

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7606292号
(P7606292)

(45)発行日 令和6年12月25日(2024.12.25)

(24)登録日 令和6年12月17日(2024.12.17)

(51)国際特許分類		F I	
H 1 0 K	50/12 (2023.01)	H 1 0 K	50/12
C 0 7 F	15/00 (2006.01)	C 0 7 F	15/00 F C S P
C 0 7 F	5/02 (2006.01)	C 0 7 F	5/02 F
C 0 9 K	11/06 (2006.01)	C 0 9 K	11/06 6 6 0
H 1 0 K	50/15 (2023.01)	H 1 0 K	50/15
請求項の数 20 (全114頁) 最終頁に続く			
(21)出願番号	特願2020-140384(P2020-140384)	(73)特許権者	512187343
(22)出願日	令和2年8月21日(2020.8.21)		三星ディスプレイ株式会社
(65)公開番号	特開2021-34735(P2021-34735A)		S a m s u n g D i s p l a y C o .
(43)公開日	令和3年3月1日(2021.3.1)		, L t d .
審査請求日	令和5年6月26日(2023.6.26)		大韓民国京畿道龍仁市器興区三星路 1
(31)優先権主張番号	10-2019-0103994		1, S a m s u n g - r o , G i h e
(32)優先日	令和1年8月23日(2019.8.23)		u n g - g u , Y o n g i n - s i ,
(33)優先権主張国・地域又は機関	韓国(KR)		G y e o n g g i - d o , R e p u b
			l i c o f K o r e a
		(74)代理人	110002619
			弁理士法人P O R T
		(72)発明者	ハン ジョンフン
			大韓民国 京畿道 龍仁市 器興区 三星路
			1 三星ディスプレイ株式会社内
		(72)発明者	コ スビョン
			最終頁に続く

(54)【発明の名称】 有機金属化合物、及びそれを含む有機電界発光素子

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

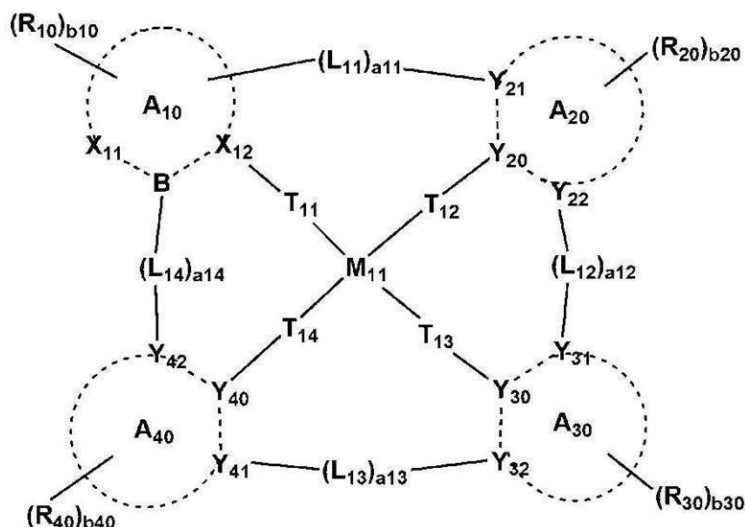
第1電極と、

前記第1電極に対向した第2電極と、

前記第1電極と前記第2電極との間に介在された、発光層を含む有機層と、を含み、

下記化学式1で表される有機金属化合物を含む有機電界発光素子。

【化 1】



・・・（化学式 1）

（化学式 1 において、

M_{11} は、白金（Pt）、パラジウム（Pd）、銅（Cu）、銀（Ag）、金（Au）、ロジウム（Rh）、イリジウム（Ir）、ルテニウム（Ru）、オスミウム（Os）、チタン（Ti）、ジルコニウム（Zr）、ハフニウム（Hf）、ユウロピウム（Eu）、テルビウム（Tb）及びツリウム（Tm）のうちから選択され、

A_{10} は、（i）5 員環のヘテロ環基、あるいは（ii） C_3-C_{60} 炭素環基及び C_1-C_{60} ヘテロ環基のうち少なくとも一つが縮合された 5 員環のヘテロ環基であり、

A_{20} 、 A_{30} 及び A_{40} は、互いに独立して、 C_5-C_{60} 炭素環基及び C_1-C_{60} ヘテロ環基のうちから選択され、

X_{11} は、N（ R_{50} ） b_{50} 、O または S であり、

X_{12} は、O または S であり、

Y_{20} 、 Y_{30} 及び Y_{40} は、互いに独立して、N または C であり、

Y_{21} 、 Y_{22} 、 Y_{31} 、 Y_{32} 、 Y_{41} 及び Y_{42} は、互いに独立して、N または C であり、

$T_{11} \sim T_{14}$ は、互いに独立して、配位結合、共有結合、 $*-O-*$ 及び $*-S-*$ のうちから選択され、

$L_{11} \sim L_{14}$ は、互いに独立して、単結合、 $*-O-*$ 、 $*-S-*$ 、 $*-C(R_1)(R_2)-*$ 、 $*-C(R_1)=*$ 、 $*=C(R_1)-*$ 、 $*-C(R_1)=C(R_2)-*$ 、 $*-C(=O)-*$ 、 $*-C(=S)-*$ 、 $*-C \equiv C-*$ 、 $*-R_1(R_2)-*$ 、 $*-N(R_1)-*$ 、 $*-P(R_1)-*$ 、 $*-Si(R_1)(R_2)-*$ 、 $*-P(R_1)(R_2)-*$ 及び $*-Ge(R_1)(R_2)-*$ のうちから選択され、

$a_{11} \sim a_{14}$ は、互いに独立して、0、1、2、3、4 及び 5 のうちから選択され、

R_1 、 R_2 、 R_{10} 、 R_{20} 、 R_{30} 、 R_{40} 及び R_{50} は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリールチオ基、置換もしくは

は無置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-P(Q_1)(Q_2)$ 、 $-C(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、 $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 、及び $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ のうちから選択され、

R_1 、 R_2 、 R_{10} 、 R_{20} 、 R_{30} 、 R_{40} 及び R_{50} のうち隣接する2以上は選択的に互いに結合して、置換もしくは無置換の C_5-C_{60} 炭素環基、または置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロ環基を形成するか、或は互いに結合せず、

b_{10} 、 b_{20} 、 b_{30} 及び b_{40} は、互いに独立して、1、2、3、4、5、6、7及び8のうちから選択され、

b_{50} は、0または1であり、

及び'は、隣接原子との結合位置であり、

前記置換された C_1-C_{60} アルキル基、置換された C_2-C_{60} アルケニル基、置換された C_2-C_{60} アルキニル基、置換された C_1-C_{60} アルコキシ基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換された C_6-C_{60} アリール基、置換された C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換された C_6-C_{60} アリールチオ基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基は、

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$ 、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-B(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-C(=O)(Q_{11})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{11})$ 及び $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$ 、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-B(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-C(=O)(Q_{21})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{21})$ 及び $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

10

20

30

40

50

32)、 $-C(=O)$ (Q_{31})、 $-S(=O)_2$ (Q_{31}) 及び $-P(=O)$ (Q_{31}) (Q_{32}) ; のうちから選択され、

前記 $Q_1 \sim Q_3$ 、 $Q_{11} \sim Q_{13}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{23}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリールオキシ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリールチオ基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、重水素、 $-F$ 及び シアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換された C_1-C_{60} アルキル基、重水素、 $-F$ 及び シアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換された C_6-C_{60} アリール基、ビフェニル基、及びターフェニル基のうちから選択される。) 10

【請求項2】

前記第1電極がアノードであり、

前記第2電極がカソードであり、

前記有機層は、前記第1電極と前記発光層との間に介在された正孔輸送領域、及び前記発光層と前記第2電極との間に介在された電子輸送領域をさらに含み、

前記正孔輸送領域は、正孔注入層、正孔輸送層、バッファ層、発光補助層及び電子阻止層のうちから選択された少なくとも1層を含み、 20

前記電子輸送領域は、正孔阻止層、電子輸送層及び電子注入層のうちから選択された少なくとも1層を含むことを特徴とする請求項1に記載の有機電界発光素子。

【請求項3】

前記有機金属化合物が、前記発光層に含まれることを特徴とする請求項1に記載の有機電界発光素子。

【請求項4】

前記発光層が、最大発光波長が400nm～500nmである青色光を放出することを特徴とする請求項3に記載の有機電界発光素子。

【請求項5】

前記発光層がホスト及びドーパントを含み、

前記ドーパントが、前記有機金属化合物を含むことを特徴とする請求項3に記載の有機電界発光素子。 30

【請求項6】

前記発光層がホストをさらに含み、

前記ホストは、シリコン含有化合物、ホスフィンオキシド含有化合物、またはそれらの組み合わせを含むことを特徴とする請求項3に記載の有機電界発光素子。

【請求項7】

前記電子輸送領域が正孔阻止層を含み、

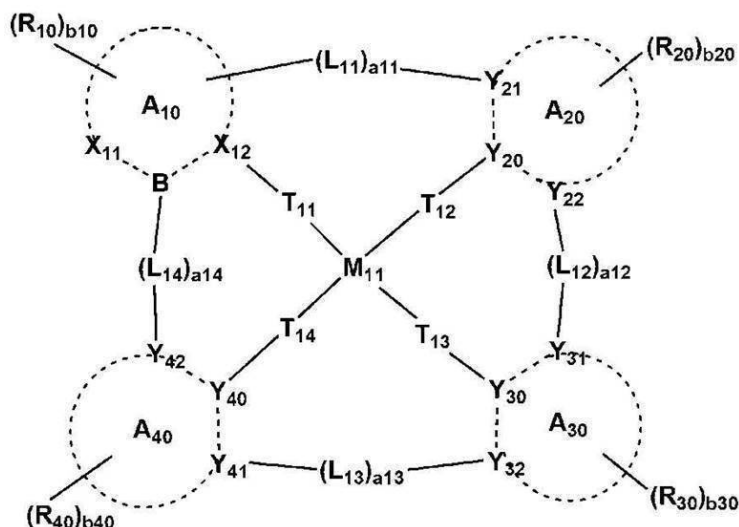
前記正孔阻止層は、前記発光層に直接接触しており、

前記正孔阻止層に、ホスフィンオキシド含有化合物またはシリル含有化合物を含むことを特徴とする請求項2に記載の有機電界発光素子。 40

【請求項8】

下記化学式1で表される有機金属化合物。

【化 2】



・・・（化学式 1）

（前記化学式 1 において、

M_{11} は、白金（Pt）、パラジウム（Pd）、銅（Cu）、銀（Ag）、金（Au）、ロジウム（Rh）、イリジウム（Ir）、ルテニウム（Ru）、オスミウム（Os）、チタン（Ti）、ジルコニウム（Zr）、ハフニウム（Hf）、ユウロピウム（Eu）、テルビウム（Tb）及びツリウム（Tm）のうちから選択され、

A_{10} は、（i）5 員環のヘテロ環基、あるいは（ii） C_3-C_{60} 炭素環基及び C_1-C_{60} ヘテロ環基のうち少なくとも一つが縮合された 5 員環のヘテロ環基であり、

A_{20} 、 A_{30} 及び A_{40} は、互いに独立して、 C_5-C_{60} 炭素環基及び C_1-C_{60} ヘテロ環基のうちから選択され、

