

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2010-18557

(P2010-18557A)

(43) 公開日 平成22年1月28日 (2010.1.28)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
C 0 7 C 43/205 (2006.01)	C 0 7 C 43/205 C S P D	3 K 1 0 7
C 0 9 K 11/06 (2006.01)	C 0 9 K 11/06 6 9 0	4 H 0 0 6
H 0 1 L 51/50 (2006.01)	H 0 5 B 33/14 B	

審査請求 未請求 請求項の数 4 O L (全 106 頁)

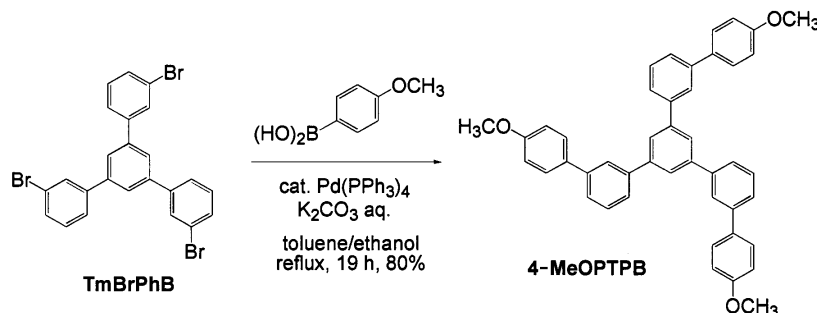
(21) 出願番号	特願2008-181021 (P2008-181021)	(71) 出願人	394013644
(22) 出願日	平成20年7月11日 (2008.7.11)		ケミプロ化成株式会社
			兵庫県神戸市中央区京町83番地
		(74) 代理人	100094466
			弁理士 友松 英爾
		(74) 代理人	100116481
			弁理士 岡本 利郎
		(72) 発明者	城戸 淳二
			山形県米沢市林泉寺3-12-16
		(72) 発明者	笹部 久宏
			山形県米沢市丸の内1-14-29 レジ
			デンス丸の内1-203
		(72) 発明者	大前 吉則
			兵庫県神戸市中央区京町83番地 ケミプ
			ロ化成株式会社内
			最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 新規なポリアルコキシキンクフェニル誘導体、それよりなるホスト材料およびそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子

(57) 【要約】 (修正有)

【課題】 素子の低電圧駆動を可能にし、高効率な素子を提供するために必要な新規なポリアルコキシキンクフェニル誘導体、それよりなるホスト材料およびそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の提供。

【解決手段】 下記式代表化合物 4-MeOPTB



10

で示されることを特徴とするポリアルコキシキンクフェニル誘導体、それよりなるホスト材料およびそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子。

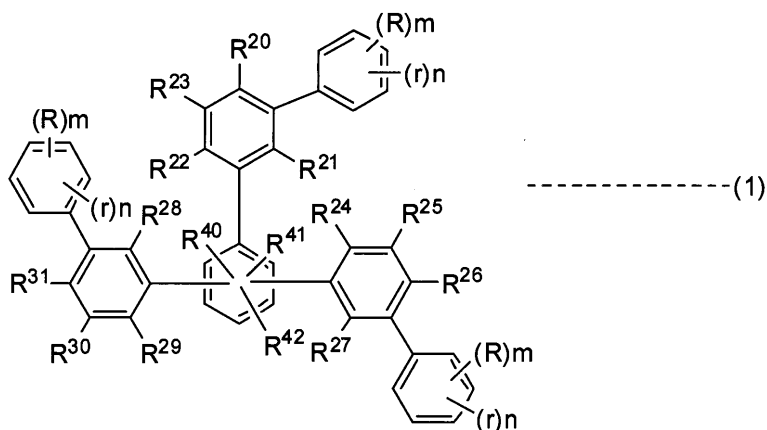
【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

下記一般式 (1)

【化 1】



10

20

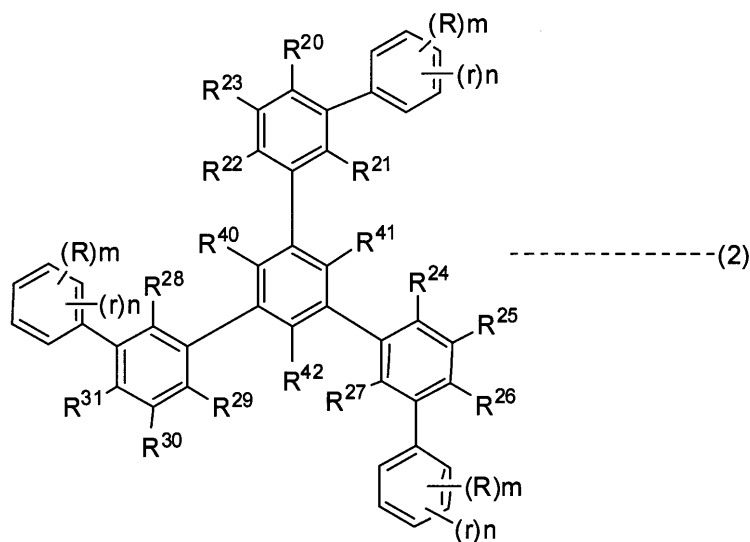
(式中、Rは炭素数1～6の直鎖または分岐のアルコキシ基、rは水素および炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキル基よりなる群から独立して選ばれた基であり、 $R^{20} \sim R^{31}$ および $R^{40} \sim R^{42}$ は水素、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキル基、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルコキシ基、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキルアミノ基およびフッ素原子よりなる群からそれぞれ独立して選ばれた基であり、mは1または2の整数、nは3または4の整数であり、かつ $m+n=5$ である。)

で示されることを特徴とするポリアルコキシキンクフェニル誘導体。

【請求項 2】

下記一般式 (2)

【化 2】



30

40

(式中、Rは炭素数1～6の直鎖または分岐のアルコキシ基、rは水素および炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキル基よりなる群から独立して選ばれた基であり、 $R^{20} \sim R^{31}$ および $R^{40} \sim R^{42}$ は水素、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキル基、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルコキシ基、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキルアミノ基およびフッ素原子よりなる群からそれぞれ独立して選ばれた基であり、mは1または2の整数、nは3または4の整数であり、かつ $m+n=5$ である。)

で示されることを特徴とするポリアルコキシキンクフェニル誘導体。

【請求項 3】

請求項 1 または 2 記載のポリアルコキシキンクフェニル誘導体よりなるホスト材料。

50

【請求項 4】

請求項 1 または 2 記載のポリアルコキシキンクフェニル誘導体を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、新規なポリアルコキシキンクフェニル誘導体、それよりなるホスト材料およびそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機 EL 素子（有機エレクトロルミネッセンス素子）の実用化に向けた研究開発が、国内外の電気メーカーや材料メーカーなどが中心になって進められている。液晶表示素子や発光ダイオードなどの既に世間で知られているディスプレイなどと、互角に取り扱われていくには消費電力の低減および素子の長寿命化が必須の課題として挙げられている。

そこでこの問題を解決する目的で、近年リン光材料による有機 EL 素子の検討がなされている（非特許文献 1）。

リン光材料は、従来の蛍光材料と異なり、三重項励起状態を使用することができるため量子効率が非常に高く、エネルギー失活がほとんどなく内部発光量子収率でほぼ 100% に達する材料である。

しかしこのリン光材料は、濃度消光を起こしやすいため蛍光材料と同様にホスト材料との併用が必要になってくる。

高効率発光を得るためには、輸送材料やホスト材料の最適化を図らないといけないが、リン光材料は蛍光材料と異なり三重項エネルギーを完全に閉じ込めないと満足な効果が得られない。特に青色の材料に関してはエネルギーレベルが非常に高い。そのためにこれまで使用されていた 4, 4'-ジ（N-カルバゾリル）-1, 1'-ビフェニル（CBP）では十分なエネルギーの閉じ込めができない。残念なことに、この青色リン光エネルギーを満足に閉じ込めることのできるワイドギャップ化されたホスト材料はこれまでほとんどなく、青色リン光材料の開発を妨げる一つの要因になっていた。

【0003】

【非特許文献 1】Appl. Phys. Lett., 75 (1) 4 (1999)

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

本発明の目的は、素子の低電圧駆動を可能にし、高効率な素子を提供するために必要な新規なポリアルコキシキンクフェニル誘導体、それよりなるホスト材料およびそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子を提供する点にある。

【課題を解決するための手段】

【0005】

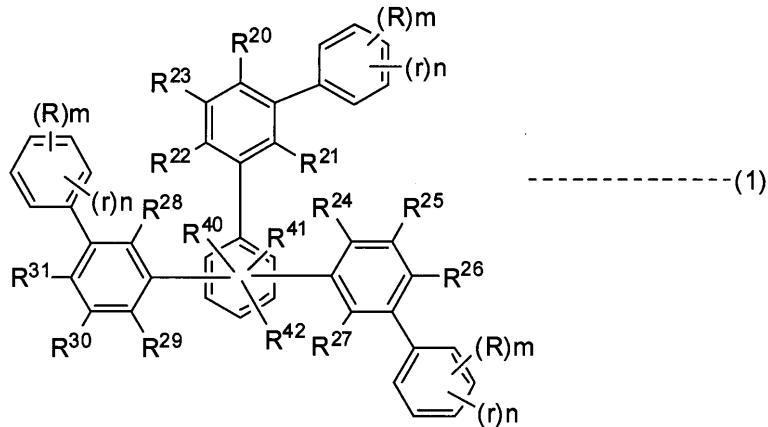
本発明の第 1 は、下記一般式（1）

10

20

30

【化 3】



10

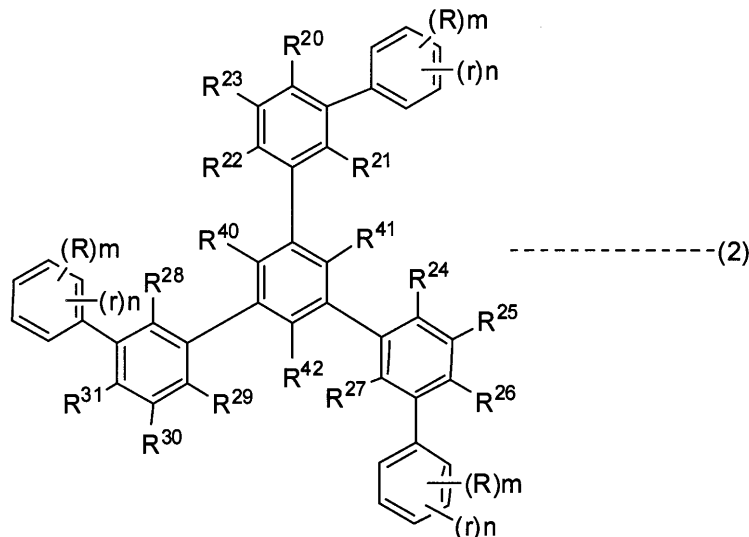
(式中、Rは炭素数1～6の直鎖または分岐のアルコキシ基、rは水素および炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキル基よりなる群から独立して選ばれた基であり、 $R^{20} \sim R^{31}$ および $R^{40} \sim R^{42}$ は水素、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキル基、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルコキシ基、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキルアミノ基およびフッ素原子よりなる群からそれぞれ独立して選ばれた基であり、mは1または2の整数、nは3または4の整数であり、かつ $m+n=5$ である。)

で示されることを特徴とするポリアルコキシキンクフェニル誘導体に関する。

20

本発明の第2は、下記一般式(2)

【化 4】



30

(式中、Rは炭素数1～6の直鎖または分岐のアルコキシ基、rは水素および炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキル基よりなる群から独立して選ばれた基であり、 $R^{20} \sim R^{31}$ および $R^{40} \sim R^{42}$ は水素、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキル基、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルコキシ基、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキルアミノ基およびフッ素原子よりなる群からそれぞれ独立して選ばれた基であり、mは1または2の整数、nは3または4の整数であり、かつ $m+n=5$ である。)

40

で示されることを特徴とするポリアルコキシキンクフェニル誘導体に関する。

本発明の第3は、請求項1または2記載のポリアルコキシキンクフェニル誘導体よりなるホスト材料に関する。

本発明の第4は、請求項1または2記載のポリアルコキシキンクフェニル誘導体を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子に関する。

【0006】

本発明におけるR、rおよび $R^{20} \sim R^{31}$ および $R^{40} \sim R^{42}$ における炭素数1～

50

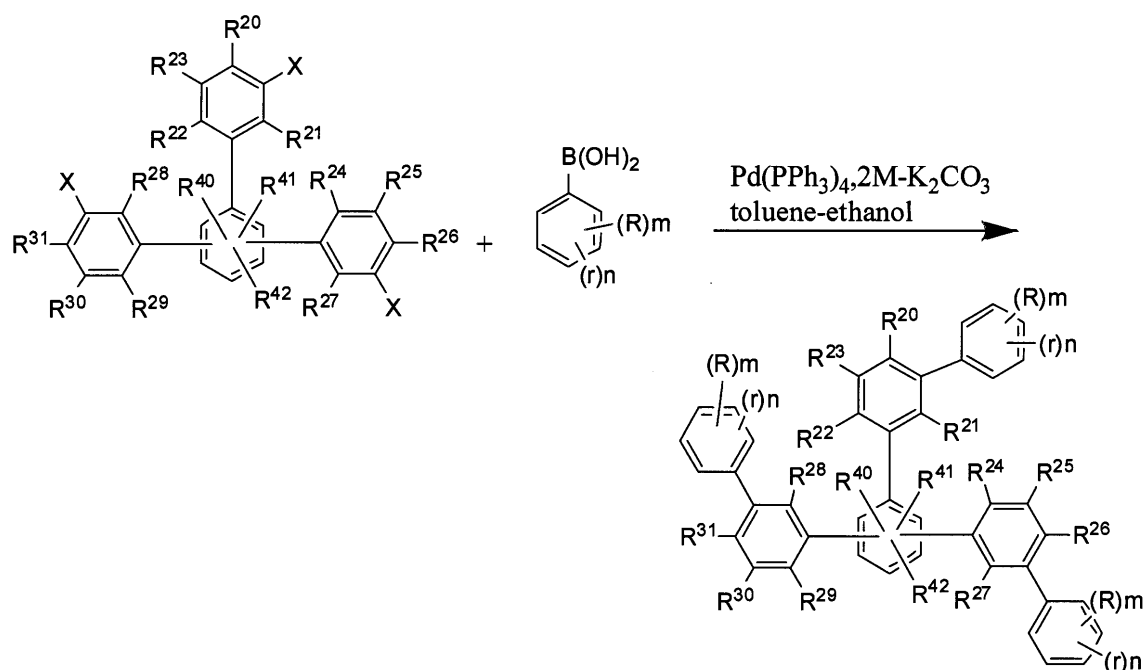
6の直鎖または分岐のアルキル基（但し、Rの場合は、アルコキシ中のアルキル部分）としては、メチル、エチル、*n*-プロピル、*i*so-プロピル、*n*-ブチル、*i*so-ブチル、*sec*-ブチル、*tert*-ブチル、*n*-ペンチル、*i*so-ペンチル、2,2-ジメチルプロピル、*n*-ヘキシル、2-メチルペンチル、3-メチルペンチル、4-メチルペンチル、2,2-ジメチルブチル、2,3-ジメチルブチル、3,3-ジメチルブチルなどを挙げることができる。

また $R^{20} \sim R^{31}$ および $R^{40} \sim R^{42}$ におけるアルコキシ基およびアルキルアミノ基中のアルキル基部分についても、上記のアルキル基を例示することができる。

【0007】

本発明の化合物は、下記の反応により製造することができる。

【化5】



〔式中、Rは炭素数1～6の直鎖または分岐のアルコキシ基、rは水素および炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキル基よりなる群から独立して選ばれた基であり、 $R^{20} \sim R^{31}$ および $R^{40} \sim R^{42}$ は水素、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキル基、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルコキシ基、炭素数1～6の直鎖または分岐のアルキルアミノ基およびフッ素原子よりなる群からそれぞれ独立して選ばれた基であり、mは1または2の整数、nは3または4の整数であり、かつ $m+n=5$ である。Xはハロゲン（例えばCl、Br、I）である。〕

【0008】

本反応で使用する反応は、一般に鈴木カップリング反応と呼ばれ、詳細はMiyaura, N.; Suzuki, A. Chem. Rev. 1995, 95, 2457などに記述されている。

用いる溶媒は、芳香属炭化水素系溶媒とアルコール系溶媒の混合物もしくはエーテル系溶媒が使用できる。前記混合物の芳香属炭化水素系溶媒としては、トルエン、キシレン、エチルベンゼン、トリメチルベンゼンなどが例示できる。また前記アルコール系溶媒としては、メタノール、エタノール、プロパノール、ブタノールなどが例示できる。エーテル系溶媒としては、テトラヒドロフランや1,4-ジオキサンのような環状エーテルやメチルセロソルブ、エチルセロソルブ、エチレングリコールジメトキシエーテルやエチレングリコールジエトキシエーテルなどが例示できる。

溶媒に対する原料の溶解性が反応進行の鍵になるため、好ましくはトルエンとアルコール系の混合溶媒であり、より好ましくはトルエンとエタノールの混合溶媒である。

反応で使用する塩基類（前記式中では K_2CO_3 を使用）に関しては、アルカリ金属を含むものであれば特に限定されるものではない。例示すれば、水酸化リチウム、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム、水酸化セシウムのような水酸化物、炭酸リチウム、炭酸ナトリウム、炭酸カリウム、炭酸セシウムのようなアルカリ金属の炭酸塩、炭酸水素リチウム、炭酸水素ナトリウム、炭酸水素カリウム、炭酸水素セシウムのようなアルカリ金属の重炭酸塩あるいはリチウム、ナトリウム、カリウムあるいはセシウムなどのアルカリ金属のアルコールあるいはアルカリ金属の酢酸塩などの有機塩基である。好ましくは、アルカリ金属の炭酸塩もしくは重炭酸塩であり、より好ましくは炭酸カリウムである。

反応で使用するパラジウムについては、ハロゲン化合物とホウ酸化合物とのカップリング反応であるため、同様にPd(0)のものが使用できる。好ましくは、テトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム〔Pd(PPh₃)₄〕あるいはトリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウムであり、より好ましくはパラジウム化合物の反応性よりテトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウムである。

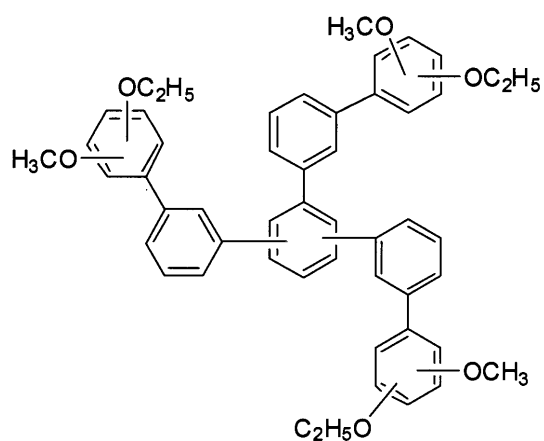
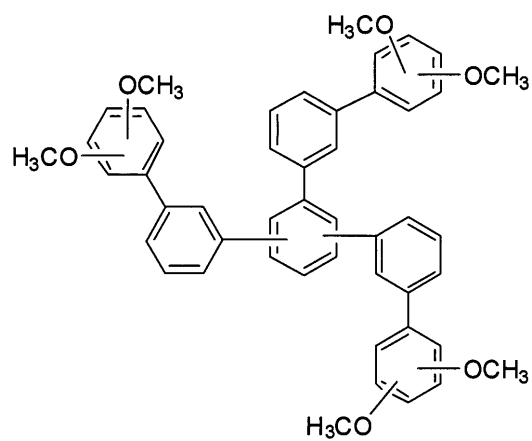
10

【0009】

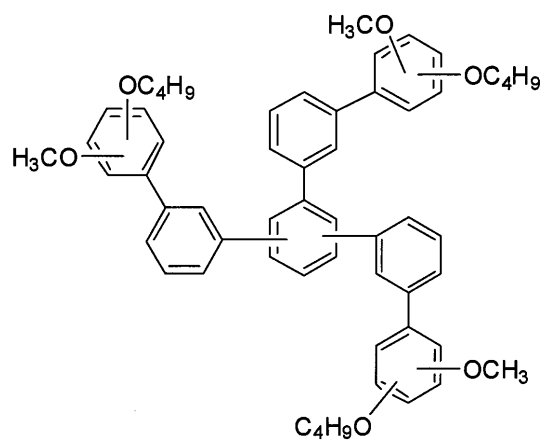
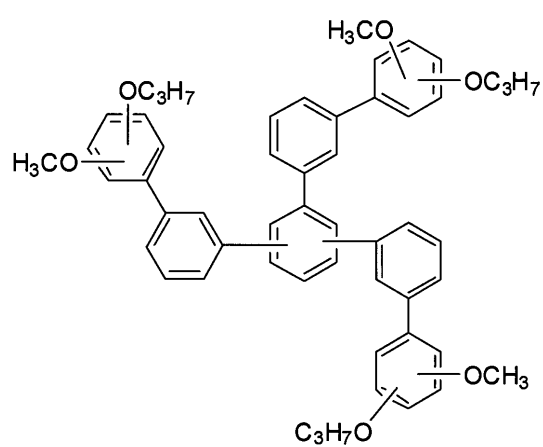
本発明の化合物の具体例を以下に例示する。なお、下記例示化合物において、メチル基は他のアルキル基、例えばエチル基やプロピル基などと置き換えることができる。

【0010】

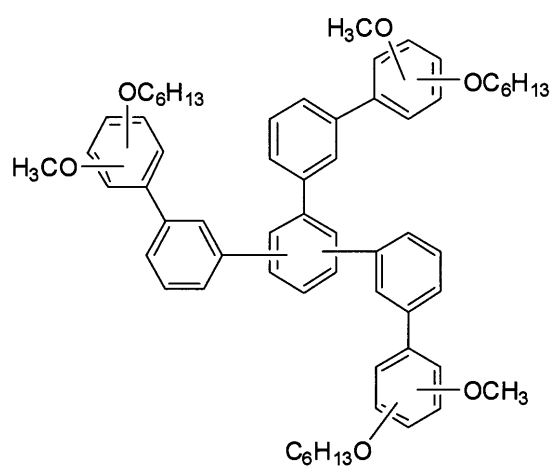
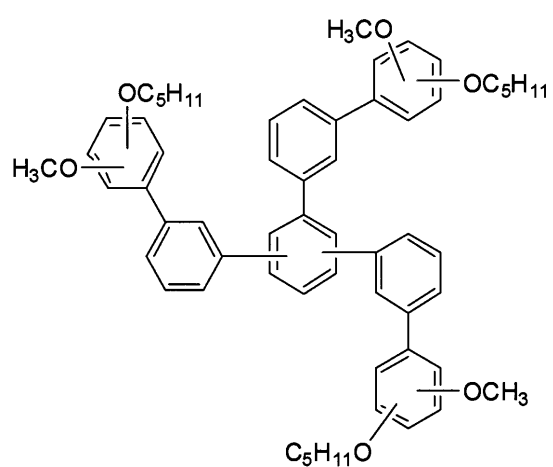
【化 6】



10



20

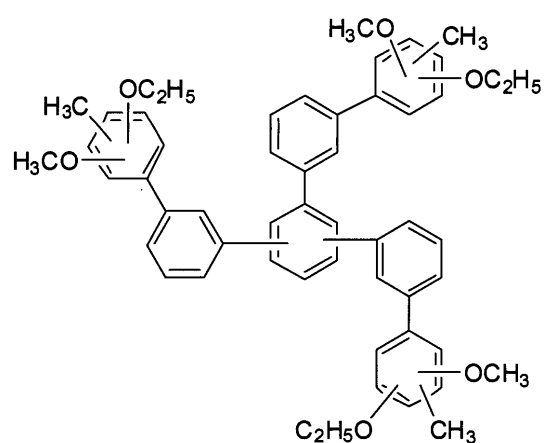
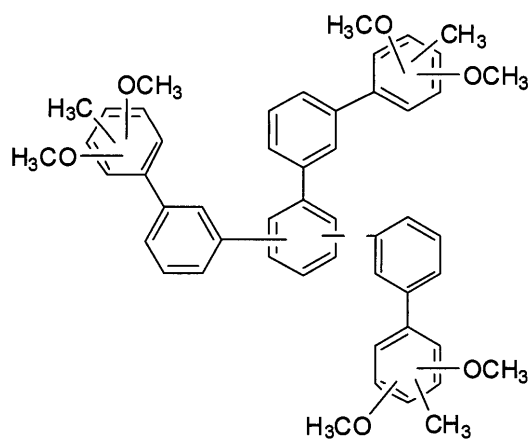


30

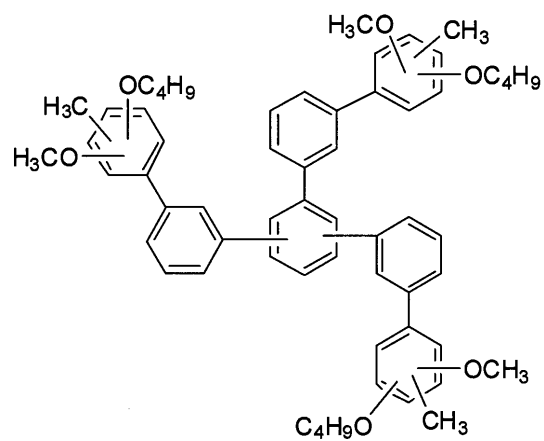
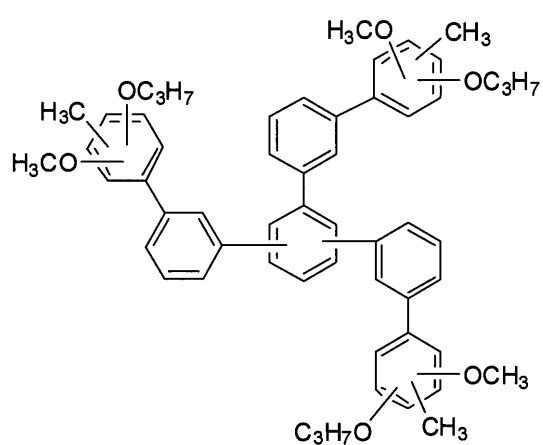
40

【 0 0 1 1 】

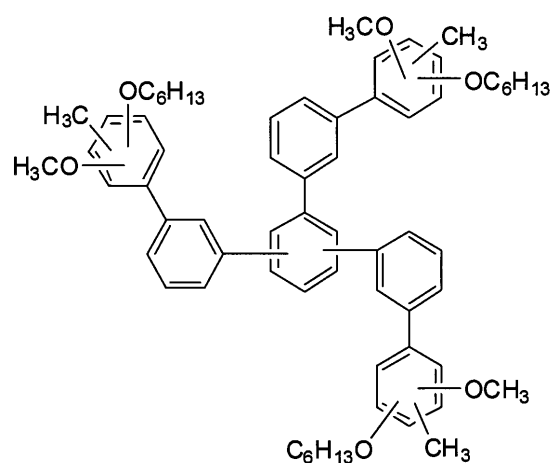
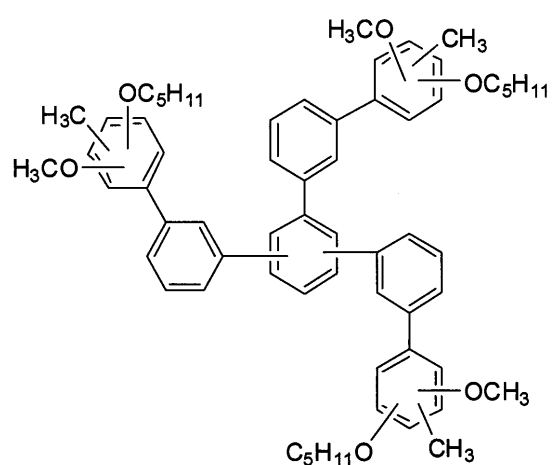
【化 7】



10



20

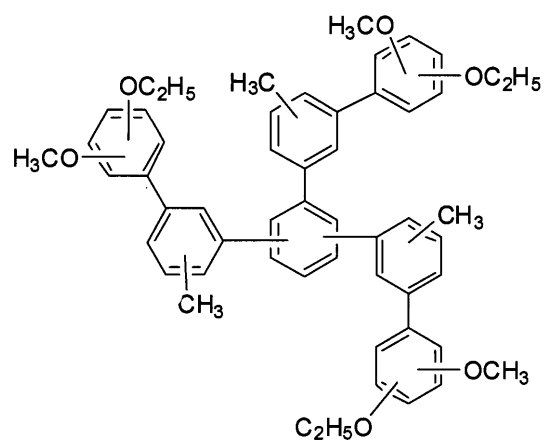
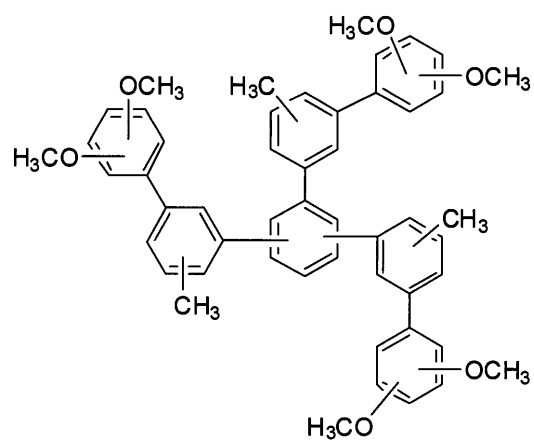


30

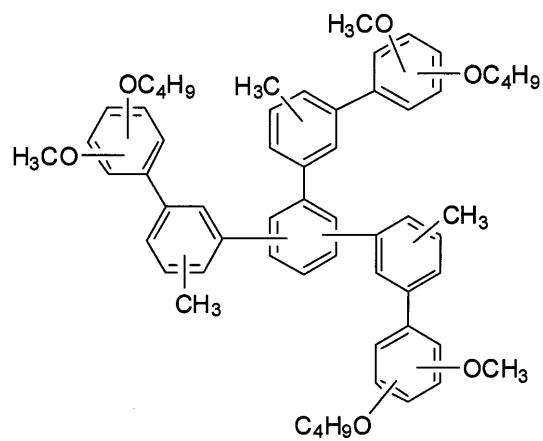
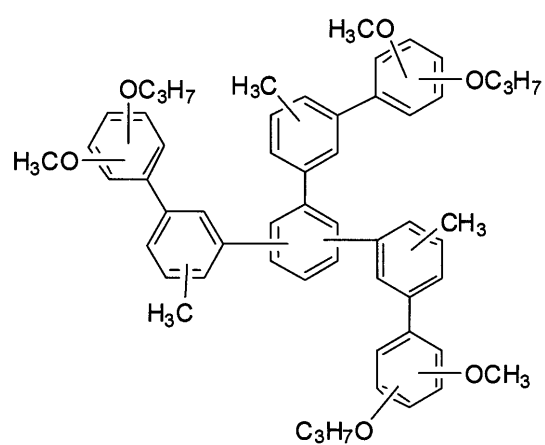
40

【 0 0 1 2 】

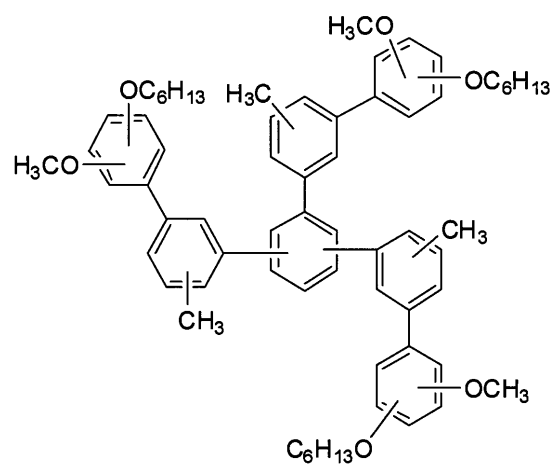
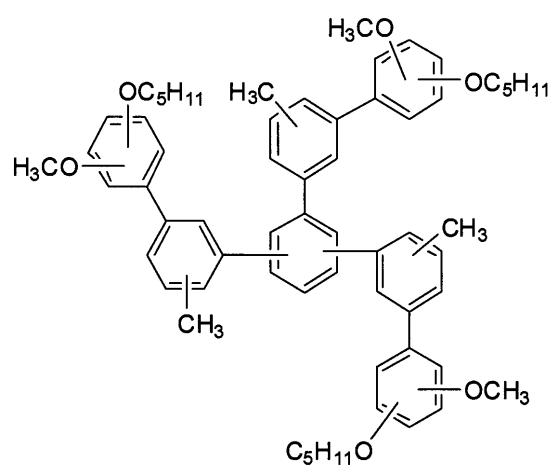
【化 8】



10



20

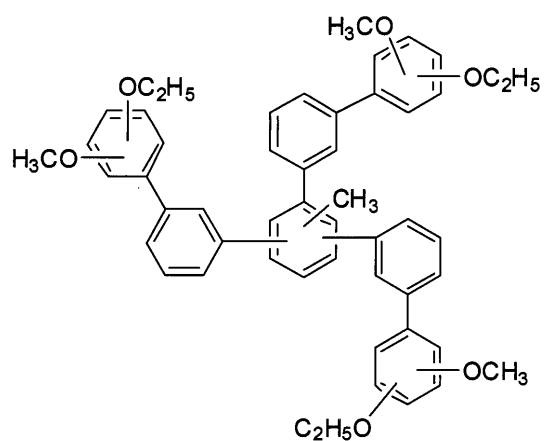
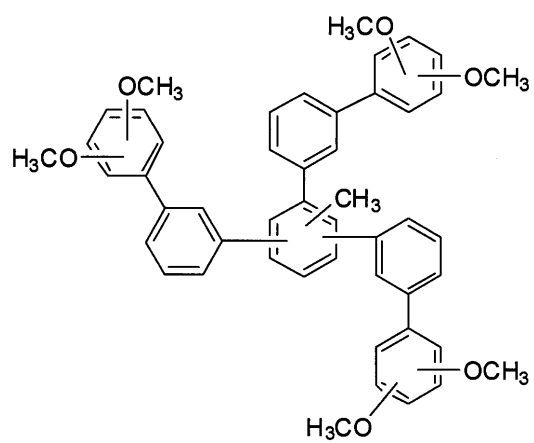


30

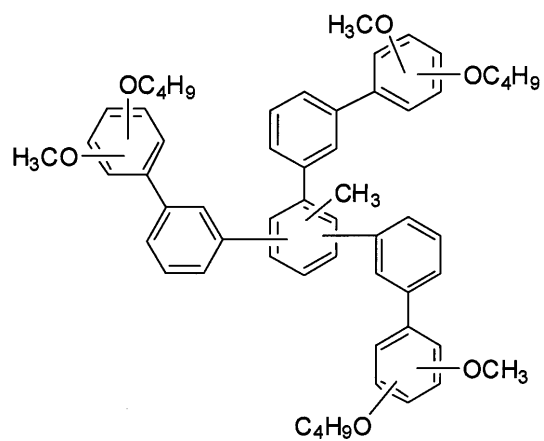
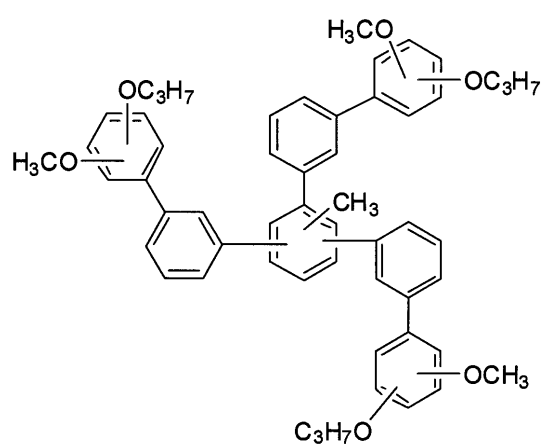
40

【 0 0 1 3 】

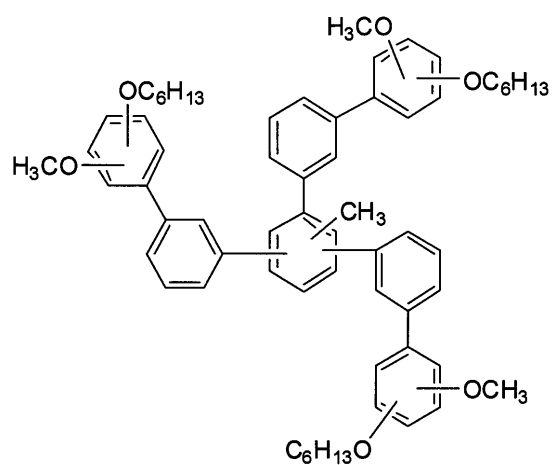
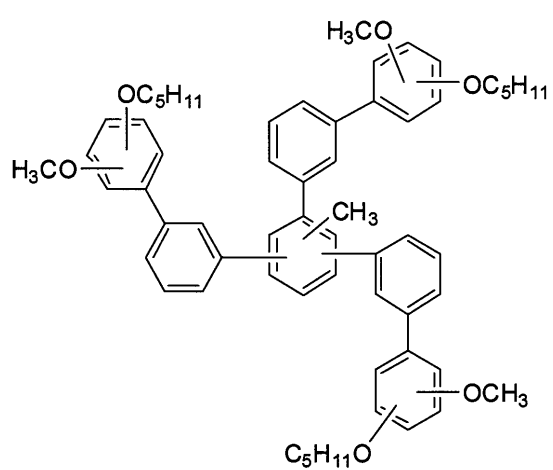
【化 9】



10



20

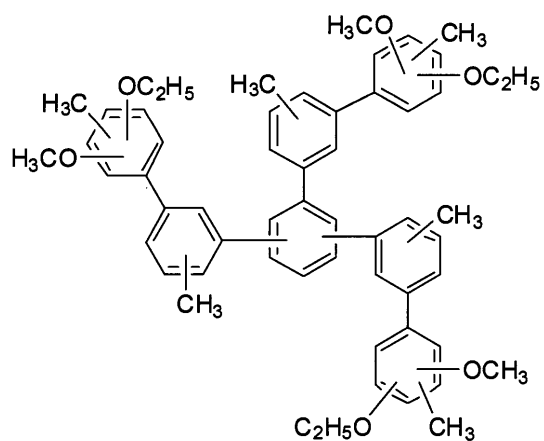
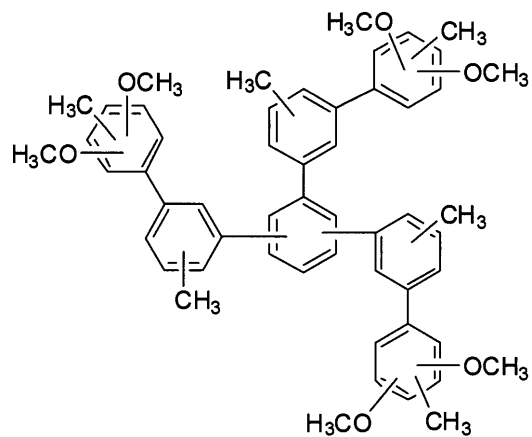


30

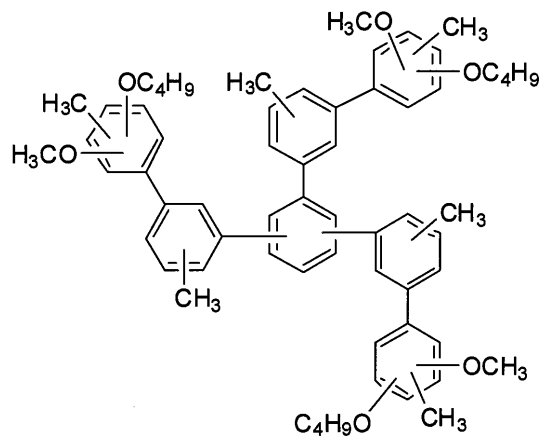
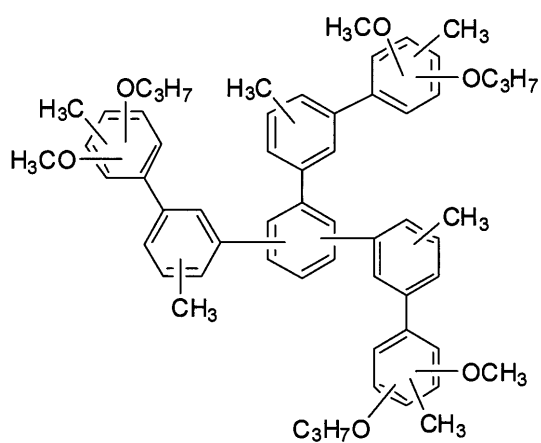
40

【 0 0 1 4 】

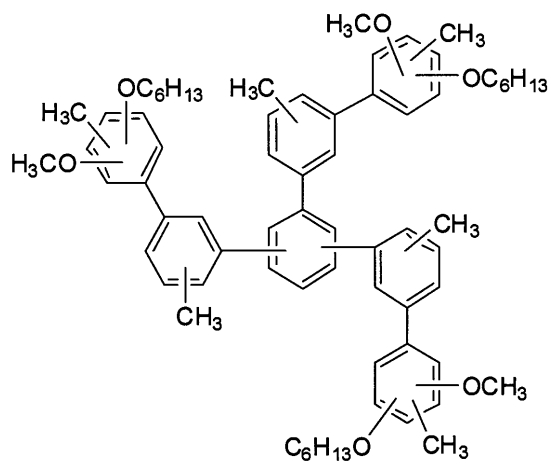
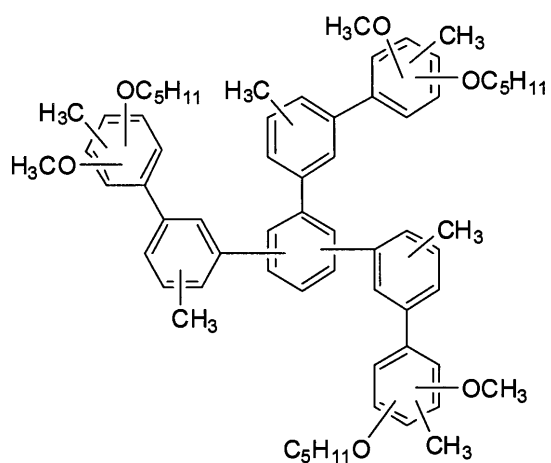
【化 10】



10



20

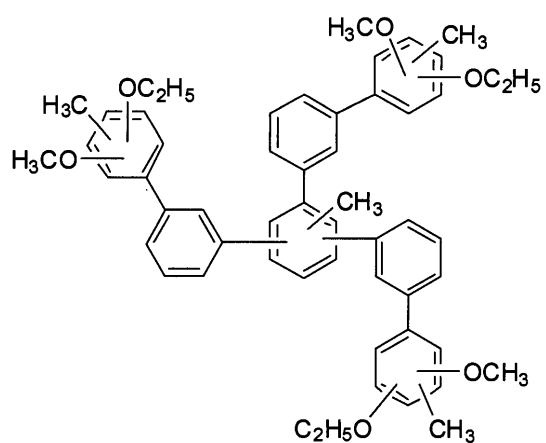
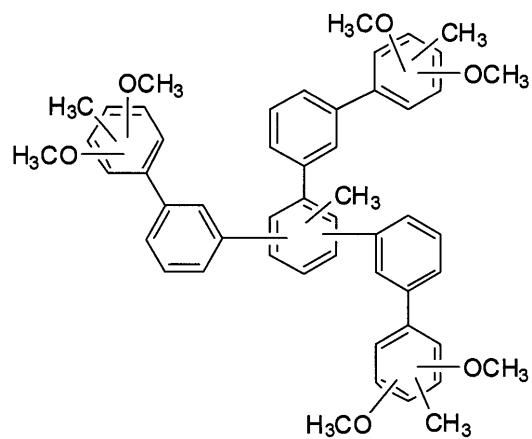


30

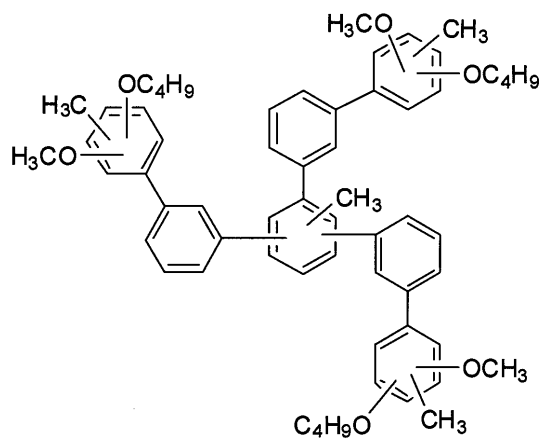
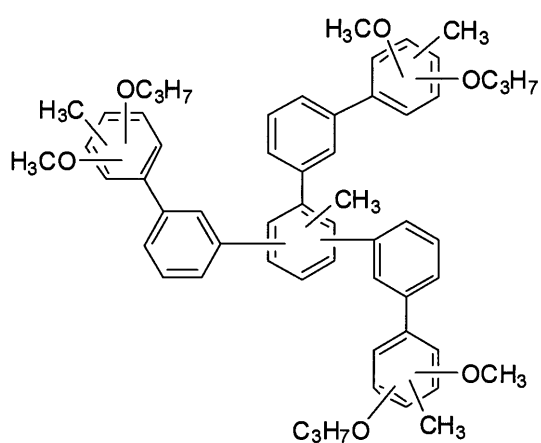
40

【0015】

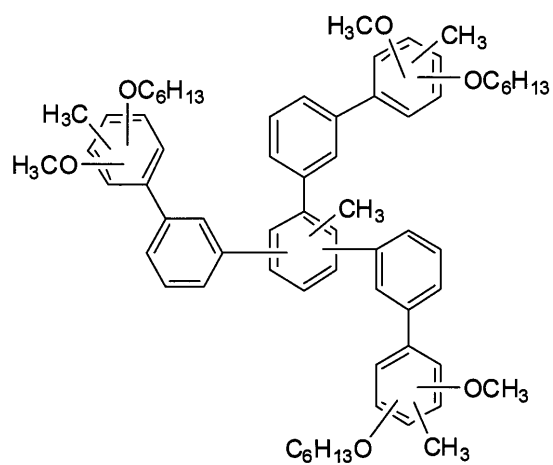
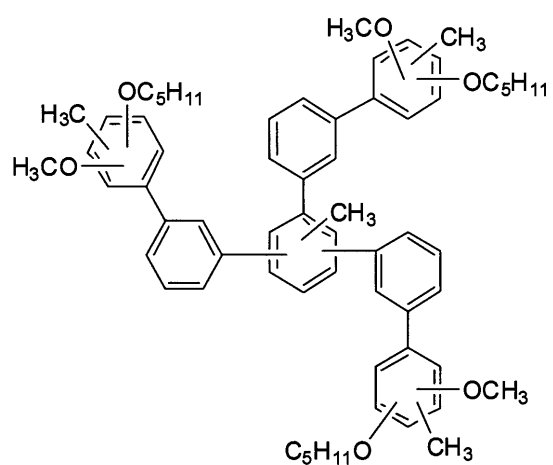
【化 1 1】



10



20

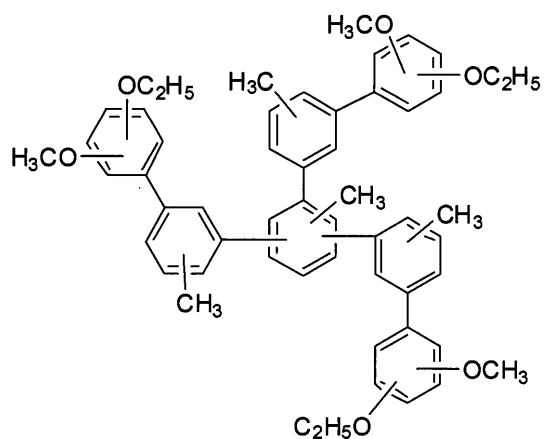
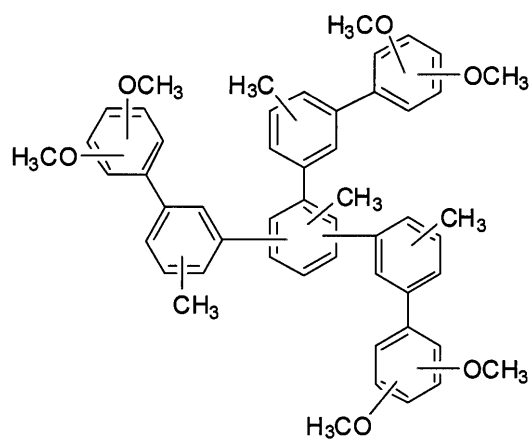


30

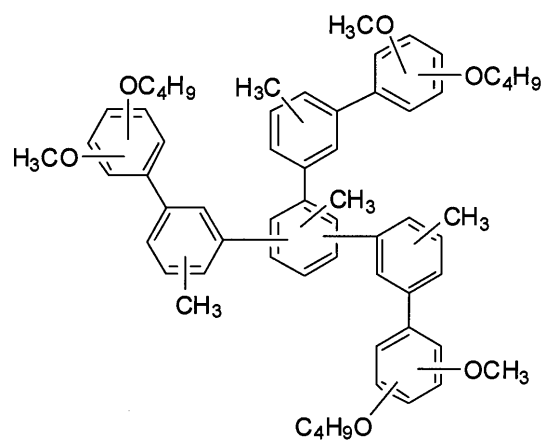
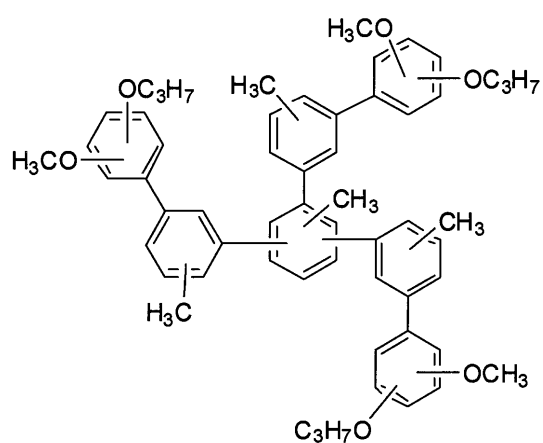
40

【 0 0 1 6】

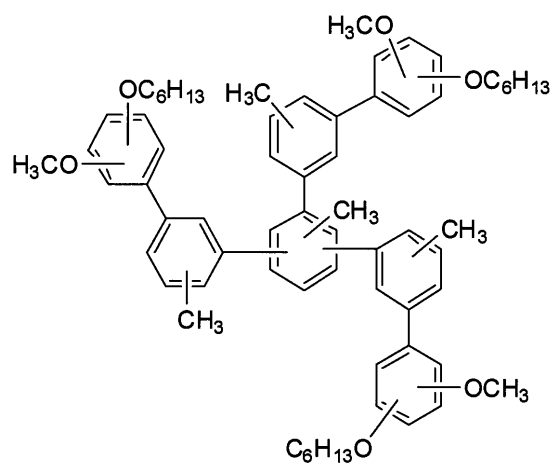
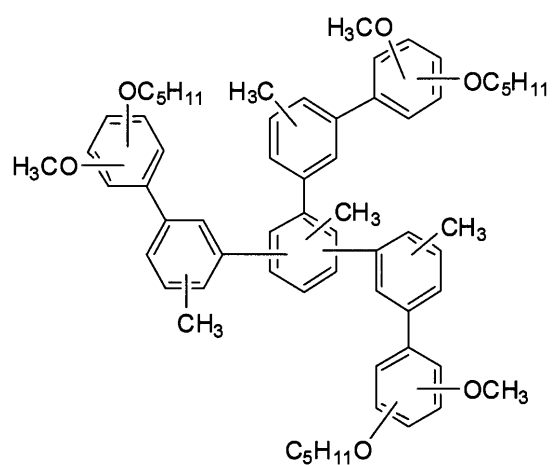
【化 1 2】



10



20

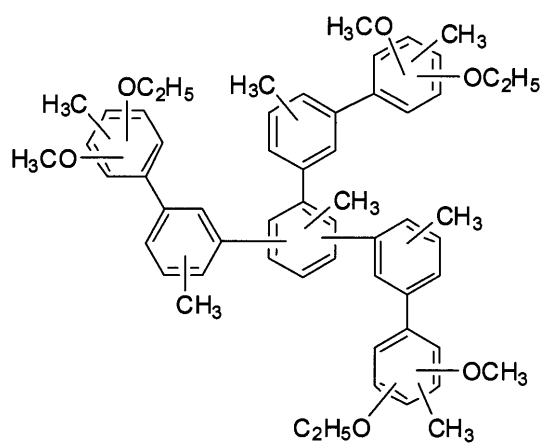
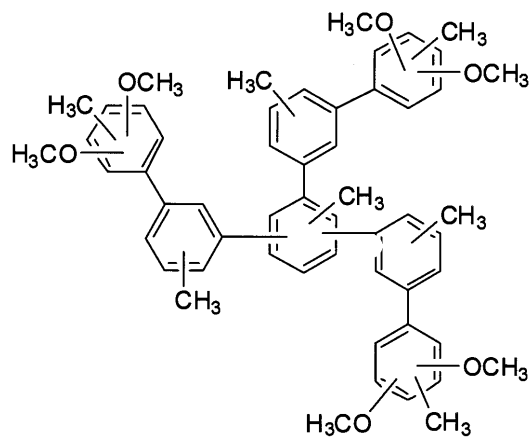


30

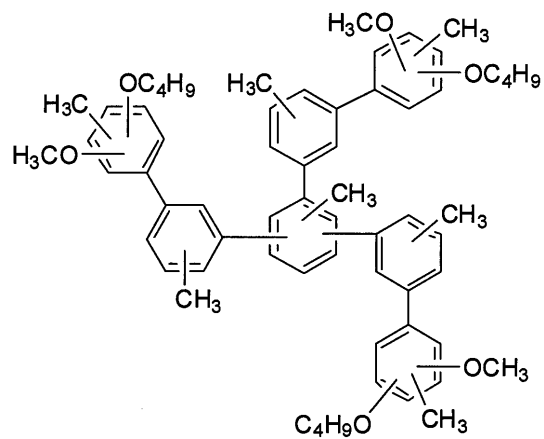
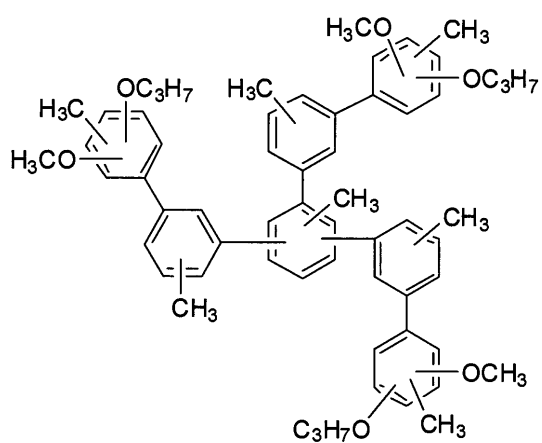
【 0 0 1 7 】

40

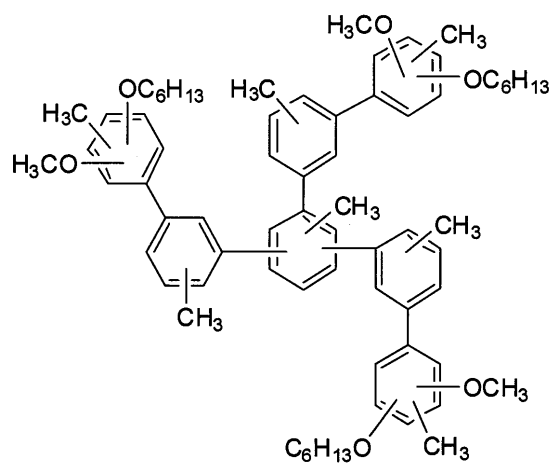
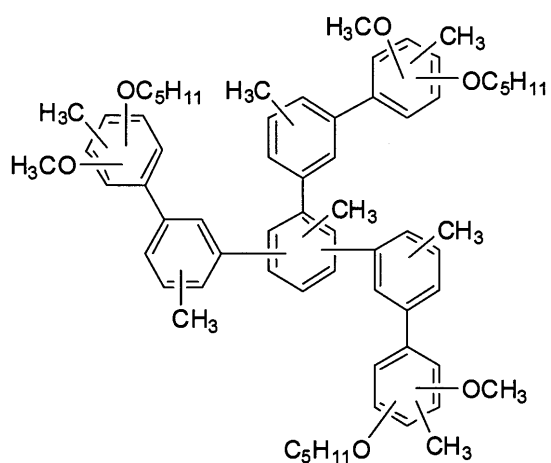
【化 1 3】



