

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6444046号
(P6444046)

(45) 発行日 平成30年12月26日 (2018.12.26)

(24) 登録日 平成30年12月7日 (2018.12.7)

(51) Int. Cl.

F I

H O 1 L 51/50 (2006.01)
C O 7 C 13/567 (2006.01)
C O 7 C 13/60 (2006.01)
C O 7 C 25/22 (2006.01)
C O 7 C 13/615 (2006.01)

H O 5 B 33/14 B
 C O 7 C 13/567 C S P
 C O 7 C 13/60
 C O 7 C 25/22
 C O 7 C 13/615

請求項の数 20 (全 58 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2014-76287 (P2014-76287)
 (22) 出願日 平成26年4月2日 (2014.4.2)
 (65) 公開番号 特開2014-212315 (P2014-212315A)
 (43) 公開日 平成26年11月13日 (2014.11.13)
 審査請求日 平成29年3月16日 (2017.3.16)
 (31) 優先権主張番号 特願2013-77439 (P2013-77439)
 (32) 優先日 平成25年4月3日 (2013.4.3)
 (33) 優先権主張国 日本国 (JP)

(73) 特許権者 000001007
 キヤノン株式会社
 東京都大田区下丸子3丁目30番2号
 (74) 代理人 100096828
 弁理士 渡辺 敬介
 (74) 代理人 100110870
 弁理士 山口 芳広
 (72) 発明者 山田 直樹
 東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キ
 ヤノン株式会社内
 (72) 発明者 鎌谷 淳
 東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キ
 ヤノン株式会社内

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機化合物及び有機発光素子

(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配置されている発光層とを有し、
 前記陽極と前記発光層との間に有機化合物層が配置され、
 前記有機化合物層が、下記の化合物Aと、化合物Bと、を有することを特徴とする、有
 機発光素子。

〔化合物A〕下記一般式〔1〕又は〔2〕に示される化合物であり、かつS P²炭素原子
 とS P³炭素原子を有し、前記S P²炭素原子の個数に対する前記S P³炭素原子の個数の
 比率が40%以上である化合物（但し、下記一般式〔A〕で表されるフルオレン化合物及
 び下記一般式〔B〕で表される発光ナフタセン化合物を除く）

〔化合物B〕3級アミン構造を有する化合物

【化1】



（一般式〔1〕において、Z₁は、フェニル基又は酸素原子を表す。前記フェニル基は、
 アルキル基又はハロゲン原子をさらに有してもよい。

一般式〔1〕において、Ar₁は、アリール基又は脂肪族縮合多環基を表す。尚、Ar₁

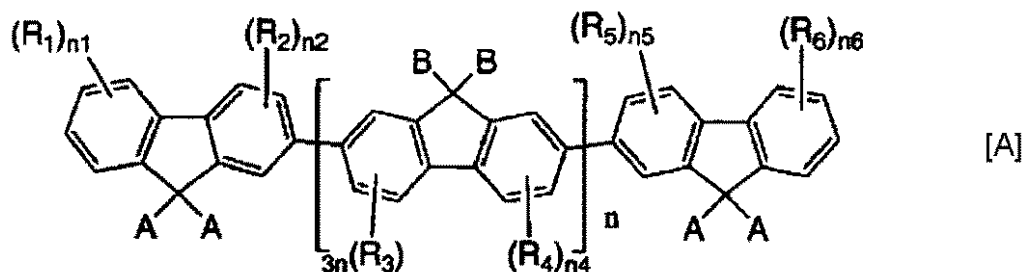
で表わされる置換基は、アルキル基、アルコキシ基又はハロゲン原子をさらに有してもよい。

一般式 [1] において、 n は、1 乃至 6 の整数を表す。ただし、 Z_1 が酸素原子である場合、 n は、2 である。 n が 2 以上である場合、複数ある括弧内の構造 Ar^1 は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。

一般式 [2] において、 Ar_2 及び Ar_3 は、それぞれアリール基又は脂肪族縮合多環基を表す。尚、 Ar_2 及び Ar_3 で表わされる置換基は、アルキル基、アルコキシ基又はハロゲン原子をさらに有してもよい。また Ar_2 及び Ar_3 は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。)

【化 1 - 1】

10



(一般式 [A] において、

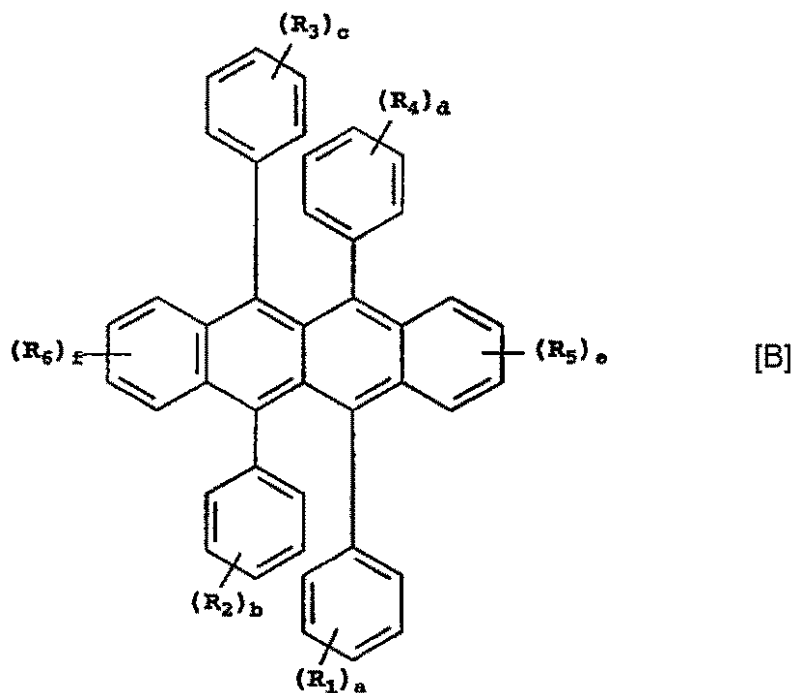
20

$R_1 \sim R_6$ は、それぞれ独立に置換基を表し、 $R_1 \sim R_6$ はそれぞれ隣接する基と共に、環を形成していてもよく、

$n_1 \sim n_6$ は 0 または 1 ~ 3 の整数を表し、

A および B は、直鎖、分岐鎖または環状のアルキル基、置換または未置換のアリール基あるいは置換または未置換のアラルキル基を表すが、A と B は互いに同一の基ではなく n は 1 または 2 を表す (ただし、A および B がいずれもアリール基である場合を除く)。

【化 1 - 2】



30

40

(一般式 [B] において、

$R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6$ は各環の置換基を表わし、各置換基は、独立に、炭素原

50

子が 1 ~ 24 個のアルキル基または置換されたアルキル基；炭素原子が 6 ~ 20 個のアリール基または置換されたアリール基；縮合芳香族環を完成させるのに必要な 4 ~ 24 個の炭素原子；5 ~ 24 個の炭素原子からなる複素環基または置換された複素環基で、単結合を通じて結合すること、または縮合した複素芳香族環系を完成させることができるもの；炭素原子が 1 ~ 24 個のアルコキシ基、アリールオキシ基、アルコシアミノ基、アルキルアミノ基、アリールアミノ基；フッ素置換基、塩素置換基、臭素置換基、シアノ置換基の中から選択され；

a、b、c、d は、独立に、0 ~ 5 の中から選択され；

e と f は、独立に、0 ~ 4 の中から選択され；

$R_1 \sim R_4$ のうちの少なくとも 1 つは縮合環基ではなく、 $R_1 \sim R_6$ のうちの少なくとも 1 つは置換基であり；

さらに、 R_1 と R_4 の両方が複素環であることはなく、 R_2 と R_3 の両方が複素環であることもない）

【請求項 2】

前記一般式 [1] において、前記 Ar_1 が、アルキル基を有するフェニル基、アルキル基を有するフルオレニル基、アルキル基を有するビフェニル基又はアルキル基を有するナフチル基であり、

前記一般式 [2] において、前記 Ar_2 及び Ar_3 が、それぞれアルキル基を有するフェニル基、アルキル基を有するフルオレニル基、アルキル基を有するビフェニル基又はアルキル基を有するナフチル基であることを特徴とする、請求項 1 に記載の有機発光素子。

【請求項 3】

前記 Z_1 が、フッ素原子あるいはアルキル基を有してもよいフェニル基又は酸素原子であることを特徴とする、請求項 1 または 2 に記載の有機発光素子。

【請求項 4】

前記化合物 A が有する SP^2 炭素原子の個数に対する前記化合物 A が有する SP^3 炭素原子の個数の比率が、80 % 以上であることを特徴とする、請求項 1 乃至 3 のいずれか一項に記載の有機発光素子。

【請求項 5】

前記化合物 A 及び前記化合物 B の合計を基準とする、前記有機化合物層に含まれる前記化合物 B の比率が、10 wt % 乃至 90 wt % であることを特徴とする、請求項 1 乃至 4 のいずれか一項に記載の有機発光素子。

【請求項 6】

前記化合物 A 及び前記化合物 B の合計を基準とする、前記有機化合物層に含まれる前記化合物 B の比率が、20 wt % 乃至 70 wt % であることを特徴とする、請求項 1 乃至 5 のいずれか一項に記載の有機発光素子。

【請求項 7】

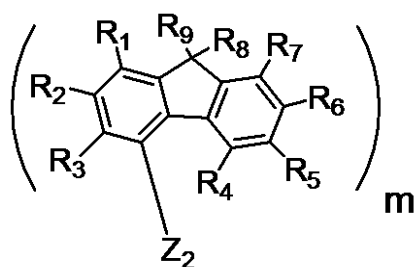
下記一般式 [3] 又は [4] に示される化合物であることを特徴とする、有機化合物。

10

20

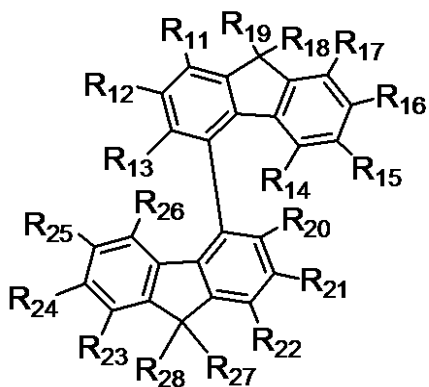
30

【化 2】



[3]

10



[4]

20

(一般式 [3] において、 Z_2 は、ナフチル基、フルオレニル基、フェナンスリル基、トリフェニレニル基、脂肪族縮合多環基、炭素原子又は酸素原子を表す。尚、 Z_2 で表される置換基は、アルキル基、アルコキシ基、アリール基又はハロゲン原子をさらに有してもよい。

一般式 [3] において、 R_1 乃至 R_9 は、それぞれ水素原子、アルキル基、アルコキシ基又はハロゲン原子を表す。ただし R_1 乃至 R_9 のいずれかで表される置換基のうち、少なくとも 2 つはアルキル基である。

一般式 [3] において、 m は、1 乃至 6 の整数を表す。ただし、 Z_2 が炭素原子である場合、 m は、1 乃至 4 の整数であり、 Z_2 が酸素原子である場合、 m は、1 又は 2 である。
 m が 2 以上である場合、複数ある括弧内の構造は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。

30

一般式 [4] において、 R_{11} 乃至 R_{28} は、それぞれ水素原子、アルキル基、アルコキシ基又はハロゲン原子を表す。ただし R_{11} 乃至 R_{28} のいずれかで表される置換基のうち、少なくとも 2 つはアルキル基である。)

【請求項 8】

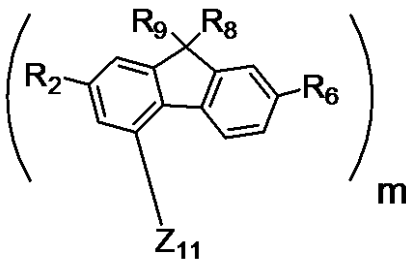
前記 Z_2 が、アルキル基、アルコキシ基、アリール基あるいはハロゲン原子をさらに有してもよい、脂肪族縮合多環基、炭素原子又は酸素原子であることを特徴とする、請求項 7 に記載の有機化合物。

【請求項 9】

40

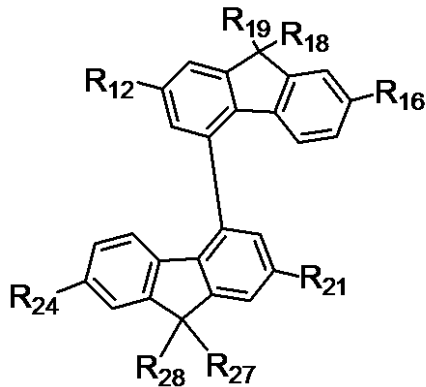
下記一般式 [5] 又は下記一般式 [6] で示される化合物であることを特徴とする、請求項 7 または 8 に記載の有機化合物。

【化 3】



[5]

10



[6]

20

(一般式 [5] において、 Z_{11} は、ナフチル基、フルオレニル基、フェナンスリル基、トリフェニレニル基、脂肪族縮合多環基、炭素原子又は酸素原子を表す。尚、 Z_{11} で表される置換基は、アルキル基、アルコキシ基、アリール基又はハロゲン原子をさらに有してもよい。

一般式 [5] において、 R_2 、 R_6 、 R_8 及び R_9 は、それぞれアルキル基又はアルコキシ基を表し、それぞれ同じでも異なってもよい。

一般式 [5] において、 m は、1 乃至 6 の整数を表す。ただし、 Z_{11} が炭素原子である場合、 m は、1 乃至 4 の整数であり、 Z_{11} が酸素原子である場合、 m は、1 又は 2 である。 m が 2 以上である場合、複数ある括弧内の構造は、それぞれ同じであってもよいし異な

30

っている。一般式 [6] において、 R_{12} 、 R_{16} 、 R_{18} 、 R_{19} 、 R_{21} 、 R_{24} 、 R_{27} 及び R_{28} は、それぞれアルキル基又はアルコキシ基を表し、それぞれ同じでも異なってもよい。)

【請求項 1 0】

前記 Z_{11} が、アルキル基、アルコキシ基、アリール基あるいはハロゲン原子をさらに有してもよい、脂肪族縮合多環基、炭素原子又は酸素原子であることを特徴とする、請求項 9 に記載の有機化合物。

【請求項 1 1】

SP^2 炭素原子と SP^3 炭素原子とを有し、

前記 SP^2 炭素原子の個数に対する前記 SP^3 炭素原子の個数の比率が 40 % 以上であることを特徴とする、請求項 7 乃至 10 いずれか一項に記載の有機化合物。

40

【請求項 1 2】

陽極と陰極と、前記陽極と前記陰極の間に配置されている発光層と、を有し、

前記陽極と前記発光層との間に有機化合物層が配置され、

前記有機化合物層が、請求項 7 乃至 11 のいずれか一項に記載の有機化合物を有することを特徴とする、有機発光素子。

【請求項 1 3】

前記有機化合物層が、3 級アミン構造を有する化合物をさらに有することを特徴とする、請求項 12 に記載の有機発光素子。

【請求項 1 4】

50

陽極と陰極と、前記陽極と前記陰極の間に配置されている発光層と、を有し、
前記陰極と前記発光層との間に有機化合物層が配置され、
前記有機化合物層が、請求項 7 乃至 11 のいずれか一項に記載の有機化合物を有することを特徴とする、有機発光素子。

【請求項 15】

陽極と陰極と、前記陽極と前記陰極の間に配置されている発光層と、を有し、
前記発光層が、請求項 7 乃至 11 のいずれか一項に記載の有機化合物を有することを特徴とする、有機発光素子。

【請求項 16】

複数の画素を有し、
前記複数の画素の少なくともいずれかが、請求項 1 乃至 6 及び 12 乃至 15 のいずれか一項に記載の有機発光素子と、前記有機発光素子に接続されている能動素子と、を有することを特徴とする、表示装置。

【請求項 17】

画像情報を入力する入力部と、画像を表示する表示部と、を有し、
前記表示部が、請求項 16 に記載の表示装置であることを特徴とする画像情報処理装置。

【請求項 18】

請求項 1 乃至 6 及び 12 乃至 15 のいずれか一項に記載の有機発光素子と、
前記有機発光素子に駆動電圧を供給するための AC / DC コンバーター回路と、を有することを特徴とする、照明装置。

【請求項 19】

感光体と、
前記感光体の表面を帯電させる帯電部と、
前記感光体を露光するための露光部と、
前記感光体の表面に形成された静電潜像を現像するための現像器と、を有する画像形成装置であって、
前記露光部が、請求項 1 乃至 6 及び 12 乃至 15 のいずれか一項に記載の有機発光素子を有することを特徴とする、画像形成装置。

【請求項 20】

発光部材を有し、
前記発光部材を用いて感光体を露光する露光機であって、
前記発光部材が、請求項 1 乃至 6 及び 12 乃至 15 のいずれか一項に記載の有機発光素子を所定の直線方向に沿って列を形成して配置されてなる部材であることを特徴とする、露光機。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機化合物及びこれを用いた有機発光素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機発光素子は、一对の電極とこれら電極の間に配置される有機化合物層とを有する電子素子である。これら一对の電極から電子及び正孔が注入され、有機化合物層内にて電子と正孔とが再結合することで発光性有機化合物の励起子が生成し、該励起子が基底状態に戻る際に、有機発光素子は光を放出する。

【0003】

有機発光素子において、発光効率を向上させる要素は複数存在するが、その要素の一つとして、電荷（正孔、電子）の注入・輸送性の向上が挙げられる。そして、電荷の注入・輸送性の向上を図ることを目的とした材料や素子構成の研究開発が従来から行われてきた。

10

20

30

40

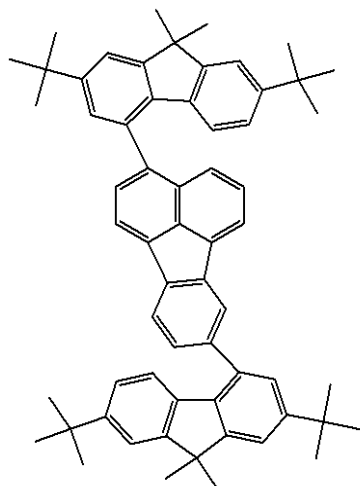
50

【 0 0 0 4 】

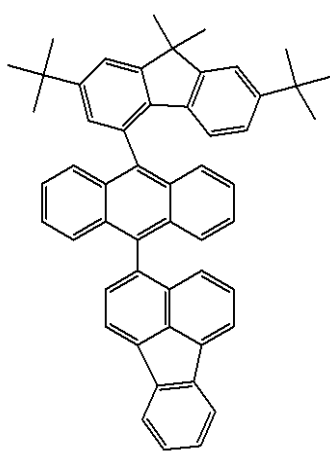
特許文献 1 では、異なる正孔輸送性材料を混合して正孔輸送層を形成し、正孔輸送性の向上を図ることが提案されている。また特許文献 2 には三級アミン化合物にルブレンやアントラセン化合物をドーブした層を有する有機発光素子が開示されている。さらに特許文献 3 及び特許文献 4 には、以下に示す化合物が記載されている。

【 0 0 0 5 】

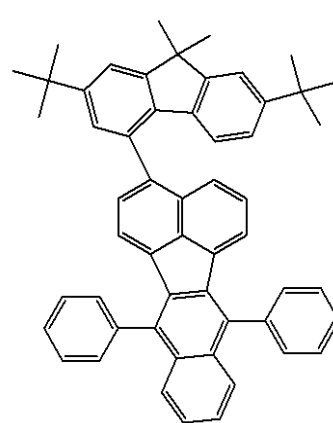
【 化 1 】



C-1



C-2



C-3

【 先行技術文献 】

【 特許文献 】

【 0 0 0 6 】

【 特許文献 1 】 特開 2 0 0 0 - 6 8 0 6 4 号公報

【 特許文献 2 】 特開 2 0 0 3 - 7 7 6 7 6 号公報

【 特許文献 3 】 特開 2 0 0 7 - 3 1 4 5 1 0 号公報

【 特許文献 4 】 特開 2 0 0 7 - 3 1 4 5 0 6 号公報

【 発明の概要 】

【 発明が解決しようとする課題 】

【 0 0 0 7 】

本発明は上述した課題を解決するためになされるものであり、その目的は、高効率かつ高輝度で光を出力できる有機発光素子を提供することにある。

【 課題を解決するための手段 】

【 0 0 0 8 】

本発明の有機発光素子は、陽極と陰極と、前記陽極と前記陰極との間に配置されている発光層とを有し、

前記陽極と前記発光層との間に有機化合物層が配置され、

前記有機化合物層が、下記の化合物 A と、化合物 B と、を有することを特徴とする。

[化合物 A] 下記一般式 [1] 又は [2] に示される化合物であり、かつ SP^2 炭素原子と SP^3 炭素原子を有し、前記 SP^2 炭素原子の個数に対する前記 SP^3 炭素原子の個数の比率が 4 0 % 以上である化合物 (但し、下記一般式 [A] で表されるフルオレン化合物及び下記一般式 [B] で表される発光ナフタセン化合物を除く)

[化合物 B] 3 級アミン構造を有する化合物

【 化 1 - 1 】



10

20

30

40

50

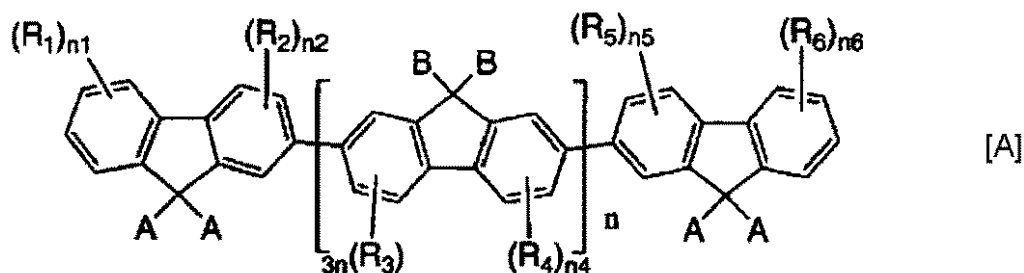
(一般式 [1] において、 Z_1 は、フェニル基又は酸素原子を表す。前記フェニル基は、アルキル基又はハロゲン原子をさらに有してもよい。

一般式 [1] において、 Ar_1 は、アリール基又は脂肪族縮合多環基を表す。尚、 Ar_1 で表わされる置換基は、アルキル基、アルコキシ基又はハロゲン原子をさらに有してもよい。

一般式 [1] において、 n は、1 乃至 6 の整数を表す。ただし、 Z_1 が酸素原子である場合、 n は、2 である。 n が 2 以上である場合、複数ある括弧内の構造 Ar^1 は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。

一般式 [2] において、 Ar_2 及び Ar_3 は、それぞれアリール基又は脂肪族縮合多環基を表す。尚、 Ar_2 及び Ar_3 で表わされる置換基は、アルキル基、アルコキシ基又はハロゲン原子をさらに有してもよい。また Ar_2 及び Ar_3 は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。) 10

