等が挙げられる。より好ましくは、カルバゾール環、インドロインドール環、９，１０－ジヒドロアクリジン環、フェノキサジン環、フェノチアジン環、ジベンゾチオフェン環、ベンゾフリルインドール環、ベンゾカルバゾール環が挙げられる。電子供与性の複素環基は、同一の又は異なる２以上の上記複素環が単結合を介して結合したものであってもよい。

【００３９】

Ｄで表される「置換されていてもよい電子供与性の複素環基」における置換基としては、アルキル基、アルコキシ基、アルキル基で置換されていてもよいアリール環、置換されていてもよいアミノ基などが挙げられる。アルキル基、アルコキシ基、アリール基及びアミノ基は、それぞれ前述のアルキル基、アルコキシ基、アリール基及びアミノ基と同義である。

【００４０】

Ｄで表される「電子供与性基で置換されたアリール基」の「電子供与性基」の「置換されていてもよい電子供与性の複素環基」は、前述の「置換されていてもよい電子供与性の複素環基」と同義である。

【００４１】

Ｄで表される「置換されていてもよいアミノ基」における置換基の例には、アルキル基、アルキル基で置換されていてもよいアリール基が含まれる。アルキル基及びアリール基は、それぞれ前述のアルキル基及びアリール基と同様でありうる。

【００４２】

これらの中でも、電子供与性が高いことから、電子供与性基Ｄは、電子供与性基で置換されたフェニル基、置換されていてもよいカルバゾリル基、置換されていてもよいアザカルバゾリル基、置換されていてもよいジアザカルバゾリル基、置換されていてもよい９，１０－ジヒドロアクリジル基、置換されていてもよいフェノキサジル基、置換されていてもよいフェノチアジル基、置換されていてもよい５，１０－ジヒドロフェナジル基、置換されていてもよいジフェニルアミノ基、又は置換されていてもよいジアルキルアミノ基であることが好ましい。さらに好ましくは、置換されていてもよいカルバゾリル基、置換されていてもよいアザカルバゾリル基、置換されていてもよいジアザカルバゾリル基、置換されていてもよい９，１０－ジヒドロアクリジル基、置換されていてもよいジフェニルアミノ基である。

【００４３】

（電子求引性基Ａ）

一般式（１）～（６）において、Ｌ又はＭで表される電子求引性基Ａは、「置換されていてもよいカルボニル基」、「置換されていてもよいスルホニル基」、「置換されていてもよいホスフィンオキサイド基」、「置換されていてもよいボリル基」、「電子求引性基で置換されていてもよいアリール基」、「電子求引性基で置換されている電子供与性の複素環基」、又は「置換されていてもよい電子求引性の複素環基」でありうる。

【００４４】
Ａで表される「電子求引性基で置換されていてもよいアリール基」の「アリール基」としては、前述のアリール基と同義である。
【００４５】
Ａで表される「電子求引性基で置換されていてもよいアリール基」の置換基としては、フッ素原子、シアノ基、フッ素原子で置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよいカルボニル基、置換されていてもよいスルホニル基、置換されていてもよいホスフィンオキサイド基、置換されていてもよいボリル基、置換されていてもよい電子求引性の複素環基が挙げられ、フッ素原子、シアノ基、フッ素原子で置換されたアルキル基、又は置換されていてもよい電子求引性の複素環基が好ましい。
【００４６】
Ａで表される「電子求引性基で置換されている電子供与性の複素環基」における「電子供与性の複素環基」は、前述のＤで表される「置換されていてもよい電子供与性の複素環基」における「電子供与性の複素環基」と同義である。
【００４７】
Ａで表される「電子求引性基で置換されている電子供与性の複素環基」の置換基である「電子求引性基」としては、前述のアリール基の置換基と同義である。
【００４８】
Ａで表される「置換されていてもよい電子求引性の複素環基」における「複素環基」は、炭素数が３～２４の電子求引性の複素環基から誘導される基が好ましい。そのような複素環の例には、ジベンゾチオフェンオキシド環、ジベンゾチオフェンジオキシド環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、キナゾリン環、シンノリン環、キノキサリン環、フタラジン環、プテリジン環、フェナントリジン環、フェナントロリン環、ジベンゾフラン環、ジベンゾシロール環、ジベンゾボロール環、アザジベンゾフラン環、ジアザジベンゾフラン環、ジベンゾホスホールオキシド環などが挙げられる。より好ましくは、ピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、キナゾリン環、キノキサリン環、フェナントリジン環、フェナントロリン環、ジベンゾフラン環、アザジベンゾフラン環、ジアザジベンゾフラン環、又はジベンゾホスホールオキシド環が挙げられる。電子求引性の複素環基は、同一の又は異なる２以上の上記複素環が単結合を介して結合したものであってもよい。
【００４９】
Ａで表される「置換されていてもよい電子求引性の複素環基」における置換基としては、重水素原子、フッ素原子、シアノ基、フッ素原子で置換されていてもよいアルキル基、フッ素原子で置換されていてもよいアルキル基で置換されていてもよいアリール基、フッ素原子で置換されていてもよいアリール基が挙げられる。アルキル基及びアリール基は前述のアルキル基及びアリール基と同義である。
【００５０】
Ａで表される「電子求引性基で置換されていてもよいアリール基」の置換基の「置換されていてもよい電子求引性の複素環基」としては、前述と同義である。
【００５１】
Ａで表される「置換されていてもよいカルボニル基」、「置換されていてもよいスルホニル基」、「置換されていてもよいホスフィンオキサイド基」、「置換されていてもよいボリル基」における置換基の例としては、フッ素原子、シアノ基、フッ素原子で置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよいアリール基、置換されていてもよい電子求引性の複素環が挙げられる。アルキル基及びアリール基は前述のアルキル基及びアリール基と同義である。
【００５２】
Ａで表される「電子求引性基で置換されていてもよいアリール基」の置換基の「置換されていてもよいカルボニル基」、「置換されていてもよいスルホニル基」、「置換されて

いてもよいホスフィンオキサイド基」、「置換されていてもよいボリル基」としては、それぞれ前述の同義である。

【００５３】

一般式（１）～（６）において、ＬとＭは、それぞれ独立して電子供与性基Ｄ又は電子求引性基Ａを表す。そのため、一般式（１）～（６）のいずれかで表される構造を有するπ共役系化合物は、２つの電子供与性基Ｄ（又は電子供与性基Ａ）を有してもよいし、電子供与性基Ｄと電子供与性基Ａの両方を有してもよい。尚、ＬとＭの両方が電子供与性基Ｄであるとき、ＬとＭが結合する環は電子求引性の環であるものとし；ＬとＭの両方が電子求引性基Ａであるとき、ＬとＭが結合する環は電子供与性の環であるものとする。

【００５４】

一般式（１）～（６）において、ＬとＭが結合する環が「電子供与性の環」である例には、一般式（１）におけるカルバゾール環、一般式（３）におけるカルバゾール環、一般式（５）におけるインドロインドール環、一般式（６）におけるインドロカルバゾール環が含まれる。

一般式（１）～（６）において、ＬとＭが結合する環が「電子求引性の環」である例には、一般式（３）におけるジベンゾフラン環（Ｒ＝酸素原子）、ジベンゾチオフェンジオキシド環（Ｒ＝SO_2）、アザジベンゾフラン環（Ｒ＝酸素原子、Ｑのうち１つが窒素原子）、ジアザジベンゾフラン環（Ｒ＝酸素原子、Ｑのうち２つが窒素原子）、が含まれる。

【００５５】

中でも、本発明のπ共役系化合物においては、ＬとＭの一方が電子供与性基Ｄであり、他方が電子求引性基Ａであること、即ち、化合物が電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａの両方を有することが、ΔE_{ST}をより小さくでき、高い発光効率を達成する上で好ましい。また、本発明のπ共役系化合物のように電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａとが対面する構造であると、強力な電子供与性基や電子求引性基を使用しなくとも、高い発光効率を達成しうるため好ましい。それにより、吸収スペクトルや発光スペクトルの長波長化も抑制できると考えられる。

【００５６】

上記一般式（１）～（６）において、Ｑは各々独立に、炭素原子又は窒素原子を表す。一般式（１）～（６）には６～１０のＱが含まれるが、その内、窒素原子の数は０～４であることが好ましく、０～２であることがさらに好ましい。Ｑとして含まれる窒素原子の数が２以下であると、発光波長の制御の観点から好ましい。

【００５７】

上記一般式（１）～（６）において、Ｑが炭素原子の場合、炭素原子の置換基としては、水素原子、重水素原子、フッ素原子、シアノ基、フッ素で置換されていてもよいアルキル基、電子供与性基又は電子吸引性基で置換されていてもよいアリール基、置換されていてもよい電子供与性基の複素環基、置換されていてもよいアミノ基、置換されていてもよい電子吸引性基の複素環基、置換されていてもよいカルボニル基、置換されていてもよいスルホニル基、置換されていてもよいホスフィンオキサイド基、及び置換されていてもよいボリル基からなる群より選ばれる基であり、それぞれ前述と同義である。好ましくは、水素原子、重水素原子、フッ素原子、シアノ基、フッ素で置換されていてもよいアルキル基、電子供与性基又は電子吸引性基で置換されていてもよいアリール基、置換されていてもよい電子供与性基の複素環基、置換されていてもよいアミノ基、置換されていてもよい電子吸引性基の複素環基であり、さらに好ましくは、水素原子、重水素原子、シアノ基、置換されていてもよい電子供与性基の複素環基、置換されていてもよいアミノ基、置換されていてもよい電子吸引性基の複素環基である。

【００５８】

更に一般式（３）において、Ｒは炭素原子、酸素原子、窒素原子、硫黄原子、ホウ素原子、又はケイ素原子を表わし、好ましくは炭素原子、酸素原子、窒素原子、又はケイ素原子であり、さらに好ましくは酸素原子、窒素原子である。発光性、合成の観点から、Ｒが

酸素原子または窒素原子であることが好ましい。

【００５９】

更にＲが炭素原子、窒素原子、ホウ素原子又はケイ素原子の場合、Ｒは置換されていてもよい。一般式（３）で表される構造を有するπ共役系化合物は、Ｌ及びＭとして電子供与性基Ｄ及び／又は電子求引性基Ａを有しているため、Ｒの置換基は、Ｌ及びＭとしての電子供与性基Ｄ同士、電子求引性基Ａ同士、または電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａとの相互作用を妨げるようなものでないことが好ましい。

【００６０】

置換基の具体例としては、アルキル基（例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ｔｅｒｔ－ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、ドデシル基、トリデシル基、テトラデシル基、ペンタデシル基等）、シクロアルキル基（例えば、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等）、アリール基（例えば、フェニル基、ｐ－クロロフェニル基、メシチル基、トリル基、キシリル基、ナフチル基、アントリル基、アズレニル基、アセナフテニル基、フルオレニル基、フェナントリル基、インデニル基、ピレニル基、ビフェニリル基等）、芳香族複素環基（例えば、ピリジル基、ピリミジニル基、フリル基、ピロリル基、イミダゾリル基、ベンゾイミダゾリル基、ピラゾリル基、ピラジニル基、トリアゾリル基（例えば、１，２，４－トリアゾール－１－イル基、１，２，３－トリアゾール－１－イル基、ピロリジル基、イミダゾリジル基、モルホリル基、オキサゾリジル基等）、アルコキシ基（例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロピルオキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、オクチルオキシ基、ドデシルオキシ基等）、シクロアルコキシ基（例えば、シクロペンチルオキシ基、シクロヘキシルオキシ基等）、アミノ基（例えば、アミノ基、エチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ジフェニルアミノ基、ブチルアミノ基、シクロペンチルアミノ基、２－エチルヘキシルアミノ基、ドデシルアミノ基、アニリノ基、ナフチルアミノ基、２－ピリジルアミノ基等）、ハロゲン原子（例えば、フッ素原子、塩素原子、臭素原子等）、フッ化炭化水素基（例えば、フルオロメチル基、トリフルオロメチル基、ペンタフルオロエチル基、ペンタフルオロフェニル基等）、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシ基、メルカプト基、シリル基（例えば、トリメチルシリル基、トリイソプロピルシリル基、トリフェニルシリル基、フェニルジエチルシリル基等）、ホスホノ基等が挙げられる。

【００６１】

これらの中でも、ＬとＭに電子的な摂動が小さいことから、Ｒは、アリール基又はアルキル基であることが好ましい。

【００６２】

上記一般式（１）～（６）のうち、特に好ましい構造は式（１）である。式（１）の構造を有するπ共役系化合物は、電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａ、２つの電子供与性基Ｄ同士、又は２つの電子求引性基Ａ同士が、空間上の近い位置で平行に近い角度で対面しやすい。それにより、電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａとの間でＣＴ性の励起状態が形成されやすく、ΔE_{ST}を小さくしたり；２つの電子供与性基Ｄ同士又は２つの電子求引性基Ａ同士で空間的に共鳴しやすく、励起状態を安定化させやすいからである。式（１）で表される化合物には、発光材料、第３成分、ホスト化合物のいずれとして用いた場合にも、高い発光効率を達成し、且つΔE_{ST}の絶対値が極小となる化合物が含まれるため好ましい。

【００６３】

前記一般式（１）～（６）のいずれかで表される構造を有するπ共役系化合物は、該π共役系化合物を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子材料、及び該π共役系化合物を含有する発光性薄膜、及び該π共役系化合物を含有する有機エレクトロルミネッセンス素子として用いることができる。

【００６４】

前記一般式（１）～（６）のいずれかで表される構造を有するπ共役系化合物は、電界励起によって励起状態となり、励起子を生成することができる。したがって、前記一般式

（１）～（６）のいずれかで表される構造を有するπ共役系化合物は、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層に好ましく含まれる。即ち、発光層は、高発光性の観点から、前記一般式（１）～（６）のいずれかで表される構造を有するπ共役系化合物を単独で用いるか；前記一般式（１）～（６）のいずれかで表される構造を有するπ共役系化合物と後述のホスト化合物とを含有するか；前記一般式（１）～（６）のいずれかで表される構造を有するπ共役系化合物と、後述の蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物のうち少なくとも１種とを含有するか；或いは前記一般式（１）～（６）のいずれかで表される構造を有するπ共役系化合物と、後述の蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物のうち少なくとも１種と、後述のホスト化合物とを含有することが好ましい。

【００６５】

前記一般式（１）～（６）のいずれかで表される構造を有するπ共役系化合物の最低励起一重項準位と最低励起三重項準位とのエネルギー差の絶対値（ΔE_{ST}）は、０．５０ｅＶ以下であることが好ましい。本発明のπ共役系化合物は前記有機エレクトロルミネッセンス素子、前記素子材料、又は前記発光性薄膜に含有されることが好ましい。

【００６６】

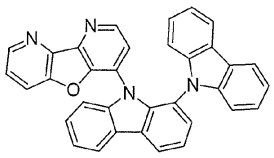
本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、照明装置及び表示装置に好適に具備され得る。

【００６７】

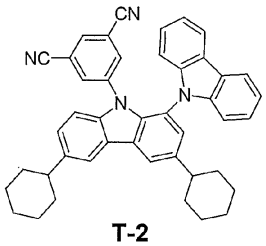
以下に、本発明に係るπ共役系化合物の好ましい具体例を挙げるが、これらの化合物はさらに置換基を有していたり、構造異性体などが存在していたりする場合もあり、本記述に限定されない。