X_{11} は、N（R₅₀）_{b50}、O または S であり、

X_{12} は、O または S であり、

Y_{20} 、 Y_{30} 及び Y_{40} は、互いに独立して、N または C であり、

Y_{21} 、 Y_{22} 、 Y_{31} 、 Y_{32} 、 Y_{41} 及び Y_{42} は、互いに独立して、N または C であり、

$T_{11} \sim T_{14}$ は、互いに独立して、配位結合、共有結合、 $*-O-*$ 及び $*-S-*$ のうちから選択され、

$L_{11} \sim L_{14}$ は、互いに独立して、単結合、 $*-O-*$ 、 $*-S-*$ 、 $*-C(R_1)(R_2)-*$ 、 $*-C(R_1)=*$ 、 $*=C(R_1)-*$ 、 $*-C(R_1)=C(R_2)-*$ 、 $*-C(=O)-*$ 、 $*-C(=S)-*$ 、 $*-C \equiv C-*$ 、 $*-B(R_1)(R_2)-*$ 、 $*-N(R_1)-*$ 、 $*-P(R_1)-*$ 、 $*-Si(R_1)(R_2)-*$ 、 $*-P(R_1)(R_2)-*$ 及び $*-Ge(R_1)(R_2)-*$ のうちから選択され、

$a_{11} \sim a_{14}$ は、互いに独立して、0、1、2、3、4 及び 5 のうちから選択され、

R_1 、 R_2 、 R_{10} 、 R_{20} 、 R_{30} 、 R_{40} 及び R_{50} は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリールチオ基、置換もしくは

は無置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-P(Q_1)(Q_2)$ 、 $-C(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、 $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 、及び $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ のうちから選択され、

R_1 、 R_2 、 R_{10} 、 R_{20} 、 R_{30} 、 R_{40} 及び R_{50} のうち隣接する2以上が選択的に互いに結合して、置換もしくは無置換の C_5-C_{60} 炭素環基、または置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロ環基を形成するか、或は互いに結合せず、

b_{10} 、 b_{20} 、 b_{30} 及び b_{40} は、互いに独立して、1、2、3、4、5、6、7及び8のうちから選択され、

b_{50} は、0または1であり、

及び'は、隣接原子との結合位置であり、

前記置換された C_1-C_{60} アルキル基、置換された C_2-C_{60} アルケニル基、置換された C_2-C_{60} アルキニル基、置換された C_1-C_{60} アルコキシ基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換された C_6-C_{60} アリール基、置換された C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換された C_6-C_{60} アリールチオ基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基は、

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$ 、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-B(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-C(=O)(Q_{11})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{11})$ 及び $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$ 、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-B(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-C(=O)(Q_{21})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{21})$ 及び $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q$

10

20

30

40

50

32)、 $-C(=O)$ (Q_{31})、 $-S(=O)_2$ (Q_{31}) 及び $-P(=O)$ (Q_{31}) (Q_{32}) ; のうちから選択され、

前記 $Q_1 \sim Q_3$ 、 $Q_{11} \sim Q_{13}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{23}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリールオキシ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリールチオ基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、重水素、 $-F$ 及び シアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換された C_1-C_{60} アルキル基、重水素、 $-F$ 及び シアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換された C_6-C_{60} アリール基、ビフェニル基、及びターフェニル基のうちから選択される。) 10

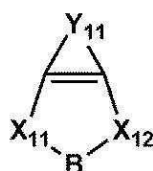
【請求項9】

M_{11} は、 Pt 、 Pd 、 Cu 、 Ag 及び Au のうちから選択されることを特徴とする請求項8に記載の有機金属化合物。

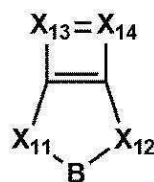
【請求項10】

A_{10} は、下記化学式 $A_{10}-1 \sim$ 化学式 $A_{10}-7$ のうちから選択されたいずれか一つで表わされる基であることを特徴とする請求項8に記載の有機金属化合物。 20

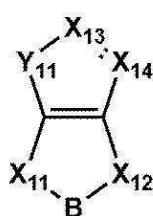
【化3】



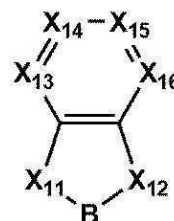
A10-1



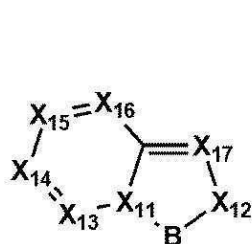
A10-2



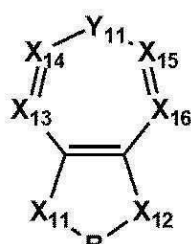
A10-3



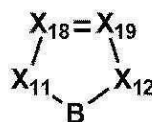
A10-4



A10-5



A10-6



A10-7

(前記化学式 $A_{10}-1 \sim$ 化合物 $A_{10}-7$ において、

Y_{11} は、 O 、 S 、 $N(R_{11})$ または $C(R_{11})(R_{12})$ であり、 40

X_{13} は、 N または $C(R_{13})$ であり、 X_{14} は、 N または $C(R_{14})$ であり、 X_{15} は、 N または $C(R_{15})$ であり、 X_{16} は、 N または $C(R_{16})$ であり、 X_{17} は、 N または $C(R_{17})$ であり、 X_{18} は、 N または $C(R_{18})$ であり、 X_{19} は、 N または $C(R_{19})$ であり、

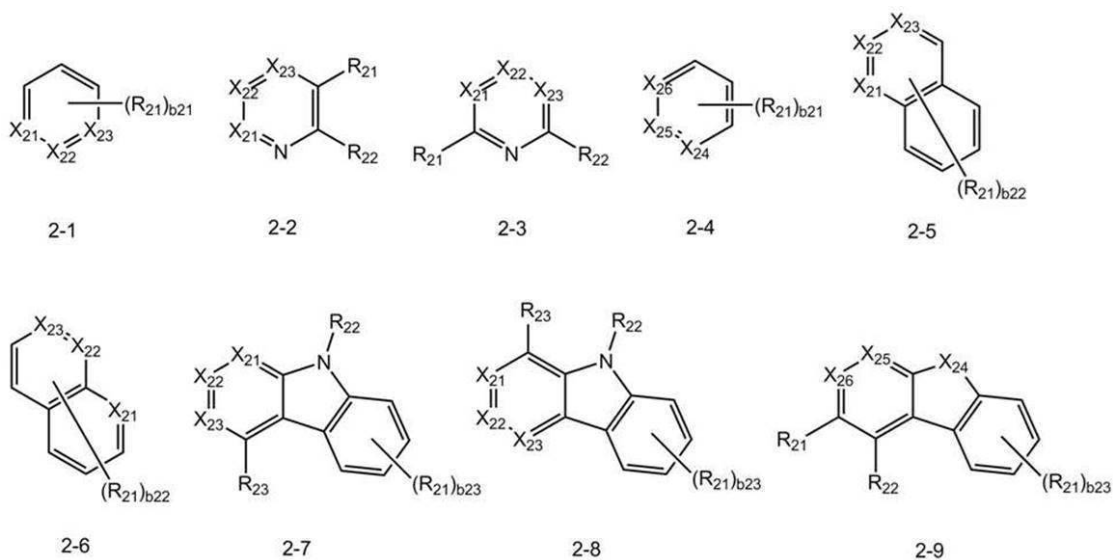
$R_{11} \sim R_{19}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基 50

、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリールチオ基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-P(Q_1)(Q_2)$ 、 $-C(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、 $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 、及び $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ のうちから選択される。))

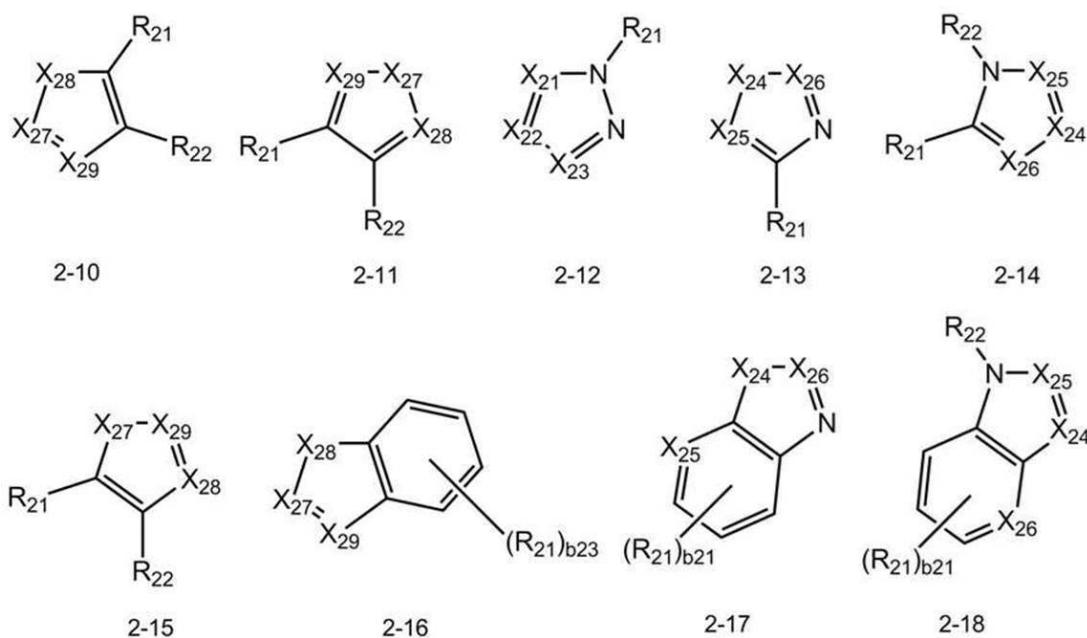
【請求項 11】

A₂₀、A₃₀ 及び A₄₀ は、互いに独立して、下記化学式 2-1～化学式 2-43 のうちいずれか一つで表わされる基のうちから選択されることを特徴とする請求項 8 に記載の有機金属化合物。

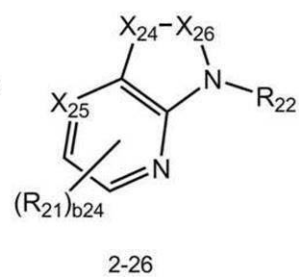
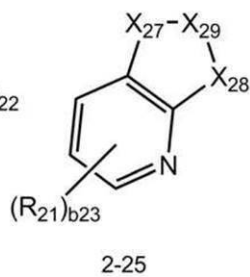
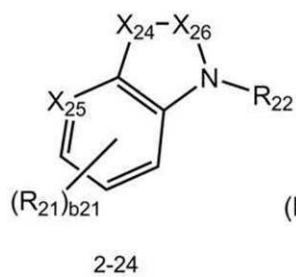
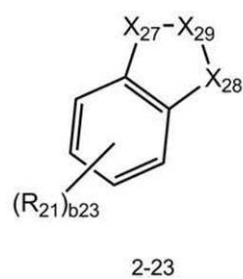
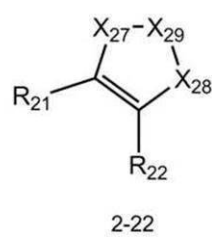
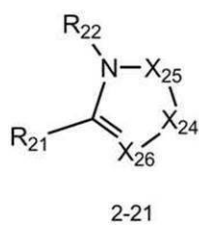
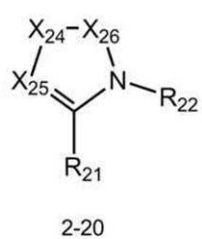
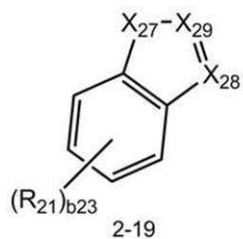
【化 4】