【化 1 - 2】



20

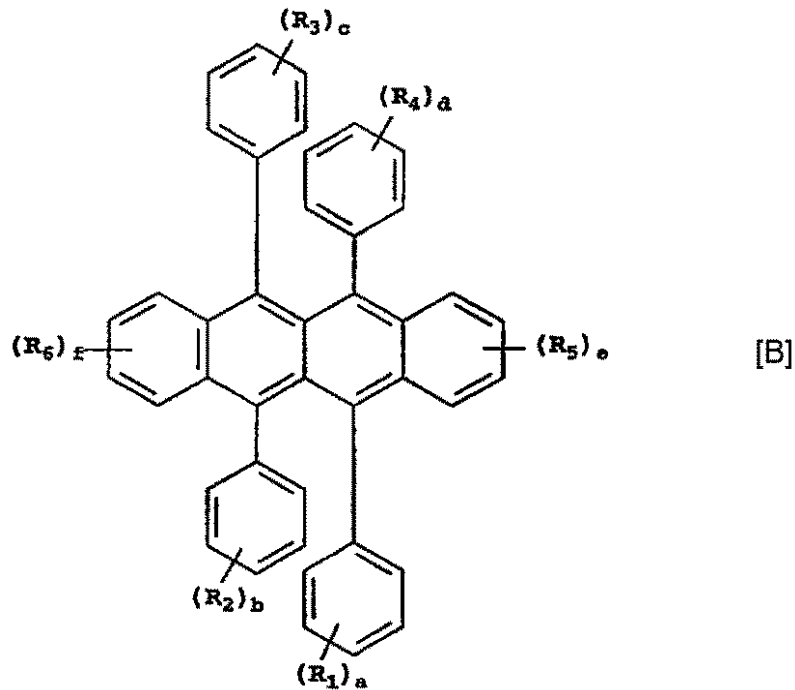
(一般式 [A] において、

$R_1 \sim R_6$ は、それぞれ独立に置換基を表し、 $R_1 \sim R_6$ はそれぞれ隣接する基と共に、環を形成していてもよく、

$n_1 \sim n_6$ は 0 または 1 ~ 3 の整数を表し、

A および B は、直鎖、分岐鎖または環状のアルキル基、置換または未置換のアリール基あるいは置換または未置換のアラルキル基を表すが、A と B は互いに同一の基ではなく n は 1 または 2 を表す (ただし、A および B がいずれもアリール基である場合を除く)。)

【化 1 - 3】



(一般式 [B] において、

R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 は各環の置換基を表わし、各置換基は、独立に、炭素原子が1～24個のアルキル基または置換されたアルキル基；炭素原子が6～20個のアリール基または置換されたアリール基；縮合芳香族環を完成させるのに必要な4～24個の炭素原子；5～24個の炭素原子からなる複素環基または置換された複素環基で、単結合を通じて結合すること、または縮合した複素芳香族環系を完成させることができるもの；炭素原子が1～24個のアルコキシ基、アリールオキシ基、アルコシアミノ基、アルキルアミノ基、アリールアミノ基；フッ素置換基、塩素置換基、臭素置換基、シアノ置換基の中から選択され；

a、b、c、dは、独立に、0～5の中から選択され；

eとfは、独立に、0～4の中から選択され；

$R_1 \sim R_4$ のうちの少なくとも1つは縮合環基ではなく、 $R_1 \sim R_6$ のうちの少なくとも1つは置換基であり；

さらに、 R_1 と R_4 の両方が複素環であることはなく、 R_2 と R_3 の両方が複素環であることもない)

【発明の効果】

【0009】

本発明によれば、高効率かつ高輝度で光を出力できる有機発光素子を提供することができる。尚、本発明の有機化合物は、分子間の会合を生じさせることなく、かつ膜中で広いバンドギャップを有している。

【図面の簡単な説明】

【0010】

【図1】有機発光素子と有機発光素子と接続するスイッチング素子とを有する表示装置の断面模式図である。

【発明を実施するための形態】

【0011】

以下、本発明について詳細に説明する。

【0012】

10

20

30

40

50

(1) 有機発光素子

まず本発明の有機発光素子について説明する。本発明の有機発光素子は、陽極と陰極と、前記陽極と前記陰極との間に配置されている発光層とを有し、前記陽極と前記発光層との間に有機化合物層が配置されている。

【 0 0 1 3 】

本発明において、上記有機化合物層は、下記の化合物 A と、化合物 B と、を有している。

[化合物 A] SP^2 炭素原子と SP^3 炭素原子を有し、この SP^2 炭素原子の個数に対する前記 SP^3 炭素原子の個数の比率が 40 % 以上である炭化水素芳香族化合物

[化合物 B] 3 級アミン構造を有する化合物

10

本発明において、有機発光素子の具体的な構成としては、少なくとも下記 (A) 乃至 (C) が挙げられる。

(A) (基板 /) 陽極 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 陰極

(B) (基板 /) 陽極 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 陰極

(C) (基板 /) 陽極 / 正孔輸送層 / 発光層 / 正孔・エキシトンブロッキング層 / 電子輸送層 / 陰極

【 0 0 1 4 】

ただし本発明においては、上記 (A) 乃至 (C) の態様に限定されるものではない。特に、有機化合物層に含まれる化合物 A によっては、有機発光素子の具体的な構成として、例えば、下記 (D) 及び (E) の態様も含まれ得る。

20

(D) (基板 /) 陽極 / 発光層 / 陰極

(E) (基板 /) 陽極 / 正孔輸送層 / 電子輸送層 / 陰極

【 0 0 1 5 】

尚、(A) 乃至 (C) の態様だけでなく (D) 及び (E) の態様をも取り得る化合物 A の具体例については、後述する。また (E) の構成の場合、正孔輸送層と電子輸送層との界面が発光する。

【 0 0 1 6 】

本発明においては、有機発光素子を構成する陰極を基板に近い電極として基板上に形成した後で各層を形成してもよい。

【 0 0 1 7 】

30

本発明において、発光層とは異なる層として有機発光素子中に含まれる有機化合物層は、上述したように陽極と発光層との間に設けられる層である。このとき有機化合物層の層構成は、単一の層に限定されず、複数の層からなる積層体であってもよい。本発明において有機発光素子中に含まれる有機化合物層は、好ましくは、正孔を輸送する機能を有する層であり、具体的には、正孔注入層、正孔輸送層又は正孔注入層と正孔輸送層とを積層してなる積層体である。

【 0 0 1 8 】

ここで化合物 A に含まれる SP^2 炭素原子は、不飽和の炭素 - 炭素結合 ($C = C$) を形成するための炭素原子であり、主に、炭化水素芳香族化合物の主骨格を構成する炭素原子である。また化合物 A に含まれる SP^3 炭素原子は、飽和の炭素 - 炭素結合 ($C - C$) を形成するための炭素原子であり、主に、炭化水素芳香族化合物の主骨格に結合するアルキル基を構成する炭素原子である。

40

【 0 0 1 9 】

本発明において、化合物 A は、好ましくは、下記一般式 [1] 又は [2] で表される化合物である。

【 0 0 2 0 】

【化 2】



【0021】

一般式 [1] において、 Z_1 は、アリール基（芳香族炭化水素基）、脂肪族縮合多環基、炭素原子又は酸素原子を表す。

【0022】

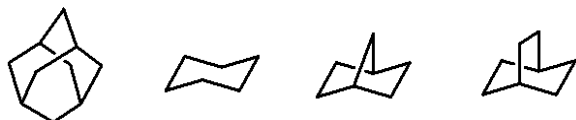
Z_1 で表されるアリール基として、例えば、フェニル基、ナフチル基、ペンタレニル基、インデニル基、アズレニル基、アントリル基、ピレニル基、インダセニル基、アセナフテニル基、フェナントリル基、フェナレニル基、フルオランテニル基、アセフェナントリル基、アセアントリル基、トリフェニレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ペリレニル基、ペンタセニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、フルオレニル基等の 1 価のアリール基や、これら 1 価のアリール基に由来する 2 価乃至 6 価のアリール基（即ち、これら 1 価のアリール基から水素原子を 1 個乃至 5 個取り除いてなる 2 価乃至 6 価のアリール基）が挙げられる。

【0023】

Z_1 で表される脂肪族縮合多環基として、例えば、以下に列挙される環構造が挙げられる。

【0024】

【化 3】



【0025】

尚、 Z_1 で表される置換基（アリール基、脂肪族縮合多環基、炭素原子又は酸素原子）は、メチル基、エチル基、ノルマルプロピル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、ターシャリーブチル基、セカンダリーブチル基、オクチル基、1 - アダマンチル基、2 - アダマンチル基、シクロヘキシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシルメチル基等のアルキル基、メトキシ基、エトキシ基、イソプロポキシ基、ノルマルプロポキシ基、セカンダリーブトキシ基、ターシャリーブトキシ基、オクトキシ基等のアルコキシ基、フェニル基、アルキル基を有するフェニル基等のアリール基又は塩素、臭素、フッ素等のハロゲン原子をさらに有してもよい。ここで当該アリール基がアルキル基をさらに有する場合、アルキル基として、好ましくは、炭素数 10 以下のアルキル基、例えば、イソプロピル基、ノルマルプロピル基、ノルマルブチル基、セカンダリーブチル基、ターシャリーブチル基、イソアミル基、アダマンチル基、シクロヘキシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシルメチル基等である。これらの置換基は、熱安定性がよく、膜中の分子会合を防ぐ役割が高く、膜の結晶化を抑制するため、有機発光素子の長寿命化を促す。より好ましくは、イソプロピル基、ターシャリーブチル基、イソアミル基、アダマンチル基、シクロヘキシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシルメチル基等の分岐型アルキル基である。これらの置換基を有することにより、化合物自体の熱安定性が高くなる。ここで当該アリール基がアルコキシ基をさらに有する場合、アルコキシ基として、好ましくは、炭素数 10 以下のアルコキシ基、例えば、イソプロポキシ基、ノルマルプロポキシ基、セカンダリーブトキシ基、ターシャリーブトキシ基等で置換されるもの良く、さらに好ましくはイソプロポキシ基、セカンダリーブトキシ基、ターシャリーブトキシ基等の分岐型アルキル基を有するアルコキシ基が好ましい。また当該アリール基がハロゲン原子をさらに有する場合、ハロゲン原子として、好ましくは、フッ素である。

【 0 0 2 6 】

一般式 [1] において、 $A r_1$ は、アリール基、脂肪族縮合多環基、炭素原子又は酸素原子を表す。 $A r_1$ で表されるアリール基及び脂肪族縮合多環基の具体例は、 Z_1 で表されるアリール基及び脂肪族縮合多環基の具体例と同様である。また $A r_1$ がアリール基である場合、当該アリール基はさらに置換基を有してもよく、その置換基の具体例は、 Z_1 で表されるアリール基がさらに有してもよい置換基の具体例と同様である。一般式 [1] において、 $A r_1$ は、好ましくは、アルキル基を有するフェニル基、アルキル基を有するフルオレニル基、アルキル基を有するピフェニル基又はアルキル基を有するナフチル基である。

【 0 0 2 7 】

10

一般式 [1] において、 n は、1乃至6の整数を表す。ただし、 Z_1 が炭素原子である場合、 n は、1乃至4の整数であり、 Z_1 が酸素原子である場合、 n は、1又は2である。 n が2以上である場合、複数ある括弧内の構造 $A r_1$ は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。

【 0 0 2 8 】

一般式 [2] において、 $A r_2$ 及び $A r_3$ は、それぞれアリール基又は脂肪族縮合多環基を表す。 $A r_2$ 及び $A r_3$ で表されるアリール基及び脂肪族縮合多環基の具体例は、式 [1] 中の Z_1 で表されるアリール基及び脂肪族縮合多環基の具体例と同様である。また $A r_2$ 及び $A r_3$ のいずれかがアリール基である場合、当該アリール基はさらに置換基を有してもよく、その置換基の具体例は、式 [1] 中の Z_1 で表されるアリール基がさらに有してもよい置換基の具体例と同様である。一般式 [2] において、 $A r_2$ 又は $A r_3$ で表わされる置換基として、好ましくは、アルキル基を有するフェニル基、アルキル基を有するフルオレニル基、アルキル基を有するピフェニル基又はアルキル基を有するナフチル基である。

20

【 0 0 2 9 】

次に、化合物Bについて説明する。化合物Bが有する3級アミン構造とは、窒素原子と、この窒素原子に結合する水素以外の三種類の置換基と、からなる構造をいう。化合物Bは、この3級アミン構造を1つ以上含む化合物である。また、低分子化合物でも高分子化合物でもよい。

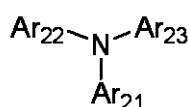
【 0 0 3 0 】

30

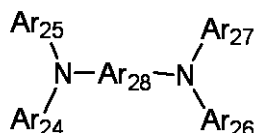
化合物Bとなる3級アミン構造を有する化合物とは、例えば、低分子の場合、下記一般式 [1 1] 乃至 [1 7] に列挙される化合物のいずれかである。

【 0 0 3 1 】

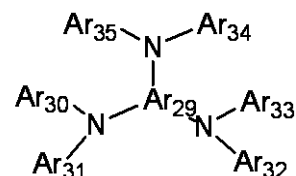
【化 4】



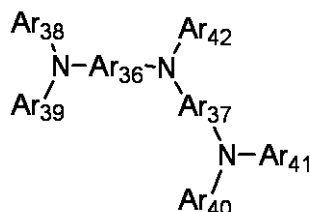
一般式 [1 1]



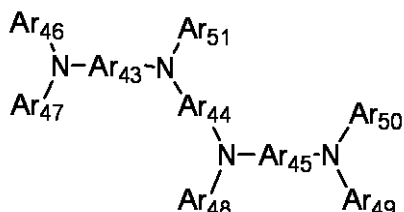
一般式 [1 2]



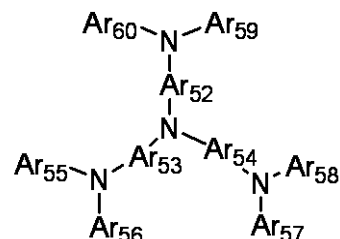
一般式 [1 3]



一般式 [1 4]

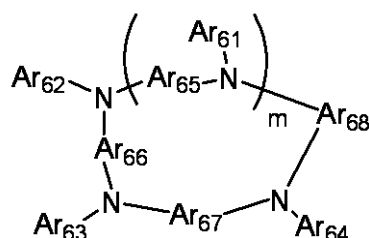


一般式 [1 5]



一般式 [1 6]

10



一般式 [1 7]

20

【 0 0 3 2 】

一般式 [1 1] 乃至 [1 7] において、 Ar_{21} 乃至 Ar_{27} 、 Ar_{30} 乃至 Ar_{35} 、 Ar_{38} 乃至 Ar_{42} 、 Ar_{46} 乃至 Ar_{51} 、 Ar_{55} 乃至 Ar_{60} 及び Ar_{61} 乃至 Ar_{64} は、それぞれ置換あるいは無置換の 1 価のアリール基、置換あるいは無置換の 1 価の複素環基又は置換あるいは無置換の 1 価のアルキル基を表す。一般式 [1 7] において、 m は 1 乃至 5 の整数を表す。

30

【 0 0 3 3 】

また、化合物 B の高分子化合物として、例えば、上記一般式 [1 1] 乃至 [1 7] のいずれかを繰り返し単位とする高分子化合物がある。

【 0 0 3 4 】

上記 1 価のアリール基として、例えば、フェニル基、ナフチル基、ペンタレニル基、インデニル基、アズレニル基、アントリル基、ピレニル基、インダセニル基、アセナフテニル基、フェナントリル基、フェナレニル基、フルオランテニル基、アセフェナントリル基、アセアントリル基、トリフェニレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ペリレニル基、ペンタセニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、フルオレニル基等の 1 価の置換基が挙げられる。

40

【 0 0 3 5 】

上記 1 価の複素環基として、例えば、チエニル基、ピロリル基、ピリジル基、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、チアゾリル基、チアジアゾリル基、ターチエニル基、ジベンゾチオフェニル基、ジベンゾフリル基、フェナントロニル基等の 1 価の置換基が挙げられる。

【 0 0 3 6 】

上記 1 価のアルキル基として、例えば、メチル基、エチル基、ノルマルプロピル基、イ

50

ソプロピル基、ノルマルブチル基、ターシャリーブチル基、セカンダリーブチル基、オクチル基、1 - アダマンチル基、2 - アダマンチル基等の1価のアルキル基が挙げられる。好ましくは、炭素数4以下であるアルキル基、例えば、メチル基、エチル基、ノルマルプロピル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、ターシャリーブチル基又はセカンダリーブチル基である。

【0037】

上記1価のアリール基、1価の複素環基及び1価のアルキル基が有してもよい置換基として、メチル基、エチル基、ノルマルプロピル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、ターシャリーブチル基、セカンダリーブチル基、オクチル基、1 - アダマンチル基、2 - アダマンチル基等のアルキル基、フェニル基、ナフチル基、ペンタレニル基、インデニル基、アズレニル基、アントリル基、ピレニル基、インダセニル基、アセナフテニル基、フェナントリル基、フェナレニル基、フルオランテニル基、アセフェナントリル基、アセアントリル基、トリフェニレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ペリレニル基、ペンタセニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、フルオレニル基等のアリール基、チエニル基、ピロリル基、ピリジル基、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、チアゾリル基、チアジアゾリル基、ターチエニル基、ジベンゾチオフエニル基、ジベンゾフリル基、フェナントロニル基等の複素環基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジベンジルアミノ基、ジフェニルアミノ基、ジトリルアミノ基、ジアニソリルアミノ基等の置換アミノ基、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基等のアルコキシ基（好ましくは、炭素数が4以下のアルコキシ基、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ノルマルブトキシ基）、フェノキシ基等のアリールオキシ基、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素等のハロゲン原子（好ましくは、フッ素原子）、シアノ基等が挙げられる。

【0038】

一般式[11]乃至[17]において、 Ar_{28} 、 Ar_{29} 、 Ar_{36} 、 Ar_{37} 、 Ar_{43} 乃至 Ar_{45} 、 Ar_{52} 乃至 Ar_{54} 及び Ar_{65} 乃至 Ar_{68} は、それぞれ置換あるいは無置換の2価のアリール基、置換あるいは無置換の2価の複素環基又は置換あるいは無置換の2価のアルキル基を表す。

【0039】

上記2価のアリール基として、例えば、フェニル基、ナフチル基、ペンタレニル基、インデニル基、アズレニル基、アントリル基、ピレニル基、インダセニル基、アセナフテニル基、フェナントリル基、フェナレニル基、フルオランテニル基、アセフェナントリル基、アセアントリル基、トリフェニレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ペリレニル基、ペンタセニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、フルオレニル基等に由来する2価の置換基が挙げられる。

【0040】

上記2価の複素環基として、例えば、チエニル基、ピロリル基、ピリジル基、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、チアゾリル基、チアジアゾリル基、ターチエニル基、ジベンゾチオフエニル基、ジベンゾフリル基、フェナントロニル基等に由来する2価の置換基が挙げられる。

【0041】

上記2価のアルキル基として、例えば、メチル基、エチル基、ノルマルプロピル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、ターシャリーブチル基、セカンダリーブチル基、オクチル基、1 - アダマンチル基、2 - アダマンチル基等に由来する2価のアルキル基が挙げられる。好ましくは、炭素数4以下であるアルキル基、例えば、メチル基、エチル基、ノルマルプロピル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、ターシャリーブチル基又はセカンダリーブチル基に由来する2価の置換基である。

【0042】

上記アリール基、複素環基及びアルキル基が有してもよい置換基として、メチル基、エチル基、ノルマルプロピル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、ターシャリーブチル基、セカンダリーブチル基、オクチル基、1 - アダマンチル基、2 - アダマンチル基等の

アルキル基、フェニル基、ナフチル基、ペンタレニル基、インデニル基、アズレニル基、アントリル基、ピレニル基、インダセニル基、アセナフテニル基、フェナントリル基、フェナレニル基、フルオランテニル基、アセフェナントリル基、アセアントリル基、トリフェニレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ペリレニル基、ペンタセニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、フルオレニル基等のアリール基、チエニル基、ピロリル基、ピリジル基、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、チアゾリル基、チアジアゾリル基、ターチエニル基、ジベンゾチオフェニル基、ジベンゾフリル基、フェナントロニル基等の複素環基、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジベンジルアミノ基、ジフェニルアミノ基、ジトリルアミノ基、ジアニソリルアミノ基等の置換アミノ基、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基等のアルコキシ基（好ましくは、炭素数が4以下のアルコキシ基、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ノルマルブトキシ基）、フェノキシ基等のアリールオキシ基、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素等のハロゲン原子（好ましくは、フッ素原子）、シアノ基等が挙げられる。

10

【0043】

一般式[11]において、 Ar_{21} 乃至 Ar_{23} は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。また Ar_{21} 及び Ar_{22} 、 Ar_{21} 及び Ar_{23} 、並びに Ar_{22} 及び Ar_{23} のいずれかが環を巻いて（即ち、例えば Ar_{21} と Ar_{22} が結合して $-Ar_{21}-Ar_{22}-$ となってNと共に環を形成して）、例えば、カルバゾール骨格等の含窒素複素環骨格を形成してもよい。

【0044】

20

一般式[12]において、 Ar_{24} 乃至 Ar_{27} は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。また Ar_{24} 及び Ar_{25} 、並びに Ar_{26} 及び Ar_{27} のいずれかが環を巻いて、例えば、カルバゾール骨格等の含窒素複素環骨格を形成してもよい。

【0045】

一般式[13]において、 Ar_{30} 乃至 Ar_{35} は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。また Ar_{30} 及び Ar_{31} 、 Ar_{32} 及び Ar_{33} 、並びに Ar_{34} 及び Ar_{35} のいずれかが環を巻いて、例えば、カルバゾール骨格等の含窒素複素環骨格を形成してもよい。

【0046】

一般式[14]において、 Ar_{36} 及び Ar_{37} は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。また一般式[14]において、 Ar_{38} 乃至 Ar_{42} は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。また Ar_{38} 及び Ar_{39} 、並びに Ar_{40} 及び Ar_{41} のいずれかが環を巻いて、例えば、カルバゾール骨格等の含窒素複素環骨格を形成してもよい。

30

【0047】

一般式[15]において、 Ar_{43} 乃至 Ar_{45} は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。また一般式[15]において、 Ar_{46} 乃至 Ar_{51} は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。また Ar_{46} 及び Ar_{47} 、並びに Ar_{49} 及び Ar_{50} のいずれかが環を巻いて、例えば、カルバゾール骨格等の含窒素複素環骨格を形成してもよい。

【0048】

一般式[16]において、 Ar_{52} 乃至 Ar_{54} は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。また一般式[16]において、 Ar_{55} 乃至 Ar_{60} は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。また Ar_{55} 及び Ar_{56} 、 Ar_{57} 及び Ar_{58} 、並びに Ar_{59} 及び Ar_{60} のいずれかが環を巻いて、例えば、カルバゾール骨格等の含窒素複素環骨格を形成してもよい。

40

【0049】

一般式[17]において、 Ar_{61} 乃至 Ar_{63} は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。また一般式[17]において、 Ar_{65} 乃至 Ar_{68} は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。また一般式[17]に係る化合物は、繰り返し単位(m値)が大きい高分子化合物も含まれる。

【0050】

50

本発明の有機発光素子は、陽極と発光層との間に少なくとも一層の有機化合物層（例えば、正孔輸送層、電子ブロッキング層）を有している。そしてこの有機化合物層には、上述した化合物 A と、化合物 B と、が含まれている。これにより、本発明の有機発光素子は発光効率が良好である。

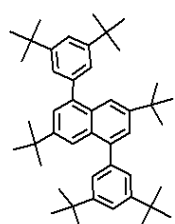
【 0 0 5 1 】

本発明者らは、陽極と発光層との間に設けられる有機化合物層に化合物 A と化合物 B とを含ませることによる作用効果を検証すべく、下記に示される化合物を用いて、下記表 1 に示される素子構成を有する有機発光素子を作製した。尚、化合物 A となる化合物は、S P³炭素原子の含有率が異なる化合物を複数種用意した。その詳細を以下に示す。