【００６８】

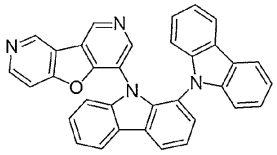
【化５】



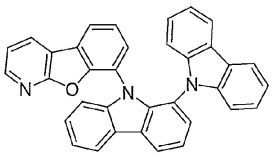
T-1



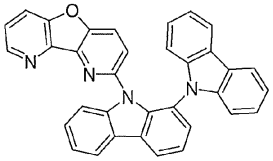
T-2



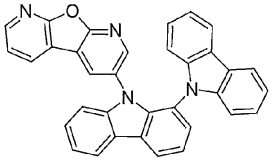
T-3



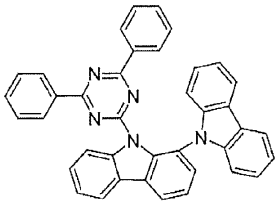
T-4



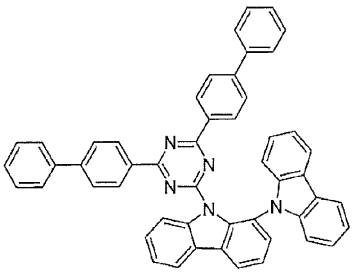
T-5



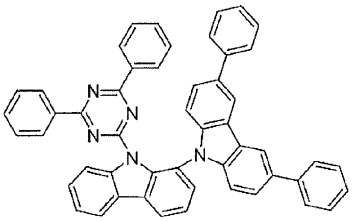
T-6



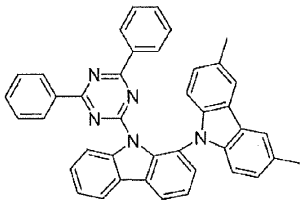
T-7



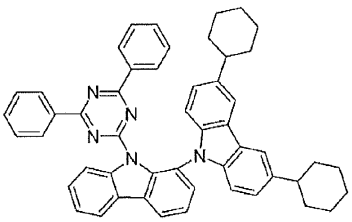
T-8



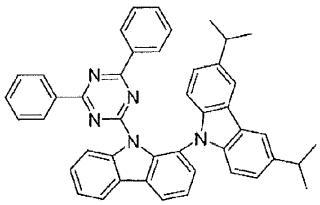
T-9



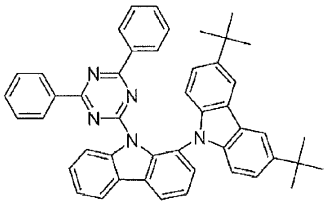
T-10



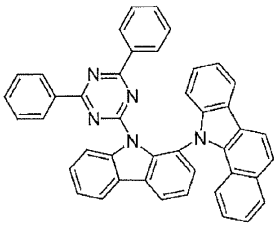
T-11



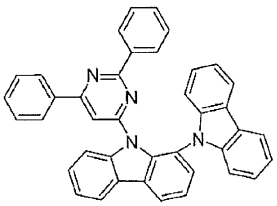
T-12



T-13



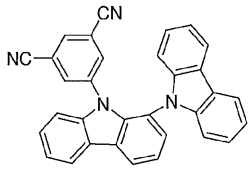
T-14

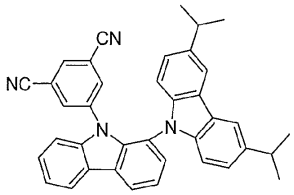


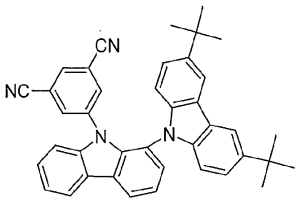
T-15

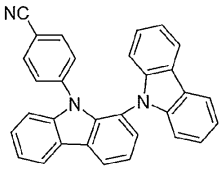
【００６９】

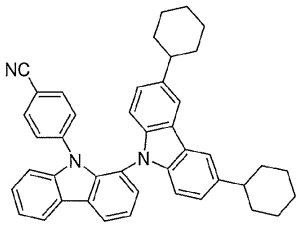
【化６】

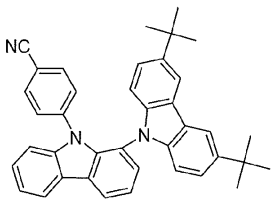

T-16

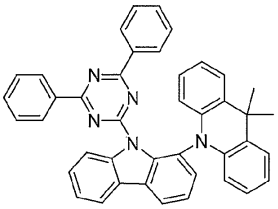

T-17

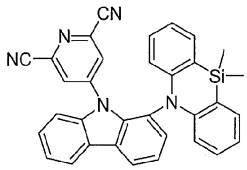

T-18

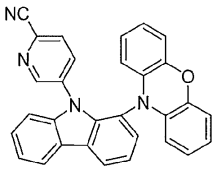

T-19

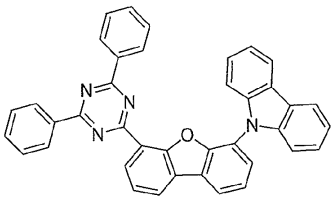

T-20

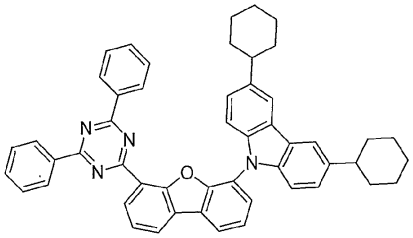

T-21

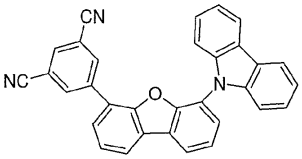

T-22

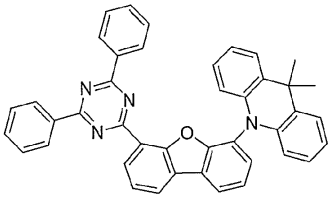

T-23

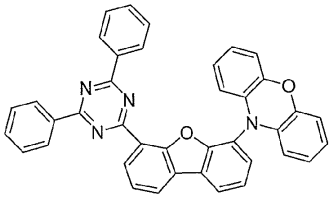

T-24

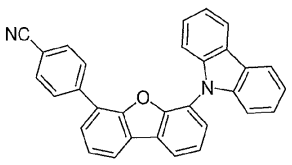

T-25


T-26


T-27

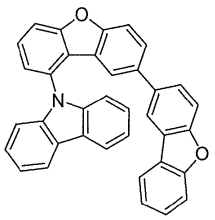

T-28


T-29

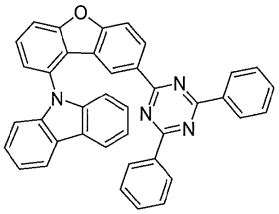

T-30

【００７０】

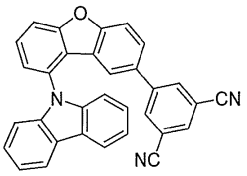
【化７】



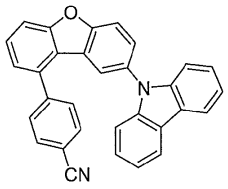
T-31



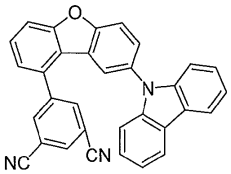
T-32



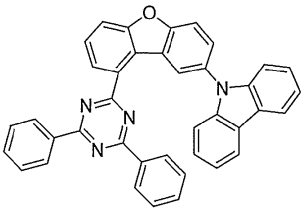
T-33



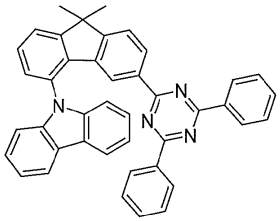
T-34



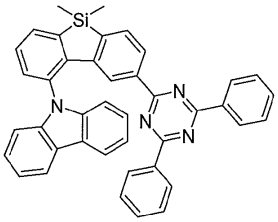
T-35



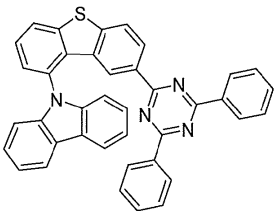
T-36



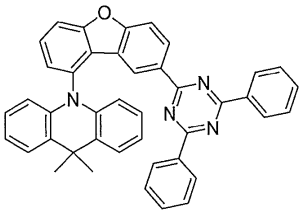
T-37



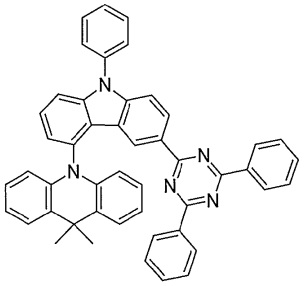
T-38



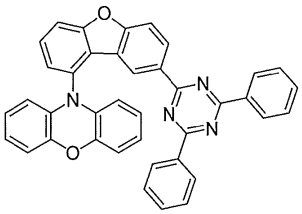
T-39



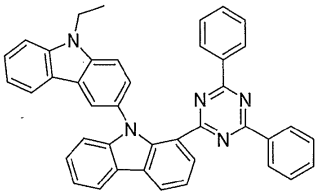
T-40



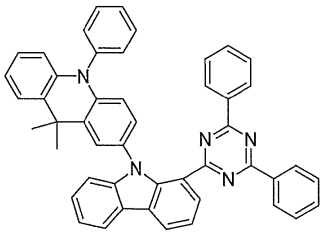
T-41



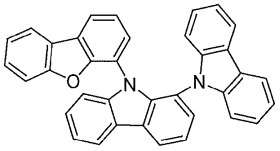
T-42



T-43



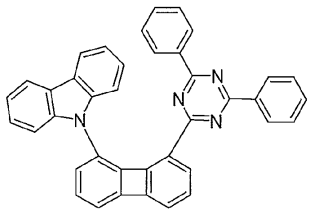
T-44



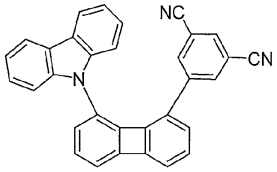
T-45

【００７１】

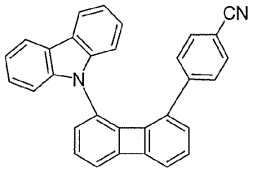
【化８】



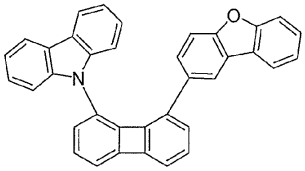
T-46



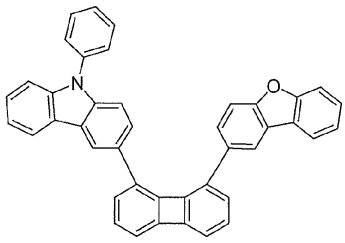
T-47



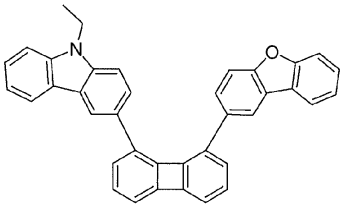
T-48



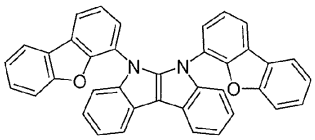
T-49



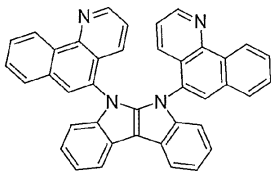
T-50



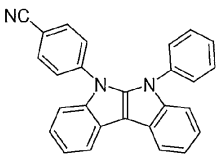
T-51



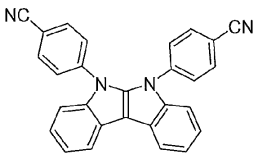
T-52



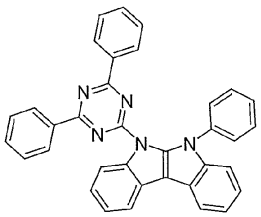
T-53



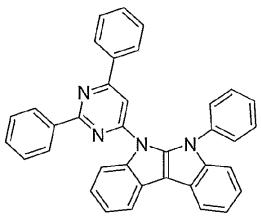
T-54



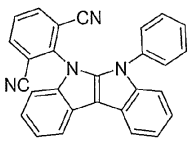
T-55



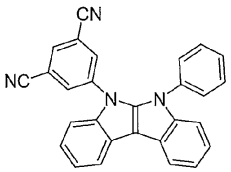
T-56



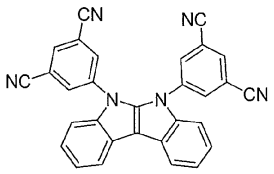
T-57



T-58



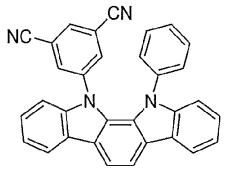
T-59



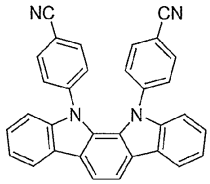
T-60

【００７２】

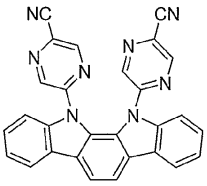
【化９】



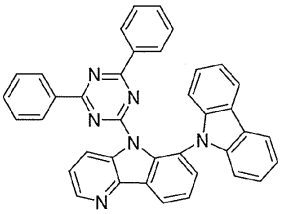
T-61



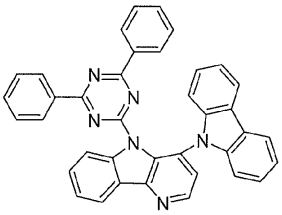
T-62



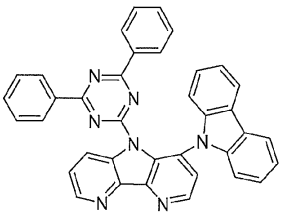
T-63



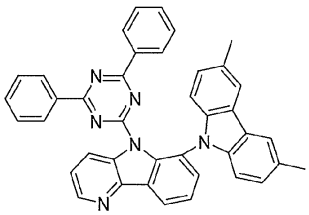
T-64



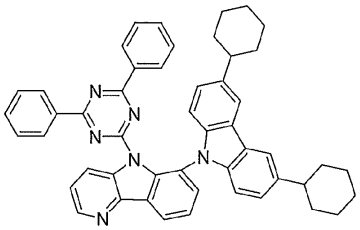
T-65



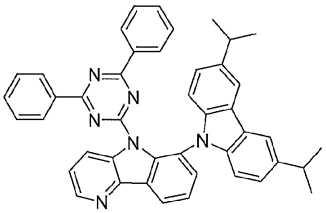
T-66



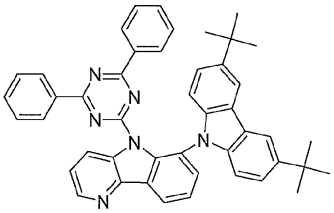
T-67



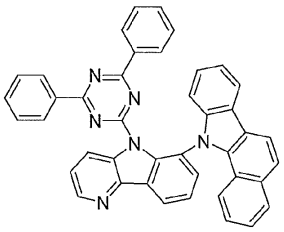
T-68



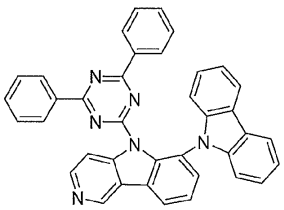
T-69



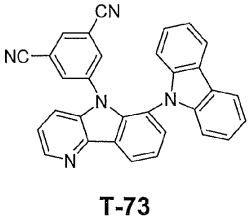
T-70



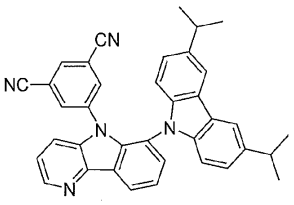
T-71



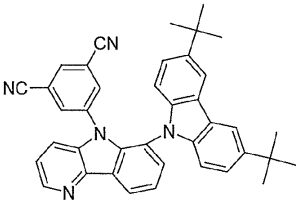
T-72



T-73



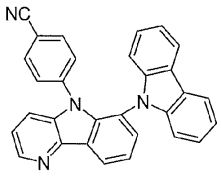
T-74



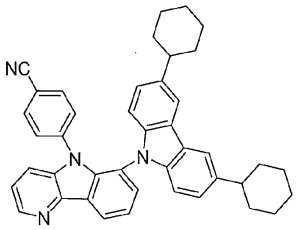
T-75

【００７３】

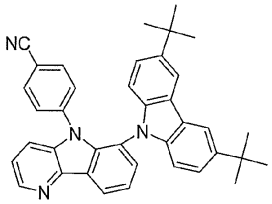
【化１０】



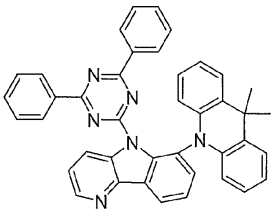
T-76



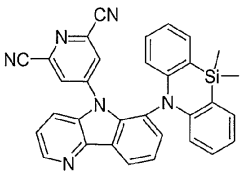
T-77



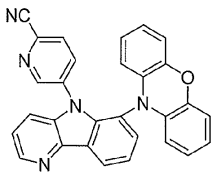
T-78



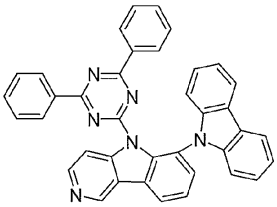
T-79



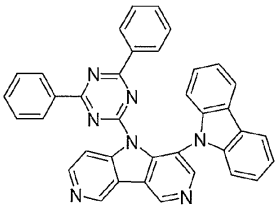
T-80



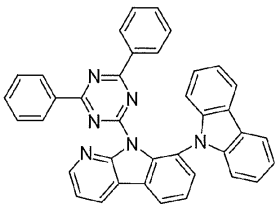
T-81



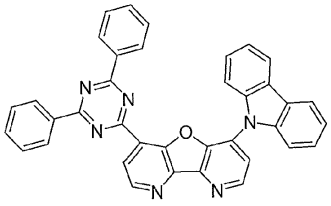
T-82



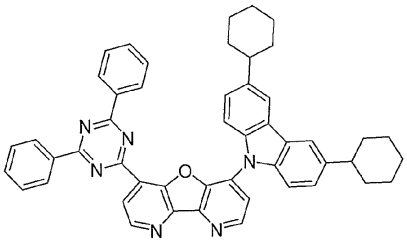
T-83



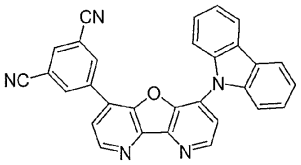
T-84



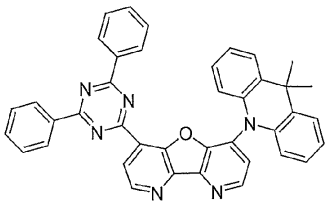
T-85



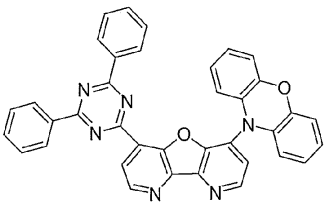
T-86



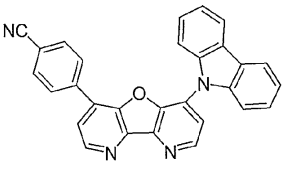
T-87



T-88



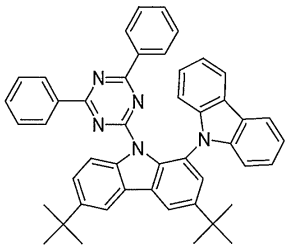
T-89



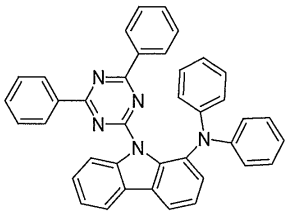
T-90

【００７４】

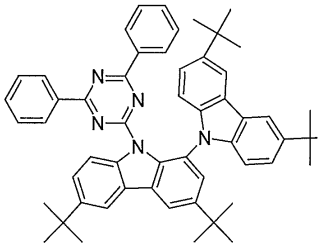
【化１１】



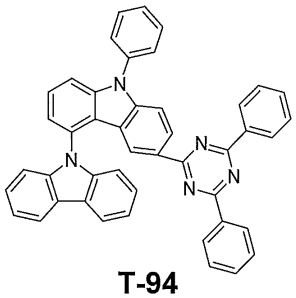
T-91



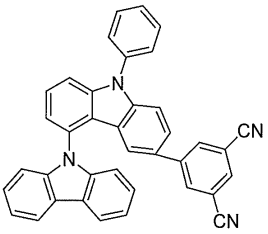
T-92



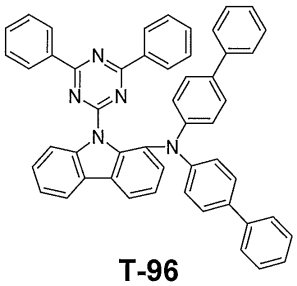
T-93



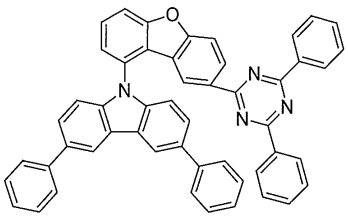
T-94



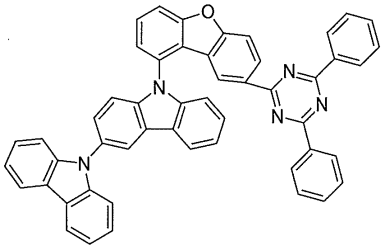
T-95



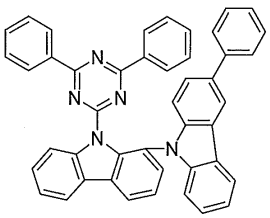
T-96



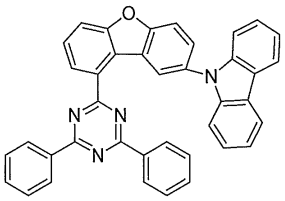
T-97



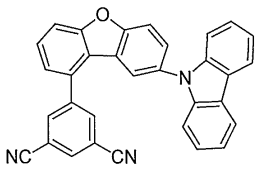
T-98



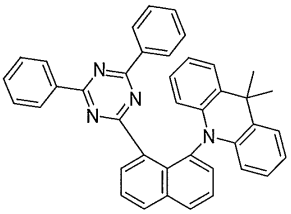
T-99



T-100



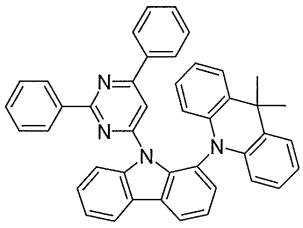
T-101



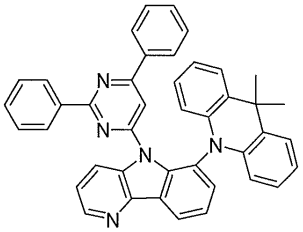
T-102

【００７５】

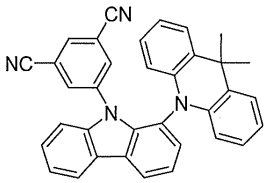
【化１２】



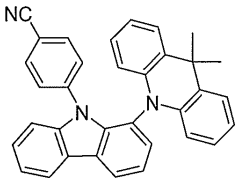
T-103



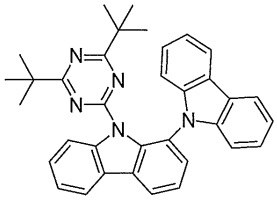
T-104



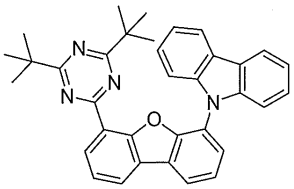
T-105



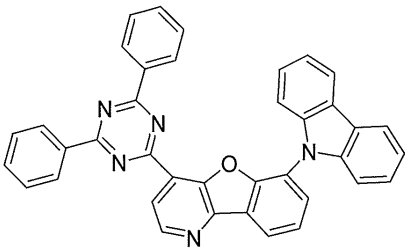
T-106



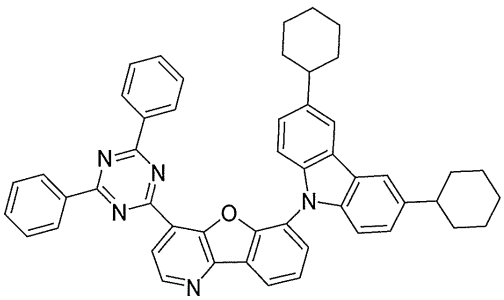
T-107



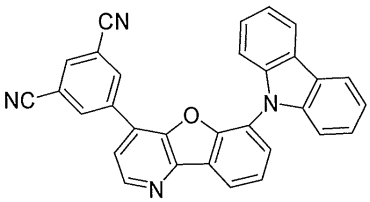
T-108



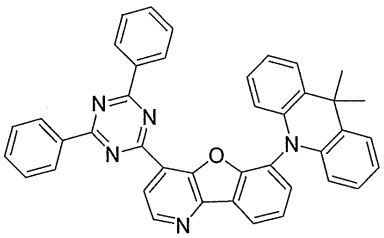
T-109



T-110



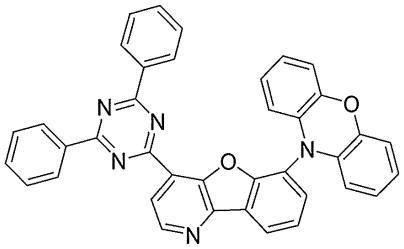
T-111



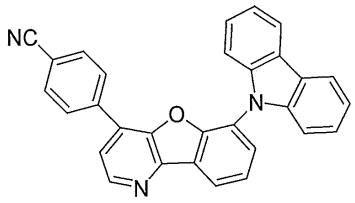
T-112

【００７６】

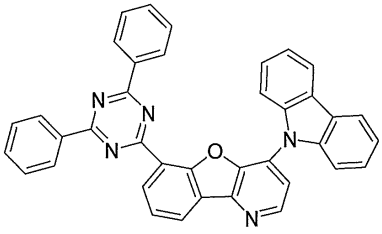
【化１３】



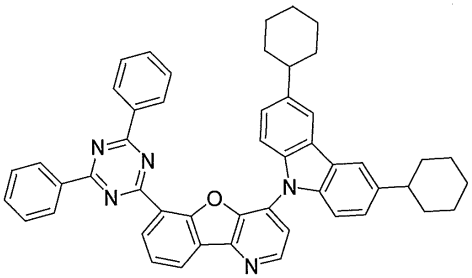
T-113



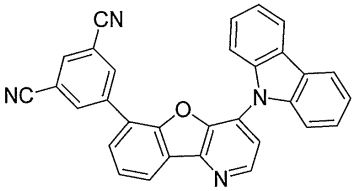
T-114



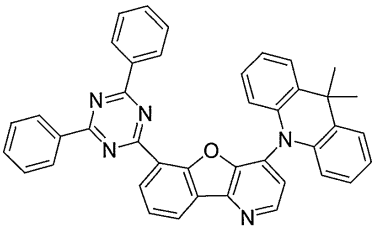
T-115



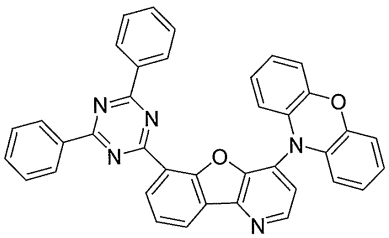
T-116



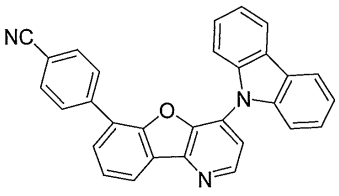
T-117



T-118



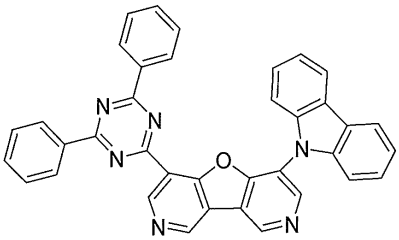
T-119



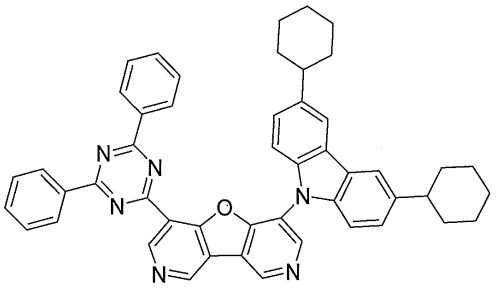
T-120

【００７７】

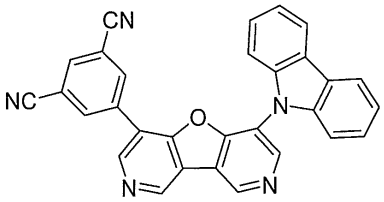
【化１４】



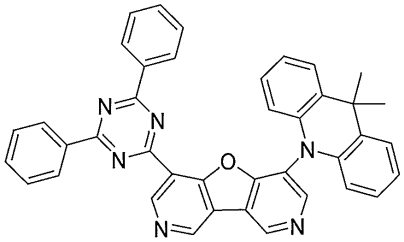
T-121



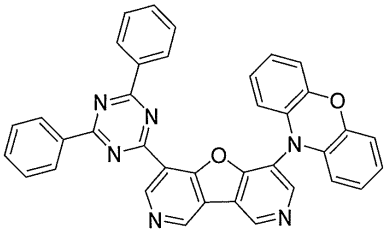
T-122



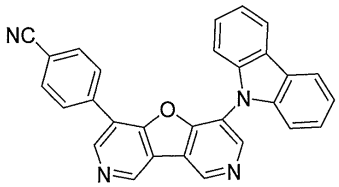
T-123



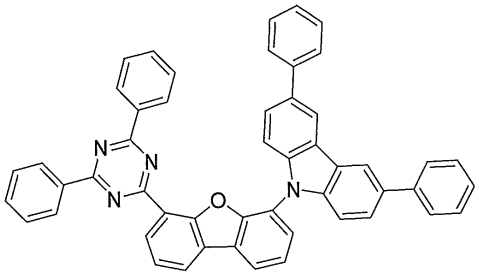
T-124



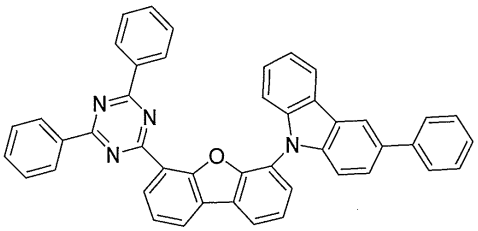
T-125



T-126



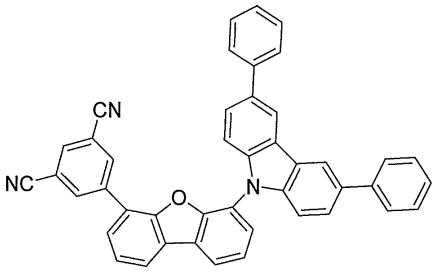
T-127



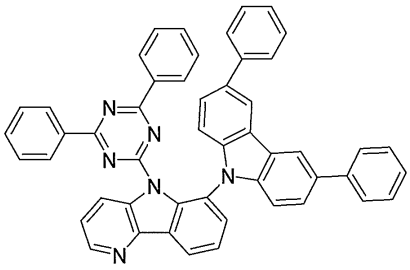
T-128

【００７８】

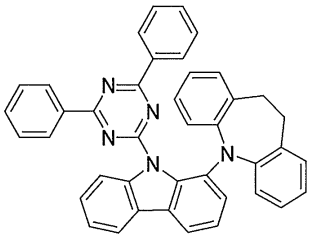
【化１５】



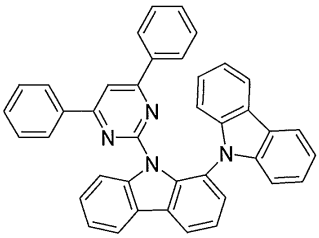
T-129



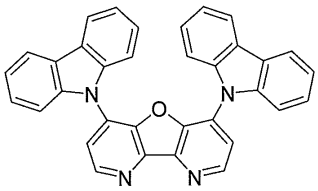
T-130



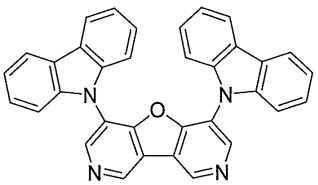
T-131



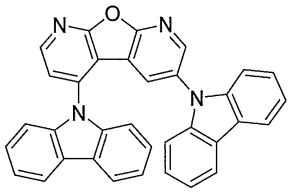
T-132



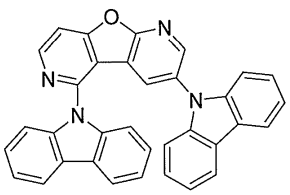
T-133



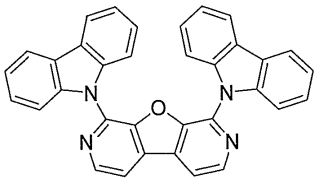
T-134



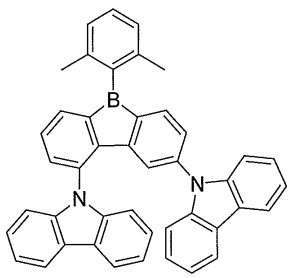
T-135



T-136



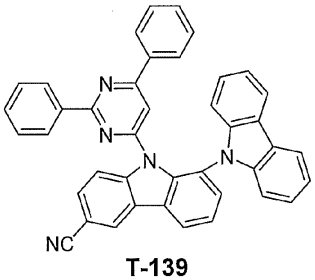
T-137

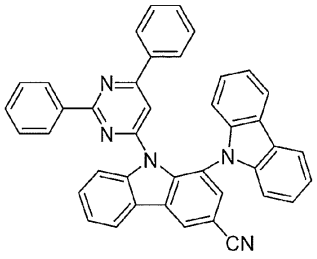


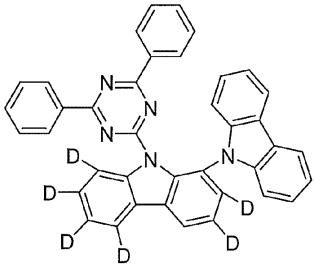
T-138

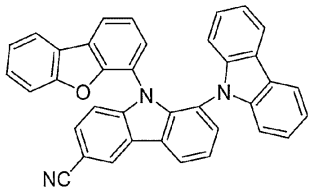
【００７９】

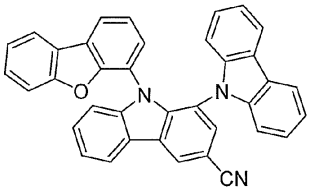
【化１６】

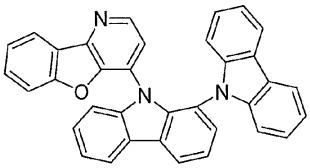

T-139

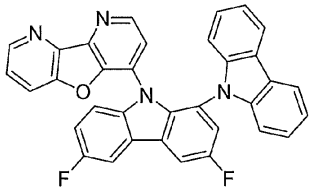

T-140

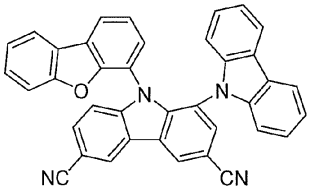

T-141

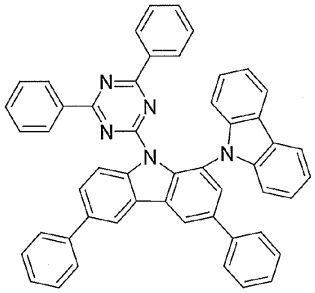

T-142

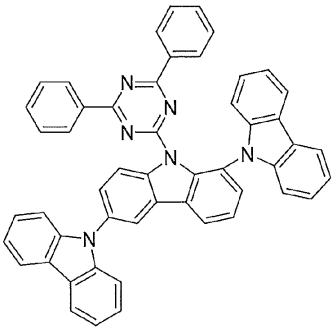

T-143

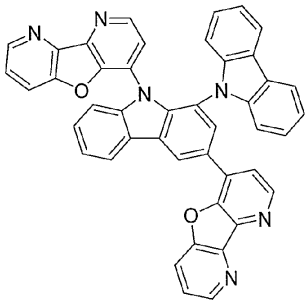

T-144


T-145


T-146

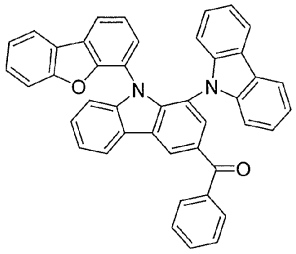

T-147


T-148

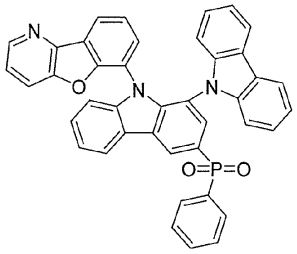

T-149

【００８０】

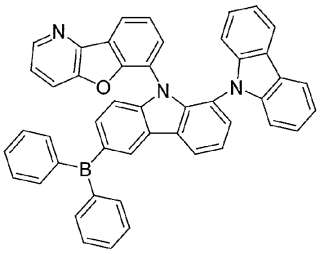
【化１７】



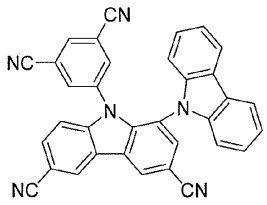
T-150



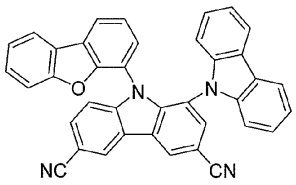
T-151



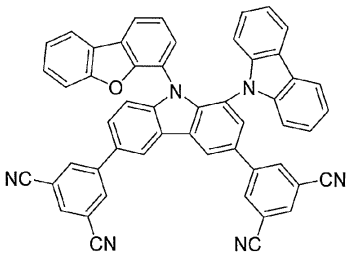
T-152



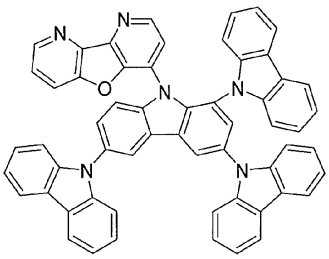
T-153



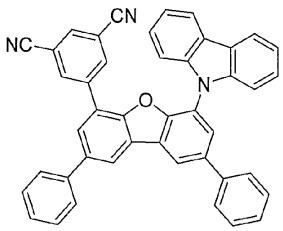
T-154



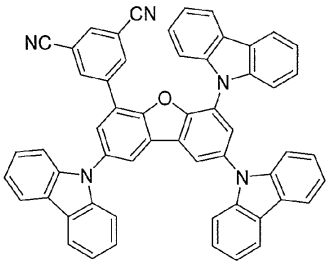
T-155



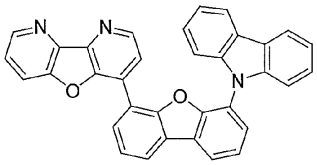
T-156



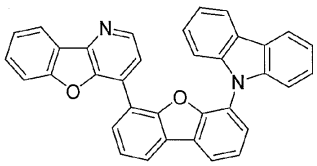
T-157



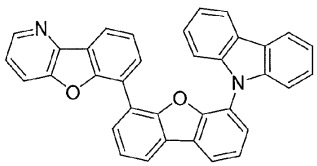
T-158



T-159



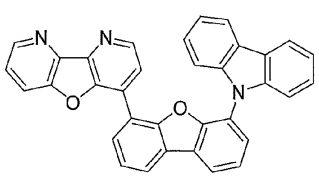
T-160



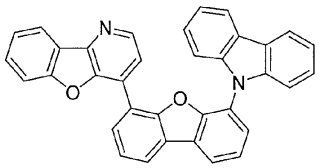
T-161

【００８１】

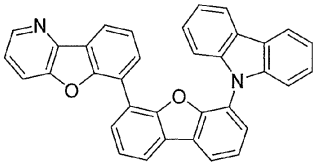
【化１８】



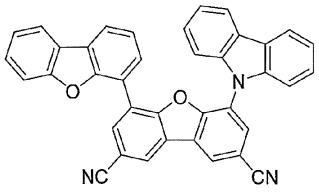
T-162



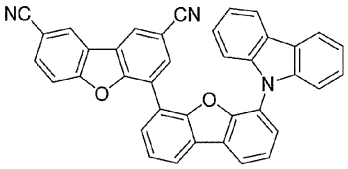
T-163



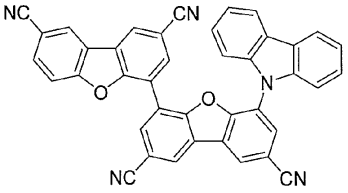
T-164



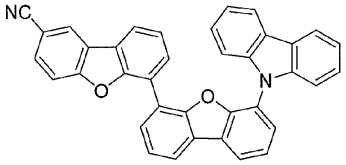
T-165



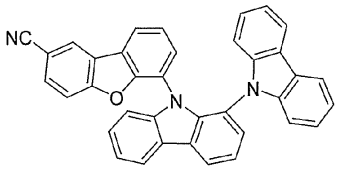
T-166



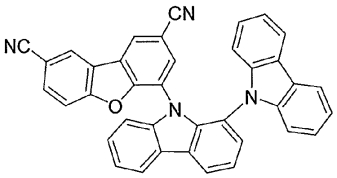
T-167



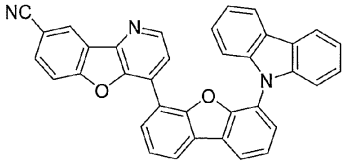
T-168



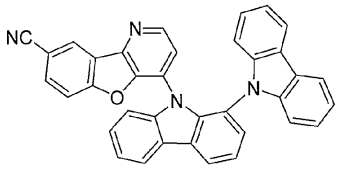
T-169



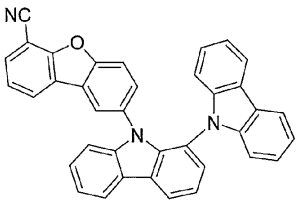
T-170



T-171



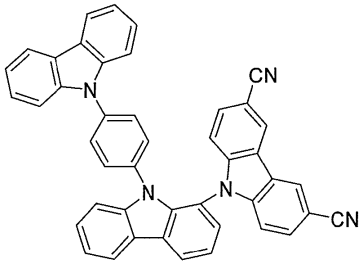
T-172



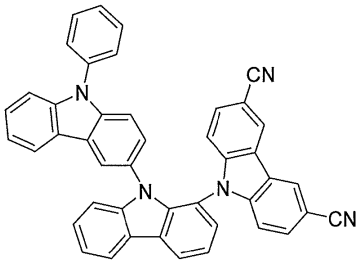
T-173

【００８２】

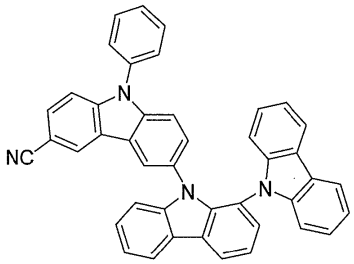
【化１９】



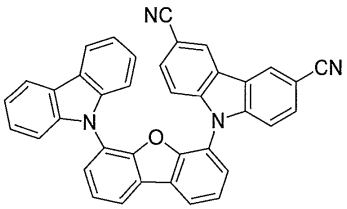
T-174



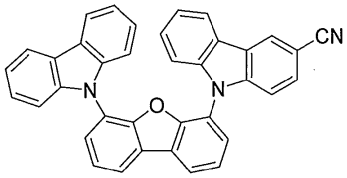
T-175



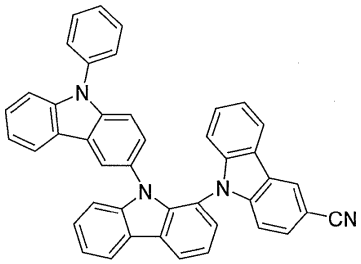
T-176



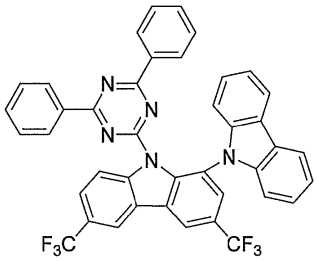
T-177



T-178



T-179



T-180

【００８３】

これらの化合物のうちΔＥ$_{ST}$の絶対値が０．５０ｅＶ以下の材料については、ＴＡＤＦ性（遅延蛍光性）を示す、つまり遅延蛍光を放射してもよい。ここで、遅延蛍光性を示すとは、蛍光減衰測定を行った時に、放射される蛍光の減衰速度の異なる成分が２種類以上あることをいう。なお、減衰が遅い成分は一般的には減衰時間がサブマイクロ秒以上であることが多いが、材料によって減衰時間が異なるため、減衰時間は限定されない。蛍光減衰測定は、一般的には以下のように行うことができる。π共役系化合物（発光性化合物）の溶液又は薄膜、又はπ共役系化合物と第二成分との共蒸着膜に、窒素雰囲気下で励起光を照射し、ある発光波長の光子数を計測する。そしてこのとき、放射される蛍光の減衰速度の異なる成分が２種類以上ある場合に、π共役系化合物が遅延蛍光性を示すものとする。

【００８４】

なお、これらの化合物は、バイポーラー性を有し、様々なエネルギー準位に対応できることから、発光材料やホスト材料としても使用できるのみならず、正孔輸送、電子輸送にも適した化合物、即ち、電荷輸送材料として使用することができるため、発光層での使用に限定されず、上述の正孔注入層、正孔輸送層、電子阻止層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、中間層などに用いてもよい。

【００８５】

＜合成方法＞

上記π共役系化合物は、例えば、国際公開第２０１０／１１３７５５号、Ｏｒｇａｎｉｃ　Ｌｅｔｔｅｒｓ，２００２，４，１７８３-１７８５．、Ａｎｇｅｗ．Ｃｈｅｍ．Ｉ

ｎｔ．Ｅｄ．２０１０，４９，２０１４-２０１７．に記載の方法、又は、これらの文献に記載の参照文献に記載の方法を参照することにより合成することができる。

【００８６】

次に、本発明の技術思想と関連する、有機ＥＬの発光方式及び発光材料について述べる。

【００８７】

＜有機ＥＬの発光方式＞

有機ＥＬの発光方式としては三重項励起状態から基底状態に戻る際に光を発する「リン光発光」と、一重項励起状態から基底状態に戻る際に光を発する「蛍光発光」の二通りがある。

有機ＥＬのような電界で励起する場合には、三重項励起子が７５％の確率で、一重項励起子が２５％の確率で生成するため、リン光発光の方が蛍光発光に比べ発光効率を高くすることが可能で、低消費電力化を実現するには優れた方式である。

一方、蛍光発光においても、７５％の確率で生成してしまう、通常では、励起子のエネルギーが、無輻射失活により、熱にしかならない三重項励起子を、高密度で存在させることによって、二つの三重項励起子から一つの一重項励起子を発生させて発光効率を向上させるＴＴＡ（Ｔｒｉｐｌｅｔ－Ｔｒｉｐｌｅｔ　Ａｎｎｉｈｉｌａｔｉｏｎ、また、Ｔｒｉｐｌｅｔ－Ｔｒｉｐｌｅｔ　Ｆｕｓｉｏｎ：「ＴＴＦ」と略記する。）機構を利用した方式が見つかっている。

【００８８】

さらに、近年では、安達らの発見により一重項励起状態と三重項励起状態のエネルギーギャップを小さくすることで、発光中のジュール熱及び／又は発光素子が置かれる環境温度によりエネルギー準位の低い三重項励起状態から一重項励起状態に逆項間交差がおこり、結果としてほぼ１００％に近い蛍光発光を可能とする現象（熱励起型遅延蛍光又は熱励起型遅延蛍光ともいう：「ＴＡＤＦ」）とそれを可能にする蛍光物質が見いだされている（例えば、非特許文献１等参照。）。

【００８９】

＜リン光発光性化合物＞

前述のとおり、リン光発光は発光効率的には蛍光発光よりも理論的には３倍有利であるが、三重項励起状態から一重項基底状態へのエネルギー失活（＝リン光発光）は禁制遷移であり、また同様に一重項励起状態から三重項励起状態への項間交差も禁制遷移であるため、通常その速度定数は小さい。すなわち、遷移が起こりにくいため、励起子寿命はミリ秒から秒オーダーと長くなり、所望の発光を得ることが困難である。

ただし、イリジウムや白金などの重金属を用いた錯体が発光する場合には、中心金属の重原子効果によって、前記の禁制遷移の速度定数が３桁以上増大し、配位子の選択によっては、１００％のリン光量子収率を得ることも可能となる。

しかしながら、このような理想的な発光を得るためには、希少金属であるイリジウムやパラジウム、白金などのいわゆる白金属と呼ばれる貴金属を用いる必要があり、大量に使用されることになるとその埋蔵量や金属自体の値段が産業上大きな問題となってくる。

【００９０】

＜蛍光発光性化合物＞

一般的な蛍光発光性化合物は、リン光発光性化合物のような重金属錯体である必要性は特になく、炭素、酸素、窒素及び水素などの一般的な元素の組み合わせから構成される、いわゆる有機化合物が適用でき、さらに、リンや硫黄、ケイ素などその他の非金属元素を用いることも可能で、また、アルミニウムや亜鉛などの典型金属の錯体も活用できるなど、その多様性はほぼ無限と言える。