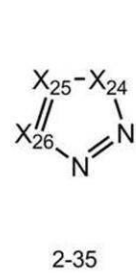
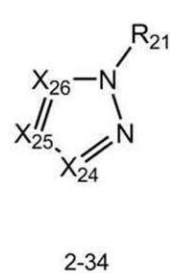
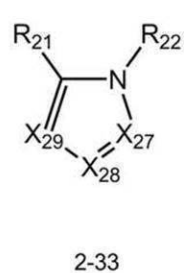
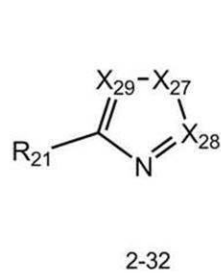
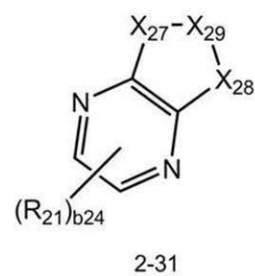
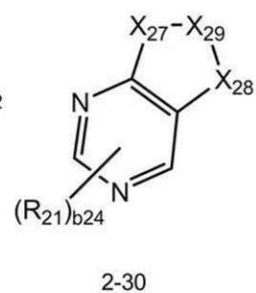
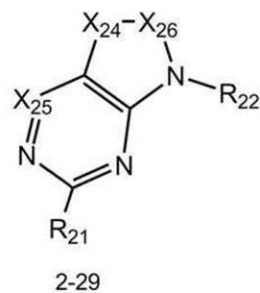
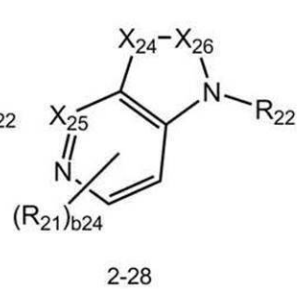
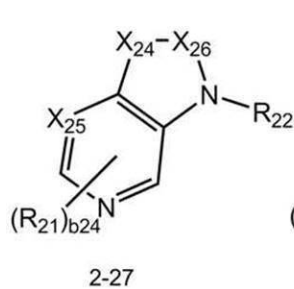
【化 5】



【化 6】



【化 7】



10

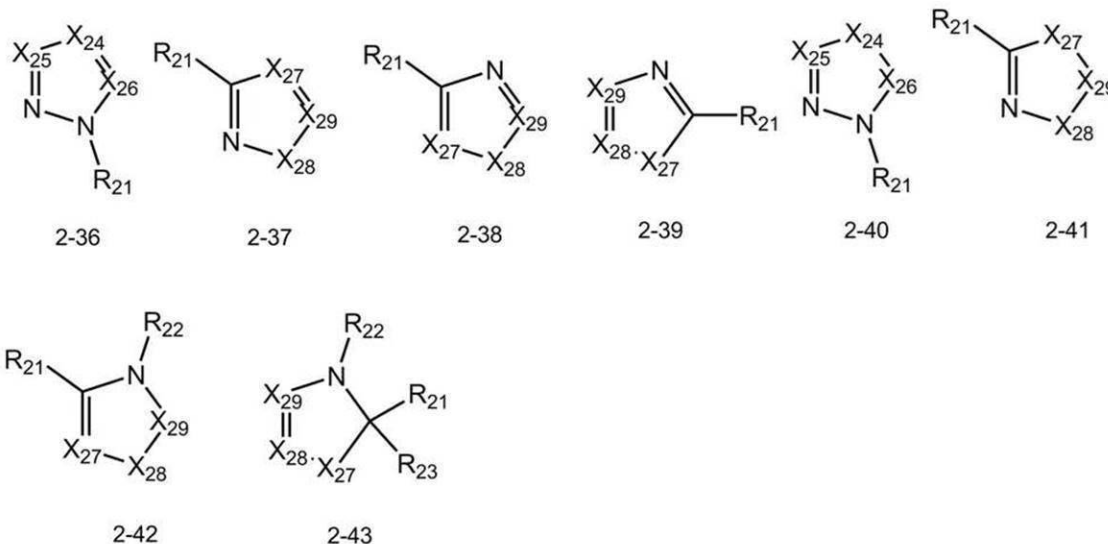
20

30

40

50

【化 8】



10

(前記化学式 2-1 ~ 化学式 2-43 において、

$X_{21} \sim X_{23}$ は、互いに独立して、 $C(R_{24})$ 及び C^* のうちから選択されるが、 $X_{21} \sim X_{23}$ のうち少なくとも 2 以上は、 C^* であり、

20

X_{24} は、 N^* であり、

X_{25} 及び X_{26} は、互いに独立して、 $C(R_{24})$ 及び C^* のうちから選択されるが、 X_{25} 及び X_{26} のうち少なくとも 1 以上は、 C^* であり、

X_{27} 及び X_{28} は、互いに独立して、 N 、 $N(R_{25})$ 及び N^* のうちから選択され、 X_{29} は、 $C(R_{24})$ 及び C^* のうちから選択されるが、i) X_{27} 及び X_{28} のうち 1 以上は、 N^* であり、 X_{29} は、 C^* であるか、あるいは ii) X_{27} 及び X_{28} は、 N^* であり、 X_{29} は、 $C(R_{24})$ であり、

$R_{21} \sim R_{25}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリールチオ基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-P(Q_1)(Q_2)$ 、 $-C(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、 $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 、及び $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ のうちから選択され、

30

b21 は、1、2 及び 3 のうちから選択され、

b22 は、1、2、3、4 及び 5 のうちから選択され、

b23 は、1、2、3 及び 4 のうちから選択され、

b24 は、1 及び 2 のうちから選択され、

* は、隣接原子との結合位置サイトである。)

【請求項 12】

A_{30} 及び A_{40} は、互いに独立して、前記化学式 2-1 ~ 化学式 2-9 のうちいずれか一つで表わされる基であることを特徴とする請求項 11 に記載の有機金属化合物。

50

【請求項 13】

X₁₁は、Nであることを特徴とする請求項 8 に記載の有機金属化合物。

【請求項 14】

Y₂₀は、Nであり、

Y₃₀及びY₄₀は、Cであることを特徴とする請求項 8 に記載の有機金属化合物。

【請求項 15】

L₁₁～L₁₄は、互いに独立して、単結合、*—O—*′、*—S—*′、*—N (R₁)—*′、*—C (R₁) (R₂)—*′、*—Si (R₁) (R₂)—*′ 及び *—B (R₁)—*′ のうちから選択されることを特徴とする請求項 8 に記載の有機金属化合物。

【請求項 16】

a₁₁は、0であり、a₁₂～a₁₄は、それぞれ1であることを特徴とする請求項 8 に記載の有機金属化合物。

【請求項 17】

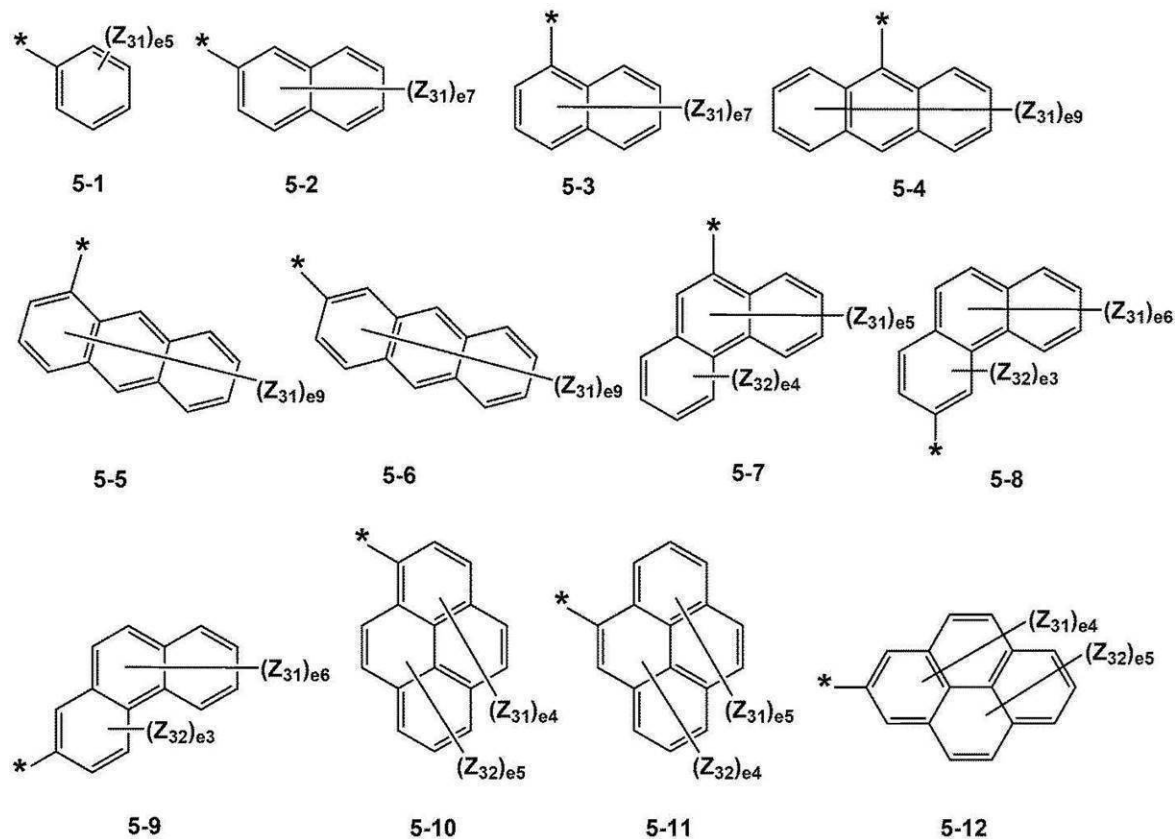
R₁、R₂、R₁₀、R₂₀、R₃₀、R₄₀及びR₅₀は、互いに独立して、水素、重水素、—F、—Cl、—Br、—I、シアノ基、C₁—C₂₀アルキル基及びC₁—C₂₀アルコキシ基；

重水素、—F、—Cl、—Br、—I、シアノ基、フェニル基及びビフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、C₁—C₂₀アルキル基及びC₁—C₂₀アルコキシ基；並びに

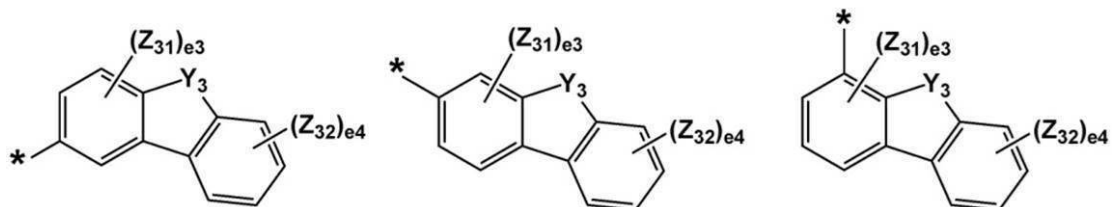
下記化学式 5-1～化学式 5-27、及び化学式 6-1～化学式 6-55 のうちいずれか一つで表わされる基；のうちから選択され、

R₁、R₂、R₁₀、R₂₀、R₃₀、R₄₀及びR₅₀のうち隣接する2以上が選択的に互いに結合して、シクロペンタン基、シクロヘキサン基、ベンゼン基、ナフチレン基、フルオレン基またはカルバゾール基を形成するか、互いに結合しないことを特徴とする請求項 8 に記載の有機金属化合物。