10



20

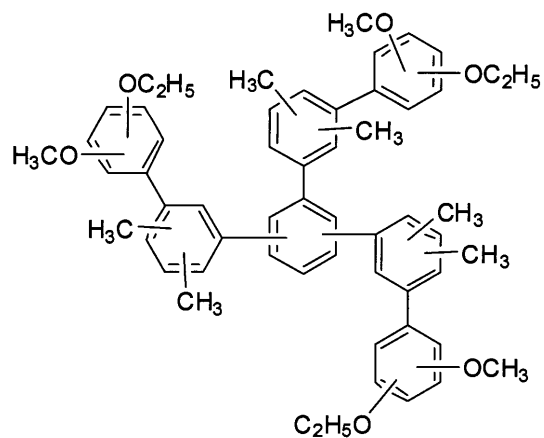
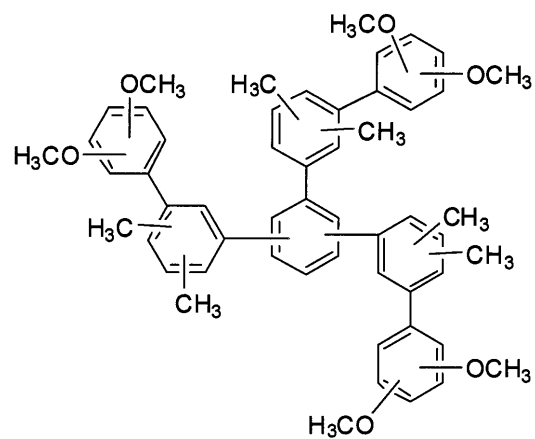


30

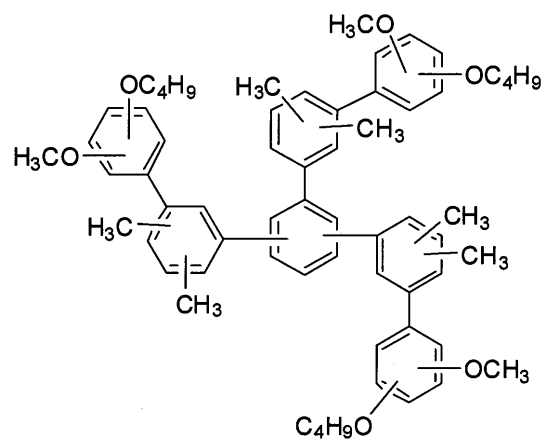
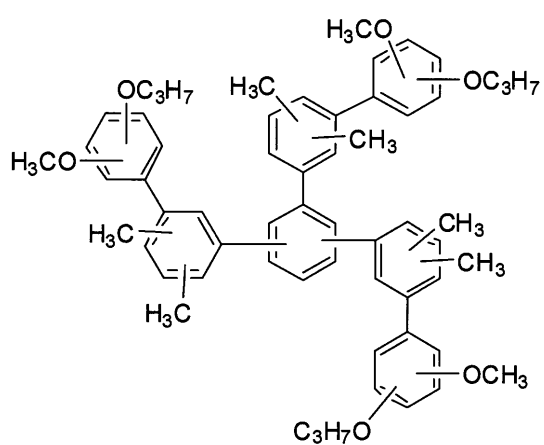
【 0 0 1 8】

40

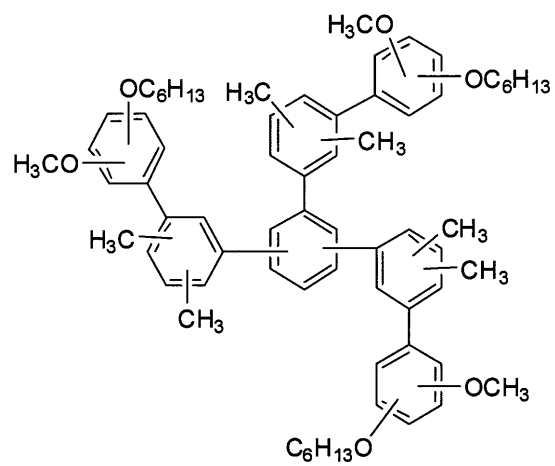
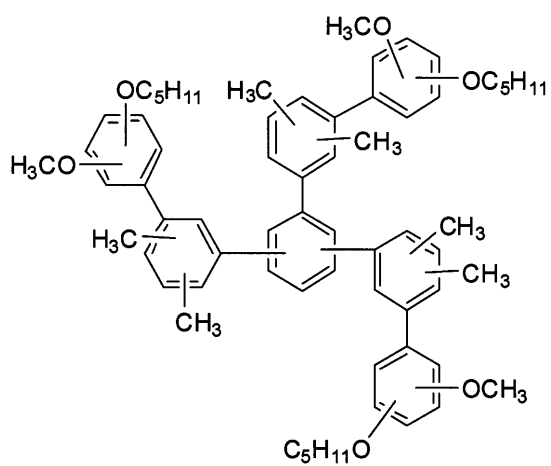
【化 1 4】



10



20

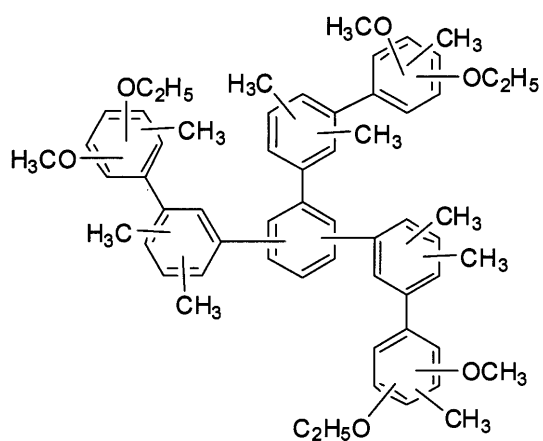
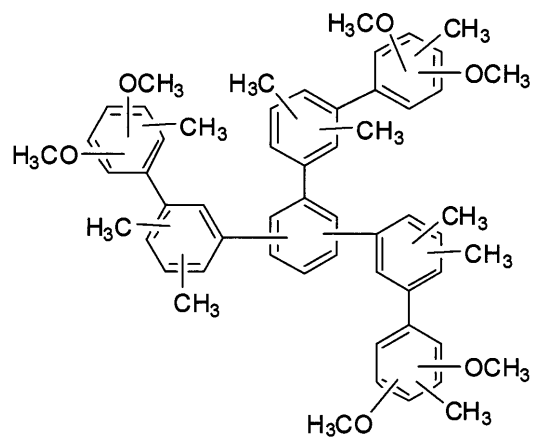


30

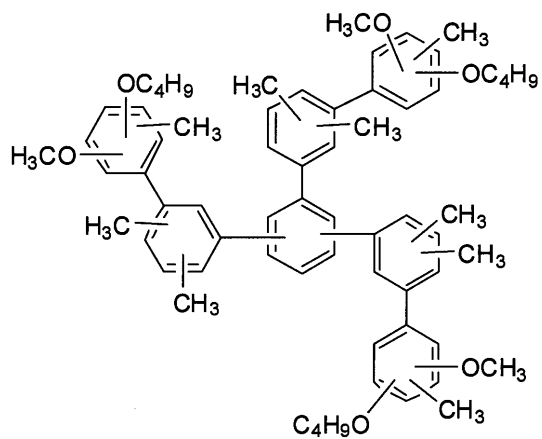
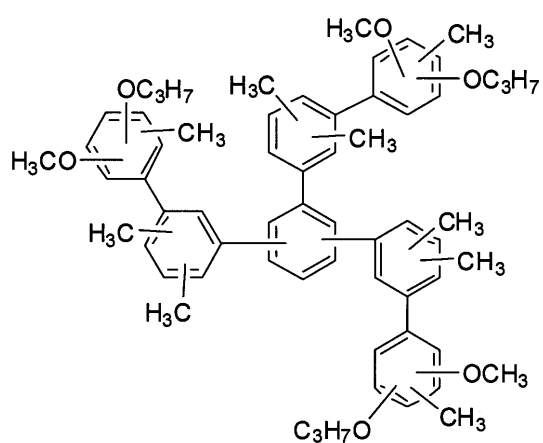
【 0 0 1 9】

40

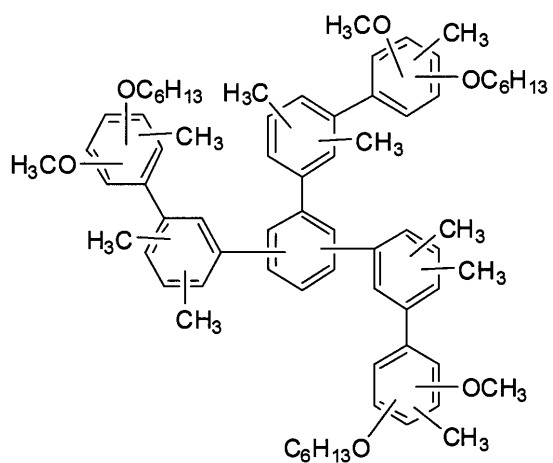
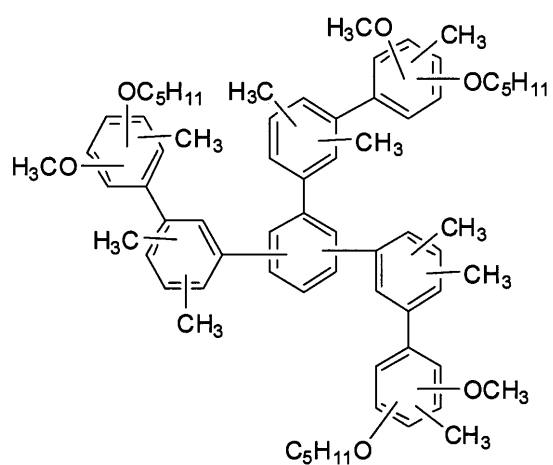
【化 1 5】



10



20

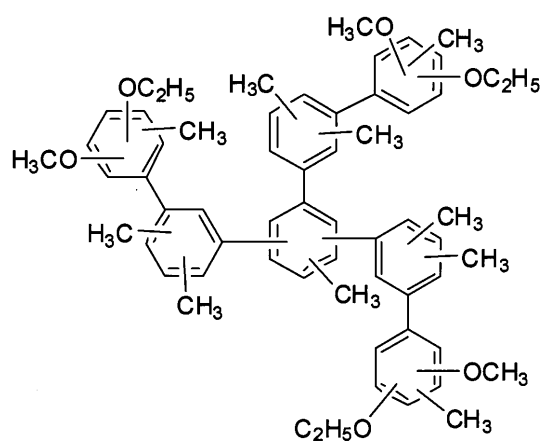
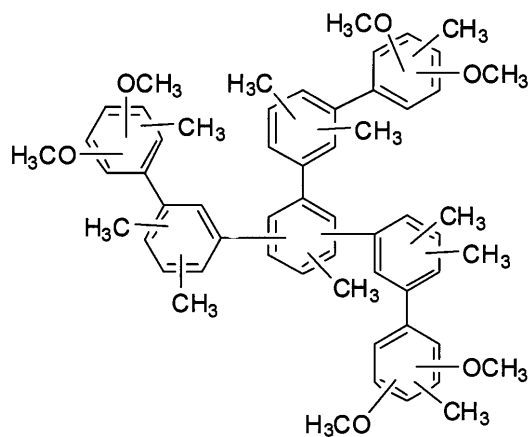


30

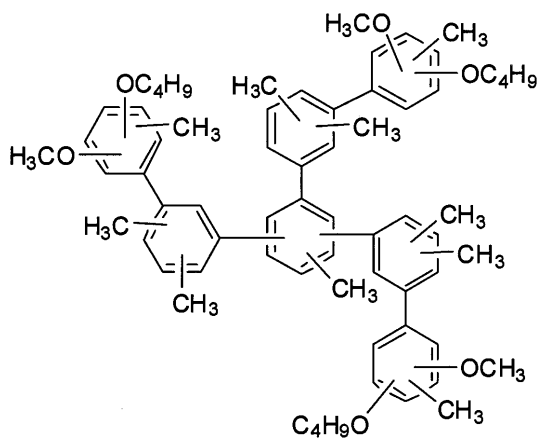
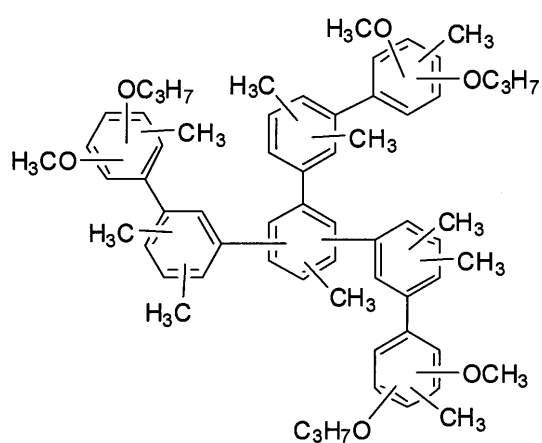
40

【 0 0 2 0 】

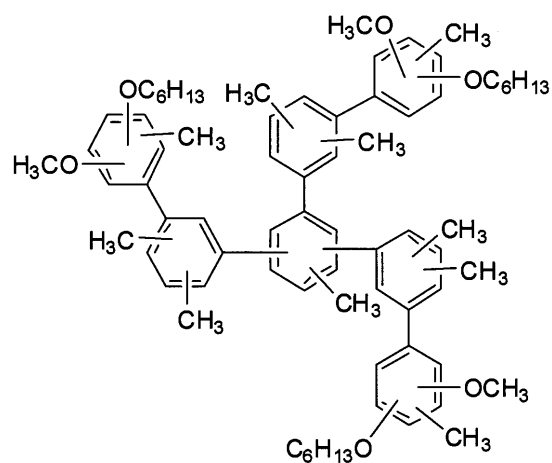
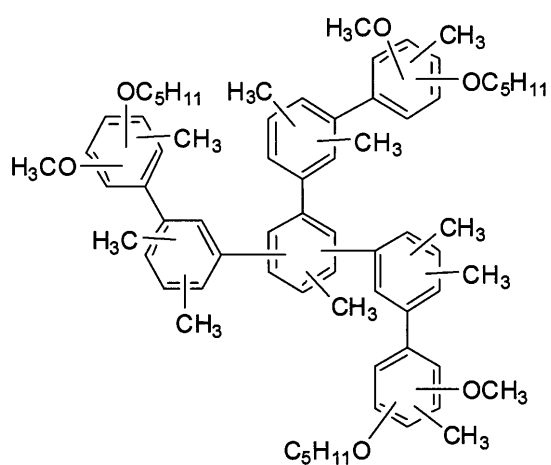
【化 1 6】



10



20

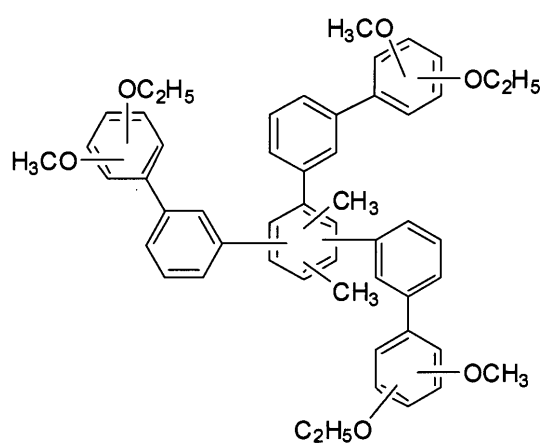
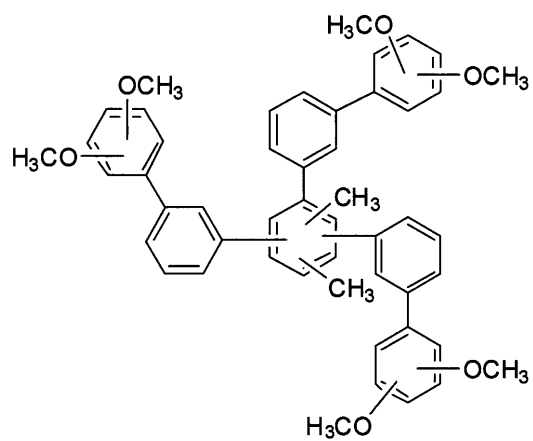


30

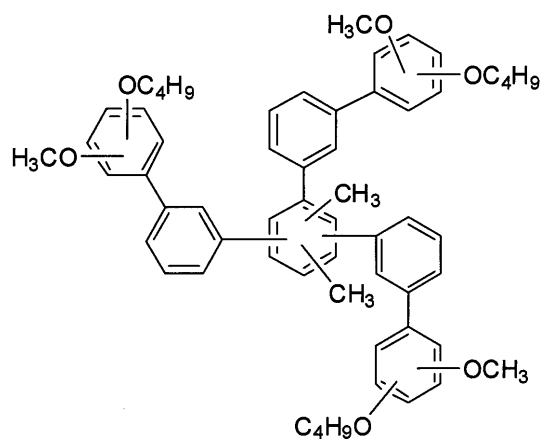
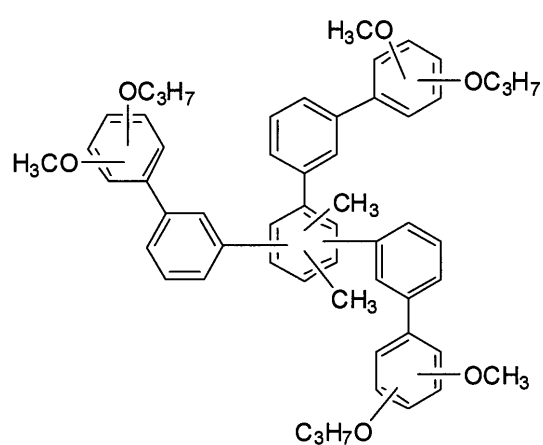
40

【 0 0 2 1】

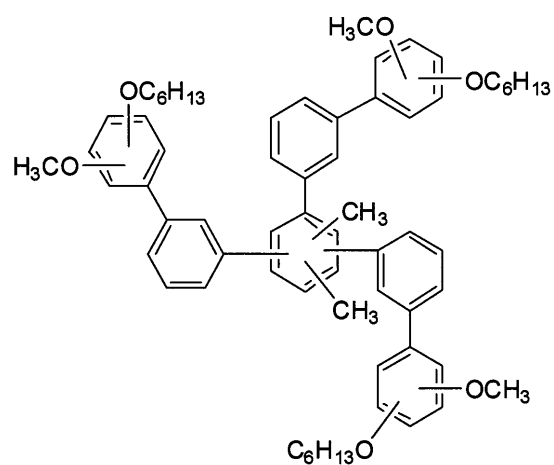
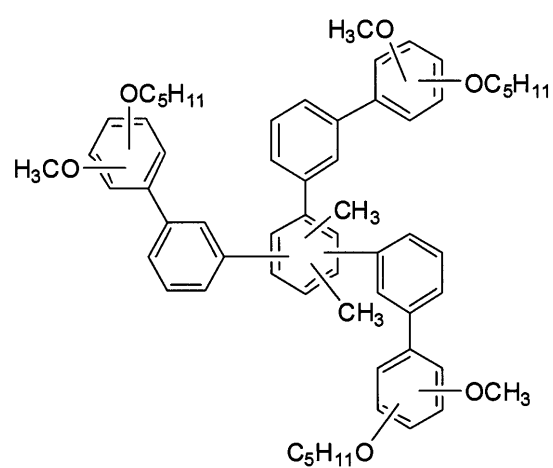
【化 1 7】



10



20

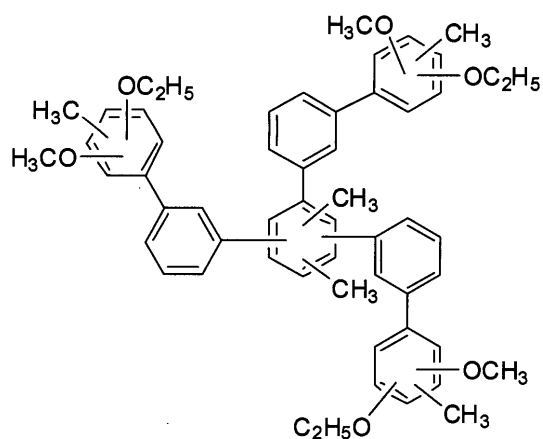
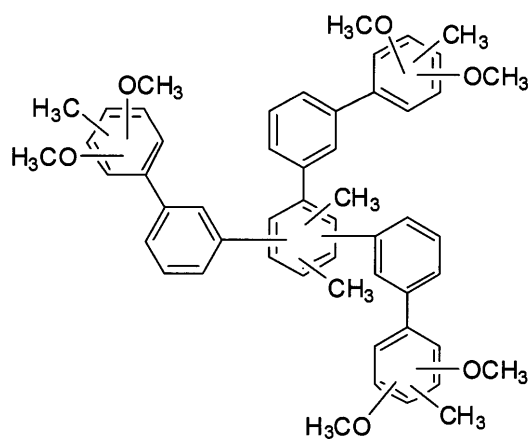


30

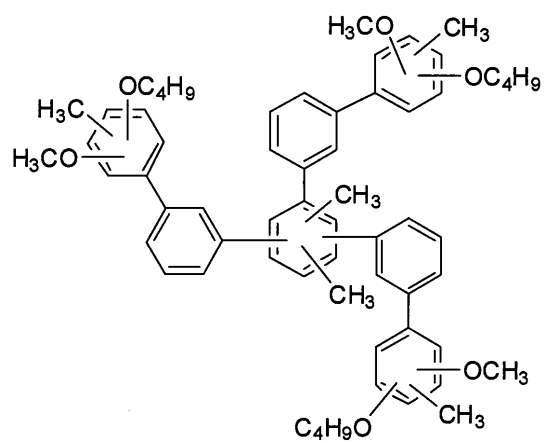
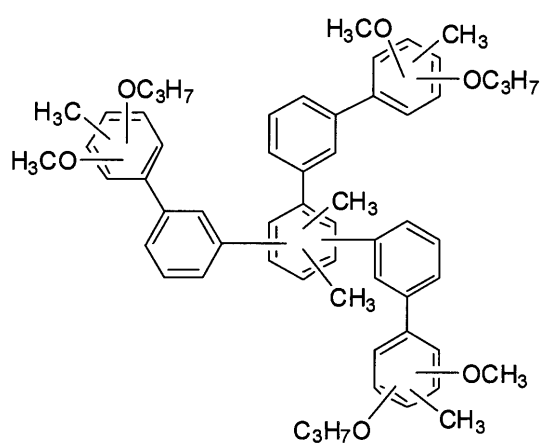
40

【 0 0 2 2 】

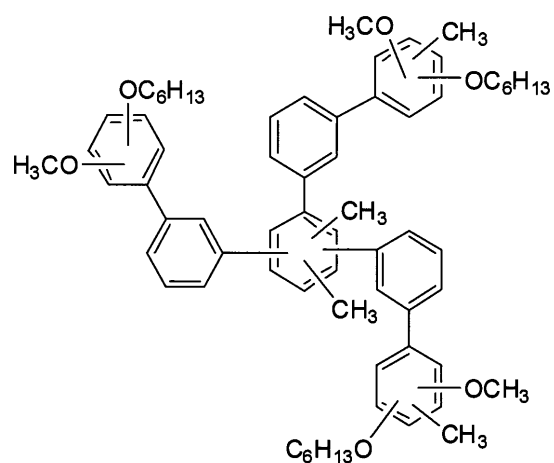
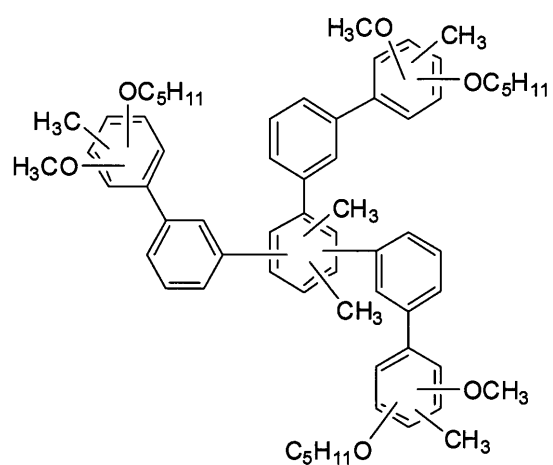
【化 1 8】



10



20

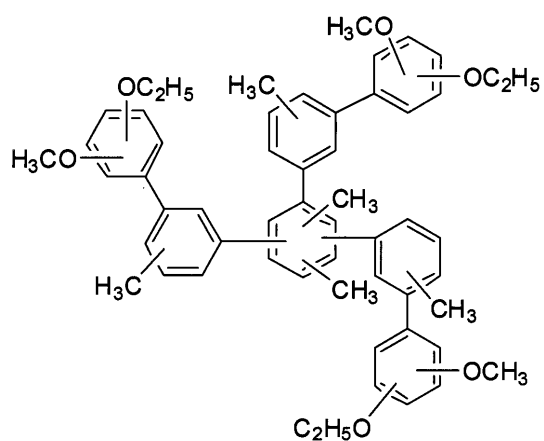
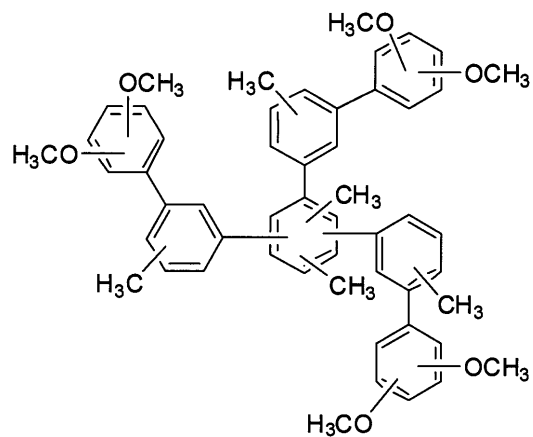


30

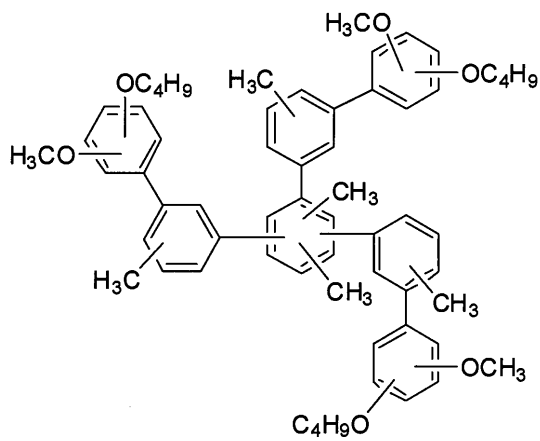
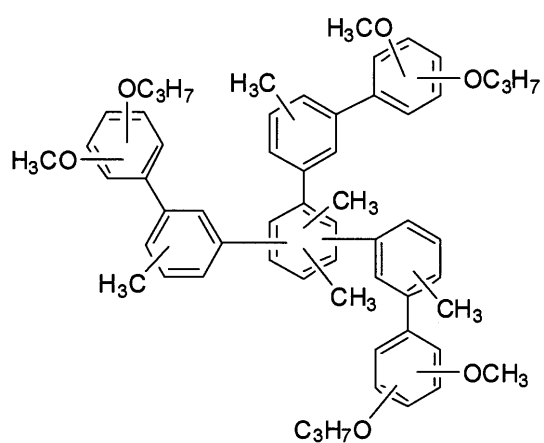
【 0 0 2 3 】

40

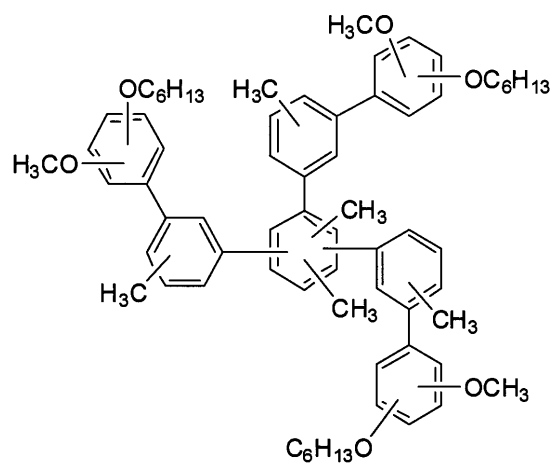
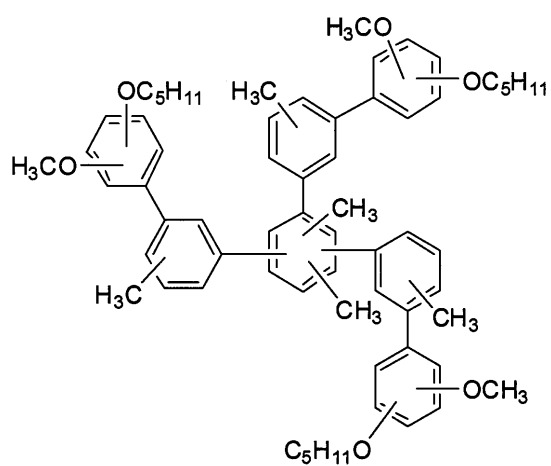
【化 1 9】



10



20

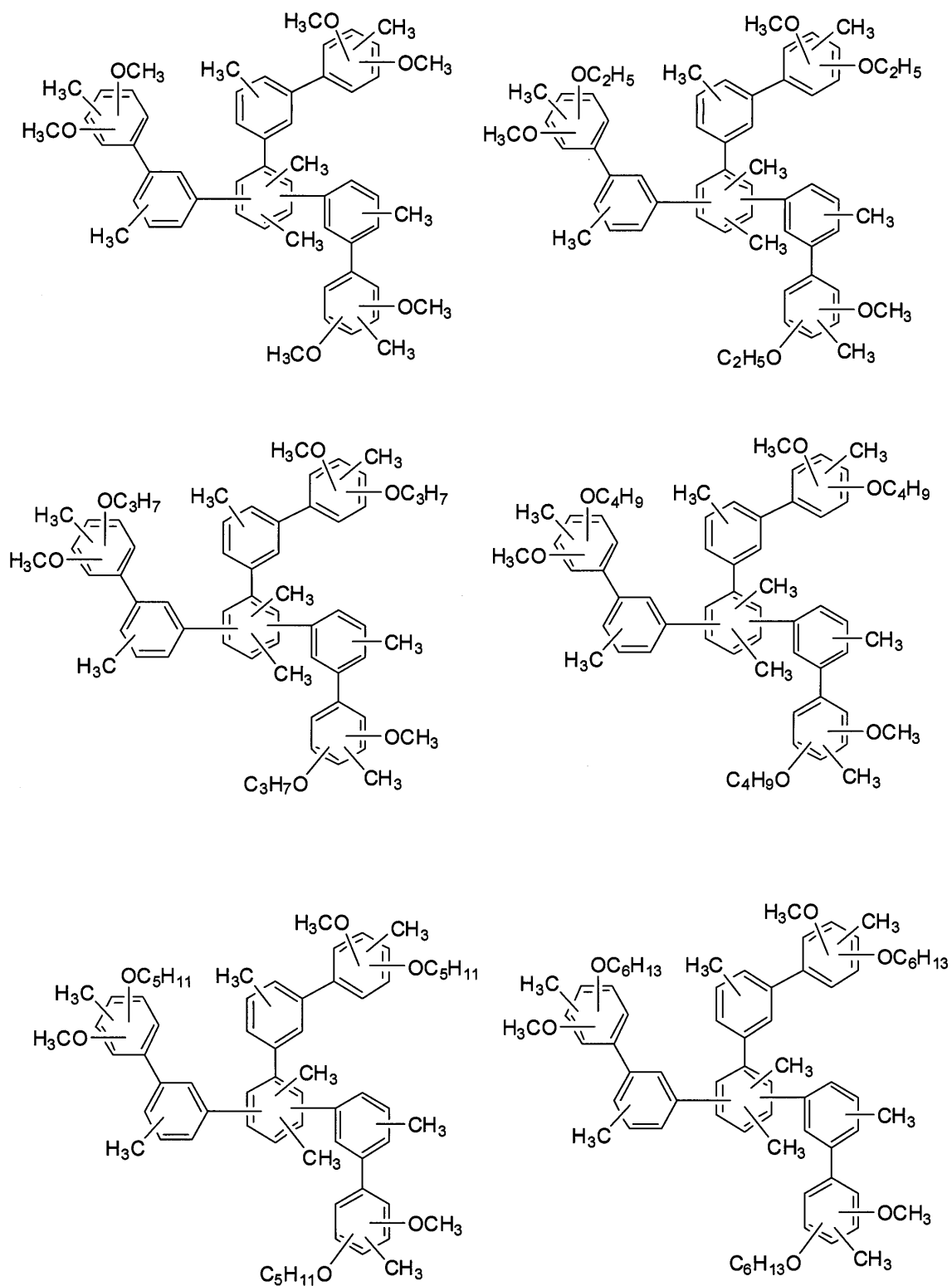


30

40

【 0 0 2 4】

【化 20】



10

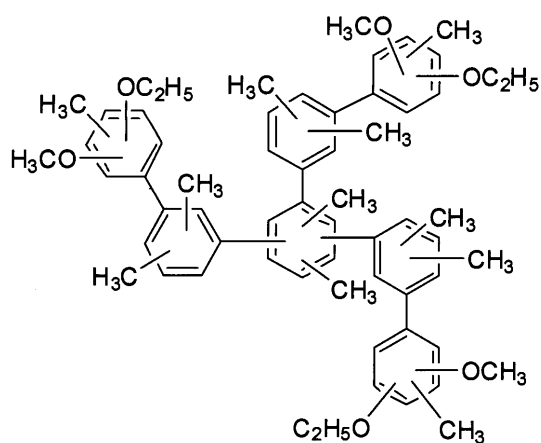
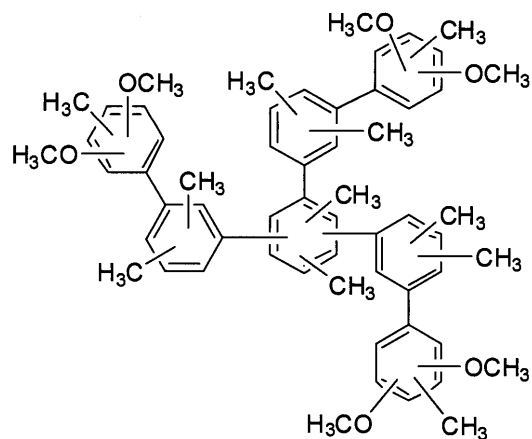
20

30

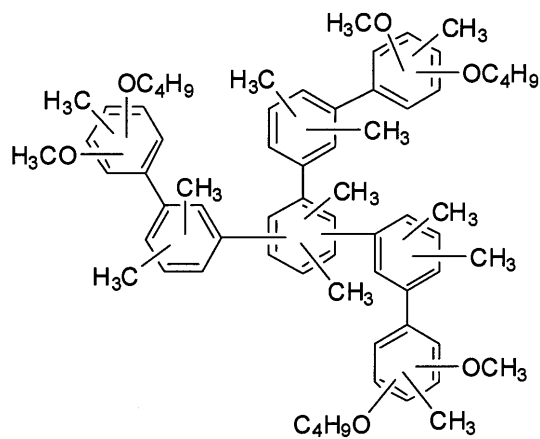
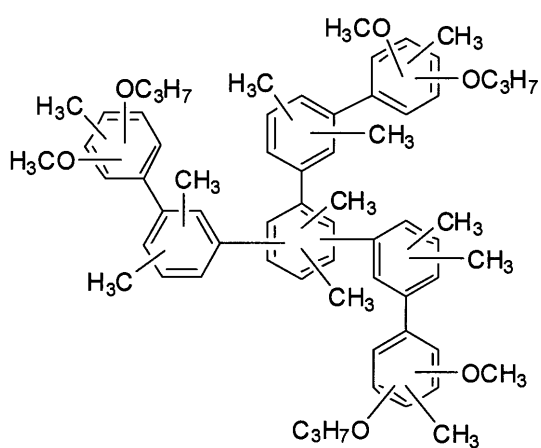
40

【0025】

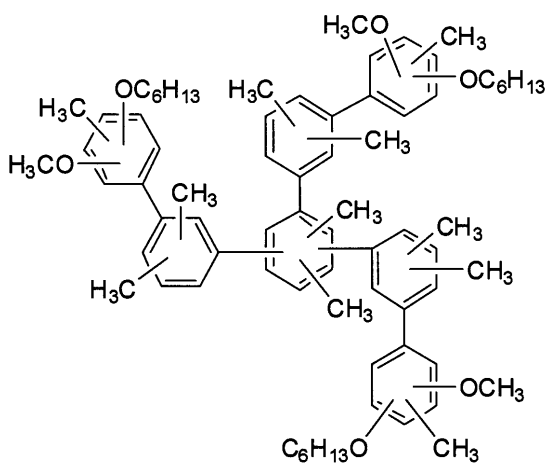
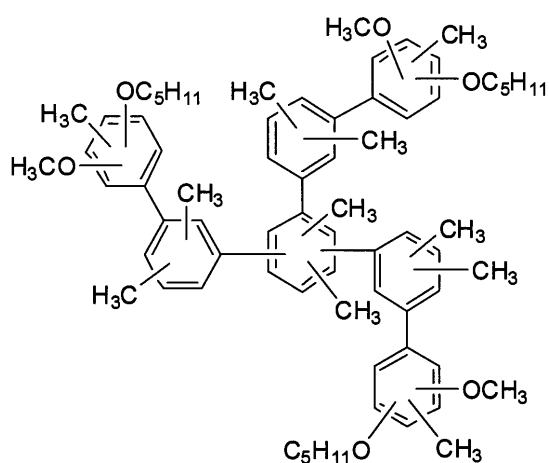
【化 2 1】



10



20

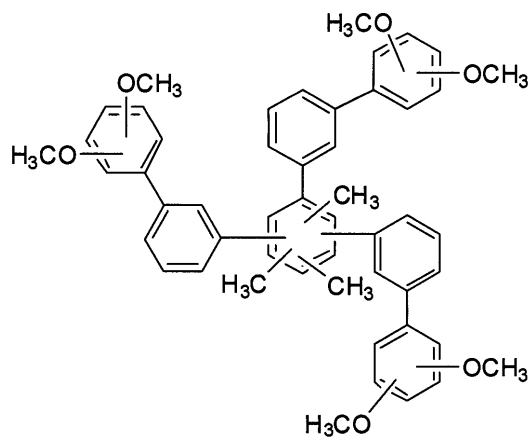


30

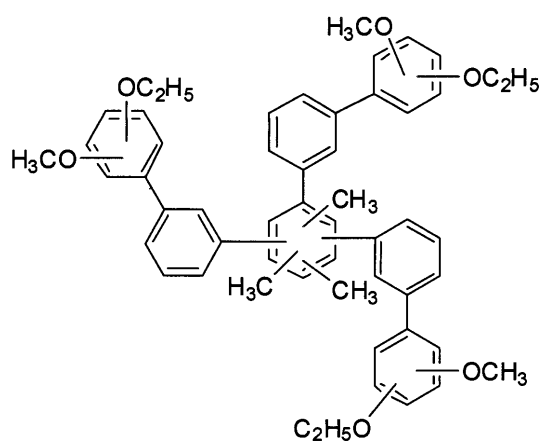
【 0 0 2 6 】

40

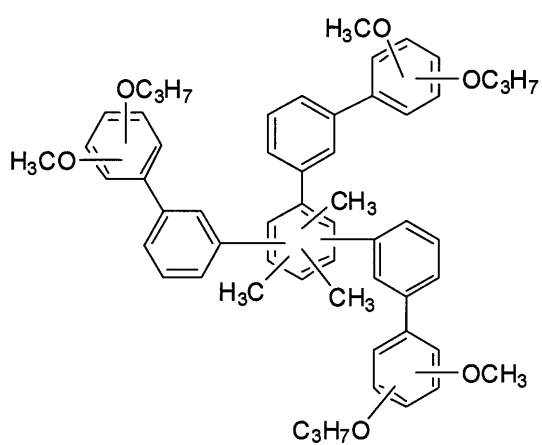
【化 2 2】



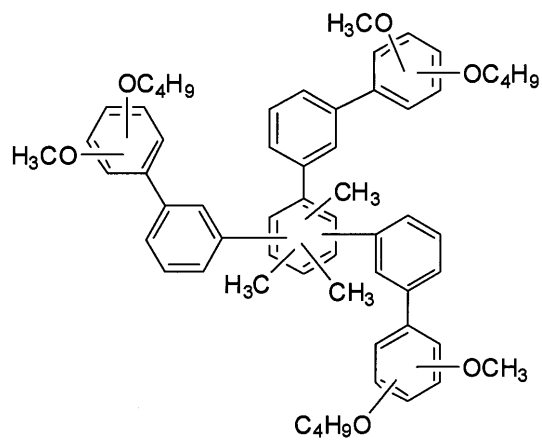
10



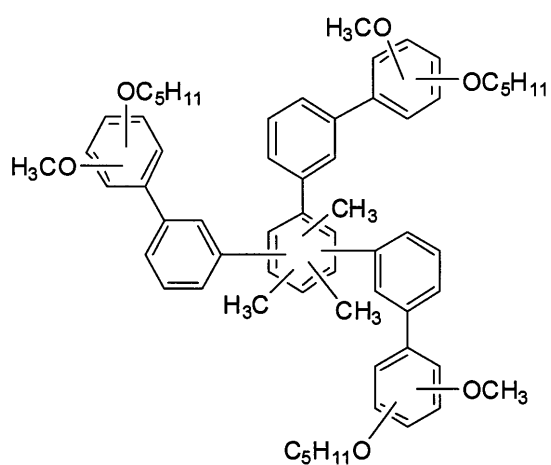
20



30

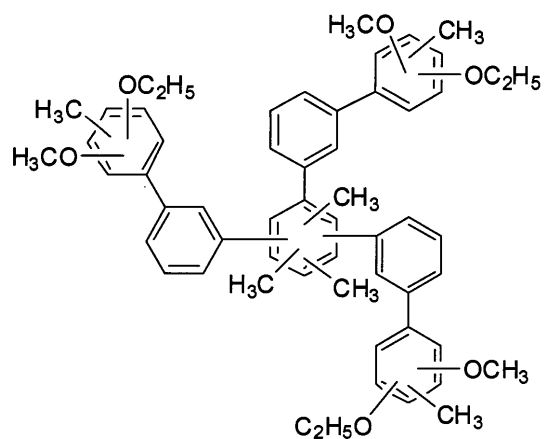
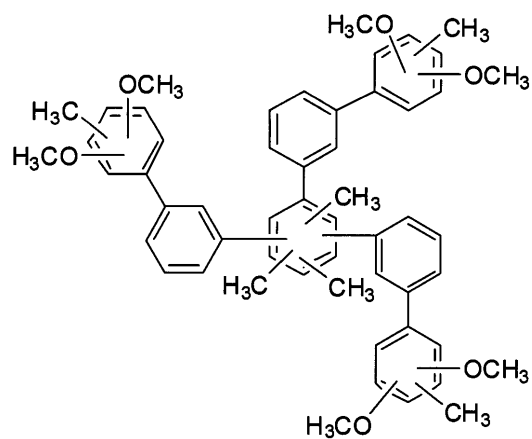


40

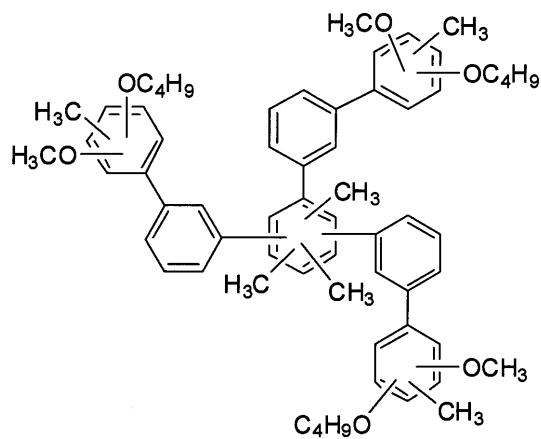
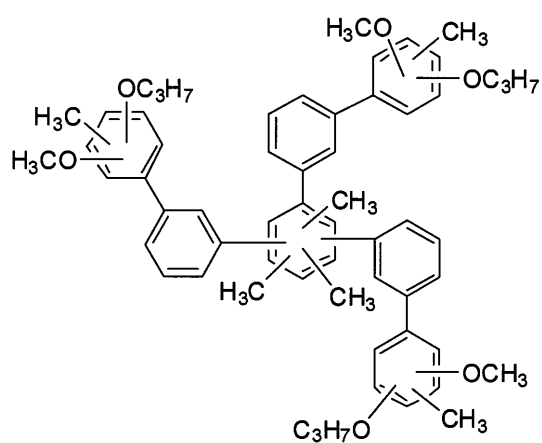


【 0 0 2 7】

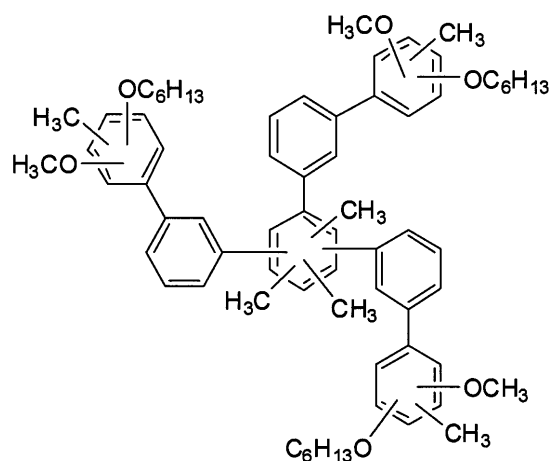
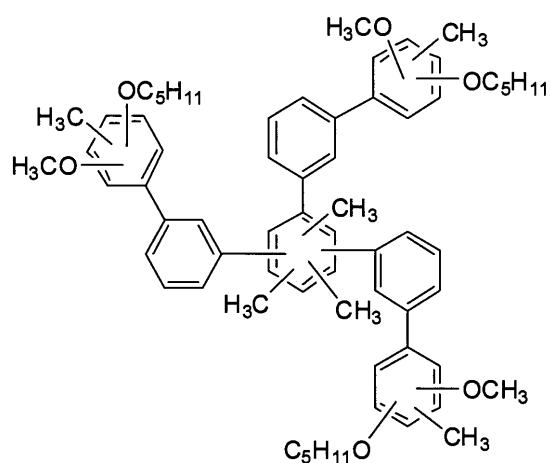
【化 2 3】



10



20

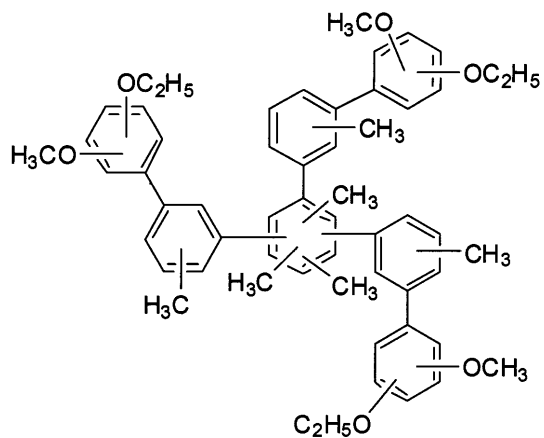
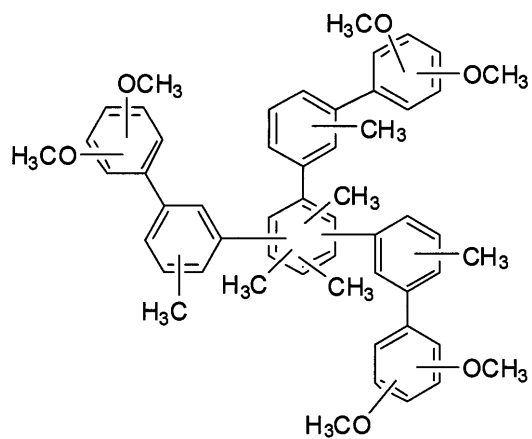


30

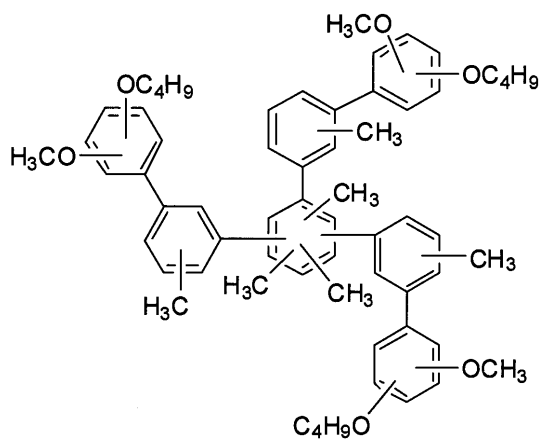
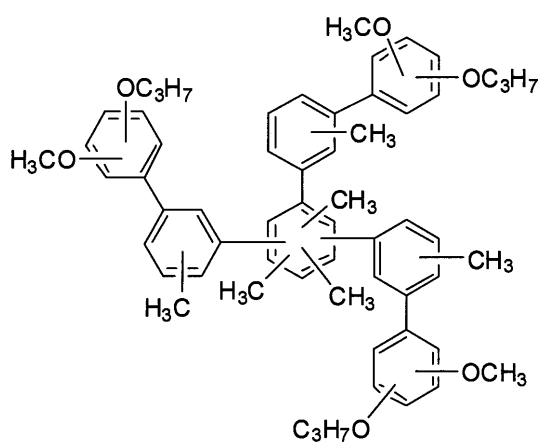
40

【 0 0 2 8 】

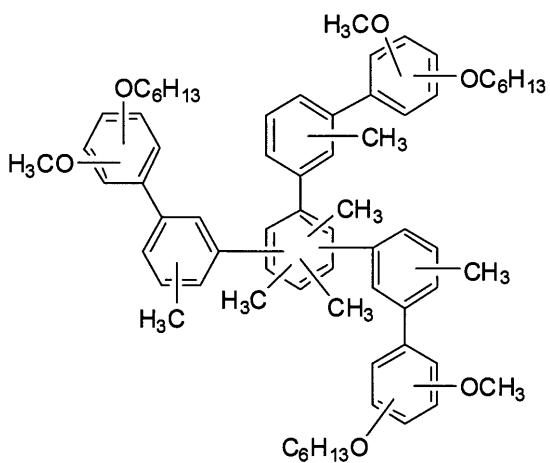
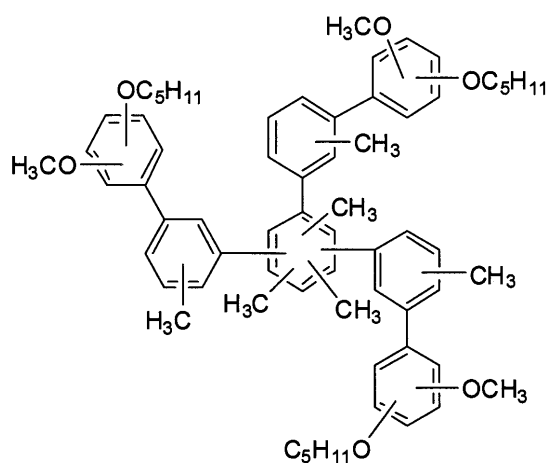
【化 2 4】



10



20

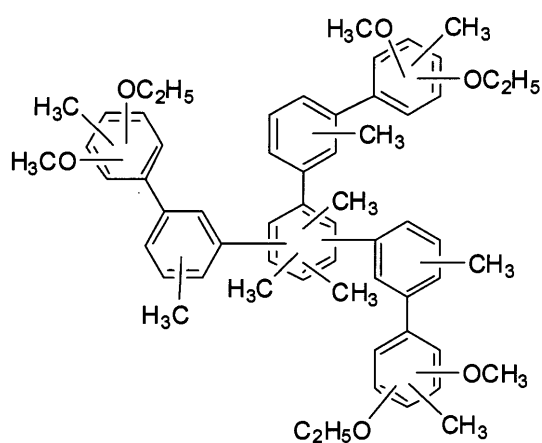
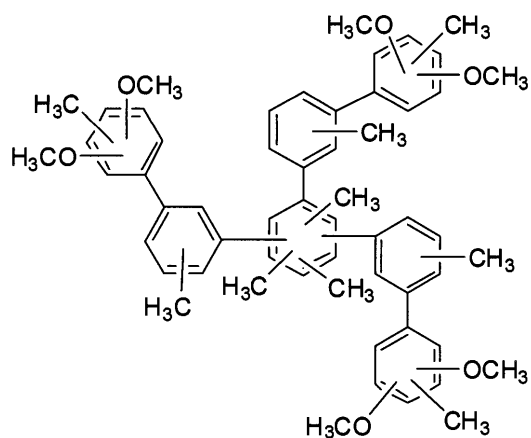


30

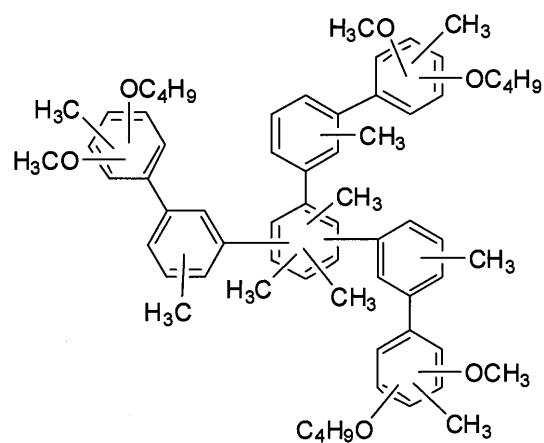
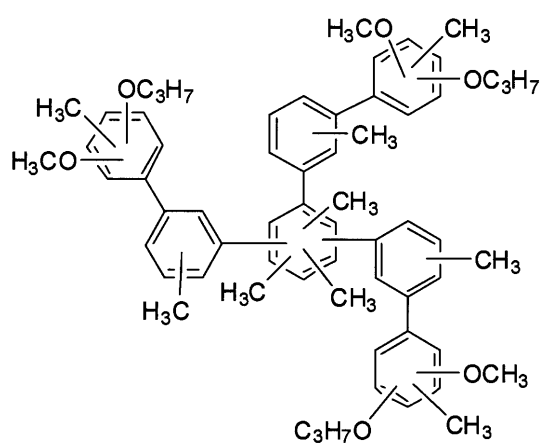
【 0 0 2 9】

40

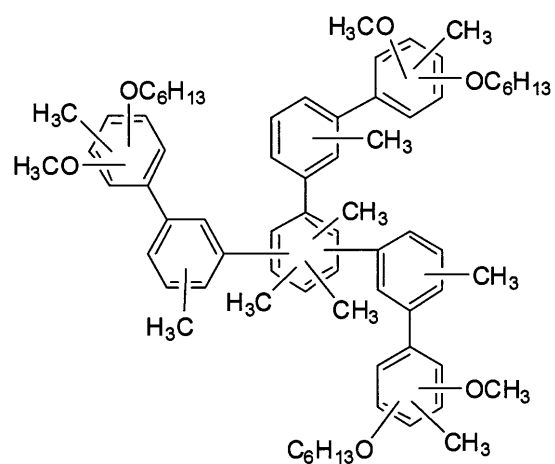
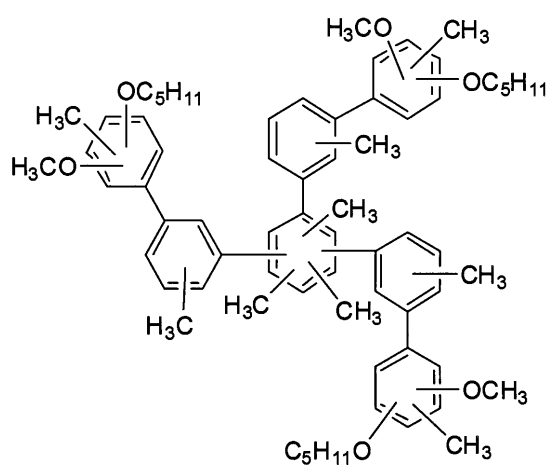
【化 2 5】



10



20

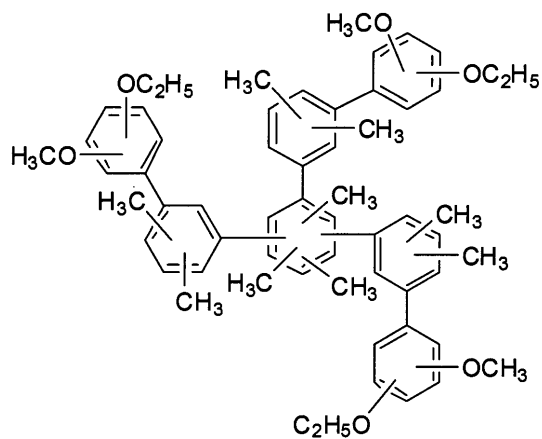
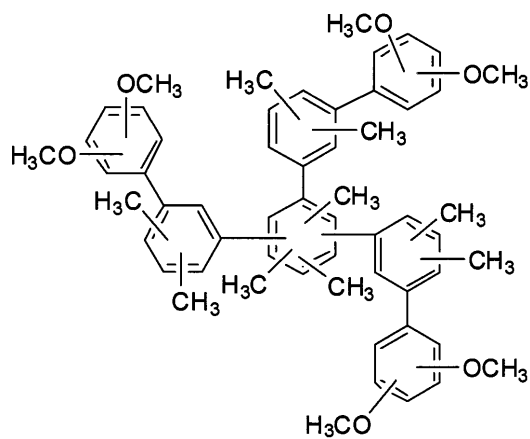