ただし、従来の蛍光化合物では前記のように励起子の２５％しか発光に適用できないために、リン光発光のような高効率発光は望めない。

【００９１】

＜遅延蛍光化合物＞

［励起三重項－三重項消滅（ＴＴＡ）遅延蛍光化合物］
蛍光発光性化合物の問題点を解決すべく登場したのが遅延蛍光を利用した発光方式である。三重項励起子同士の衝突を起源とするＴＴＡ方式は、下記のような一般式で記述できる。すなわち、従来、励起子のエネルギーが、無輻射失活により、熱にしか変換されなかった三重項励起子の一部が、発光に寄与しうる一重項励起子に逆項間交差できるメリットがあり、実際の有機ＥＬ素子においても従来の蛍光発光素子の約２倍の外部取り出し量子効率を得ることができている。
一般式：　Ｔ＊　＋　Ｔ＊　→　Ｓ＊　＋　Ｓ
（式中、Ｔ＊は三重項励起子、Ｓ＊は一重項励起子、Ｓは基底状態分子を表す。）
しかしながら、上式からもわかるように、二つの三重項励起子から発光に利用できる一重項励起子は一つしか生成しないため、この方式で１００％の内部量子効率を得ることは原理上できない。
【００９２】
［熱活性型遅延蛍光（ＴＡＤＦ）化合物］
もう一つの高効率蛍光発光であるＴＡＤＦ方式は、ＴＴＡの問題点を解決できる方式である。
蛍光発光性化合物は前記のごとく無限に分子設計できる利点を持っている。すなわち、分子設計された化合物の中で、特異的に三重項励起状態と一重項励起状態のエネルギー準位差が極めて近接する化合物が存在する。
このような化合物は、分子内に重原子を持っていないにもかかわらず、ΔE_{ST}が小さいために通常では起こりえない三重項励起状態から一重項励起状態への逆項間交差が起こる。さらに、一重項励起状態から基底状態への失活（＝蛍光発光）の速度定数が極めて大きいことから、三重項励起子はそれ自体が基底状態に熱的に失活（無輻射失活）するよりも、一重項励起状態経由で蛍光を発しながら基底状態に戻る方が速度論的に有利である。そのため、ＴＡＤＦでは理論的には１００％の蛍光発光が可能となる。
【００９３】
＜ΔE_{ST}に関する分子設計思想＞
上記ΔE_{ST}を小さくするための分子設計について説明する。
ΔE_{ST}を小さくするためには、原理上分子内の最高被占軌道（Ｈｉｇｈｅｓｔ　Ｏｃｃｕｐｉｅｄ　Ｍｏｌｅｃｕｌａｒ　Ｏｒｂｉｔａｌ：HOMO）と最低空軌道（Ｌｏｗｅｓｔ　Ｕｎｏｃｃｕｐｉｅｄ　Ｍｏｌｅｃｕｌａｒ　Ｏｒｂｉｔａｌ：LUMO）の空間的な重なりを小さくすることが最も効果的である。
一般に分子の電子軌道において、ＨＯＭＯは電子供与性部位に、ＬＵＭＯは電子求引性部位に分布することが知られており、分子内に電子供与性と電子求引性の骨格を導入することによって、ＨＯＭＯとＬＵＭＯが存在する位置を遠ざけることが可能である。
【００９４】
例えば、「実用化ステージを迎えた有機光エレクトロニクス」応用物理　第８２巻、第６号、２０１３年においては、シアノ基やトリアジンなどの電子求引性の骨格と、カルバゾールやジフェニルアミノ基等の電子供与性の骨格とを導入することで、ＬＵＭＯとＨＯＭＯとをそれぞれ局在化させている。
また、化合物の基底状態と三重項励起状態との分子構造変化を小さくすることも効果的である。構造変化を小さくするための方法としては、例えば、化合物を剛直にすることなどが効果的である。ここで述べる剛直とは、例えば、分子内の環と環との結合における自由回転を抑制することや、π共役面の大きい縮合環を導入するなど、分子内において自由に動ける部位が少ないことを意味する。特に、発光に関与する部位を剛直にすることによって、励起状態における構造変化を小さくすることが可能である。
【００９５】
本発明のπ共役系化合物においては、電子供与性基Ｄ同士、電子求引性基Ａ同士、又は電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａの間に、３～５個の原子を含み、２個又は３個の環構造を配置することで、ＨＯＭＯとＬＵＭＯを分離することに成功している。本発明における

特定の構造においては、電子供与性基Ｄ同士、電子求引性基Ａ同士、又は電子供与性基Ｄと電子求引性基Ａは、平行に近い角度で空間的に対面することが可能となるため、ＣＴ性の励起状態を効果的に形成し、安定化することができると考えられる。その結果、本願化合物の無輻射失活を抑制でき、発光効率が向上できたものと考えられる。

【００９６】

また、本発明のπ共役系化合物においては、電子求引性基Ａや電子供与性基Ｄがスルーボンドでの連結ではなく、スルースペースで相互作用しているため、吸収スペクトルや発光スペクトルの長波長化も抑制できると考えられる。

【００９７】

以下に、本発明に係るπ共役系化合物に関する種々の測定方法について記載する。

【００９８】

［電子密度分布］

本発明に係るπ共役系化合物は、ΔE_{ST}を小さくするという観点から、分子内においてＨＯＭＯとＬＵＭＯが実質的に分離していることが好ましい。これらＨＯＭＯ及びＬＵＭＯの分布状態については、分子軌道計算により得られる構造最適化した際の電子密度分布から求めることができる。

本発明におけるπ共役系化合物の分子軌道計算による構造最適化及び電子密度分布の算出は、計算手法として、汎関数としてＢ３ＬＹＰ、基底関数として６－３１Ｇ（ｄ）を用いた分子軌道計算用ソフトウェアを用いて算出することができ、ソフトウェアに特に限定はなく、いずれを用いても同様に求めることができる。

本発明においては、分子軌道計算用ソフトウェアとして、米国Ｇａｕｓｓｉａｎ社製のＧａｕｓｓｉａｎ０９（Ｒｅｖｉｓｉｏｎ　Ｃ．０１，Ｍ．Ｊ．Ｆｒｉｓｃｈ，ｅｔ　ａｌ，Ｇａｕｓｓｉａｎ，Ｉｎｃ．，２０１０．）を用いた。

【００９９】

また、「ＨＯＭＯとＬＵＭＯが実質的に分離している」とは、上記分子計算により算出されたＨＯＭＯ軌道分布及びＬＵＭＯ軌道分布の中心部位が離れており、より好ましくはＨＯＭＯ軌道の分布とＬＵＭＯ軌道の分布がほぼ重なっていないことを意味する。

また、ＨＯＭＯとＬＵＭＯの分離状態については、前述の汎関数としてＢ３ＬＹＰ、基底関数として６－３１Ｇ（ｄ）を用いた構造最適化計算から、さらに時間依存密度汎関数法（Ｔｉｍｅ－Ｄｅｐｅｎｄｅｎｔ　ＤＦＴ）による励起状態計算を実施してS_1、T_1のエネルギー準位（それぞれＥ（S_1）、Ｅ（T_1））を求めてΔE_{ST}＝｜Ｅ（S_1）－Ｅ（T_1）｜として算出することも可能である。算出されたΔE_{ST}が小さいほど、ＨＯＭＯとＬＵＭＯがより分離していることを示す。本発明においては、前述と同様の計算手法を用いて算出されたΔE_{ST}が０．５０ｅＶ以下であり、好ましくは０．３０ｅＶ以下であり、より好ましくは０．１０ｅＶ以下である。

【０１００】

［最低励起一重項エネルギー準位S_1］

本発明におけるπ共役系化合物の最低励起一重項エネルギー準位S_1については、本発明においても通常の手法と同様にして算出されるもので定義される。すなわち、測定対象となる化合物を石英基板上に蒸着して試料を作製し、常温（３００Ｋ）でこの試料の吸収スペクトル（縦軸：吸光度、横軸：波長とする。）を測定する。この吸収スペクトルの長波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値に基づいて、所定の換算式から算出される。

ただし、本発明において使用するπ共役系化合物の分子自体の凝集性が比較的高い場合、薄膜の測定においては凝集による誤差を生じる可能性がある。本発明におけるπ共役系化合物はストークスシフトが比較的小さいこと、さらに励起状態と基底状態の構造変化が小さいことを考慮し、本発明における最低励起一重項エネルギー準位S_1は、室温（２５℃）におけるπ共役系化合物の溶液状態の最大発光波長のピーク値を近似値として用いた。

ここで、使用する溶媒は、π共役系化合物の凝集状態に影響を与えない、すなわち溶媒

効果の影響が小さい溶媒、例えばシクロヘキサンやトルエン等の非極性溶媒等を用いることができる。

【０１０１】

［最低励起三重項エネルギー準位Ｔ$_1$］

本発明で用いられるπ共役系化合物の最低励起三重項エネルギー準位（Ｔ$_1$）については、溶液若しくは薄膜のフォトルミネッセンス（ＰＬ）特性により算出した。例えば、薄膜における算出方法としては、希薄状態のπ共役系化合物の分散物を薄膜にした後に、ストリークカメラを用い、過渡ＰＬ特性を測定することで、蛍光成分とリン光成分の分離を行い、そのエネルギー差の絶対値をΔＥ$_{ST}$として最低励起一重項エネルギー準位から最低励起三重項エネルギー準位を求めることができる。

測定・評価にあたって、絶対ＰＬ量子収率の測定については、絶対ＰＬ量子収率測定装置Ｃ９９２０－０２（浜松ホトニクス社製）を用いた。発光寿命は、ストリークカメラＣ４３３４（浜松ホトニクス社製）を用いて、サンプルをレーザー光で励起させながら測定した。

【０１０２】

《有機ＥＬ素子の構成層》

本発明の有機ＥＬ素子は、陽極と陰極の間に少なくとも発光層を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、該発光層の少なくとも１層が、前記一般式（１）～（７）のいずれかで表される構造を有するπ共役系化合物を含有することを特徴とする。

本発明の有機ＥＬ素子における代表的な素子構成としては、以下の構成を挙げることができるが、これらに限定されるものではない。

（１）陽極／発光層／陰極

（２）陽極／発光層／電子輸送層／陰極

（３）陽極／正孔輸送層／発光層／陰極

（４）陽極／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／陰極

（５）陽極／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／電子注入層／陰極

（６）陽極／正孔注入層／正孔輸送層／発光層／電子輸送層／陰極

（７）陽極／正孔注入層／正孔輸送層／（電子阻止層／）発光層／（正孔阻止層／）電子輸送層／電子注入層／陰極

上記の中で（７）の構成が好ましく用いられるが、これに限定されるものではない。

本発明に用いられる発光層は、単層又は複数層で構成されており、発光層が複数の場合は各発光層の間に非発光性の中間層を設けてもよい。

【０１０３】

必要に応じて、発光層と陰極との間に正孔阻止層（正孔障壁層ともいう）や電子注入層（陰極バッファー層ともいう）を設けてもよく、また、発光層と陽極との間に電子阻止層（電子障壁層ともいう）や正孔注入層（陽極バッファー層ともいう）を設けてもよい。

本発明に用いられる電子輸送層とは、電子を輸送する機能を有する層であり、広い意味で電子注入層、正孔阻止層も電子輸送層に含まれる。また、複数層で構成されていてもよい。

本発明に用いられる正孔輸送層とは、正孔を輸送する機能を有する層であり、広い意味で正孔注入層、電子阻止層も正孔輸送層に含まれる。また、複数層で構成されていてもよい。

上記の代表的な素子構成において、陽極と陰極を除いた層を「有機層」ともいう。

【０１０４】

（タンデム構造）

また、本発明の有機ＥＬ素子は、少なくとも１層の発光層を含む発光ユニットを複数積層した、いわゆるタンデム構造の素子であってもよい。

タンデム構造の代表的な素子構成としては、例えば以下の構成を挙げることができる。

陽極／第１発光ユニット／中間層／第２発光ユニット／中間層／第３発光ユニット／陰極

ここで、上記第１発光ユニット、第２発光ユニット及び第３発光ユニットは全て同じであっても、異なっていてもよい。また二つの発光ユニットが同じであり、残る一つが異なっていてもよい。

複数の発光ユニットは直接積層されていても、中間層を介して積層されていてもよく、中間層は、一般的に中間電極、中間導電層、電荷発生層、電子引抜層、接続層、中間絶縁層とも呼ばれ、陽極側の隣接層に電子を、陰極側の隣接層に正孔を供給する機能を持った層であれば、公知の材料構成を用いることができる。

【０１０５】

中間層に用いられる材料としては、例えば、ＩＴＯ（インジウムスズ酸化物）、ＩＺＯ（インジウム・亜鉛酸化物）、ZnO_2、ＴｉＮ、ＺｒＮ、ＨｆＮ、ＴｉＯｘ、ＶＯｘ、ＣｕＩ、ＩｎＮ、ＧａＮ、$CuAlO_2$、$CuGaO_2$、$SrCu_2O_2$、LaB_6、RuO_2、Ａｌ等の導電性無機化合物層や、Ａｕ／Bi_2O_3等の２層膜や、SnO_2／Ａｇ／SnO_2、ＺｎＯ／Ａｇ／ＺｎＯ、Bi_2O_3／Ａｕ／Bi_2O_3、TiO_2／ＴｉＮ／TiO_2、TiO_2／ＺｒＮ／TiO_2等の多層膜、またC_{60}等のフラーレン類、オリゴチオフェン等の導電性有機物層、金属フタロシアニン類、無金属フタロシアニン類、金属ポルフィリン類、無金属ポルフィリン類等の導電性有機化合物層等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

発光ユニット内の好ましい構成としては、例えば、上記の代表的な素子構成で挙げた（１）～（７）の構成から、陽極と陰極を除いたもの等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

【０１０６】

タンデム型有機ＥＬ素子の具体例としては、例えば、米国特許第６３３７４９２号明細書、米国特許第７４２０２０３号明細書、米国特許第７４７３９２３号明細書、米国特許第６８７２４７２号明細書、米国特許第６１０７７３４号明細書、米国特許第６３３７４９２号明細書、国際公開第２００５／００９０８７号、特開２００６－２２８７１２号公報、特開２００６－２４７９１号公報、特開２００６－４９３９３号公報、特開２００６－４９３９４号公報、特開２００６－４９３９６号公報、特開２０１１－９６６７９号公報、特開２００５－３４０１８７号公報、特許第４７１１４２４号公報、特許第３４９６６８１号公報、特許第３８８４５６４号公報、特許第４２１３１６９号公報、特開２０１０－１９２７１９号公報、特開２００９－０７６９２９号公報、特開２００８－０７８４１４号公報、特開２００７－０５９８４８号公報、特開２００３－２７２８６０号公報、特開２００３－０４５６７６号公報、国際公開第２００５／０９４１３０号等に記載の素子構成や構成材料等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

【０１０７】

以下、本発明の有機ＥＬ素子を構成する各層について説明する。

【０１０８】

《発光層》

本発明に用いられる発光層は、電極又は隣接層から注入されてくる電子及び正孔が再結合し、励起子を経由して発光する場を提供する層であり、発光する部分は発光層の層内であっても、発光層と隣接層との界面であってもよい。本発明に用いられる発光層は、本発明で規定する要件を満たしていれば、その構成に特に制限はない。

発光層の層厚の総和は、特に制限はないが、形成する膜の均質性や、発光時に不必要な高電圧を印加するのを防止し、かつ、駆動電流に対する発光色の安定性向上の観点から、２ｎｍ～５μｍの範囲に調整することが好ましく、より好ましくは２～５００ｎｍの範囲に調整され、更に好ましくは５～２００ｎｍの範囲に調整される。

また、本発明に用いられる個々の発光層の層厚としては、２ｎｍ～１μｍの範囲に調整することが好ましく、より好ましくは２～２００ｎｍの範囲に調整され、更に好ましくは３～１５０ｎｍの範囲に調整される。

本発明に用いられる発光層は、一層で構成されてもよいし、複数の層から構成されてもよい。本願のπ共役系化合物を発光層に用いる場合、単独で用いてもよいし、後述のホス

ト材料、蛍光発光材料、りん光発光材料などと混合して用いてもよい。発光層の少なくとも一層が、発光ドーパント（発光性化合物、発光性ドーパント、単にドーパントともいう。）を含有し、さらにホスト化合物（マトリックス材料、発光ホスト化合物、単にホスト、ともいう。）を含有することが好ましい。本願のπ共役系化合物は、発光層の少なくとも一層が、本願π共役系化合物と、ホスト化合物とを含有すると、発光効率が向上するため好ましい。発光層の少なくとも一層が、本願π共役系化合物と、蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物のうち少なくとも１種類とを含有すると、発光効率が向上するため好ましい。発光層の少なくとも一層が、本願π共役系化合物と、蛍光発光性化合物及びリン光発光性化合物のうち少なくとも１種類と、ホスト化合物とを含有すると、発光効率が向上するため好ましい。

【０１０９】

（１）発光ドーパント

発光ドーパントとしては、蛍光発光性ドーパント（蛍光発光性化合物、蛍光ドーパントともいう。）と、リン光発光性ドーパント（リン光発光性化合物、リン光ドーパントともいう。）が好ましく用いられる。本発明においては、発光層が、本発明に係るπ共役系化合物を蛍光発光性化合物又はアシストドーパントとして、０．１～５０質量％の範囲内で含有し、特に、１～３０質量％の範囲内で含有することが好ましい。

【０１１０】

本発明においては、発光層が発光性化合物を０．１～５０質量％の範囲内で含有し、特に、１～３０質量％の範囲内で含有することが好ましい。

発光層中の発光性化合物の濃度については、使用される特定の発光性化合物及びデバイスの必要条件に基づいて、任意に決定することができ、発光層の層厚方向に対し、均一な濃度で含有されていてもよく、また任意の濃度分布を有していてもよい。

また、本発明で用いられる発光性化合物は、複数種を併用して用いてもよく、構造の異なる蛍光発光性化合物同士の組み合わせや、蛍光発光性化合物とリン光発光性化合物とを組み合わせて用いてもよい。これにより、任意の発光色を得ることができる。

【０１１１】

最低励起一重項エネルギー準位と最低励起三重項エネルギー準位の差の絶対値（ΔE_{ST}）が、０．５０ｅＶ以下である本発明に係るπ共役系化合物と、発光性化合物と、ホスト化合物を発光層に含有する場合、本発明に係るπ共役系化合物はアシストドーパントとして作用する。一方、発光層が、本発明に係るπ共役系化合物と発光性化合物を含有し、ホスト化合物を含有しない場合、本発明に係るπ共役系化合物はホスト化合物として作用する。発光層が、本発明に係るπ共役系化合物のみを含有する場合、本発明に係るπ共役系化合物はホスト化合物兼発光性化合物として作用する。

効果が発現する機構としては、いずれの場合も同様であり、本発明に係るπ共役系化合物上に生成した三重項励起子を逆項間交差（ＲＩＳＣ）で一重項励起子へと変換する点にある。

これにより、本発明に係るπ共役系化合物上に生成した理論上すべての励起子エネルギーを発光性化合物に蛍光共鳴エネルギー移動（ＦＲＥＴ）することができ、高発光効率の発現を可能にする。

したがって、発光層が、本発明に係るπ共役系化合物、発光性化合物及びホスト化合物の３成分を含有する場合は、π共役系化合物のS_1とT_1のエネルギー準位は、ホスト化合物のS_1とT_1のエネルギー準位よりも低く、発光性化合物のS_1とT_1のエネルギー準位よりも高い方が好ましい。

同様に、発光層が、本発明に係るπ共役系化合物と発光性化合物の２成分を含有する場合は、π共役系化合物のS_1とT_1のエネルギー準位は、発光性化合物のS_1とT_1のエネルギー準位よりも高い方が好ましい。

【０１１２】

図３及び図４に、本発明のπ共役系化合物がそれぞれアシストドーパント及びホスト化合物として作用する場合の模式図を示す。図３及び図４は一例であって、本発明に係るπ

共役系化合物上に生成する三重項励起子の生成過程は電界励起のみに限定されず、発光層内又は周辺層界面からのエネルギー移動や電子移動等も含まれる。

さらに、図３及び図４では、発光材料として蛍光発光性化合物を用いて示しているが、これに限定されず、リン光発光性化合物を用いてもよいし、蛍光発光性化合物とリン光発光性化合物の両者を用いてもよい。

【０１１３】

本発明に係るπ共役系化合物をアシストドーパントとして用いる場合、発光層は、π共役系化合物に対し質量比で１００％以上のホスト化合物を含有し、蛍光発光性化合物及び／又はリン光発光性化合物がπ共役系化合物に対して質量比０．１～５０％の範囲内で含有していることが好ましい。

【０１１４】

本発明に係るπ共役系化合物をホスト化合物として用いる場合、発光層は、蛍光発光性化合物及び／又はリン光発光性化合物をπ共役系化合物に対して質量比０．１～５０％の範囲内で含有することが好ましい。

【０１１５】

本発明に係るπ共役系化合物をアシストドーパント又はホスト化合物として用いる場合、本発明に係るπ共役系化合物の発光スペクトルと発光性化合物の吸収スペクトルが重なることが好ましい。

【０１１６】

本発明の有機ＥＬ素子や本発明に用いられる化合物の発光する色は、「新編色彩科学ハンドブック」（日本色彩学会編、東京大学出版会、１９８５）の１０８頁の図３．１６において、分光放射輝度計ＣＳ－１０００（コニカミノルタ（株）製）で測定した結果をＣＩＥ色度座標に当てはめたときの色で決定される。

本発明においては、１層又は複数層の発光層が、発光色の異なる複数の発光ドーパントを含有し、白色発光を示すことも好ましい。

白色を示す発光ドーパントの組み合わせについては特に限定はないが、例えば青と橙や、青と緑と赤の組合わせ等が挙げられる。

本発明の有機ＥＬ素子における白色とは、２度視野角正面輝度を前述の方法により測定した際に、１０００ｃｄ／ｍ^{2}でのＣＩＥ１９３１表色系における色度がｘ＝０．３９±０．０９、ｙ＝０．３８±０．０８の領域内にあることが好ましい。

【０１１７】

（１．１）蛍光発光性ドーパント

蛍光発光性ドーパント（蛍光ドーパント）は、本発明のπ共役系化合物を用いてもよいし、有機ＥＬ素子の発光層に使用される公知の蛍光ドーパントや遅延蛍光性ドーパントの中から適宜選択して用いてもよい。

【０１１８】

本発明に使用できる公知の蛍光ドーパントの具体例としては、例えば、アントラセン誘導体、ピレン誘導体、クリセン誘導体、フルオランテン誘導体、ペリレン誘導体、フルオレン誘導体、アリールアセチレン誘導体、スチリルアリーレン誘導体、スチリルアミン誘導体、アリールアミン誘導体、ホウ素錯体、クマリン誘導体、ピラン誘導体、シアニン誘導体、クロコニウム誘導体、スクアリウム誘導体、オキソベンツアントラセン誘導体、フルオレセイン誘導体、ローダミン誘導体、ピリリウム誘導体、ペリレン誘導体、ポリチオフェン誘導体、又は希土類錯体系化合物等が挙げられる。また、近年では遅延蛍光を利用した発光ドーパントも開発されており、これらを用いてもよい。遅延蛍光を利用した発光ドーパントの具体例としては、例えば、国際公開第２０１１／１５６７９３号、特開２０１１－２１３６４３号公報、特開２０１０－９３１８１号公報、特許５３６６１０６号公報等に記載の化合物が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

【０１１９】

（１．２）リン光発光性ドーパント

本発明に用いられるリン光発光性ドーパントについて説明する。

本発明に用いられるリン光発光性ドーパントは、励起三重項からの発光が観測される化合物であり、具体的には、室温（２５℃）にてリン光発光する化合物であり、リン光量子収率が、２５℃において０．０１以上の化合物であると定義されるが、好ましいリン光量子収率は０．１以上である。

上記リン光量子収率は、第４版実験化学講座７の分光ＩＩの３９８頁（１９９２年版、丸善）に記載の方法により測定できる。溶液中でのリン光量子収率は種々の溶媒を用いて測定できるが、本発明に用いられるリン光ドーパントは、任意の溶媒のいずれかにおいて上記リン光量子収率（０．０１以上）が達成されればよい。

【０１２０】

リン光ドーパントは、有機ＥＬ素子の発光層に使用される公知のものの中から適宜選択して用いることができる。本発明に使用できる公知のリン光ドーパントの具体例としては、以下の文献に記載されている化合物等が挙げられる。

Ｎａｔｕｒｅ ３９５，１５１（１９９８）、Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．Ｌｅｔｔ．７８，１６２２（２００１）、Ａｄｖ．Ｍａｔｅｒ．１９，７３９（２００７）、Ｃｈｅｍ．Ｍａｔｅｒ．１７，３５３２（２００５）、Ａｄｖ．Ｍａｔｅｒ．１７，１０５９（２００５）、国際公開第２００９／１００９９１号、国際公開第２００８／１０１８４２号、国際公開第２００３／０４０２５７号、米国特許出願公開第２００６／８３５４６９号明細書、米国特許出願公開第２００６／０２０２１９４号明細書、米国特許出願公開第２００７／００８７３２１号明細書、米国特許出願公開第２００５／０２４４６７３号明細書、Ｉｎｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．４０，１７０４（２００１）、Ｃｈｅｍ．Ｍａｔｅｒ．１６，２４８０（２００４）、Ａｄｖ．Ｍａｔｅｒ．１６，２００３（２００４）、Ａｎｇｅｗ．Ｃｈｅｍ．ｌｎｔ．Ｅｄ．２００６，４５，７８００、Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．Ｌｅｔｔ．８６，１５３５０５（２００５）、Ｃｈｅｍ．Ｌｅｔｔ．３４，５９２（２００５）、Ｃｈｅｍ．Ｃｏｍｍｕｎ．２９０６（２００５）、Ｉｎｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．４２，１２４８（２００３）、国際公開第２００９／０５０２９０号、国際公開第２００２／０１５６４５号、国際公開第２００９／０００６７３号、米国特許出願公開第２００２／００３４６５６号明細書、米国特許第７３３２２３２号明細書、米国特許出願公開第２００９／０１０８７３７号明細書、米国特許出願公開第２００９／００３９７７６号明細書、米国特許第６９２１９１５号明細書、米国特許第６６８７２６６号明細書、米国特許出願公開第２００７／０１９０３５９号明細書、米国特許出願公開第２００６／０００８６７０号明細書、米国特許出願公開第２００９／０１６５８４６号明細書、米国特許出願公開第２００８／００１５３５５号明細書、米国特許第７２５０２２６号明細書、米国特許第７３９６５９８号明細書、米国特許出願公開第２００６／０２６３６３５号明細書、米国特許出願公開第２００３／０１３８６５７号明細書、米国特許出願公開第２００３／０１５２８０２号明細書、米国特許第７０９０９２８号明細書、Ａｎｇｅｗ．Ｃｈｅｍ．ｌｎｔ．Ｅｄ．４７，１（２００８）、Ｃｈｅｍ．Ｍａｔｅｒ．１８，５１１９（２００６）、Ｉｎｏｒｇ．Ｃｈｅｍ．４６，４３０８（２００７）、Ｏｒｇａｎｏｍｅｔａｌｌｉｃｓ ２３，３７４５（２００４）、Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．Ｌｅｔｔ．７４，１３６１（１９９９）、国際公開第２００２／００２７１４号、国際公開第２００６／００９０２４号、国際公開第２００６／０５６４１８号、国際公開第２００５／０１９３７３号、国際公開第２００５／１２３８７３号、国際公開第２００５／１２３８７３号、国際公開第２００７／００４３８０号、国際公開第２００６／０８２７４２号、米国特許出願公開第２００６／０２５１９２３号明細書、米国特許出願公開第２００５／０２６０４４１号明細書、米国特許第７３９３５９９号明細書、米国特許第７５３４５０５号明細書、米国特許第７４４５８５５号明細書、米国特許出願公開第２００７／０１９０３５９号明細書、米国特許出願公開第２００８／０２９７０３３号明細書、米国特許第７３３８７２２号明細書、米国特許出願公開第２００２／０１３４９８４号明細書、米国特許第７２７９７０４号明細書、米国特許出願公開第２００６／０９８１２０号明細書、米国特許出願公開第２００６／１０３８７４号明細書、国際公開第２００５／０７６３８０号、国際公開第２０１０／０３２６６３号、国際公開第２００８／１４０１１５号、国際公開第２００７／０５２４３１

号、国際公開第２０１１／１３４０１３号、国際公開第２０１１／１５７３３９号、国際公開第２０１０／０８６０８９号、国際公開第２００９／１１３６４６号、国際公開第２０１２／０２０３２７号、国際公開第２０１１／０５１４０４号、国際公開第２０１１／００４６３９号、国際公開第２０１１／０７３１４９号、米国特許出願公開第２０１２／２２８５８３号明細書、米国特許出願公開第２０１２／２１２１２６号明細書、特開２０１２－０６９７３７号公報、特願２０１１－１８１３０３号公報、特開２００９－１１４０８６号公報、特開２００３－８１９８８号公報、特開２００２－３０２６７１号公報、特開２００２－３６３５５２号公報等である。

中でも、好ましいリン光ドーパントとしてはＩｒを中心金属に有する有機金属錯体が挙げられる。さらに好ましくは、金属－炭素結合、金属－窒素結合、金属－酸素結合、金属－硫黄結合の少なくとも一つの配位様式を含む錯体が好ましい。

【０１２１】

（２）ホスト化合物

本発明に用いられるホスト化合物は、発光層において主に電荷の注入及び輸送を担う化合物であり、有機ＥＬ素子においてそれ自体の発光は実質的に観測されない。

ホスト化合物は、発光層に含有される化合物の内で、その層中での質量比が２０％以上であることが好ましい。

ホスト化合物は、単独で用いてもよく、又は複数種併用して用いてもよい。ホスト化合物を複数種用いることで、電荷の移動を調整することが可能であり、有機エレクトロルミネッセンス素子を高効率化することができる。

以下に、本発明において好ましく用いられるホスト化合物について述べる。

【０１２２】

ホスト化合物としては、上述のように本発明で用いられるπ共役系化合物を用いてもよいが、特に制限はない。逆エネルギー移動の観点から、ドーパントの励起一重項エネルギーより大きな励起エネルギーをもつものが好ましく、さらにドーパントの励起三重項エネルギーより大きな励起三重項エネルギーをもつものがより好ましい。

ホスト化合物は、発光層内においてキャリアの輸送及び励起子の生成を担う。そのため、カチオンラジカル状態、アニオンラジカル状態、及び励起状態の全ての活性種の状態において安定に存在でき、分解や付加反応などの化学変化を起こさないこと、さらに、層中において通電経時でホスト分子がオングストロームレベルで移動しないことが好ましい。

【０１２３】

また、特に併用する発光ドーパントがＴＡＤＦ発光を示す場合には、ＴＡＤＦ化合物の三重項励起状態の存在時間が長いことから、ホスト化合物自体のT_1エネルギー準位が高いこと、さらにホスト化合物同士が会合した状態で低T_1状態を作らないこと、ＴＡＤＦ化合物とホスト化合物とがエキサイプレックスを形成しないこと、ホスト化合物が電界によりエレクトロマーを形成しないことなど、ホスト化合物が低T_1化しないような分子構造の適切な設計が必要となる。

このような要件を満たすためには、ホスト化合物自体が電子のホッピング移動性が高いこと、かつ、正孔のホッピング移動が高いこと、三重項励起状態となったときの構造変化が小さいことが必要である。このような要件を満たすホスト化合物の代表格としてカルバゾール骨格、アザカルバゾール骨格、ジベンゾフラン骨格、ジベンゾチオフェン骨格又はアザジベンゾフラン骨格などの、高T_1エネルギー準位を有するものが好ましく挙げられる。

【０１２４】

また、ホスト化合物は、正孔輸送能又は電子輸送能を有しつつ、かつ、発光の長波長化を防ぎ、さらに、有機エレクトロルミネッセンス素子を高温駆動時や素子駆動中の発熱に対して安定して動作させる観点から、高いガラス転移温度（Ｔｇ）を有することが好ましい。好ましくはＴｇが９０℃以上であり、より好ましくは１２０℃以上である。

ここで、ガラス転移点（Ｔｇ）とは、ＤＳＣ（Ｄｉｆｆｅｒｅｎｔｉａｌ　Ｓｃａｎｎｉｎｇ　Ｃｏｌｏｒｉｍｅｔｒｙ：示差走査熱量法）を用いて、ＪＩＳ　Ｋ　７１２１－

２０１２に準拠した方法により求められる値である。

【０１２５】

また、本発明に用いられるホスト化合物としては、上述のように本発明に係るπ共役系化合物を用いることも好適である。本発明に係るπ共役系化合物は、高いT_1を有しており、発光波長の短い（すなわちT_1及びS_1のエネルギー準位が高い）発光材料に対しても好適に用いることができるためである。

【０１２６】

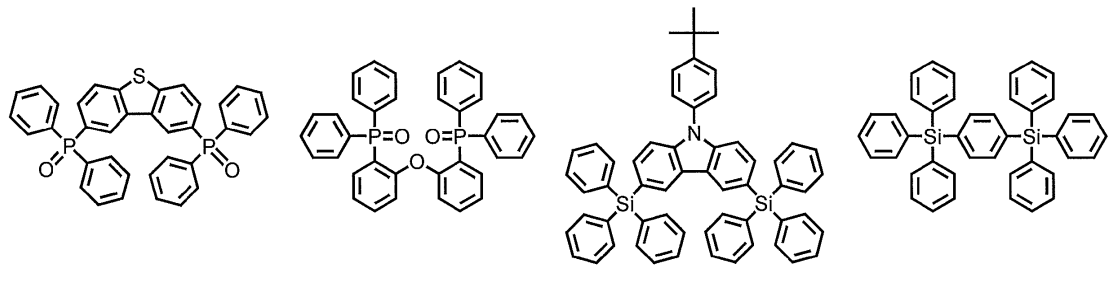
本発明の有機ＥＬ素子に公知のホスト化合物を用いる場合、その具体例としては、以下の文献に記載の化合物等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