【化 9】



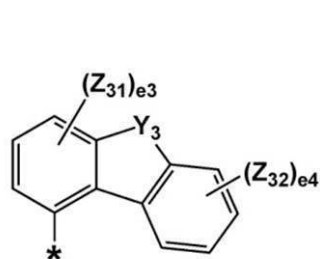
【化 1 0】



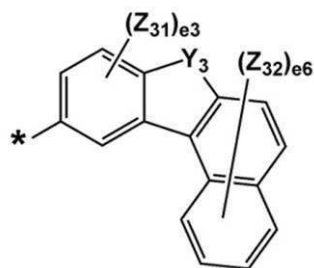
5-13

5-14

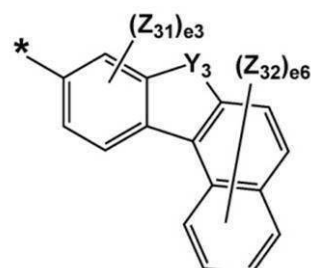
5-15



5-16

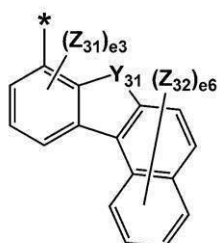


5-17

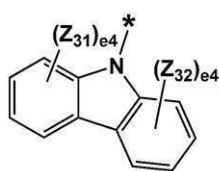


5-18

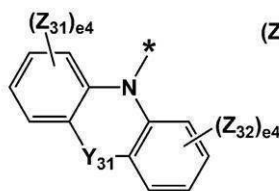
【化 1 1】



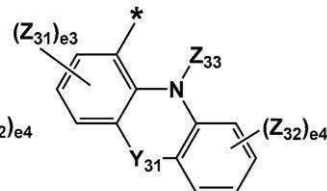
5-19



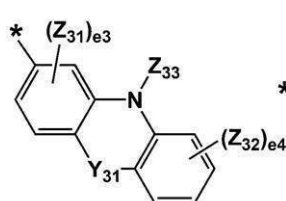
5-20



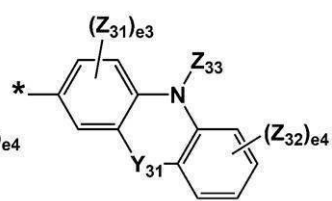
5-21



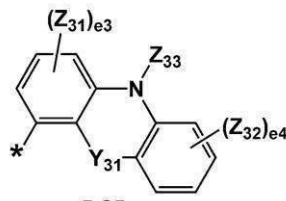
5-22



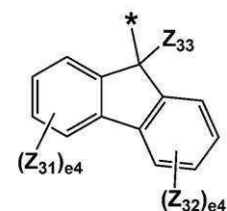
5-23



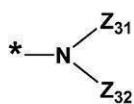
5-24



5-25



5-26



5-27

10

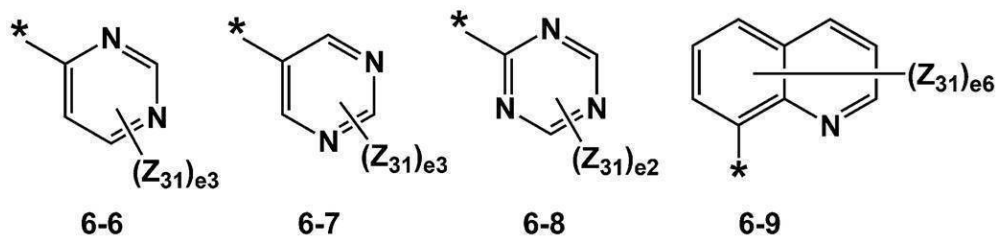
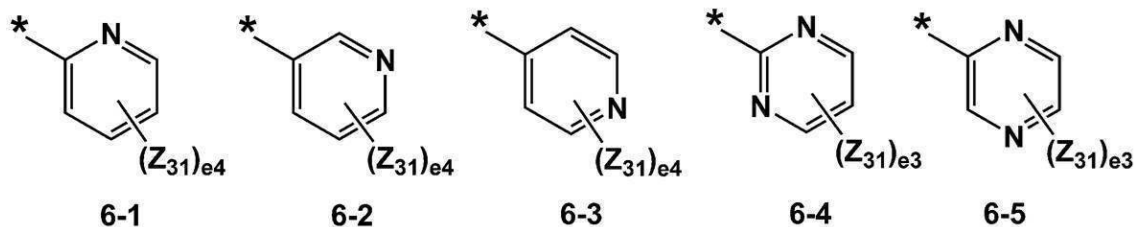
20

30

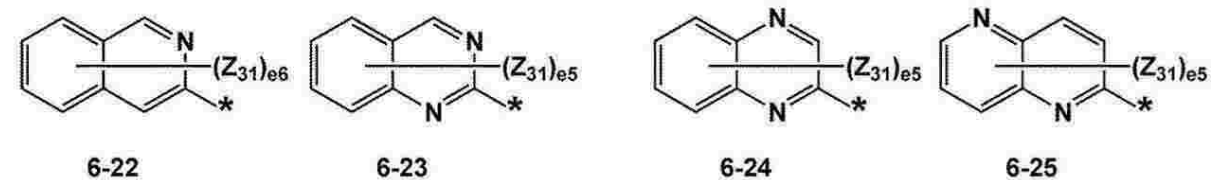
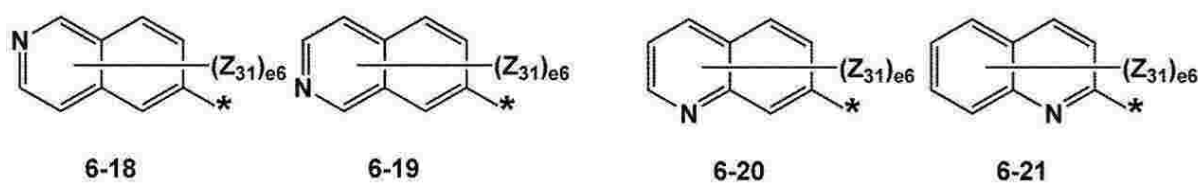
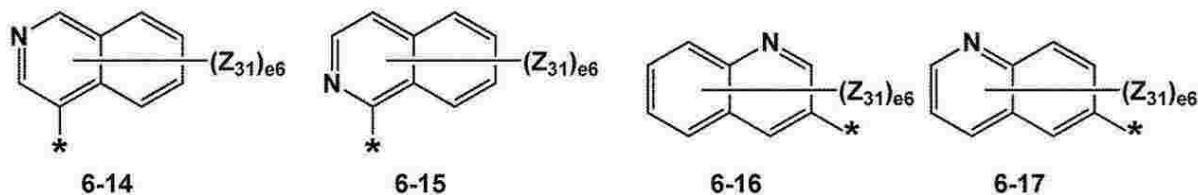
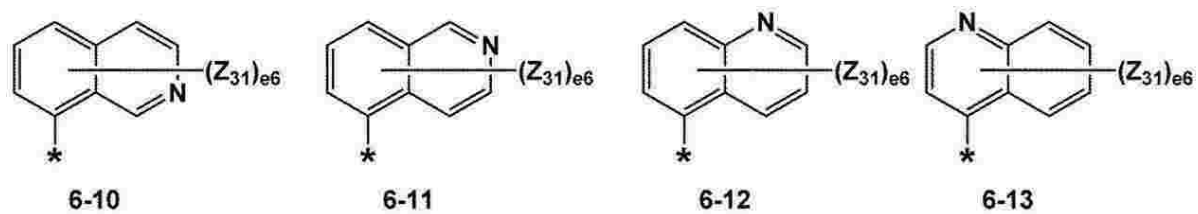
40

50

【化 1 2】



【化 1 3】



10

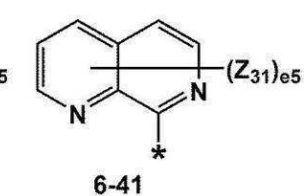
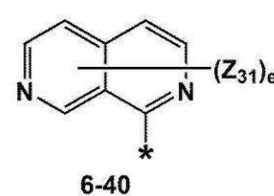
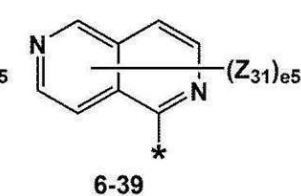
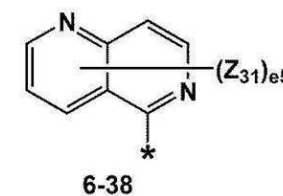
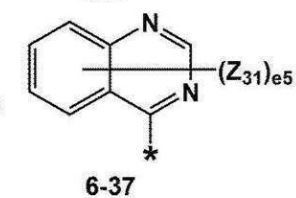
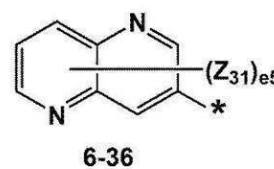
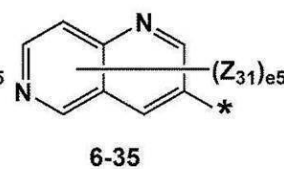
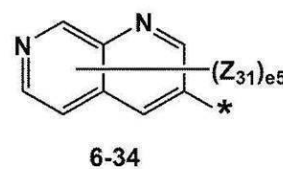
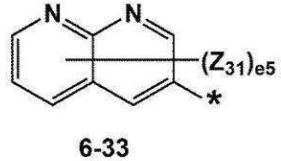
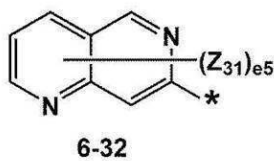
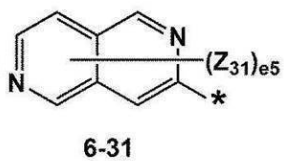
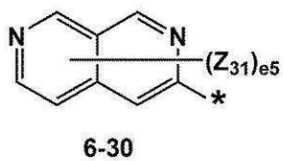
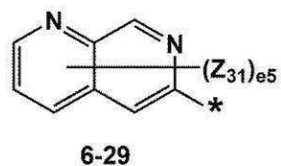
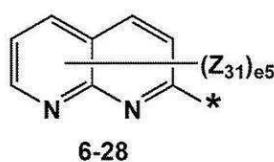
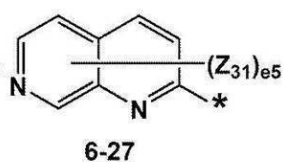
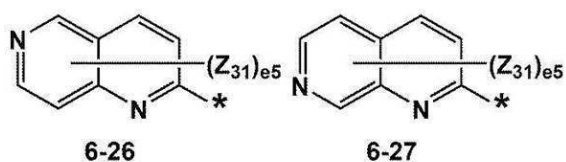
20

30

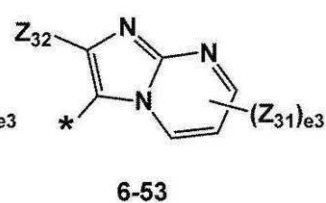
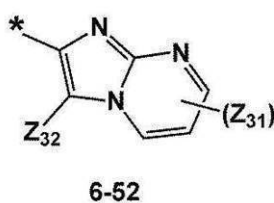
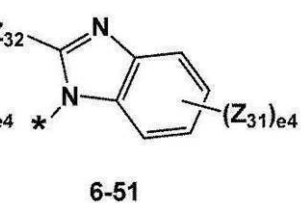
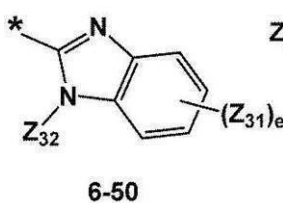
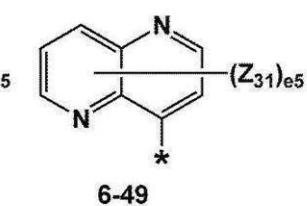
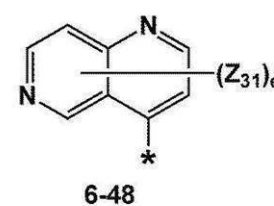
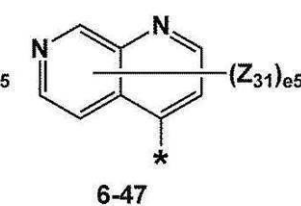
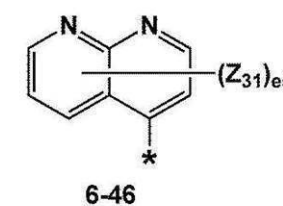
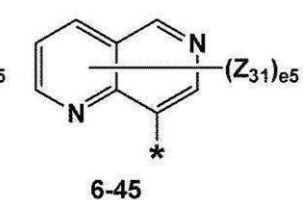
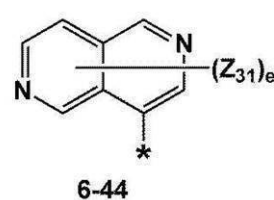
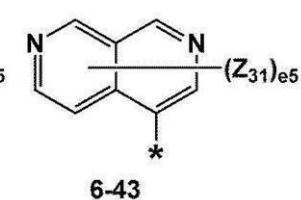
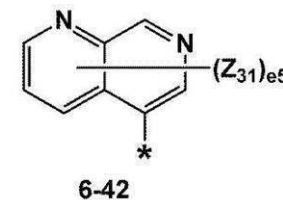
40