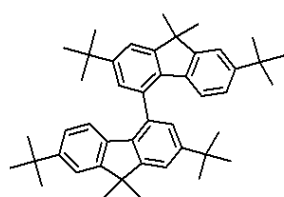
【 0 0 5 2 】

【化5】

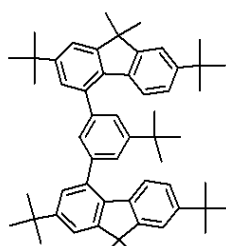
<化合物Aとして用いた化合物>



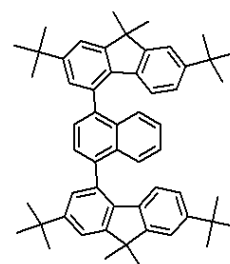
AC-6



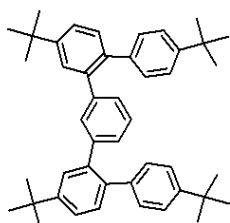
AA-1



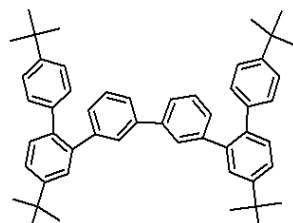
AA-7



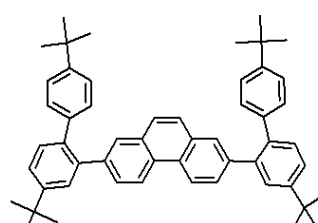
AA-9



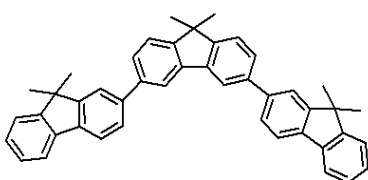
AB-3



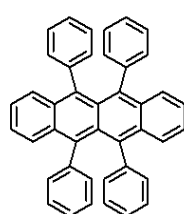
AB-7



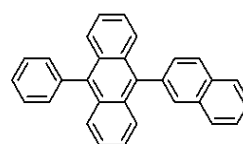
AB-6



AZ-1

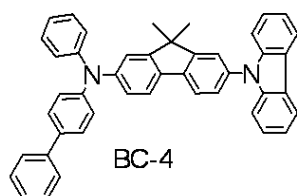


AZ-2



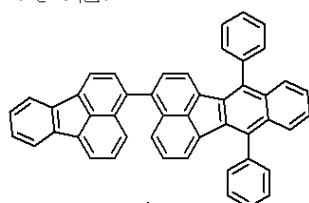
AZ-3

<化合物Bとして用いた化合物>

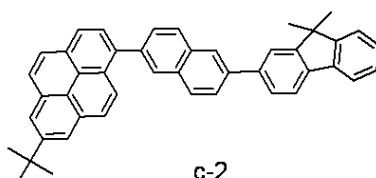


BC-4

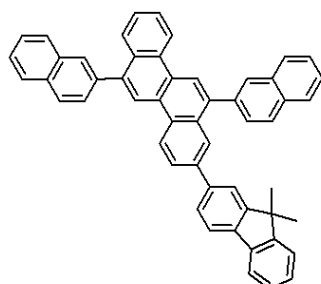
<その他>



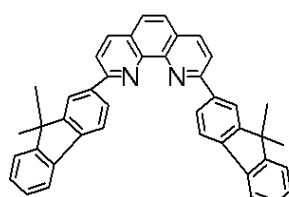
c-1



c-2



c-3



c-4

【表 1】

	構成材料	膜厚[nm]
陽極	ITO	—
有機化合物層	化合物A 化合物B(BC-4) (化合物A:化合物B=2:1(重量比))	30
発光層	c-2(ホスト) c-1(ゲスト) (ホスト:ゲスト=95:5(重量比))	20
正孔ブロッキング層	c-3	40
電子輸送層	c-4	20
第1電極層(陰極)	LiF	0.5
第2電極層(陰極)	Al	1500

10

【0054】

作製した有機発光素子について、 2000 cd/m^2 の条件下で発光させたときの発光効率、外部量子収率及び色度について評価した。

【0055】

ところで、化合物Aに含まれる SP^3 炭素原子の相対比率(%)は、以下の式で求めることができる。尚、小数点以下は四捨五入するものとする。

20

[化合物A中の SP^3 炭素原子の個数] ÷ [化合物A中の SP^2 炭素原子の個数] × 100

【0056】

下記表2に、発光効率、外部量子収率及び色度の評価結果を示す。

【0057】

【表 2】

化合物Aとして 用いた化合物	SP^3 炭素原子 [相対比率、%]	発光効率 [cd/A]	外部量子収率 [%]	色度 [x, y]
AC-6	109	13.0	7.0	(0.15, 0.26)
AA-1	92	11.7	6.5	(0.16, 0.26)
AA-7	87	11.3	6.3	(0.16, 0.26)
AA-9	65	11.1	6.2	(0.16, 0.26)
AB-3	53	12.3	6.9	(0.16, 0.25)
AB-7	44	11.5	6.6	(0.15, 0.25)
AB-6	42	12.1	6.8	(0.15, 0.25)
AZ-1	25	8.8	4.9	(0.16, 0.24)
AZ-2	0	— (注1)		
AZ-3	0	7.8	4.3	(0.15, 0.25)
(なし)	—	8.3	4.7	(0.15, 0.25)

30

[注1]AZ-2が発光

40

【0058】

表2より、化合物Aとして使用された有機化合物のうち、 SP^3 炭素原子の相対比率(%)が40%以上である化合物を、正孔輸送性の化合物である化合物Bと共に陽極と発光層との間に設けられる有機化合物層に含ませることで、発光効率が高くなることがわかる。

【0059】

この結果は、以下に説明する作用効果が発現していることによるものと考えられる。

【0060】

50

一般に、 SP^3 炭素原子は、下記(1a-1)及び(1a-2)に示される特徴を有する。

(1a-1) 膜中で分子間スタッキングを抑え、バンドギャップの収縮を抑える特徴
(1a-2) SP^3 炭素原子で構成される置換基(アルキル基、脂肪族縮合多環基等)が可視領域に吸収をもたないという特徴

一方、 SP^2 炭素原子は、一般的に下記(1b-1)及び(1b-2)に示される特徴を有する。

(1b-1) 一般的に、可視領域に吸収を有するという特徴(その芳香環同士の連結数が多くなる又は縮環の個数が増えることにより、吸収の領域が長波長側にシフトする。)

(1b-2) 薄膜状態において、希薄溶液状態と比較してバンドギャップが狭くなるバンドギャップの収縮効果が起きるという特徴

尚、特徴(1b-2)は、堅固な平面構造及び SP^2 混成軌道上の電子系により非局在化した電子が豊富に存在することで、スタッキング相互作用が強くなるために生じる特徴である。また特徴(1b-2)は、電子の数が増えるに従ってより顕著になる。

【0061】

以上を考慮すると、化合物Aに含まれる SP^2 炭素原子の個数に対する化合物Aにおいて SP^3 炭素原子(の個数)の相対比率(%)を高くすることにより、3級アミン構造を含む化合物である化合物Bのバンドギャップの収縮を防ぐ効果につながる。これにより発光層からの励起子や電子の拡散・注入を抑えることができるので、結果として発光効率が向上する。

【0062】

これに対して、 SP^3 炭素原子(の個数)の相対比率が少ない(40%未満)あるいはゼロである化合物、例えば、化合物AZ-2を化合物Aとして用いると、バンドギャップがより狭くなるため、AZ-2の発光が観測される。このためドーパントとして発光層に含まれる化合物c-1由来の発光スペクトルは得られない。また化合物AZ-1、AZ-3をそれぞれ用いた場合では、化合物Aとなる化合物が含まれていない有機発光素子とほぼ同程度の効率であり、改善が見られない。

【0063】

以上説明した事項は、化合物Aに該当する有機化合物が有するアルキル基等に含まれる SP^3 炭素原子を一定量以上含ませる、言い換えれば、分子中の SP^3 炭素原子からなる置換基(アルキル基等)の占める割合が多いほど、発光効率が高くなると言える。また表2より、 SP^3 炭素原子の相対比率(%)が40%以上であれば発光効率の向上の効果が現れている。本発明において、化合物Aに含まれる SP^2 炭素原子の個数に対する化合物Aに含まれる SP^3 炭素原子の個数の相対比率(%)は、好ましくは80%以上である。

【0064】

ただし化合物Aとして、 SP^3 炭素原子のみからなる化合物を用いると、キャリア輸送を阻害するため好ましくない。このため、ある程度の SP^2 炭素原子を化合物中に含ませることでキャリア輸送機能を担保する必要がある。

【0065】

また化合物Aは、 SP^3 炭素原子の相対比率(%)が40%以上であれば構造や置換基は特に限定されないが、化合物Bと相互作用を起こしにくい方が好ましいため、窒素原子や金属原子を含まない構造が好ましい。

【0066】

また一般式[1]中の Ar_1 及び Z_1 、並びに一般式[2]中の Ar_2 及び Ar_3 は、それぞれバンドギャップが広い構造であることがより好ましい。具体的には、フェニル基、フルオレニル基、ピフェニル基、ナフチル基等のアリール基が含まれる構造である。励起子の移動、電子の注入を抑えることに効果があるからである。

【0067】

また有機化合物層に含まれる化合物Aと化合物Bとの混合比率は、特に限定されない。ただ化合物Aの比率が高いほど、発光効率が高くなり、化合物Bの比率が高いほど、駆動

10

20

30

40

50

電圧が低くなると考えられる。このため、高効率、低電圧駆動の両立を図る場合、有機化合物層中の化合物 B の比率（混合比率、質量基準 w t %）は、化合物 A 及び化合物 B の合計を基準として、好ましくは、10 w t % 乃至 90 w t % である。より好ましくは、20 w t % 乃至 70 w t % である。

【0068】

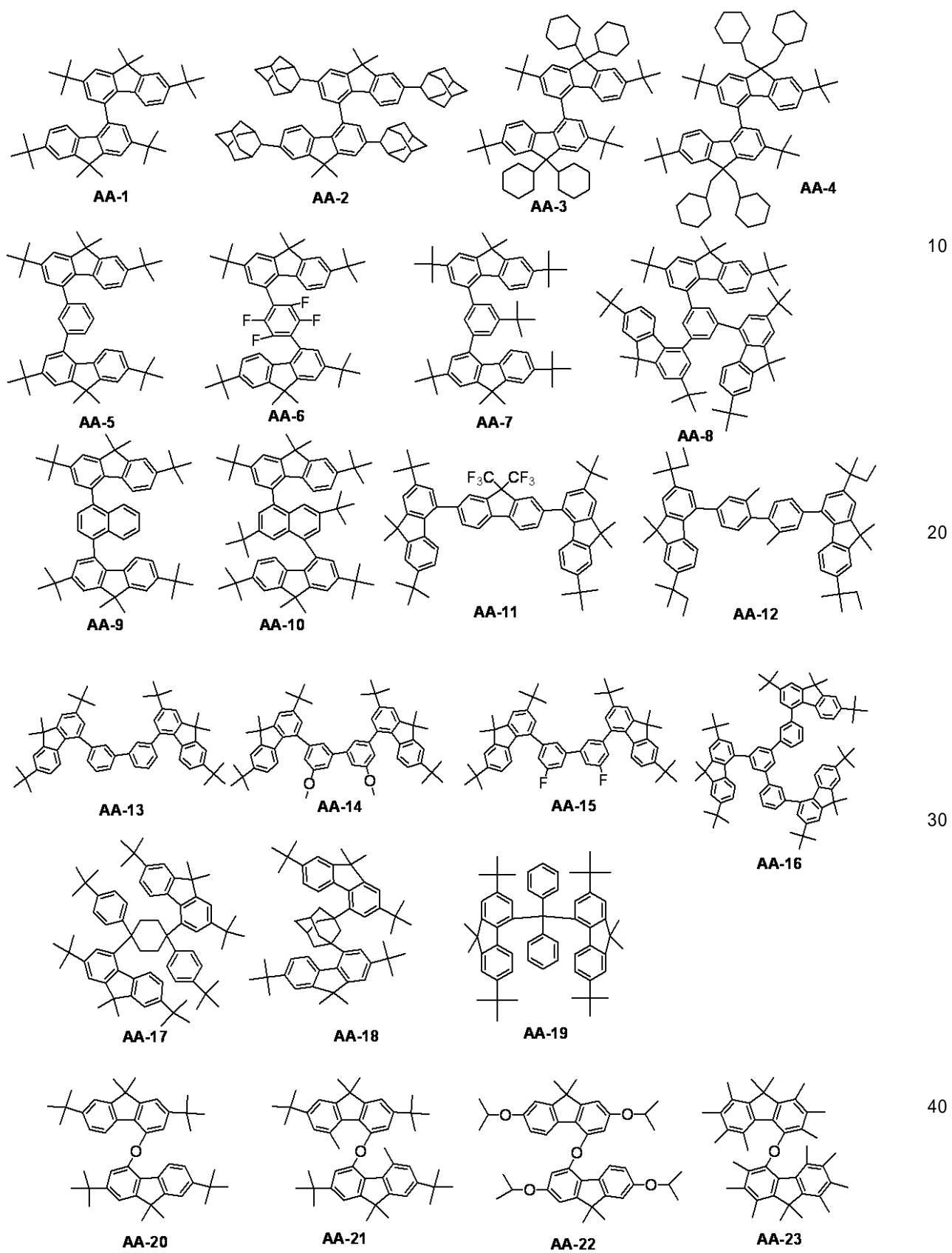
尚、本発明においては、化合物 A、化合物 B 以外に、キャリア注入を促進させるようなアシスト材料を有機化合物層に含ませてもよい。

【0069】

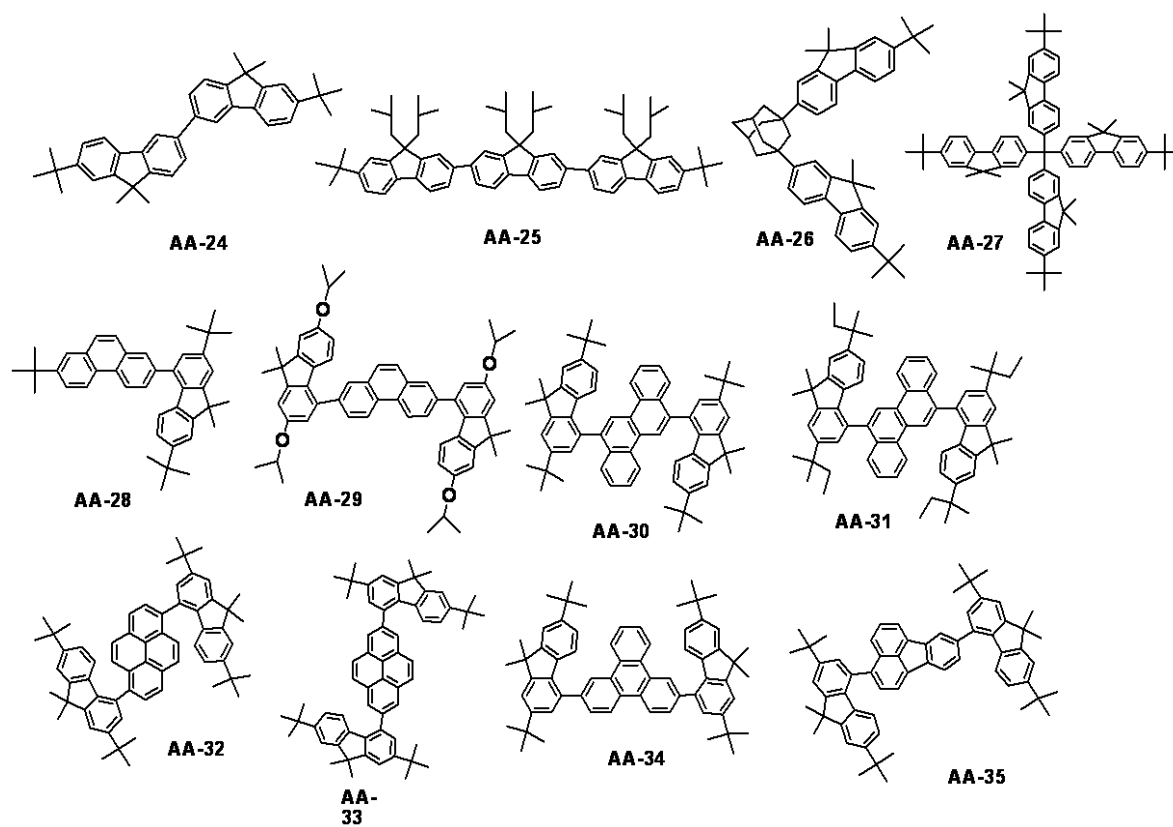
以下に、化合物 A の具体例を示す。

【0070】

【化 6】

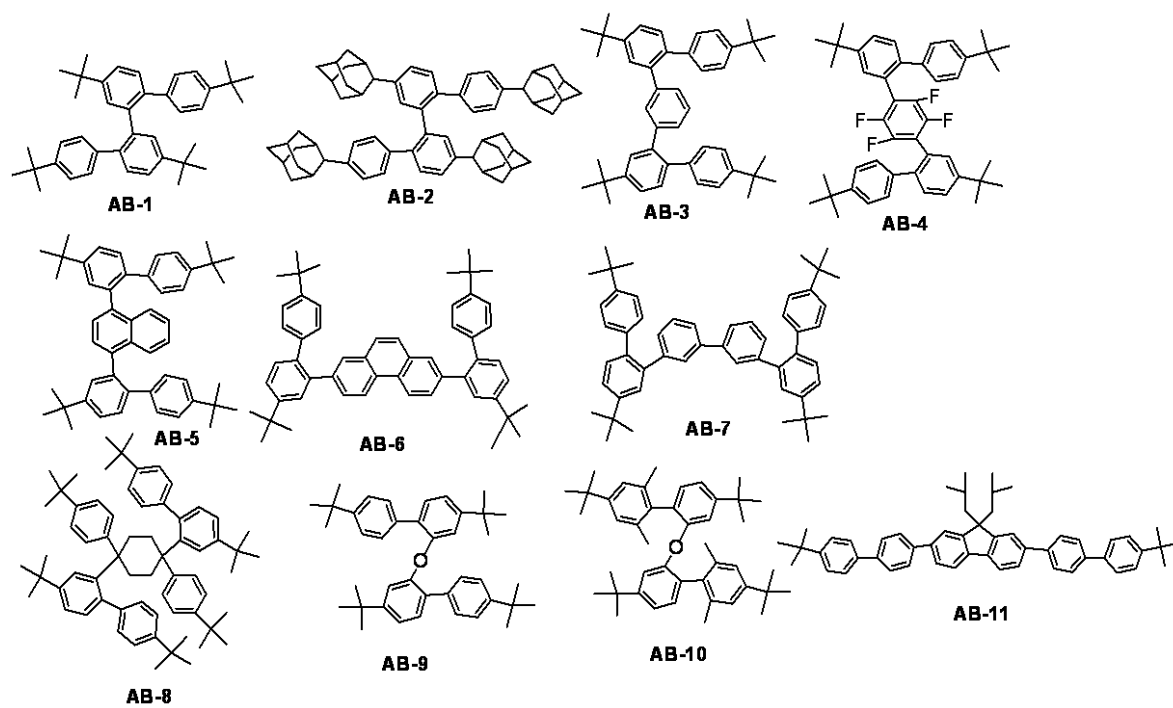


【化 7】



【 0 0 7 2 】

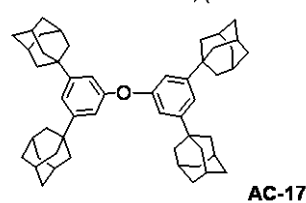
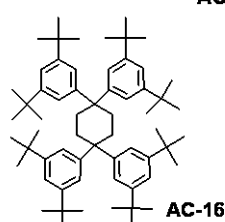
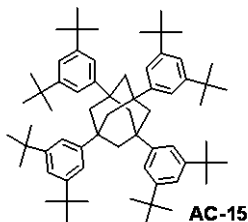
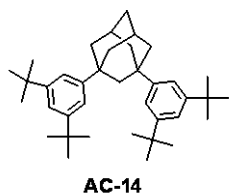
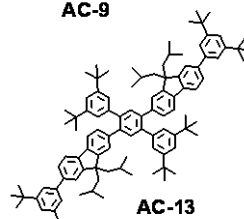
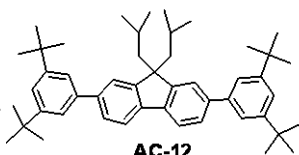
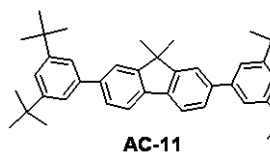
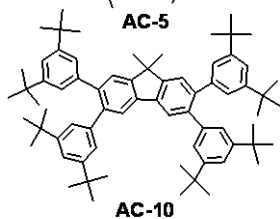
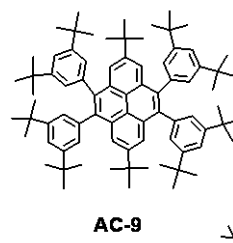
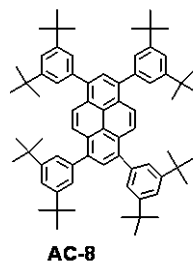
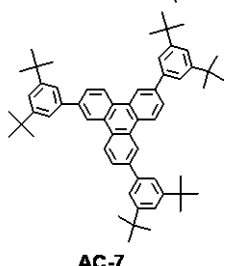
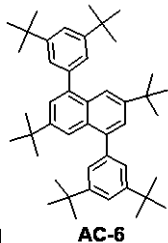
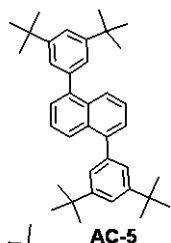
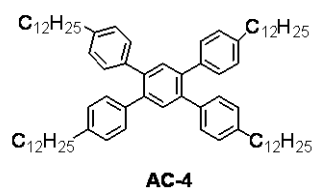
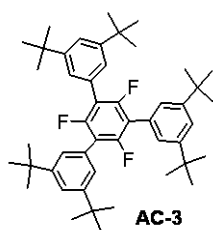
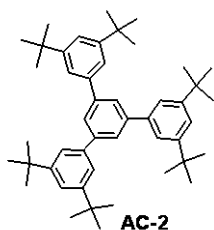
【化 8】



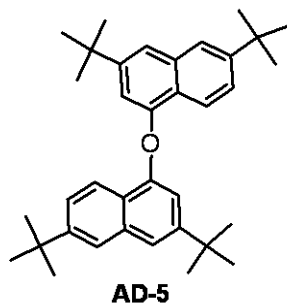
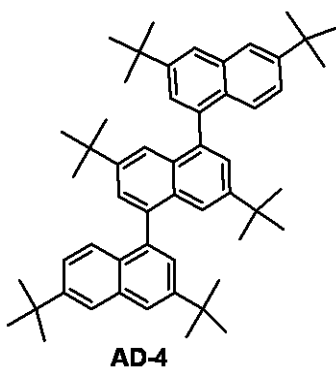
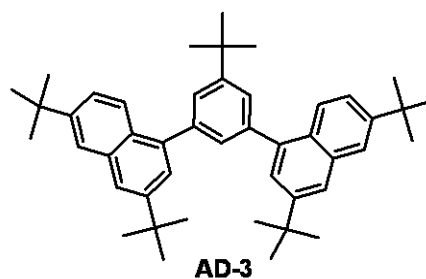
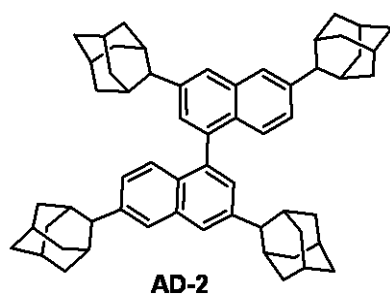
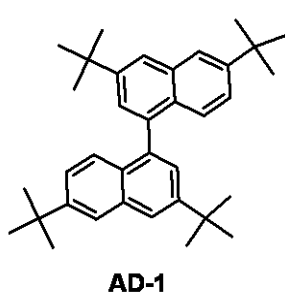
【 0 0 7 3 】