特開２００１－２５７０７６号公報、同２００２－３０８８５５号公報、同２００１－３１３１７９号公報、同２００２－３１９４９１号公報、同２００１－３５７９７７号公報、同２００２－３３４７８６号公報、同２００２－８８６０号公報、同２００２－３３４７８７号公報、同２００２－１５８７１号公報、同２００２－３３４７８８号公報、同２００２－４３０５６号公報、同２００２－３３４７８９号公報、同２００２－７５６４５号公報、同２００２－３３８５７９号公報、同２００２－１０５４４５号公報、同２００２－３４３５６８号公報、同２００２－１４１１７３号公報、同２００２－３５２９５７号公報、同２００２－２０３６８３号公報、同２００２－３６３２２７号公報、同２００２－２３１４５３号公報、同２００３－３１６５号公報、同２００２－２３４８８８号公報、同２００３－２７０４８号公報、同２００２－２５５９３４号公報、同２００２－２６０８６１号公報、同２００２－２８０１８３号公報、同２００２－２９９０６０号公報、同２００２－３０２５１６号公報、同２００２－３０５０８３号公報、同２００２－３０５０８４号公報、同２００２－３０８８３７号公報、米国特許出願公開第２００３／０１７５５５３号明細書、米国特許出願公開第２００６／０２８０９６５号明細書、米国特許出願公開第２００５／０１１２４０７号明細書、米国特許出願公開第２００９／００１７３３０号明細書、米国特許出願公開第２００９／００３０２０２号明細書、米国特許出願公開第２００５／０２３８９１９号明細書、国際公開第２００１／０３９２３４号、国際公開第２００９／０２１１２６号、国際公開第２００８／０５６７４６号、国際公開第２００４／０９３２０７号、国際公開第２００５／０８９０２５号、国際公開第２００７／０６３７９６号、国際公開第２００７／０６３７５４号、国際公開第２００４／１０７８２２号、国際公開第２００５／０３０９００号、国際公開第２００６／１１４９６６号、国際公開第２００９／０８６０２８号、国際公開第２００９／００３８９８号、国際公開第２０１２／０２３９４７号、特開２００８－０７４９３９号公報、特開２００７－２５４２９７号公報、欧州特許第２０３４５３８号明細書、国際公開第２０１１／０５５９３３号、国際公開第２０１２／０３５８５３号、特開２０１５－３８９４１号公報等である。特開２０１５－３８９４１号公報に記載のホスト化合物の例には、明細書の［０２５５］～［０２９３］に記載の化合物Ｈ－１～Ｈ－２３０が含まれる。

【０１２７】

以下に、本発明に用いられるホスト化合物として、具体的な化合物例を示すが、これらに限定されるものではない。

【化２０】



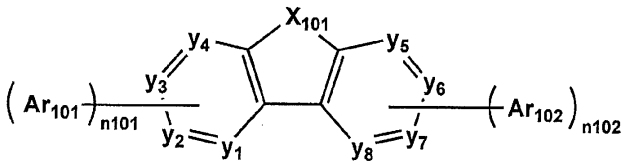
H-231　H-232　H-233　H-234

【０１２８】

さらに、本発明に用いられるホスト化合物は、下記一般式（Ｉ）で表される化合物であることが好ましい。下記一般式（Ｉ）で表される化合物はバイポーラー性を有し、かつ非常に安定である。したがってホスト化合物が下記一般式（Ｉ）で表される化合物であると、有機ＥＬ素子の寿命が長くなりやすい。

【化２１】

一般式(I)



上記一般式（Ｉ）中、X_{101}は、NR_{101}、酸素原子、硫黄原子、スルフィニル基、スルホニル基、$CR_{102}R_{103}$又は$SiR_{104}R_{105}$を表す。また、y_1～y_8は、それぞれ独立に、CR_{106}、又は窒素原子を表す。ここで、R_{101}～R_{106}は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、互いに結合して環を形成してもよい。R_{101}～R_{106}でありうる置換基の例には、以下の基が含まれる。

【０１２９】

直鎖状又は分岐状のアルキル基（例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ｔ－ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、ドデシル基、トリデシル基、テトラデシル基、ペンタデシル基等）；

アルケニル基（例えば、ビニル基、アリル基等）；

アルキニル基（例えば、エチニル基、プロパルギル基等）；

芳香族炭化水素環基（芳香族炭素環基やアリール基等とも称される。例えば、ベンゼン環、ビフェニル、ナフタレン環、アズレン環、アントラセン環、フェナントレン環、ピレン環、クリセン環、ナフタセン環、トリフェニレン環、ｏ－ターフェニル環、ｍ－ターフェニル環、ｐ－ターフェニル環、アセナフテン環、コロネン環、インデン環、フルオレン環、フルオラントレン環、ナフタセン環、ペンタセン環、ペリレン環、ペンタフェン環、ピセン環、ピレン環、ピラントレン環、アンスラアントレン環、テトラリン等から導出される基）；

芳香族複素環基（例えば、フラン環、ジベンゾフラン環、チオフェン環、ジベンゾチオフェン環、オキサゾール環、ピロール環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、ベンゾイミダゾール環、オキサジアゾール環、トリアゾール環、イミダゾール環、ピラゾール環、チアゾール環、インドール環、インダゾール環、ベンゾイミダゾール環、ベンゾチアゾール環、ベンゾオキサゾール環、キノキサリン環、キナゾリン環、シンノリン環、キノリン環、イソキノリン環、フタラジン環、ナフチリジン環、カルバゾール環、カルボリン環、ジアザカルバゾール環（カルボリン環を構成する炭化水素環の炭素原子の一つが更に窒素原子で置換されている環等から導出される基。また、カルボリン環とジアザカルバゾール環を合わせて「アザカルバゾール環」と称される場合もある。）；

非芳香族炭化水素環基（例えば、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等）；

非芳香族複素環基（例えば、ピロリジル基、イミダゾリジル基、モルホリル基、オキサゾリジル基等）；

アルコキシ基（例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロピルオキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、オクチルオキシ基、ドデシルオキシ基等）；

シクロアルコキシ基（例えば、シクロペンチルオキシ基、シクロヘキシルオキシ基等）；

アリールオキシ基（例えば、フェノキシ基、ナフチルオキシ基等）；

アルキルチオ基（例えば、メチルチオ基、エチルチオ基、プロピルチオ基、ペンチルチオ基、ヘキシルチオ基、オクチルチオ基、ドデシルチオ基等）；

シクロアルキルチオ基（例えば、シクロペンチルチオ基、シクロヘキシルチオ基等）；

アリールチオ基（例えば、フェニルチオ基、ナフチルチオ基等）：
アルコキシカルボニル基（例えば、メチルオキシカルボニル基、エチルオキシカルボニル基、ブチルオキシカルボニル基、オクチルオキシカルボニル基、ドデシルオキシカルボニル基等）；
アリールオキシカルボニル基（例えば、フェニルオキシカルボニル基、ナフチルオキシカルボニル基等）；
スルファモイル基（例えば、アミノスルホニル基、メチルアミノスルホニル基、ジメチルアミノスルホニル基、ブチルアミノスルホニル基、ヘキシルアミノスルホニル基、シクロヘキシルアミノスルホニル基、オクチルアミノスルホニル基、ドデシルアミノスルホニル基、フェニルアミノスルホニル基、ナフチルアミノスルホニル基、２－ピリジルアミノスルホニル基等）；
アシル基（例えば、アセチル基、エチルカルボニル基、プロピルカルボニル基、ペンチルカルボニル基、シクロヘキシルカルボニル基、オクチルカルボニル基、２－エチルヘキシルカルボニル基、ドデシルカルボニル基、フェニルカルボニル基、ナフチルカルボニル基、ピリジルカルボニル基等）；
アシルオキシ基（例えば、アセチルオキシ基、エチルカルボニルオキシ基、ブチルカルボニルオキシ基、オクチルカルボニルオキシ基、ドデシルカルボニルオキシ基、フェニルカルボニルオキシ基等）；
アミド基（例えば、メチルカルボニルアミノ基、エチルカルボニルアミノ基、ジメチルカルボニルアミノ基、プロピルカルボニルアミノ基、ペンチルカルボニルアミノ基、シクロヘキシルカルボニルアミノ基、２－エチルヘキシルカルボニルアミノ基、オクチルカルボニルアミノ基、ドデシルカルボニルアミノ基、フェニルカルボニルアミノ基、ナフチルカルボニルアミノ基等）；
カルバモイル基（例えば、アミノカルボニル基、メチルアミノカルボニル基、ジメチルアミノカルボニル基、プロピルアミノカルボニル基、ペンチルアミノカルボニル基、シクロヘキシルアミノカルボニル基、オクチルアミノカルボニル基、２－エチルヘキシルアミノカルボニル基、ドデシルアミノカルボニル基、フェニルアミノカルボニル基、ナフチルアミノカルボニル基、２－ピリジルアミノカルボニル基等）；
ウレイド基（例えば、メチルウレイド基、エチルウレイド基、ペンチルウレイド基、シクロヘキシルウレイド基、オクチルウレイド基、ドデシルウレイド基、フェニルウレイド基ナフチルウレイド基、２－ピリジルアミノウレイド基等）；
スルフィニル基（例えば、メチルスルフィニル基、エチルスルフィニル基、ブチルスルフィニル基、シクロヘキシルスルフィニル基、２－エチルヘキシルスルフィニル基、ドデシルスルフィニル基、フェニルスルフィニル基、ナフチルスルフィニル基、２－ピリジルスルフィニル基等）；
アルキルスルホニル基（例えば、メチルスルホニル基、エチルスルホニル基、ブチルスルホニル基、シクロヘキシルスルホニル基、２－エチルヘキシルスルホニル基、ドデシルスルホニル基等）；
アリールスルホニル基又はヘテロアリールスルホニル基（例えば、フェニルスルホニル基、ナフチルスルホニル基、２－ピリジルスルホニル基等）；
アミノ基（例えば、アミノ基、エチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ブチルアミノ基、シクロペンチルアミノ基、２－エチルヘキシルアミノ基、ドデシルアミノ基、アニリノ基、ナフチルアミノ基、２－ピリジルアミノ基、ジフェニルアミノ基等）；
ハロゲン原子（例えば、フッ素原子、塩素原子、臭素原子等）；
フッ化炭化水素基（例えば、フルオロメチル基、トリフルオロメチル基、ペンタフルオロエチル基、ペンタフルオロフェニル基等）；
シアノ基；
ニトロ基；
ヒドロキシ基；
チオール基；

シリル基（例えば、トリメチルシリル基、トリイソプロピルシリル基、トリフェニルシリル基、フェニルジエチルシリル基等）；
重水素原子
【０１３０】
上記の中でも好ましい基として、直鎖又は分岐アルキル基、芳香族炭化水素環基、芳香族複素環基、アミノ基、フッ素原子、フッ化炭化水素基、シアノ基、及びシリル基が挙げられる。
【０１３１】
また、Ar_{101}及びAr_{102}は、それぞれ独立に、置換されていてもよいアリール基、又は置換されていてもよいヘテロアリール基を表す。「置換されていてもよいアリール基」におけるアリール基は、炭素原子数６～２４の芳香族炭化水素環から誘導される基であることが好ましい。そのような芳香族炭化水素環の例には、ベンゼン環、インデン環、ナフタレン環、アズレン環、フルオレン環、フェナントレン環、アントラセン環、アセナフチレン環、ビフェニレン環、ナフタセン環、ピレン環、ペンタレン環、アセアントリレン環、ヘプタレン環、トリフェニレン環、ａｓ－インダセン環、クリセン環、ｓ－インダセン環、プレイアデン環、フェナレン環、フルオランテン環、ペリレン環、アセフェナントリレン環、ビフェニル環、ターフェニル環、及びテトラフェニル環等が含まれる。好ましくは、ベンゼン環、ビフェニル環、ターフェニル環である。
【０１３２】
また、「置換されていてもよいヘテロアリール基」におけるヘテロアリール基は、各種芳香族複素環から誘導される基であることが好ましい。そのような芳香族複素環の例にはピロール環、インドール環、カルバゾール環、インドロインドール環、９，１０－ジヒドロアクリジン環、５，１０－ジヒドロフェナジン環、フェノキサジン環、フェノチアジン環、ジベンゾチオフェン環、ベンゾフリルインドール環、ベンゾチエノインドール環、インドロカルバゾール環、ベンゾフリルカルバゾール環、ベンゾチエノカルバゾール環、ベンゾチエノベンゾチオフェン環、ベンゾカルバゾール環、ジベンゾカルバゾール環、アザカルバゾール環、アザジベンゾフラン環、ジアザカルバゾール環、ジアザジベンゾフラン環、ジベンゾチオフェンオキシド環、ジベンゾチオフェンジオキシド環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、キナゾリン環、シンノリン環、キノキサリン環、フタラジン環、プテリジン環、フェナントリジン環、フェナントロリン環、ジベンゾフラン環、ジベンゾシロール環、ジベンゾボロール環、ジベンゾホスホールオキシド環等が含まれる。好ましくは、カルバゾール環、ベンゾカルバゾール環、アザカルバゾール環、アザジベンゾフラン環、ジアザカルバゾール環、ジアザジベンゾフラン環、ピリジン環、ピリミジン環、トリアジン環である。
【０１３３】
アリール基やヘテロアリール基が有しうる置換基の例には、アルキル基で置換されていてもよいアリール基、フッ素原子、シアノ基、フッ素で置換されていてもよいアルキル基、置換されていてもよいカルボニル基、置換されていてもよいスルホニル基、置換されていてもよいホスフィンオキサイド基、置換されていてもよいボリル基、置換されていてもよい複素環基、置換されていてもよいアミノ基、置換されていてもよいシリル基等が含まれる。
上記「アルキル基」は、直鎖、分岐又は環状のいずれであってもよく、例えば炭素原子数１～２０の直鎖又は分岐のアルキル基、或いは炭素原子数５～２０の環状のアルキル基でありうる。アルキル基の例には、メチル基、エチル基、ｎ－プロピル基、イソプロピル基、ｎ－ブチル基、ｓ－ブチル基、ｔ－ブチル基、ｎ－ペンチル基、ネオペンチル基、ｎ－ヘキシル基、シクロヘキシル基、２－エチルヘキシル基、ｎ－ヘプチル基、ｎ－オクチル基、２－ヘキシルオクチル基、ｎ－ノニル基、ｎ－デシル基、ｎ－ウンデシル基、ｎ－ドデシル基、ｎ－トリデシル基、ｎ－テトラデシル基、ｎ－ペンタデシル基、ｎ－ヘキサデシル基、ｎ－ヘプタデシル基、ｎ－オクタデシル基、ｎ－ノナデシル基、及びｎ－イコシル基等が含まれる。また、「アリール基」及び「複素環基」は、Ar_{101}及びAr_{1}

０２で表されるアリール基やヘテロアリール基と同様でありうる。

【０１３４】

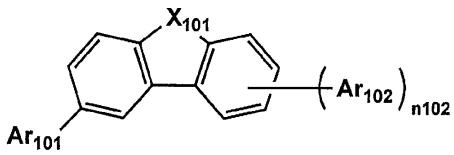
また、上記一般式（Ｉ）において、ｎ１０１及びｎ１０２は、各々０～４の整数を表すが、Ｒ１０１が水素原子の場合は、ｎ１０１は１～４の整数を表す。

【０１３５】

上記一般式（Ｉ）で表される構造を有するホスト化合物は、下記一般式（II）で表される構造を有することがより好ましい。

【化２２】

一般式(II)



一般式（II）において、Ｘ１０１は、ＮＲ１０１、酸素原子、硫黄原子、スルフィニル基、スルホニル基、ＣＲ１０２Ｒ１０３又はＳｉＲ１０４Ｒ１０５を表す。Ｒ１０１～Ｒ１０５は、それぞれ独立して水素原子又は置換基を表し、互いに結合して環を形成してもよい。なお、Ｒ１０１～Ｒ１０５は、一般式（Ｉ）のＲ１０１～Ｒ１０５と同義である。

【０１３６】

Ａｒ１０１及びＡｒ１０２は、それぞれ独立に、置換されていてもよいアリール基、置換されていてもよいヘテロアリール基を表し、Ａｒ１０１及びＡｒ１０２は、一般式（Ｉ）のＡｒ１０１及びＡｒ１０２と同義である。

【０１３７】

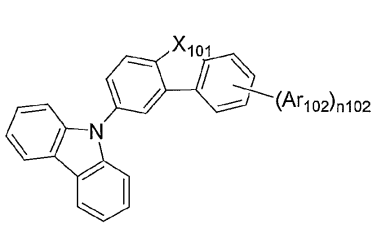
また、ｎ１０２は０～４の整数を表す。

【０１３８】

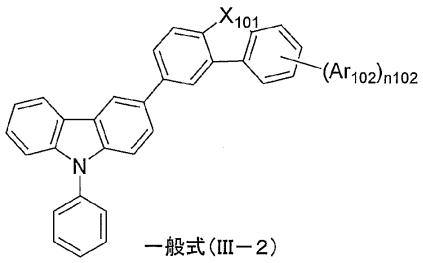
さらに、一般式（II）で表される化合物は、下記一般式（III－１）、（III－２）又は（III－３）で表される化合物であることが好ましい。

【０１３９】

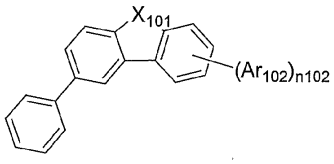
【化２３】



一般式(III－1)



一般式(III－2)



一般式(III－3)

【０１４０】

一般式（III－１）～（III－３）において、Ｘ１０１、Ａｒ１０２、ｎ１０２は、前記一般式（II）におけるＸ１０１、Ａｒ１０２、ｎ１０２と同義である。また、一般式（III－２）において、Ｒ１０４は、前記一般式（Ｉ）におけるＲ１０４と同義である。

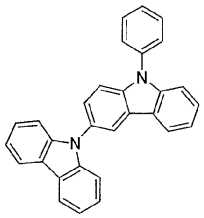
一般式（III－１）～（III－３）において、Ｘ１０１を含んで形成される縮合環、カルバゾール環及びベンゼン環は、ホスト化合物の機能を阻害しない範囲でさらに置換基を有してもよい。

【０１４１】

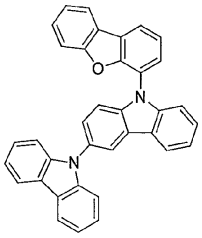
上記一般式（Ｉ）、（II）、又は（III－１）～（III－３）で表されるホスト化合物の好ましい具体例を挙げるが、これらの化合物はさらに置換基を有していたり、構造異性体などが存在していたりする場合もあり、本記述に限定されない。