30

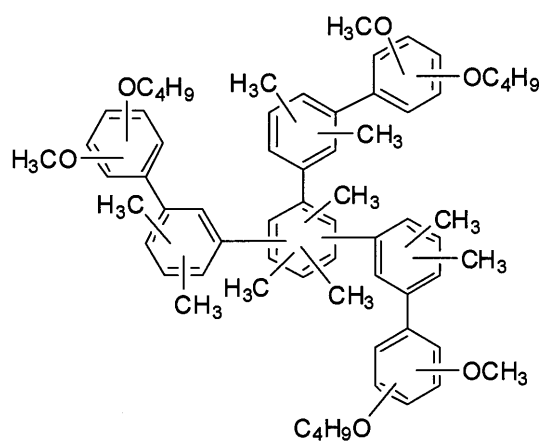
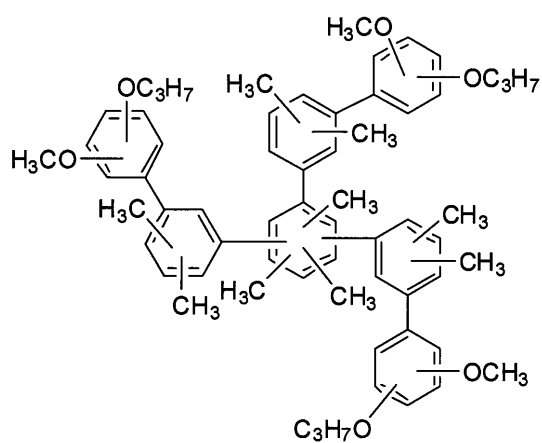
【 0 0 3 0 】

40

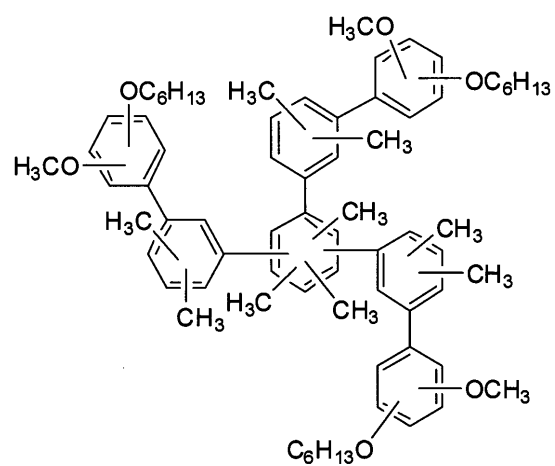
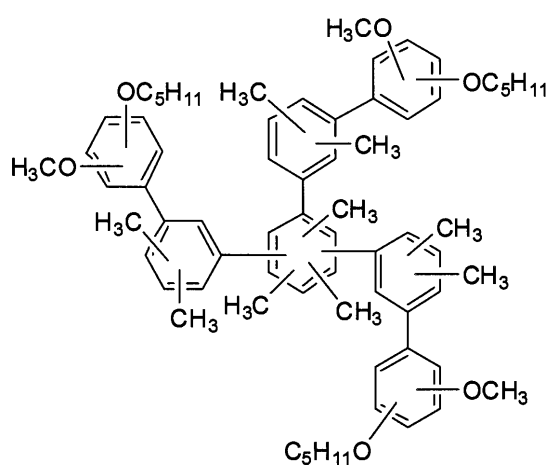
【化 2 6】



10



20

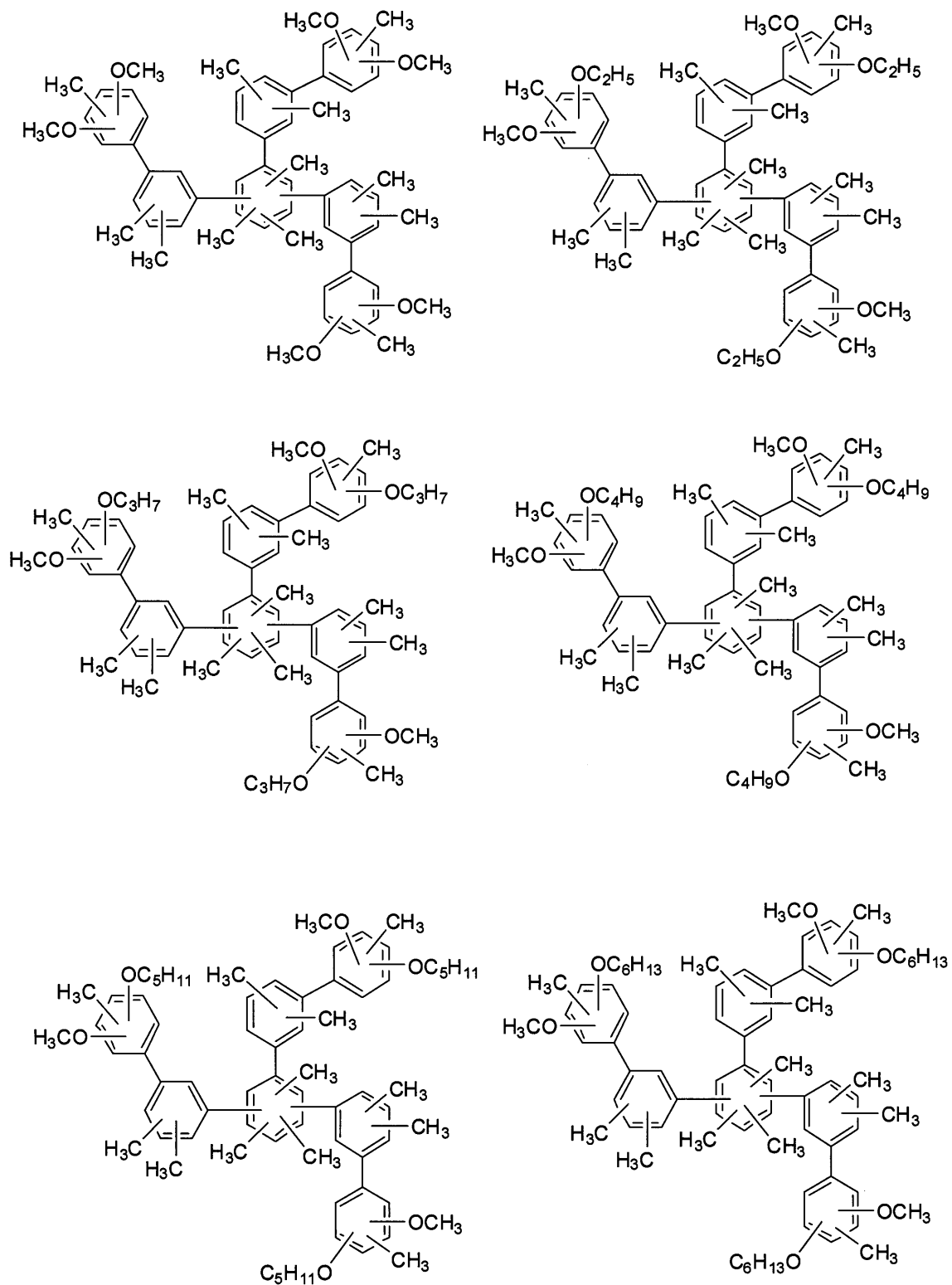


30

40

【 0 0 3 1】

【化 27】



10

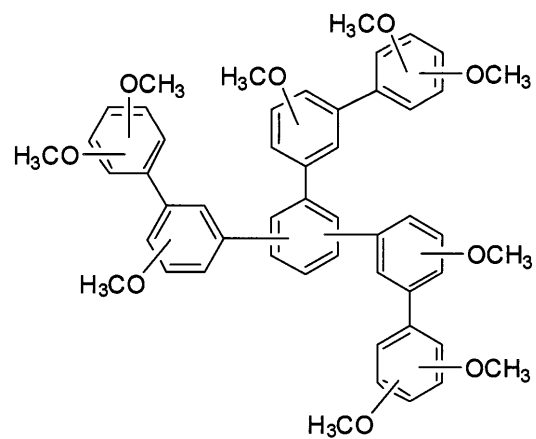
20

30

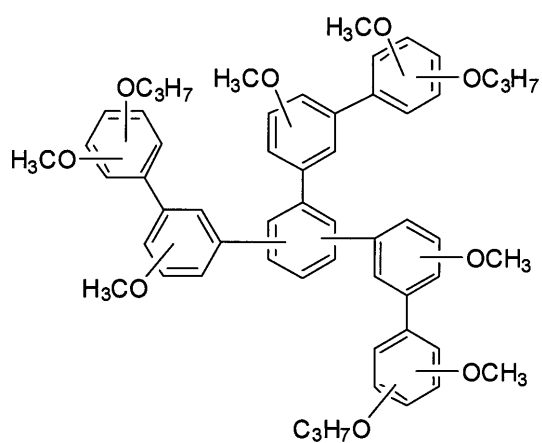
40

【0032】

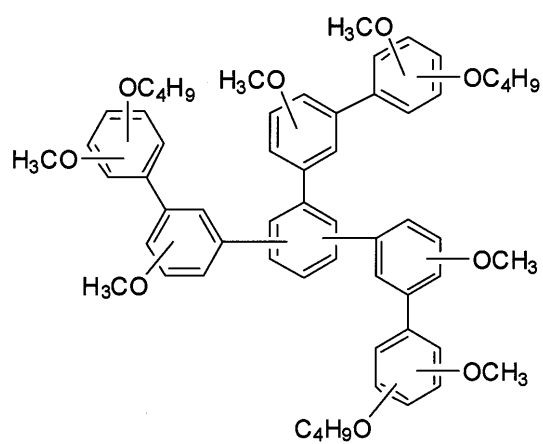
【化 2 8】



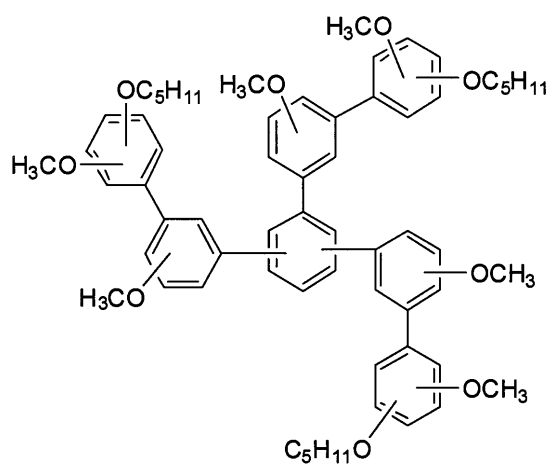
10



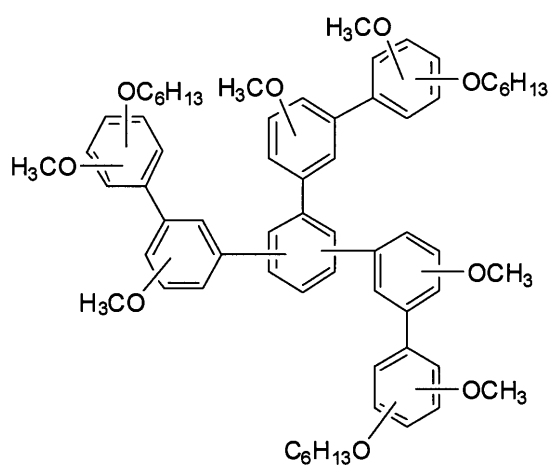
20



30

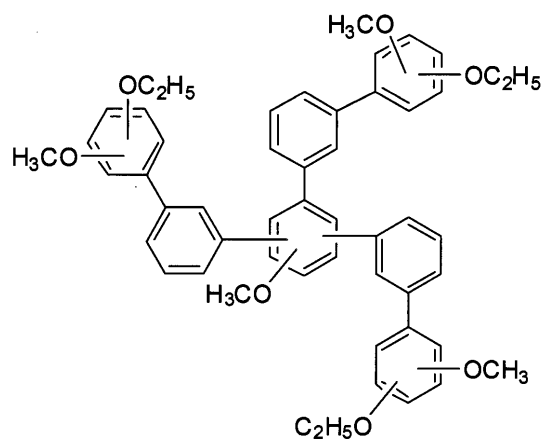
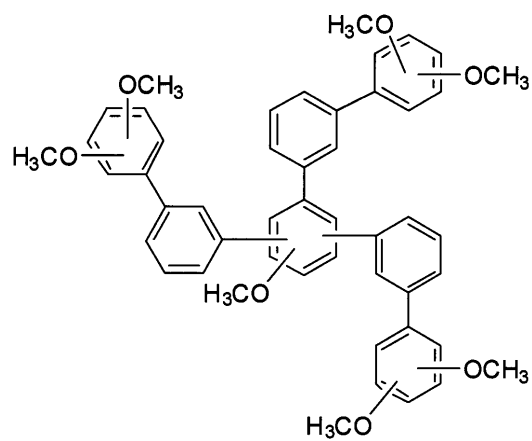


40

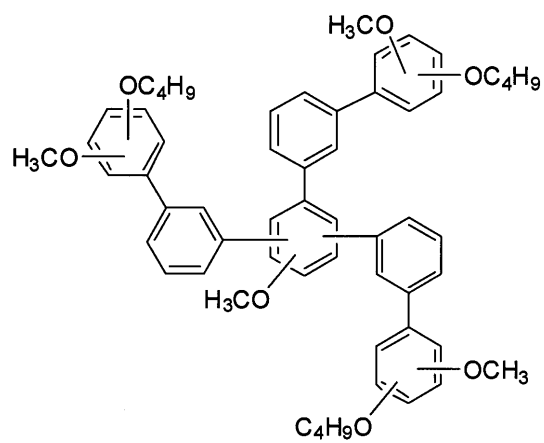
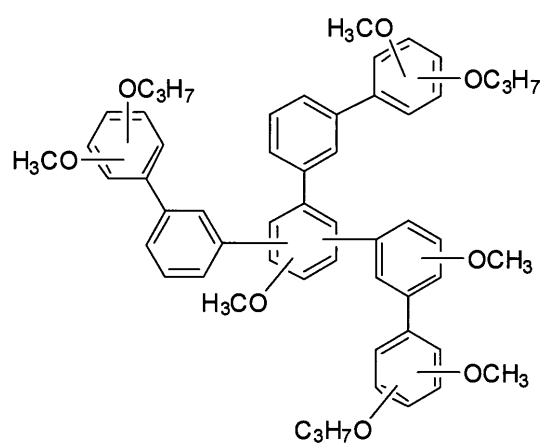


【 0 0 3 3 】

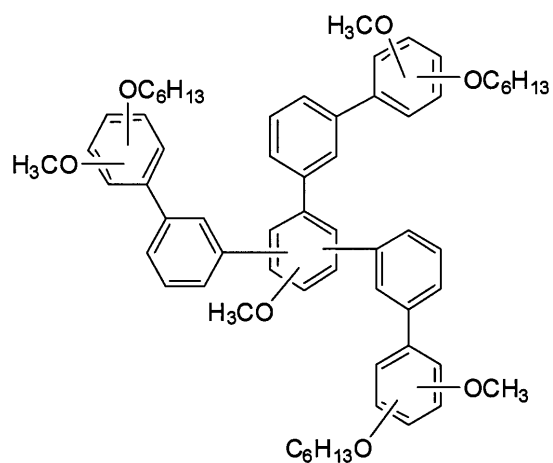
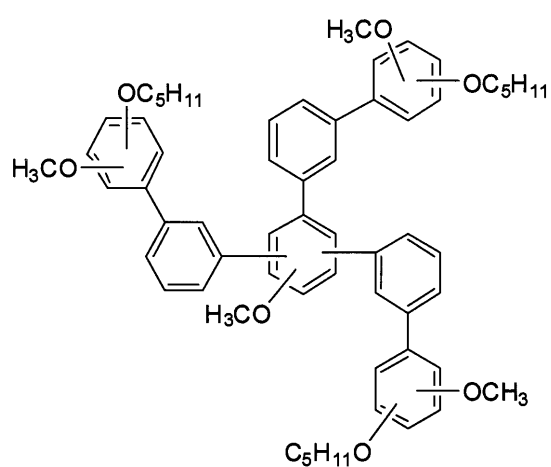
【化 2 9】



10



20

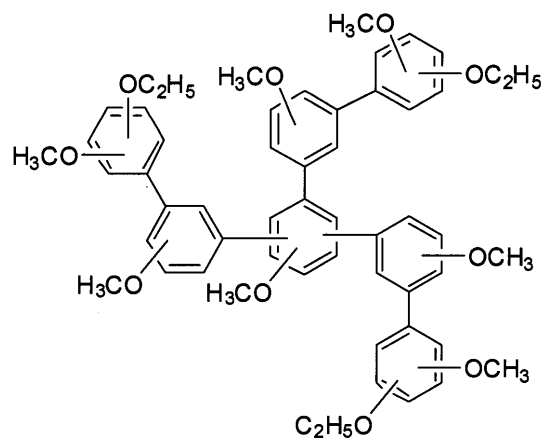
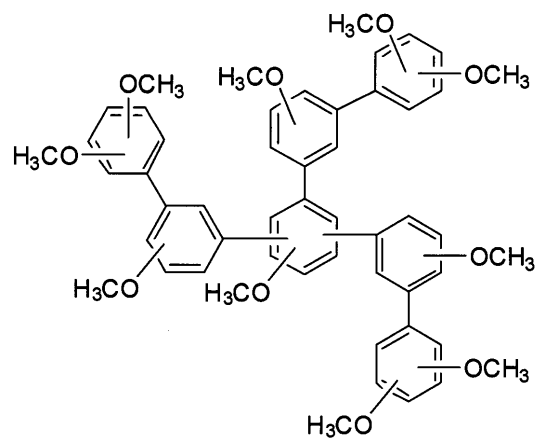


30

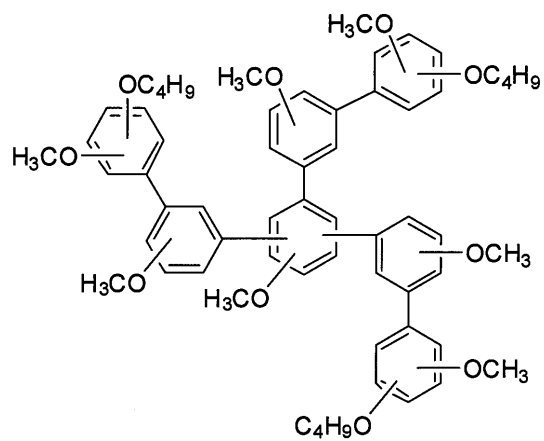
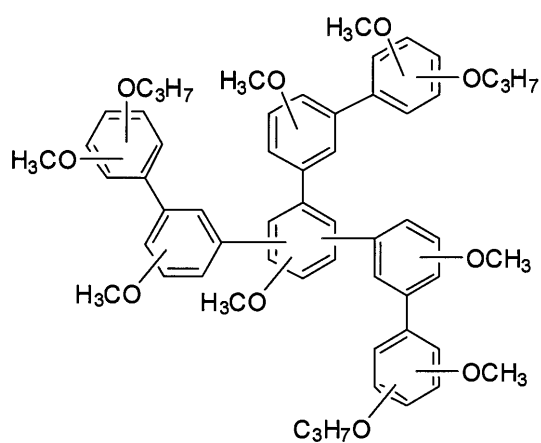
40

【 0 0 3 4 】

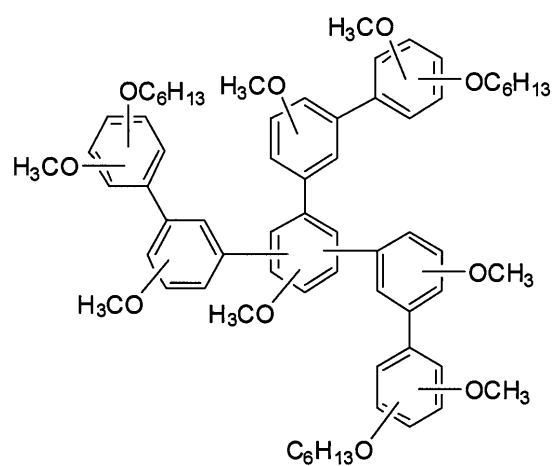
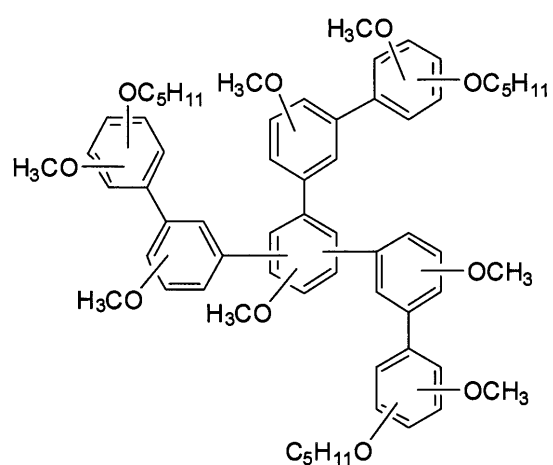
【化 30】



10



20

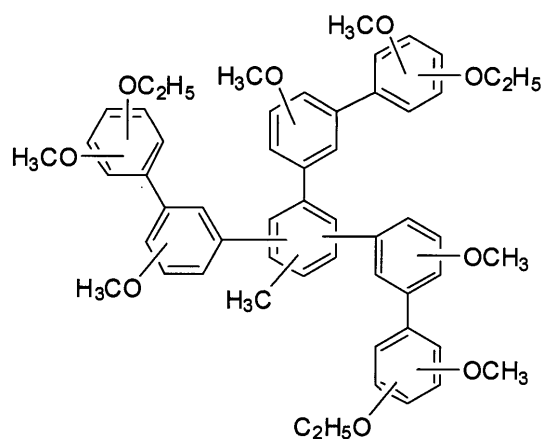
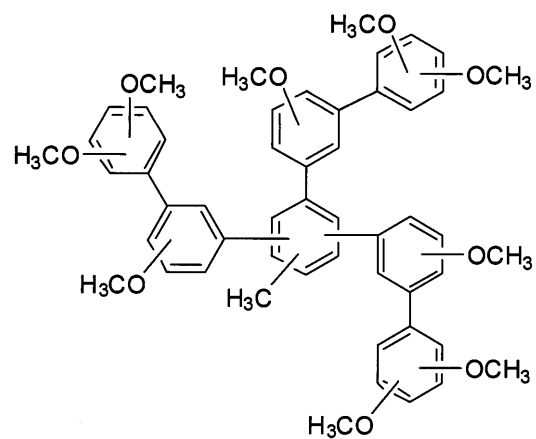


30

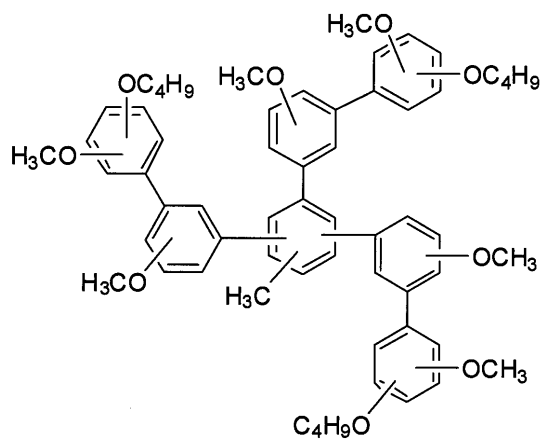
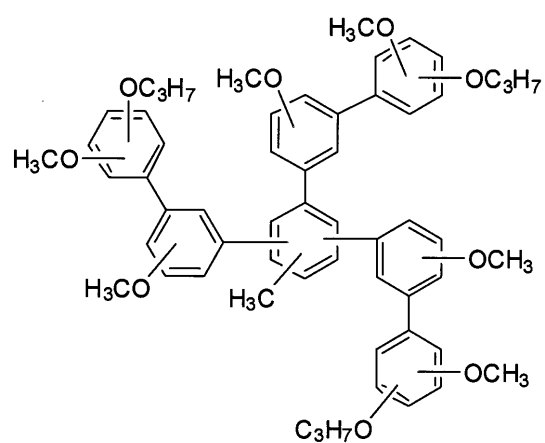
40

【0035】

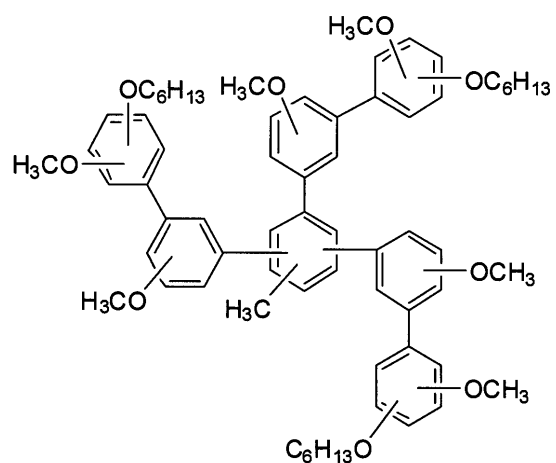
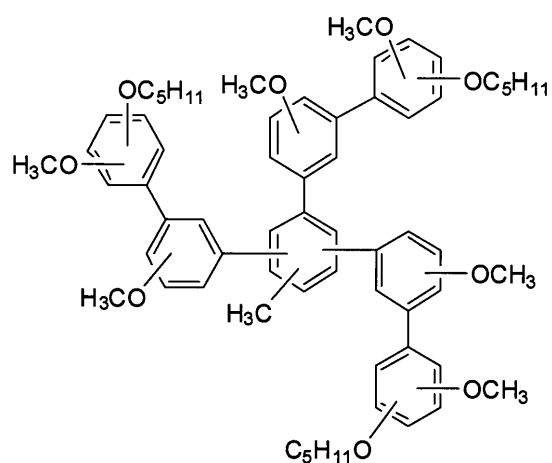
【化 3 1】



10



20

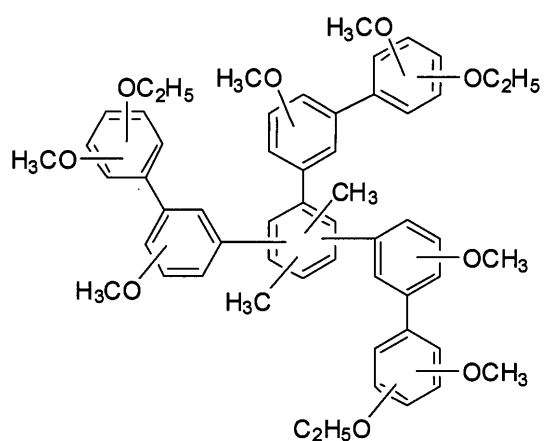
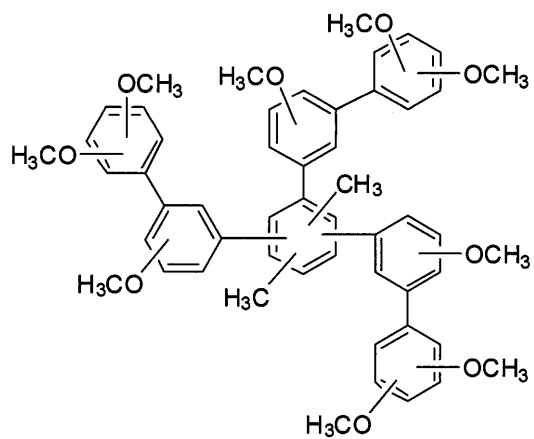


30

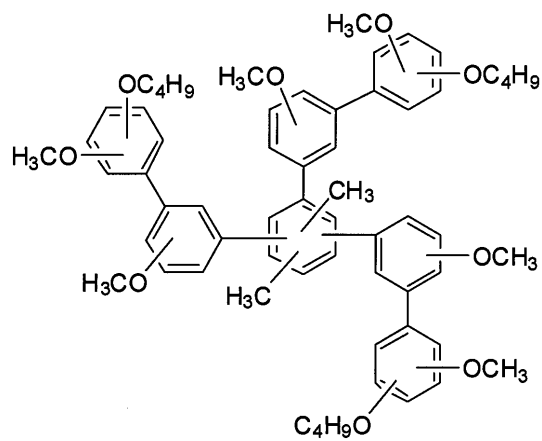
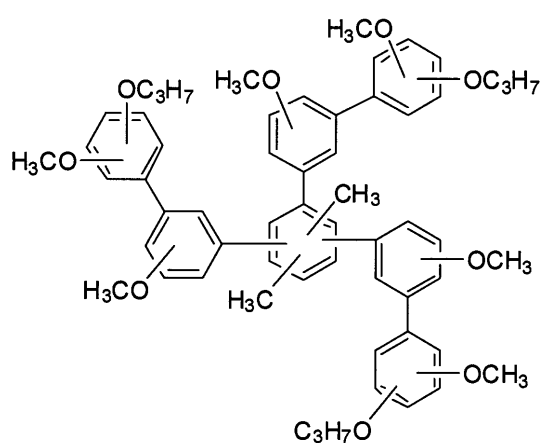
40

【 0 0 3 6】

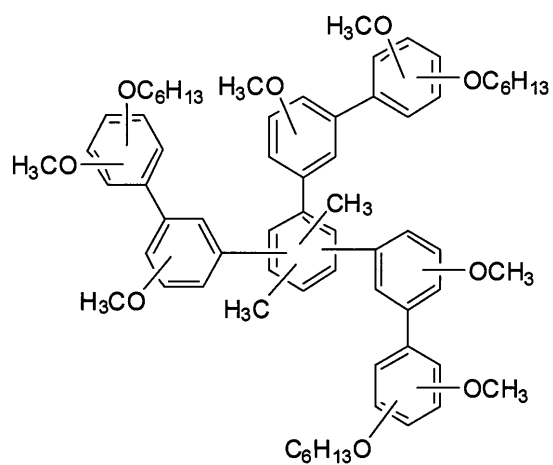
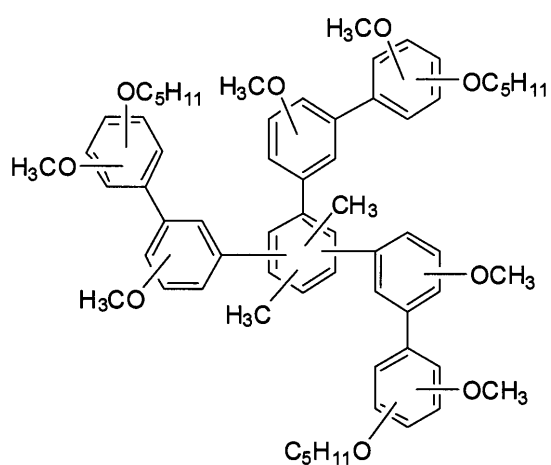
【化 3 2】



10



20

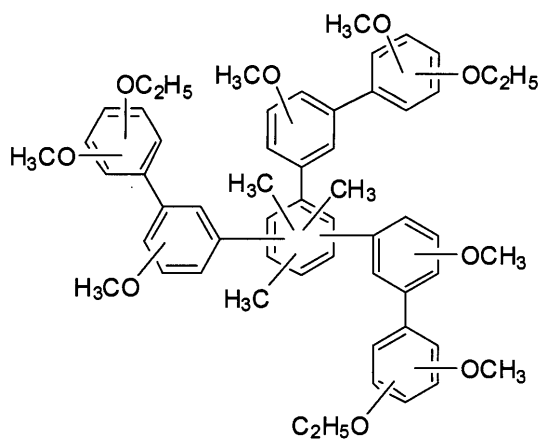
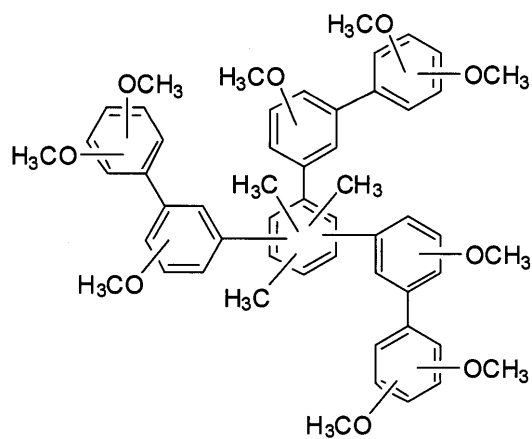


30

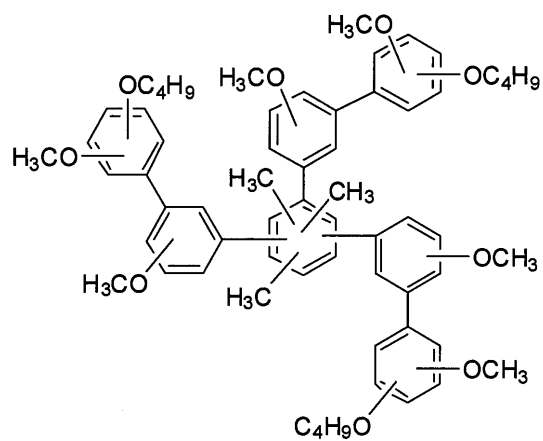
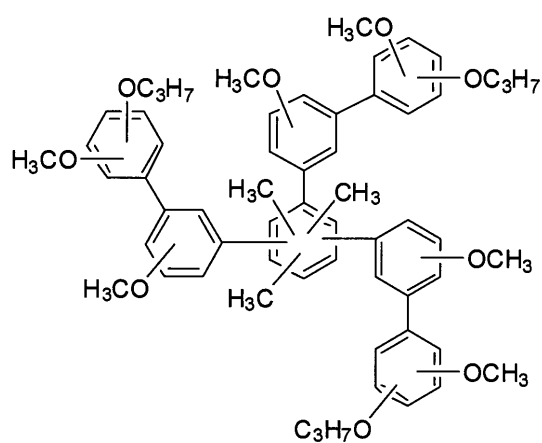
【 0 0 3 7 】

40

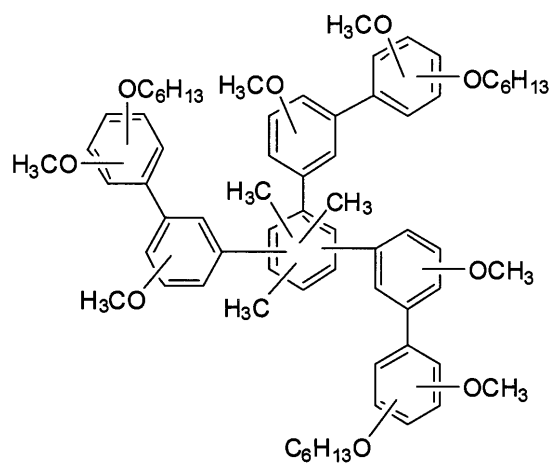
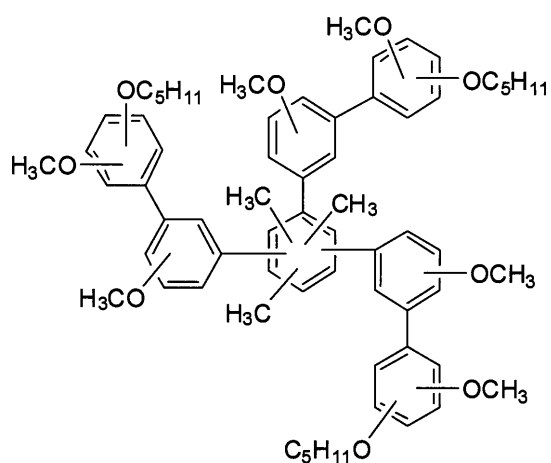
【化 3 3】



10



20

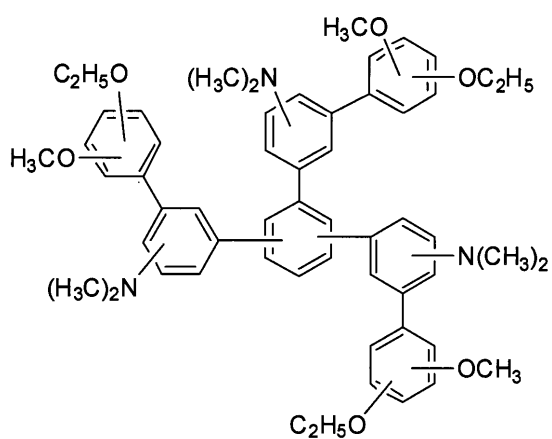
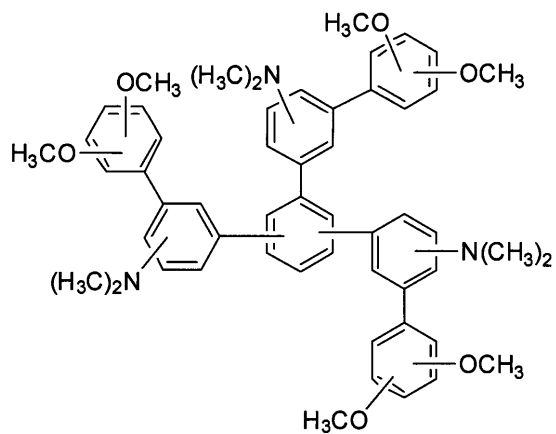


30

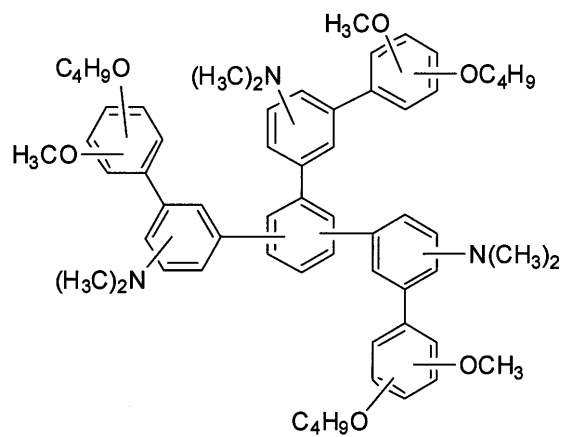
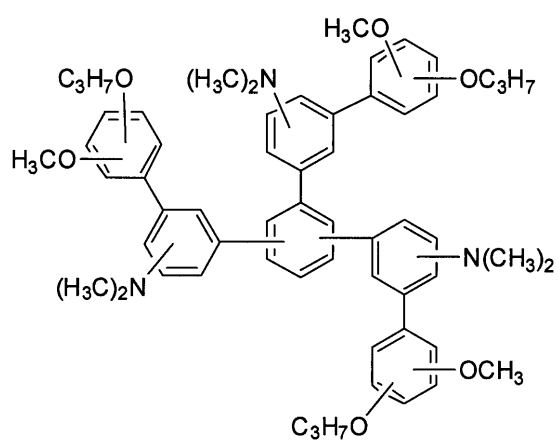
40

【 0 0 3 8 】

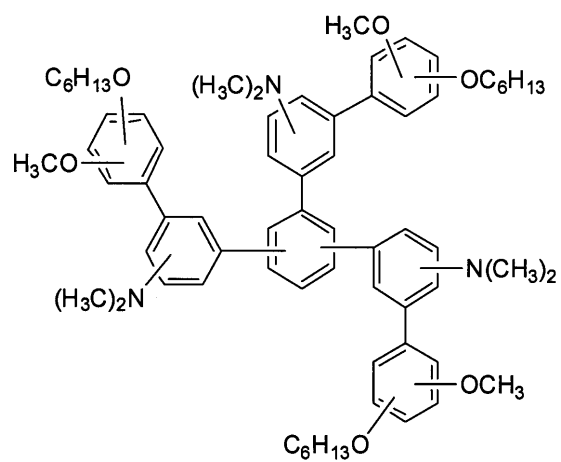
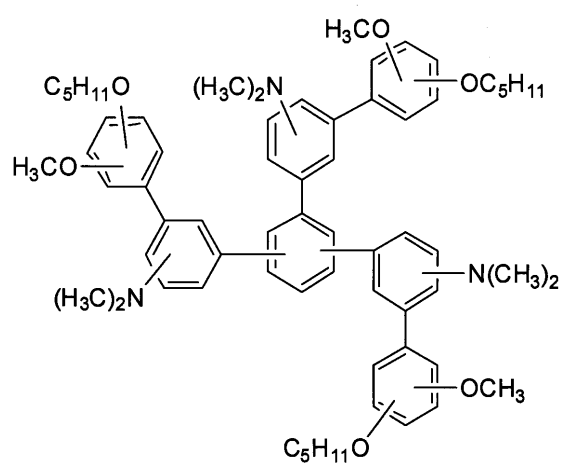
【化 3 4】



10



20

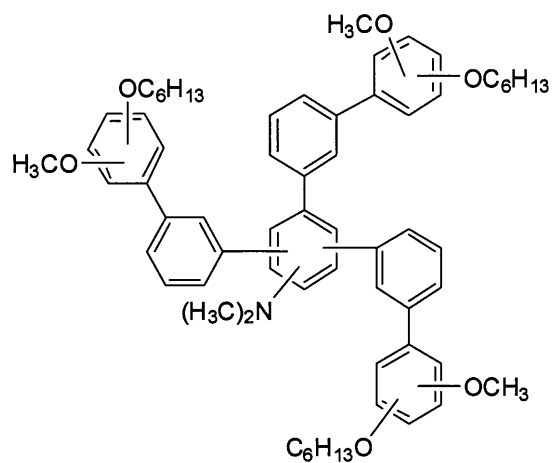
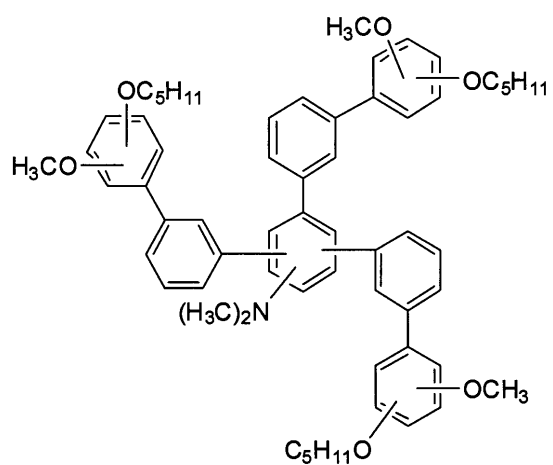
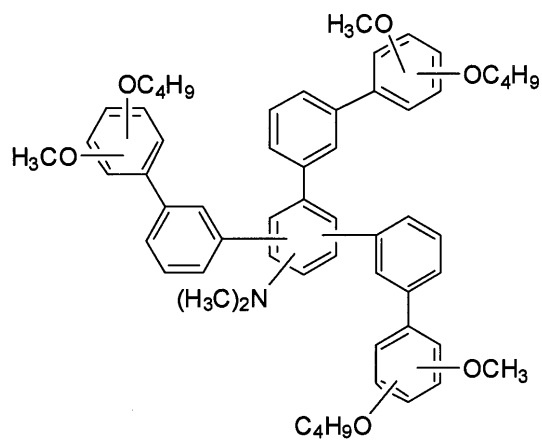
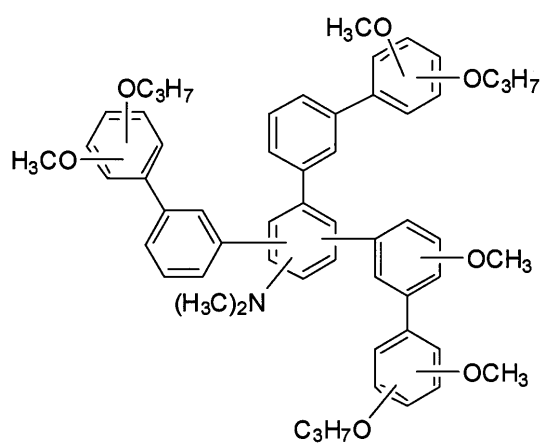
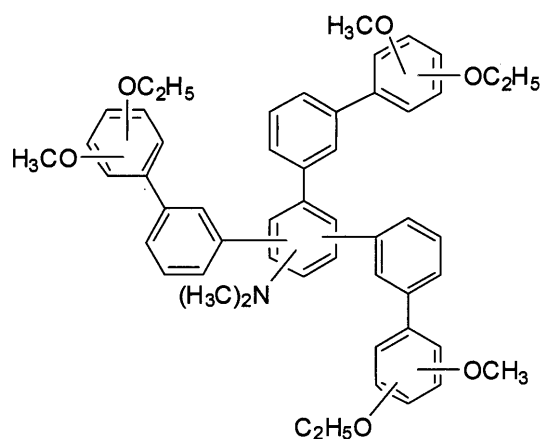
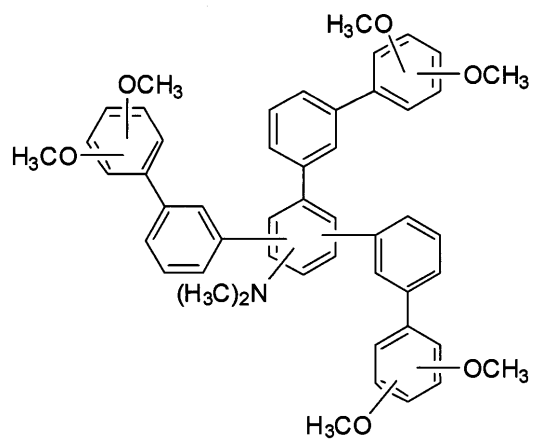


30

40

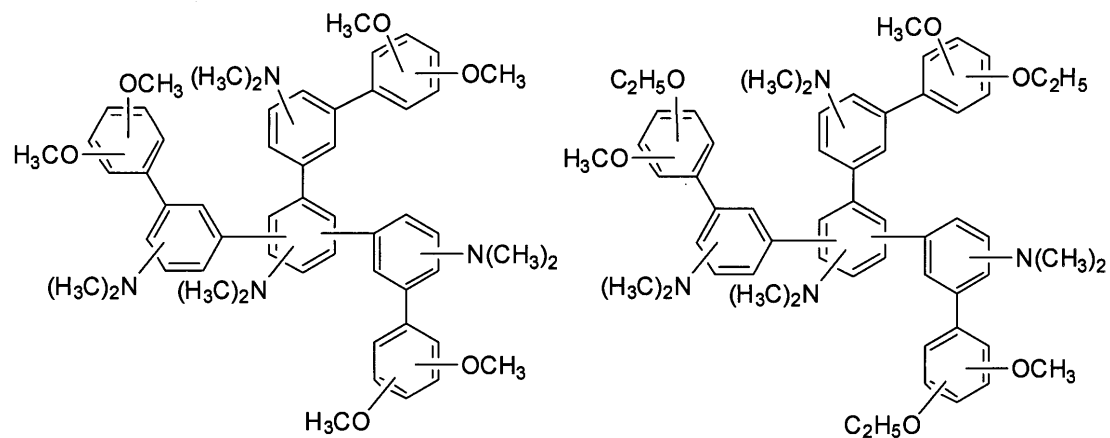
【 0 0 3 9 】

【化 3 5】

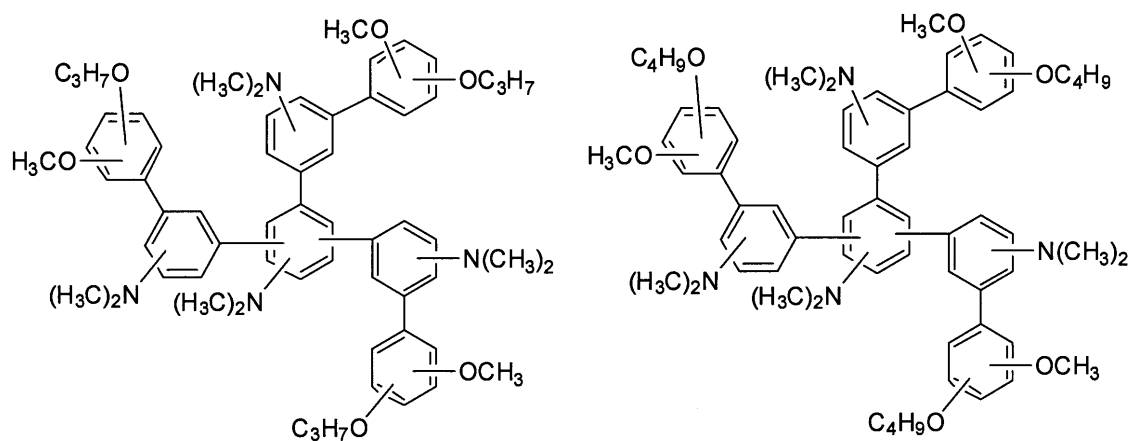


【 0 0 4 0 】

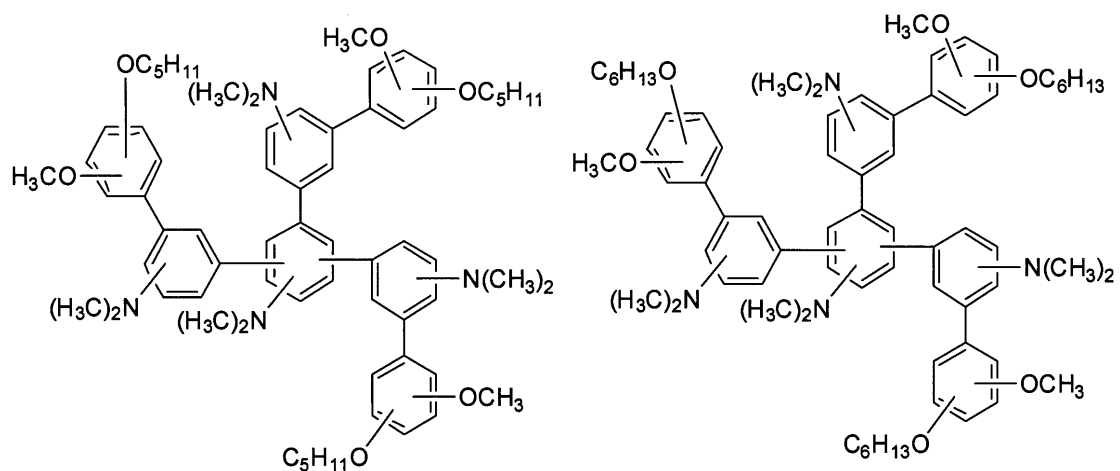
【化 3 6】



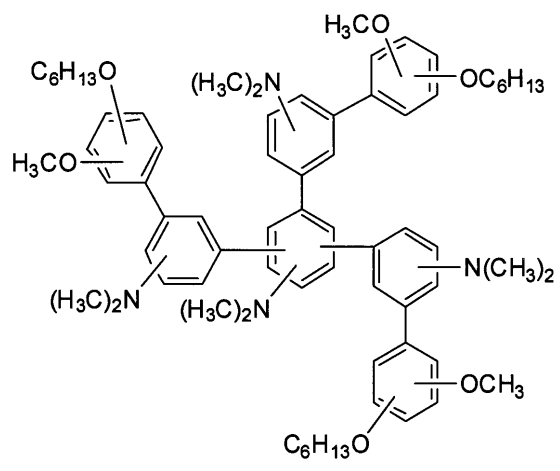
10



20



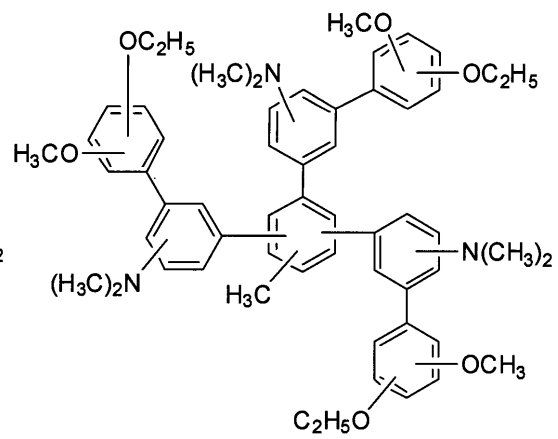
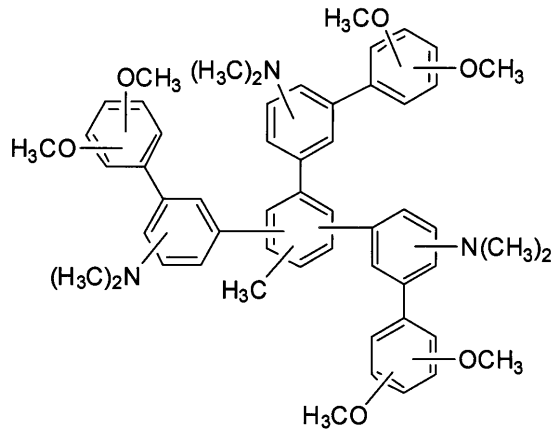
30



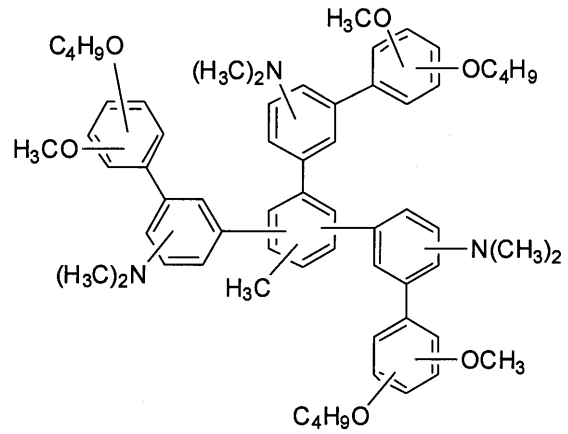
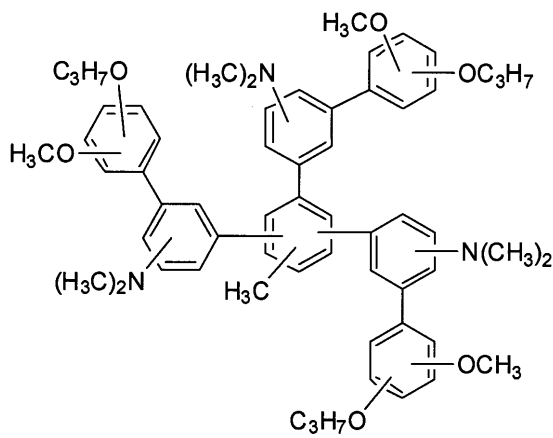
40

【 0 0 4 1】

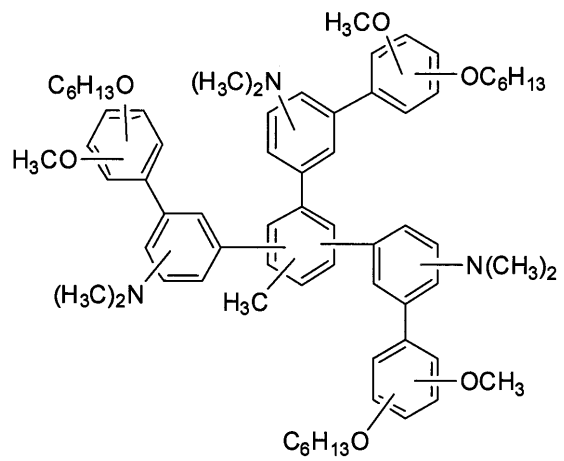
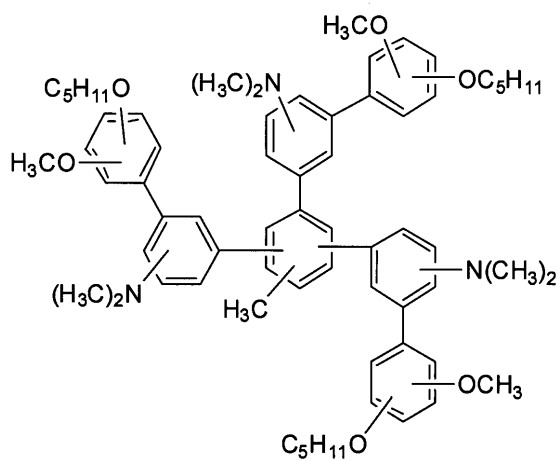
【化 3 7】