AC-1

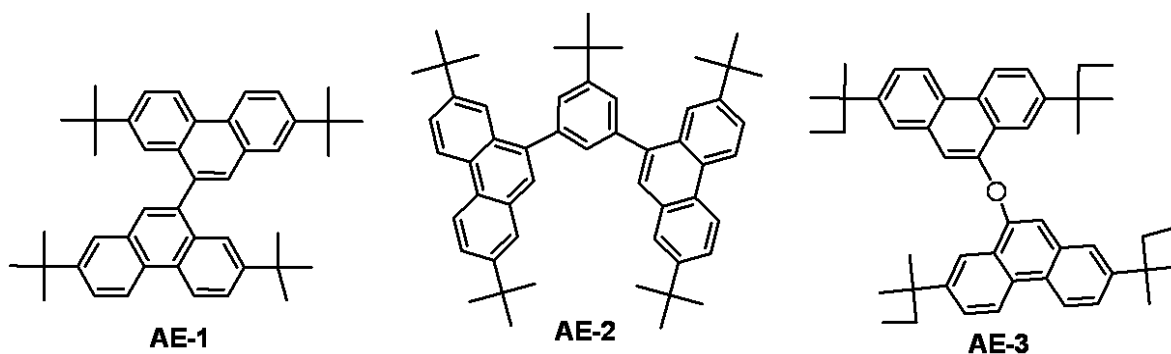


【化 1 0】



【 0 0 7 5 】

【化 1 1】



10

【0076】

列挙されている化合物のうち、例示化合物 AA - 1 乃至 AA - 35 は、バンドギャップが広く、ガラス転移温度が高いという特徴を有する化合物である。

【0077】

列挙されている化合物のうち、例示化合物 AB - 1 乃至 AB - 11 は、 Ar_1 又は Ar_2 及び Ar_3 がピフェニル基である化合物群である。この化合物群に属する化合物は、ピフェニル骨格中に回転軸があるため、バンドギャップが広く、昇華温度が低い。

【0078】

列挙されている化合物のうち、例示化合物 AC - 1 乃至 AC - 17 は、 Ar_1 又は Ar_2 及び Ar_3 がフェニル基である化合物群である。ここでフェニル基のバンドギャップは広い
20 ため、この化合物群においては、バンドギャップが広い化合物が設計し易い。また、分子量が小さくできるため、昇華温度を低くすることができる。

【0079】

列挙されている化合物のうち、例示化合物 AD - 1 乃至 AD - 5 は、 Ar_1 又は Ar_2 及び Ar_3 がナフチル基である化合物群である。この化合物群に属する化合物は、バンドギャップが広くガラス転移温度が高いという特徴を有する。

【0080】

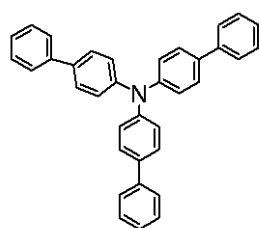
列挙されている化合物のうち、例示化合物 AE - 1 乃至 AE - 3 は、 Ar_1 又は Ar_2 及び Ar_3 がフェナンスリル基である化合物群である。この化合物群に属する化合物は、分
30 子量が大いもののバンドギャップが広くガラス転移温度が高いという特徴を有する。

【0081】

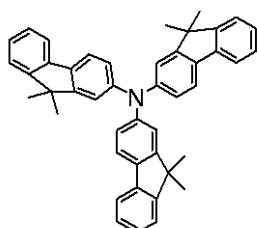
次に、化合物 B の具体例を示す。

【0082】

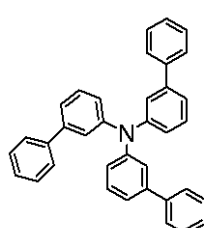
【化 1 2】



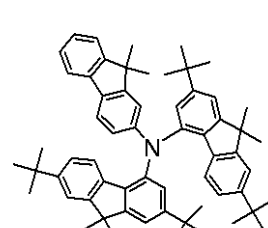
BA-1



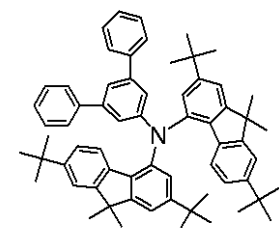
BA-2



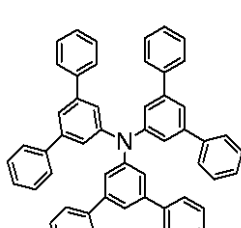
BA-3



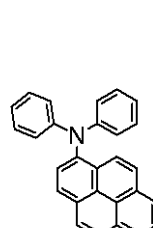
BA-4



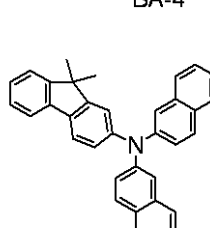
BA-5



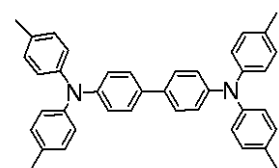
BA-6



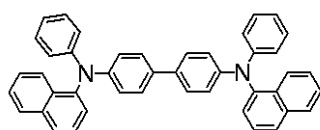
BA-7



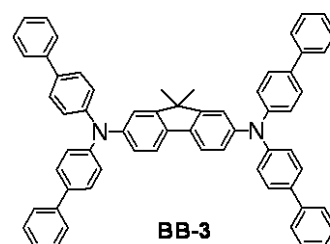
BA-8



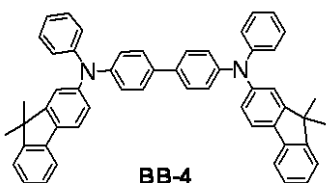
BB-1



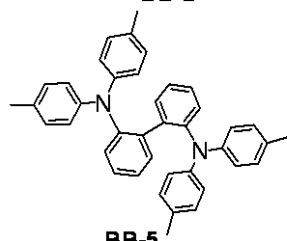
BB-2



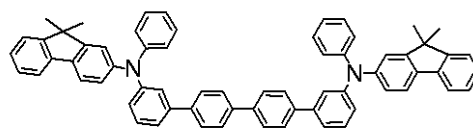
BB-3



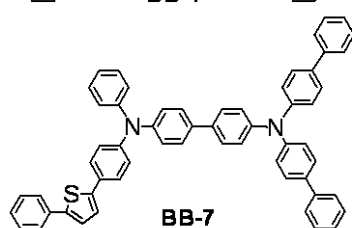
BB-4



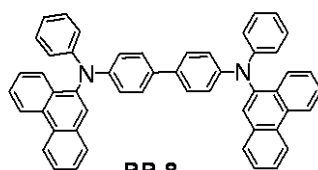
BB-5



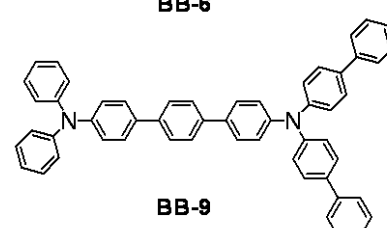
BB-6



BB-7



BB-8



BB-9

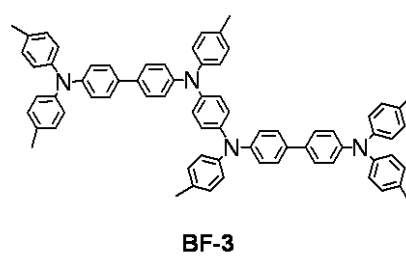
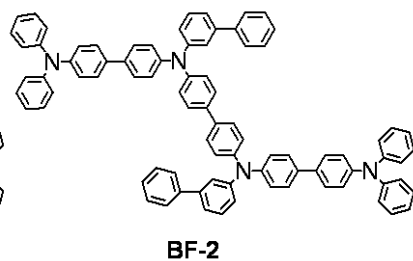
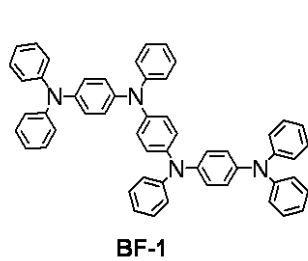
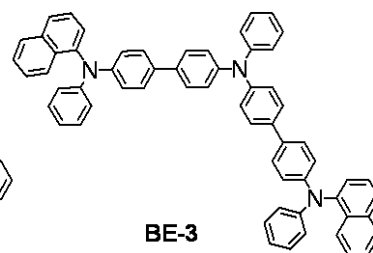
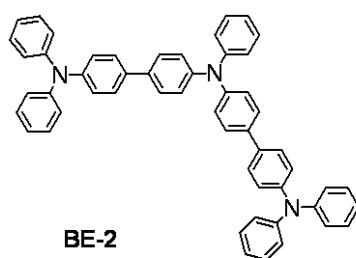
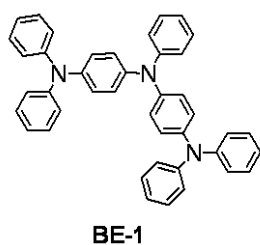
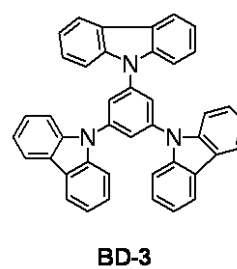
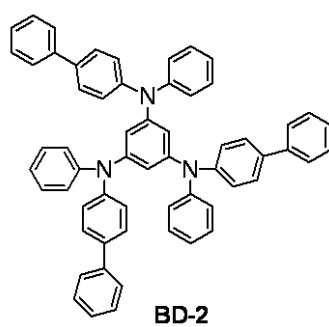
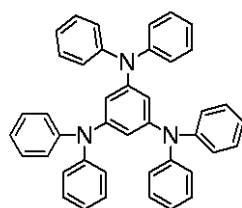
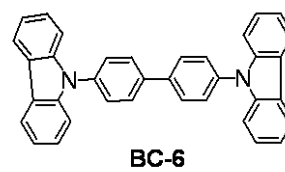
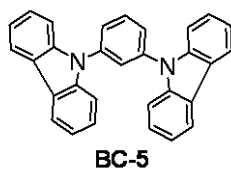
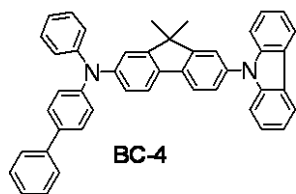
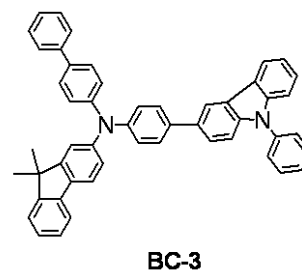
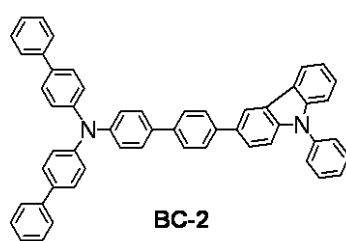
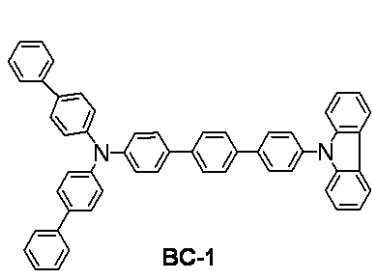
【 0 0 8 3 】

10

20

30

【化 1 3】



【 0 0 8 4 】

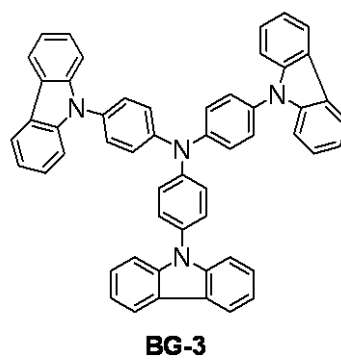
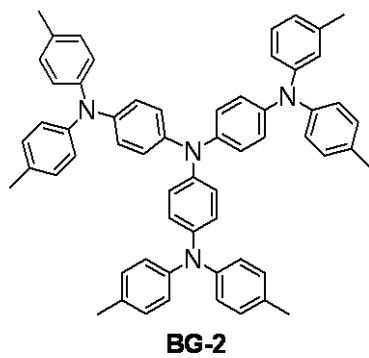
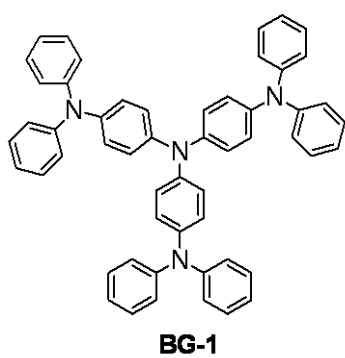
10

20

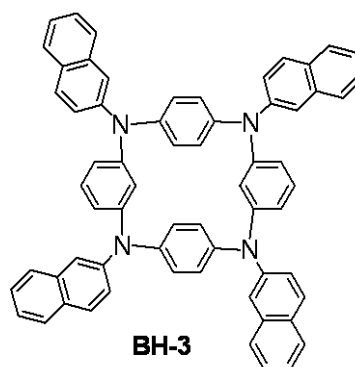
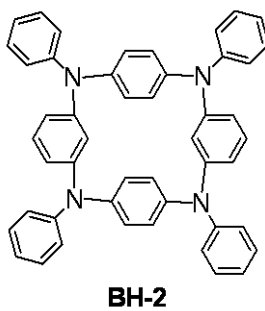
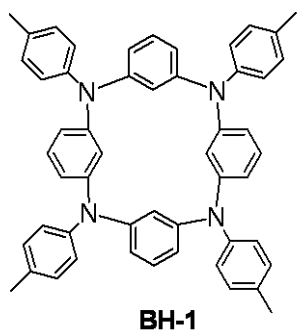
30

40

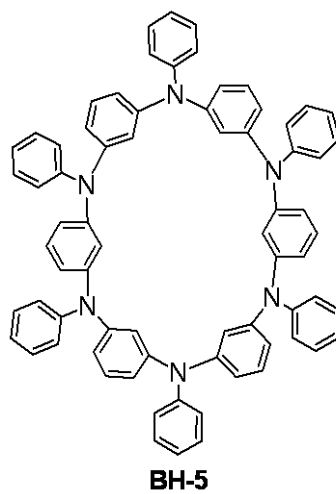
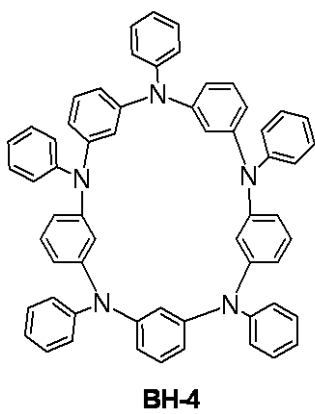
【化 1 4】



10



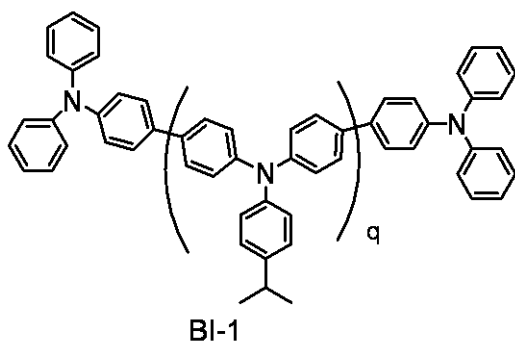
20



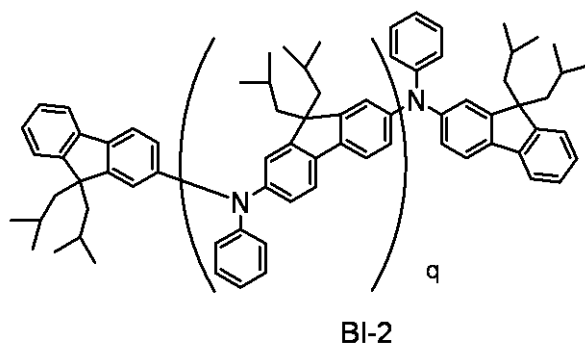
30

【 0 0 8 5 】

【化 1 5】

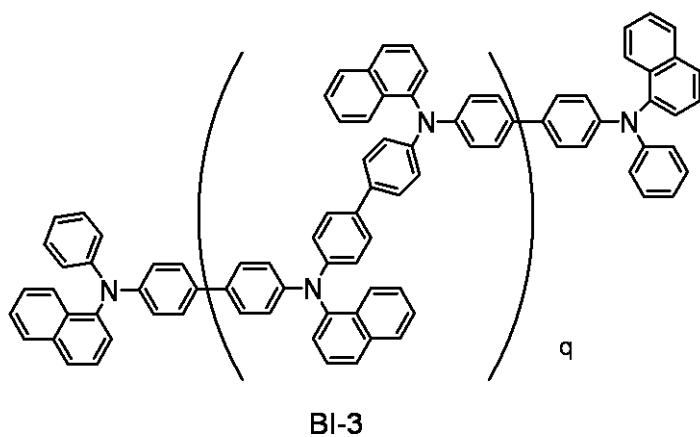


(q は 1 以上の整数を表す。)



(q は 1 以上の整数を表す。)

10



(q は 1 以上の整数を表す。)

20

【 0 0 8 6】

以上、本発明の有機発光素子、特に、主要な構成材料である化合物 A (窒素原子及び金属原子を含まない有機化合物)、並びに化合物 B (3 級アミン構造を有する化合物) について説明した。ただし、本発明の有機発光素子の構成材料は、上述した化合物 A、化合物 B に限定されるものではない。尚、本発明の有機発光素子に含まれる他の構成材料については、別途説明する。

30

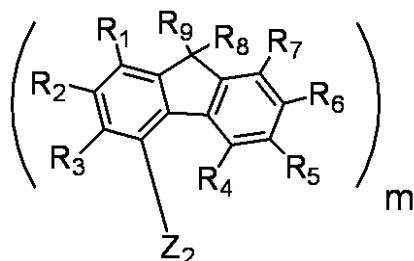
【 0 0 8 7】

(2) 有機化合物

次に、本発明の有機化合物について説明する。本発明の有機化合物は、下記一般式 [3] 又は [4] に示される化合物である。

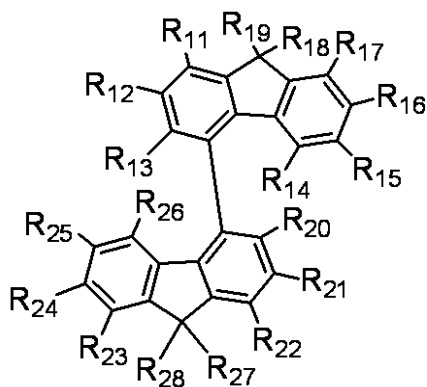
【 0 0 8 8】

【化 1 6】



[3]

10



[4]

20

【 0 0 8 9 】

一般式 [3] において、 Z_2 は、ナフチル基、フルオレニル基、フェナンスリル基、トリフェニレニル基、脂肪族縮合多環基、炭素原子又は酸素原子を表す。すなわち、 Z_2 は、1価のナフチル基、フルオレニル基、フェナンスリル基、トリフェニレニル基や、これら1価の基に由来する2価乃至6価の基、脂肪族縮合多環基、炭素原子又は酸素原子を表す。尚、 Z_2 で表される置換基は、アルキル基、アルコキシ基、アリール基又はハロゲン原子をさらに有してもよい。 Z_2 は、好ましくは、アルキル基、アルコキシ基、アリール基あるいはハロゲン原子をさらに有してもよい脂肪族縮合多環基、炭素原子又は酸素原子である。

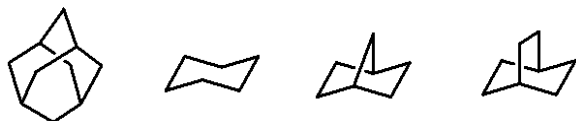
30

【 0 0 9 0 】

Z_2 で表される脂肪族縮合多環基として、下記に示される脂肪族縮合多環化合物に由来する置換基が挙げられる。

【 0 0 9 1 】

【化 1 7】



【 0 0 9 2 】

尚、 Z_2 で表される置換基は、メチル基、エチル基、ノルマルプロピル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、ターシャリーブチル基、セカンダリーブチル基、オクチル基、1 - アダマンチル基、2 - アダマンチル基、シクロヘキシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシルメチル基等のアルキル基、メトキシ基、エトキシ基、イソプロポキシ基、ノルマルプロポキシ基、セカンダリーブトキシ基、ターシャリーブトキシ基、オクトキシ基等のアルコキシ基、フェニル基、アルキル基を有するフェニル基等のアリール基又は塩素、臭素、フッ素等のハロゲン原子をさらに有してもよい。

【 0 0 9 3 】

一般式 [3] において、 R_1 乃至 R_9 は、それぞれ水素原子、アルキル基、アルコキシ基又はハロゲン原子を表す。ただし R_1 乃至 R_9 のいずれかで表される置換基のうち、少なく

40

50

とも2つはアルキル基である。

【0094】

一般式[3]において、 m は、1乃至6の整数を表す。ただし、 Z_2 が炭素原子である場合、 m は、1乃至4であり、 Z_2 が酸素原子である場合、 m は、1又は2である。 m が2以上である場合、複数ある括弧内の構造は、それぞれ同じであってもよいし異なっているてもよい。

【0095】

m は、好ましくは2以上である。結晶性が低減し、膜性が良くなるためである。

【0096】

一般式[4]において、 R_{11} 乃至 R_{28} は、それぞれ水素原子、アルキル基、アルコキシ基又はハロゲン原子を表す。ただし R_{11} 乃至 R_{28} のいずれかで表される置換基のうち、少なくとも2つはアルキル基である。

10

【0097】

R_1 乃至 R_9 及び R_{11} 乃至 R_{28} で表されるアルキル基として、好ましくは、炭素数が10以下のアルキル基である。例えば、メチル基、エチル基、ノルマルプロピル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、ターシャリーブチル基、セカンダリーブチル基、オクチル基、イソアミル基、1-アダマンチル基、2-アダマンチル基、シクロヘキシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシルメチル基等が挙げられる。これらの置換基を導入することで、化合物自体の熱安定性がよくなる。またこれらの置換基を導入することで、膜にしたときの分子間会合を防げるため、膜の結晶化を抑制し、長寿命な有機発光素子を提供することができる。より好ましくは、イソプロピル基、ターシャリーブチル基、イソアミル基、アダマンチル基、シクロヘキシル基、シクロペンチル基、シクロヘキシルメチル基等の分岐型アルキル基である。これらの置換基のいずれかを導入することで、化合物自体の熱安定性がより高くなるからである。

20

【0098】

R_1 乃至 R_9 及び R_{11} 乃至 R_{28} で表されるアルコキシ基として、好ましくは、炭素数が10以下のアルコキシ基である。例えば、メトキシ基、エトキシ基、イソプロポキシ基、ノルマルプロポキシ基、セカンダリーブトキシ基、ターシャリーブトキシ基、オクトキシ基等が挙げられる。より好ましくは、イソプロポキシ基、セカンダリーブトキシ基、ターシャリーブトキシ基等の分岐型アルキルが導入されているアルコキシ基である。

30

【0099】

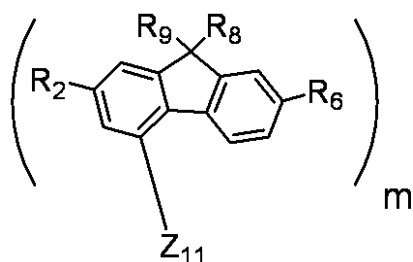
R_1 乃至 R_9 及び R_{11} 乃至 R_{28} で表されるハロゲン原子として、例えば、塩素、臭素、フッ素等が挙げられる。好ましくはフッ素である。各分子に含まれるフルオレン骨格同士の会合を防ぐ効果が大きいからである。

【0100】

本発明において、一般式[3]の有機化合物は、好ましくは、下記一般式[5]に示される有機化合物である。また一般式[4]に示される有機化合物として、好ましくは、一般式[6]に示される有機化合物である。

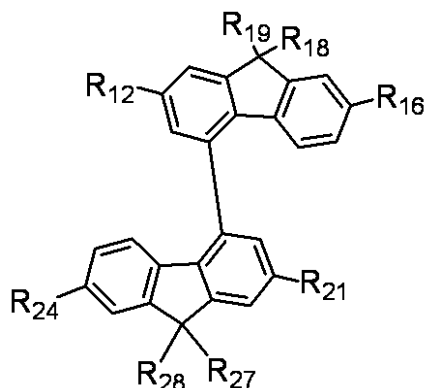
【0101】

【化 18】



[5]