【０１４２】

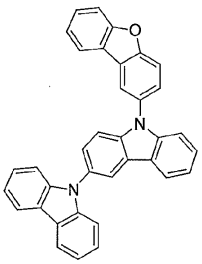
【化２４】



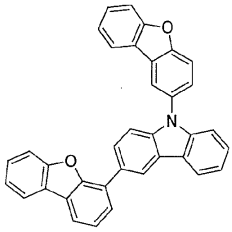
J-1



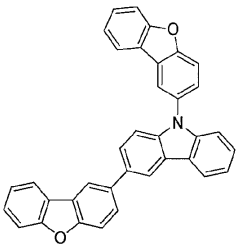
J-2



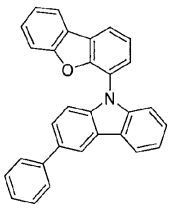
J-3



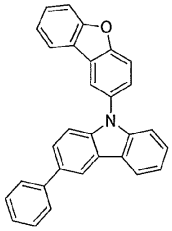
J-4



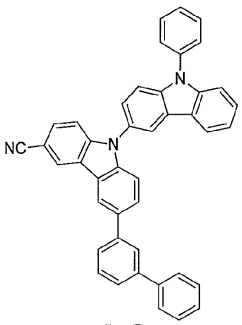
J-5



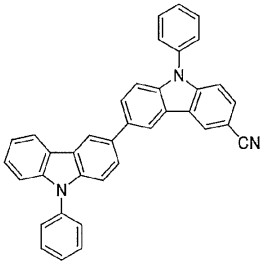
J-6



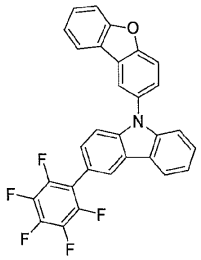
J-7



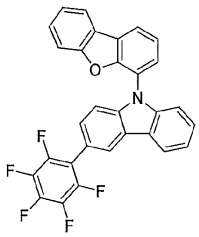
J-8



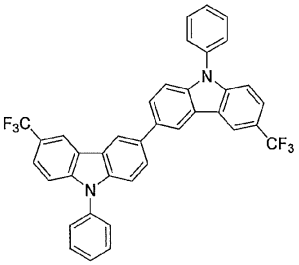
J-9



J-10



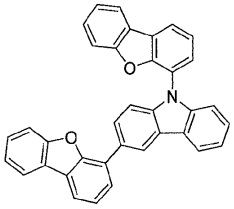
J-11



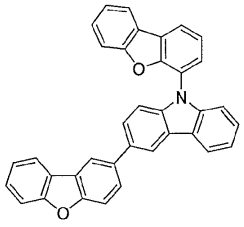
J-12

【０１４３】

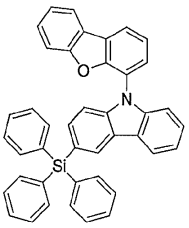
【化２５】



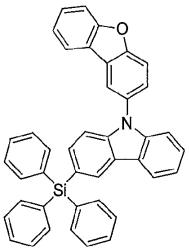
J-13



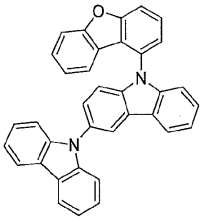
J-14



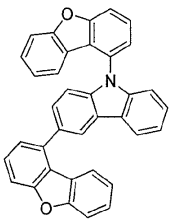
J-15



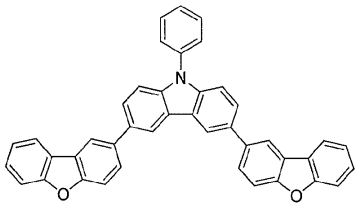
J-16



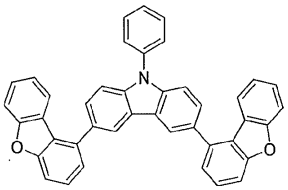
J-17



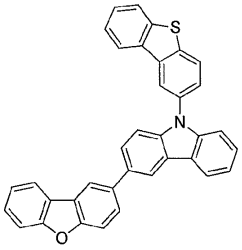
J-18



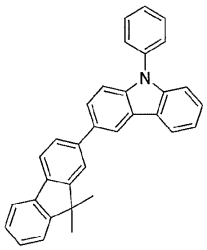
J-19



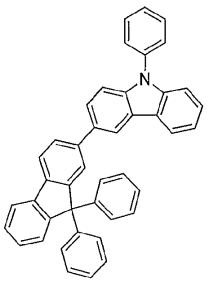
J-20



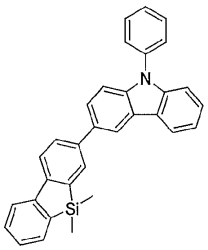
J-21



J-22



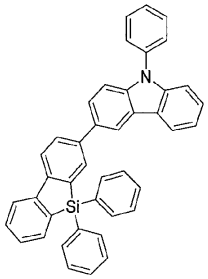
J-23



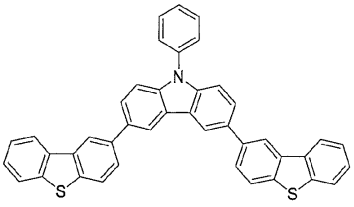
J-24

【０１４４】

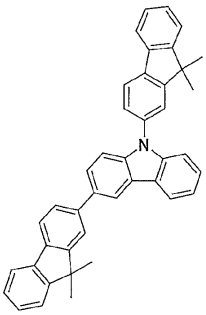
【化２６】



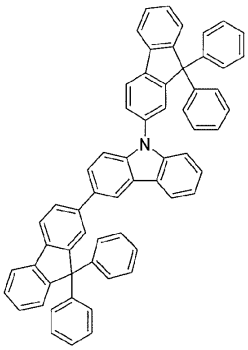
J-25



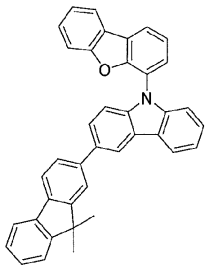
J-26



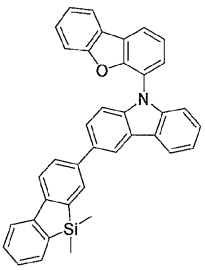
J-27



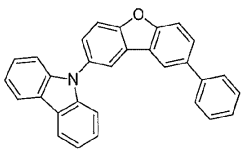
J-28



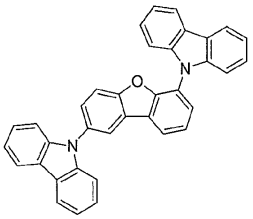
J-29



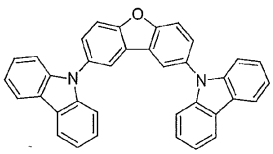
J-30



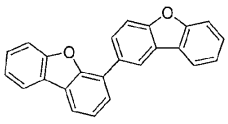
J-31



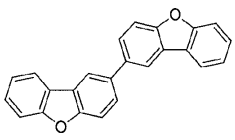
J-32



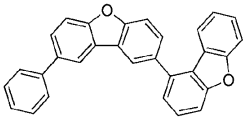
J-33



J-34



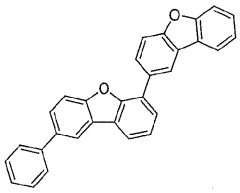
J-35



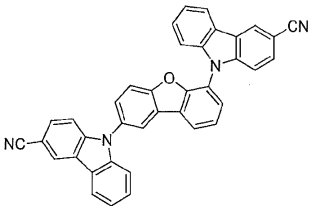
J-36

【０１４５】

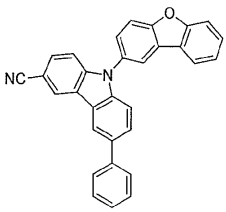
【化２７】



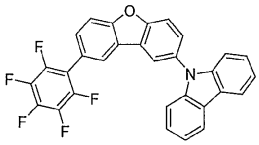
J-37



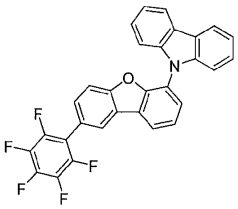
J-38



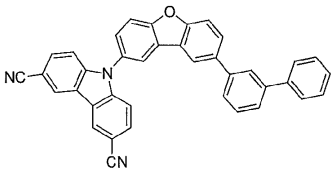
J-39



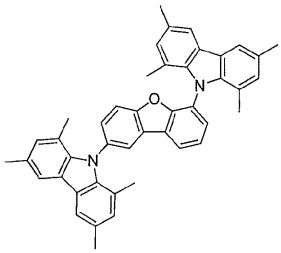
J-40



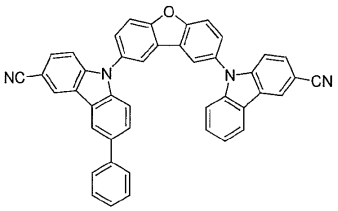
J-41



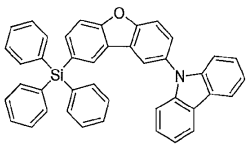
J-42



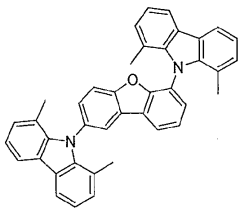
J-43



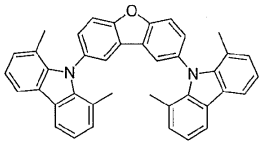
J-44



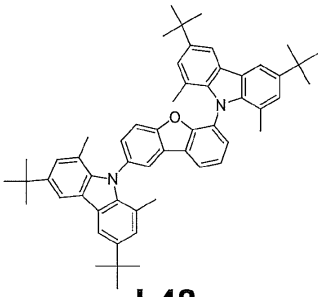
J-45



J-46



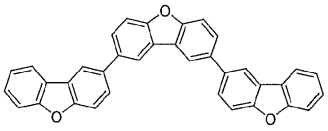
J-47



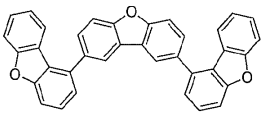
J-48

【０１４６】

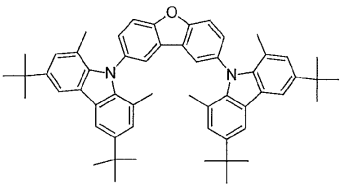
【化２８】



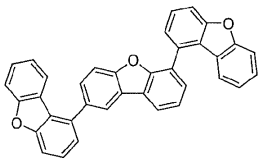
J-49



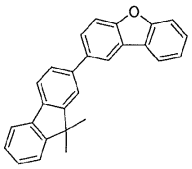
J-50



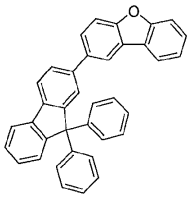
J-51



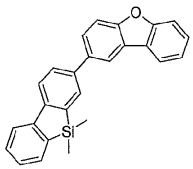
J-52



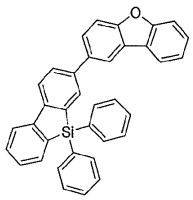
J-53



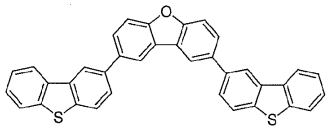
J-54



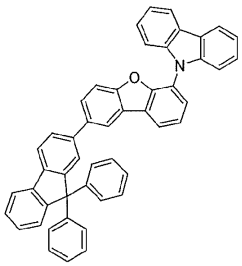
J-55



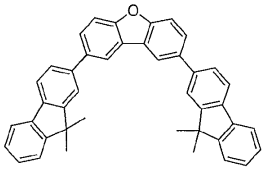
J-56



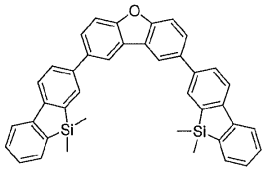
J-57



J-58



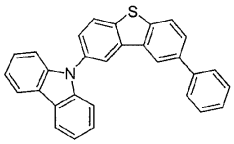
J-59



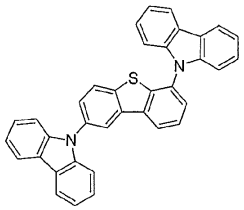
J-60

【０１４７】

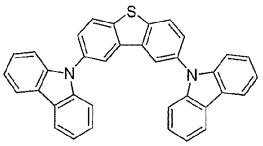
【化２９】



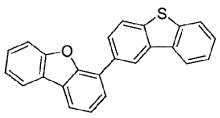
J-61



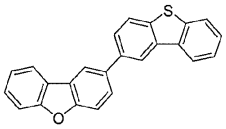
J-62



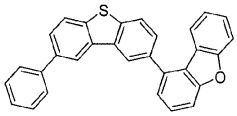
J-63



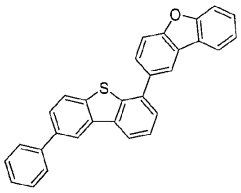
J-64



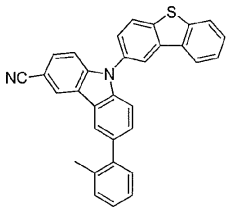
J-65



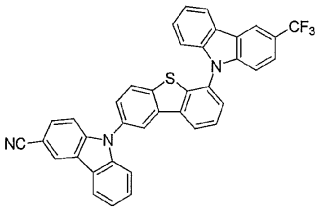
J-66



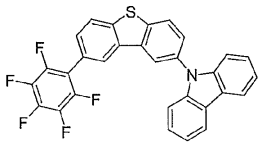
J-67



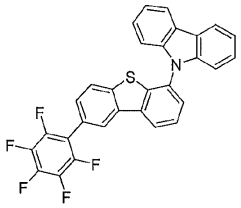
J-68



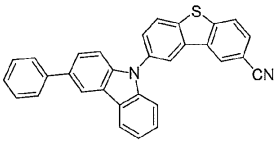
J-69



J-70



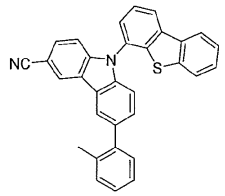
J-71



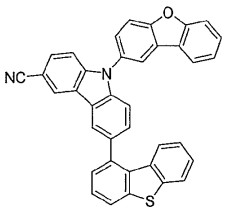
J-72

【０１４８】

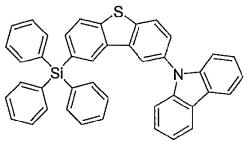
【化３０】



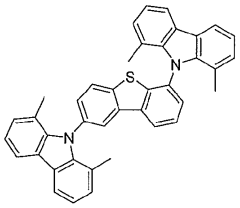
J-73



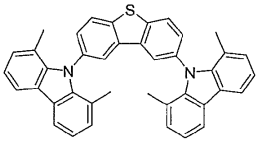
J-74



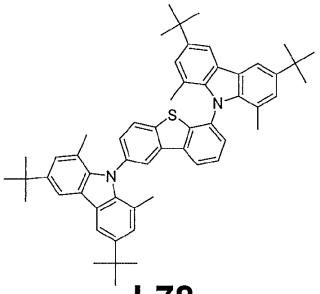
J-75



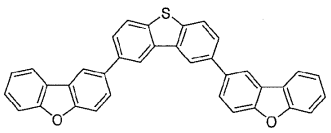
J-76



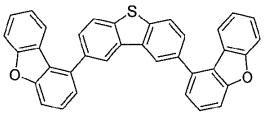
J-77



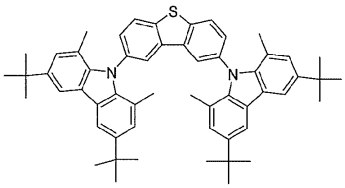
J-78



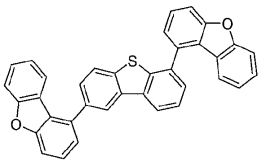
J-79



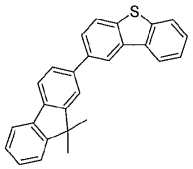
J-80



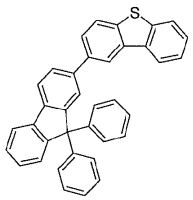
J-81



J-82



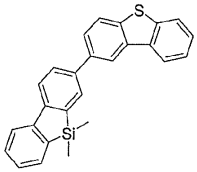
J-83



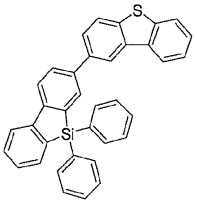
J-84

【０１４９】

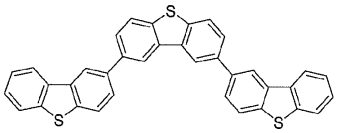
【化３１】



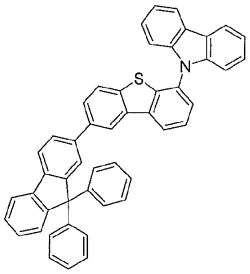
J-85



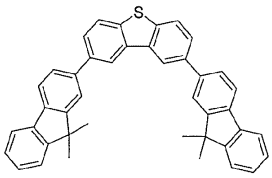
J-86



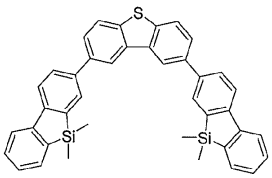
J-87



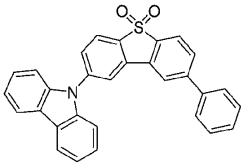
J-88



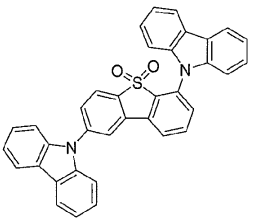
J-89



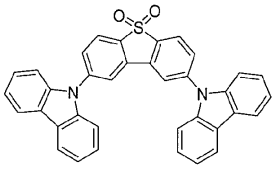
J-90



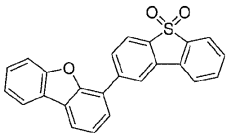
J-91



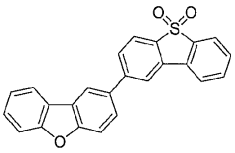
J-92



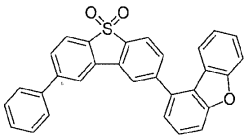
J-93



J-94



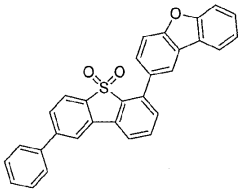
J-95



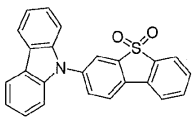
J-96

【０１５０】

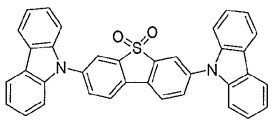
【化３２】



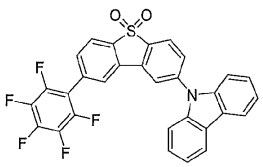
J-97



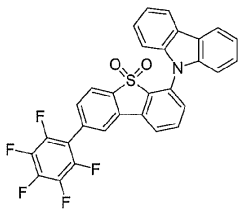
J-98



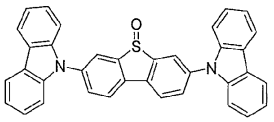
J-99



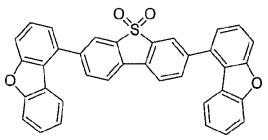
J-100



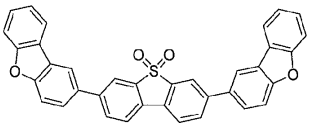
J-101



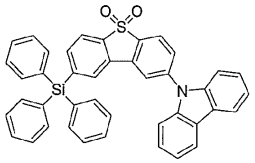
J-102



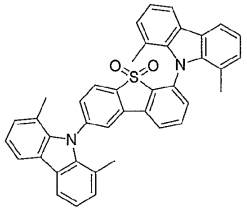
J-103



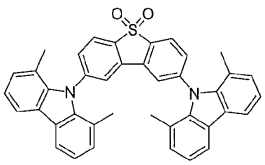
J-104



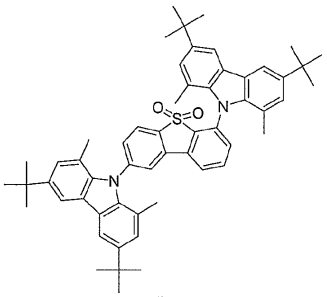
J-105



J-106



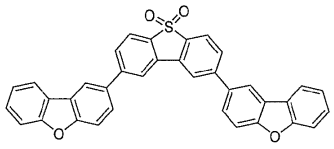
J-107



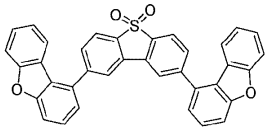
J-108

【０１５１】

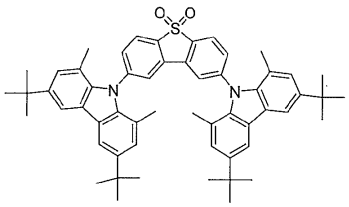
【化３３】



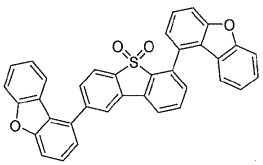
J-109



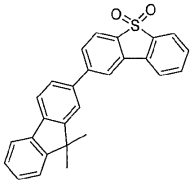
J-110



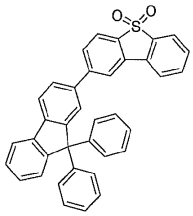
J-111



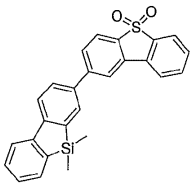
J-112



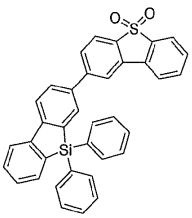
J-113



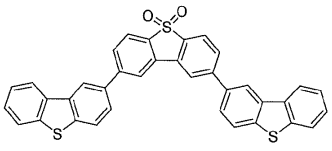
J-114



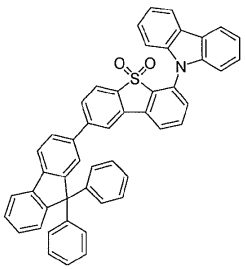
J-115



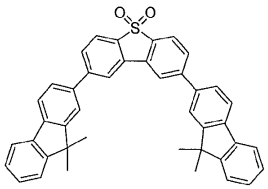
J-116



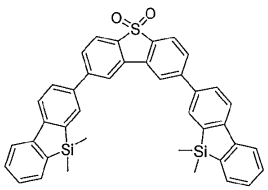
J-117



J-118



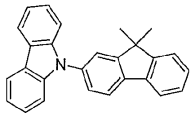
J-119



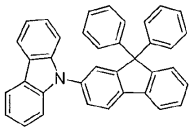
J-120

【０１５２】

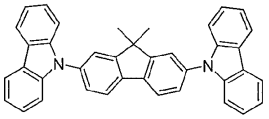
【化３４】



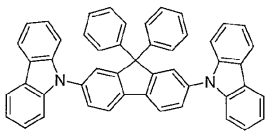
J-121



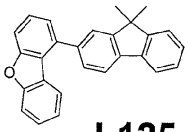
J-122



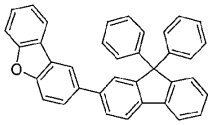
J-123



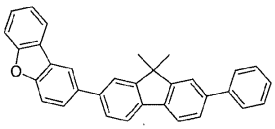
J-124



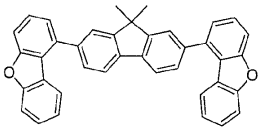
J-125



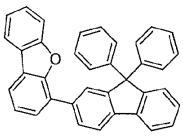
J-126



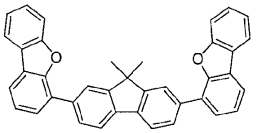
J-127



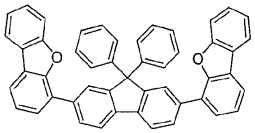
J-128



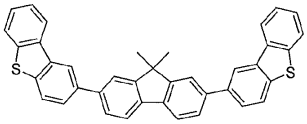
J-129



J-130



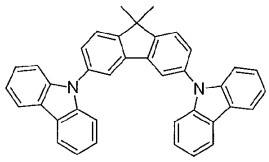
J-131



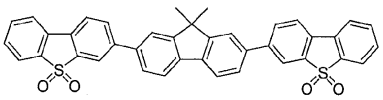
J-132

【０１５３】

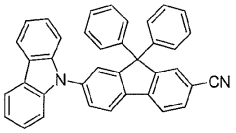
【化３５】



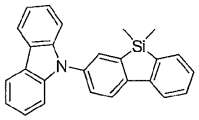
J-133



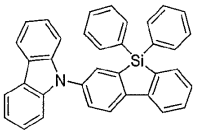
J-134



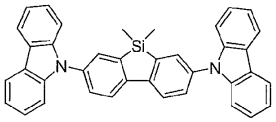
J-135



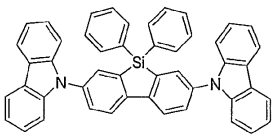
J-136



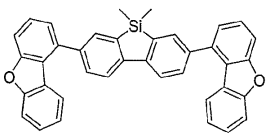
J-137



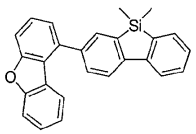
J-138



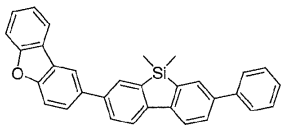
J-139



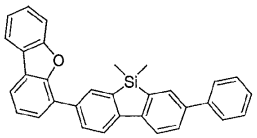
J-140



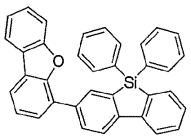
J-141



J-142



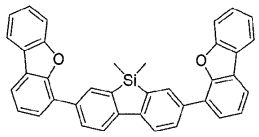
J-143



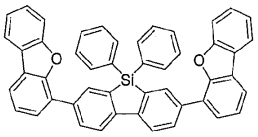
J-144

【０１５４】

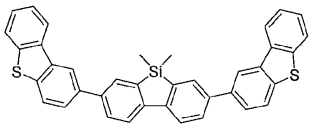
【化３６】



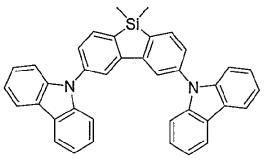
J-145



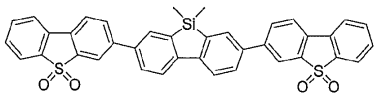
J-146



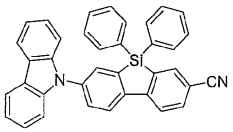
J-147



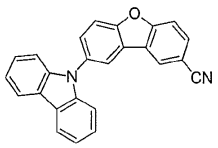
J-148



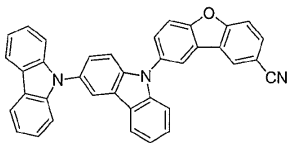
J-149



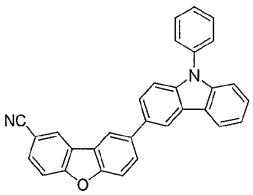
J-150



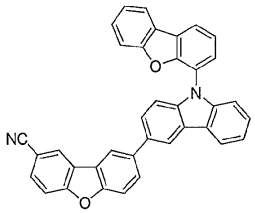
J-151



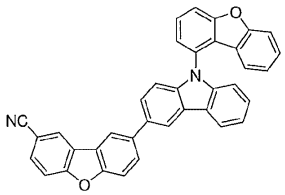
J-152



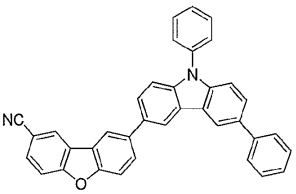
J-153



J-154



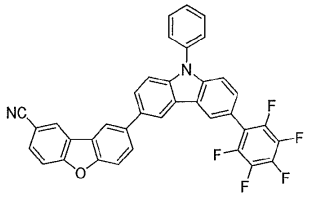
J-155



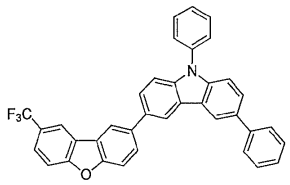
J-156

【０１５５】

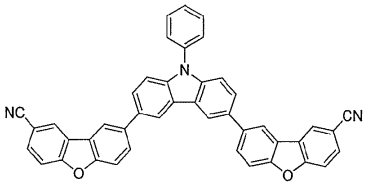
【化３７】



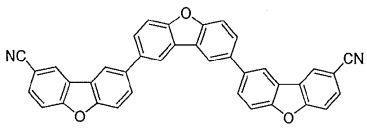
J-157



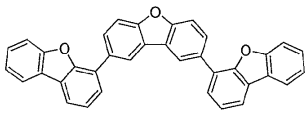
J-158



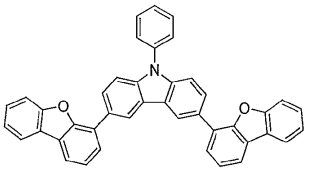
J-159



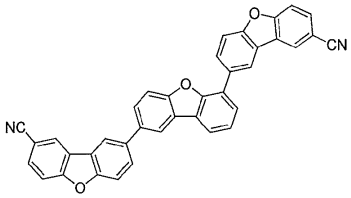
J-160



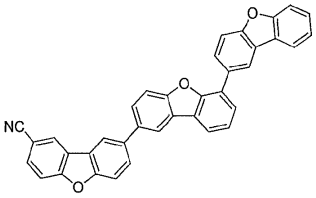
J-161



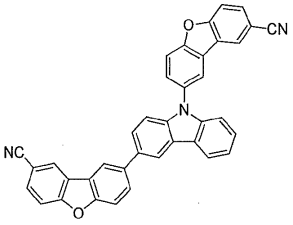
J-162



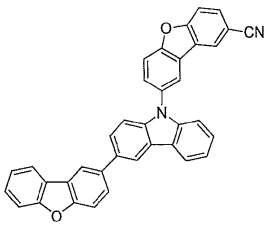
J-163



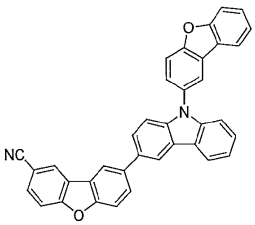
J-164



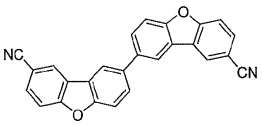
J-165



J-166



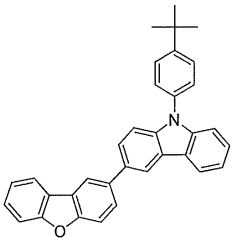
J-167



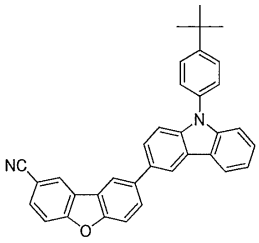
J-168

【０１５６】

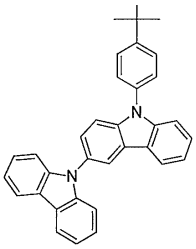
【化３８】



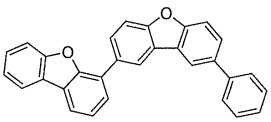
J-169



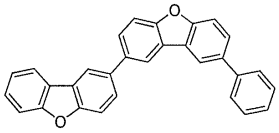
J-170



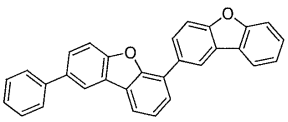
J-171



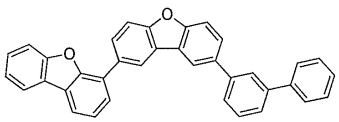
J-172



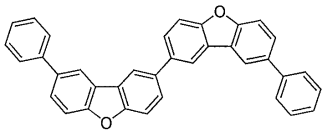
J-173



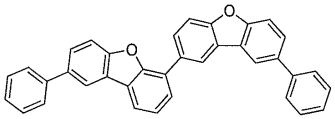
J-174



J-175



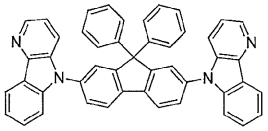
J-176



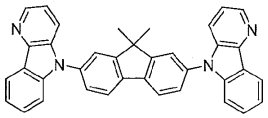
J-177

【０１５７】

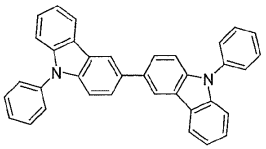
【化３９】



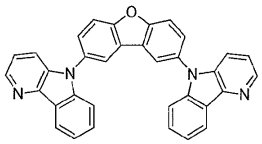
J-178



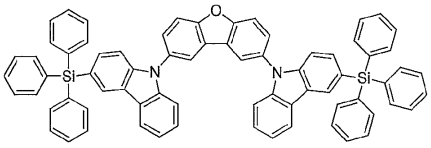
J-179



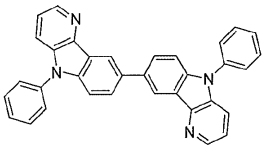
J-180



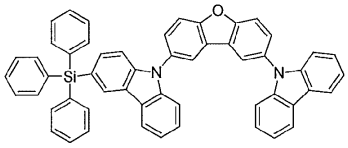
J-181



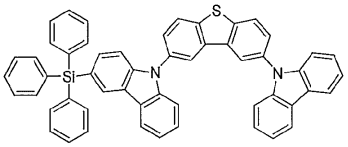
J-182



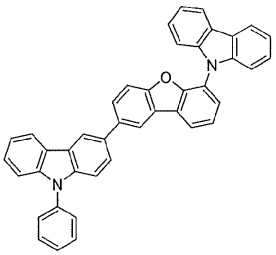
J-183



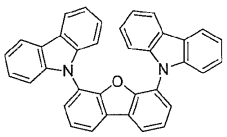
J-184



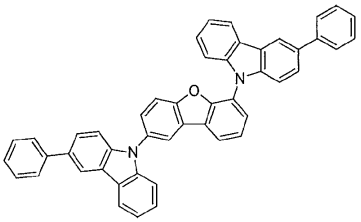
J-185



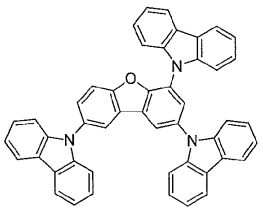
J-186



J-187



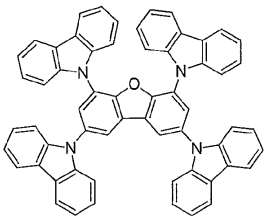
J-188



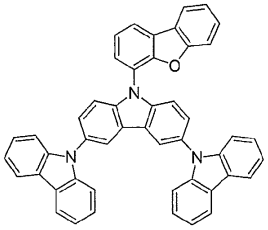
J-189

【０１５８】

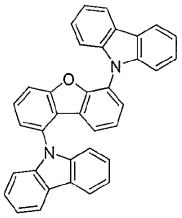
【化４０】



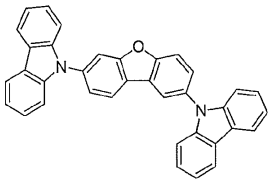
J-190



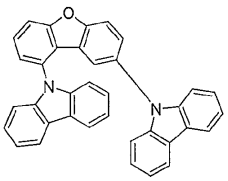
J-191



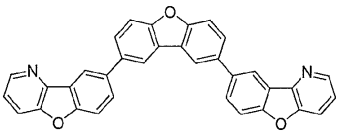
J-192



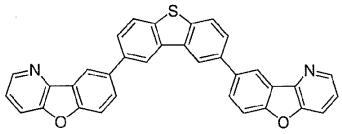
J-193



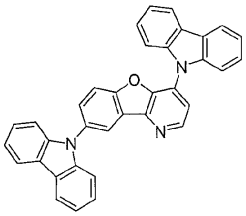
J-194



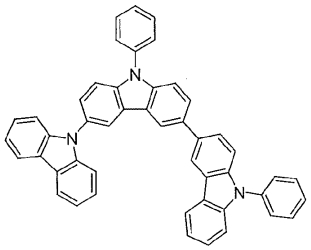
J-195



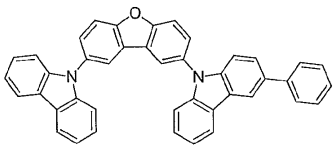
J-196



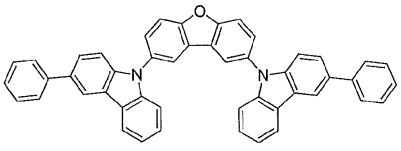
J-197



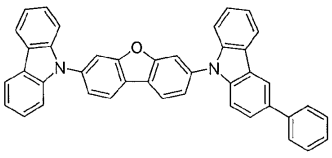
J-198



J-199



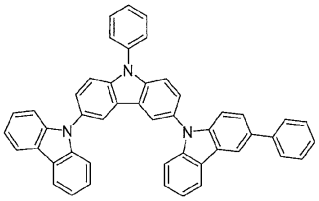
J-200



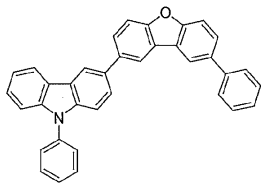
J-201

【０１５９】

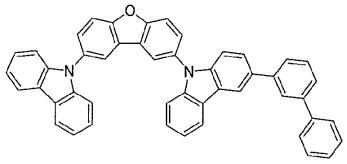
【化４１】



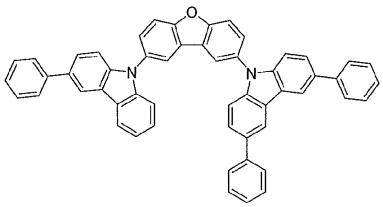
J-202



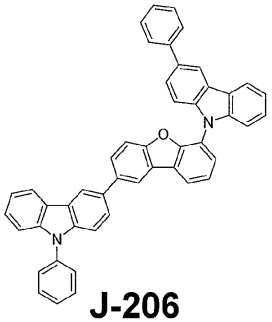
J-203



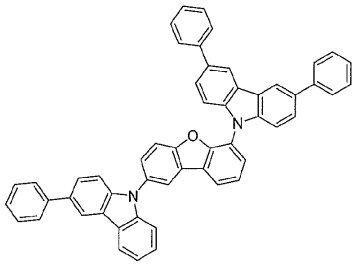
J-204



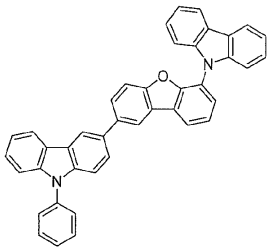
J-205



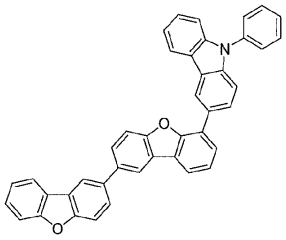
J-206



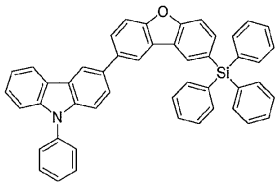
J-207



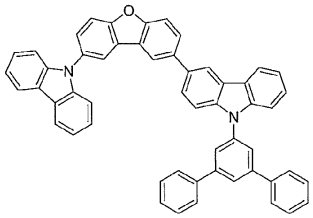
J-208



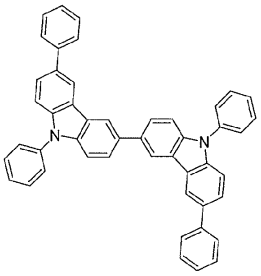
J-209



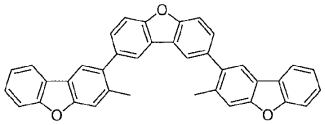
J-210



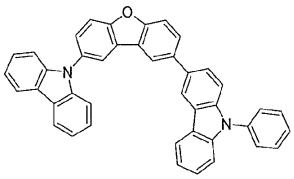
J-211



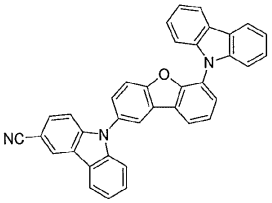
J-212



J-213



J-214



J-215

【０１６０】

《電子輸送層》

本発明において電子輸送層とは、電子を輸送する機能を有する材料からなり、陰極より注入された電子を発光層に伝達する機能を有していればよい。

本発明に係る電子輸送層の総層厚については特に制限はないが、通常は２ｎｍ～５μｍの範囲であり、より好ましくは２～５００ｎｍであり、さらに好ましくは５～２００ｎｍである。

また、有機ＥＬ素子においては発光層で生じた光を電極から取り出す際、発光層から直接取り出される光と、光を取り出す電極と対極に位置する電極によって反射されてから取り出される光とが干渉を起こすことが知られている。光が陰極で反射される場合は、電子輸送層の総層厚を数ｎｍ～数μｍの間で適宜調整することにより、この干渉効果を効率的に利用することが可能である。

一方で、電子輸送層の層厚を厚くすると電圧が上昇しやすくなるため、特に層厚が厚い場合においては、電子輸送層の電子移動度は10^{-5}ｃｍ^{2}／Ｖｓ以上であることが好ましい。

電子輸送層に用いられる材料（以下、電子輸送材料という）としては、電子の注入性又は輸送性、正孔の障壁性のいずれかを有していればよく、従来公知の化合物の中から任意のものを選択して用いることができる。

【０１６１】

例えば、含窒素芳香族複素環誘導体（カルバゾール誘導体、アザカルバゾール誘導体（カルバゾール環を構成する炭素原子の一つ以上が窒素原子に置換されたもの）、ピリジン誘導体、ピリミジン誘導体、ピラジン誘導体、ピリダジン誘導体、トリアジン誘導体、キノリン誘導体、キノキサリン誘導体、フェナントロリン誘導体、アザトリフェニレン誘導体、オキサゾール誘導体、チアゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、チアジアゾール誘導体、トリアゾール誘導体、ベンズイミダゾール誘導体、ベンズオキサゾール誘導体、ベンズチアゾール誘導体等）、ジベンゾフラン誘導体、ジベンゾチオフェン誘導体、シロール誘導体、芳香族炭化水素環誘導体（ナフタレン誘導体、アントラセン誘導体、トリフェニレン誘導体等）等が挙げられる。

【０１６２】

また、配位子にキノリノール骨格やジベンゾキノリノール骨格を有する金属錯体、例えば、トリス（８－キノリノール）アルミニウム（Ａｌｑ）、トリス（５，７－ジクロロ－８－キノリノール）アルミニウム、トリス（５，７－ジブロモ－８－キノリノール）アルミニウム、トリス（２－メチル－８－キノリノール）アルミニウム、トリス（５－メチル－８－キノリノール）アルミニウム、ビス（８－キノリノール）亜鉛（Ｚｎｑ）等、及びこれらの金属錯体の中心金属がＩｎ、Ｍｇ、Ｃｕ、Ｃａ、Ｓｎ、Ｇａ又はＰｂに置き替わった金属錯体も、電子輸送材料として用いることができる。

その他、メタルフリー若しくはメタルフタロシアニン、又はそれらの末端がアルキル基やスルホン酸基等で置換されているものも、電子輸送材料として好ましく用いることができる。また、発光層の材料として例示したジスチリルピラジン誘導体も、電子輸送材料として用いることができるし、正孔注入層、正孔輸送層と同様にｎ型－Ｓｉ、ｎ型－ＳｉＣ等の無機半導体も電子輸送材料として用いることができる。

また、これらの材料を高分子鎖に導入した、又はこれらの材料を高分子の主鎖とした高分子材料を用いることもできる。

【０１６３】

本発明に係る電子輸送層においては、電子輸送層にドープ材をゲスト材料としてドープして、ｎ性の高い（電子リッチ）電子輸送層を形成してもよい。ドープ材としては、金属錯体やハロゲン化金属など金属化合物等のｎ型ドーパントが挙げられる。このような構成の電子輸送層の具体例としては、例えば、特開平４－２９７０７６号公報、同１０－２７０１７２号公報、特開２０００－１９６１４０号公報、同２００１－１０２１７５号公報、Ｊ．Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．，９５，５７７３（２００４）等の文献に記載されたものが挙げられる。

【０１６４】

本発明の有機ＥＬ素子に用いられる、公知の好ましい電子輸送材料の具体例としては、以下の文献に記載の化合物等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

米国特許第６５２８１８７号明細書、米国特許第７２３０１０７号明細書、米国特許出願公開第２００５／００２５９９３号明細書、米国特許出願公開第２００４／００３６０７７号明細書、米国特許出願公開第２００９／０１１５３１６号明細書、米国特許出願公

開第２００９／０１０１８７０号明細書、米国特許出願公開第２００９／０１７９５５４号明細書、国際公開第２００３／０６０９５６号、国際公開第２００８／１３２０８５号、Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．Ｌｅｔｔ．７５，４（１９９９）、Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．Ｌｅｔｔ．７９，４４９（２００１）、Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．Ｌｅｔｔ．８１，１６２（２００２）、Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．Ｌｅｔｔ．８１，１６２（２００２）、Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．Ｌｅｔｔ．７９，１５６（２００１）、米国特許第７９６４２９３号明細書、米国特許出願公開第２００９／０３０２０２号明細書、国際公開第２００４／０８０９７５号、国際公開第２００４／０６３１５９号、国際公開第２００５／０８５３８７号、国際公開第２００６／０６７９３１号、国際公開第２００７／０８６５５２号、国際公開第２００８／１１４６９０号、国際公開第２００９／０６９４４２号、国際公開第２００９／０６６７７９号、国際公開第２００９／０５４２５３号、国際公開第２０１１／０８６９３５号、国際公開第２０１０／１５０５９３号、国際公開第２０１０／０４７７０７号、欧州特許第２３１１８２６号明細書、特開２０１０－２５１６７５号公報、特開２００９－２０９１３３号公報、特開２００９－１２４１１４号公報、特開２００８－２７７８１０号公報、特開２００６－１５６４４５号公報、特開２００５－３４０１２２号公報、特開２００３－４５６６２号公報、特開２００３－３１３６７号公報、特開２００３－２８２２７０号公報、国際公開第２０１２／１１５０３４号等である。

【０１６５】

本発明におけるより好ましい公知の電子輸送材料としては、少なくとも一つの窒素原子を含む芳香族複素環化合物や、リン原子を含む化合物が挙げられ、例えばピリジン誘導体、ピリミジン誘導体、ピラジン誘導体、トリアジン誘導体、ジベンゾフラン誘導体、ジベンゾチオフェン誘導体、アザジベンゾフラン誘導体、アザジベンゾチオフェン誘導体、カルバゾール誘導体、アザカルバゾール誘導体、ベンズイミダゾール誘導体、アリールホスフィンオキサイド誘導体などが挙げられる。

電子輸送材料は単独で用いてもよく、また複数種を併用して用いてもよい。

【０１６６】

《正孔阻止層》

正孔阻止層とは広い意味では電子輸送層の機能を有する層であり、好ましくは電子を輸送する機能を有しつつ正孔を輸送する能力が小さい材料からなり、電子を輸送しつつ正孔を阻止することで電子と正孔の再結合確率を向上させることができる。