10



20

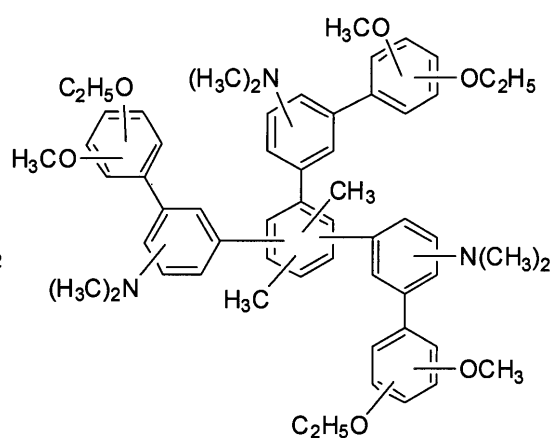
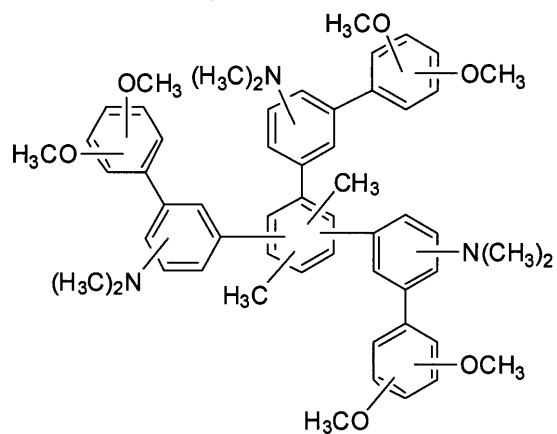


30

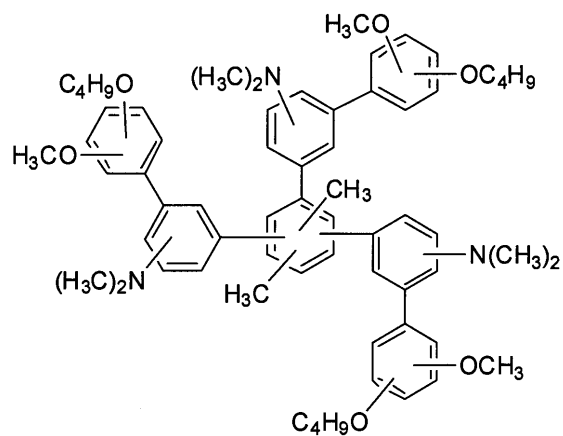
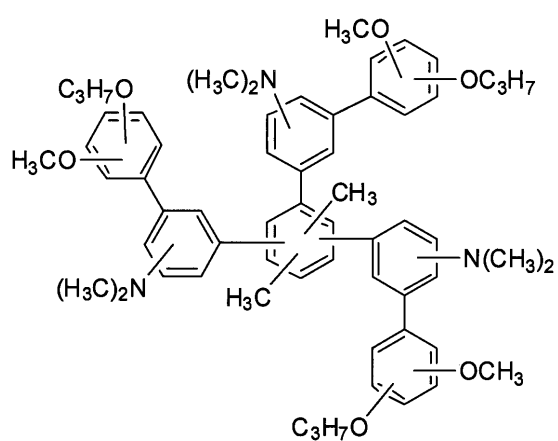
【 0 0 4 2】

40

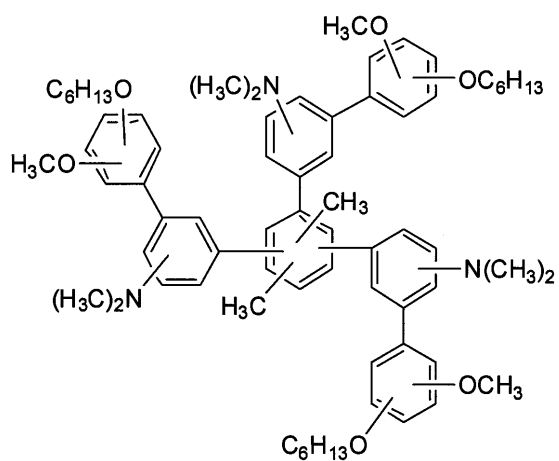
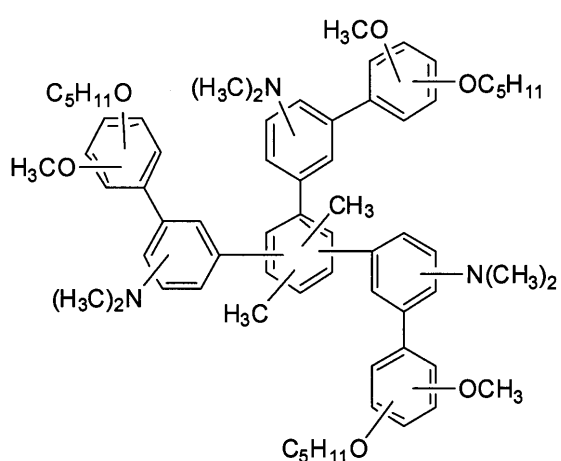
【化 3 8】



10



20

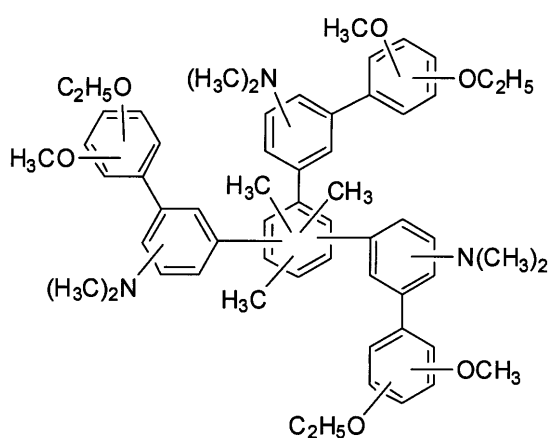
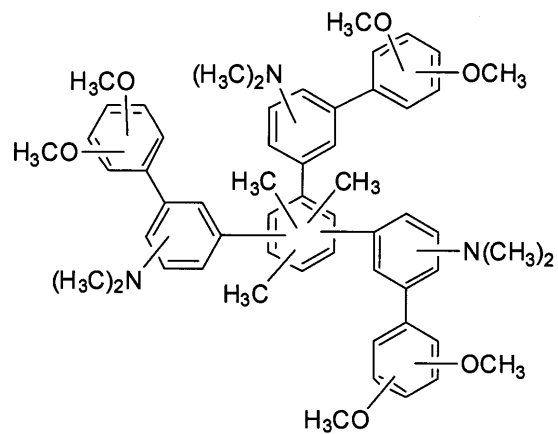


30

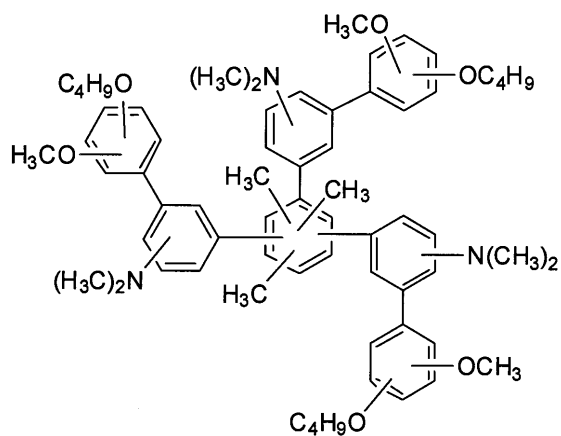
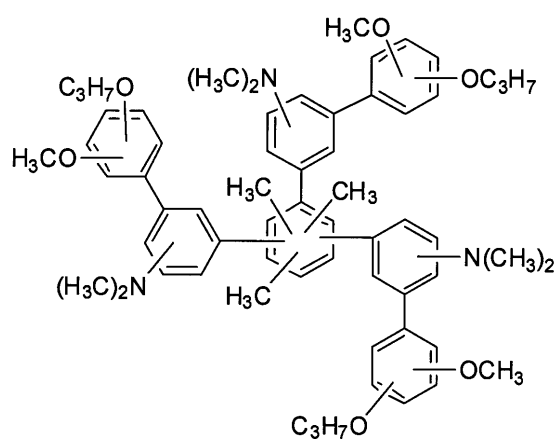
40

【 0 0 4 3 】

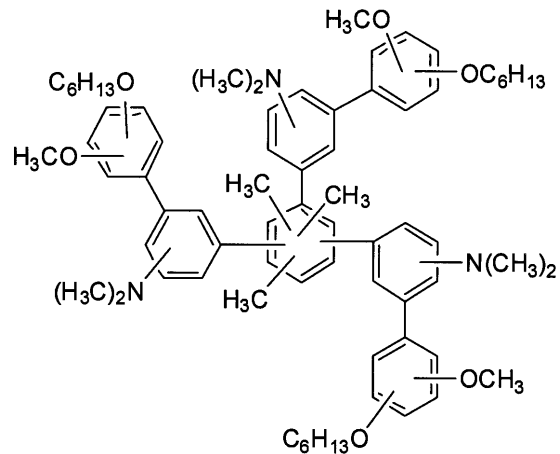
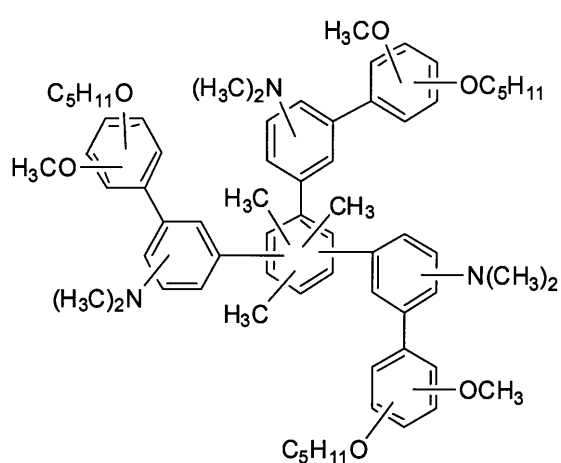
【化 3 9】



10



20

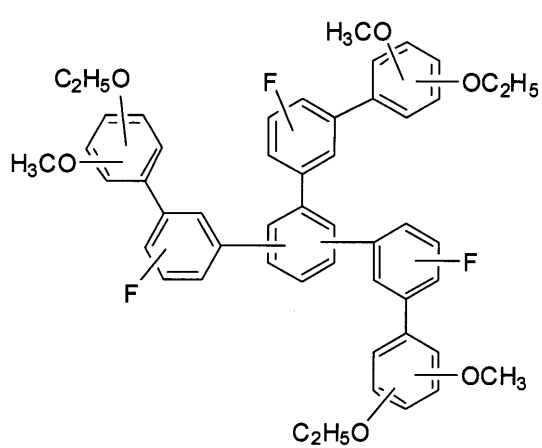
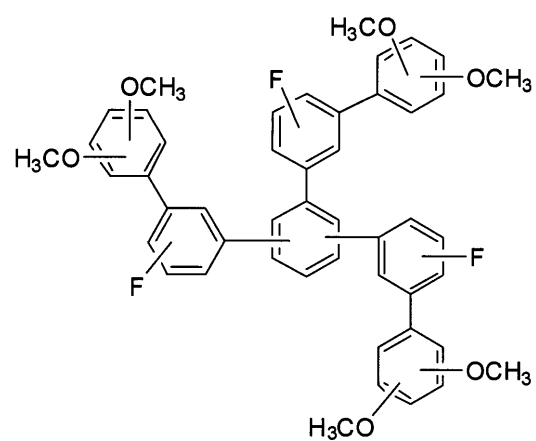


30

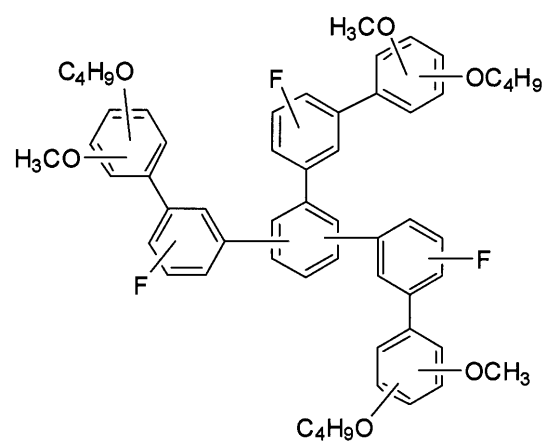
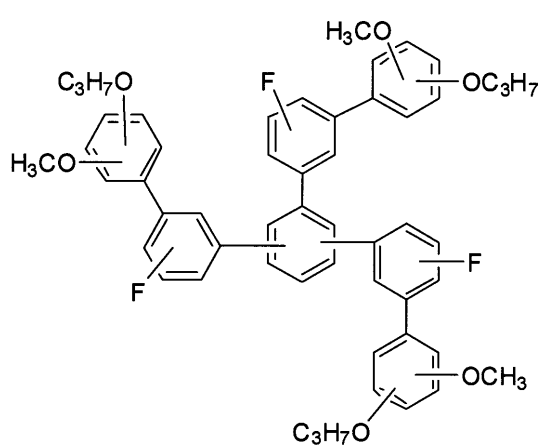
40

【 0 0 4 4 】

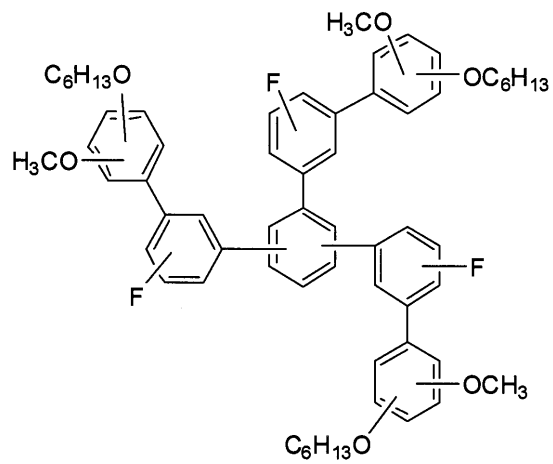
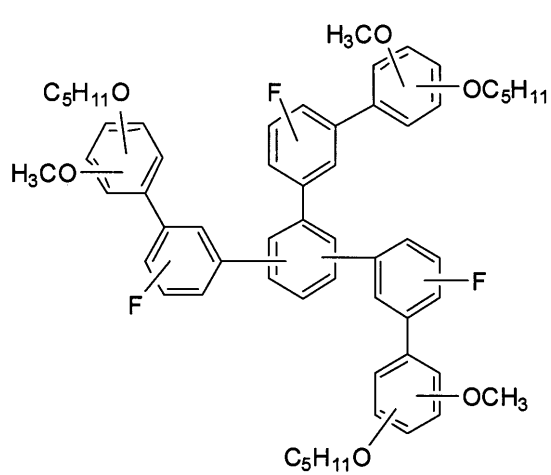
【化 4 0】



10



20

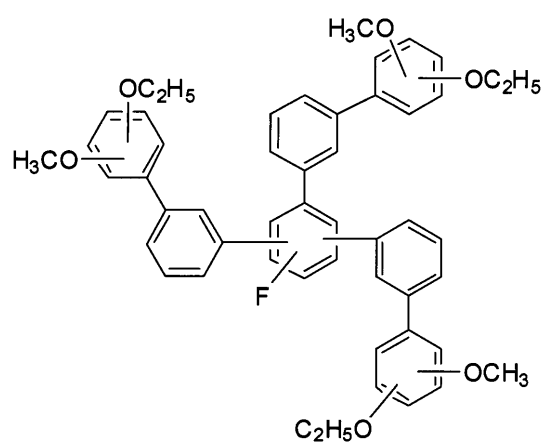
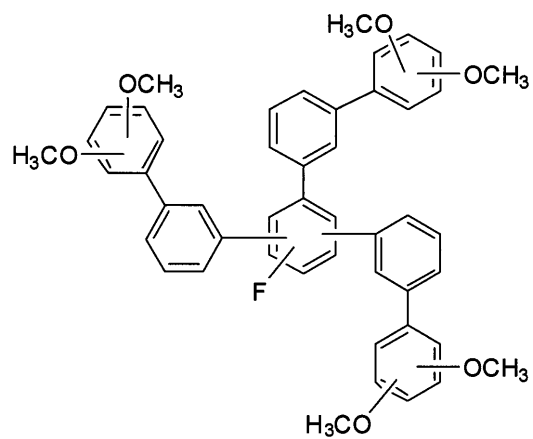


30

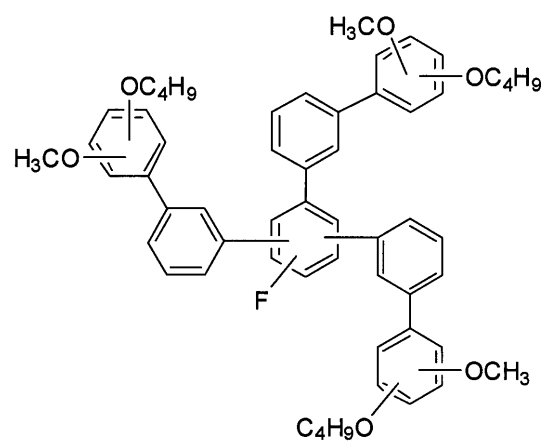
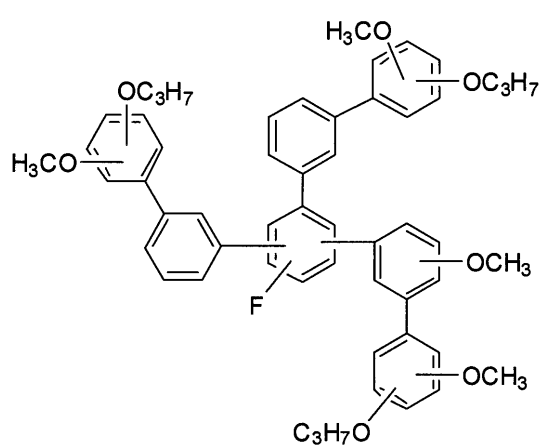
40

【 0 0 4 5】

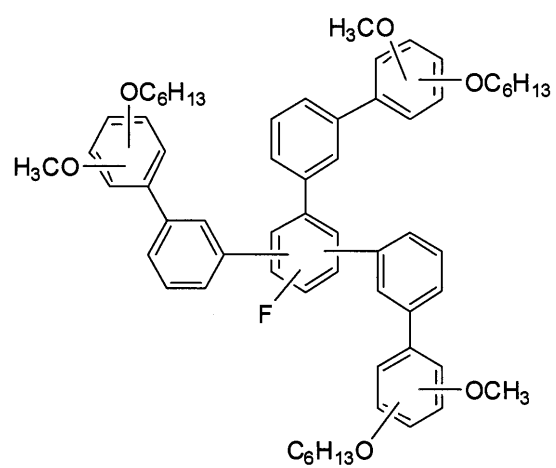
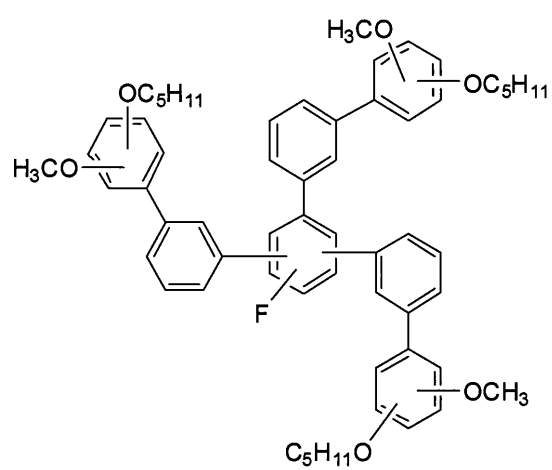
【化 4 1】



10



20

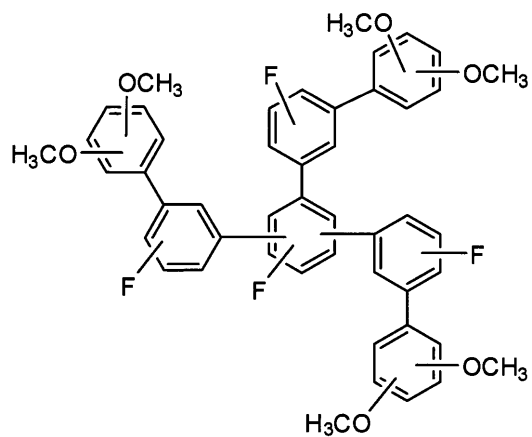


30

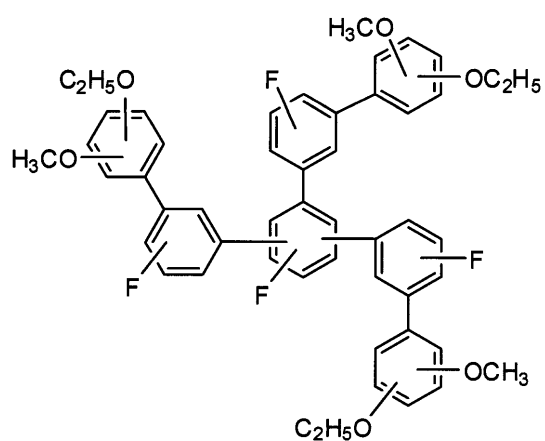
40

【 0 0 4 6 】

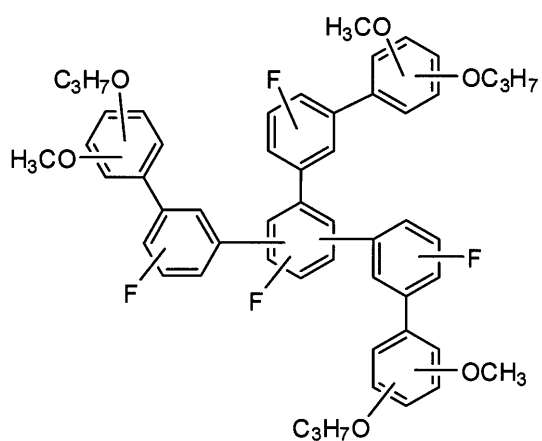
【化 4 2】



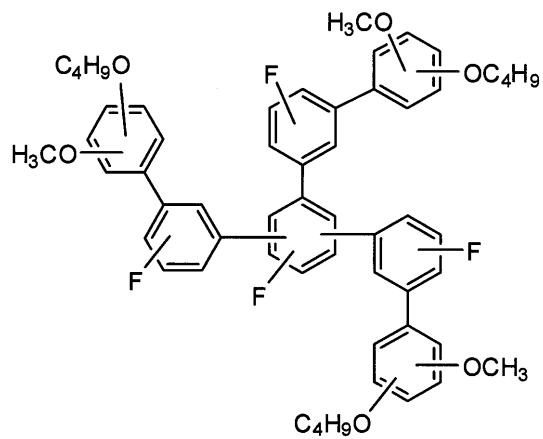
10



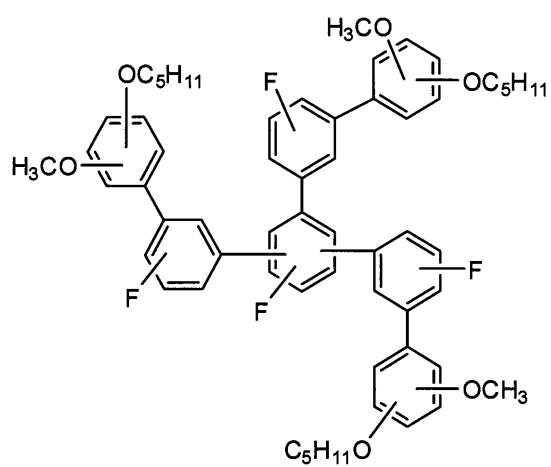
20



30

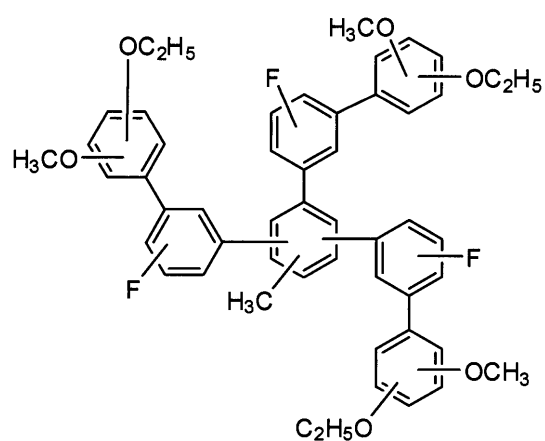
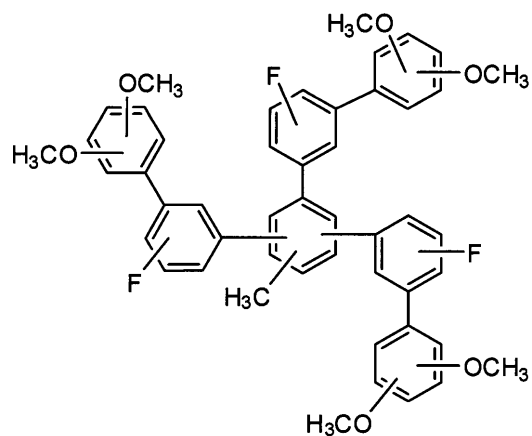


40

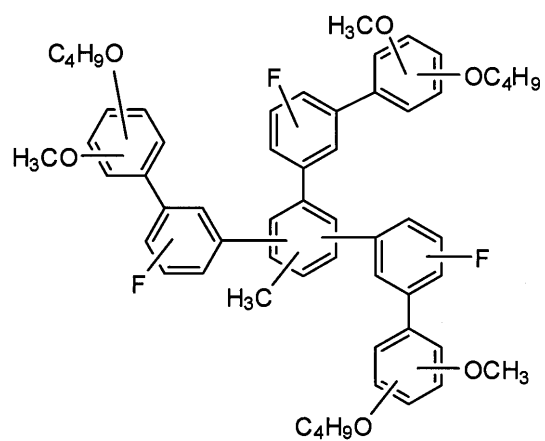
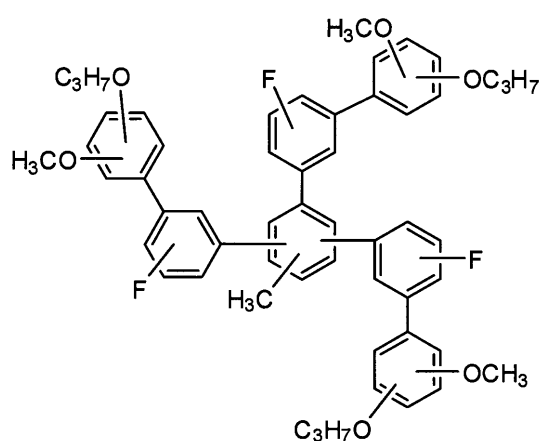


【 0 0 4 7 】

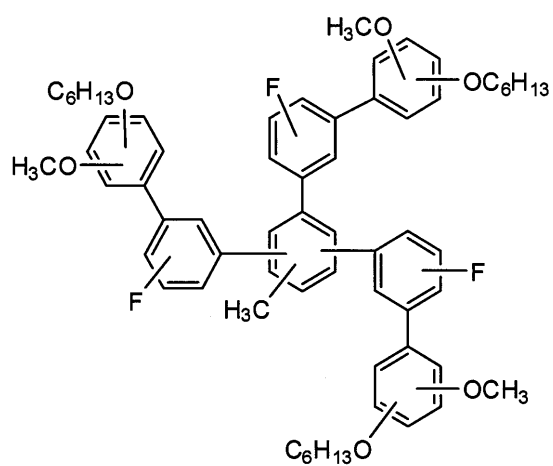
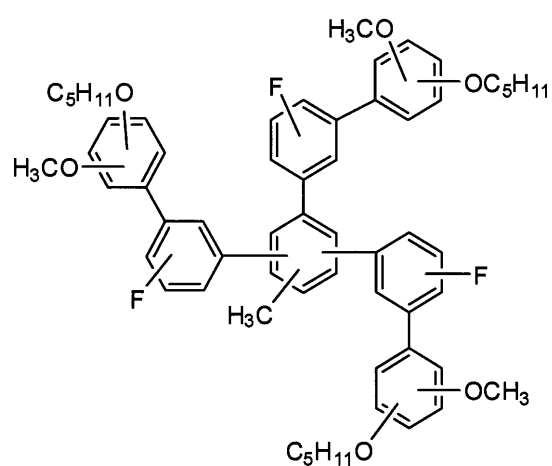
【化 4 3】



10



20

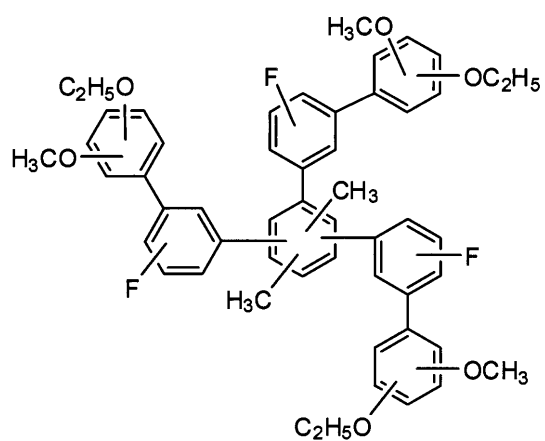
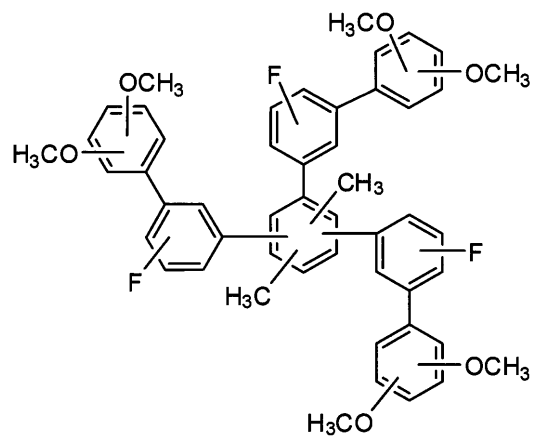


30

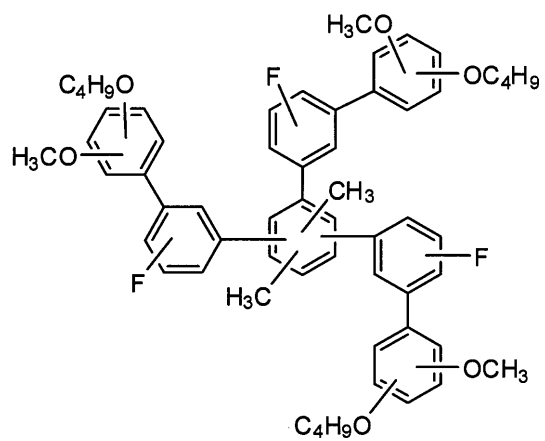
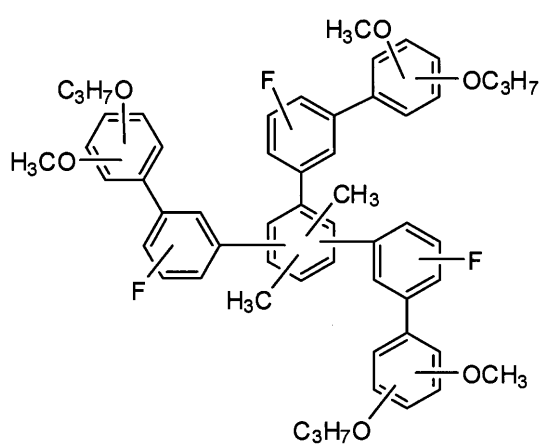
40

【 0 0 4 8 】

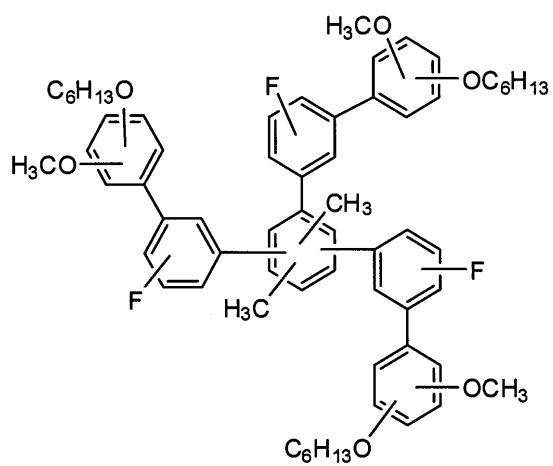
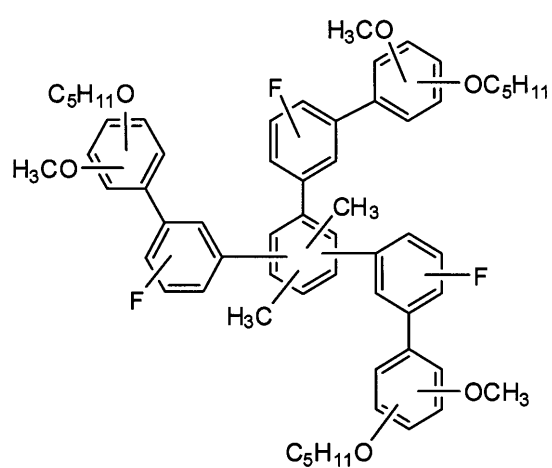
【化 4 4】



10



20

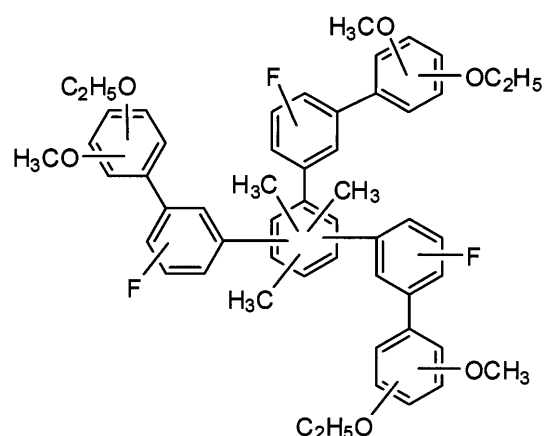
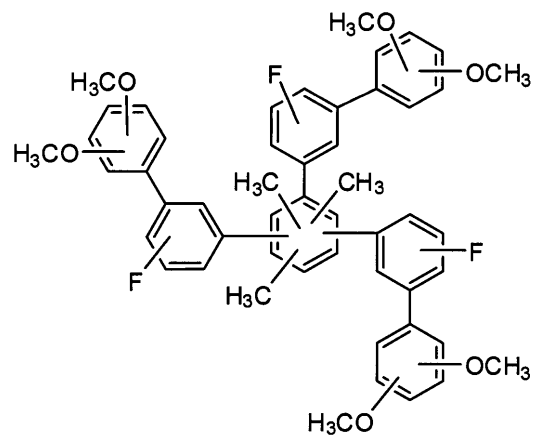


30

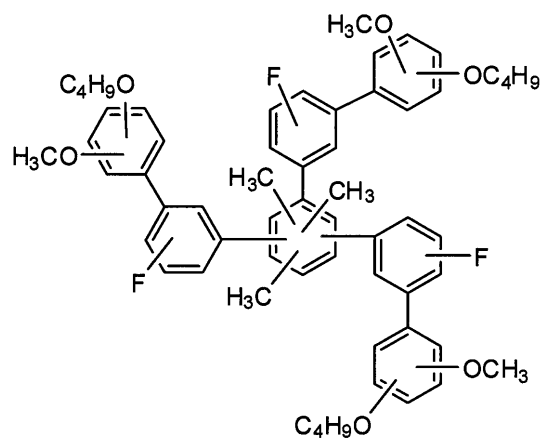
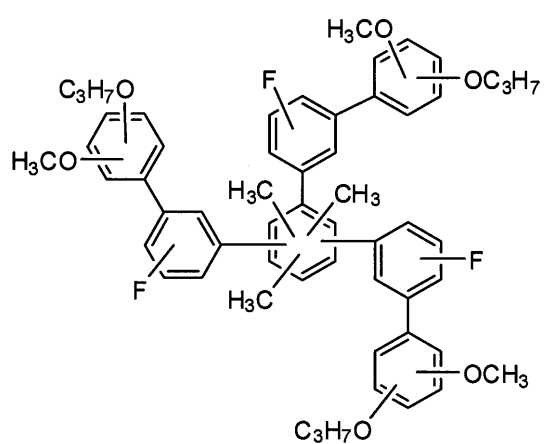
40

【 0 0 4 9 】

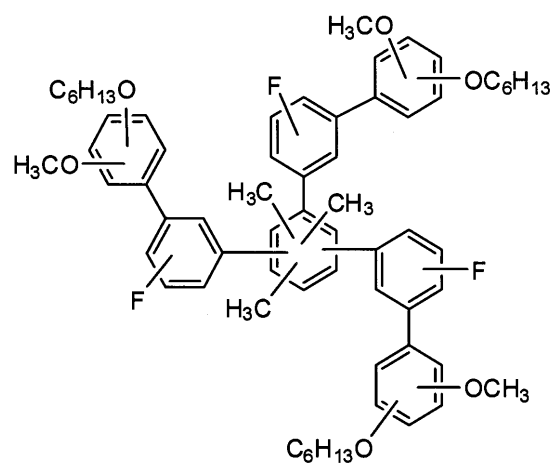
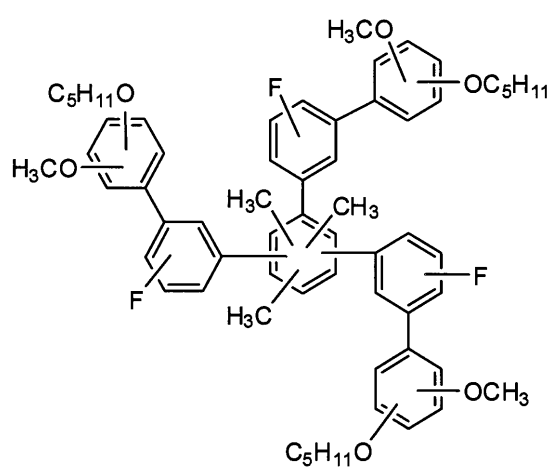
【化 4 5】



10



20

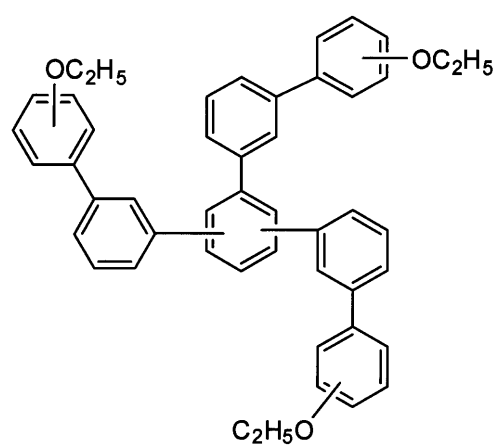
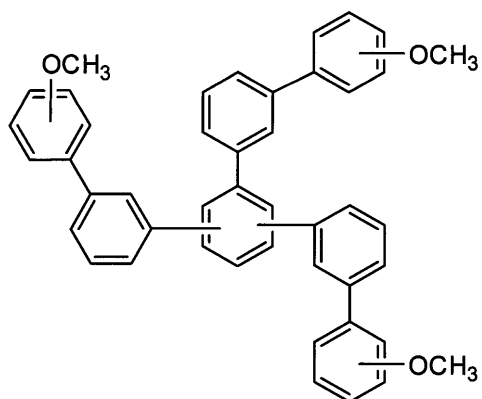


30

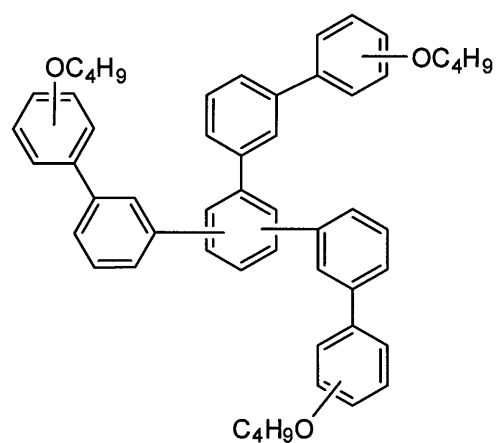
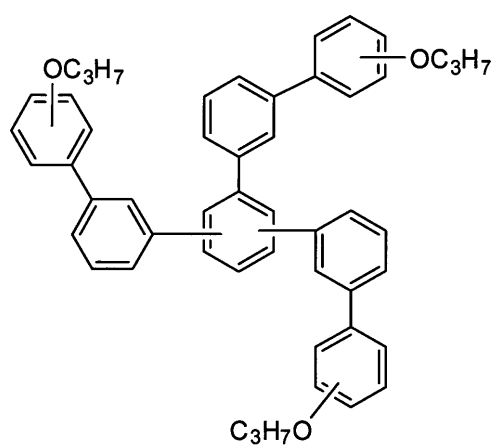
40

【 0 0 5 0 】

【化 4 6】

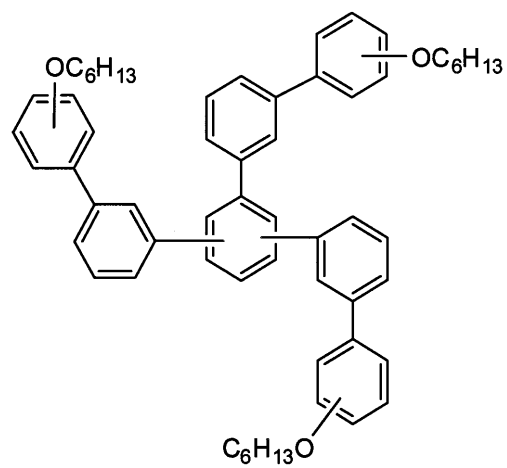
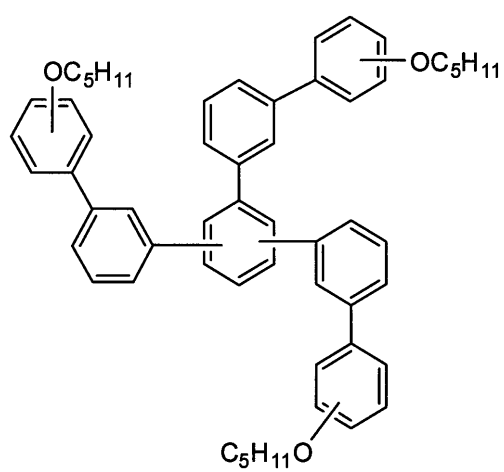


10



20

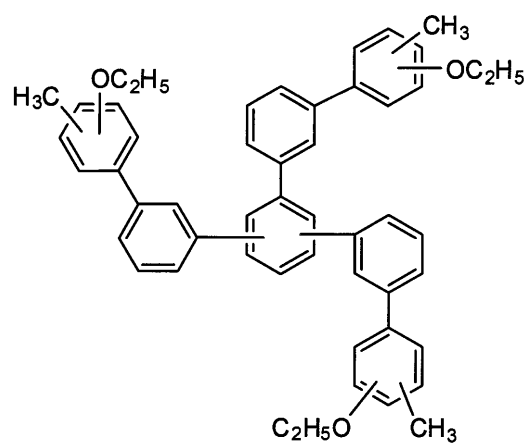
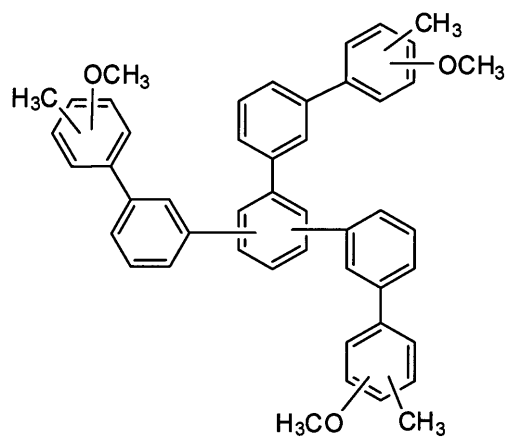
30



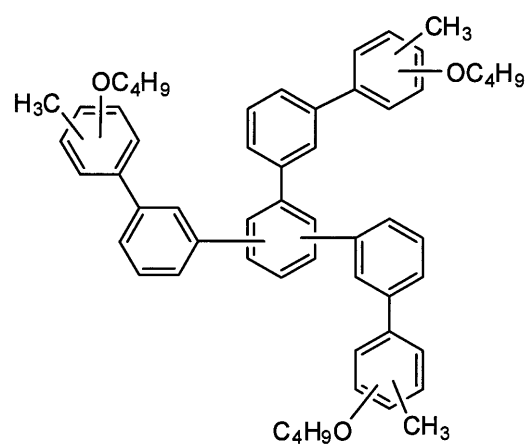
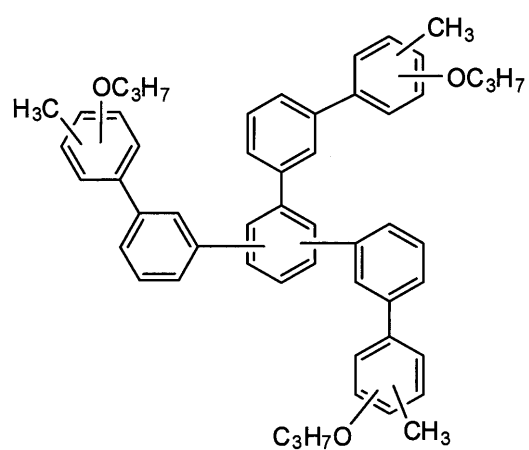
40

【 0 0 5 1】

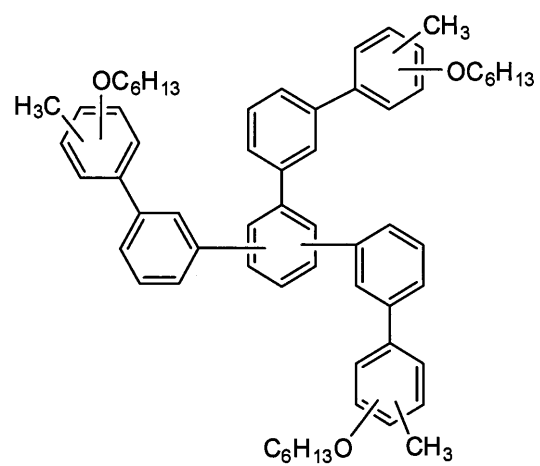
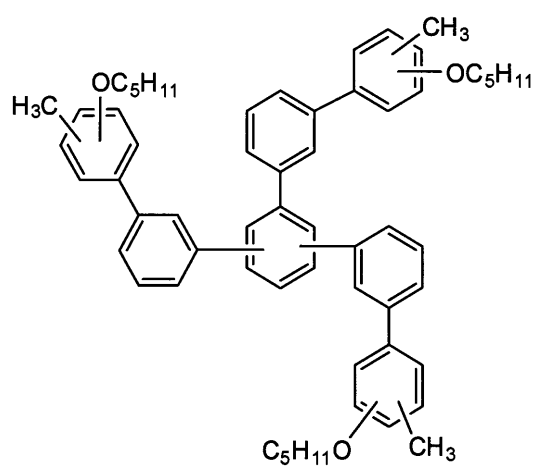
【化 4 7】



10



20

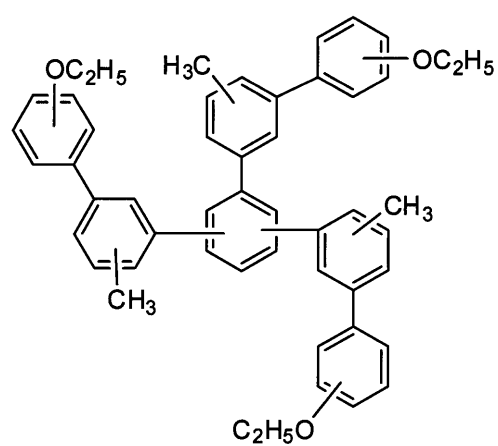
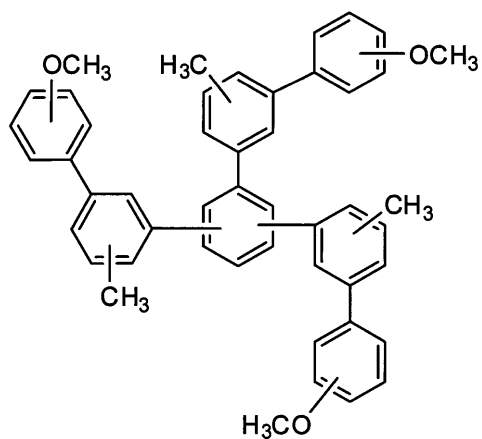


30

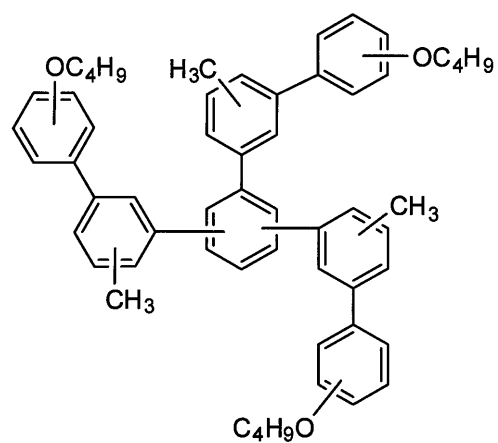
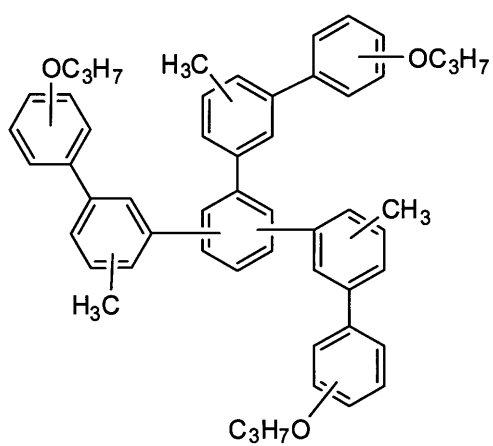
40

【 0 0 5 2 】

【化 4 8】

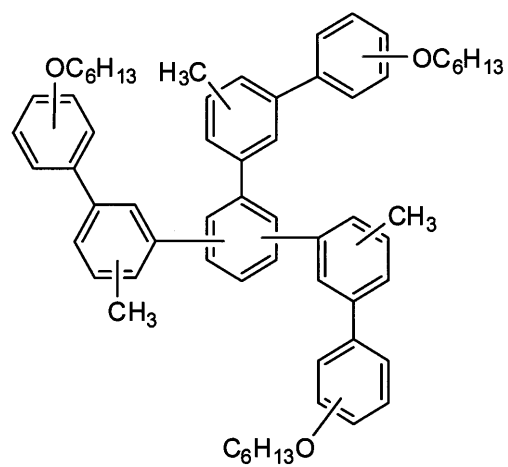
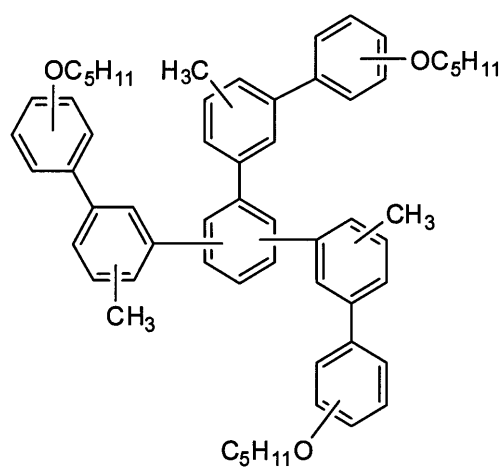


10



20

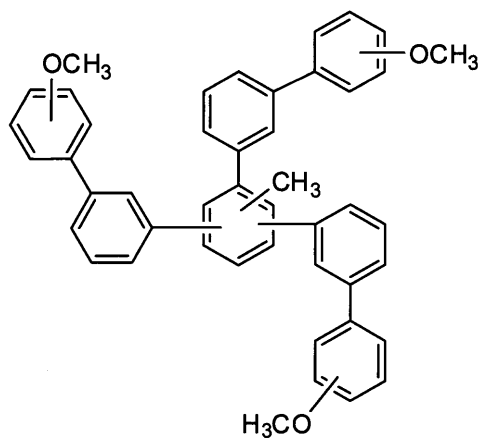
30



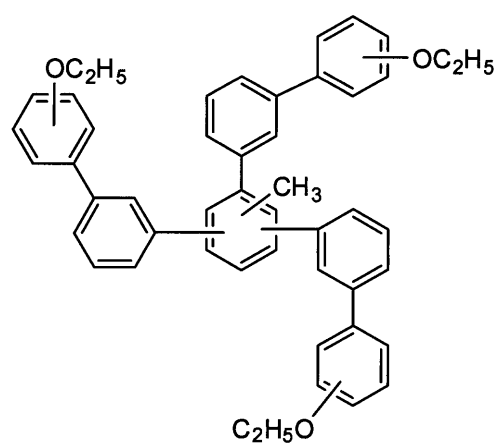
40

【 0 0 5 3 】

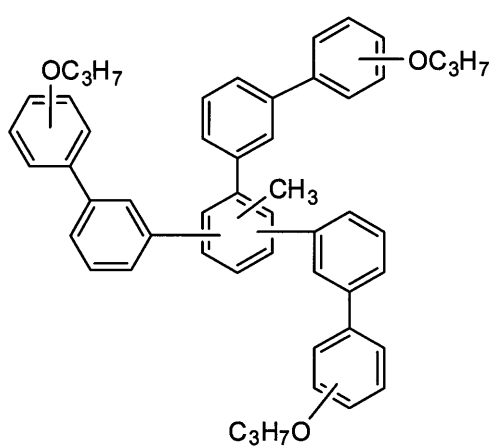
【化 4 9】



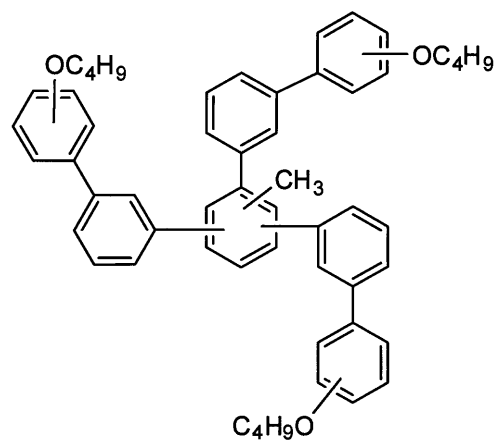
10



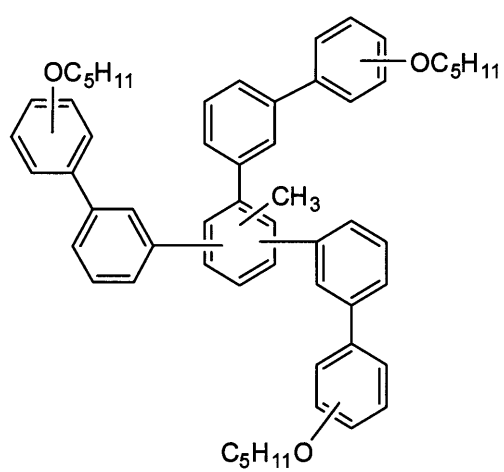
20



30

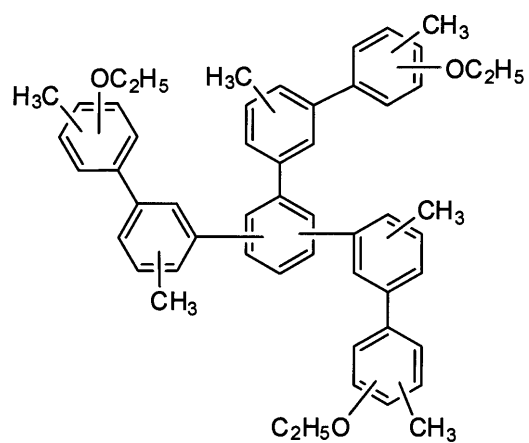
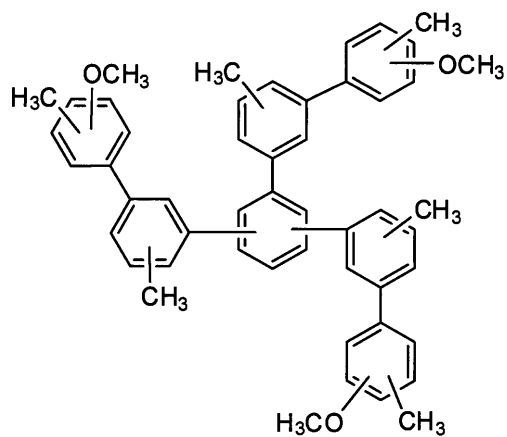