10



[6]

20

【0102】

一般式 [5] において、 Z_{11} は、ナフチル基、フルオレニル基、フェナンスリル基、トリフェニレニル基、脂肪族縮合多環基、炭素原子又は酸素原子を表す。尚、 Z_{11} で表される置換基は、アルキル基、アルコキシ基、アリール基又はハロゲン原子をさらに有してもよい。 Z_{11} は、好ましくは、アルキル基、アルコキシ基、アリール基あるいはハロゲン原子をさらに有してもよい、脂肪族縮合多環基、炭素原子又は酸素原子である。

【0103】

Z_{11} で表される脂肪族縮合多環基の具体例は、一般式 [3] 中の Z_2 で表される脂肪族縮合多環基の具体例と同様である。また Z_{11} で表される置換基がさらに有してもよいアルキル基、アルコキシ基、アリール基又はハロゲン原子の具体例は、一般式 [3] 中の Z_2 で表される置換基がさらに有してもよいアルキル基、アルコキシ基アリール基又はハロゲン原子の具体例と同様である。

30

【0104】

一般式 [5] において、 m は、1 乃至 6 の整数を表す。ただし、 Z_{11} が炭素原子である場合、 m は、1 乃至 4 であり、 Z_{11} が酸素原子である場合、 m は、1 又は 2 である。 m が 2 以上である場合、複数ある括弧内の構造は、それぞれ同じであってもよいし異なってもよい。

【0105】

R_2 、 R_6 、 R_8 、 R_9 、 R_{12} 、 R_{16} 、 R_{18} 、 R_{19} 、 R_{21} 、 R_{24} 、 R_{27} 及び R_{28} は、それぞれアルキル基又はアルコキシ基を表し、それぞれ同じでも異なってもよい。本発明において、一般式 [5] 中の R_2 、 R_6 、 R_8 及び R_9 、並びに一般式 [6] 中の R_{12} 、 R_{16} 、 R_{18} 、 R_{19} 、 R_{21} 、 R_{24} 、 R_{27} 及び R_{28} は、それぞれアルキル基又はアルコキシ基であるのが好ましい。その理由は、フルオレン骨格の 2 位、7 位及び 9 位のいずれかにアルキル基又はアルコキシ基が置換することで、分子間のフルオレン骨格同士の会合確実に防げるからである。つまり、膜にしたときに分子間会合が生じると、希薄溶液状態と比較してバンドギャップが長波長化するが、一般式 [3] 及び [4] の有機化合物は、膜にしたとしても分子間会合が抑制されるので、バンドギャップの長波長化を防ぐことができる。

40

【0106】

一般式 [3] 乃至 [6] の有機化合物は、いずれも以下に説明する特徴がある。

50

(i) バンドギャップが広く、希薄溶液中の吸収スペクトルの第一ピーク値（最長波長側のピーク値）は 4 0 0 n m 未満であること

(i i) T_1 （最低励起三重項状態）が高く、低温希薄溶液中の燐光発光スペクトルの第一ピーク値（最短波長側のピーク値）は 5 2 0 n m 未満であること

【 0 1 0 7 】

本発明の有機化合物において、母骨格であるフルオレン骨格は、後で説明するように、希薄溶液状態における吸収スペクトルの第一ピーク値が 3 0 3 n m であり、バンドギャップが広い骨格である。また一般式 [3] の有機化合物は、フルオレン骨格の 4 位の炭素原子に置換基 Z_2 が置換されている化合物であるが、フルオレン骨格の 4 位に置換基を導入すると立体障害の大きくなる。そうすると、置換基 Z_2 とフルオレン骨格との共役は切れるため、化合物そのもののバンドギャップは、 Z_2 及びフルオレン骨格のうちバンドギャップが狭い構造に由来する。

10

【 0 1 0 8 】

ところで、 Z_2 は、置換基（アルキル基、アルコキシ基、アリール基、ハロゲン原子）を有してもよい 2 価以上の芳香族炭化水素基、脂肪族縮合多環基、炭素原子又は酸素原子である。特に、 Z_2 が芳香族炭化水素基である場合は、希薄溶液状態で希薄溶液中の吸収スペクトルの第一ピーク値が 4 0 0 n m 未満のワイドバンドギャップを有する芳香族炭化水素化合物から選ばれる。

【 0 1 0 9 】

ここで、下記表 3 より、例えば、トリフェニレンは 3 3 6 n m、フェナンスレンは 3 5 2 n m である。

20

【 0 1 1 0 】

【表 3】

化合物	吸収第一ピーク波長 [nm]	T_1 [nm]
c-11 (トリフェニレン)	336	435
c-12 (フェナントレン)	352	462
c-13 (フルオレン)	303	429
c-21 (フルオランテン)	362	540
c-22 (ベンゾフルオランテン)	405	566

30

【 0 1 1 1 】

以上より、本発明の有機化合物は、バンドギャップが広く、希薄溶液中の吸収スペクトルの第一ピーク値が 4 0 0 n m 以内で維持される。また、一般式 [3] の有機化合物は、複数あるフルオレン骨格のいずれもが Z_2 との結合手が 4 位である構造である。このため、希薄溶液中の吸収スペクトルの第一ピーク値は 4 0 0 n m 未満で維持される。

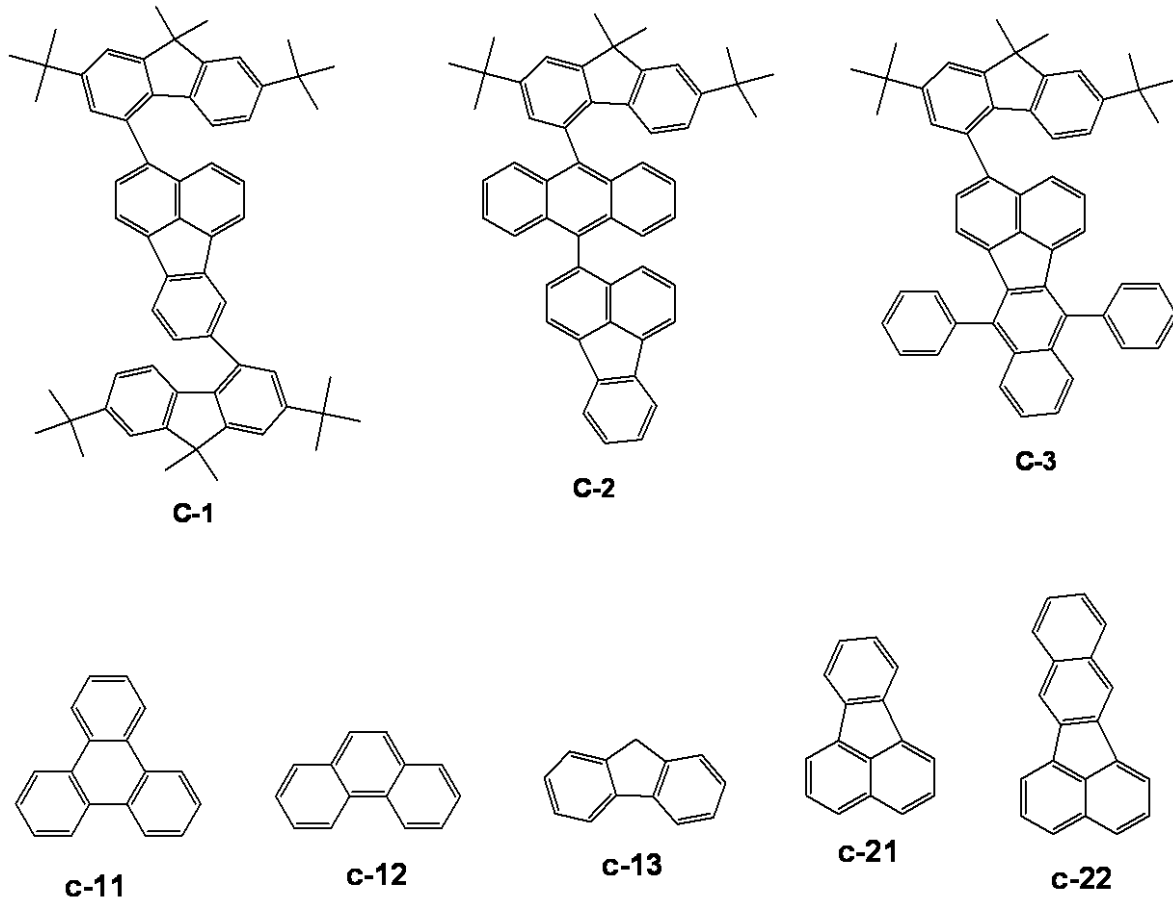
【 0 1 1 2 】

ここで希薄溶液中の吸収スペクトルの第一ピーク値という観点から、本発明の有機化合物と、下記に列挙する特許文献 3、4 に係る有機化合物（化合物 C - 1 乃至 C - 3）とを比較する。

40

【 0 1 1 3 】

【化 19】



【0114】

上記化合物 C - 1 乃至 C - 3 は、化合物中にフルオランテン骨格やベンゾフルオランテン骨格を有しているが、フルオランテン及びベンゾフルオランテンはバンドギャップが狭いため、希薄溶液中の吸収スペクトルの第一ピーク値は 400 nm 以上である。例えば、化合物 C - 1 は 405 nm である。

【0115】

以上説明したバンドギャップに関する傾向は、 T_1 についても当てはまる。

【0116】

本発明の有機化合物の母骨格であるフルオレンは、低温希薄溶液中の燐光発光スペクトルの第一ピーク値は 429 nm である。また Z_2 で表される (2 価以上の) 芳香族炭化水素基は、いずれも低温希薄溶液中の燐光発光スペクトルの第一ピーク値が 520 nm 未満の高い T_1 を有する骨格から選ばれている。

【0117】

以上より、本発明の有機化合物の T_1 は高く、低温希薄溶液中の燐光発光スペクトルの第一ピーク値は 520 nm 以内で維持される。一方、化合物 C - 1、C - 2 及び C - 3 は、いずれも Z_2 で表される (2 価以上の) 芳香族炭化水素基よりも低い T_1 を有する骨格 (フルオランテン骨格、ベンゾフルオランテン骨格) を有する。このため、低温希薄溶液中の燐光発光スペクトルの第一ピーク値が 520 nm 以上である。例えば、フルオランテンでは 540 nm、ベンゾフルオランテンでは 566 nm である。ちなみに、フルオランテン骨格を有する化合物 C - 1 の T_1 は、557 nm である。

【0118】

ここでトルエン希薄溶液での吸収スペクトルにおける吸収第一ピーク波長 (長波長側第一ピーク) 及びトルエン希薄溶液での 77 K での燐光発光ピーク波長を、下記表 4 に示す。

【0119】

10

20

30

40

50

【表 4】

化合物	吸収第一ピーク波長 (nm)	T ₁ (nm)
例示化合物AA-1	308	444
例示化合物AA-9	308	505
例示化合物AA-20	303	443
化合物c-1	405	557
化合物c-11	336	435
化合物c-12	352	462
化合物c-13	303	429
化合物c-21	362	540
化合物c-22	405	566

(注1)トルエン溶液(1×10^{-6} mol/l)の最長波長側のピーク波長より吸収第一ピーク波長を定義する。尚、測定にあたっては、日立製分光光度計U-3010を用いている。

(注2)トルエン溶液(1×10^{-4} mol/l)を77Kに冷却し、励起波長320nmにて燐光発光成分を測定し、最短波長側のピーク波長をT₁とする。尚、測定にあたっては、日立製分光光度計U-3010を用いている。

10

【0120】

ところで、一般式[3]及び[4]の有機化合物は、フルオレン骨格の4位において隣接する置換基と結合しているため、分子全体の構造が非平面である。この特徴を有することで、本発明の有機化合物は、薄膜状態にすると、結晶化しにくく、かつ安定なアモルファス膜になる。またこの特徴を有することで、分子間スタッキングが起こりにくいことから、エキサイマーの発生を抑えることもできる。

20

【0121】

以上の特徴から、本発明の有機化合物は、有機発光素子の構成材料、具体的には、発光層に含まれるホストとしても有用である。また本発明の有機化合物は、結晶化しにくく安定なアモルファス膜が形成できることから、素子耐久性が高い有機発光素子を提供することができる。

【0122】

また、広いバンドギャップと520nm未満のT₁を持つことから、ホストの中でも青色蛍光発光材料や青又は緑の燐光発光材料に対するホストとして用いると、発光ドーパント由来の発光を出力させることができる。ここで広いバンドギャップと520nm未満のT₁を有するという特徴は発光層からの励起子の拡散を抑える効果が大きく、正孔輸送層や電子輸送層といった輸送層、電子ブロッキング層や正孔ブロッキング層といった電荷をブロッキングする層としても有用である。

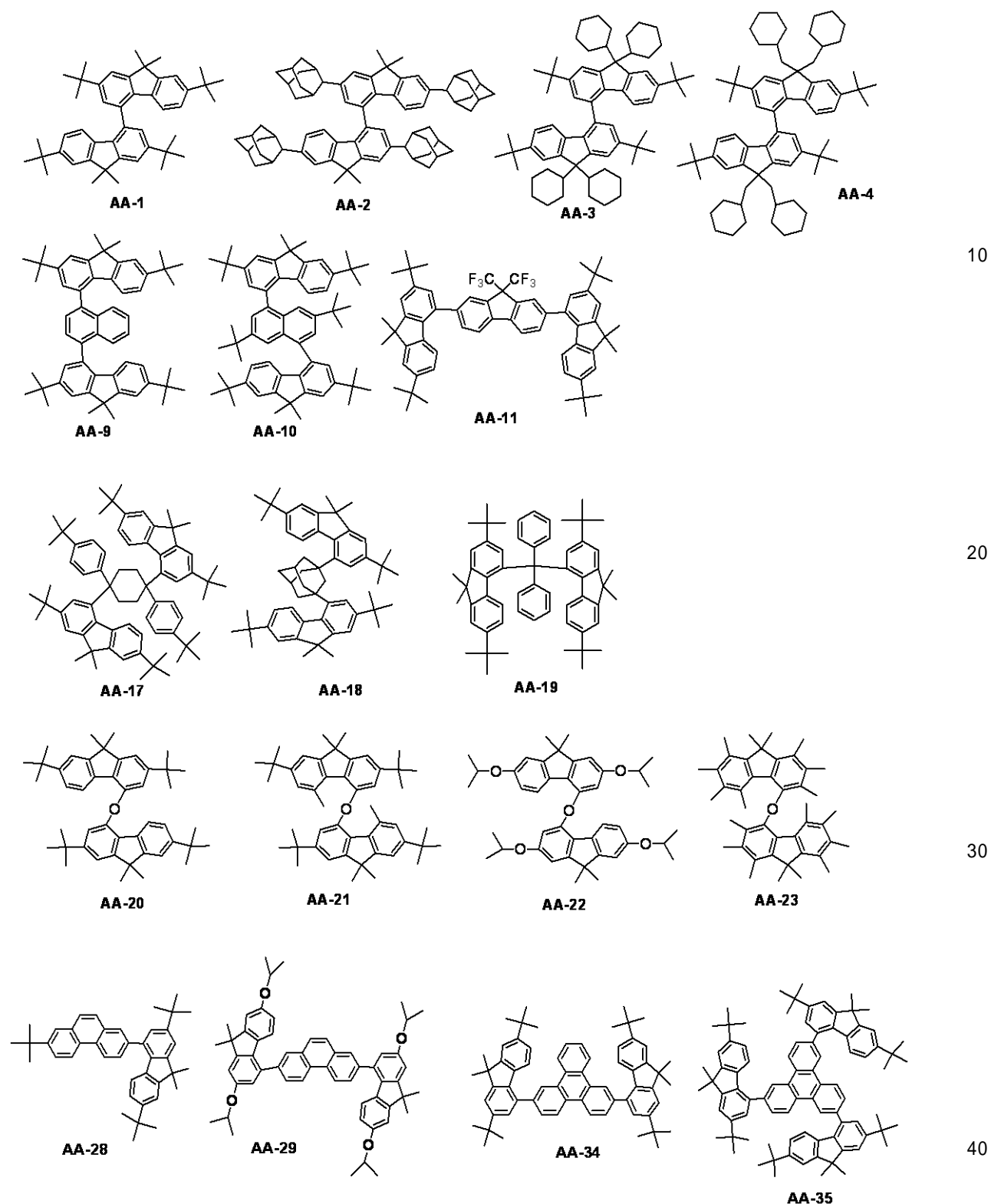
30

【0123】

以下に、本発明の有機化合物の具体例を列挙する。

【0124】

【化 20】



【0125】

列挙されている化合物のうち、例示化合物 AA - 1 乃至 AA - 4 は、一般式 [4] の有機化合物に該当する化合物群である。これら化合物は分子量が小さいため、昇華性が高く、低温で昇華するため、真空蒸着時の蒸着スピードが速い。

【0126】

列挙されている化合物のうち、例示化合物 AA - 9 乃至 AA - 11 は、一般式 [3] の有機化合物に該当する化合物群であって、Z2 が、ナフチル基又はフルオレニル基である化合物群である。ナフチル基及びフルオレニル基は、いずれも T_1 が 500 nm 以下の置

換基であるため、化合物自体の T_1 が高い。このため、有機発光素子を構成する発光層に含まれるホストとして、又は電荷輸送層あるいは電荷ブロッキング層の構成材料として用いると、発光効率が向上すると考えられる。特に、緑燐光発光素子においては好ましい化合物である。

【0127】

列挙されている化合物のうち、例示化合物AA-17乃至AA-19は、一般式[3]の有機化合物に該当する化合物群であって、 Z_2 が、炭素原子又は脂肪族縮合多環基である化合物群である。この化合物群に属する化合物は、フルオレン骨格との共役が起きない構造である。そのため、バンドギャップ、 T_1 がともに高くなる。従って、青色燐光素子においては好ましい化合物である。

10

【0128】

列挙されている化合物のうち、例示化合物AA-20乃至AA-23は、一般式[3]の有機化合物に該当する化合物群であって、 Z_2 が、酸素原子である化合物群である。この化合物群に属する化合物は、酸素原子による電子供与効果があるため、イオン化ポテンシャルが低い。このため、有機発光素子を構成する発光層に含まれるホストとして、又は正孔輸送層や電子ブロッキング層の構成材料として用いると、正孔の注入が促進され、駆動電圧が低くなる。

【0129】

列挙されている化合物のうち、例示化合物AA-28乃至AA-35は、一般式[3]の有機化合物に該当する化合物群であって、 Z_2 が、3つ以上の環が縮合してなる芳香族縮合多環基である化合物群である。ここで3つ以上の環が縮合してなる芳香族縮合多環基とは、 T_1 が580nm以下でかつ、平面性が高い置換基であるが、具体的には、フェナンスリル基、トリフェニレニル基である。この化合物群に属する化合物は、 T_1 が高いため、有機発光素子を構成する発光層に含まれるホストとして、又は正孔輸送層や電子ブロッキング層の構成材料として用いると、発光効率が向上すると考えられる。特に、緑色、赤色の燐光発光素子の構成材料として用いるのが好ましい。またこの化合物群に属する化合物は、平面性が高い置換基を有することで分子間のキャリアホッピングが促進され、キャリア移動度が早いと考えられる。

20

【0130】

本発明の有機化合物は、主に、有機発光素子の構成材料として用いられるが、有機発光素子に限らず、生体内部標識やフィルターフィルムの材料として使用することができる。

30

【0131】

本発明の有機化合物を有機発光素子の構成材料として用いる場合、本発明の有機化合物を有する有機発光素子の実施形態は、大きく分けて二つあり、具体的には、下記(2A)、(2B)がある。

(2A) 陽極と陰極と、陽極と陰極との間に設けられ、少なくとも発光層と、陽極と発光層との間に設けられる有機化合物層と、を有し、この有機化合物層に3級アミン構造を有する化合物が含まれている有機発光素子。

(2B) 陽極と陰極と、陽極と陰極との間に設けられる有機化合物層と、を有する有機発光素子。

40

【0132】

本発明の有機化合物を、上記(2A)の態様の有機発光素子の構成材料として用いる場合、本発明の有機化合物は、3級アミン構造を有する化合物(「(1)有機発光素子」の項で説明した「化合物B」と共に有機化合物層に含まれる。ここで(2A)の態様の有機発光素子を構成する有機化合物層は、陽極と発光層との間に設けられる層であるため、本発明の有機化合物は、陽極と発光層との間に設けられる層、例えば、正孔輸送層、正孔注入層、電子ブロック層等に含まれる。

【0133】

ところで、上記(2B)の態様は、下記(2B-1)乃至(2B-3)に細分化することができる。

50

(2B-1) 陽極と陰極と、陽極と陰極との間に設けられる発光層と、陽極と発光層との間に設けられる有機化合物層(正孔注入輸送層)と、を有する有機発光素子。

(2B-2) 陽極と陰極と、陽極と陰極との間に設けられる発光層と、陰極と発光層との間に設けられる有機化合物層(電子注入輸送層)と、を有する有機発光素子。

(2B-3) 陽極と陰極と、陽極と陰極との間に設けられる発光層と、を有する有機発光素子((2B)でいう「有機化合物層」が発光層である有機発光素子)。

【0134】

本発明の有機化合物を、上記(2B)の態様の有機発光素子の構成材料として用いる場合、本発明の有機化合物を含む有機化合物層としては、発光層、正孔注入輸送層(正孔注入層、正孔輸送層、電子ブロック層)、電子注入輸送層(電子注入層、電子輸送層、正孔・エキシトンブロック層)等が挙げられる。また本発明の有機化合物を、上記(2B)の態様の有機発光素子の構成材料として用いる場合、本発明の有機化合物を含む層は、一層であってもよいし、複数層であってもよい。さらに本発明の有機化合物を、上記(2B)の態様の有機発光素子の構成材料として用いる場合、本発明の有機化合物を含む層は、本発明の有機化合物のみからなる層であってもよいし、本発明の有機化合物と他の化合物とが混合されている層であってもよい。

【0135】

本発明の有機化合物を有する有機発光素子の基本構成として、例えば、下記(a)乃至(e)が挙げられる。ただし、本発明は、これらに限定されるものではない。

(a) (基板/陽極/発光層/陰極)

(b) (基板/陽極/正孔輸送層/電子輸送層/陰極)

(c) (基板/陽極/正孔輸送層/発光層/電子輸送層/陰極)

(d) (基板/陽極/正孔注入層/正孔輸送層/発光層/電子輸送層/陰極)

(e) (基板/陽極/正孔輸送層/発光層/正孔・エキシトンブロッキング層/電子輸送層/陰極)

【0136】

尚、上記(a)乃至(e)の構成は、いずれも基板に近い電極が陽極である場合の構成であるが、本発明においてはこれに限定されるものではなく、基板に近い電極が陰極である場合の構成も当然に含まれる。

【0137】

(3) 有機発光素子の他の構成材料

次に、本発明の有機発光素子の他の構成材料(化合物A(本発明の有機化合物に該当する化合物を含む。)、化合物B以外の材料)について説明する。本発明の有機発光素子においては、必要に応じて従来公知の低分子系及び高分子系の材料を使用することができる。より具体的には正孔注入輸送性材料、発光アシスト材料、あるいは電子注入輸送性材料等を使用することができる。

【0138】

以下にこれらの材料例を挙げる。

【0139】

正孔注入輸送性材料としては、トリアリールアミン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、スチルベン誘導体、フタロシアニン誘導体、ポルフィリン誘導体、ポリ(ビニルカルバゾール)、ポリ(チオフェン)、その他導電性高分子が挙げられる。ただし本発明はこれらに限定されるものではない。

【0140】

主に発光機能に関わる発光材料(ゲスト)としては、トリアリールアミン誘導体、フェニレン誘導体、縮合環芳香族化合物(例えばフルオランテン誘導体、ベンゾフルオランテン誘導体、ピレン誘導体、クリセン誘導体、またそれらとジアリールアミン置換誘導体等)、スチルベン誘導体等の青、緑又は赤に発光する蛍光性発光材料、有機金属錯体(例えば有機イリジウム錯体、有機プラチナ錯体、希土類金属錯体等)等の青、緑又は赤に発光する燐光性発光材料が挙げられる。