また、前述する電子輸送層の構成を必要に応じて、本発明に係る正孔阻止層として用いることができる。

本発明の有機ＥＬ素子に設ける正孔阻止層は、発光層の陰極側に隣接して設けられることが好ましい。

本発明に係る正孔阻止層の層厚としては、好ましくは３～１００ｎｍの範囲であり、更に好ましくは５～３０ｎｍの範囲である。

正孔阻止層に用いられる材料としては、前述の電子輸送層に用いられる材料が好ましく用いられ、また、前述のホスト化合物として用いられる材料も正孔阻止層に好ましく用いられる。

【０１６７】

《電子注入層》

本発明に係る電子注入層（「陰極バッファー層」ともいう）とは、駆動電圧低下や発光輝度向上のために陰極と発光層との間に設けられる層のことで、「有機ＥＬ素子とその工業化最前線（１９９８年１１月３０日エヌ・ティー・エス社発行）」の第２編第２章「電極材料」（１２３～１６６頁）に詳細に記載されている。

本発明において電子注入層は必要に応じて設け、上記のごとく陰極と発光層との間、又は陰極と電子輸送層との間に存在させてもよい。

電子注入層はごく薄い膜であることが好ましく、素材にもよるがその層厚は０．１～５ｎｍの範囲が好ましい。また構成材料が断続的に存在する不均一な層（膜）であってもよい。

【０１６８】
電子注入層は、特開平６－３２５８７１号公報、同９－１７５７４号公報、同１０－７４５８６号公報等にもその詳細が記載されており、電子注入層に好ましく用いられる材料の具体例としては、ストロンチウムやアルミニウム等に代表される金属、フッ化リチウム、フッ化ナトリウム、フッ化カリウム等に代表されるアルカリ金属化合物、フッ化マグネシウム、フッ化カルシウム等に代表されるアルカリ土類金属化合物、酸化アルミニウムに代表される金属酸化物、８－ヒドロキシキノリネートリチウム（Ｌｉｑ）等に代表される金属錯体等が挙げられる。また、前述の電子輸送材料を用いることも可能である。
また、上記の電子注入層に用いられる材料は単独で用いてもよく、複数種を併用して用いてもよい。
【０１６９】
《正孔輸送層》
本発明において正孔輸送層とは、正孔を輸送する機能を有する材料からなり、陽極より注入された正孔を発光層に伝達する機能を有していればよい。
本発明に係る正孔輸送層の総層厚については特に制限はないが、通常は５ｎｍ～５μｍの範囲であり、より好ましくは２～５００ｎｍであり、さらに好ましくは５～２００ｎｍである。
正孔輸送層に用いられる材料（以下、正孔輸送材料という）としては、正孔の注入性又は輸送性、電子の障壁性のいずれかを有していればよく、従来公知の化合物の中から任意のものを選択して用いることができる。
例えば、ポルフィリン誘導体、フタロシアニン誘導体、オキサゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、トリアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、ピラゾリン誘導体、ピラゾロン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、ポリアリールアルカン誘導体、トリアリールアミン誘導体、カルバゾール誘導体、インドロカルバゾール誘導体、イソインドール誘導体、アントラセンやナフタレン等のアセン系誘導体、フルオレン誘導体、フルオレノン誘導体、及びポリビニルカルバゾール、芳香族アミンを主鎖又は側鎖に導入した高分子材料又はオリゴマー、ポリシラン、導電性ポリマー又はオリゴマー（例えばＰＥＤＯＴ／ＰＳＳ、アニリン系共重合体、ポリアニリン、ポリチオフェン等）等が挙げられる。
【０１７０】
トリアリールアミン誘導体としては、α－ＮＰＤ（４，４’－ビス〔Ｎ－（１－ナフチル）－Ｎ－フェニルアミノ〕ビフェニル）に代表されるベンジジン型や、ＭＴＤＡＴＡに代表されるスターバースト型、トリアリールアミン連結コア部にフルオレンやアントラセンを有する化合物等が挙げられる。
また、特表２００３－５１９４３２号公報や特開２００６－１３５１４５号公報等に記載されているようなヘキサアザトリフェニレン誘導体も同様に正孔輸送材料として用いることができる。
さらに不純物をドープしたｐ性の高い正孔輸送層を用いることもできる。その例としては、特開平４－２９７０７６号公報、特開２０００－１９６１４０号公報、同２００１－１０２１７５号公報の各公報、Ｊ．Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．，９５，５７７３（２００４）等に記載されたものが挙げられる。
【０１７１】
また、特開平１１－２５１０６７号公報、Ｊ．Ｈｕａｎｇ　ｅｔ．ａｌ．著文献（Ａｐｐｌｉｅｄ　Ｐｈｙｓｉｃｓ　Ｌｅｔｔｅｒｓ　８０（２００２），ｐ．１３９）に記載されているような、いわゆるｐ型正孔輸送材料やｐ型－Ｓｉ、ｐ型－ＳｉＣ等の無機化合物を用いることもできる。さらにＩｒ（ｐｐｙ）３に代表されるような中心金属にＩｒやＰｔを有するオルトメタル化有機金属錯体も好ましく用いられる。
正孔輸送材料としては、上記のものを使用することができるが、トリアリールアミン誘導体、カルバゾール誘導体、インドロカルバゾール誘導体、アザトリフェニレン誘導体、有機金属錯体、芳香族アミンを主鎖又は側鎖に導入した高分子材料又はオリゴマー等が好

ましく用いられる。

【０１７２】

本発明の有機ＥＬ素子に用いられる、公知の好ましい正孔輸送材料の具体例としては、上記で挙げた文献の他、以下の文献に記載の化合物等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

例えば、Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．Ｌｅｔｔ．６９，２１６０（１９９６）、Ｊ．Ｌｕｍｉｎ．７２－７４，９８５（１９９７）、Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．Ｌｅｔｔ．７８，６７３（２００１）、Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．Ｌｅｔｔ．９０，１８３５０３（２００７）、Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．Ｌｅｔｔ．９０，１８３５０３（２００７）、Ａｐｐｌ．Ｐｈｙｓ．Ｌｅｔｔ．５１，９１３（１９８７）、Ｓｙｎｔｈ．Ｍｅｔ．８７，１７１（１９９７）、Ｓｙｎｔｈ．Ｍｅｔ．９１，２０９（１９９７）、Ｓｙｎｔｈ．Ｍｅｔ．１１１，４２１（２０００）、ＳＩＤ Ｓｙｍｐｏｓｉｕｍ Ｄｉｇｅｓｔ，３７，９２３（２００６）、Ｊ．Ｍａｔｅｒ．Ｃｈｅｍ．３，３１９（１９９３）、Ａｄｖ．Ｍａｔｅｒ．６，６７７（１９９４）、Ｃｈｅｍ．Ｍａｔｅｒ．１５，３１４８（２００３）、米国特許出願公開第２００３／０１６２０５３号明細書、米国特許出願公開第２００２／０１５８２４２号明細書、米国特許出願公開第２００６／０２４０２７９号明細書、米国特許出願公開第２００８／０２２０２６５号明細書、米国特許第５０６１５６９号、国際公開第２００７／００２６８３号、国際公開第２００９／０１８００９号、ＥＰ６５０９５５、米国特許出願公開第２００８／０１２４５７２号明細書、米国特許出願公開第２００７／０２７８９３８号明細書、米国特許出願公開第２００８／０１０６１９０号明細書、米国特許出願公開第２００８／００１８２２１号明細書、国際公開第２０１２／１１５０３４号、特表２００３－５１９４３２号公報、特開２００６－１３５１４５号公報、米国特許出願番号１３／５８５９８１号等である。

正孔輸送材料は単独で用いてもよく、また複数種を併用して用いてもよい。

【０１７３】

《電子阻止層》

電子阻止層とは、広い意味では正孔輸送層の機能を有する層であり、好ましくは正孔を輸送する機能を有しつつ電子を輸送する能力が小さい材料からなり、正孔を輸送しつつ電子を阻止することで電子と正孔の再結合確率を向上させることができる。

また、前述する正孔輸送層の構成を必要に応じて、本発明に係る電子阻止層として用いることができる。

本発明の有機ＥＬ素子に設ける電子阻止層は、発光層の陽極側に隣接して設けられることが好ましい。

本発明に係る電子阻止層の層厚としては、好ましくは３～１００ｎｍの範囲内であり、更に好ましくは５～３０ｎｍの範囲内である。

電子阻止層に用いられる材料としては、前述の正孔輸送層に用いられる材料が好ましく用いられ、また、前述のホスト化合物も電子阻止層に好ましく用いられる。

【０１７４】

《正孔注入層》

本発明に係る正孔注入層（「陽極バッファー層」ともいう）とは、駆動電圧低下や発光輝度向上のために陽極と発光層との間に設けられる層のことで、「有機ＥＬ素子とその工業化最前線（１９９８年１１月３０日エヌ・ティー・エス社発行）」の第２編第２章「電極材料」（１２３～１６６頁）に詳細に記載されている。

本発明において正孔注入層は必要に応じて設け、上記のごとく陽極と発光層又は陽極と正孔輸送層との間に存在させてもよい。

正孔注入層は、特開平９－４５４７９号公報、同９－２６００６２号公報、同８－２８８０６９号公報等にもその詳細が記載されており、正孔注入層に用いられる材料としては、例えば前述の正孔輸送層に用いられる材料等が挙げられる。

中でも銅フタロシアニンに代表されるフタロシアニン誘導体、特表２００３－５１９４３２号公報や特開２００６－１３５１４５号公報等に記載されているようなヘキサアザト

リフェニレン誘導体、酸化バナジウムに代表される金属酸化物、アモルファスカーボン、ポリアニリン（エメラルディン）やポリチオフェン等の導電性高分子、トリス（２－フェニルピリジン）イリジウム錯体等に代表されるオルトメタル化錯体、トリアリールアミン誘導体等が好ましい。

前述の正孔注入層に用いられる材料は単独で用いてもよく、また複数種を併用して用いてもよい。

【０１７５】

《添加物》

前述した本発明における有機層は、更に他の添加物が含まれていてもよい。

添加物としては、例えば臭素、ヨウ素及び塩素等のハロゲン元素やハロゲン化化合物、Ｐｄ、Ｃａ、Ｎａ等のアルカリ金属やアルカリ土類金属、遷移金属の化合物や錯体、塩等が挙げられる。

添加物の含有量は、任意に決定することができるが、含有される層の全質量％に対して１０００ｐｐｍ以下であることが好ましく、より好ましくは５００ｐｐｍ以下であり、さらに好ましくは５０ｐｐｍ以下である。

ただし、電子や正孔の輸送性を向上させる目的や、励起子のエネルギー移動を有利にするための目的などによってはこの範囲内ではない。

【０１７６】

《有機層の形成方法》

本発明に係る有機層（正孔注入層、正孔輸送層、発光層、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、中間層等）の形成方法について説明する。

本発明に係る有機層の形成方法は、特に制限はなく、従来公知の例えば真空蒸着法、湿式法（ウェットプロセスともいう）等による形成方法を用いることができる。

湿式法としては、スピンコート法、キャスト法、インクジェット法、印刷法、ダイコート法、ブレードコート法、ロールコート法、スプレーコート法、カーテンコート法、ＬＢ法（ラングミュアーブロジェット法）等があるが、均質な薄膜が得られやすく、かつ高生産性の点から、ダイコート法、ロールコート法、インクジェット法、スプレーコート法などのロール・ツー・ロール方式適性の高い方法が好ましい。

【０１７７】

本発明に用いられる有機ＥＬ材料を溶解又は分散する液媒体としては、例えば、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン等のケトン類、酢酸エチル等の脂肪酸エステル類、ジクロロベンゼン等のハロゲン化炭化水素類、トルエン、キシレン、メシチレン、シクロヘキシルベンゼン等の芳香族炭化水素類、シクロヘキサン、デカリン、ドデカン等の脂肪族炭化水素類、ＤＭＦ、ＤＭＳＯ等の有機溶媒を用いることができる。

また、分散方法としては、超音波、高剪断力分散やメディア分散等の分散方法により分散することができる。

更に層ごとに異なる成膜法を適用してもよい。成膜に蒸着法を採用する場合、その蒸着条件は使用する化合物の種類等により異なるが、一般にボート加熱温度５０～４５０℃、真空度10^{-6}～10^{-2}Ｐａ、蒸着速度０．０１～５０ｎｍ／秒、基板温度－５０～３００℃、層（膜）厚０．１ｎｍ～５μｍ、好ましくは５～２００ｎｍの範囲内で適宜選ぶことが望ましい。

本発明に係る有機層の形成は、一回の真空引きで一貫して正孔注入層から陰極まで作製するのが好ましいが、途中で取り出して異なる成膜法を施しても構わない。その際は作業を乾燥不活性ガス雰囲気下で行うことが好ましい。

【０１７８】

《陽極》

有機ＥＬ素子における陽極としては、仕事関数の大きい（４ｅＶ以上、好ましくは４．５ｅＶ以上）金属、合金、電気伝導性化合物及びこれらの混合物を電極物質とするものが好ましく用いられる。このような電極物質の具体例としては、Ａｕ等の金属、ＣｕＩ、インジウムスズ酸化物（ＩＴＯ）、SnO_2、ＺｎＯ等の導電性透明材料が挙げられる。ま

た、ＩＤＩＸＯ（In_2O_3－ＺｎＯ）等非晶質で透明導電膜を作製可能な材料を用いてもよい。

陽極はこれらの電極物質を蒸着やスパッタリング等の方法により薄膜を形成させ、フォトリソグラフィー法で所望の形状のパターンを形成してもよく、あるいはパターン精度を余り必要としない場合は（１００μｍ以上程度）、上記電極物質の蒸着やスパッタリング時に所望の形状のマスクを介してパターンを形成してもよい。

あるいは、有機導電性化合物のように塗布可能な物質を用いる場合には、印刷方式、コーティング方式等湿式成膜法を用いることもできる。この陽極より発光を取り出す場合には、透過率を１０％より大きくすることが望ましく、また陽極としてのシート抵抗は数百Ω／□以下が好ましい。

陽極の膜厚は材料にもよるが、通常１０ｎｍ～１μｍ、好ましくは１０～２００ｎｍの範囲内で選ばれる。

【０１７９】

《陰極》

陰極としては、仕事関数の小さい（４ｅＶ以下）金属（電子注入性金属と称する）、合金、電気伝導性化合物及びこれらの混合物を電極物質とするものが用いられる。このような電極物質の具体例としては、ナトリウム、ナトリウム－カリウム合金、マグネシウム、リチウム、マグネシウム／銅混合物、マグネシウム／銀混合物、マグネシウム／アルミニウム混合物、マグネシウム／インジウム混合物、アルミニウム／酸化アルミニウム（Al_2O_3）混合物、インジウム、リチウム／アルミニウム混合物、アルミニウム、希土類金属等が挙げられる。これらの中で、電子注入性及び酸化等に対する耐久性の点から、電子注入性金属とこれより仕事関数の値が大きく安定な金属である第二金属との混合物、例えば、マグネシウム／銀混合物、マグネシウム／アルミニウム混合物、マグネシウム／インジウム混合物、アルミニウム／酸化アルミニウム（Al_2O_3）混合物、リチウム／アルミニウム混合物、アルミニウム等が好適である。

【０１８０】

陰極はこれらの電極物質を蒸着やスパッタリング等の方法により、薄膜を形成させることで作製することができる。また、陰極としてのシート抵抗は数百Ω／□以下が好ましく、膜厚は通常１０ｎｍ～５μｍ、好ましくは５０～２００ｎｍの範囲で選ばれる。

なお、発光した光を透過させるため、有機ＥＬ素子の陽極又は陰極のいずれか一方が透明又は半透明であれば発光輝度が向上し好都合である。

また、陰極に上記金属を１～２０ｎｍの膜厚で作製した後に、陽極の説明で挙げる導電性透明材料をその上に作製することで、透明又は半透明の陰極を作製することができ、これを応用することで陽極と陰極の両方が透過性を有する素子を作製することができる。

【０１８１】

［支持基板］

本発明の有機ＥＬ素子に用いることのできる支持基板（以下、基板、基材等ともいう。）としては、ガラス、プラスチック等の種類には特に限定はなく、また透明であっても不透明であってもよい。支持基板側から光を取り出す場合には、支持基板は透明であることが好ましい。好ましく用いられる透明な支持基板としては、ガラス、石英、透明樹脂フィルムを挙げることができる。特に好ましい支持基板は、有機ＥＬ素子にフレキシブル性を与えることが可能な樹脂フィルムである。

【０１８２】

樹脂フィルムとしては、例えば、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）等のポリエステル、ポリエチレン、ポリプロピレン、セロファン、セルロースジアセテート、セルローストリアセテート（ＴＡＣ）、セルロースアセテートブチレート、セルロースアセテートプロピオネート（ＣＡＰ）、セルロースアセテートフタレート、セルロースナイトレート等のセルロースエステル類又はそれらの誘導体、ポリ塩化ビニリデン、ポリビニルアルコール、ポリエチレンビニルアルコール、シンジオタクティックポリスチレン、ポリカーボネート、ノルボルネン樹脂、ポリメチルペンテン

、ポリエーテルケトン、ポリイミド、ポリエーテルスルホン（ＰＥＳ）、ポリフェニレンスルフィド、ポリスルホン類、ポリエーテルイミド、ポリエーテルケトンイミド、ポリアミド、フッ素樹脂、ナイロン、ポリメチルメタクリレート、アクリルあるいはポリアリレート類、アートン（商品名ＪＳＲ社製）あるいはアペル（商品名三井化学社製）といったシクロオレフィン系樹脂等を挙げられる。

【０１８３】

樹脂フィルムの表面には、無機物、有機物の被膜又はその両者のハイブリッド被膜が形成されていてもよく、ＪＩＳ　Ｋ　７１２９－１９９２に準拠した方法で測定された、水蒸気透過度（２５±０．５℃、相対湿度（９０±２）％ＲＨ）が０．０１ｇ／ｍ^{2}・２４ｈ以下のバリア性フィルムであることが好ましく、更には、ＪＩＳ　Ｋ　７１２６－１９８７に準拠した方法で測定された酸素透過度が、１×１０$^{-3}$ｍｌ／ｍ^{2}・２４ｈ・ａｔｍ以下、水蒸気透過度が、１×１０$^{-5}$ｇ／ｍ^{2}・２４ｈ以下の高バリア性フィルムであることが好ましい。

【０１８４】

バリア膜を形成する材料としては、水分や酸素等素子の劣化をもたらすものの浸入を抑制する機能を有する材料であればよく、例えば、酸化ケイ素、二酸化ケイ素、窒化ケイ素等を用いることができる。更に該膜の脆弱性を改良するために、これら無機層と有機材料からなる層の積層構造を持たせることがより好ましい。無機層と有機層の積層順については特に制限はないが、両者を交互に複数回積層させることが好ましい。

バリア膜の形成方法については特に限定はなく、例えば、真空蒸着法、スパッタリング法、反応性スパッタリング法、分子線エピタキシー法、クラスターイオンビーム法、イオンプレーティング法、プラズマ重合法、大気圧プラズマ重合法、プラズマＣＶＤ法、レーザーＣＶＤ法、熱ＣＶＤ法、コーティング法等を用いることができるが、特開２００４－６８１４３号公報に記載されているような大気圧プラズマ重合法によるものが特に好ましい。

【０１８５】

不透明な支持基板としては、例えば、アルミ、ステンレス等の金属板、フィルムや不透明樹脂基板、セラミック製の基板等が挙げられる。

本発明の有機ＥＬ素子の発光の室温（２５℃）における外部取り出し量子効率は、１％以上であることが好ましく、５％以上であるとより好ましい。

ここで、外部取り出し量子効率（％）＝有機ＥＬ素子外部に発光した光子数／有機ＥＬ素子に流した電子数×１００である。

また、カラーフィルター等の色相改良フィルター等を併用しても、有機ＥＬ素子からの発光色を、蛍光体を用いて多色へ変換する色変換フィルターを併用してもよい。

【０１８６】

［封止］

本発明の有機ＥＬ素子の封止に用いられる封止手段としては、例えば、封止部材と、電極、支持基板とを接着剤で接着する方法を挙げることができる。封止部材としては、有機ＥＬ素子の表示領域を覆うように配置されていればよく、凹板状でも、平板状でもよい。また、透明性、電気絶縁性は特に限定されない。

具体的には、ガラス板、ポリマー板・フィルム、金属板・フィルム等が挙げられる。ガラス板としては、特にソーダ石灰ガラス、バリウム・ストロンチウム含有ガラス、鉛ガラス、アルミノケイ酸ガラス、ホウケイ酸ガラス、バリウムホウケイ酸ガラス、石英等を挙げることができる。また、ポリマー板としては、ポリカーボネート、アクリル、ポリエチレンテレフタレート、ポリエーテルサルファイド、ポリサルフォン等を挙げることができる。金属板としては、ステンレス、鉄、銅、アルミニウム、マグネシウム、ニッケル、亜鉛、クロム、チタン、モリブテン、シリコン、ゲルマニウム及びタンタルからなる群から選ばれる１種以上の金属又は合金からなるものが挙げられる。

【０１８７】

本発明においては、有機ＥＬ素子を薄膜化できるということからポリマーフィルム、金

属フィルムを好ましく使用することができる。さらには、ポリマーフィルムはＪＩＳ　Ｋ７１２６－１９８７に準拠した方法で測定された酸素透過度が１×１０$^{-3}$ｍｌ／ｍ^{2}・２４ｈ以下、ＪＩＳ　Ｋ　７１２９－１９９２に準拠した方法で測定された、水蒸気透過度（２５±０．５℃、相対湿度９０±２％）が、１×１０$^{-3}$ｇ／ｍ^{2}・２４ｈ以下のものであることが好ましい。

封止部材を凹状に加工するのは、サンドブラスト加工、化学エッチング加工等が使われる。

【０１８８】

接着剤として具体的には、アクリル酸系オリゴマー、メタクリル酸系オリゴマーの反応性ビニル基を有する光硬化及び熱硬化型接着剤、２－シアノアクリル酸エステル等の湿気硬化型等の接着剤を挙げることができる。また、エポキシ系等の熱及び化学硬化型（二液混合）を挙げることができる。また、ホットメルト型のポリアミド、ポリエステル、ポリオレフィンを挙げることができる。また、カチオン硬化タイプの紫外線硬化型エポキシ樹脂接着剤を挙げることができる。

なお、有機ＥＬ素子が熱処理により劣化する場合があるので、室温から８０℃までに接着硬化できるものが好ましい。また、前記接着剤中に乾燥剤を分散させておいてもよい。封止部分への接着剤の塗布は市販のディスペンサーを使ってもよいし、スクリーン印刷のように印刷してもよい。

【０１８９】

また、有機層を挟み支持基板と対向する側の電極の外側に該電極と有機層を被覆し、支持基板と接する形で無機物、有機物の層を形成し封止膜とすることも好適にできる。この場合、該膜を形成する材料としては、水分や酸素等素子の劣化をもたらすものの浸入を抑制する機能を有する材料であればよく、例えば、酸化ケイ素、二酸化ケイ素、窒化ケイ素等を用いることができる。

さらに該膜の脆弱性を改良するために、これら無機層と有機材料からなる層の積層構造を持たせることが好ましい。これらの膜の形成方法については特に限定はなく、例えば、真空蒸着法、スパッタリング法、反応性スパッタリング法、分子線エピタキシー法、クラスターイオンビーム法、イオンプレーティング法、プラズマ重合法、大気圧プラズマ重合法、プラズマＣＶＤ法、レーザーＣＶＤ法、熱ＣＶＤ法、コーティング法等を用いることができる。

【０１９０】

封止部材と有機ＥＬ素子の表示領域との間隙には、気相及び液相では、窒素、アルゴン等の不活性気体やフッ化炭化水素、シリコンオイルのような不活性液体を注入することが好ましい。また、真空とすることも可能である。また、内部に吸湿性化合物を封入することもできる。

吸湿性化合物としては、例えば、金属酸化物（例えば、酸化ナトリウム、酸化カリウム、酸化カルシウム、酸化バリウム、酸化マグネシウム、酸化アルミニウム等）、硫酸塩（例えば、硫酸ナトリウム、硫酸カルシウム、硫酸マグネシウム、硫酸コバルト等）、金属ハロゲン化物（例えば、塩化カルシウム、塩化マグネシウム、フッ化セシウム、フッ化タンタル、臭化セリウム、臭化マグネシウム、ヨウ化バリウム、ヨウ化マグネシウム等）、過塩素酸類（例えば、過塩素酸バリウム、過塩素酸マグネシウム等）等が挙げられ、硫酸塩、金属ハロゲン化物及び過塩素酸類においては無水塩が好適に用いられる。

【０１９１】

［保護膜、保護板］

有機層を挟み支持基板と対向する側の前記封止膜あるいは前記封止用フィルムの外側に、素子の機械的強度を高めるために、保護膜あるいは保護板を設けてもよい。特に、封止が前記封止膜により行われている場合には、その機械的強度は必ずしも高くないため、このような保護膜、保護板を設けることが好ましい。これに使用することができる材料としては、前記封止に用いたのと同様なガラス板、ポリマー板・フィルム、金属板・フィルム等を用いることができるが、軽量かつ薄膜化ということからポリマーフィルムを用いるこ

とが好ましい。

【０１９２】

［光取り出し向上技術］

有機ＥＬ素子は、空気よりも屈折率の高い（屈折率１．６～２．１程度の範囲内）層の内部で発光し、発光層で発生した光のうち１５％から２０％程度の光しか取り出せないことが一般的に言われている。これは、臨界角以上の角度θで界面（透明基板と空気との界面）に入射する光は、全反射を起こし素子外部に取り出すことができないことや、透明電極ないし発光層と透明基板との間で光が全反射を起こし、光が透明電極ないし発光層を導波し、結果として、光が素子側面方向に逃げるためである。

【０１９３】

この光の取り出しの効率を向上させる手法としては、例えば、透明基板表面に凹凸を形成し、透明基板と空気界面での全反射を防ぐ方法（例えば、米国特許第４７７４４３５号明細書）、基板に集光性を持たせることにより効率を向上させる方法（例えば、特開昭６３－３１４７９５号公報）、素子の側面等に反射面を形成する方法（例えば、特開平１－２２０３９４号公報）、基板と発光体の間に中間の屈折率を持つ平坦層を導入し、反射防止膜を形成する方法（例えば、特開昭６２－１７２６９１号公報）、基板と発光体の間に基板よりも低屈折率を持つ平坦層を導入する方法（例えば、特開２００１－２０２８２７号公報）、基板、透明電極層や発光層のいずれかの層間（含む、基板と外界間）に回折格子を形成する方法（特開平１１－２８３７５１号公報）などが挙げられる。

【０１９４】

本発明においては、これらの方法を本発明の有機ＥＬ素子と組み合わせて用いることができるが、基板と発光体の間に基板よりも低屈折率を持つ平坦層を導入する方法、あるいは基板、透明電極層や発光層のいずれかの層間（含む、基板と外界間）に回折格子を形成する方法を好適に用いることができる。

本発明は、これらの手段を組み合わせることにより、更に高輝度あるいは耐久性に優れた素子を得ることができる。

【０１９５】

透明電極と透明基板の間に低屈折率の媒質を光の波長よりも長い厚さで形成すると、透明電極から出てきた光は、媒質の屈折率が低いほど、外部への取り出し効率が高くなる。

低屈折率層としては、例えば、エアロゲル、多孔質シリカ、フッ化マグネシウム、フッ素系ポリマーなどが挙げられる。透明基板の屈折率は一般に１．５～１．７程度の範囲内であるので、低屈折率層は、屈折率がおよそ１．５以下であることが好ましい。またさらに１．３５以下であることが好ましい。

また、低屈折率媒質の厚さは、媒質中の波長の２倍以上となるのが望ましい。これは、低屈折率媒質の厚さが、光の波長程度になってエバネッセントで染み出した電磁波が基板内に入り込む膜厚になると、低屈折率層の効果が薄れるからである。

【０１９６】

全反射を起こす界面又は、いずれかの媒質中に回折格子を導入する方法は、光取り出し効率の向上効果が高いという特徴がある。この方法は、回折格子が１次の回折や、２次の回折といった、いわゆるブラッグ回折により、光の向きを屈折とは異なる特定の向きに変えることができる性質を利用して、発光層から発生した光のうち、層間での全反射等により外に出ることができない光を、いずれかの層間若しくは、媒質中（透明基板内や透明電極内）に回折格子を導入することで光を回折させ、光を外に取り出そうとするものである。

【０１９７】

導入する回折格子は、二次元的な周期屈折率を持っていることが望ましい。これは、発光層で発光する光はあらゆる方向にランダムに発生するので、ある方向にのみ周期的な屈折率分布を持っている一般的な一次元回折格子では、特定の方向に進む光しか回折されず、光の取り出し効率がさほど上がらない。

しかしながら、屈折率分布を二次元的な分布にすることにより、あらゆる方向に進む光

が回折され、光の取り出し効率が上がる。
回折格子を導入する位置としては、いずれかの層間、若しくは媒質中（透明基板内や透明電極内）でもよいが、光が発生する場所である有機発光層の近傍が望ましい。このとき、回折格子の周期は、媒質中の光の波長の約１／２～３倍程度の範囲内が好ましい。回折格子の配列は、正方形のラチス状、三角形のラチス状、ハニカムラチス状など、二次元的に配列が繰り返されることが好ましい。
【０１９８】
［集光シート］
本発明の有機ＥＬ素子は、支持基板（基板）の光取出し側に、例えばマイクロレンズアレイ上の構造を設ける加工や、いわゆる集光シートと組み合わせることにより、特定方向、例えば素子発光面に対し正面方向に集光することにより、特定方向上の輝度を高めることができる。
マイクロレンズアレイの例としては、基板の光取り出し側に一辺が３０μｍでその頂角が９０度となるような四角錐を二次元に配列する。一辺は１０～１００μｍの範囲内が好ましい。これより小さくなると回折の効果が発生して色付く、大きすぎると厚さが厚くなり好ましくない。
集光シートとしては、例えば液晶表示装置のＬＥＤバックライトで実用化されているものを用いることが可能である。このようなシートとして例えば、住友スリーエム社製輝度上昇フィルム（ＢＥＦ）などを用いることができる。プリズムシートの形状としては、例えば、基材に頂角９０度、ピッチ５０μｍの△状のストライプが形成されたものであってもよいし、頂角が丸みを帯びた形状、ピッチをランダムに変化させた形状、その他の形状であってもよい。
また、有機ＥＬ素子からの光放射角を制御するために光拡散板・フィルムを、集光シートと併用してもよい。例えば、（株）きもと製拡散フィルム（ライトアップ）などを用いることができる。
【０１９９】
［用途］
本発明の有機ＥＬ素子は、電子機器、例えば、表示装置、ディスプレイ、各種発光装置として用いることができる。
発光装置として、例えば、照明装置（家庭用照明、車内照明）、時計や液晶用バックライト、看板広告、信号機、光記憶媒体の光源、電子写真複写機の光源、光通信処理機の光源、光センサーの光源等が挙げられるがこれに限定するものではないが、特に液晶表示装置のバックライト、照明用光源としての用途に有効に用いることができる。
本発明の有機ＥＬ素子においては、必要に応じ成膜時にメタルマスクやインクジェットプリンティング法等でパターニングを施してもよい。パターニングする場合は、電極のみをパターニングしてもよいし、電極と発光層をパターニングしてもよいし、素子全層をパターニングしてもよく、素子の作製においては、従来公知の方法を用いることができる。
【０２００】
＜表示装置＞
本発明の有機ＥＬ素子を具備する表示装置は単色でも多色でもよいが、ここでは多色表示装置について説明する。
【０２０１】
多色表示装置の場合は発光層形成時のみシャドーマスクを設け、一面に蒸着法、キャスト法、スピンコート法、インクジェット法又は印刷法等で膜を形成できる。
発光層のみパターニングを行う場合、その方法に限定はないが、好ましくは蒸着法、インクジェット法、スピンコート法及び印刷法である。
【０２０２】
表示装置に具備される有機ＥＬ素子の構成は、必要に応じて上記の有機ＥＬ素子の構成例の中から選択される。
【０２０３】

また、有機ＥＬ素子の製造方法は、上記の本発明の有機ＥＬ素子の製造の一態様に示したとおりである。

【０２０４】

このようにして得られた多色表示装置に直流電圧を印加する場合には、陽極を＋、陰極を－の極性として電圧２～４０Ｖ程度を印加すると発光が観測できる。また、逆の極性で電圧を印加しても電流は流れずに発光は全く生じない。更に交流電圧を印加する場合には、陽極が＋、陰極が－の状態になったときのみ発光する。なお、印加する交流の波形は任意でよい。