40

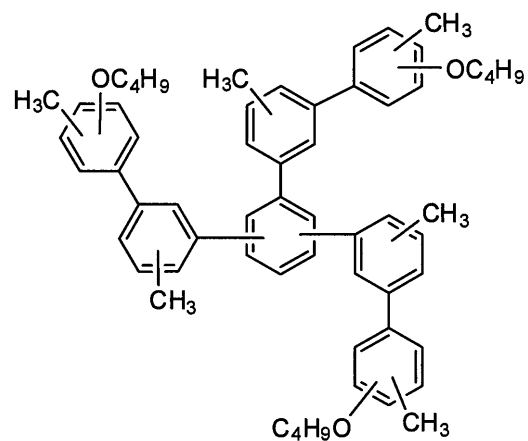
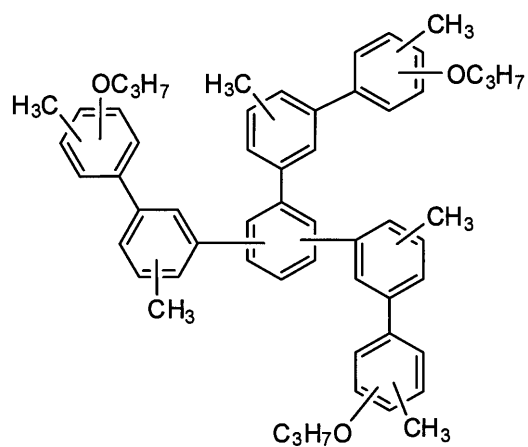


【 0 0 5 4】

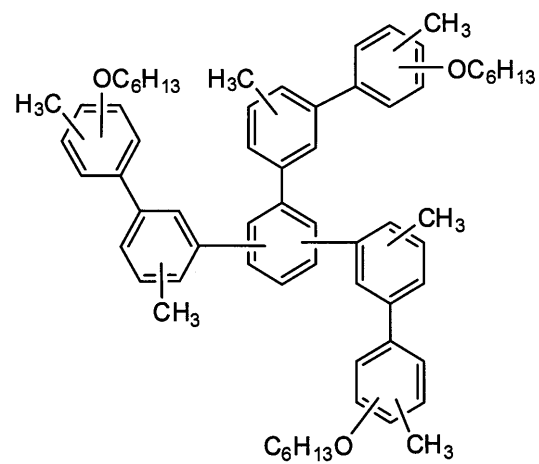
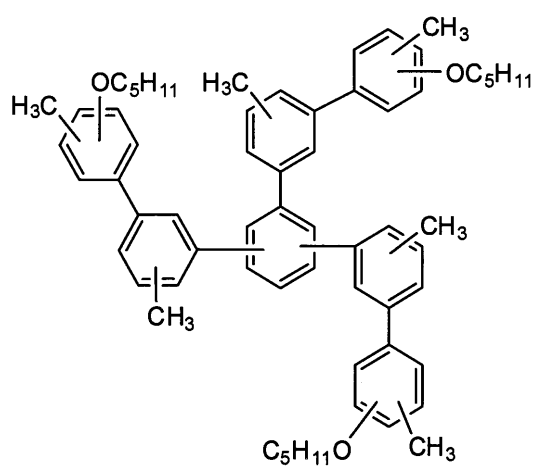
【化 5 0】



10



20

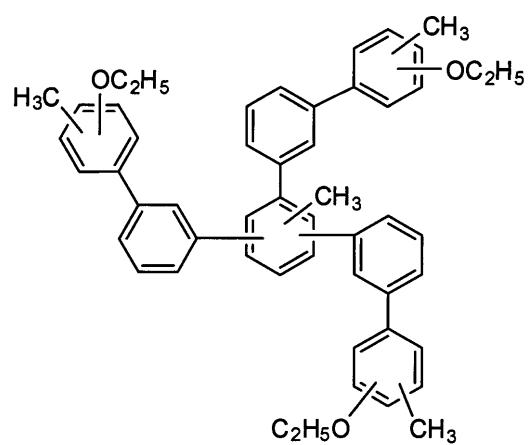
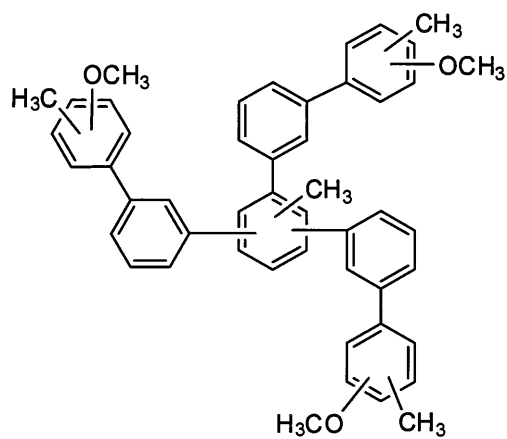


30

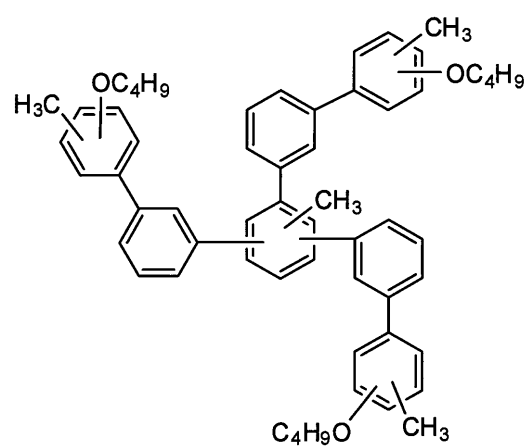
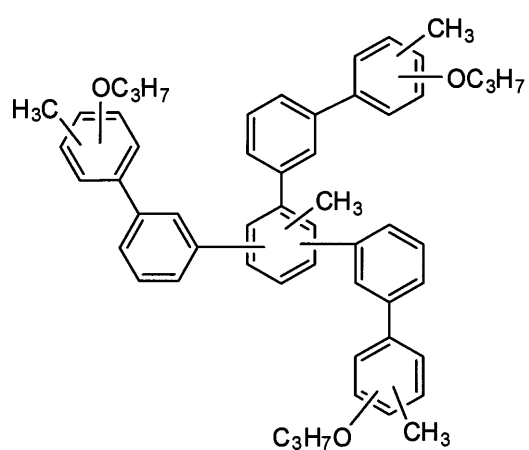
40

【 0 0 5 5 】

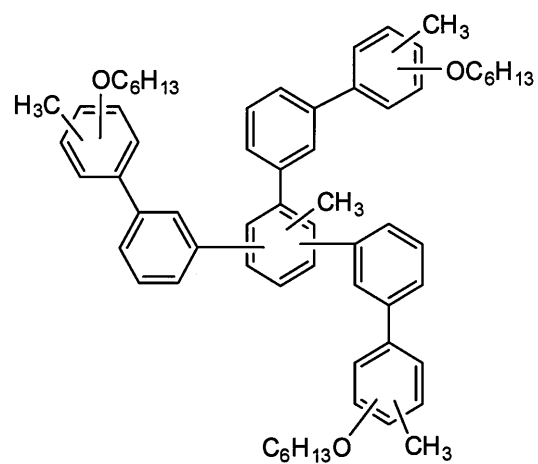
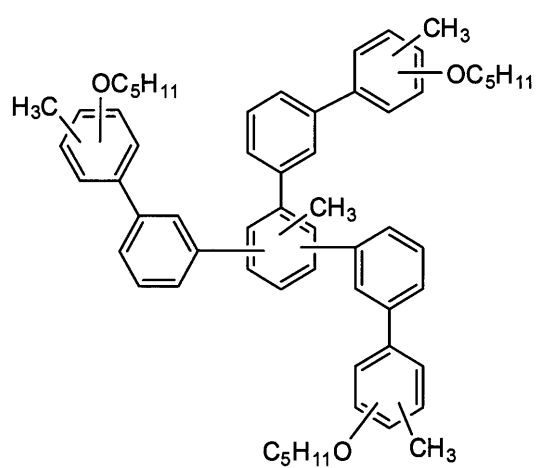
【化 5 1】



10



20

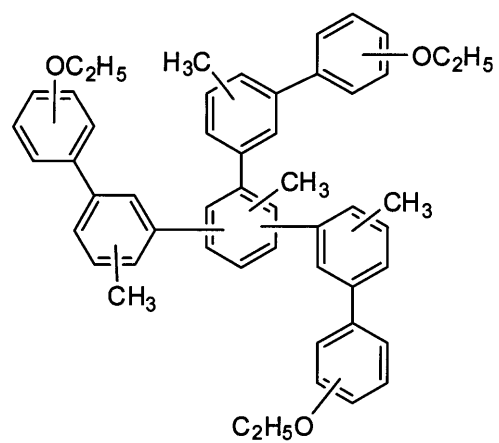
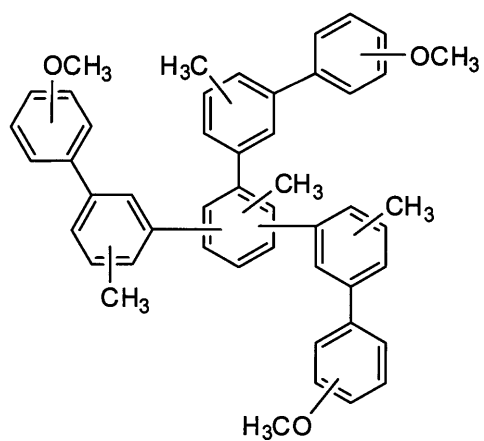


30

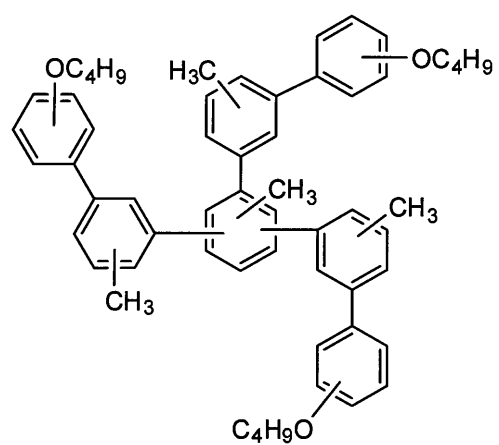
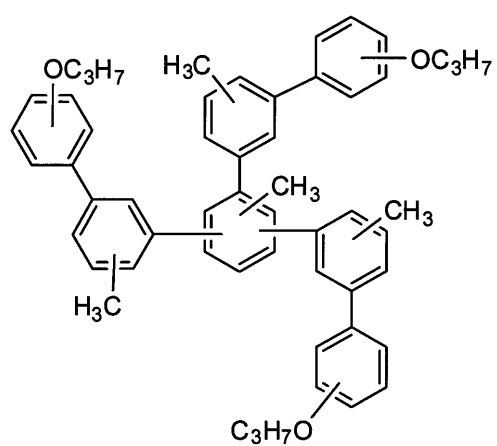
40

【 0 0 5 6 】

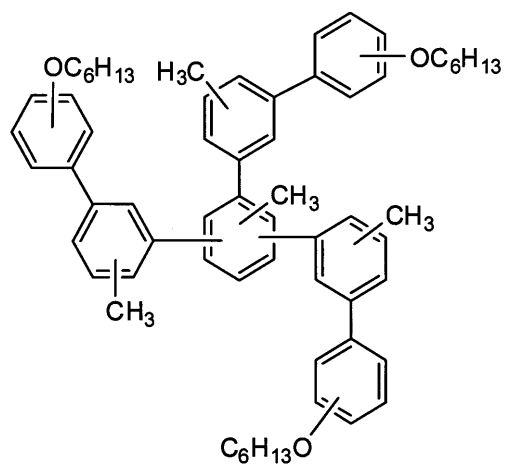
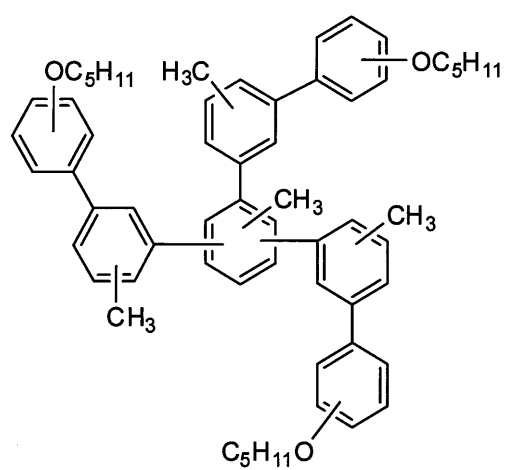
【化 5 2】



10



20

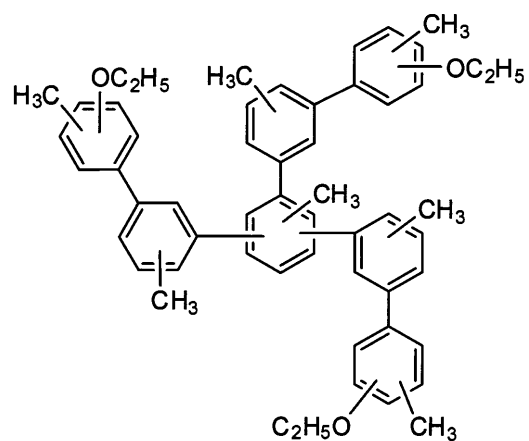
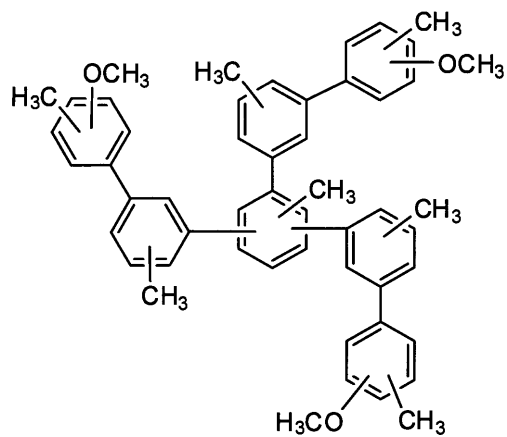


30

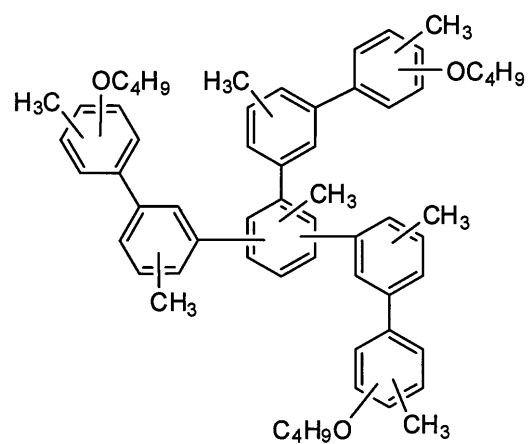
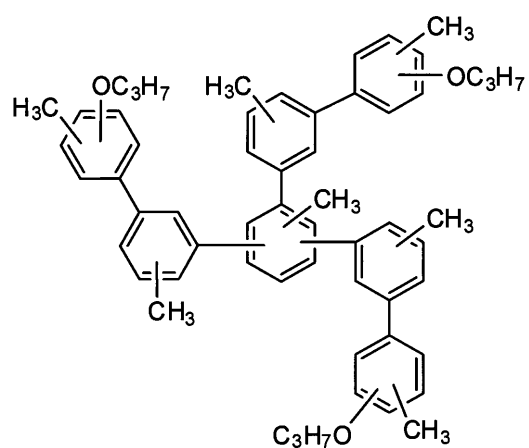
40

【 0 0 5 7 】

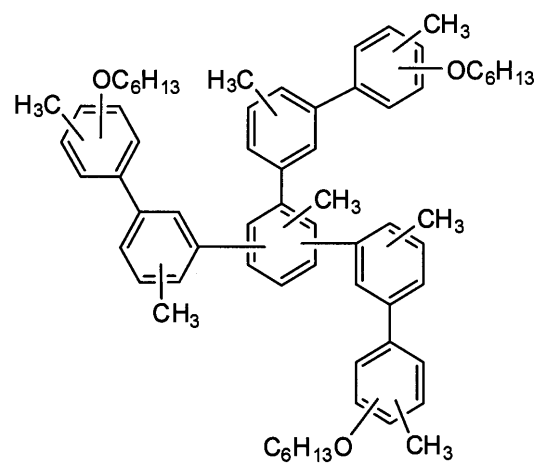
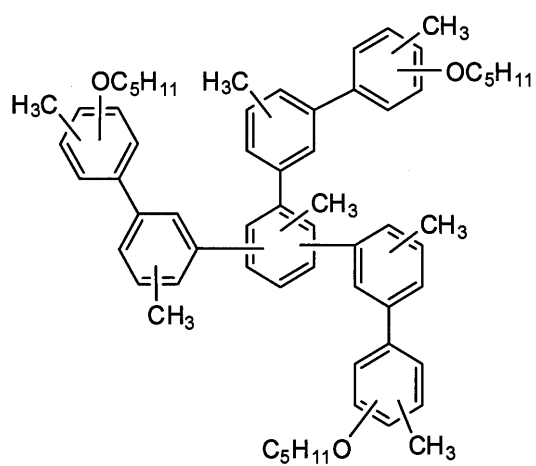
【化 5 3】



10



20

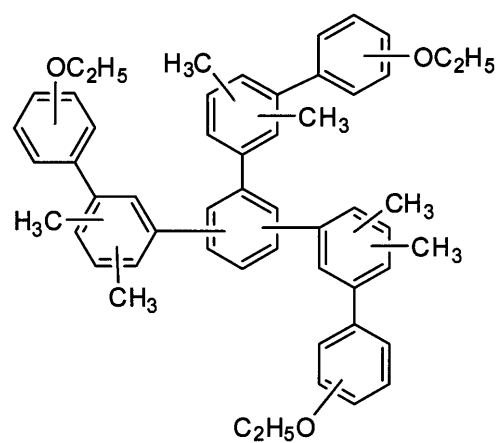
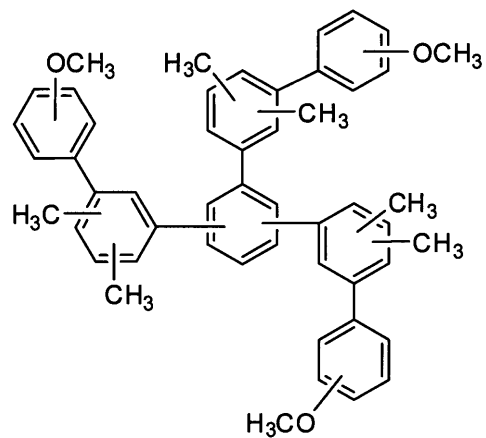


30

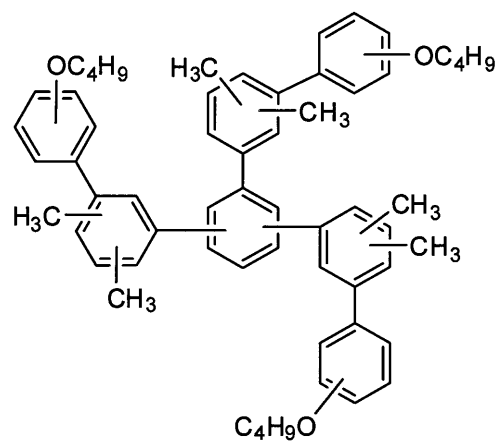
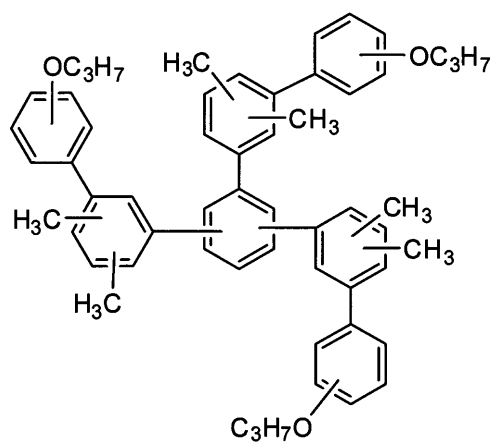
40

【 0 0 5 8 】

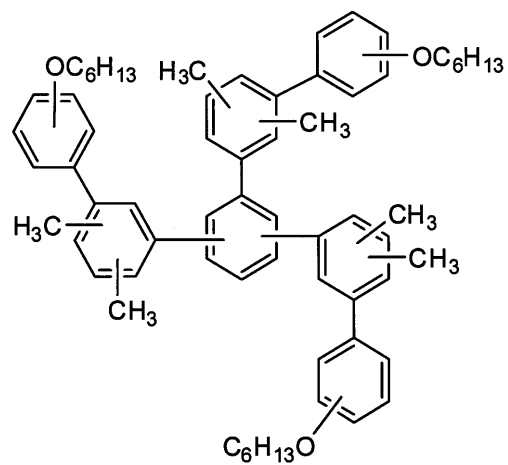
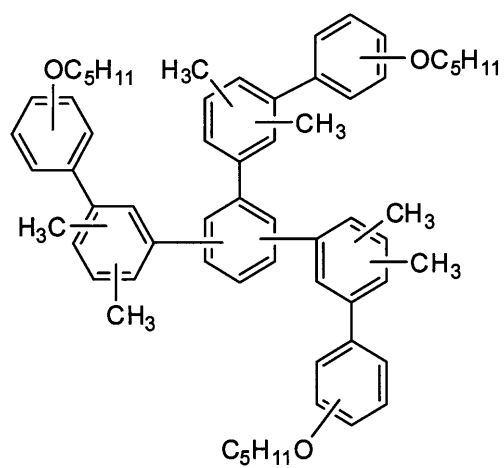
【化 5 4】



10



20

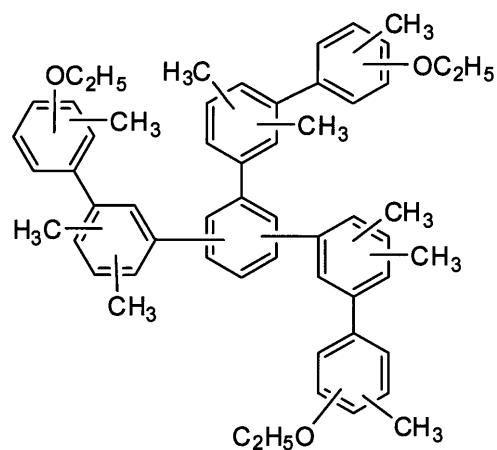
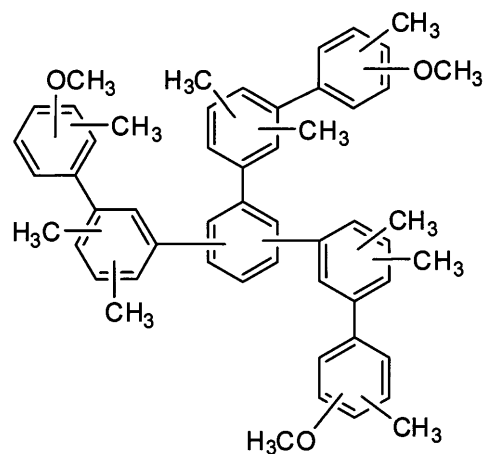


30

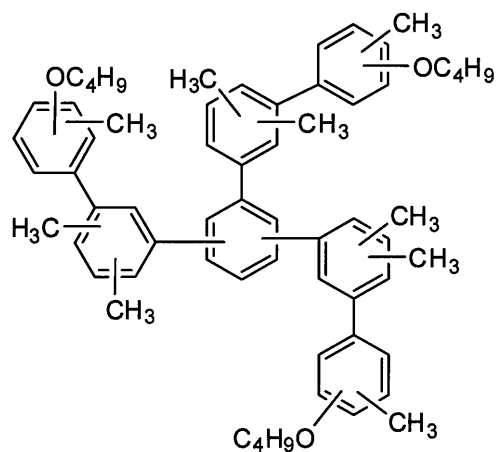
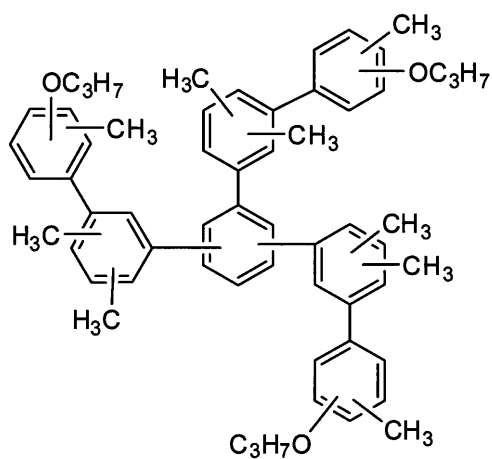
40

【 0 0 5 9 】

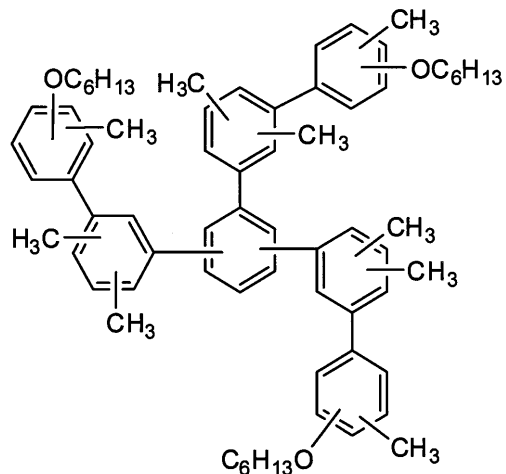
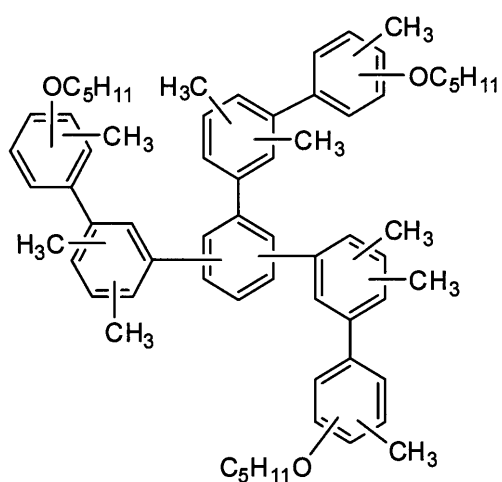
【化 5 5】



10



20

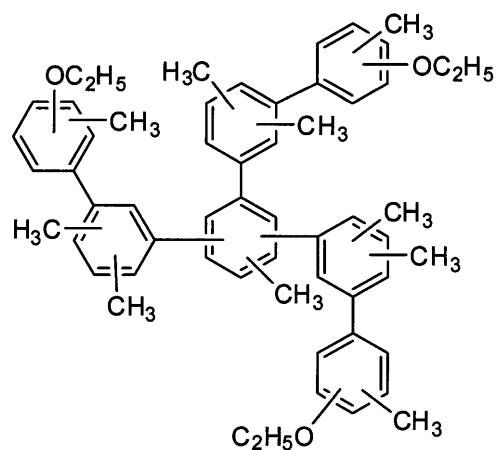
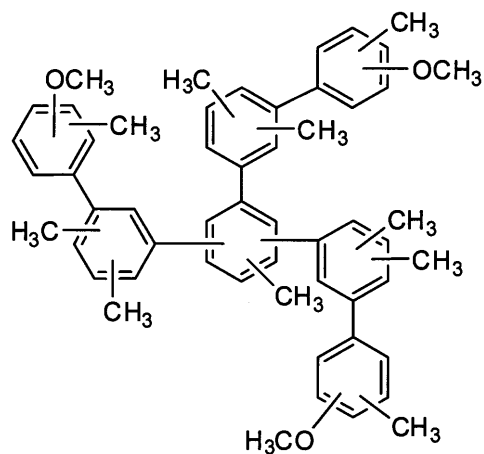


30

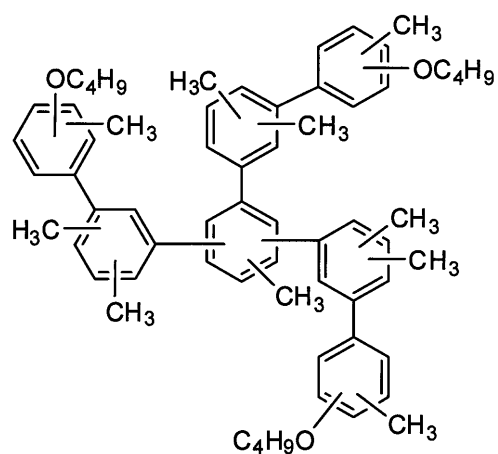
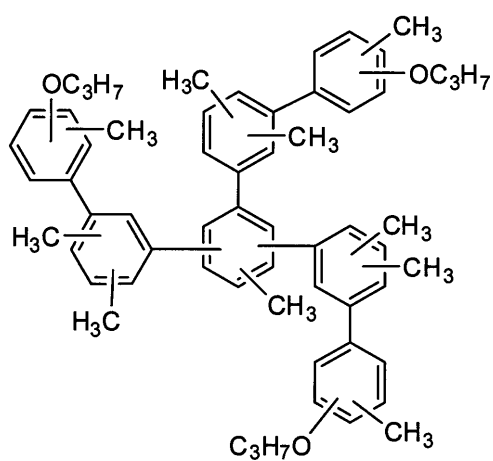
40

【0060】

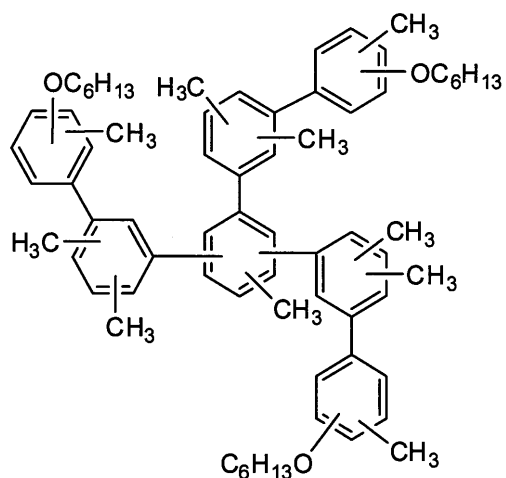
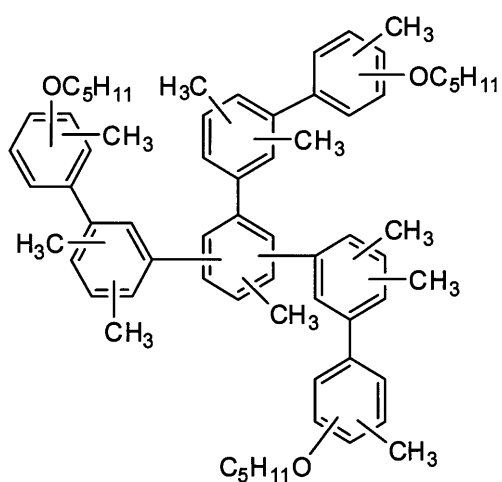
【化 5 6】



10



20

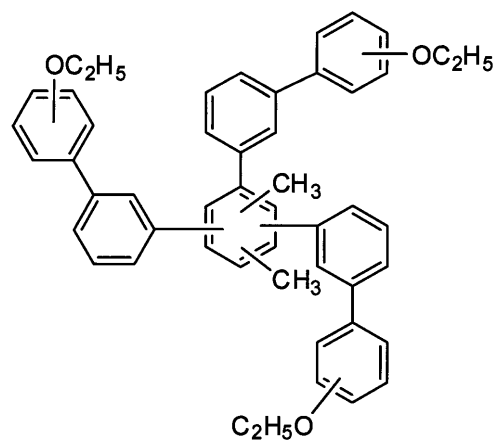
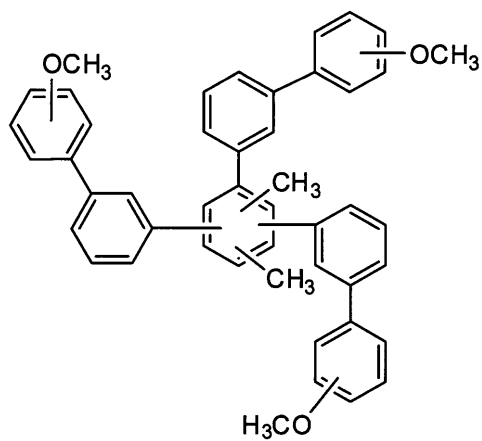


30

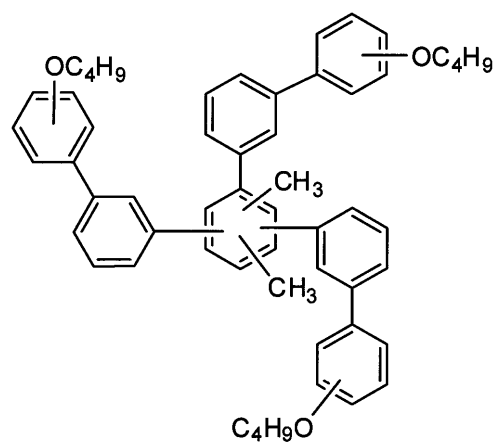
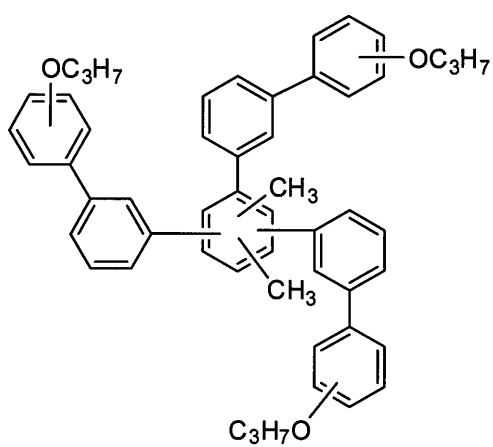
40

【 0 0 6 1 】

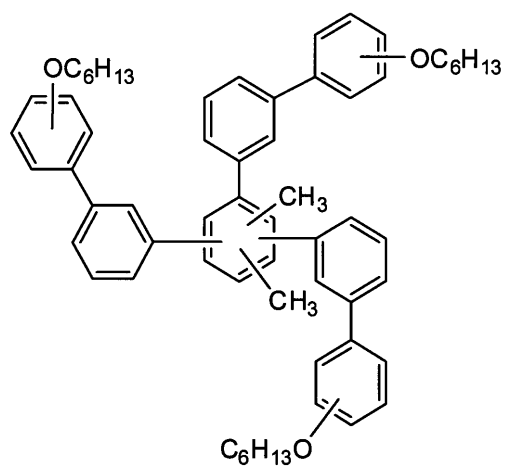
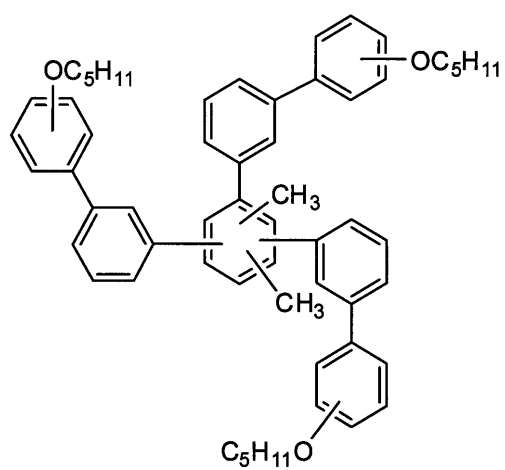
【化 5 7】



10



20

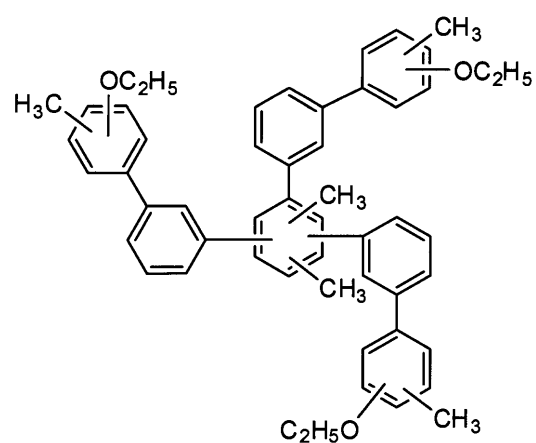
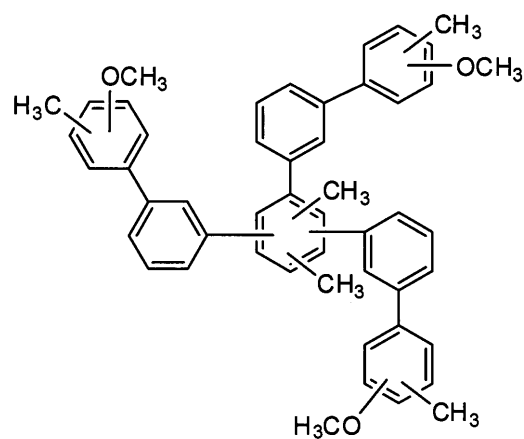


30

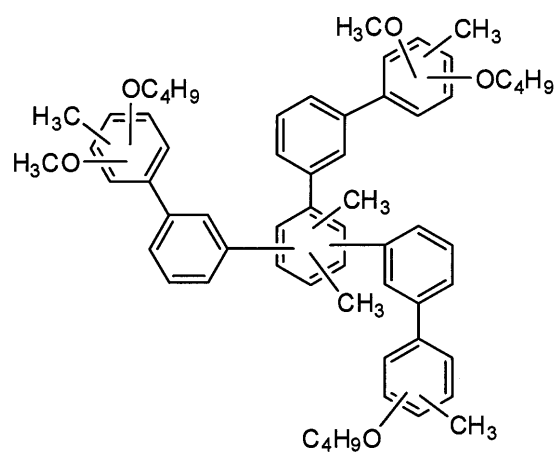
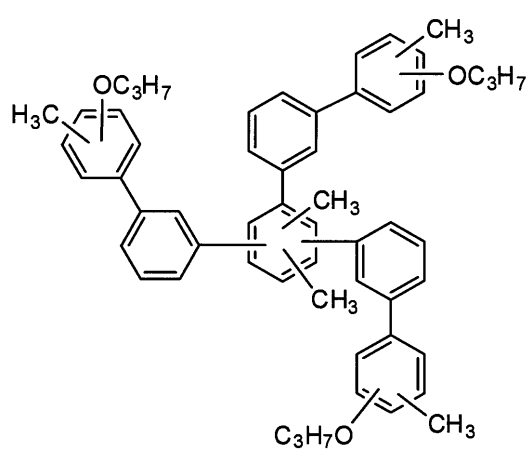
40

【 0 0 6 2 】

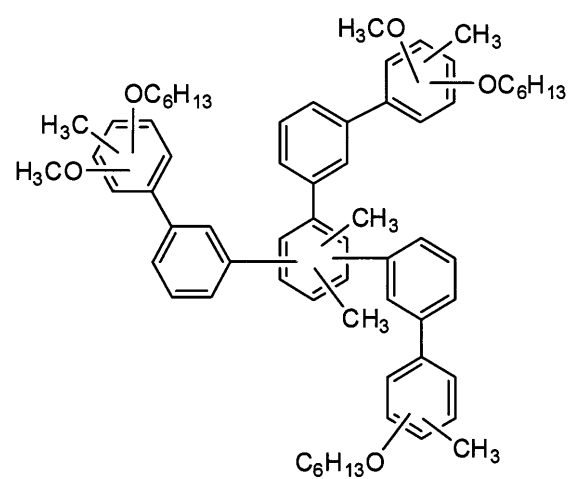
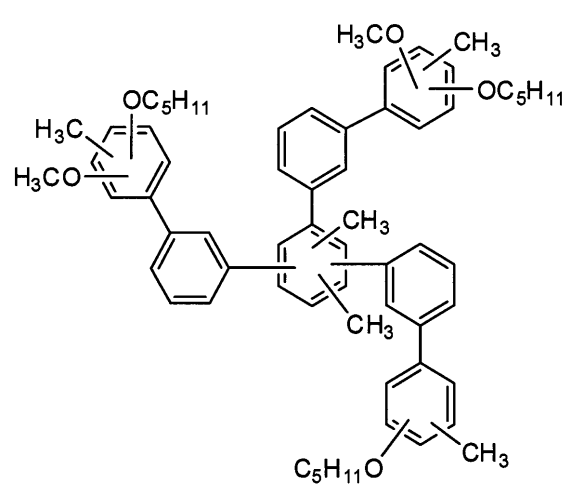
【化 5 8】



10



20

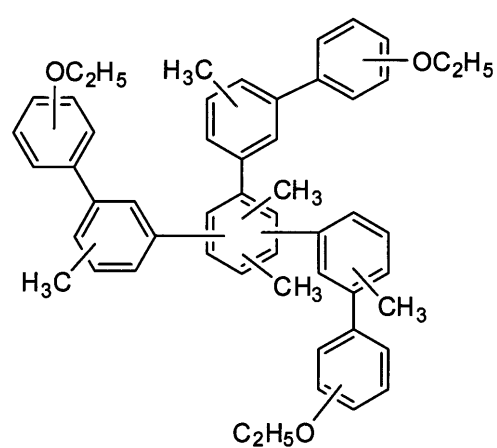
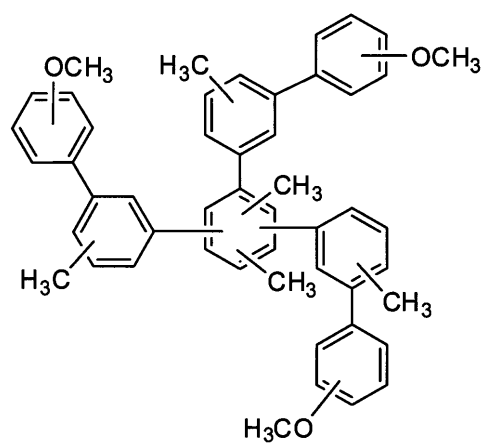


30

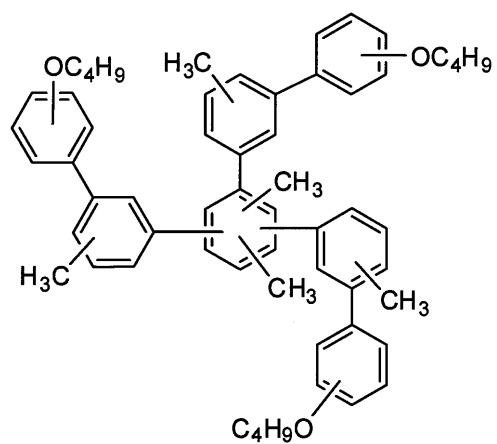
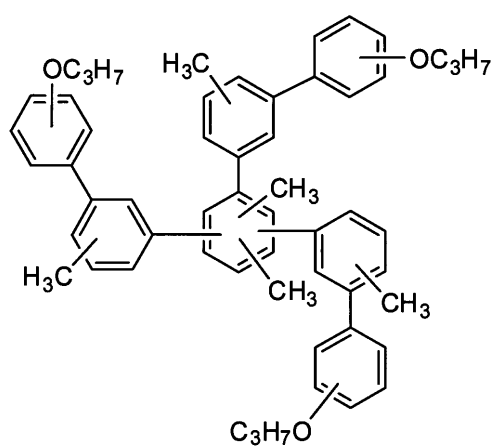
【 0 0 6 3 】

40

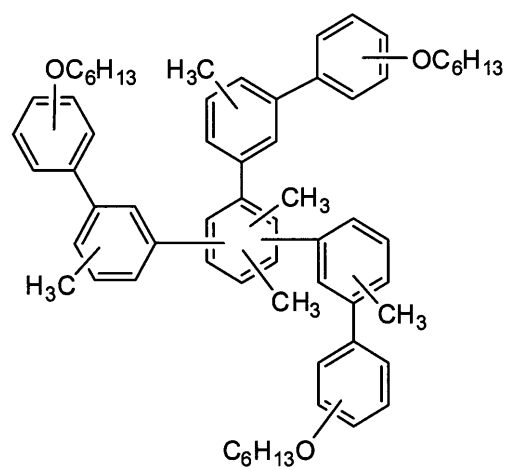
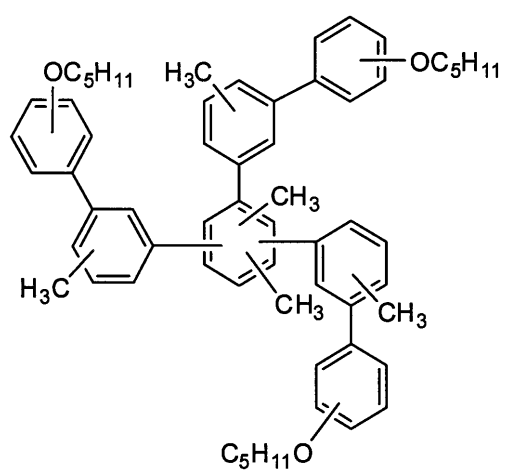
【化 5 9】



10



20

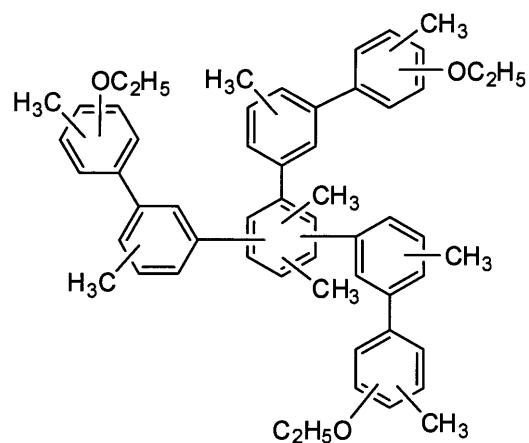
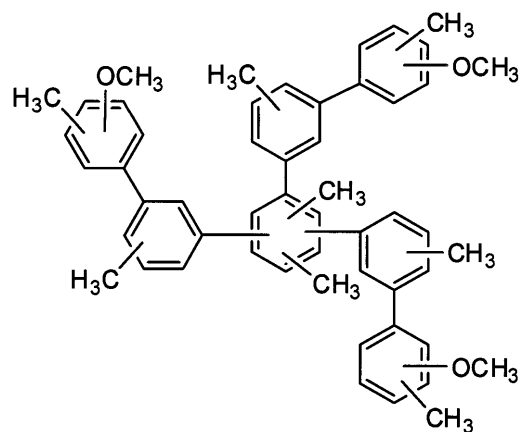


30

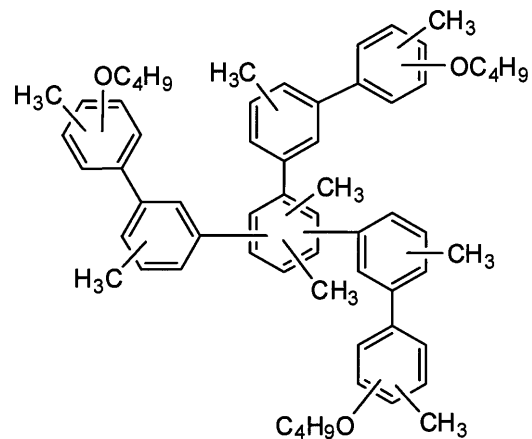
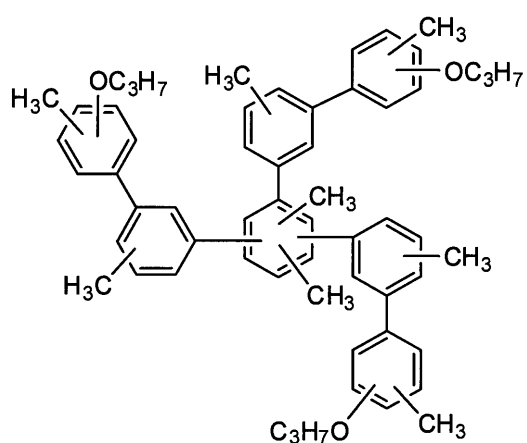
40

【 0 0 6 4 】

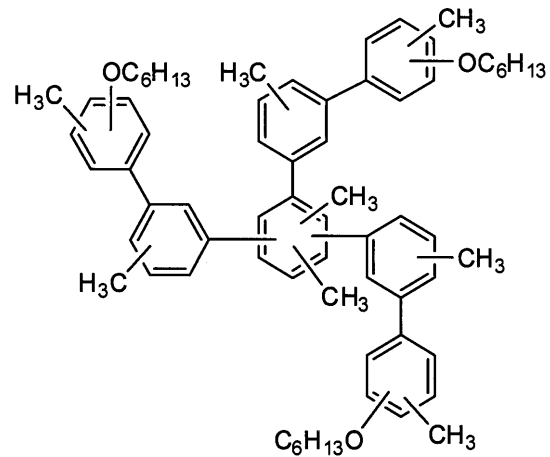
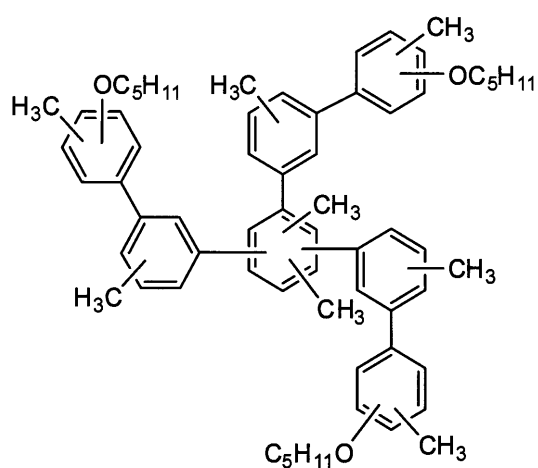
【化 60】



10



20

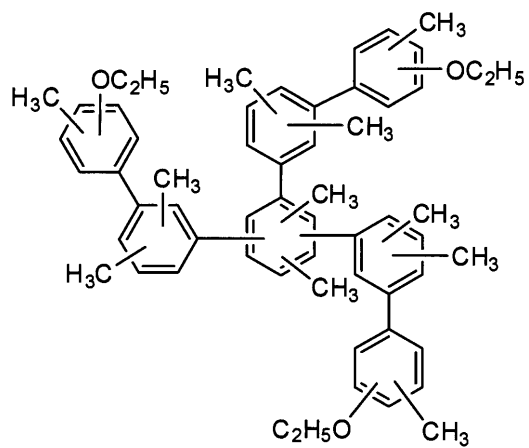
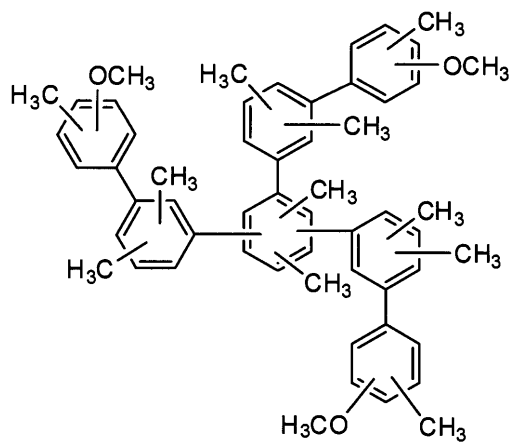


30

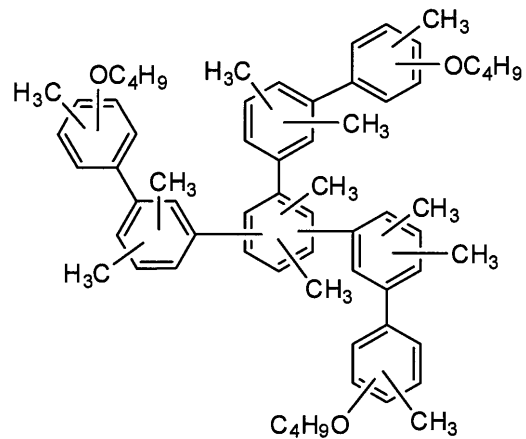
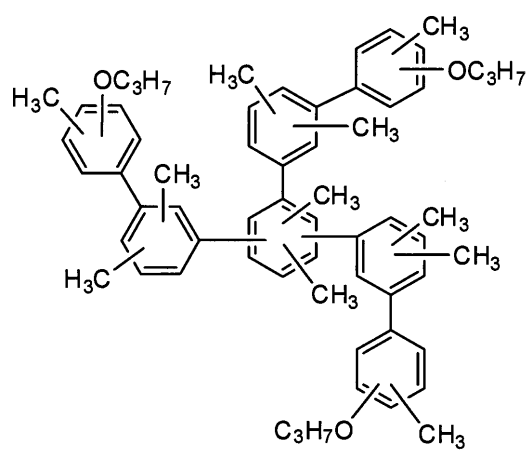
40

【0065】

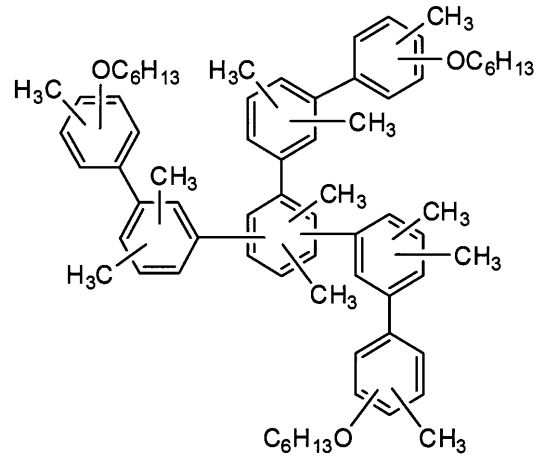
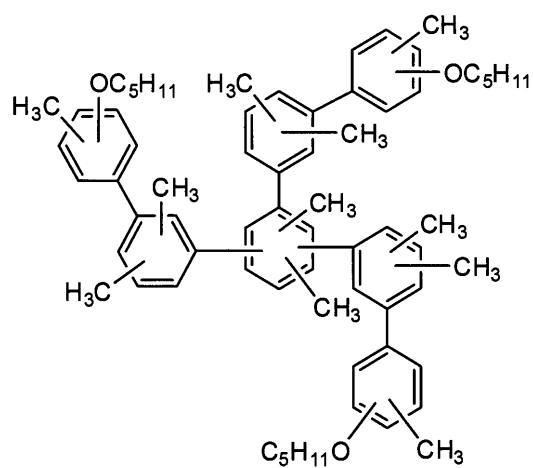
【化 6 1】



10



20

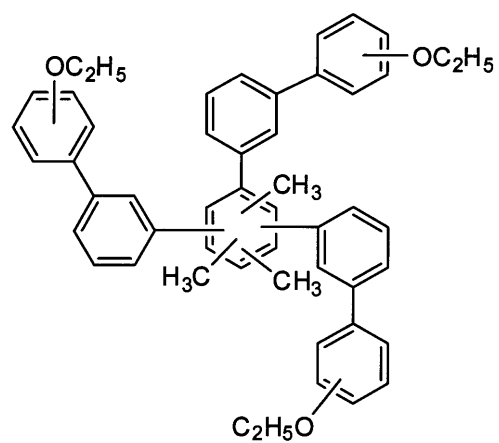
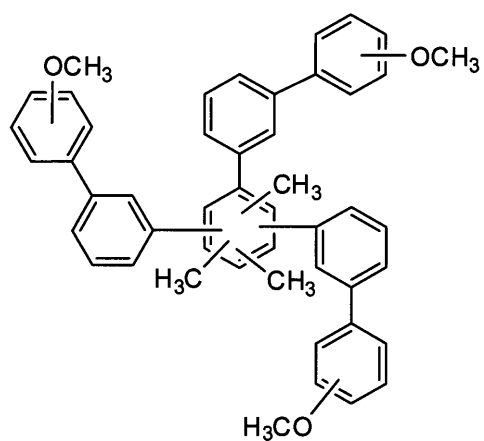


30

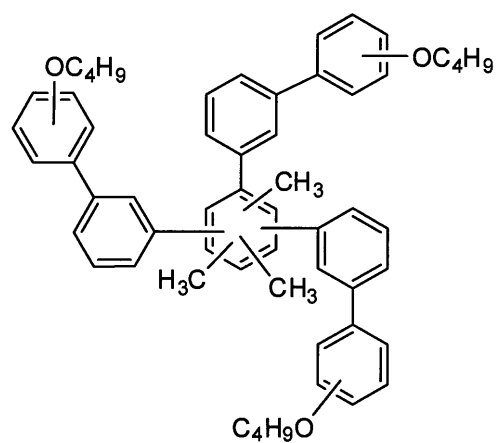
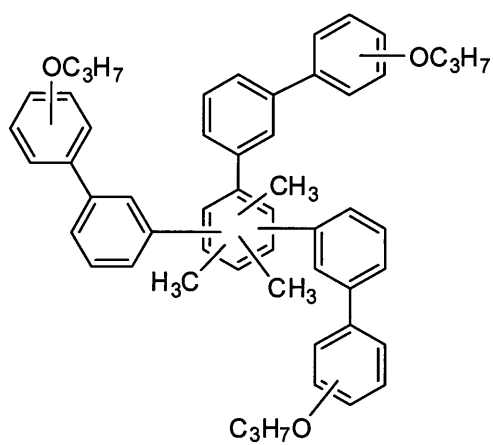
40

