

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6986552号  
(P6986552)

(45) 発行日 令和3年12月22日 (2021. 12. 22)

(24) 登録日 令和3年12月1日 (2021. 12. 1)

|                                  |                     |
|----------------------------------|---------------------|
| (51) Int. Cl.                    | F I                 |
| <b>H O 1 L 51/50 (2006. 01)</b>  | H O 5 B 33/14 B     |
| <b>C O 9 K 11/06 (2006. 01)</b>  | C O 9 K 11/06 6 4 5 |
| <b>C O 7 D 487/06 (2006. 01)</b> | C O 9 K 11/06 6 1 0 |
|                                  | C O 9 K 11/06 6 3 5 |
|                                  | C O 9 K 11/06 6 4 0 |
| 請求項の数 35 (全 178 頁) 最終頁に続く        |                     |

|                    |                              |           |                   |
|--------------------|------------------------------|-----------|-------------------|
| (21) 出願番号          | 特願2019-511257 (P2019-511257) | (73) 特許権者 | 000183646         |
| (86) (22) 出願日      | 平成30年4月3日 (2018. 4. 3)       |           | 出光興産株式会社          |
| (86) 国際出願番号        | PCT/JP2018/014266            |           | 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 |
| (87) 国際公開番号        | W02018/186396                | (74) 代理人  | 110002620         |
| (87) 国際公開日         | 平成30年10月11日 (2018. 10. 11)   |           | 特許業務法人大谷特許事務所     |
| 審査請求日              | 令和2年12月8日 (2020. 12. 8)      | (72) 発明者  | 田崎 聡美             |
| (31) 優先権主張番号       | 特願2017-74066 (P2017-74066)   |           | 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地   |
| (32) 優先日           | 平成29年4月3日 (2017. 4. 3)       | (72) 発明者  | 西村 和樹             |
| (33) 優先権主張国・地域又は機関 | 日本国 (JP)                     |           | 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地   |
|                    |                              | (72) 発明者  | 中野 裕基             |
|                    |                              |           | 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地   |
|                    |                              | 審査官       | 岩井 好子             |

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に存在する有機層とを含有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、該有機層は蛍光発光層を含み、該蛍光発光層が、

第1化合物、

該第1化合物よりも大きい正孔移動度を有する第2化合物、及び

蛍光スペクトルの半値幅が30nm以下のドーパント材料を含む有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 2】

前記第2化合物の蛍光発光層中の含有量が、前記第1化合物の蛍光発光層中の含有量以下である請求項1に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 3】

前記第2化合物の蛍光発光層中の含有量が第1化合物、第2化合物及びドーパント材料の合計量に対して30質量%以下である請求項1又は2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

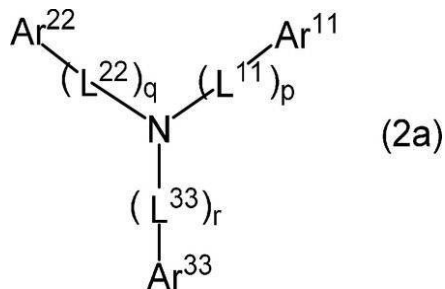
【請求項 4】

前記ドーパント材料の蛍光発光層中の含有量が第1化合物、第2化合物及びドーパント材料の合計量に対して10質量%以下である請求項1～3のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 5】

前記第 2 化合物が下記式 (2 a)、(2 b)、及び (2 c) で表される化合物から選ばれる少なくとも 1 種である請求項 1 ~ 4 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネセンス素子。

【化 1】



10

(式中、

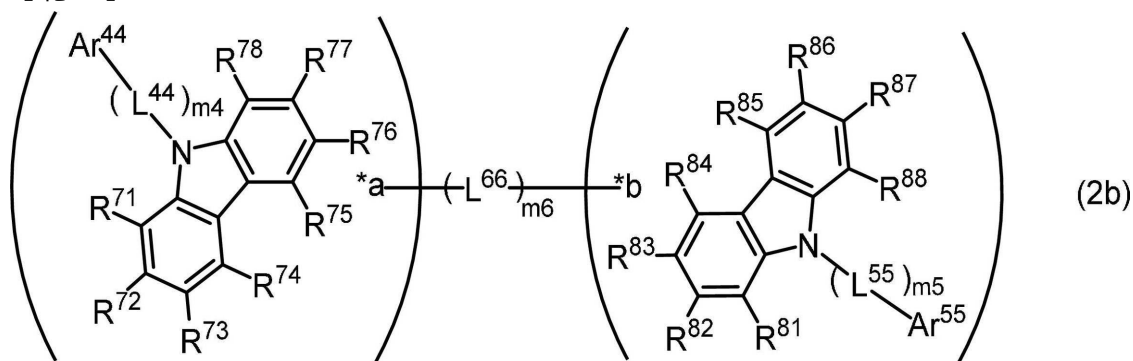
Ar<sup>11</sup>、Ar<sup>22</sup>、及び Ar<sup>33</sup> は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基である。

L<sup>11</sup>、L<sup>22</sup>、及び L<sup>33</sup> は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリーレン基である。

p、q、及び r は、それぞれ独立に、0、1、又は 2 であり、p が 0 のとき L<sup>11</sup> は単結合であり、q が 0 のとき L<sup>22</sup> は単結合であり、r が 0 のとき L<sup>33</sup> は単結合である。

)

【化 2】



30

(式中、

R<sup>71</sup> ~ R<sup>78</sup> から選ばれる 1 つは \*a に結合する単結合であり、R<sup>81</sup> ~ R<sup>88</sup> から選ばれる 1 つは \*b に結合する単結合であり、

前記単結合ではない R<sup>71</sup> ~ R<sup>78</sup> 及び R<sup>81</sup> ~ R<sup>88</sup> は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基である。

前記単結合ではない R<sup>71</sup> ~ R<sup>74</sup> から選ばれる隣接する 2 つ、前記単結合ではない R<sup>75</sup> ~ R<sup>78</sup> から選ばれる隣接する 2 つ、前記単結合ではない R<sup>81</sup> ~ R<sup>84</sup> から選ばれる隣接する 2 つ、及び前記単結合ではない R<sup>85</sup> ~ R<sup>88</sup> から選ばれる隣接する 2 つは互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよい。

Ar<sup>44</sup> 及び Ar<sup>55</sup> は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基である。

L<sup>44</sup>、L<sup>55</sup> 及び L<sup>66</sup> は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6

50

～ 50 のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 のヘテロアリーレン基である。

m 4、m 5、及び m 6 は、それぞれ独立に、0、1、又は 2 であり、m 4 が 0 のとき L<sup>4 4</sup> は単結合であり、m 5 が 0 のとき L<sup>5 5</sup> は単結合であり、m 6 が 0 のとき L<sup>6 6</sup> は単結合である。)

(Ar<sup>8 0</sup>)(Ar<sup>8 1</sup>)N - (L<sup>8 0</sup>) - N(Ar<sup>8 2</sup>)(Ar<sup>8 3</sup>)

(2c)

(式中、

Ar<sup>8 0</sup> ～ Ar<sup>8 3</sup> は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 のヘテロアリール基である。

L<sup>8 0</sup> は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 のヘテロアリーレン基である。)

【請求項 6】

陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に存在する有機層とを含有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、該有機層は蛍光発光層を含み、該蛍光発光層が、

第 1 化合物、

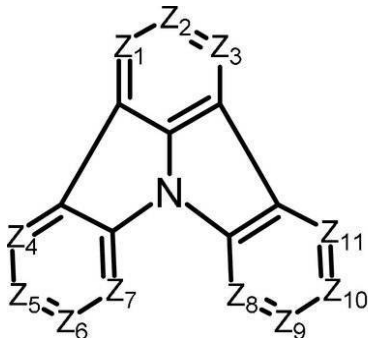
該第 1 化合物よりも大きいアフィニティを有する第 3 化合物、及び

蛍光スペクトルの半値幅が 30 nm 以下のドーパント材料を含み、

該ドーパント材料が、下記式 (D1a) で表される化合物を含み、

該第 3 化合物の蛍光発光層中の含有量が、該第 1 化合物の蛍光発光層中の含有量より少ない有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 3】



(D1a)

(式中、

Z<sub>1</sub> は CR<sub>1</sub> 又は N、Z<sub>2</sub> は CR<sub>2</sub> 又は N、Z<sub>3</sub> は CR<sub>3</sub> 又は N、Z<sub>4</sub> は CR<sub>4</sub> 又は N、Z<sub>5</sub> は CR<sub>5</sub> 又は N、Z<sub>6</sub> は CR<sub>6</sub> 又は N、Z<sub>7</sub> は CR<sub>7</sub> 又は N、Z<sub>8</sub> は CR<sub>8</sub> 又は N、Z<sub>9</sub> は CR<sub>9</sub> 又は N、Z<sub>10</sub> は CR<sub>10</sub> 又は N、Z<sub>11</sub> は CR<sub>11</sub> 又は N である。

R<sub>1</sub> ～ R<sub>11</sub> は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、

該置換基は、

ハロゲン原子、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、アミノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルコキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリールチオ基、- Si(R<sub>101</sub>)(R<sub>102</sub>)(R<sub>103</sub>) で表される基、- N(R<sub>104</sub>)(R<sub>105</sub>) で表される基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 のヘテロアリール基である。

R<sub>101</sub> ～ R<sub>105</sub> は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、置

換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基である。

$R_1 \sim R_3$  から選ばれる隣接する 2 つは互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合することなく環構造を形成しなくてもよい。

$R_4 \sim R_7$  から選ばれる隣接する 2 つは互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合することなく環構造を形成しなくてもよい。

$R_8 \sim R_{11}$  から選ばれる隣接する 2 つは互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合することなく環構造を形成しなくてもよい。)

【請求項 7】

前記第 3 化合物の蛍光発光層中の含有量が第 1 化合物、第 3 化合物及びドーパント材料の合計量に対して 30 質量%以下である請求項 6 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【請求項 8】

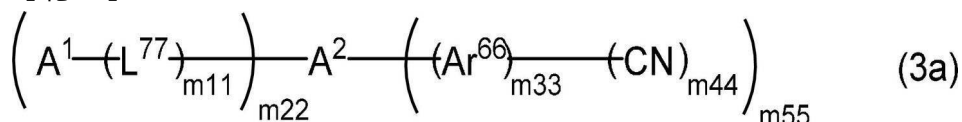
前記ドーパント材料の蛍光発光層中の含有量が第 1 化合物、第 3 化合物及びドーパント材料の合計量に対して 10 質量%以下である請求項 6 又は 7 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 9】

前記第 3 化合物が下記式 (3a) で表される化合物から選ばれる少なくとも 1 種である請求項 6 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 4】

20



(式中、

$L^{77}$  は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリーレン基である。

$Ar^{66}$  は環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環又は環形成原子数 5 ~ 50 の芳香族複素環の 2 ~ 4 価の残基であり、置換基を有していてもよい。

$m11$  は 0、1、又は 2 であり、 $m11$  が 0 のとき  $L^{77}$  は単結合であり、 $m11$  が 2 のとき 2 個の  $L^{77}$  は同一でも異なってもよい。

30

$m22$  は 0 又は 1 であり、 $m22$  が 0 のとき  $A^1 - (L^{77})_{m11}$  は存在せず、水素原子が  $A^2$  に結合する。

$m33$  は 0、1、2、又は 3 であり、 $m33$  が 0 のとき  $Ar^{66}$  は単結合であり、 $m33$  が 2 又は 3 のとき 2 又は 3 個の  $Ar^{66}$  は同一でも異なってもよい。

$m44$  は 0、1、2、又は 3 であり、 $m44$  が 0 のとき  $CN$  は存在せず、水素原子が  $Ar^{66}$  に結合する。

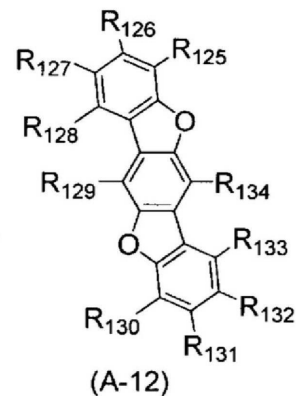
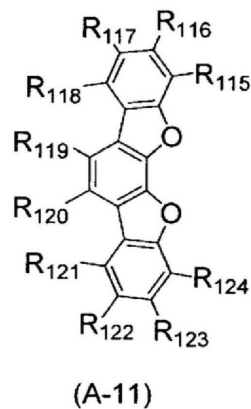
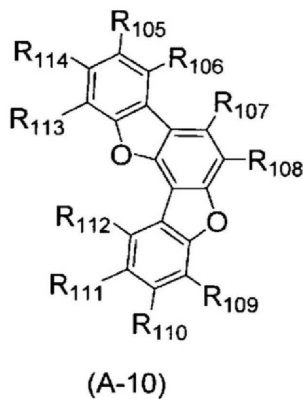
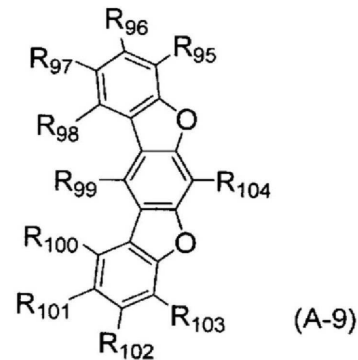
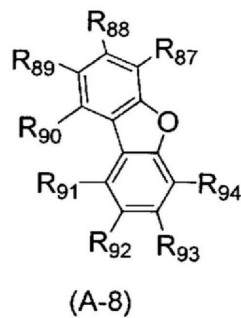
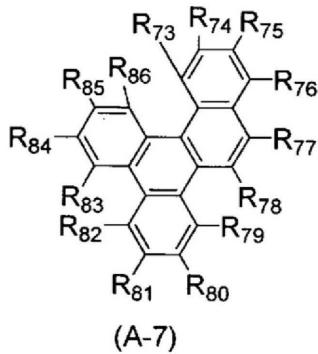
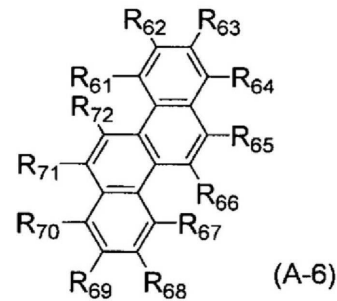
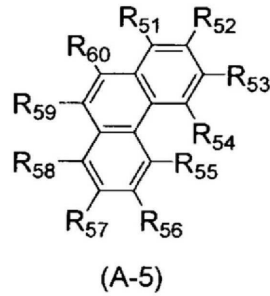
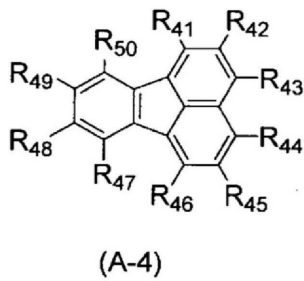
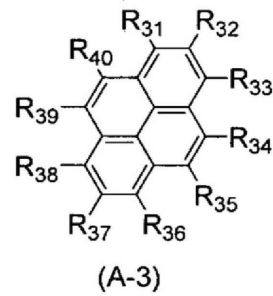
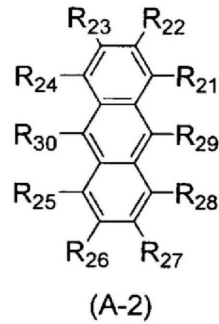
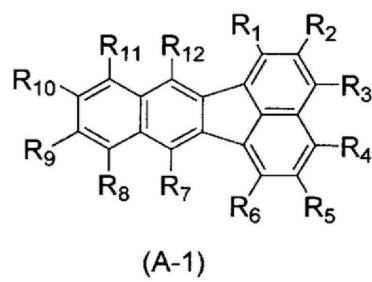
$m55$  は 1、2、又は 3 であり、 $m55$  が 2 又は 3 のとき、2 又は 3 個の  $-(Ar^{66})_{m33} - (CN)_{m55}$  は同一でも異なってもよい。

$A^1$  は下記式 (A-1) ~ (A-12) から選ばれる 1 価の基である。

40

$A^2$  は下記式 (A-1) ~ (A-12) から選ばれる 2 ~ 4 価の基である。

## 【化5】



(式中、

$R_1 \sim R_{12}$  から選ばれる1つ、 $R_{21} \sim R_{30}$  から選ばれる1つ、 $R_{31} \sim R_{40}$  から選ばれる1つ、 $R_{41} \sim R_{50}$  から選ばれる1つ、 $R_{51} \sim R_{60}$  から選ばれる1つ、 $R_{61} \sim R_{72}$  から選ばれる1つ、 $R_{73} \sim R_{86}$  から選ばれる1つ、 $R_{87} \sim R_{94}$  から選ばれる1つ、 $R_{95} \sim R_{104}$  から選ばれる1つ、 $R_{105} \sim R_{114}$  から選ばれる1つ、 $R_{115} \sim R_{124}$  から選ばれる1つ、及び  $R_{125} \sim R_{134}$  から選ばれる1つは  $L^{77}$  に結合する単結合である。

又は、 $R_1 \sim R_{12}$  から選ばれる2～4個、 $R_{21} \sim R_{30}$  から選ばれる2～4個、 $R_{31} \sim R_{40}$  から選ばれる2～4個、 $R_{41} \sim R_{50}$  から選ばれる2～4個、 $R_{51} \sim R$

10

20

30

40

50

$R_{60}$  から選ばれる 2 ~ 4 個、 $R_{61} \sim R_{72}$  から選ばれる 2 ~ 4 個、 $R_{73} \sim R_{86}$  から選ばれる 2 ~ 4 個、 $R_{87} \sim R_{94}$  から選ばれる 2 ~ 4 個、 $R_{95} \sim R_{104}$  から選ばれる 2 ~ 4 個、 $R_{105} \sim R_{114}$  から選ばれる 2 ~ 4 個、 $R_{115} \sim R_{124}$  から選ばれる 2 ~ 4 個、及び  $R_{125} \sim R_{134}$  から選ばれる 2 ~ 4 個のうちの 1 つは  $L^{77}$  に結合する単結合であり、他は  $Ar^{66}$  に結合する単結合である。

前記単結合ではない  $R_1 \sim R_{12}$ 、 $R_{21} \sim R_{30}$ 、 $R_{31} \sim R_{40}$ 、 $R_{41} \sim R_{50}$ 、 $R_{51} \sim R_{60}$ 、 $R_{61} \sim R_{72}$ 、 $R_{73} \sim R_{86}$ 、 $R_{87} \sim R_{94}$ 、 $R_{95} \sim R_{104}$ 、 $R_{105} \sim R_{114}$ 、 $R_{115} \sim R_{124}$ 、及び  $R_{125} \sim R_{134}$  は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20 のシクロアルキル基、 $-Si(R_{101})(R_{102})(R_{103})$  で表される基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基である。

10

前記単結合ではない  $R_1 \sim R_{12}$ 、 $R_{21} \sim R_{30}$ 、 $R_{31} \sim R_{40}$ 、 $R_{41} \sim R_{50}$ 、 $R_{51} \sim R_{60}$ 、 $R_{61} \sim R_{72}$ 、 $R_{73} \sim R_{86}$ 、 $R_{87} \sim R_{94}$ 、 $R_{95} \sim R_{104}$ 、 $R_{105} \sim R_{114}$ 、 $R_{115} \sim R_{124}$ 、及び  $R_{125} \sim R_{134}$  から選ばれる隣接する 2 つは互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよい。

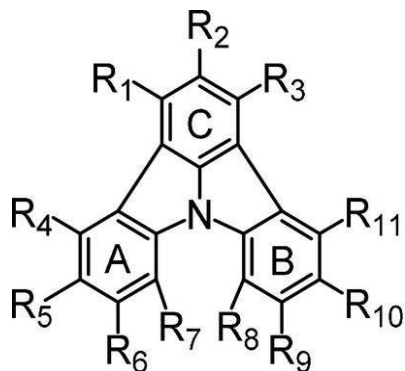
$R_{101}$ 、 $R_{102}$ 、及び  $R_{103}$  は前記と同様である。))

#### 【請求項 10】

前記式 (D1a) で表されるドーパント材料が、下記式 (1) で表される化合物を含む請求項 8 又は 9 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

20

#### 【化 6】



(1)

30

(式中、

$R_n$  と  $R_{n+1}$  ( $n$  は 1、2、4 ~ 6、及び 8 ~ 10 から選ばれる整数を表す) は互いに結合して、 $R_n$  と  $R_{n+1}$  が結合する 2 つの環形成炭素原子と共に置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造を形成してもよく、又は  $R_n$  と  $R_{n+1}$  は互いに結合することなく環構造を形成しなくてもよい。

前記環形成原子は炭素原子、酸素原子、硫黄原子、及び窒素原子から選ばれる。

該環形成原子数 3 以上の環構造の任意の置換基は  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した前記置換基と同じであり、隣接する 2 つの任意の置換基は互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよい。

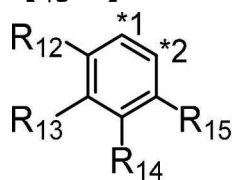
40

前記置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造を形成しない  $R_1 \sim R_{11}$  は前記と同じである。)

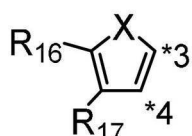
#### 【請求項 11】

前記置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造が下記式 (2) ~ (8) から選ばれる請求項 10 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

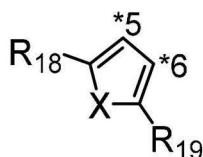
## 【化 7】



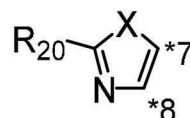
(2)



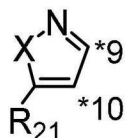
(3)



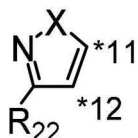
(4)



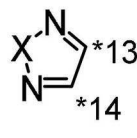
(5)



(6)



(7)



(8)

(式中、

\*1と\*2、\*3と\*4、\*5と\*6、\*7と\*8、\*9と\*10、\*11と\*12、及び\*13と\*14のそれぞれは、 $R_n$ と $R_{n+1}$ が結合する前記2つの環形成炭素原子を表し、 $R_n$ は前記2つの環形成炭素原子のどちらに結合してもよい。

XはC( $R_{23}$ )( $R_{24}$ )、 $NR_{25}$ 、O、及びSから選ばれる。

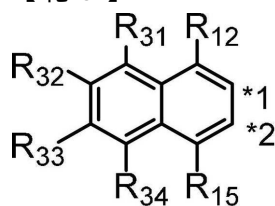
$R_{12} \sim R_{25}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は $R_A$ 、 $R_B$ 及び $R_C$ に関して記載した前記置換基と同じである。

$R_{12} \sim R_{15}$ から選ばれる隣接する2つ、 $R_{16}$ と $R_{17}$ 、及び $R_{23}$ と $R_{24}$ は互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよい。)

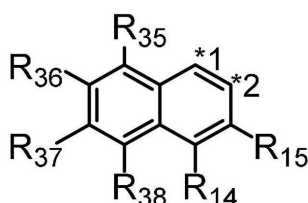
## 【請求項 1 2】

前記置換もしくは無置換の環形成原子数3以上の環構造が、下記式(9)～(11)から選ばれる請求項10又は11に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

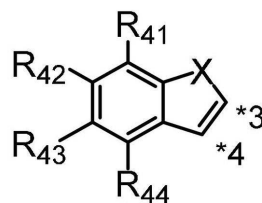
## 【化 8】



(9)



(10)



(11)

(式中、

\*1と\*2及び\*3と\*4は前記と同じである。

$R_{12}$ 、 $R_{14}$ 、 $R_{15}$ 、及びXは前記と同じであり、 $R_{31} \sim R_{38}$ 及び $R_{41} \sim R_{44}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は $R_A$ 、 $R_B$ 及び $R_C$ に関して記載した前記置換基と同じである。

$R_{12}$ 、 $R_{15}$ 、及び $R_{31} \sim R_{34}$ から選ばれる隣接する2つ、 $R_{14}$ 、 $R_{15}$ 、及び $R_{35} \sim R_{38}$ から選ばれる隣接する2つ、及び $R_{41} \sim R_{44}$ から選ばれる隣接する2つは互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよい。)

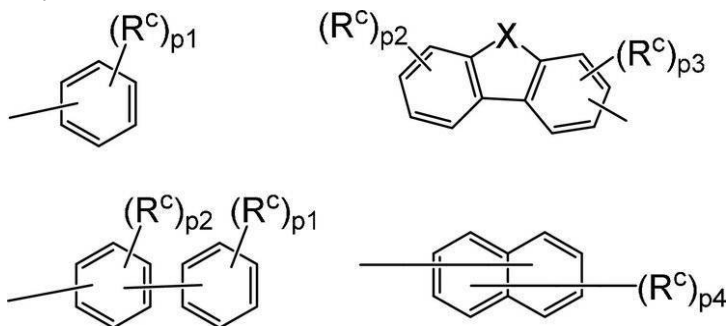
## 【請求項 1 3】

式(1)において、 $R_2$ 、 $R_4$ 、 $R_5$ 、 $R_{10}$ 及び $R_{11}$ の少なくとも1つが前記置換もしくは無置換の環形成原子数3以上の環構造を形成しない請求項10～12のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

## 【請求項 14】

式(1)において、前記環形成原子数3以上の環構造の任意の置換基が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数1~20のアルキル基、 $-N(R_{104})(R_{105})$ で表される基( $R_{104}$ 及び $R_{105}$ は前記と同じ)、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~50のヘテロアリール基、又は下記の群から選択される基のいずれかである請求項10~13のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

## 【化9】



10

(式中、

各 $R^c$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は $R_A$ 、 $R_B$ 及び $R_c$ に関して記載した前記置換基と同じである。

20

Xは前記と同じである。

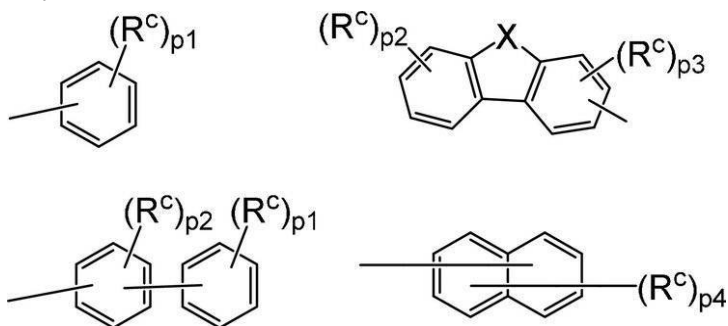
$p_1$ は0~5の整数、 $p_2$ は0~4の整数、 $p_3$ は0~3の整数、 $p_4$ は0~7の整数である。)

## 【請求項 15】

式(1)において、前記置換もしくは無置換の環形成原子数3以上の環構造を形成しない $R_1 \sim R_{11}$ が、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~20のアルキル基、 $-N(R_{104})(R_{105})$ で表される基( $R_{104}$ 及び $R_{105}$ は前記と同じ)、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~50のヘテロアリール基、又は下記の群から選択される基のいずれかである請求項10~14のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

## 【化10】



40

(式中、

各 $R^c$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は $R_A$ 、 $R_B$ 及び $R_c$ に関して記載した前記置換基と同じである。

Xは前記と同じである。

$p_1$ は0~5の整数、 $p_2$ は0~4の整数、 $p_3$ は0~3の整数、 $p_4$ は0~7の整数である。)

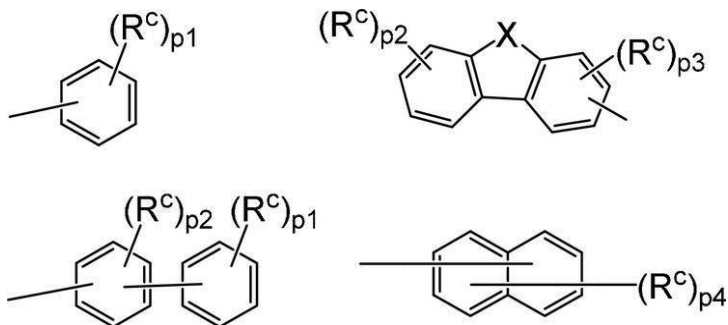
## 【請求項 16】

式(2)~(11)において、 $R_{12} \sim R_{22}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 及び $R_{41} \sim R_{44}$ が

50

、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、- N ( R<sub>104</sub> ) ( R<sub>105</sub> ) で表される基 ( R<sub>104</sub> 及び R<sub>105</sub> は前記と同じ )、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基、又は下記の群から選択される基のいずれかである、請求項 11 ~ 15 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1 1】



10

( 式中、

各 R<sup>c</sup> は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は R<sub>A</sub>、R<sub>B</sub> 及び R<sub>C</sub> に関して記載した前記置換基と同じである。

X は前記と同じである。

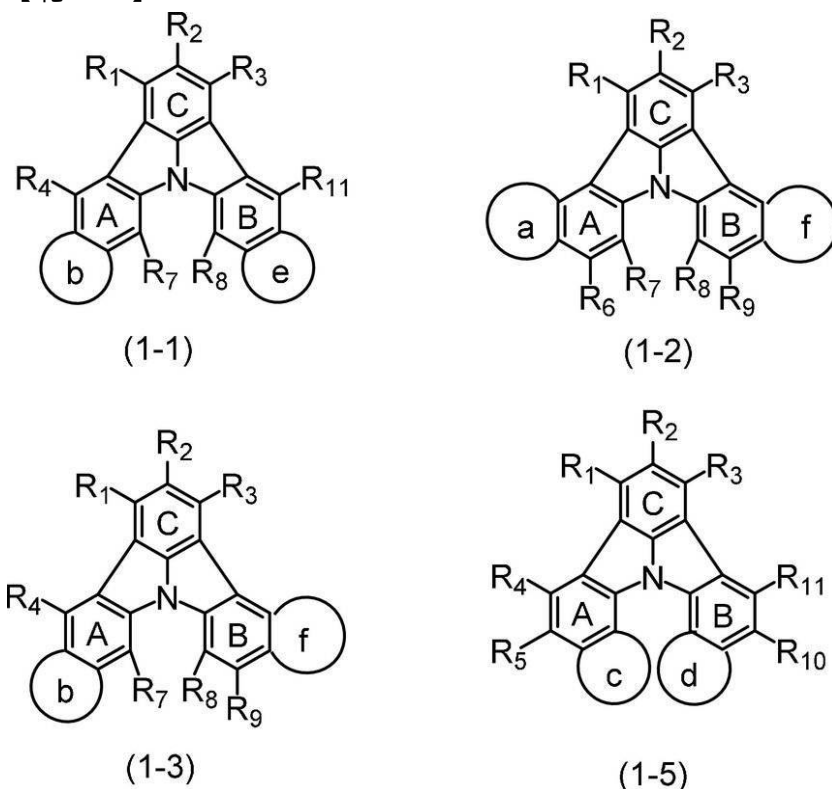
p<sub>1</sub> は 0 ~ 5 の整数、p<sub>2</sub> は 0 ~ 4 の整数、p<sub>3</sub> は 0 ~ 3 の整数、p<sub>4</sub> は 0 ~ 7 の整数である。 )

20

【請求項 17】

前記式 ( 1 ) で表されるドーパント材料が、下記式 ( 1 - 1 ) ~ ( 1 - 3 ) 及び ( 1 - 5 ) のいずれかで表される化合物を含む請求項 10 ~ 16 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1 2】



30

40

( 式中、

50

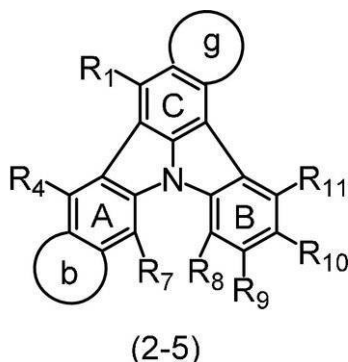
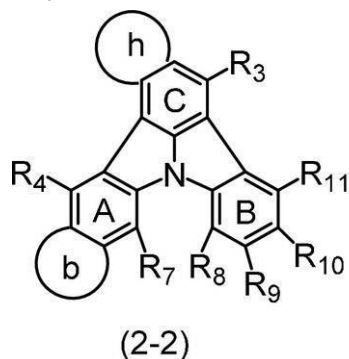
$R_1 \sim R_{11}$  は前記と同じである。

環 a ~ f は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造である。）

【請求項 18】

前記式(1)で表されるドーパント材料が、下記式(2-2)及び(2-5)のいずれかで表される化合物を含む請求項10~16のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化13】



10

(式中、

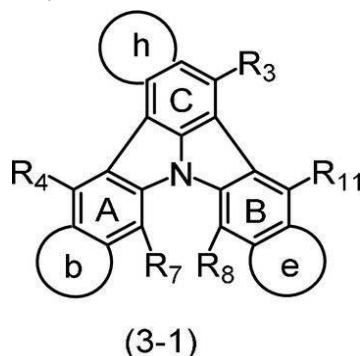
$R_1$ 、 $R_3$ 、 $R_4$  及び  $R_7 \sim R_{11}$  は前記と同じである。

環 b 及び g ~ h は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造である。）

【請求項 19】

前記式(1)で表されるドーパント材料が、下記式(3-1)で表される化合物を含む請求項10~16のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化14】



30

(式中、

$R_3$ 、 $R_4$ 、 $R_7$ 、 $R_8$  及び  $R_{11}$  は前記と同じである。

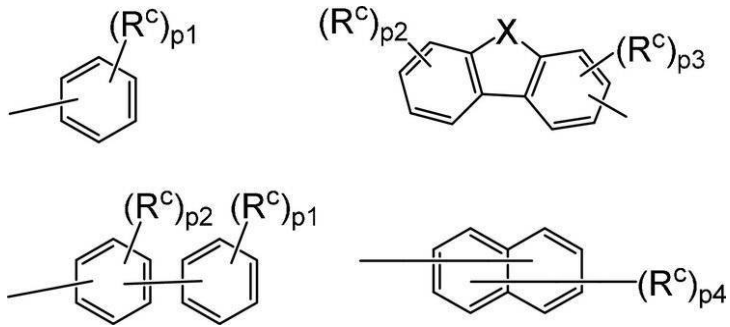
環 b、e 及び h は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造である。）

【請求項 20】

前記環 a ~ f の任意の置換基が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、 $-N(R_{104})(R_{105})$  で表される基 ( $R_{104}$  及び  $R_{105}$  は前記と同じ)、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基、又は下記の群から選択される基のいずれかである請求項17~19のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

## 【化 1 5】



10

( 式中、

各  $R^C$  は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した前記置換基と同じである。

$X$  は前記と同じである。

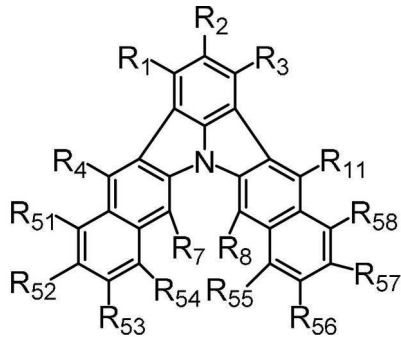
$p_1$  は 0 ~ 5 の整数、 $p_2$  は 0 ~ 4 の整数、 $p_3$  は 0 ~ 3 の整数、 $p_4$  は 0 ~ 7 の整数である。)

## 【請求項 2 1】

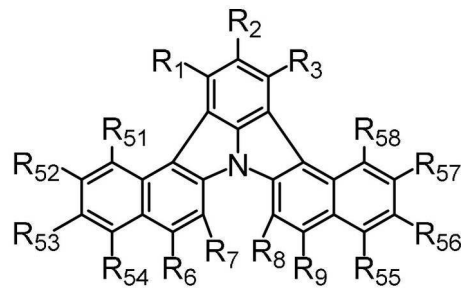
前記式 ( 1 ) で表されるドーパント材料が、下記式 ( 4 - 1 ) ~ ( 4 - 4 ) のいずれかで表される化合物を含む請求項 1 0 ~ 1 7 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネ

20

## 【化 1 6】

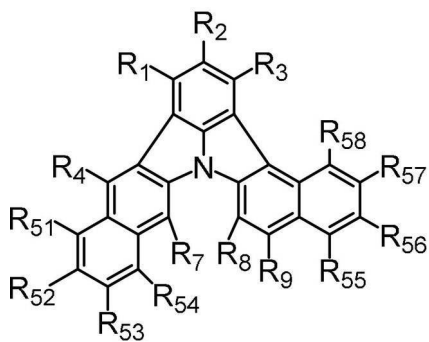


(4-1)

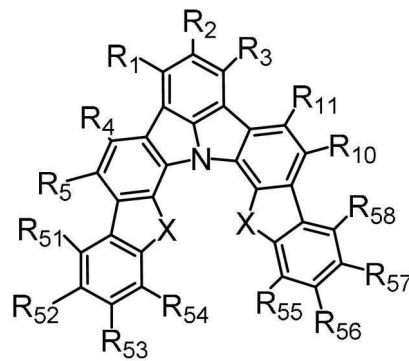


(4-2)

30



(4-3)



(4-4)

40

( 式中、

$X$  及び  $R_1 \sim R_{11}$  は前記と同じである。

$R_{51} \sim R_{58}$  は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は  $R_A$ 、 $R$

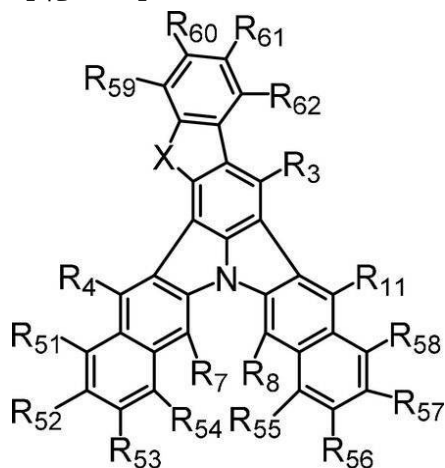
50

$R_B$  及び  $R_C$  に関して前記した置換基と同じである。)

【請求項 22】

前記式 (1) で表されるドーパント材料が、下記式 (5-1) で表される化合物を含む請求項 10 ~ 16 及び 19 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 17】



(5-1)

(式中、

$X$ 、 $R_3$ 、 $R_4$ 、 $R_7$ 、 $R_8$ 、及び  $R_{11}$  は前記と同じである。

$R_{51} \sim R_{62}$  は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した前記置換基と同じである。)

【請求項 23】

式 (1) において、 $R_n$  と  $R_{n+1}$  が互いに結合して、少なくとも 2 つの前記置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造を形成する請求項 10 ~ 22 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 24】

$R_1$  と  $R_2$  からなる対と  $R_2$  と  $R_3$  からなる対；

$R_4$  と  $R_5$  からなる対と  $R_5$  と  $R_6$  からなる対；

$R_5$  と  $R_6$  からなる対と  $R_6$  と  $R_7$  からなる対；

$R_8$  と  $R_9$  からなる対と  $R_9$  と  $R_{10}$  からなる対；及び

$R_9$  と  $R_{10}$  からなる対と  $R_{10}$  と  $R_{11}$  からなる対

が前記置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造を同時に形成しない請求項 10 ~ 22 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 25】

前記第 1 化合物が多環芳香族骨格含有化合物である請求項 1 ~ 24 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 26】

前記第 1 化合物が縮合多環芳香族骨格含有化合物である請求項 1 ~ 25 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 27】

前記第 1 化合物が 3 環以上の縮合多環芳香族骨格を含有する請求項 1 ~ 26 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

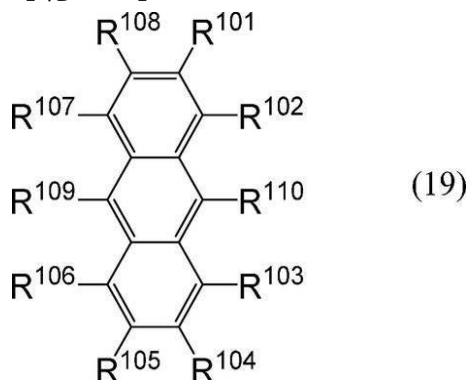
【請求項 28】

前記第 1 化合物がアントラセン骨格含有化合物、クリセン骨格含有化合物、ピレン骨格含有化合物、又はフルオレン骨格含有化合物である請求項 1 ~ 27 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 29】

前記アントラセン骨格含有化合物が下記式(19)で表される請求項28に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化18】



10

(式中、

$R^{101} \sim R^{110}$  は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した前記置換基と同じである。

但し、 $R^{101} \sim R^{110}$  のうち少なくとも1つは  $-L-Ar$  であり、

各  $L$  は、それぞれ独立に、単結合又は連結基であり、該連結基は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリーレン基であり、

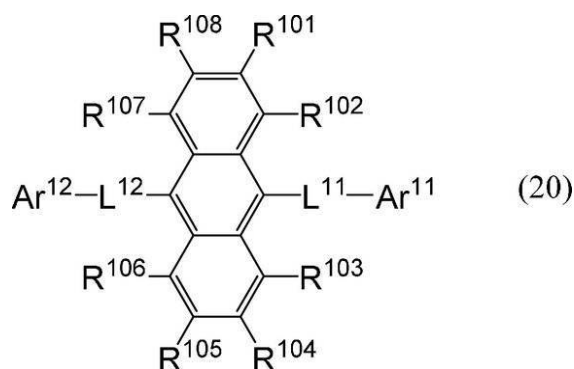
20

各  $Ar$  は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の単環基、置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合環基、又は前記単環及び前記縮合環から選ばれる2以上の環が単結合を介して結合した1価の基である。)

【請求項30】

前記アントラセン骨格含有化合物が、下記式(20)で表される、請求項29に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化19】



30

(式中、

$R^{101} \sim R^{108}$  は前記と同じである。

$Ar^{11}$  及び  $Ar^{12}$  は、それぞれ独立に、前記  $Ar$  と同じである。

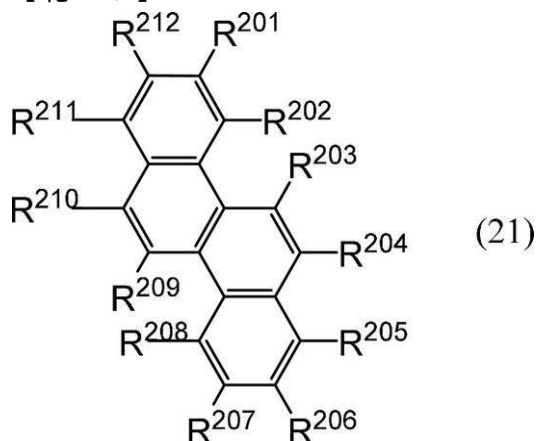
$L^{11}$  及び  $L^{12}$  は、それぞれ独立に、前記  $L$  と同じである。)

40

【請求項31】

前記第1化合物が下記式(21)～(23)いずれかで表される化合物である請求項28に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 2 0】



10

(式中、

R<sup>201</sup> ~ R<sup>212</sup> は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は R<sub>A</sub>、R<sub>B</sub> 及び R<sub>C</sub> に関して記載した前記置換基と同じである。

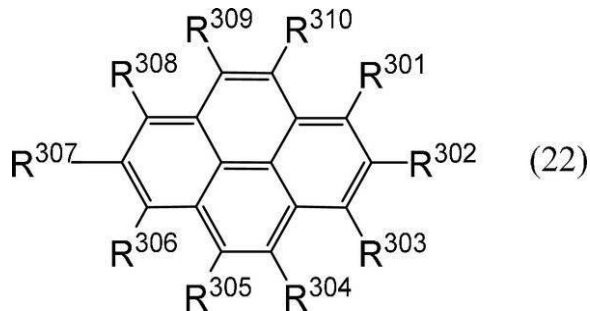
但し、R<sup>201</sup> ~ R<sup>212</sup> のうち少なくとも1つは -L<sup>2</sup>-Ar<sup>21</sup> であり、

各 L<sup>2</sup> は、それぞれ独立に、単結合又は連結基であり、該連結基は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

20

各 Ar<sup>21</sup> は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の単環基、置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合環基、又は前記単環及び前記縮合環から選ばれる 2 以上の環が単結合を介して結合した 1 価の基である。)

【化 2 1】



30

(式中、

R<sup>301</sup> ~ R<sup>310</sup> は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は R<sub>A</sub>、R<sub>B</sub> 及び R<sub>C</sub> に関して記載した前記置換基と同じである。

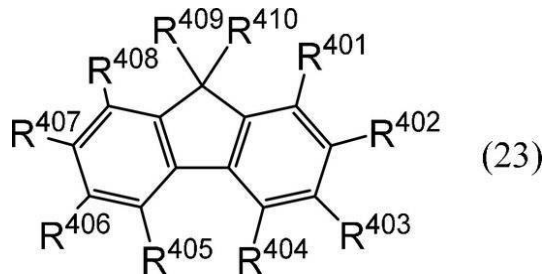
但し、R<sup>301</sup> ~ R<sup>310</sup> のうち少なくとも1つは -L<sup>3</sup>-Ar<sup>31</sup> であり、

各 L<sup>3</sup> は、それぞれ独立に、単結合又は連結基であり、該連結基は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

40

各 Ar<sup>31</sup> は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の単環基、置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合環基、又は前記単環及び前記縮合環から選ばれる 2 以上の環が単結合を介して結合した 1 価の基である。)

## 【化 2 2】



(式中、

$R^{401} \sim R^{410}$  は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した前記置換基と同じである。

但し、 $R^{401} \sim R^{410}$  のうち少なくとも1つは  $-L^4 - Ar^{41}$  であり、

各  $L^4$  は、それぞれ独立に、単結合又は連結基であり、該連結基は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基であり、

各  $Ar^{41}$  は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の単環基、置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50 の縮合環基、又は前記単環及び前記縮合環から選ばれる2以上の環が単結合を介して結合した1個の基である。

$R^{401}$  と  $R^{402}$ 、 $R^{402}$  と  $R^{403}$ 、 $R^{403}$  と  $R^{404}$ 、 $R^{405}$  と  $R^{406}$ 、 $R^{406}$  と  $R^{407}$ 、及び  $R^{407}$  と  $R^{408}$  から選ばれる隣接する2つが互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよい。)

## 【請求項 3 2】

前記第1化合物が請求項 2 9 ~ 3 1 のいずれか1項に記載の前記式 (1 9) ~ (2 3) のいずれかで表される化合物であり、

前記第2化合物が請求項 2 9 ~ 3 1 のいずれか1項に記載の前記式 (1 9) ~ (2 3) のいずれかで表される化合物であり、

前記ドーパント材料が請求項 8 ~ 2 4 に記載のドーパント材料から選ばれる1種以上である、請求項 1 ~ 4 のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

## 【請求項 3 3】

前記蛍光発光層が重金属錯体を含まない請求項 1 ~ 3 2 のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

## 【請求項 3 4】

青色発光する請求項 1 ~ 3 3 のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

## 【請求項 3 5】

請求項 1 ~ 3 4 のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を備えた電子機器。

## 【発明の詳細な説明】

## 【技術分野】

## 【0 0 0 1】

本発明は、有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器に関する。

## 【背景技術】

## 【0 0 0 2】

一般に有機エレクトロルミネッセンス素子(以下、「有機EL素子」と略記することがある。)は、陽極、陰極、及び陽極と陰極に挟まれた1層以上の有機薄膜層から構成されている。両電極間に電圧が印加されると、陰極側から電子、陽極側から正孔が発光領域に注入され、注入された電子と正孔は発光領域において再結合して励起状態を生成し、励起状態が基底状態に戻る際に光を放出する。

また、有機EL素子は、発光層に種々の発光材料を用いることにより、多様な発光色を

得ることが可能であることから、ディスプレイなどへの実用化研究が盛んである。例えば、有機EL素子の性能を向上させるために、赤色、緑色、青色の三原色の発光材料及びその他の有機EL素子用材料の研究が活発である。

そのような有機EL素子用の材料として、例えば特許文献1～7に記載の化合物などが知られている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0003】

【特許文献1】特開2014-73965号公報

【特許文献2】国際公開第2016/006925号

【特許文献3】中国特許第104119347号公報

【特許文献4】国際公開第2011/128017号

【特許文献5】韓国特許第10-2015-0135125号公報

【特許文献6】国際公開第2013/077344号

【特許文献7】国際公開第2016/195441号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

発明者等は、蛍光青色発光層に用いることができ、特に発光層のドーパントとして用いたときに、半値幅が狭く高い色純度の蛍光スペクトルを示す化合物を検討する過程で、本発明を見出した。

蛍光スペクトルの半値幅が狭いドーパントは、基底状態と励起状態で構造変化が小さい。そのため、蛍光スペクトルの半値幅が狭いドーパントの吸収スペクトルと蛍光スペクトルは重なりが大きい。その結果、発光した光がドーパントに自己吸収され、発光効率が低下するおそれがある。

自己吸収による発光効率の低下は、発光層中のドーパント濃度を低くすることによりある程度防ぐことができる。しかしながら、発光層中のドーパント濃度が低いと、ドーパントによる正孔輸送経路が十分に形成されず、正孔を捕捉する性質が強くなり、発光層全体の正孔移動度が低下する。

一般に、蛍光青色発光層では、ホストの電子移動度が正孔移動度よりも大きいので、励起密度の高い領域（再結合領域）が正孔輸送層近傍に存在する。その結果、正孔輸送層が劣化し、有機EL素子の寿命が短くなるという問題があった。

本発明者等は上記知見に基づいて研究した結果、自己吸収による発光効率の低下を防ぐ目的で、蛍光スペクトルの半値幅が狭いドーパントの発光層中の濃度を低くすると、励起密度の高い領域がより正孔輸送層に近づき、さらに寿命が短くなることを見出した。

本発明の目的は、蛍光スペクトルの半値幅が狭いドーパント材料を含有し、かつ、優れた寿命を示す有機EL素子を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【0005】

本発明者らは前記課題を解決するために鋭意研究を重ねた結果、蛍光スペクトルの半値幅が狭いドーパント材料、特定の材料（第1化合物）、及び構造が異なる他の特定の材料（第2化合物）を含む発光層が前記課題を解決することを見出した。

【0006】

（1）本発明の一態様によれば、陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に存在する有機層とを含有する有機EL素子であって、該有機層は蛍光発光層を含み、該蛍光発光層が、第1化合物、該第1化合物よりも大きい正孔移動度を有する第2化合物、及び蛍光スペクトルの半値幅が30nm以下のドーパント材料を含む有機EL素子が提供される。

（2）本発明の他の態様によれば、陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に存在する有機層とを含有する有機EL素子であって、該有機層は蛍光発光層を含み、該蛍光発光層が、第1化合物、該第1化合物よりも大きいアフィニティを有する第3化合物、蛍光スペクトル

10

20

30

40

50

ルの半値幅が30nm以下のドーパント材料を含有し、該第3化合物の蛍光発光層中の含有量が、該第1化合物の蛍光発光層中の含有量より少ない有機EL素子が提供される。

(3) 本発明のさらに他の態様によれば、上記(1)又は(2)に記載の有機EL素子を備えた電子機器が提供される。

【発明の効果】

【0007】

本発明の蛍光スペクトルの半値幅が狭いドーパント材料を含有する有機EL素子は優れた寿命を示す。

【図面の簡単な説明】

【0008】

10

【図1】本発明の実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の構成を示す概略図である。

【発明を実施するための形態】

【0009】

本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数 $XX \sim YY$ の $ZZ$ 基」という表現における「炭素数 $XX \sim YY$ 」は、 $ZZ$ 基が無置換である場合の炭素数を表すものであり、置換されている場合の置換基の炭素数は含めない。

また、本明細書において、「置換もしくは無置換の原子数 $XX \sim YY$ の $ZZ$ 基」という表現における「原子数 $XX \sim YY$ 」は、 $ZZ$ 基が無置換である場合の原子数を表すものであり、置換されている場合の置換基の原子数は含めない。

20

【0010】

本明細書において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物(例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物)の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記される「環形成炭素数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が6であり、ナフタレン環は環形成炭素数が10であり、ピリジニル基は環形成炭素数5であり、フラニル基は環形成炭素数4である。また、ベンゼン環やナフタレン環に置換基として例えばアルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、環形成炭素数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合(スピロフルオレン環を含む)、置換基としてのフルオレン環の炭素数は環形成炭素数の数に含めない。

30

【0011】

また、本明細書において、環形成原子数とは、原子が環状に結合した構造(例えば単環、縮合環、環集合)の化合物(例えば単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物)の当該環自体を構成する原子の数を表す。環を構成しない原子や、当該環が置換基によって置換される場合の置換基に含まれる原子は環形成原子数には含まない。以下で記される「環形成原子数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ピリジン環の環形成原子数は6であり、キナゾリン環の環形成原子数は10であり、フラン環の環形成原子数は5である。ピリジン環やキナゾリン環の炭素原子にそれぞれ結合している水素原子や置換基を構成する原子については、環形成原子数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合(スピロフルオレン環を含む)、置換基としてのフルオレン環の原子数は環形成原子数の数に含めない。

40

【0012】

また、本明細書において、「水素原子」とは、中性子数が異なる同位体、すなわち、軽水素(*protium*)、重水素(*deuterium*)及び三重水素(*tritium*)を包含する。

【0013】

第1の有機EL素子

第1の有機EL素子は陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に有機層を含有し、該有機

50

層は蛍光発光層を含有する。

第1の有機EL素子の蛍光発光層は、第1化合物、第1化合物よりも大きい正孔移動度を有する第2化合物、及び蛍光スペクトルの半値幅が30nm以下のドーパント材料を含む。正孔移動度が大きいほど正孔は移動し易いので、第2化合物を併用することにより、蛍光発光層への正孔注入性と、蛍光発光層内部の正孔輸送性とが向上する。そのため、励起密度の高い領域（正孔と電子の再結合領域）が蛍光発光層の中央部に近づく。励起密度の高い領域が蛍光発光層の中央部に近づく、励起によって蛍光発光層に隣接する層が劣化することを抑制することができる。これにより、前記した問題、すなわち、蛍光スペクトルの半値幅が狭いドーパントを使用した有機EL素子が有する寿命低下の問題が解決され、寿命が向上する。

10

#### 【0014】

第1の有機EL素子に使用するドーパント材料の蛍光スペクトルの半値幅は30nm以下、好ましくは25nm以下、より好ましくは20nm以下である。半値幅が上記の範囲にあると、高い色純度が得られる。

また、第1の有機EL素子に使用するドーパント材料の蛍光スペクトルの半値幅は例えば2nm以上である。

本発明で使用する蛍光スペクトルの半値幅の測定方法は後述する。

ドーパント材料の蛍光発光層中の含有量は第1化合物、第2化合物及びドーパント材料の合計量に対して10質量%以下、好ましくは1～10質量%、より好ましくは1～8質量%である。

20

#### 【0015】

第2化合物は第1化合物よりも大きな正孔移動度を有する。例えば、第1化合物と第2化合物の正孔移動度の関係は、第2化合物の正孔移動度/第1化合物の正孔移動度で5以上である。正孔移動度の測定方法は後述する。

#### 【0016】

第2化合物の蛍光発光層中の含有量は第1化合物の含有量以下であることが好ましい。第2化合物の蛍光発光層中の含有量は、第1化合物、第2化合物及びドーパント材料の合計量に対して好ましくは30質量%以下、より好ましくは2～30質量%、さらに好ましくは2～20質量%である。上記範囲であると、励起密度の高い領域が蛍光発光層の中央部に近づく、寿命が向上する。

30

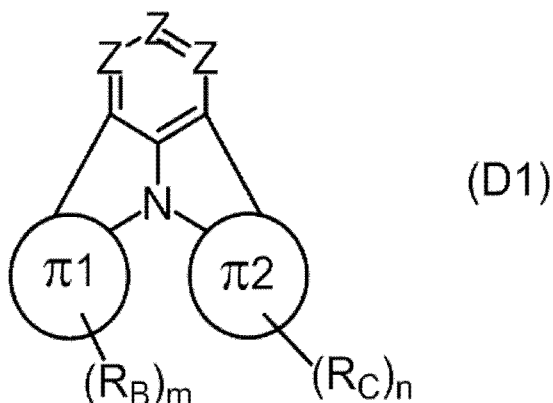
#### 【0017】

ドーパント材料

第1の有機EL素子のドーパント材料は式(D1)で表される化合物(ドーパント材料1)及び式(D2)で表される化合物(ドーパント材料2)から選ばれる少なくとも1種の化合物であることが好ましく、式(D1)で表される化合物から選ばれる少なくとも1種の化合物であることがより好ましい。

ドーパント材料1は下記式(D1)で表される。

#### 【化1】



40

50

(式中、

Zは、それぞれ独立に、C R<sub>A</sub> 又はNである。

環π 1は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の芳香族複素環である。

環π 2は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の芳香族複素環である。

R<sub>A</sub>、R<sub>B</sub> 及びR<sub>C</sub> は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、該置換基は、ハロゲン原子、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルケニル基、置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキニル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルコキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールオキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキルチオ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリールチオ基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリール基、-Si(R<sub>101</sub>)(R<sub>102</sub>)(R<sub>103</sub>)で表される基、又は-N(R<sub>104</sub>)(R<sub>105</sub>)で表される基である。

R<sub>101</sub>～R<sub>105</sub> は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリール基である。

n及びmは、それぞれ独立に、1～4の整数である。

隣接する2つのR<sub>A</sub> は互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合することなく、環構造を形成しなくてもよい。

隣接する2つのR<sub>B</sub> は互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合することなく、環を形成しなくてもよい。

隣接する2つのR<sub>C</sub> は互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合することなく、環構造を形成しなくてもよい。)

#### 【0018】

環π 1及び環π 2は、それぞれ独立に、環形成炭素数6～50、好ましくは6～24、より好ましくは6～18の芳香族炭化水素環又は環形成原子数5～50、好ましくは5～24、より好ましくは5～13の芳香族複素環である。

#### 【0019】

上記環形成炭素数6～50の芳香族炭化水素環の具体例としては、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、ベンゾアントラセン環、フェナントレン環、ベンゾフェナントレン環、フルオレン環、ベンゾフルオレン環、ジベンゾフルオレン環、ピセン環、テトラセン環、ペンタセン環、ピレン環、クリセン環、ベンゾクリセン環、s-インダセン環、as-インダセン環、フルオランテン環、ベンゾフルオランテン環、トリフェニレン環、ベンゾトリフェニレン環、ペリレン環、コロネン環、ジベンゾアントラセン環等が挙げられる。

#### 【0020】

上記環形成原子数5～50の芳香族複素環の具体例としては、ピロール環、ピラゾール環、イソインドール環、ベンゾフラン環、ベンゾチオフェン環、イソベンゾフラン環、ジベンゾチオフェン環、イソキノリン環、シンノリン環、キノキサリン環、フェナントリジン環、フェナントロリン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、トリアジン環、イミダゾピリジン環、インドール環、インダゾール環、ベンズイミダゾール環、キノリン環、アクリジン環、ピロリジン環、ジオキササン環、ピペリジン環、モルフォリン環、ピペラジン環、カルバゾール環、フラン環、チオフェン環、オキサゾール環、オキサジアゾール環、ベンゾオキサゾール環、チアゾール環、チアジアゾール環、ベンゾチアゾール環、トリアゾール環、イミダゾール環、ベンゾイミダゾール環、ピラン環、ジベンゾフラン環、ベンゾ[c]ジベンゾフラン環、プリン環、アクリジン環等が挙げられる。

。

## 【 0 0 2 1 】

$R_B$  はそれぞれ、芳香族炭化水素環又は芳香族複素環（環  $\pi 1$ ）の環形成原子のいずれかに結合する。 $R_C$  はそれぞれ、芳香族炭化水素環又は芳香族複素環（環  $\pi 2$ ）の環形成原子のいずれかに結合する。

$R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  が表す置換基を以下に説明する。

## 【 0 0 2 2 】

ハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子等が挙げられる。

。

## 【 0 0 2 3 】

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 6 のアルキル基において、該アルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、 $n$ -プロピル基、イソプロピル基、 $n$ -ブチル基、イソブチル基、 $s$ -ブチル基、 $t$ -ブチル基、ペンチル基（異性体基を含む）、ヘキシル基（異性体基を含む）、ヘプチル基（異性体基を含む）、オクチル基（異性体基を含む）、ノニル基（異性体基を含む）、デシル基（異性体基を含む）、ウンデシル基（異性体基を含む）、及びドデシル基（異性体基を含む）などが挙げられる。これらの中でも、メチル基、エチル基、 $n$ -プロピル基、イソプロピル基、 $n$ -ブチル基、イソブチル基、 $s$ -ブチル基、 $t$ -ブチル基及びペンチル基（異性体基を含む）が好ましく、メチル基、エチル基、 $n$ -プロピル基、イソプロピル基、 $n$ -ブチル基、イソブチル基、 $s$ -ブチル基及び  $t$ -ブチル基がより好ましく、メチル基、エチル基、イソプロピル基及び  $t$ -ブチル基がさらに好ましい。

置換アルキル基としては炭素数 1 ~ 20、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 6 のフルオロアルキル基が好ましい。該フルオロアルキル基は前記炭素数 1 ~ 20 のアルキル基の少なくとも 1 個の水素原子、好ましくは 1 ~ 7 個の水素原子、又は全ての水素原子をフッ素原子で置換した基である。該フルオロアルキル基としては、ヘプタフルオロプロピル基（異性体を含む）、ペンタフルオロエチル基、2,2,2-トリフルオロエチル基、及びトリフルオロメチル基が好ましく、ペンタフルオロエチル基、2,2,2-トリフルオロエチル基、及びトリフルオロメチル基がより好ましく、トリフルオロメチル基がさらに好ましい。

## 【 0 0 2 4 】

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 6 のアルケニル基において、該アルケニル基としては、ビニル基、2-プロペニル基、2-ブテニル基、3-ブテニル基、4-ペンテニル基、2-メチル-2-プロペニル基、2-メチル-2-ブテニル基、3-メチル-2-ブテニル基等が挙げられる。

## 【 0 0 2 5 】

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 6 のアルキニル基において、該アルキニル基としては、2-プロピニル基、2-ブチニル基、3-ブチニル基、4-ペンチニル基、5-ヘキシニル基、1-メチル-2-プロピニル基、1-メチル-2-ブチニル基、1,1-ジメチル-2-プロピニル基等が挙げられる。

## 【 0 0 2 6 】

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 20、好ましくは 3 ~ 6、より好ましくは 5 又は 6 のシクロアルキル基において、該シクロアルキル基としては、例えば、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンチル基などが挙げられる。これらの中でも、シクロペンチル基、シクロヘキシル基が好ましい。

## 【 0 0 2 7 】

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 6 のアルコキシ基において、アルキル部位の詳細は前記炭素数 1 ~ 20 のアルキル基と同じである。

置換アルコキシ基としては炭素数 1 ~ 20、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~

10

20

30

40

50

6 のフルオロアルコキシ基が好ましい。該フルオロアルコキシ基のフルオロアルキル部位の詳細は前記素数 1 ~ 20 のフルオロアルキル基と同じである。

#### 【0028】

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 のアリール基において、該アリール基は縮合アリール基であっても非縮合アリール基であってもよい。該アリール基としては、例えば、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アセナフチレニル基、アントリル基、ベンゾアントリル基、アセアントリル基、フェナントリル基、ベンゾ[*c*]フェナントリル基、フェナレニル基、フルオレニル基、ピセニル基、ペンタフェニル基、ピレニル基、クリセニル基、ベンゾ[*g*]クリセニル基、*s*-インダセニル基、*as*-インダセニル基、フルオランテニル基、ベンゾ[*k*]フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ベンゾ[*b*]トリフェニレニル基及びペリレニル基などが挙げられる。これらの中でも、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アントリル基、ピレニル基、フルオランテニル基が好ましく、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基がより好ましく、フェニル基がさらに好ましい。

10

置換アリール基としては、例えば、9,9-ジメチルフルオレニル基、9,9-ジフェニルフルオレニル基、9,9'-スピロビフルオレニル基、9,9-ジ(4-メチルフェニル)フルオレニル基、9,9-ジ(4-イソプロピルフェニル)フルオレニル基、9,9-ジ(4-*t*-ブチルフェニル)フルオレニル基、パラ-メチルフェニル基、メタ-メチルフェニル基、オルト-メチルフェニル基、パラ-イソプロピルフェニル基、メタ-イソプロピルフェニル基、オルト-イソプロピルフェニル基、パラ-*t*-ブチルフェニル基、メタ-*t*-ブチルフェニル基、オルト-*t*-ブチルフェニル基が好ましい。

20

#### 【0029】

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 のアリールオキシ基において、該アリールオキシ基のアリール部位の詳細は前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基と同じである。

#### 【0030】

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 6 のアルキルチオ基において、該アルキルチオ基のアルキル部位の詳細は前記炭素数 1 ~ 20 のアルキル基と同じである。

30

#### 【0031】

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 のアリールチオ基において、該アリールチオ基のアリール部位の詳細は前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基と同じである。

#### 【0032】

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 18、さらに好ましくは 5 ~ 13 のヘテロアリール基は、少なくとも 1 個、好ましくは 1 ~ 5 個、より好ましくは 1 ~ 4 個、さらに好ましくは 1 ~ 3 個の環形成ヘテロ原子を含む。該環形成ヘテロ原子としては、例えば、窒素原子、硫黄原子及び酸素原子が挙げられ、窒素原子、酸素原子が好ましい。該ヘテロアリール基の遊離原子価は環形成炭素原子上に存在するか、又は、構造的に可能である場合には、環形成窒素原子上に存在してもよい。

40

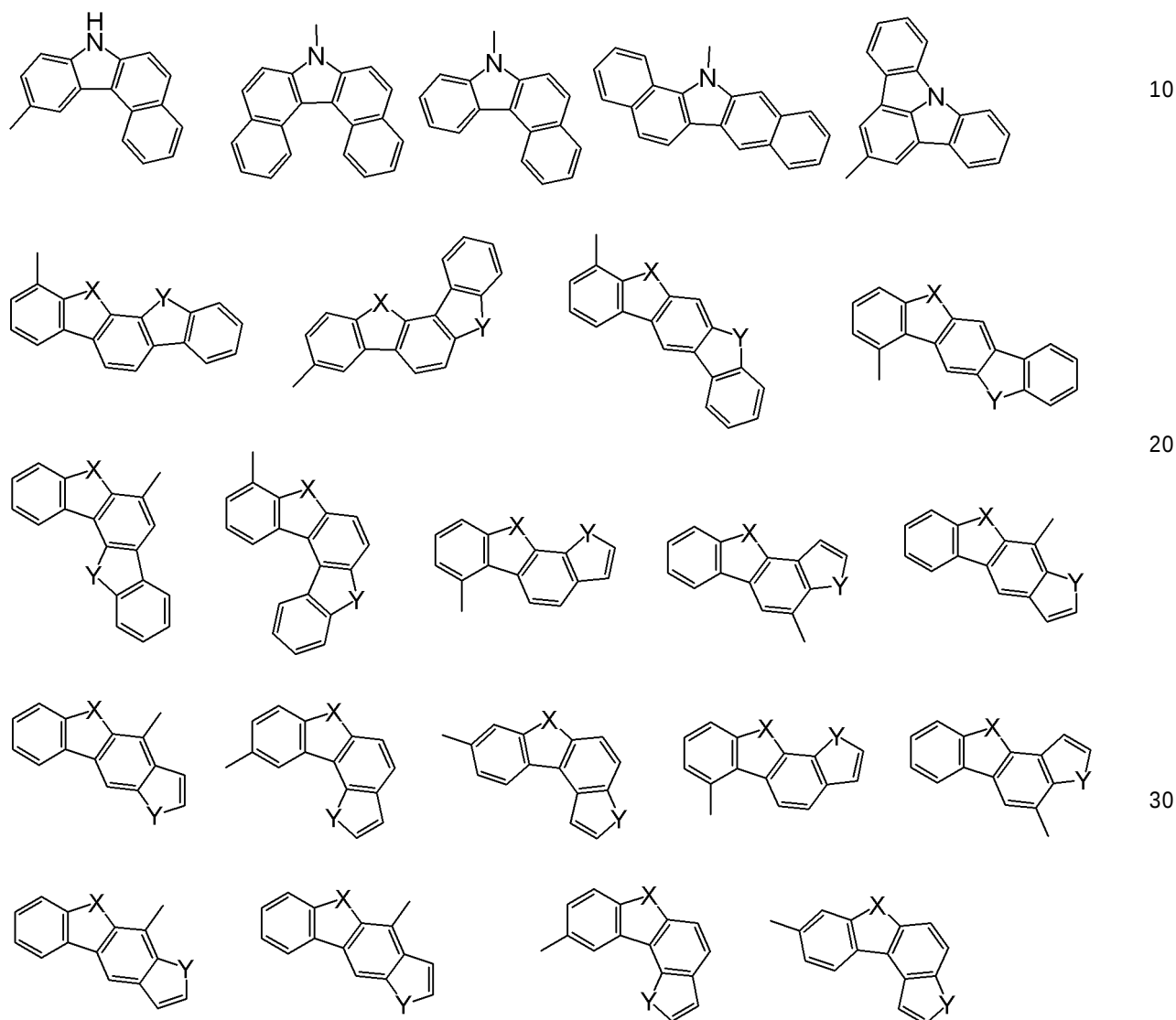
該ヘテロアリール基としては、例えば、ピロリル基、フリル基、チエニル基、ピリジル基、イミダゾピリジル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、トリアジニル基、イミダゾリル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、ピラゾリル基、イソオキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、イソベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基(ベンゾチエニル基)、イソベンゾチオフェニル基(イソベンゾチエニル基)、インドリジニル基、キノリジニル基、キノリル基、イソキノリル基、シンノリル基、フタラジニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、ベンズイミダゾリ

50

ル基、ベンズオキサゾリル基、ベンズチアゾリル基、インダゾリル基、ベンズイソキサゾリル基、ベンズイソチアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基（ジベンゾチエニル基）、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、フェノキサジニル基及びキサンテニル基などが挙げられる。

また該ヘテロアリール基としては、以下の基が挙げられる。

【化 2】

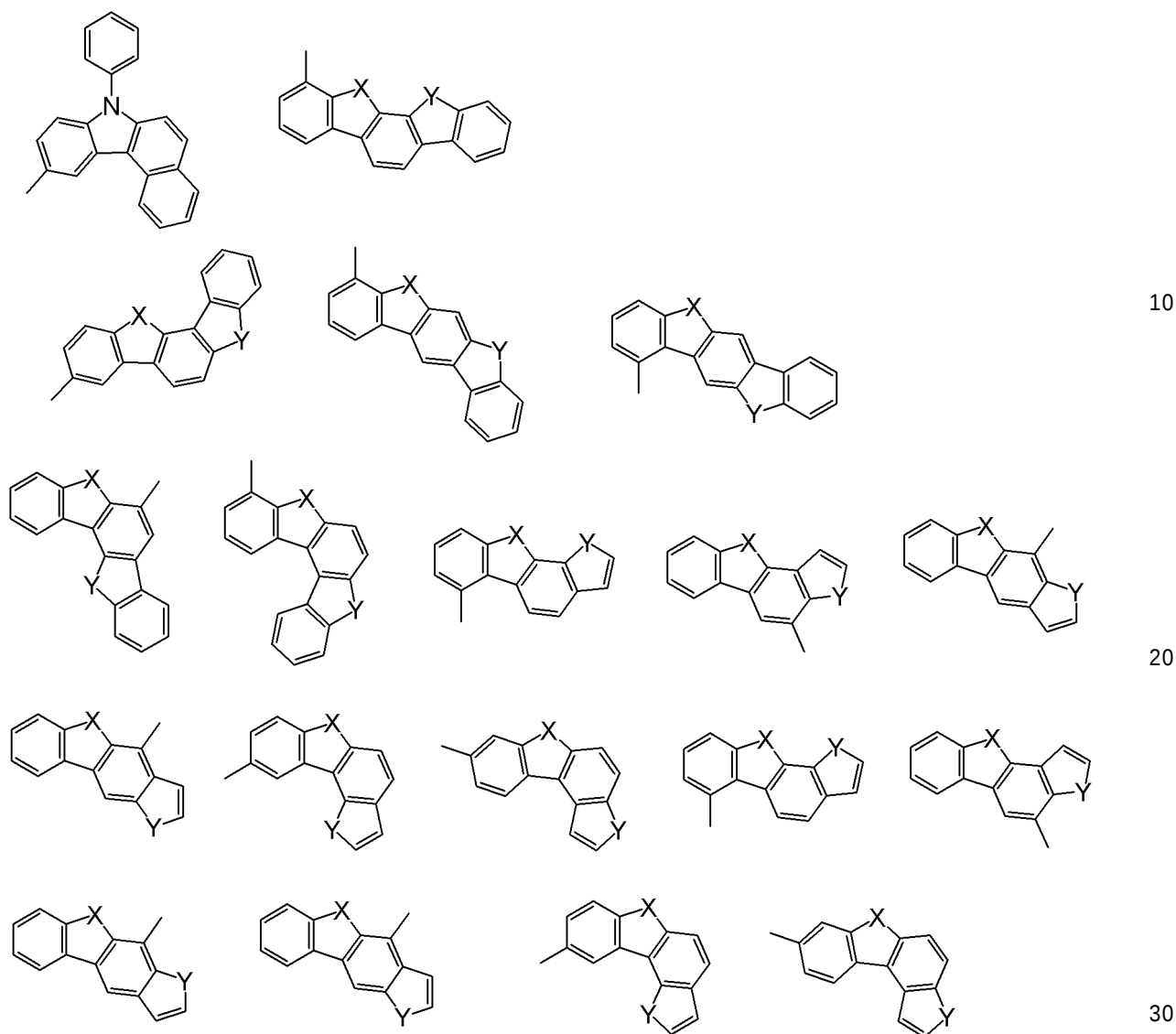


（式中、Xは酸素原子又は硫黄原子を表し、Yは酸素原子、硫黄原子、 $\text{NR}^a$ 、又は $\text{CR}^b_2$ であり、 $\text{R}^a$ 及び $\text{R}^b$ は水素原子である。）

これらの中でも、ピリジル基、イミダゾピリジル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、トリアジニル基、ベンズイミダゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、カルバゾリル基、フェナントロリニル基、キナゾリニル基が好ましい。

置換ヘテロアリール基としては、例えば、（9 - フェニル）カルバゾリル基、（9 - ビフェニリル）カルバゾリル基、（9 - フェニル）フェニルカルバゾリル基、（9 - ナフチル）カルバゾリル基、ジフェニルカルバゾール - 9 - イル基、フェニルジベンゾフラニル基、フェニルジベンゾチオフェニル基（フェニルジベンゾチエニル基）、及び下記の基が挙げられる。

## 【化 3】



(式中、Xは酸素原子又は硫黄原子を表し、Yは $\text{NR}^a$ 、又は $\text{CR}^b_2$ であり、 $\text{R}^a$ 及び $\text{R}^b$ は、それぞれ独立に、前記炭素数1～20のアルキル基及び前記環形成炭素数6～50のアリール基から選ばれる。)

## 【0033】

前記-Si( $\text{R}_{101}$ )( $\text{R}_{102}$ )( $\text{R}_{103}$ )で表される基及び-N( $\text{R}_{104}$ )( $\text{R}_{105}$ )で表される基において、 $\text{R}_{101} \sim \text{R}_{105}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリール基である。

40

上記の置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3～20のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリール基の詳細は前記したとおりである。

## 【0034】

前記-Si( $\text{R}_{101}$ )( $\text{R}_{102}$ )( $\text{R}_{103}$ )で表される基としては、例えば、モノアルキルシリル基、ジアルキルシリル基、トリアルキルシリル基、モノアリールシリル基、ジアリールシリル基、トリアリールシリル基、モノアルキルジアリールシリル基、及びジアルキルモノアリールシリル基が挙げられる。

50

該置換シリル基としては、トリアルキルシリル基及びトリアリールシリル基が好ましく、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリイソプロピルシリル基、*t*-ブチルジメチルシリル基、トリフェニルシリル基、及びトリトリルシリル基がより好ましい。

【0035】

前記 - N ( R <sub>104</sub> ) ( R <sub>105</sub> ) で表される基としては、例えば、アミノ基、モノアルキルアミノ基、ジアルキルアミノ基、モノアリールアミノ基、ジアリールアミノ基、モノヘテロアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基、モノアルキルモノアリールアミノ基、モノアルキルモノヘテロアリールアミノ基、モノアリールモノヘテロアリールアミノ基が挙げられる。これらの中でも、ジアルキルアミノ基、ジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基、モノアリールモノヘテロアリールアミノ基が好ましく、ジメチルアミノ基、ジエチルアミノ基、ジイソプロピルアミノ基、ジフェニルアミノ基、ビス(アルキル置換フェニル)アミノ基、ビス(アリール置換フェニル)アミノ基がより好ましい。

10

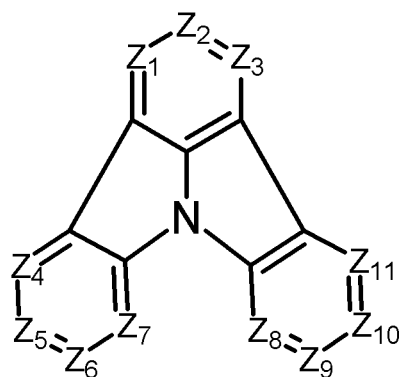
【0036】

式 ( D 1 ) 中、 - Si ( R <sub>101</sub> ) ( R <sub>102</sub> ) ( R <sub>103</sub> ) で表される基が複数存在する場合、これらは互いに同一でも異なってもよい。また、式 ( D 1 ) 中、 - N ( R <sub>104</sub> ) ( R <sub>105</sub> ) で表される基が複数存在する場合、これらは互いに同一でも異なってもよい。

【0037】

式 ( D 1 ) で表される化合物は好ましくは下記式 ( D 1 a ) で表される化合物を含む。

20



(D1a)

30

( 式中、

Z <sub>1</sub> は C R <sub>1</sub> 又は N、Z <sub>2</sub> は C R <sub>2</sub> 又は N、Z <sub>3</sub> は C R <sub>3</sub> 又は N、Z <sub>4</sub> は C R <sub>4</sub> 又は N、Z <sub>5</sub> は C R <sub>5</sub> 又は N、Z <sub>6</sub> は C R <sub>6</sub> 又は N、Z <sub>7</sub> は C R <sub>7</sub> 又は N、Z <sub>8</sub> は C R <sub>8</sub> 又は N、Z <sub>9</sub> は C R <sub>9</sub> 又は N、Z <sub>10</sub> は C R <sub>10</sub> 又は N、Z <sub>11</sub> は C R <sub>11</sub> 又は N である。

R <sub>1</sub> ~ R <sub>11</sub> は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基を表し、該置換基は式 ( D 1 ) の R <sub>A</sub>、R <sub>B</sub> 及び R <sub>C</sub> に関して記載した前記置換基と同じである。

R <sub>1</sub> ~ R <sub>3</sub> から選ばれる隣接する 2 つは互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合することなく環構造を形成しなくてもよい。

R <sub>4</sub> ~ R <sub>7</sub> から選ばれる隣接する 2 つは互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合することなく環構造を形成しなくてもよい。

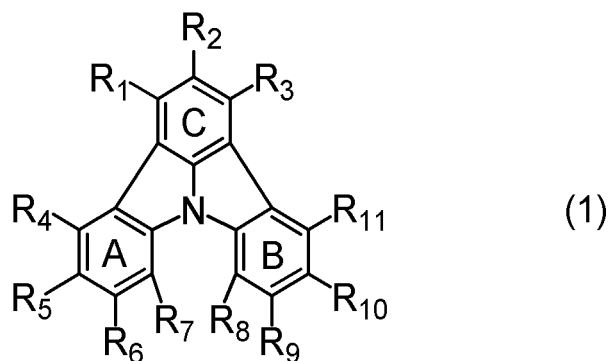
40

R <sub>8</sub> ~ R <sub>11</sub> から選ばれる隣接する 2 つは互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、互いに結合することなく環構造を形成しなくてもよい。)

【0038】

式 ( D 1 ) で表される化合物は好ましくは下記式 ( 1 ) で表される化合物を含む。

## 【化 5】



10

(式中、

$R_n$  と  $R_{n+1}$  ( $n$  は 1、2、4～6、及び 8～10 から選ばれる整数を表す) は互いに結合して、 $R_n$  と  $R_{n+1}$  が結合する 2 つの環形成炭素原子と共に置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造を形成してもよく、又は  $R_n$  と  $R_{n+1}$  は互いに結合することなく環構造を形成しなくてもよい。

前記環形成原子は炭素原子、酸素原子、硫黄原子、及び窒素原子から選ばれる。

該環形成原子数 3 以上の環構造の任意の置換基は式 (D1) の  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した前記置換基と同じであり、隣接する 2 つの任意の置換基は互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよい。

20

前記置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造を形成しない  $R_1 \sim R_{11}$  は水素原子又は置換基を表し、該置換基は式 (D1) の  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した前記置換基と同じである。) )