【０２０５】

多色表示装置は、表示デバイス、ディスプレイ又は各種発光光源として用いることができる。表示デバイス又はディスプレイにおいて、青、赤及び緑発光の３種の有機ＥＬ素子を用いることによりフルカラーの表示が可能となる。

【０２０６】

表示デバイス又はディスプレイとしては、テレビ、パソコン、モバイル機器、ＡＶ機器、文字放送表示及び自動車内の情報表示等が挙げられる。特に静止画像や動画像を再生する表示装置として使用してもよく、動画再生用の表示装置として使用する場合の駆動方式は単純マトリクス（パッシブマトリクス）方式でもアクティブマトリクス方式でもどちらでもよい。

【０２０７】

発光装置としては、家庭用照明、車内照明、時計や液晶用のバックライト、看板広告、信号機、光記憶媒体の光源、電子写真複写機の光源、光通信処理機の光源、光センサーの光源等が挙げられるが、本発明はこれらに限定されない。

【０２０８】

以下、本発明の有機ＥＬ素子を有する表示装置の一例を図面に基づいて説明する。

図５は有機ＥＬ素子から構成される表示装置の一例を示した模式図である。有機ＥＬ素子の発光により画像情報の表示を行う、例えば、携帯電話等のディスプレイの模式図である。

【０２０９】

ディスプレイ１は複数の画素を有する表示部Ａ、画像情報に基づいて表示部Ａの画像走査を行う制御部Ｂ、表示部Ａと制御部Ｂとを電気的に接続する配線部Ｃ等を有する。

制御部Ｂは表示部Ａと配線部Ｃを介して電気的に接続され、複数の画素それぞれに外部からの画像情報に基づいて走査信号と画像データ信号を送り、走査信号により走査線ごとの画素が画像データ信号に応じて順次発光して画像走査を行って画像情報を表示部Ａに表示する。

【０２１０】

図６はアクティブマトリクス方式による表示装置の模式図である。

表示部Ａは基板上に、複数の走査線５及びデータ線６を含む配線部Ｃと複数の画素３等とを有する。表示部Ａの主要な部材の説明を以下に行う。

図６においては、画素３の発光した光が白矢印方向（下方向）へ取り出される場合を示している。

【０２１１】

配線部の走査線５及び複数のデータ線６はそれぞれ導電材料からなり、走査線５とデータ線６は格子状に直交して、直交する位置で画素３に接続している（詳細は図示していない）。

画素３は走査線５から走査信号が印加されると、データ線６から画像データ信号を受け取り、受け取った画像データに応じて発光する。

発光の色が赤領域の画素、緑領域の画素、青領域の画素を適宜同一基板上に並置することによって、フルカラー表示が可能となる。

【０２１２】

次に、画素の発光プロセスを説明する。図７は画素の回路を示した概略図である。

画素は、有機ＥＬ素子１０、スイッチングトランジスタ１１、駆動トランジスタ１２、コンデンサー１３等を備えている。複数の画素に有機ＥＬ素子１０として、赤色、緑色及び青色発光の有機ＥＬ素子を用い、これらを同一基板上に並置することでフルカラー表示を行うことができる。

【０２１３】

図７において、制御部Ｂからデータ線６を介してスイッチングトランジスタ１１のドレインに画像データ信号が印加される。そして、制御部Ｂから走査線５を介してスイッチングトランジスタ１１のゲートに走査信号が印加されると、スイッチングトランジスタ１１の駆動がオンし、ドレインに印加された画像データ信号がコンデンサー１３と駆動トランジスタ１２のゲートに伝達される。

【０２１４】

画像データ信号の伝達により、コンデンサー１３が画像データ信号の電位に応じて充電されるとともに、駆動トランジスタ１２の駆動がオンする。駆動トランジスタ１２は、ドレインが電源ライン７に接続され、ソースが有機ＥＬ素子１０の電極に接続されており、ゲートに印加された画像データ信号の電位に応じて電源ライン７から有機ＥＬ素子１０に電流が供給される。

【０２１５】

制御部Ｂの順次走査により走査信号が次の走査線５に移ると、スイッチングトランジスタ１１の駆動がオフする。しかし、スイッチングトランジスタ１１の駆動がオフしてもコンデンサー１３は充電された画像データ信号の電位を保持するので、駆動トランジスタ１２の駆動はオン状態が保たれて、次の走査信号の印加が行われるまで有機ＥＬ素子１０の発光が継続する。順次走査により次に走査信号が印加されたとき、走査信号に同期した次の画像データ信号の電位に応じて駆動トランジスタ１２が駆動して有機ＥＬ素子１０が発光する。

すなわち、有機ＥＬ素子１０の発光は、複数の画素それぞれの有機ＥＬ素子１０に対して、アクティブ素子であるスイッチングトランジスタ１１と駆動トランジスタ１２を設けて、複数の画素３それぞれの有機ＥＬ素子１０の発光を行っている。このような発光方法をアクティブマトリクス方式と呼んでいる。

【０２１６】

ここで、有機ＥＬ素子１０の発光は複数の階調電位を持つ多値の画像データ信号による複数の階調の発光でもよいし、２値の画像データ信号による所定の発光量のオン、オフでもよい。また、コンデンサー１３の電位の保持は次の走査信号の印加まで継続して保持してもよいし、次の走査信号が印加される直前に放電させてもよい。

本発明においては、上述したアクティブマトリクス方式に限らず、走査信号が走査されたときのみデータ信号に応じて有機ＥＬ素子を発光させるパッシブマトリクス方式の発光駆動でもよい。

【０２１７】

図８は、パッシブマトリクス方式による表示装置の模式図である。図８において、複数の走査線５と複数の画像データ線６が画素３を挟んで対向して格子状に設けられている。

順次走査により走査線５の走査信号が印加されたとき、印加された走査線５に接続している画素３が画像データ信号に応じて発光する。

パッシブマトリクス方式では画素３にアクティブ素子が無く、製造コストの低減が計れる。

本発明の有機ＥＬ素子を用いることにより、発光効率が向上した表示装置が得られた。

【０２１８】

＜照明装置＞

本発明の有機ＥＬ素子は、照明装置に用いることもできる。

本発明の有機ＥＬ素子は、共振器構造を持たせた有機ＥＬ素子として用いてもよい。このような共振器構造を有した有機ＥＬ素子の使用目的としては、光記憶媒体の光源、電子写真複写機の光源、光通信処理機の光源、光センサーの光源等が挙げられるが、これらに

限定されない。また、レーザー発振をさせることにより上記用途に使用してもよい。
また、本発明の有機ＥＬ素子は、照明用や露光光源のような一種のランプとして使用してもよいし、画像を投影するタイプのプロジェクション装置や、静止画像や動画像を直接視認するタイプの表示装置（ディスプレイ）として使用してもよい。
動画再生用の表示装置として使用する場合の駆動方式は、パッシブマトリクス方式でもアクティブマトリクス方式でもどちらでもよい。又は、異なる発光色を有する本発明の有機ＥＬ素子を２種以上使用することにより、フルカラー表示装置を作製することが可能である。

【０２１９】

また、本発明に用いられるπ共役系化合物は、実質的に白色の発光を生じる有機ＥＬ素子を具備する照明装置に適用できる。例えば、複数の発光材料を用いる場合、複数の発光色を同時に発光させて、混色することで白色発光を得ることができる。複数の発光色の組み合わせとしては、赤色、緑色及び青色の３原色の三つの発光極大波長を含有させたものでもよいし、青色と黄色、青緑と橙色等の補色の関係を利用した二つの発光極大波長を含有したものでもよい。

【０２２０】

また、本発明の有機ＥＬ素子の形成方法は、発光層、正孔輸送層あるいは電子輸送層等の形成時のみマスクを設け、マスクにより塗り分ける等単純に配置するだけでよい。他層は共通であるのでマスク等のパターニングは不要であり、一面に蒸着法、キャスト法、スピンコート法、インクジェット法及び印刷法等で、例えば、電極膜を形成でき、生産性も向上する。
この方法によれば、複数色の発光素子をアレー状に並列配置した白色有機ＥＬ装置と異なり、素子自体が白色発光である。

【０２２１】

［本発明の照明装置の一態様］
本発明の有機ＥＬ素子を具備した、本発明の照明装置の一態様について説明する。
本発明の有機ＥＬ素子の非発光面をガラスケースで覆い、厚さ３００μｍのガラス基板を封止用基板として用いて、周囲にシール材として、エポキシ系光硬化型接着剤（東亞合成社製ラックストラックＬＣ０６２９Ｂ）を適用し、これを陰極上に重ねて透明支持基板と密着させ、ガラス基板側からＵＶ光を照射して、硬化させて、封止し、図９及び図１０に示すような照明装置を形成することができる。
図９は、照明装置の概略図を示し、本発明の有機ＥＬ素子（照明装置内の有機ＥＬ素子１０１）はガラスカバー１０２で覆われている（なお、ガラスカバーでの封止作業は、照明装置内の有機ＥＬ素子１０１を大気に接触させることなく窒素雰囲気下のグローブボックス（純度９９．９９９％以上の高純度窒素ガスの雰囲気下）で行った。）。
図１０は、照明装置の断面図を示し、１０５は陰極、１０６は有機層、１０７は透明電極付きガラス基板を示す。なお、ガラスカバー１０２内には窒素ガス１０８が充填され、捕水剤１０９が設けられている。
本発明の有機ＥＬ素子を用いることにより、発光効率が向上した照明装置が得られる。

【０２２２】

＜発光材料＞
本発明のπ共役系化合物は、電界励起等により、蛍光を放射することができる。したがって、各種発光材料として使用することができる。発光材料には、π共役系化合物以外に、必要に応じて他の成分が含まれてもよい。また、発光材料は、粉体状で用いられてもよく、所望の形状に加工されて用いられてもよい。発光材料は、例えば後述の発光性薄膜を形成するための材料や、蛍光塗料、バイオイメージング蛍光色素に適用することができる。

【０２２３】

また、π共役系化合物のΔE_{ST}の絶対値が０．５０ｅＶ以下である場合、π共役系化合物が、遅延蛍光を放射することがあり、このような化合物は、バイオイメージング蛍光

色素に適用することができる。さらに遅延蛍光は、酸素により消光されることが知られているため、酸素センシング材料にも適用することができる。

【０２２４】

＜発光性薄膜＞

本発明に係る発光性薄膜は、上述の本発明に係るπ共役系化合物を含有することを特徴とし、前記有機層の形成方法と同様に作製することができる。

本発明の発光性薄膜及は、前記有機層の形成方法と同様に作製することができる。

【０２２５】

本発明の発光性薄膜の形成方法は、特に制限はなく、従来公知の例えば真空蒸着法、湿式法（ウェットプロセスともいう）等による形成方法を用いることができる。

湿式法としては、スピンコート法、キャスト法、インクジェット法、印刷法、ダイコート法、ブレードコート法、ロールコート法、スプレーコート法、カーテンコート法、ＬＢ法（ラングミュアーブロジェット法）等があるが、均質な薄膜が得られやすく、かつ高生産性の点から、ダイコート法、ロールコート法、インクジェット法、スプレーコート法などのロール・ツー・ロール方式適性の高い方法が好ましい。

【０２２６】

本発明に用いられる発光材料を溶解又は分散する液媒体としては、例えば、メチルエチルケトン、シクロヘキサノン等のケトン類、酢酸エチル等の脂肪酸エステル類、ジクロロベンゼン等のハロゲン化炭化水素類、トルエン、キシレン、メシチレン、シクロヘキシルベンゼン等の芳香族炭化水素類、シクロヘキサン、デカリン、ドデカン等の脂肪族炭化水素類、ＤＭＦ、ＤＭＳＯ等の有機溶媒を用いることができる。

【０２２７】

また、分散方法としては、超音波、高剪断力分散やメディア分散等の分散方法により分散することができる。

更に層毎に異なる成膜法を適用してもよい。成膜に蒸着法を採用する場合、その蒸着条件は使用する化合物の種類等により異なるが、一般にボート加熱温度を５０～４５０℃の範囲内、真空度を10^{-6}～10^{-2}Ｐａの範囲内、蒸着速度０．０１～５０ｎｍ／秒の範囲内、基板温度－５０～３００℃の範囲内、層厚０．１ｎｍ～５μｍの範囲内、好ましくは５～２００ｎｍの範囲内で適宜選ぶことが望ましい。

また、成膜にスピンコート法を採用する場合、スピンコーターを１００～１０００ｒｐｍの範囲内、１０～１２０秒の範囲内で、乾燥不活性ガス雰囲気下で行うことが好ましい。

【実施例】

【０２２８】

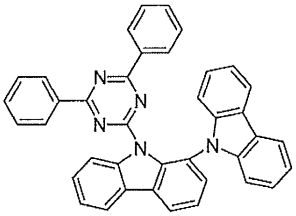
以下、実施例により本発明を具体的に説明するが、本発明はこれにより限定されるものではない。なお、実施例において「％」の表示を用いるが、特に断りがない限り「質量％」を表す。

【０２２９】

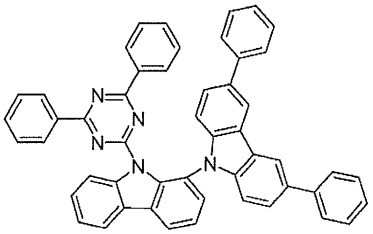
実施例及び比較例で用いた化合物を以下に示す。

【０２３０】

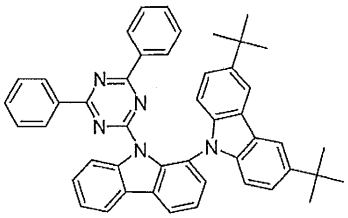
【化４２】



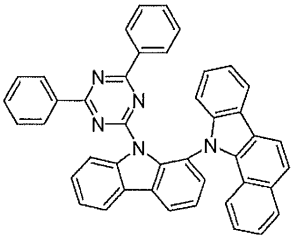
T-7



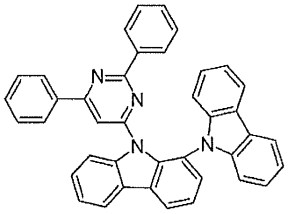
T-9



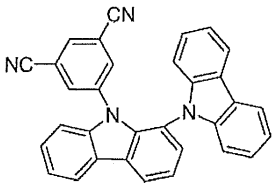
T-13



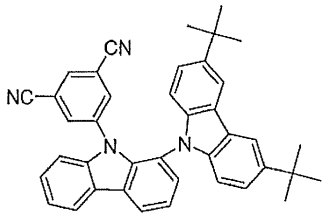
T-14



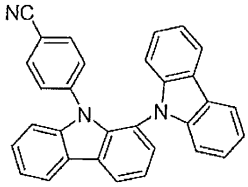
T-15



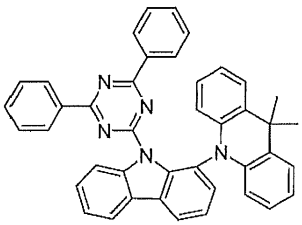
T-16



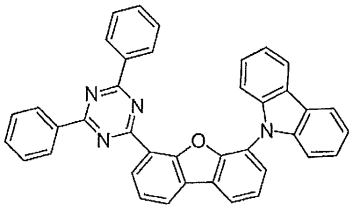
T-18



T-19



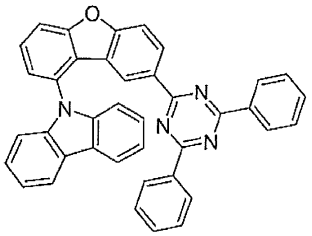
T-22



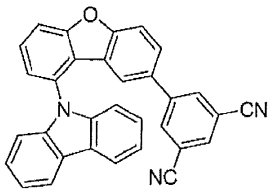
T-25

【０２３１】

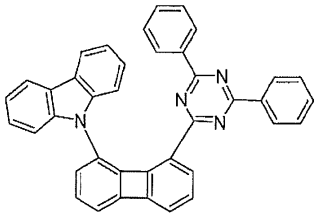
【化４３】



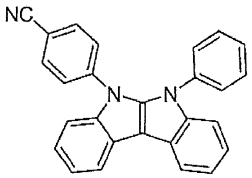
T-32



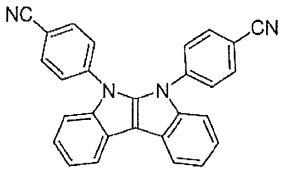
T-33



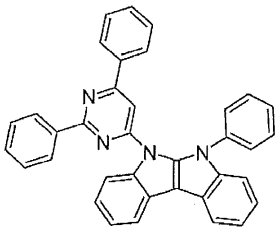
T-46



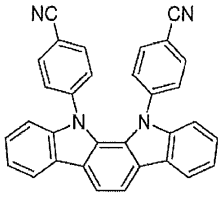
T-54



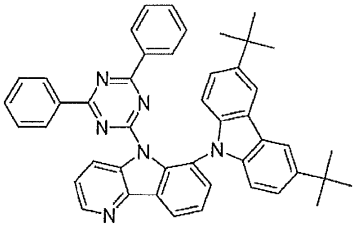
T-55



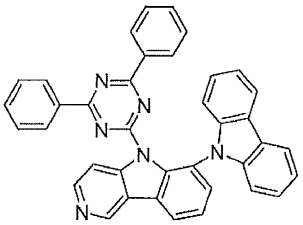
T-57



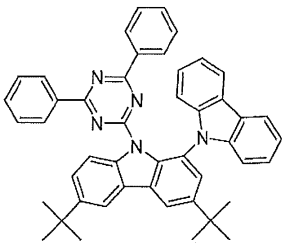
T-62



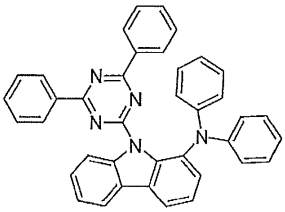
T-70



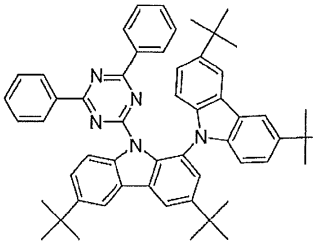
T-82



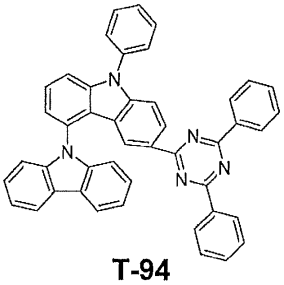
T-91



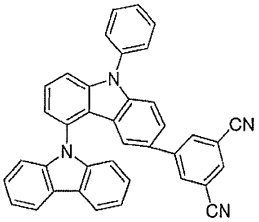
T-92



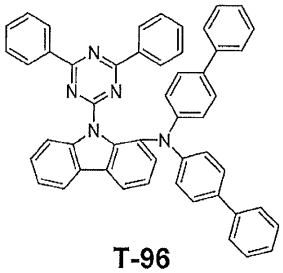
T-93



T-94



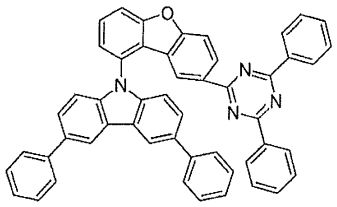
T-95



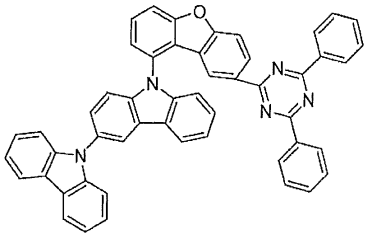
T-96

【０２３２】

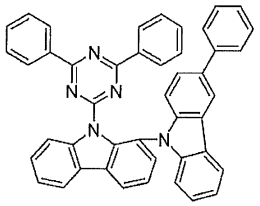
【化４４】



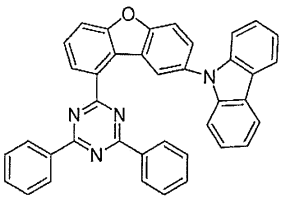
T-97



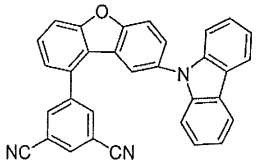
T-98



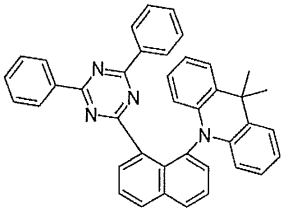
T-99



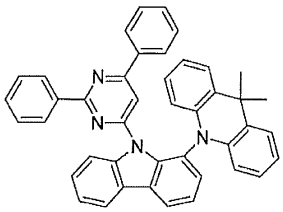
T-100



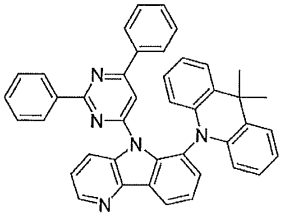
T-101



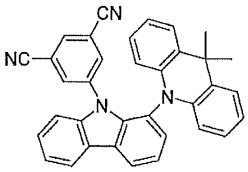
T-102



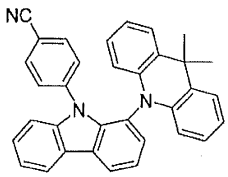
T-103



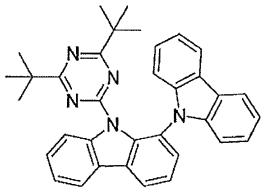
T-104



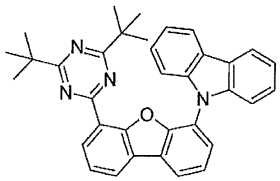
T-105



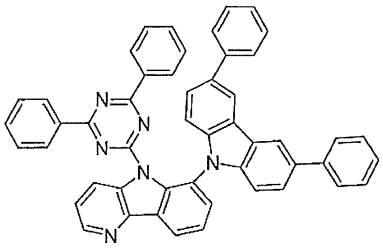
T-106



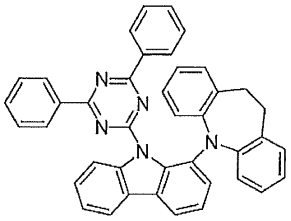
T-107



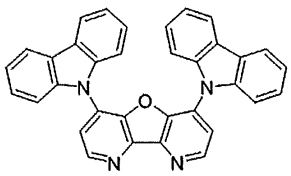
T-108



T-130



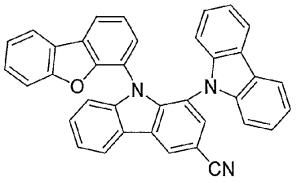
T-131



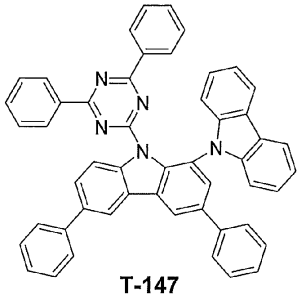
T-133

【０２３３】

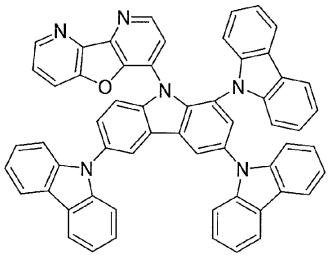
【化４５】



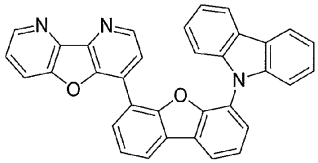
T-143



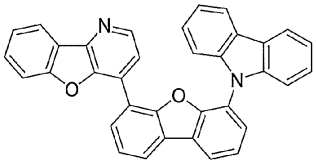
T-147



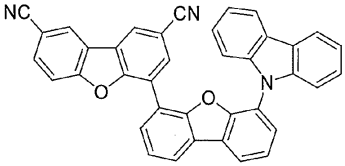
T-156



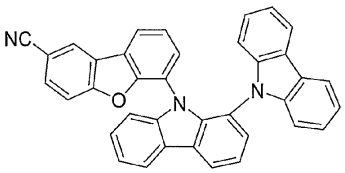
T-162



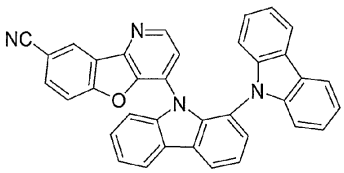
T-163



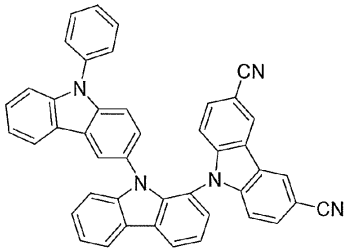
T-166



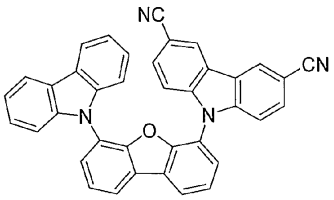
T-169



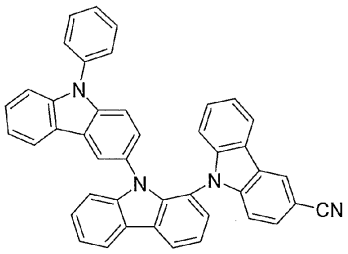
T-172



T-175



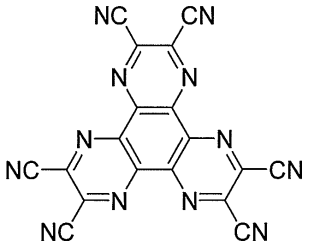
T-177



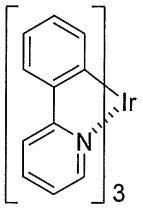
T-179

【０２３４】

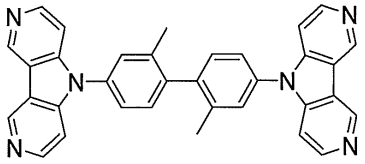
【化４６】



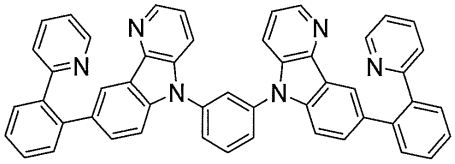
HI-1



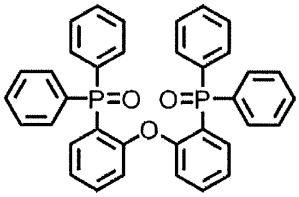
GD-1



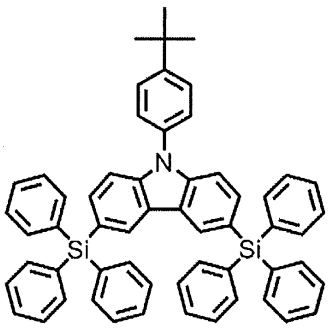
HB-1



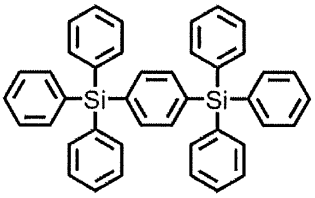
ET-1



H-232



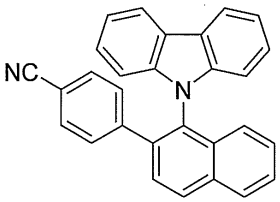
H-233



H-234



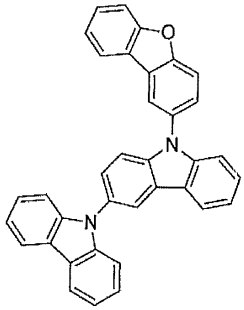
比較化合物1



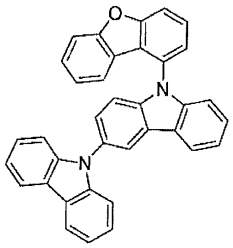
比較化合物2

【０２３５】

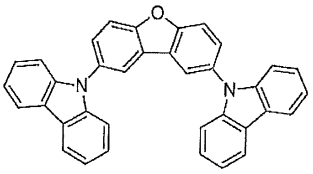
【化４７】



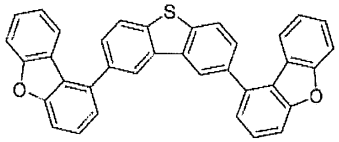
J-3



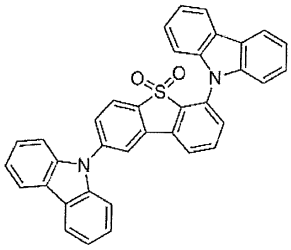
J-17



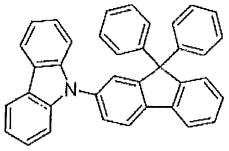
J-33



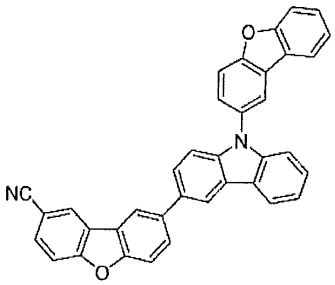
J-80



J-92



J-122



J-167

【０２３６】

（π共役系化合物Ｔ－１４の合成）

Ａｎｇｅｗ．　Ｃｈｅｍ．　Ｉｎｔ．　Ｅｄ．，２０１４，５３，２７０１．に記載の方法で合成した１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾールと、１－フルオロ－２－ニトロベンゼンとを、水素化ナトリウム存在下でＮ，Ｎ－ジメチルホルムアミド中、１２０℃で反応させ、１１－（２－ニトロフェニル）－１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾールを得た。次に、１１－（２－ニトロフェニル）－１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾールを塩化スズ存在下、エタノール中、８０℃で加熱し、２－（１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾリル－１１－イル）アニリンを得た。続いて、２－（１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾリル－１１－イル）アニリンと１－ブロモ－２－ヨードベンゼンを、酢酸パラジウムとビス［２－（ジフェニルホスフィノ）フェニル］エーテルとｔ－ブトキシナトリウムの存在下、トルエン中、１００℃で加熱し、Ｎ－（２－（１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾリル－１１－イル）フェニル）－２－ブロモアニリンを得た。続いて、Ｎ－（２－（１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾリル－１１－イル）フェニル）－２－ブロモアニリンを、酢酸パラジウムと１，１’－ビス（ジフェニルホスフィノ）フェロセンと炭酸カリウムの存在下、Ｎ，Ｎ－ジメチルホルムアミド中、１４０℃で反応させ、１１－（９Ｈ－カルバゾリル－１－イル）－１１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾールを得た。最後に、１１－（９Ｈ－カルバゾリル－１－イル）－１

１Ｈ－ベンゾ［ａ］カルバゾールと２－クロロ－４，６－ジフェニル－１，３，５－トリアジンを、水素化ナトリウム存在下でＮ，Ｎ－ジメチルホルムアミド中、６０℃で反応させ、π共役系化合物Ｔ－１４の粗精製物を得た。その後、カラムクロマトグラフィー、再結晶、昇華精製を行って、π共役系化合物Ｔ－１４の高純度品を取得した。

【０２３７】

（その他のπ共役系化合物の合成）

前述と同様にして、π共役系化合物Ｔ－７、Ｔ－９、Ｔ－１３、Ｔ－１５、Ｔ－１６、Ｔ－１８、Ｔ－１９、Ｔ－２２、Ｔ－２５、Ｔ－３２、Ｔ－３３、Ｔ－４６、Ｔ－５４、Ｔ－５５、Ｔ－５７、Ｔ－６２、Ｔ－７０、Ｔ－８２、Ｔ－９１、Ｔ－９２、Ｔ－９３、Ｔ－９４、Ｔ－９５、Ｔ－９６、Ｔ－９７、Ｔ－９８、Ｔ－９９、Ｔ－１００、Ｔ－１０１、Ｔ－１０２、Ｔ－１０３、Ｔ－１０４、Ｔ－１０５、Ｔ－１０６、Ｔ－１０７、Ｔ－１０８、Ｔ－１３０、Ｔ－１３１、およびＴ－１３３を合成した。

【０２３８】

得られたπ共役系化合物及び比較化合物１及び２のΔE_{ST}を、以下の方法で計算して求めた。

【０２３９】

（ΔE_{ST}の算出）

化合物の分子軌道計算による構造最適化及び電子密度分布の算出は、計算手法として、汎関数としてＢ３ＬＹＰ、基底関数として６－３１Ｇ（ｄ）を用いた分子軌道計算用ソフトウェアを用いて算出した。分子軌道計算用ソフトウェアとして、米国Ｇａｕｓｓｉａｎ社製のＧａｕｓｓｉａｎ０９（Ｒｅｖｉｓｉｏｎ Ｃ．０１，Ｍ．Ｊ．Ｆｒｉｓｃｈ，ｅｔ ａｌ，Ｇａｕｓｓｉａｎ，Ｉｎｃ．，２０１０．）を用いた。