50

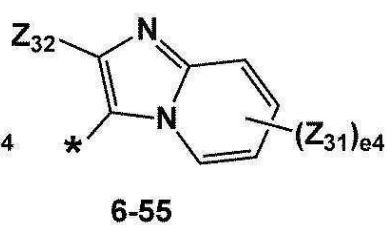
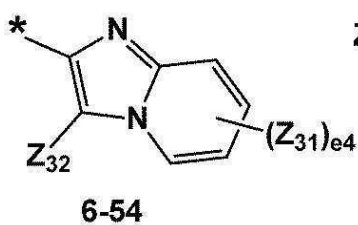
【化 1 4】



【化 1 5】



【化 1 6】



10

20

30

40

50

(前記化学式 5-1 ~ 化学式 5-27、及び化学式 6-1 ~ 化学式 6-55 において、
 Y_3 は、O、S、C (Z_{34}) (Z_{35})、N (Z_{34}) または Si (Z_{34}) (Z_{35})
 であり、

$Z_{31} \sim Z_{35}$ は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルケニル基、 C_1-C_{20} アルキニル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、トリフェリレニル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、カルバゾリル基及びトリアジニル基のうちから選択され、

e_2 は、1 または 2 であり、

e_3 は、1 ~ 3 のうちから選択された整数であり、

e_4 は、1 ~ 4 のうちから選択された整数であり、

e_5 は、1 ~ 5 のうちから選択された整数であり、

e_6 は、1 ~ 6 のうちから選択された整数であり、

e_7 は、1 ~ 7 のうちから選択された整数であり、

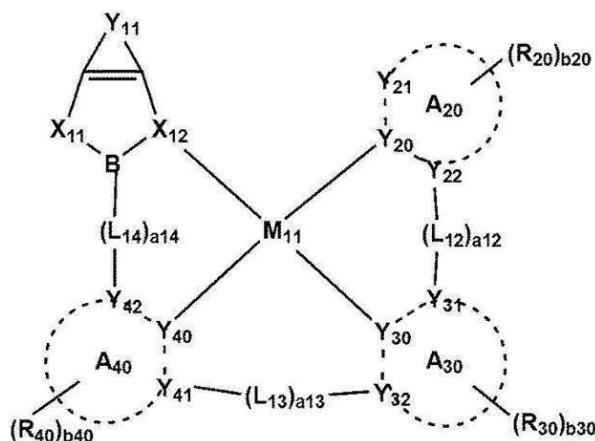
e_9 は、1 ~ 9 のうちから選択された整数であり、

* は、隣接原子との結合位置である。

【請求項 18】

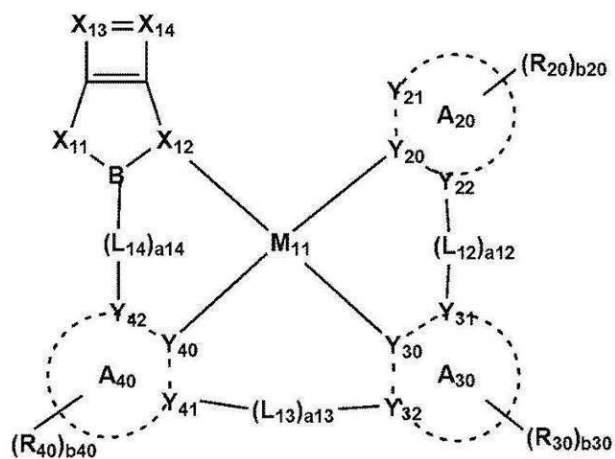
化学式 1 で表される有機金属化合物は、下記化学式 1A ~ 化学式 1G のうちから選択されたいずれか一つで表わされる化合物であることを特徴とする請求項 8 に記載の有機金属化合物。

【化 17】



... (化学式 1-A)

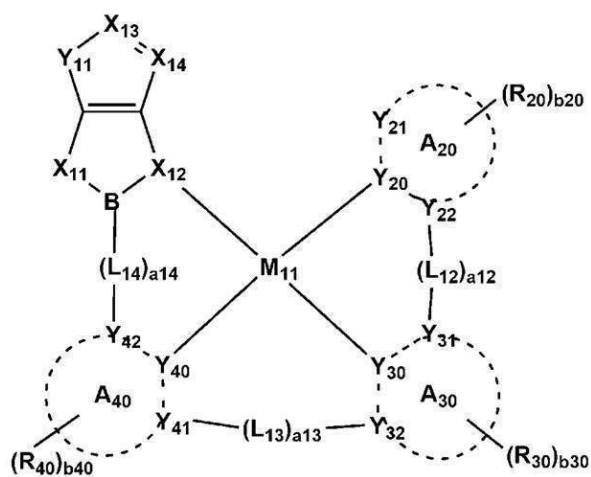
【化 1 8】



10

... (化学式 1 - B)

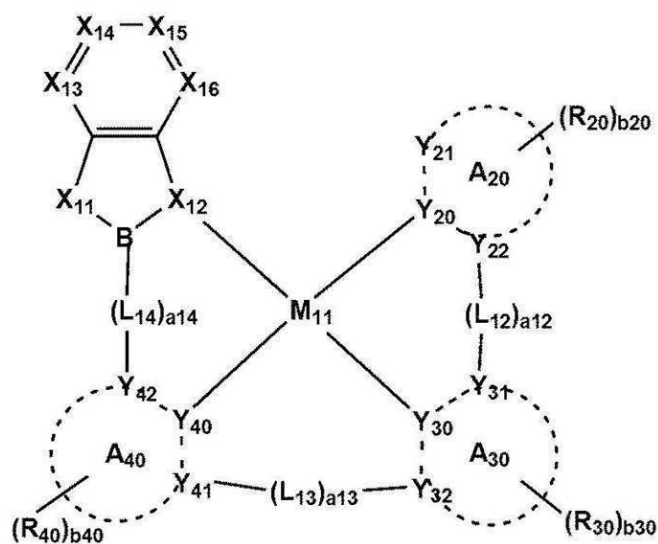
【化 1 9】



20

... (化学式 1 - C)

【化 2 0】

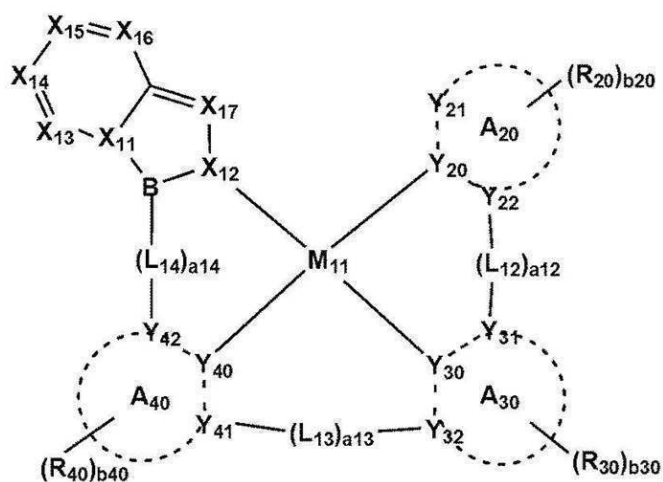


40

... (化学式 1 - D)

50

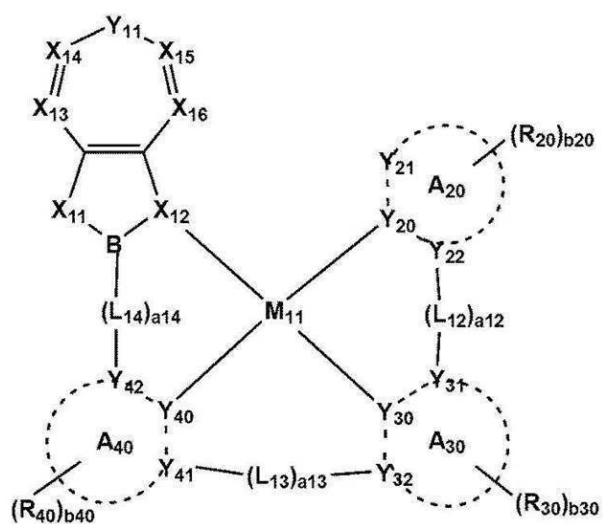
【化 2 1】



10

... (化学式 1 - E)

【化 2 2】

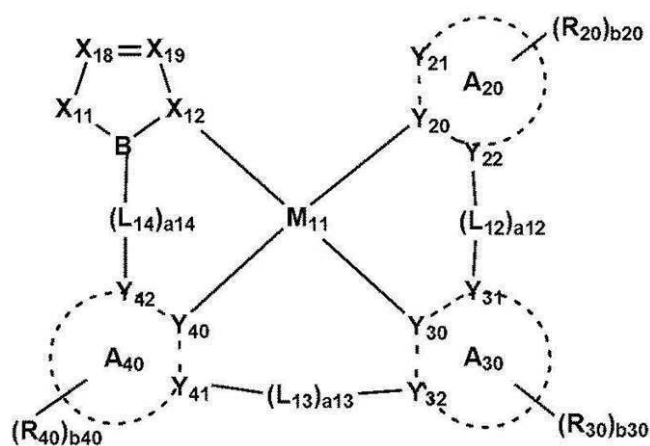


20

30

... (化学式 1 - F)

【化 2 3】



40

... (化学式 1 - G)

(前記化学式 1 A ~ 化学式 1 G において、

Y₁₁ は、O、S、N (R₁₁) または C (R₁₁) (R₁₂) であり、

50

X_{13} は、NまたはC (R_{13}) であり、 X_{14} は、NまたはC (R_{14}) であり、 X_{15} は、NまたはC (R_{15}) であり、 X_{16} は、NまたはC (R_{16}) であり、 X_{17} は、NまたはC (R_{17}) であり、 X_{18} は、NまたはC (R_{18}) であり、 X_{19} は、NまたはC (R_{19}) であり、

$R_{11} \sim R_{19}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ アルキル基、置換もしくは無置換の $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、置換もしくは無置換の $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリールチオ基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-P(Q_1)(Q_2)$ 、 $-C(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、 $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 、及び $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ のうちから選択され、

前記化学式1A～化学式1D、化学式1F、及び化学式1Gにおいて、 X_{11} がN (R_{50}) b_{50} である場合、 b_{50} は、1であり、

前記化学式1Eにおいて、 X_{11} がN (R_{50}) b_{50} である場合、 b_{50} は、0である。

【請求項19】

前記化学式1で表される有機金属化合物は、下記化学式10-1～化学式10-25のうちから選択されたいずれか一つで表わされる化合物であることを特徴とする請求項8に記載の有機金属化合物。