【 0 1 4 1 】

本発明において、ゲストは、発光層全量を基準として 0 . 1 質量 % 以上 3 0 質量 % 以下であることが好ましく、 0 . 5 質量 % 以上 1 0 質量 % 以下であることがより好ましい。

【 0 1 4 2 】

発光層に含まれるホストは、発光層中の重量比率が一番高い材料である。ホストとして、例えば、トリアリールアミン誘導体、フェニレン誘導体、縮合環芳香族化合物（例えばナフタレン誘導体、フェナントレン誘導体、フルオレン誘導体、クリセン誘導体、など）、有機金属錯体（例えば、トリス（ 8 - キノリノラート）アルミニウム等の有機アルミニウム錯体、有機ベリリウム錯体、有機イリジウム錯体、有機プラチナ錯体等）およびポリ（フェニレンビニレン）誘導体、ポリ（フルオレン）誘導体、ポリ（フェニレン）誘導体、ポリ（チエニレンビニレン）誘導体、ポリ（アセチレン）誘導体等の高分子誘導体が挙げられるが、もちろんこれらに限定されるものではない。

【 0 1 4 3 】

ホストとして、より具体的には、表 5 に示される化合物群が挙げられる。

【 0 1 4 4 】

【表 5】

H1	H2	H3	H4
H5	H6	H7	H8
H9	H10	H11	H12
H13	H14	H15	H16
H17	H18	H19	H20
H21	H22	H23	H24

【 0 1 4 5 】

上記表 5 に示される化合物群以外にも、縮環化合物（例えばフルオレン誘導体、ナフタレン誘導体、アントラセン誘導体、ピレン誘導体、カルバゾール誘導体、キノキサリン誘導体、キノリン誘導体等）、トリス（8 - キノリノラート）アルミニウム等の有機アルミニウム錯体、有機亜鉛錯体、及びトリフェニルアミン誘導体、ポリ（フルオレン）誘導体、ポリ（フェニレン）誘導体等の高分子誘導体が挙げられるが、もちろんこれらに限定されるものではない。

【 0 1 4 6 】

電子注入輸送性材料としては、陰極からの電子の注入が容易で注入された電子を発光層へ輸送することができるものから任意に選ぶことができ、正孔輸送性材料の正孔移動度とのバランス等を考慮して選択される。電子注入性能及び電子輸送性能を有する材料としては、オキサジアゾール誘導体、オキサゾール誘導体、ピラジン誘導体、トリアゾール誘導体、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、有機アルミニウム錯体等が挙げられる。

10

【 0 1 4 7 】

陽極の構成材料としては仕事関数になるべく大きなものがよい。例えば、金、白金、銀、銅、ニッケル、パラジウム、コバルト、セレン、バナジウム、タンゲステン等の金属単体あるいはこれらを組み合わせた合金、酸化錫、酸化亜鉛、酸化インジウム、酸化錫インジウム（ITO）、酸化亜鉛インジウム等の金属酸化物が使用できる。またポリアニリン、ポリピロール、ポリチオフェン等の導電性ポリマーも使用できる。

【 0 1 4 8 】

20

これらの電極物質は一種類を単独で使用してもよいし、二種類以上を併用して使用してもよい。また、陽極は一層で構成されていてもよく、複数の層で構成されていてもよい。

【 0 1 4 9 】

一方、陰極の構成材料としては仕事関数の小さなものがよい。例えばリチウム等のアルカリ金属、カルシウム等のアルカリ土類金属、アルミニウム、チタニウム、マンガン、銀、鉛、クロム等の金属単体が挙げられる。あるいはこれら金属単体を組み合わせた合金も使用することができる。例えばマグネシウム - 銀、アルミニウム - リチウム、アルミニウム - マグネシウム等が使用できる。酸化錫インジウム（ITO）等の金属酸化物の利用も可能である。これらの電極物質は一種類を単独で使用してもよいし、二種類以上を併用して使用してもよい。また陰極は一層構成でもよく、多層構成でもよい。

30

【 0 1 5 0 】

本発明の有機発光素子を構成する有機化合物層（正孔注入層、正孔輸送層、電子ブロック層、発光層、正孔ブロック層、電子輸送層、電子注入層等）は、以下に示す方法により形成される。

【 0 1 5 1 】

発明の有機発光素子を構成する有機化合物層は、真空蒸着法、イオン化蒸着法、スパッタリング、プラズマ等のドライプロセスを用いることができる。またドライプロセスに代えて、有機発光素子の構成材料を適当な溶媒に溶解させて公知の塗布法（例えば、スピンコーティング、ディッピング、キャスト法、LB法、インクジェット法等）により層を形成するウェットプロセスを用いることもできる。

40

【 0 1 5 2 】

ここで真空蒸着法や溶液塗布法等によって層を形成すると、結晶化等が起こりにくく経時安定性に優れる。また塗布法で成膜する場合は、適当なバインダー樹脂と組み合わせて膜を形成することもできる。

【 0 1 5 3 】

上記バインダー樹脂としては、ポリビニルカルバゾール樹脂、ポリカーボネート樹脂、ポリエステル樹脂、ABS樹脂、アクリル樹脂、ポリイミド樹脂、フェノール樹脂、エポキシ樹脂、シリコン樹脂、尿素樹脂等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【 0 1 5 4 】

50

また、これらバインダー樹脂は、ホモポリマー又は共重合体として一種類を単独で使用してもよいし、二種類以上を混合して使用してもよい。さらに必要に応じて、公知の可塑剤、酸化防止剤、紫外線吸収剤等の添加剤を併用してもよい。

【0155】

(4) 有機発光素子の用途

本発明の有機発光素子は、表示装置や照明装置の構成部材として用いることができる。他にも、電子写真方式の画像形成装置の露光光源や液晶表示装置のバックライト、白色光源にカラーフィルターを有する発光装置等の用途がある。カラーフィルターは例えば赤、緑、青の3つの色が透過するフィルターが挙げられる。

【0156】

本発明の表示装置は、本発明の有機発光素子を表示部に有する。尚、この表示部は複数の画素を有する。

【0157】

そしてこの画素は、本発明の有機発光素子と、発光輝度を制御するための能動素子（スイッチング素子）又は増幅素子の一例であるトランジスタとを有し、この有機発光素子の陽極又は陰極とトランジスタのドレイン電極又はソース電極とが電気接続されている。ここで表示装置は、PC等の画像表示装置として用いることができる。上記トランジスタとして、例えば、TFT素子が挙げられ、このTFT素子は、例えば、基板の絶縁性表面に設けられている。またこのTFT素子は、透明酸化物半導体からなる電極を有するのが好ましい。

【0158】

表示装置は、エリアCCD、リニアCCD、メモリーカード等からの画像情報を入力する画像入力部を有し、入力された画像を表示部に表示する画像情報処理装置でもよい。

【0159】

また、撮像装置やインクジェットプリンタが有する表示部は、タッチパネル機能を有していてもよい。このタッチパネル機能の駆動方式は特に限定されない。

【0160】

また表示装置はマルチファンクションプリンタの表示部に用いられてもよい。

【0161】

照明装置は例えば室内を照明する装置である。照明装置は白色（色温度が4200K）、昼白色（色温度が5000K）、その他青から赤のいずれの色を発光するものであってもよい。

【0162】

本発明の照明装置は、本発明の有機発光素子と、この有機発光素子と接続し有機発光素子に駆動電圧を供給するAC/DCコンバーター回路（交流電圧を直流電圧に変換する回路）とを有している。尚、この照明装置は、カラーフィルターをさらに有してもよい。

【0163】

本発明の画像形成装置は、感光体とこの感光体の表面を帯電させる帯電部と、感光体を露光して静電潜像を形成するための露光部と、感光体の表面に形成された静電潜像を現像するための現像器とを有する画像形成装置である。ここで画像形成装置に備える露光手段は、本発明の有機発光素子を含んでいる。

【0164】

また本発明の有機発光素子は、感光体を露光するための露光機の構成部材（発光部材）として使用することができる。本発明の有機発光素子を有する露光機は、例えば、本発明の有機発光素子を所定の直線方向に沿って列を形成して配置されている露光機がある。

【0165】

次に、図面を参照しながら本発明の表示装置について説明する。図1は、有機発光素子とこの有機発光素子に接続されるスイッチング素子とを有する表示装置の例を示す断面模式図である。尚、図1の表示装置1を構成する有機発光素子として、本発明の有機発光素子が用いられている。

10

20

30

40

50

【 0 1 6 6 】

図 1 の表示装置 1 は、ガラス等の基板 1 1 とその上部にスイッチング素子となる T F T 素子 1 8 又は有機化合物層を保護するための防湿膜 1 2 が設けられている。また符号 1 3 は金属のゲート電極 1 3 である。符号 1 4 はゲート絶縁膜 1 4 であり、1 5 は半導体層である。

【 0 1 6 7 】

T F T 素子 1 8 は、半導体層 1 5 とドレイン電極 1 6 とソース電極 1 7 とを有している。T F T 素子 1 8 の上部には絶縁膜 1 9 が設けられている。コンタクトホール 2 0 を介して有機発光素子を構成する陽極 2 1 とソース電極 1 7 とが接続されている。

【 0 1 6 8 】

尚、有機発光素子に含まれる電極（陽極、陰極）と T F T に含まれる電極（ソース電極、ドレイン電極）との電気接続の方式は、図 1 に示される態様に限られるものではない。つまり陽極又は陰極のうちいずれか一方と T F T 素子ソース電極又はドレイン電極のいずれか一方とが電気接続されていればよい。

【 0 1 6 9 】

図 1 の表示装置 1 では多層の有機化合物層を 1 つの層の如く図示をしているが、有機化合物層 2 2 は、複数層であってよい。陰極 2 3 の上には有機発光素子の劣化を抑制するための第一の保護層 2 4 や第二の保護層 2 5 が設けられている。

【 0 1 7 0 】

図 1 の表示装置 1 が白色を発する表示装置の場合、図 1 中の有機化合物層 2 2 に含まれる発光層は、赤色発光材料、緑色発光材料及び青色発光材料を混合してなる層としてもよい。また赤色発光材料からなる層、緑色発光材料からなる層、青色発光材料からなる層をそれぞれ積層させてなる積層型の発光層としてもよい。さらに別法として、赤色発光材料からなる層、緑色発光材料からなる層、青色発光材料からなる層を横並びにするなりして一の発光層の中にドメインを形成した態様であってもよい。

【 0 1 7 1 】

図 1 の表示装置 1 ではスイッチング素子としてトランジスタを使用しているが、これに代えて M I M 素子をスイッチング素子として用いてもよい。

【 0 1 7 2 】

また図 1 の表示装置 1 に使用されるトランジスタは、単結晶シリコンウエハを用いたトランジスタに限らず、基板の絶縁性表面上に活性層を有する薄膜トランジスタでもよい。活性層として単結晶シリコンを用いた薄膜トランジスタ、活性層としてアモルファスシリコンや微結晶シリコン等の非単結晶シリコンを用いた薄膜トランジスタ、活性層としてインジウム亜鉛酸化物やインジウムガリウム亜鉛酸化物等の非単結晶酸化物半導体を用いた薄膜トランジスタであってもよい。尚、薄膜トランジスタは T F T 素子とも呼ばれる。

【 0 1 7 3 】

図 1 の表示装置 1 に含まれるトランジスタは、S i 基板等の基板内に形成されていてもよい。ここで基板内に形成されるとは、S i 基板等の基板自体を加工してトランジスタを作製することを意味する。つまり、基板内にトランジスタを有することは、基板とトランジスタとが一体に形成されていると見ることもできる。

【 0 1 7 4 】

基板内にトランジスタを設けるかどうかについては、精細度によって選択される。例えば 1 インチで Q V G A 程度の精細度の場合は S i 基板内に有機発光素子を設けることが好ましい。

【 0 1 7 5 】

以上の説明の通り、本発明の有機発光素子を用いた表示装置を駆動することにより、良好な画質で、長時間安定な表示が可能になる。

【 実施例 】

【 0 1 7 6 】

以下、実施例にて本発明を詳細に説明するが、本発明はこれら実施例に限定されるもの

10

20

30

40

50

ではない。

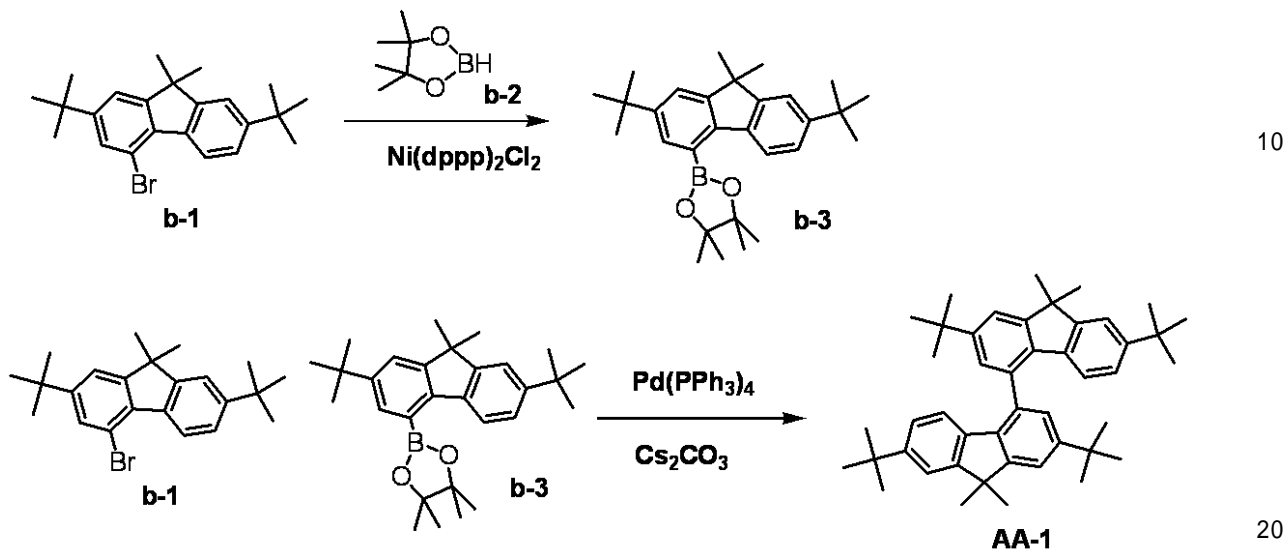
【 0 1 7 7 】

[実施例 1] 例示化合物 A A - 1 の合成

以下に示す合成スキームに従って例示化合物 A A - 1 を合成した。

【 0 1 7 8 】

【 化 2 1 】



【 0 1 7 9 】

以下、上記合成スキームの詳細を説明する。

【 0 1 8 0 】

(1) 化合物 b - 3 の合成

1 0 0 m l の三ツ口フラスコに、下記に示す試薬、溶媒を入れた。

化合物 b - 1 : 1 0 . 3 g (3 4 . 3 m m o l)

[1 , 1 ' - ビス (ジフェニルホスフィノ) プロパン] ジクロロニッケル : 1 . 8 8 g (3 . 4 3 m m o l)

化合物 b - 2 : 9 . 9 m l (6 8 . 5 m m o l)

トルエン : 2 0 0 m l

トリエチルアミン : 3 0 m l

【 0 1 8 1 】

次に、窒素雰囲気中にて反応溶液を 9 0 に昇温して、この温度 (9 0) で 6 時間攪拌した。反応終了後、水 2 0 0 m l を加えた後、有機層をトルエンで抽出し無水硫酸ナトリウムで乾燥した。次に、有機層を減圧濃縮して得られた粗生成物についてシリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒 : トルエン・ヘプタン混合溶媒) で精製することにより、化合物 b - 3 を白色結晶として 1 2 . 2 g (収率 8 2 %) 得た。

【 0 1 8 2 】

(2) 例示化合物 A A - 1 の合成

1 0 0 m l の三ツ口フラスコに、下記に示す試薬、溶媒を入れた。

化合物 b - 1 : 2 . 5 0 g (6 . 5 0 m m o l)

化合物 b - 3 : 3 . 6 5 g (8 . 4 3 m m o l)

炭酸セシウム : 6 . 3 5 g

トルエン : 3 0 m l

エタノール : 1 0 m l

水 : 3 0 m l

【 0 1 8 3 】

次に、窒素雰囲気中、室温下で反応溶液を攪拌しながら、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) を 3 7 6 m g 添加した。次に、反応溶液を 8 0 に昇温し、

10

20

30

40

50

この温度（８０℃）で５時間攪拌した。反応終了後、有機層をトルエンで抽出し、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。次に、有機層を減圧濃縮して得られた粗生成物についてシリカゲルカラムクロマトグラフィー（展開溶媒：トルエン・ヘプタン混合溶媒）で精製することにより、化合物ＡＡ－１を白色結晶として３．７０ｇ（収率９３％）得た。

【０１８４】

質量分析法により、例示化合物ＡＡ－１の M^+ である６１１を確認した。また、 1H -NMR測定により、例示化合物ＡＡ－１の構造を確認した。

【０１８５】

1H -NMR（ $CDCl_3$ ，４００MHz）（ppm）：７．５１（s，２H），
 ７．３４－７．３３（m，４H），６．８６（d，２H），６．３６（s，２H），１．
 ５６（s，６H），１．５２（s，６H），１．４１（s，１８H），１．２７（s，１
 ８H）

10

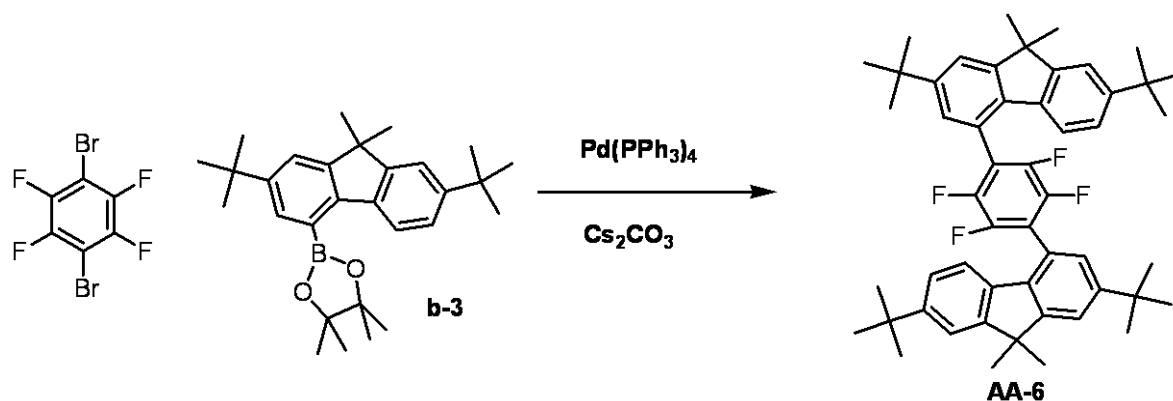
【０１８６】

〔実施例２〕例示化合物ＡＡ－６の合成

以下に示す合成スキームに従って例示化合物ＡＡ－６を合成した。

【０１８７】

【化２２】



20

【０１８８】

以下、上記合成スキームの詳細を説明する。

30

【０１８９】

１００ｍｌの三ツ口フラスコに、下記に示す試薬、溶媒を入れた。

１，４－ジブロモ ２，３，５，６，－テトラフルオロベンゼン：１．０ｇ（３．３mmol）

化合物ｂ－３：３．１ｇ（７．２mmol）

炭酸セシウム：９．３ｇ

トルエン：３０ml

エタノール：１５ml

水：１５ml

【０１９０】

40

次に、窒素雰囲気中、室温下で反応溶液を攪拌しながら、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（０）を０．２３ｇ添加した。次に、反応溶液を９０℃に昇温し、この温度（９０℃）で５時間攪拌した。反応終了後、有機層をトルエンで抽出し無水硫酸ナトリウムで乾燥した。次に、有機層を減圧濃縮して得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（展開溶媒：トルエン・ヘプタン混合溶媒）で精製することにより、例示化合物ＡＡ－６を白色結晶として１．９ｇ（収率７７％）得た。

【０１９１】

質量分析法により、例示化合物ＡＡ－６の M^+ である７５９を確認した。

【０１９２】

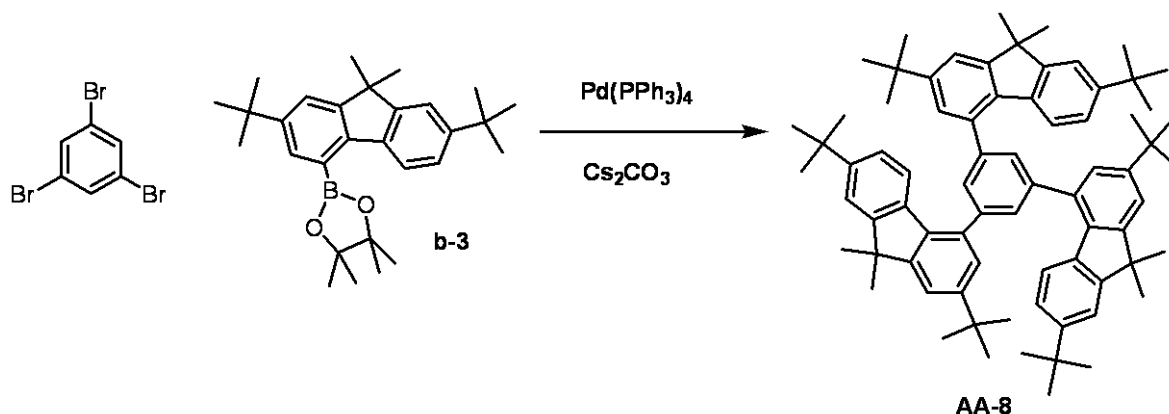
〔実施例３〕例示化合物ＡＡ－８の合成

50

以下に示す合成スキームに従って例示化合物 AA - 8 を合成した。

【 0 1 9 3 】

【 化 2 3 】



【 0 1 9 4 】

以下、上記合成スキームの詳細を説明する。

【 0 1 9 5 】

100 ml の三ツ口フラスコに、下記に示す試薬、溶媒を入れた。

1, 3, 5 - トリブロモベンゼン : 0.630 g (2.00 mmol)

化合物 b - 3 : 3.46 g (8.00 mmol)

炭酸セシウム : 7.0 g

トルエン : 30 ml

エタノール : 10 ml

水 : 30 ml

【 0 1 9 6 】

次に、窒素雰囲気中、室温下で反応溶液を攪拌しながら、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)を231 mg 添加した。次に、反応溶液を80 に昇温し、この温度(80)で5時間攪拌した。反応終了後、有機層をトルエンで抽出し無水硫酸ナトリウムで乾燥した。次に、有機層を減圧濃縮して得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒: クロロホルム・ヘプタン混合溶媒)で精製することにより、例示化合物 AA - 8 を白色結晶として0.85 g (収率43%) 得た。