## 【0039】

$R_n$  と  $R_{n+1}$ 、すなわち、 $R_1$  と  $R_2$ 、 $R_2$  と  $R_3$ 、 $R_4$  と  $R_5$ 、 $R_5$  と  $R_6$ 、 $R_6$  と  $R_7$ 、 $R_8$  と  $R_9$ 、 $R_9$  と  $R_{10}$ 、及び、 $R_{10}$  と  $R_{11}$  が互いに結合して、 $R_n$  と  $R_{n+1}$  が結合する 2 つの環形成炭素原子と共に置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造を形成する場合、 $R_n - R_{n+1}$ 、すなわち、 $R_1 - R_2$ 、 $R_2 - R_3$ 、 $R_4 - R_5$ 、 $R_5 - R_6$ 、 $R_6 - R_7$ 、 $R_8 - R_9$ 、 $R_9 - R_{10}$ 、又は  $R_{10} - R_{11}$  は、 $CH_2$ 、 $NH$ 、 $O$ 、及び  $S$  から選ばれる 1 つを表すか、又は、 $CH_2$ 、 $CH$ 、 $NH$ 、 $N$ 、 $O$ 、及び  $S$  から選ばれる 2 以上が単結合、二重結合、又は芳香族性結合を介して順次結合した原子群を表す。 $CH_2$ 、 $CH$ 、及び  $NH$  の水素原子は前記置換基で置換されていてもよい。前記芳香族性結合とは、芳香族環の 2 つの原子を結合する 1～2 の間の結合次数 (約 1.5) を有する結合である。

30

## 【0040】

本発明の一様態において、前記式 (1) の化合物は、前記置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造を 2 つ有することが好ましい。

本発明の他の様態において、式 (1) の化合物は、該環構造を 3 つ有することもが好ましく、該環構造は、式 (1) の 3 つの異なるベンゼン環、すなわち、環 A、環 B、及び環 C のそれぞれに 1 つずつ存在することがより好ましい。

40

本発明のさらに他の様態において、式 (1) の化合物は、該環構造を 4 つ以上有することが好ましい。

## 【0041】

本発明の一様態において、 $R_p$  と  $R_{p+1}$  及び  $R_{p+1}$  と  $R_{p+2}$  ( $p$  は 1、4、5、8、又は 9 である) が同時に前記置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造を形成しないことが好ましい。すなわち、 $R_1$  と  $R_2$  及び  $R_2$  と  $R_3$  ;  $R_4$  と  $R_5$  及び  $R_5$  と  $R_6$  ;  $R_5$  と  $R_6$  及び  $R_6$  と  $R_7$  ;  $R_8$  と  $R_9$  及び  $R_9$  と  $R_{10}$  ; 及び  $R_9$  と  $R_{10}$  及び  $R_{10}$  と  $R_{11}$  がそれぞれ同時に該環構造を形成しないことが好ましい。

## 【0042】

50

本発明の一様態において、式(1)の化合物が前記置換もしくは無置換の環形成原子数3以上の環構造を2個以上有する場合、該2個以上の環構造は、環A、環B及び環Cから選ばれる2又は3つの環上に存在することが好ましい。該2個以上の環構造は同一でも異なってもよい。

【0043】

前記置換もしくは無置換の環形成原子数3以上の環構造の任意の置換基の詳細は式(D1)の $R_A$ 、 $R_B$ 及び $R_C$ に関して記載した前記置換基と同じである。

【0044】

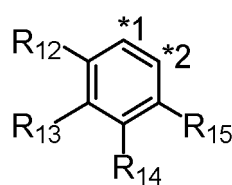
前記置換もしくは無置換の環形成原子数3以上の環構造の環形成原子数は、特に限定されないが、好ましくは3~7であり、より好ましくは5又は6である。

10

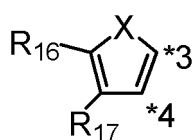
【0045】

前記置換もしくは無置換の環形成原子数3以上の環構造は、下記式(2)~(8)から選ばれるいずれかの環構造であることが好ましい。

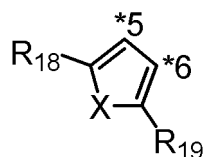
【化6】



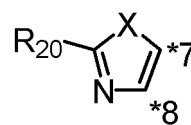
(2)



(3)

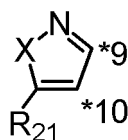


(4)

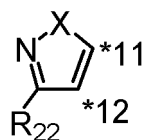


(5)

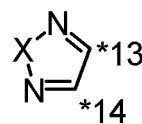
20



(6)



(7)



(8)

30

(式中、

\*1と\*2、\*3と\*4、\*5と\*6、\*7と\*8、\*9と\*10、\*11と\*12及び\*13と\*14のそれぞれは、 $R_n$ と $R_{n+1}$ が結合する前記2つの環形成炭素原子を表し、 $R_n$ は前記2つの環形成炭素原子のどちらに結合してもよい。

XはC( $R_{23}$ )( $R_{24}$ )、 $NR_{25}$ 、O、及びSから選ばれる。

$R_{12}$ ~ $R_{25}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は $R_A$ 、 $R_B$ 及び $R_C$ に関して記載した前記置換基と同じである。

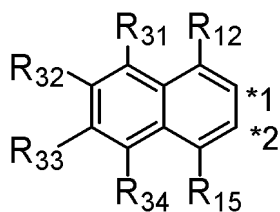
$R_{12}$ ~ $R_{15}$ から選ばれる隣接する2つ、 $R_{16}$ と $R_{17}$ 、及び $R_{23}$ と $R_{24}$ は互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよい。)

【0046】

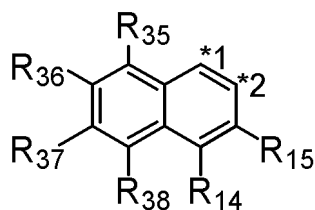
下記式(9)~(11)から選ばれる環構造も前記置換もしくは無置換の環形成原子数3以上の環構造として好ましい。

40

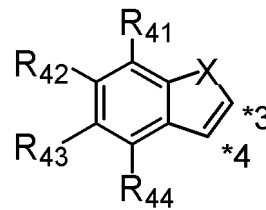
## 【化 7】



(9)



(10)



(11)

10

(式中、

\* 1 と \* 2 及び \* 3 と \* 4 は前記と同じである。

 $R_{12}$ 、 $R_{14}$ 、 $R_{15}$ 、及び X は前記と同じである。 $R_{31} \sim R_{38}$  及び  $R_{41} \sim R_{44}$  は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は式 (D 1) の  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した前記置換基と同じである。 $R_{12}$ 、 $R_{15}$ 、及び  $R_{31} \sim R_{34}$  から選ばれる隣接する 2 つ、 $R_{14}$ 、 $R_{15}$ 、及び  $R_{35} \sim R_{38}$  から選ばれる隣接する 2 つ、及び  $R_{41} \sim R_{44}$  から選ばれる隣接する 2 つは互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよい。)

## 【0047】

20

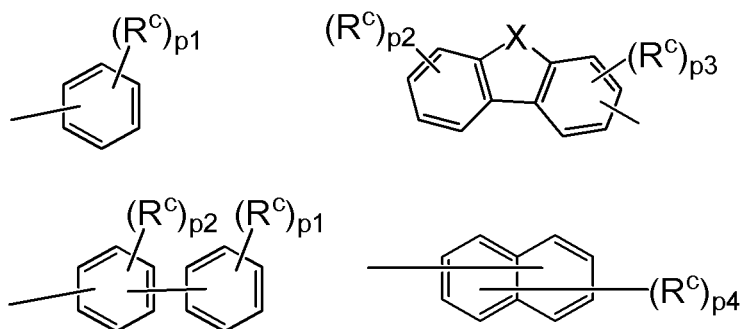
式 (1) の  $R_2$ 、 $R_4$ 、 $R_5$ 、 $R_{10}$ 、及び  $R_{11}$  の少なくとも 1 つ、好ましくは  $R_2$ 、 $R_5$ 、及び  $R_{10}$  の少なくとも 1 つ、さらに好ましくは  $R_2$  が前記置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造を形成しないことが好ましい。

## 【0048】

式 (1) において、前記環形成原子数 3 以上の環構造が有する任意の置換基が、それぞれ独立に置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、 $-N(R_{104})(R_{105})$  で表される基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基、又は下記の群から選択される基のいずれかであると好ましい。

## 【化 8】

30



40

(式中、

各  $R^C$  は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基式 (D 1) のは  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した前記置換基と同じである。

X は前記と同じである。

 $p_1$  は 0 ~ 5 の整数、 $p_2$  は 0 ~ 4 の整数、 $p_3$  は 0 ~ 3 の整数、 $p_4$  は 0 ~ 7 の整数である。)

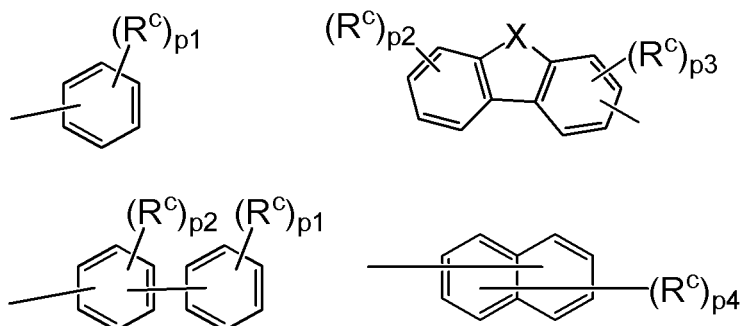
## 【0049】

式 (1) の前記置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造を形成しない  $R_1 \sim R_{11}$ 、及び式 (2) ~ (11) の  $R_{12} \sim R_{22}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$  及び  $R_{41} \sim R_{44}$  が、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、 -

50

$N(R_{104})(R_{105})$  で表される基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基、又は下記の群から選択される基のいずれかであると好ましい。

【化 9】



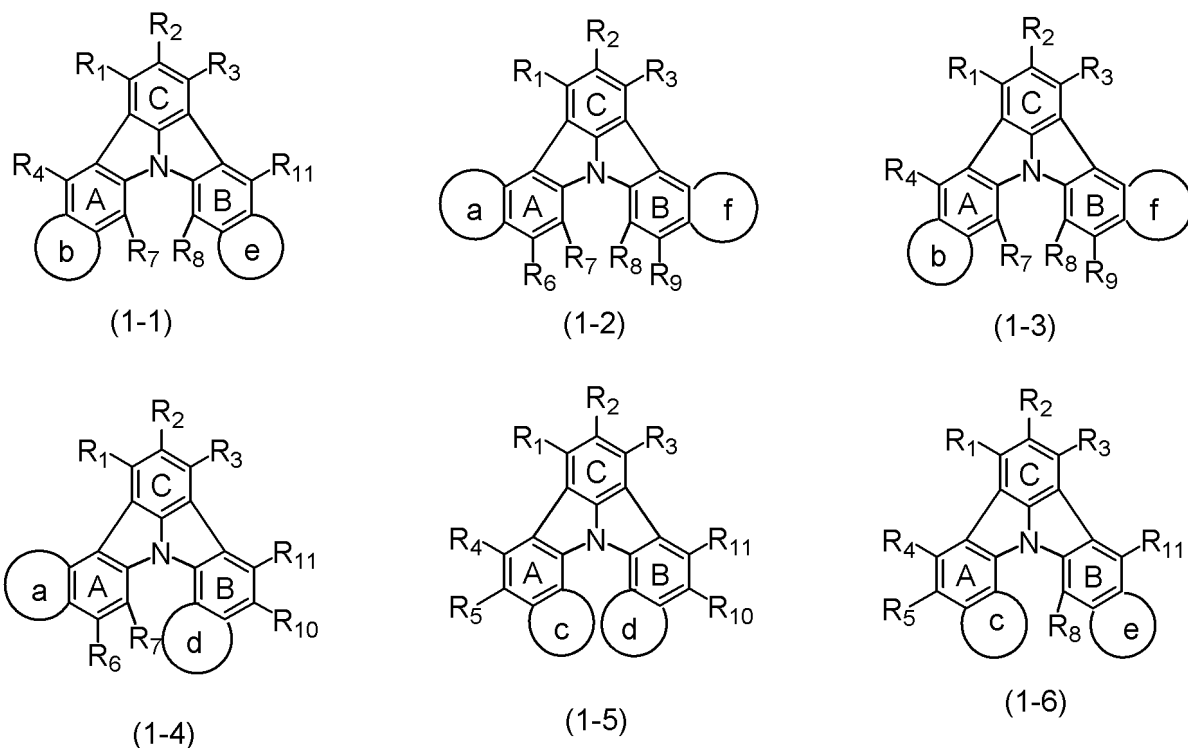
10

(式中、 $R^C$ 、 $X$ 、 $p1$ 、 $p2$ 、 $p3$ 、及び  $p4$  は前記したとおりである。)

【0050】

式(1)の化合物は、下記式(1-1) ~ (1-6)のいずれかで表されると好ましく、式(1-1) ~ (1-3)及び(1-5)のいずれかで表されるとより好ましく、式(1-1)又は(1-5)で表されるとさらに好ましい。

【化10】



20

30

40

(式中、

$R_1 \sim R_{11}$  は前記と同じであり、

環 a ~ f は、それぞれ独立に、前記の置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造である。)

【0051】

式(1-1) ~ (1-6)において、前記環形成原子数 3 以上の環構造上の隣接する 2 つの任意の置換基は互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよい。

前記環 a ~ f の環形成原子数は、特に限定されないが、好ましくは 3 ~ 7、より好ましくは 5 又は 6 である。前記環 a ~ f は、それぞれ独立に、式(2) ~ (11)から選ばれ

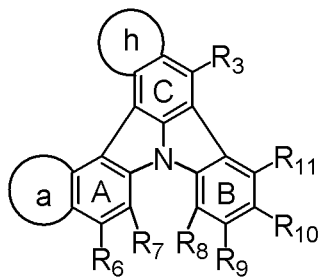
50

るいずれかの環であることが好ましい。

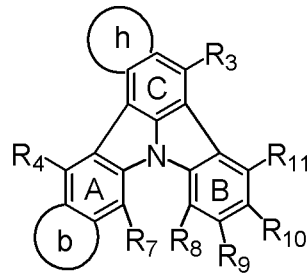
【 0 0 5 2 】

式 ( 1 ) の化合物は、下記式 ( 2 - 1 ) ~ ( 2 - 6 ) のいずれかで表されると好ましく、式 ( 2 - 2 ) 又は ( 2 - 5 ) で表されるとより好ましい。

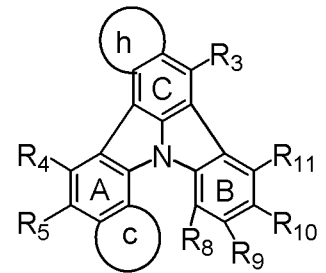
【 化 1 1 】



(2-1)

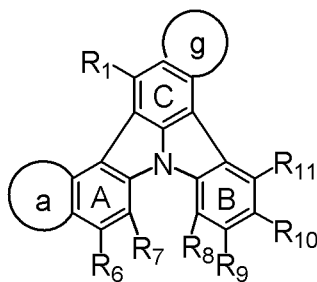


(2-2)

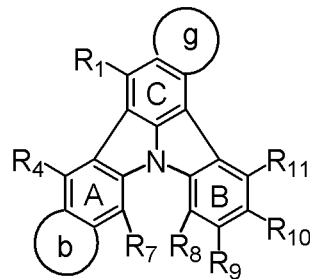


(2-3)

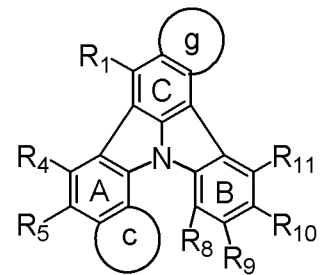
10



(2-4)



(2-5)



(2-6)

20

( 式中、

R<sub>1</sub> 及び R<sub>3</sub> ~ R<sub>11</sub> は前記と同じであり、

環 a ~ c は前記と同じであり、環 g 及び h は、それぞれ独立に、前記の置換もしくは無置換の環形成原子数 3 以上の環構造である。 )

30

【 0 0 5 3 】

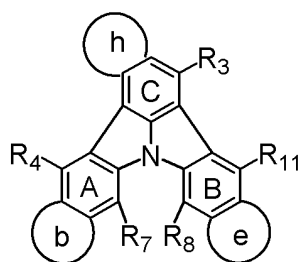
式 ( 2 - 1 ) ~ ( 2 - 6 ) において、前記環形成原子数 3 以上の環構造上の隣接する 2 つの任意の置換基は互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよい。

前記環 a ~ c、g、及び h の環形成原子数は、特に限定されないが、好ましくは 3 ~ 7、より好ましくは 5 又は 6 である。前記環 a ~ c、g、及び h は、それぞれ独立に、式 ( 2 ) ~ ( 1 1 ) から選ばれるいずれかの環であることが好ましい。

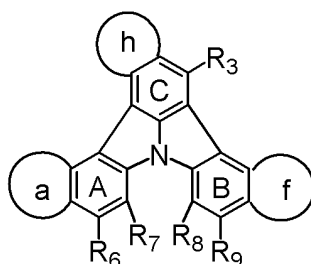
【 0 0 5 4 】

式 ( 1 ) の化合物は、下記式 ( 3 - 1 ) ~ ( 3 - 9 ) のいずれかで表されると好ましく、式 ( 3 - 1 ) で表されるとより好ましい。

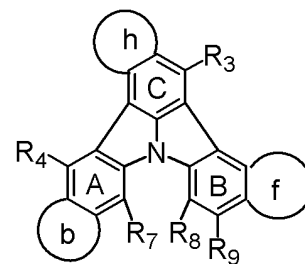
## 【化 1 2】



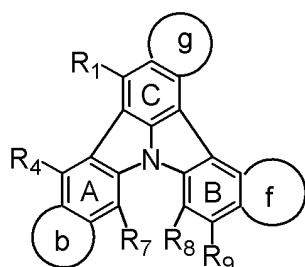
(3-1)



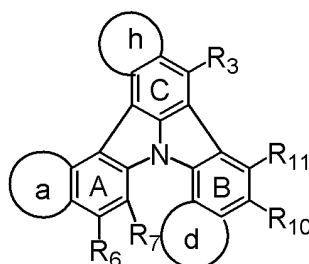
(3-2)



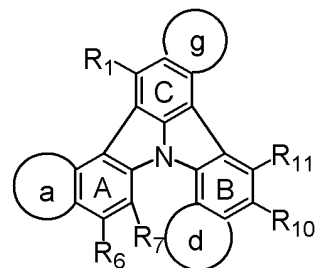
(3-3)



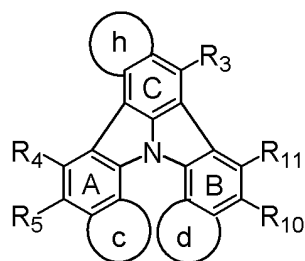
(3-4)



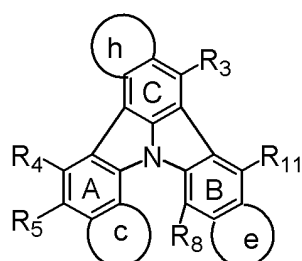
(3-5)



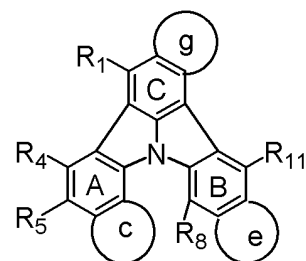
(3-6)



(3-7)



(3-8)



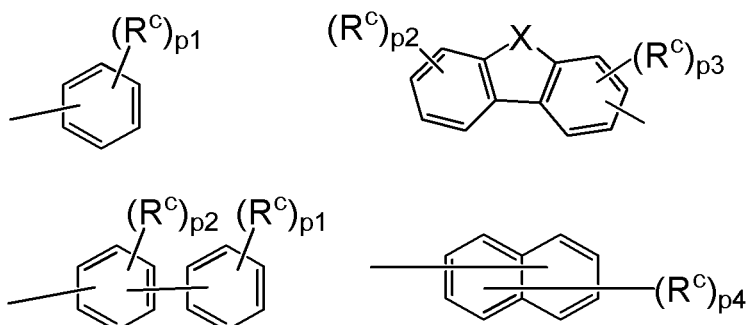
(3-9)

(式中、 $R_1$ 、 $R_3 \sim R_{11}$ 、及び環 a ~ h は前記と同じである。)

## 【0055】

式(1-1)~(1-6)、(2-1)~(2-6)及び(3-1)~(3-9)において、環 a ~ h が有する任意の置換基が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、 $-N(R_{104})(R_{105})$  で表される基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基、又は下記の群から選択される基のいずれかであると好ましい。

## 【化 1 3】



10

20

30

40

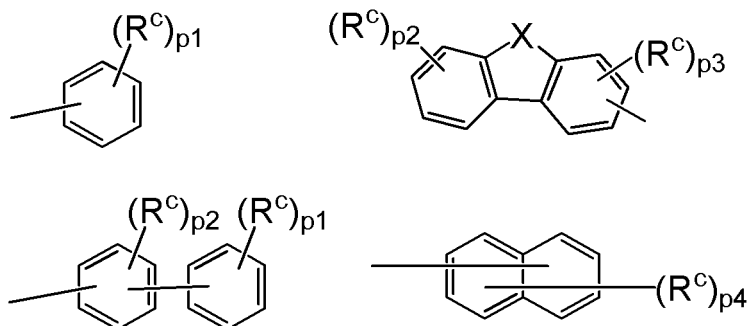
50

(式中、 $R^c$ 、 $X$ 、 $p_1$ 、 $p_2$ 、 $p_3$ 、及び $p_4$ は前記したとおりである。)

【0056】

式(1-1)~(1-6)、(2-1)~(2-6)及び(3-1)~(3-9)において、環 $a \sim h$ を形成しない $R_1 \sim R_{11}$ が、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~20のアルキル基、 $-N(R_{104})(R_{105})$ で表される基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~50のヘテロアリール基、又は下記の群から選択される基のいずれかであると好ましい。

【化14】



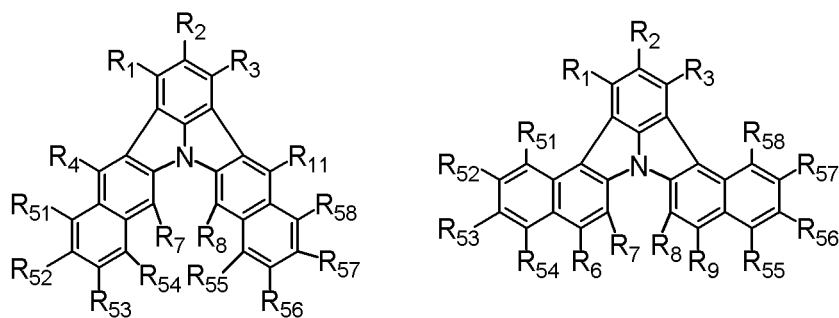
10

(式中、 $R^c$ 、 $X$ 、 $p_1$ 、 $p_2$ 、 $p_3$ 、及び $p_4$ は前記したとおりである。)

【0057】

式(1)の化合物は、下記式(4-1)~(4-4)のいずれかで表されると好ましい。

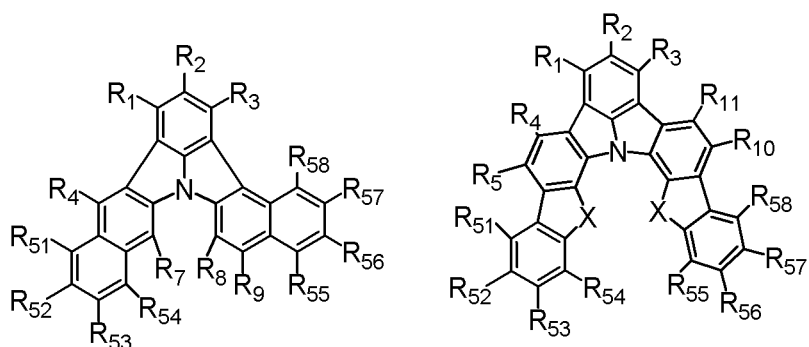
【化15】



(4-1)

(4-2)

30



(4-3)

(4-4)

40

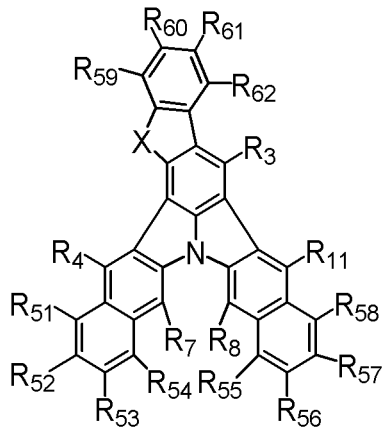
(式中、 $R_1 \sim R_{11}$ 及び $X$ は前記と同じであり、 $R_{51} \sim R_{58}$ は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は式(D1)の $R_A$ 、 $R_B$ 及び $R_C$ に関して記載した前記置換基と同じである。)

50

【 0 0 5 8 】

前記式 ( 1 ) の化合物は、下記式 ( 5 - 1 ) で表されると好ましい。

【 化 1 6 】



(5-1)

10

( 式中、

$R_3$ 、 $R_4$ 、 $R_7$ 、 $R_8$ 、 $R_{11}$  及び  $R_{51} \sim R_{58}$  は前記と同じであり、

20

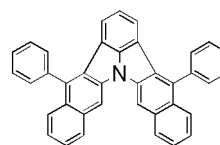
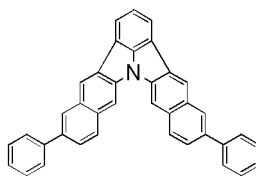
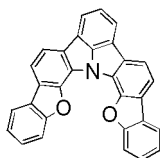
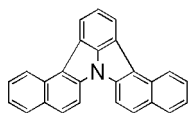
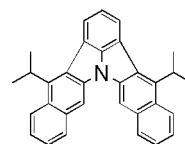
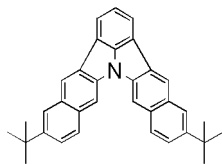
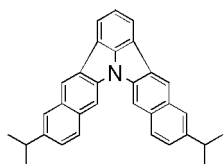
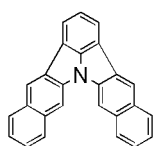
$R_{59} \sim R_{62}$  は、それぞれ独立に、水素原子又は置換基であり、該置換基は式 ( D 1 ) の  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した前記置換基と同じである。 )

【 0 0 5 9 】

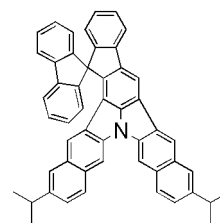
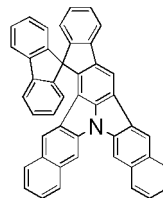
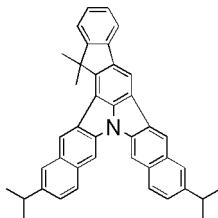
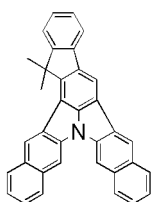
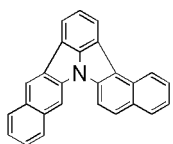
本発明で使用する式 ( D 1 ) のドーパント材料の具体例を以下に挙げるが、特にこれらに制限されるものではない。下記具体例中、Phはフェニル基、Dは重水素原子を示す。

【 0 0 6 0 】

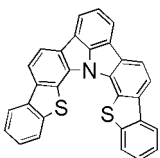
【化 1 7】



10

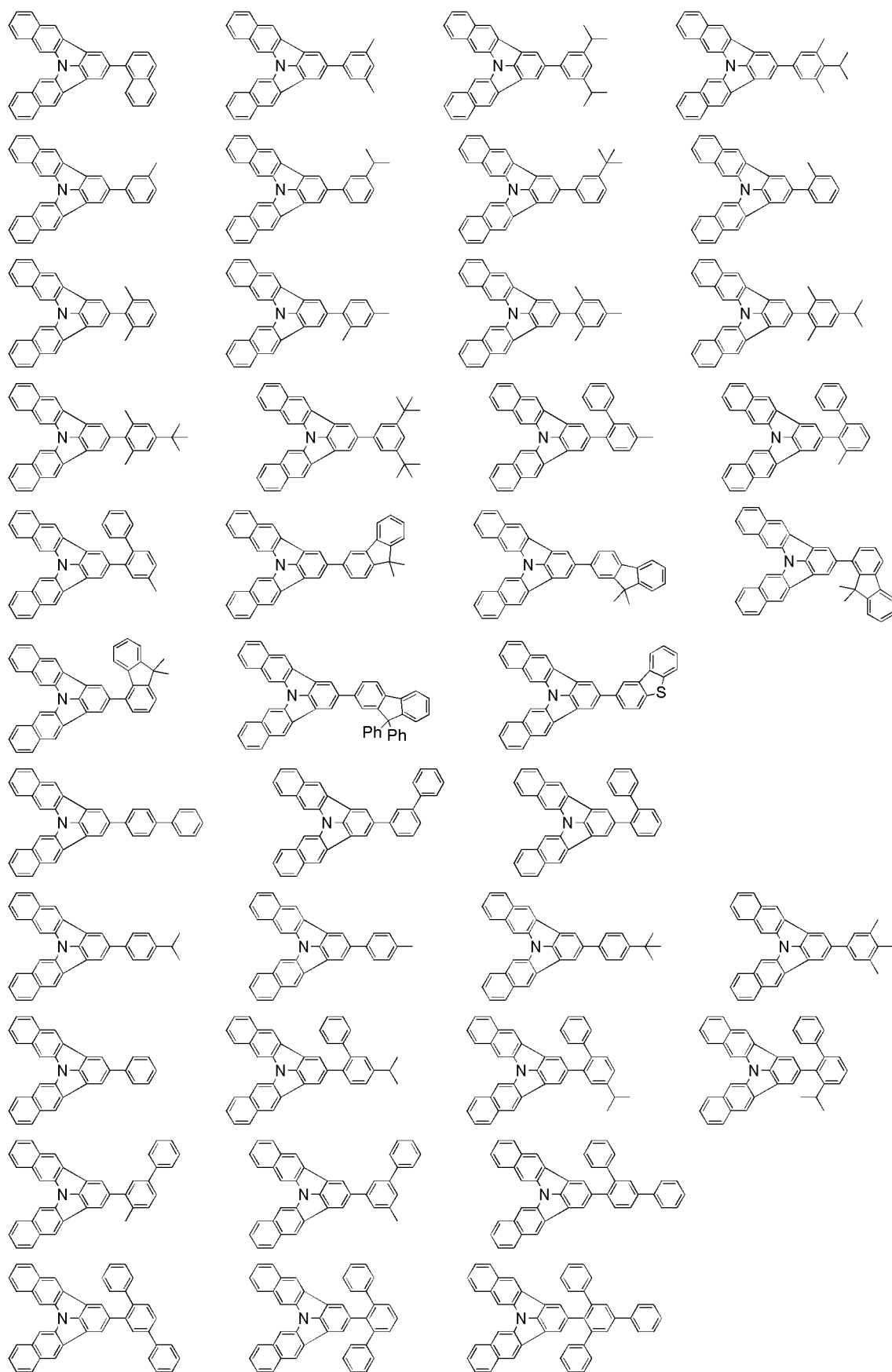


20



【 0 0 6 1】

## 【化 1 8】



10

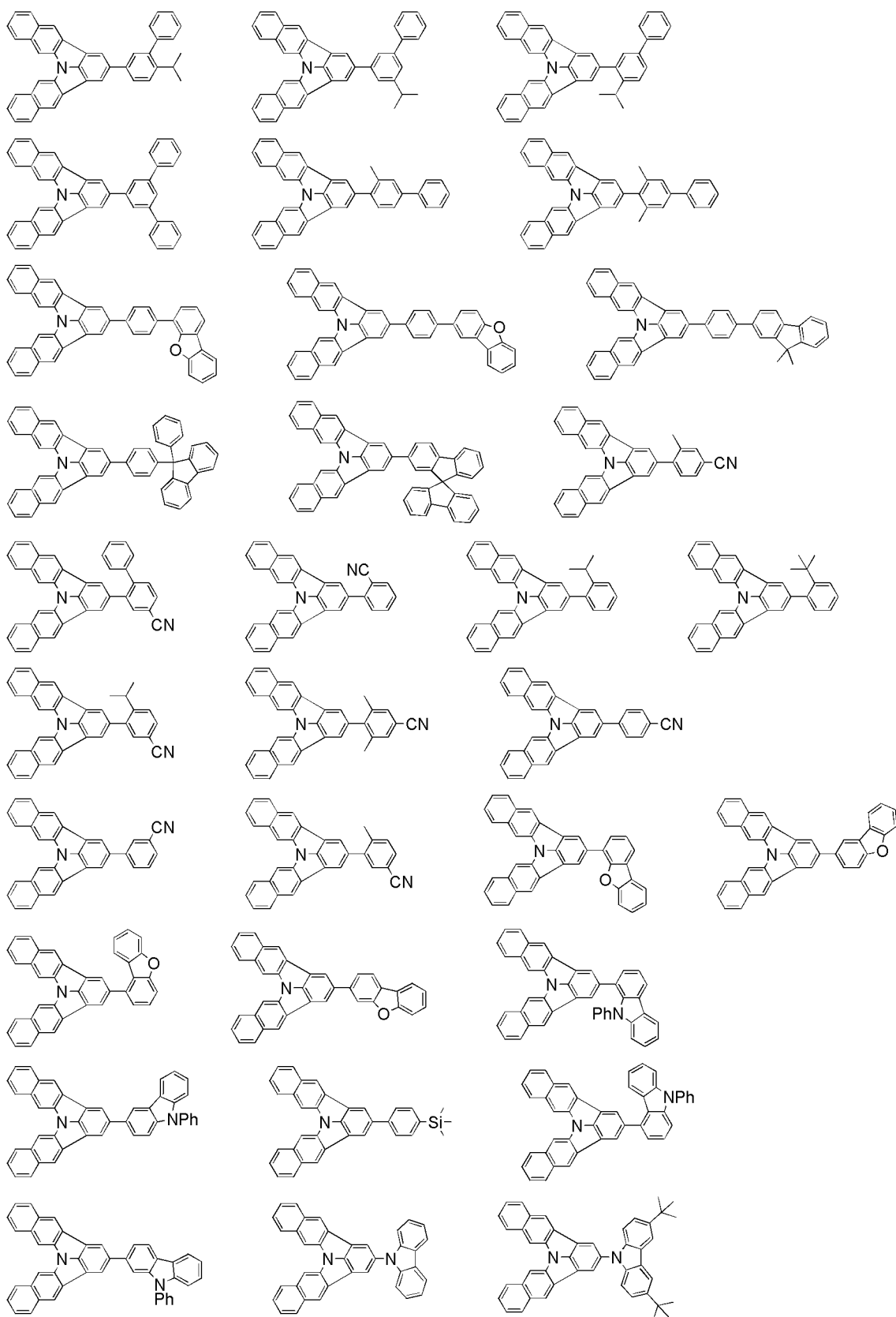
20

30

40

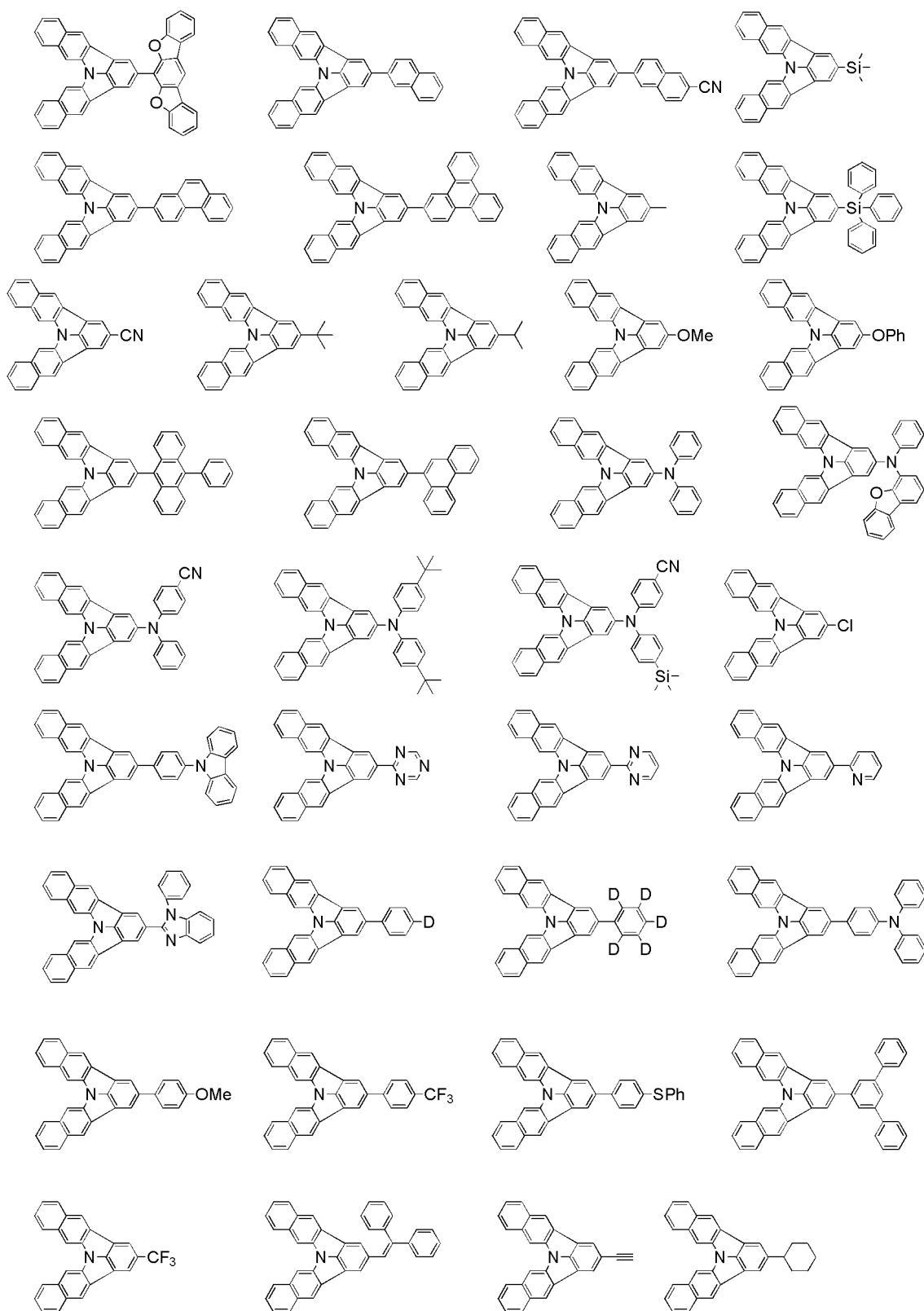
## 【 0 0 6 2】

## 【化 19】



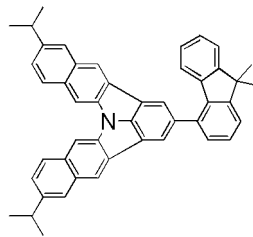
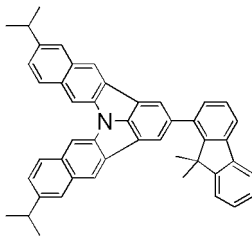
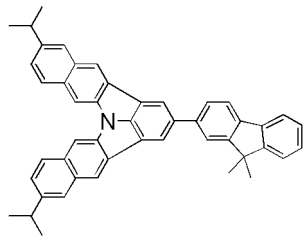
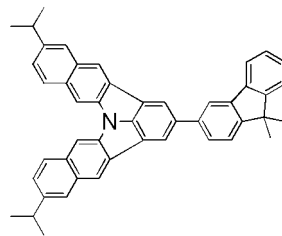
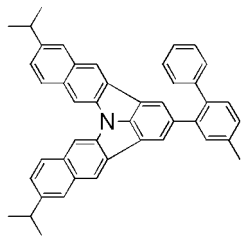
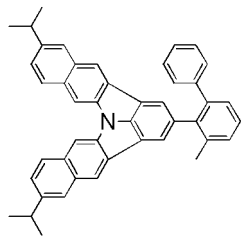
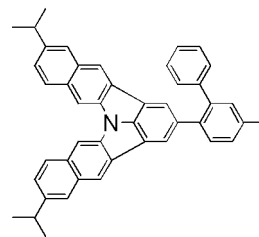
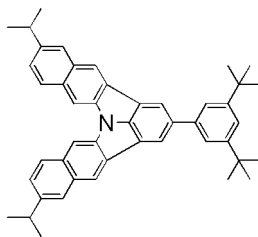
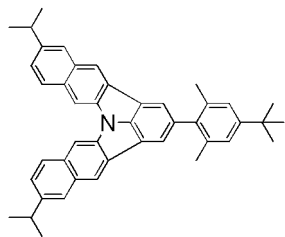
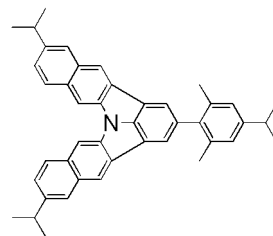
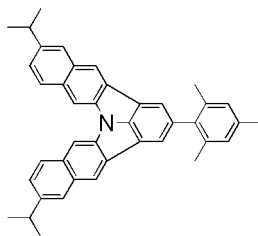
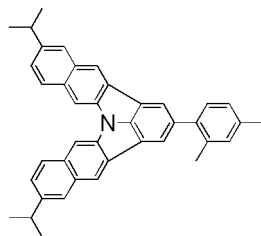
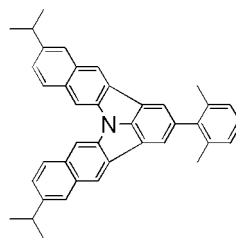
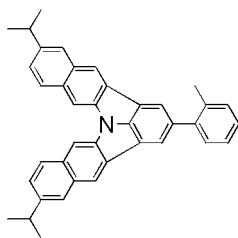
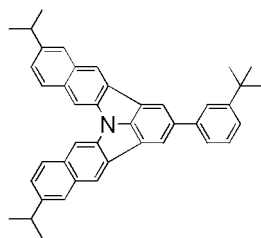
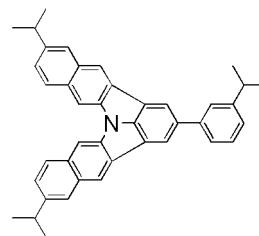
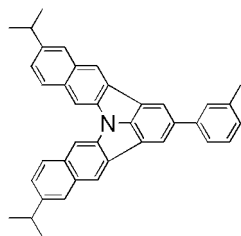
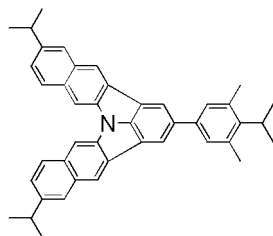
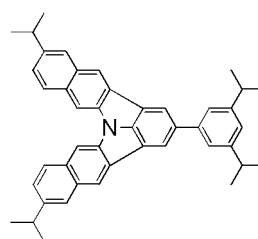
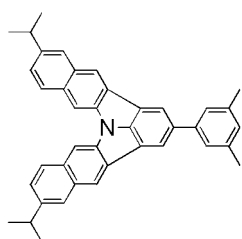
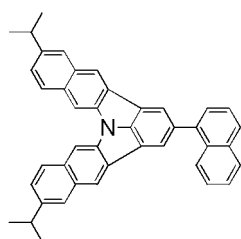
## 【 0 0 6 3 】

## 【化 20】



## 【0064】

## 【化 2 1】



【 0 0 6 5 】

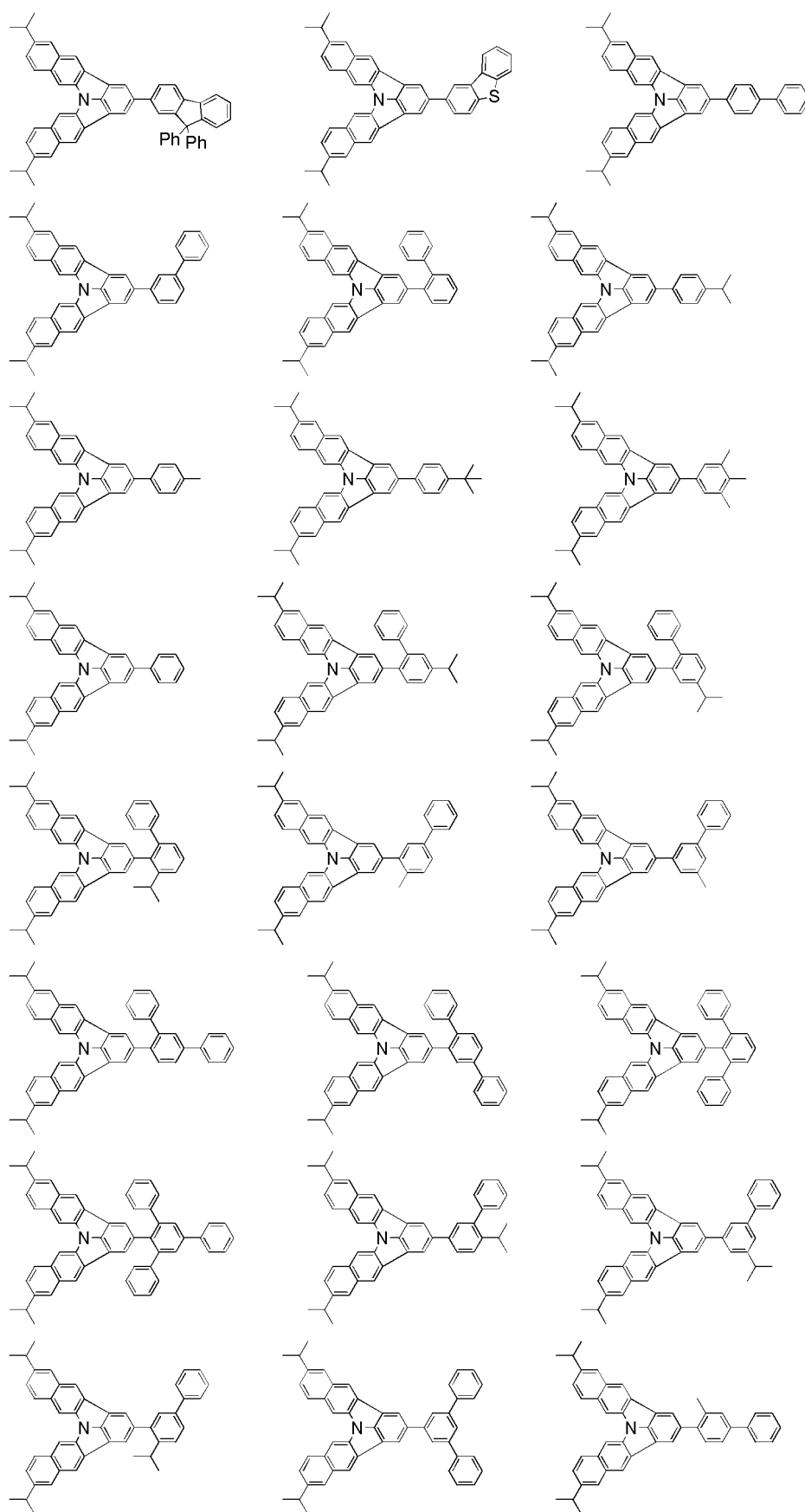
10

20

30

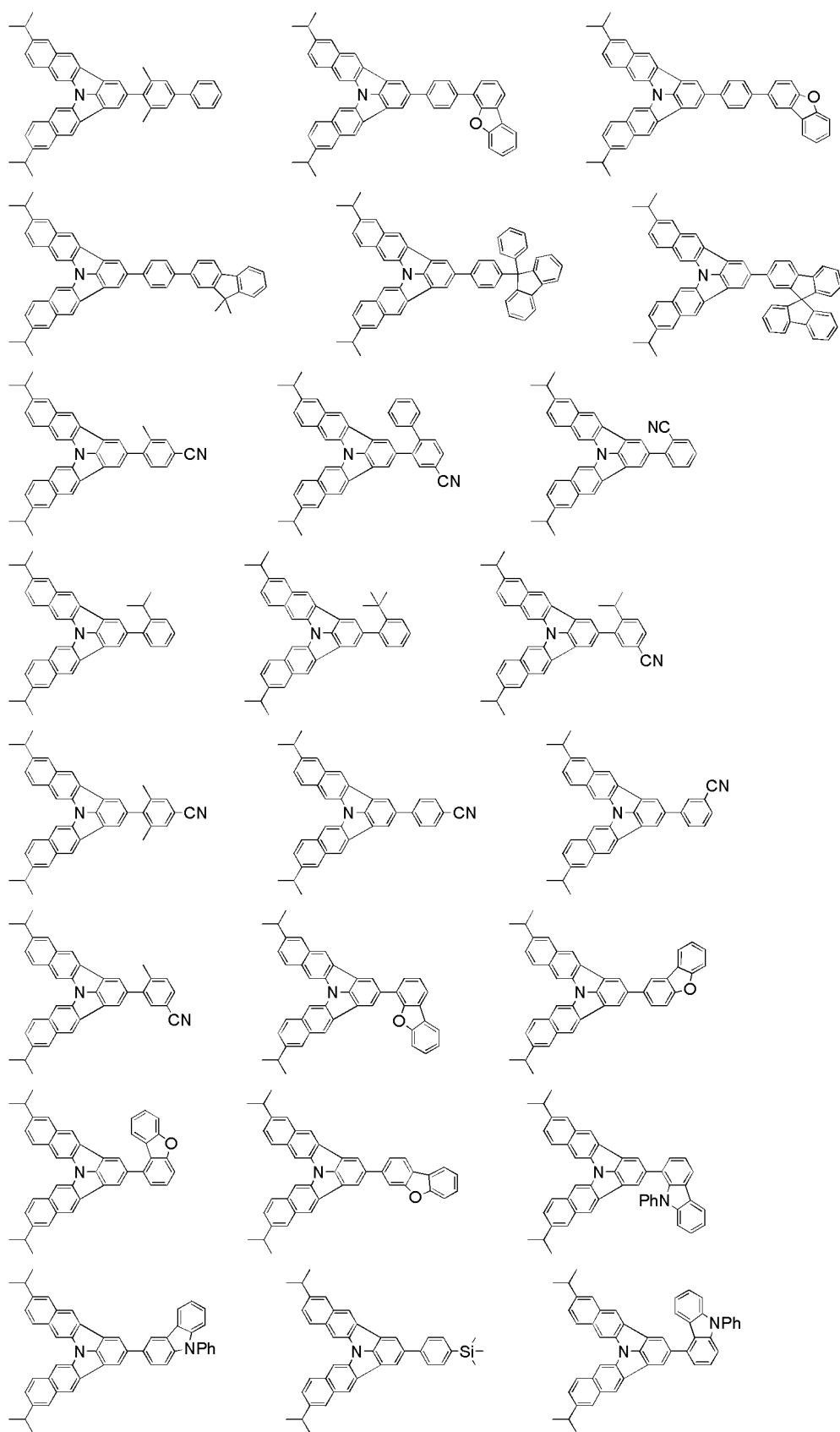
40

## 【化 2 2】



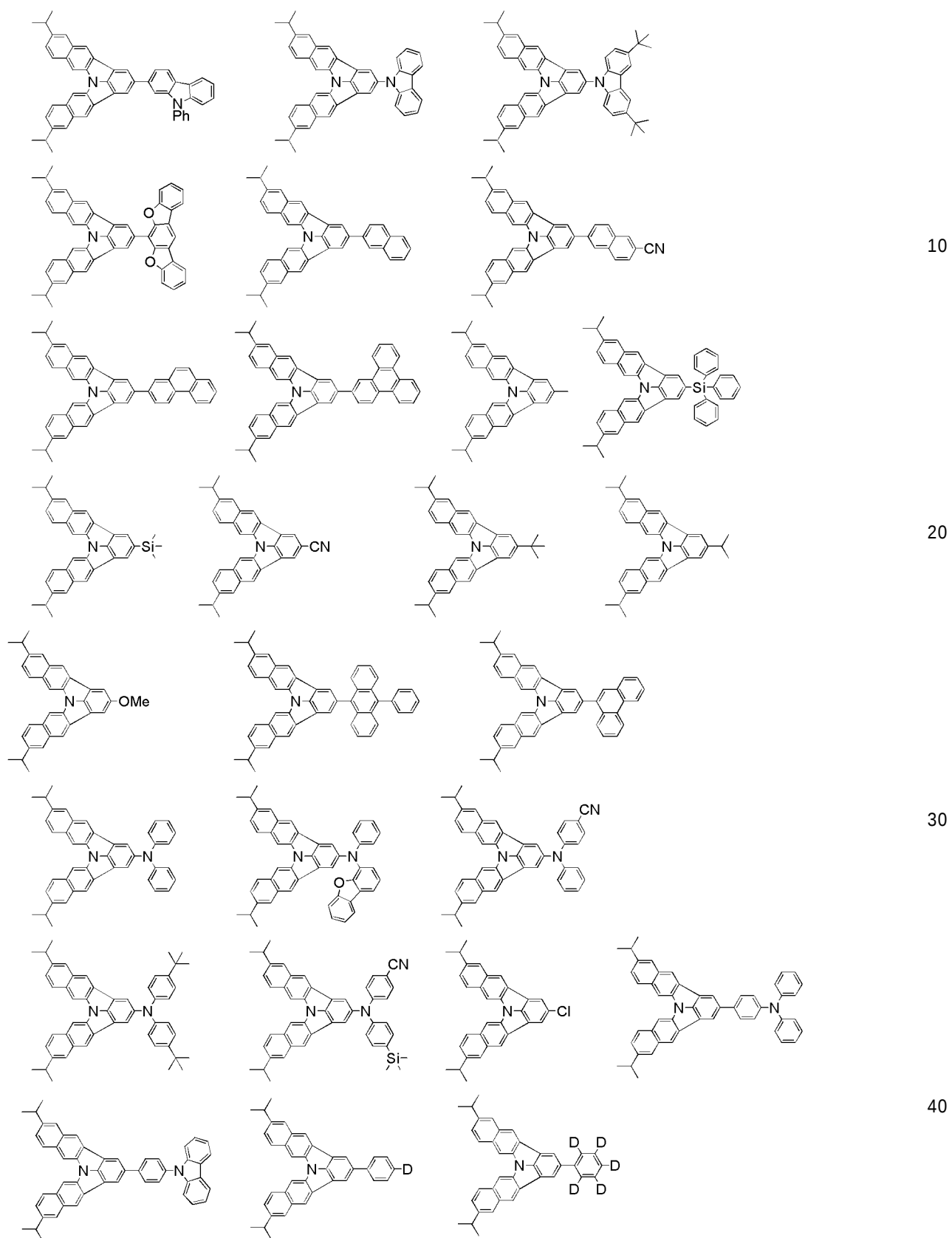
【 0 0 6 6 】

## 【化 2 3】



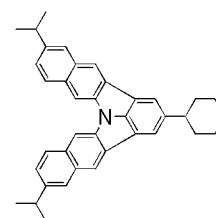
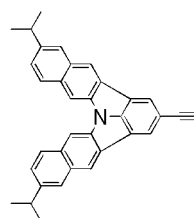
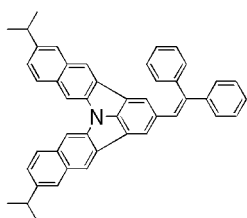
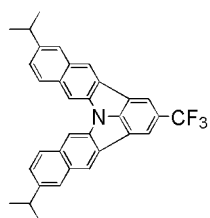
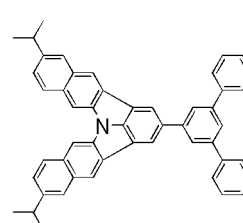
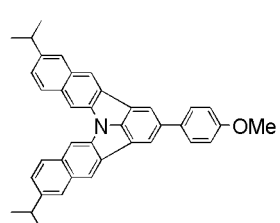
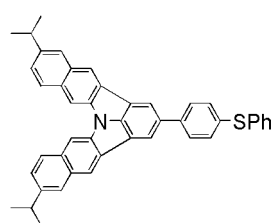
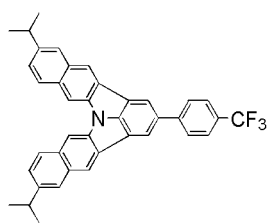
## 【 0 0 6 7 】

## 【化 2 4】



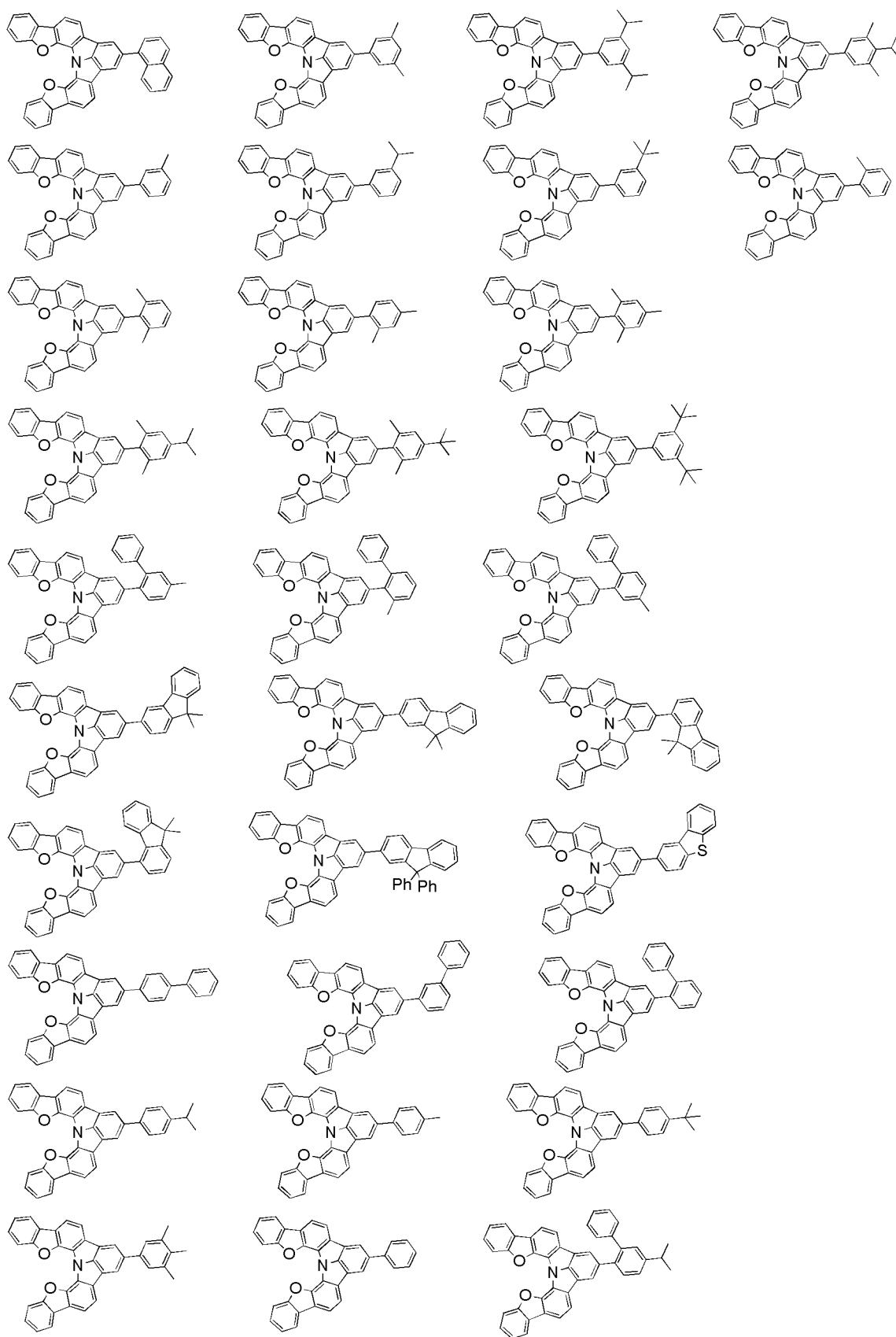
## 【 0 0 6 8 】

## 【化 2 5】



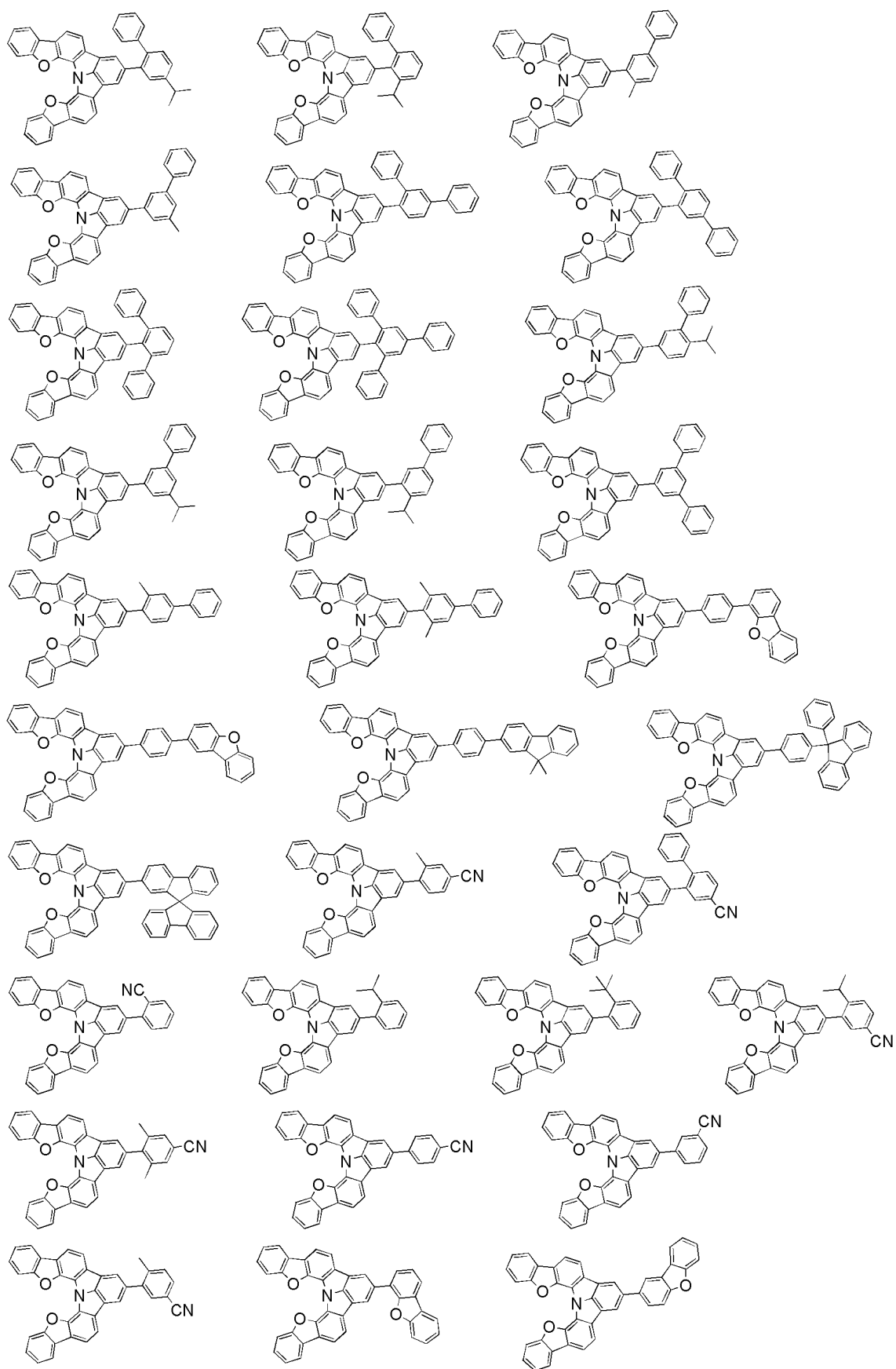
## 【 0 0 6 9 】

## 【化 26】



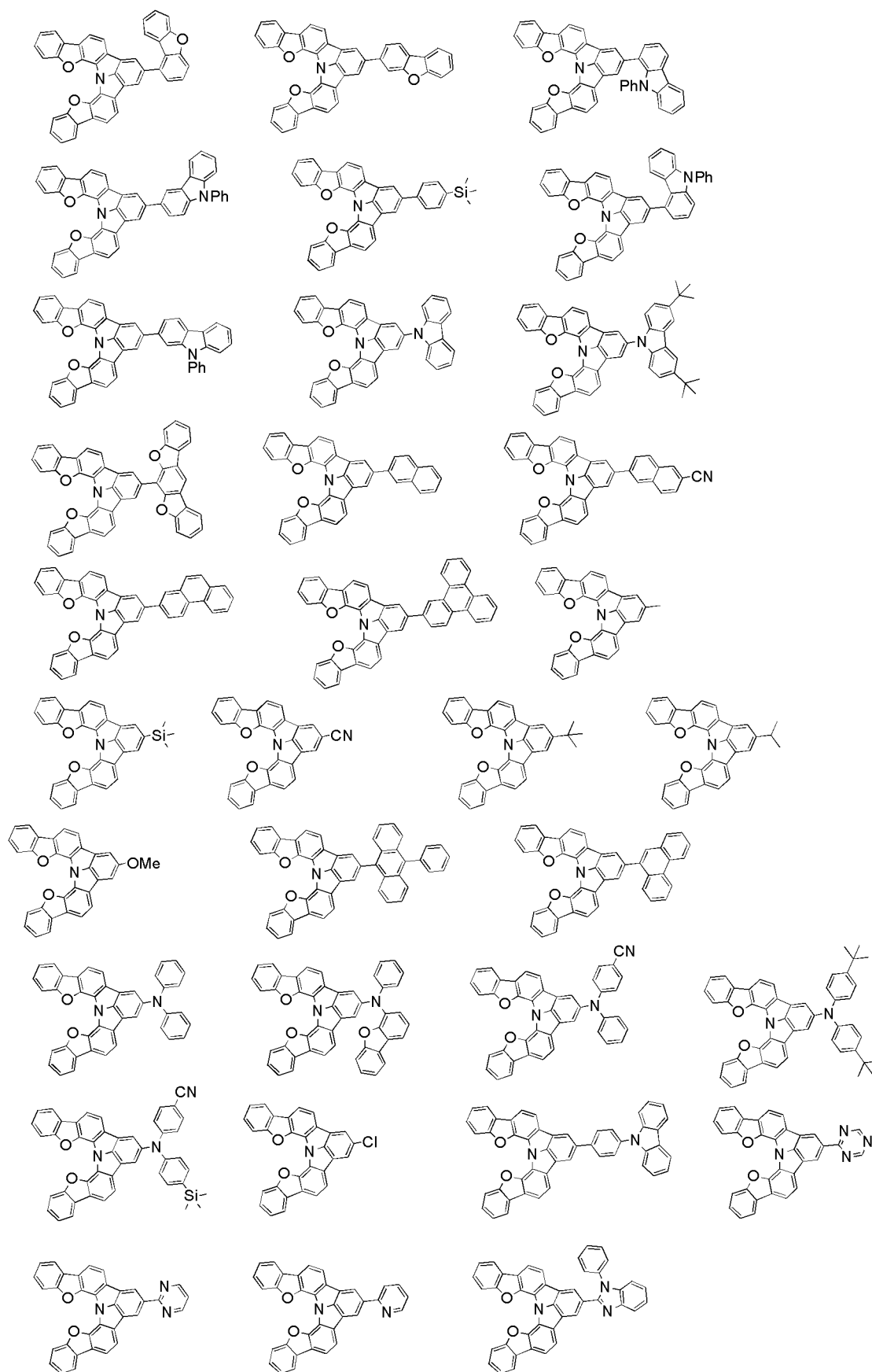
## 【 0 0 7 0 】

## 【化 27】



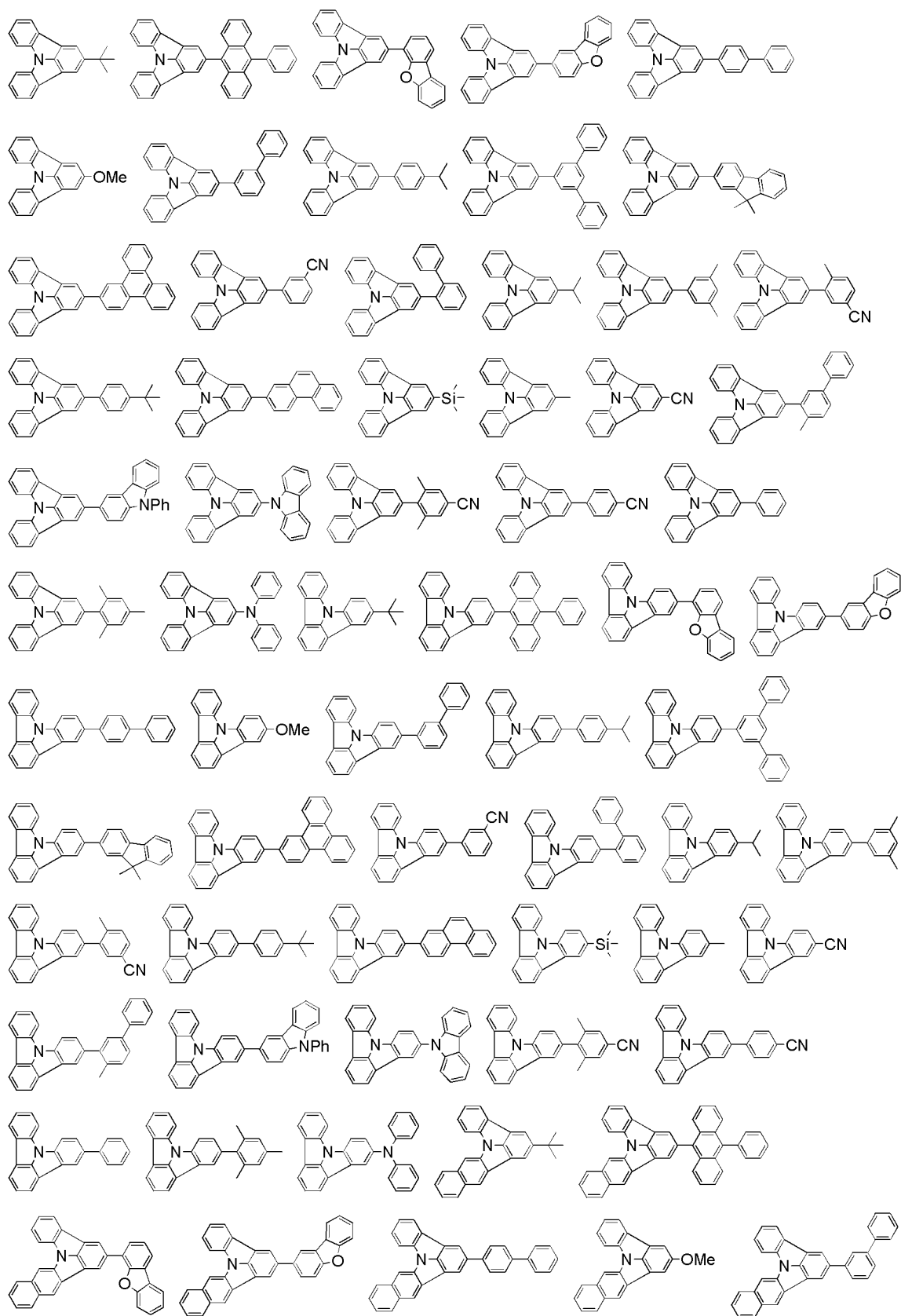
## 【 0 0 7 1 】

## 【化 28】



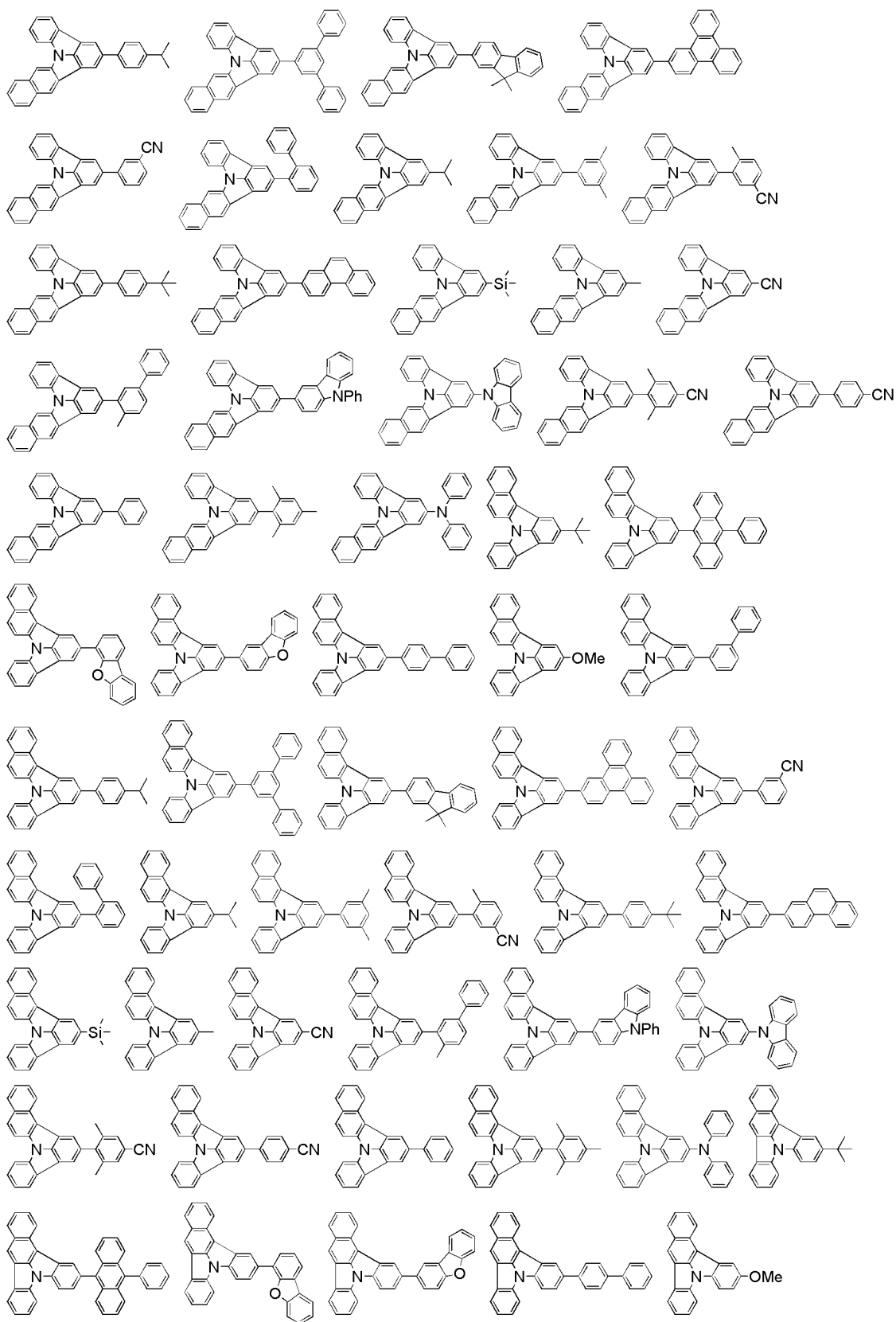
## 【 0 0 7 2 】

## 【化 2 9】



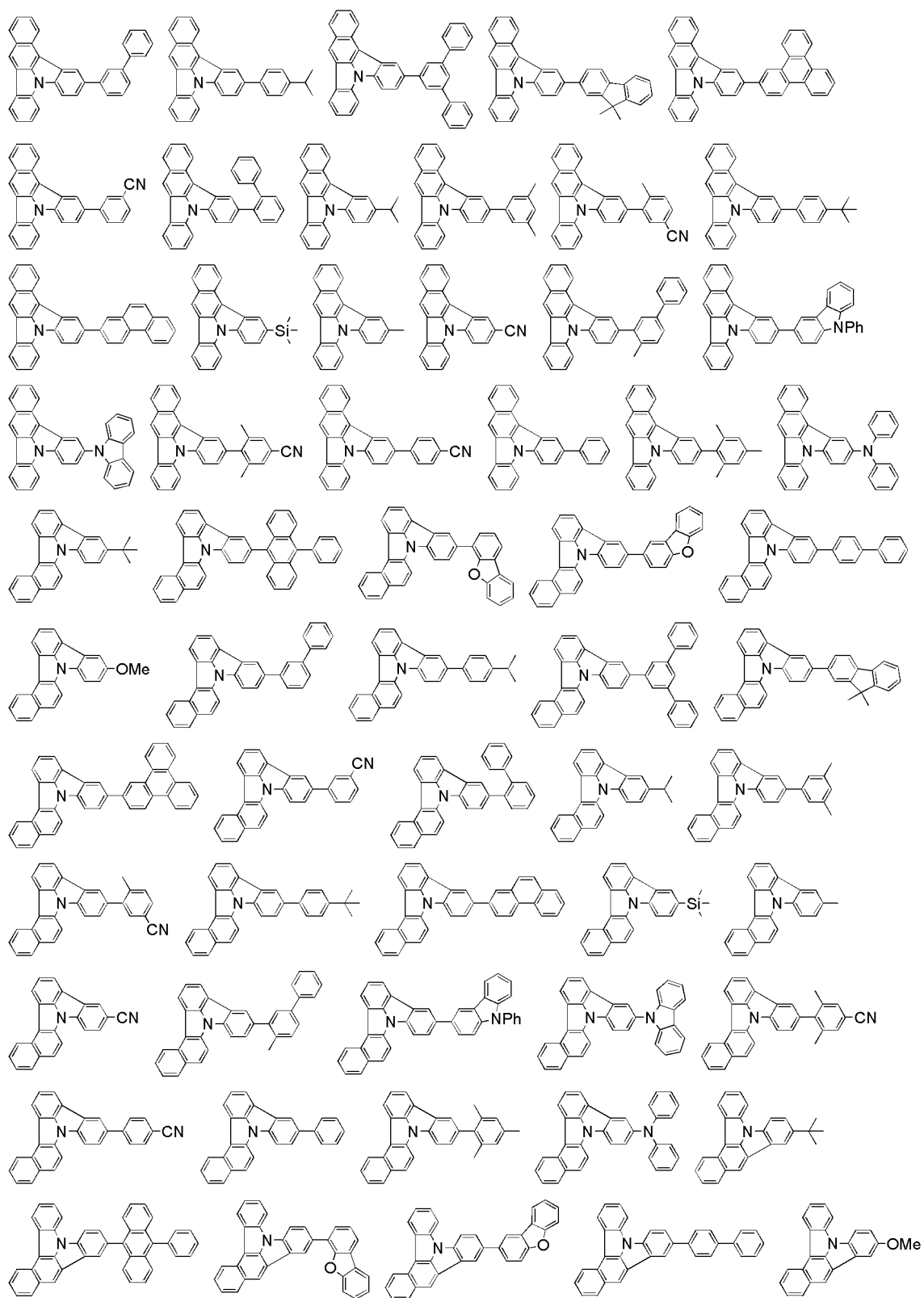
## 【 0 0 7 3 】

【化 3 0】



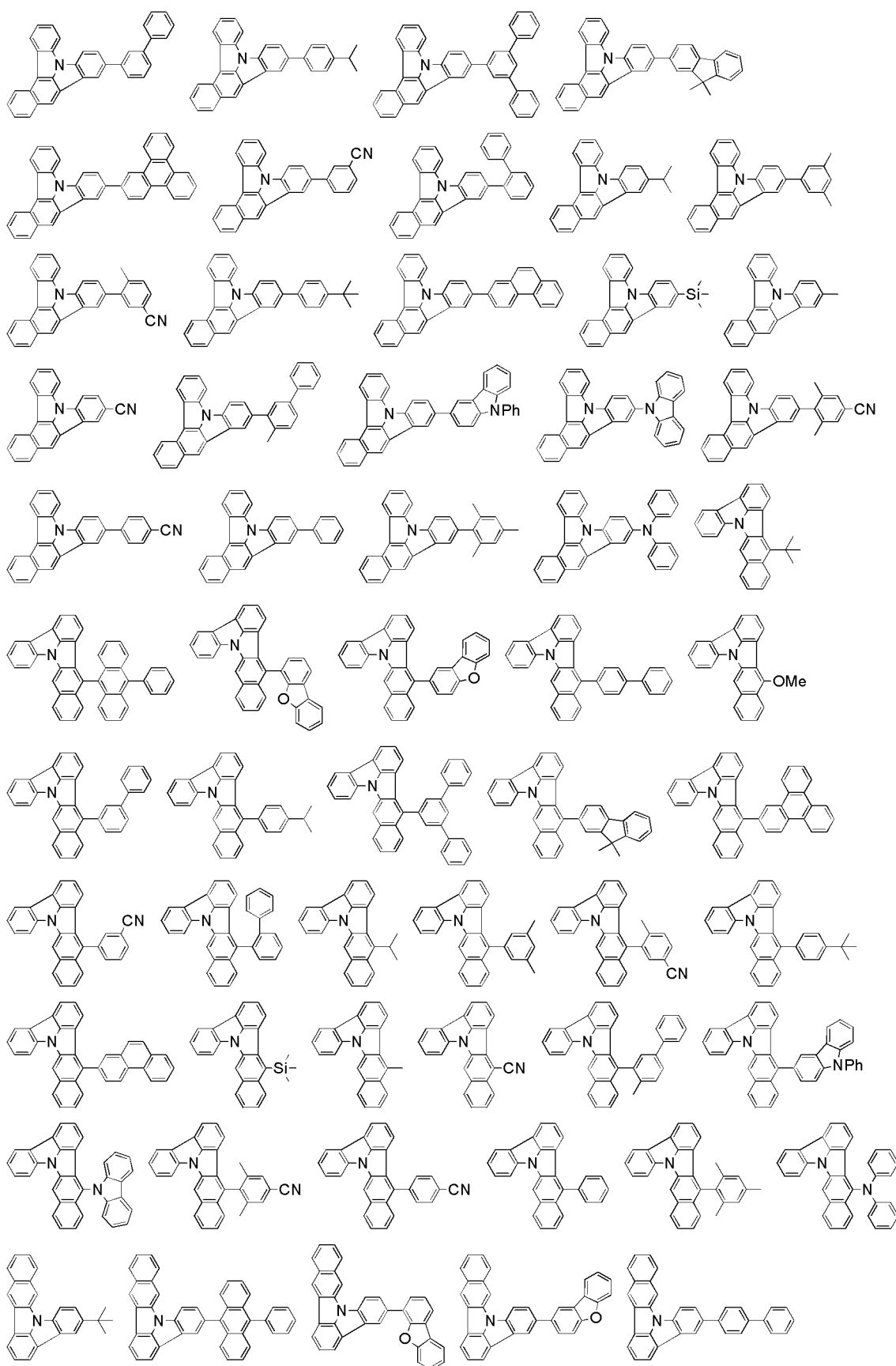
【 0 0 7 4】

## 【化 3 1】



## 【 0 0 7 5 】

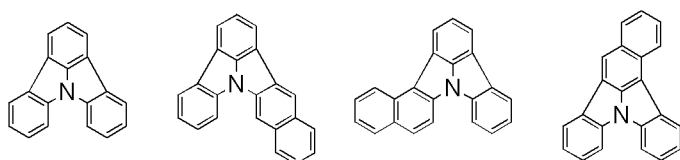
## 【化 3 2】



## 【 0 0 7 6 】

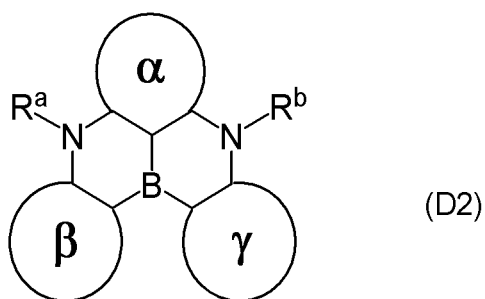
20

## 【化 3 4】



ドーパント材料 2 は下記式 ( D 2 ) で表されるホウ素含有化合物である。

【化 3 5】



40

環  $\alpha$ 、環  $\beta$ 、及び環  $\gamma$  は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 の芳香族複素環である。