10

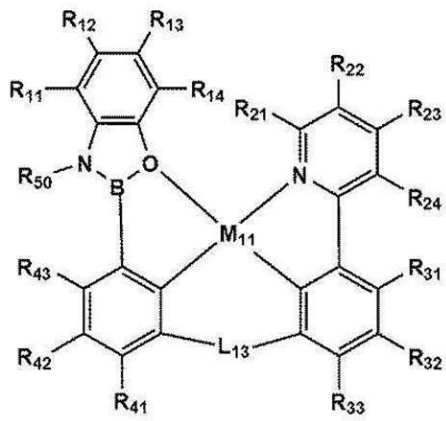
20

30

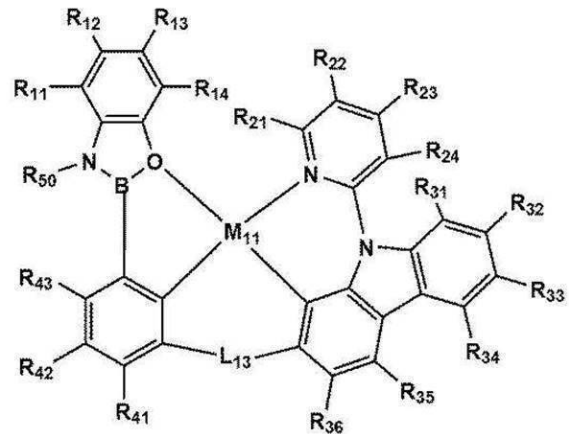
40

50

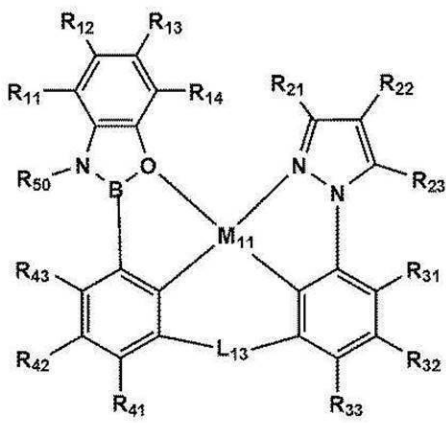
【化 2 4】



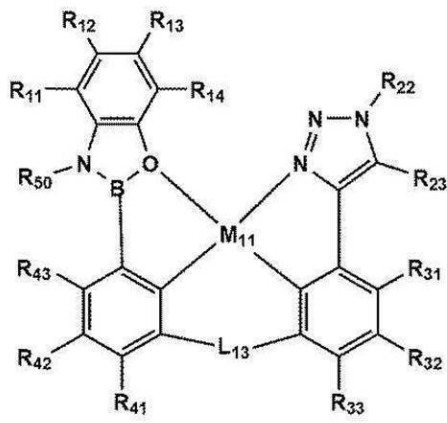
10-1



10-2



10-3



10-4

10

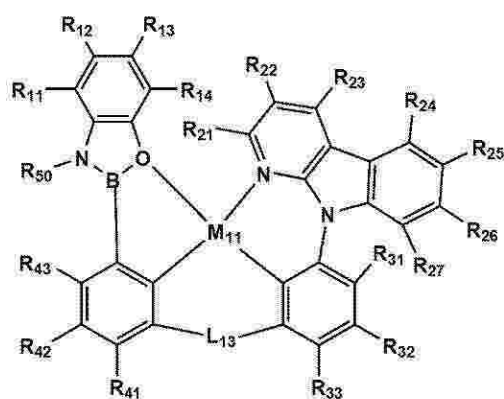
20

30

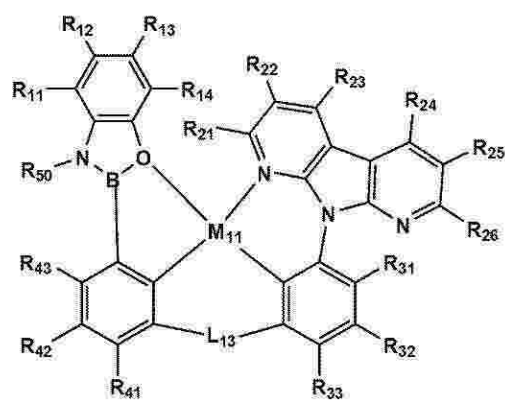
40

50

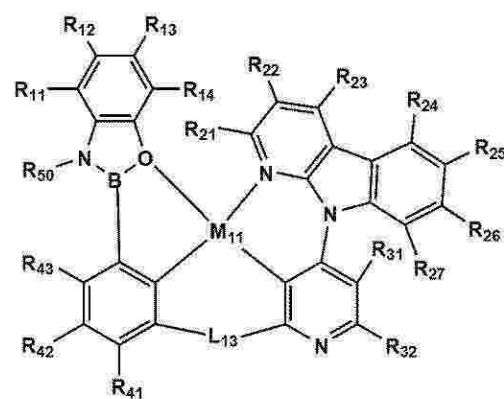
【化 2 5】



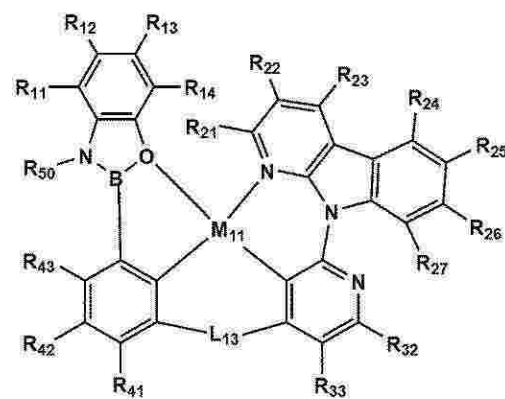
10-5



10-6



10-7



10-8

10

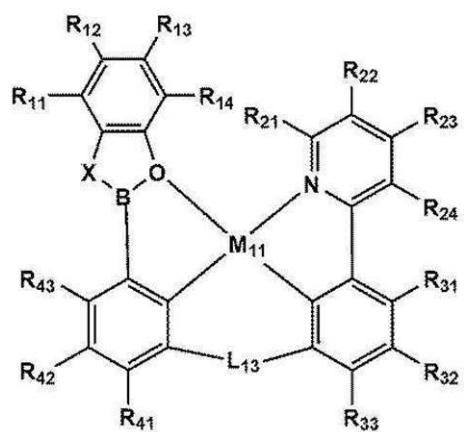
20

30

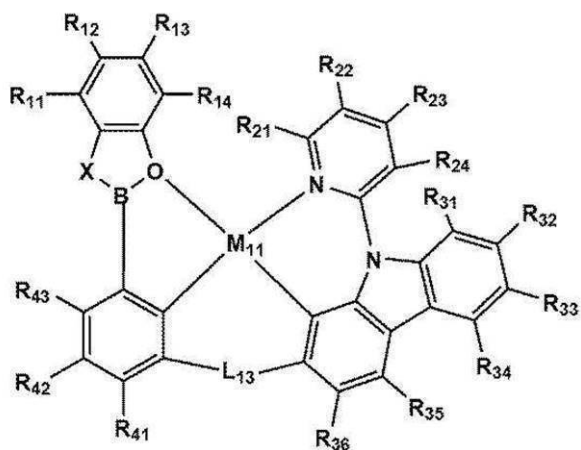
40

50

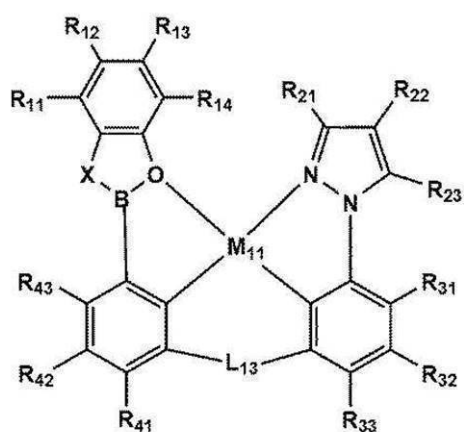
【化 2 6】



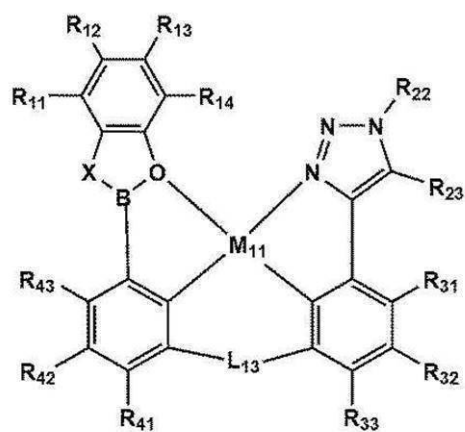
10-9



10-10



10-11



10-12

10

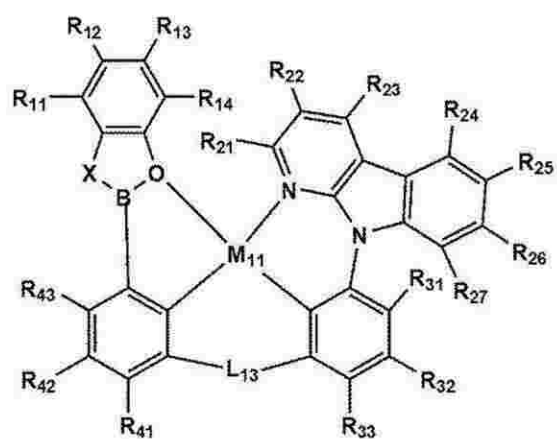
20

30

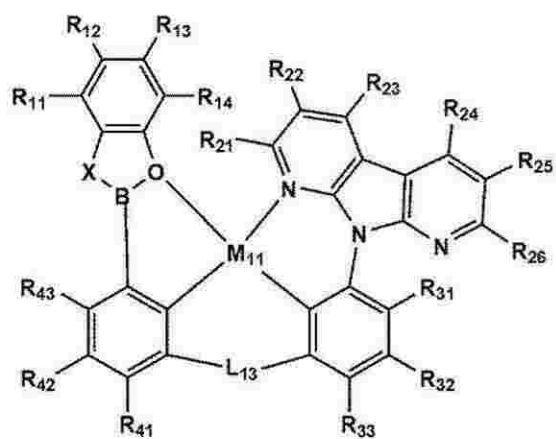
40

50

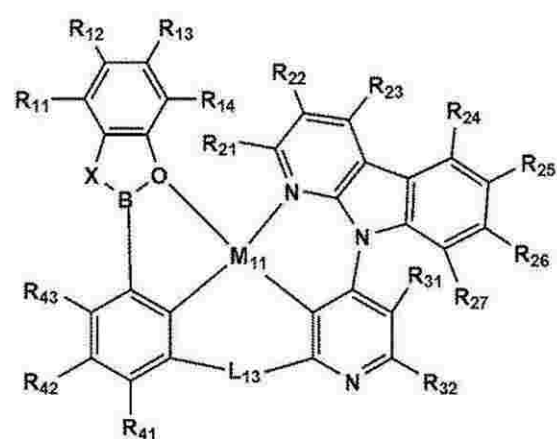
【化 2 7】



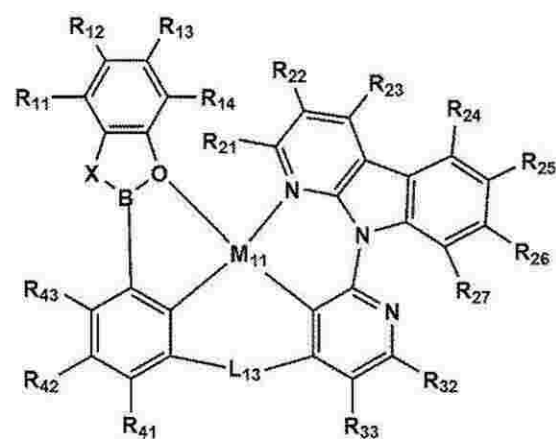
10-13



10-14



10-15



10-16

10

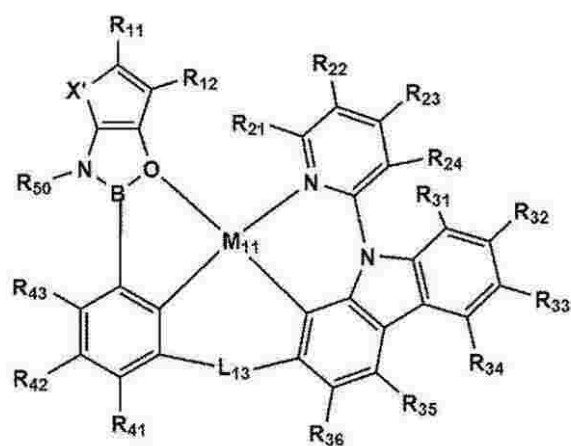
20

30

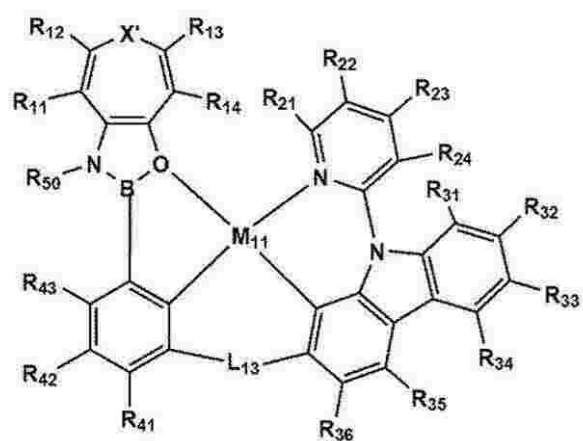
40

50

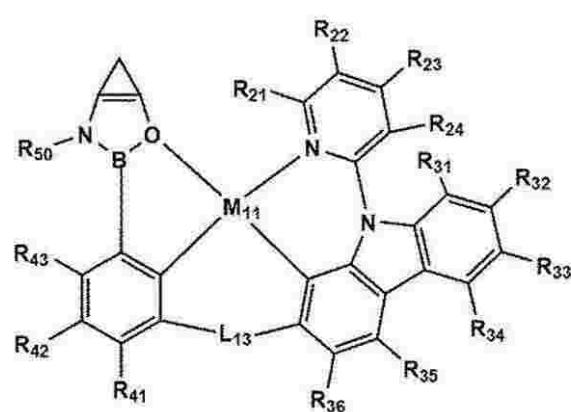
【化 2 8】



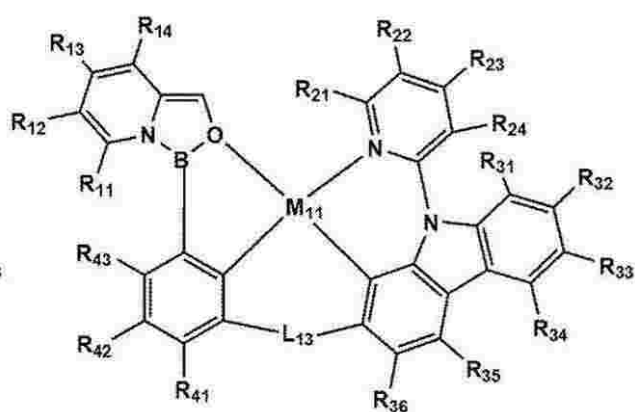
10-17



10-18

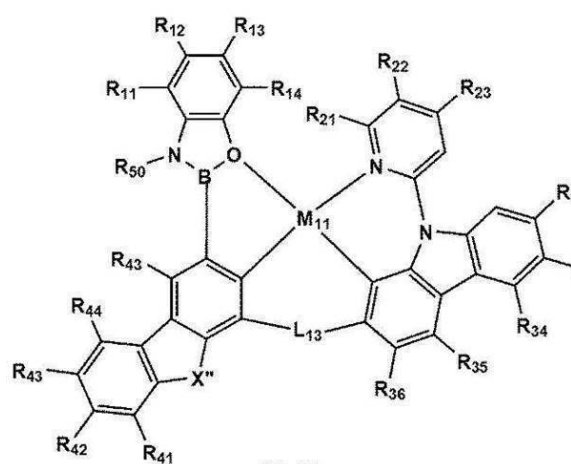