【 0 0 6 6 】

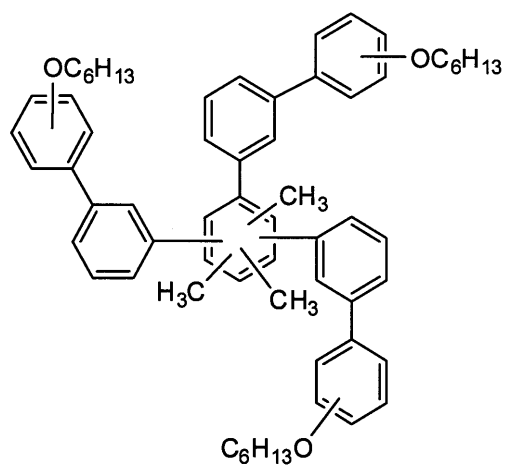
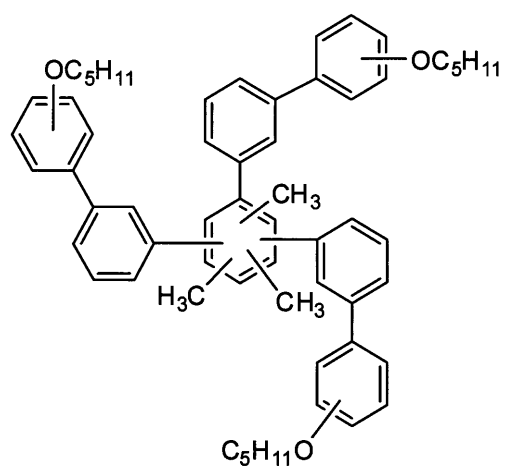
【化 6 2】



10



20

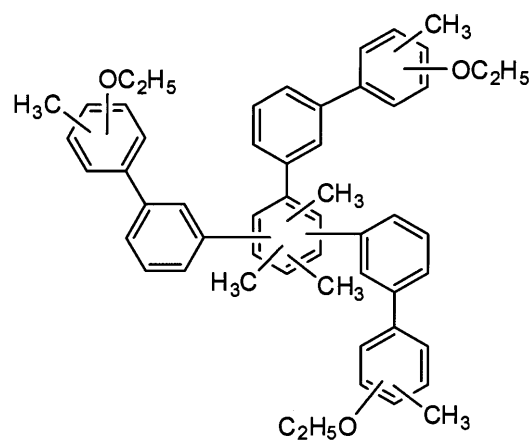
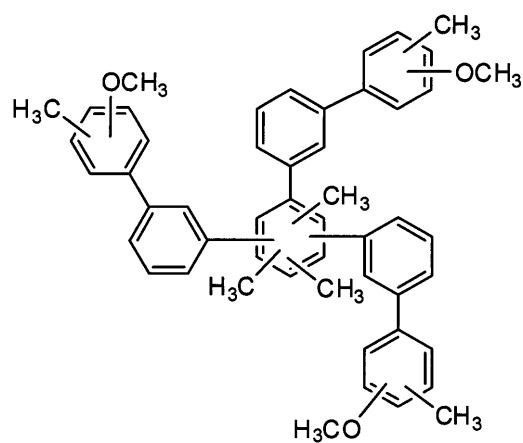


30

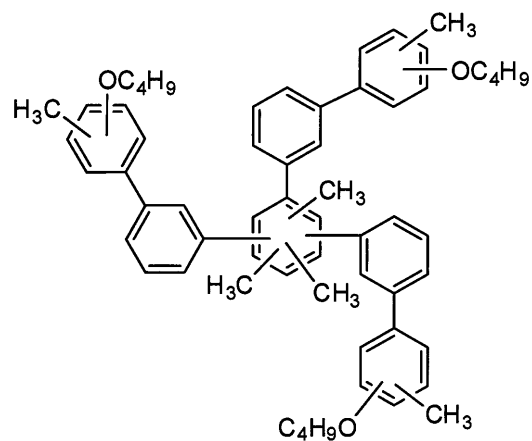
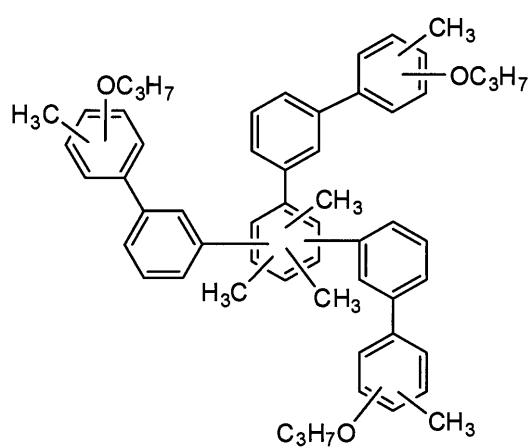
40

【 0 0 6 7 】

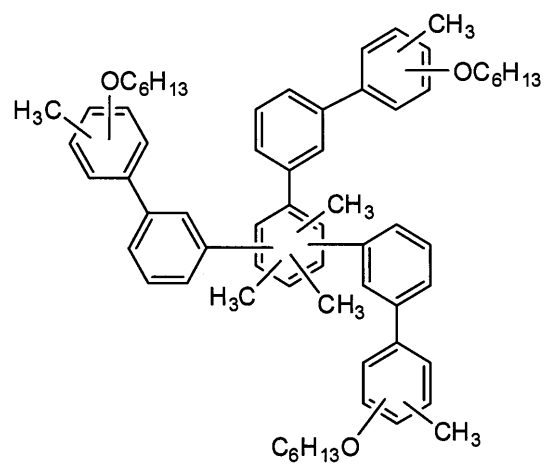
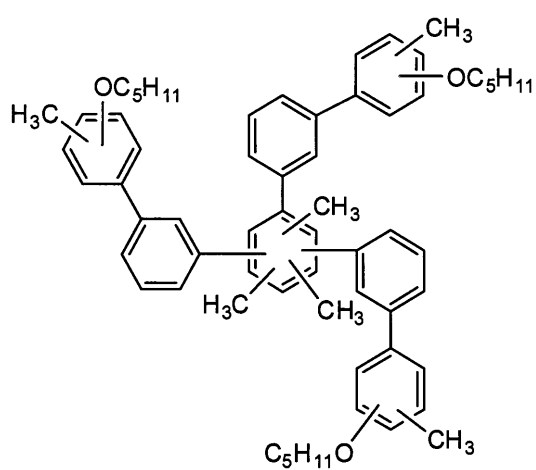
【化 6 3】



10



20

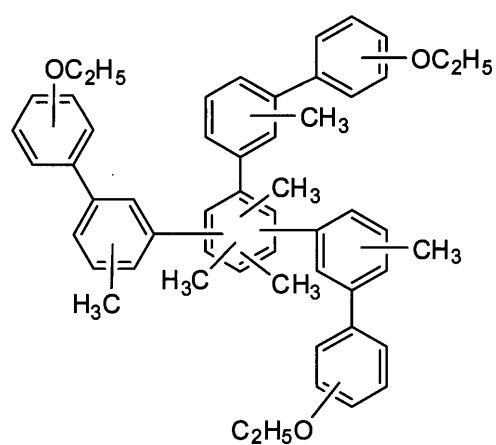
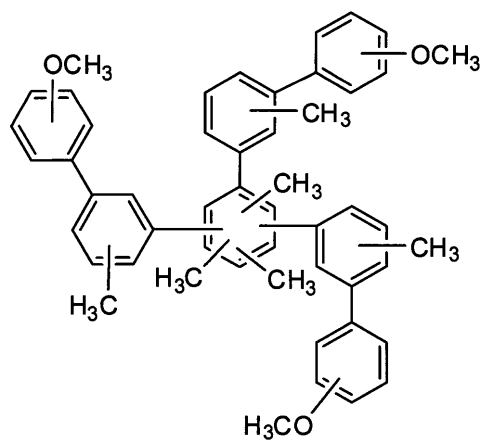


30

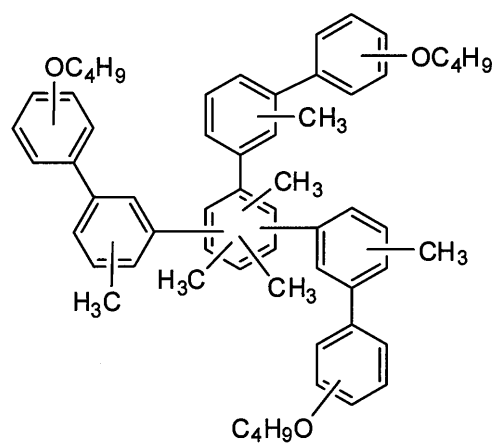
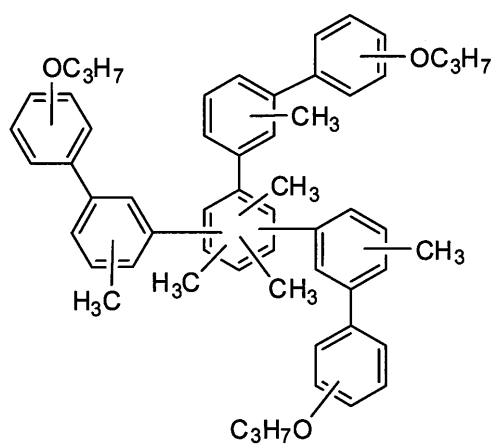
40

【 0 0 6 8 】

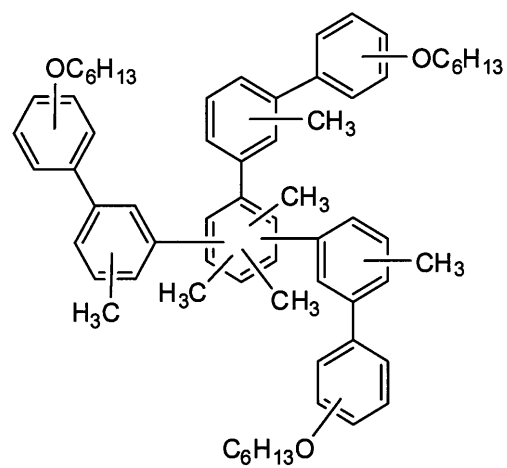
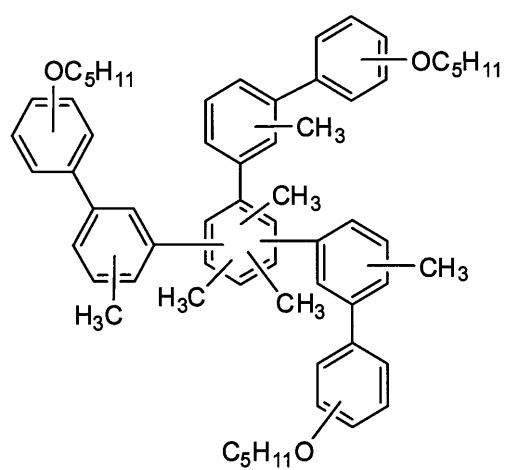
【化 6 4】



10



20

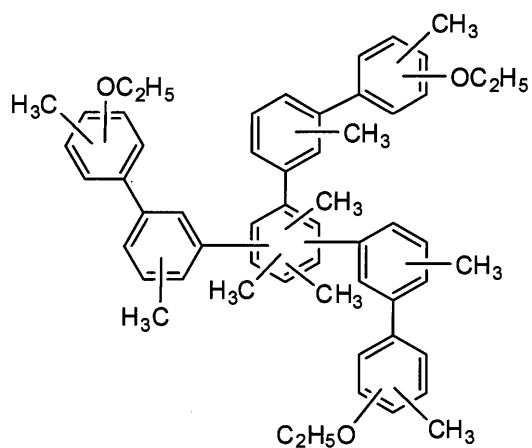
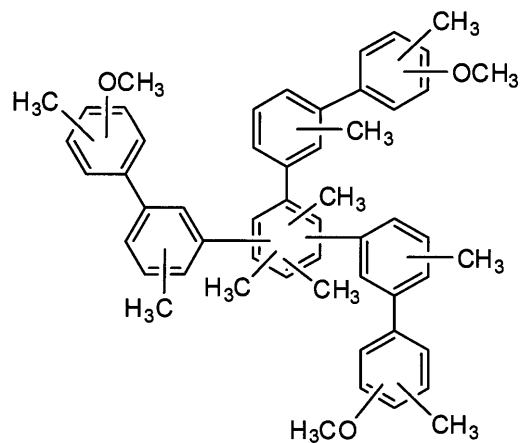


30

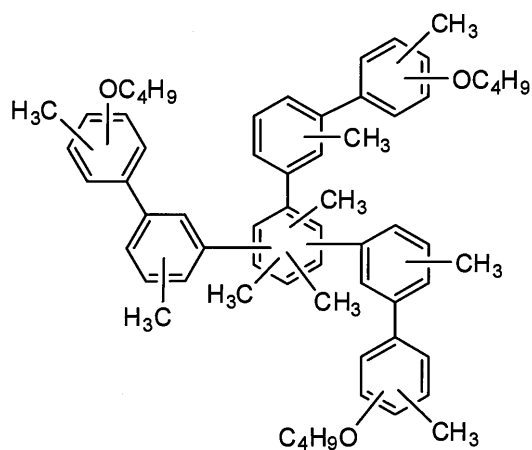
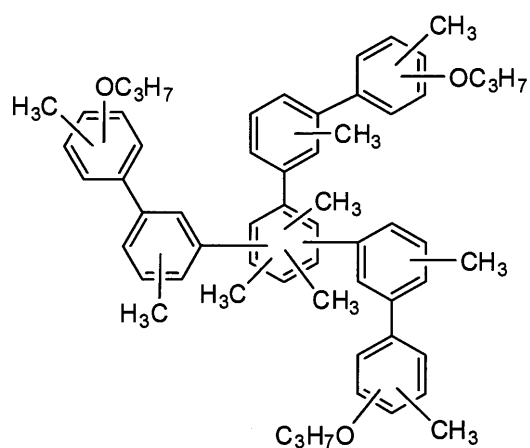
40

【 0 0 6 9 】

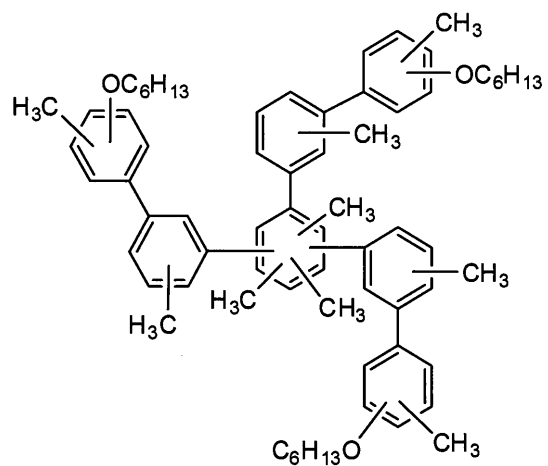
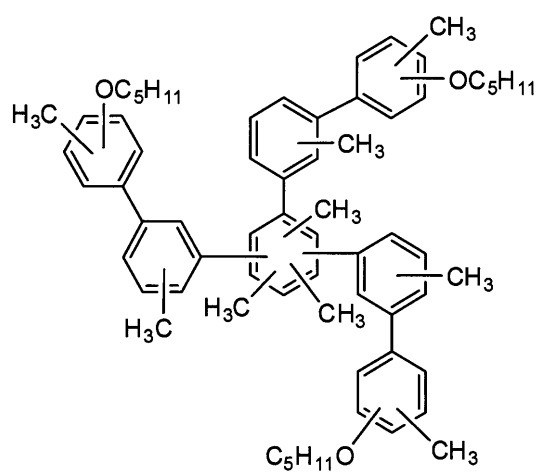
【化 6 5】



10



20

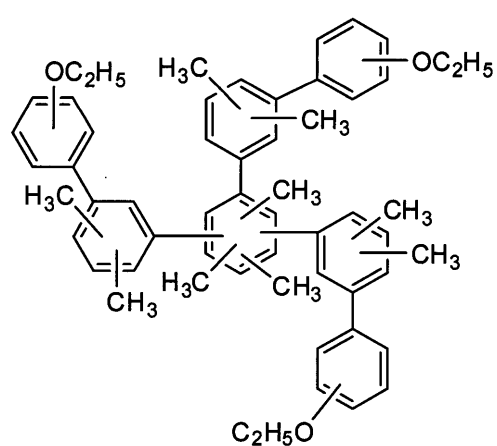
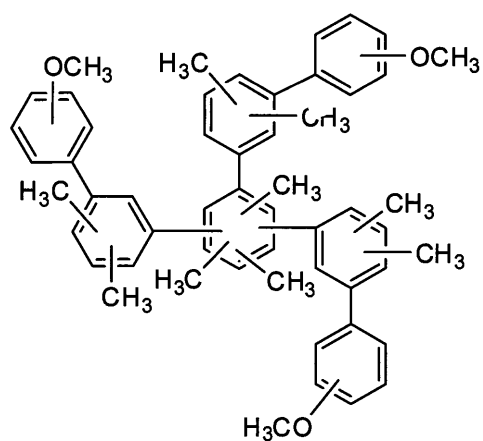


30

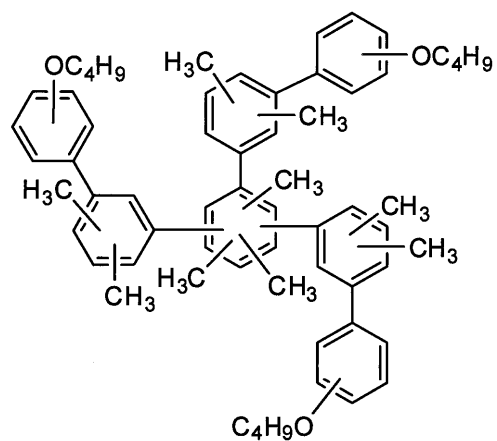
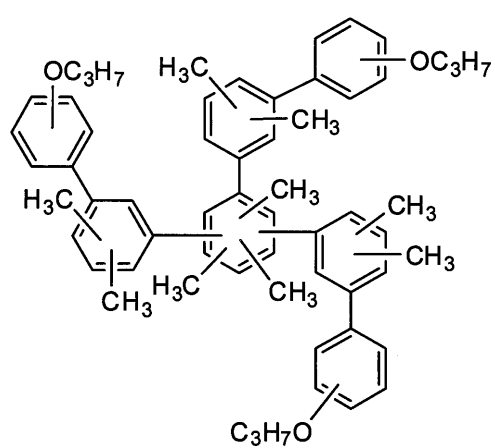
40

【 0 0 7 0 】

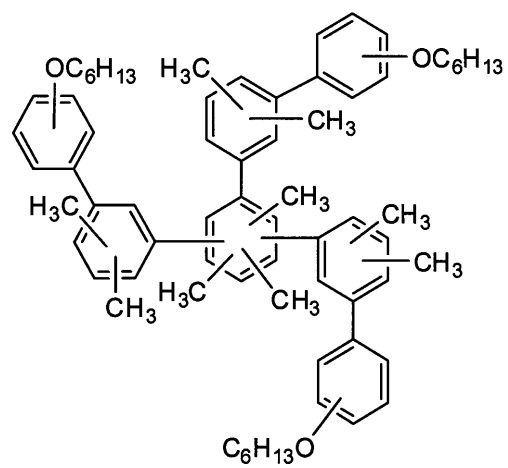
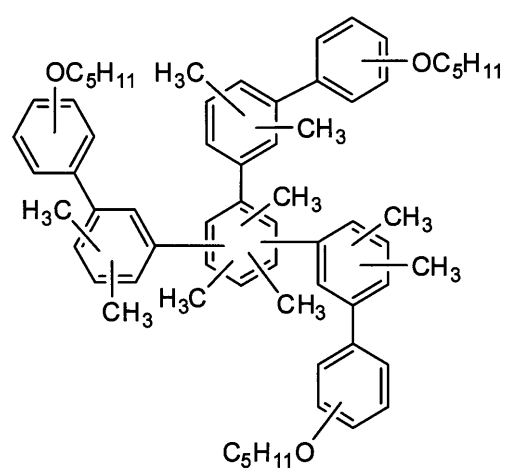
【化 6 6】



10



20

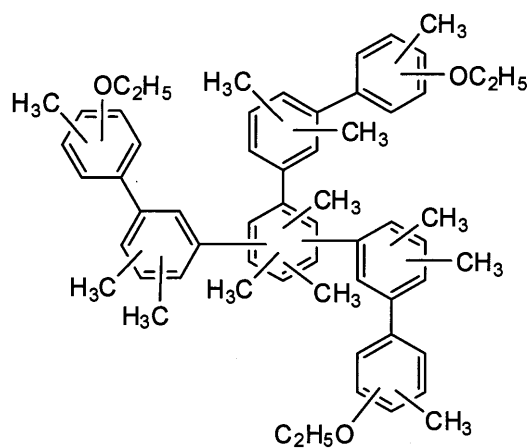
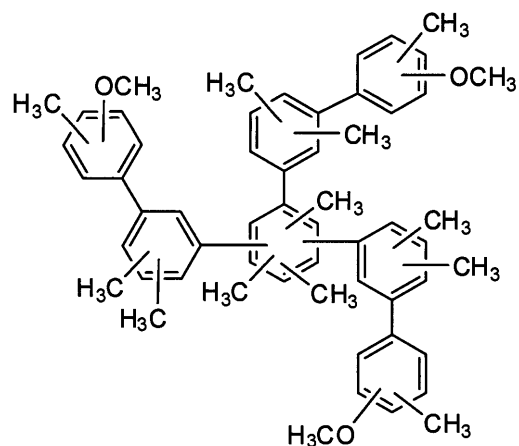


30

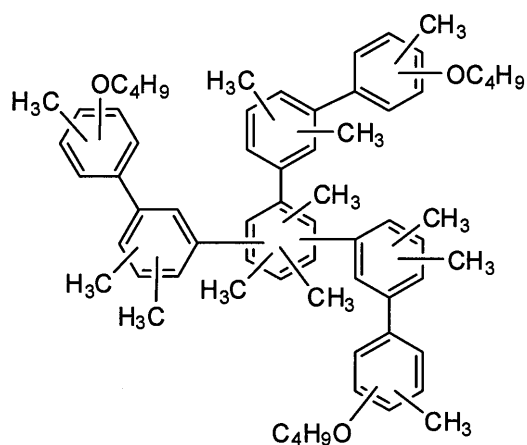
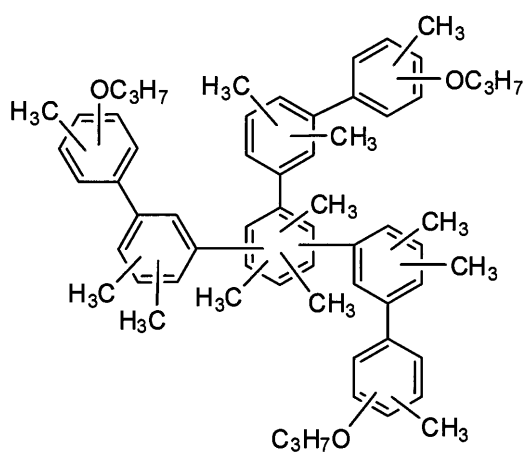
40

【 0 0 7 1】

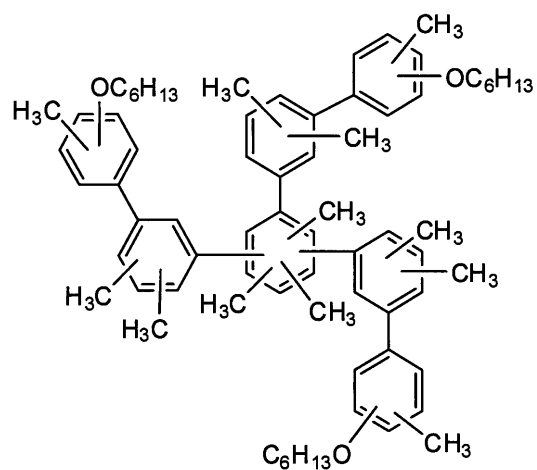
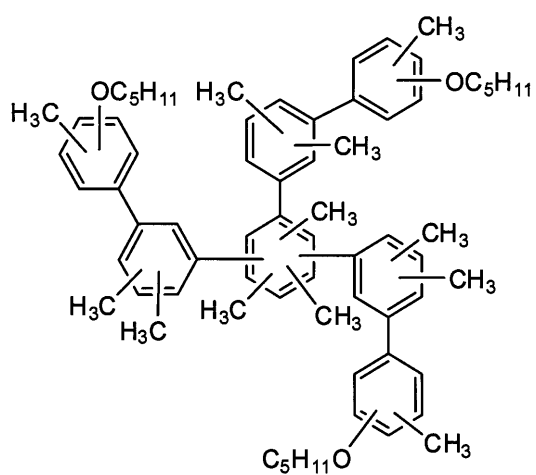
【化 6 7】



10



20

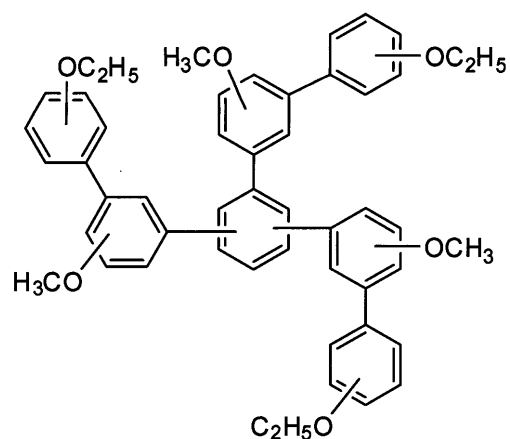
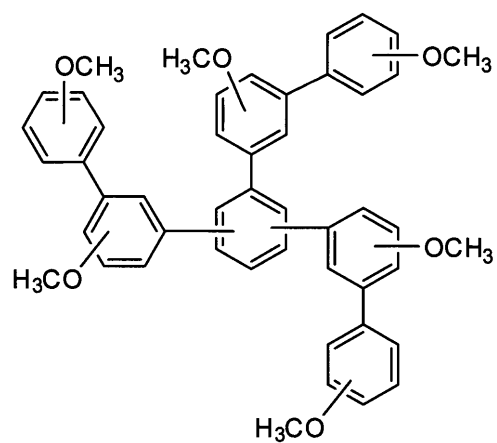


30

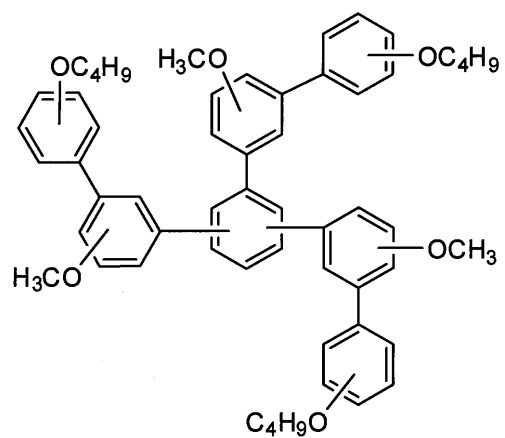
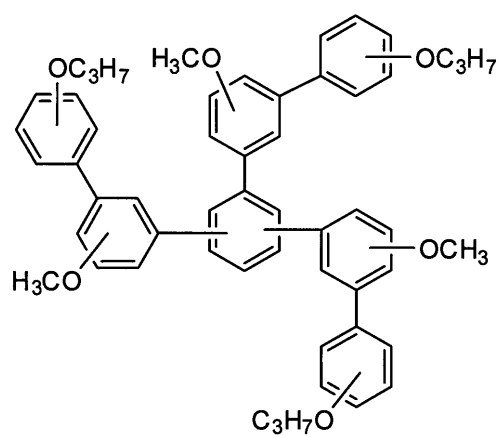
40

【0072】

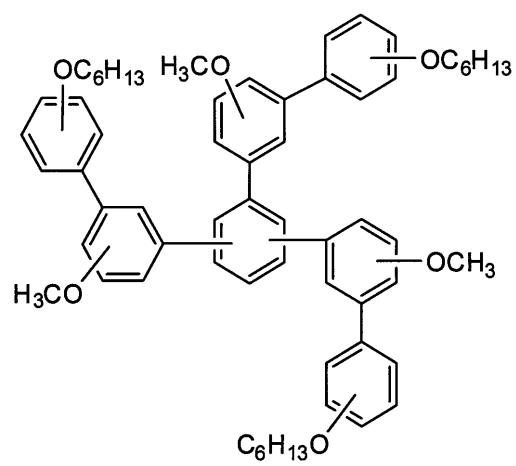
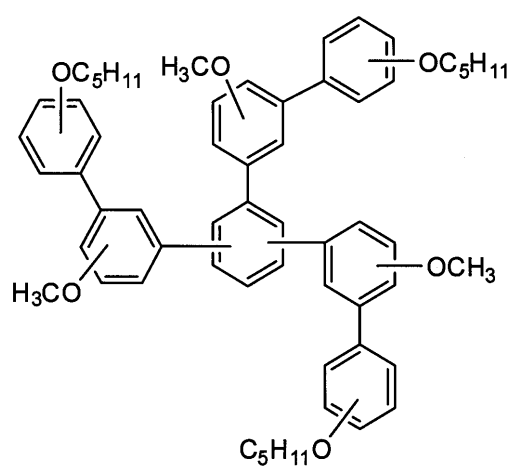
【化 6 8】



10



20

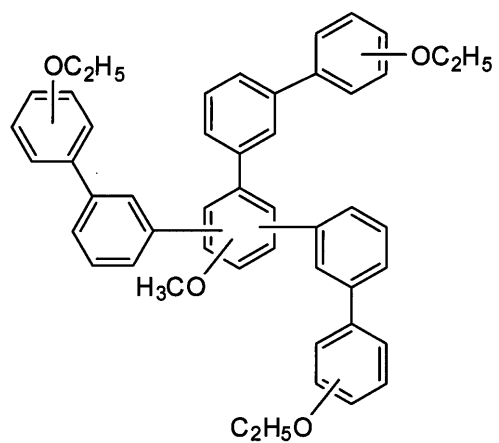
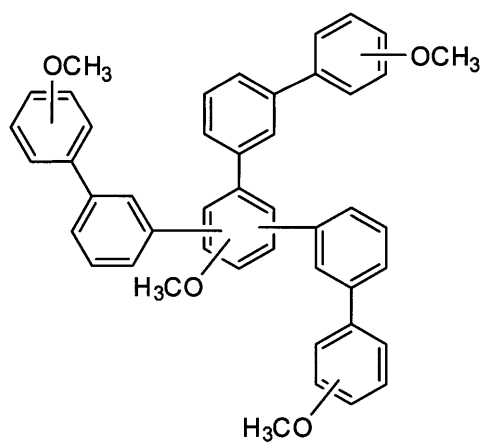


30

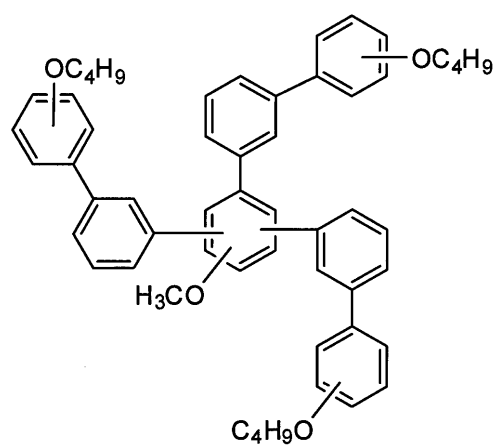
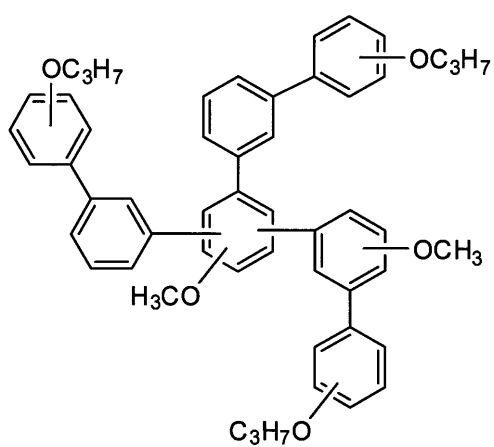
40

【 0 0 7 3 】

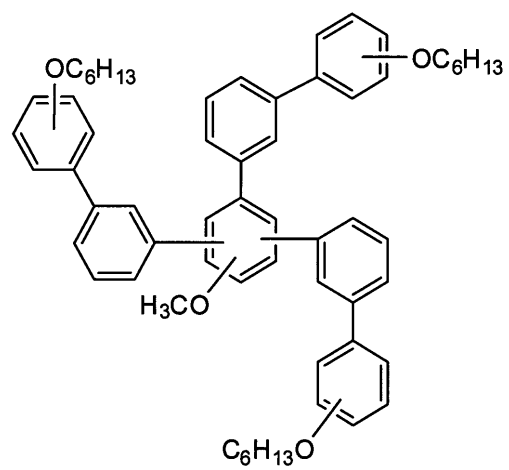
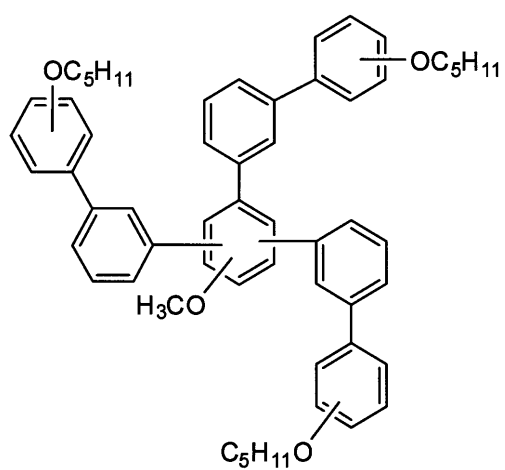
【化 6 9】



10



20

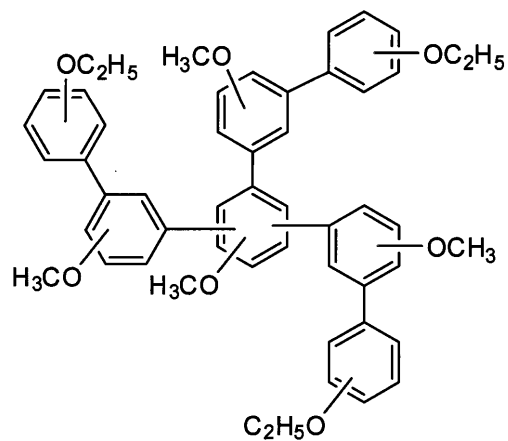
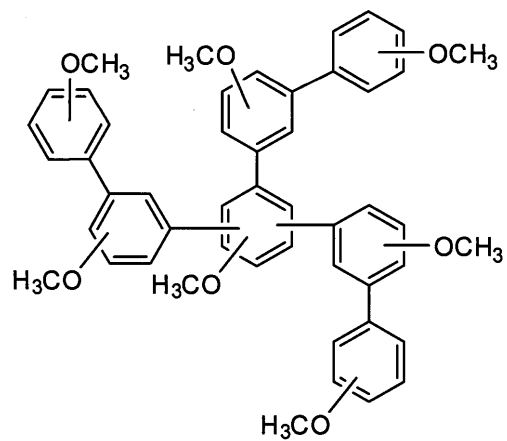


30

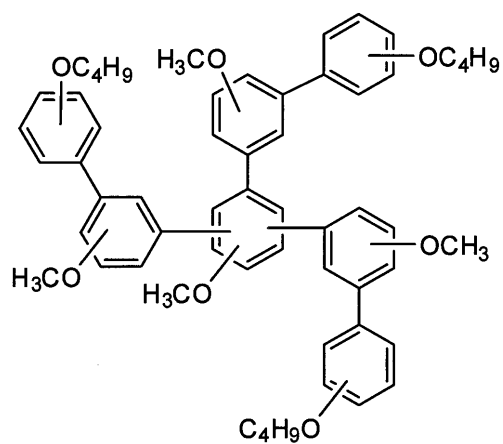
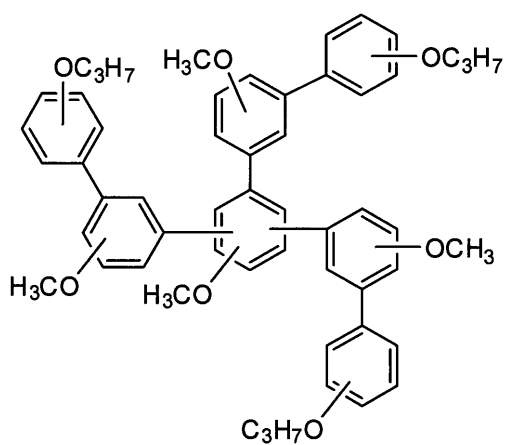
40

【 0 0 7 4】

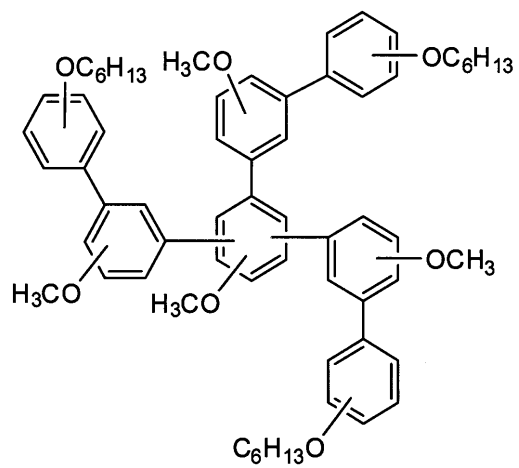
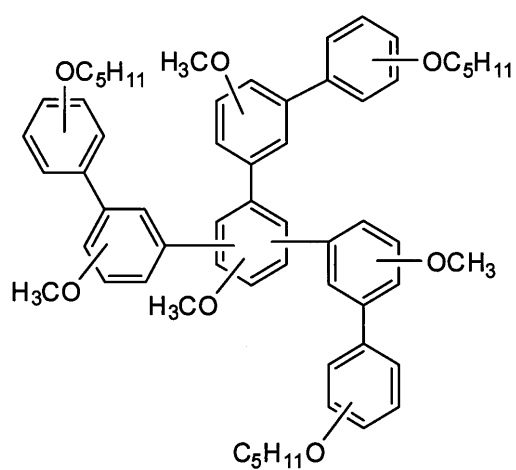
【化 7 0】



10



20

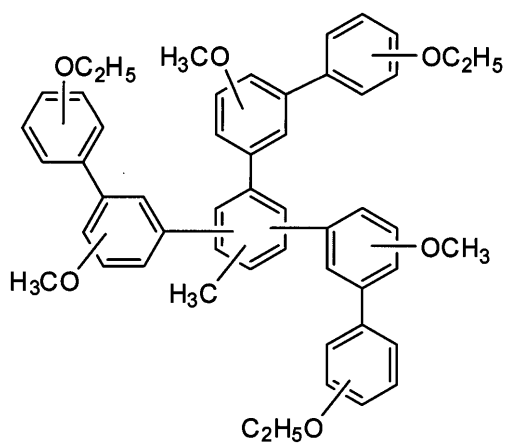
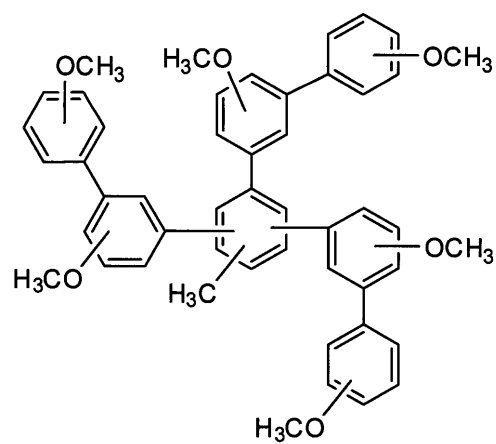


30

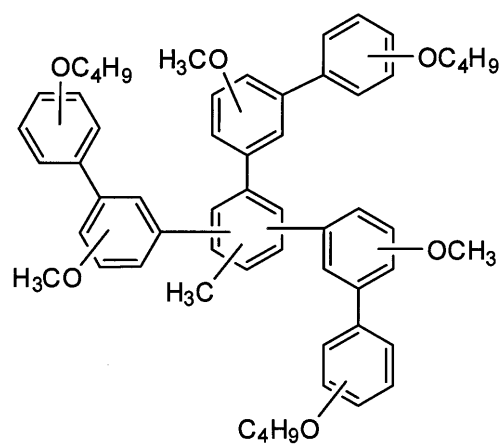
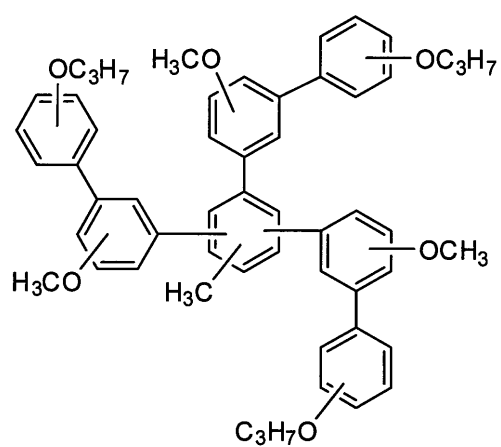
40

【 0 0 7 5】

【化 7 1】

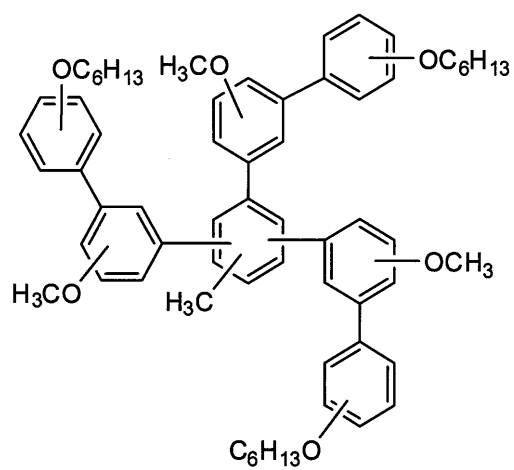
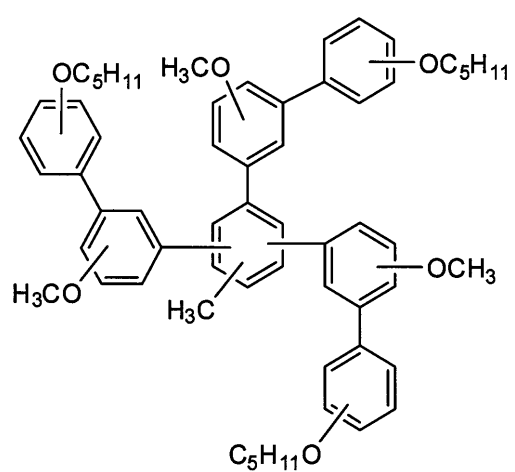


10



20

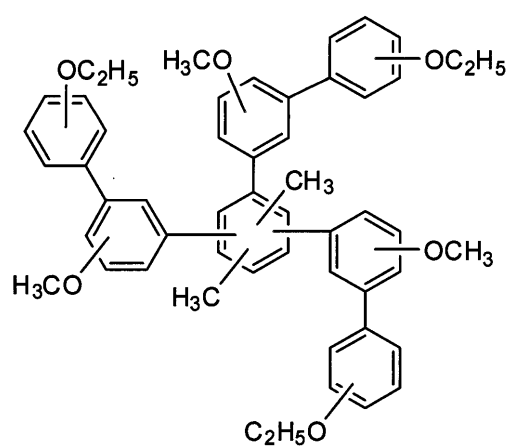
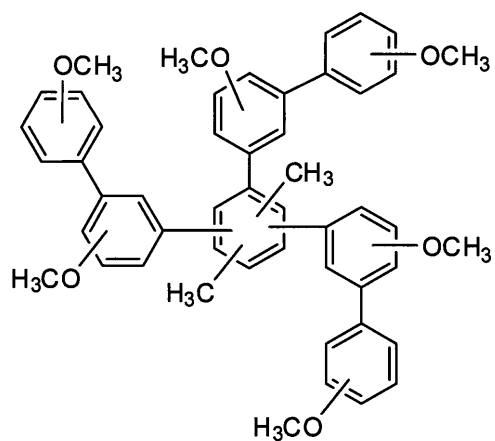
30



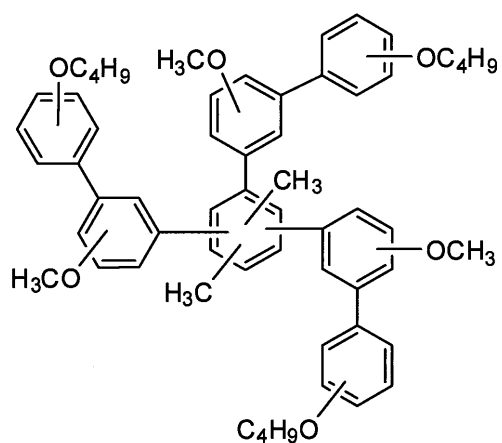
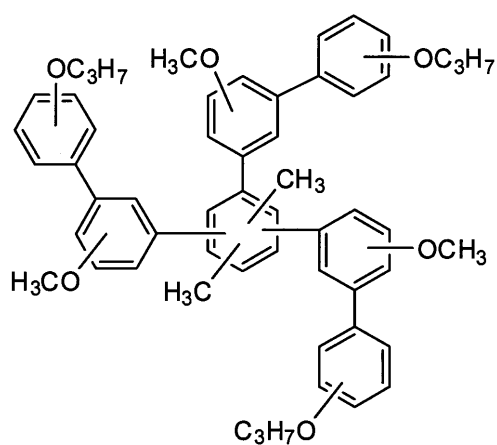
40

【 0 0 7 6 】

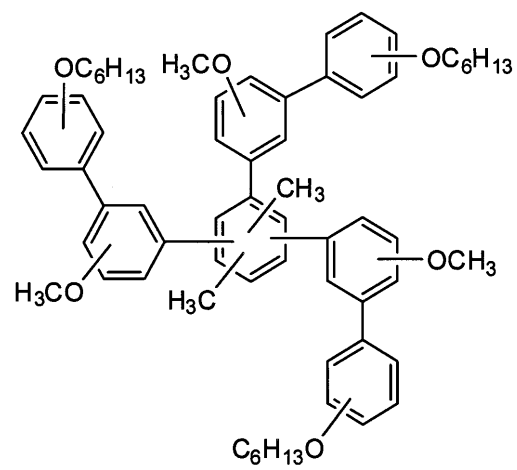
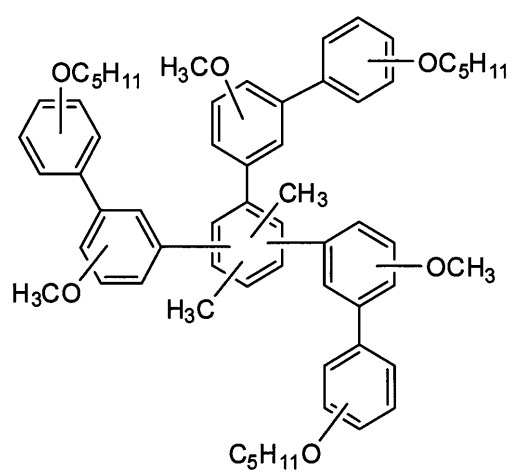
【化 7 2】



10



20

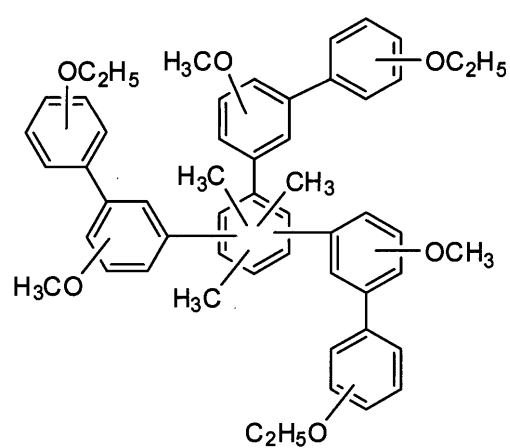
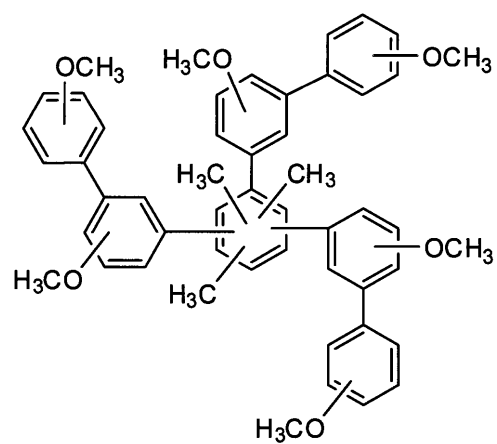


30

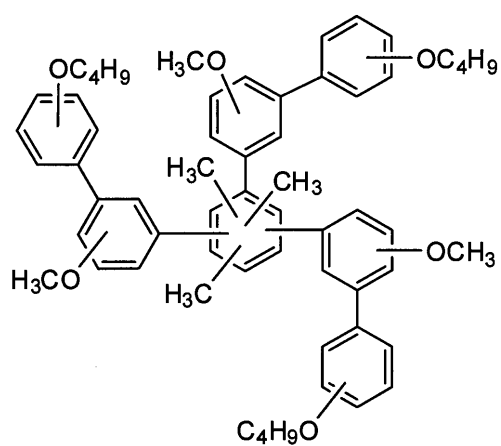
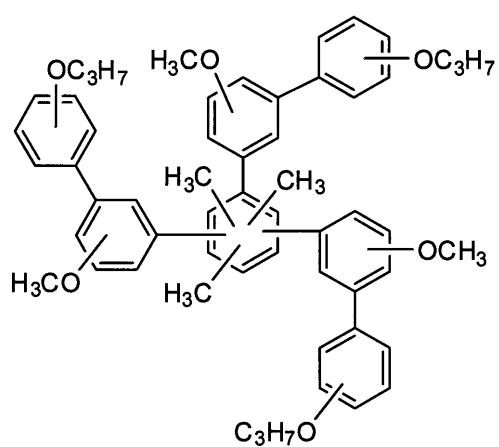
40

【 0 0 7 7 】

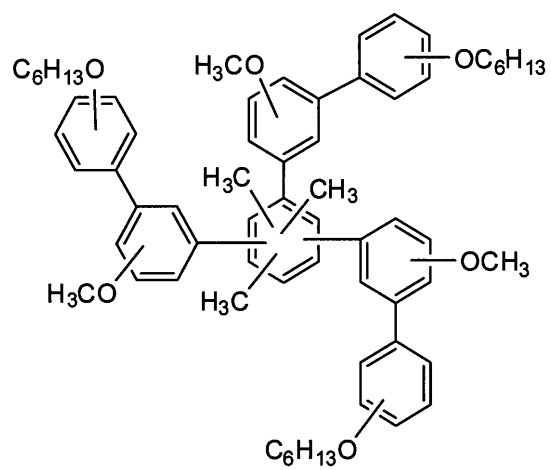
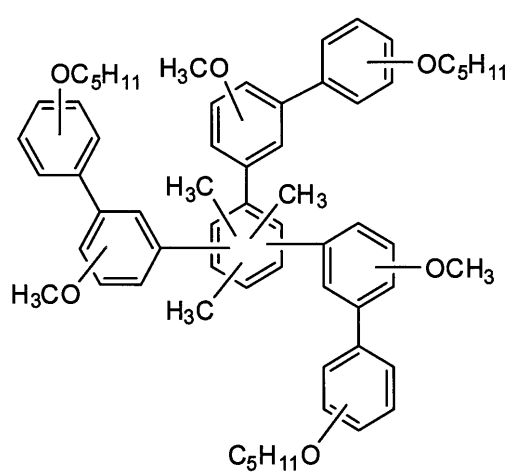
【化 7 3】



10



20

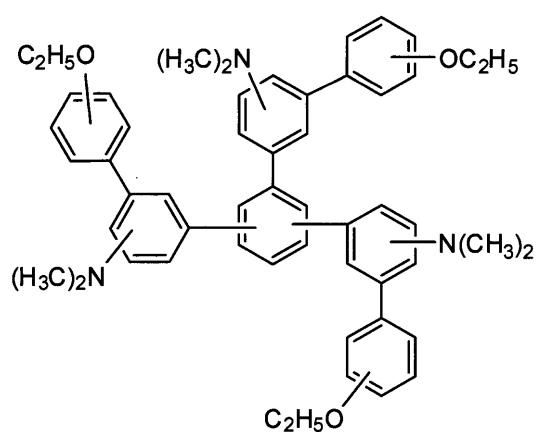
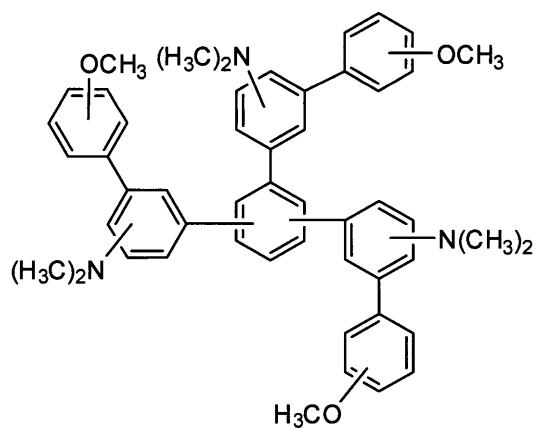


30

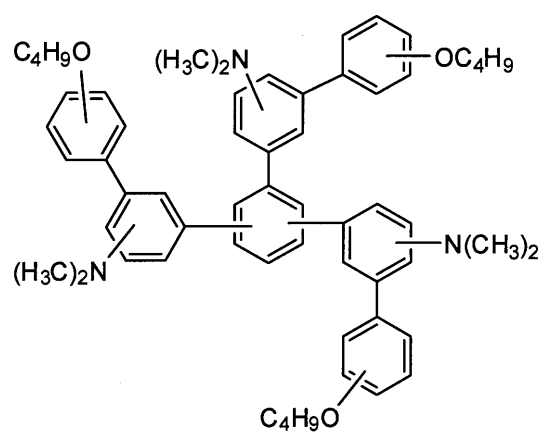
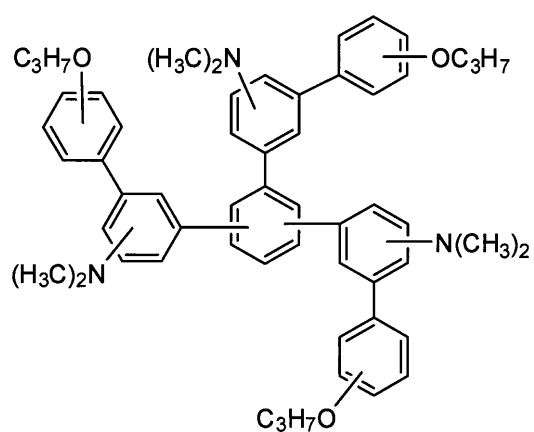
40

【 0 0 7 8 】

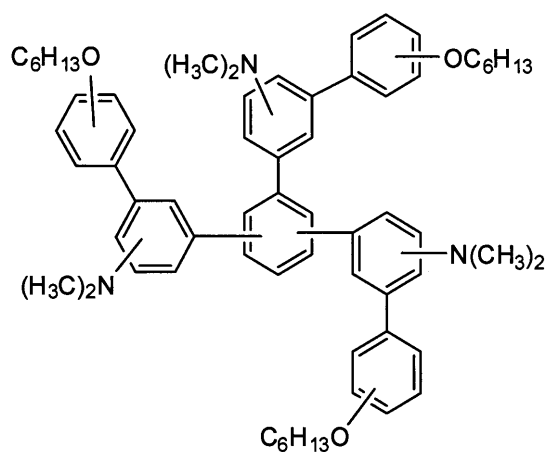
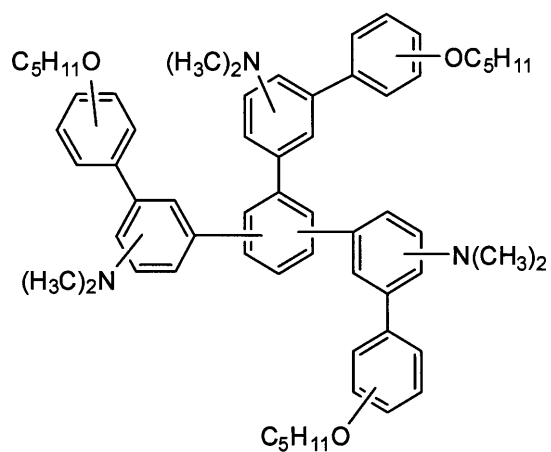
【化 7 4】