R<sup>a</sup> 及び R<sup>b</sup> は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基、又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基である。

R<sup>a</sup> は環  $\alpha$  及び環  $\beta$  の一方又は双方に、直接又は連結基を介して結合してもよい。

R<sup>b</sup> は環  $\alpha$  及び環  $\gamma$  の一方又は双方に、直接又は連結基を介して結合してもよい。）

50

## 【0079】

前記環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 の芳香族炭化水素環としては、例えば、ベンゼン環、ビフェニル環、ナフタレン環、ターフェニル環 (m-ターフェニル環、o-ターフェニル環、p-ターフェニル環)、アントラセン環、アセナフチレン環、フルオレン環、フェナレン環、フェナントレン環、トリフェニレン環、フルオランテン環、ピレン環、ナфтаセン環、ペリレン環、ペンタセン環などが挙げられる。

## 【0080】

前記環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 18、さらに好ましくは 5 ~ 13 の芳香族複素環は少なくとも 1 個、好ましくは 1 ~ 5 個の環形成ヘテロ原子を含む。該環形成ヘテロ原子は、例えば、窒素原子、硫黄原子及び酸素原子から選ばれる。該芳香族複素環としては、例えば、ピロール環、オキサゾール環、イソオキサゾール環、チアゾール環、イソチアゾール環、イミダゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、トリアゾール環、テトラゾール環、ピラゾール環、ピリジン環、ピリミジン環、ピリダジン環、ピラジン環、トリアジン環、インドール環、イソインドール環、1H-インダゾール環、ベンゾイミダゾール環、ベンゾオキサゾール環、ベンゾチアゾール環、1H-ベンゾトリアゾール環、キノリン環、イソキノリン環、シンノリン環、キナゾリン環、キノキサリン環、フタラジン環、ナフチリジン環、プリン環、プテリジン環、カルバゾール環、アクリジン環、フェノキサチン環、フェノキサジン環、フェノチアジン環、フェナジン環、インドリジン環、フラン環、ベンゾフラン環、イソベンゾフラン環、ジベンゾフラン環、チオフエン環、ベンゾチオフエン環、ジベンゾチオフエン環、フラザン環、オキサジアゾール環、チアントレン環などが挙げられる。

## 【0081】

前記環  $\alpha$ 、環  $\beta$ 、及び環  $\gamma$  は 5 員環又は 6 員環であることが好ましい。

## 【0082】

前記環  $\alpha$ 、環  $\beta$ 、及び環  $\gamma$  の任意の置換基は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 のアリール基；置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 18、さらに好ましくは 5 ~ 13 のヘテロアリール基；置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 のアリール基及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 18、さらに好ましくは 5 ~ 13 のヘテロアリール基から選ばれる置換基を有するジアリールアミノ基、ジヘテロアリールアミノ基、又はアリールヘテロアリールアミノ基；置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 6 のアルキル基；置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 6 のアルコキシ基；及び置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 のアリールオキシ基から選ばれる。

上記任意の置換基は、環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 のアリール基；環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 18、さらに好ましくは 5 ~ 13 のヘテロアリール基；又は炭素数 1 ~ 20、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 6 のアルキル基で置換されていてもよい。

## 【0083】

前記環  $\alpha$ 、環  $\beta$ 、及び環  $\gamma$  上の隣接する 2 つの置換基は互いに結合して置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 の芳香族炭化水素環又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 18、さらに好ましくは 5 ~ 13 の芳香族複素環を形成してもよい。該芳香族炭化水素環及び芳香族複素環の詳細は環  $\alpha$ 、環  $\beta$ 、及び環  $\gamma$  に関して記載したとおりである。

このようにしてさらに形成される環の任意の置換基は、環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 のアリール基；環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 18、さらに好ましくは 5 ~ 13 のヘテロアリール基；及び炭素数 1 ~ 20、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 6 のアルキル基から選ばれる。

【0084】

$R^a$  及び  $R^b$  は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 18、さらに好ましくは 5 ~ 13 のヘテロアリール基、又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 6 のアルキル基である。

10

【0085】

環  $\alpha$ 、環  $\beta$ 、及び環  $\gamma$  に関して記載したアリール基、ヘテロアリール基、アルキル基、アルコキシ基、及びアリールオキシ基の詳細、及び  $R^a$  及び  $R^b$  のアリール基、ヘテロアリール基、及びアルキル基の詳細は、式 (D1) の  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した対応する基と同じである。

【0086】

前記連結基は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、又は  $-CR^cR^d-$  であり、 $R^c$  及び  $R^d$  は、それぞれ独立に、水素原子又は炭素数 1 ~ 20、好ましくは 1 ~ 10、より好ましくは 1 ~ 6 のアルキル基である。

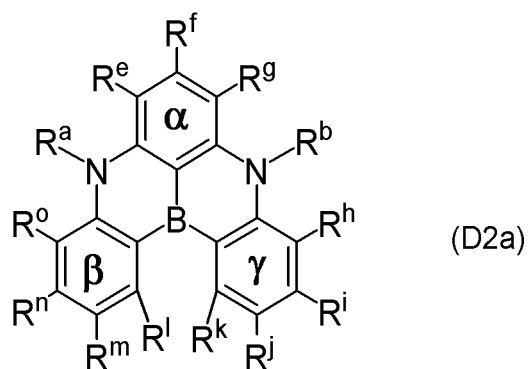
20

該アルキル基の詳細は、式 (D1) の  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載したアルキル基と同じである。

【0087】

式 (D2) は好ましくは下記式 (D2a) で表される。

【化36】



30

【0088】

式 (D2a) において、 $R^a$  及び  $R^b$  は前記と同じである。

$R^e \sim R^o$  は、それぞれ独立に、水素又は環  $\alpha$ 、環  $\beta$ 、及び環  $\gamma$  に関して記載した任意の置換基である。

$R^e \sim R^g$  から選ばれる隣接する 2 つ、 $R^h \sim R^k$  から選ばれる隣接する 2 つ、及び  $R^l \sim R^o$  から選ばれる隣接する 2 つは互いに結合して置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 の芳香族炭化水素環又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 18、さらに好ましくは 5 ~ 13 の芳香族複素環を形成してもよい。

40

このようにして形成される環の詳細は、環  $\alpha$ 、環  $\beta$ 、及び環  $\gamma$  上の隣接する 2 つの置換基が互いに結合して形成する環と同じである。

【0089】

ドーパント材料 2 は、式 (D2) で表される単位構造、好ましくは式 (D2a) で表される単位構造を含む多量体、好ましくは 2 ~ 6 量体、より好ましくは 2 ~ 3 量体、さらに

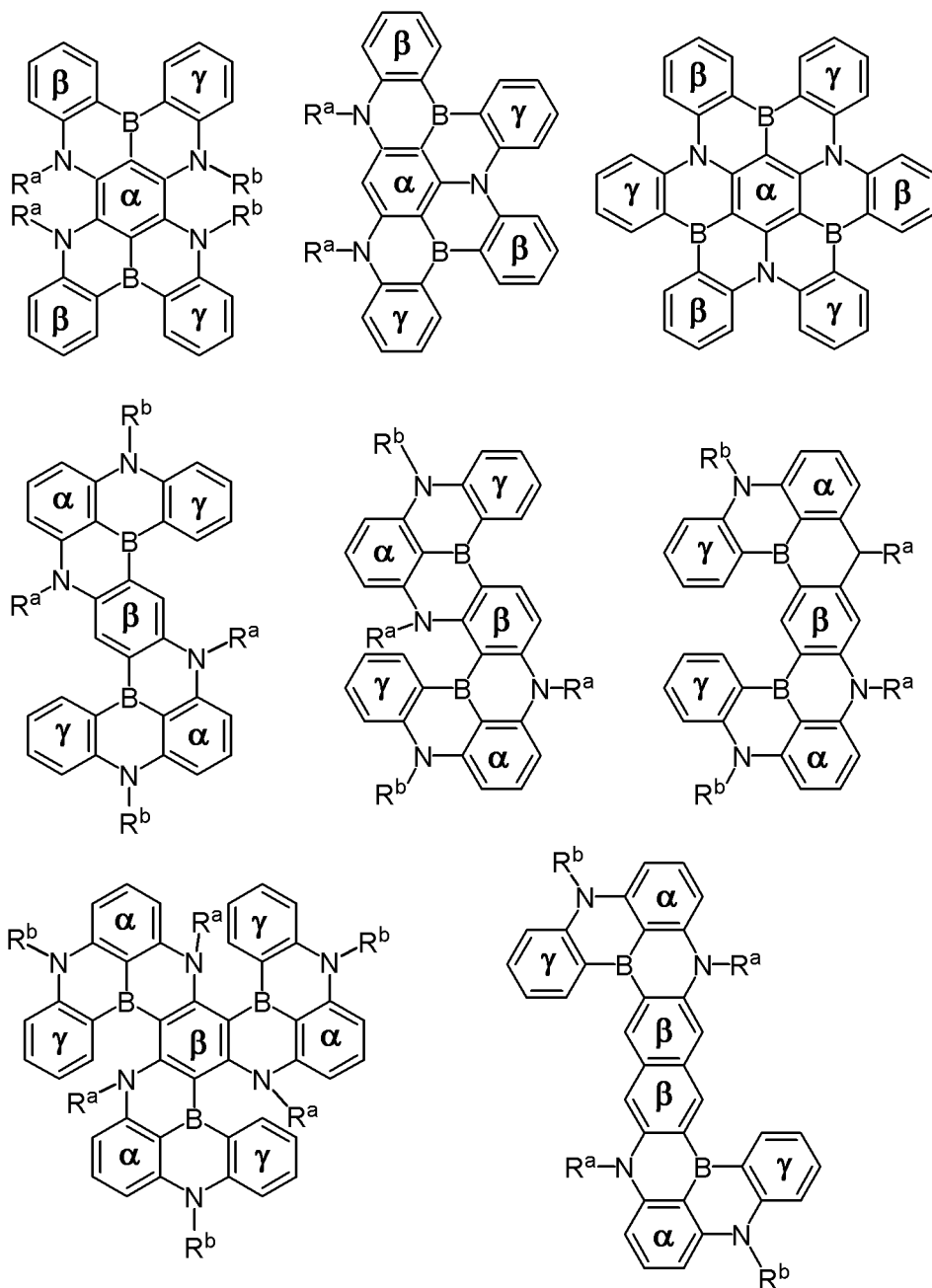
50

好ましくは 2 量体であってもよい。多量体は、2 以上の該単位構造が直接又は炭素数 1 ~ 3 のアルキレン基、フェニレン基、ナフチレン基などの連結基を介して結合した構造であってもよい。又、環  $\alpha$ 、環  $\beta$ 、環  $\gamma$ 、又はこれらの環上の置換基が形成する環が 2 以上の単位構造に共有されている構造であってもよい。さらに、1 つの単位構造中の環  $\alpha$ 、環  $\beta$ 、環  $\gamma$ 、又はこれらの環上の置換基が形成する環が他の単位構造のいずれかの環に縮合している構造であってもよい。

【 0 0 9 0 】

以下に、環を共有する多量体及び環が縮合した多量体の一例を示す。なお、簡略化のために環  $\alpha$ 、環  $\beta$ 、及び環  $\gamma$  上の各 R は省略した。

【 化 3 7 】

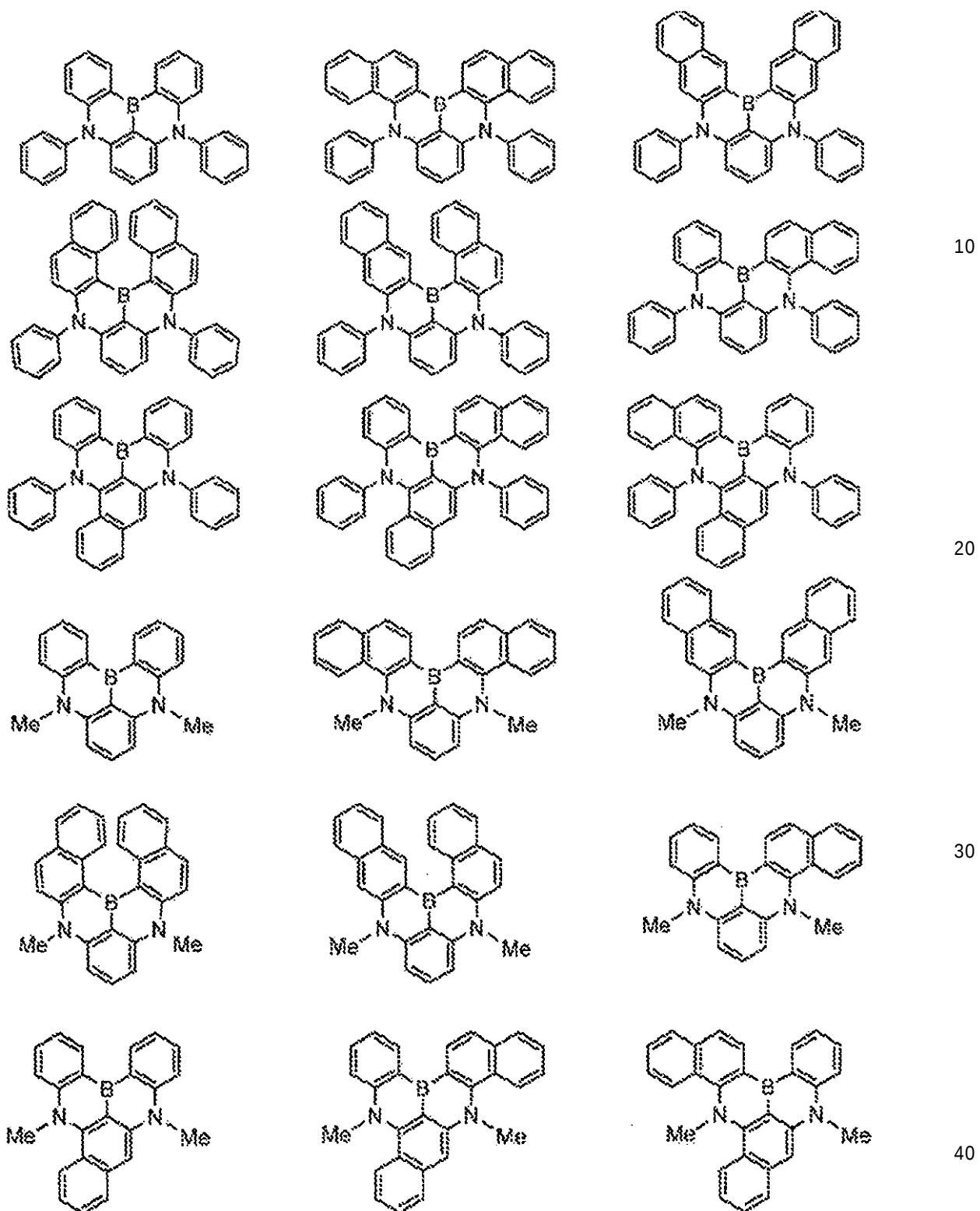


【 0 0 9 1 】

式 (D 2)、好ましくは式 (D 2 a) で表される化合物の具体例を以下に示すが、これらに限定されるものではない。

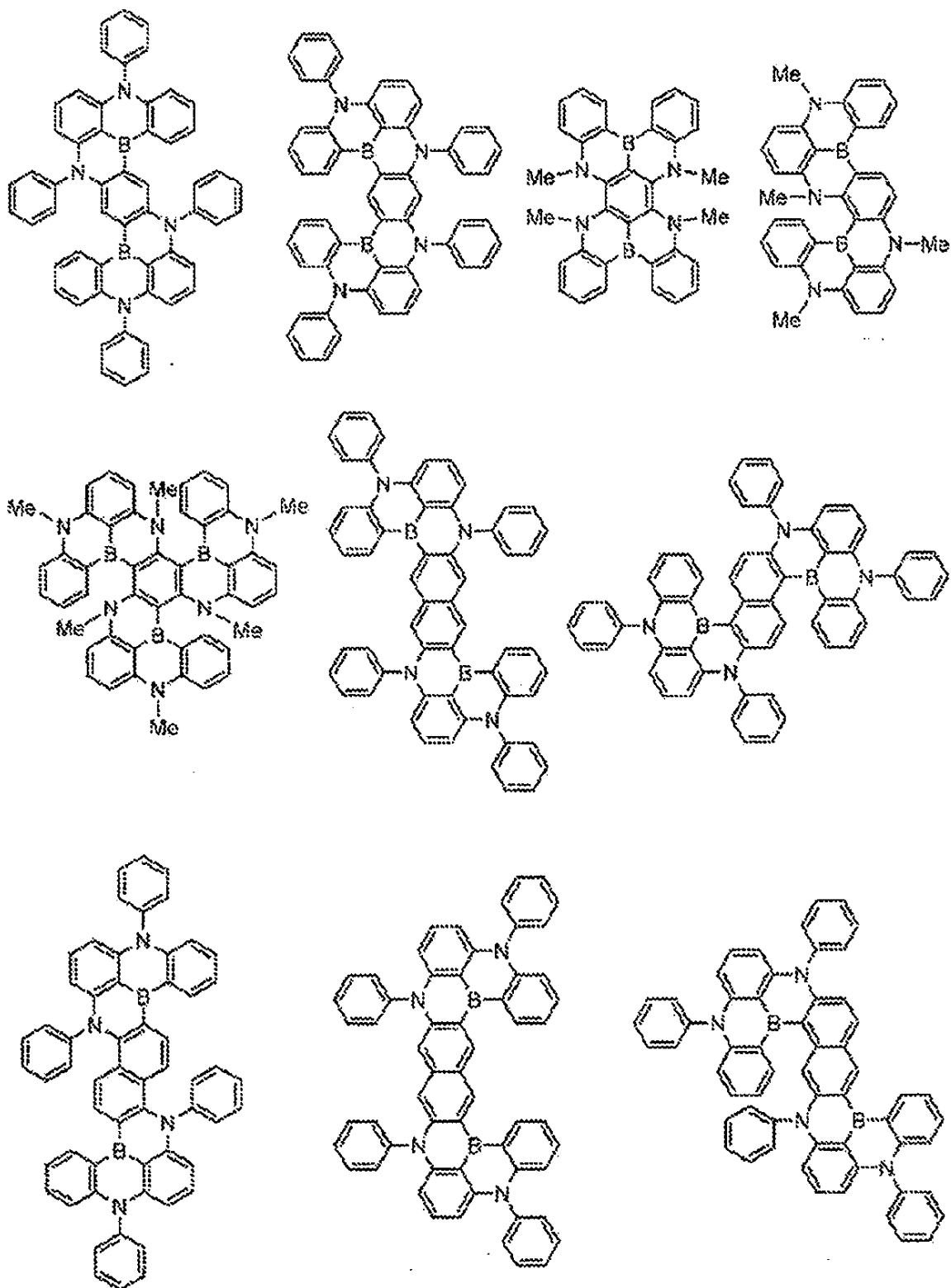
【 0 0 9 2 】

【化 3 8】



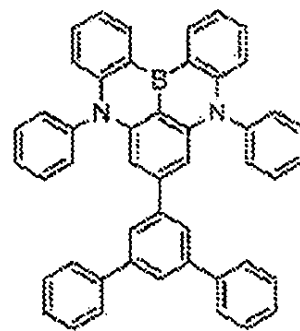
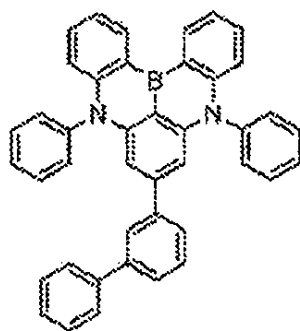
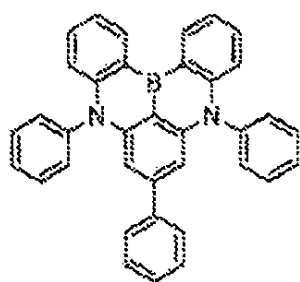
【 0 0 9 3 】

【化 3 9】

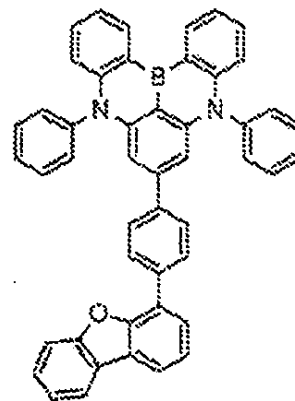
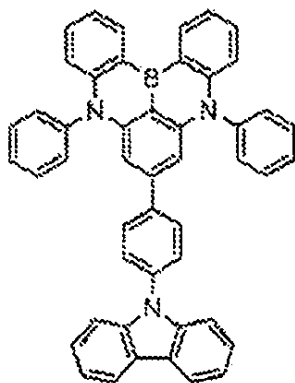
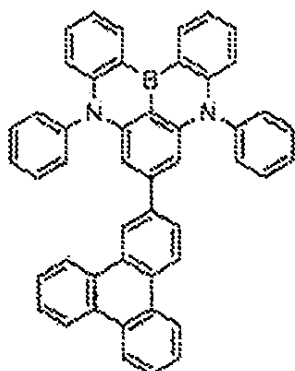


【 0 0 9 4 】

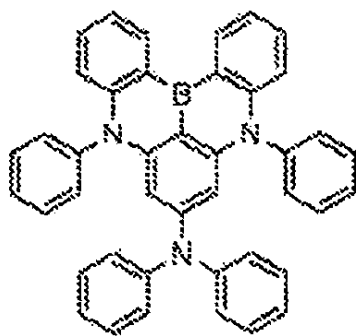
【化 4 0】



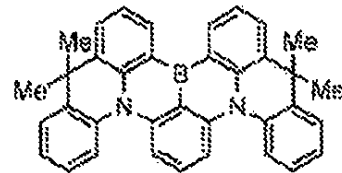
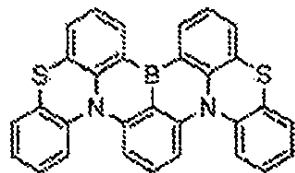
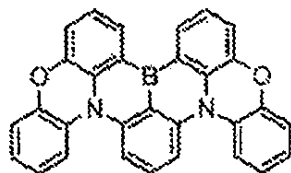
10



20



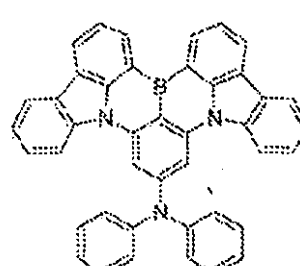
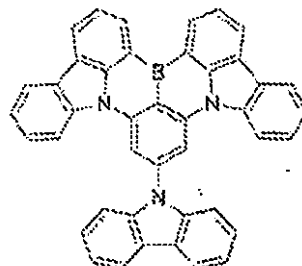
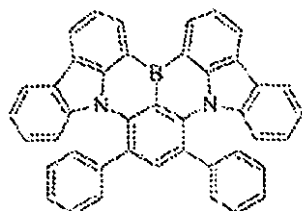
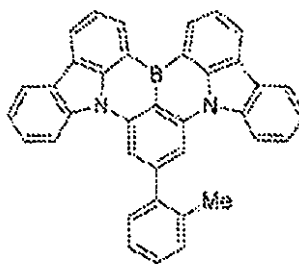
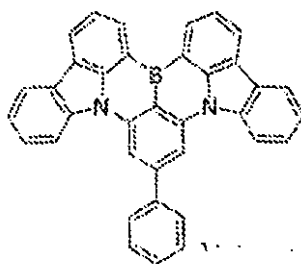
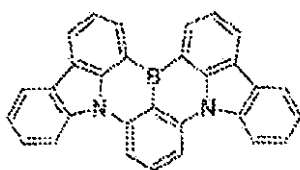
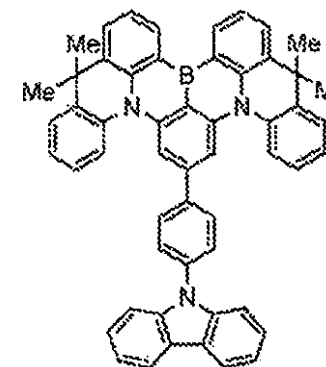
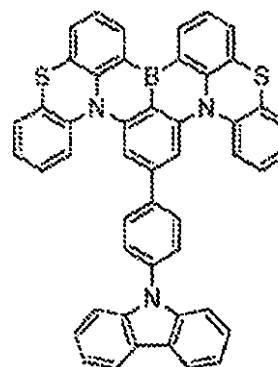
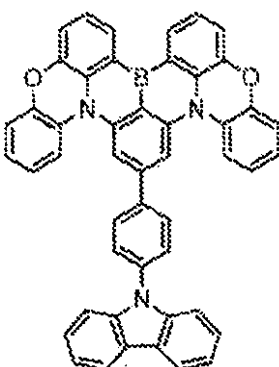
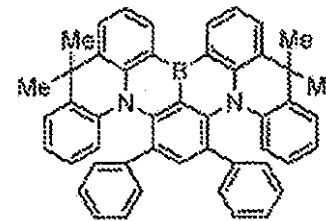
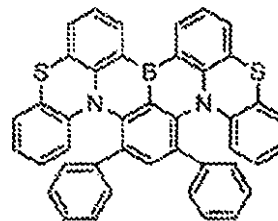
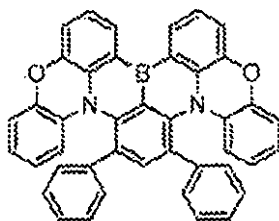
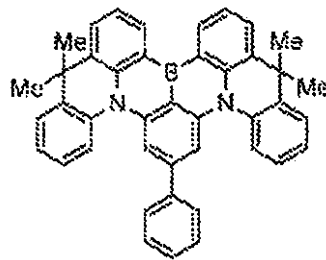
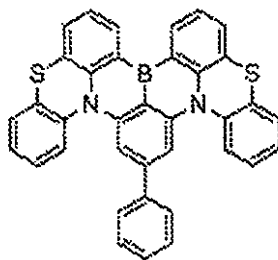
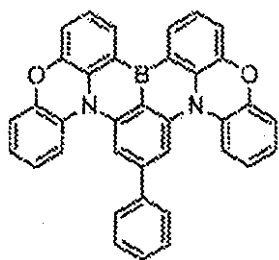
30



40

【 0 0 9 5 】

【化 4 1】



【 0 0 9 6 】

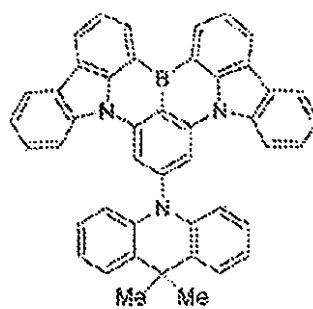
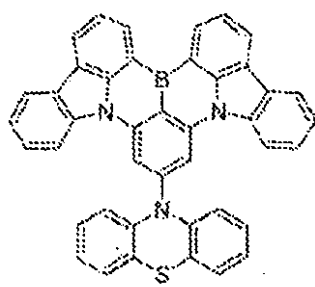
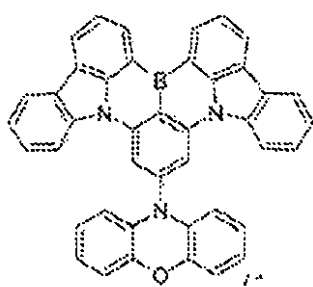
10

20

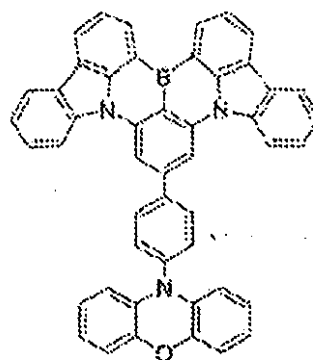
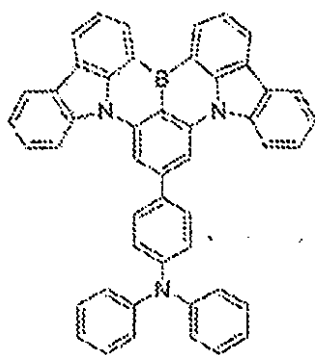
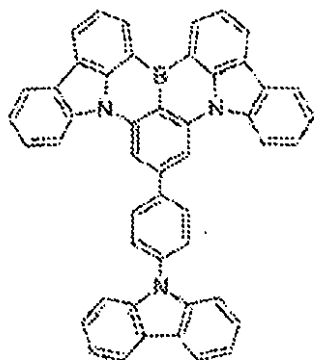
30

40

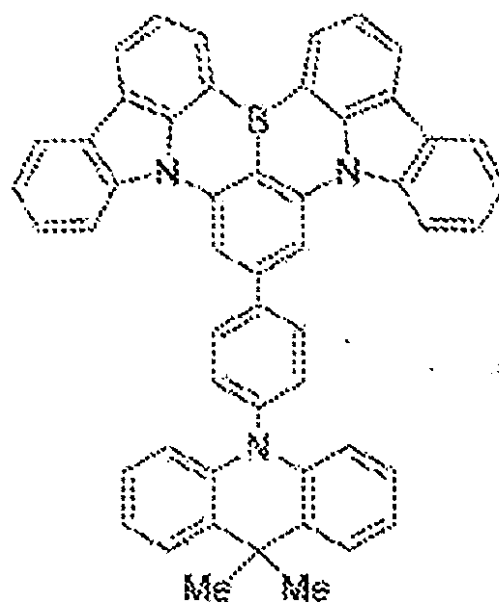
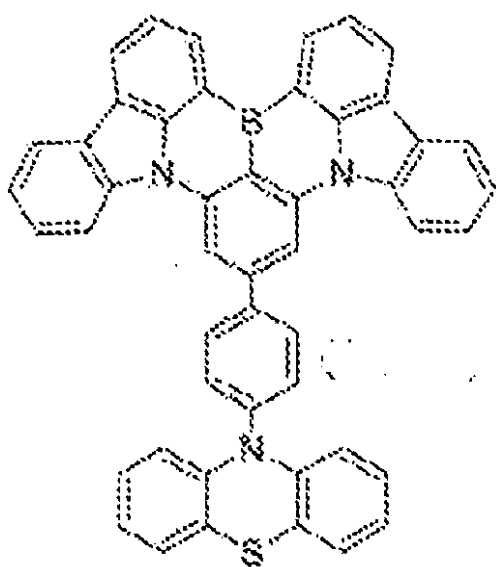
【化 4 2】



10



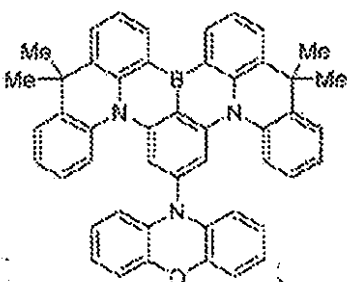
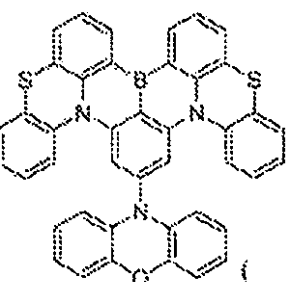
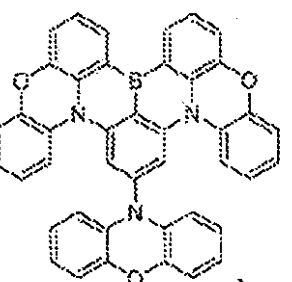
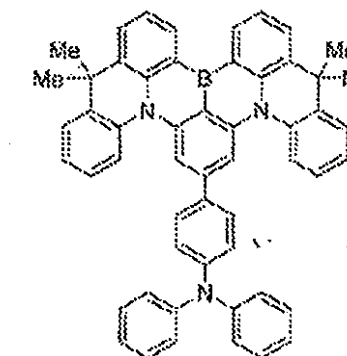
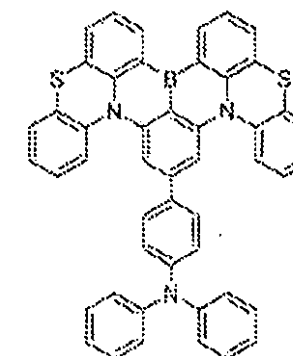
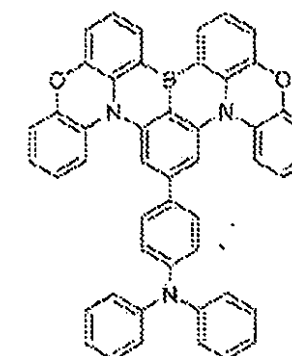
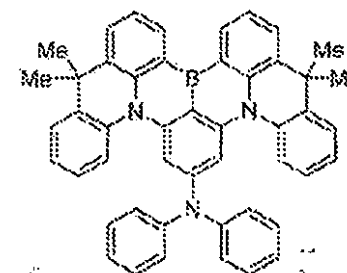
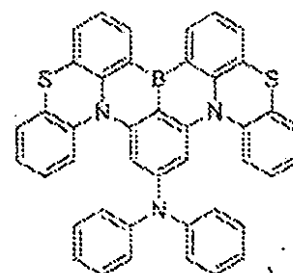
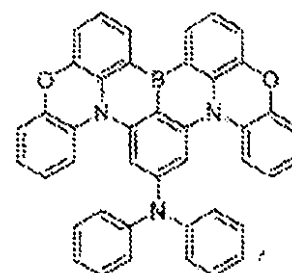
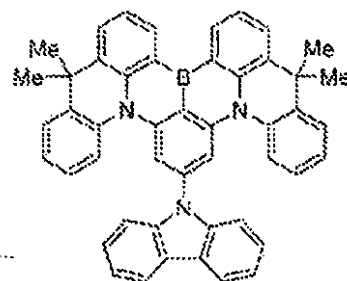
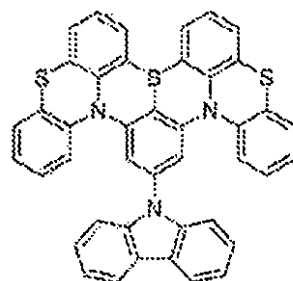
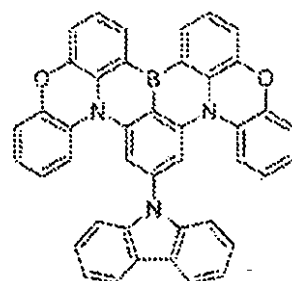
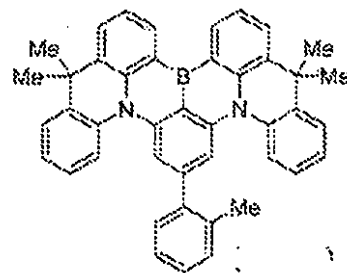
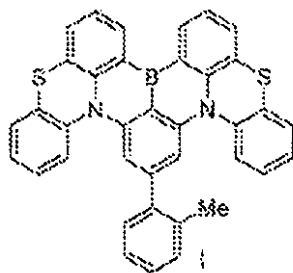
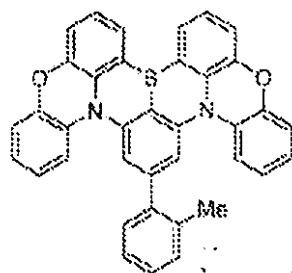
20



30

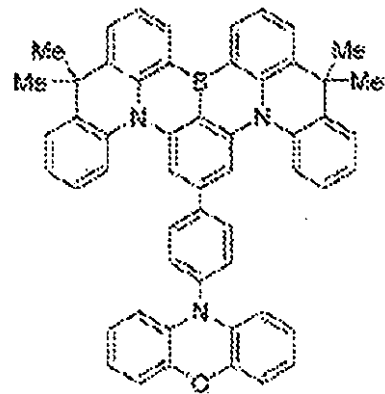
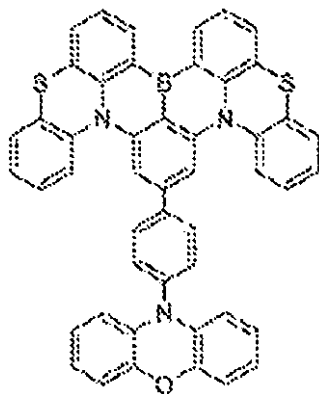
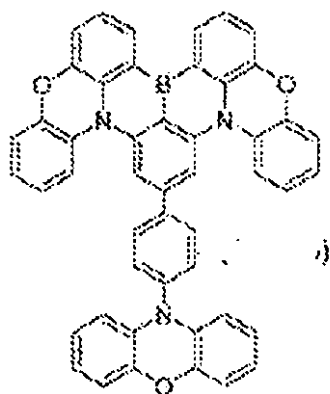
【 0 0 9 7 】

【化 4 3】

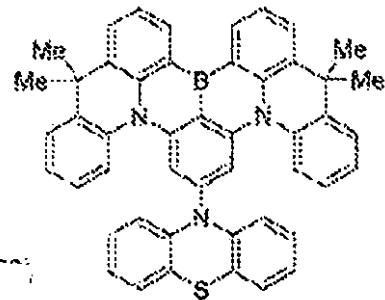
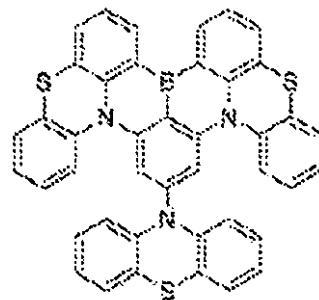
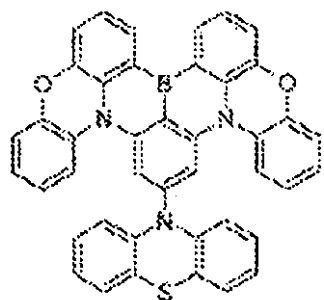


【 0 0 9 8 】

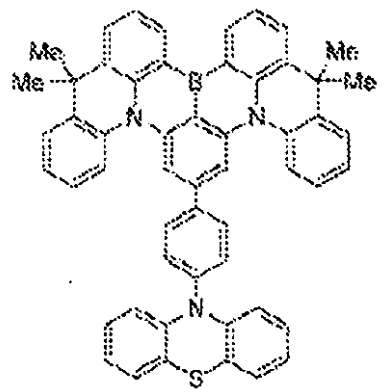
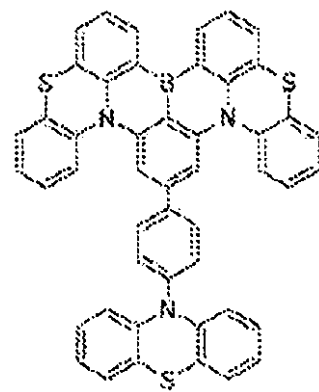
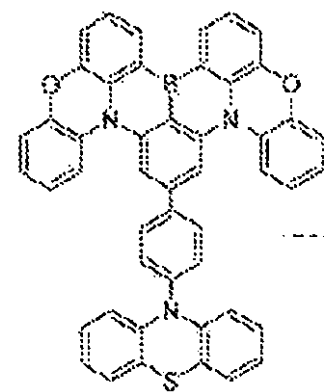
【化 4 4】



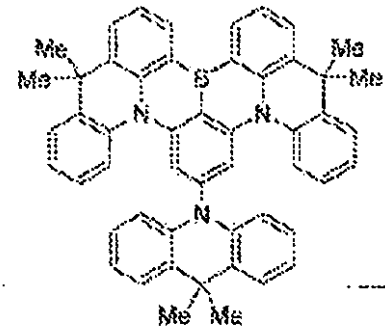
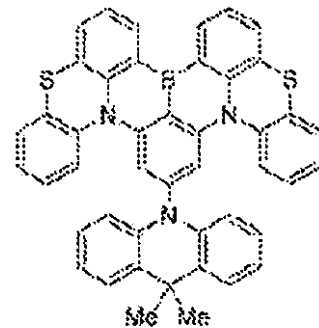
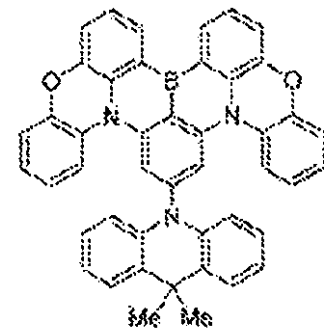
10



20



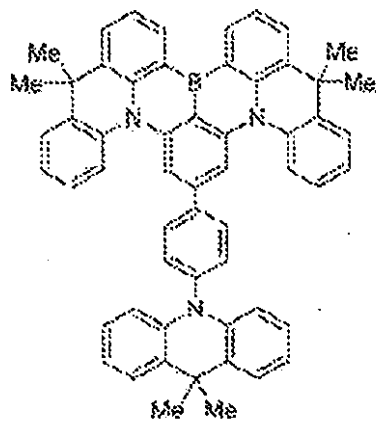
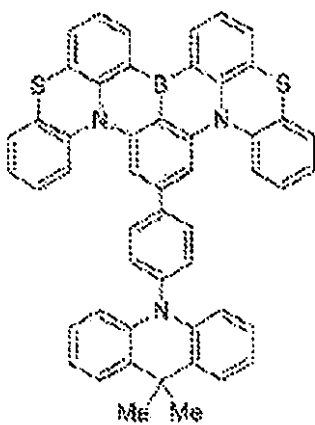
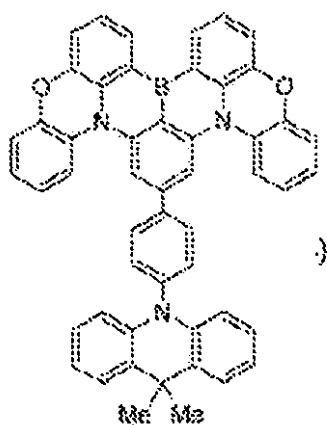
30



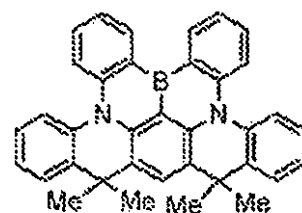
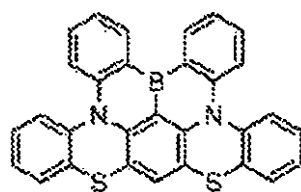
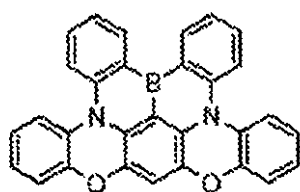
40

【 0 0 9 9 】

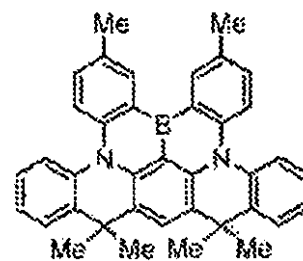
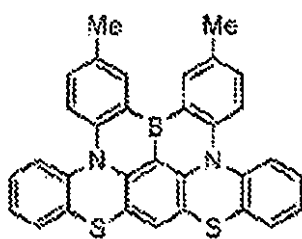
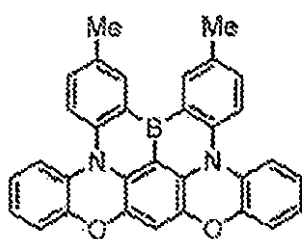
【化 4 5】



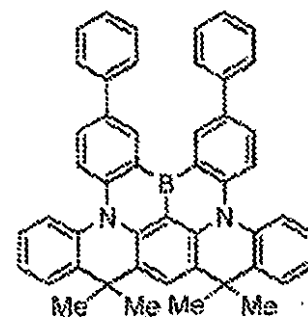
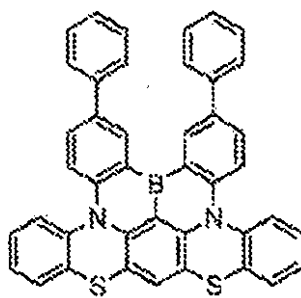
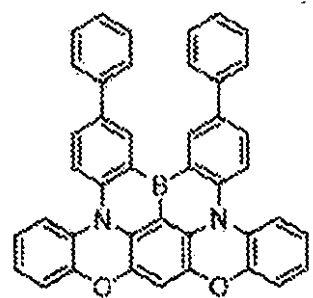
10



20

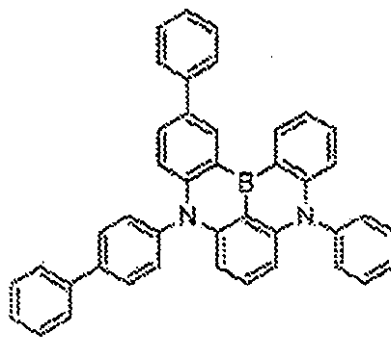
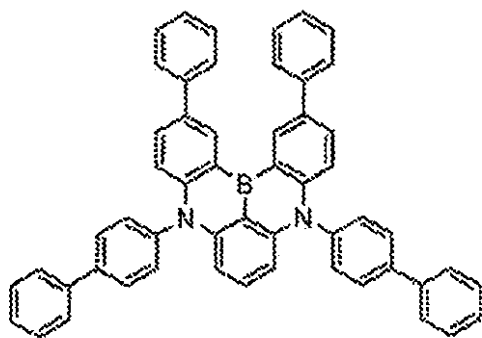


30

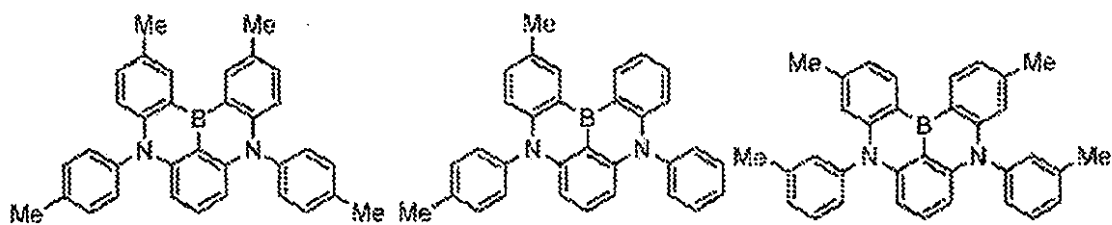


【 0 1 0 0 】

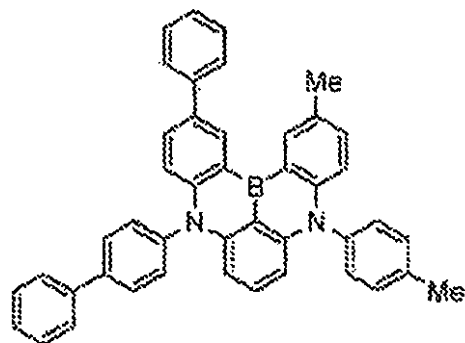
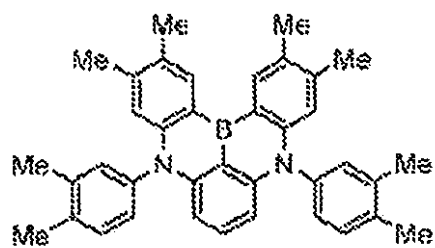
【化 4 6】



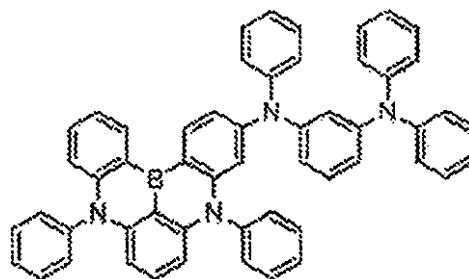
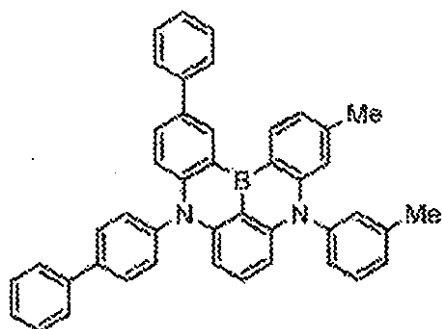
10



20



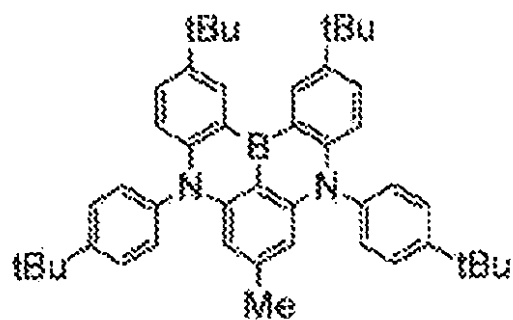
30



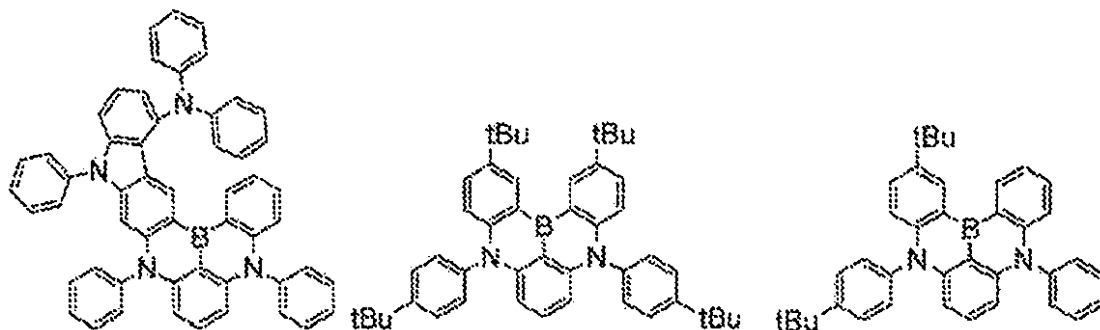
【 0 1 0 1 】

40

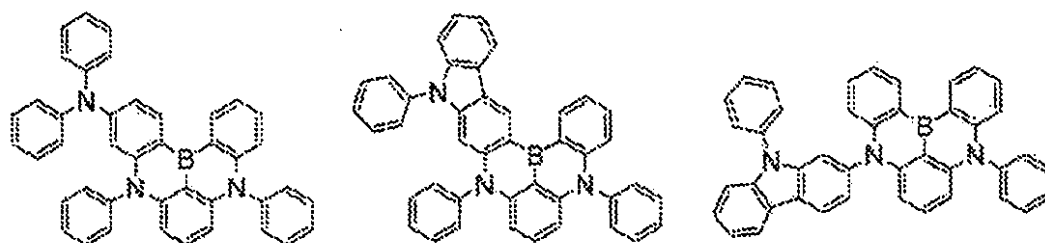
【化 47】



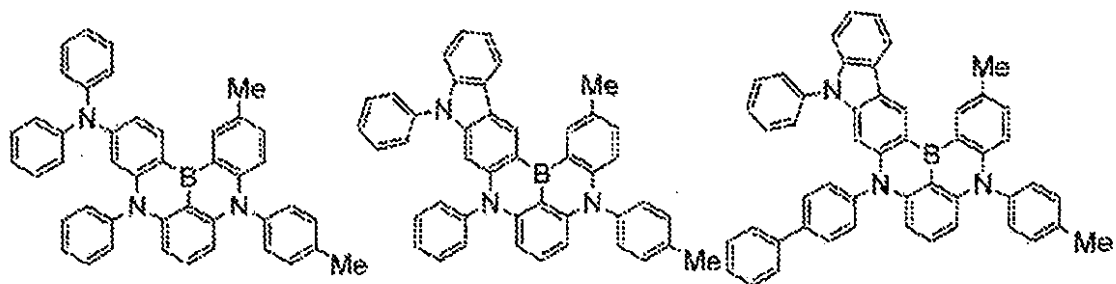
10



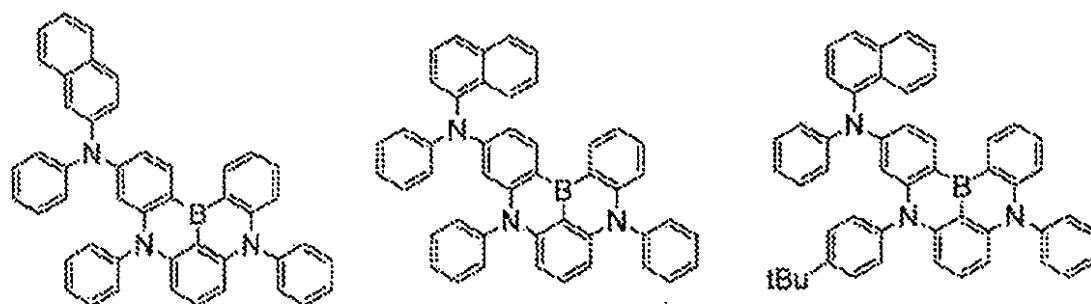
20



30

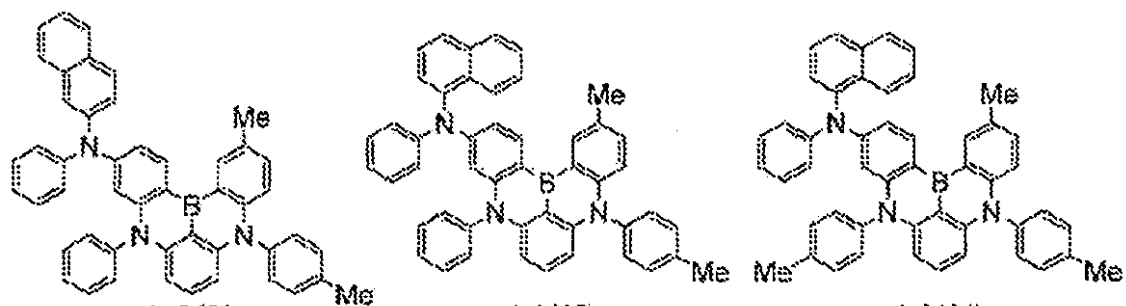


40

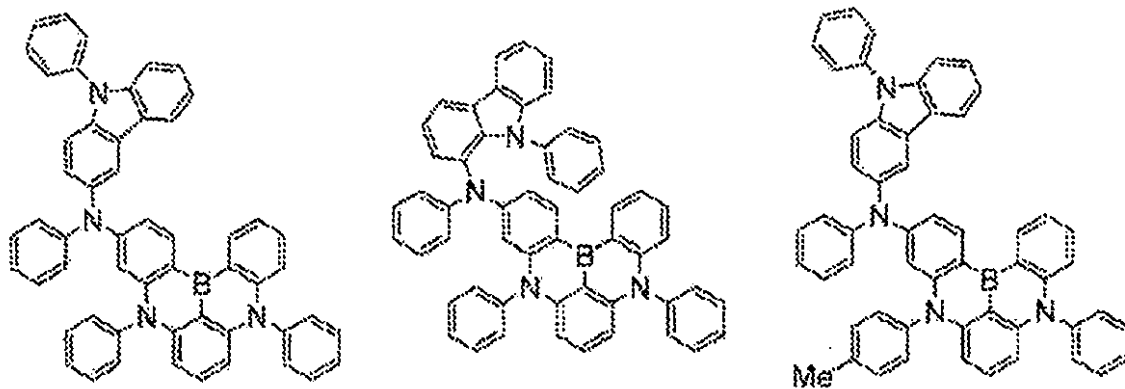


【 0 1 0 2 】

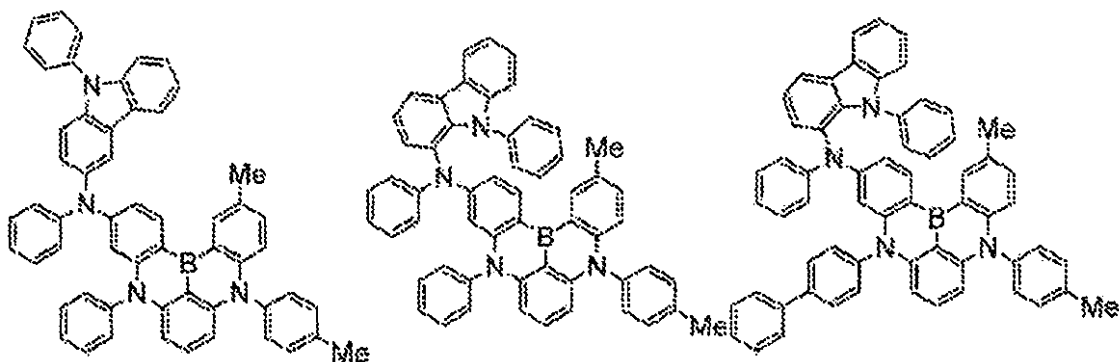
【化 4 8】



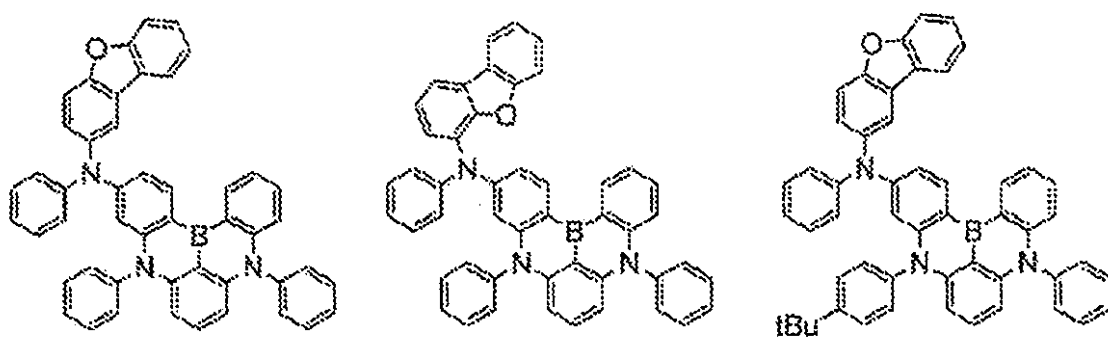
10



20



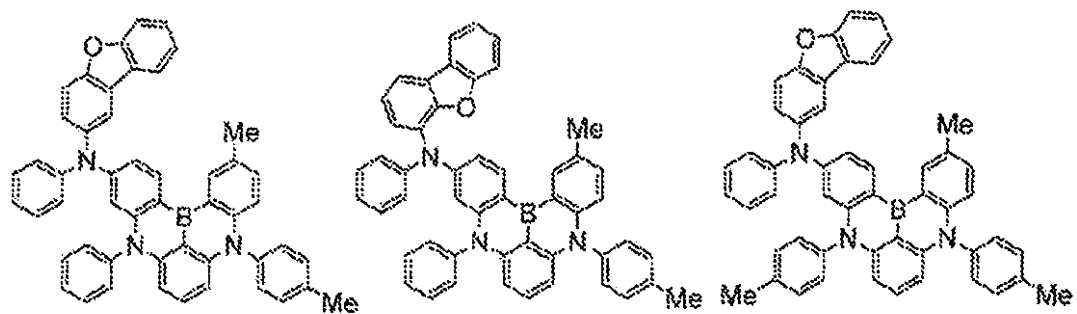
30



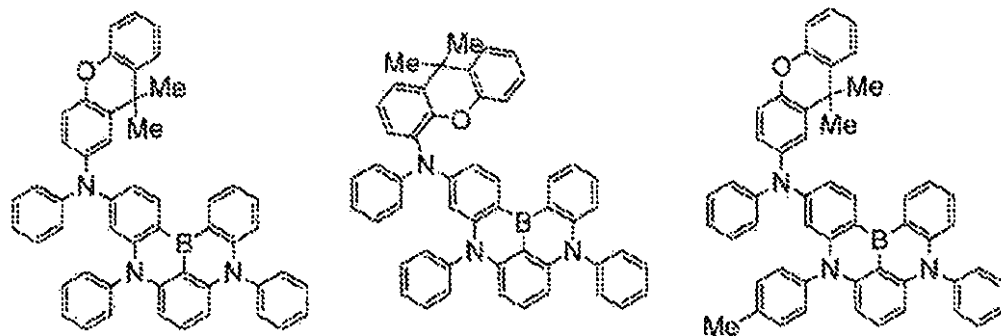
40

【 0 1 0 3 】

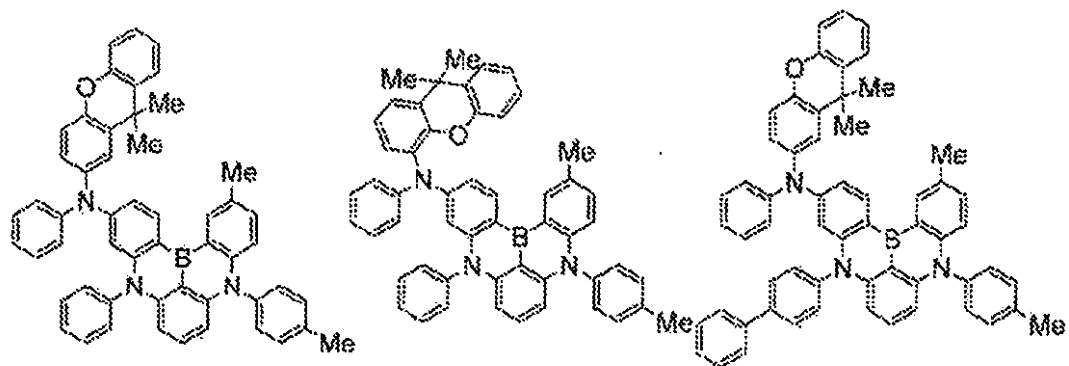
【化 4 9】



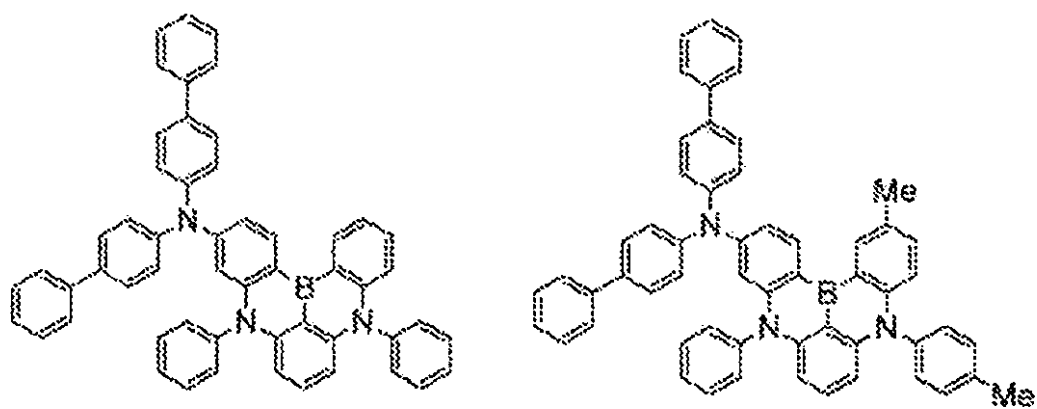
10



20



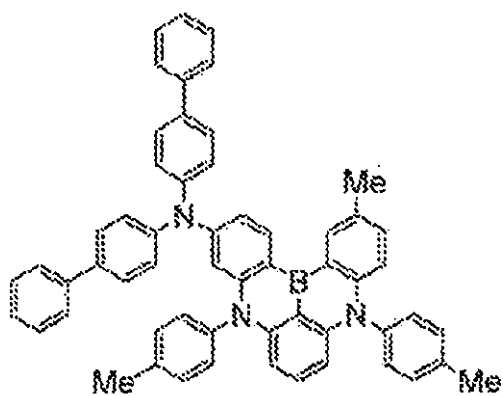
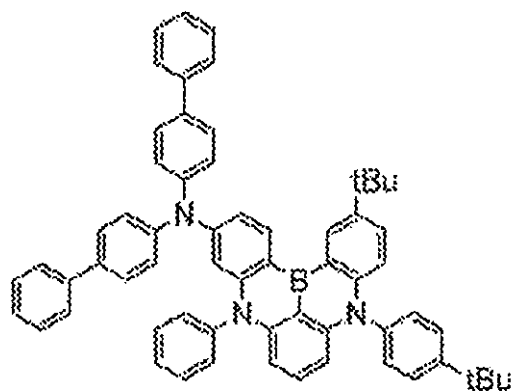
30



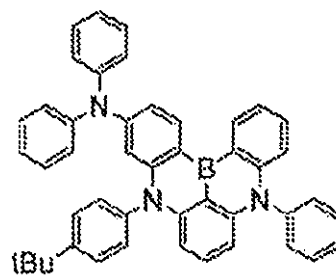
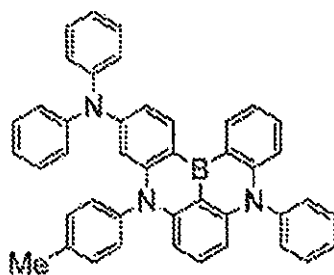
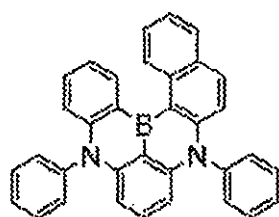
40

【 0 1 0 4 】

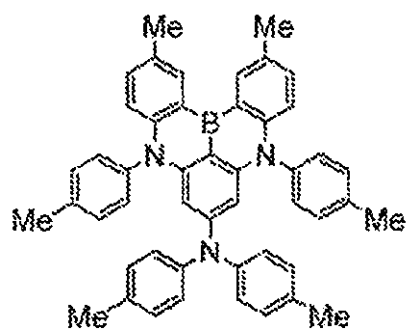
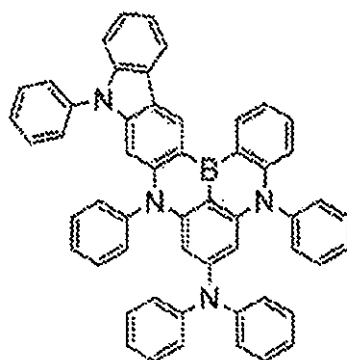
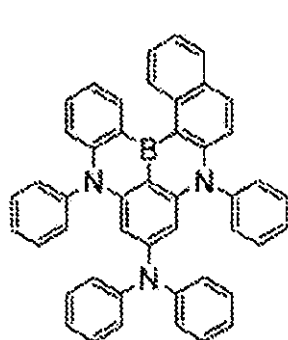
【化 5 0】



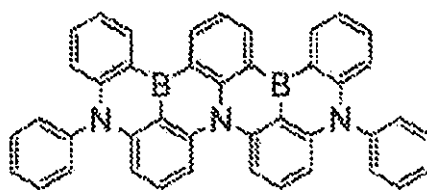
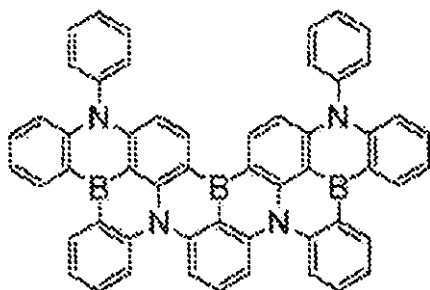
10



20



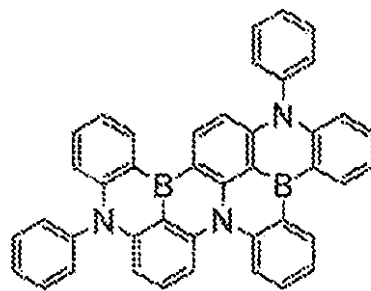
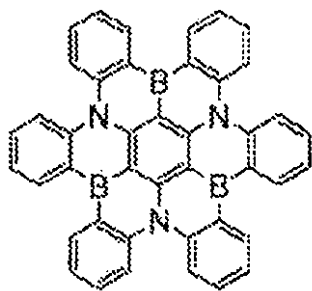
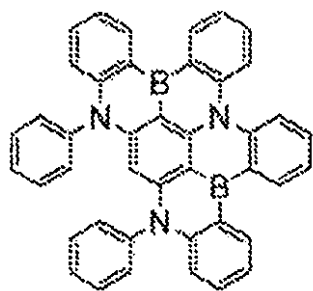
30



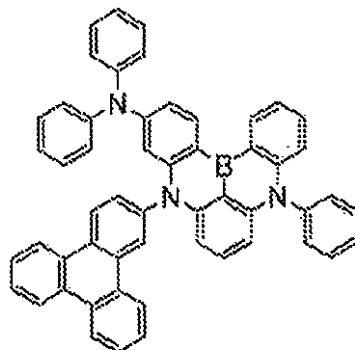
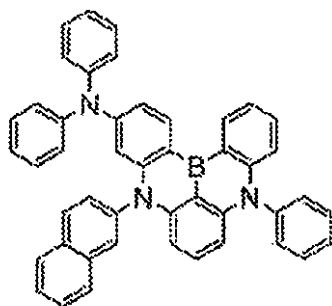
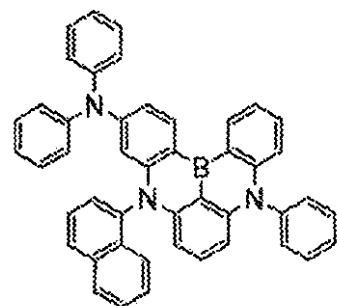
40

【 0 1 0 5】

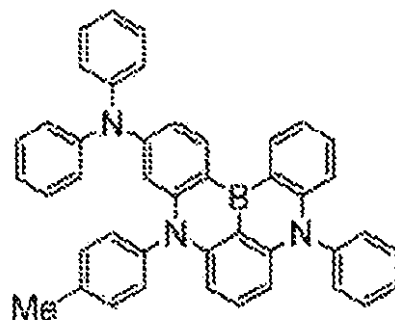
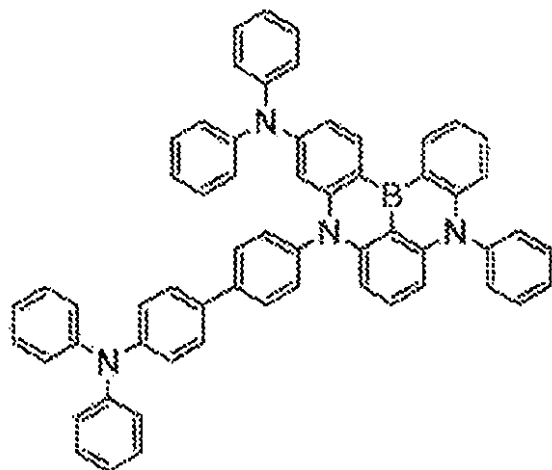
【化 5 1】



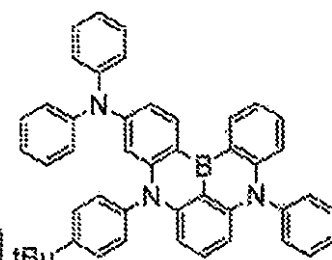
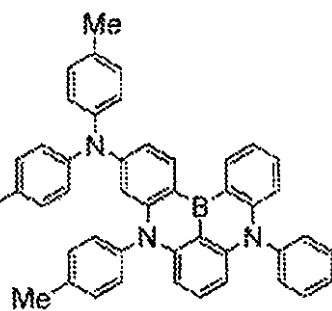
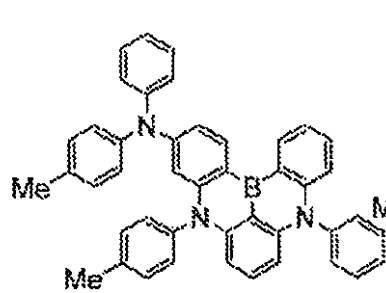
10



20



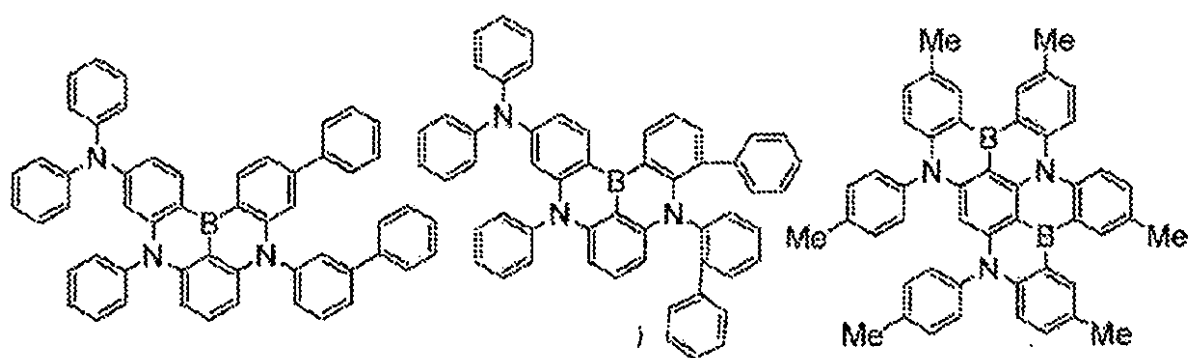
30



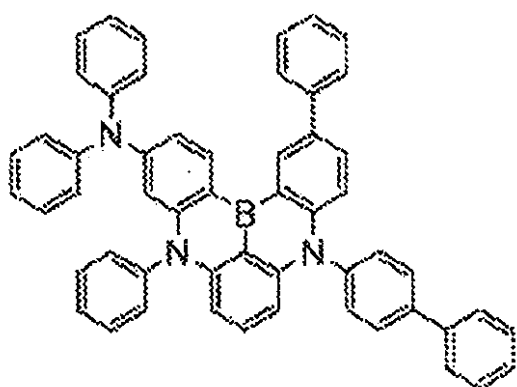
40

【 0 1 0 6 】

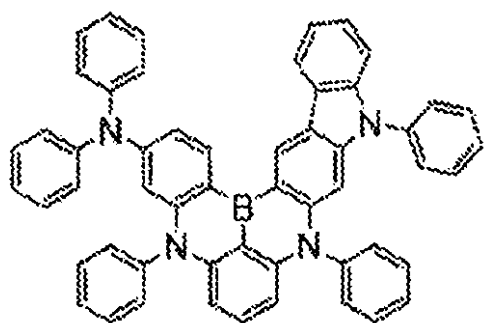
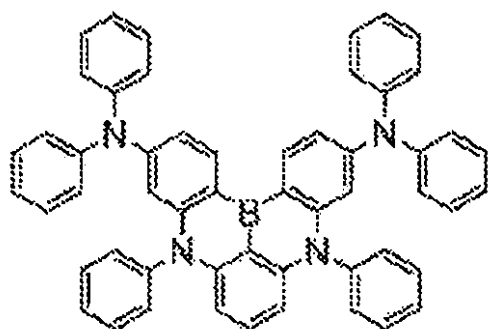
【化 5 2】



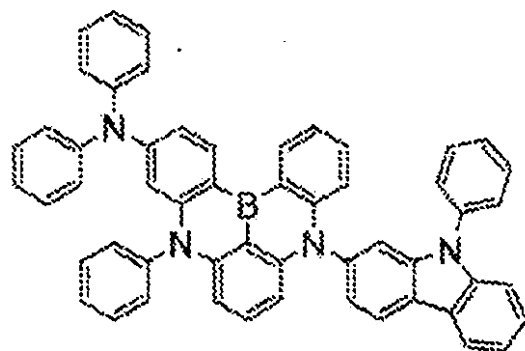
10



20

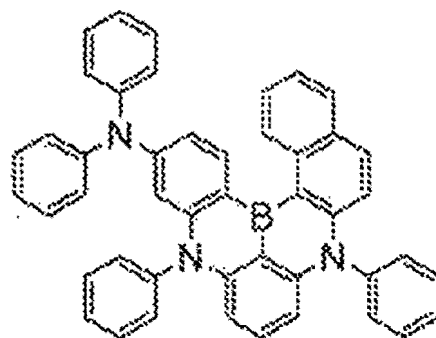
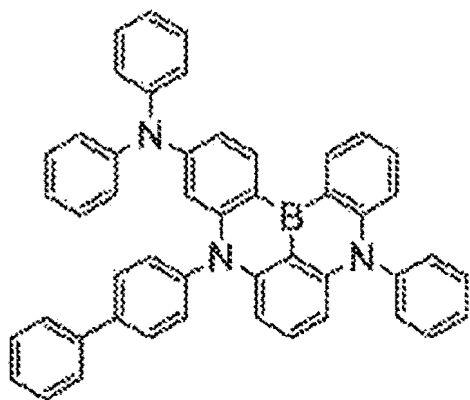


30

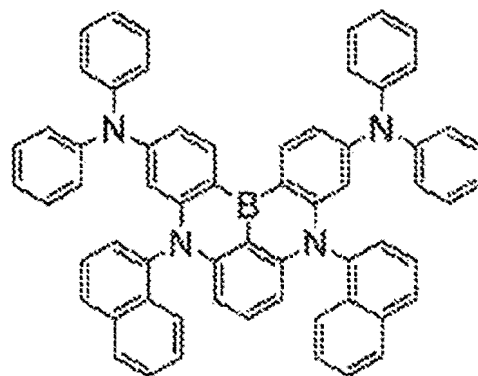
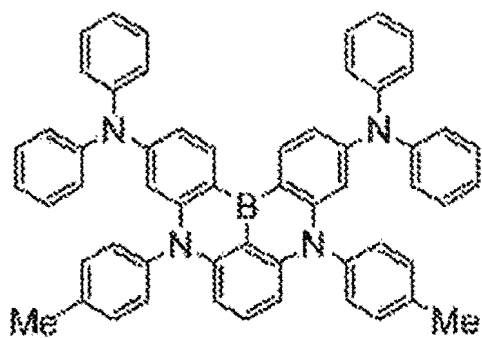


【 0 1 0 7 】

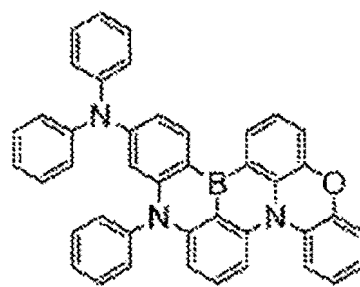
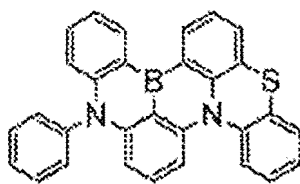
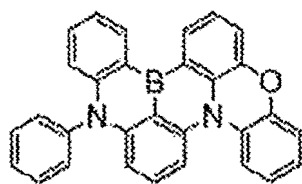
【化 5 3】