10-19

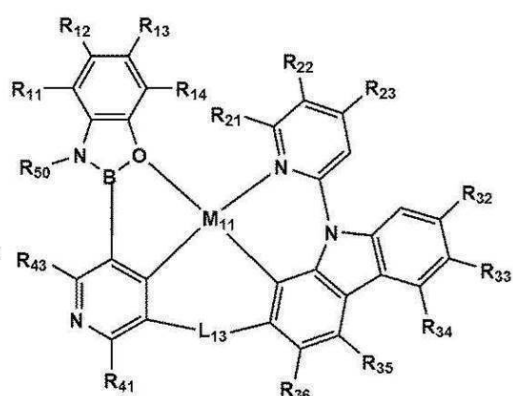


10-20

【化 2 9】



10-21



10-22

10

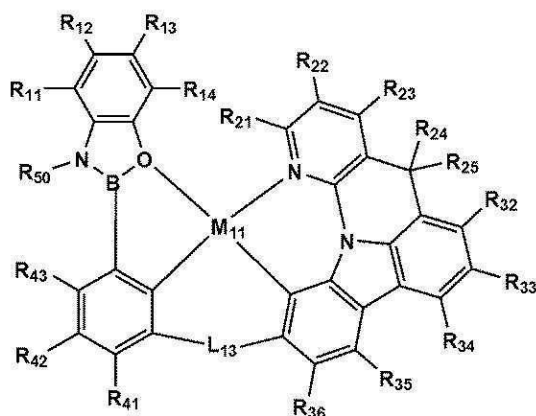
20

30

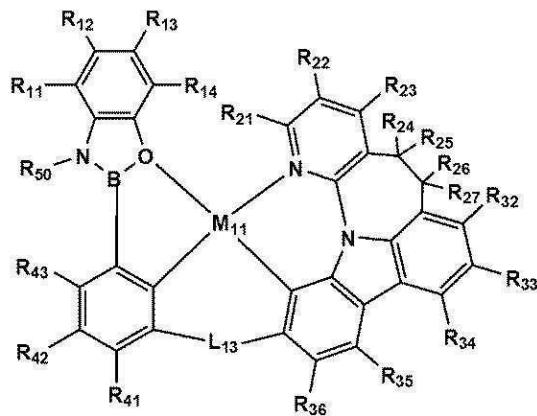
40

50

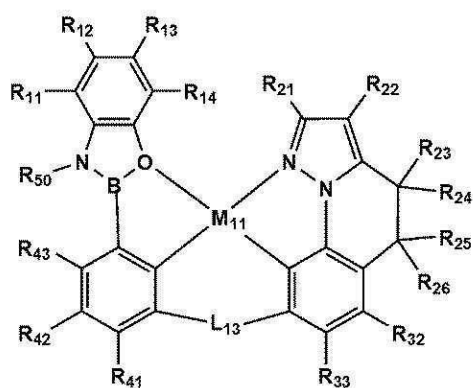
【化 3 0】



10-23



10-24



10-25

(前記化学式 10-1 ~ 化学式 10-25 において、

X、X' 及び X'' は、互いに独立して、O または S であ

R₁₁ ~ R₁₄、R₂₁ ~ R₂₇、R₃₁ ~ R₃₆、R₄₁ ~ R₄₃ は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の C₁-C₆₀ アルキル基、置換もしくは無置換の C₂-C₆₀ アルケニル基、置換もしくは無置換の C₂-C₆₀ アルキニル基、置換もしくは無置換の C₁-C₆₀ アルコキシ基、置換もしくは無置換の C₃-C₁₀ シクロアルキル基、置換もしくは無置換の C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の C₃-C₁₀ シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C₁-C₁₀ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C₆-C₆₀ アリール基、置換もしくは無置換の C₆-C₆₀ アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C₆-C₆₀ アリールチオ基、置換もしくは無置換の C₁-C₆₀ ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の C₁-C₆₀ ヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の C₁-C₆₀ ヘテロアリールチオ基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、-Si(Q₁)(Q₂)(Q₃)、-B(Q₁)(Q₂)、-N(Q₁)(Q₂)、-P(Q₁)(Q₂)、-C(=O)(Q₁)、-S(=O)(Q₁)、-S(=O)₂(Q₁)、-P(=O)(Q₁)(Q₂)、及び -P(=S)(Q₁)(Q₂) のうちから選択される。)