10



20

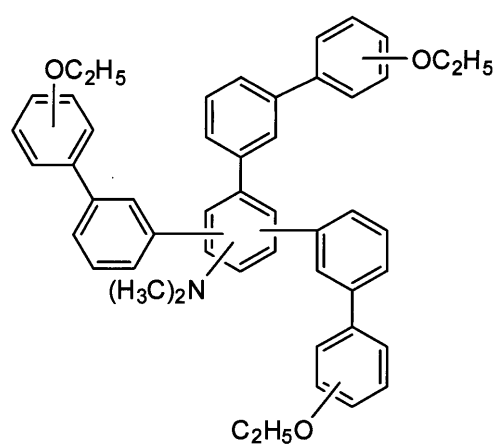
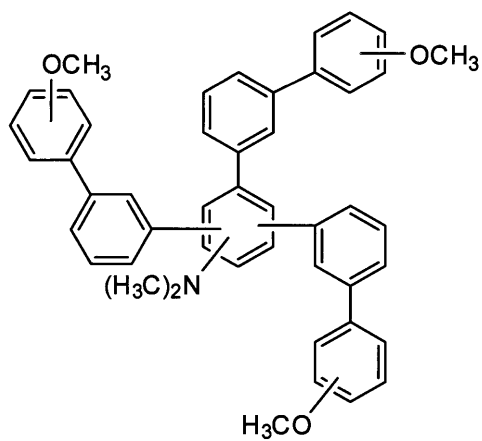


30

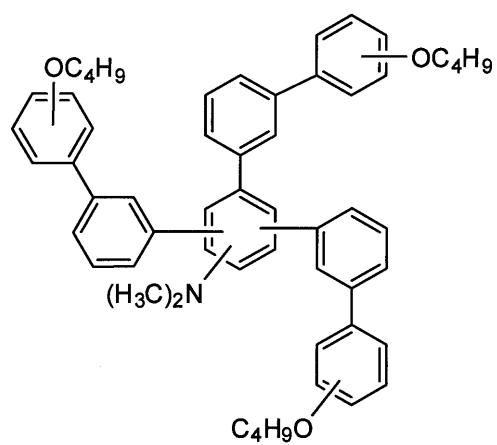
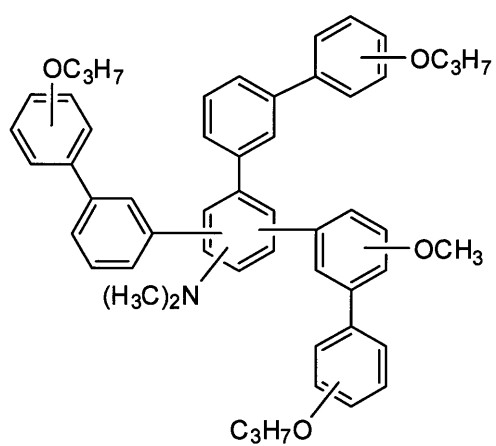
40

【 0 0 7 9 】

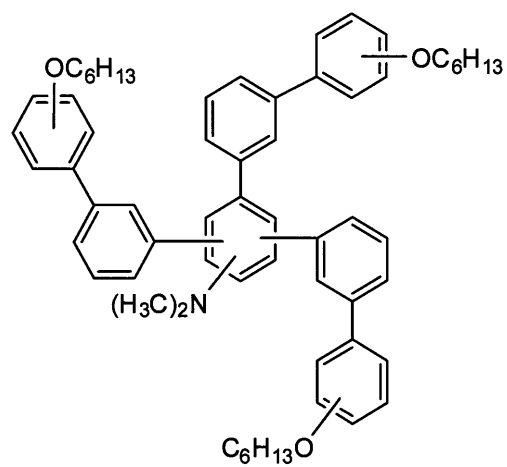
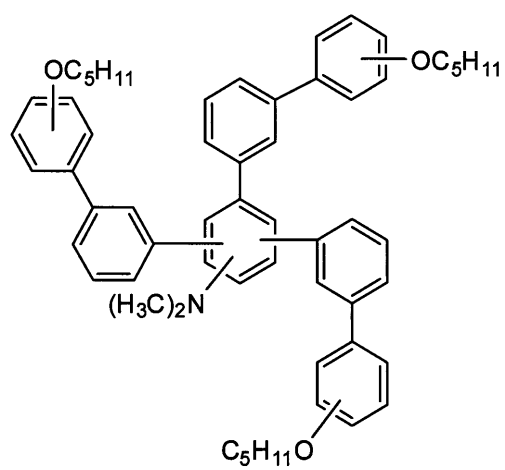
【化 7 5】



10



20

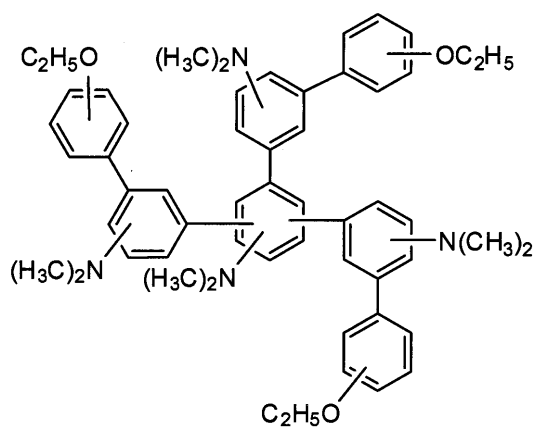
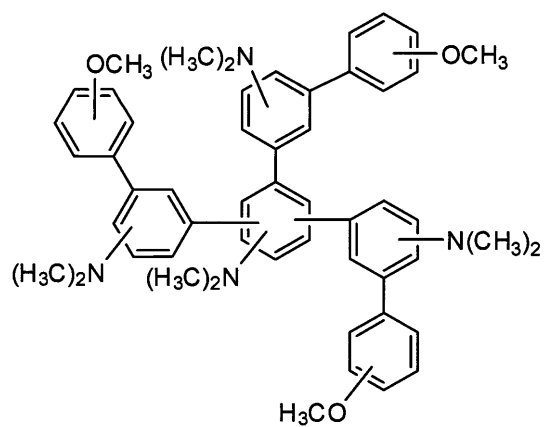


30

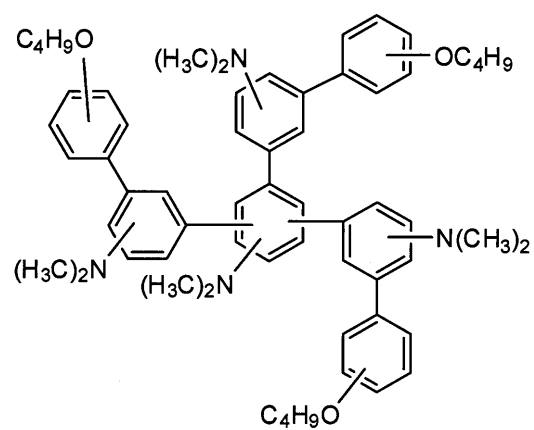
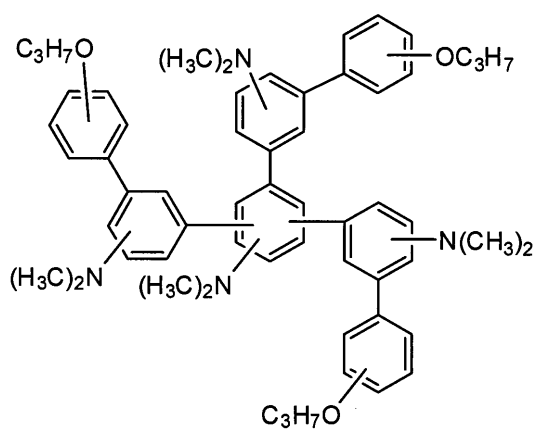
40

【 0 0 8 0 】

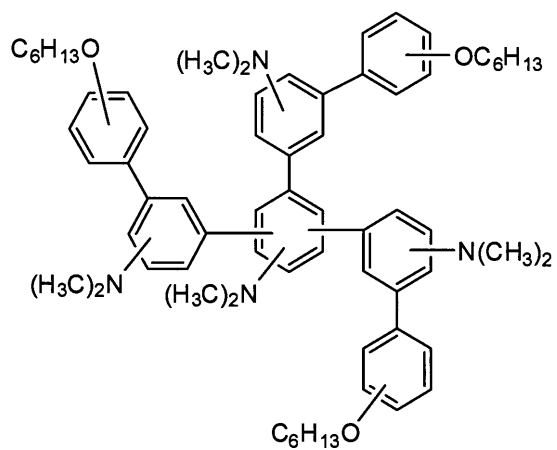
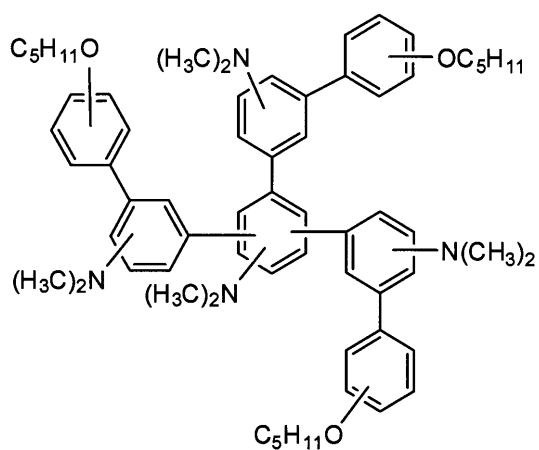
【化 7 6】



10



20

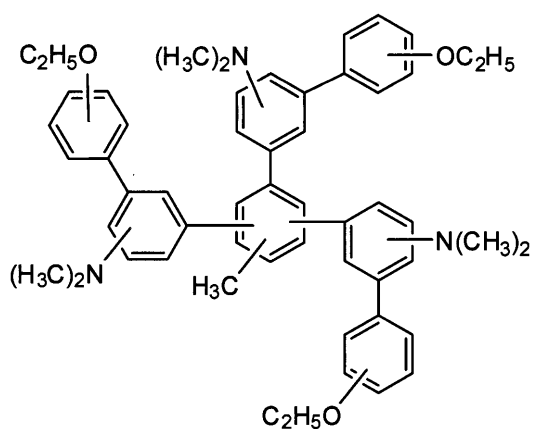
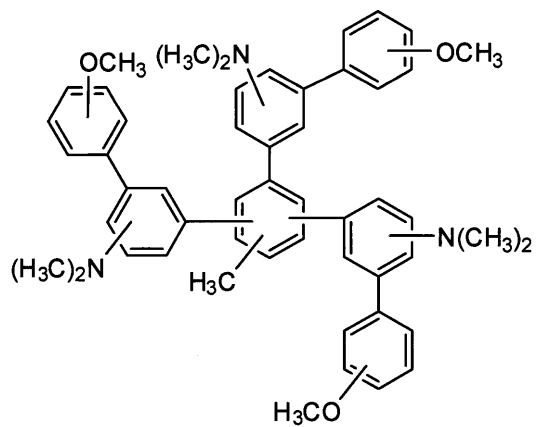


30

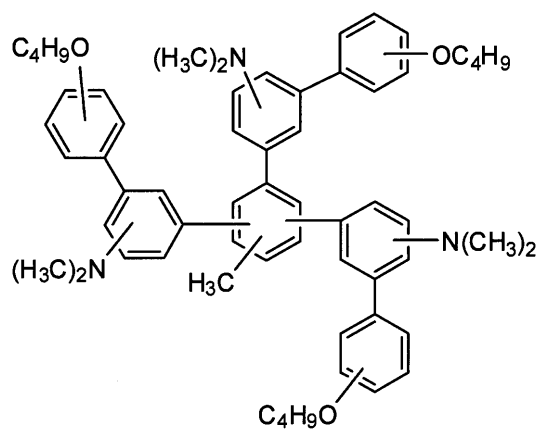
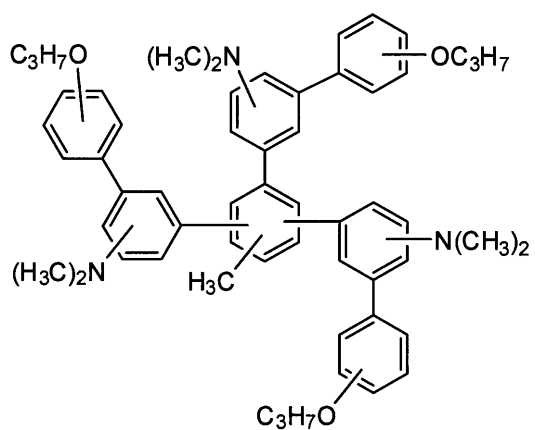
40

【 0 0 8 1】

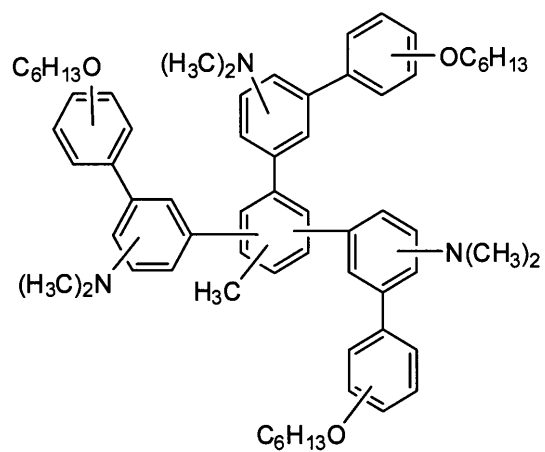
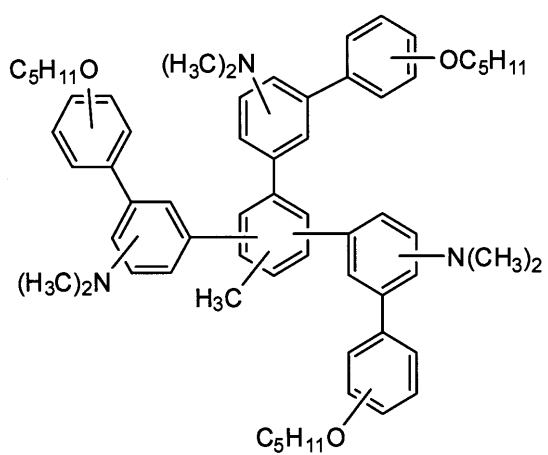
【化 7 7】



10



20

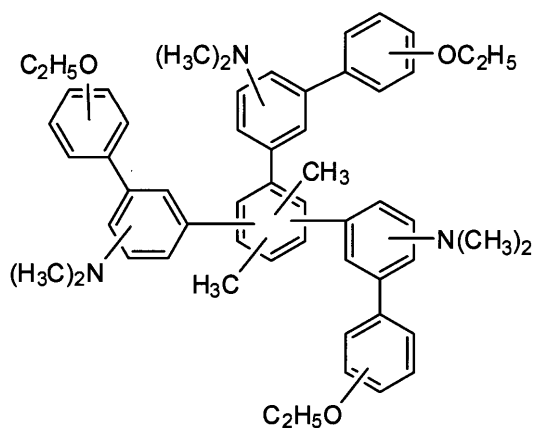
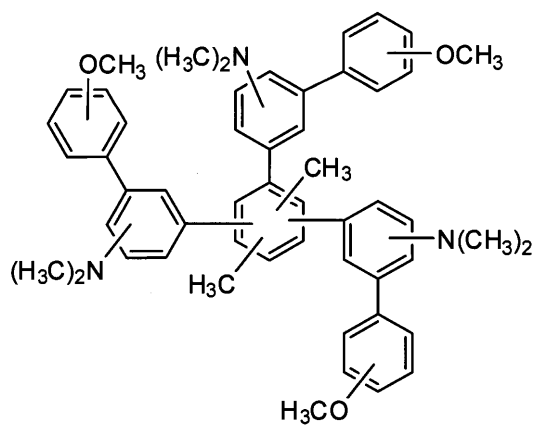


30

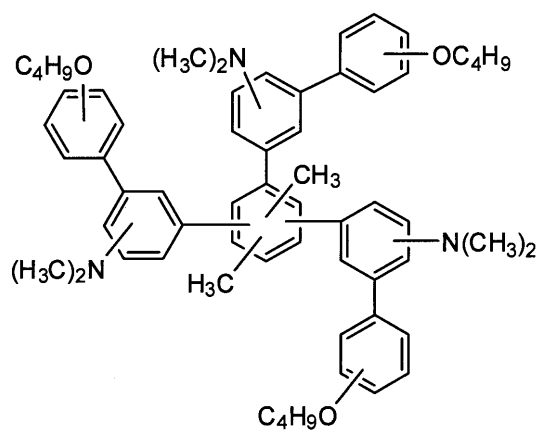
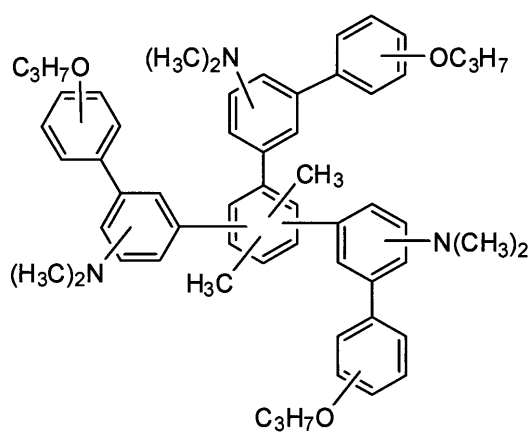
40

【 0 0 8 2】

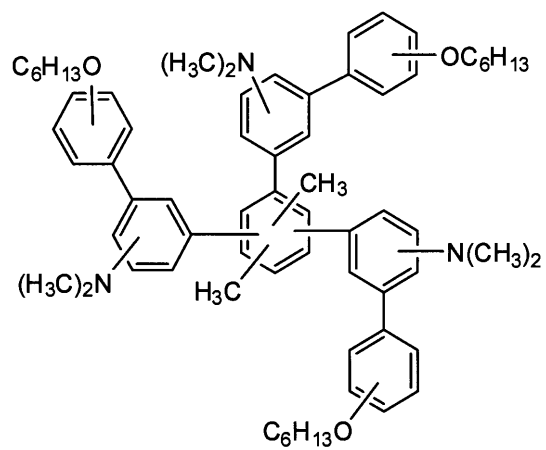
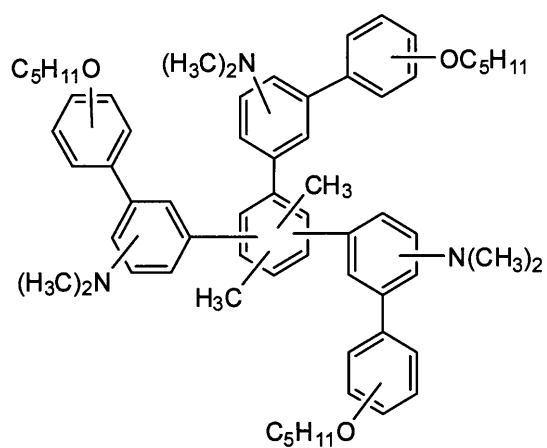
【化 7 8】



10



20

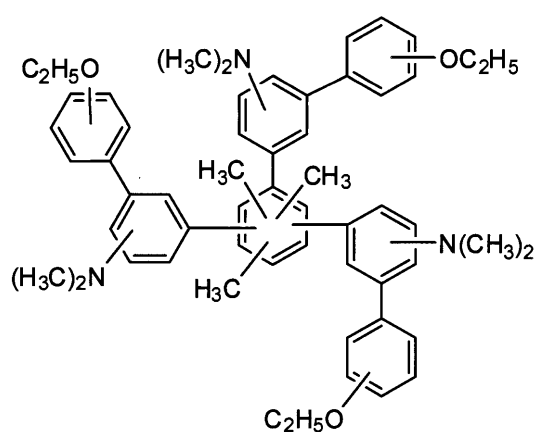
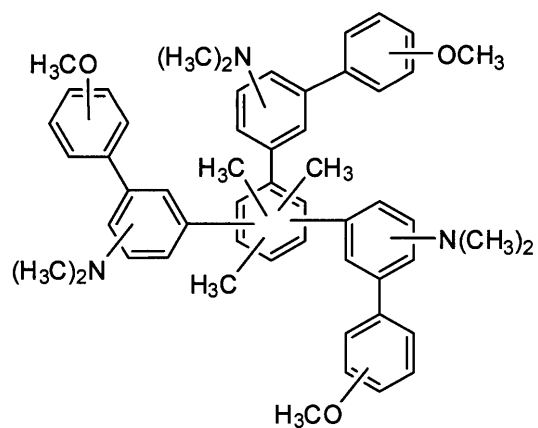


30

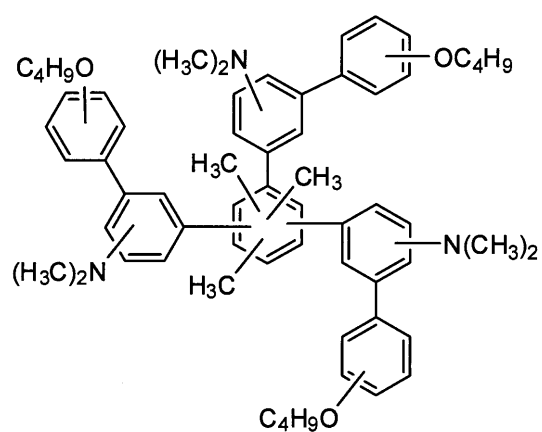
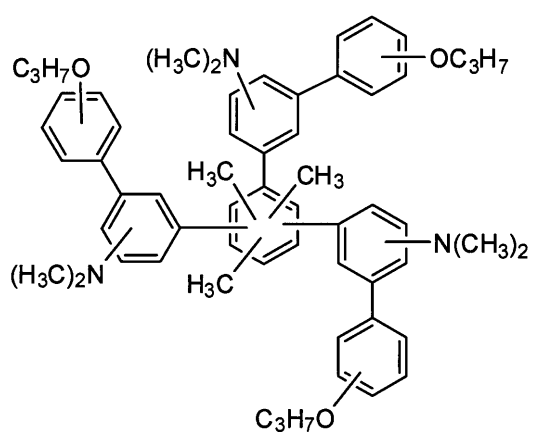
40

【 0 0 8 3 】

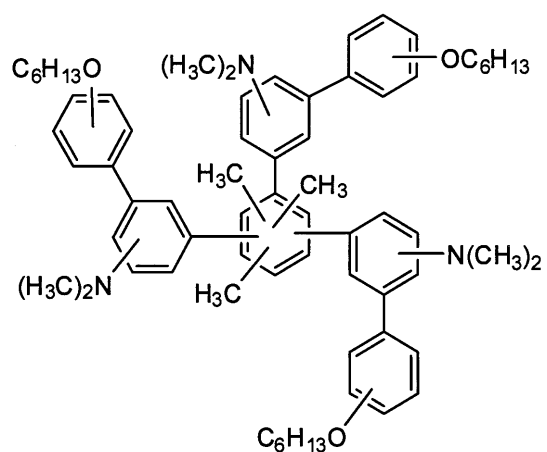
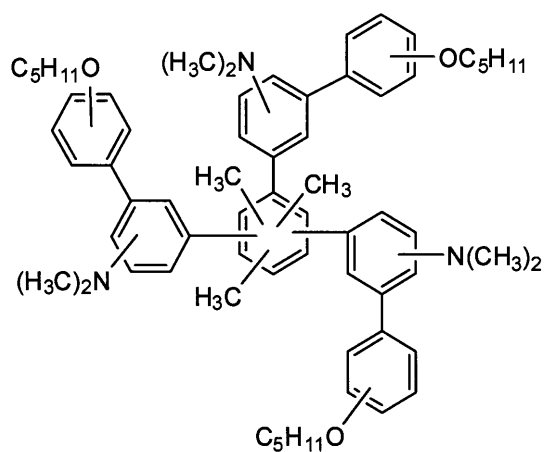
【化 7 9】



10



20

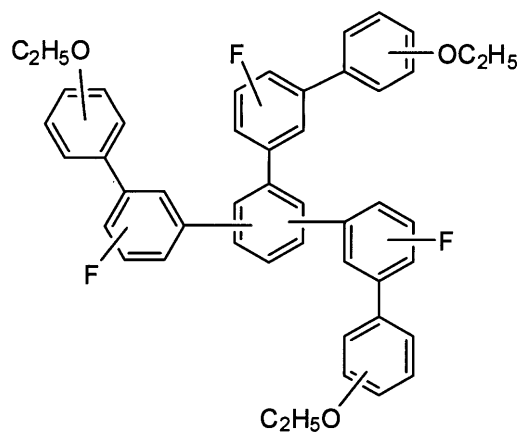
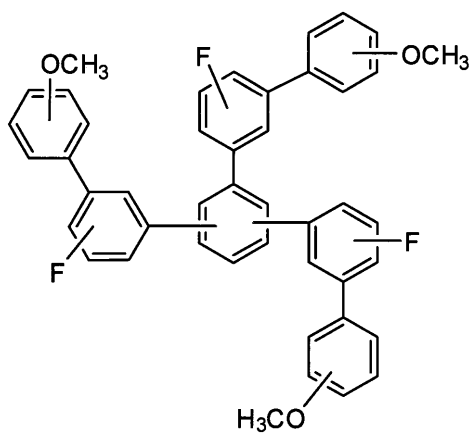


30

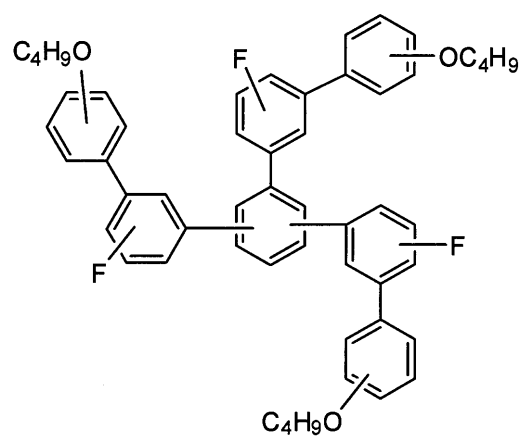
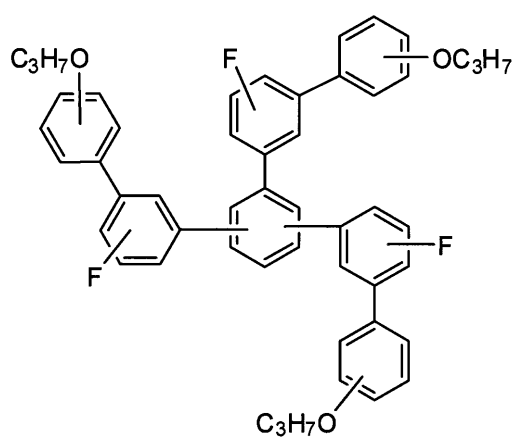
40

【 0 0 8 4 】

【化 8 0】

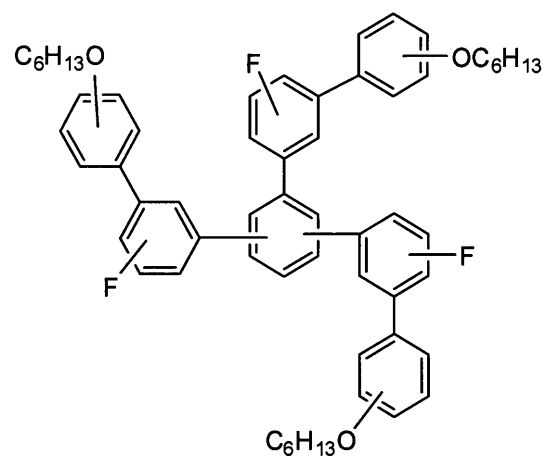
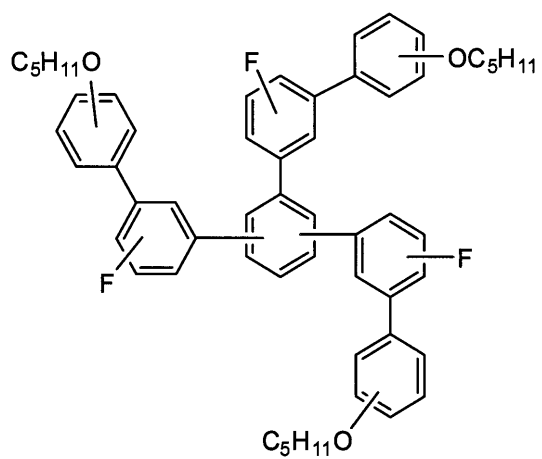


10



20

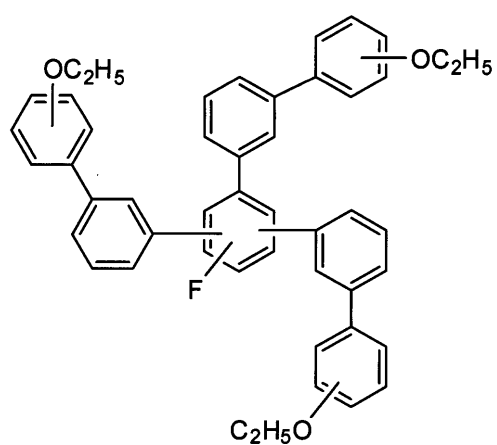
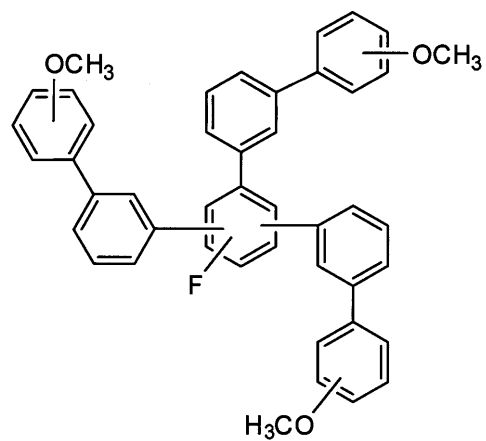
30



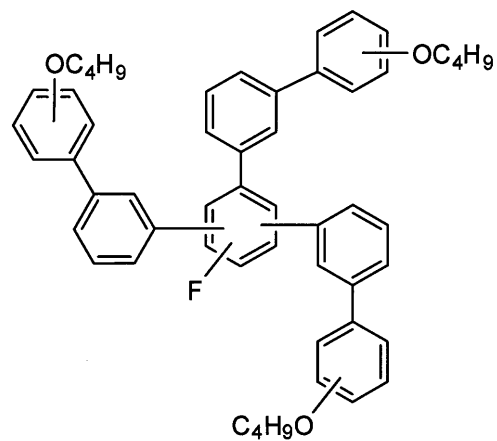
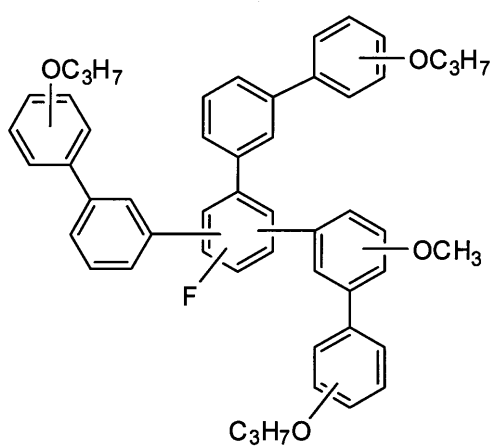
40

【 0 0 8 5】

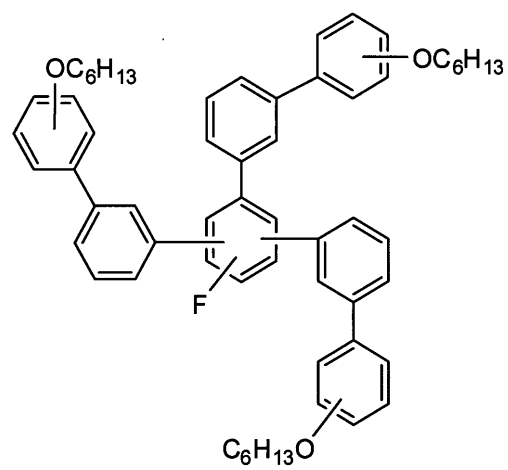
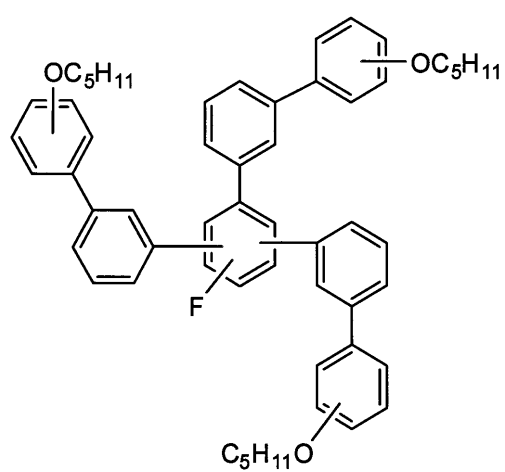
【化 8 1】



10



20

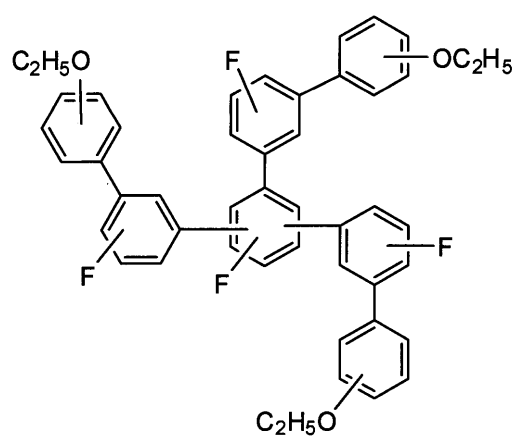
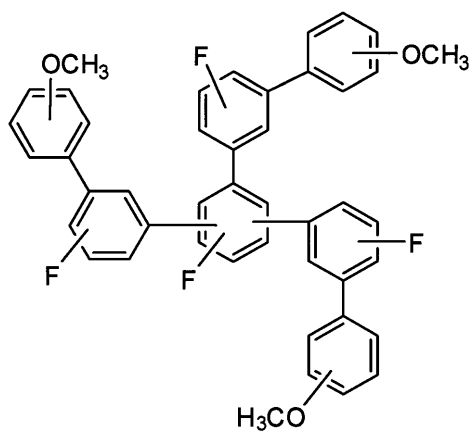


30

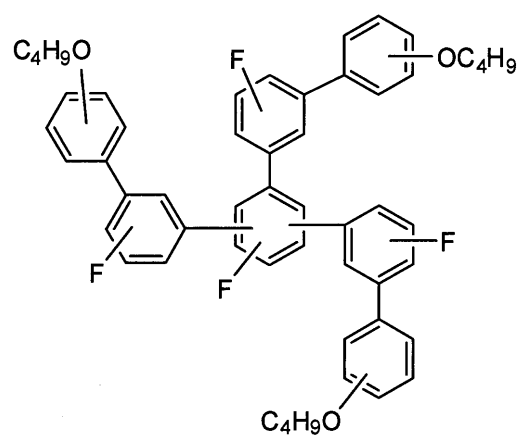
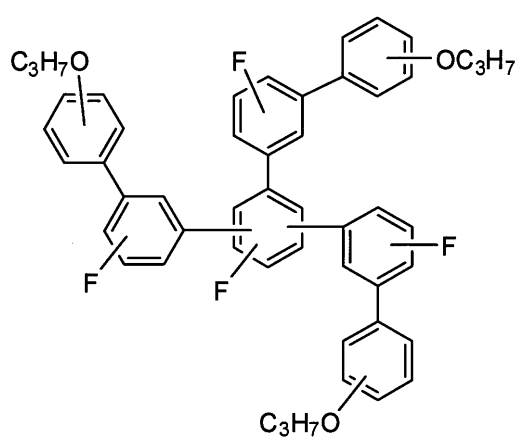
40

【 0 0 8 6 】

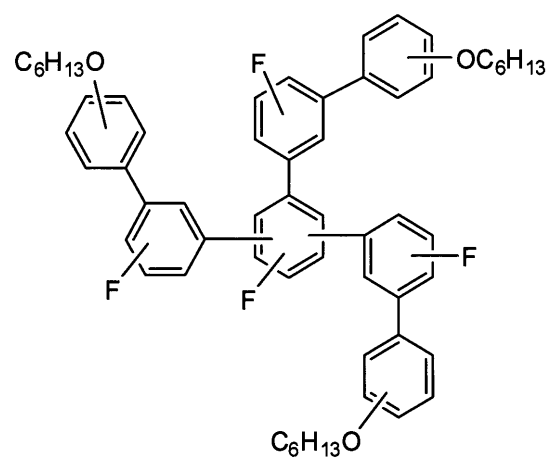
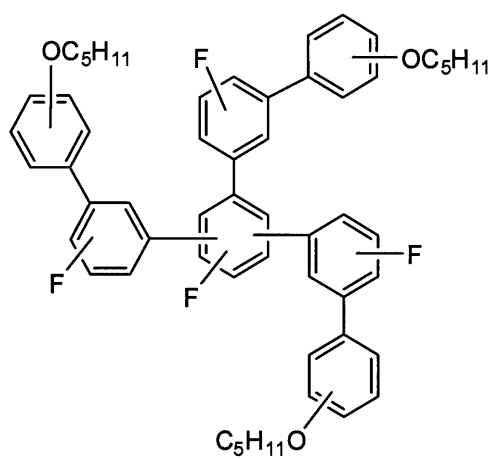
【化 8 2】



10



20

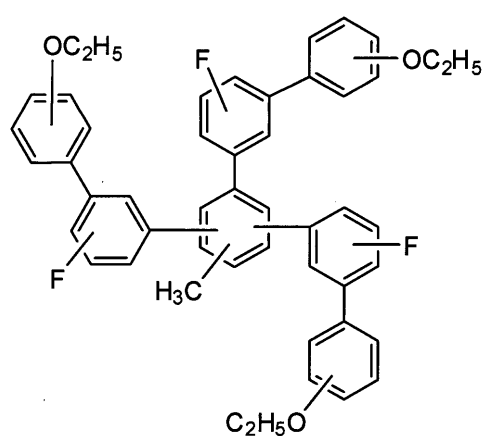
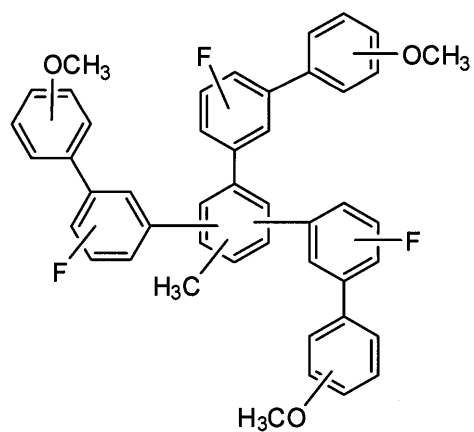


30

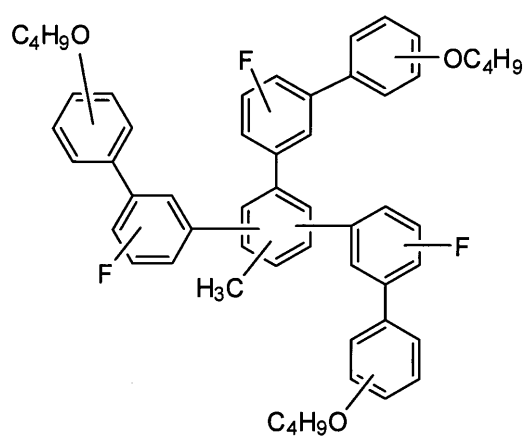
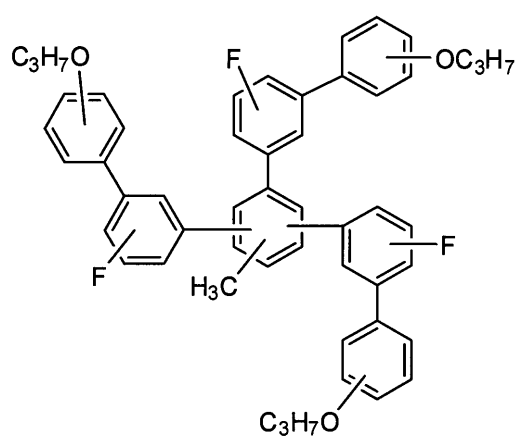
40

【 0 0 8 7 】

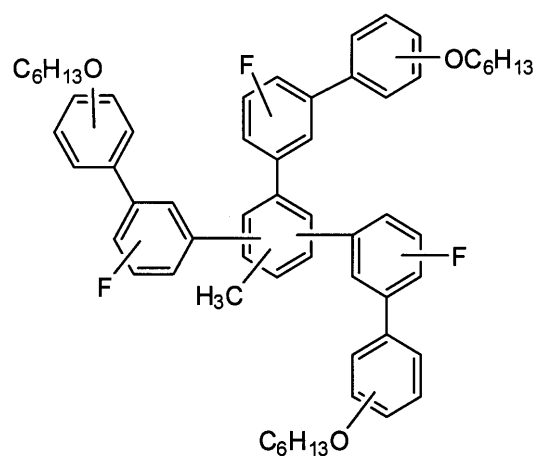
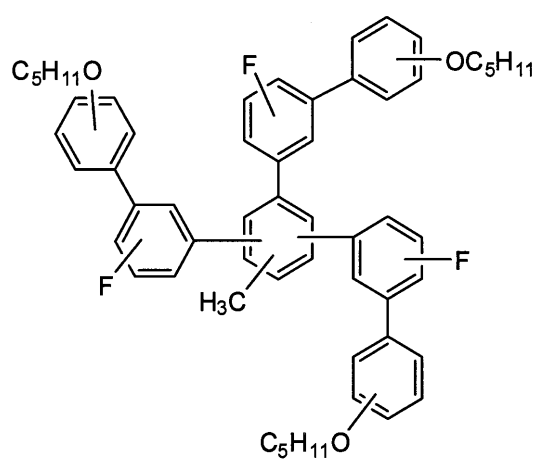
【化 8 3】



10



20

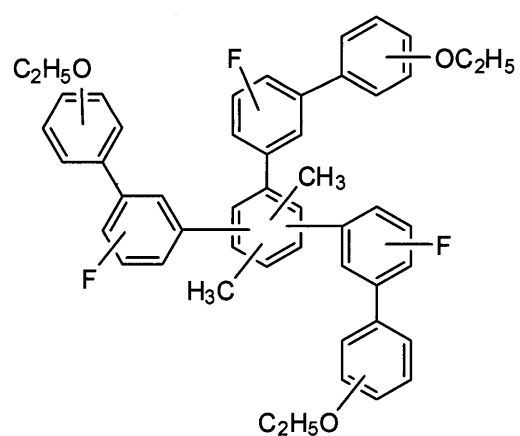
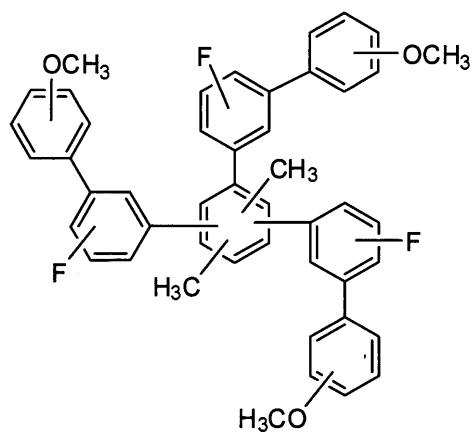


30

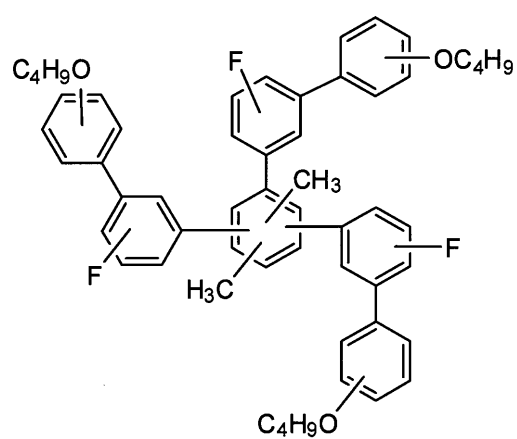
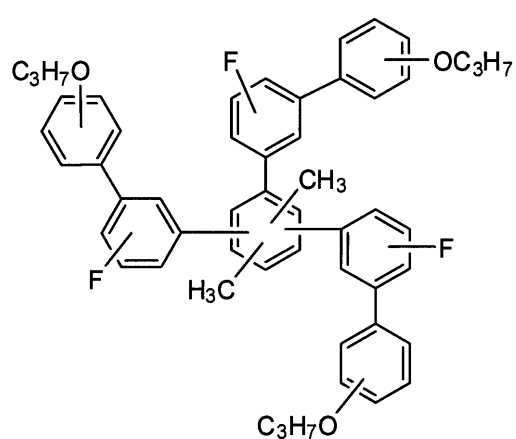
40

【 0 0 8 8 】

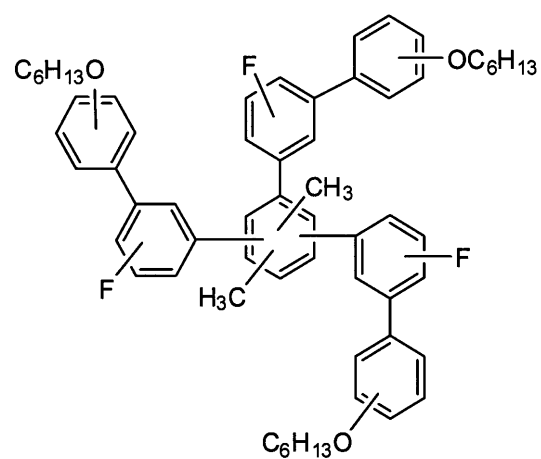
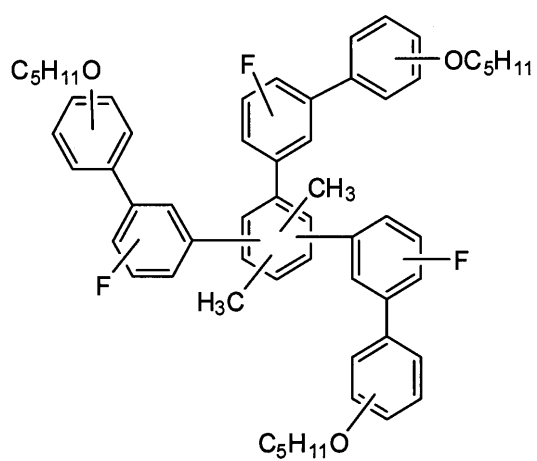
【化 8 4】



10



20

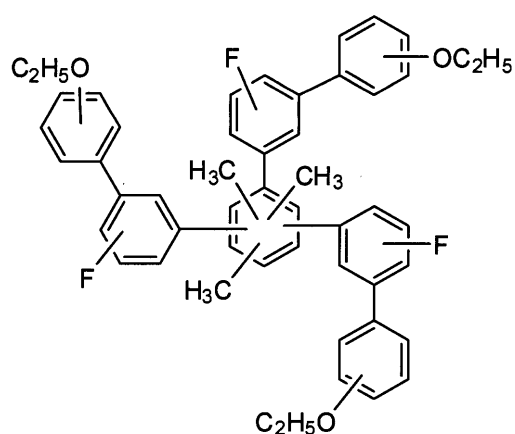
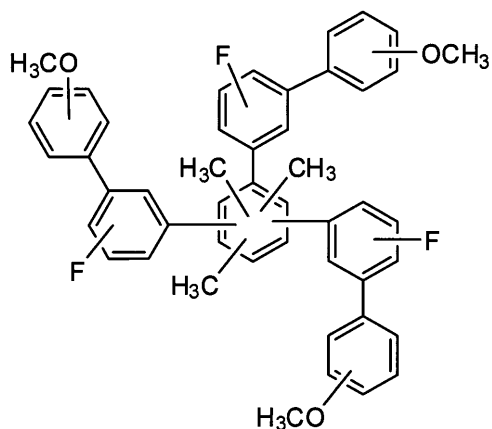


30

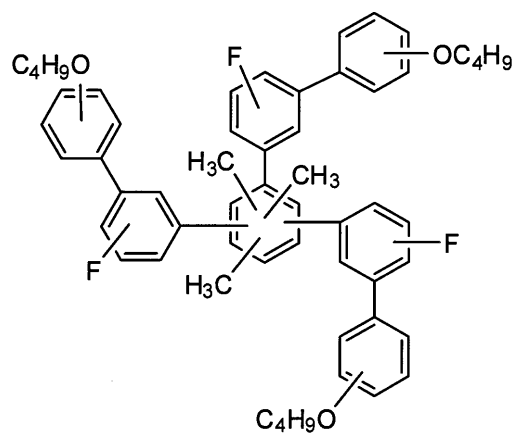
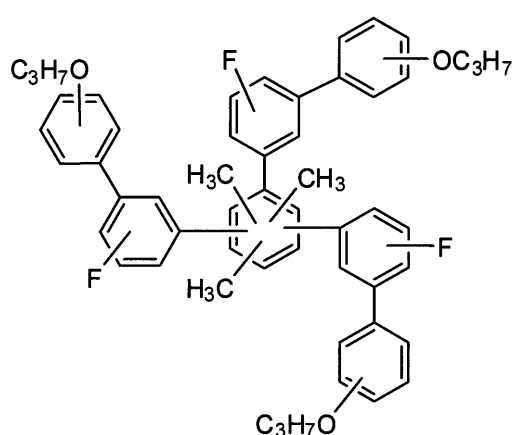
40

【 0 0 8 9 】

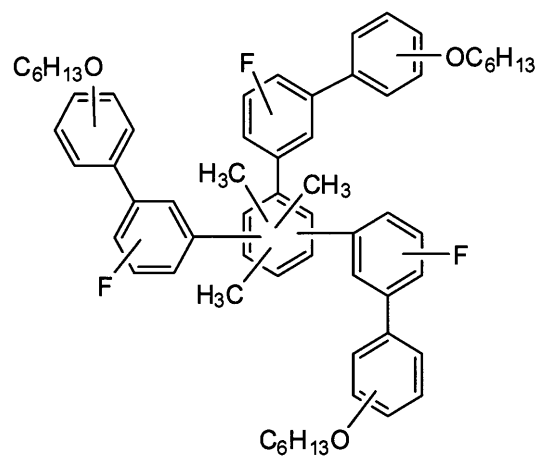
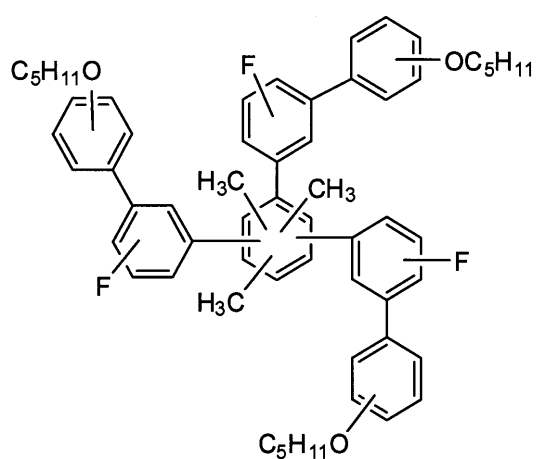
【化 8 5】



10



20



30

40

【0090】

本発明のポリアルコキシキンクフェニル誘導体は高いキャリア輸送性能を有する。従って、ホスト材料として使用することができる。これらはいずれも蒸着により層形成を行うのが望ましい。

【0091】

本発明のポリアルコキシキンクフェニル誘導体を有機エレクトロルミネッセンス素子に使用する場合、適当な発光材料と組み合わせて使用することができる。

50

【0092】

本発明のポリアルコキシキンクフェニル誘導体を発光層に用いる場合、本発明の化合物はホスト材料として使用できる。

【0093】

次に本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子（有機EL素子）について説明する。本発明の有機EL素子は、陽極と陰極間に複数層の有機化合物を積層した素子であり、発光層のホスト材料として本発明のポリアルコキシキンクフェニル誘導体を含有する。発光層は、発光材料とホスト材料から構成される。多層型の有機EL素子の構成例としては、例えば陽極（例えばITO）／ホール輸送層／発光層／電子輸送層／陰極、ITO／ホール輸送層／発光層／電子輸送層／電子注入層／陰極、ITO／ホール輸送層／発光層／ホールブロック層／電子輸送層／陰極、ITO／ホール輸送層／発光層／ホールブロック層／電子輸送層／電子注入層／陰極、ITO／ホール注入層（正孔注入層）／ホール輸送層／発光層／ホールブロック層／電子輸送層／電子注入層／陰極等の多層構成で積層したものが挙げられる。また、必要に応じて陰極上に封止層を有していても良い。

10

【0094】

ホール輸送層、電子輸送層、および発光層のそれぞれの層は、各機能を分離した多層構造であることが望ましい。またホール輸送層、電子輸送層はそれぞれの層で注入機能を受け持つ層（ホール注入層および電子注入層）と輸送機能を受け持つ層（ホール輸送層および電子輸送層）を別々に設けることもできる。

【0095】

以下本発明の有機EL素子の構成要素に関して、陽極／ホール輸送層／発光層／電子輸送層／陰極からなる素子構成を例として取り上げて説明する。本発明の有機EL素子は、基板に支持されていることが好ましい。

20

【0096】

基板の素材については特に制限はなく、例えば、従来の有機EL素子に慣用されているものが使用でき、例えば、ガラス、石英ガラス、透明プラスチックなどからなるものを用いることができる。

【0097】

本発明の有機EL素子の陽極としては、仕事関数の大きな金属単体（4 eV以上）、仕事関数の大きな金属同士の合金（4 eV以上）または導電性物質およびこれらの混合物を電極材料とすることが好ましい。このような電極材料の具体例としては、金、銀、銅等の金属、ITO（インジウムスズオキサイド）、酸化スズ（ SnO_2 ）、酸化亜鉛（ ZnO ）などの導電性透明材料、ポリピロール、ポリチオフェン等の導電性高分子材料が挙げられる。陽極はこれらの電極材料を、例えば蒸着、スパッタリング、塗布などの方法により形成することができる。陽極のシート電気抵抗は数百 Ω/cm^2 以下が好ましい。陽極の膜厚は材料にもよるが、一般に5～1,000 nm程度、好ましくは10～500 nmである。

30

【0098】

陰極としては、仕事関数の小さな金属単体（4 eV以下）、仕事関数の小さい金属同士の合金（4 eV以下）または導電性物質およびこれらの混合物を電極材料とすることが好ましい。このような電極材料の具体例としては、リチウム、リチウム－インジウム合金、ナトリウム、ナトリウム－カリウム合金、マグネシウム、マグネシウム－銀合金、マグネシウム－インジウム合金、アルミニウム、アルミニウム－リチウム合金、アルミニウム－マグネシウム合金などが挙げられる。陰極はこれらの電極材料を、例えば蒸着、スパッタリングなどの方法により、薄膜を形成させることにより作成することができる。陰極のシート電気抵抗は数百 Ω/cm^2 以下が好ましい。陰極の膜厚は材料にもよるが、一般に5～1,000 nm程度、好ましくは10～500 nmである。本発明の有機EL素子の発光を効率よく取り出すために、陽極または陰極の少なくとも一方の電極は透明もしくは半透明であることが好ましい。

40

【0099】

50

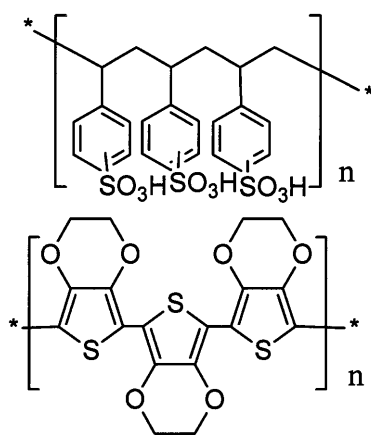
本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子のホール輸送層（正孔輸送層）は、ホール（正孔）伝達化合物からなるもので、陽極より注入されたホール（正孔）を発光層に伝達する機能を有している。電界が与えた２つの電極の間に正孔伝達化合物が配置されて陽極からホールが注入された場合、少なくとも $10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{V} \cdot \text{秒}$ 以上のホール移動度を有するホール伝達物質が好ましい。本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子のホール輸送層に使用するホール伝達物質は、前記の好ましい性能を有するものであれば特に制限はない。従来から光導電材料においてホールの電荷注入材料として慣用されているものや有機エレクトロルミネッセンス素子のホール輸送層に使用されている公知の材料の中から任意のものを選択して用いることができる。