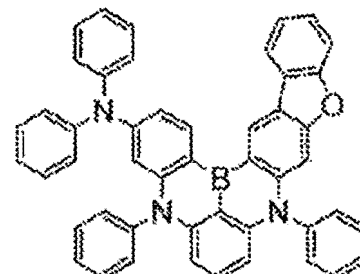
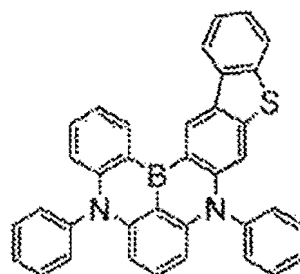
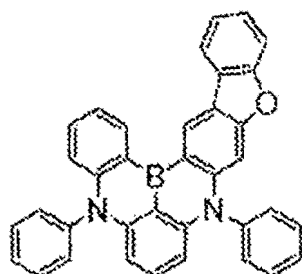
10



20



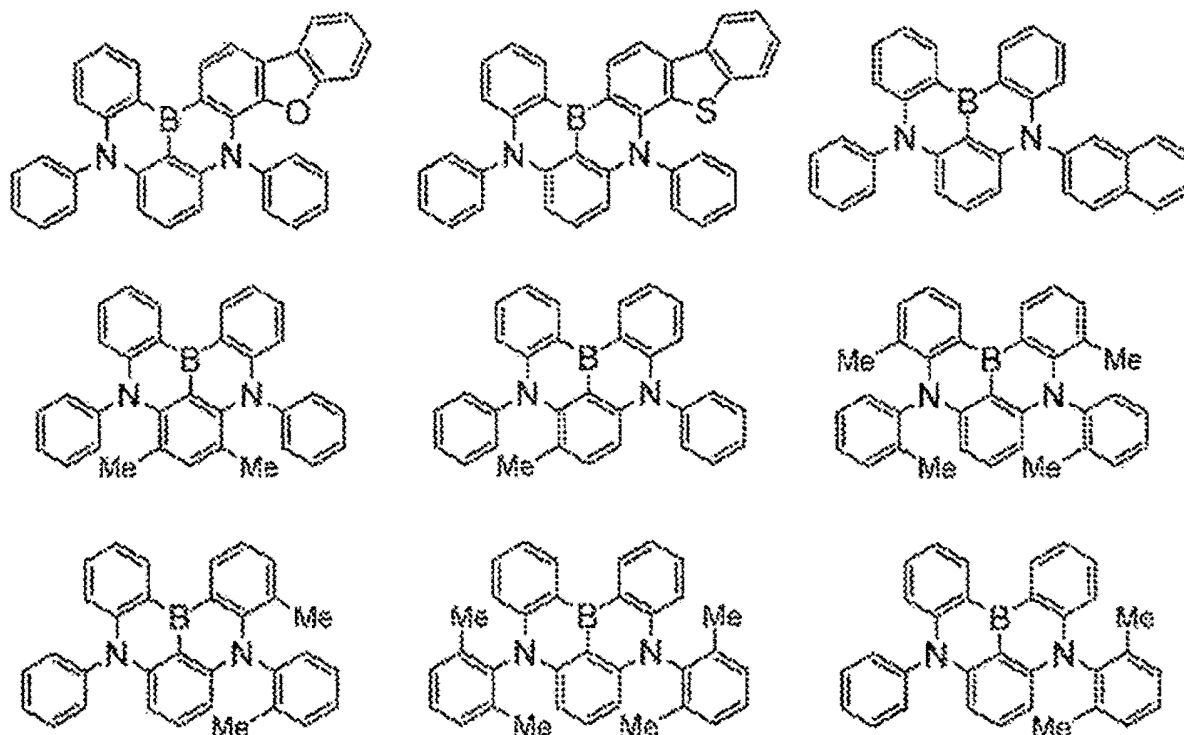
30



40

【 0 1 0 8 】

## 【化 5 4】



## 【 0 1 0 9 】

## 第 1 化合物

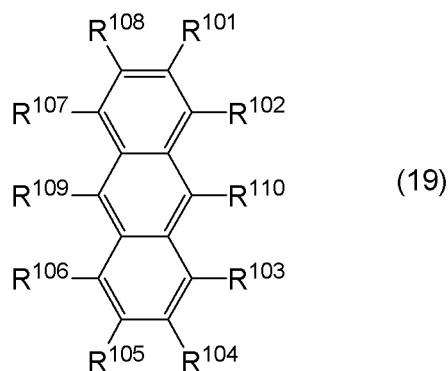
第 1 の有機 E L 素子で使用する第 1 化合物は、前記ドーパント材料及び第 2 化合物と共に蛍光発光層に使用され、蛍光発光層のホスト材料（メインホスト材料）として機能する。

第 1 化合物としては、多環芳香族骨格含有化合物が挙げられ、縮合多環芳香族骨格含有化合物が好ましく 3 個以上の環が縮合した縮合環構造を含有する化合物がより好ましい。具体的には、アントラセン骨格含有化合物、クリセン骨格含有化合物、ピレン骨格含有化合物、又はフルオレン骨格含有化合物であることが好ましく、アントラセン骨格含有化合物がさらに好ましい。

## 【 0 1 1 0 】

前記アントラセン骨格含有化合物として、例えば、下記式（19）で表されるアントラセン誘導体を使用できる。

## 【化 5 5】



## 【 0 1 1 1 】

式（19）において、 $R^{101} \sim R^{110}$  は、それぞれ独立に、水素原子、置換基、又は  $-L-Ar$  である。但し、 $R^{101} \sim R^{110}$  のうち少なくとも 1 つは  $-L-Ar$  である。

該置換基の詳細は、 $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して前記した置換基と同じである。

L は、それぞれ独立に、単結合又は連結基であり、該連結基は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 18、さらに好ましくは 5 ~ 13 のヘテロアリーレン基である。

Ar は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 24、特に好ましくは 5 ~ 18 の単環基、置換もしくは無置換の環形成原子数 8 ~ 50、好ましくは 8 ~ 30、より好ましくは 8 ~ 24、さらに好ましくは 8 ~ 18 の縮合環基、又は前記単環及び前記縮合環から選ばれる 2 以上の環が単結合を介して結合した 1 個の基である。

#### 【0112】

前記環形成原子数 5 ~ 50 単環基は縮合環を持たない単環構造のみを含む基であり、例えば、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、クォーターフェニル基などのアリール基及びピリジル基、ピラジル基、ピリミジル基、トリアジニル基、フリル基、チエニル基などのヘテロアリール基が好ましく、フェニル基、ピフェニル基、及びターフェニル基がより好ましい。

#### 【0113】

前記環形成原子数 8 ~ 50 の縮合環基は 2 以上の環が縮合した縮合環構造を含む基であり、例えば、ナフチル基、フェナントリル基、アントリル基、クリセニル基、ベンゾアントリル基、ベンゾフェナントリル基、トリフェニレニル基、ベンゾクリセニル基、インデニル基、フルオレニル基、9, 9 - ジメチルフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フルオランテニル基、ベンゾフルオランテニル基などの縮合アリール基及びベンゾフラニル基、ベンゾチオフエニル基、インドリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、カルバゾリル基、キノリル基、フェナントロリル基などの縮合ヘテロアリール基が好ましく、ナフチル基、フェナントリル基、アントリル基、9, 9 - ジメチルフルオレニル基、フルオランテニル基、ベンゾアントリル基、ジベンゾチオフエニル基、ジベンゾフラニル基、及びカルバゾリル基がより好ましい。

#### 【0114】

Ar の任意の置換基としては、上述の単環基又は縮合環基が好ましい。

#### 【0115】

L が表す置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基において、該アリーレン基は、ベンゼン、ナフチルベンゼン、ピフェニル、ターフェニル、ナフタレン、アセナフチレン、アントラセン、ベンゾアントラセン、アセアントラセン、フェナントレン、ベンゾ[ c ]フェナントレン、フェナレン、フルオレン、ピセン、ペンタフェン、ピレン、クリセン、ベンゾ[ g ]クリセン、s - インダセン、as - インダセン、フルオランテン、ベンゾ[ k ]フルオランテン、トリフェニレン、ベンゾ[ b ]トリフェニレン及びペリレンから選ばれる芳香族炭化水素化合物から 2 個の水素原子を除いて得られる 2 個の基であり、フェニレン基、ピフェニルジイル基、ターフェニルジイル基、ナフタレンジイル基が好ましく、フェニレン基、ピフェニルジイル基、ターフェニルジイル基がより好ましく、フェニレン基がさらに好ましい。

#### 【0116】

L が表す置換もしくは無置換の環形成炭素数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基において、該ヘテロアリーレン基は、少なくとも 1 個、好ましくは 1 ~ 5 個の環形成ヘテロ原子、例えば、窒素原子、硫黄原子及び酸素原子を含む芳香族複素環化合物から 2 個の水素原子を除いて得られる 2 個の基である。該芳香族複素環化合物としては、ピロール、フラン、チオフェン、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、イミダゾール、オキサゾール、チアゾール、ピラゾール、イソオキサゾール、イソチアゾール、オキサジアゾール、チアジアゾール、トリアゾール、テトラゾール、インドール、イソインドール、ベンゾフラン、イソベンゾフラン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、インドリジン、キノリジン、キノリン、イソキノリン、シンノリン、フタラジニン、キナゾリン

10

20

30

40

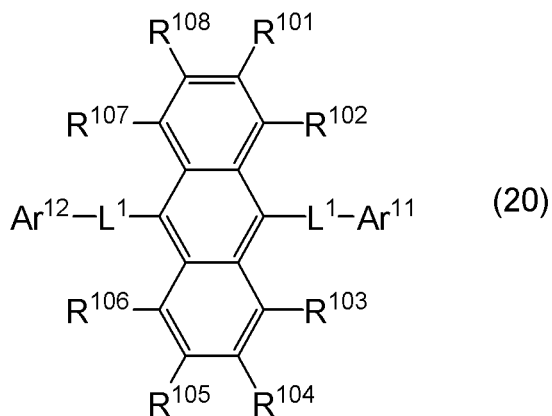
50

、キノキサリン、ベンズイミダゾール、ベンズオキサゾール、ベンズチアゾール、インダゾール、ベンズイソキサゾール、ベンズイソチアゾール、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、カルバゾール、フェナントリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、フェノチアジン、フェノキサジン、キサンテンなどが挙げられる。該ヘテロアリーレン基としては、フラン、チオフェン、ピリジン、ピリダジン、ピリミジン、ピラジン、トリアジン、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェンから2個の水素原子を除いて得られる2価の基が好ましく、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェンから2個の水素原子を除いて得られる2価の基がより好ましい。

【0117】

前記式(19)の化合物は、下記式(20)で表されるアントラセン誘導体であることが好ましい。

【化56】



【0118】

式(20)において、 $R^{101} \sim R^{108}$ は式(19)で定義したとおりであり、 $L^1$ は式(19)のLに関して定義したとおりであり、 $Ar^{11}$ 及び $Ar^{12}$ は式(19)のArに関して定義したとおりである。

【0119】

式(20)で表されるアントラセン誘導体は、下記アントラセン誘導体(A)、(B)、及び(C)のいずれかであることが好ましく、有機EL素子の構成や求める特性に従って選択される。

【0120】

アントラセン誘導体(A)

アントラセン誘導体(A)は、式(20)において $Ar^{11}$ 及び $Ar^{12}$ が、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成原子数8～50の縮合環基である化合物である。 $Ar^{11}$ 及び $Ar^{12}$ は同一でも異なってもよく、異なっていることが好ましい。

前記環形成原子数8～50の縮合環基は式(19)に関して上述した通りであり、ナフチル基、フェナントリル基、ベンズアントリル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、及びジベンゾフラニル基が好ましい。

【0121】

アントラセン誘導体(B)

アントラセン誘導体(B)は、式(20)において $Ar^{11}$ 及び $Ar^{12}$ の一方が置換若しくは無置換の環形成原子数5～50の単環基であり、他方が置換若しくは無置換の環形成原子数8～50の縮合環基である化合物である。

前記環形成原子数5～50の単環基及び前記環形成原子数8～50の縮合環基は式(19)に関して上述した通りである。

本発明の一態様においては、 $Ar^{12}$ がナフチル基、フェナントリル基、ベンズアントリル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、又はジベンゾフラニル基であり、 $Ar^{11}$ が無置換フェニル基、又は、単環基又は縮合環基(例えば、フェニル基、ビフェニル基、ナ

10

20

30

40

50

フチル基、フェナントリル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、及びジベンゾフラニル基)で置換されたフェニル基であることが好ましい。

本発明の他の態様においては、 $Ar^{12}$ が置換若しくは無置換の環形成原子数8~50の縮合環基であり、 $Ar^{11}$ が無置換のフェニル基であることが好ましい。前記縮合環基として、フェナントリル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、ジベンゾフラニル基、又はベンゾアントリル基が特に好ましい。

【0122】

アントラセン誘導体(C)

アントラセン誘導体(C)は、式(20)において $Ar^{11}$ 及び $Ar^{12}$ が、それぞれ独立に、置換若しくは無置換の環形成原子数5~50の単環基である化合物である。

10

$Ar^{11}$ 及び $Ar^{12}$ がともに置換若しくは無置換のフェニル基であることが好ましく、 $Ar^{11}$ が無置換のフェニル基であり、 $Ar^{12}$ が単環基又は縮合環基で置換されたフェニル基であること、又は、 $Ar^{11}$ 及び $Ar^{12}$ がそれぞれ独立に単環基又は縮合環基で置換されたフェニル基であることがより好ましい。

$Ar^{11}$ 及び $Ar^{12}$ の任意の置換基としての単環基及び縮合環基は式(19)に関して上述したとおりであり、単環基としてはフェニル基及びビフェニル基が好ましく、縮合環基としてはナフチル基、フェナントリル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、ジベンゾフラニル基、及びベンゾアントリル基が好ましい。

【0123】

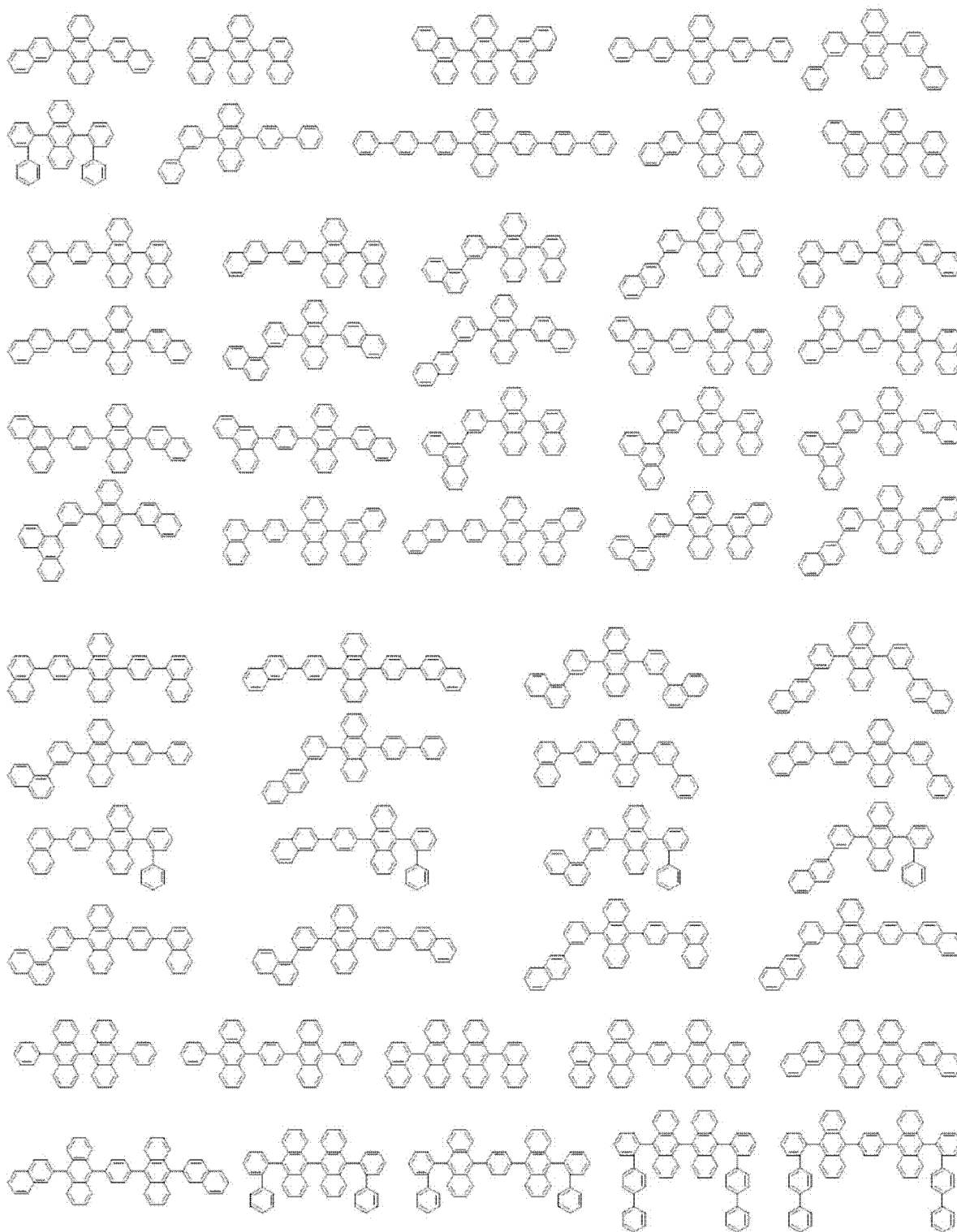
式(19)及び式(20)で表されるアントラセン誘導体の具体例としては、以下に示す化合物が挙げられる。

20

【0124】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

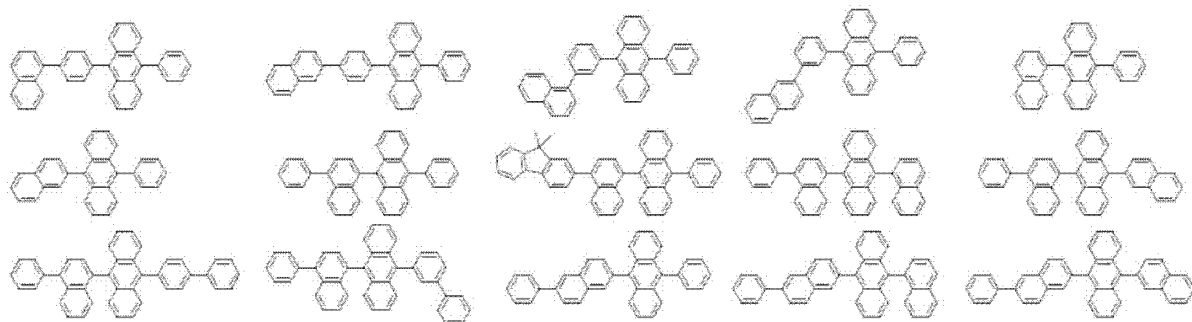
## 【化 5 7】



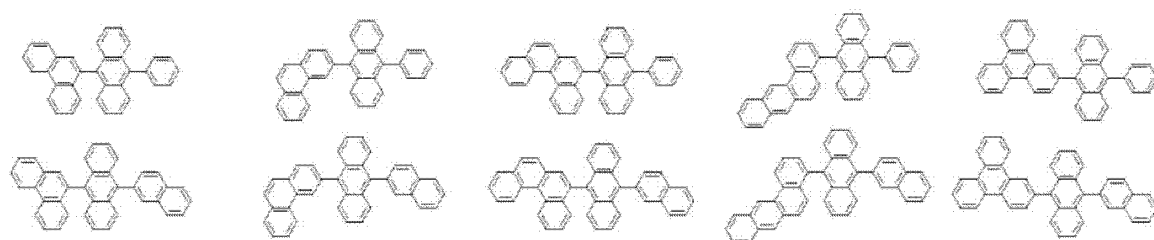
## 【 0 1 2 5 】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

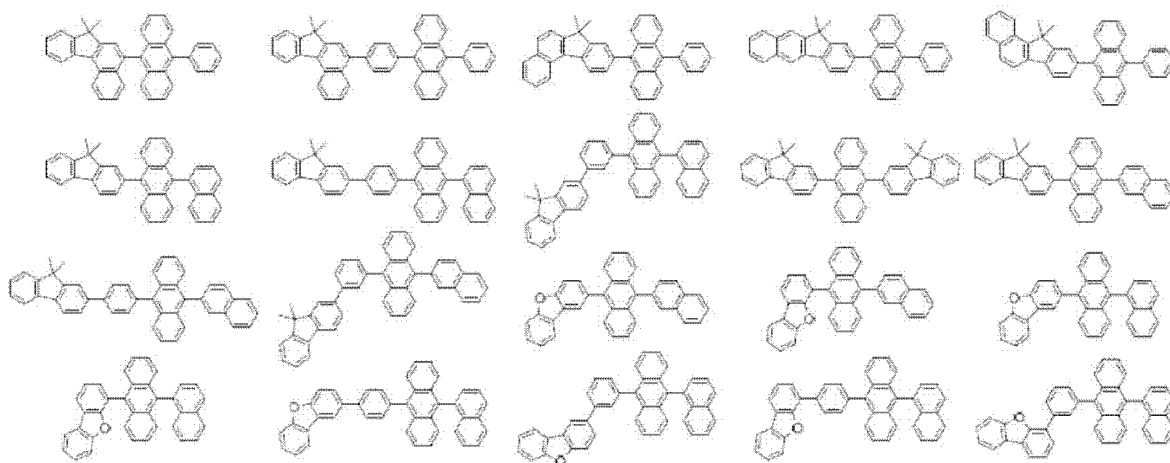
## 【化 5 8】



10



20

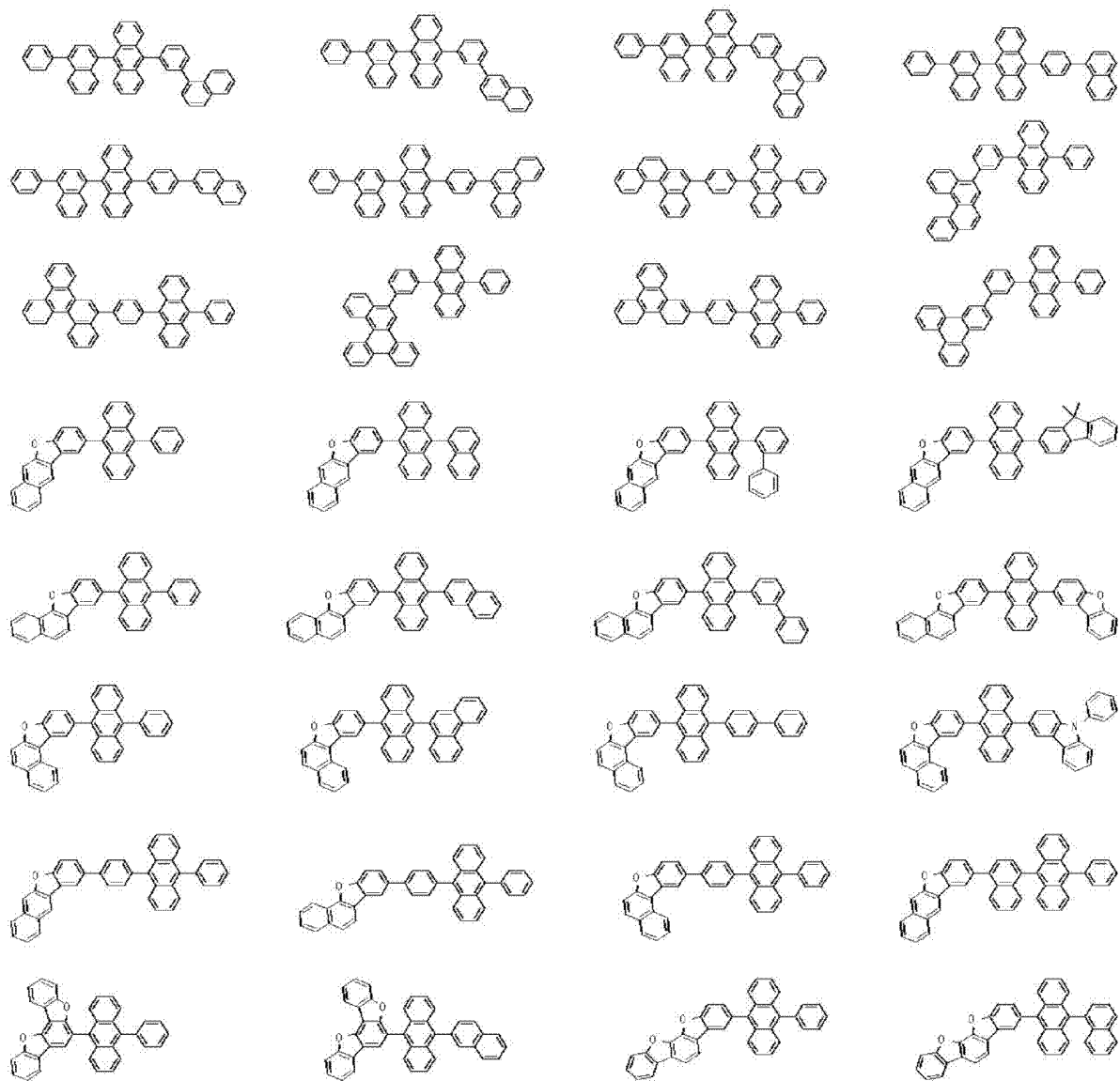


30

## 【 0 1 2 6 】

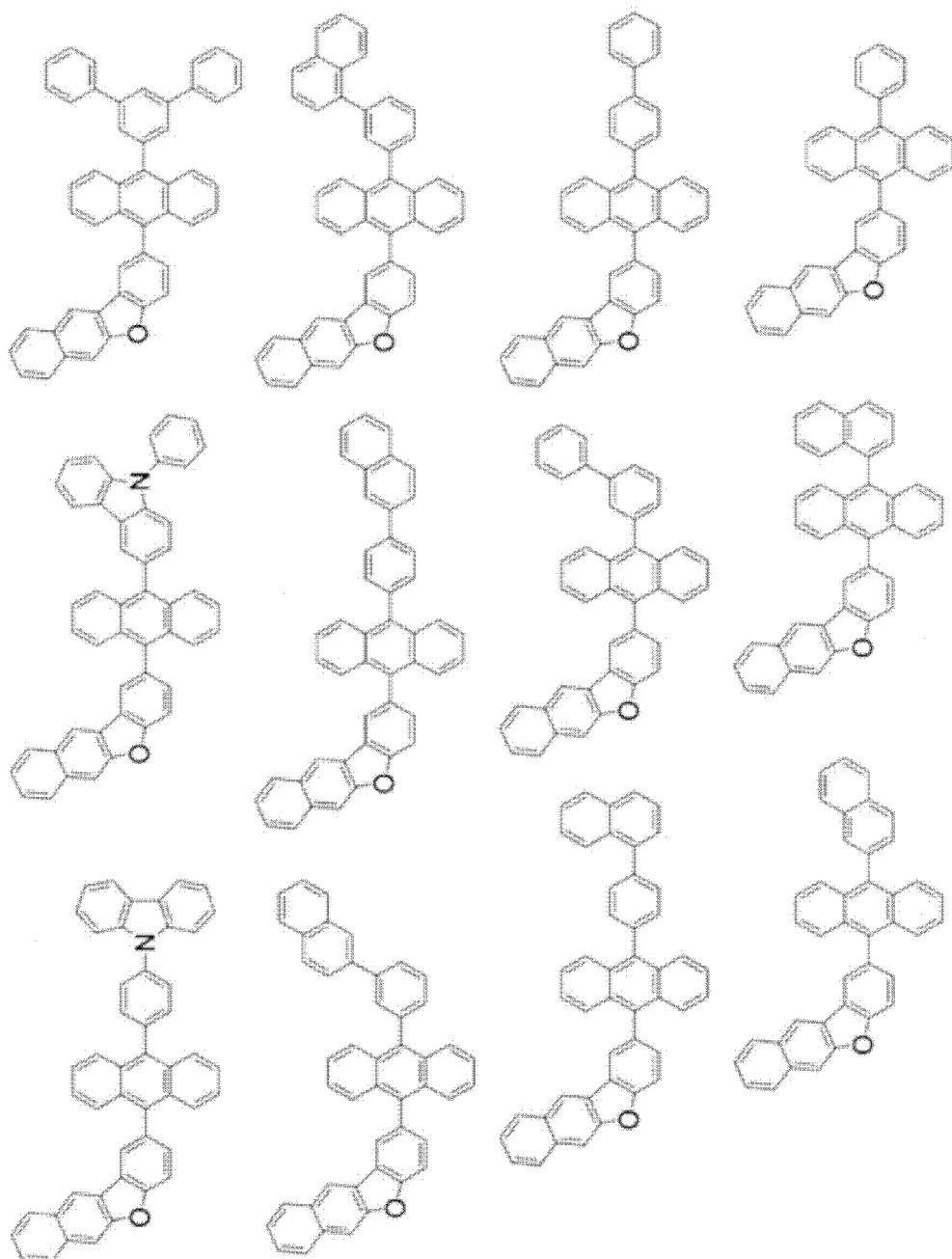
下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

【化 5 9】



【 0 1 2 7 】

【化 6 0】



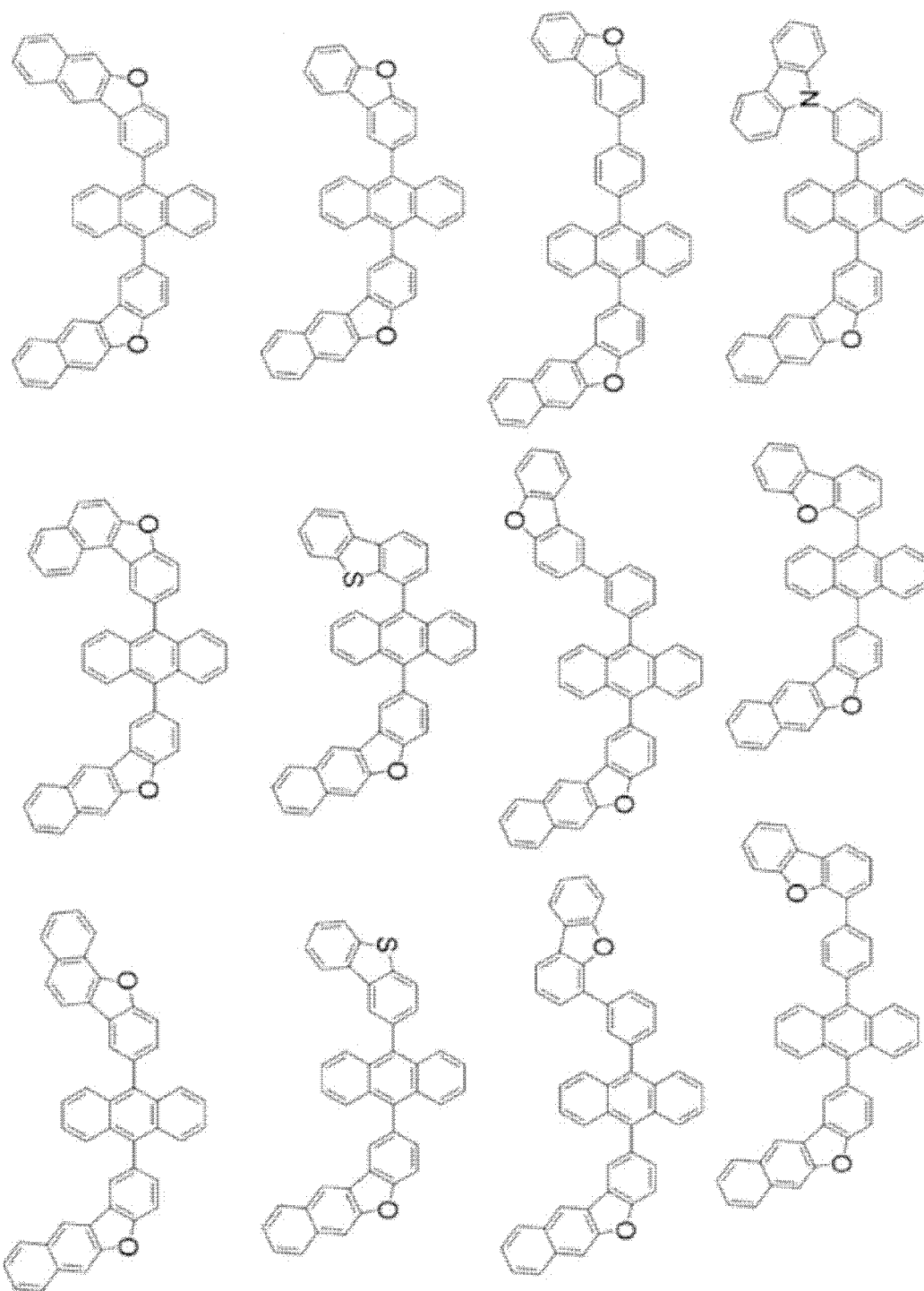
10

20

30

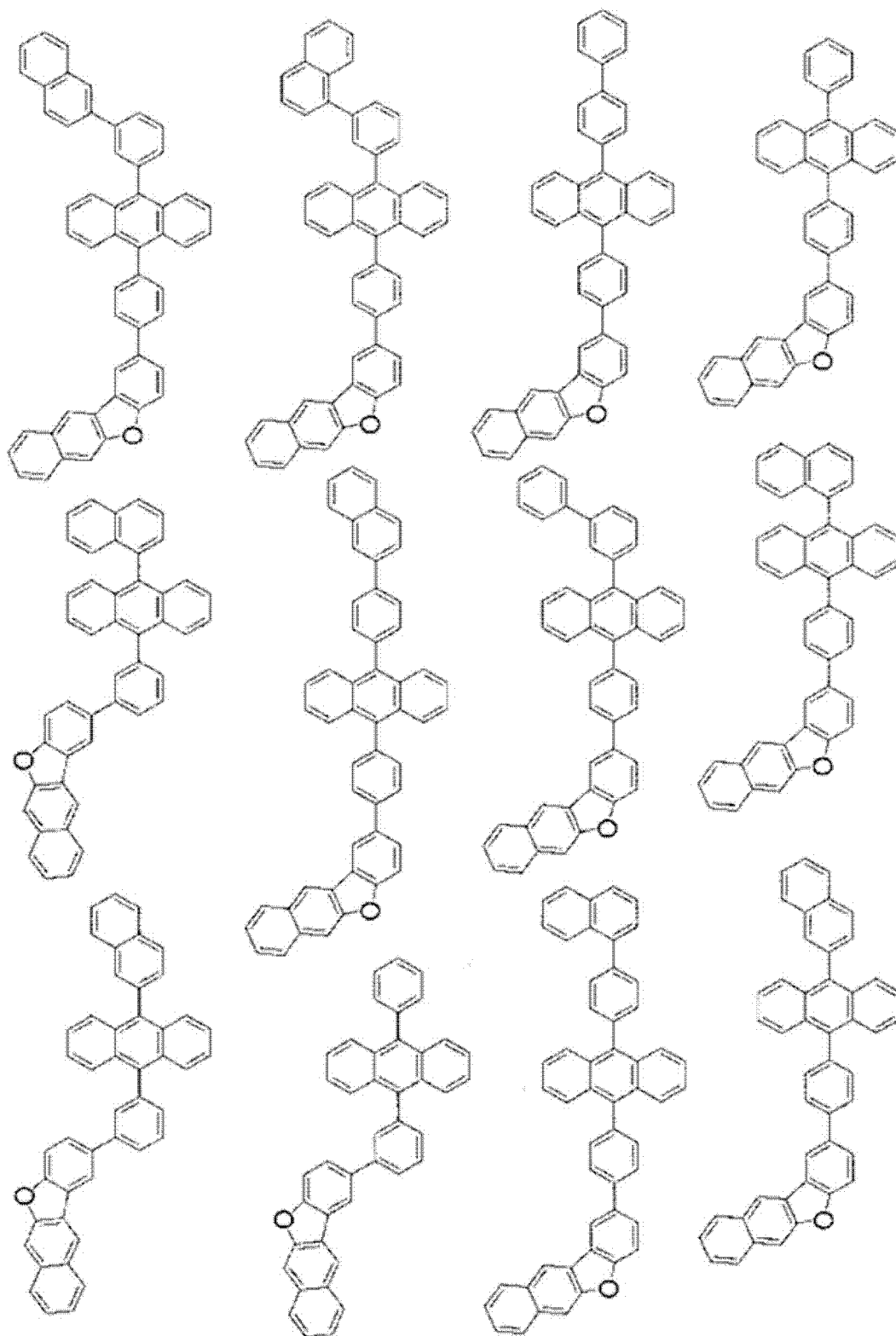
【 0 1 2 8】

【化 6 1】



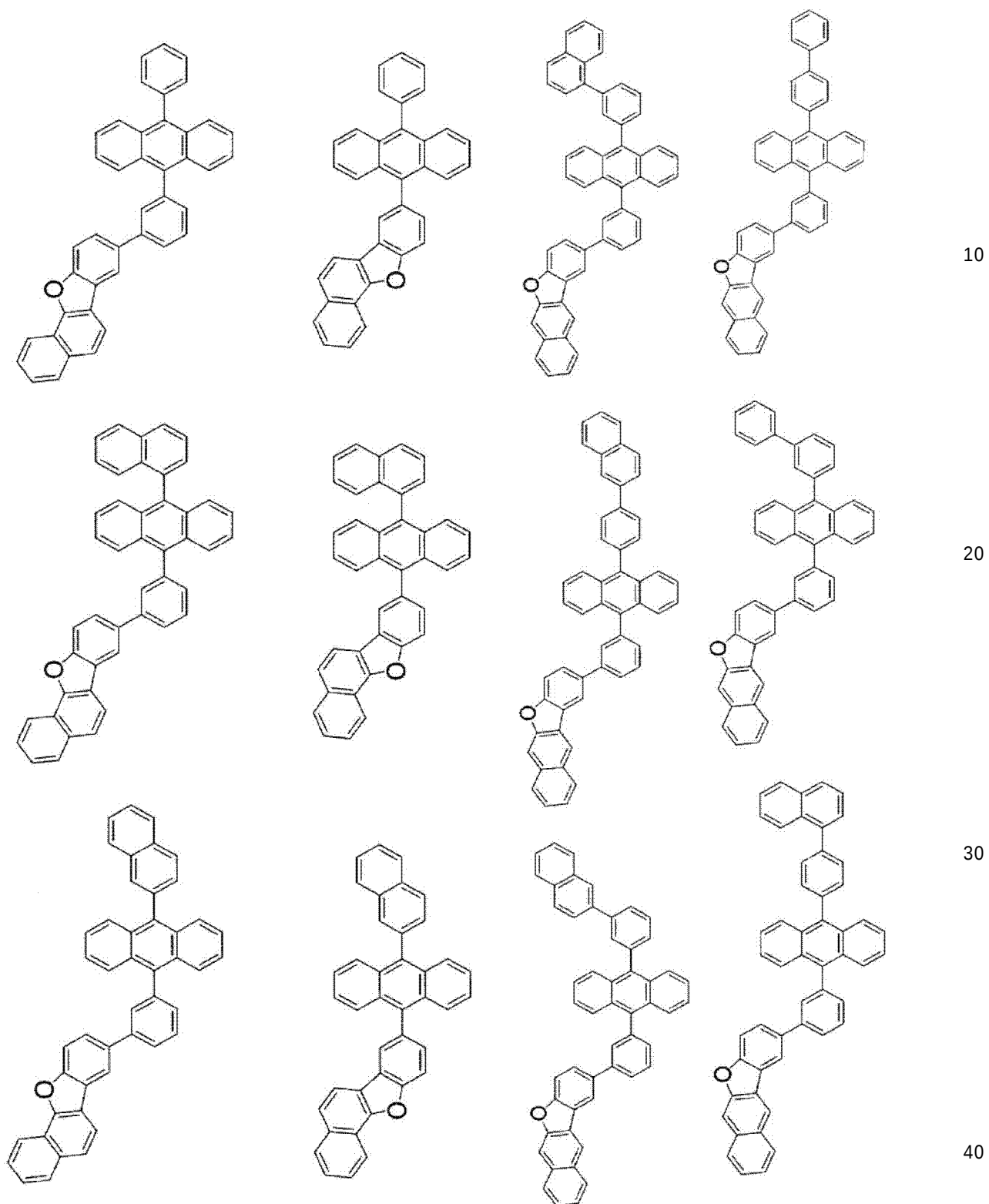
【 0 1 2 9】

【化 6 2】



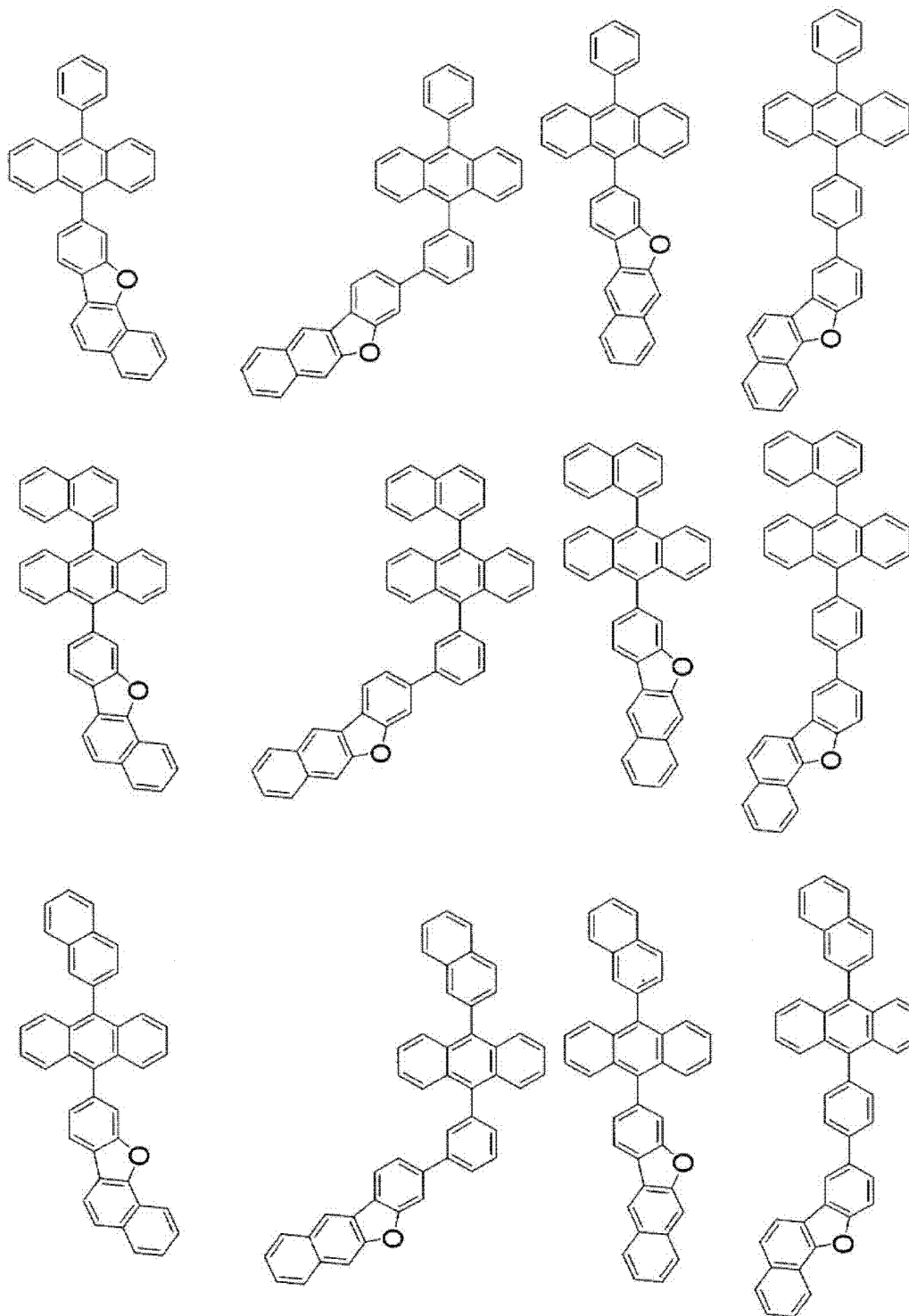
【 0 1 3 0 】

【化 6 3】



【 0 1 3 1】

【化 6 4】



10

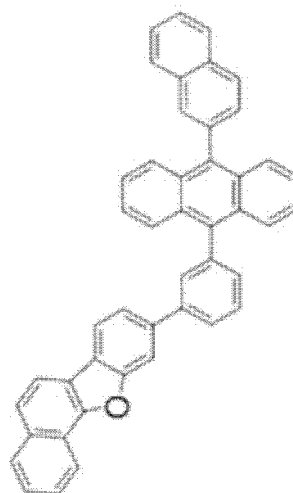
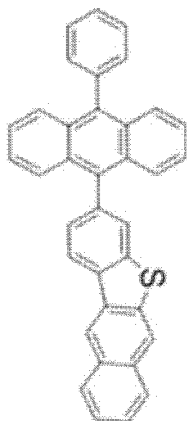
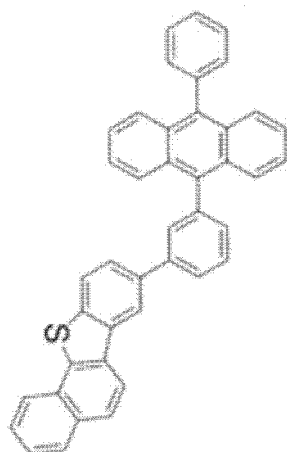
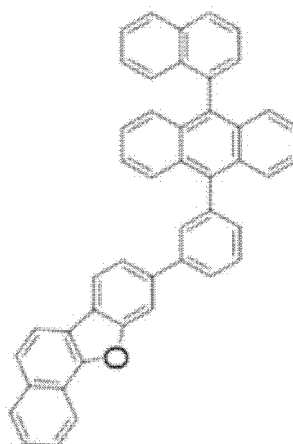
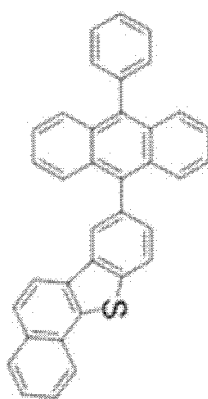
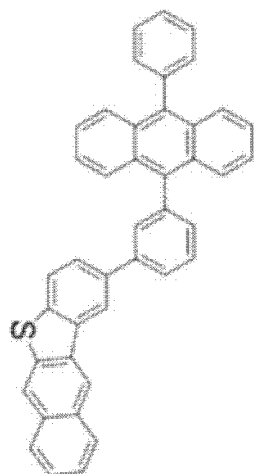
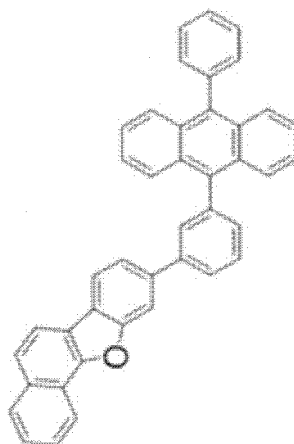
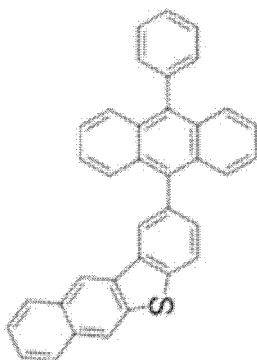
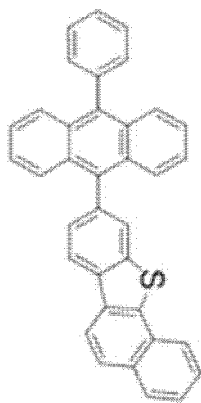
20

30

【 0 1 3 2】

40

【化 6 5】



【 0 1 3 3】

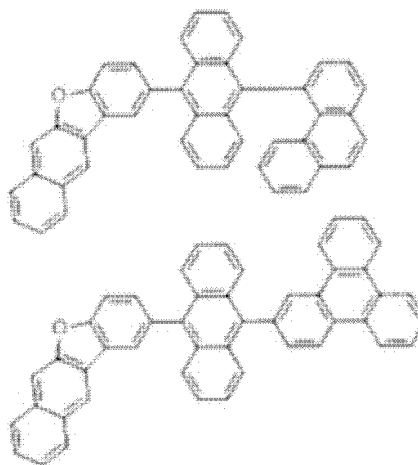
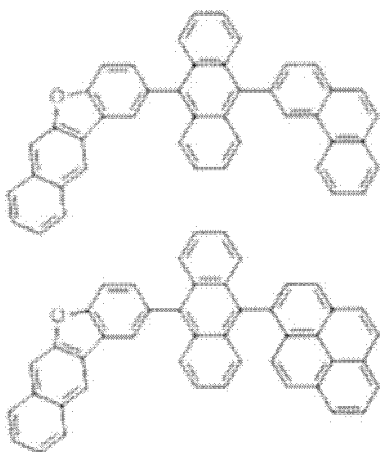
10

20

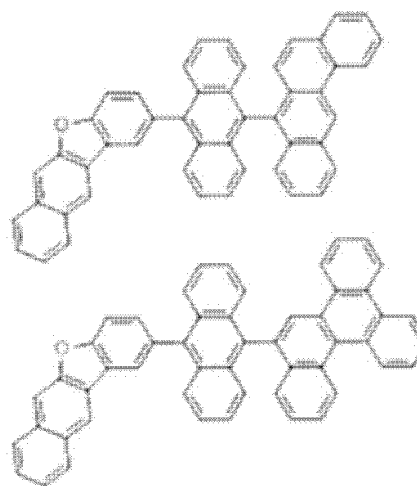
30

40

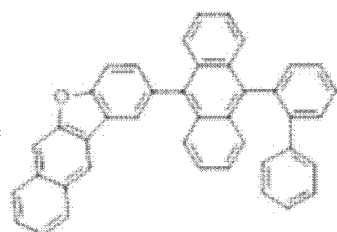
【化 6 6】



10

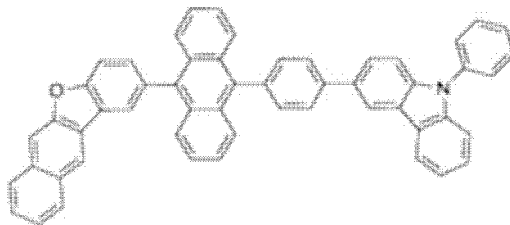
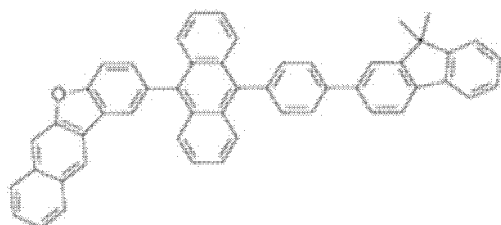
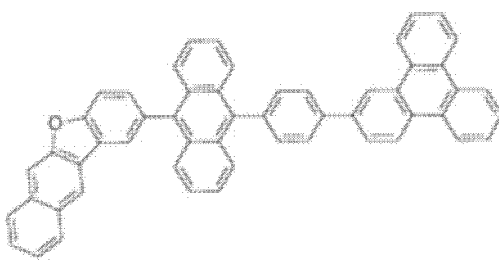
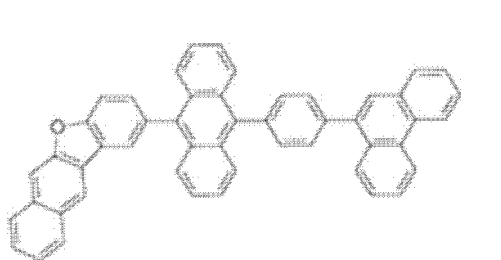


20

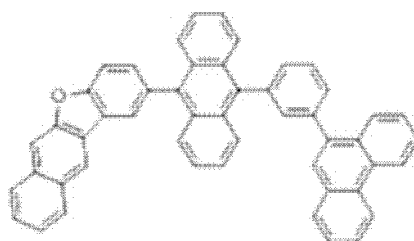
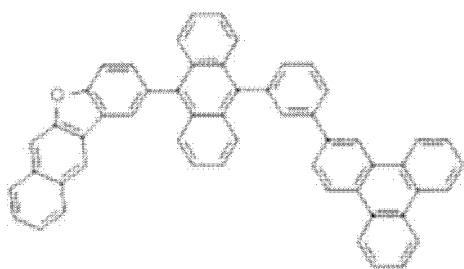


【 0 1 3 4】

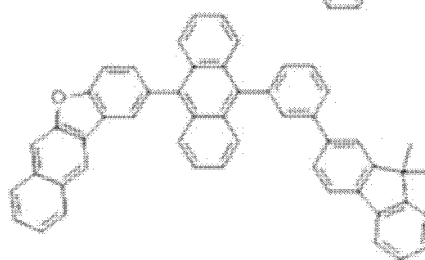
【化 6 7】



10



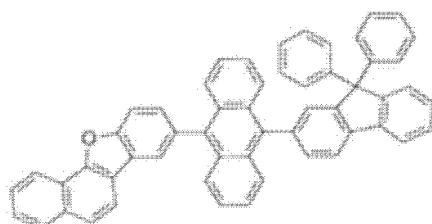
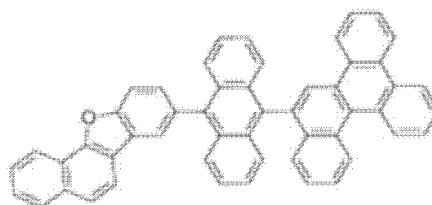
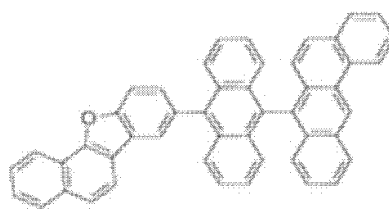
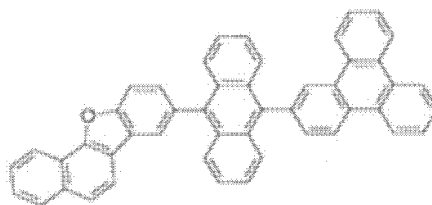
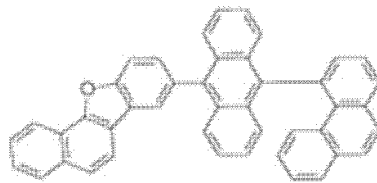
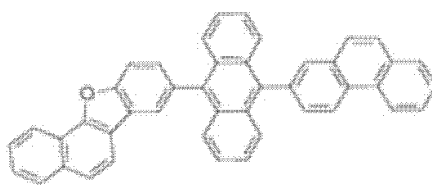
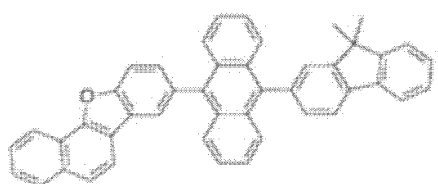
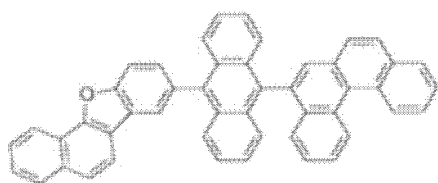
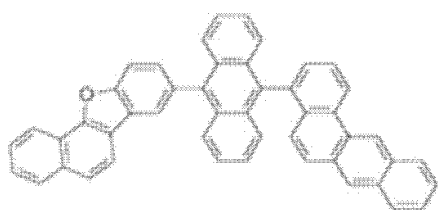
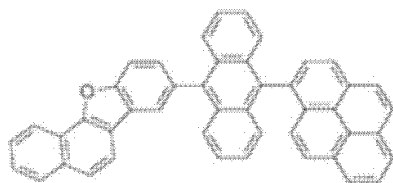
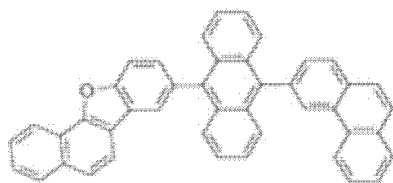
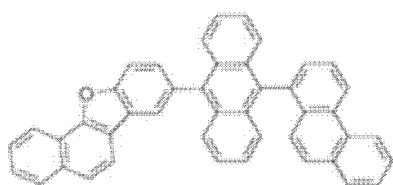
20



【 0 1 3 5 】

30

【化 6 8】



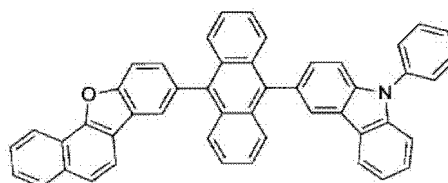
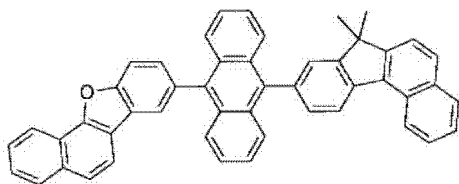
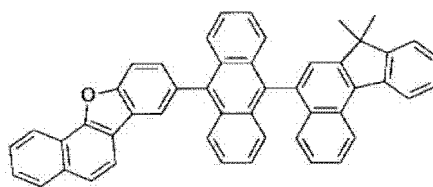
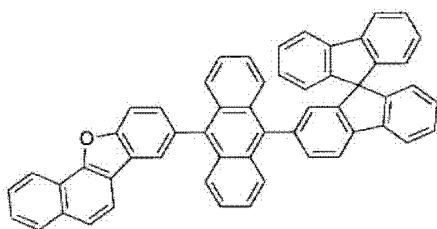
10

20

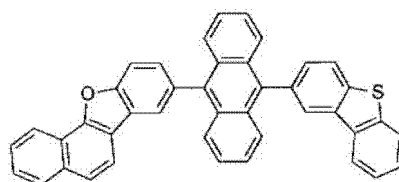
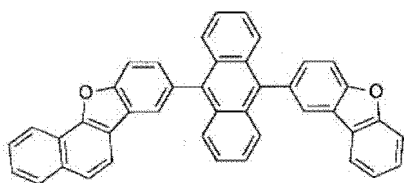
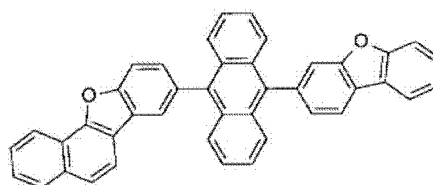
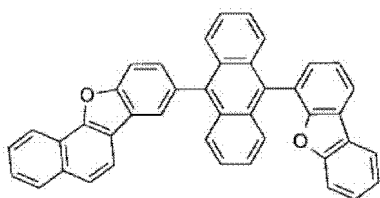
30

【 0 1 3 6 】

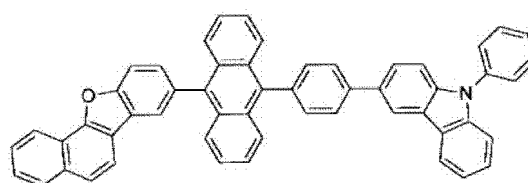
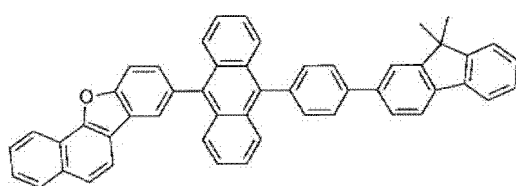
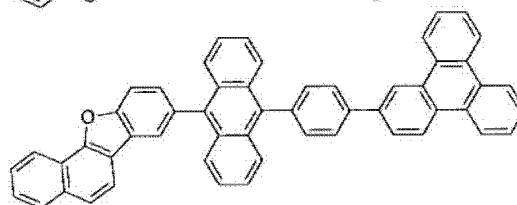
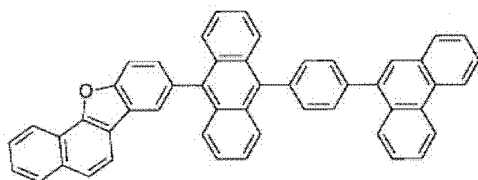
【化 6 9】



10



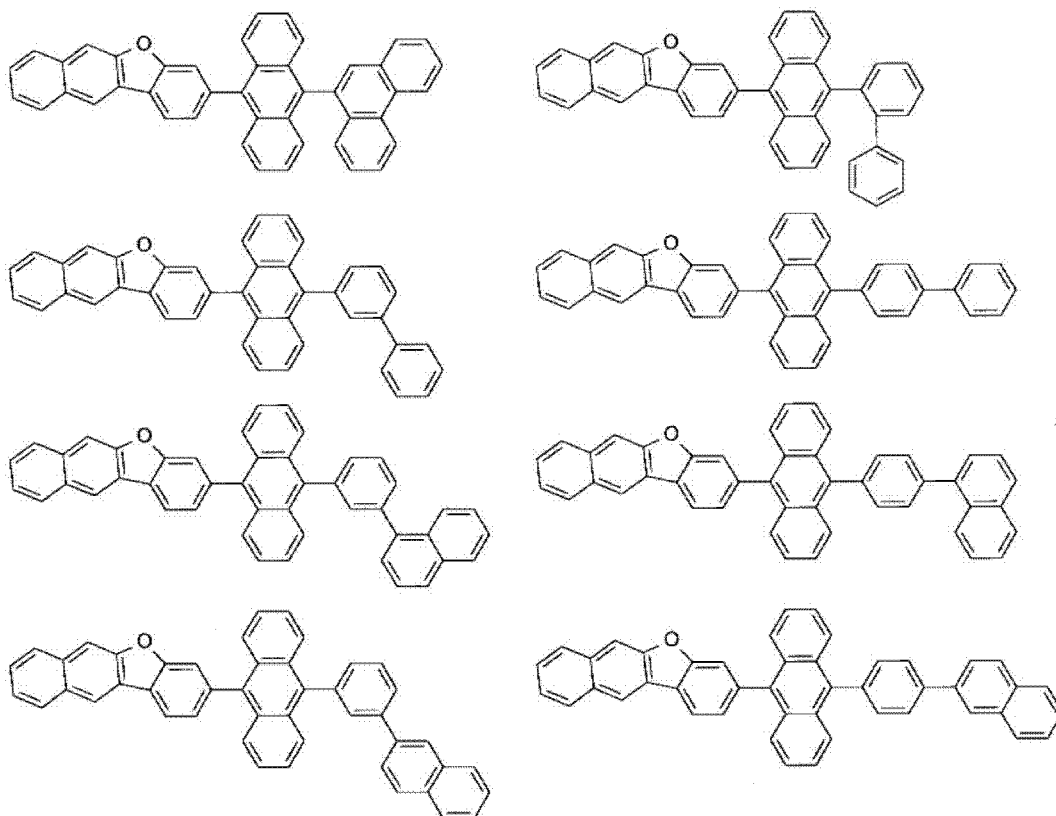
20



30

【 0 1 3 7 】

## 【化 7 0】

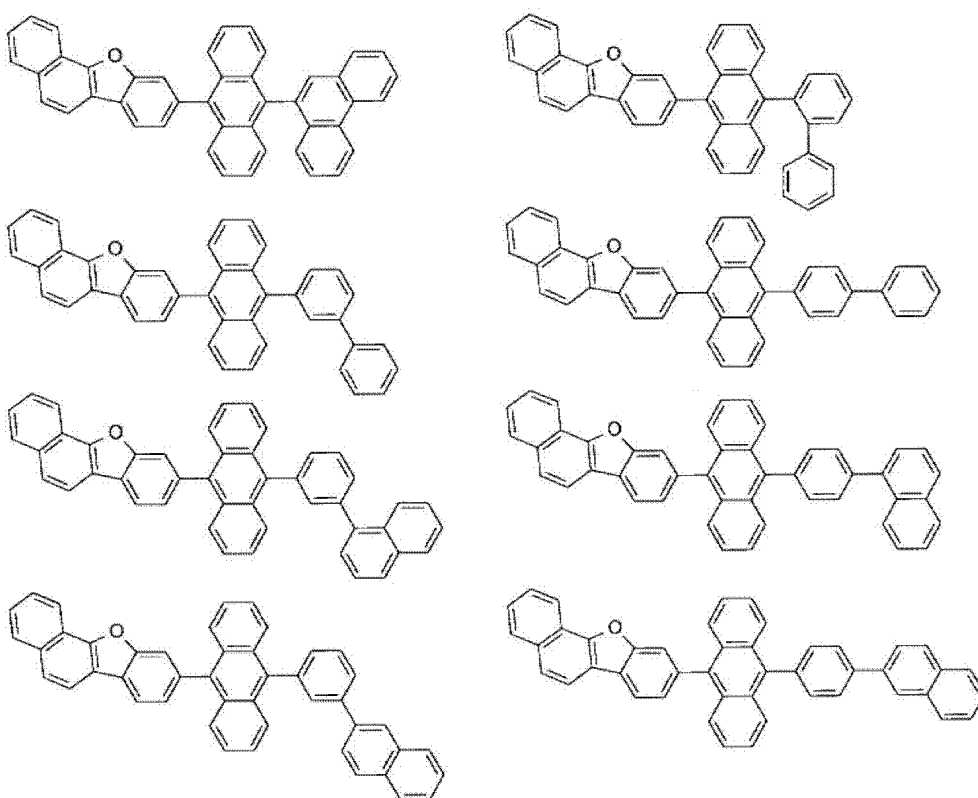


10

20

## 【 0 1 3 8】

## 【化 7 1】



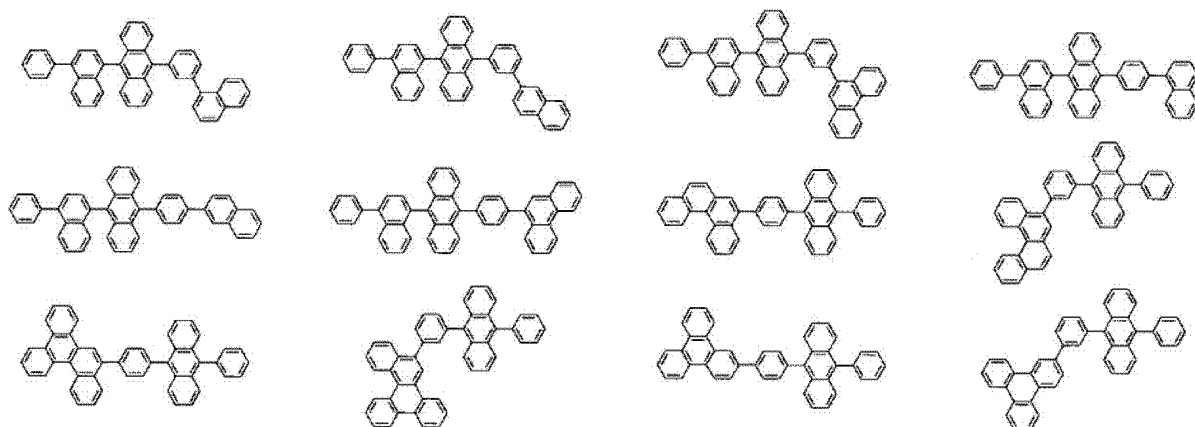
30

40

## 【 0 1 3 9】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

## 【化 7 2】

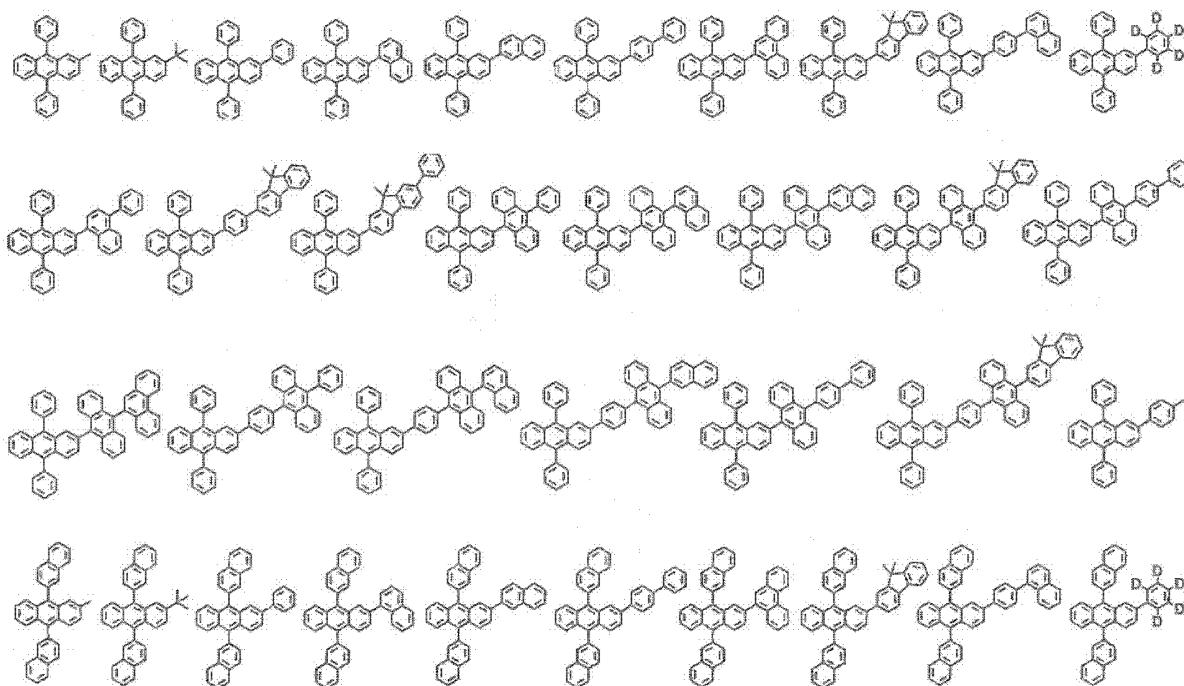


10

## 【 0 1 4 0】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

## 【化 7 3】



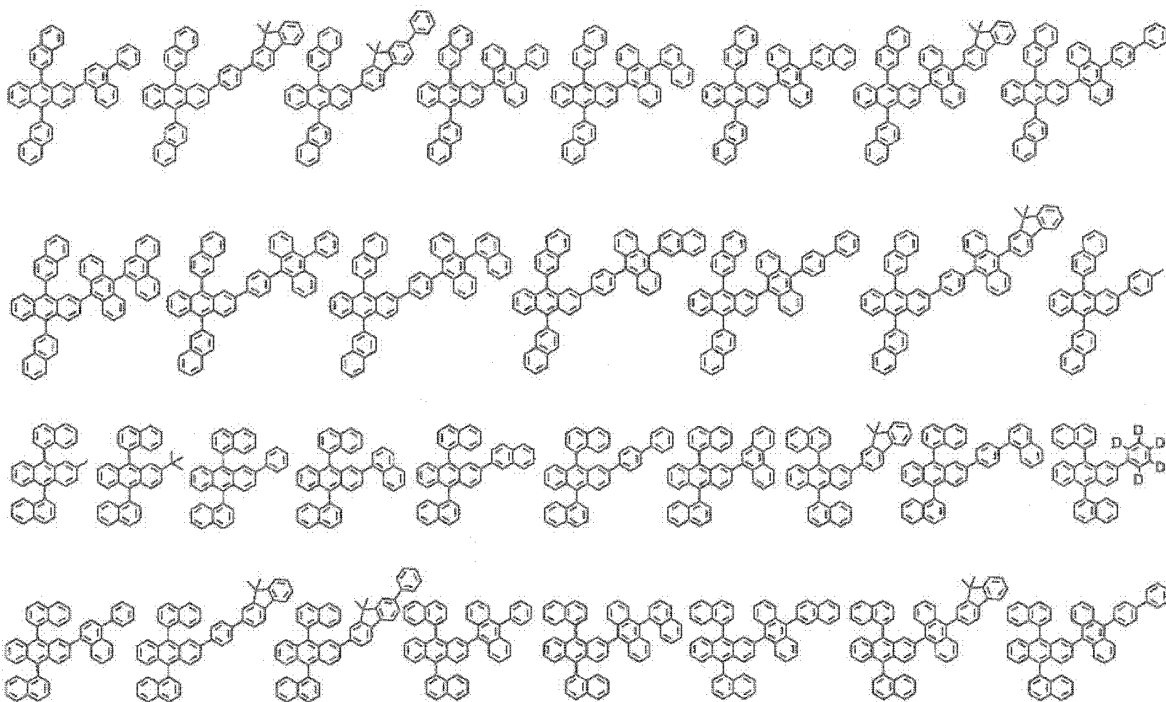
20

30

## 【 0 1 4 1】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

## 【化 7 4】



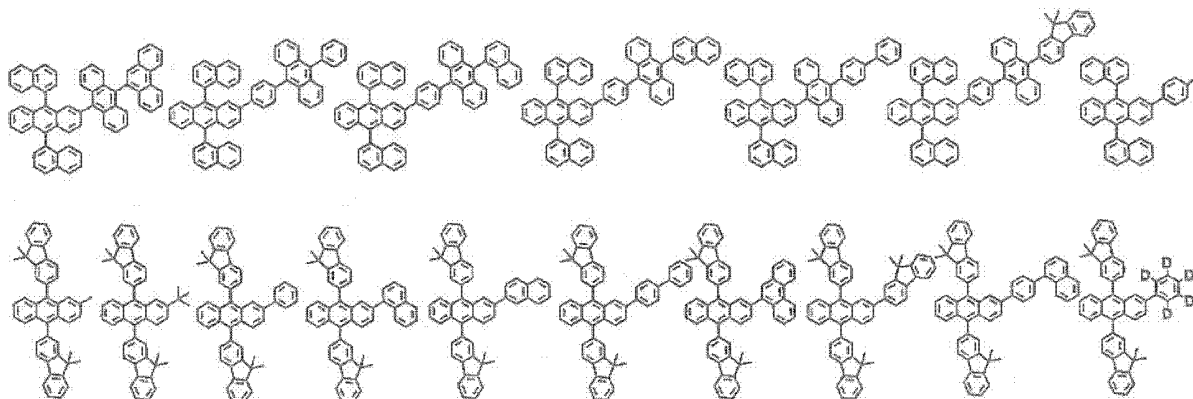
10

20

## 【 0 1 4 2】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

## 【化 7 5】

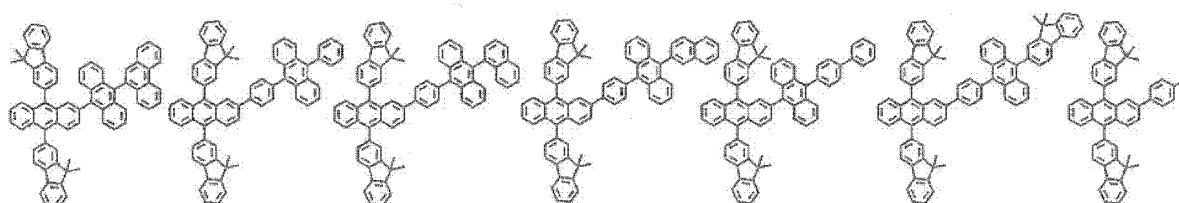
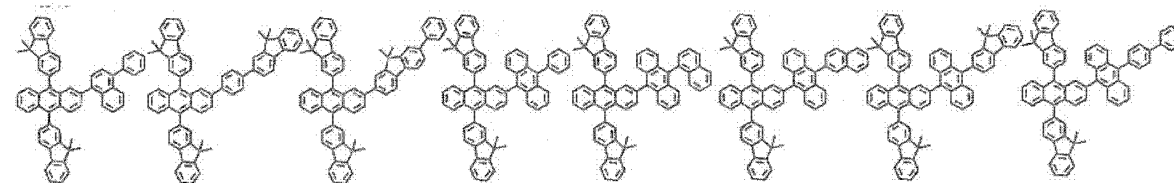


30

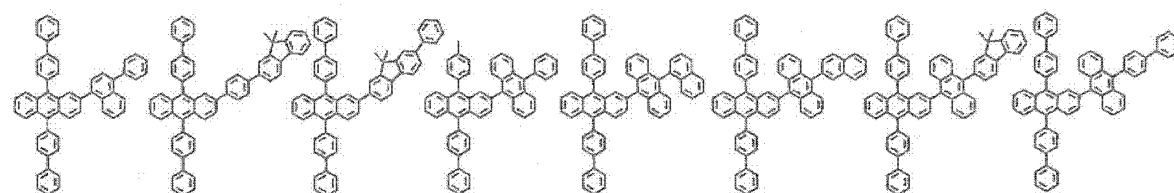
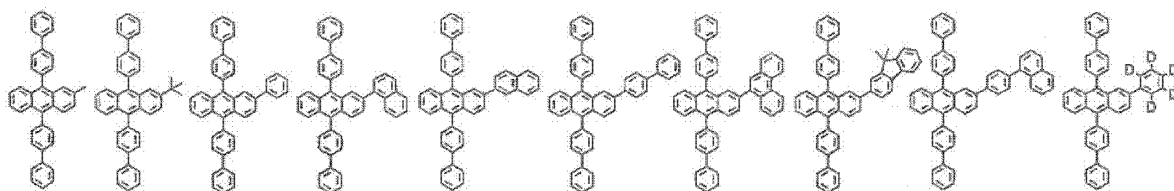
## 【 0 1 4 3】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

## 【化 7 6】



10

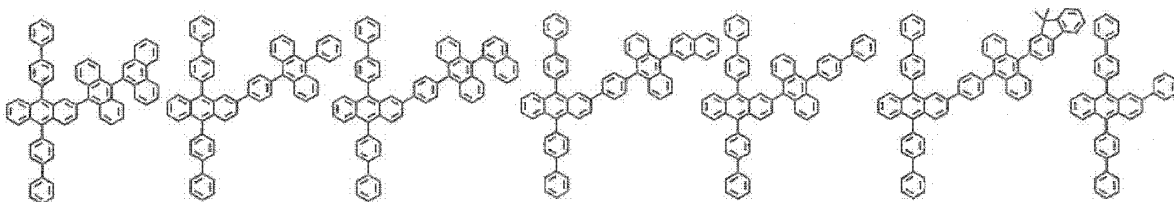


20

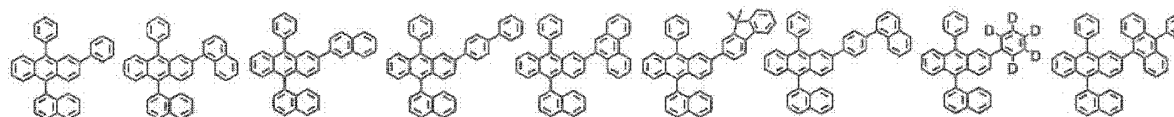
## 【 0 1 4 4】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