【 0 1 9 7 】

質量分析法により、例示化合物 AA - 8 の M^+ である991を確認した。

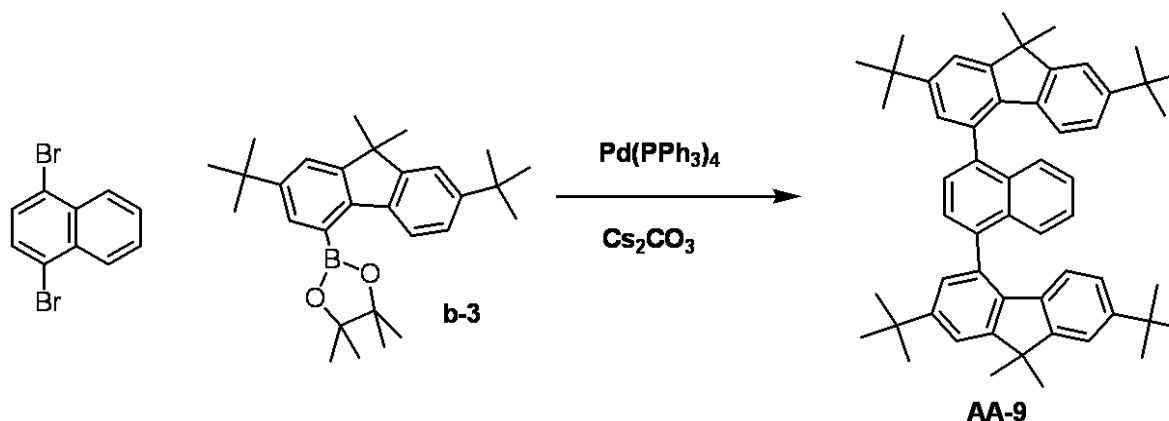
【 0 1 9 8 】

[実施例 4] 例示化合物 AA - 9 の合成

以下に示す合成スキームに従って例示化合物 AA - 9 を合成した。

【 0 1 9 9 】

【 化 2 4 】



【 0 2 0 0 】

以下、上記合成スキームの詳細を説明する。

【0201】

100 ml の三ツ口フラスコに、下記に示す試薬、溶媒を入れた。

1, 4 - ジブロモナフタレン : 0.66 g (2.31 mmol)

化合物 b - 3 : 2 g (4.62 mmol)

炭酸セシウム : 3.01 g

トルエン : 40 ml

エタノール : 20 ml

水 : 7 ml

【0202】

次に、窒素雰囲気中、室温下で反応溶液を攪拌しながら、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)を267 mg 添加した。次に、反応溶液を80℃に昇温し、この温度(80℃)で5時間攪拌した。反応終了後、有機層をトルエンで抽出し無水硫酸ナトリウムで乾燥した。次に、有機層を減圧濃縮して得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒: トルエン・ヘプタン混合溶媒)で精製することにより、例示化合物 AA - 9 を白色結晶として1.65 g (収率97%) 得た。

【0203】

質量分析法により、例示化合物 AA - 9 の M^+ である737を確認した。また、 1H -NMR測定により、例示化合物 AA - 9 の構造を確認した。

【0204】

1H -NMR (CDCl₃, 400 MHz) (ppm) : 7.70 - 7.67 (q, 2H), 7.63 (s, 2H), 7.54 (s, 2H), 7.42 (s, 2H), 7.37 (s, 2H), 7.32 - 7.28 (q, 2H), 6.90 (d, 2H), 6.48 (d, 2H), 1.61 (s, 6H), 1.59 (s, 6H), 1.44 (s, 18H), 1.30 (s, 18H)

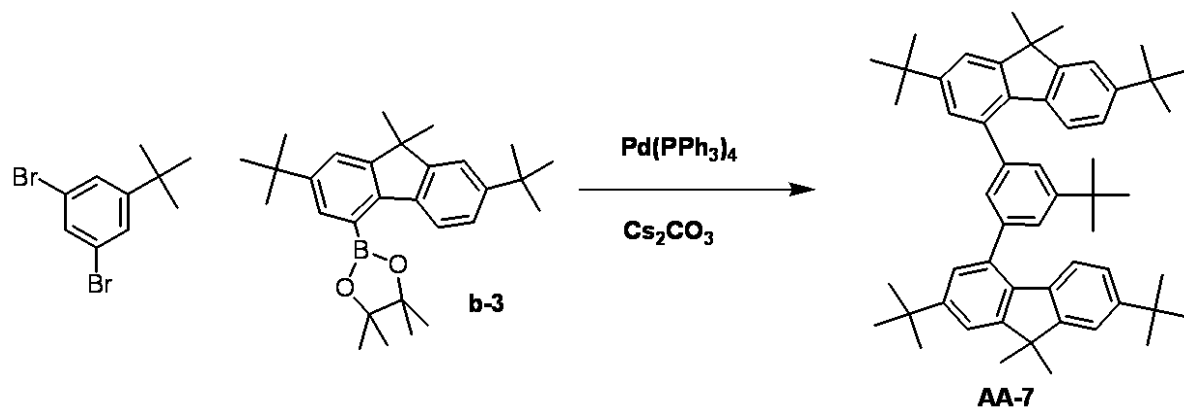
【0205】

[実施例5] 例示化合物 AA - 7 の合成

以下に示す合成スキームに従って例示化合物 AA - 7 を合成した。

【0206】

【化25】



【0207】

以下、上記合成スキームの詳細を説明する。

【0208】

100 ml の三ツ口フラスコに、下記に示す試薬、溶媒を入れた。

1 - ターシャリーブチル - 3, 5 - ジブロモベンゼン : 0.675 g (2.31 mmol)

化合物 b - 3 : 2 g (4.62 mmol)

炭酸セシウム : 3.0 g

トルエン : 40 ml

10

20

30

40

50

エタノール：20 ml

水：7 ml

【0209】

次に、窒素雰囲気中、室温下で反応溶液を攪拌しながら、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)を267 mg 添加した。次に、反応溶液を80 に昇温し、この温度(80)で4時間攪拌した。反応終了後、有機層をトルエンで抽出し無水硫酸ナトリウムで乾燥した。次に、有機層を減圧濃縮して得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒：クロロホルム・ヘプタン混合溶媒)で精製することにより、例示化合物AA-7を白色結晶として1.42 g (収率83%) 得た。

【0210】

質量分析法により、例示化合物AA-7のM⁺である743を確認した。

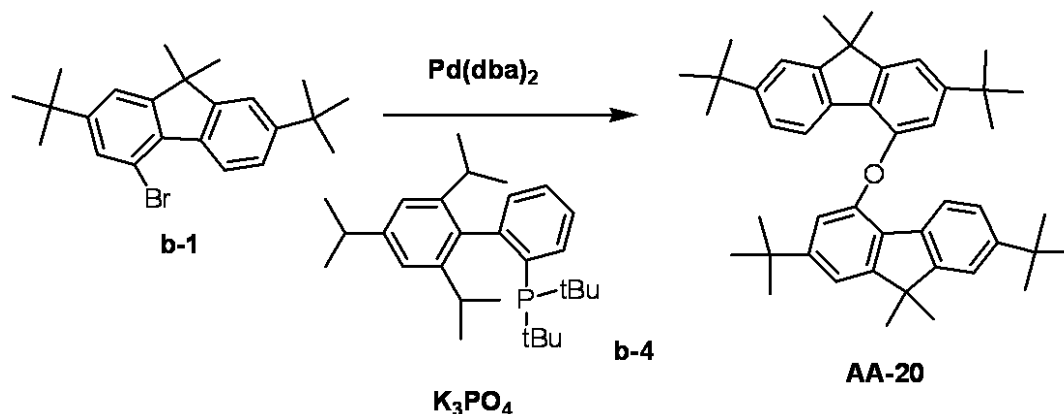
【0211】

[実施例6] 例示化合物AA-20の合成

以下に示す合成スキームに従って例示化合物AA-20を合成した。尚、下記スキームに記載のtBuは、ターシャリーブチル基を表す。

【0212】

【化26】



【0213】

以下、上記合成スキームの詳細を説明する。

【0214】

100 ml の三ツ口フラスコに、下記に示す試薬、溶媒を入れた。

化合物b-1：1.0 g (2.60 mmol)

化合物b-4：0.11 g (0.26 mmol)

リン酸カリウム：0.55 g

ジオキサン：10 ml

水：10 ml

【0215】

次に、窒素雰囲気中、室温下で反応溶液を攪拌しながら、パラジウムジベンジリデンアセトンを75 mg 添加した。次に、反応溶液を80 に昇温し、この温度(80)で5時間攪拌した。反応終了後、有機層をトルエンで抽出し無水硫酸ナトリウムで乾燥した。次に、有機層を減圧濃縮して得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒：クロロホルム・ヘプタン混合溶媒)で精製することにより、例示化合物AA-20を白色結晶として33 mg 得た。

【0216】

質量分析法により、例示化合物AA-20のM⁺である627を確認した。また、¹H-NMR測定により、例示化合物AA-20の構造を確認した。

【0217】

¹H-NMR (CDCl₃, 400 MHz) (ppm) : 8.04 (d, 2H), 7.44 (s, 2H), 7.28 (d, 2H), 7.16 (s, 2H), 6.94 (s, 2

10

20

30

40

50

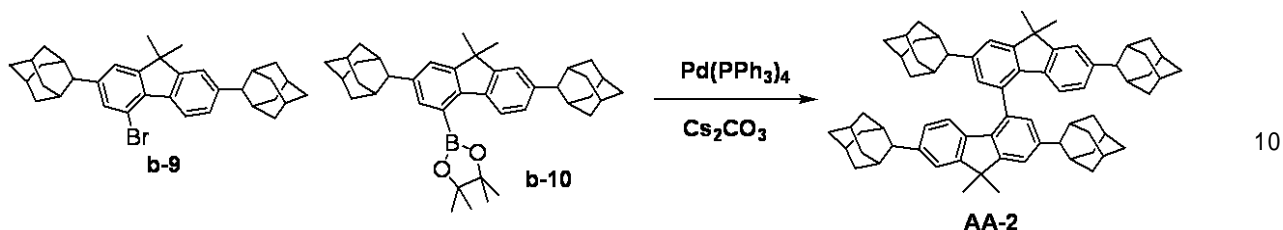
H), 1.56 (s, 6H), 1.54 (s, 6H), 1.37 (s, 18H), 1.27 (s, 18H)

【0218】

[実施例7] 例示化合物AA-2の合成

【0219】

【化27】



【0220】

実施例1(1)において、化合物b-1に代えて化合物b-9を用いて化合物b-10を合成した。また実施例1(2)において、化合物b-1に代えて化合物b-9を、化合物b-3に代えて化合物b-10をそれぞれ用いた。これらを除いては、実施例1と同様の方法により、例示化合物AA-2を合成した。

【0221】

質量分析法により、例示化合物AA-2のM⁺である923を確認した。

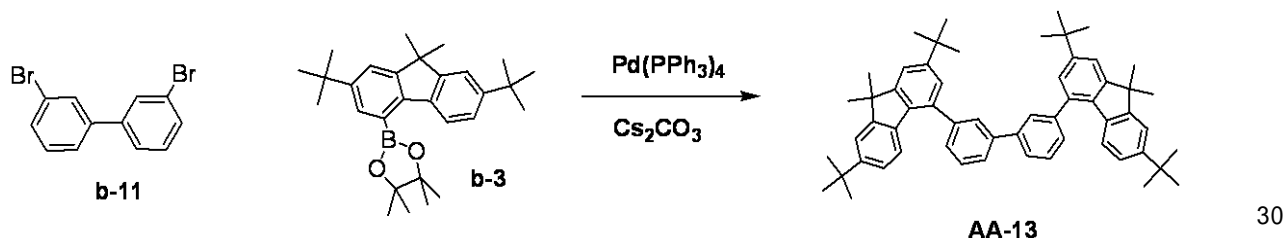
20

【0222】

[実施例8] 例示化合物AA-13の合成

【0223】

【化28】



【0224】

実施例1(2)において、化合物b-1に代えて化合物b-11(1,4-ジブロモナフタレン)を用いたことを除いては、実施例1と同様の方法により例示化合物AA-13を合成した。

【0225】

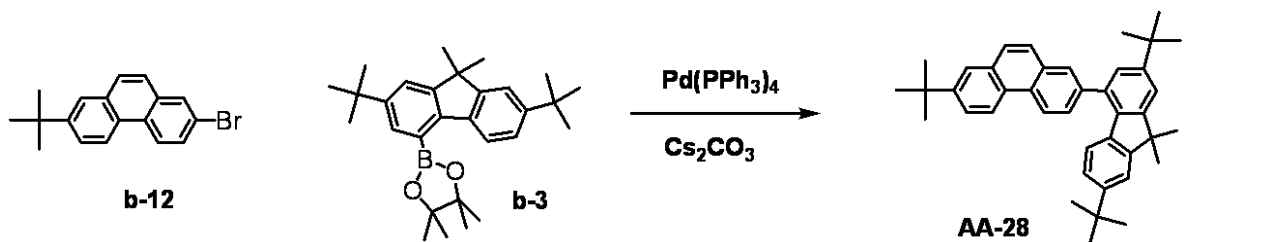
質量分析法により、例示化合物AA-13のM⁺である763を確認した。

【0226】

[実施例9] 例示化合物AA-28の合成

【0227】

【化29】



【0228】

実施例1(2)において、化合物b-1に代えて化合物b-12を用いたことを除いて

50

は、実施例 1 と同様の方法により例示化合物 A A - 2 8 を合成した。

【 0 2 2 9 】

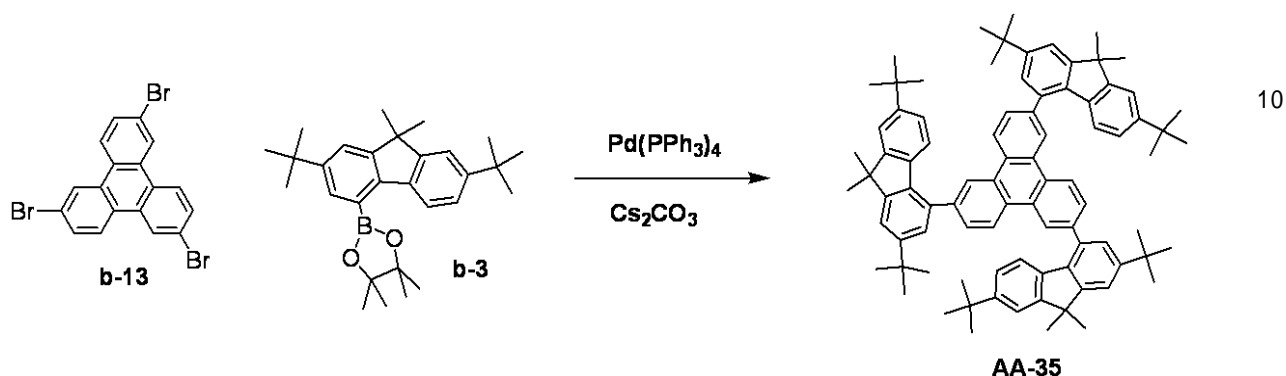
質量分析法により、例示化合物 A A - 2 8 の M^+ である 5 3 8 を確認した。

【 0 2 3 0 】

[実施例 1 0] 例示化合物 A A - 3 5 の合成

【 0 2 3 1 】

【 化 3 0 】



【 0 2 3 2 】

実施例 1 (2) において、化合物 b - 1 に代えて化合物 b - 1 3 (1 , 3 , 5 - トリブ
ロモベンゼン) を用いたことを除いては、実施例 1 と同様の方法により例示化合物 A A -

20

3 5 を合成した。

【 0 2 3 3 】

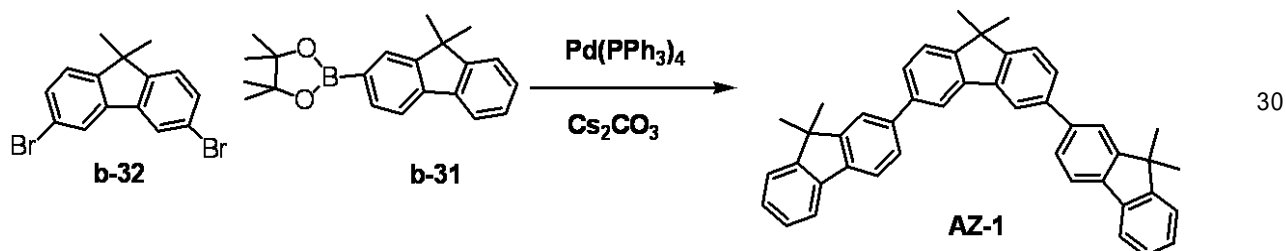
質量分析法により、例示化合物 A A - 3 5 の M^+ である 1 1 4 1 を確認した。

【 0 2 3 4 】

(比較化合物 A Z - 1 の合成)

【 0 2 3 5 】

【 化 3 1 】



【 0 2 3 6 】

実施例 4 において、1 , 4 - ジブロモナフタレンに代えて化合物 b - 3 2 を、化合物 b
- 3 に代えて化合物 b - 3 1 を、それぞれ用いたことを除いては、実施例 4 と同様の方法
により比較化合物 A Z - 1 を合成した。質量分析法により、比較化合物 A Z - 1 の M^+ で
ある 5 7 8 を確認した。

【 0 2 3 7 】

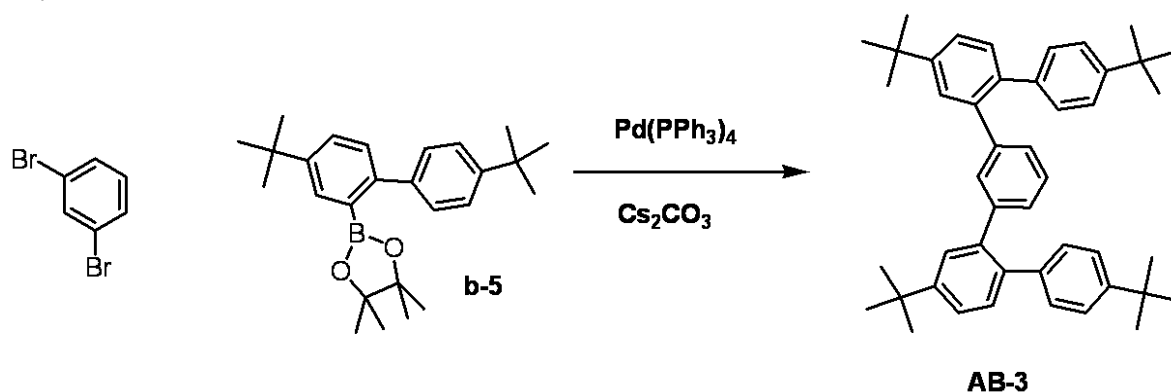
40

[合成例 1] 例示化合物 A B - 3 の合成

以下に示す合成スキームに従って例示化合物 A B - 3 を合成した。

【 0 2 3 8 】

【化 3 2】



10

【 0 2 3 9 】

以下、上記合成スキームの詳細を説明する。

【 0 2 4 0 】

100 ml の三ツ口フラスコに、下記に示す試薬、溶媒を入れた。

3, 5 - ジブロモベンゼン : 0.708 g (3.00 mmol)

化合物 b - 5 : 2.71 g (7.00 mmol)

炭酸セシウム : 3.9 g

トルエン : 30 ml

エタノール : 10 ml

水 : 30 ml

20

【 0 2 4 1 】

次に、窒素雰囲気中、室温下で反応溶液を攪拌しながら、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)を173 mg 添加した。次に、反応溶液を80℃に昇温し、この温度(80℃)で5時間攪拌した。反応終了後、有機層をトルエンで抽出し無水硫酸ナトリウムで乾燥した。次に、有機層を減圧濃縮して得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(展開溶媒: クロロホルム・ヘプタン混合溶媒)で精製することにより、化合物 AB - 3 を白色結晶として1.56 g (収率86%) 得た。

【 0 2 4 2 】

質量分析法により、例示化合物 AB - 3 の M^+ である607を確認した。

30

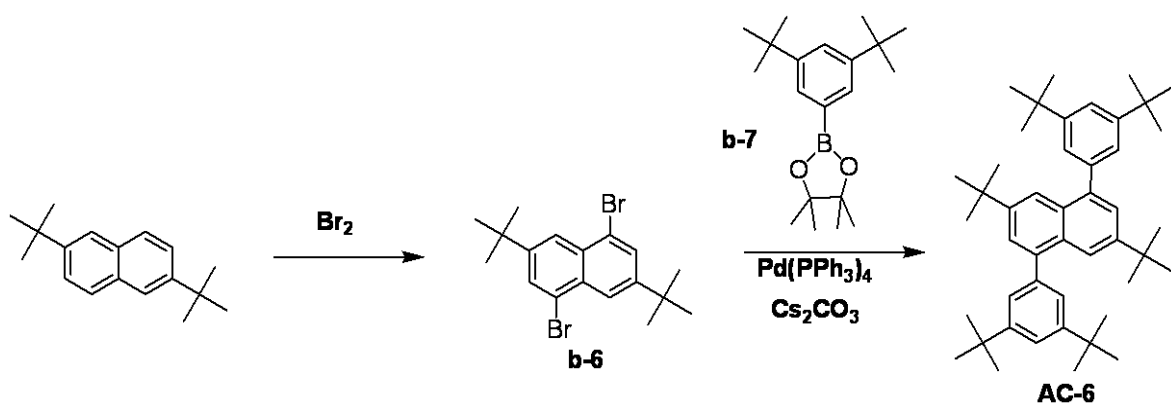
【 0 2 4 3 】

[合成例 2] 例示化合物 AC - 6 の合成

以下に示す合成スキームに従って例示化合物 AC - 6 を合成した。

【 0 2 4 4 】

【化 3 3】



40

【 0 2 4 5 】

以下、上記合成スキームの詳細を説明する。

【 0 2 4 6 】

50

(1) 化合物 b - 6 の合成

100 ml の三ツ口フラスコに、下記に示す試薬、溶媒を入れた。

2, 6 - ジターシャルブチルナフタレン : 1.0 g (4.17 mmol)

臭素 : 9.60 ml

クロロホルム : 30 ml

【 0247 】

次に、反応溶液を 65 に昇温した後、この温度 (65) で 3.5 時間攪拌した。反応終了後、有機層をクロロホルムで抽出し無水硫酸ナトリウムで乾燥した。次に、有機層を減圧濃縮した後、メタノール 30 ml 加えることで析出した結晶をろ過することにより、化合物 b - 6 を白色結晶として 1.23 g (収率 76%) 得た。

【 0248 】

(2) 例示化合物 AC - 6 の合成

100 ml の三ツ口フラスコに、下記に示す試薬、溶媒を入れた。

化合物 b - 6 : 0.750 g (1.89 mmol)

化合物 b - 7 : 1.80 g (3.16 mmol)

炭酸セシウム : 3.69 g

トルエン : 20 ml

エタノール : 10 ml

水 : 20 ml

【 0249 】

次に、窒素雰囲気中、室温下で反応溶液を攪拌しながら、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) を 109 mg 添加した。次に、反応溶液を 80 に昇温し、この温度 (80) で 5 時間攪拌した。反応終了後、有機層をトルエンで抽出し無水硫酸ナトリウムで乾燥した。次に、有機層を減圧濃縮して得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒 : クロロホルム・ヘプタン混合溶媒) で精製することにより、例示化合物 AC - 6 を白色結晶として 0.75 g (収率 65%) 得た。

【 0250 】

質量分析法により、例示化合物 AC - 6 の M^+ である 617 を確認した。また、 1H - NMR 測定により、例示化合物 AC - 6 の構造を確認した。

【 0251 】

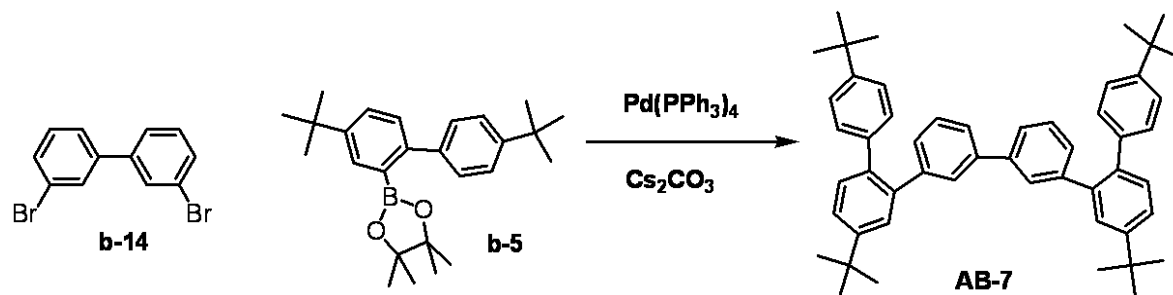
1H - NMR ($CDCl_3$, 400 MHz) (ppm) : 7.88 (s, 2H), 7.55 (s, 2H), 7.49 (s, 2H), 7.42 (s, 2H), 7.41 (s, 2H), 1.41 (s, 36H), 1.33 (s, 18H)