【０１００】

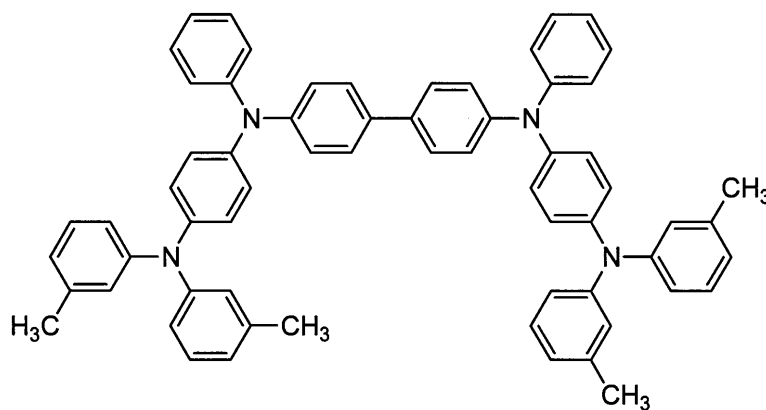
前記のホール伝達物質としては、たとえば銅フタロシアニンなどのフタロシアニン誘導体、 N ， N ， N' ， N' -テトラフェニル-１，４-フェニレンジアミン、 N ， N' -ジ（ m -トリル）- N ， N' -ジフェニル-４，４-ジアミノフェニル（TPD）、 N ， N' -ジ（１-ナフチル）- N ， N' -ジフェニル-４，４-ジアミノフェニル（ α -NPD）等のトリアリールアミン誘導体、ポリフェニレンジアミン誘導体、ポリチオフェン誘導体、および水溶性のPEDOT-PSS（ポリエチレンジオキサチオフェン-ポリスチレンスルホン酸）などが挙げられる。ホール輸送層は、これらの他のホール伝達化合物一種または二種以上からなる一層で構成されたものでよく、前記のホール伝達物質とは別の化合物からなるホール輸送層を積層したもので良い。

ホール注入材料としては、下記化学式に示されるPEDOT-PSS（ポリマー混合物）やDNTPDを挙げることができる。

【化８６】



PEDOT-PSS

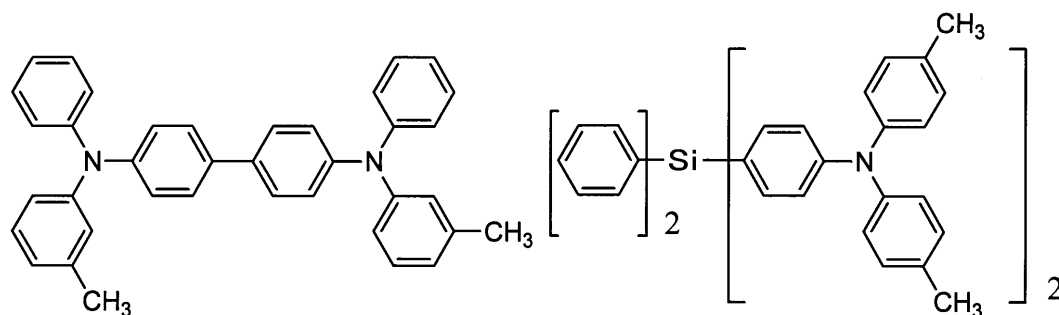


DNTPD

【0101】

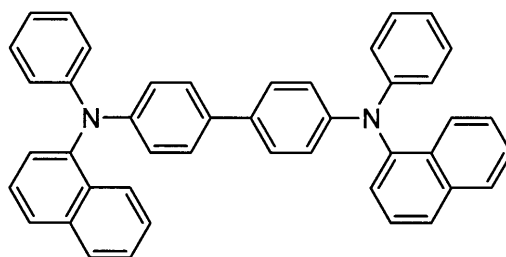
ホール輸送材料としては、下記化学式に示すTPD、DTASi、 α -NPDなどを挙げることができる。

【化87】



TPD

DTASi

 α -NPD

【0102】

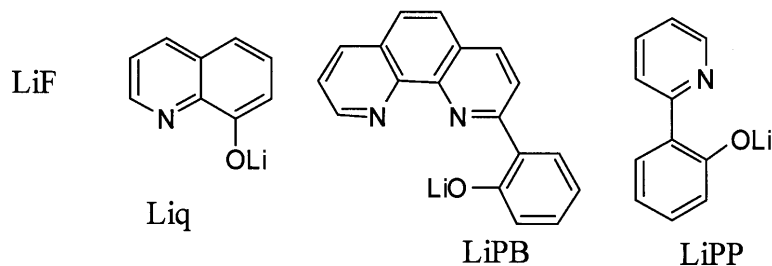
本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子の電子輸送層は、電子輸送材料からなるもので、陰極より注入された電子を発光層に伝達する機能を有している。電界が与えた2つの電極の間に電子輸送材料が配置されて陰極から電子が注入された場合、少なくとも $10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{V} \cdot \text{秒}$ 以上の電子移動度を有する電子輸送材料が好ましい。本発明の有機EL素子に使用する電子輸送層に使用する電子輸送材料は、前記の好ましい性能を有するものであれば特に制限はない。従来から光導電材料において電子の電荷注入材料として慣用されているものや有機エレクトロルミネッセンス素子の電子輸送層に使用されている公知の材料の中から任意のものを選択して用いることができる。

【0103】

前記の電子輸送材料としては、たとえばトリス(8-ヒドロキシキノリノラト)アルミニウム錯体(Alq_3)のようなキノリン錯体、1-N-フェニル-2-(p-ビフェニル)-5-(p-tert-ブチルフェニル)-1,3,5-トリアジン(TAZ)のようなトリアジン誘導体、1,4-ジ(1,10-フェナントロリン-2-イル)ベンゼン(DPB)のようなフェナントロリン誘導体、フッ化リチウムのようなハロゲン化アルカリ金属などが挙げられる。電子輸送層は、これらの他の電子輸送材料の一種または二種以上からなる一層で構成されたものでよく、前記の電子輸送材料とは別の化合物からなる電子輸送層を積層したものでも良い。

電子注入材料としては、下記化学式に示されるフッ化リチウム(LiF)や8-ヒドロキシキノリノラトリチウム錯体(Liq)などを挙げることができるが、本出願人の特願2006-292032号にかけるフェナントロリン誘導体のリチウム錯体(LiPB)や特願2007-29695号に掲げるフェノキシピリジンのリチウム錯体(LiPP)を用いることもできる。

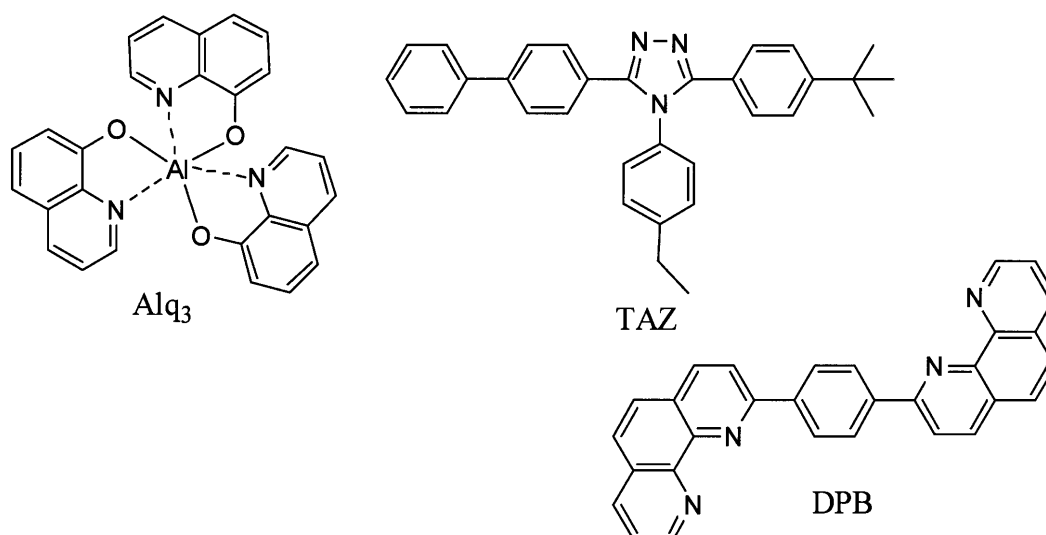
【化 8 8】



電子輸送材料としては、下記化学式に示す Alq_3 、TAZ、DPBなどを挙げるこ
 ができる。

10

【化 8 9】



20

【0104】

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子の発光層に用いられる発光材料については、特に制限はなく、任意のものを選択して用いることができる。

30

【0105】

発光材料としては、ペリレン誘導体、ナфтаセン誘導体、キナクリドン誘導体、クマリン誘導体（例えばクマリン1、クマリン540、クマリン545など）ピラン誘導体（例えばDCM-1、DCM-2、DCJTBなど）、有機金属錯体、例えばトリス（8-ヒドロキシキノリノラト）アルミニウム錯体（ Alq_3 ）、トリス（4-メチル-8-ヒドロキシキノリノラト）アルミニウム錯体（ $Almq_3$ ）等の蛍光材料や〔2-（4，6-ジフルオロフェニル）ピリジル-N，C2'〕イリジウム（III）ピコリレート（FIrpic）、トリス〔1-〔4-（トリフルオロメチル）フェニル〕-1H-ピラゾラト-N，C2'〕イリジウム（III）（Irtpmpz₃）、ビス〔2-（4'，6'-ジフルオロフェニル）ピリジナト-N，C2'〕イリジウム（III）テトラキス（1-ピラゾリル）ボレート（FIr6）、トリス（2-フェニルピリジナト）イリジウム（III）（Irppy₃）などのリン光材料などを挙げるこ
 ができる。

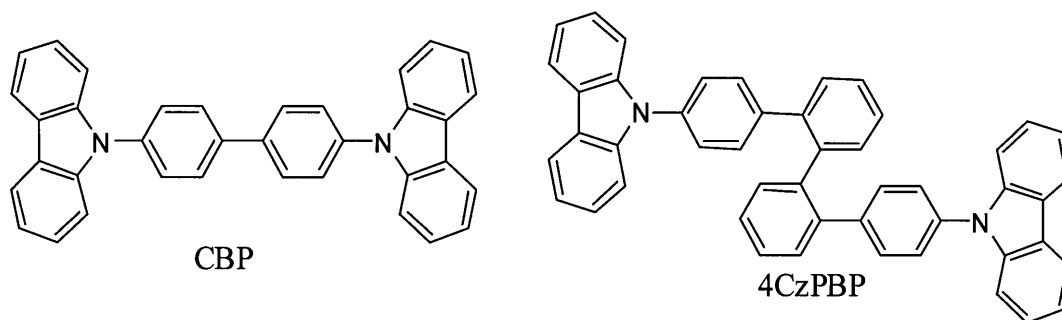
40

【0106】

発光層は、ホスト材料と発光材料（ドーパント）から形成される〔Appl. Phys. Lett., 65 3610 (1989)〕。特にリン光材料を発光層に使用する場合、ホスト材料の使用が必要であり、この時使用されるホスト材料としては本発明のポリアルコキシキンクフェニル誘導体を用いることが好ましい。その他既存のホスト材料4，4'-ジ（N-カルバゾリル）-1，1'-ビフェニル（CBP）、1，4-ジ（N-カルバゾリル）ベンゼン-2，2'-ジ〔4''-（N-カルバゾリル）フェニル〕-1，1'-ビフェニル（4CzPPB）等と併用することもできる。

50

【化 90】

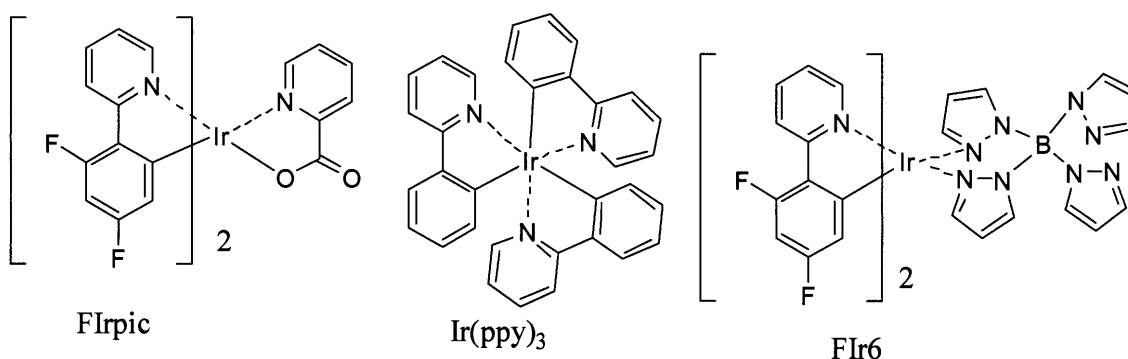


10

【0107】

発光材料は、ホスト材料に対して好ましくは0.01～40重量%であり、より好ましくは0.1～20重量%である。発光材料としては、下記に示す従来公知のFIrpic、Irppy₃、FIr6等を挙げることができる。

【化 91】



20

【0108】

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、ホール注入性をさらに向上させる目的で陽極と有機化合物の層の間に有機導電体から構成されるホール注入層をさらに設けても良い。ここで使用されるホール注入材料としては、本発明の化合物の他に銅フタロシアニンなどのフタロシアニン誘導体、ポリフェニレンジアミン誘導体、ポリチオフェン誘導体、およびPEDOT-PSS（ポリエチレンジオキシチオフェンポリスチレンスルホン酸）などが挙げられる。

30

【0109】

本発明のポリアルコキシキンクフェニル誘導体を含む素子のホール注入層、ホール輸送層の形成方法については特に限定されるものではない。例えば乾式製膜法（例えば真空蒸着法、イオン化蒸着法など）、湿式製膜法〔溶媒塗布法（例えばスピコート法、キャスト法、インクジェット法など）〕を使用することができる。電子輸送層の製膜については、湿式製膜法で行うと下層が溶出する恐れがあるため乾式製膜法（例えば真空蒸着法、イオン化蒸着法など）に限定される。素子の作成については上記の製膜法を併用しても構わない。

40

【0110】

真空蒸着法によりホール輸送層、発光層、電子輸送層などの各層を形成する場合、真空蒸着条件は特に限定されるものではない。通常 10^{-5} Torr程度以下の真空下で50～500℃程度のボート温度（蒸着原温度）、-50～300℃程度の基板温度で、0.01～50 nm/sec程度蒸着することが好ましい。正孔輸送層、発光層、電子輸送層の各層を複数の化合物を使用して形成する場合、化合物を入れたボートをそれぞれ温度制御しながら共蒸着することが好ましい。

【0111】

50

ホール注入層、ホール輸送層を溶媒塗布法で形成する場合、各層を構成する成分を溶媒に溶解または分散させて塗布液とする。溶媒としては、炭化水素系溶媒（例えばヘプタン、トルエン、キシレン、シクロヘキサン等）、ケトン系溶媒（例えばアセトン、メチルエチルケトン、メチルイソブチルケトン等）、ハロゲン系溶媒（例えばジクロロメタン、クロロホルム、クロロベンゼン、ジクロロベンゼン等）、エステル系溶媒（例えば酢酸エチル、酢酸ブチル等）、アルコール系溶媒（例えばメタノール、エタノール、ブタノール、メチルセロソルブ、エチルセロソルブ等）、エーテル系溶媒（例えばジブチルエーテル、テトラヒドロフラン、1, 4-ジオキサン、1, 2-ジメトキシエタン等）、非プロトン性溶媒（例えばN, N'-ジメチルアセトアミド、ジメチルスルホキシド等）、水等が挙げられる。溶媒は単独で使用しても良く、複数の溶媒を併用しても良い。

10

【0112】

ホール輸送層、発光層、電子輸送層等の各層の膜厚は、特に限定されるものではないが、通常5～5, 000nmになるようにする。

【0113】

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、酸素や水分等の接触を遮断する目的で保護層（封止層）を設けたり、不活性物質中に素子を封入して保護することができる。不活性物質としては、パラフィン、シリコンオイル、フルオロカーボン等が挙げられる。保護層に使用する材料としては、フッ素樹脂、エポキシ樹脂、シリコン樹脂、ポリエステル、ポリカーボネート、光硬化性樹脂等がある。

20

【0114】

本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、通常直流駆動の素子として使用できる。直流電圧を印加する場合、陽極をプラス、陰極をマイナスの極性として通常1.5～20V程度印加すると発光が観察される。また本発明の有機EL素子は交流駆動の素子としても使用できる。交流電圧を印加する場合には、陽極がプラス、陰極がマイナスの状態になった時に発光する。本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子は、例えば電子写真感光体、フラットパネルディスプレイなどの平面発光体、複写機、プリンター、液晶ディスプレイのバックライト、計器等の光源、各種発光素子、各種表示装置、各種標識、各種センサー、各種アクセサリなどに使用することができる。

【0115】

図25～33に、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子の好ましい例を示す。

30

【0116】

図25は、本発明の有機EL素子の一例を示す断面図である。図25は、基板1上に陽極2、正孔輸送層5、発光層3および陰極4を順次設けた構成のものである。この場合、発光層は電子輸送性の機能を有している場合に有用である。

【0117】

図26は、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子における他の例を示す断面図である。図26は、基板1上に陽極2、正孔輸送層5、発光層3、電子輸送層6および陰極4を順次設けた構成のものである。これはキャリア輸送と発光の機能を分離したものであり、材料選択の自由度が増すために、発光の高効率化や発光色の自由度が増すことになる。

40

【0118】

図27は、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子における他の例を示す断面図である。図27は、基板1上に陽極2、正孔（ホール）注入層7、正孔（ホール）輸送層5、発光層3、電子輸送層6および陰極4を順次設けた構成のものである。この場合、正孔（ホール）注入層7を設けることにより、陽極2と正孔（ホール）輸送層5の密着性を高め、陽極からの正孔（ホール）の注入を良くし、発光素子の低電圧化に効果がある。

【0119】

図28は、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子における他の例を示す断面図である。図28は、基板1上に陽極2、正孔（ホール）輸送層5、発光層3、電子輸送層6、電子注入層8および陰極4を順次設けた構成のものである。この場合、陰極4から電子

50

の注入を良くし、発光素子の低電圧化に効果がある。

【0120】

図29は、本発明の有機エレクトロルミネッセンス素子における他の例を示す断面図である。図29は、基板1上に陽極2、正孔（ホール）注入層7、正孔（ホール）輸送層5、発光層3、電子輸送層6、電子注入層8および陰極4を順次設けた構成のものである。この場合、陽極2から正孔（ホール）の注入を良くし、陰極4から電子注入を良くし、最も低電圧駆動に効果がある構成である。

【0121】

図30～33は素子の中に正孔（ホール）ブロック層を挿入したものの断面図である。正孔（ホール）ブロック層は、陽極から注入された正孔（ホール）、あるいは発光層3で再結合により生成した励起子が、陰極4に抜けることを防止する効果があり、有機エレクトロルミネッセンス素子の発光効率の向上に効果がある。正孔（ホール）ブロック層9については、発光層3と陰極4の間もしくは発光層3と電子輸送層6の間あるいは発光層3と電子注入層8の間に挿入することができる。より好ましいものは発光層3と電子輸送層6の間である。

10

【0122】

図30～33で、正孔（ホール）輸送層5、正孔（ホール）注入層7、電子輸送層6、電子注入層8、発光層3、正孔（ホール）ブロック層9のそれぞれの層は、一層構造であっても多層構造であっても良い。

【0123】

図25～33は、あくまでも基本的な素子構成であり、本発明の化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子の構成はこれに限定されるものではない。

20

【発明の効果】

【0124】

本発明のポリアルコキシキンクフェニル誘導体は、従来のカルバゾール置換ホスト材料とは異なりホールと電子のキャリアーバランスがよく、発光層中で効率よくドーパントにエネルギーを与えることができ、また膜厚依存性も少ない。エネルギーギャップも3.6 eV～4.0 eVと十分に広く、発光に多くのエネルギーが必要な青色リン光ドーパントとの組み合わせでも十分な効果が期待できる。

よって本発明の化合物は、素子を高効率化させるために必要なものであり工業的に極めて重要なものである。

30

【実施例】

【0125】

以下に実施例を挙げて本発明を説明するが、本発明はこれにより何ら限定されるものではない。

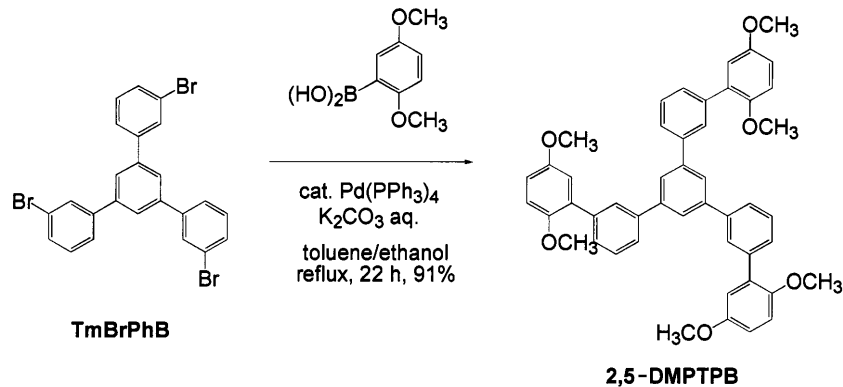
【0126】

実施例1

2, 2'', 5, 5''-テトラメトキシ-5''-[2', 5'-ジメトキシ(1, 1'-ビフェニル)-4-イル]-1, 1':3', 1'':3'', 1''':3'''-キンクフェニル(略号2, 5-DMPTPB)の合成

40

【化 9 2】



10

1, 3, 5-トリス-(*m*-ブロモフェニル)ベンゼン(略号TmBrPhB) 2.17 g (4.0 mmol)、2, 5-ジメトキシフェニルボロン酸 2.84 g (15.6 mmol)、2 M炭酸カリウム水溶液 9.0 ml、トルエン 80 ml、エタノール 40 mlを加え、1時間窒素バブリングをした。テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム〔Pd(PPh₃)₄〕 0.28 g (0.24 mmol)を加え、22時間還流した。有機層をトルエンで抽出、飽和食塩水で洗浄した。有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥し、濾別、濃縮後、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)にて精製することにより、白色泡状固体を得た。目的物の確認は、¹H-NMR、質量分析(以下MSと略す)により行った。(収量 2.60 g, 収率 91%)

20

無色透明固体、¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.87~7.86 (m, 6H)、7.68 (d, 3H, J=7.3 Hz)、7.60~7.50 (m, 6H)、6.98~6.86 (m, 9H)、3.81 (s, 9H)、3.77 (s, 9H) ppm. MS: m/z 716 [M+H]⁺. 元素分析: C₄₈H₄₂O₆としての計算値は、C, 80.65%; H, 5.92%、実測値は、C, 80.79%; H, 5.91%.

得られた2, 5-DMPTPBの¹H-NMRのチャートを図1に、MSのチャートを図2(クロマトグラム)および図3(スペクトル)に示す。また2, 5-DMPTPBの薄膜状での紫外線吸収スペクトル(UV)とフォトルミネッセンス(PL)の測定結果を図4に示す。

30

さらに熱化学特性と電気化学特性について表1にまとめる。

【表 1】

	二次転移温度 T _g (°C)	融点 T _m (°C)	分解温度 T _d (°C)	イオン化 ポテンシャル I _p (eV)	電子親和力 E _a (eV)	エネルギー ギャップ E _g (eV)
実施例1 (2, 5-DMPTPB)	72	n. d.	421	6.01	2.47	3.54

40

T_d: 分解温度、

T_g: 二次転移温度、

T_m: 融点、

I_p: イオン化ポテンシャル、

E_g: エネルギーギャップ、

E_a: エレクトロアフィニティ(電子親和力)、

n. d.: 検出されず

T_g(二次転移温度)については、DSC(Differential Scanning Calorimeter 示差熱量計)中にサンプルを加え、溶融されたものを急冷する。この溶融、急冷を2~3回繰返すとガラス点を示すカーブがチャート上に現れる

50

ので、そのカーブを接線で結び、その交点の温度を T_g として採用する。

T_m (融点) は、同じく DSC にサンプルを加え、昇温させていくと急熱カーブが現れるのでその極大のところの温度を読んで、その温度を T_m とする。

T_d (分解温度) は、DTA (Differential Thermal Analyzer 示差熱分析装置) にサンプルを加え、加熱していくとサンプルが熱によって分解し、重量が減少しだす。その減少が開始し 5 重量% 減少したところの温度を読んでその点を T_d とする。

エネルギーギャップ (E_g) については、蒸着機で作成した薄膜を紫外-可視吸光度計で薄膜の吸収曲線を測定する。その薄膜の短波長側の立ち上がりのところに接線を引き、求めた交点の波長 W (nm) を次の式に代入し目的の値を求める。それによって得た値が E_g になる。

$$E_g = 1240 \div W$$

例えば接線を引いて求めた値 W (nm) が 470 nm だったとしたらこの時の E_g の値は

$$E_g = 1240 \div 470 = 2.63 \text{ (eV)}$$

ということになる。

IP (イオン化ポテンシャル) はイオン化ポテンシャル測定装置 (例えば理研計器 AC-3) を使用して測定し、測定するサンプルがイオン化を開始したところの電圧 (eV) の値を読む。

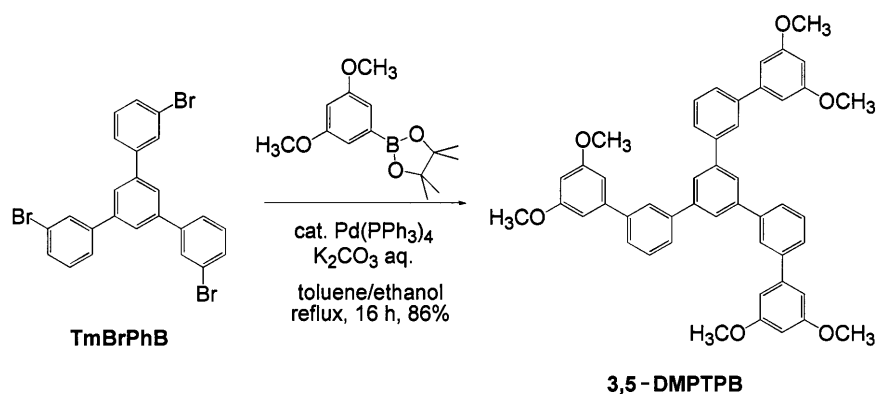
E_a (電子親和力) は、 I_p から E_g を引いた値である。

【0127】

実施例 2

3, 3''', 5, 5'''-テトラメトキシ-5''-[3', 5'-ジメトキシ(1, 1'-ビフェニル)-4-イル]-1, 1':3', 1'':3'', 1''':3'''', 1''''-キルクフェニル (略号 3, 5-DMPTPB) の合成

【化 93】



$TmBrPhB$ 2.17 g (4.0 mmol)、3, 5-ジメトキシフェニルボロン酸ピナコールエステル 4.10 g (15.6 mmol)、2 M 炭酸カリウム水溶液 9.0 ml、トルエン 80 ml、エタノール 40 ml を加え、1 時間窒素バブリングをした。 $Pd(PPh_3)_4$ 0.28 g (0.24 mmol) を加え、16 時間還流した。有機層をトルエンで抽出、飽和食塩水で洗浄した。有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥し、濾別、濃縮後、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) にて精製することにより、白色泡状固体を得た。目的物の確認は、 ^1H-NMR 、MS により行った。(収量 2.45 g, 収率 86%)

無色透明固体、 ^1H-NMR (400 MHz, $CDCl_3$) δ 7.87 (s, 6H), 7.69 (d, 3H, $J=7.3$ Hz) 7.61~7.52 (m, 6H), 6.78 (d, 6H, $J=2.2$ Hz), 6.48 (t, 3H, $J=2.2$ Hz), 3.84 (s, 18H) ppm. MS: m/z 716 $[M+H]^+$. 元素分析: $C_{48}H_{42}O_6$ としての

計算値は、C, 80.65%; H, 5.92%. 実測値は、C, 80.38%; H, 5.86%.

得られた3,5-DMPTPBの¹H-NMRのチャートを図5に、MSのチャートを図6(クロマトグラム)と7(スペクトル)に示す。また薄膜状での紫外線吸収スペクトル(UV)とフォトルミネッセンス(PL)の測定結果を図8に示す。

さらに熱化学特性と電気化学特性について表2にまとめる。

【表2】

	二次転移温度 T _g (°C)	融点 T _m (°C)	分解温度 T _d (°C)	イオン化 ポテンシャル I _p (eV)	電子親和力 E _a (eV)	エネルギー ギャップ E _g (eV)
実施例2 (3,5-DMPTPB)	70	n. d.	440	6.36	2.31	4.05

10

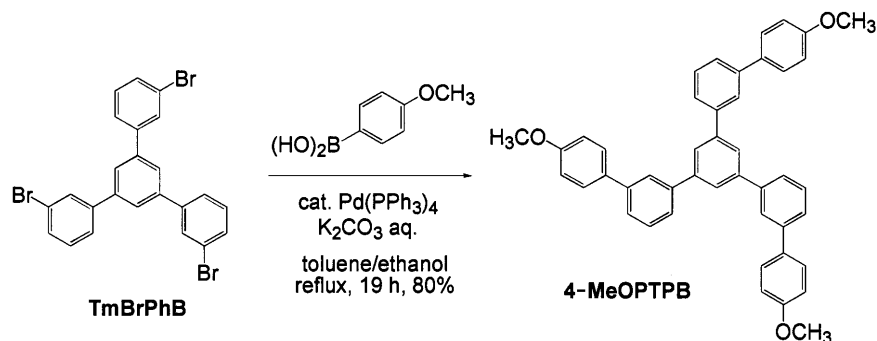
【0128】

実施例3

4,4''-ジメトキシ-5''-[4'-メトキシ(1,1'-ビフェニル)-4-イル]-1,1':3',1''':3'',1''':3'''-トリフェニル(略号4-MeOPTPB)の合成

【化94】

20



30

TmBrPhB 2.17 g (4.0 mmol)、4-メトキシフェニルボロン酸 2.37 g (15.6 mmol)、2 M炭酸カリウム水溶液 9.0 ml、トルエン 80 ml、エタノール 40 mlを加え、1時間窒素バブリングをした。Pd(PPh₃)₄ 0.28 g (0.24 mmol)を加え、19時間還流した。有機層をトルエンで抽出、飽和食塩水で洗浄した。有機層を無水硫酸マグネシウムで乾燥し、濾別、濃縮後、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)にて精製することにより、白色固体を得た。目的物の確認は、¹H-NMR、MSにより行った。(収量 2.0 g, 収率 80%)

無色透明固体、¹H-NMR(400 MHz, CDCl₃) δ 7.88 (s, 3H), 7.87 (s, 3H), 7.66~7.49 (m, 15H), 7.00 (d, 6H, J = 8.2 Hz), 3.85 (s, 9H) ppm. MS: m/z 626 [M+H]⁺.

40

得られた4-MeOPTPBの¹H-NMRのチャートを図9に、MSのチャートを図10および図11に示す。また薄膜状での紫外線吸収スペクトル(UV)とフォトルミネッセンス(PL)の測定結果を図12に示す。

さらに熱化学特性と電気化学特性について表3にまとめる。

【表 3】

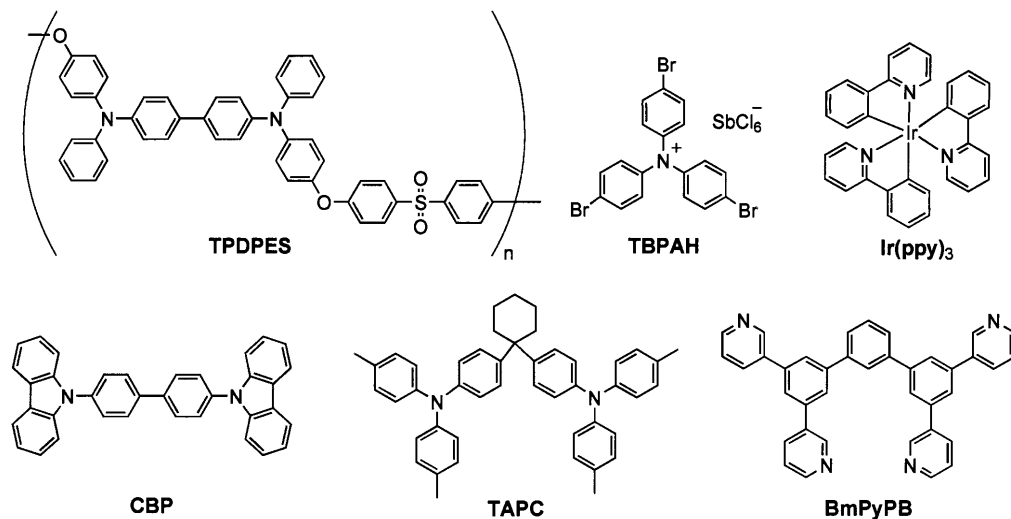
	二次転移温度 T _g (°C)	融点 T _m (°C)	分解温度 T _d (°C)	イオン化 ポテンシャル I _p (eV)	電子親和力 E _a (eV)	エネルギー ギャップ E _g (eV)
実施例3 (4-MeOPTPB)	79	184	440	6.26	2.47	3.79

【0129】

実施例 4～6 および 比較例 1

実施例 1、2 および 3 で合成したホスト材料 2，5-DMPTPB、3，5-DMPTPB および 4-MeOPTPB を用いた緑色リン光素子を作成した。比較例 1 として 4，4'-ジ（カルバゾール-9-イル）-1，1'-ビフェニル（略称 CBP）を用いた素子を作成し、それぞれの素子の性能を評価した。

【化 95】



これらの各素子のエネルギーダイアグラムを図 13 に示す。

また、各素子の構成は下記に示す。

実施例 4：[ITO/TPDPES：10wt%TBP AH（20nm）/TAPC（30nm）/3，5-DMPTPB：8wt%Ir（ppy）₃（10nm）/BmPyPB（50nm）/LiF（0.5nm）/Al（100nm）]

実施例 5：[ITO/TPDPES：10wt%TBP AH（20nm）/TAPC（30nm）/2，5-DMPTPB：8wt%Ir（ppy）₃（10nm）/BmPyPB（50nm）/LiF（0.5nm）/Al（100nm）]

実施例 6：[ITO/TPDPES：10wt%TBP AH（20nm）/TAPC（30nm）/4-MeOPTPB：8wt%Ir（ppy）₃（10nm）/BmPyPB（50nm）/LiF（0.5nm）/Al（100nm）]

比較例 1：[ITO/TPDPES：10wt%TBP AH（20nm）/TAPC（30nm）/CBP：8wt%Ir（ppy）₃（10nm）/BmPyPB（50nm）/LiF（0.5nm）/Al（100nm）]

電流密度－電圧特性は図 14 に、

輝度－電圧特性は図 15 に、

視感効率－電圧特性は図 16 に、

電流効率－電圧特性は図 17 に、

エレクトロルミネッセンス（EL）スペクトルは図 18 に、

それぞれ示す。

また、実施例 4～6 と比較例 1 の緑色リン光素子の $100\text{cd}/\text{m}^2$ と $1000\text{cd}/\text{m}^2$ におけるそれぞれの視感効率および外部量子効率特性を表 4 に示す。

【表 4】

Host	視感効率 P.E. @100cd/m ² (lm/W)	外部量子効率 Q.E. @100cd/m ² (%)	視感効率 P.E. @1000cd/m ² (lm/W)	外部量子効率 Q.E. @1000cd/m ² (%)
実施例4 2, 5-DMPTPB	85.3	24.6	61.8	21.8
実施例5 3, 5-DMPTPB	82.2	22.3	56.5	19.2
実施例6 4-MeOPTPB	79.5	22.7	69.9	20.9
比較例1 CBP	100.1	29.8	76.3	26.4

10

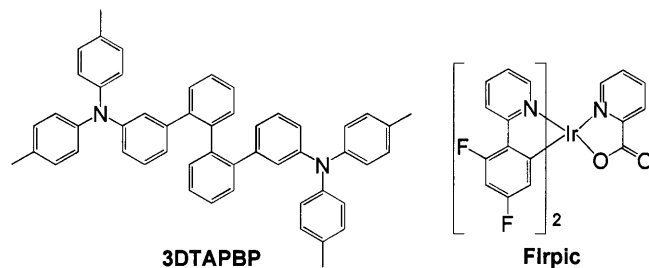
【0130】

実施例 7～9 および比較例 2

実施例 1、2 および 3 で合成したホスト材料 2, 5-DMPTPB、3, 5-DMPTPB および 4-MeOPTPB を用いた青色リン光素子を作成した。また比較例 2 として CBP を用いた素子を作成し、それぞれの素子の性能を評価した。

20

【化 96】



30

これらの各素子のエネルギーダイアグラムを図 19 に示す。

また、各素子の構成は下記に示す。

実施例 7：[ITO/TPDPES：10wt%TBPAH(20nm)/3DTAPBP(20nm)/3, 5-DMPTPB：11wt%Firpic(10nm)/BmPyPB(50nm)/LiF(0.5nm)/Al(100nm)]

実施例 8：[ITO/TPDPES：10wt%TBPAH(20nm)/3DTAPBP(20nm)/2, 5-DMPTPB：11wt%Firpic(10nm)/BmPyPB(50nm)/LiF(0.5nm)/Al(100nm)]

40

実施例 9：[ITO/TPDPES：10wt%TBPAH(20nm)/3DTAPBP(20nm)/4-MeOPTPB：11wt%Firpic(10nm)/BmPyPB(50nm)/LiF(0.5nm)/Al(100nm)]

比較例 2：[ITO/TPDPES：10wt%TBPAH(20nm)/3DTAPBP(20nm)/CBP：11wt%Firpic(10nm)/BmPyPB(50nm)/LiF(0.5nm)/Al(100nm)]

電流密度－電圧特性は図 20 に、

輝度－電圧特性は図 21 に、

視感効率－電圧特性は図 22 に、

電流効率－電圧特性は図 23 に、

50

エレクトロルミネッセンス（EL）スペクトルは図24に、それぞれ示す。

また、実施例7～9と比較例2の青色リン光素子の $100\text{cd}/\text{m}^2$ と $1000\text{cd}/\text{m}^2$ におけるそれぞれの視感効率および外部量子効率特性を表5に示す。
【表5】

Host	視感効率 P.E. @100cd/m ² (lm/W)	外部量子効率 Q.E. @100cd/m ² (%)	視感効率 P.E. @1000cd/m ² (lm/W)	外部量子効率 Q.E. @1000cd/m ² (%)
実施例7 2, 5-DMPTPB	9.6	5.4	6.3	4.7
実施例8 3, 5-DMPTPB	32.3	17.2	19.9	13.6
実施例9 4-MeOPTPB	23.4	12.9	14.1	10
比較例2 CBP	32.1	15.9	22.9	13.5

10

図21で見られるとおり、低電圧側では各実施例と比較例にほとんど差異は見られないが、高電圧側では各実施例化合物の方が比較例に較べて高輝度領域で発光している傾向が見られる。

20

【図面の簡単な説明】

【0131】

【図1】実施例1の2, 5-DMPTPBの¹H-NMRのチャートを示す。

【図2】実施例1の2, 5-DMPTPBのMSのチャート（クロマトグラム）を示す。

【図3】実施例1の2, 5-DMPTPBのMSのチャート（スペクトル）を示す。

【図4】実施例1の2, 5-DMPTPBのUV-PL曲線を示す。

【図5】実施例2の3, 5-DMPTPBの¹H-NMRのチャートを示す。

【図6】実施例2の3, 5-DMPTPBのMSのチャート（クロマトグラム）を示す。

30

【図7】実施例2の3, 5-DMPTPBのMSのチャート（スペクトル）を示す。

【図8】実施例2の3, 5-DMPTPBのUV-PL曲線を示す。

【図9】実施例3の4-MeOPTPBの¹H-NMRチャートを示す。

【図10】実施例3の4-MeOPTPBのMSのチャート（クロマトグラム）を示す。

【図11】実施例3の4-MeOPTPBのMSのチャート（スペクトル）を示す。

【図12】実施例3の4-MeOPTPBのUV-PL曲線を示す。

【図13】実施例4～6と比較例1のエネルギーダイアグラムを示す。

【図14】実施例4～6と比較例1の電流密度-電圧特性を示す。

【図15】実施例4～6と比較例1の輝度-電圧特性を示す。

【図16】実施例4～6と比較例1の視感効率-電圧特性を示す。

40

【図17】実施例4～6と比較例1の電流効率-電圧特性を示す。

【図18】実施例4～6と比較例1のエレクトロルミネッセンス（EL）スペクトルを示す。

【図19】実施例7～9と比較例2のエネルギーダイアグラムを示す。

【図20】実施例7～9と比較例2の電流密度-電圧特性を示す。

【図21】実施例7～9と比較例2の輝度-電圧特性を示す。

【図22】実施例7～9と比較例2の視感効率-電圧特性を示す。

【図23】実施例7～9と比較例2の電流効率-電圧特性を示す。

【図24】実施例7～9と比較例2のエレクトロルミネッセンス（EL）スペクトルを示す。

50

【図 2 5】本発明における有機エレクトロルミネッセンス素子の一例を示す断面図である。
【図 2 6】本発明における有機エレクトロルミネッセンス素子の一例を示す断面図である。
【図 2 7】本発明における有機エレクトロルミネッセンス素子の一例を示す断面図である。
【図 2 8】本発明における有機エレクトロルミネッセンス素子の一例を示す断面図である。
【図 2 9】本発明における有機エレクトロルミネッセンス素子の一例を示す断面図である。
【図 3 0】本発明における有機エレクトロルミネッセンス素子の一例を示す断面図である。
【図 3 1】本発明における有機エレクトロルミネッセンス素子の一例を示す断面図である。
【図 3 2】本発明における有機エレクトロルミネッセンス素子の一例を示す断面図である。
【図 3 3】本発明における有機エレクトロルミネッセンス素子の一例を示す断面図である。

10

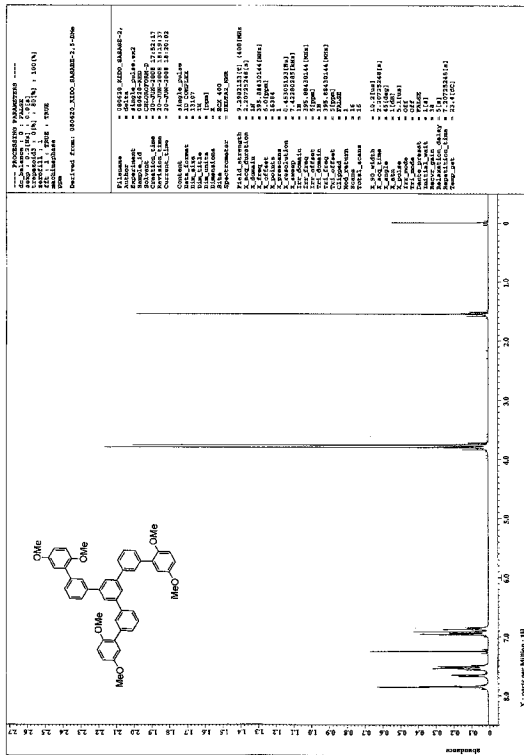
【符号の説明】

【 0 1 3 2 】

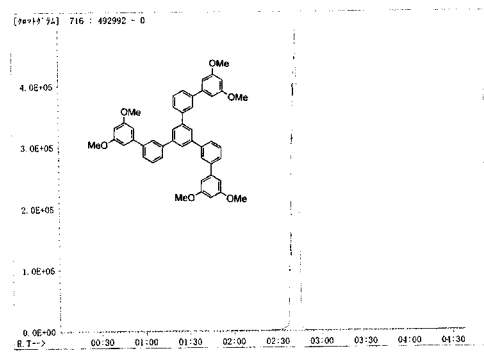
20

- 1 基板
- 2 陽極 (ITO)
- 3 発光層
- 4 陰極
- 5 正孔 (ホール) 輸送層
- 6 電子輸送層
- 7 正孔 (ホール) 注入層
- 8 電子注入層
- 9 正孔 (ホール) ブロック層

【図 1】

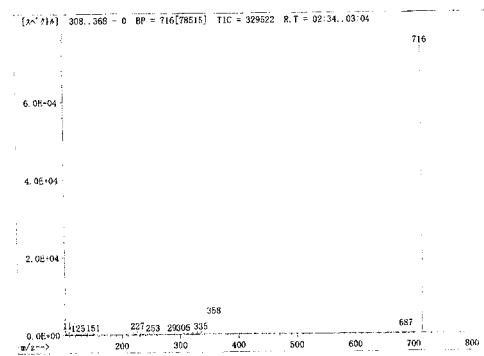


【図 2】



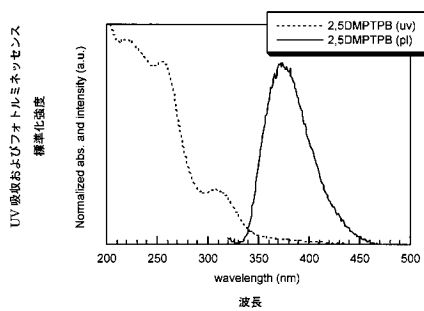
図は分析時間に対するイオン強度を表す。

【図 3】

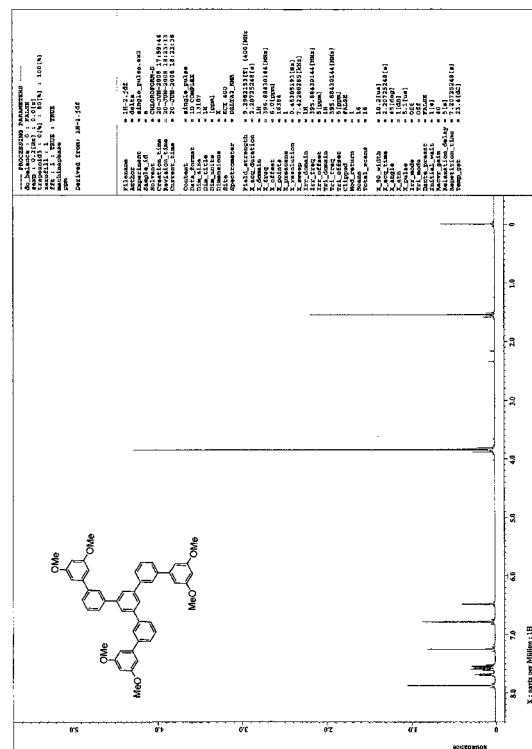


縦軸はイオン強度、横軸は質量数を表す。

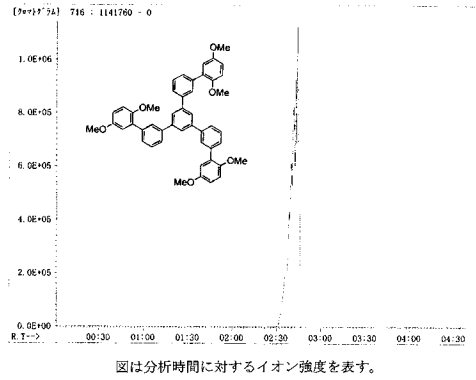
【図 4】



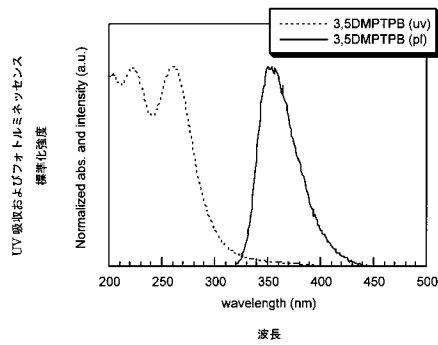
【図 5】



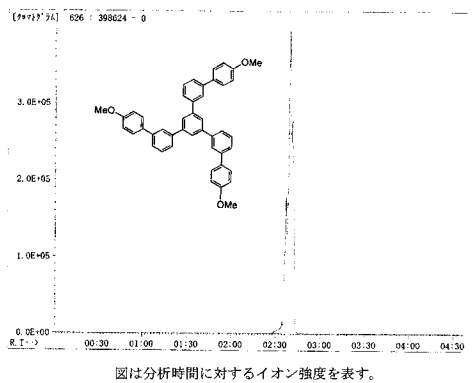
【図 6】



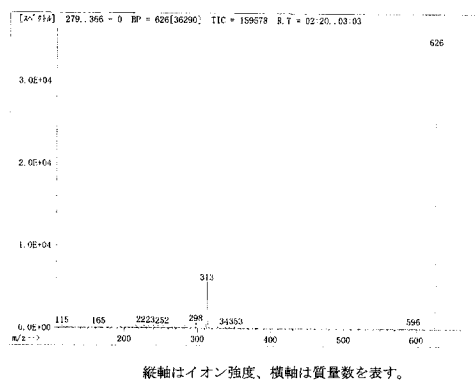
【図 8】



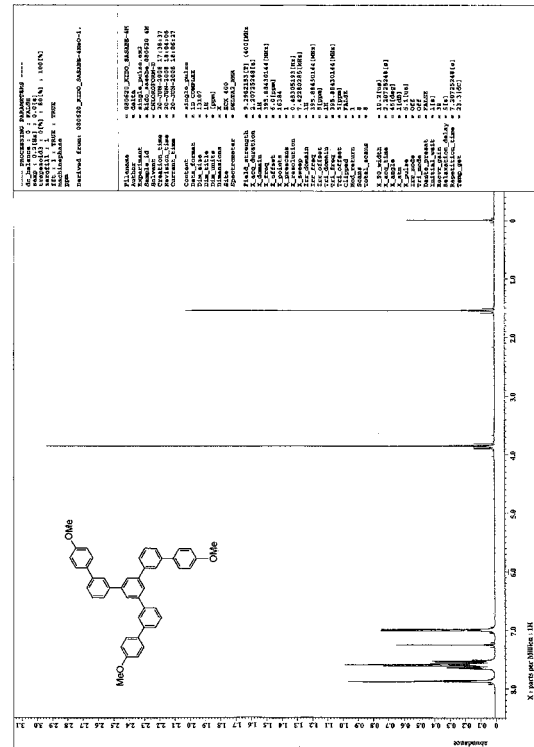
【図 10】



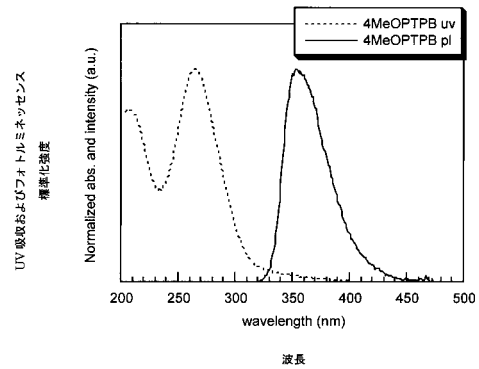
【図 11】



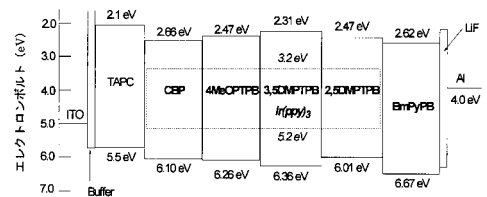
【図 9】



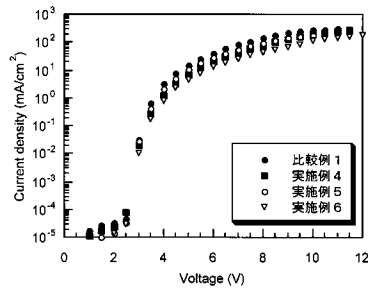
【図 12】



【図 13】

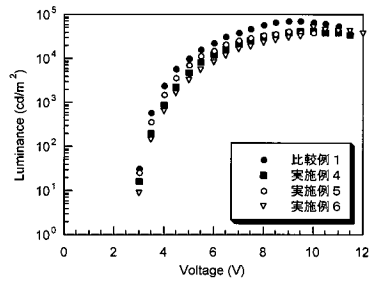


【図 14】



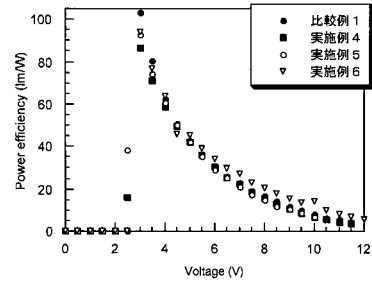
縦軸は電流密度、横軸は電圧を示す。

【図 15】



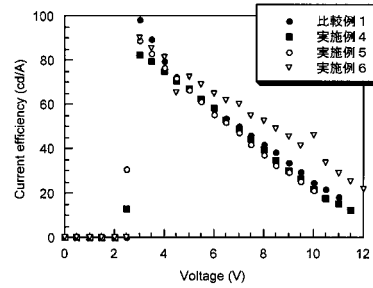
縦軸は輝度、横軸は電圧を示す。

【図 16】



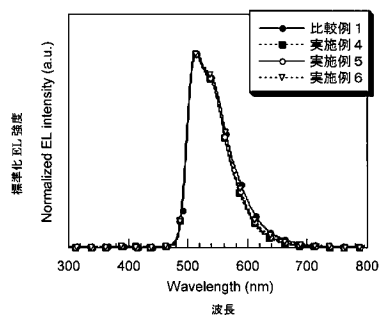
縦軸は視感効率、横軸は電圧を示す。

【図 17】



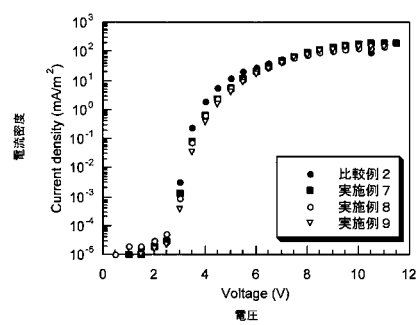
縦軸は電流効率、横軸は電圧を表す。

【図 18】



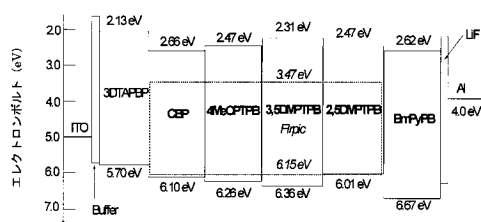
縦軸は強度、横軸は波長を表す。

【図 20】

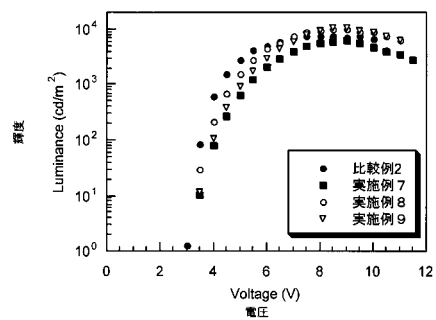


縦軸は電流密度、横軸は電圧を示す。

【図 19】

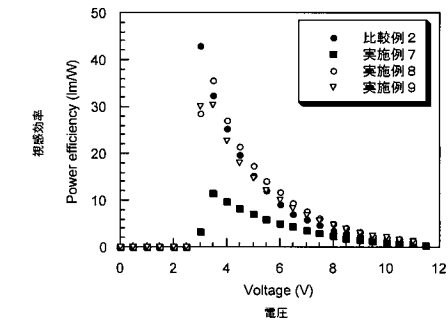


【図 21】



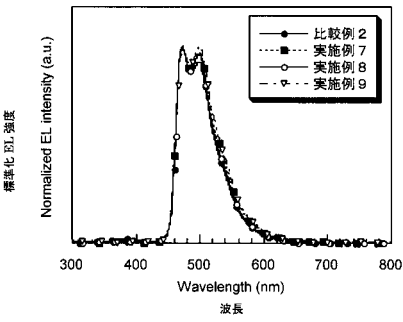
縦軸は輝度、横軸は電圧を示す。

【図 2 2】

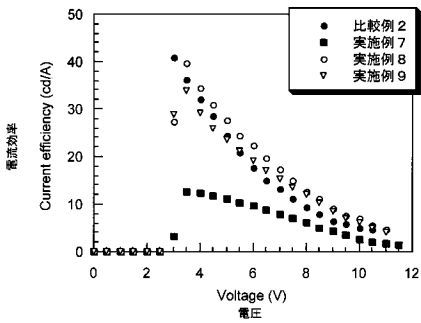


縦軸は視感効率、横軸は電圧を示す。

【図 2 4】



【図 2 3】



縦軸は電流効率、横軸は電圧を表す。

【図 2 5】

4
3
5
2
1

【図 2 6】

4
6
3
5
2
1

【図 2 9】

4
8
6
3
5
7
2
1

【図 2 7】

4
6
3
5
7
2
1

【図 3 0】

4
6
9
3
5
2
1

【図 2 8】

4
8
6
3
5
2
1

【図 3 1】

4
6
9
3
5
7
2
1

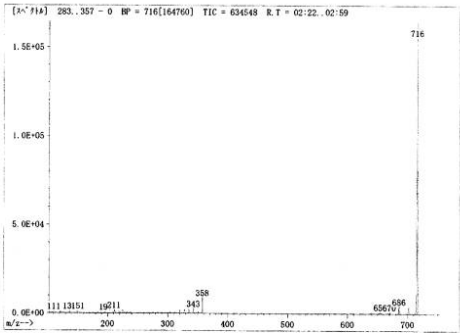
【図 3 2】

4
8
6
9
3
5
2
1

【図 3 3】

4
8
6
9
3
5
7
2
1

【図 7】



フロントページの続き

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 CC03 CC06 CC12 DD53 DD59 DD67 DD68
4H006 AA01 AA03 AB92 GP03