## 【化 7 7】



30

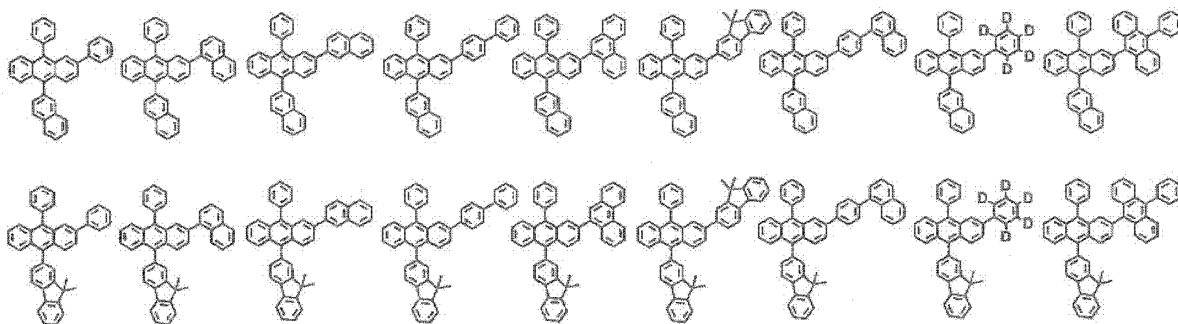


## 【 0 1 4 5】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

40

## 【化 7 8】

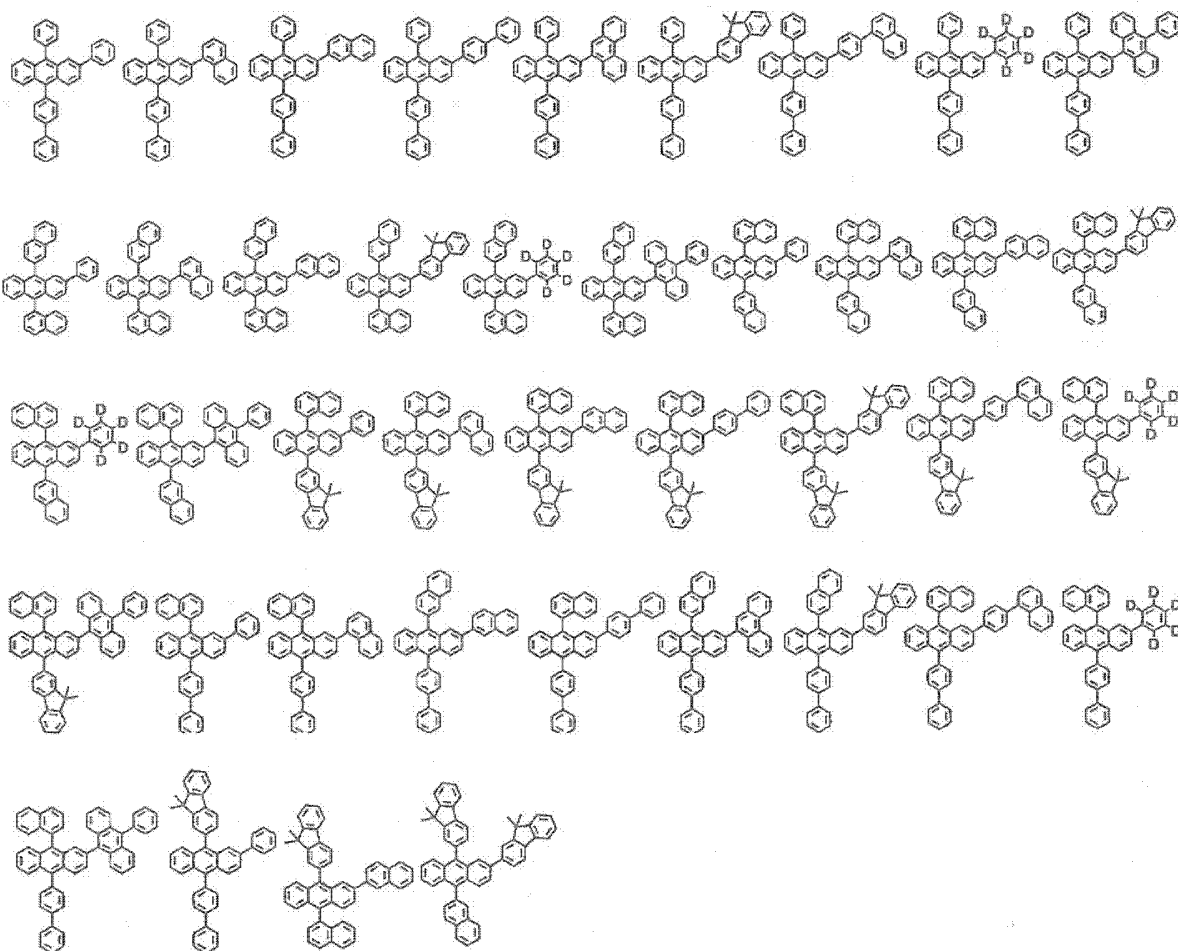


10

## 【 0 1 4 6】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

## 【化 7 9】



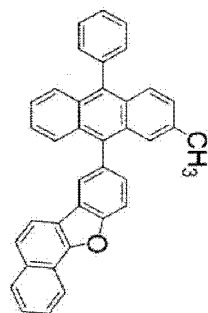
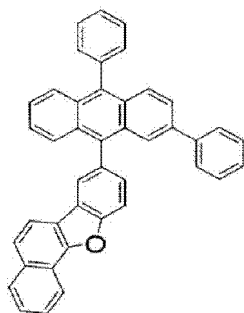
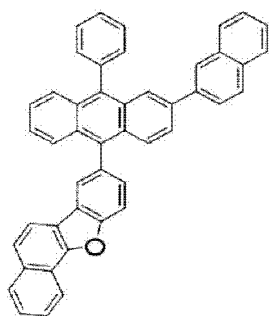
20

30

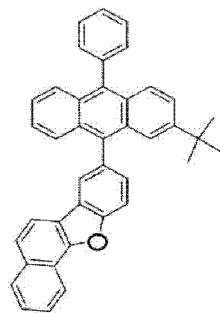
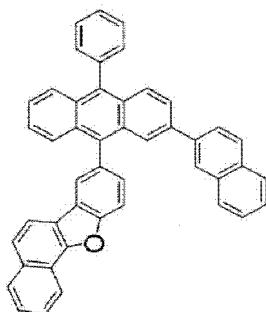
## 【 0 1 4 7】

40

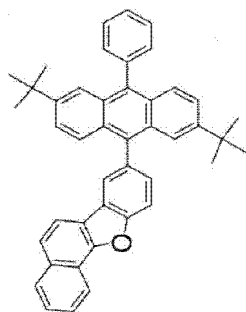
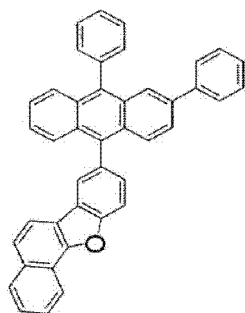
【化 8 0】



10



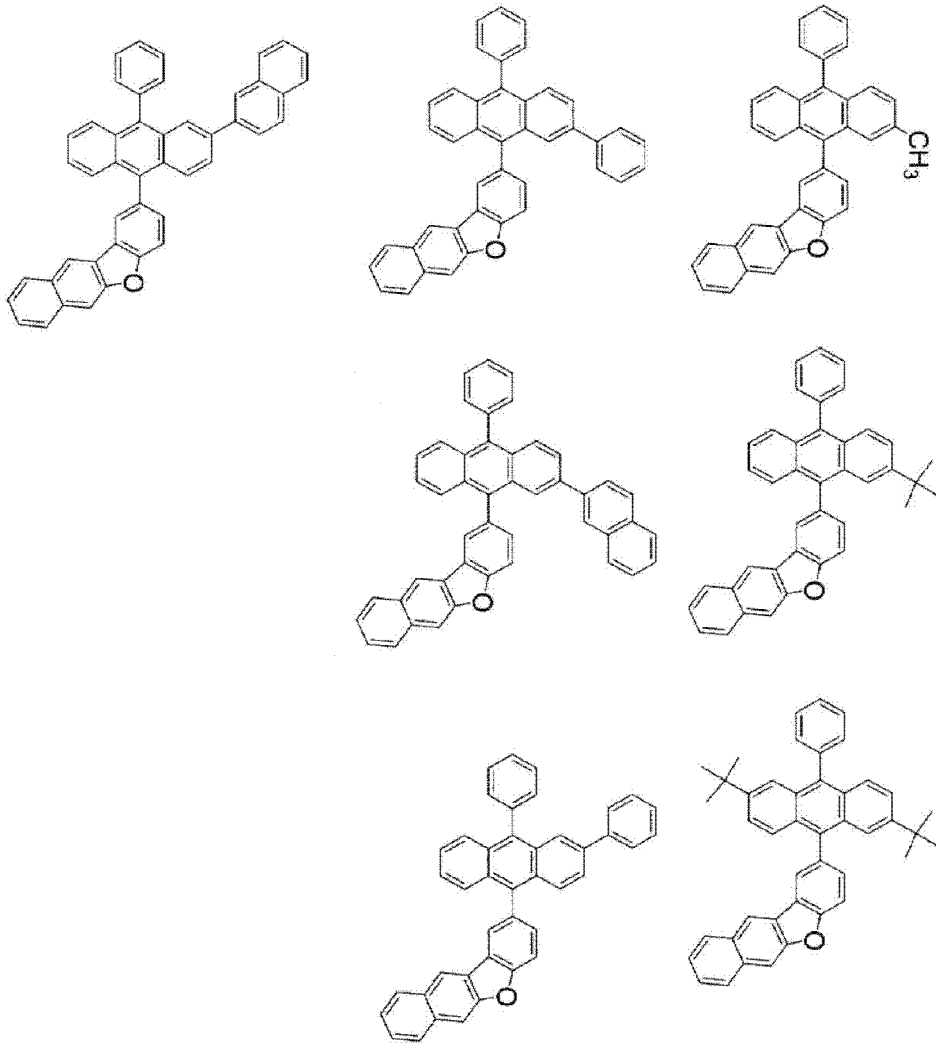
20



【 0 1 4 8】

30

## 【化 8 1】



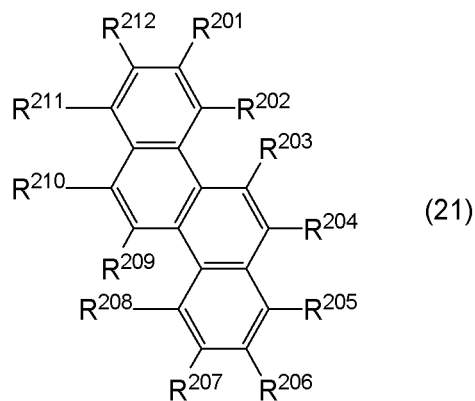
10

20

## 【 0 1 4 9 】

前記クリセン骨格含有化合物としては、例えば、下記式(21)で表される化合物が好ましい。

## 【化 8 2】



30

40

## 【 0 1 5 0 】

式(21)において、 $R^{201} \sim R^{212}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換基、又は  $-L^2-Ar^{21}$  である。但し、 $R^{201} \sim R^{212}$ の少なくとも1つは  $-L^2-Ar^{21}$  である。

該置換基の詳細は式(D1)の $R_A$ 、 $R_B$ 及び $R_C$ に関して記載した前記置換基と同じであり、 $L^2$ 及び $Ar^{21}$ の詳細は、式(19)の $L$ 及び $Ar$ に関して記載したとおりで

50

ある。

$R^{204}$  と  $R^{210}$  の一方又は双方が  $-L^2-Ar^{21}$  であることが好ましい。

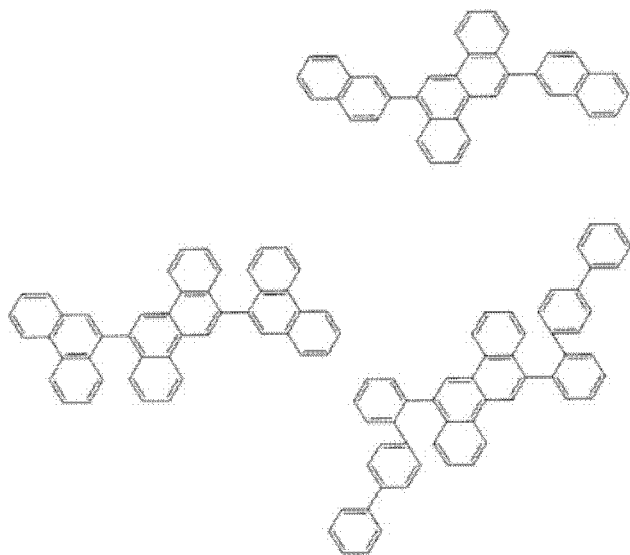
【0151】

式(21)で表されるクリセン誘導体の具体例としては、以下に示すものが挙げられるが、特にこれらに制限されるものではない。

【0152】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

【化83】



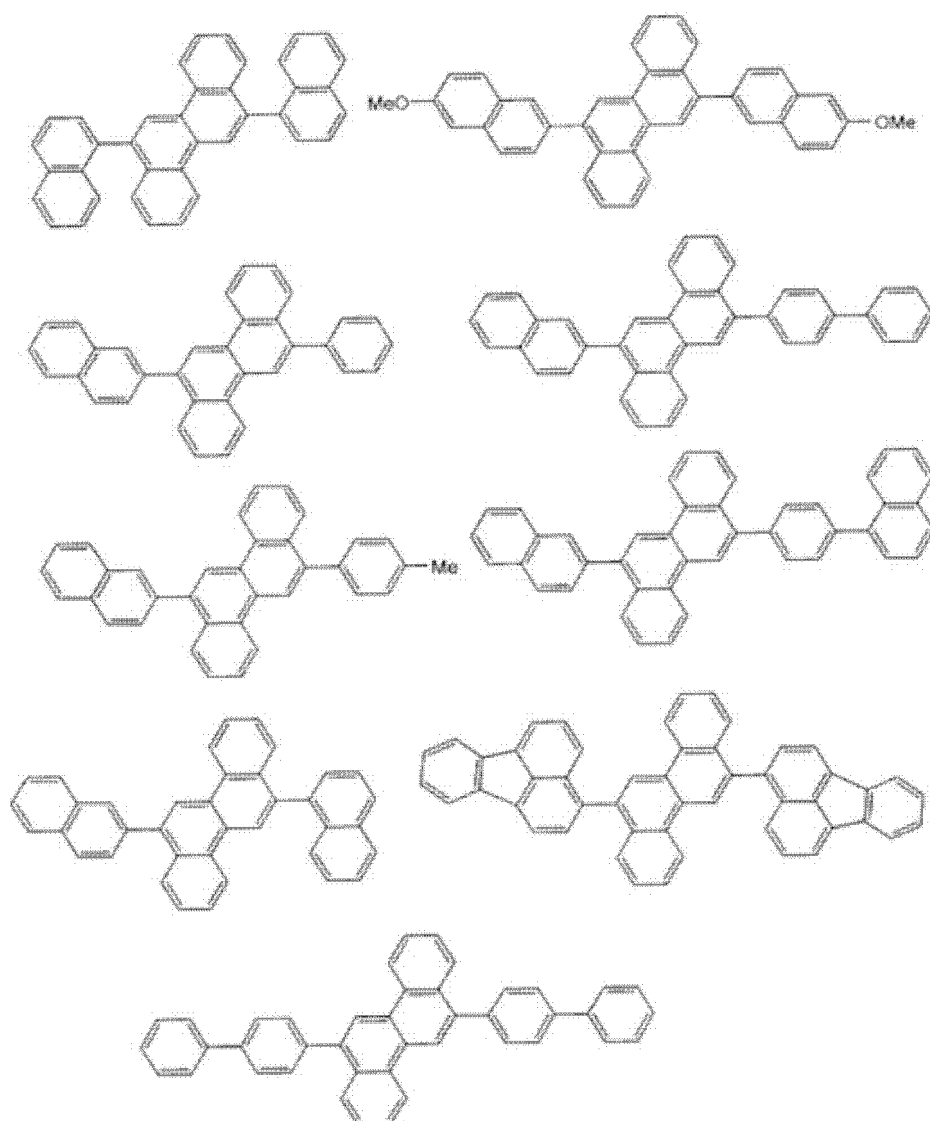
10

20

【0153】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

## 【化 8 4】



10

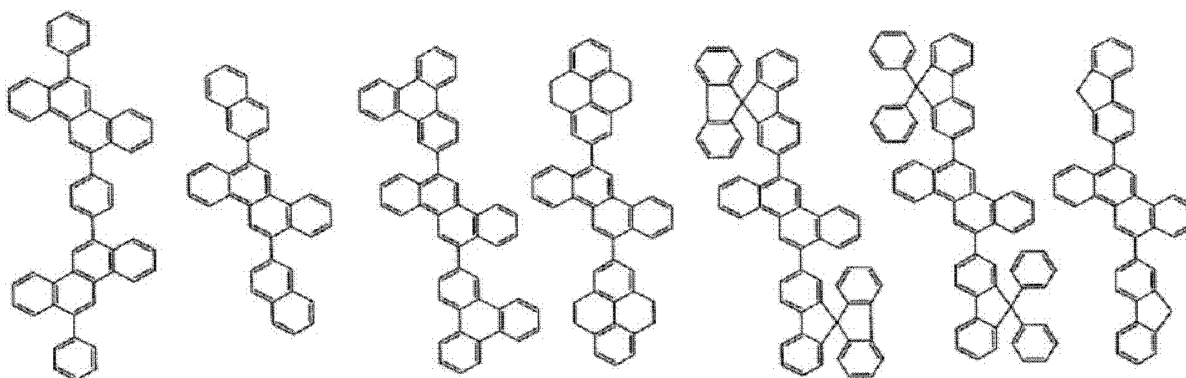
20

30

## 【 0 1 5 4】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

## 【化 8 5】

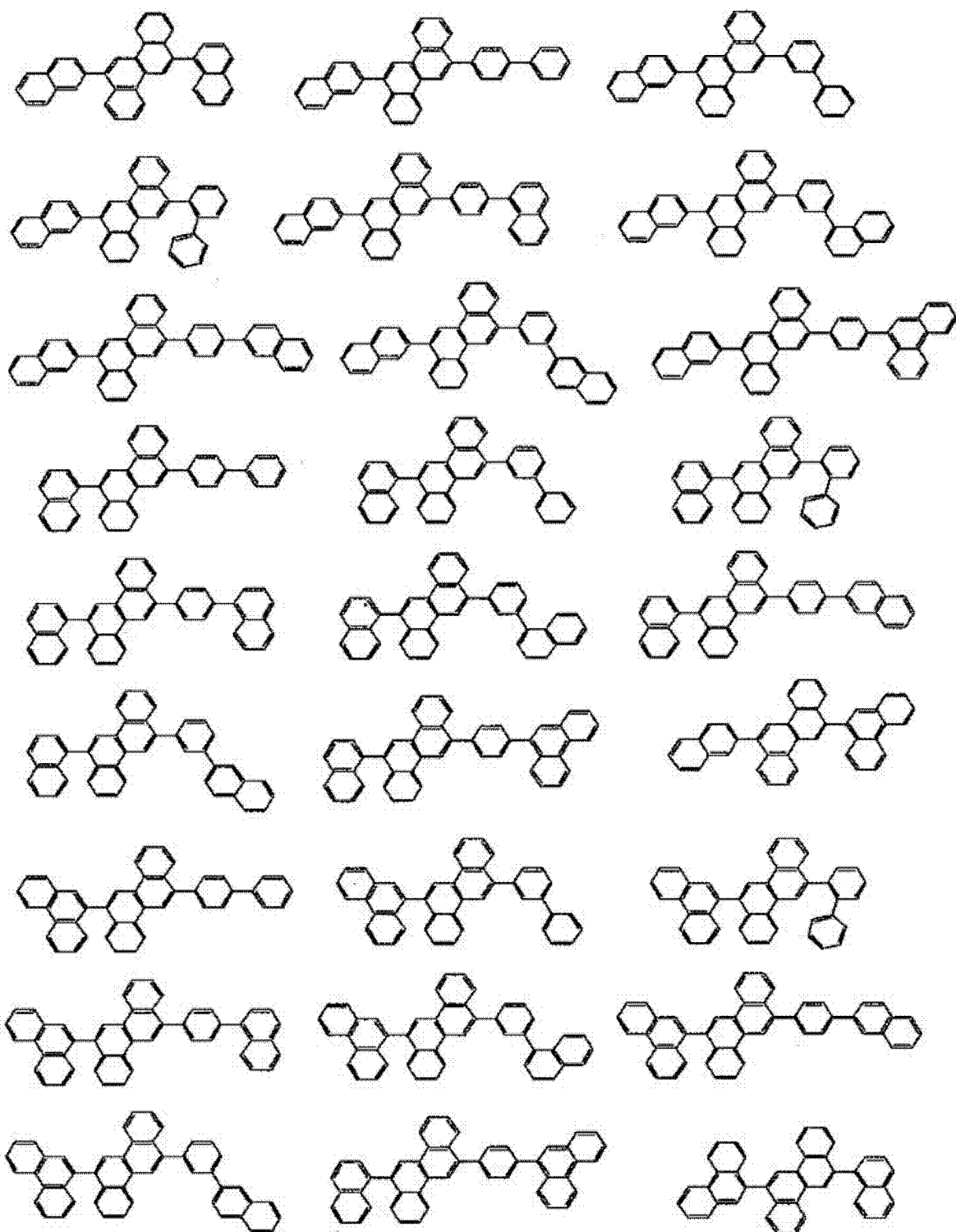


40

## 【 0 1 5 5】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

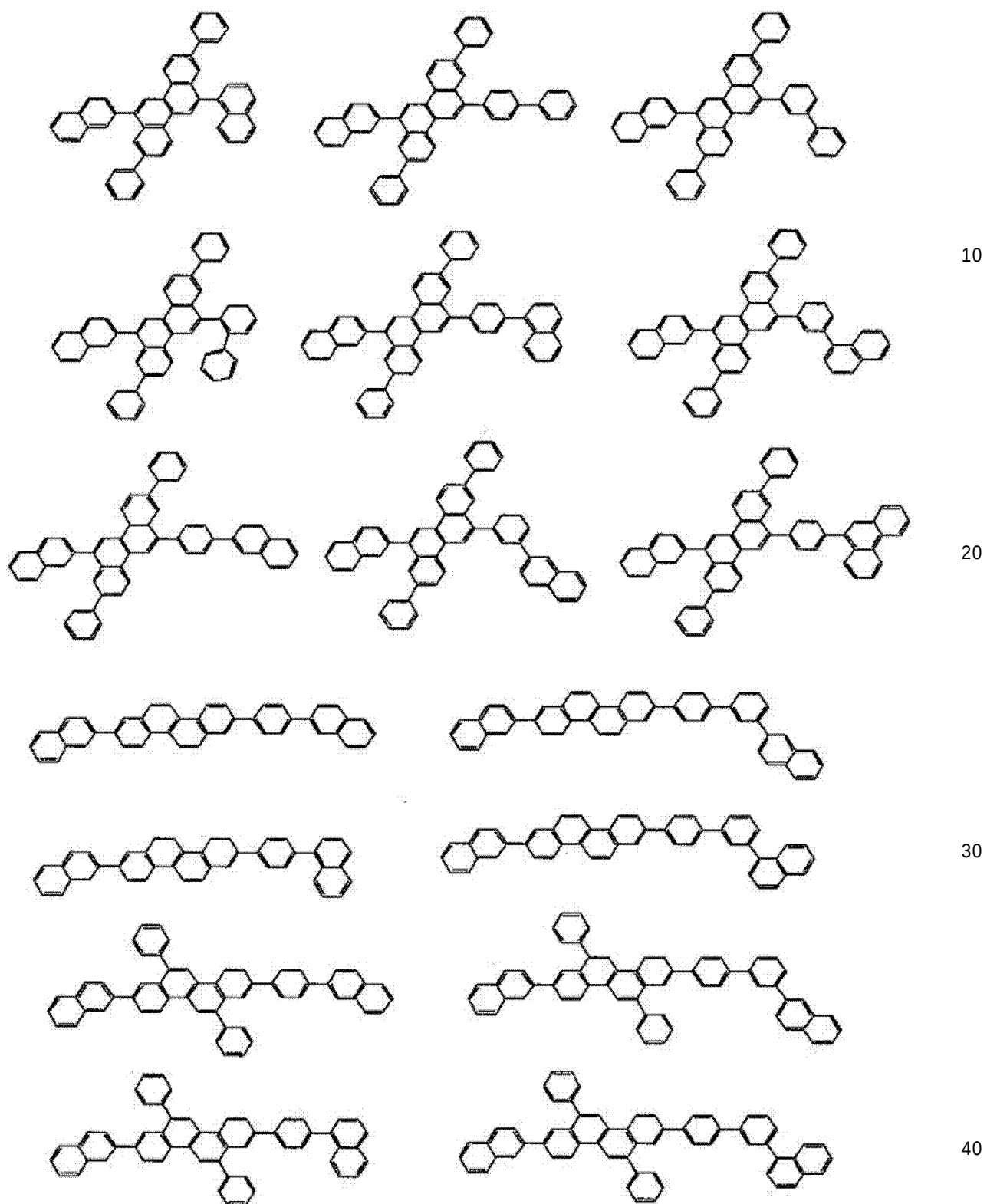
## 【化 8 6】



## 【 0 1 5 6】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

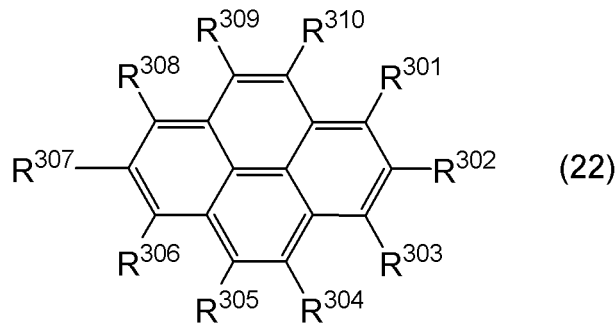
## 【化 8 7】



## 【 0 1 5 7】

前記ピレン骨格含有化合物としては、例えば、下記式(22)で表される化合物が好ましい。

## 【化 8 8】



10

## 【 0 1 5 8】

式(22)において、 $R^{301} \sim R^{310}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換基、又は $-L^3-Ar^{31}$ である。但し、 $R^{301} \sim R^{310}$ の少なくとも1つは $-L^3-Ar^{31}$ である。

該置換基の詳細は式(D1)の $R_A$ 、 $R_B$ 及び $R_C$ に関して記載した前記置換基と同じであり、 $L^3$ 及び $Ar^{31}$ の詳細は、式(19)の $L$ 及び $Ar$ に関して記載したとおりである。

$R^{301}$ 、 $R^{303}$ 、 $R^{306}$ 、及び $R^{308}$ のいずれか1つ以上が $-L^3-Ar^{31}$ であることが好ましい。

## 【 0 1 5 9】

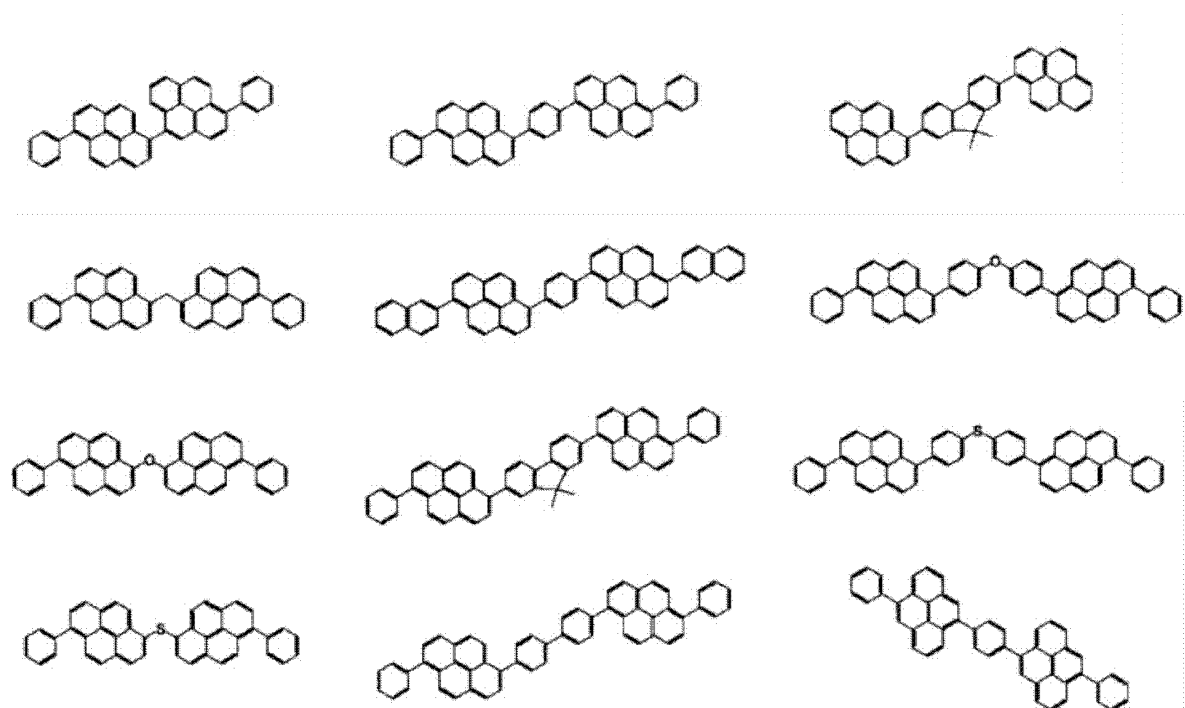
20

式(22)で表されるピレン誘導体の具体例としては、以下に示す化合物が挙げられるが、特にこれらに制限されるものではない。

## 【 0 1 6 0】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

## 【化 8 9】



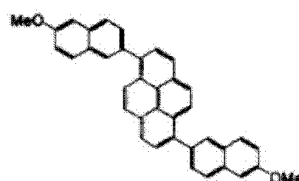
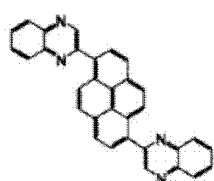
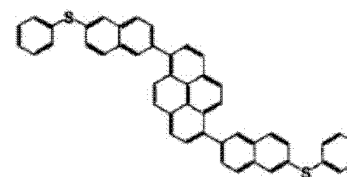
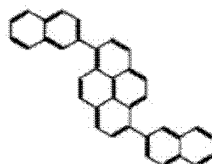
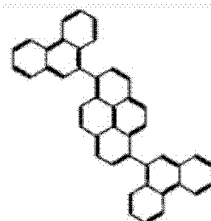
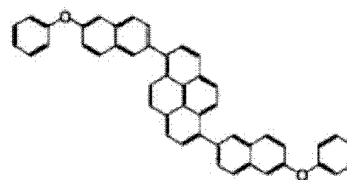
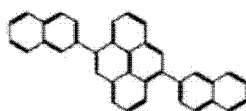
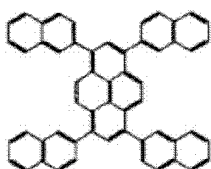
30

40

## 【 0 1 6 1】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

## 【化 9 0】



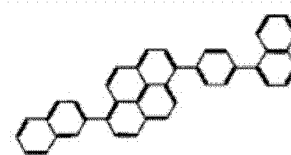
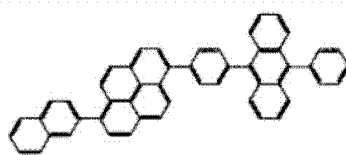
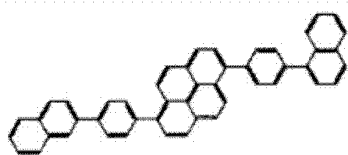
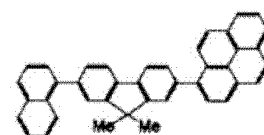
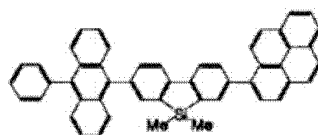
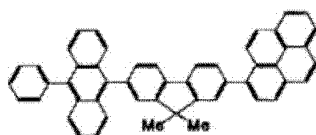
10

20

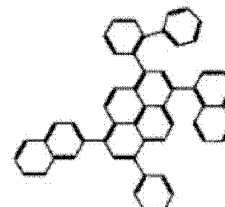
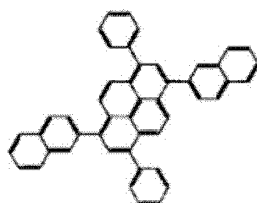
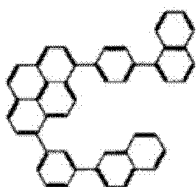
## 【 0 1 6 2】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

## 【化 9 1】



30

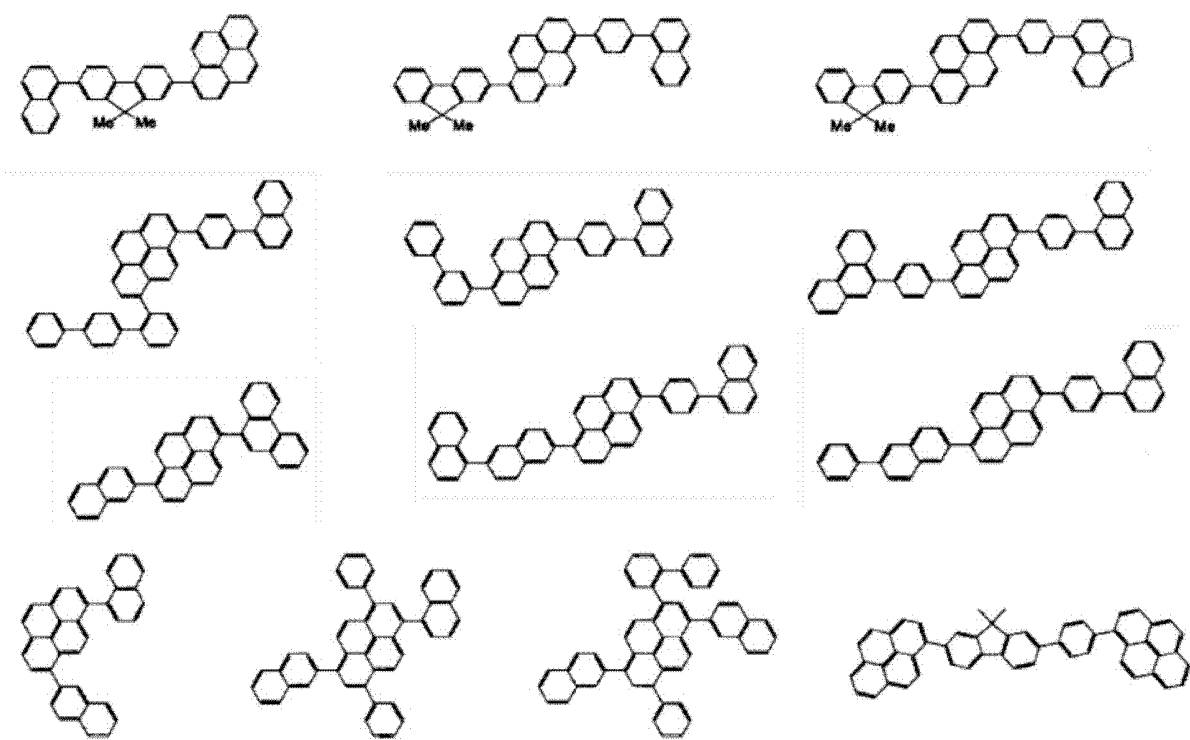


40

## 【 0 1 6 3】

下記化合物の構造において、6員環はすべてベンゼン環である。

【化 9 2】

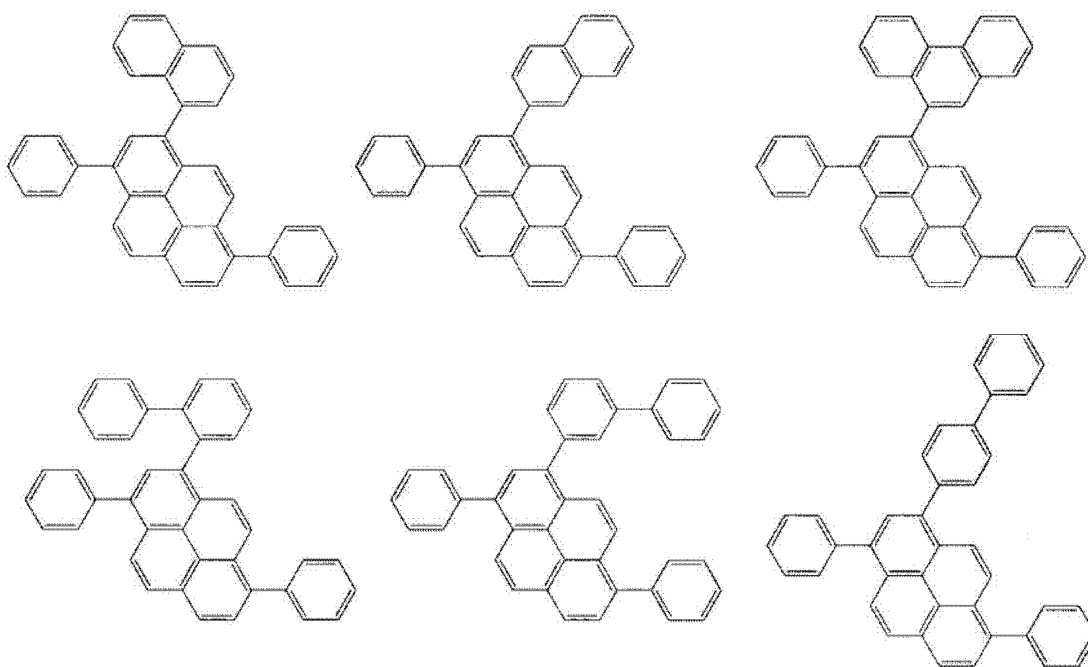


10

20

【 0 1 6 4】

【化 9 3】

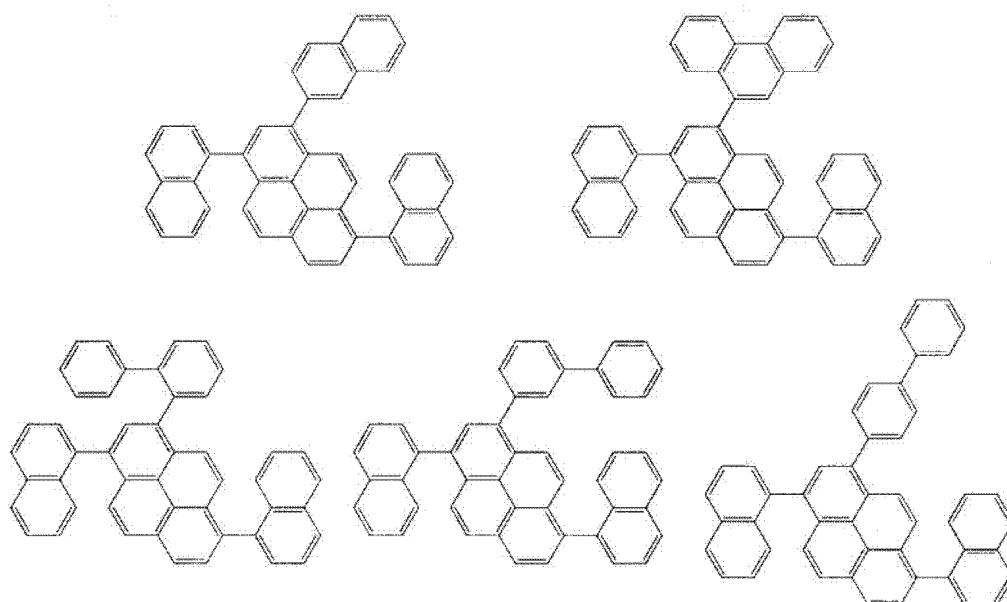


30

40

【 0 1 6 5】

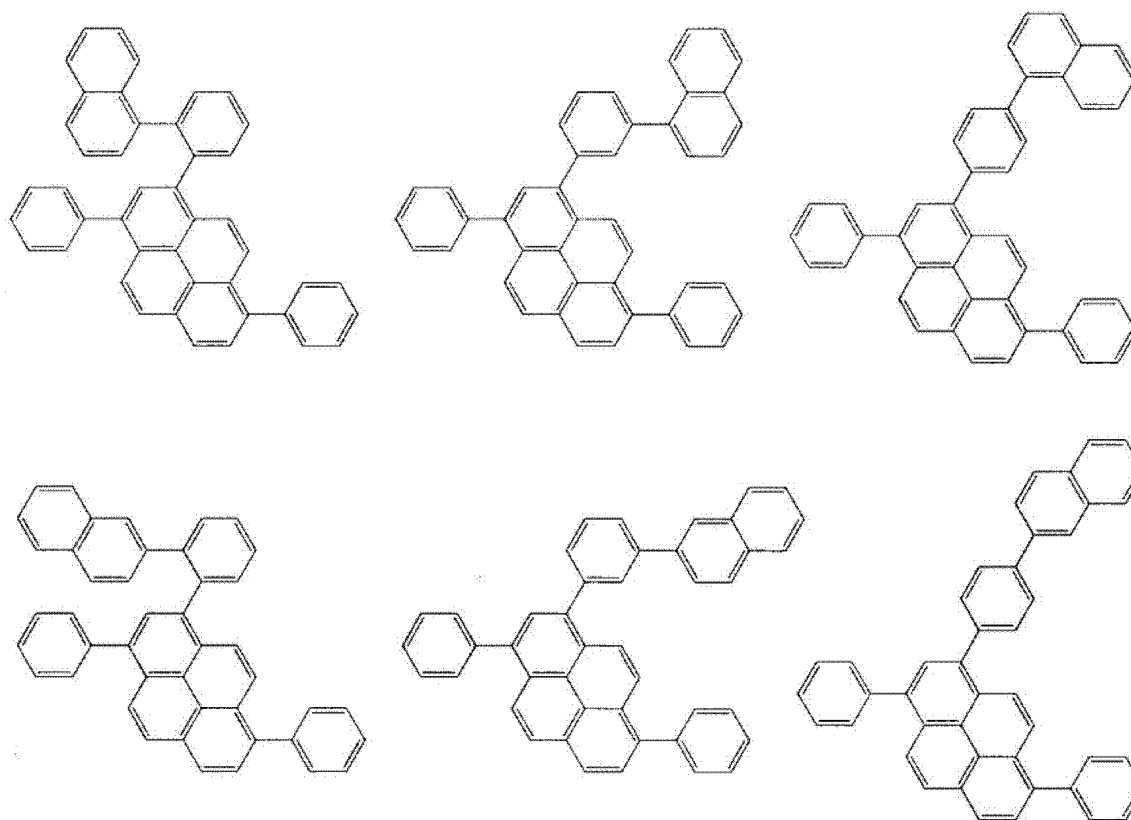
【化 9 4】



10

【 0 1 6 6 】

【化 9 5】



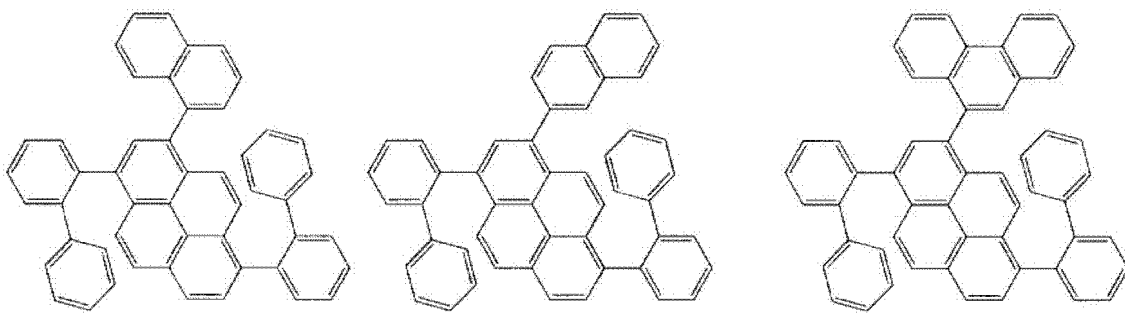
20

30

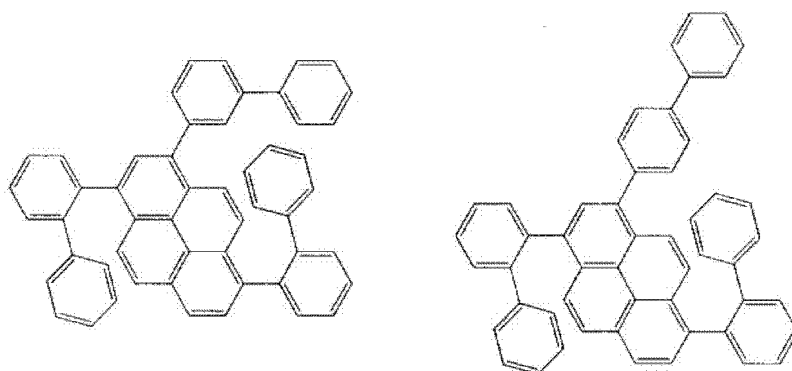
40

【 0 1 6 7 】

【化 9 6】



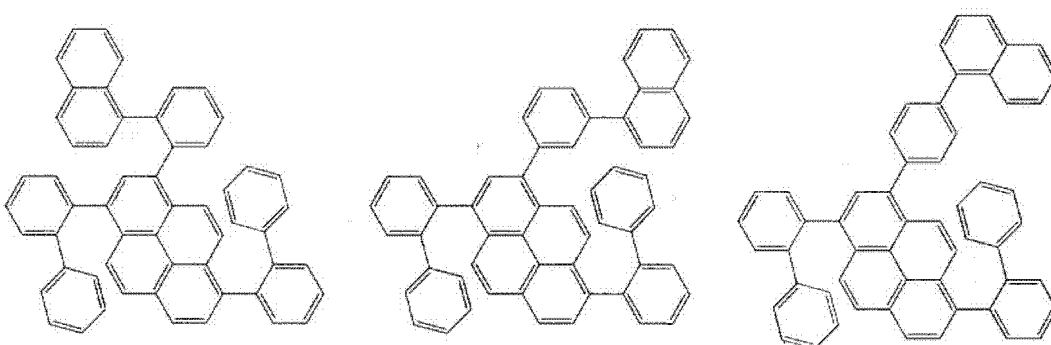
10



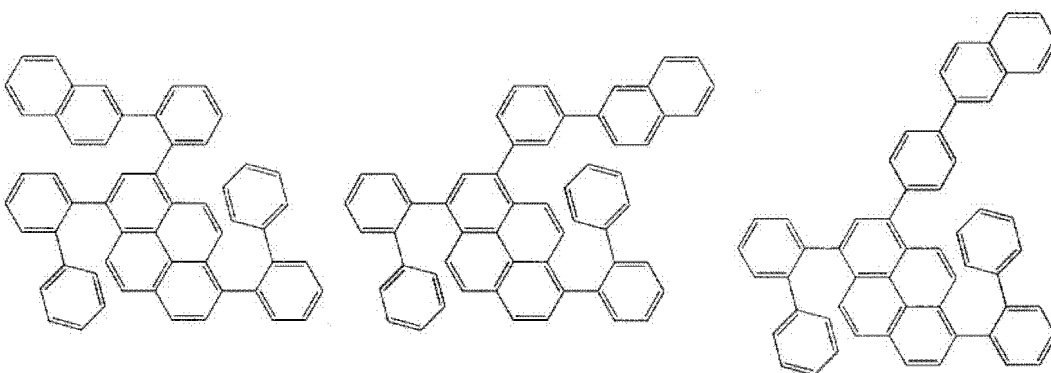
20

【 0 1 6 8】

【化 9 7】



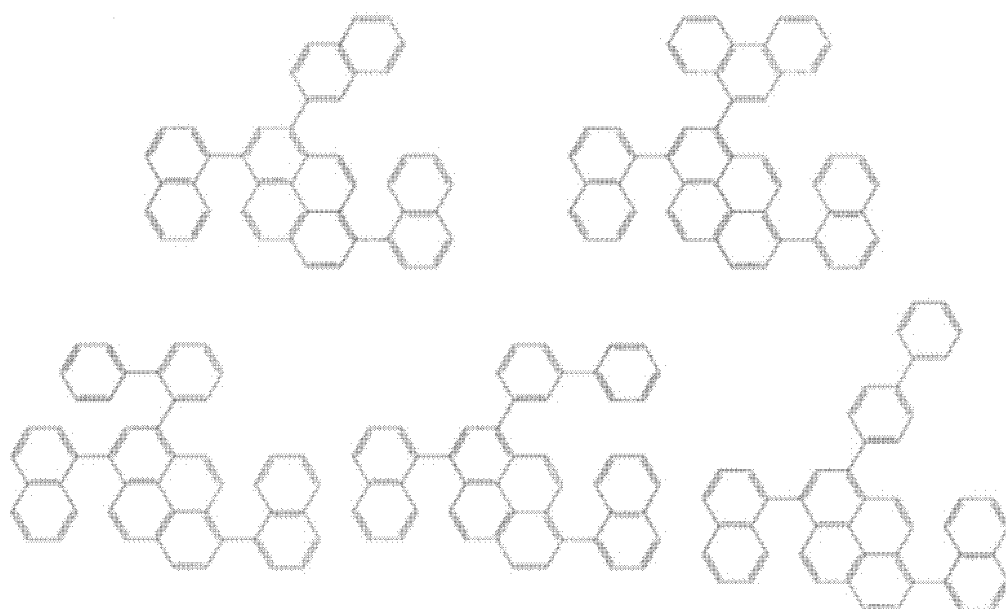
30



40

【 0 1 6 9】

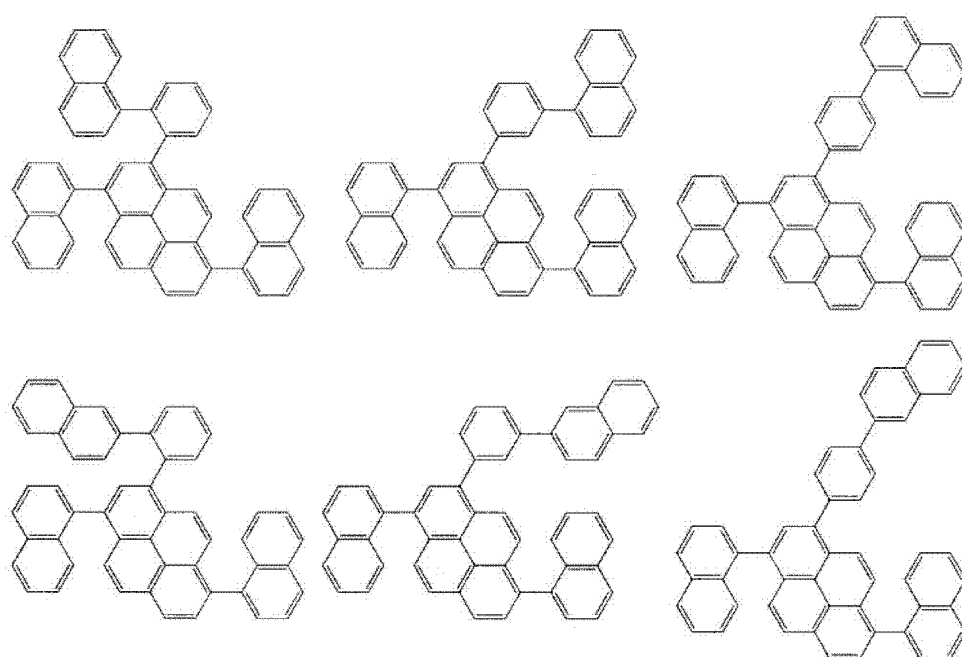
【化 9 8】



10

【 0 1 7 0】

【化 9 9】

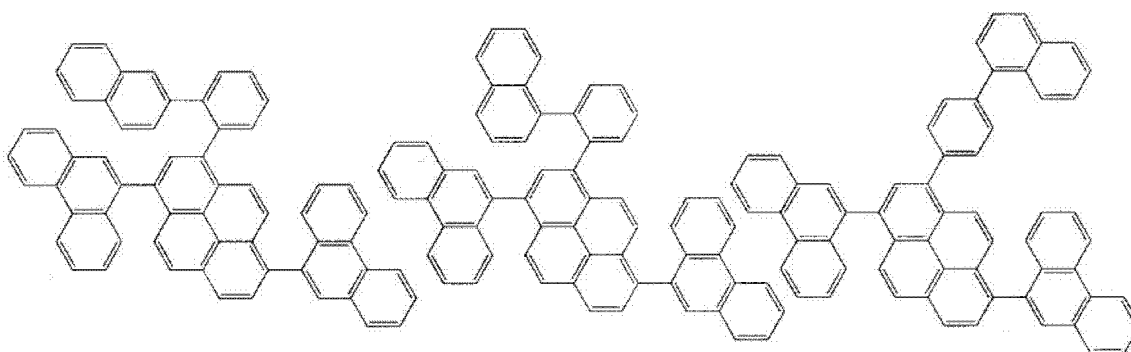


20

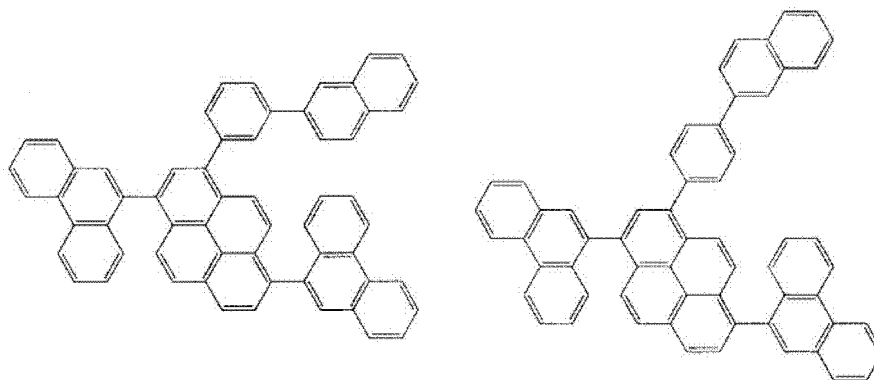
30

【 0 1 7 1】

【化 1 0 0】



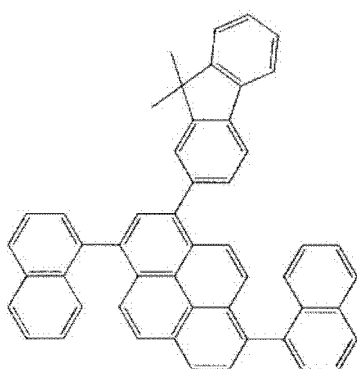
10



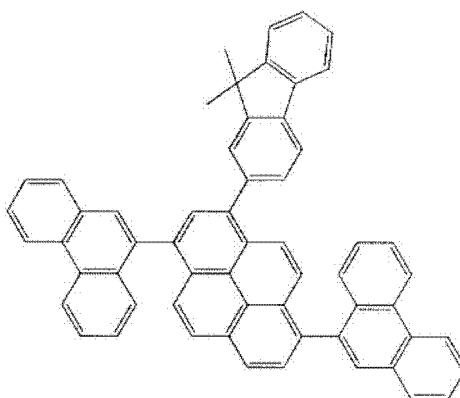
20

【 0 1 7 2】

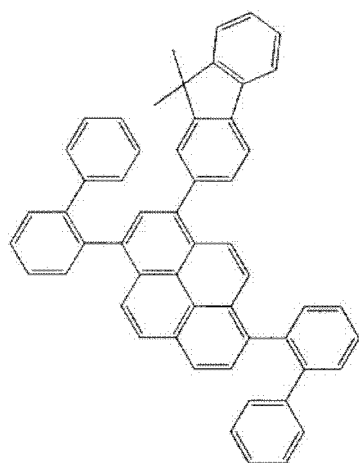
【化 1 0 1】



30

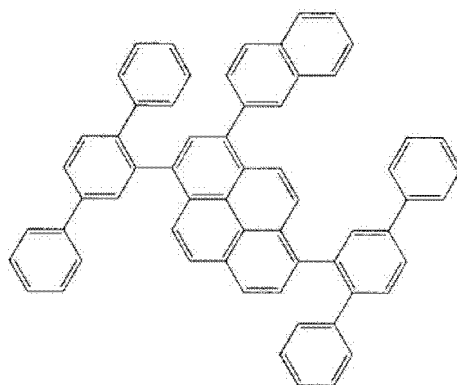
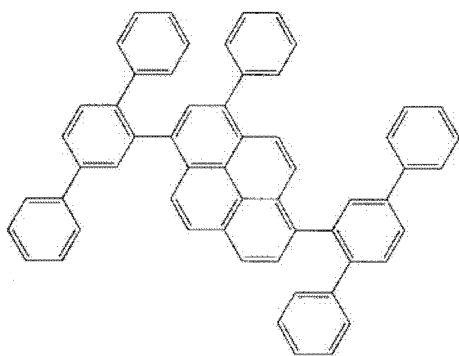


40

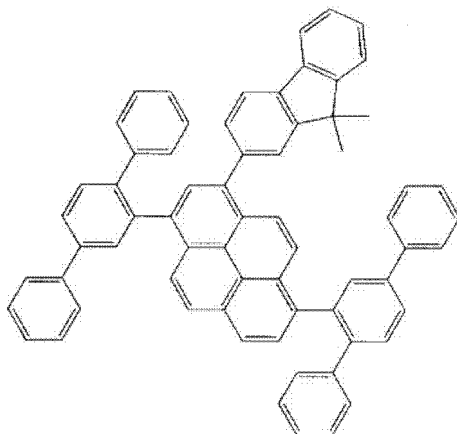
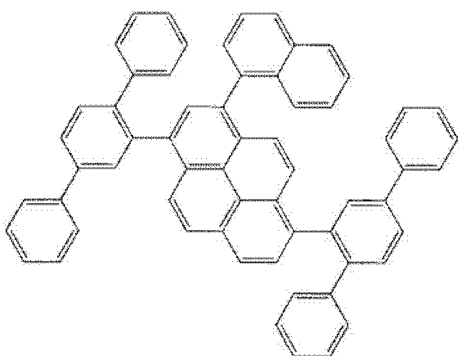


【 0 1 7 3】

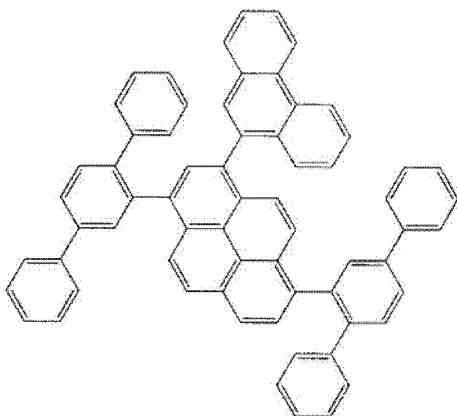
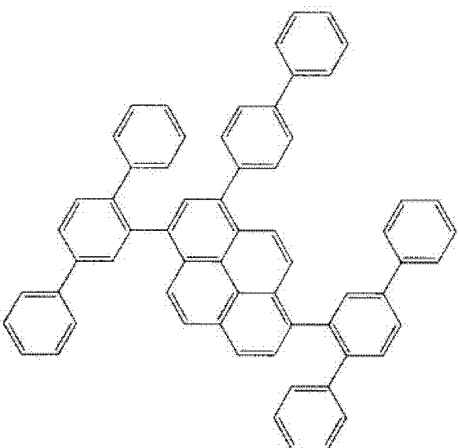
【化 1 0 2】



10



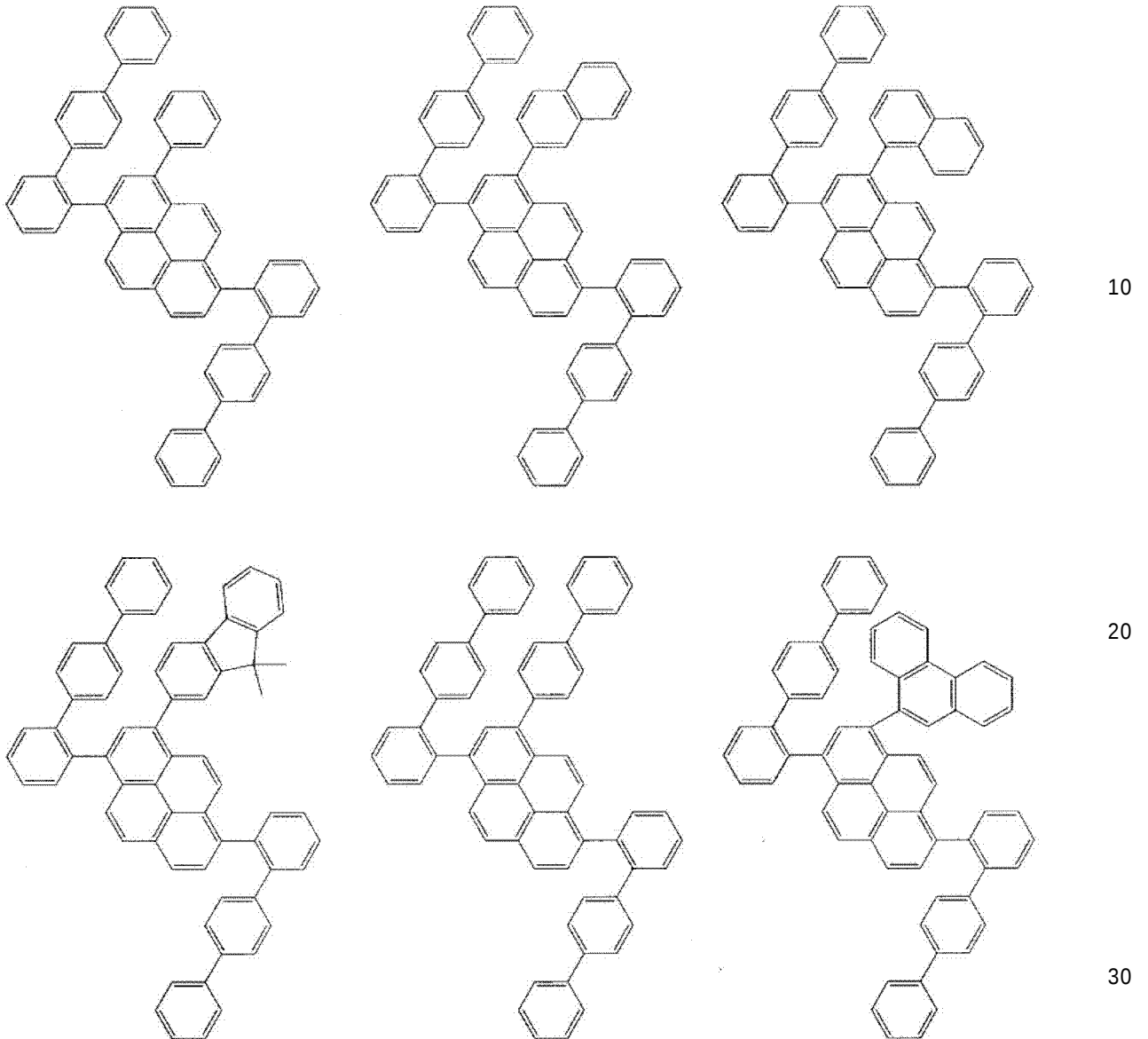
20



30

【 0 1 7 4】

## 【化 1 0 3】



## 【 0 1 7 5】

前記フルオレン骨格含有化合物としては、例えば、下記式(23)で表される化合物が好ましい。

## 【化 1 0 4】



## 【 0 1 7 6】

式(23)において、 $R^{401} \sim R^{410}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換基、又は  $-L^4 - Ar^{41}$  であり。但し、 $R^{401} \sim R^{410}$ の少なくとも1つは  $-L^4 - Ar^{41}$  である。

該置換基の詳細は  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した前記置換基と同じであり、 $L^4$  及び  $Ar^{41}$  の詳細は、前記式(19)の  $L$  及び  $Ar$  に関して記載したとおりである。

$R^{401}$  と  $R^{402}$ 、 $R^{402}$  と  $R^{403}$ 、 $R^{403}$  と  $R^{404}$ 、 $R^{405}$  と  $R^{406}$

、 $R^{406}$ と $R^{407}$ 、及び $R^{407}$ と $R^{408}$ から選択される1以上の隣接する対が、互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよい。

$R^{402}$ 及び $R^{407}$ が $-L^4-Ar^{41}$ であることが好ましい。 $R^{409}$ 及び $R^{410}$ が置換もしくは無置換の炭素数1～20のアルキル基又は $-L^4-Ar^{41}$ であることが好ましい。

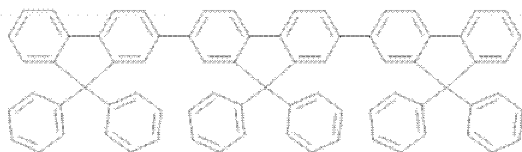
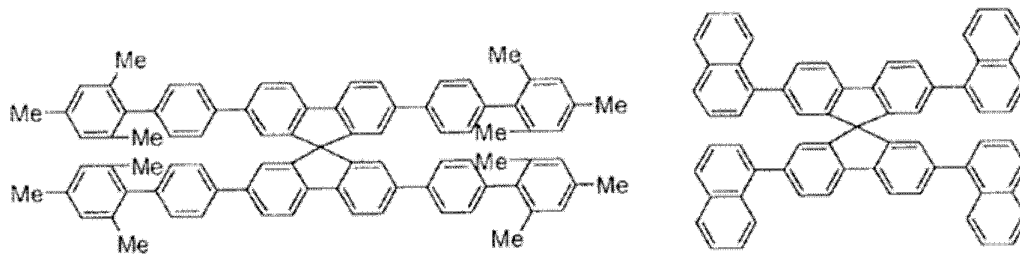
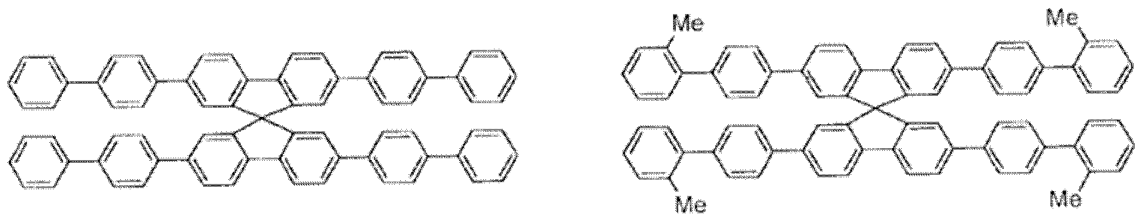
該炭素数1～20のアルキル基の詳細は、式(D1)の $R_A$ 、 $R_B$ 及び $R_C$ に関して記載した前記アルキル基と同じである。

【0177】

式(23)で表されるフルオレン誘導体の具体例としては、以下に示す化合物が挙げられるが、特にこれらに制限されるものではない。

【0178】

【化105】



【0179】

## 第2化合物

第1の有機EL素子に使用される第2化合物は前記ドーパント材料及び第1化合物と共に蛍光発光層に使用され、蛍光発光層のコホスト材料として機能する。

第2化合物は、上述の式(19)で表される化合物、上述の式(21)で表される化合物、上述の式(22)で表される化合物、上述の式(23)で表される化合物、下記式(2a)で表されるアミン化合物、下記式(2b)で表されるビスカルバゾール化合物、及び下記式(2c)で表されるジアミン化合物から選ばれる1種以上であることが好ましい。

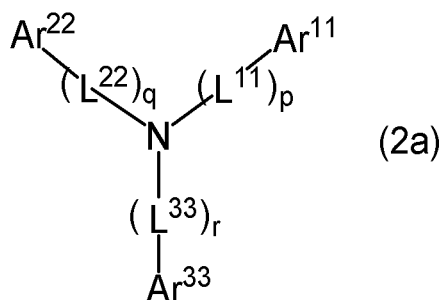
第2化合物は、下記式(2a)で表されるアミン化合物、下記式(2b)で表されるビスカルバゾール化合物、及び下記式(2c)で表されるジアミン化合物から選ばれる1種以上であることがより好ましい。

第2化合物は、下記式(2a)で表されるアミン化合物及び下記式(2b)で表されるビスカルバゾール化合物から選ばれる1種以上であることがさらに好ましい。

【0180】

前記アミン化合物は下記式(2a)で表される。

【化 1 0 6】



【0 1 8 1】

10

式(2a)において、 $\text{Ar}^{11}$ 、 $\text{Ar}^{22}$ 、及び $\text{Ar}^{33}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50、好ましくは6～30、より好ましくは6～24、さらに好ましくは6～18のアリール基又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50、好ましくは5～30、より好ましくは5～18、さらに好ましくは5～13のヘテロアリール基である。

該環形成炭素数6～50のアリール基及び該環形成原子数5～50のヘテロアリール基の詳細は、式(D1)の $\text{R}_A$ 、 $\text{R}_B$ 及び $\text{R}_C$ に関して記載した前記環形成炭素数6～50のアリール基及び前記環形成原子数5～50のヘテロアリール基とそれぞれ同じである。

【0 1 8 2】

20

式(2a)において、 $\text{L}^{11}$ 、 $\text{L}^{22}$ 、及び $\text{L}^{33}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50、好ましくは6～30、より好ましくは6～24、さらに好ましくは6～18のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50、好ましくは5～30、より好ましくは5～18、さらに好ましくは5～13のヘテロアリーレン基である。

該環形成炭素数6～50のアリーレン基及び該環形成原子数5～50のヘテロアリーレン基の詳細は、式(19)の $\text{L}$ に関して記載した前記環形成炭素数6～50のアリーレン基及び前記環形成原子数5～50のヘテロアリーレン基と同じである。

【0 1 8 3】

30

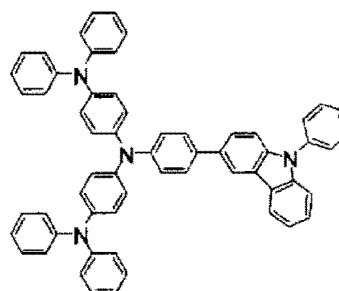
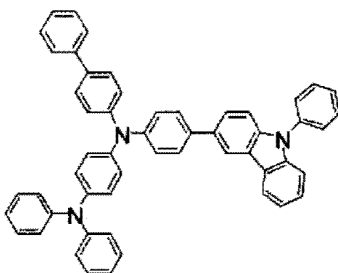
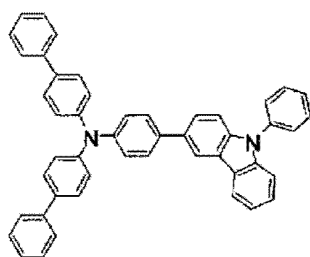
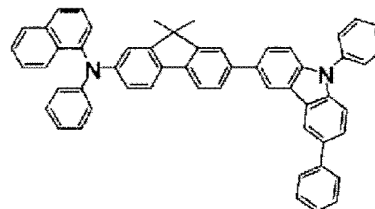
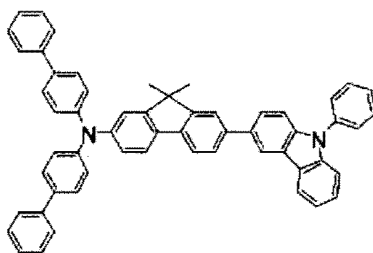
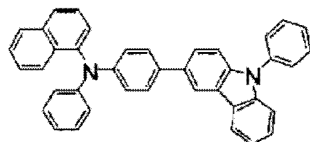
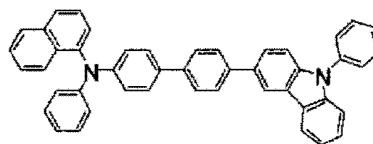
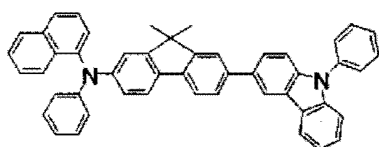
式(2a)において、 $p$ 、 $q$ 、及び $r$ は、それぞれ独立に、0、1、又は2、好ましくは0又は1である。 $p$ が0のとき $\text{L}^{11}$ は単結合であり、 $q$ が0のとき $\text{L}^{22}$ は単結合であり、 $r$ が0のとき $\text{L}^{33}$ は単結合である。

【0 1 8 4】

式(2a)で表される化合物の具体例を以下に示すが、これらに限定されるものではない。

【0 1 8 5】

【化 1 0 7】

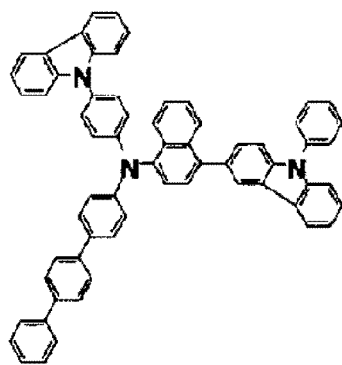
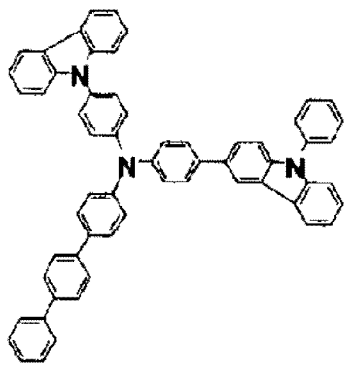


10

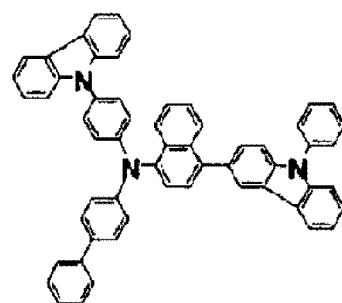
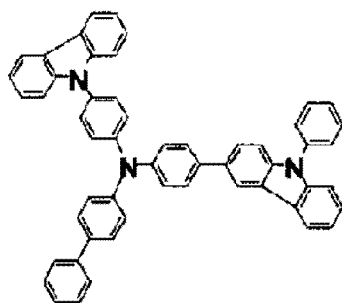
20

【 0 1 8 6】

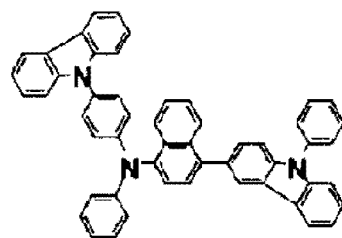
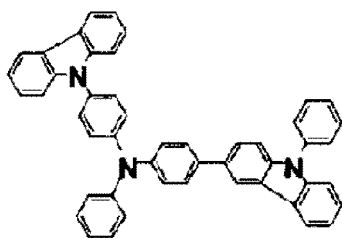
【化 1 0 8】



10



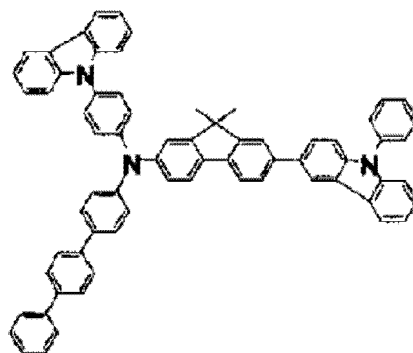
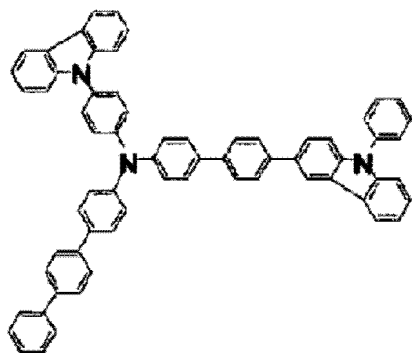
20



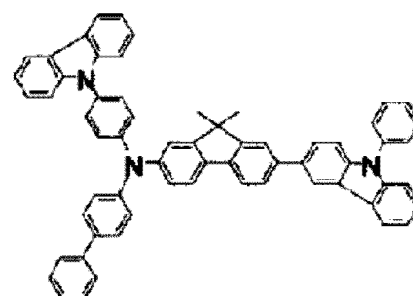
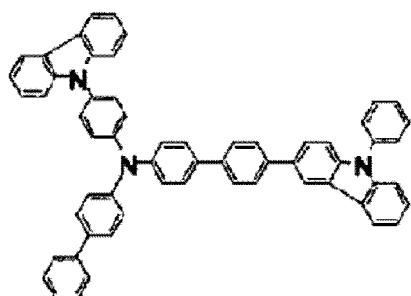
30

【 0 1 8 7 】

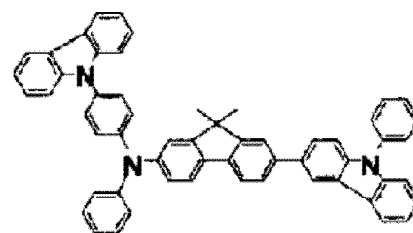
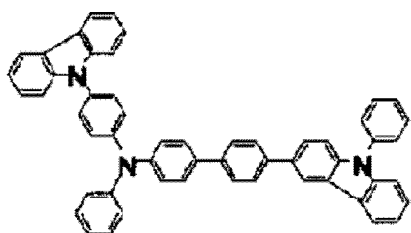
【化 1 0 9】



10



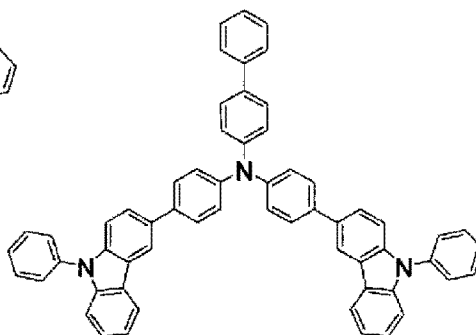
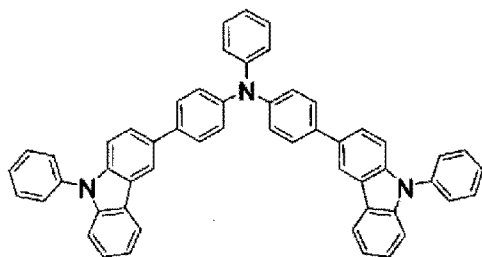
20



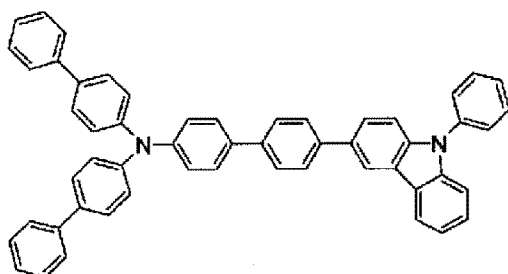
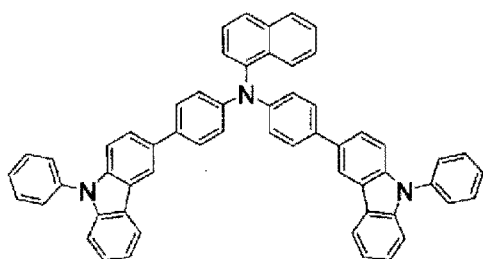
30

【 0 1 8 8】

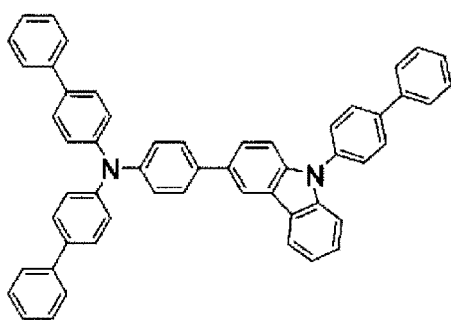
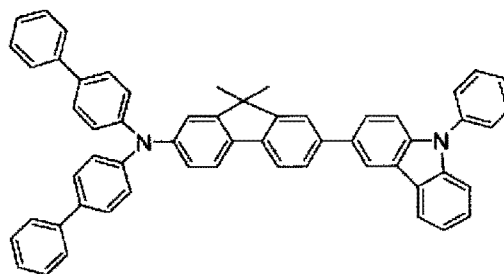
【化 1 1 0】



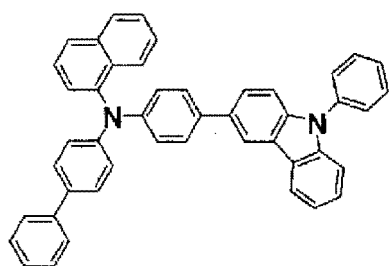
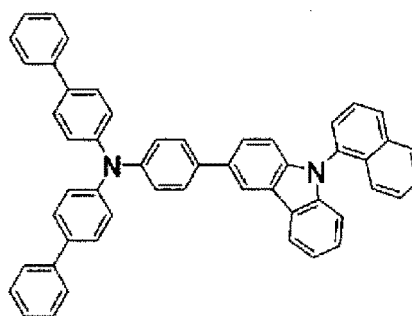
10



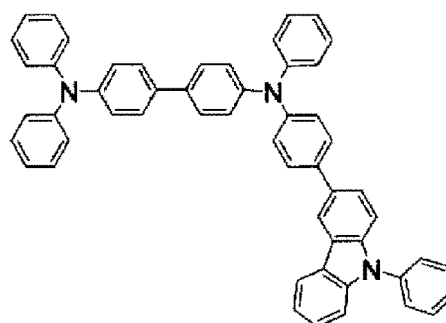
20



30

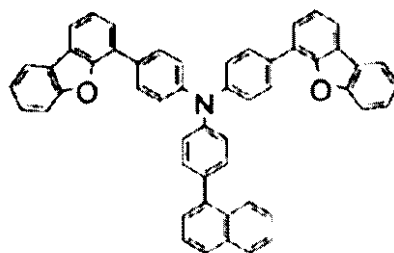
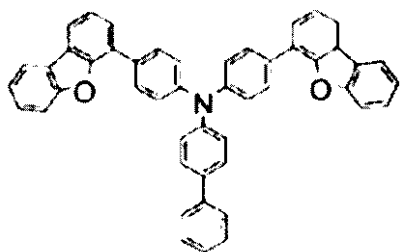


40

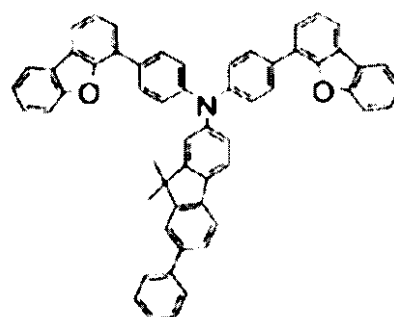
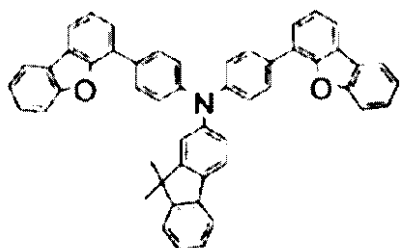


【 0 1 8 9】

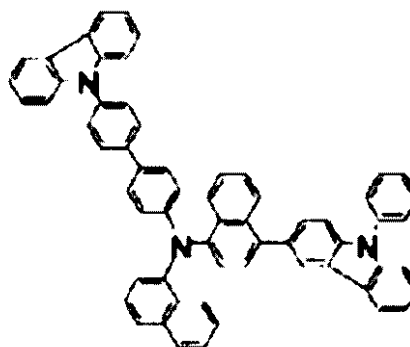
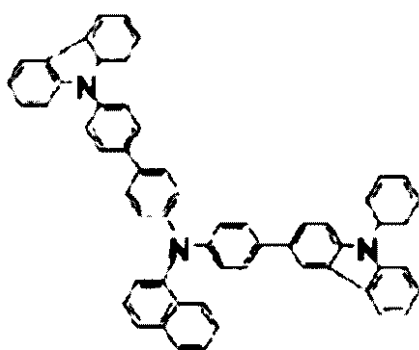
【化 1 1 1】