この汎関数としてＢ３ＬＹＰ、基底関数として６－３１Ｇ（ｄ）を用いた構造最適化計算から、さらに時間依存密度汎関数法（Ｔｉｍｅ－Ｄｅｐｅｎｄｅｎｔ ＤＦＴ）による励起状態計算を実施してS_1、T_1のエネルギー準位（それぞれＥ（S_1）、Ｅ（T_1））を求めてΔE_{ST}＝｜Ｅ（S_1）－Ｅ（T_1）｜として算出した。

【０２４０】

［実施例１］

（有機ＥＬ素子１－１の作製）

５０ｍｍ×５０ｍｍ、厚さ０．７ｍｍのガラス基板上に、陽極としてＩＴＯ（インジウム・スズ酸化物）を１５０ｎｍの厚さで成膜し、パターニングを行った後、このＩＴＯ透明電極を付けた透明基板をイソプロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、ＵＶオゾン洗浄を５分間行った後、この透明基板を市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定した。

真空蒸着装置内の蒸着用るつぼの各々に、各層の構成材料を、各々素子作製に最適の量を充填した。蒸着用るつぼはモリブデン製またはタングステン製の抵抗加熱用材料で作製されたものを用いた。

【０２４１】

真空度１×10^{-4}Ｐａまで減圧した後、ＨＩ－１の入った蒸着用るつぼに通電して加熱し、蒸着速度０．１ｎｍ／秒でＩＴＯ透明電極上に蒸着し、層厚１０ｎｍの正孔注入輸送層を形成した。

次いで、α－ＮＰＤ（４，４’－ビス〔Ｎ－（１－ナフチル）－Ｎ－フェニルアミノ〕ビフェニル）を蒸着速度０．１ｎｍ／秒で前記正孔注入層上に蒸着し、層厚４０ｎｍの正孔輸送層を形成した。ホスト化合物としてＨ－２３２と発光性化合物として比較化合物１とを、それぞれ９４％と６％の体積％になるように蒸着速度０．１ｎｍ／秒で共蒸着し、層厚３０ｎｍの発光層を形成した。

その後、ＢＣＰ（２，９－ジメチル－４，７－ジフェニル－１，１０－フェナントロリン）を蒸着速度０．１ｎｍ／秒で蒸着し、層厚３０ｎｍの電子輸送層を形成した。

さらに、フッ化リチウムを膜厚０．５ｎｍで形成した後に、アルミニウム１００ｎｍを蒸着して陰極を形成した。

上記素子の非発光面側を、純度９９．９９９％以上の高純度窒素ガスの雰囲気下で、缶状ガラスケースで覆い、電極取り出し配線を設置して、有機ＥＬ素子１－１を作製した。

【０２４２】

（有機ＥＬ素子１－２～１－４２の作製）

発光性化合物を比較化合物１から表１に示すように変えた以外は、有機ＥＬ素子１－１と同様の方法で有機ＥＬ素子１－２から１－４２を作製した。

【０２４３】

（発光効率の測定）

作製した各有機ＥＬ素子について、駆動時の各サンプルの発光効率は下記測定を行うことにより評価した。

上記で作製した各有機ＥＬ素子を、室温（約２５℃）、２．５ｍＡ／ｃｍ^{2}の定電流条件下で発光させ、発光開始直後の発光輝度を、分光放射輝度計ＣＳ－２０００（コニカミノルタ社製）を用いて測定した。

【０２４４】

（相対発光効率の算出）

得られた発光輝度の相対値（実施例１では有機ＥＬ素子１－１の発光輝度に対する相対値）を求め、表１に示した。

【０２４５】

【表１】

有機EL素子	発光性化合物	ΔE_{ST} (eV)	相対発光効率 (%)	備考
1－1	比較化合物1	0.16	100	比較例
1－2	比較化合物2	0.47	65	比較例
1－3	T－7	0.04	161	本発明
1－4	T－9	0.03	164	本発明
1－5	T－13	0.04	170	本発明
1－6	T－14	0.09	150	本発明
1－7	T－15	0.28	141	本発明
1－8	T－16	0.03	153	本発明
1－9	T－18	0.03	159	本発明
1－10	T－19	0.22	145	本発明
1－11	T－22	0.02	172	本発明
1－12	T－25	0.16	146	本発明
1－13	T－32	0.28	139	本発明
1－14	T－33	0.17	143	本発明
1－15	T－46	0.70	111	本発明
1－16	T－54	0.22	128	本発明
1－17	T－55	0.31	123	本発明
1－18	T－57	0.13	130	本発明
1－19	T－62	0.40	119	本発明
1－20	T－70	0.03	162	本発明
1－21	T－82	0.04	158	本発明
1－22	T－91	0.05	156	本発明
1－23	T－92	0.02	171	本発明
1－24	T－93	0.04	167	本発明
1－25	T－94	0.36	129	本発明
1－26	T－95	0.22	135	本発明
1－27	T－96	0.03	165	本発明
1－28	T－97	0.15	141	本発明
1－29	T－98	0.05	148	本発明
1－30	T－99	0.03	169	本発明
1－31	T－100	0.07	150	本発明
1－32	T－101	0.01	155	本発明
1－33	T－102	0.02	153	本発明
1－34	T－103	0.03	155	本発明
1－35	T－104	0.08	149	本発明
1－36	T－105	0.02	157	本発明
1－37	T－106	0.05	155	本発明
1－38	T－107	0.41	121	本発明
1－39	T－108	0.21	134	本発明
1－40	T－130	0.02	163	本発明
1－41	T－131	0.02	161	本発明
1－42	T－133	0.29	120	本発明

【０２４６】

表１から明らかなように、発光性化合物として比較化合物よりも本発明の化合物を使用した有機ＥＬ素子の方が、高い発光効率を示した。特に化合物Ｔ－７、Ｔ－９、Ｔ－１３、Ｔ－１４、Ｔ－１６、Ｔ－１８、Ｔ－２２、Ｔ－７０、Ｔ－８２、Ｔ－９１、Ｔ－９２、Ｔ－９３、Ｔ－９６、Ｔ－９８、Ｔ－９９、Ｔ－１００、Ｔ－１０１、Ｔ－１０２、Ｔ－１０３、Ｔ－１０４、Ｔ－１０５、Ｔ－１０６、Ｔ－１３０及びＴ－１３１を用いた有機ＥＬ素子は、ΔE_{ST}の絶対値が０．１未満であり、且つ相対発光効率も１４８％以上

と高かった。

【０２４７】

［実施例２］

（有機ＥＬ素子２－１の作製）

陽極として１００ｍｍ×１００ｍｍ×１．１ｍｍのガラス基板上にＩＴＯ（インジウムチンオキシド）を１００ｎｍ成膜した基板（ＮＨテクノグラス社製ＮＡ４５）にパターニングを行った後、このＩＴＯ透明電極を設けた透明支持基板をイソプロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、ＵＶオゾン洗浄を５分間行った。

この透明支持基板上に、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ネート（ＰＥＤＯＴ／ＰＳＳ、Ｂａｙｅｒ社製、Ｂａｙｔｒｏｎ　Ｐ　Ａｌ　４０８３）を純水で７０％に希釈した溶液を用いて３０００ｒｐｍ、３０秒の条件下、スピンコート法により薄膜を形成した後、２００℃にて１時間乾燥し、層厚２０ｎｍの正孔注入層を設けた。この透明支持基板を市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定し、真空蒸着装置内の蒸着用るつぼの各々に、各層の構成材料を、各々素子作製に最適の量を充填した。蒸着用るつぼはモリブデン製またはタングステン製の抵抗加熱用材料で作製されたものを用いた。

【０２４８】

真空度１×１０$^{-4}$Ｐａまで減圧した後、α－ＮＰＤを蒸着速度０．１ｎｍ／秒で前記正孔注入層上に蒸着し、層厚４０ｎｍの正孔輸送層を形成した。ホスト化合物としてＨ－２３４と、発光性化合物として２，５，８，１１－テトラ－ｔ－ブチルペリレンとが、それぞれ９７％と３％の体積％になるように蒸着速度０．１ｎｍ／秒で共蒸着し、層厚３０ｎｍの発光層を形成した。

その後、ＴＰＢｉ（１，３，５－トリス（Ｎ－フェニルベンゾイミダゾール－２－イル）を蒸着速度０．１ｎｍ／秒で蒸着し、層厚３０ｎｍの電子輸送層を形成した。

さらに、フッ化ナトリウムを膜厚１ｎｍで形成した後に、アルミニウム１００ｎｍを蒸着して陰極を形成した。

上記素子の非発光面側を、純度９９．９９９％以上の高純度窒素ガスの雰囲気下で、缶状ガラスケースで覆い、電極取り出し配線を設置して、有機ＥＬ素子２－１を作製した。

【０２４９】

（有機ＥＬ素子２－２の作製）

ホスト化合物としてＨ－２３４、発光性化合物として２，５，８，１１－テトラ－ｔ－ブチルペリレン、第三成分として比較化合物１を用い、それぞれの比率が８２％、３％、１５％の体積％となるように発光層を形成した以外は有機ＥＬ素子２－１の作製と同様にして、有機ＥＬ素子２－２を作製した。

【０２５０】

（有機ＥＬ素子２－３～２－１３の作製）

表２に示すように第三成分を変えた以外は、有機ＥＬ素子２－２と同様の方法で有機ＥＬ素子２－３から２－１３を作製した。

【０２５１】

作製した各有機ＥＬ素子について、駆動時の各サンプルの発光効率を実施例１と同様にして測定した。得られた発光輝度の相対値（実施例２では有機ＥＬ素子２－１の発光輝度に対する相対値）を求め、表２に示した。

【０２５２】

【表２】

有機EL素子	第三成分	ΔE_{ST} (eV)	相対発光効率 (%)	備考
2－1	なし	—	100	比較例
2－2	比較化合物1	0.16	109	比較例
2－3	比較化合物2	0.47	86	比較例
2－4	T－9	0.03	156	本発明
2－5	T－13	0.04	153	本発明
2－5	T－18	0.03	154	本発明
2－6	T－22	0.02	157	本発明
2－7	T－33	0.17	132	本発明
2－8	T－57	0.13	140	本発明
2－9	T－91	0.05	149	本発明
2－10	T－95	0.22	129	本発明
2－11	T－99	0.03	155	本発明
2－12	T－105	0.02	158	本発明
2－13	T－131	0.02	157	本発明

【０２５３】

表２から明らかなように、第三成分として比較例化合物よりも本発明の化合物を使用した有機ＥＬ素子の方が、高い発光効率を示した。特に化合物Ｔ－９、Ｔ－１３、Ｔ－１８、Ｔ－２２、Ｔ－９１、Ｔ－９９、Ｔ－１０５及びＴ－１３１を用いた有機ＥＬ素子は、ΔE_{ST}の絶対値が０．１未満であり、且つ相対発光効率も１４９％以上と高かった。

【０２５４】

［実施例３］

（有機ＥＬ素子３－１の作製）

５０ｍｍ×５０ｍｍ、厚さ０．７ｍｍのガラス基板上に、陽極としてＩＴＯ（インジウム・スズ酸化物）を１５０ｎｍの厚さで製膜し、パターニングを行った後、このＩＴＯ透明電極を付けた透明基板をイソプロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、ＵＶオゾン洗浄を５分間行った後、この透明基板を市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定した。

【０２５５】

真空蒸着装置内の蒸着用の抵抗加熱ボートの各々に、各層の構成材料を、各々素子作製に最適の量を充填した。前記抵抗加熱ボートはモリブデン製又はタングステン製を用いた。

【０２５６】

真空度1×10^{-4}Ｐａまで減圧した後、ＨＩ－１の入った抵抗加熱ボートに通電して加熱し、蒸着速度０．１ｎｍ／秒でＩＴＯ透明電極上に蒸着し、層厚１５ｎｍの正孔注入層を形成した。

【０２５７】

次いで、α－ＮＰＤ（４，４’－ビス〔Ｎ－（１－ナフチル）－Ｎ－フェニルアミノ〕ビフェニル）を蒸着速度０．１ｎｍ／秒で蒸着し、層厚３０ｎｍの正孔輸送層を形成した。

【０２５８】

次いで、比較のホスト化合物として比較化合物１と発光性化合物としてＧＤ－１とが入った抵抗加熱ボートに通電して加熱し、それぞれ蒸着速度０．１ｎｍ／秒、０．０１０ｎｍ／秒で前記正孔輸送層上に共蒸着し、層厚４０ｎｍの発光層を形成した。

【０２５９】

次いで、ＨＢ－１を蒸着速度０．１ｎｍ／秒で蒸着し、層厚５ｎｍの第一電子輸送層を形成した。

【０２６０】

さらにその上に、ＥＴ－１を蒸着速度０．１ｎｍ／秒で蒸着し、層厚４５ｎｍの第二電

子輸送層を形成した。

【０２６１】

その後、フッ化リチウムを厚さ０．５ｎｍになるよう蒸着した後に、アルミニウム１００ｎｍを蒸着して陰極を形成し、有機ＥＬ素子３－１を作製した。

【０２６２】

（有機ＥＬ素子３－２～３－２４の作製）

ホスト化合物を比較化合物１から表３に示すように変えた以外は、有機ＥＬ素子３－１と同様の方法で有機ＥＬ素子３－２から３－２４を作製した。

【０２６３】

作製した各有機ＥＬ素子について、駆動時の各サンプルの発光効率を実施例１と同様にして測定した。得られた発光輝度の相対値（実施例３では有機ＥＬ素子３－１の発光輝度に対する相対値）を求め、表３に示した。

【０２６４】

【表３】

有機EL素子	ホスト化合物	ΔE_{ST} (eV)	相対発光効率 (%)	備考
3−1	比較化合物1	0.16	100	比較例
3−2	比較化合物2	0.47	75	比較例
3−3	T−13	0.04	161	本発明
3−4	T−16	0.03	162	本発明
3−5	T−19	0.22	147	本発明
3−6	T−25	0.16	145	本発明
3−7	T−32	0.28	131	本発明
3−8	T−82	0.04	156	本発明
3−9	T−100	0.07	146	本発明
3−10	T−103	0.03	149	本発明
3−11	T−105	0.02	152	本発明
3−12	T−107	0.41	128	本発明
3−13	T−133	0.29	124	本発明
3−14	T−143	0.50	120	本発明
3−15	T−147	0.05	155	本発明
3−16	T−156	0.09	145	本発明
3−17	T−162	0.27	130	本発明
3−18	T−163	0.31	126	本発明
3−19	T−166	0.26	133	本発明
3−20	T−169	0.25	135	本発明
3−21	T−172	0.03	158	本発明
3−22	T−175	0.24	134	本発明
3−23	T−177	0.27	130	本発明
3−24	T−179	0.23	135	本発明

【０２６５】

表３から明らかなように、ホスト化合物として比較例化合物よりも本発明の化合物を使用した有機ＥＬ素子の方が、高い発光効率を示した。特に化合物Ｔ－１３、Ｔ－１６、Ｔ－８２、Ｔ－１００、Ｔ－１０３、Ｔ－１０５、Ｔ－１４７、Ｔ－１５６及びＴ－１７２を用いた有機ＥＬ素子は、ΔE_{ST}の絶対値が０．１未満であり、且つ相対発光効率も１４５％以上と高かった。

【０２６６】

［実施例４］

（有機ＥＬ素子４－１の作製）

５０ｍｍ×５０ｍｍ、厚さ０．７ｍｍのガラス基板上に、陽極としてＩＴＯ（インジウム・スズ酸化物）を１５０ｎｍの厚さで製膜し、パターニングを行った後、このＩＴＯ透明電極を付けた透明基板をイソプロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、ＵＶオゾン洗浄を５分間行った後、この透明基板を市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定した。

【０２６７】

真空蒸着装置内の蒸着用の抵抗加熱ボートの各々に、各層の構成材料を、各々素子作製に最適の量を充填した。前記抵抗加熱ボートはモリブデン製又はタングステン製を用いた。

【０２６８】

真空度１×１０$^{-4}$Ｐａまで減圧した後、α－ＮＰＤ（４，４’－ビス〔Ｎ－（１－ナフチル）－Ｎ－フェニルアミノ〕ビフェニル）の入った抵抗加熱ボートに通電して加熱し、蒸着速度０．１ｎｍ／秒でＩＴＯ透明電極上に蒸着し、層厚３０ｎｍの正孔注入層を形成した。

【０２６９】

次いで、ＴＣＴＡ（トリス（４－カルバゾイル－９－イルフェニル）アミン）を蒸着速度０．１ｎｍ／秒で蒸着し、層厚２０ｎｍの第一正孔輸送層を形成した。

【０２７０】

さらに、Ｈ－２３３を蒸着速度０．１ｎｍ／秒で蒸着し、層厚１０ｎｍの第二正孔輸送層を形成した。

【０２７１】

次いで、比較のホスト化合物である比較化合物１とＴＢＰｅ（２，５，８，１１－テトラ－ｔｅｒｔ－ブチルペリレン）の入った抵抗加熱ボートに通電して加熱し、それぞれ蒸着速度０．１ｎｍ／秒、０．０１０ｎｍ／秒で前記正孔輸送層上に共蒸着し、層厚２０ｎｍの発光層を形成した。

【０２７２】

次いで、Ｈ－２３２を蒸着速度０．１ｎｍ／秒で蒸着し、層厚１０ｎｍの第一電子輸送層を形成した。

【０２７３】

さらにその上に、ＴＢＰＩ（１，３，５－トリス（１－フェニル－１Ｈ－ベンズイミダゾール－２－イル）ベンゼン）を蒸着速度０．１ｎｍ／秒で蒸着し、層厚３０ｍの第二電子輸送層を形成した。

【０２７４】

その後、フッ化リチウムを厚さ０．５ｎｍになるよう蒸着した後に、アルミニウム１００ｎｍを蒸着して陰極を形成し、有機ＥＬ素子４－１を作製した。

【０２７５】

（有機ＥＬ素子４－２～４－１２の作製）

ホスト化合物を比較化合物１から表４に示すように変えた以外は、有機ＥＬ素子４－１と同様の方法で有機ＥＬ素子４－２から４－１２を作製した。

【０２７６】

作製した各有機ＥＬ素子について、駆動時の各サンプルの発光効率を実施例１と同様にして測定した。得られた発光輝度の相対値（実施例４では有機ＥＬ素子４－１の発光輝度に対する相対値）を求め、表４に示した。

【０２７７】

【表４】

有機EL素子	ホスト化合物	ΔE_{ST} (eV)	相対発光効率 (%)	備考
4－1	比較化合物1	0.16	100	比較例
4－2	比較化合物2	0.47	81	比較例
4－3	T－7	0.04	163	本発明
4－4	T－9	0.03	165	本発明
4－5	T－18	0.03	164	本発明
4－6	T－33	0.17	139	本発明
4－7	T－54	0.22	123	本発明
4－8	T－57	0.13	131	本発明
4－9	T－95	0.22	131	本発明
4－10	T－99	0.03	164	本発明
4－11	T－101	0.01	148	本発明
4－12	T－131	0.02	159	本発明

【０２７８】

表４から明らかなように、ホスト化合物として比較例化合物よりも本発明の化合物を使用した有機ＥＬ素子の方が、高い発光効率を示した。特に化合物Ｔ－７、Ｔ－９、Ｔ－１８、Ｔ－９９、Ｔ－１０１及びＴ－１３１を用いた有機ＥＬ素子は、ΔE_{ST}の絶対値が０．１未満であり、且つ相対発光効率も１４８％以上と高かった。

【０２７９】

［実施例５］

有機ＥＬ素子を初期輝度３００ｃｄ／ｍ^{2}で点灯した時の、輝度半減時間を測定した。

【０２８０】

（有機ＥＬ素子５－１～５－７の作製）

ホスト化合物および発光性化合物を表５に示すように変えた以外は、実施例１の有機ＥＬ素子１－４と同様の方法で、有機ＥＬ素子５－１から５－７を作製した。

【０２８１】

（相対輝度半減時間の測定）

上記で作製した有機ＥＬ素子５－１から５－７と、実施例１で作製した有機ＥＬ素子１－４、１－５、１－１２、１－１３、１－１６、１－４０と１－４２について、相対輝度半減時間を測定した。具体的には、各有機ＥＬ素子の輝度が３００ｃｄ／ｍ^{2}となる条件で点灯し、その輝度が半分の１５０ｃｄ／ｍ^{2}となるまでに要する時間を測定し、輝度半減時間を得た。得られた輝度半減時間の相対値（有機ＥＬ素子１－１６の輝度半減時間に対する相対値）を求め、表５に示した。

【０２８２】

【表５】

有機EL素子	発光性化合物	ホスト化合物	相対輝度半減時間(倍率)	備考
1−4	T−9	H−232	80	本発明
5−1	T−9	J−3	950	本発明
1−5	T−13	H−232	50	本発明
5−2	T−13	J−17	600	本発明
1−12	T−25	H−232	60	本発明
5−3	T−25	J−33	800	本発明
1−13	T−32	H−232	30	本発明
5−4	T−32	J−80	300	本発明
1−16	T−54	H−232	1	本発明
5−5	T−54	J−92	200	本発明
1−40	T−130	H−232	20	本発明
5−6	T−130	J−122	400	本発明
1−42	T−133	H−232	20	本発明
5−7	T−133	J−167	450	本発明

【０２８３】

表５から明らかなように、ホスト化合物が前述の一般式（I）で表される化合物である実施例５の有機ＥＬ素子は、同じ発光性化合物を用いるが、他のホスト化合物を用いた実施例１の有機ＥＬ素子と比べて、１０倍以上の長い相対輝度半減時間を示した。

【０２８４】

［実施例６］

（共蒸着膜６－１の作製）

５０ｍｍ×５０ｍｍ、厚さ０．７ｍｍの石英基板をイソプロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、ＵＶオゾン洗浄を５分間行った後、この透明基板を市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定した。

真空蒸着装置内の蒸着用るつぼの各々に、Ｈ－２３２および発光性化合物Ｔ－１４を充填した。蒸着用るつぼはモリブデン製またはタングステン製の抵抗加熱用材料で作製されたものを用いた。

真空度１×１０$^{-4}$Ｐａまで減圧した後、Ｈ－２３２と発光性化合物Ｔ－１４を、それぞれ９４％と６％の体積％になるように蒸着速度０．１ｎｍ／秒で共蒸着し、層厚４０ｎｍの共蒸着膜５－１を形成した。

【０２８５】

（共蒸着膜６－１の遅延蛍光の測定）

窒素雰囲気下で、共蒸着膜６－１に３５５ｎｍの励起光を照射し、極大発光波長での蛍光減衰測定を行った。

共蒸着膜６－１について、時間と光子数との関係を示すグラフを図１１に示す。

【０２８６】

図１１に示すように、本発明のπ共有化合物（Ｔ－１４）は、蛍光の減衰速度の異なる成分が２種以上確認され、遅延蛍光を放射することが確認された。

【０２８７】

本出願は、２０１５年１２月２８日出願の特願２０１５－２５６９７０に基づく優先権を主張する。当該出願明細書および図面に記載された内容は、すべて本願明細書に援用される。

【産業上の利用可能性】

【０２８８】

本発明によれば、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光効率を改良しうる新たなπ共役系化合物を提供することができる。また、当該π共役系化合物を用いた有機エレクト

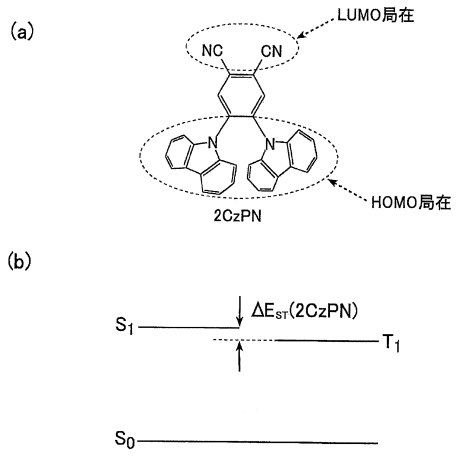
ロルミネッセンス素子材料、発光材料、電荷輸送材料、発光性薄膜、有機エレクトロルミネッセンス素子、表示装置及び照明装置を提供することができる。

【符号の説明】

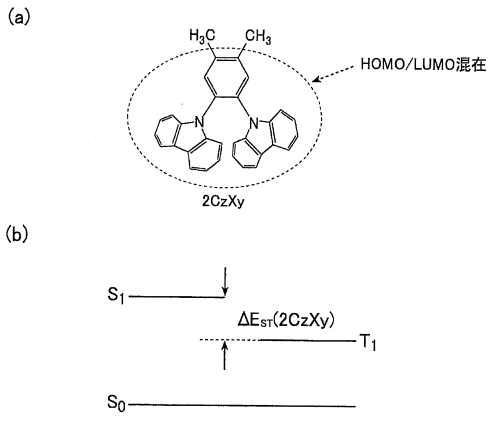
【０２８９】

１　ディスプレイ
３　画素
５　走査線
６　データ線
７　電源ライン
１０　有機ＥＬ素子
１１　スイッチングトランジスタ
１２　駆動トランジスタ
１３　コンデンサー
１０１　照明装置内の有機ＥＬ素子
１０２　ガラスカバー
１０５　陰極
１０６　有機層
１０７　透明電極付きガラス基板
１０８　窒素ガス
１０９　捕水剤
Ａ　表示部
Ｂ　制御部
Ｃ　配線部

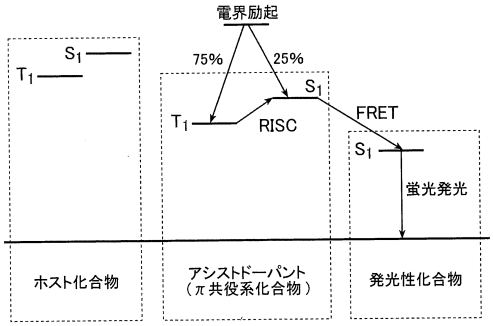
【図１】



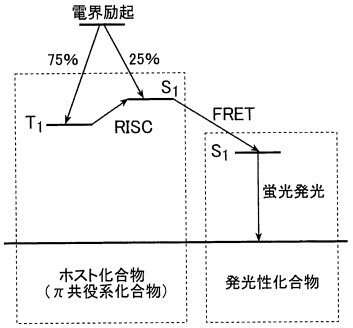
【図２】



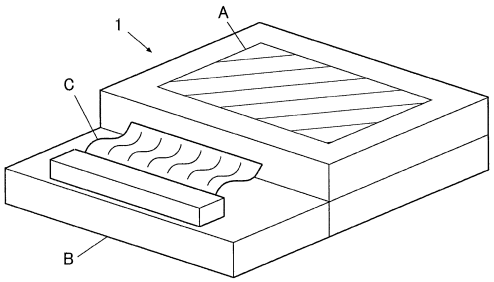
【図３】


電界励起
75%
25%
S1
T1
RISC
FRET
S1
蛍光発光
ホスト化合物
アシストドーパント
（π共役系化合物）
発光性化合物

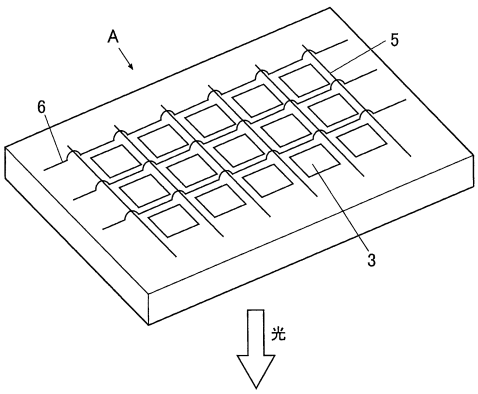
【図４】


電界励起
75%
25%
S1
T1
RISC
FRET
S1
蛍光発光
ホスト化合物
（π共役系化合物）
発光性化合物

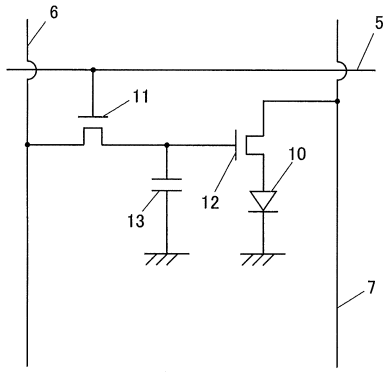
【図５】


1
A
C
B

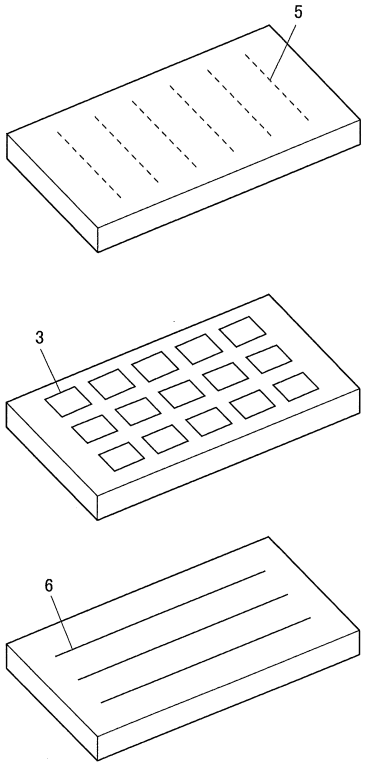
【図６】


A
5
6
3
光

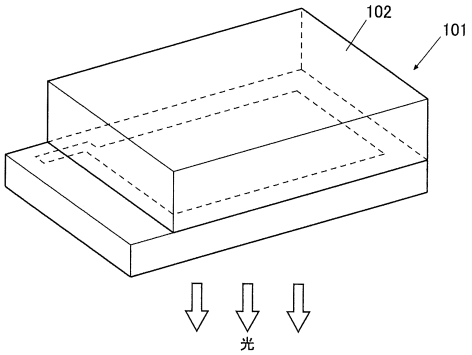
【図７】



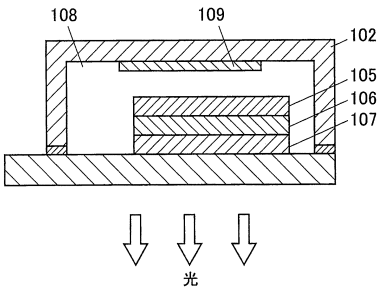
【図８】



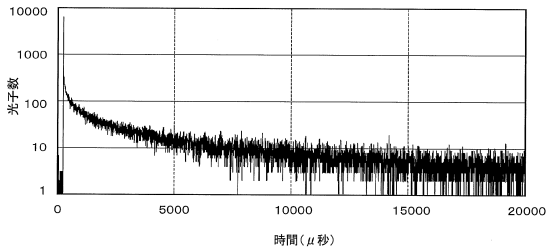
【図９】



【図１０】



【図１１】



フロントページの続き

(51)Int.Cl.		FI	
C07D 405/14	*(2006.01)*	C07D 405/14	
C07D 405/04	*(2006.01)*	C07D 405/04	
C07D 401/10	*(2006.01)*	C07D 401/10	
C07D 487/04	*(2006.01)*	C07D 487/04	137
C07D 471/04	*(2006.01)*	C07D 471/04	103S
C07D 491/147	*(2006.01)*	C07D 491/147	
C07D 491/048	*(2006.01)*	C07D 491/048	
C07D 409/04	*(2006.01)*	C07D 409/04	
C07D 403/14	*(2006.01)*	C07D 403/14	

(72)発明者　菅原　隆太郎
東京都千代田区丸の内二丁目７番２号　コニカミノルタ株式会社内

審査官　東　裕子

(56)参考文献　韓国公開特許第１０－２０１４－０１４１３３７（ＫＲ，Ａ）
特許第５８３１６５４（ＪＰ，Ｂ２）
国際公開第２０１５／０１４４３５（WO，Ａ１）
国際公開第２０１５／１３３３５３（WO，Ａ１）
特開２０１２－０４９５１８（ＪＰ，Ａ）
米国特許出願公開第２０１５／０２２８９０８（ＵＳ，Ａ１）
国際公開第２０１４／０６７６１４（WO，Ａ１）
国際公開第２０１５／０１４４３４（WO，Ａ１）
米国特許出願公開第２０１５／０１７１３４２（ＵＳ，Ａ１）
国際公開第２０１２／０３５８５３（WO，Ａ１）
国際公開第２０１４／１０４３１５（WO，Ａ１）
国際公開第２０１３／１８００９７（WO，Ａ１）
国際公開第２０１１／０７０９６３（WO，Ａ１）
国際公開第２０１２／１３３１８８（WO，Ａ１）
国際公開第２０１４／０９２９８３（WO，Ａ１）
国際公開第２０１５／０２２８３５（WO，Ａ１）
特開２０１６－０３６０２５（ＪＰ，Ａ）
国際公開第２０１６／０１７７６０（WO，Ａ１）

(58)調査した分野(Int.Cl.，ＤＢ名)
Ｃ０７Ｄ
ＣＡｐｌｕｓ／ＲＥＧＩＳＴＲＹ（ＳＴＮ）