【 0252 】

[合成例 3] 例示化合物 AB - 7 の合成

【 0253 】

【 化 34 】



【 0254 】

合成例 1 において、1, 3 - ジブロモベンゼンに代えて化合物 b - 14 を用いたことを除いては、合成例 1 と同様の方法により例示化合物 AB - 7 を合成した。

【 0255 】

質量分析法により、例示化合物 AB - 7 の M^+ である 683 を確認した。

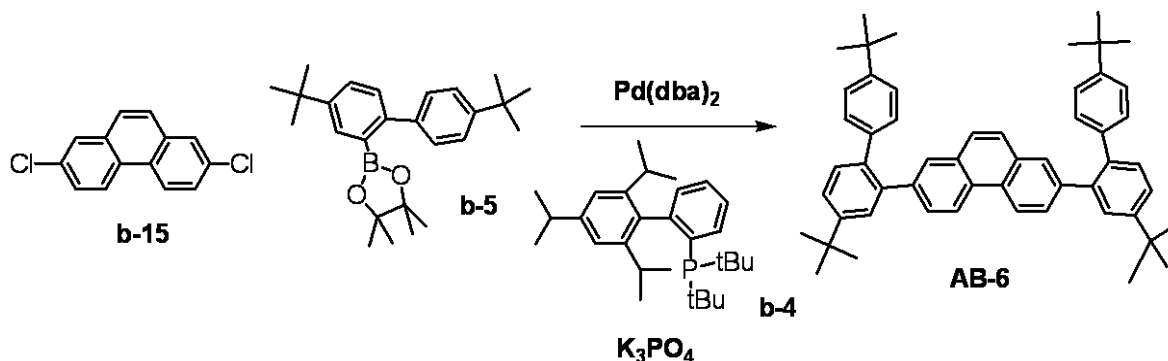
【 0 2 5 6 】

[合成例 4] 例示化合物 A B - 6 の合成

以下に示す合成スキームに従って例示化合物 A B - 6 を合成した。

【 0 2 5 7 】

【 化 3 5 】



10

【 0 2 5 8 】

以下、上記合成スキームの詳細を説明する。

【 0 2 5 9 】

100 ml の三ツ口フラスコに、下記に示す試薬、溶媒を入れた。

化合物 b - 15 : 0 . 2 5 g (1 . 0 m m o l)

化合物 b - 5 : 1 . 0 g (2 . 6 0 m m o l)

化合物 b - 4 : 0 . 1 1 g (0 . 2 6 m m o l)

リン酸カリウム : 0 . 5 5 g

ジオキサン : 1 0 m l

水 : 1 0 m l

【 0 2 6 0 】

次に、窒素雰囲気中、室温下で反応溶液を攪拌しながら、パラジウムジベンジリデンアセトンを 7 5 m g 添加した。次に、反応溶液を 8 0 ℃ に昇温し、この温度 (8 0 ℃) で 5 時間攪拌した。反応終了後、有機層をトルエンで抽出した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。次に、有機層を減圧濃縮することで得られた粗生成物についてシリカゲルカラムクロマトグラフィー (展開溶媒 : クロロホルム・ヘプタン混合溶媒) で精製することにより、例示化合物 A B - 6 を白色結晶として 0 . 3 7 g (収率 5 3 %) 得た。

30

【 0 2 6 1 】

質量分析法により、例示化合物 A B - 6 の M⁺である 7 0 7 を確認した。

【 0 2 6 2 】

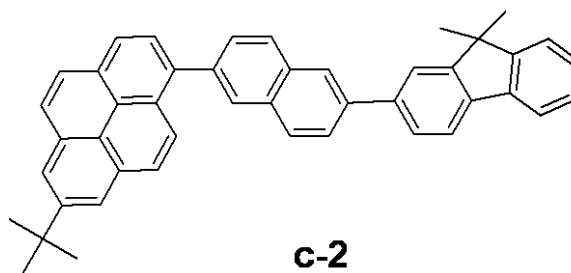
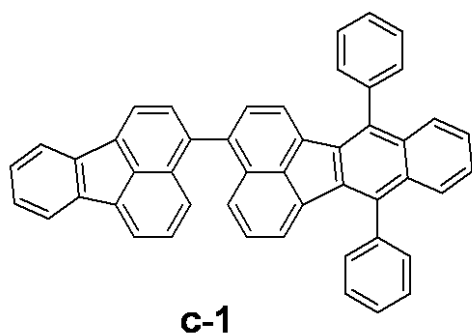
[実施例 1 1]

本実施例では、基板上に、陽極、正孔輸送層、発光層、正孔ブロッキング層、電子輸送層及び陰極がこの順に形成されている有機発光素子を、以下に説明する方法により作製した。ここで、本実施例にて使用した化合物の一部を以下に列挙する。

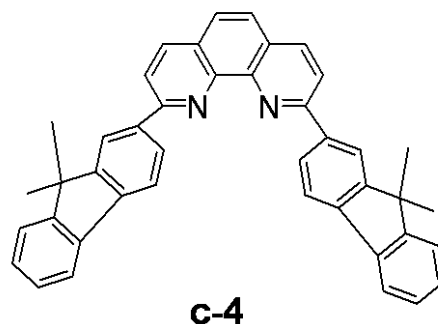
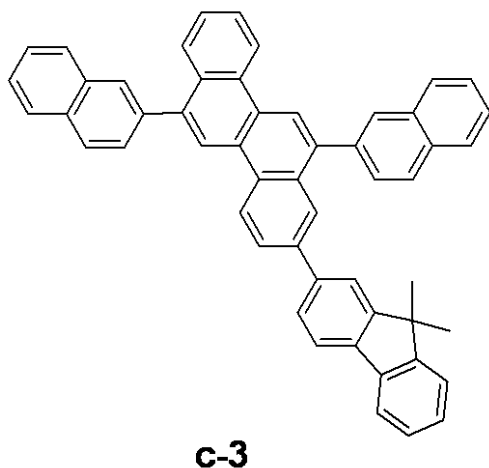
【 0 2 6 3 】

40

【化 3 6】



10



20

【 0 2 6 4】

スパッタ法により、ガラス基板上に、酸化錫インジウム（ITO）を成膜して陽極を形成した。このとき陽極の膜厚を120nmとした。次に、陽極が形成されている基板について、アセトンを用いた超音波洗浄と、イソプロピルアルコール（IPA）を用いた超音波洗浄と、を順次行い、次いでIPAによる煮沸洗浄を行った後、乾燥した。さらに、UV / オゾン洗浄したものを透明導電性支持基板として次の工程で使用した。

30

【 0 2 6 5】

次に、例示化合物AC-6（以下、化合物A）とクロロホルムとを混合して濃度が0.25重量%のA材料溶液を調製した。またBC-4（以下、化合物B）とクロロホルムとを混合して濃度が0.25重量%のB材料溶液を調製した。

【 0 2 6 6】

次に、A材料溶液とB材料溶液とを、重量比が2：1になるように混合して混合液を調製した。

【 0 2 6 7】

次に、この混合液を、陽極（ITO電極）上に滴下した後、最初に回転数500RPMで10秒、次いで回転数1000RPMで1分間スピコートを行い、薄膜を形成した。次に、この薄膜を80の真空オープンにて10分間乾燥させることで、薄膜中の溶剤を完全に除去したことにより正孔輸送層を形成した。このとき正孔輸送層の厚みは30nmであった。

40

【 0 2 6 8】

次に、 1×10^{-5} Paの真空チャンバー内における抵抗加熱を用いた真空蒸着法により、正孔輸送層上に、下記表6に記載の有機化合物層及び電極層を連続成膜することにより、有機発光素子を作製した。

【 0 2 6 9】

【表 6】

	構成材料	膜厚[nm]
発光層	c-2(ホスト) c-1(ゲスト) (ホスト:ゲスト=95:5(重量比))	20
正孔ブロッキング層	c-3	10
電子輸送層	c-4	50
第1電極層(陰極)	LiF	0.5
第2電極層(陰極)	Al	150

10

【0270】

得られた有機発光素子に電流を通電して、発光輝度を 2000 cd/m^2 に設定した際の発光特性を測定・評価した。その結果、発光効率 (cd/A) が 13.0 cd/A であり、外部量子収率が 7.5% であった。また CIE 色度は、 $(0.16, 0.26)$ であり良好な青色発光が観測された。

【0271】

[実施例 12 乃至 17]

実施例 11 において、化合物 A 及び化合物 B として、下記表 7 に示す化合物に変えた以外は実施例 11 と同様の方法により有機発光素子を作製した。また得られた有機発光素子について、実施例 11 と同様の方法により評価を行った。結果を表 7 に示す。

20

【0272】

[実施例 18 乃至 20]

実施例 11 において、化合物 A として例示化合物 AA-1 を使用し、化合物 B として、下記表 7 に示す化合物に変えた以外は、実施例 11 と同様の方法により有機発光素子を作製した。また得られた有機発光素子について、実施例 11 と同様の方法により評価を行った。結果を表 7 に示す。

【0273】

【表 7】

	化合物A	化合物B	発光効率 [cd/A]	外部量子収率 [%]	色度 [x, y]
実施例11	AC-6	BC-4	13.0	7.5	(0.15, 0.26)
実施例12	AA-1	BC-4	11.7	6.5	(0.16, 0.26)
実施例13	AA-7	BC-4	11.3	6.3	(0.16, 0.26)
実施例14	AA-9	BC-4	11.1	6.2	(0.15, 0.26)
実施例15	AB-3	BC-4	12.3	6.9	(0.16, 0.25)
実施例16	AB-7	BC-4	11.5	6.6	(0.15, 0.25)
実施例17	AB-6	BC-4	12.1	6.8	(0.15, 0.25)
実施例18	AA-1	BB-4	8.7	4.7	(0.16, 0.26)
実施例19	AA-1	BF-1	8.9	5.0	(0.16, 0.26)
実施例20	AA-1	BF-2	8.8	4.9	(0.16, 0.26)

30

40

【0274】

[比較例 1 乃至 3]

実施例 11 において、化合物 A 及び化合物 B として、下記表 8 に示す化合物に変えた以外は実施例 11 と同様の方法により有機発光素子を作製した。また得られた有機発光素子について、実施例 11 と同様の方法により評価を行った。結果を表 8 に示す。

【0275】

[比較例 4]

実施例 11 において、B 材料溶液のみを用いて正孔輸送層を形成したこと以外は実施例 1

50

1と同様の方法により有機発光素子を作製した。また得られた有機発光素子について、実施例11と同様の方法により評価を行った。結果を表8に示す。

【0276】

〔比較例5乃至7〕

比較例4において、化合物Bとして下記表8に示す化合物に変えた以外は、比較例4を同様の方法により有機発光素子を作製した。また得られた有機発光素子について、実施例11と同様の方法により評価を行った。結果を表8に示す。

【0277】

【表8】

	化合物A	化合物B	発光効率 [cd/A]	外部量子収率 [%]	色度 [x, y]
比較例1	AZ-1	BC-4	8.8	4.9	(0.16, 0.24)
比較例2	AZ-2	BC-4	AZ-2が発光した		
比較例3	AZ-3	BC-4	7.8	4.3	(0.15, 0.25)
比較例4	—	BC-4	8.3	4.7	(0.15, 0.25)
比較例5	—	BB-4	3.2	1.8	(0.15, 0.25)
比較例6	—	BF-1	2.4	1.3	(0.15, 0.25)
比較例7	—	BF-2	2.2	1.2	(0.15, 0.25)

10

20

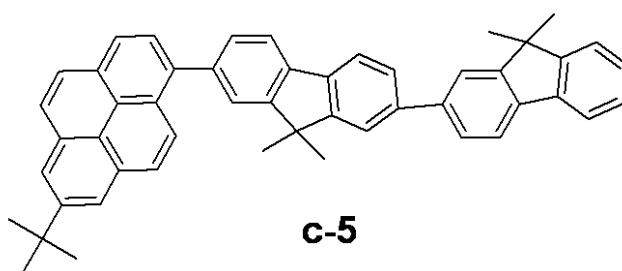
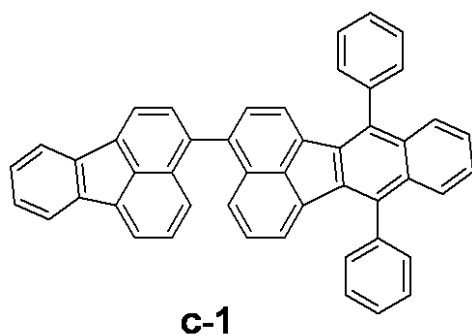
【0278】

〔実施例21〕

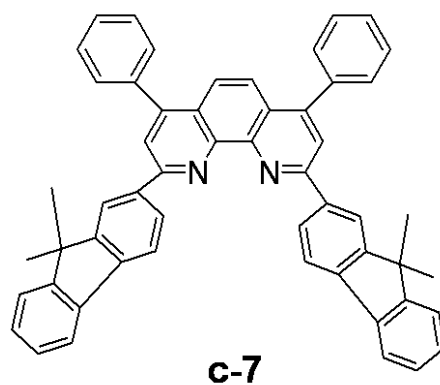
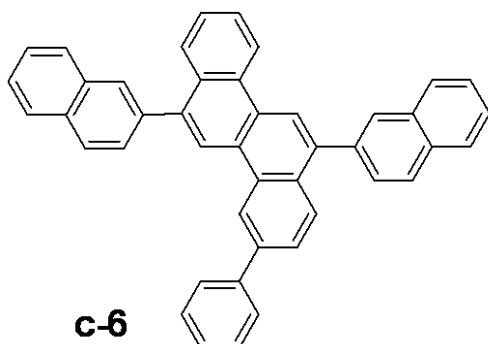
本実施例では、有機発光素子を作成した。基板上に、陽極、正孔輸送層、発光層、正孔ブロッキング層、電子輸送層及び陰極がこの順に形成されている有機発光素子を、以下に説明する方法により作製した。ここで、本実施例にて使用した化合物の一部を以下に列挙する。

【0279】

【化37】



30



40

【0280】

50

まず実施例 1 1 と同様の方法により、透明導電性支持基板を作製した。

【 0 2 8 1 】

次に、例示化合物 A A - 1 とクロロホルムとを混合して、濃度が 0 . 2 5 重量 % であるクロロホルム溶液を調製した。次に、このクロロホルム溶液を、陽極 (I T O 電極) 上に滴下して、最初に回転数 5 0 0 R P M で 1 0 秒、次に回転数 1 0 0 0 R P M で 1 分間スピコートを行い、薄膜を形成した。次に、この薄膜を、 8 0 の真空オーブンで 1 0 分間乾燥させることで、薄膜中の溶剤を完全に除去することにより正孔輸送層を形成した。このとき正孔輸送層の膜厚は 3 0 n m であった。

【 0 2 8 2 】

次に、 1×10^{-5} P a の真空チャンバー内における抵抗加熱を用いた真空蒸着法により、正孔輸送層上に、下記表 9 に記載の有機化合物層及び電極層を連続成膜することにより、有機発光素子を作製した。

【 0 2 8 3 】

【表 9】

	構成材料	膜厚[nm]
発光層	c-5(ホスト) c-1(ゲスト) (ホスト:ゲスト=95:5(重量比))	20
正孔フロッキング層	c-6	40
電子輸送層	c-7	40
第1電極層(陰極)	LiF	0.5
第2電極層(陰極)	Al	150

【 0 2 8 4 】

得られた有機発光素子に電流を通電して、発光輝度を 2000 cd/m^2 に設定した際の発光特性を測定・評価した。その結果、発光効率 (cd/A) が 7.2 cd/A であり、良好な青色発光が観測された。

【 0 2 8 5 】

[実施例 2 2]

実施例 2 1 において、例示化合物 A A - 1 に代えて例示化合物 A A - 2 0 を用いたこと以外は、実施例 2 1 と同様の方法により有機発光素子を作製した。実施例 2 1 と同様の方法により有機発光素子の発光特性を測定・評価した。その結果、発光効率 (cd/A) は 8.0 cd/A であり、良好な青色発光が観測された。

【 0 2 8 6 】

[実施例 2 3]

実施例 2 1 において、例示化合物 A A - 1 に代えて例示化合物 A A - 3 5 を用いたこと以外は、実施例 2 1 と同様の方法により有機発光素子を作製した。実施例 2 1 と同様の方法により有機発光素子の発光特性を測定・評価した。その結果、発光効率 (cd/A) は 7.1 cd/A であり、良好な青色発光が観測された。

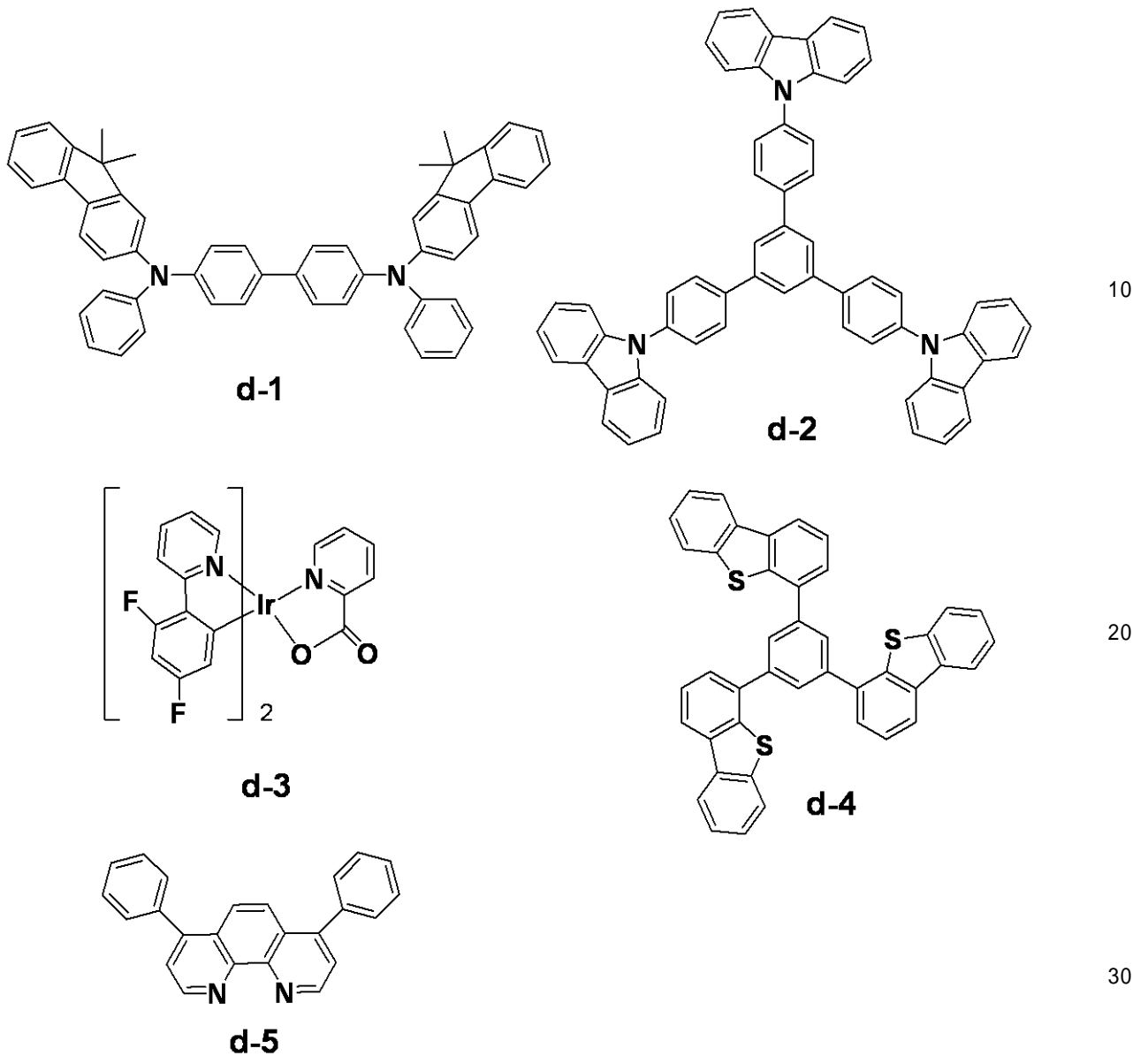
【 0 2 8 7 】

[実施例 2 4]

本実施例にて使用した化合物の一部を以下に列挙する。

【 0 2 8 8 】

【化 3 8】



【 0 2 8 9 】

まずスパッタ法により、ガラス基板上に、酸化錫インジウム（ITO）を成膜して陽極を形成した。このとき陽極の膜厚を120nmとした。次に、陽極が形成されている基板について、アセトンを用いた超音波洗浄と、イソプロピルアルコール（IPA）を用いた超音波洗浄と、を順次行い、次いでIPAによる煮沸洗浄を行った後、乾燥した。さらに、UV/オゾン洗浄したものを透明導電性支持基板として次の工程で使用した。

【 0 2 9 0 】

次に、 1×10^{-5} Paの真空チャンバー内における抵抗加熱を用いた真空蒸着法により、下記表10に記載の有機化合物層及び電極層を連続成膜することにより、有機発光素子を作製した。

【 0 2 9 1 】

10

20

30

40

【表 10】

	構成材料	膜厚[nm]
正孔注入層	d-1	40
正孔輸送層	d-2	10
発光層	例示化合物AA-1(ホスト) d-3(ゲスト) (ホスト:ゲスト=95:5(重量比))	30
正孔ブロッキング層	d-4	10
電子輸送層	d-5	30
第1電極層(陰極)	LiF	0.5
第2電極層(陰極)	Al	150

10

【0292】

得られた有機発光素子について、ITO電極を正極、Al電極を負極にして、所定の電圧を印加したところ、CIE色度座標(0.21, 0.48)の青色発光が観測された。

【0293】

[実施例25]

実施例24において、例示化合物AA-1に代えて例示化合物AA-20を用いたこと以外は、実施例24と同様の方法により有機発光素子を作製した。実施例24と同様の方法により有機発光素子の発光特性を測定・評価した。その結果、CIE色度座標(0.21, 0.48)の青色発光が観測された。

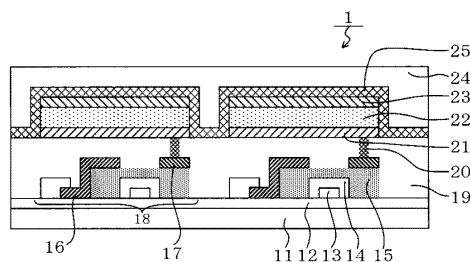
20

【符号の説明】

【0294】

17：TFT素子、20：陽極、21：有機化合物層、22：陰極

【図1】



フロントページの続き

(51)Int.Cl.		F I		
C 0 9 K	11/06	(2006.01)	C 0 9 K	11/06 6 1 0
			C 0 9 K	11/06 6 9 0
			C 0 9 K	11/06 6 6 0
			C 0 9 K	11/06 6 2 0

(72)発明者 齊藤 章人
東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤノン株式会社内

(72)発明者 西出 洋祐
東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤノン株式会社内

(72)発明者 村椿 方規
東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤノン株式会社内

(72)発明者 石井 隆司
東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤノン株式会社内

(72)発明者 石毛 剛一
東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤノン株式会社内

(72)発明者 伊藤 希之
東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤノン株式会社内

(72)発明者 梶本 典史
東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤノン株式会社内

(72)発明者 水野 信貴
東京都大田区下丸子3丁目30番2号 キヤノン株式会社内

審査官 うし 田 真悟

(56)参考文献 特開2009-170812(JP,A)
特開2011-009573(JP,A)
特開2011-008918(JP,A)
特表2007-529597(JP,A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
H 0 1 L 5 1 / 5 0 - 5 1 / 5 6
C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)