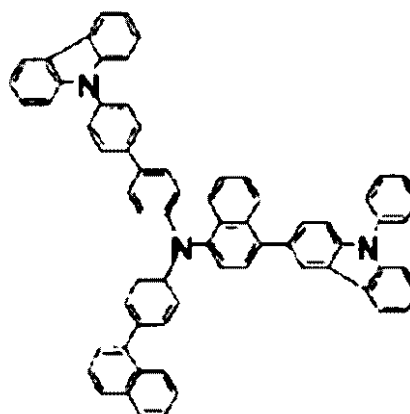
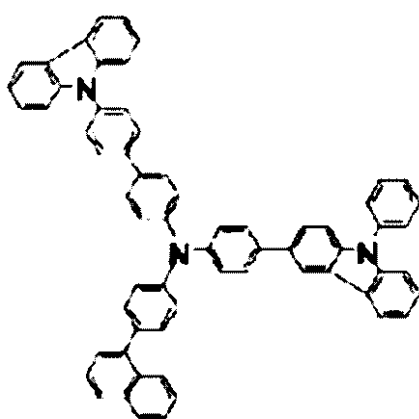
10



20



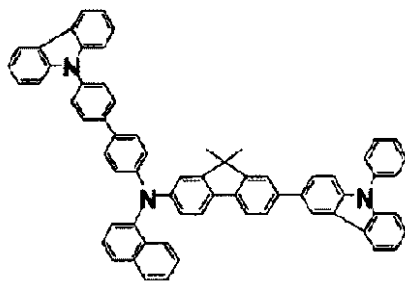
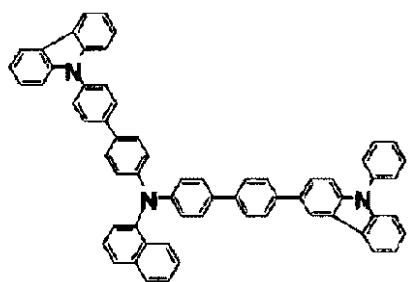
30



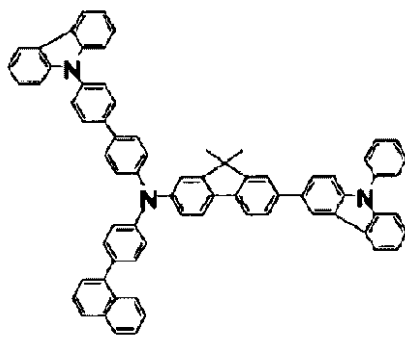
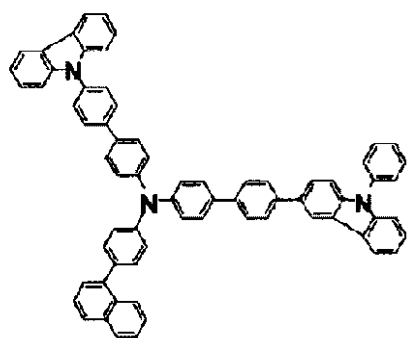
40

【 0 1 9 0 】

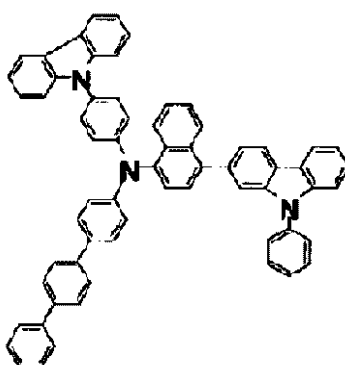
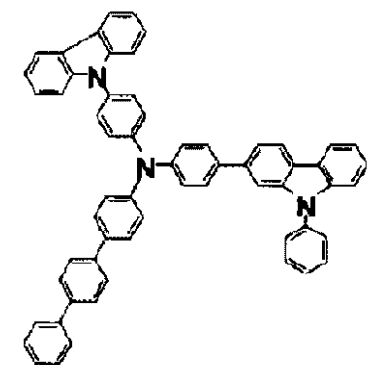
【化 1 1 2】



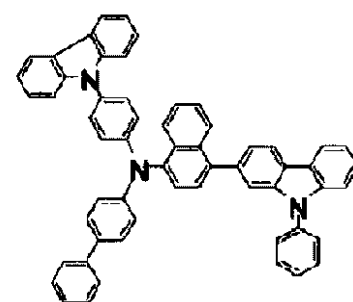
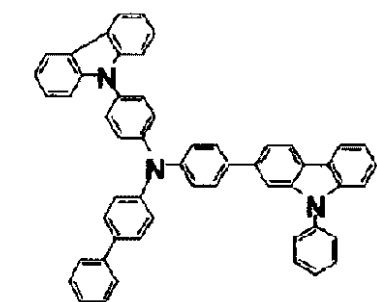
10



20



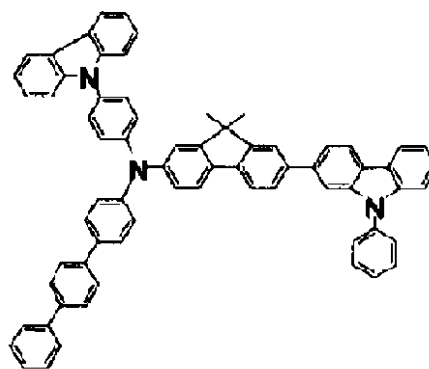
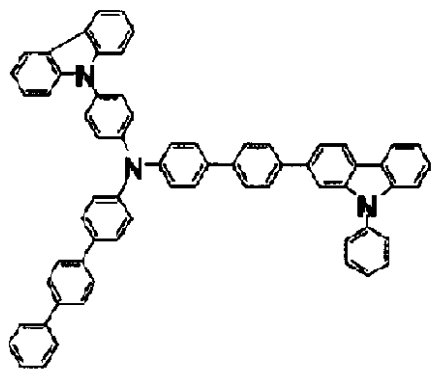
30



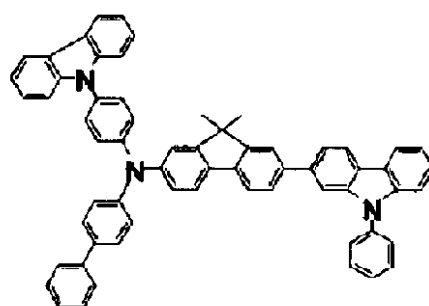
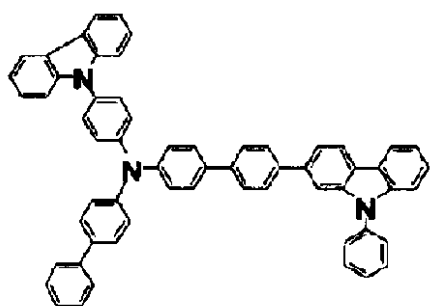
40

【 0 1 9 1】

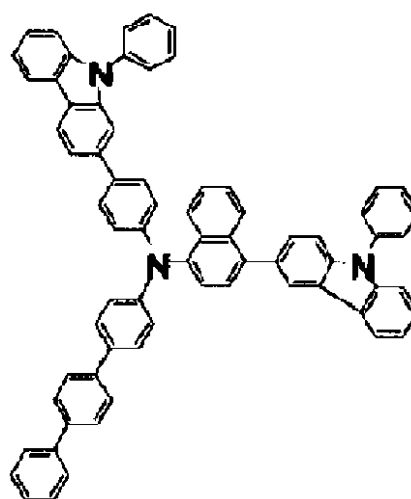
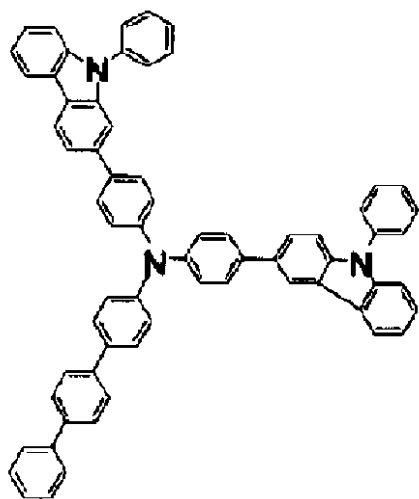
【化 1 1 3】



10



20

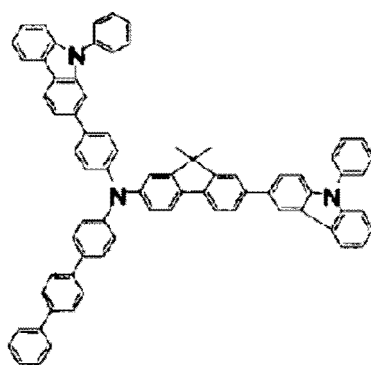
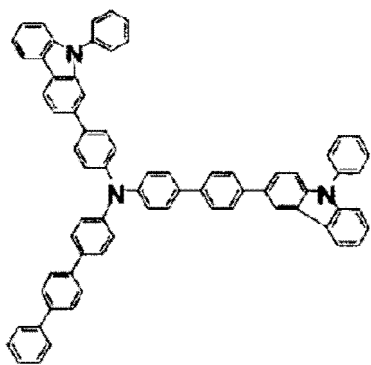


30

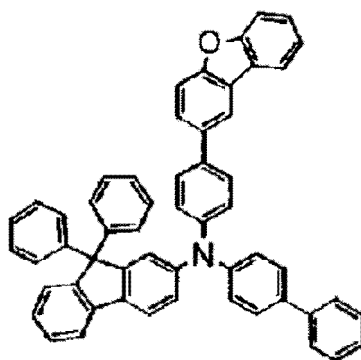
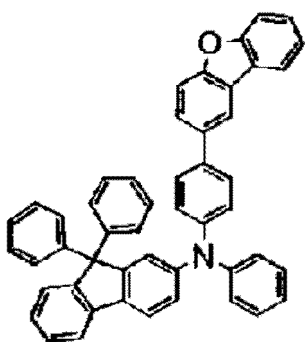
【 0 1 9 2】

40

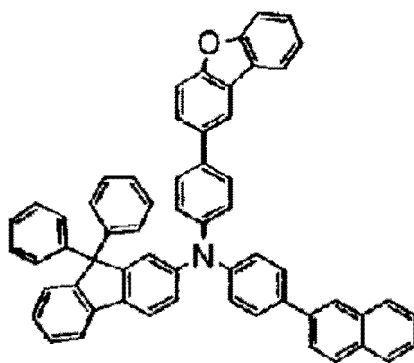
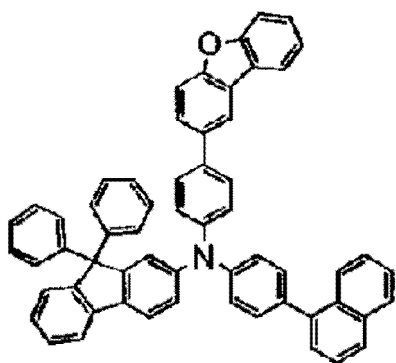
【化 1 1 4】



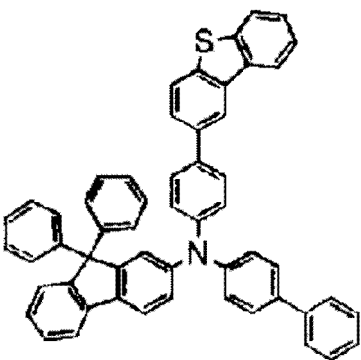
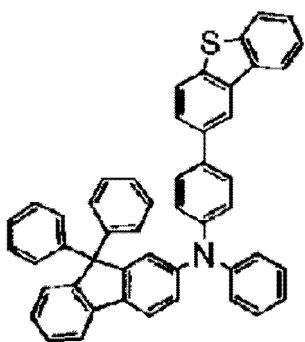
10



20



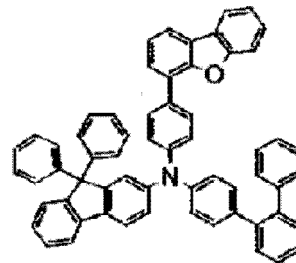
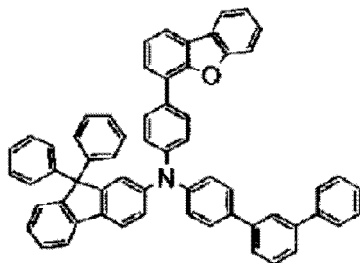
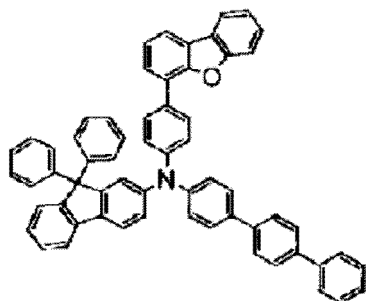
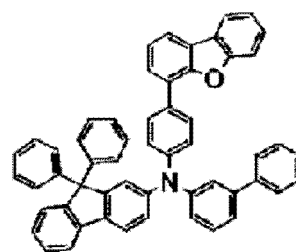
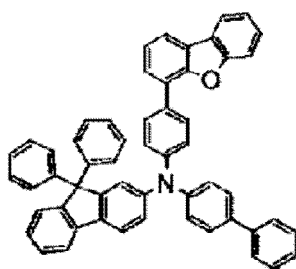
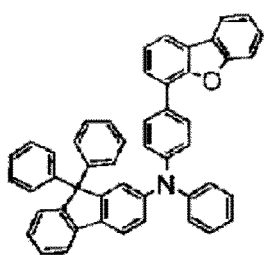
30



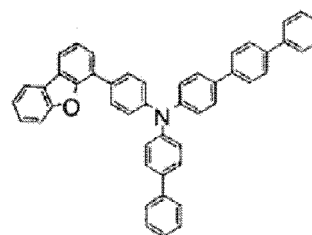
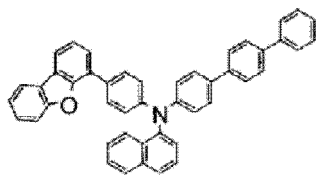
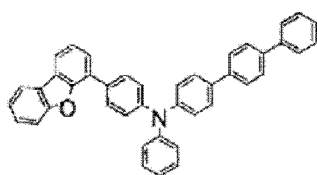
40

【 0 1 9 3 】

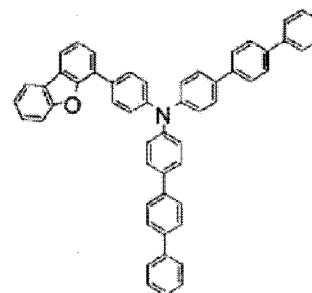
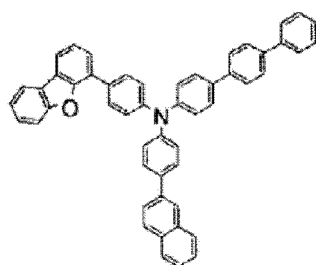
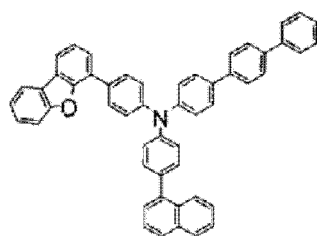
【化 1 1 5】



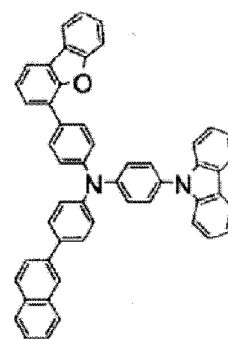
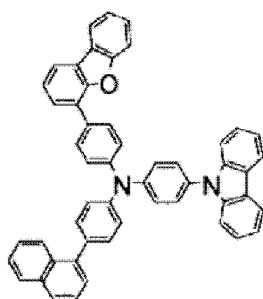
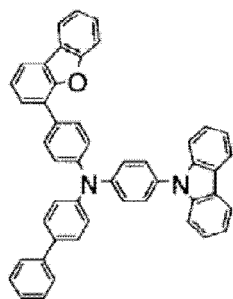
10



20



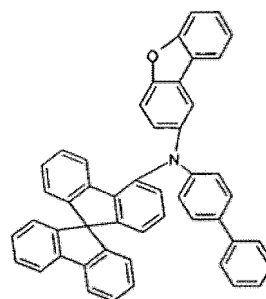
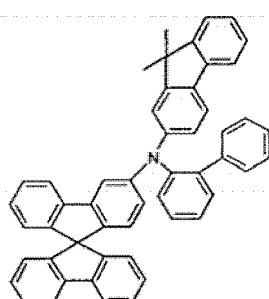
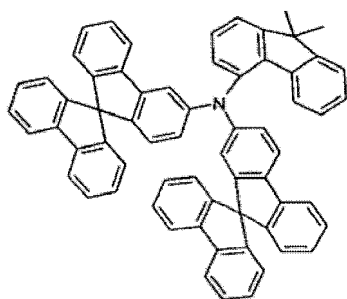
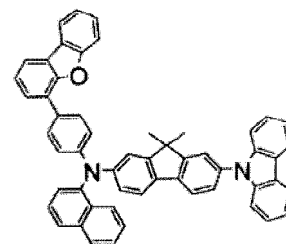
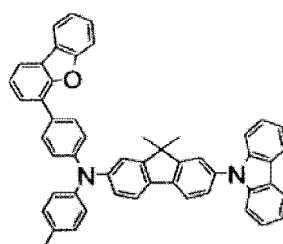
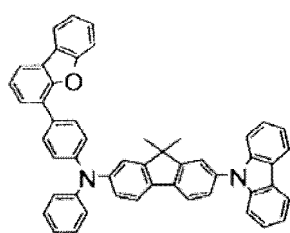
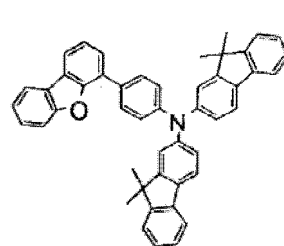
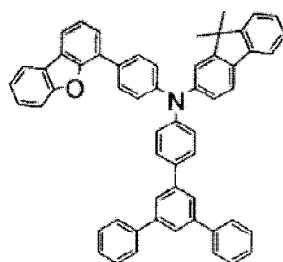
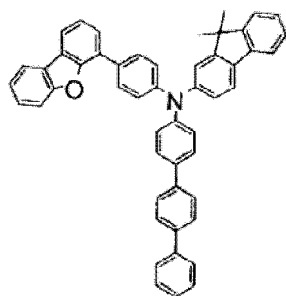
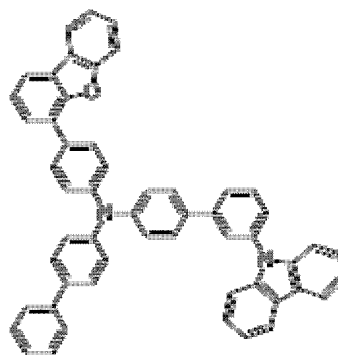
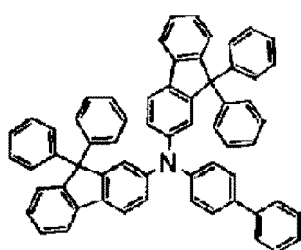
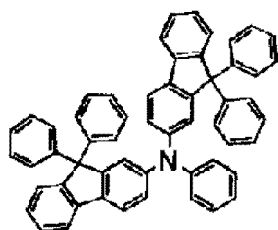
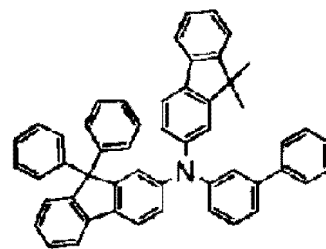
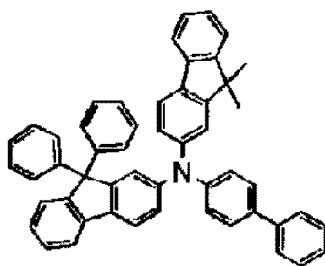
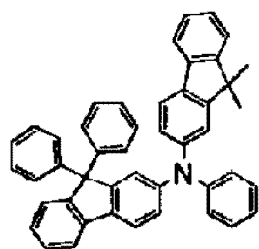
30



40

【 0 1 9 4 】

【化 1 1 6】



【 0 1 9 5】

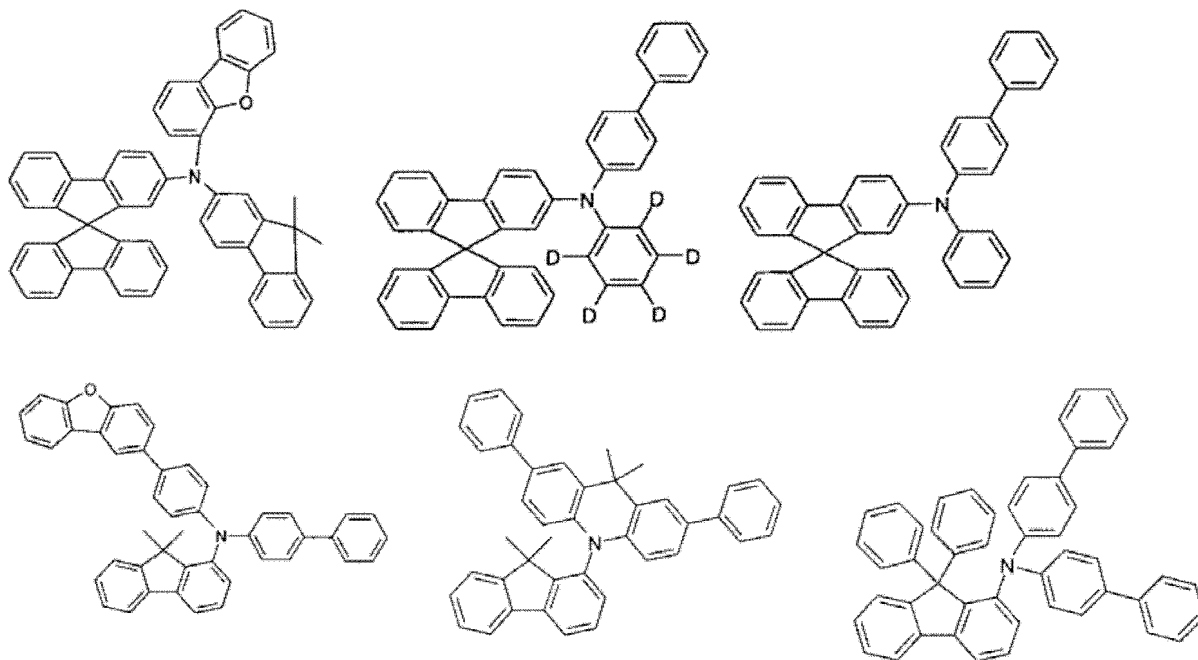
10

20

30

40

## 【化 1 1 7】



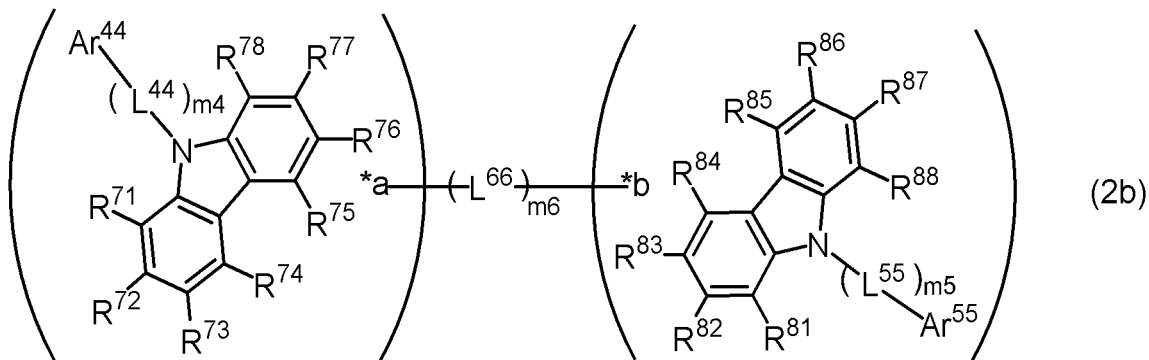
10

## 【 0 1 9 6】

前記ビスカルバゾール化合物は下記式（2b）で表される。

20

## 【化 1 1 8】



30

## 【 0 1 9 7】

式（2b）において、 $R^{71} \sim R^{78}$  から選ばれる 1 つは  $*a$  に結合する単結合であり、 $R^{81} \sim R^{88}$  から選ばれる 1 つは  $*b$  に結合する単結合である。

前記単結合ではない  $R^{71} \sim R^{78}$  及び  $R^{81} \sim R^{88}$  は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20、好ましくは 1 ～ 10、より好ましくは 1 ～ 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50、好ましくは 6 ～ 30、より好ましくは 6 ～ 24、さらに好ましくは 6 ～ 18 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50、好ましくは 5 ～ 30、より好ましくは 5 ～ 18、さらに好ましくは 5 ～ 13 のヘテロアリール基である。

40

該炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、該環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、及び該環形成原子数 5 ～ 50 のヘテロアリール基の詳細は、式（D1）の  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した前記炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、前記環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、及び前記環形成原子数 5 ～ 50 のヘテロアリール基とそれぞれ同じである。

## 【 0 1 9 8】

前記単結合ではない  $R^{71} \sim R^{74}$  から選ばれる隣接する 2 つ、前記単結合ではない  $R^{75} \sim R^{78}$  から選ばれる隣接する 2 つ、前記単結合ではない  $R^{81} \sim R^{84}$  から選ばれる隣接する 2 つ、及び前記単結合ではない  $R^{85} \sim R^{88}$  から選ばれる隣接する 2 つは互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよいし、環構造を形成しなくても

50

よい。

該環構造は、例えば、式 (D 1) の環  $\pi 1$  及び環  $\pi 2$  に関して記載した前記環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環及び前記環形成原子数 5 ~ 50 の芳香族複素環から選ばれ、好ましくは式 (1) に関して記載した式 (2) ~ (11) から選ばれる。

【0199】

式 (2b) において、 $Ar^{44}$  及び  $Ar^{55}$  は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基である。

該環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基及び該環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基の詳細は、式 (D 1) の  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基及び前記環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基とそれぞれ同じである。

10

【0200】

式 (2b) において、 $L^{44}$ 、 $L^{55}$  及び  $L^{66}$  は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリーレン基である。

該環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基及び該環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリーレン基の詳細は、式 (19) の  $L$  に関して記載した前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基及び前記環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリーレン基と同じである。

【0201】

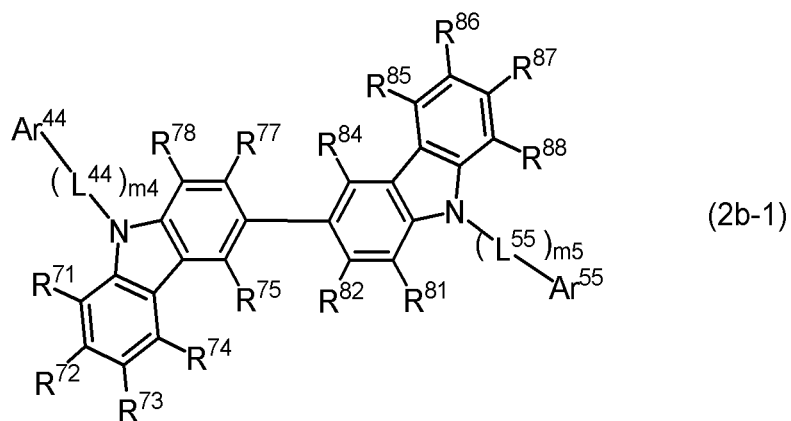
式 (2b) において、 $m_4$ 、 $m_5$ 、及び  $m_6$  は、それぞれ独立に、0、1、又は 2、好ましくは 0 又は 1 であり、 $m_4$  が 0 のとき  $L^{44}$  は単結合であり、 $m_5$  が 0 のとき  $L^{55}$  は単結合であり、 $m_6$  が 0 のとき  $L^{66}$  は単結合である。

20

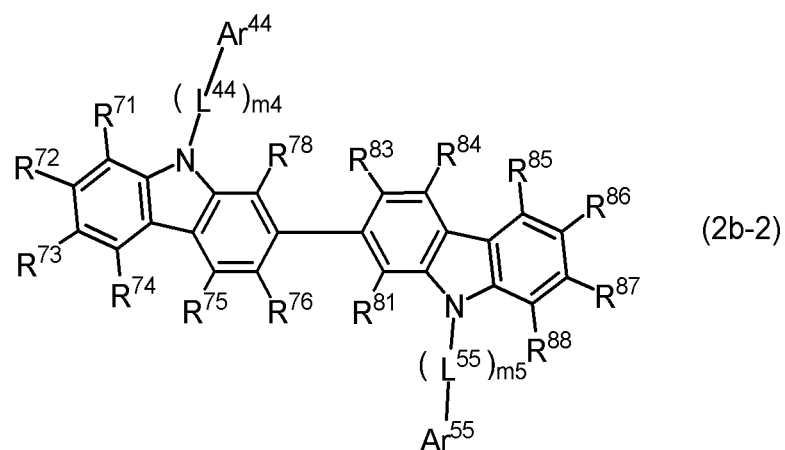
【0202】

式 (2b) は好ましくは下記式 (2b-1) ~ (2b-3) のいずれかで表される。

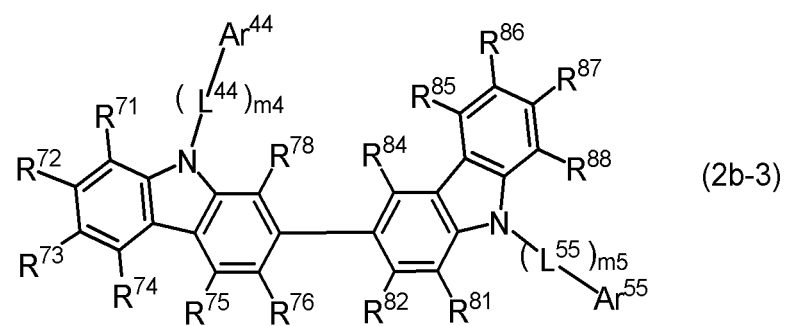
【化 1 1 9】



10



20



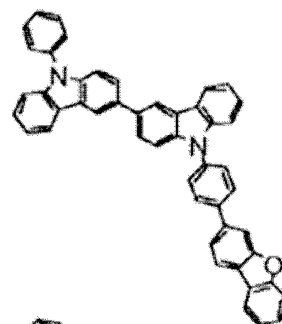
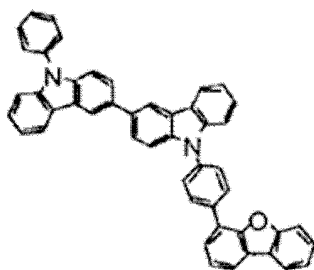
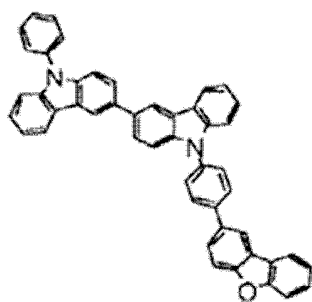
30

【 0 2 0 3 】

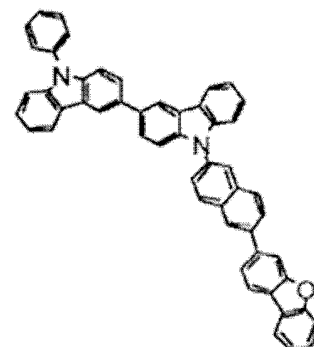
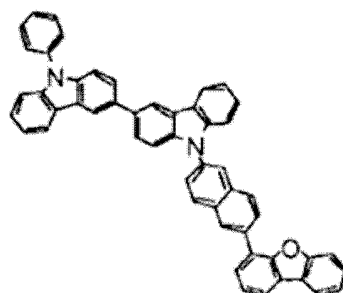
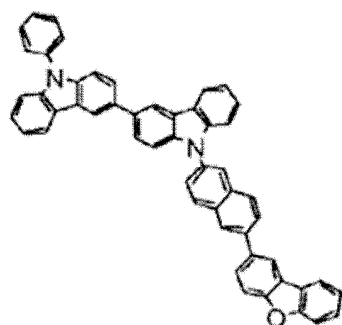
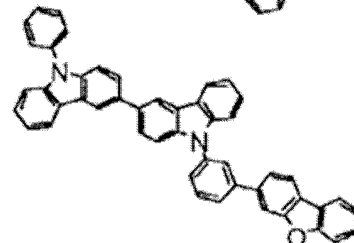
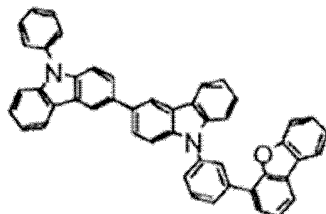
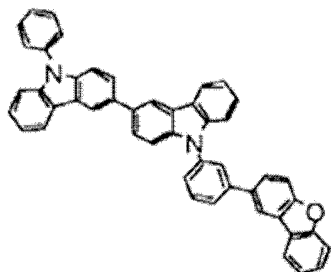
式(2b)で表される化合物の具体例を以下に示すが、これらに限定されるものではない。

【 0 2 0 4 】

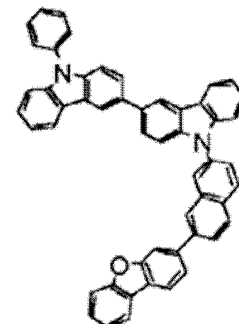
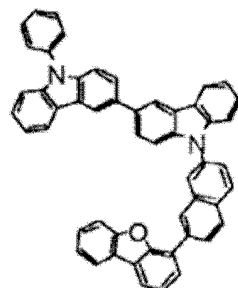
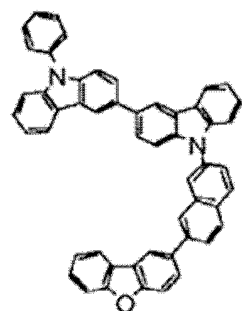
【化 1 2 0】



10



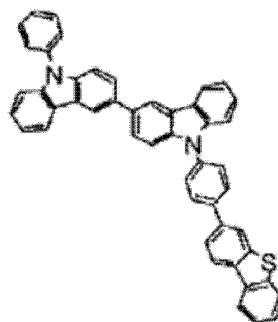
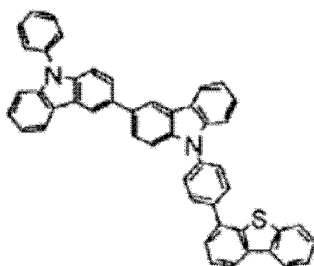
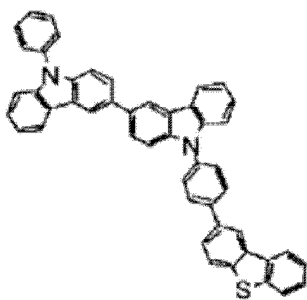
20



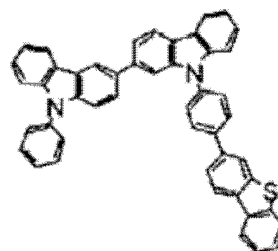
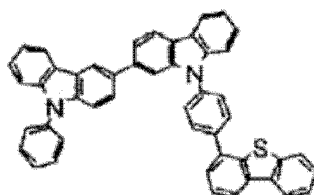
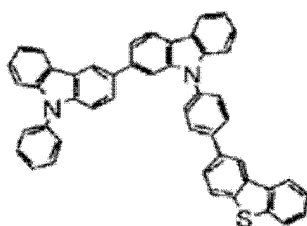
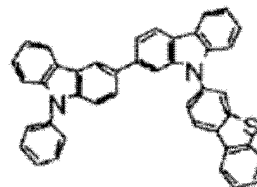
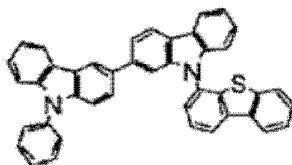
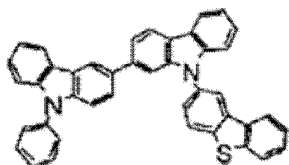
30

【 0 2 0 5】

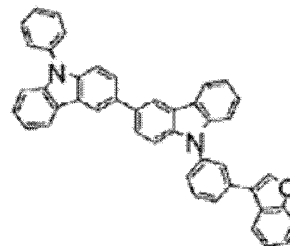
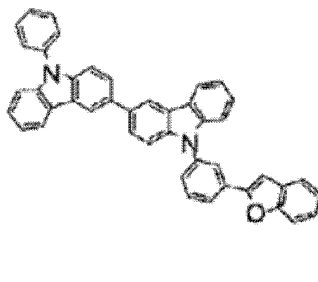
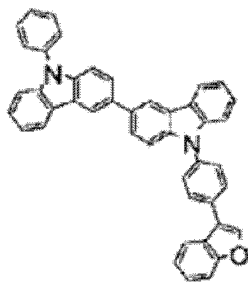
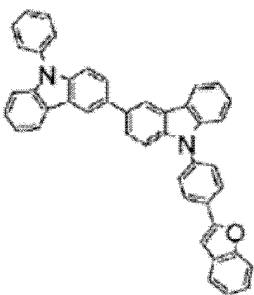
## 【化 1 2 1】



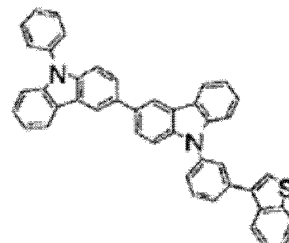
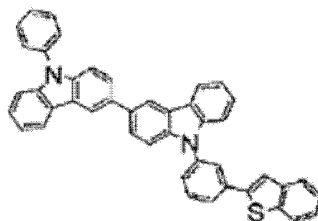
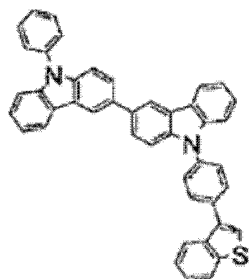
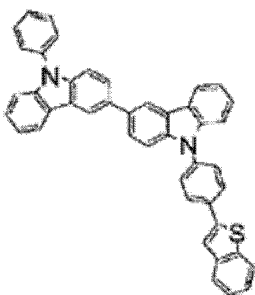
10



20



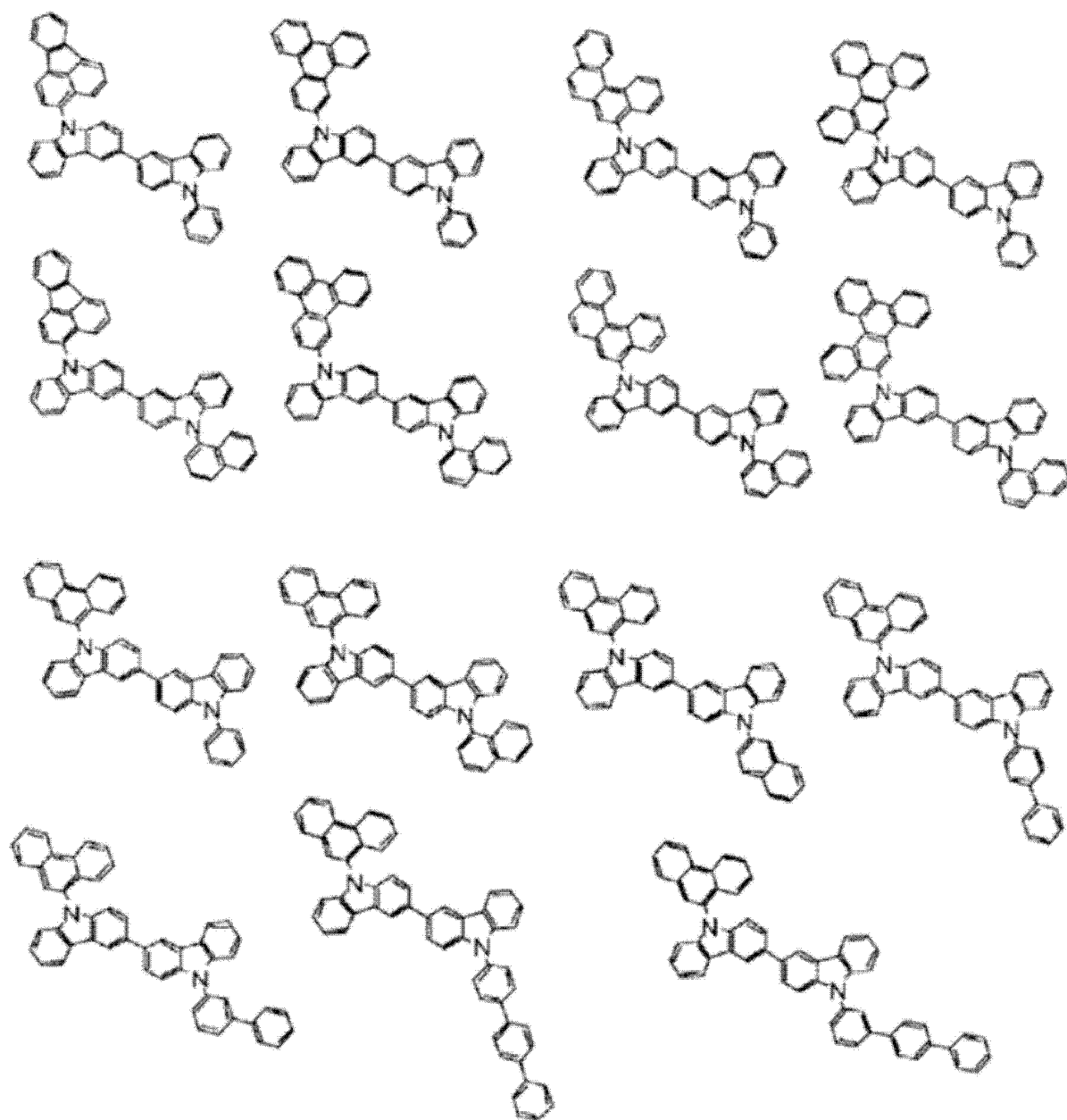
30



40

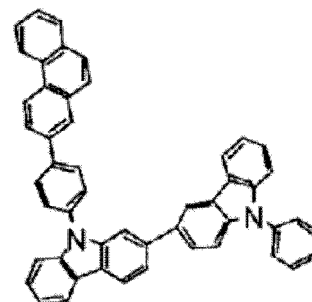
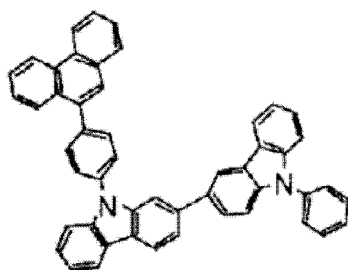
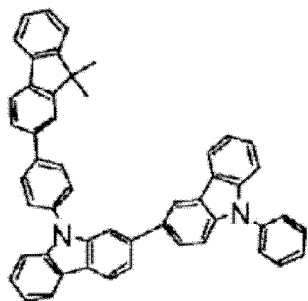
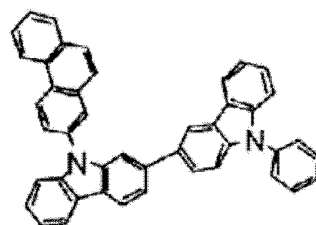
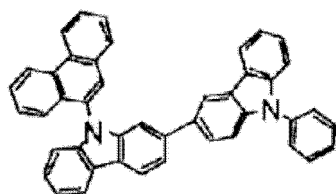
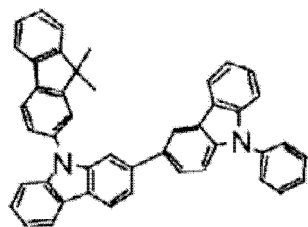
## 【 0 2 0 6】

【化 1 2 2】

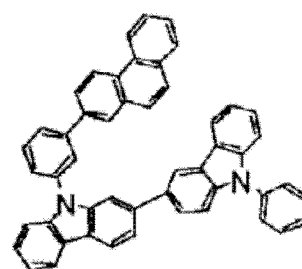
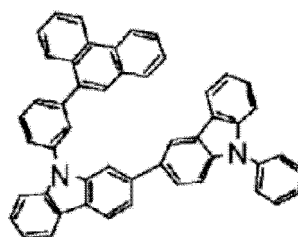
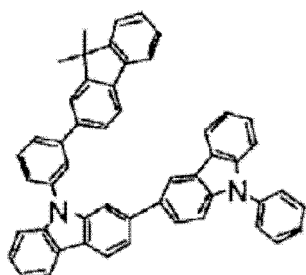


【 0 2 0 7】

【化 1 2 3】



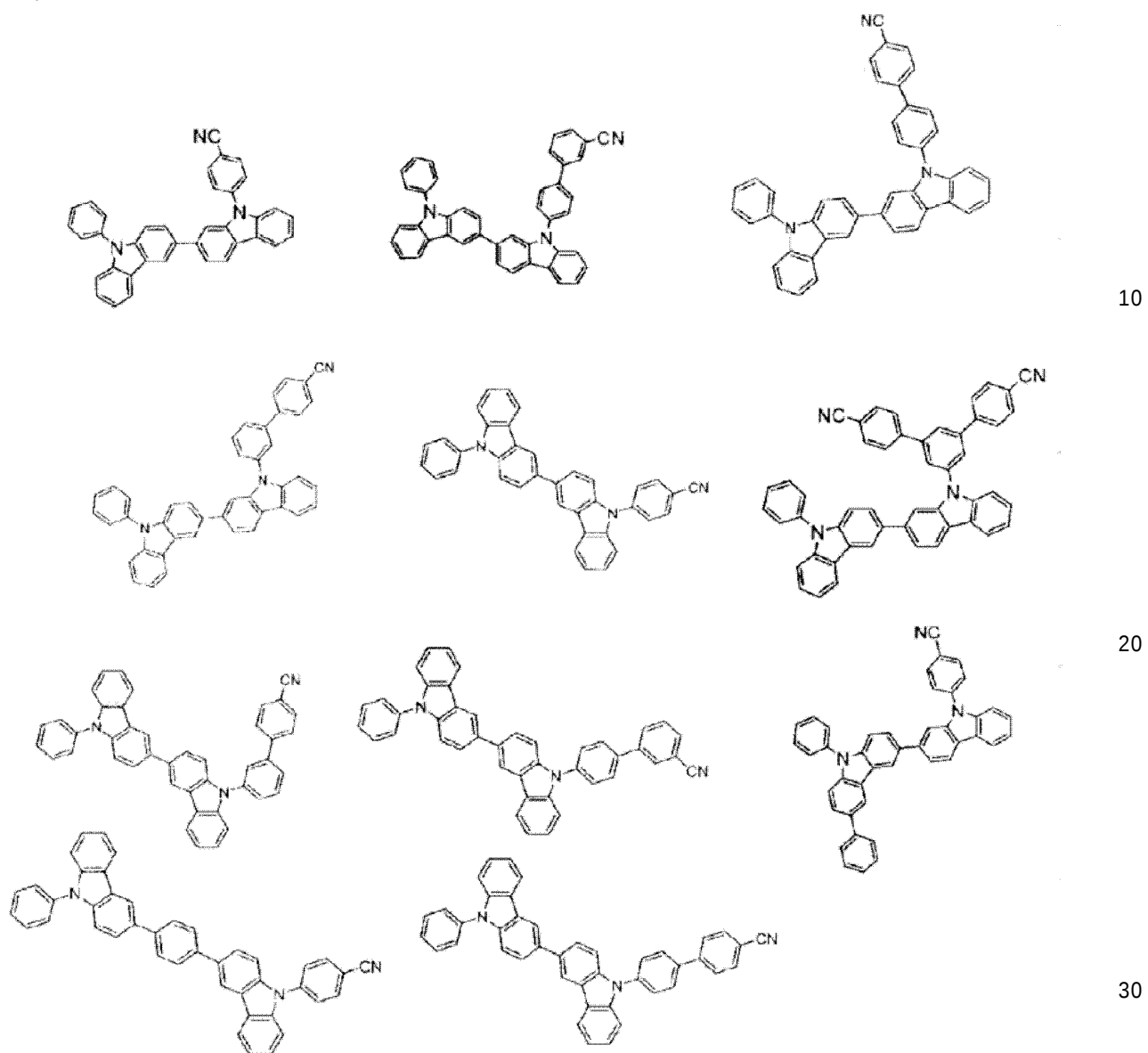
10



20

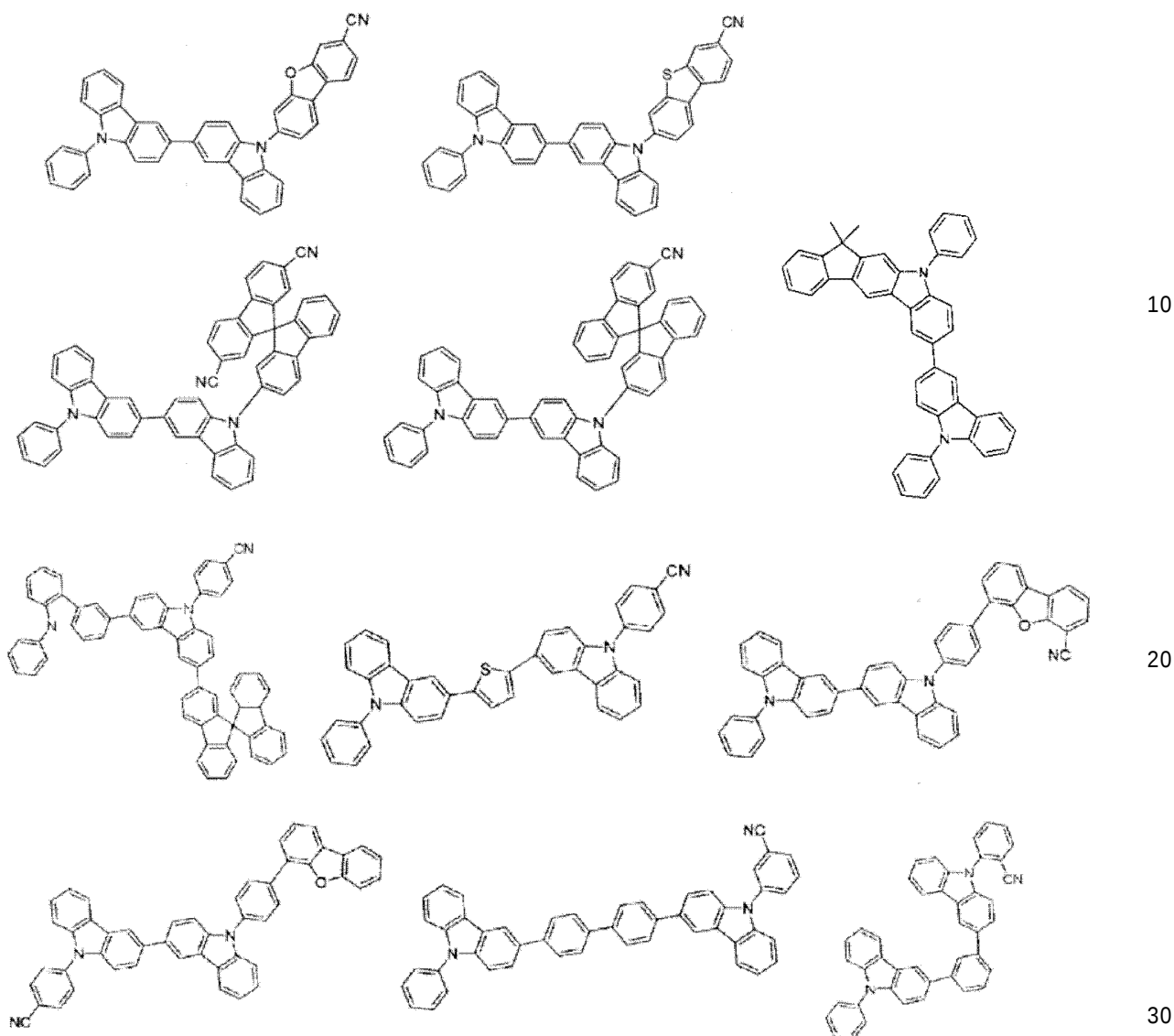
【 0 2 0 8】

【化 1 2 4】



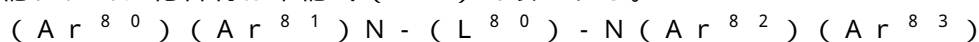
【 0 2 0 9】

## 【化 1 2 5】



## 【 0 2 1 0】

前記ジアミン化合物は下記式(2c)で表される。



(2c)

式(2c)において、 $Ar^{80} \sim Ar^{83}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリール基である。

該環形成炭素数6～50のアリール基及び該環形成原子数5～50のヘテロアリール基の詳細は、式(D1)の $R_A$ 、 $R_B$ 及び $R_C$ に関して記載した前記環形成炭素数6～50のアリール基及び前記環形成原子数5～50のヘテロアリール基とそれぞれ同じである。

式(2c)において、 $L^{80}$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50のヘテロアリーレン基である。

該環形成炭素数6～50のアリーレン基及び該環形成原子数5～50のヘテロアリーレン基の詳細は、式(19)の $L$ に関して記載した前記環形成炭素数6～50のアリーレン基及び前記環形成原子数5～50のヘテロアリーレン基と同じである。

## 【 0 2 1 1】

式(2c)で表される化合物の具体例を以下に示すが、これらに限定されるものではない。

10

20

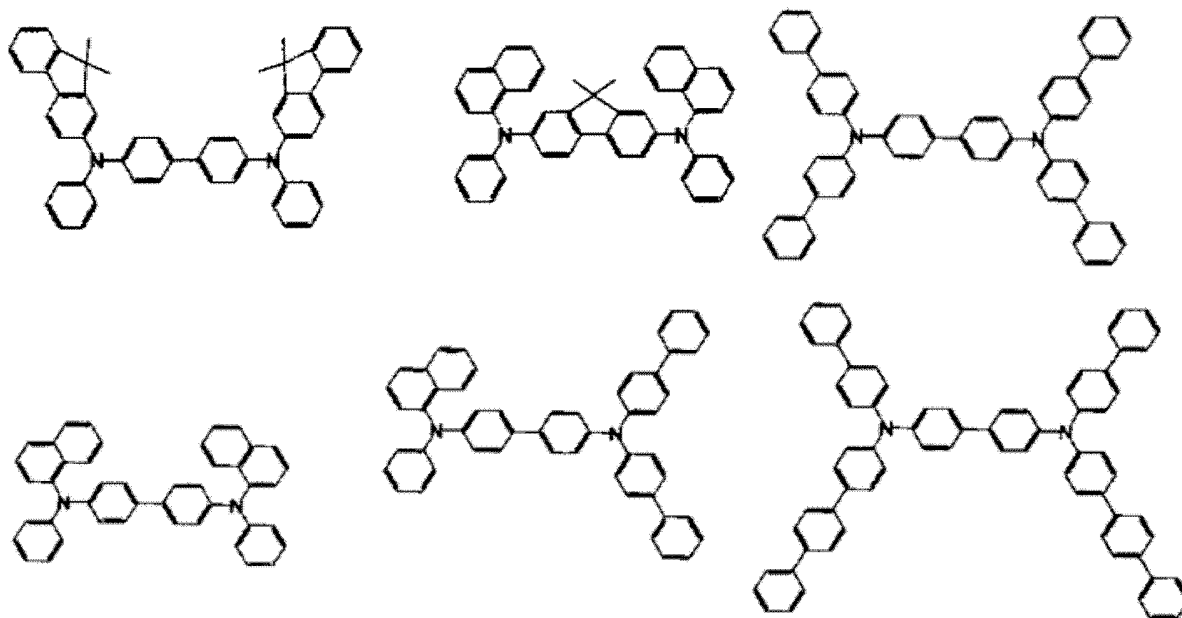
30

40

50

【 0 2 1 2 】

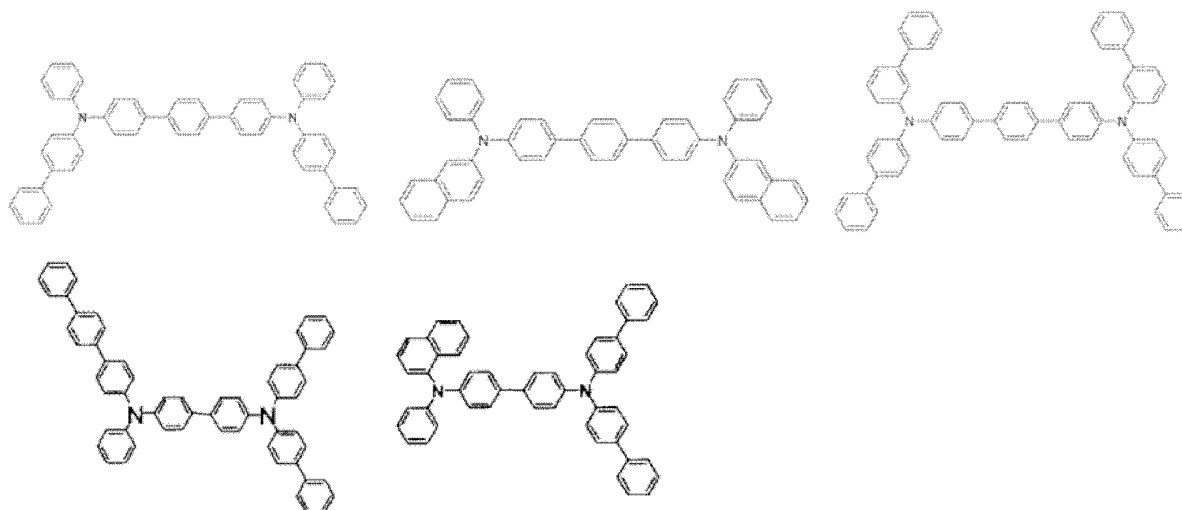
【 化 1 2 6 】



10

【 0 2 1 3 】

【 化 1 2 7 】



20

30

【 0 2 1 4 】

第 2 の有機 E L 素子

第 2 の有機 E L 素子は陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に有機層を含有し、該有機層は蛍光発光層を含有する。

該蛍光発光層は、第 1 化合物、第 1 化合物よりも大きいアフィニティを有する第 3 化合物、及び蛍光スペクトルの半値幅が 30 nm 以下のドーパント材料を含む。

40

第 3 化合物は第 1 化合物よりも大きいアフィニティを有するので電子を捕捉し易い。従って、第 3 化合物を使用すると蛍光発光層への電子注入性は良好である。しかし、第 3 化合物は第 1 化合物よりも少量使用するので、蛍光発光層内で電子輸送経路が十分に形成されず、第 3 化合物に捕捉された電子が蛍光発光層内で移動し難くなる。

このように、第 3 化合物を少量使用することにより、蛍光発光層への電子注入性を良好に維持しながら、蛍光発光層内での電子輸送を抑制することができる。その結果、励起密度の高い領域（正孔と電子の再結合領域）が蛍光発光層の中央部に近づく。励起密度の高い領域が蛍光発光層の中央部に近づく、励起によって蛍光発光層に隣接する層が劣化することを抑制することができる。これにより、前記した問題、すなわち、蛍光スペクトル

50

の半値幅が狭いドーパントを使用した有機 E L 素子が有する寿命低下の問題が解決され、寿命が向上する。

【 0 2 1 5 】

第 2 の有機 E L 素子で使用するドーパント材料の蛍光スペクトルの半値幅は 3 0 n m 以下、好ましくは 2 5 n m 以下、より好ましくは 2 0 n m 以下である。半値幅が上記の範囲にあると、高い色純度が得られる。

第 2 の有機 E L 素子で使用するドーパント材料の蛍光スペクトルの半値幅は、例えば 2 n m 以上である。

本発明で使用する蛍光スペクトルの半値幅の測定方法は後述する。

ドーパント材料の蛍光発光層中の含有量は第 1 化合物、第 3 化合物及びドーパント材料の合計量に対して 1 0 質量 % 以下、好ましくは 1 ~ 1 0 質量 %、より好ましくは 1 ~ 8 質量 % である。

10

【 0 2 1 6 】

第 3 化合物は第 1 化合物よりも大きなアフィニティを有する。第 1 化合物と第 3 化合物のアフィニティの差は 0 . 0 5 e V 以上、好ましくは 0 . 1 e V 以上である。

アフィニティの測定方法は後述する。

【 0 2 1 7 】

第 3 化合物の蛍光発光層中の含有量は第 1 化合物の含有量よりも少なく、第 1 化合物、第 3 化合物及びドーパント材料の合計量に対して好ましくは 3 0 質量 % 以下、より好ましくは 2 ~ 3 0 質量 %、さらにより好ましくは 2 ~ 2 0 質量 % である。上記範囲であると、励起密度の高い領域が蛍光発光層の中央部に近づき、寿命が向上する。

20

【 0 2 1 8 】

ドーパント材料

第 2 の有機 E L 素子のドーパント材料は式 ( D 1 ) で表される化合物 (ドーパント材料 1 ) 及び式 ( D 2 ) で表される化合物 (ドーパント材料 2 ) から選ばれる少なくとも 1 種の化合物である。第 2 の有機 E L 素子のドーパント材料 1 及びドーパント材料 2 の詳細は、第 1 の有機 E L 素子に関して記載した前記ドーパント材料 1 及び前記ドーパント材料 2 と同じであるので、ここでは簡略化のため省略する。

【 0 2 1 9 】

第 1 化合物

30

第 2 の有機 E L 素子で使用する第 1 化合物は、前記ドーパント材料及び第 3 化合物と共に蛍光発光層に使用され、蛍光発光層のホスト材料 (メインホスト材料) として機能する。第 2 の有機 E L 素子の第 1 化合物の詳細は、第 1 の有機 E L 素子に関して記載した第 1 化合物と同じであるので、ここでは簡略化のため省略する。

【 0 2 2 0 】

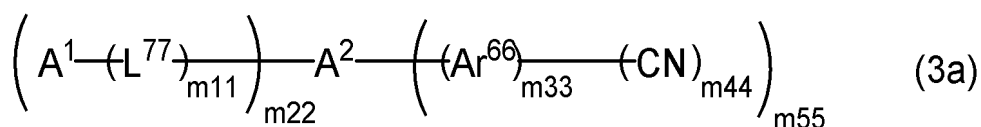
第 3 化合物

第 3 化合物は前記ドーパント材料及び第 1 化合物と共に第 2 の有機 E L 素子の蛍光発光層に使用され、蛍光発光層のコホスト材料として機能する。

第 3 化合物は下記式 ( 3 a ) で表される化合物から選ばれる少なくとも 1 種であることが好ましい。

40

【 化 1 2 8 】



【 0 2 2 1 】

式 ( 3 a ) において、 $L^{77}$  は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 5 0、好ましくは 6 ~ 3 0、より好ましくは 6 ~ 2 4、さらに好ましくは 6 ~ 1 8 のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 5 0、好ましくは 5 ~ 3 0、より好ましくは 5 ~ 1 8、さらに好ましくは 5 ~ 1 3 のヘテロアリーレン基である。

50

該環形成炭素数 6 ~ 50 のアリーレン基及び該環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリーレン基の詳細は、式 (19) の L に関して記載した対応する基とそれぞれ同じである。

【0222】

式 (3a) において、 $Ar^{66}$  は環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 24、さらに好ましくは 6 ~ 18 の芳香族炭化水素環又は環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 18、さらに好ましくは 5 ~ 13 の芳香族複素環の 2 ~ 4 価の残基であり、置換基を有していてもよい。

該環形成炭素数 6 ~ 50 の芳香族炭化水素環及び該環形成原子数 5 ~ 50 の芳香族複素環の詳細は、式 (D1) の環  $\pi 1$  及び環  $\pi 2$  に関して記載した対応する環とそれぞれ同じである。

10

【0223】

式 (3a) において、 $m_{11}$  は 0、1、又は 2、好ましくは 0 又は 1 であり、 $m_{11}$  が 0 のとき  $L^{77}$  は単結合であり、 $m_{11}$  が 2 のとき 2 個の  $L^{77}$  は同一でも異なってもよい。

【0224】

式 (3a) において、 $m_{22}$  は 0 又は 1 であり、 $m_{22}$  が 0 のとき  $A^{11} - (L^{77})_{m_{11}}$  は存在せず、水素原子が  $A^{22}$  に結合する。

【0225】

式 (3a) において、 $m_{33}$  は 0、1、2、又は 3、好ましくは 0、1、又は 2、より好ましくは 0 又は 1 であり、 $m_{33}$  が 0 のとき  $Ar^{66}$  は単結合であり、 $m_{33}$  が 2 又は 3 のとき 2 又は 3 個の  $Ar^{66}$  は同一でも異なってもよい。

20

【0226】

式 (3a) において、 $m_{44}$  は 0、1、2、又は 3、好ましくは 0、1、又は 2、より好ましくは 0 又は 1 であり、 $m_{44}$  が 0 のとき CN は存在せず、水素原子が  $A^{66}$  に結合する。

【0227】

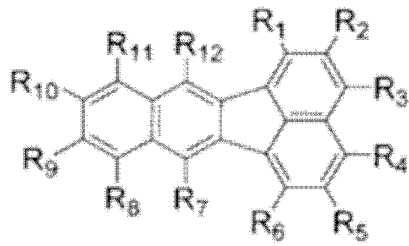
式 (3a) において、 $m_{55}$  は 1、2、又は 3、好ましくは 1 又は 2 であり、 $m_{55}$  が 2 又は 3 のとき、2 又は 3 個の  $-(Ar^{66})_{m_{33}} - (CN)_{m_{55}}$  は同一でも異なってもよい。

【0228】

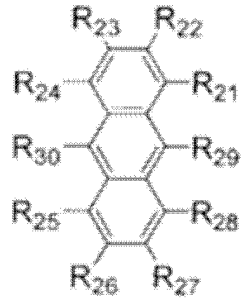
式 (3a) において、 $A^{11}$  は下記式 (A-1) ~ (A-12) から選ばれる 1 価の残基であり、 $A^{22}$  は下記式 (A-1) ~ (A-12) から選ばれる 2 ~ 4 価の基である。

30

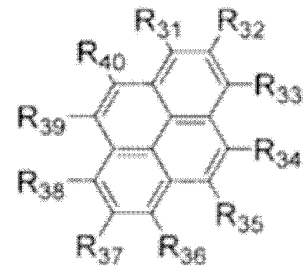
## 【化 1 2 9】



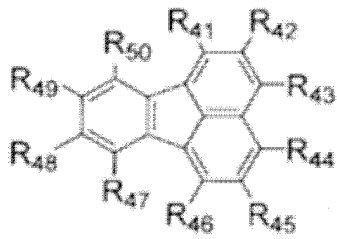
(A-1)



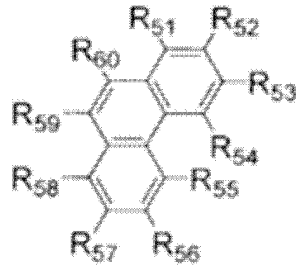
(A-2)



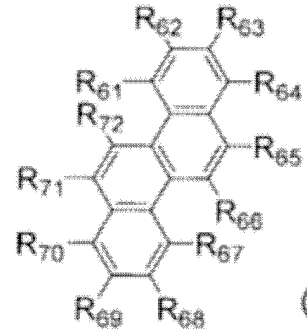
(A-3)



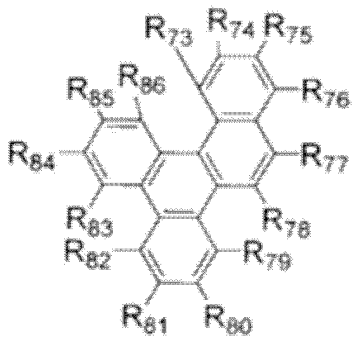
(A-4)



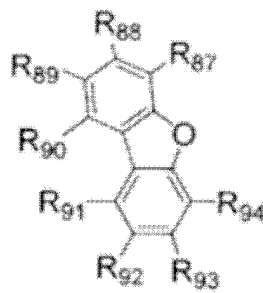
(A-5)



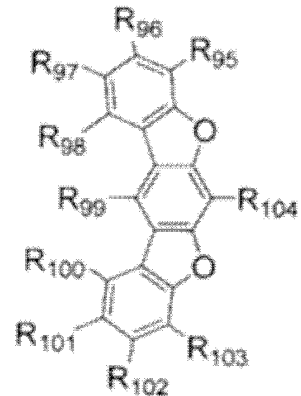
(A-6)



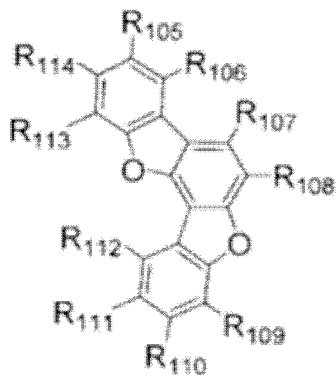
(A-7)



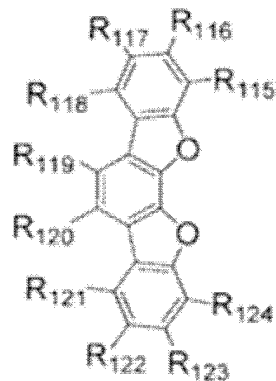
(A-8)



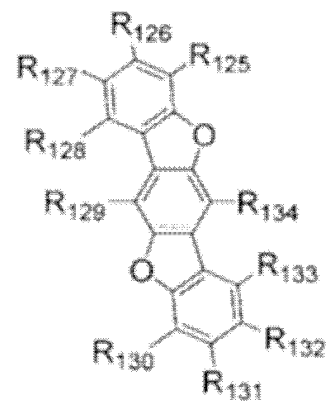
(A-9)



(A-10)



(A-11)



(A-12)

## 【 0 2 2 9 】

式 (A-1) ~ (A-12) において、 $R_1 \sim R_{12}$  から選ばれる 1 つ、 $R_{21} \sim R_{30}$  から選ばれる 1 つ、 $R_{31} \sim R_{40}$  から選ばれる 1 つ、 $R_{41} \sim R_{50}$  から選ばれる 1 つ、 $R_{51} \sim R_{60}$  から選ばれる 1 つ、 $R_{61} \sim R_{72}$  から選ばれる 1 つ、 $R_{73} \sim R_{86}$  から選ばれる 1 つ、 $R_{87} \sim R_{94}$  から選ばれる 1 つ、 $R_{95} \sim R_{104}$  から選ばれる 1 つ、 $R_{105} \sim R_{114}$  から選ばれる 1 つ、 $R_{115} \sim R_{124}$  から選ばれる 1 つ、及

10

20

30

40

50

び  $R_{125} \sim R_{134}$  から選ばれる 1 つは  $L^{77}$  に結合する単結合である。

又は、 $R_1 \sim R_{12}$  から選ばれる 2 ～ 4 個、 $R_{21} \sim R_{30}$  から選ばれる 2 ～ 4 個、 $R_{31} \sim R_{40}$  から選ばれる 2 ～ 4 個、 $R_{41} \sim R_{50}$  から選ばれる 2 ～ 4 個、 $R_{51} \sim R_{60}$  から選ばれる 2 ～ 4 個、 $R_{61} \sim R_{72}$  から選ばれる 2 ～ 4 個、 $R_{73} \sim R_{86}$  から選ばれる 2 ～ 4 個、 $R_{87} \sim R_{94}$  から選ばれる 2 ～ 4 個、 $R_{95} \sim R_{104}$  から選ばれる 2 ～ 4 個、 $R_{105} \sim R_{114}$  から選ばれる 2 ～ 4 個、 $R_{115} \sim R_{124}$  から選ばれる 2 ～ 4 個、及び  $R_{125} \sim R_{134}$  から選ばれる 2 ～ 4 個のうちの 1 つは  $L^{77}$  に結合する単結合であり、他は  $Ar^{66}$  に結合する単結合である。

#### 【0230】

前記単結合ではない  $R_1 \sim R_{12}$ 、 $R_{21} \sim R_{30}$ 、 $R_{31} \sim R_{40}$ 、 $R_{41} \sim R_{50}$ 、 $R_{51} \sim R_{60}$ 、 $R_{61} \sim R_{72}$ 、 $R_{73} \sim R_{86}$ 、 $R_{87} \sim R_{94}$ 、 $R_{95} \sim R_{104}$ 、 $R_{105} \sim R_{114}$ 、 $R_{115} \sim R_{124}$ 、及び  $R_{125} \sim R_{134}$  は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 20、好ましくは 1 ～ 10、より好ましくは 1 ～ 6 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 20、好ましくは 3 ～ 6、より好ましくは 5 又は 6 のシクロアルキル基、 $-Si(R_{101})(R_{102})(R_{103})$  で表される基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50、好ましくは 6 ～ 30、より好ましくは 6 ～ 24、さらに好ましくは 6 ～ 18 のアリール基である。

該炭素数 1 ～ 20 のアルキル基、該環形成炭素数 3 ～ 20 のシクロアルキル基、該  $-Si(R_{101})(R_{102})(R_{103})(R_{101}, R_{102}, \text{及び } R_{103})$  は前記と同様) で表される基、及び該環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基の詳細は、式 (D1) の  $R_A$ 、 $R_B$  及び  $R_C$  に関して記載した対応する基とそれぞれ同じである。

#### 【0231】

単結合ではない  $R_1 \sim R_{12}$ 、 $R_{21} \sim R_{30}$ 、 $R_{31} \sim R_{40}$ 、 $R_{41} \sim R_{50}$ 、 $R_{51} \sim R_{60}$ 、 $R_{61} \sim R_{72}$ 、 $R_{73} \sim R_{86}$ 、 $R_{87} \sim R_{94}$ 、 $R_{95} \sim R_{104}$ 、 $R_{105} \sim R_{114}$ 、 $R_{115} \sim R_{124}$ 、及び  $R_{125} \sim R_{134}$  がすべて水素原子であってもよい。

#### 【0232】

式 (A-1) ～ (A-12) において、前記単結合ではない  $R_1 \sim R_{12}$ 、 $R_{21} \sim R_{30}$ 、 $R_{31} \sim R_{40}$ 、 $R_{41} \sim R_{50}$ 、 $R_{51} \sim R_{60}$ 、 $R_{61} \sim R_{72}$ 、 $R_{73} \sim R_{86}$ 、 $R_{87} \sim R_{94}$ 、 $R_{95} \sim R_{104}$ 、 $R_{105} \sim R_{114}$ 、 $R_{115} \sim R_{124}$ 、及び  $R_{125} \sim R_{134}$  から選ばれる隣接する 2 つは互いに結合して置換もしくは無置換の環構造を形成してもよい。

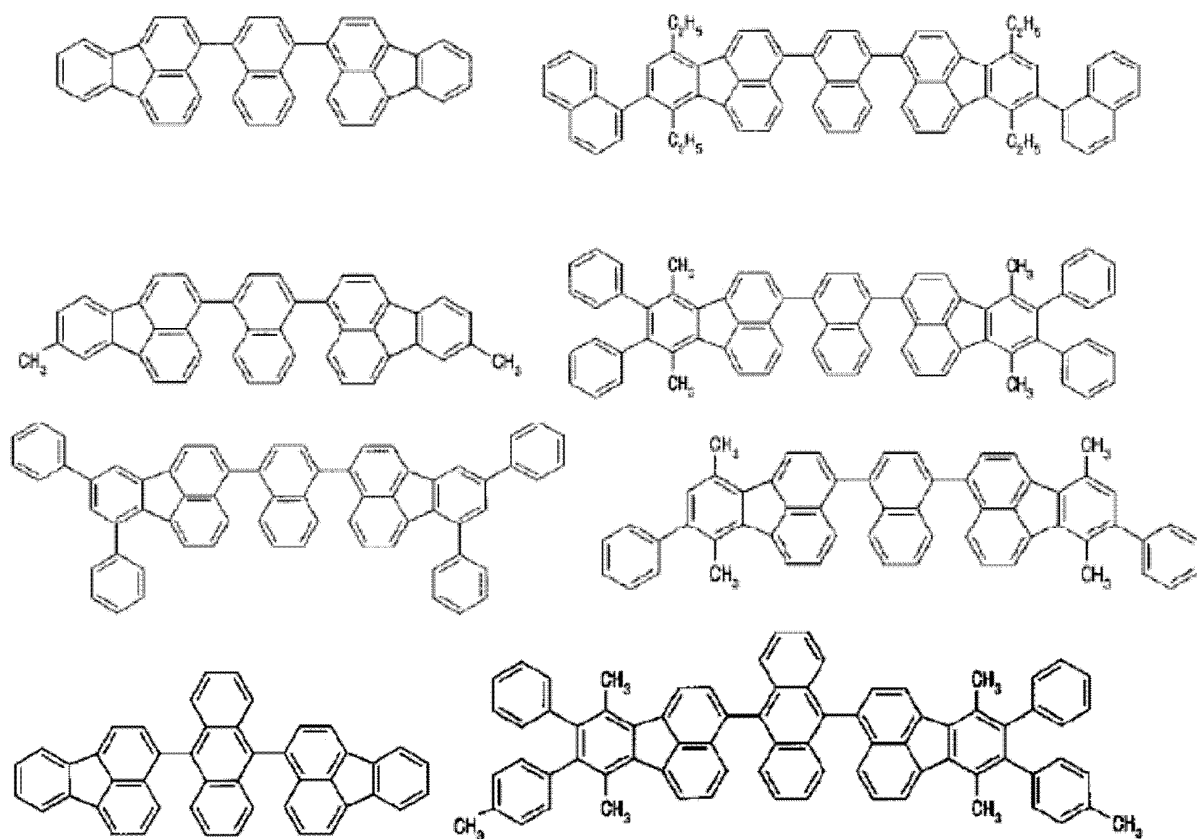
該環構造は、例えば、式 (D1) の環  $\pi 1$  及び環  $\pi 2$  に関して記載した前記環形成炭素数 6 ～ 50 の芳香族炭化水素環及び前記環形成原子数 5 ～ 50 の芳香族複素環から選ばれ、好ましくは式 (1) に関して記載した式 (2) ～ (11) から選ばれる。

#### 【0233】

式 (3a) で表される化合物の具体例を以下に示すが、これらに限定されるものではない。

#### 【0234】

【化 1 3 0】

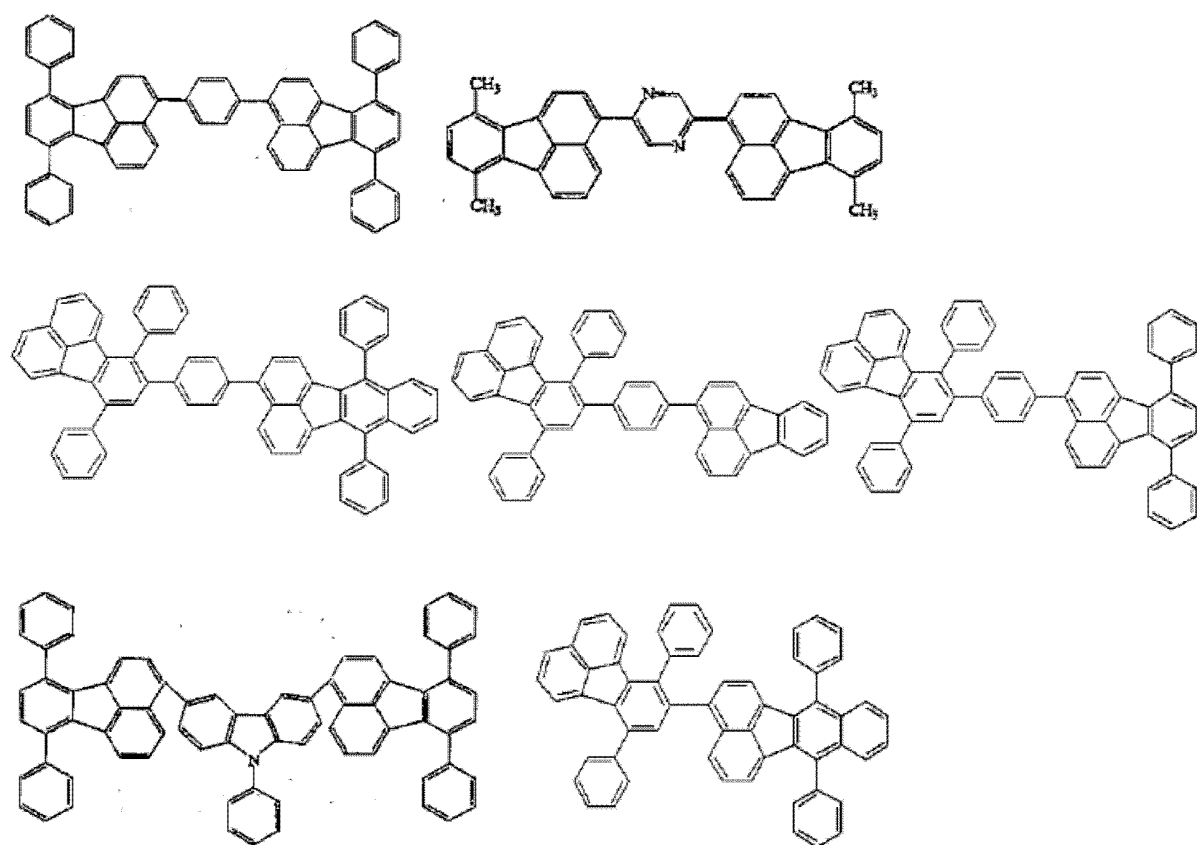


10

20

【 0 2 3 5】

【化 1 3 1】

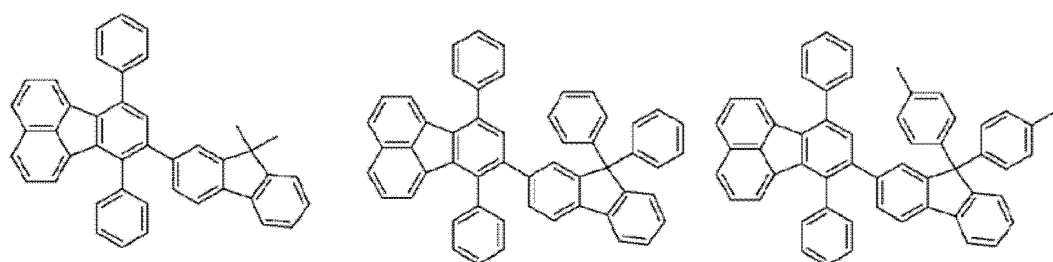
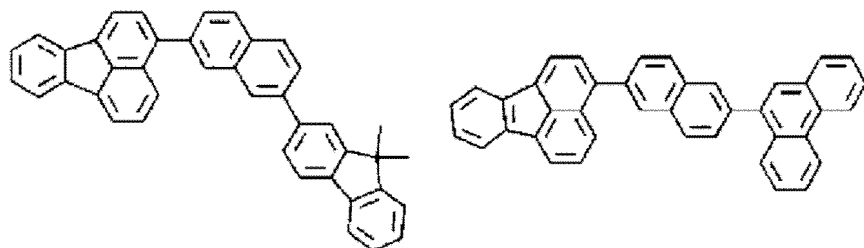
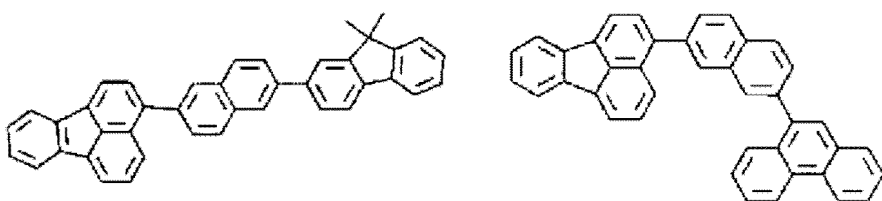


30

40

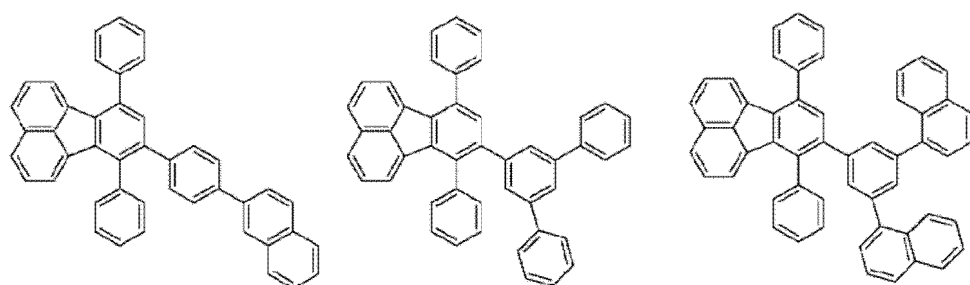
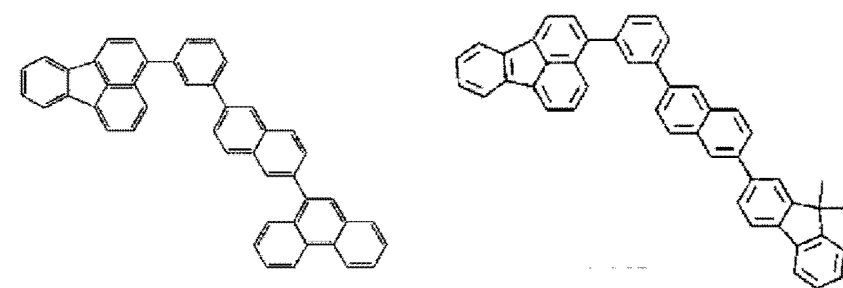
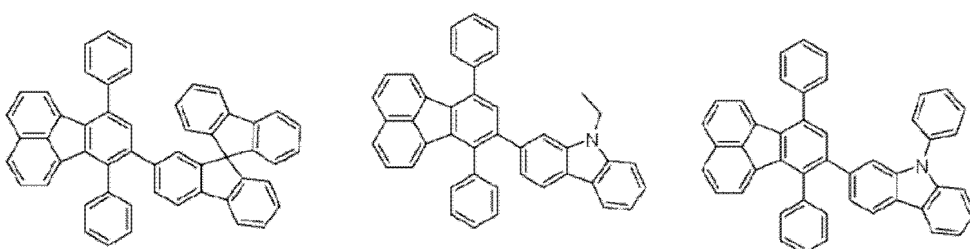
【 0 2 3 6】

【化 1 3 2】



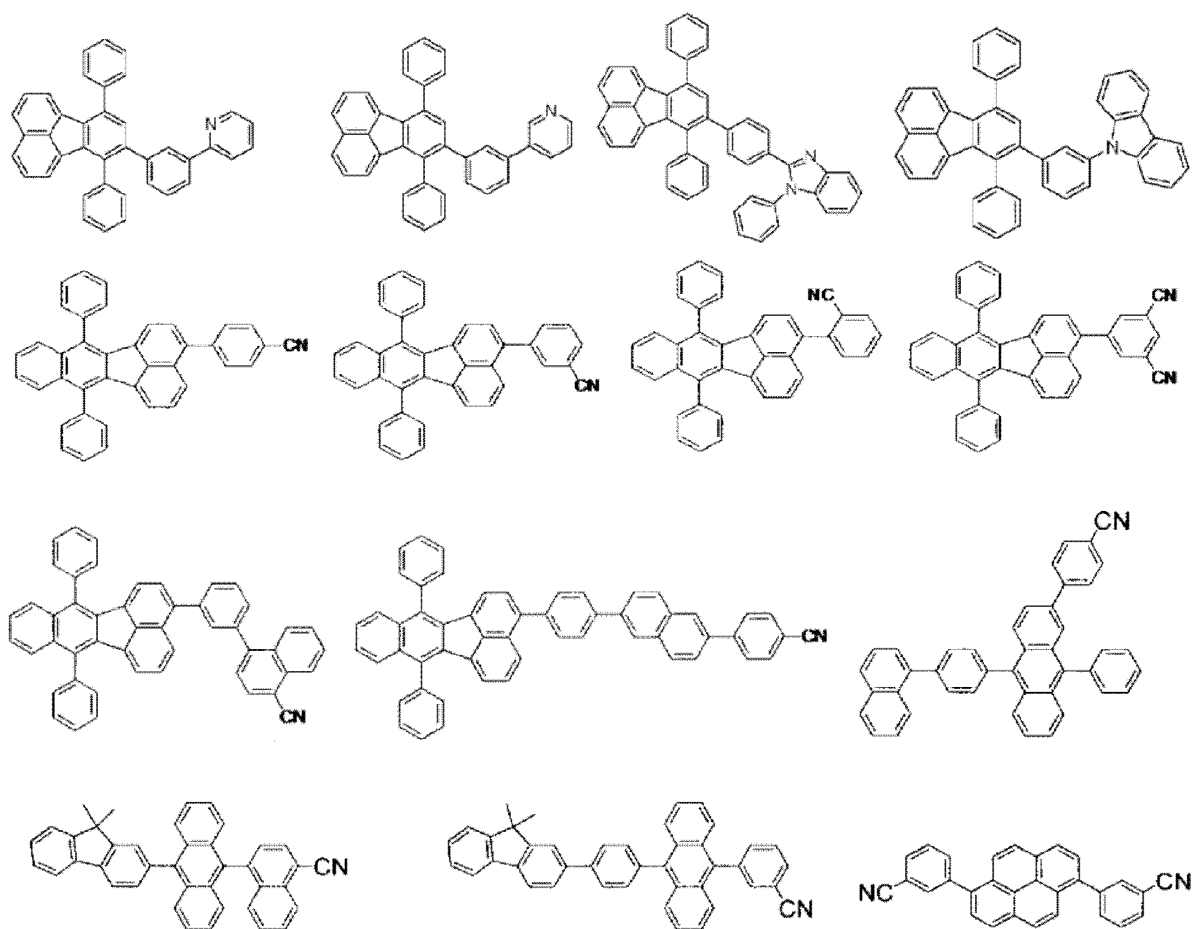
【 0 2 3 7】

【化 1 3 3】



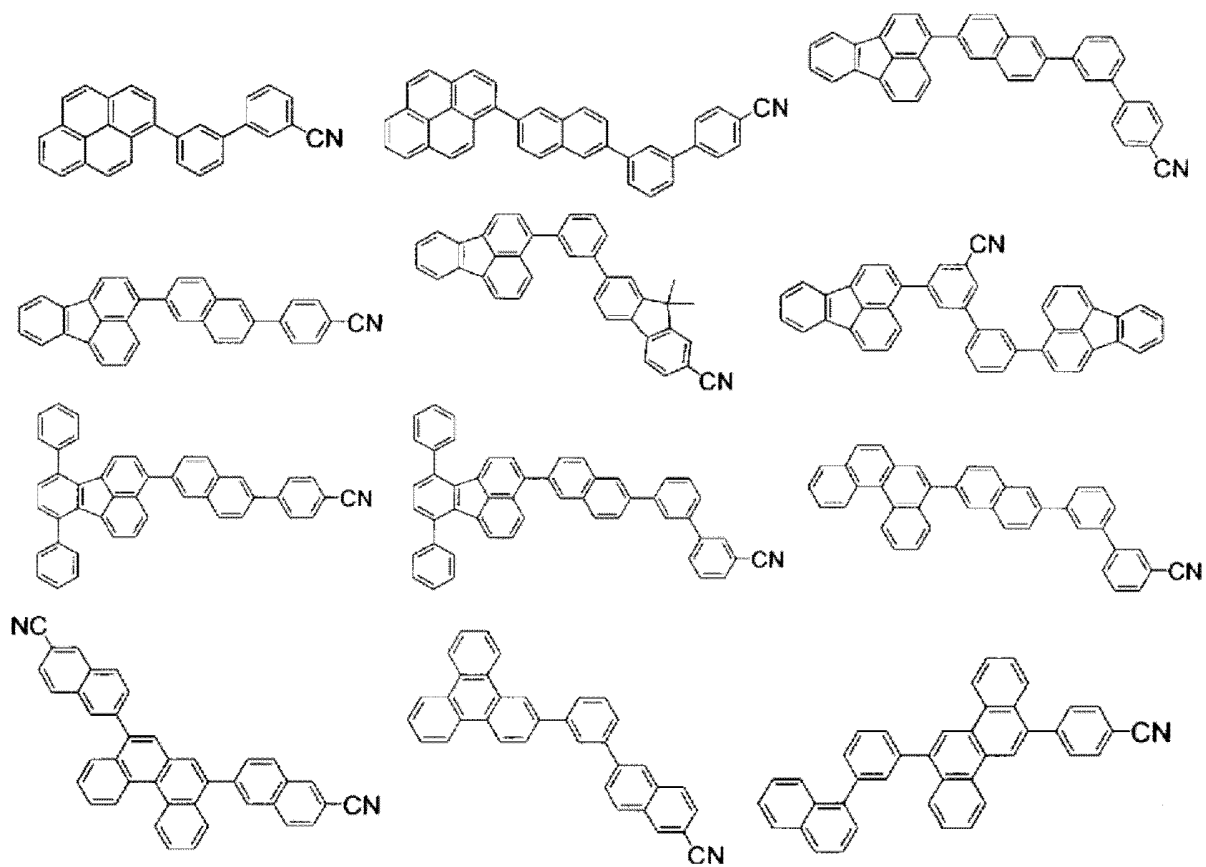
【 0 2 3 8】

## 【化 1 3 4】



## 【 0 2 3 9】

## 【化 1 3 5】



10

20

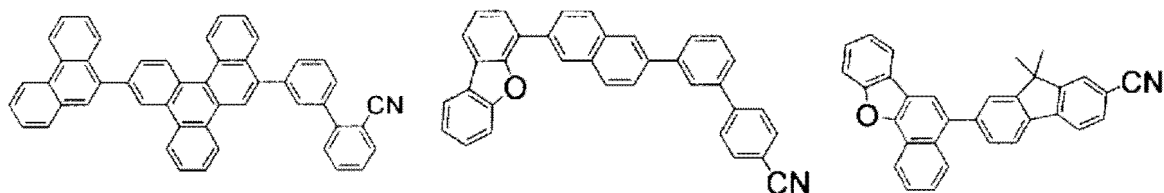
30

40

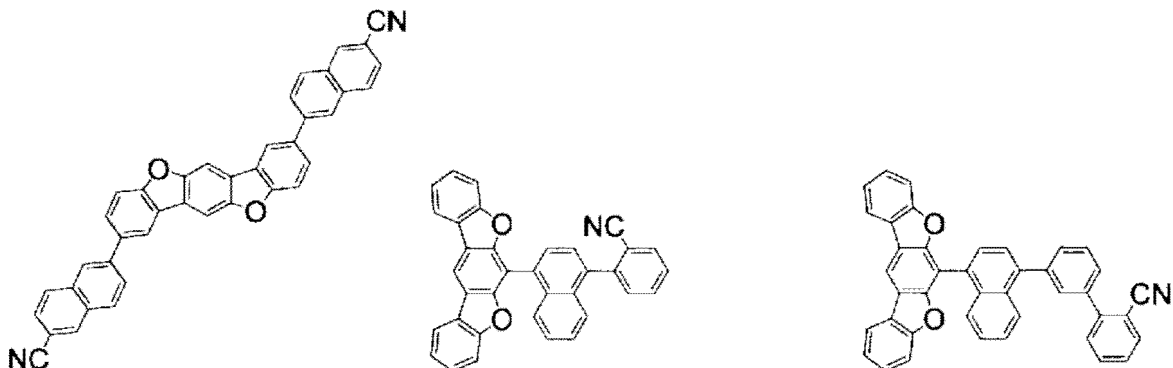
50

【 0 2 4 0 】

【 化 1 3 6 】



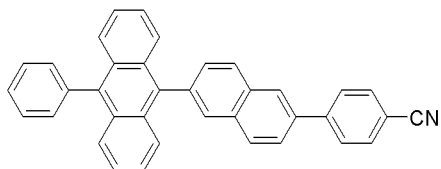
10



20

【 0 2 4 1 】

【 化 1 3 7 】



【 0 2 4 2 】

前記の「置換基」又は「置換もしくは無置換」との記載における置換基としては、別段の定めのない限り、炭素数 1 ~ 50、好ましくは 1 ~ 18、より好ましくは 1 ~ 8 のアルキル基；環形成炭素数 3 ~ 50、好ましくは 3 ~ 10、より好ましくは 3 ~ 8、さらに好ましくは 5 又は 6 のシクロアルキル基；環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18 のアリール基；環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18 のアリール基を有する炭素数 7 ~ 51、好ましくは 7 ~ 30、より好ましくは 7 ~ 20 のアラルキル基；アミノ基；炭素数 1 ~ 50、好ましくは 1 ~ 18、より好ましくは 1 ~ 8 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50（好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18 のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基；炭素数 1 ~ 50、好ましくは 1 ~ 18、より好ましくは 1 ~ 8 のアルコキシ基；環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18 のアリールオキシ基；炭素数 1 ~ 50、好ましくは 1 ~ 18、より好ましくは 1 ~ 8 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18 のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基；環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 24、より好ましくは 5 ~ 13 のヘテロアリール基；炭素数 1 ~ 50、好ましくは 1 ~ 18、より好ましくは 1 ~ 8 のハロアルキル基；ハロゲン原子；シアノ基；ニトロ基；炭素数 1 ~ 50、好ましくは 1 ~ 18、より好ましくは 1 ~ 8 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18 のアリール基から選ばれる置換基を有するスルホニル基；炭素数 1 ~ 50、好ましくは 1 ~ 18、より好ましくは 1 ~ 8 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18 のアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換ホスフォリル基；アルキルスルホニルオキシ基；アリールスルホニルオキシ基；アルキルカルボニルオキシ基；アリールカルボニルオキシ基；ホウ素含有基；亜鉛含有基；スズ含有基；ケイ素含有基；マグネ

30

40

50

シウム含有基；リチウム含有基；ヒドロキシ基；アルキル置換又はアリール置換カルボニル基；カルボキシ基；ビニル基；（メタ）アクリロイル基；エポキシ基；並びにオキセタニル基からなる群より選ばれる少なくとも１つが好ましいが、特にこれらに制限されるものではない。

これらの置換基は、さらに上述の任意の置換基により置換されていてもよい。また、隣接する２つの置換基は互いに結合して環構造を形成してもよい。

#### 【 0 2 4 3 】

上記置換基は、より好ましくは置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50、好ましくは 1 ~ 18、より好ましくは 1 ~ 8 のアルキル基；置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50、好ましくは 3 ~ 10、より好ましくは 3 ~ 8、さらに好ましくは 5 又は 6 のシクロアルキル基；置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18 のアリール基；置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50、好ましくは 1 ~ 18、より好ましくは 1 ~ 8 のアルキル基及び置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 25、より好ましくは 6 ~ 18 のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基；置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 24、より好ましくは 5 ~ 13 のヘテロアリール基、ハロゲン原子、シアノ基である。

#### 【 0 2 4 4 】

前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、n - プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、イソブチル基、s - ブチル基、t - ブチル基、ペンチル基（異性体基を含む）、ヘキシル基（異性体基を含む）、ヘプチル基（異性体基を含む）、オクチル基（異性体基を含む）、ノニル基（異性体基を含む）、デシル基（異性体基を含む）、ウンデシル基（異性体基を含む）、及びドデシル基（異性体基を含む）などが挙げられる。これらの中でも、メチル基、エチル基、n - プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、イソブチル基、s - ブチル基、t - ブチル基及びペンチル基（異性体基を含む）が好ましく、メチル基、エチル基、n - プロピル基、イソプロピル基、n - ブチル基、イソブチル基、s - ブチル基及び t - ブチル基がより好ましく、メチル基、エチル基、イソプロピル基及び t - ブチル基が特に好ましい。

前記環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基としては、例えば、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロオクチル基、アダマンチル基などが挙げられる。これらの中でも、シクロペンチル基、シクロヘキシル基が好ましい。

前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基としては、例えば、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アセナフチレニル基、アントリル基、ベンゾアントリル基、アセアントリル基、フェナントリル基、ベンゾ [ c ] フェナントリル基、フェナレニル基、フルオレニル基、ピセニル基、ベンタフェニル基、ピレニル基、クリセニル基、ベンゾ [ g ] クリセニル基、s - インダセニル基、a s - インダセニル基、フルオランテニル基、ベンゾ [ k ] フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ベンゾ [ b ] トリフェニレニル基及びペリレニル基などが挙げられる。これらの中でも、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アントリル基、ピレニル基、フルオランテニル基が好ましく、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基がより好ましく、フェニル基がさらに好ましい。

前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基を有する炭素数 7 ~ 51 のアラルキル基のアリール部位の詳細は上記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基と同じであり、アルキル部位の詳細は前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基と同じである。

前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基のアリール部位の詳細は上記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基と同じであり、アルキル部位の詳細は前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基と同じである。

前記炭素数 1 ~ 50 のアルコキシ基のアルキル部位の詳細は前記炭素数 1 ~ 50 のアル

10

20

30

40

50

キル基と同じである。

前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリールオキシ基のアリール部位の詳細は前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基と同じである。

前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基としては、モノアルキルシリル基、ジアルキルシリル基、トリアルキルシリル基；モノアリールシリル基、ジアリールシリル基、トリアリールシリル基；モノアルキルジアリールシリル基、ジアルキルモノアリールシリル基が挙げられる。これらの基のアルキル部位の詳細及びアリール部位の詳細は前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基及び前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基と同じである。

10

前記環形成原子数 5 ~ 50 のヘテロアリール基としては、例えば、ピロリル基、フリル基、チエニル基、ピリジル基、イミダゾピリジル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、トリアジニル基、イミダゾリル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、ピラゾリル基、イソオキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、イソベンゾフラニル基、ベンゾチオフエニル基、イソベンゾチオフエニル基、インドリジニル基、キノリジニル基、キノリル基、イソキノリル基、シンノリル基、フタラジニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、ベンズイミダゾリル基、ベンズオキサゾリル基、ベンズチアゾリル基、インダゾリル基、ベンズイソキサゾリル基、ベンズイソチアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、カルバゾリル基、9 - フェニルカルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、フェノキサジニル基及びキサンテニル基などが挙げられる。これらの中でも、ピリジル基、イミダゾピリジル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、トリアジニル基、ベンズイミダゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、カルバゾリル基、9 - フェニルカルバゾリル基、フェナントロリニル基、キナゾリニル基が好ましい。

20

前記ハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子等が挙げられる。

前記炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基は、前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の少なくとも 1 つの水素原子が前記ハロゲン原子で置換された基である。

30

前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するスルホニル基、前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換ホスフォリル基、アルキルスルホニルオキシ基、アリールスルホニルオキシ基、アルキルカルボニルオキシ基、アリールカルボニルオキシ基、アルキル置換又はアリール置換カルボニル基のそれぞれのアリール部位の詳細及びアルキル部位の詳細は、それぞれ、前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基及び炭素数 1 ~ 50 のアルキル基と同じである。

#### 【0245】

本発明は、置換基の例示、その好ましい例、より好ましい例などを他の置換基の例示、その好ましい例、より好ましい例などと自由に組み合わせた態様を含む。化合物、炭素数の範囲、原子数の範囲についても同様である。また、本発明は、置換基、化合物、炭素数の範囲、原子数の範囲に関する記載を自由に組み合わせた態様も含む。

40

#### 【0246】

#### 有機EL素子

有機EL素子の発光効率向上のためには、ドーパント材料の蛍光量子収率 (PLQY) 及び蛍光スペクトルの形状 (半値幅) が重要視される。

最適な色調の光を得るために、フルカラーディスプレイで用いられる赤、緑及び青の3原色やそれに黄等を加えた4色以上の光はカラーフィルタにより目的としない波長の光をカットした後、或いは、マイクロキャビティ構造により目的波長の光を増幅し、それ以外の光を減衰させた後に外部に取り出されている。すなわち、目的波長以外の光はカットさ

50

れるため、エネルギーロスにつながる。従って、ドーパント材料の発光スペクトル形状がよりシャープ（半値幅がより狭い）であると、カットされる光の波長域が狭くなるため、エネルギーロスが少なく効率の面で有利となる。

【0247】

シャープな発光スペクトルを示すドーパント材料としては、基底状態と励起状態の構造変化が少なく、振動準位の数が少ない化学構造が適すると考えられている。

【0248】

本発明で使用する式（D1）及び（D2）のドーパント材料は、縮合芳香環を基本構造とする剛直な構造であるので基底状態と励起状態の構造変化が少ない。

【0249】

式（D1）及び（D2）の縮合構造（各Rを除いた構造、以下同様）が対称である場合は、振動準位が縮重するため、よりシャープな発光スペクトルが得られると考えられる。縮合構造が対称であるとは、例えば、式（D1）の窒素原子と中央のZとを結ぶ直線に対して縮合構造が対称であることを意味する。

式（D1）及び（D2）の縮合構造が非対称である場合は、置換基を導入することなく波長を調整する際に特に有効である。非対称の縮合構造とは、例えば、式（D1）の窒素原子と中央のZとを結ぶ直線に対して縮合構造が対称ではないことを意味する。

【0250】

本発明の有機EL素子についてさらに説明する。なお、以下において「発光層」は特にことわらない限り蛍光発光層と燐光発光層を含む。

本発明の有機EL素子は、前述した様に、陰極、陽極、及び該陰極と該陽極の間に存在する有機層とを含有し、該有機層は蛍光発光層を含む。該蛍光発光層は第1化合物、該第1化合物よりも大きい正孔移動度を有する第2化合物、及び蛍光スペクトルの半値幅が30nm以下のドーパント材料を含有するか、又は、第1化合物、該第1化合物よりも大きいアフィニティを有する第3化合物、及び蛍光スペクトルの半値幅が30nm以下のドーパント材料を含有する。

前記蛍光発光層は熱活性化遅延蛍光（Thermally Activated Delayed Fluorescence）機構を用いる発光層であってもよい。また、前記蛍光発光層は、燐光発光性を有する重金属錯体、例えば、イリジウム錯体、白金錯体、オスミウム錯体、レニウム錯体、ルテニウム錯体等、を含まない。

【0251】

本発明の有機EL素子は、蛍光発光型又は熱活性化遅延蛍光機構を用いる単色発光素子であっても、2以上の上記単色発光素子を含むハイブリッド型の白色発光素子であってもよいし、単独の発光ユニットを有するシンプル型であっても、複数の発光ユニットを有するタンデム型であってもよい。ここで、「発光ユニット」とは、有機層を含み、そのうちの一層が発光層であり、注入された正孔と電子が再結合することにより発光することができる最小単位をいう。

【0252】

シンプル型有機EL素子の代表的な素子構成としては、以下の素子構成を挙げることができる。

（1）陽極／発光ユニット／陰極

但し、下記発光ユニットは少なくとも1つの蛍光発光層を含む。また、上記発光ユニットは、燐光発光層、蛍光発光層及び熱活性化遅延蛍光機構を用いる発光層から選ばれる2以上の発光層を含む積層型であってもよい。燐光発光層で生成された励起子が蛍光発光層に拡散することを防ぐ目的で、2つの発光層の間にスペース層を介在させてもよい。発光ユニットの代表的な層構成を以下に示す。括弧内の層は任意である。

（a）（正孔注入層／）正孔輸送層／蛍光発光層（／電子輸送層／電子注入層）

（b）（正孔注入層／）正孔輸送層／第一蛍光発光層／第二蛍光発光層（／電子輸送層／電子注入層）

（c）（正孔注入層／）正孔輸送層／燐光発光層／スペース層／蛍光発光層（／電子輸送

10

20

30

40

50

層 / 電子注入層)

(d) (正孔注入層 /) 正孔輸送層 / 第一燐光発光層 / 第二燐光発光層 / スペース層 / 蛍光発光層 ( / 電子輸送層 / 電子注入層)

(e) (正孔注入層 /) 正孔輸送層 / 第一燐光発光層 / スペース層 / 第二燐光発光層 / スペース層 / 蛍光発光層 ( / 電子輸送層 / 電子注入層)

(f) (正孔注入層 /) 正孔輸送層 / 燐光発光層 / スペース層 / 第一蛍光発光層 / 第二蛍光発光層 ( / 電子輸送層 / 電子注入層)

(g) (正孔注入層 /) 第一正孔輸送層 / 第二正孔輸送層 / 蛍光発光層 / 第一電子輸送層 / 第二電子輸送層 ( / 電子注入層)

【0253】

10

上記燐光発光層又は蛍光発光層は、それぞれ互いに異なる発光色を示すものとしてすることができる。具体的には、上記発光ユニット(d)において、正孔輸送層 / 第一燐光発光層 (赤色発光) / 第二燐光発光層 (緑色発光) / スペース層 / 蛍光発光層 (青色発光) / 電子輸送層といった層構成が挙げられる。

なお、各発光層と正孔輸送層あるいはスペース層との間には、電子阻止層を設けてもよい。また、各発光層と電子輸送層との間には、正孔阻止層を設けてもよい。電子阻止層や正孔阻止層を設けることで、電子又は正孔を発光層内に閉じ込めて、発光層における電荷の再結合確率を高め、発光効率を向上させることができる。

【0254】

タンデム型有機EL素子の代表的な素子構成としては、以下の素子構成を挙げることができる。

20

(2) 陽極 / 第一発光ユニット / 中間層 / 第二発光ユニット / 陰極

上記第一発光ユニット及び第二発光ユニットとしては、例えば、それぞれ独立に、上述の発光ユニットから選択することができる。

上記中間層は、一般的に、中間電極、中間導電層、電荷発生層、電子引抜層、接続層、中間絶縁層とも呼ばれ、第一発光ユニットに電子を、第二発光ユニットに正孔を供給することが出来る公知の材料を用いることができる。

【0255】

図1に、本発明の有機EL素子の一例の概略構成を示す。有機EL素子1は、基板2、陽極3、陰極4、及び該陽極3と陰極4との間に配置された発光ユニット(有機層)10とを有する。発光ユニット10は蛍光発光層5を有する。蛍光発光層5と陽極3との間に正孔注入層 / 正孔輸送層6など、蛍光発光層5と陰極4との間に電子注入層 / 電子輸送層7などを形成してもよい。また、蛍光発光層5の陽極3側に電子阻止層を、蛍光発光層5の陰極4側に正孔阻止層を、それぞれ設けてもよい。これにより、電子や正孔を蛍光発光層5に閉じ込めて、蛍光発光層5における励起子の生成確率を高めることができる。

30

【0256】

本明細書において、蛍光ドーパント材料と組み合わせられたホスト材料を蛍光ホスト材料と称し、燐光ドーパント材料と組み合わせられたホスト材料を燐光ホスト材料と称する。蛍光ホスト材料と燐光ホスト材料は、分子構造のみにより区分されるものではない。すなわち、蛍光ホスト材料とは、蛍光ドーパント材料を含有する蛍光発光層に用いるドーパント材料を意味し、燐光発光層に用いることができないことを意味しているわけではない。燐光ホスト材料についても同様である。

40

【0257】

基板

本発明の有機EL素子は、透光性基板上に作製する。透光性基板は有機EL素子を支持する基板であり、400nm~700nmの可視領域の光の透過率が50%以上で平滑な基板が好ましい。具体的には、ガラス板、ポリマー板などが挙げられる。ガラス板としては、ソーダ石灰ガラス、バリウム-ストロンチウム含有ガラス、鉛ガラス、アルミノケイ酸ガラス、ホウケイ酸ガラス、バリウムホウケイ酸ガラス、石英などを原料として用いるものを挙げられる。またポリマー板としては、ポリカーボネート、アクリル、ポリエ

50

チレンテレフタレート、ポリエーテルサルファイド、ポリサルフォンなどを原料として用いてなるものを挙げることができる。

【 0 2 5 8 】

陽極

有機 E L 素子の陽極は、正孔を正孔輸送層又は発光層に注入する役割を担うものであり、4.5 eV 以上の仕事関数を有するものを用いることが効果的である。陽極材料の具体例としては、酸化インジウム錫合金 (ITO)、酸化錫 (NE SA)、酸化インジウム亜鉛酸化物、金、銀、白金、銅などが挙げられる。陽極はこれらの電極物質を蒸着法やスパッタリング法などの方法で薄膜を形成させることにより作製することができる。発光層からの発光を陽極から取り出す場合、陽極の可視領域の光の透過率を 10 % より大きくすることが好ましい。また、陽極のシート抵抗は、数百  $\Omega / \square$  以下が好ましい。陽極の膜厚は、材料にもよるが、通常 10 nm ~ 1  $\mu$ m、好ましくは 10 ~ 200 nm である。

10

【 0 2 5 9 】

陰極

陰極は電子注入層、電子輸送層又は発光層に電子を注入する役割を担うものであり、仕事関数の小さい材料により形成するのが好ましい。陰極材料は特に限定されないが、具体的にはインジウム、アルミニウム、マグネシウム、マグネシウム - インジウム合金、マグネシウム - アルミニウム合金、アルミニウム - リチウム合金、アルミニウム - スカンジウム - リチウム合金、マグネシウム - 銀合金などが使用できる。陰極も、陽極と同様に、蒸着法やスパッタリング法などの方法で薄膜を形成させることにより作製することができる。また、必要に応じて、陰極側から発光層からの発光を取り出してもよい。

20

【 0 2 6 0 】

正孔注入層

正孔注入層は、正孔注入性の高い材料 (正孔注入性材料) を含む層である。

正孔注入性材料としては、芳香族アミン化合物、モリブデン酸化物、チタン酸化物、バナジウム酸化物、レニウム酸化物、ルテニウム酸化物、クロム酸化物、ジルコニウム酸化物、ハフニウム酸化物、タンタル酸化物、銀酸化物、タングステン酸化物、マンガン酸化物等を用いることができる。

【 0 2 6 1 】

正孔輸送層

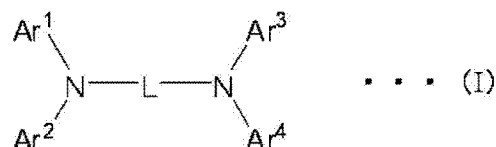
発光層と陽極との間に形成される有機層であって、正孔を陽極から発光層へ輸送する機能を有する。正孔輸送層が複数層で構成される場合、陽極に近い有機層を正孔注入層と定義することができる。正孔注入層は、陽極から正孔を効率的に有機層ユニットに注入する機能を有する。

30

【 0 2 6 2 】

正孔輸送層を形成する材料としては、芳香族アミン化合物、例えば、下記式 (I) で表される芳香族アミン誘導体が好ましい。

【 化 1 3 8 】



40

【 0 2 6 3 】

前記式 (I) において、 $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^4$  は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 20、さらに好ましくは 6 ~ 12 の非縮合アリール基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 20、さらに好ましくは 6 ~ 12 の縮合アリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 20、さらに好ましくは 5 ~ 12 の非縮合ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 50、好ましくは 5 ~ 30、より好ましくは 5 ~ 20、さらに好ましくは 5 ~ 1

50

2の縮合ヘテロアリール基、又は、前記非縮合アリール基又は縮合アリール基と前記非縮合ヘテロアリール基又は縮合ヘテロアリール基が結合した基を表す。

$Ar^1$ と $Ar^2$ 及び $Ar^3$ と $Ar^4$ は互いに結合して環を形成してもよい。

前記式(I)において、Lは置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50、好ましくは6～30、より好ましくは6～20、さらに好ましくは6～12の非縮合アリーレン基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50、好ましくは6～30、より好ましくは6～20、さらに好ましくは6～12の縮合アリーレン基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50、好ましくは5～30、より好ましくは5～20、さらに好ましくは5～12の非縮合ヘテロアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50、好ましくは5～30、より好ましくは5～20、さらに好ましくは5～12の縮合ヘテロアリーレン基を表す。

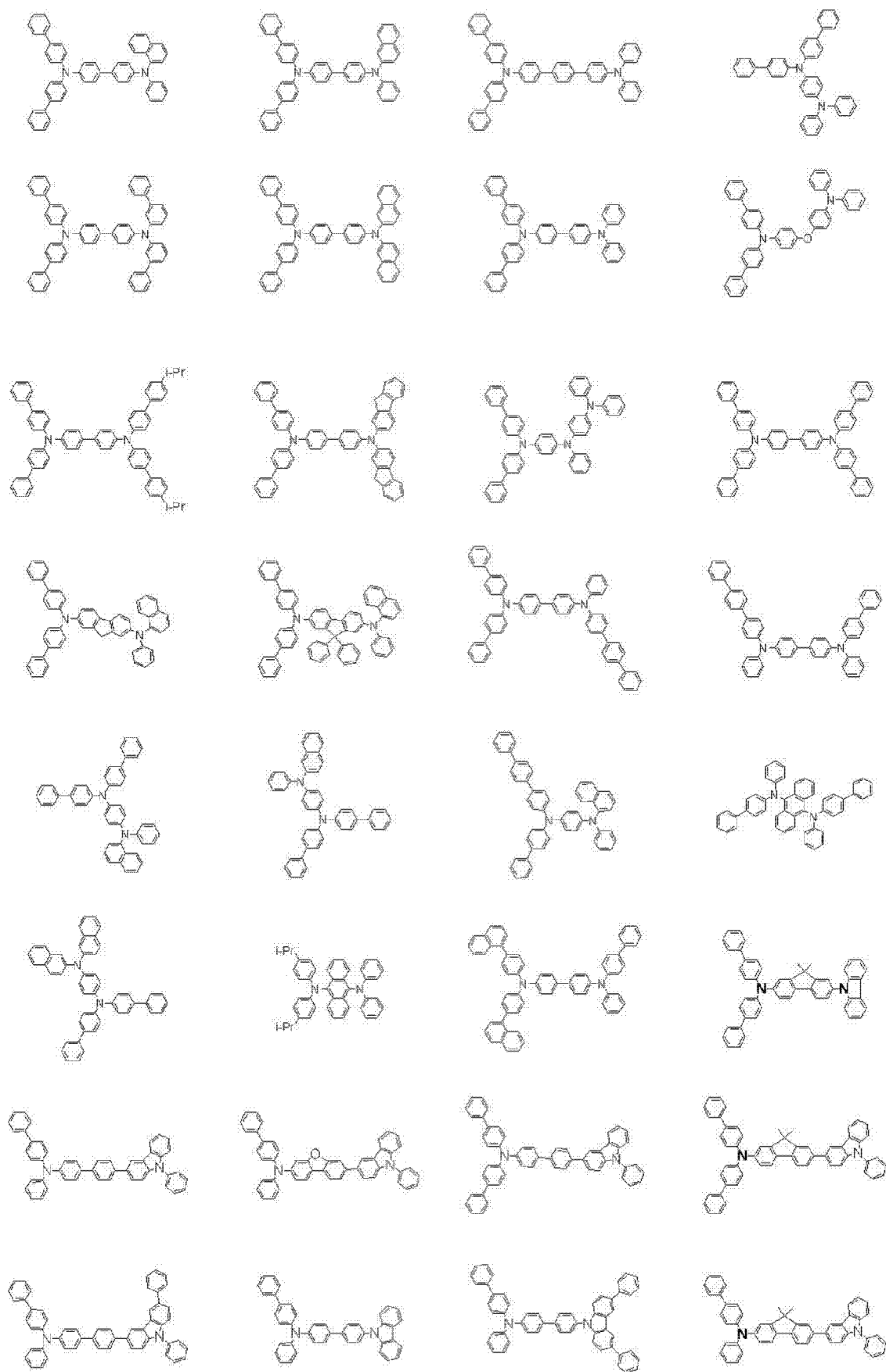
10

【0264】

式(I)の化合物の具体例を以下に記す。

【0265】

【化 1 3 9】



10

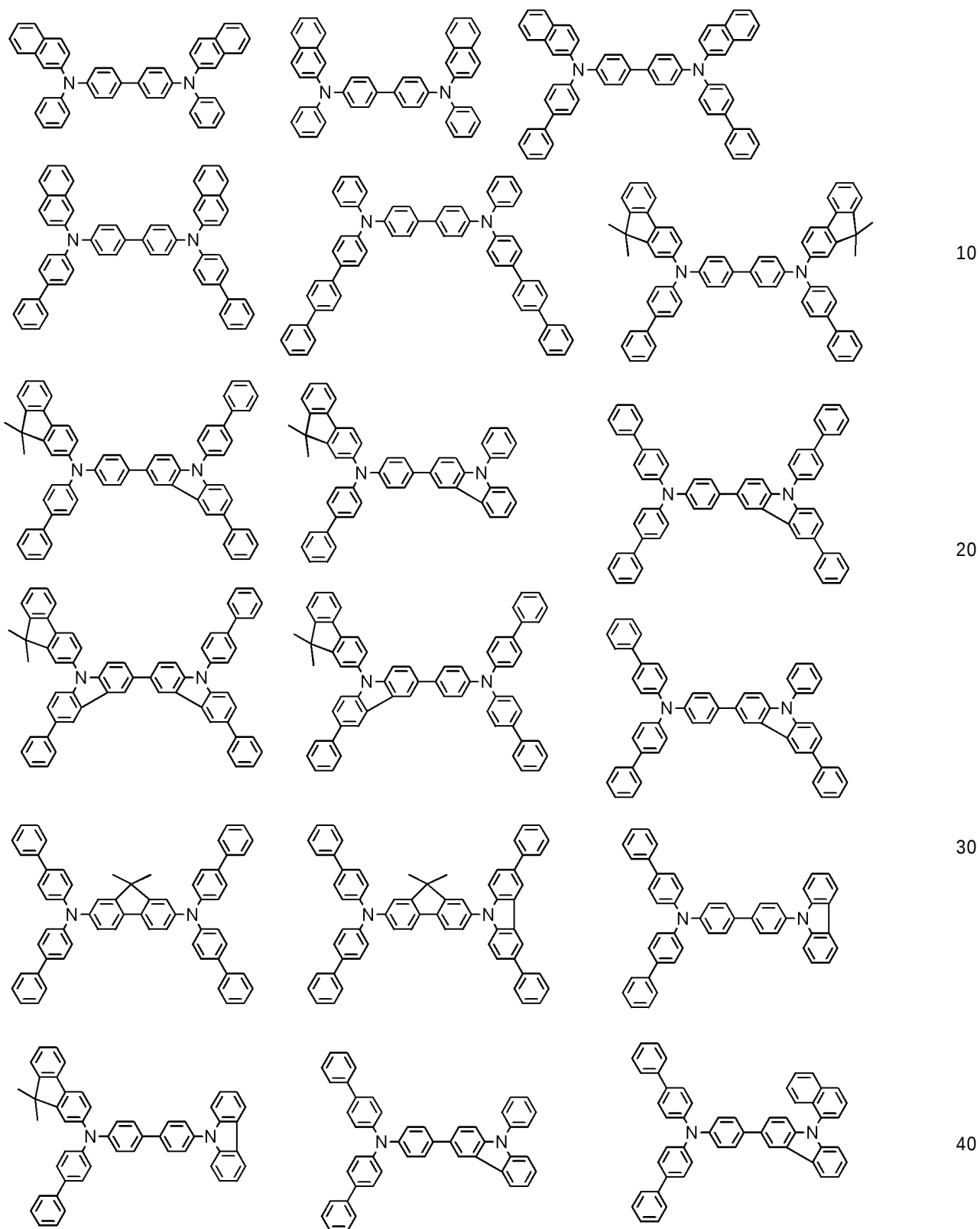
20

30

40

【 0 2 6 6 】

## 【化 1 4 0】

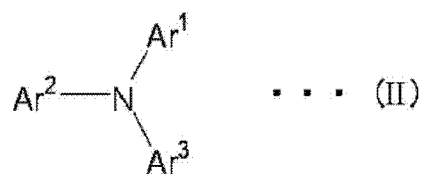


## 【 0 2 6 7】

また、下記式 ( I I ) の芳香族アミンも正孔輸送層の材料として好ましい。

## 【 0 2 6 8】

【化 1 4 1】

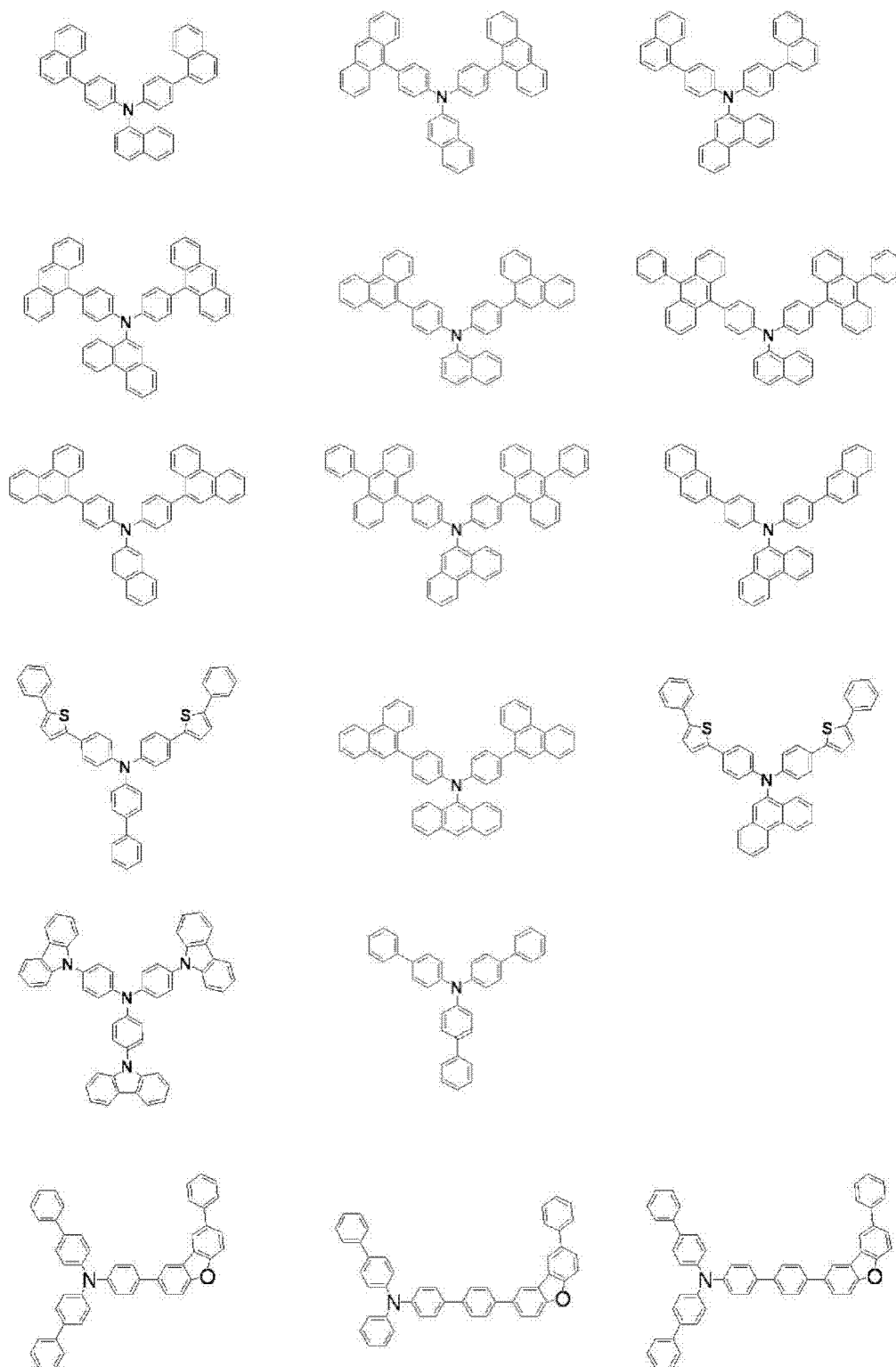


【 0 2 6 9 】

前記式 ( I I ) において、 $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^3$  は前記式 ( I ) の  $\text{Ar}^1 \sim \text{Ar}^4$  の定義と同様である。以下に式 ( I I ) の化合物の具体例を記すがこれらに限定されるものではない。

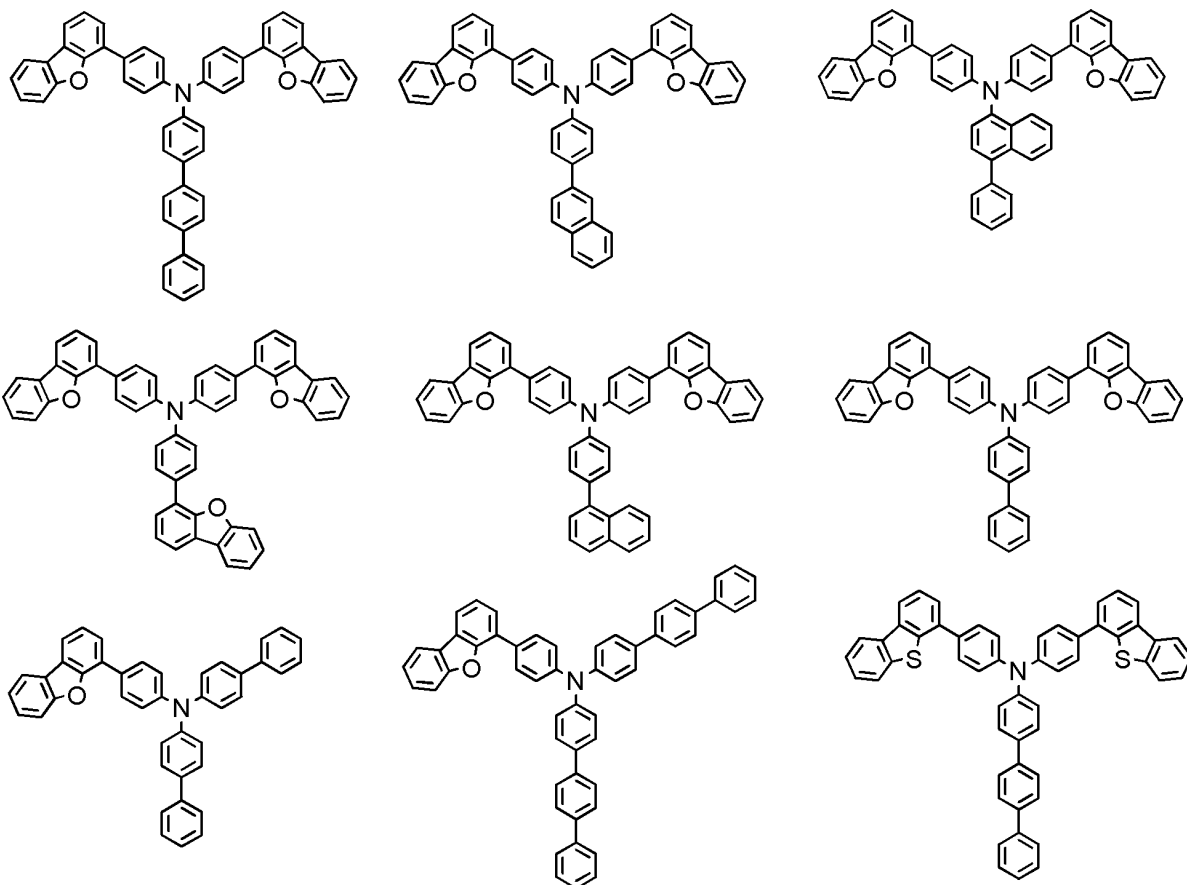
【 0 2 7 0 】

【化 1 4 2】



【 0 2 7 1】

## 【化 1 4 3】



10

20

## 【 0 2 7 2】

正孔輸送層は第 1 正孔輸送層（陽極側）と第 2 正孔輸送層（陰極側）の 2 層構造にしてもよい。

## 【 0 2 7 3】

正孔輸送層の膜厚は特に限定されないが、10～200 nmであるのが好ましい。正孔輸送層が、第 1 正孔輸送層（陽極側）と第 2 正孔輸送層（陰極側）の 2 層構造である場合、第 1 正孔輸送層の膜厚は、好ましくは 50～150 nm、より好ましくは 50～110 nmであり、第 2 正孔輸送層の膜厚は、好ましくは 5～50 nm、より好ましくは 5～30 nmである。

30

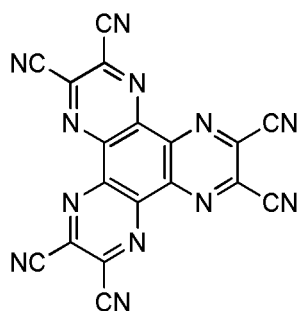
## 【 0 2 7 4】

正孔輸送層又は第 1 正孔輸送層の陽極側にアクセプター材料を含有する層を接合してもよい。これにより駆動電圧の低下及び製造コストの低減が期待される。

## 【 0 2 7 5】

前記アクセプター材料としては下記式で表される化合物が好ましい。

## 【化 1 4 4】



40

## 【 0 2 7 6】

アクセプター材料を含有する層の膜厚は特に限定されないが、5～20 nmであるのが好ましい。

50

## 【 0 2 7 7 】

## 発光層

発光機能を有する有機層であって、ドーピングシステムを採用する場合、ホスト材料とドーパント材料を含んでいる。このとき、ホスト材料は、主に電子と正孔の再結合を促し、励起子を発光層内に閉じ込める機能を有し、ドーパント材料は、再結合で得られた励起子を効率的に発光させる機能を有する。

燐光素子の場合、ホスト材料は主にドーパント材料で生成された励起子を発光層内に閉じ込める機能を有する。

前記ドーパント材料及び前記ホスト材料（第 1 化合物と第 2 化合物、又は、第 1 化合物と第 3 化合物）の合計量は発光層の全質量に対して 7 0 質量 % 以上、好ましくは 8 0 質量 % 以上、より好ましくは 9 0 質量 % 以上（いずれも 1 0 0 % を含む）である。

10

## 【 0 2 7 8 】

量子収率の高いドーパント材料を二種類以上用いることによって、それぞれのドーパント材料が発光するダブルドーパントシステムを採用してもよい。例えば、ホスト材料、赤色ドーパント材料及び緑色ドーパント材料を共蒸着して単一の発光層を形成することにより、黄色発光層を得ることが出来る。

## 【 0 2 7 9 】

発光層への正孔の注入し易さと電子の注入し易さは異なってもよく、また、発光層中での正孔移動度で表される正孔輸送能と電子移動度で表される電子輸送能が異なってもよい。

20

## 【 0 2 8 0 】

発光層は、例えば蒸着法、スピンコート法、LB 法などの公知の方法により形成することができる。また、樹脂などの結着剤と発光層材料の溶液をスピンコート法などにより薄膜化することによっても発光層を形成することができる。

## 【 0 2 8 1 】

発光層は、分子堆積膜であることが好ましい。分子堆積膜とは、気相状態の材料化合物から沈着され形成された薄膜や、溶液状態又は液相状態の材料化合物から固体化され形成された膜のことである。通常この分子堆積膜は、LB 法により形成された薄膜（分子累積膜）とは凝集構造、高次構造の相違や、それに起因する機能的な相違により区分することができる。

30

発光層の膜厚は、好ましくは 5 ~ 5 0 nm、より好ましくは 7 ~ 5 0 nm、さらに好ましくは 1 0 ~ 5 0 nm である。5 nm 以上であると発光層の形成が容易であり、5 0 nm 以下であると駆動電圧の上昇が避けられる。

## 【 0 2 8 2 】

## ドーパント材料

蛍光ドーパント材料（蛍光発光材料）は一重項励起状態から発光する化合物である。上記した式（D 1）及び（D 2）で表される化合物以外の蛍光ドーパント材料を使用してもよい。そのような蛍光ドーパント材料は、一重項励起状態から発光する限り特に限定されないが、フルオランテン誘導体、スチリルアリーレン誘導体、ピレン誘導体、アリールアセチレン誘導体、フルオレン誘導体、ハウ素錯体、ペリレン誘導体、オキサジアゾール誘導体、アントラセン誘導体、スチリルアミン誘導体、アリールアミン誘導体などが挙げられ、好ましくは、アントラセン誘導体、フルオランテン誘導体、スチリルアミン誘導体、アリールアミン誘導体、スチリルアリーレン誘導体、ピレン誘導体、ハウ素錯体、より好ましくはアントラセン誘導体、フルオランテン誘導体、スチリルアミン誘導体、アリールアミン誘導体、ハウ素錯体化合物などが挙げられる。

40

燐光発光層に使用される燐光ドーパント材料（燐光発光材料）は三重項励起状態から発光する化合物である。燐光ドーパント材料としては、イリジウム錯体、白金錯体、オスミウム錯体、レニウム錯体、ルテニウム錯体等の金属錯体が使用出来る。

## 【 0 2 8 3 】

## ホスト材料

50

本発明の一態様において、蛍光発光層は第 1 化合物をホスト材料（メインホスト材料）として、及び、該第 1 化合物よりも大きい正孔移動度を有する第 2 化合物をコホスト材料として含む。本発明の他の態様において、蛍光発光層は第 1 化合物をホスト材料（メインホスト材料）として、及び、該第 1 化合物よりも大きいアフィニティを有する第 3 化合物をコホスト材料として含む。

発光層に使用してもよいその他のホスト材料としては、例えば、アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体；オキサジアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素環化合物；カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体、フェナントレン誘導体、ピレン誘導体、クリセン誘導体等の縮合芳香族化合物；トリアリールアミン誘導体、縮合多環芳香族アミン誘導体等の芳香族アミン化合物が挙げられる。

10

#### 【0284】

##### 電子輸送層

発光層と陰極との間に形成される有機層であって、電子を陰極から発光層へ輸送する機能を有する。

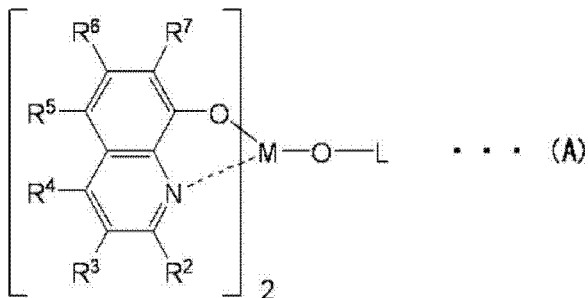
#### 【0285】

電子輸送層に用いる電子輸送性材料としては、分子内にヘテロ原子を 1 個以上含有する芳香族複素環化合物が好ましく、含窒素環誘導体が好ましい。また、含窒素環誘導体としては、含窒素 6 員環もしくは 5 員環骨格を有する芳香族複素環化合物、又は含窒素 6 員環もしくは 5 員環骨格を有する縮合芳香族複素環化合物が好ましい。

20

この含窒素環誘導体としては、例えば、下記式（A）で表される含窒素環金属キレート錯体が好ましい。

#### 【化145】



30

#### 【0286】

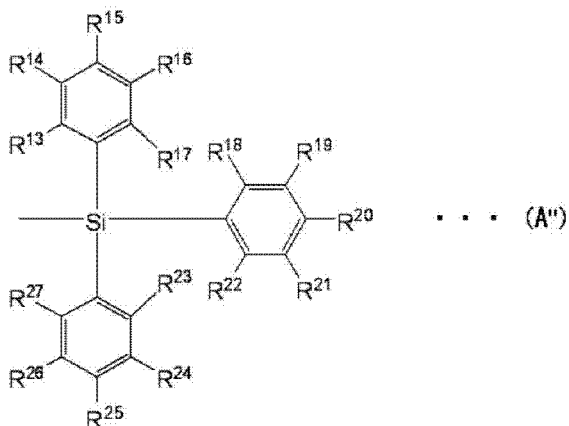
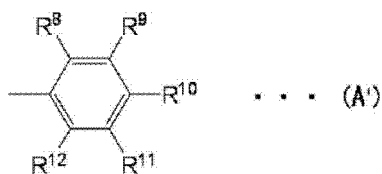
式（A）において、 $R^2 \sim R^7$  は、それぞれ独立に、水素原子、ハロゲン原子、ヒドロキシ基、アミノ基、炭素数 1 ～ 40、好ましくは 1 ～ 20、より好ましくは 1 ～ 10、さらに好ましくは 1 ～ 6 の炭化水素基、炭素数 1 ～ 40、好ましくは 1 ～ 20、より好ましくは 1 ～ 10、さらに好ましくは 1 ～ 6 のアルコキシ基、環形成炭素数 6 ～ 40、好ましくは 6 ～ 20、より好ましくは 6 ～ 12 のアリールオキシ基、炭素数 2 ～ 40、好ましくは 2 ～ 20、より好ましくは 2 ～ 10、さらに好ましくは 2 ～ 5 のアルコキシカルボニル基又は環形成原子数 9 ～ 40、好ましくは 9 ～ 30、より好ましくは 9 ～ 20 のヘテロアリール基であり、これらは置換されていてもよい。

40

M は、アルミニウム、ガリウム又はインジウムであり、In が好ましい。

L は、下記式（A'）又は（A''）で表される基である。

## 【化 1 4 6】



10

## 【 0 2 8 7】

式 (A') 中、 $R^8 \sim R^{12}$  は、それぞれ独立に、水素原子又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 40、好ましくは 1 ~ 20、より好ましくは 1 ~ 10、さらに好ましくは 1 ~ 6 の炭化水素基であり、互いに隣接する基が環構造を形成していてもよい。

20

式 (A'') 中、 $R^{13} \sim R^{27}$  は、それぞれ独立に、水素原子又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 40、好ましくは 1 ~ 20、より好ましくは 1 ~ 10、さらに好ましくは 1 ~ 6 の炭化水素基であり、互いに隣接する基が環構造を形成していてもよい。

$R^8 \sim R^{12}$  及び  $R^{13} \sim R^{27}$  の互いに隣接する基が環構造を形成した場合の 2 価の基としては、テトラメチレン基、ペンタメチレン基、ヘキサメチレン基、ジフェニルメタン - 2, 2' - ジイル基、ジフェニルエタン - 3, 3' - ジイル基、ジフェニルプロパン - 4, 4' - ジイル基等が挙げられる。

## 【 0 2 8 8】

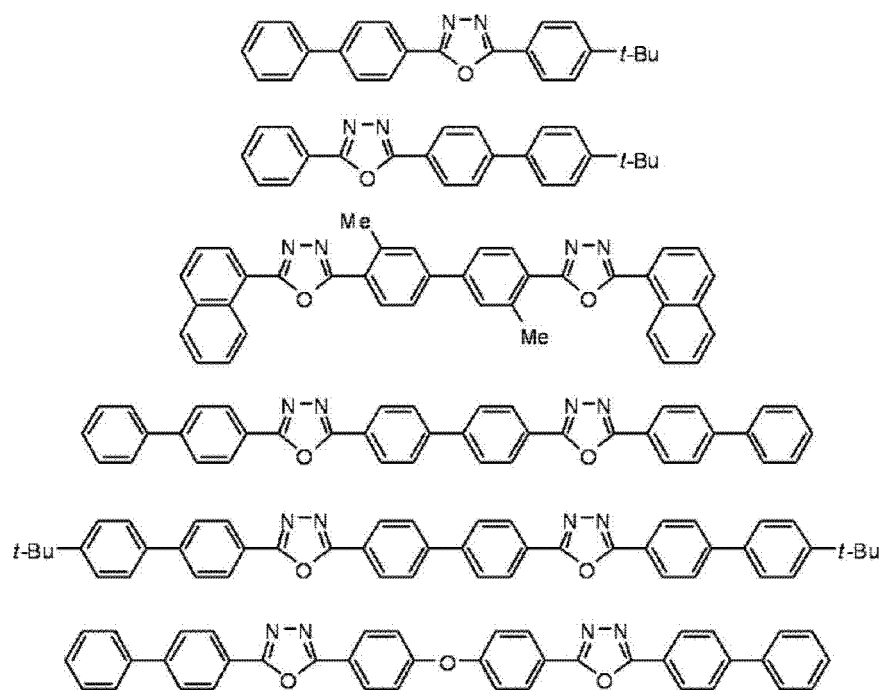
8 - ヒドロキシキノリン又はその誘導体の金属錯体、オキサジアゾール誘導体、含窒素複素環誘導体も電子輸送層に用いられる電子輸送性材料として好ましい。

30

## 【 0 2 8 9】

これらの電子輸送性材料は、薄膜形成性の良好なものが好ましく用いられる。電子輸送性材料の具体例としては、下記のことを挙げることができる。

## 【化 1 4 7】



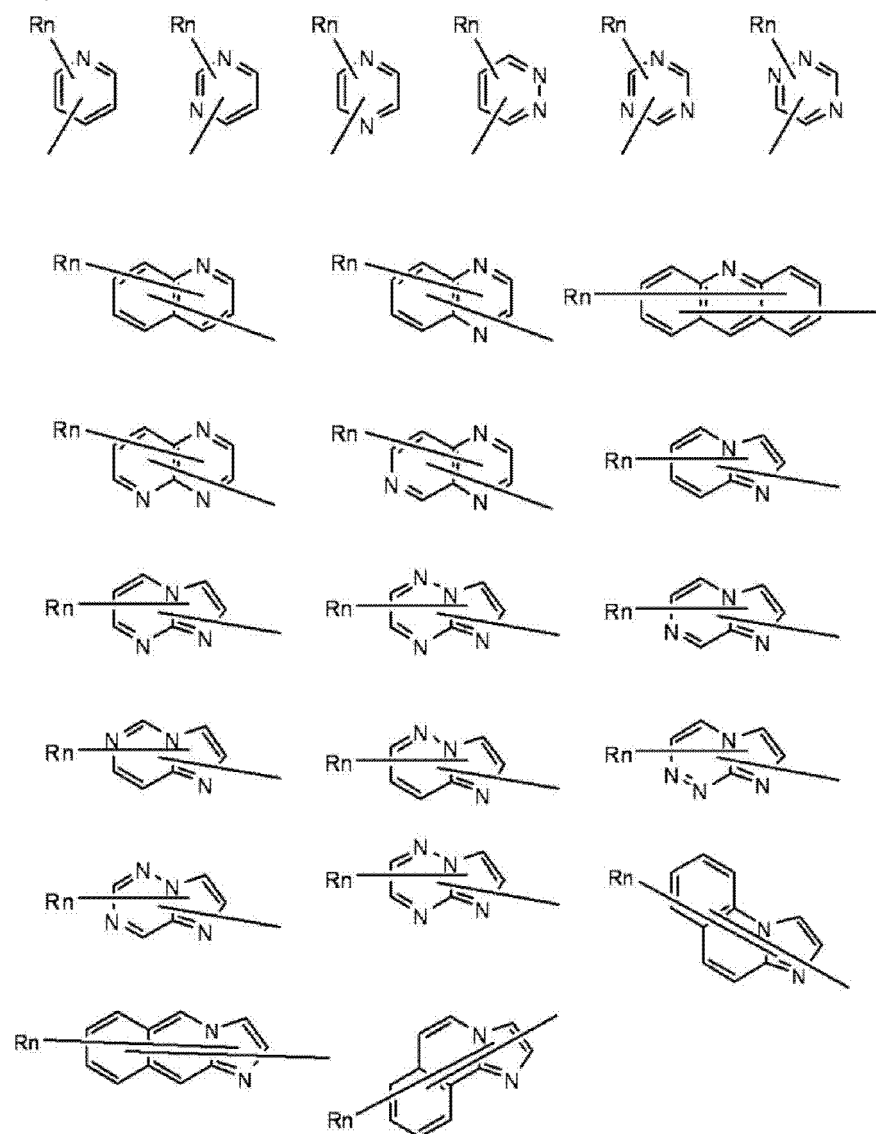
10

## 【 0 2 9 0】

以下の式で表される含窒素複素環基を有する化合物も電子輸送層に用いられる電子輸送性材料として好ましい。

20

## 【化 1 4 8】



10

20

30

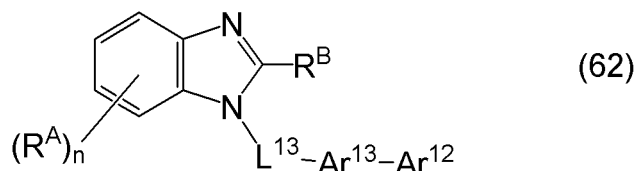
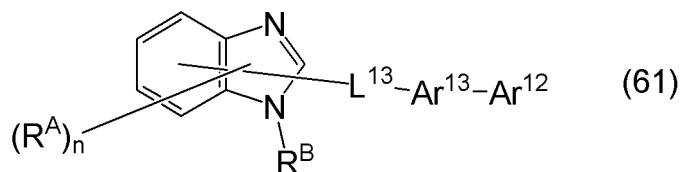
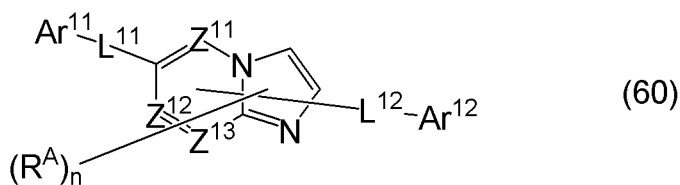
(上記式中、各 R は、環形成炭素数 6 ~ 40 の非縮合アリール基、環形成炭素数 10 ~ 40 の縮合アリール基、環形成炭素数 3 ~ 40 の非縮合ヘテロアリール基、環形成炭素数 3 ~ 40 の縮合ヘテロアリール基、炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、又は炭素数 1 ~ 20 のアルコキシ基であり、n は 0 ~ 5 の整数であり、n が 2 以上の整数であるとき、複数の R は互いに同一又は異なっている。) )

## 【0291】

電子輸送層は、下記式 (60) ~ (62) で表される含窒素複素環誘導体を少なくとも 1 種含むことが特に好ましい。

40

## 【化 1 4 9】



## 【 0 2 9 2】

式(60)～(62)において、 $Z^{11}$ 、 $Z^{12}$ 及び $Z^{13}$ は、それぞれ独立に、窒素原子又は炭素原子である。

$R^A$ 及び $R^B$ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50、好ましくは6～30、より好ましくは6～20、さらに好ましくは6～12のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～50、好ましくは5～30、より好ましくは5～20、さらに好ましくは5～12のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数1～20、好ましくは1～10、より好ましくは1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～20、好ましくは1～10、より好ましくは1～6のハロアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数1～20、好ましくは1～10、より好ましくは1～6のアルコキシ基である。

$n$ は、0～5の整数であり、 $n$ が2以上の整数であるとき、複数の $R^A$ は互いに同一でも異なってもよい。また、隣接する2つの $R^A$ 同士が互いに結合して、置換もしくは無置換の炭化水素環を形成していてもよい。

$Ar^{11}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50、好ましくは6～30、より好ましくは6～20、さらに好ましくは6～12のアリール基又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50、好ましくは5～30、より好ましくは5～20、さらに好ましくは5～12)のヘテロアリール基である。

$Ar^{12}$ は、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～20、好ましくは1～10、より好ましくは1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～20、好ましくは1～10、より好ましくは1～6のハロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～20、好ましくは1～10、より好ましくは1～6のアルコキシ基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50、好ましくは6～30、より好ましくは6～20、さらに好ましくは6～12のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50、好ましくは5～30、より好ましくは5～20、さらに好ましくは5～12のヘテロアリール基である。

但し、 $Ar^{11}$ 、 $Ar^{12}$ のいずれか一方は、置換もしくは無置換の環形成炭素数10～50、好ましくは10～30、より好ましくは10～20、さらに好ましくは10～14の縮合アリール基又は置換もしくは無置換の環形成原子数9～50、好ましくは9～30、より好ましくは9～20、さらに好ましくは9～14の縮合ヘテロアリール基である。

$Ar^{13}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50、好ましくは6～30、より好ましくは6～20、さらに好ましくは6～12のアリーレン基又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50、好ましくは5～30、より好ましくは5～20、さらに好ましく

10

20

30

40

50

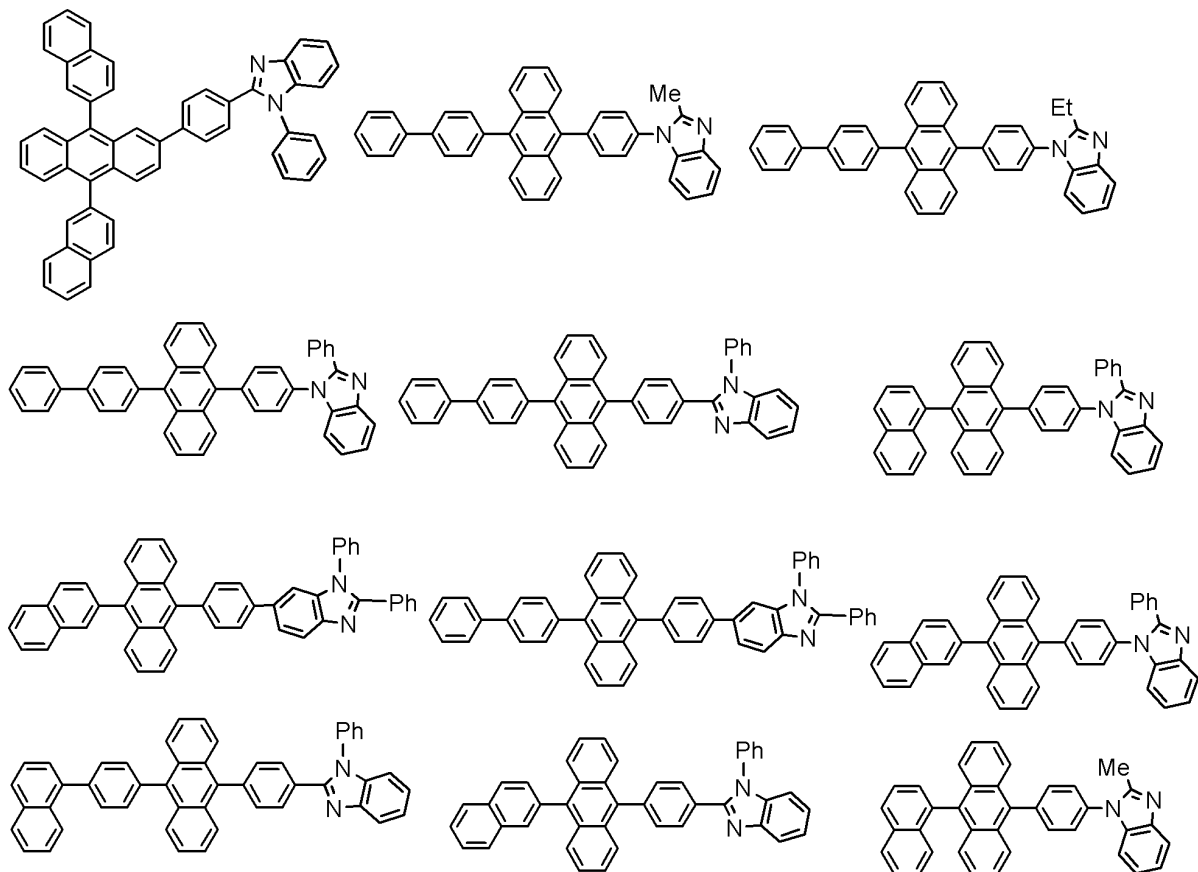
くは 5 ~ 12 のヘテロアリーレン基である。

L<sup>11</sup>、L<sup>12</sup> 及び L<sup>13</sup> は、それぞれ独立に、単結合、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 50、好ましくは 6 ~ 30、より好ましくは 6 ~ 20、さらに好ましくは 6 ~ 12 のアリーレン基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 9 ~ 50、好ましくは 9 ~ 30、より好ましくは 9 ~ 20、さらに好ましくは 9 ~ 14 ) の縮合ヘテロアリーレン基である。

【0293】

上記式 (60) ~ (62) で表される含窒素複素環誘導体の具体例としては、以下に示すものが挙げられる。

【化150】



【0294】

本発明の有機 EL 素子の電子輸送層は第 1 電子輸送層 (陽極側) と第 2 電子輸送層 (陰極側) の 2 層構造にしてもよい。

電子輸送層の膜厚は、特に限定されないが、好ましくは 1 nm ~ 100 nm である。有機 EL 素子の電子輸送層は第 1 電子輸送層 (陽極側) と第 2 電子輸送層 (陰極側) の 2 層構造である場合、第 1 電子輸送層の膜厚は、好ましくは 5 ~ 60 nm、より好ましくは 10 ~ 40 nm であり、第 2 電子輸送層の膜厚は、好ましくは 1 ~ 20 nm、より好ましくは 1 ~ 10 nm である。

【0295】

電子注入層は、陰極から電子を効率的に有機層ユニットに注入する機能を有する。

電子注入層を形成する材料は前記含窒素複素環誘導体から選ぶことができる。また、絶縁体又は半導体などの無機化合物を使用することが好ましい。電子注入層が絶縁体又は半導体を含んでいると、電流のリークを有効に防止して、電子注入性を向上させることができる。

【0296】

このような絶縁体としては、アルカリ金属カルコゲニド、アルカリ土類金属カルコゲニド、アルカリ金属のハロゲン化物、及びアルカリ土類金属のハロゲン化物からなる群から

10

20

30

40

50

選択される少なくとも一つの金属化合物を使用するのが好ましい。電子注入層がこれらのアルカリ金属カルコゲニドなどを含んでいると、電子注入性をさらに向上させることができる。好ましいアルカリ金属カルコゲニドとしては、例えば、 $\text{Li}_2\text{O}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$ 、 $\text{Na}_2\text{S}$ 、 $\text{Na}_2\text{Se}$  及び  $\text{Na}_2\text{O}$  が挙げられ、好ましいアルカリ土類金属カルコゲニドとしては、例えば、 $\text{CaO}$ 、 $\text{BaO}$ 、 $\text{SrO}$ 、 $\text{BeO}$ 、 $\text{BaS}$  及び  $\text{CaSe}$  が挙げられる。また、好ましいアルカリ金属のハロゲン化物としては、例えば、 $\text{LiF}$ 、 $\text{NaF}$ 、 $\text{KF}$ 、 $\text{LiCl}$ 、 $\text{KCl}$  及び  $\text{NaCl}$  などが挙げられる。また、好ましいアルカリ土類金属のハロゲン化物としては、例えば、 $\text{CaF}_2$ 、 $\text{BaF}_2$ 、 $\text{SrF}_2$ 、 $\text{MgF}_2$  及び  $\text{BeF}_2$  などのフッ化物や、フッ化物以外のハロゲン化物が挙げられる。

【0297】

10

半導体としては、 $\text{Ba}$ 、 $\text{Ca}$ 、 $\text{Sr}$ 、 $\text{Yb}$ 、 $\text{Al}$ 、 $\text{Ga}$ 、 $\text{In}$ 、 $\text{Li}$ 、 $\text{Na}$ 、 $\text{Cd}$ 、 $\text{Mg}$ 、 $\text{Si}$ 、 $\text{Ta}$ 、 $\text{Sb}$  及び  $\text{Zn}$  の少なくとも一つの元素を含む酸化物、窒化物又は酸化窒化物などの一種又は二種以上の組み合わせが挙げられる。また、電子注入層に含まれる無機化合物を含む電子注入層は微結晶又は非晶質の絶縁性薄膜であることが好ましい。このような絶縁性薄膜は均質な薄膜であるので、ダークスポットなどの画素欠陥を減少させることができる。

【0298】

上記絶縁体又は半導体を使用する場合、電子注入層の好ましい厚みは  $0.1 \sim 15 \text{ nm}$  である。また、本電子注入層は、後述する電子供与性ドーパント材料を含有していてもよい。

20

【0299】

電子注入層の電子移動度は、電界強度  $0.04 \sim 0.5 \text{ MV/cm}$  において、 $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$  以上であることが好ましい。これにより陰極からの電子輸送層への電子注入が促進され、ひいては隣接する阻止層、発光層への電子注入も促進され、より低電圧での駆動が可能になる。

【0300】

電子供与性ドーパント材料

本発明の有機EL素子は、陰極と発光ユニットとの界面領域に電子供与性ドーパント材料を有することが好ましい。このような構成によれば、有機EL素子における発光輝度の向上や長寿命化が図られる。電子供与性ドーパント材料とは、仕事関数  $3.8 \text{ eV}$  以下の金属及びこれを含む化合物をいい、例えば、アルカリ金属、アルカリ金属錯体、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属、アルカリ土類金属錯体、アルカリ土類金属化合物、希土類金属、希土類金属錯体、及び希土類金属化合物などから選ばれた少なくとも一種が挙げられる。

30

【0301】

アルカリ金属としては、 $\text{Na}$  (仕事関数:  $2.36 \text{ eV}$ )、 $\text{K}$  (仕事関数:  $2.28 \text{ eV}$ )、 $\text{Rb}$  (仕事関数:  $2.16 \text{ eV}$ )、 $\text{Cs}$  (仕事関数:  $1.95 \text{ eV}$ ) などが挙げられ、仕事関数が  $2.9 \text{ eV}$  以下のものが特に好ましい。アルカリ土類金属としては、 $\text{Ca}$  (仕事関数:  $2.9 \text{ eV}$ )、 $\text{Sr}$  (仕事関数:  $2.0 \text{ eV} \sim 2.5 \text{ eV}$ )、 $\text{Ba}$  (仕事関数:  $2.52 \text{ eV}$ ) などが挙げられ、仕事関数が  $2.9 \text{ eV}$  以下のものが特に好ましい。希土類金属としては、 $\text{Sc}$ 、 $\text{Y}$ 、 $\text{Ce}$ 、 $\text{Tb}$ 、 $\text{Yb}$  などが挙げられ、仕事関数が  $2.9 \text{ eV}$  以下のものが特に好ましい。

40

【0302】

アルカリ金属化合物としては、 $\text{Li}_2\text{O}$ 、 $\text{Cs}_2\text{O}$ 、 $\text{K}_2\text{O}$  などのアルカリ酸化物、 $\text{LiF}$ 、 $\text{NaF}$ 、 $\text{CsF}$ 、 $\text{KF}$  などのアルカリハロゲン化物などが挙げられ、 $\text{LiF}$ 、 $\text{Li}_2\text{O}$ 、 $\text{NaF}$  が好ましい。アルカリ土類金属化合物としては、 $\text{BaO}$ 、 $\text{SrO}$ 、 $\text{CaO}$  及びこれらを混合した  $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$  ( $0 < x < 1$ )、 $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$  ( $0 < x < 1$ ) などが挙げられ、 $\text{BaO}$ 、 $\text{SrO}$ 、 $\text{CaO}$  が好ましい。希土類金属化合物としては、 $\text{YbF}_3$ 、 $\text{ScF}_3$ 、 $\text{ScO}_3$ 、 $\text{Y}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Ce}_2\text{O}_3$ 、 $\text{GdF}_3$ 、 $\text{TbF}_3$  などが挙げられ、 $\text{YbF}_3$ 、 $\text{ScF}_3$ 、 $\text{TbF}_3$  が好ましい。

50

## 【0303】

アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体、希土類金属錯体としては、それぞれ金属イオンとしてアルカリ金属イオン、アルカリ土類金属イオン、希土類金属イオンの少なくとも一つ含有するものであれば特に限定はない。また、配位子にはキノリノール、ベンゾキノリノール、アクリジノール、フェナントリジノール、ヒドロキシフェニルオキサゾール、ヒドロキシフェニルチアゾール、ヒドロキシジアリールオキサジアゾール、ヒドロキシジアリールチアジアゾール、ヒドロキシフェニルピリジン、ヒドロキシフェニルベンゾイミダゾール、ヒドロキシベンゾトリアゾール、ヒドロキシフルボラン、ビピリジル、フェナントロリン、フタロシアニン、ポルフィリン、シクロペンタジエン、 $\beta$ -ジケトン類、アゾメチン類、及びそれらの誘導体などが挙げられる。

10

## 【0304】

電子供与性ドーパント材料は界面領域に層状又は島状に形成すると好ましい。形成方法としては、抵抗加熱蒸着法により電子供与性ドーパント材料を蒸着しながら、界面領域を形成する有機化合物（発光材料や電子注入材料）を同時に蒸着させ、有機化合物に電子供与性ドーパント材料を分散する方法が好ましい。分散濃度はモル比で有機化合物：電子供与性ドーパント材料 = 100 : 1 ~ 1 : 100 である。

## 【0305】

電子供与性ドーパント材料を層状に形成する場合は、界面の有機層である発光材料や電子注入材料を層状に形成した後に、還元ドーパント材料を単独で抵抗加熱蒸着法により蒸着し、好ましくは層の厚み 0.1 nm ~ 15 nm で形成する。電子供与性ドーパント材料を島状に形成する場合は、界面の有機層である発光材料や電子注入材料を島状に形成した後に、電子供与性ドーパント材料を単独で抵抗加熱蒸着法により蒸着し、島の厚み 0.05 nm ~ 1 nm で形成する。

20

本発明の有機 EL 素子における、主成分と電子供与性ドーパント材料の割合は、モル比で主成分：電子供与性ドーパント材料 = 5 : 1 ~ 1 : 5 であると好ましい。

## 【0306】

## n / p ドーピング

特許第 3695714 号明細書に記載されているように、ドナー性材料のドーピング (n) やアクセプター性材料のドーピング (p) により正孔輸送層や電子輸送層のキャリア注入能を調整することができる。

30

n ドーピングの代表例としては、電子輸送材料に Li や Cs などの金属をドーピングする方法が挙げられ、p ドーピングの代表例としては、正孔輸送材料に F<sub>4</sub>TCNQ などのアクセプター材料をドーピングする方法が挙げられる。

## 【0307】

## スペース層

スペース層とは、例えば、蛍光発光層と燐光発光層とを積層する場合に、燐光発光層で生成する励起子を蛍光発光層に拡散させないため、あるいは、キャリアバランスを調整するために、蛍光発光層と燐光発光層との間に設けられる層である。また、スペース層は、複数の燐光発光層の間に設けることもできる。

スペース層は発光層間に設けられるため、電子輸送性と正孔輸送性を兼ね備える材料で形成することが好ましい。また、隣接する燐光発光層内の三重項エネルギーの拡散を防ぐため、スペース層の三重項エネルギーが 2.6 eV 以上であることが好ましい。スペース層に用いられる材料としては、上述の正孔輸送層に用いられるものと同様のものが挙げられる。

40

## 【0308】

## 阻止層

電子阻止層、正孔阻止層、トリプレット阻止層といった阻止層を発光層に隣接して設けることが好ましい。電子阻止層とは、発光層から正孔輸送層へ電子が漏れることを防ぐ層であり、発光層と正孔輸送層との間に設けられる層である。正孔阻止層とは、発光層から電子輸送層へ正孔が漏れることを防ぐ層であり、発光層と電子輸送層との間に設けられる

50

層である。トリプレット阻止層は、発光層で生成する三重項励起子が、周辺の層へ拡散することを防止する層である。三重項励起子を発光層内に閉じ込めることによって、ドーパント材料以外の電子輸送層の分子上で三重項励起子のエネルギーが失活することを抑制する。

【0309】

電子機器

本発明の有機EL素子は優れた性能を有するため、有機ELパネルモジュールなどの表示部品；テレビ、携帯電話、パーソナルコンピュータなどの表示装置；照明、車両用灯具の発光装置、などの電子機器に使用できる。

【実施例】

10

【0310】

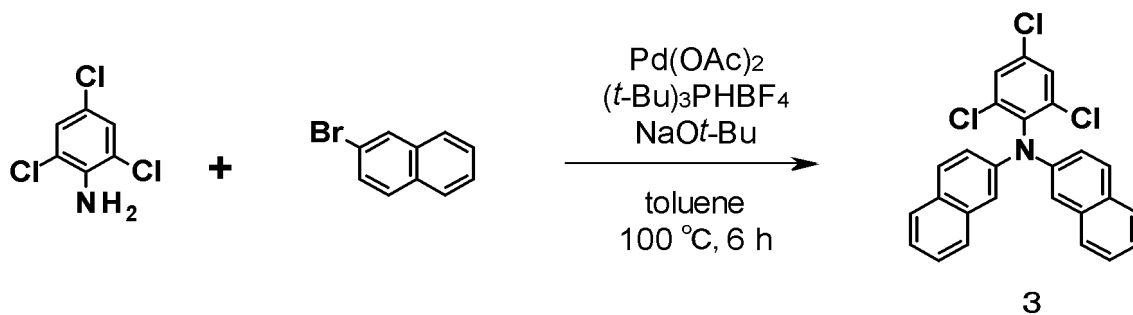
以下、本発明を実施例により具体的に説明するが、本発明はこれらにより何ら限定されるものではない。

【0311】

合成実施例1（化合物BD-1の合成）

（1）中間体3の合成

【化151】



20

【0312】

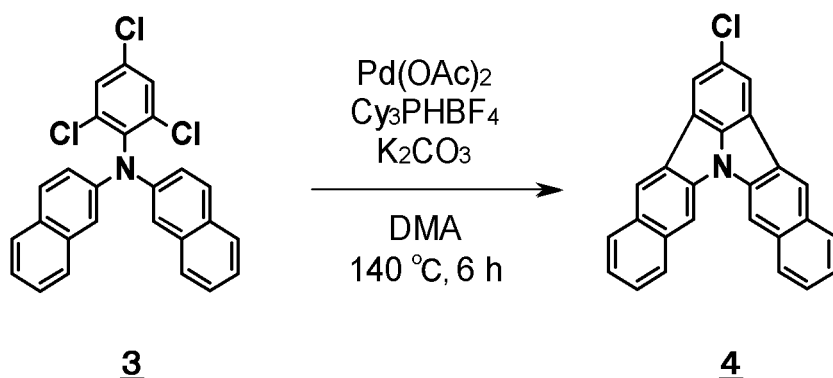
アルゴン雰囲気下、2,4,6-トリクロロアニリン1.0g(5.09mmol)、2-プロモナフタレン2.21g(10.7mmol)、酢酸パラジウム22mg(0.102mmol)、トリ-t-ブチルホスフィンテトラフルオロボレート59mg(0.204mmol)、ナトリウムt-ブトキシド1.38g(15.3mmol)をトルエン15mLに溶かし、100 で6時間攪拌した。反応終了後、水を加え、ジクロロメタンで抽出した。有機層を集め、濃縮後得られた固体をカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、白色固体1.5gを得た。得られた固体は目的物である中間体3であり、マスペクトル分析の結果、分子量448.77に対し、 $m/e = 448$ であった。（収率66%）

30

【0313】

（2）中間体4の合成

【化152】



40

【0314】

50

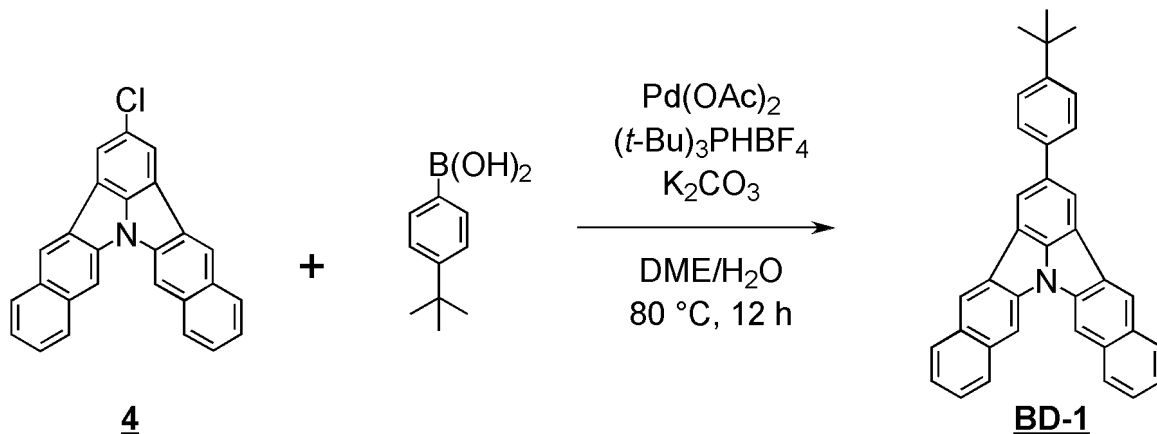
アルゴン雰囲気下、中間体 3 100 mg (0.223 mmol)、酢酸パラジウム 2.5 mg (0.0111 mmol)、トリシクロヘキシルホスフィンテトラフルオロボレート 6.4 mg (0.0222 mmol)、炭酸カリウム 92 mg (0.669 mmol) をジメチルアセトアミド 3 mL に溶かし、140 で 6 時間加熱した。反応終了後、水を加え、ジクロロメタンで抽出した。有機層を集め、濃縮後得られた固体をフラッシュカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、黄色固体 26 mg を得た。得られた固体は目的物である中間体 4 であり、マススペクトル分析の結果、分子量 375.85 に対し、375 であった。(収率 30%)

【0315】

(3) 化合物 BD-1 の合成

【化153】

10



20

【0316】

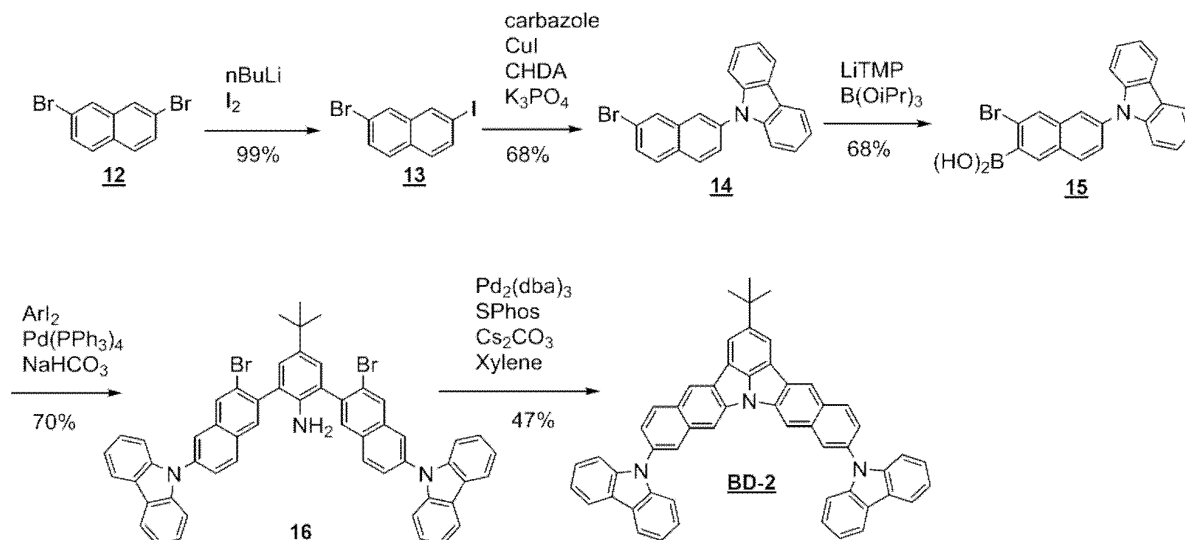
アルゴン雰囲気下、中間体 4 20 mg (0.0532 mmol)、4-tert-ブチルフェニルボロン酸 9.3 mg (0.0639 mmol)、酢酸パラジウム 1.2 mg (0.00532 mmol)、トリ t-ブチルホスフィンテトラフルオロボレート 3.1 mg (0.0106 mmol)、炭酸カリウム 14.7 mg (0.106 mmol) にジメトキシエタン 2 mL と水 0.5 mL を加え、80 で 12 時間攪拌した。反応終了後、水を加え、ジクロロメタンで抽出した。有機層を集め、濃縮後得られた固体をカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、黄色固体 16 mg を得た。得られた固体は目的物である化合物 BD-1 であり、マススペクトル分析の結果、分子量 473.61 に対し、m/e = 473 であった。(収率 64%)

【0317】

合成実施例 2 (化合物 BD-2 の合成)

30

## 【化 1 5 4】



10

## 【 0 3 1 8】

## ( 1 ) 中間体 1 3 の合成

アルゴン雰囲気下、2, 7 - ジブromonaフタレン 5 . 0 g ( 1 7 m m o l ) を、無水テ  
トラヒドロフラン 8 0 m L と無水トルエン 4 0 m L の混合溶媒に溶かし、ドライアイス /  
アセトン浴で - 4 8 に冷却した。これに、n - ブチルリチウム / ヘキサン溶液 1 0 . 6  
m L ( 1 . 6 4 m o l / L、1 7 m m o l ) を加え、- 4 5 で 2 0 分間、次いで - 7 2  
で 3 0 分間撹拌した。反応混合物にヨウ素 4 . 9 g ( 1 9 m m o l ) のテトラヒドロフ  
ラン溶液を加え、- 7 2 で 1 時間、次いで室温で 2 . 5 時間撹拌した。反応混合物を 1  
0 質量 % 亜硫酸ナトリウム水溶液 6 0 m L で失活させ、トルエン 1 5 0 m L で抽出した。  
有機層を飽和食塩水 3 0 m L で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥後、溶媒留去して減圧乾  
燥し、淡黄色固体 5 . 6 6 g を得た。得られた固体は目的物である中間体 1 3 であり、マ  
ススペクトル分析の結果、分子量 3 3 9 に対し、m / e = 3 3 9 であった。(収率 9 9 % )

20

## 【 0 3 1 9】

## ( 2 ) 中間体 1 4 の合成

アルゴン雰囲気下、9 H - カルバゾール 2 . 5 5 g ( 1 5 m m o l )、2 - ブロモ - 7  
- ヨードナフタレン 5 . 7 g ( 1 7 m m o l )、ヨウ化銅 3 0 m g ( 0 . 1 6 m m o l )  
、及びリン酸三カリウム 7 . 5 g ( 3 5 m m o l ) を無水 1 , 4 - ジオキサン 2 0 m L に  
懸濁し、trans - 1 , 2 - ジアミノシクロヘキサン 0 . 1 9 m L ( 1 . 6 m m o l )  
を加え、1 0 時間還流した。反応終了後、トルエン 2 0 0 m L を加え、無機物をろ別した  
。ろ液を濃縮して得られた褐色固体 6 . 5 g をカラムクロマトグラフィーを用いて精製し  
、白色針状晶 3 . 8 g を得た。得られた固体は目的物である中間体 1 4 であり、マススペ  
クトル分析の結果、分子量 3 3 2 に対し、m / e = 3 3 2 であった。(収率 6 8 % )

30

## 【 0 3 2 0】

## ( 3 ) 中間体 1 5 の合成

アルゴン雰囲気下、2 , 2 , 6 , 6 - テトラメチルピペリジン 2 . 9 g ( 2 0 . 6 m m  
o l ) を無水テトラヒドロフラン 3 0 m L に溶かし、ドライアイス / アセトン浴で - 4 3  
に冷却した。これに、n - ブチルリチウム / ヘキサン溶液 1 2 . 5 m L ( 1 . 6 4 m o  
l / L、2 0 . 5 m m o l ) を加え、- 3 6 で 2 0 分撹拌後、- 7 0 に冷却した。こ  
れにトリイソプロポキシボラン 7 m L ( 3 0 m m o l ) を滴下し、次いで中間体 1 4 3  
. 8 g ( 1 0 . 2 m m o l ) を溶かしたテトラヒドロフラン溶液 2 0 m L を加え、冷却浴  
中で 1 0 時間撹拌した。反応終了後、5 質量 % 塩酸 1 0 0 m L を加え、室温で 3 0 分間撹  
拌後、酢酸エチル 1 5 0 m L で抽出した。有機層を飽和食塩水 3 0 m L で洗浄し、硫酸マ  
グネシウムで乾燥後、溶媒留去し、黄色アモルファス固体 4 . 9 g を得た。これをカラム

40

50

クロマトグラフィーを用いて精製し、黄色固体 2.9 g を得た。得られた固体は目的物である中間体 15 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 415 に対し、 $m/e = 415$  であった。(収率 68%)

【0321】

(4) 中間体 16 の合成

アルゴン雰囲気下、2,6-ジヨード-4-tert-ブチルアニリン 1.27 g (3.2 mmol)、中間体 15 2.9 g (7.0 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 0.36 g (0.31 mmol)、及び炭酸水素ナトリウム 2.1 g (25 mmol) を、1,2-ジメトキシエタン 40 mL に懸濁し、水 21 mL を加えて 11 時間還流した。反応終了後、ジクロロメタン 200 mL で抽出し、有機層を硫酸マグネシウムで乾燥後、溶媒留去し、黄色アモルファス固体 3.5 g を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、白色固体 2.0 g を得た。得られた固体は目的物である中間体 16 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 887 に対し、 $m/e = 887$  であった。(収率 70%)

【0322】

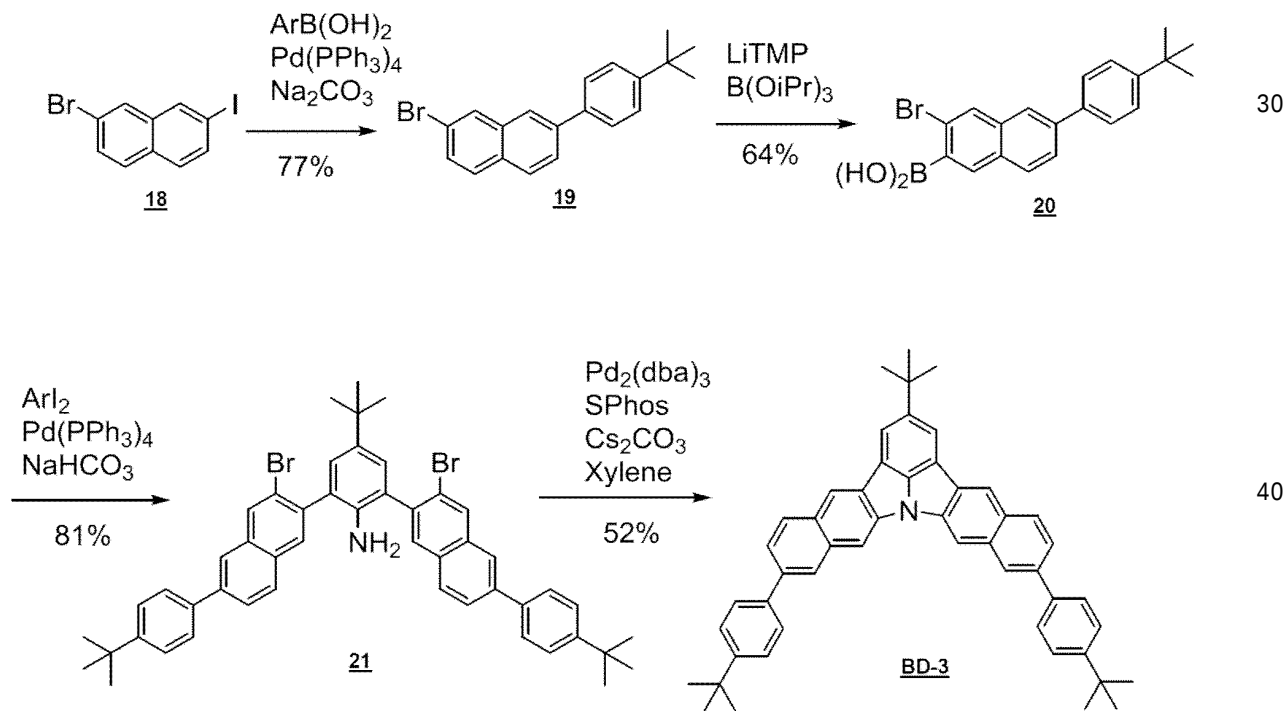
(5) 化合物 BD-2 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 16 1.0 g (1.1 mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0) 41 mg (45 μmol)、SPhos 5 mg (0.18 mmol)、炭酸セシウム 2.2 g (6.7 mmol) を無水キシレン 100 mL に懸濁し、10 時間還流した。反応終了後、ろ別し、ろ物を水及びメタノールで洗浄して減圧乾燥し、淡緑色固体 0.427 g を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、黄色固体 0.37 g を得た。得られた固体は目的物である化合物 BD-2 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 727 に対し、 $m/e = 727$  であった。(収率 47%)

【0323】

合成実施例 3 (化合物 BD-3 の合成)

【化155】



【0324】

(1) 中間体 19 の合成

アルゴン雰囲気下、4-tert-ブチルフェニルボロン酸 3.0 g (17 mmol)、2-ブロモ-7-ヨードナフタレン 5.66 g (17 mmol)、及びテトラキス(ト

リフェニルホスフィン)パラジウム 0.35 g (0.30 mmol) を 1, 2 - ジメトキシエタン 45 mL に溶かし、2 M 炭酸ナトリウム水溶液 23 mL (45 mmol) を加え、11 時間還流した。反応終了後、トルエン 150 mL で抽出した。有機層を飽和食塩水 30 mL で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥後、溶媒留去し、褐色固体 (9.2 g) を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、白色固体 4.45 g を得た。得られた固体は目的物である中間体 19 であり、マススペクトル分析の結果、分子量 338 に対し、 $m/e = 338$  であった。(収率 77%)

#### 【0325】

##### (2) 中間体 20 の合成

アルゴン雰囲気下、2, 2, 6, 6 - テトラメチルピペリジン 2.8 g (20 mmol) を無水テトラヒドロフラン 30 mL に溶かし、ドライアイス/アセトン浴で -40 に冷却した。これに *n* - ブチルリチウム/ヘキサン溶液 12 mL (1.64 mol/L、20 mmol) を加え、-54 で 20 分撹拌した。反応終了後、-65 に冷却し、トリイソプロポキシボラン 6 mL (26 mmol) を滴下し、次いで中間体 19 4.45 g (13 mmol) を溶かしたテトラヒドロフラン溶液 20 mL を加え、冷却浴中で 10 時間撹拌した。反応終了後、5 質量% 塩酸 70 mL を加え、室温で 30 分間撹拌後、酢酸エチル 200 mL で抽出した。有機層を飽和食塩水 30 mL で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥後、溶媒留去し、黄色アモルファス固体 5.5 g を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、白色固体 3.19 g を得た。得られた固体は目的物である中間体 20 であり、マススペクトル分析の結果、分子量 382 に対し、 $m/e = 382$  であった。(収率 64%)

#### 【0326】

##### (3) 中間体 21 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 20 3.19 g (8.3 mmol)、2, 6 - ジョード - 4 - tert - ブチルアニリン 1.5 g (3.7 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム 0.43 g (0.37 mmol)、炭酸水素ナトリウム 2.5 g (30 mmol) を 1, 2 - ジメトキシエタン 50 mL に懸濁し、水 25 mL を加えて 11 時間還流した。反応混合物をジクロロメタン 200 mL で抽出した。有機層を硫酸マグネシウムで乾燥後、溶媒留去し、黄色アモルファス固体 4.14 g を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、白色固体 2.47 g を得た。得られた固体は目的物である中間体 21 であり、マススペクトル分析の結果、分子量 821 に対し、 $m/e = 821$  であった。(収率 81%)

#### 【0327】

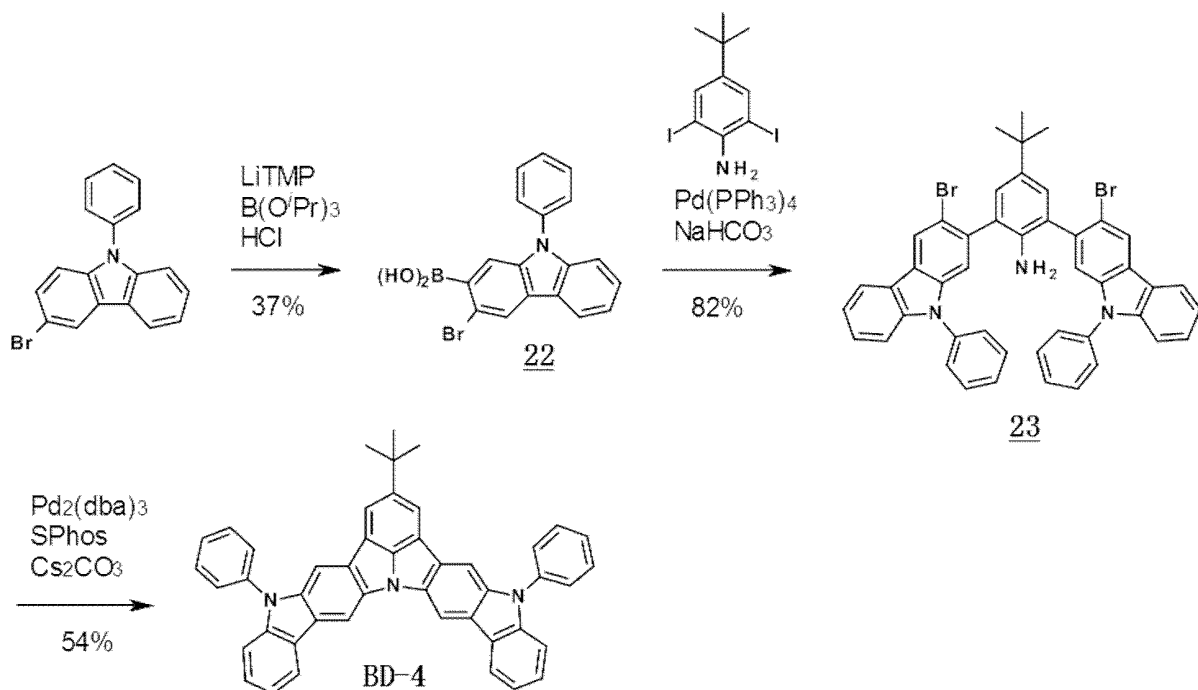
##### (4) 化合物 BD - 3 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 21 2.47 g (3.0 mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0) 0.11 g (0.12 mmol)、SPhos 0.20 g (0.49 mmol)、炭酸セシウム 5.9 g (18 mmol) を無水キシレン 250 mL に懸濁し、11 時間還流した。反応終了後、ろ別し、ろ物を水及びメタノールで順に洗浄して減圧乾燥し、淡黄色針状晶 1.88 g を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、黄色固体 1.03 g を得た。得られた固体は目的物である化合物 BD - 3 であり、マススペクトル分析の結果、分子量 661 に対し、 $m/e = 661$  であった。(収率 52%)

#### 【0328】

合成実施例 4 (化合物 BD - 4 の合成)

## 【化 1 5 6】



10

## 【 0 3 2 9】

20

## ( 1 ) 中間体 2 2 の合成

アルゴン雰囲気下、2, 2, 6, 6 - テトラメチルピペリジン ( 8 . 8 0 g、6 2 . 4 mmol、2 eq ) を無水テトラヒドロフラン ( THF ) ( 9 0 mL ) に溶かし、ドライアイス / アセトン浴で - 5 0 に冷却した。これに *n* - ブチルリチウム / ヘキサン溶液 ( 1 . 5 5 mol / L、4 0 . 3 mL、6 2 . 5 mmol、1 eq ) を加えて - 5 0 で 3 0 分攪拌後、- 7 0 に冷却した。反応混合物にトリイソプロポキシボラン ( 2 0 . 0 mL、8 6 . 7 mmol、2 . 8 eq ) を滴下し、5 分後、3 - ブロモ - 9 - フェニルカルバゾール / THF 溶液 ( 1 0 . 1 g、3 1 . 4 mmol / 4 5 mL ) を加えて冷却浴中で 1 0 時間攪拌した。反応混合物に 1 0 % HCl ( 1 3 0 mL ) を加え、室温で 3 0 分攪拌した後、酢酸エチル ( 2 0 0 mL ) で抽出した。有機層を飽和食塩水 ( 3 0 mL ) で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去し、次いで、減圧乾燥して黄色アモルファス固体 ( 1 0 . 6 g ) を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、淡黄色固体 ( 4 . 2 0 g、収率 3 7 % ) を得た。得られた固体は目的物である中間体 2 2 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 3 6 6 . 0 2 に対し、 $m/e = 3 6 6$  であった。

30

## 【 0 3 3 0】

## ( 2 ) 中間体 2 3 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 2 2 ( 4 . 2 0 g、1 1 . 5 mmol、2 . 3 eq )、4 - ( *tert* - ブチル ) - 2, 6 - ジョードアニリン ( 2 . 0 0 g、4 . 9 9 mmol )、 $\text{Pd(PPh}_3)_4$  ( 0 . 5 8 g、0 . 5 0 mmol、5 % Pd )、及び炭酸水素ナトリウム ( 3 . 5 g、3 . 6 eq ) を 1, 2 - ジメトキシエタン ( 7 0 mL ) に懸濁し、更に水 ( 3 5 mL ) を加えて 1 1 時間還流した。反応混合物をジクロロメタン ( 2 5 0 mL ) で抽出し、硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去し、次いで、減圧乾燥して黄色アモルファス固体 ( 5 . 6 g ) を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、白色固体 ( 3 . 2 5 g、収率 8 2 % ) を得た。得られた固体は目的物である中間体 2 3 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 7 8 9 . 6 に対し、 $m/e = 7 8 9$  であった。

40

## 【 0 3 3 1】

## ( 3 ) 化合物 BD - 4 の合成

アルゴン雰囲気下、中間体 2 3 ( 3 . 2 5 g、4 . 1 2 mmol )、トリス ( ジベンジリデンアセトン ) ジパラジウム ( 0 ) ( 0 . 1 5 g、0 . 1 6 mmol、4 % Pd )、SPhos ( 0 . 2 7 g、0 . 6 6 mmol )、及び炭酸セシウム ( 8 . 1 g、2 4 . 8 mmol ) を 1, 2 - ジメトキシエタン ( 7 0 mL ) に懸濁し、更に水 ( 3 5 mL ) を加えて 1 1 時間還流した。反応混合物をジクロロメタン ( 2 5 0 mL ) で抽出し、硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去し、次いで、減圧乾燥して黄色アモルファス固体 ( 5 . 6 g ) を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、白色固体 ( 3 . 2 5 g、収率 8 2 % ) を得た。得られた固体は目的物である中間体 2 3 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 7 8 9 . 6 に対し、 $m/e = 7 8 9$  であった。

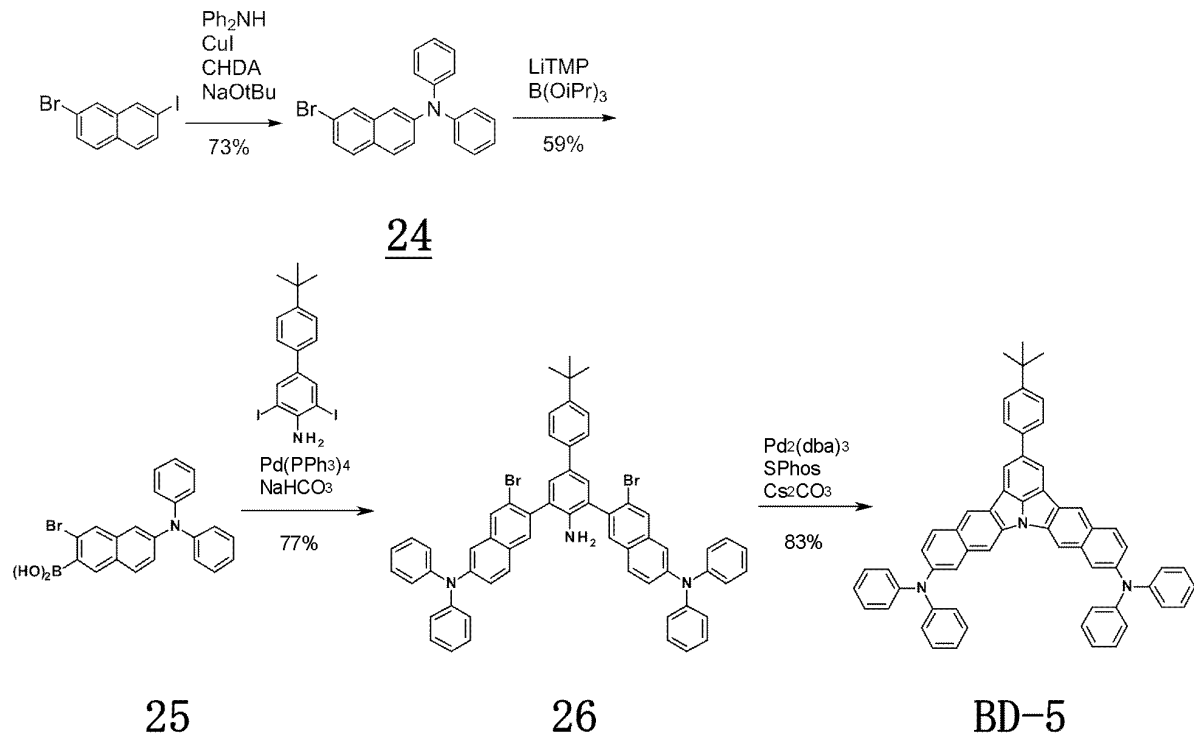
50

o 1) を無水キシレン (320 mL) に懸濁し、11 時間還流した。反応混合物をろ過し、ろ液の溶媒を留去し、次いで、減圧乾燥して褐色固体 (3.27 g) を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製して黄色固体 (1.40 g) を得た。得られた固体をトルエン (40 mL) から再結晶して黄色板状晶 (1.14 g、収率 54%) を得た。得られた固体は目的物である化合物 BD-4 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 627.77 に対し、 $m/e = 627$  であった。

### 【0332】

合成実施例 5 (化合物 BD-5 の合成)

### 【化157】



### 【0333】

(1) 中間体 24 の合成

アルゴン雰囲気下、2-ブロモ-7-ヨードナフタレン (2.83 g、16.7 mmol)、ジフェニルアミン (5.57 g、16.7 mmol)、ヨウ化銅 (30 mg、0.16 mmol)、及びナトリウム t-ブトキシド (2.2 g、23 mmol) を無水 1,4-ジオキサン (20 mL) に懸濁した。trans-1,2-ジアミノシクロヘキサン (0.19 mL、1.6 mmol) を加え、110 で 10 時間撹拌した。反応混合物をシリカパッドを通してろ過し、残渣をトルエン 100 mL で洗浄した。ろ液から溶媒を留去し、減圧乾燥して濃褐色オイル (6.7 g) を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、白色固体 (4.56 g) を得た。得られた固体は目的物である中間体 24 であり、マスペクトル分析の結果、分子量 373 に対し、 $m/e = 373$  であった。(収率 68%)

### 【0334】

(2) 中間体 25 の合成

アルゴン雰囲気下、2,2,6,6-テトラメチルピペリジン (3.4 g、24 mmol) を無水テトラヒドロフラン 35 mL に溶かし、ドライアイス/アセトン浴で -30 に冷却した。これに、n-ブチルリチウム/ヘキサン溶液 (14.7 mL、1.64 mol/L、24 mmol) を加え、-20 で 20 分撹拌後、-75 に冷却した。これにトリイソプロポキシボラン (8.3 mL、36 mmol) を滴下し、5 分後、中間体 24 (4.5 g、12 mmol) のテトラヒドロフラン溶液 (20 mL) を加え、冷却浴中で 10 時間撹拌した。反応終了後、5 質量% 塩酸 (100 mL) を加え、室温で 30 分間撹

拌後、酢酸エチル（150 mL）で抽出した。有機層を飽和食塩水（30 mL）で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥し、次いで、溶媒を留去して赤褐色アモルファス固体（5.8 g）を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、淡黄色固体（2.94 g）を得た。得られた固体は目的物である中間体25であり、マスペクトル分析の結果、分子量417に対し、 $m/e = 417$ であった。（収率59%）

#### 【0335】

##### （3）中間体26の合成

アルゴン雰囲気下、中間体25（2.94 g、7.0 mmol、2.2 eq）、4-（4-tert-ブチルフェニル）-2,6-ジヨードアニリン（3.05 g、6.40 mmol）、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>（0.74 g、0.64 mmol、5% Pd）、NaHCO<sub>3</sub>（4.3 g、51 mmol、3.6 eq）を1,2-ジメトキシエタン（80 mL）に懸濁し、水（40 mL）を加えて11時間還流した。反応混合物をジクロロメタン（200 mL）で抽出し、硫酸マグネシウムで乾燥し、溶媒を留去し、次いで、減圧乾燥して褐色アモルファス固体（7.78 g）を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、黄色固体（4.80 g、収率77%）を得た。得られた固体は目的物である中間体26であり、マスペクトル分析の結果、分子量969.8に対し、 $m/e = 969$ であった。

#### 【0336】

##### （4）化合物BD-5の合成

アルゴン雰囲気下、中間体26（4.00 g、4.12 mmol）、トリス（ジベンジリデンアセトン）ジパラジウム（0）（0.15 g、0.164 mmol、4% Pd）、SPhos（0.27 g、0.658 mmol）、炭酸セシウム（8.1 g、24.8 mmol）を無水キシレン（400 mL）に懸濁し、11時間還流した。反応混合物をろ過し、ろ液から溶媒を留去し、次いで、減圧乾燥して暗黄色固体を得た。これをカラムクロマトグラフィーを用いて精製し、黄色固体（2.43 g、収率73%）を得た。得られた固体は目的物である化合物BD-5であり、マスペクトル分析の結果、分子量808.04に対し、 $m/e = 808$ であった。

#### 【0337】

##### 半値幅の測定

実施例及び比較例で使用した化合物BD-1～BD-6（ドーパント材料）の半値幅を以下のようにして測定した。

#### 【0338】

ドーパント材料を $10^{-6}$  mol/L以上 $10^{-5}$  mol/L以下の濃度でトルエンに溶解し、測定用試料を調製した。石英セルへ入れた測定用試料に室温（300 K）で励起光を照射し、蛍光スペクトル（縦軸：蛍光強度、横軸：波長）を測定した。蛍光スペクトル測定には、日立ハイテクサイエンス社の分光蛍光光度計F-7000形を用いた。

この蛍光スペクトルからドーパント材料の半値幅（nm）を求めた。結果を表1～表5に示す。

#### 【0339】

##### 正孔移動度の測定

下記の手順で作製した移動度評価用素子を用いて第1化合物と第2化合物の正孔移動度を測定した。

##### （1）移動度評価用素子の作製

25 mm × 75 mm × 1.1 mm ITO透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック社製）をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。ITOの膜厚は130 nmであった。

洗浄後の前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極が形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HI-1を蒸着し、膜厚5 nmの正孔注入層を形成した。

この正孔注入層上に、化合物HT-1を蒸着し、膜厚10 nmの正孔輸送層を形成した

10

20

30

40

50

。

続けて下記の第 1 化合物及び第 2 化合物（ターゲット）から選ばれた化合物を蒸着し、膜厚 200 nm のターゲット膜を形成した。

最後に、ターゲット膜上に、金属アルミニウムを蒸着し、膜厚 80 nm の金属陰極を形成した。

以上のようにして作製した移動度評価用素子の層構成を以下に示す。

ITO (130) / HI - 1 (5) / HT - 1 (10) / ターゲット (200) / Al (80)

括弧内の数字は、膜厚 (nm) を示す。

## (2) 正孔移動度の測定

移動度評価用素子をインピーダンス測定装置に設置し、インピーダンスを測定した。

インピーダンス測定は、測定周波数を 1 Hz から 1 MHz まで掃引して行った。その際、素子には交流振幅 0.1 V と同時に、直流電圧 V を印加した。

測定されたインピーダンス Z から、下記の関係を用いて、モジュラス M を計算した。

$$M = j \omega Z$$

j は虚数単位、 $\omega$  は角周波数 (rad/s) である。

モジュラス M の虚部を縦軸、周波数 (Hz) を横軸にしたボデプロットにおいて、ピークを示す周波数  $f_{max}$  から移動度評価用素子の電氣的な時定数  $\tau$  を下式から求めた。

$$\tau = 1 / (2 \pi f_{max})$$

$\pi$  は円周率である。

上記  $\tau$  を用い、下式の関係式から正孔移動度  $\mu$  ( $\text{cm}^2 / \text{V} \cdot \text{s}$ ) を算出した。

$$\mu = d^2 / (V \tau)$$

d は素子を構成する有機薄膜の総膜厚であり、上記の素子構成では、 $d = 5 + 10 + 200 = 215$  (nm) である。

本願における正孔移動度は、電界強度の平方根  $E^{1/2}$  が  $500 \text{ V}^{1/2} / \text{cm}^{1/2}$  の際の値である。電界強度の平方根  $E^{1/2}$  は下記の関係式から算出することができる。

$$E^{1/2} = V^{1/2} / d^{1/2}$$

本実施例では、インピーダンス測定にはソーラトロン社の 1260 型を用い、高精度の結果を得るため、ソーラトロン社の 1296 型誘電率測定インターフェイスを併せて用いた。

第 1 化合物及び第 2 化合物の正孔移動度測定結果を表 1 及び表 3 に示す。

## 【0340】

### アフィニティの測定

アフィニティ (Af, electron affinity / 電子親和力) とは、材料の分子に電子を一つ与えた時に放出または吸収されるエネルギーをいい、放出の場合は正、吸収の場合は負と定義する。

第 1 化合物及び第 3 化合物のアフィニティ (Af) は、イオン化ポテンシャル (Ip) と一重項エネルギー ( $E_g(S)$ ) の測定値から下記式を用いて算出した。

$$Af (\text{eV}) = Ip - E_g(S)$$

### イオン化ポテンシャル (Ip)

イオン化ポテンシャル Ip は、測定化合物に光を照射し、その際に電荷分離によって生じる電子量を大気下光電子分光装置 (理研計器 (株) 社製: AC-3) を用いて測定した。

### 一重項エネルギー $E_g(S)$

一重項エネルギー  $E_g(S)$  は、次のようにして測定した。測定化合物を  $10^{-5} \text{ mol/L}$  の濃度でトルエンに溶解し、測定用試料を調製した。石英セルへ入れた測定用試料の吸収スペクトル (縦軸: 吸光度、横軸: 波長) を室温 (300 K) で測定した。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がり部分に接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値  $\lambda_{edge}$  (nm) を求めた。この波長値を下記換算式に代入して一重項エネルギーを算出した。

$$E_g(S)(eV) = 1239.85 / \lambda_{edge}$$

吸収スペクトルの測定には、日立ハイテクサイエンス社の分光光度計 U - 3310 形を用いた。

第 1 化合物及び第 3 化合物のアフィニティ測定結果を表 2、表 4 及び表 5 に示す。

#### 【0341】

##### 実施例 1

##### 有機 EL 素子の作製

25 mm × 75 mm × 1.1 mm ITO 透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマティック社製）をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を 5 分間行なった後、UV オゾン洗浄を 30 分間行なった。ITO の膜厚は、130 nm とした。

洗浄後の前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極が形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物 HI - 1 を蒸着し、膜厚 5 nm の正孔注入層を形成した。

この正孔注入層上に、化合物 HT - 1 を蒸着し、膜厚 80 nm の第一正孔輸送層を形成した。

続けて、この第一正孔輸送層の上に、化合物 HT - 2 を蒸着し、膜厚 10 nm の第二正孔輸送層を形成した。

続けて、この第二正孔輸送層の上に、化合物 BH1 - 1（第 1 化合物）、化合物 BH2 - 1（第 2 化合物）、及び化合物 BD - 1（ドーパント材料）を共蒸着し、膜厚 25 nm の発光層を形成した。発光層における化合物 BH1 - 1 の濃度は 86 質量%、化合物 BH2 - 1 の濃度は 12 質量%、化合物 BD - 1 の濃度は 2 質量%であった。

この発光層の上に、ET - 1 を蒸着し、膜厚 10 nm の第一電子輸送層を形成した。

続けて、この第一電子輸送層の上に、ET - 2 を蒸着し、膜厚 15 nm の第二電子輸送層を形成した。

さらに、この第二電子輸送層の上に、フッ化リチウム（LiF）を蒸着し、膜厚 1 nm の電子注入性電極を形成した。

そして、この電子注入性電極の上に、金属アルミニウム（Al）を蒸着し、膜厚 80 nm の金属陰極を形成した。

有機 EL 素子の層構成を以下に示す。

ITO (130) / HI - 1 (5) / HT - 1 (80) / HT - 2 (10) / BH1 - 1 : BH2 - 1 : BD - 1 (25, 86 : 12 : 2 質量%) / ET - 1 (10) / ET - 2 (15) / LiF (1) / Al (80)

なお、括弧内の数字は膜厚（nm）を示す。

##### 有機 EL 素子の評価

作製した有機 EL 素子の主ピーク波長  $\lambda_p$  と寿命 LT90 を以下のようにして測定した。

電流密度が 10 mA / cm<sup>2</sup> となるように有機 EL 素子に直流電圧を印加したときの分光放射輝度スペクトルを測定し、この分光放射輝度スペクトルから主ピーク波長  $\lambda_p$ （単位：nm）を求めた。分光放射輝度スペクトル測定には、コニカミノルタ社の分光放射輝度計 CS - 1000 を用いた。

初期電流密度が 50 mA / cm<sup>2</sup> となるように直流の連続通電試験を行い、輝度が初期輝度の 90% まで減少する時間を測定し、これを寿命 LT90 とした。

結果を表 1 に示す。

#### 【0342】

##### 実施例 2 ~ 14 及び比較例 1 ~ 10

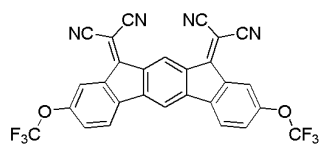
表 1 に示す第 1 化合物、第 2 化合物、及びドーパント材料を表 1 に示す質量比で含む各有機 EL 素子を実施例 1 と同様にして作製し、評価した。結果を表 1 に示す。

#### 【0343】

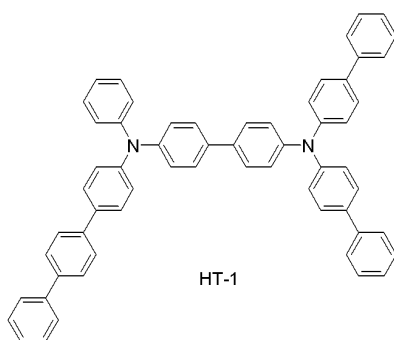
実施例 1 ~ 14 及び比較例 1 ~ 10 で使用した材料を以下に示す。

正孔注入層、正孔輸送層材料

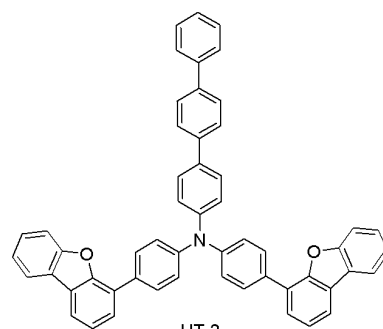
## 【化 1 5 8】



HI-1



HT-1

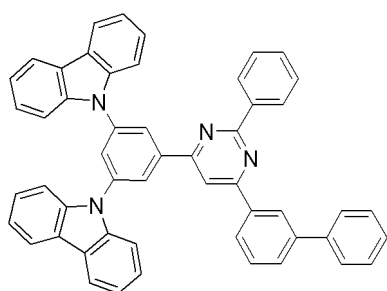


HT-2

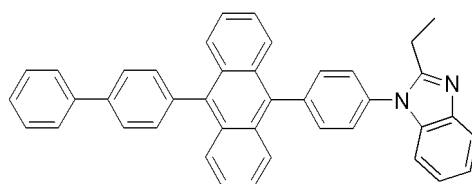
10

## 電子輸送層材料

## 【化 1 5 9】



ET-1

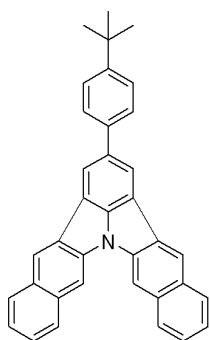


ET-2

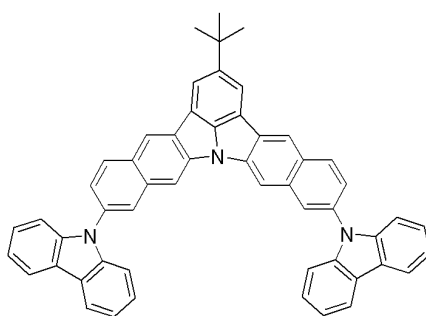
20

## ドーパント材料

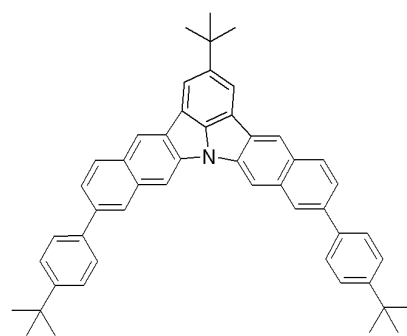
## 【化 1 6 0】



BD-1



BD-2

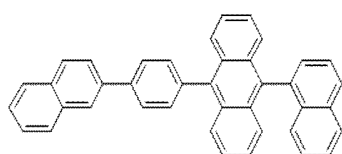


BD-3

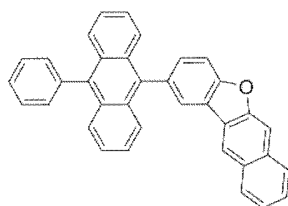
30

## 第 1 化合物

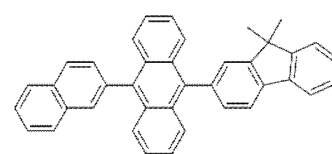
## 【化 1 6 1】



BH1-1



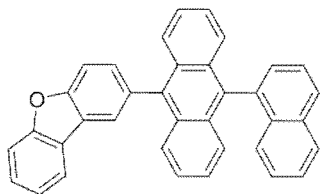
BH1-2



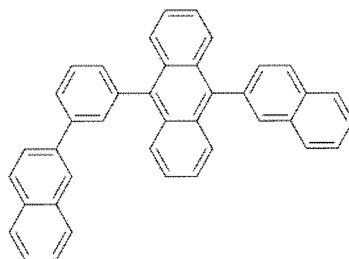
BH1-3

40

## 【化 1 6 2】



BH1-5

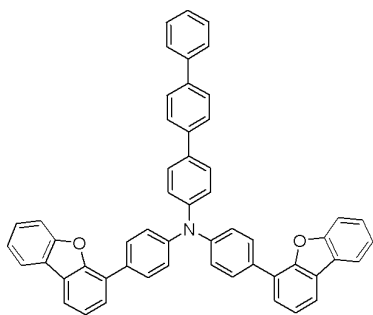


BH1-6

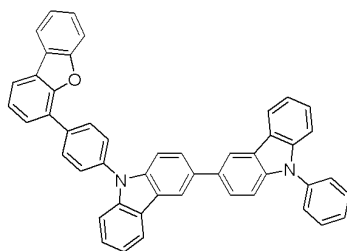
10

## 第 2 化合物

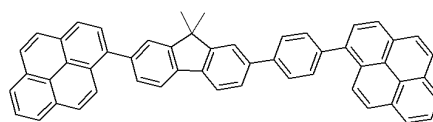
## 【化 1 6 3】



BH2-1



BH2-2



BH2-3

20

【表 1】

| 表 1   | 材料パラメータ |     |         |       |     |         |         |     |         |             | 素子性能         |  |
|-------|---------|-----|---------|-------|-----|---------|---------|-----|---------|-------------|--------------|--|
|       | 第1化合物   |     |         | 第2化合物 |     |         | ドーパント材料 |     |         | λ p<br>(nm) | LT90<br>(時間) |  |
|       | 材料名     | 質量% | 正孔移動度   | 材料名   | 質量% | 正孔移動度   | 材料名     | 質量% | 半値幅(nm) |             |              |  |
| 実施例1  | BH1-1   | 86  | 1.3E-09 | BH2-1 | 12  | 1.8E-04 | BD-1    | 2   | 18      | 448         | 181          |  |
| 実施例2  | BH1-1   | 92  | 1.3E-09 | BH2-1 | 6   | 1.8E-04 | BD-1    | 2   | 18      | 448         | 211          |  |
| 実施例3  | BH1-1   | 86  | 1.3E-09 | BH2-2 | 12  | 2.0E-05 | BD-1    | 2   | 18      | 449         | 174          |  |
| 実施例4  | BH1-1   | 92  | 1.3E-09 | BH2-2 | 6   | 2.0E-05 | BD-1    | 2   | 18      | 449         | 176          |  |
| 実施例5  | BH1-1   | 68  | 1.3E-09 | BH2-3 | 30  | 3.1E-06 | BD-1    | 2   | 18      | 449         | 187          |  |
| 比較例1  | BH1-1   | 98  | 1.3E-09 | -     | -   | -       | BD-1    | 2   | 18      | 448         | 165          |  |
| 実施例6  | BH1-2   | 92  | 4.4E-08 | BH2-1 | 6   | 1.8E-04 | BD-1    | 2   | 18      | 449         | 216          |  |
| 比較例2  | BH1-2   | 98  | 4.4E-08 | -     | -   | -       | BD-1    | 2   | 18      | 449         | 190          |  |
| 実施例7  | BH1-3   | 92  | 1.0E-06 | BH2-1 | 6   | 1.8E-04 | BD-1    | 2   | 18      | 448         | 199          |  |
| 比較例3  | BH1-3   | 98  | 1.0E-06 | -     | -   | -       | BD-1    | 2   | 18      | 448         | 80           |  |
| 実施例8  | BH1-5   | 92  | 1.3E-07 | BH2-1 | 6   | 1.8E-04 | BD-1    | 2   | 18      | 448         | 140          |  |
| 比較例4  | BH1-5   | 98  | 1.3E-07 | -     | -   | -       | BD-1    | 2   | 18      | 448         | 114          |  |
| 実施例9  | BH1-1   | 92  | 1.3E-09 | BH2-1 | 6   | 1.8E-04 | BD-2    | 2   | 15      | 442         | 138          |  |
| 比較例5  | BH1-1   | 98  | 1.3E-09 | -     | -   | -       | BD-2    | 2   | 15      | 442         | 93           |  |
| 実施例10 | BH1-2   | 92  | 4.4E-08 | BH2-1 | 6   | 1.8E-04 | BD-2    | 2   | 15      | 442         | 162          |  |
| 比較例6  | BH1-2   | 98  | 4.4E-08 | -     | -   | -       | BD-2    | 2   | 15      | 442         | 112          |  |
| 実施例11 | BH1-6   | 92  | 2.1E-08 | BH2-1 | 6   | 1.8E-04 | BD-2    | 2   | 15      | 442         | 222          |  |
| 比較例7  | BH1-6   | 98  | 2.1E-08 | -     | -   | -       | BD-2    | 2   | 15      | 442         | 63           |  |
| 実施例12 | BH1-1   | 92  | 1.3E-09 | BH2-1 | 6   | 1.8E-04 | BD-3    | 2   | 17      | 451         | 267          |  |
| 比較例8  | BH1-1   | 98  | 1.3E-09 | -     | -   | -       | BD-3    | 2   | 17      | 451         | 136          |  |
| 実施例13 | BH1-2   | 92  | 4.4E-08 | BH2-1 | 6   | 1.8E-04 | BD-3    | 2   | 17      | 451         | 286          |  |
| 比較例9  | BH1-2   | 98  | 4.4E-08 | -     | -   | -       | BD-3    | 2   | 17      | 451         | 166          |  |
| 実施例14 | BH1-6   | 92  | 2.1E-08 | BH2-1 | 6   | 1.8E-04 | BD-3    | 2   | 17      | 451         | 372          |  |
| 比較例10 | BH1-6   | 98  | 2.1E-08 | -     | -   | -       | BD-3    | 2   | 17      | 451         | 124          |  |

## 【0344】

比較例1～10の第1化合物とドーパント材料からなるシングルホスト有機EL素子と比較して、実施例1～14の第1化合物とドーパント材料に加えて第1化合物よりも大きい正孔移動度を有する第2化合物をさらに含むコホスト有機EL素子は長寿命であった。

10

20

30

40

50

すなわち、第2化合物の有無以外は同一条件である有機EL素子同士で比較すると、本発明のEL素子は長寿命であった。

また、コホスト有機EL素子は、シングルホスト有機EL素子と同様に、青色領域の発光波長を示した。

#### 【0345】

##### 実施例15

25mm×75mm×1.1mmITO透明電極(陽極)付きガラス基板(ジオマティック社製)をイソプロピルアルコール中で超音波洗浄を5分間行なった後、UVオゾン洗浄を30分間行なった。ITOの膜厚は、130nmとした。

洗浄後の前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極が形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HI-1を蒸着し、膜厚5nmの正孔注入層を形成した。

この正孔注入層の上に、化合物HT-1を蒸着し、膜厚80nmの第一正孔輸送層を形成した。

続けて、この第一正孔輸送層の上に、化合物HT-2を蒸着し、膜厚10nmの第二正孔輸送層を形成した。

続けて、この第二正孔輸送層の上に、化合物BH1-2(第1化合物)、化合物BH3-1(第3化合物)、及び化合物BD-1(ドーパント材料)を共蒸着し、膜厚25nmの発光層を形成した。発光層における化合物BH1-2の濃度は80質量%、化合物BH3-1の濃度は18質量%、化合物BD-1の濃度は2質量%であった。

続けて、この発光層の上に、ET-1を蒸着し、膜厚10nmの第一電子輸送層を形成した。

続けて、この第一電子輸送層の上に、ET-2を蒸着し、膜厚15nmの第二電子輸送層を形成した。

さらに、この第二電子輸送層の上に、フッ化リチウム(LiF)を蒸着し、膜厚1nmの電子注入性電極を形成した。

最後に、この電子注入性電極の上に、金属アルミニウム(Al)を蒸着し、膜厚80nmの金属陰極を形成した。

有機EL素子の層構成を以下に示す。

ITO(130)/HI-1(5)/HT-1(80)/HT-2(10)/BH1-2:BH3-1:BD-1(25,80:18:2質量%)/ET-1(10)/ET-2(15)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は膜厚(nm)を示す。

##### 有機EL素子の評価

作製した有機EL素子の主ピーク波長 $\lambda_p$ と寿命LT90を実施例1と同様にして測定した。結果を表2に示す。

#### 【0346】

##### 実施例16~33及び比較例11~20

表2に示す第1化合物、第3化合物、及びドーパント材料を表2に示す質量比で含む各有機EL素子を実施例15と同様にして作製し、評価した。結果を表2に示す。

#### 【0347】

実施例15~33及び比較例11~20で使用した材料を以下に示す。

正孔注入層、正孔輸送層材料

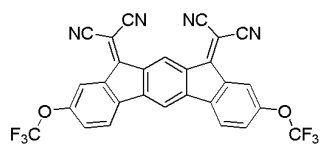
10

20

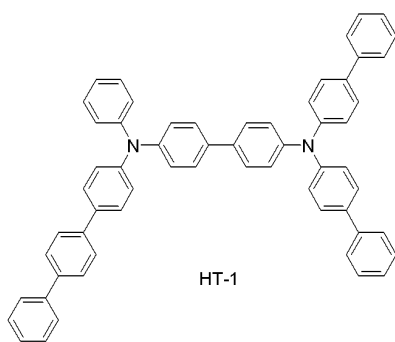
30

40

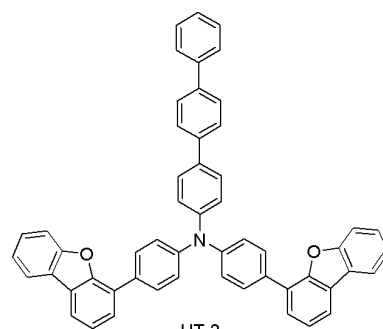
## 【化 1 6 4】



HI-1



HT-1

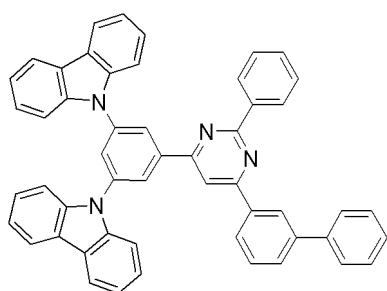


HT-2

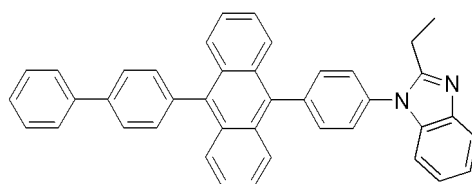
10

## 電子輸送層材料

## 【化 1 6 5】



ET-1

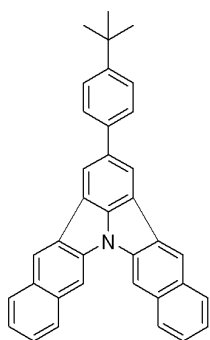


ET-2

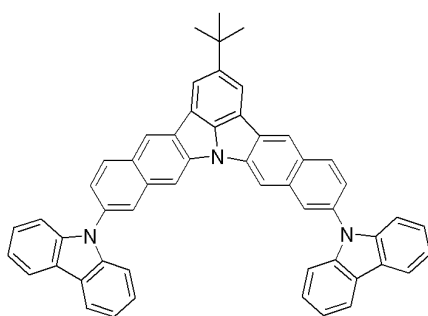
20

## ドーパント材料

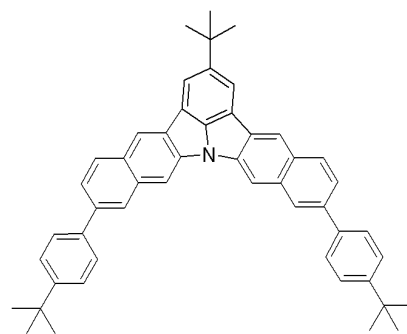
## 【化 1 6 6】



BD-1



BD-2

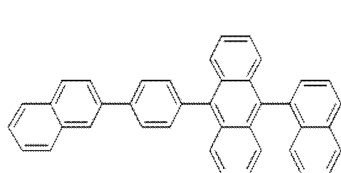


BD-3

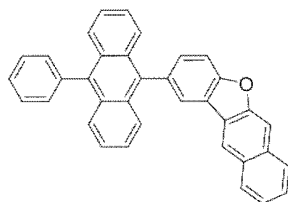
30

## 第 1 化合物

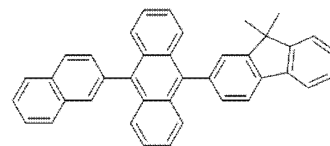
## 【化 1 6 7】



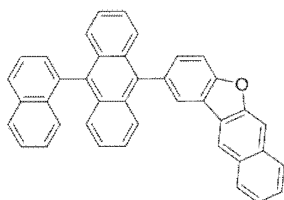
BH1-1



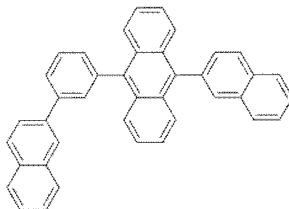
BH1-2



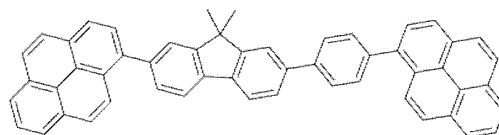
BH1-3



BH1-4



BH1-6

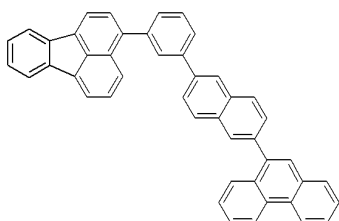


BH1-7

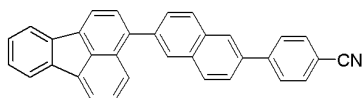
10

## 第 3 化合物

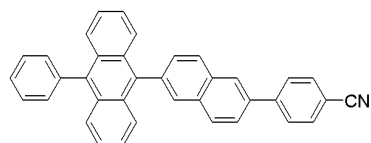
## 【化 1 6 8】



BH3-1



BH3-2



BH3-3

20

【表 2】

| 表2    | 材料パラメータ |     |      |       |     |      |         |     |         |     | 素子性能        |              |
|-------|---------|-----|------|-------|-----|------|---------|-----|---------|-----|-------------|--------------|
|       | 第1化合物   |     |      | 第3化合物 |     |      | ドーパント材料 |     |         |     | λ p<br>(nm) | LT90<br>(時間) |
|       | 材料名     | 質量% | Af   | 材料名   | 質量% | Af   | 材料名     | 質量% | 半値幅(nm) |     |             |              |
| 実施例15 | BH1-2   | 80  | 2.92 | BH3-1 | 18  | 3.12 | BD-1    | 2   | 18      | 450 | 219         |              |
|       | BH1-2   | 92  | 2.92 | BH3-1 | 6   | 3.12 | BD-1    | 2   | 18      | 449 | 216         |              |
| 比較例11 | BH1-2   | 98  | 2.92 | -     | -   | -    | BD-1    | 2   | 18      | 449 | 190         |              |
| 実施例17 | BH1-3   | 80  | 2.87 | BH3-1 | 18  | 3.12 | BD-1    | 2   | 18      | 450 | 145         |              |
| 実施例18 | BH1-3   | 92  | 2.87 | BH3-1 | 6   | 3.12 | BD-1    | 2   | 18      | 449 | 151         |              |
| 実施例19 | BH1-3   | 80  | 2.87 | BH3-2 | 18  | 3.25 | BD-1    | 2   | 18      | 452 | 263         |              |
| 実施例20 | BH1-3   | 92  | 2.87 | BH3-2 | 6   | 3.25 | BD-1    | 2   | 18      | 450 | 288         |              |
| 実施例21 | BH1-3   | 92  | 2.87 | BH3-3 | 6   | 3.04 | BD-1    | 2   | 18      | 449 | 117         |              |
| 比較例12 | BH1-3   | 98  | 2.87 | -     | -   | -    | BD-1    | 2   | 18      | 448 | 80          |              |
| 実施例22 | BH1-4   | 80  | 3.00 | BH3-1 | 18  | 3.12 | BD-1    | 2   | 18      | 450 | 179         |              |
| 実施例23 | BH1-4   | 92  | 3.00 | BH3-1 | 6   | 3.12 | BD-1    | 2   | 18      | 450 | 185         |              |
| 実施例24 | BH1-4   | 80  | 3.00 | BH3-2 | 18  | 3.25 | BD-1    | 2   | 18      | 452 | 356         |              |
| 実施例25 | BH1-4   | 92  | 3.00 | BH3-2 | 6   | 3.25 | BD-1    | 2   | 18      | 451 | 210         |              |
| 比較例13 | BH1-4   | 98  | 3.00 | -     | -   | -    | BD-1    | 2   | 18      | 449 | 117         |              |
| 実施例26 | BH1-7   | 92  | 2.80 | BH3-2 | 6   | 3.25 | BD-1    | 2   | 18      | 453 | 132         |              |
| 実施例27 | BH1-7   | 80  | 2.80 | BH3-3 | 18  | 3.04 | BD-1    | 2   | 18      | 451 | 134         |              |
| 比較例14 | BH1-7   | 98  | 2.80 | -     | -   | -    | BD-1    | 2   | 18      | 452 | 43          |              |
| 実施例28 | BH1-1   | 92  | 3.02 | BH3-1 | 6   | 3.12 | BD-2    | 2   | 15      | 442 | 147         |              |
| 比較例15 | BH1-1   | 98  | 3.02 | -     | -   | -    | BD-2    | 2   | 15      | 442 | 93          |              |
| 実施例29 | BH1-2   | 92  | 2.92 | BH3-1 | 6   | 3.12 | BD-2    | 2   | 15      | 443 | 132         |              |
| 比較例16 | BH1-2   | 98  | 2.92 | -     | -   | -    | BD-2    | 2   | 15      | 442 | 112         |              |
| 実施例30 | BH1-6   | 92  | 3.00 | BH3-1 | 6   | 3.12 | BD-2    | 2   | 15      | 442 | 122         |              |
| 比較例17 | BH1-6   | 98  | 3.00 | -     | -   | -    | BD-2    | 2   | 15      | 442 | 63          |              |
| 実施例31 | BH1-1   | 92  | 3.02 | BH3-1 | 6   | 3.12 | BD-3    | 2   | 17      | 451 | 197         |              |
| 比較例18 | BH1-1   | 98  | 3.02 | -     | -   | -    | BD-3    | 2   | 17      | 451 | 136         |              |
| 実施例32 | BH1-2   | 92  | 2.92 | BH3-1 | 6   | 3.12 | BD-3    | 2   | 17      | 452 | 214         |              |
| 比較例19 | BH1-2   | 98  | 2.92 | -     | -   | -    | BD-3    | 2   | 17      | 451 | 166         |              |
| 実施例33 | BH1-6   | 92  | 3.00 | BH3-1 | 6   | 3.12 | BD-3    | 2   | 17      | 451 | 217         |              |
| 比較例20 | BH1-6   | 98  | 3.00 | -     | -   | -    | BD-3    | 2   | 17      | 451 | 124         |              |

## 【0348】

比較例11～20の第1化合物とドーパント材料からなるシングルホスト有機EL素子と比較して、実施例15～33の第1化合物とドーパント材料に加えて第1化合物よりも大きいアフィニティを有する第3化合物を含むコホスト有機EL素子は、長寿命であった。すなわち、第3化合物の有無以外は同一条件である有機EL素子同士で比較すると、本発明のEL素子は長寿命であった。

また、コホスト有機EL素子は、シングルホスト有機EL素子と同様に、青色領域の発光波長を示した。

## 【0349】

実施例34～40及び比較例21～23

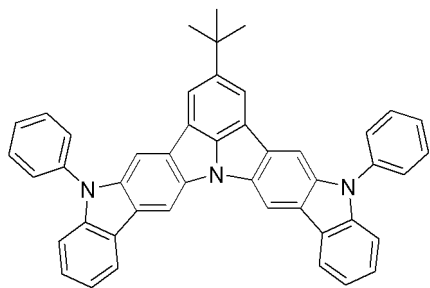
表3に示す第1化合物、第2化合物、及びドーパント材料を表3に示す質量比で含む各有機EL素子を実施例1と同様にして作製し、評価した。結果を表3に示す。

## 【0350】

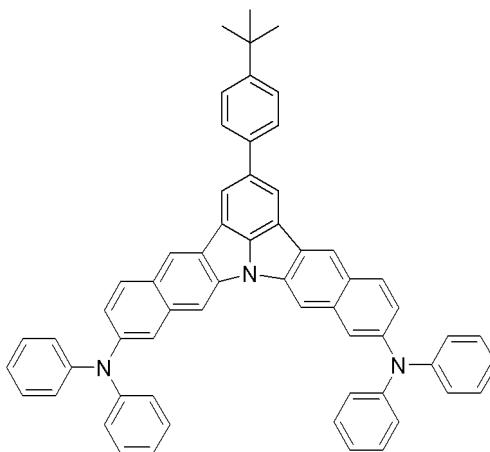
実施例34～40及び比較例21～23で使用した材料を以下に示す。前記した化合物は省略した。

ドーパント材料

## 【化 1 6 9】



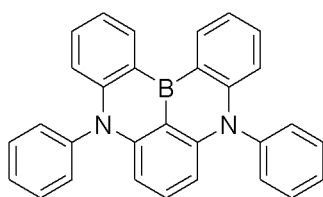
BD-4



BD-5

10

## 【化 1 7 0】

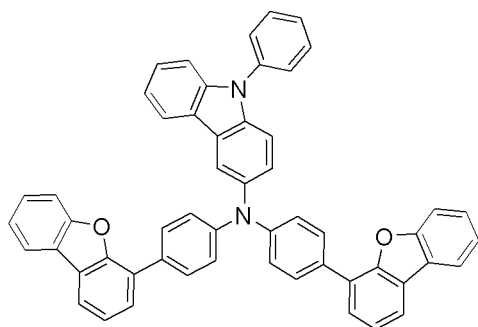


BD-6

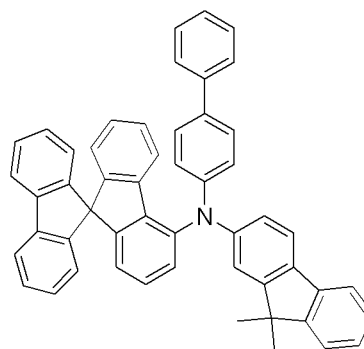
20

## 第 2 化合物

## 【化 1 7 1】



BH2-4



BH2-5

30

40

【表 3】

| 表3    | 材料パラメータ |     |         |       |     |         |         |     |         |     |             | 素子性能         |  |
|-------|---------|-----|---------|-------|-----|---------|---------|-----|---------|-----|-------------|--------------|--|
|       | 第1化合物   |     |         | 第2化合物 |     |         | ドーパント材料 |     |         |     | λ p<br>(nm) | LT90<br>(時間) |  |
|       | 材料名     | 質量% | 正孔移動度   | 材料名   | 質量% | 正孔移動度   | 材料名     | 質量% | 半値幅(nm) |     |             |              |  |
|       |         |     |         |       |     |         |         |     |         |     |             |              |  |
| 実施例34 | BH1-1   | 92  | 1.3E-09 | BH2-1 | 6   | 1.8E-04 | BD-4    | 2   | 18      | 462 | 330         |              |  |
| 実施例35 | BH1-1   | 92  | 1.3E-09 | BH2-4 | 6   | 1.1E-04 | BD-4    | 2   | 18      | 462 | 390         |              |  |
| 実施例36 | BH1-1   | 92  | 1.3E-09 | BH2-5 | 6   | 8.5E-05 | BD-4    | 2   | 18      | 462 | 300         |              |  |
| 比較例21 | BH1-1   | 98  | 1.3E-09 | -     | -   | -       | BD-4    | 2   | 18      | 462 | 238         |              |  |
| 実施例37 | BH1-1   | 92  | 1.3E-09 | BH2-1 | 6   | 1.8E-04 | BD-5    | 2   | 17      | 454 | 190         |              |  |
| 実施例38 | BH1-1   | 92  | 1.3E-09 | BH2-4 | 6   | 1.1E-04 | BD-5    | 2   | 17      | 454 | 265         |              |  |
| 実施例39 | BH1-1   | 92  | 1.3E-09 | BH2-5 | 6   | 8.5E-05 | BD-5    | 2   | 17      | 454 | 190         |              |  |
| 比較例22 | BH1-1   | 98  | 1.3E-09 | -     | -   | -       | BD-5    | 2   | 17      | 454 | 176         |              |  |
| 実施例40 | BH1-1   | 92  | 1.3E-09 | BH2-4 | 6   | 1.1E-04 | BD-6    | 2   | 22      | 458 | 141         |              |  |
| 比較例23 | BH1-1   | 98  | 1.3E-09 | -     | -   | -       | BD-6    | 2   | 22      | 459 | 124         |              |  |

【 0 3 5 1 】

比較例 2 1 ~ 2 3 の第 1 化合物とドーパント材料からなるシングルホスト有機 E L 素子と比較して、実施例 3 4 ~ 4 0 の第 1 化合物とドーパント材料に加えて第 1 化合物よりも

10

20

30

40

50

大きい正孔移動度を有する第 2 化合物をさらに含むコホスト有機 E L 素子は長寿命であった。すなわち、第 2 化合物の有無以外は同一条件である有機 E L 素子同士で比較すると、本発明の E L 素子は長寿命であった。

また、コホスト有機 E L 素子は、シングルホスト有機 E L 素子と同様に、青色領域の発光波長を示した。

【 0 3 5 2 】

実施例 4 1 ~ 4 3 及び比較例 2 4 ~ 2 6

表 4 又は表 5 に示す第 1 化合物、第 3 化合物、及びドーパント材料を表 4 又は表 5 に示す質量比で含む各有機 E L 素子を実施例 1 5 と同様にして作製し、評価した。結果を表 4 及び表 5 に示す。表 5 において、実施例 4 3 の素子の L T 9 0 は、比較例 2 6 の素子の L T 9 0 を 1 . 0 0 とした相対値で表した。

10

【 0 3 5 3 】

実施例 4 1 ~ 4 3 及び比較例 2 4 ~ 2 6 で使用した材料の構造式は上記したので、ここでは省略する。

【表 4】

| 表 4   | 材料パラメータ |     |      |       |     |      |         |     |         |  | 素子性能                |              |
|-------|---------|-----|------|-------|-----|------|---------|-----|---------|--|---------------------|--------------|
|       | 第1化合物   |     |      | 第3化合物 |     |      | ドーパント材料 |     |         |  | $\lambda$ p<br>(nm) | LT90<br>(時間) |
|       | 材料名     | 質量% | Af   | 材料名   | 質量% | Af   | 材料名     | 質量% | 半値幅(nm) |  |                     |              |
| 実施例41 | BH1-1   | 92  | 3.02 | BH3-1 | 6   | 3.12 | BD-4    | 2   | 18      |  | 462                 | 280          |
| 比較例24 | BH1-1   | 98  | 3.02 | —     | —   | —    | BD-4    | 2   | 18      |  | 462                 | 238          |
| 実施例42 | BH1-1   | 92  | 3.02 | BH3-1 | 6   | 3.12 | BD-5    | 2   | 17      |  | 454                 | 185          |
| 比較例25 | BH1-1   | 98  | 3.02 | —     | —   | —    | BD-5    | 2   | 17      |  | 454                 | 176          |

表 5

| 表 5   | 材料パラメータ |     |      |       |     |      |         |     |         |  | 素子性能                |               |
|-------|---------|-----|------|-------|-----|------|---------|-----|---------|--|---------------------|---------------|
|       | 第1化合物   |     |      | 第3化合物 |     |      | ドーパント材料 |     |         |  | $\lambda$ p<br>(nm) | LT90<br>(相対値) |
|       | 材料名     | 質量% | Af   | 材料名   | 質量% | Af   | 材料名     | 質量% | 半値幅(nm) |  |                     |               |
| 実施例43 | BH1-1   | 90  | 3.02 | BH3-1 | 6   | 3.12 | BD-6    | 4   | 22      |  | 459                 | 1.11          |
| 比較例26 | BH1-1   | 96  | 3.02 | —     | —   | —    | BD-6    | 4   | 22      |  | 460                 | 1.00          |

【 0 3 5 4 】

比較例 2 4 ~ 2 6 の第 1 化合物とドーパント材料からなるシングルホスト有機 E L 素子と比較して、実施例 4 1 ~ 4 3 の第 1 化合物とドーパント材料に加えて第 1 化合物よりも大きいアフィニティを有する第 3 化合物を含むコホスト有機 E L 素子は、長寿命であった

10

20

30

40

50

。すなわち、第3化合物の有無以外は同一条件である有機EL素子同士で比較すると、本発明のEL素子は長寿命であった。

また、コホスト有機EL素子は、シングルホスト有機EL素子と同様に、青色領域の発光波長を示した。

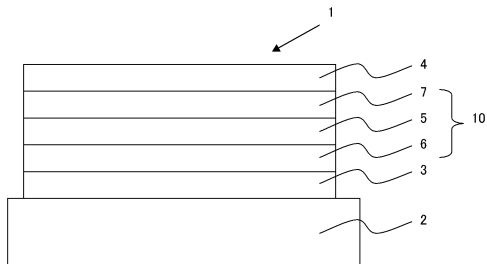
【符号の説明】

【0355】

- 1 有機エレクトロルミネッセンス素子
- 2 基板
- 3 陽極
- 4 陰極
- 5 蛍光発光層
- 6 正孔注入層 / 正孔輸送層
- 7 電子注入層 / 電子輸送層
- 10 発光ユニット

10

【図1】



## フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I  
C 0 9 K 11/06 6 6 0  
C 0 9 K 11/06 6 2 0  
C 0 7 D 487/06

(56)参考文献 国際公開第2016/152418(WO,A1)  
国際公開第2015/151965(WO,A1)  
国際公開第2009/008348(WO,A1)  
韓国公開特許第10-2014-0102947(KR,A)  
中国特許出願公開第104119347(CN,A)  
欧州特許出願公開第03009494(EP,A1)  
欧州特許出願公開第03010052(EP,A1)  
国際公開第2017/175690(WO,A1)

(58)調査した分野(Int.Cl.,DB名)  
H 0 1 L 5 1 / 5 0  
C 0 9 K 1 1 / 0 6  
C 0 7 D 4 8 7 / 0 6  
CAplus/REGISTRY(STN)