【請求項 20】

前記化学式 1 で表される有機金属化合物は、下記化合物 1 ~ 化合物 86 のうちから選択されることを特徴とする請求項 8 に記載の有機金属化合物。

10

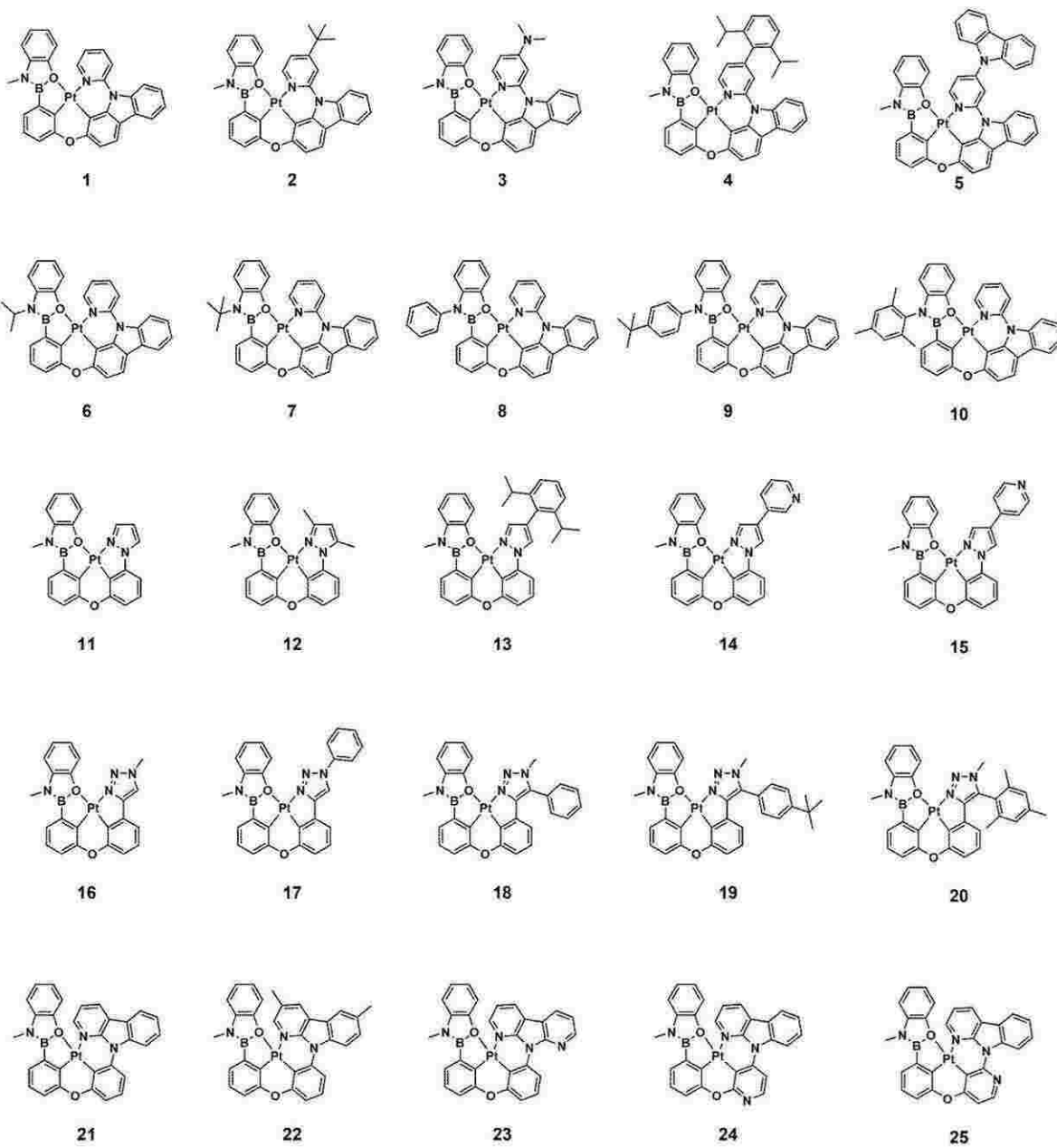
20

30

40

50

【化 3 1】



10

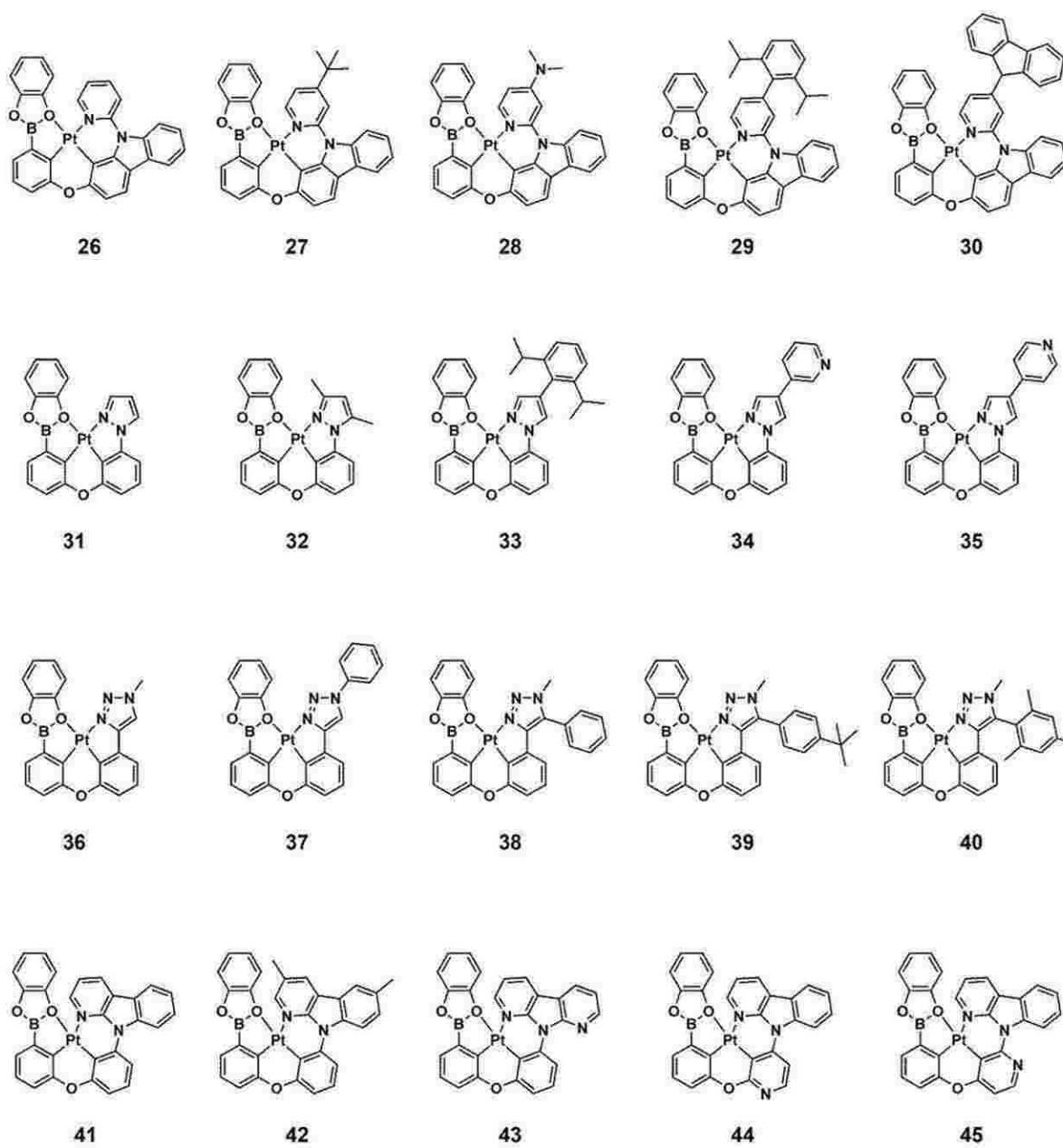
20

30

40

50

【化 3 2】



10

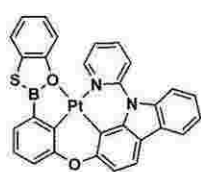
20

30

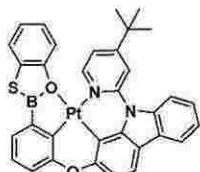
40

50

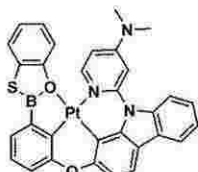
【化 3 3】



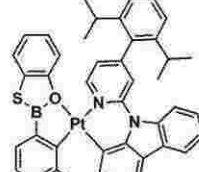
46



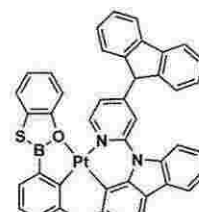
47



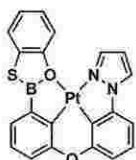
48



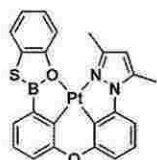
49



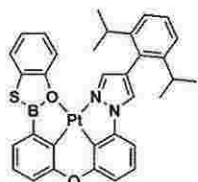
50



51



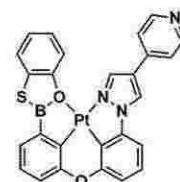
52



53



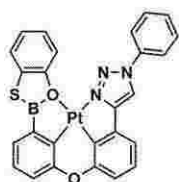
54



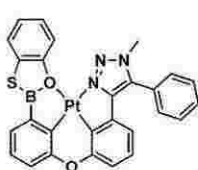
55



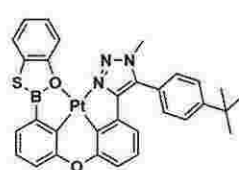
56



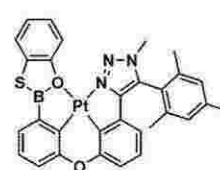
57



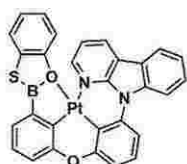
58



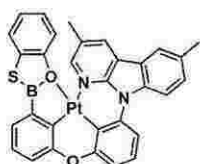
59



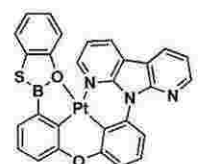
60



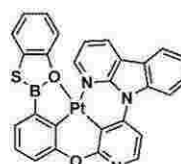
61



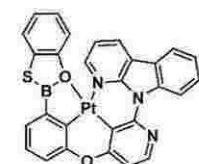
62



63



64



65

10

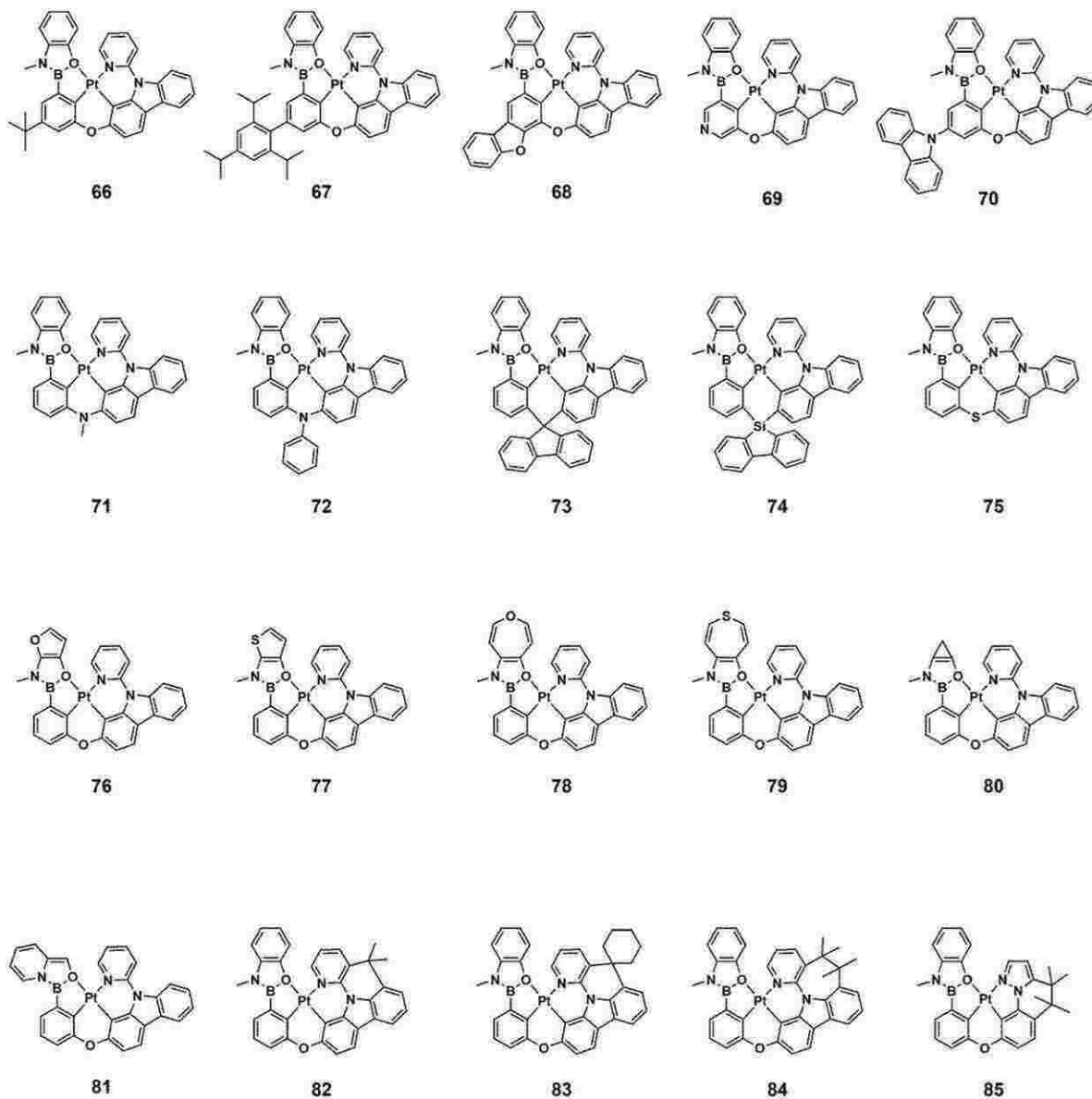
20

30

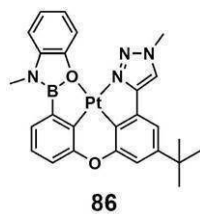
40

50

【化 3 4】



【化 3 5】



【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機金属化合物、及びそれを含む有機電界発光素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機電界発光素子（organic light emitting device）は、自発光型素子であり、従来の素子に比べ、視野角が広く、コントラストにすぐれるだけではなく、応答時間が短く、輝度、駆動電圧及び応答速度の特性がすぐれ、多色化が可能である。

【0003】

有機電界発光素子は、基板上部に第1電極が配置されており、第1電極上部に、正孔輸送領域(hole transport region)、発光層、電子輸送領域(electron transport region)及び第2電極が順次に設けられている構造を有することができる。第1電極から注入された正孔は、正孔輸送領域を経由して発光層に移動し、第2電極から注入された電子は、電子輸送領域を経由して発光層に移動する。前述の正孔及び電子のようなキャリアは、発光層領域で再結合し、励起子(exciton)を生成する。該励起子が励起状態から基底状態に変わる際に光が生成される。

【先行技術文献】

【特許文献】

10

【0004】

【文献】韓国公開特許第10-2015-0043225号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

本発明が解決しようとする課題の一つは、有機電界発光素子に用いられる新規有機金属化合物、及びそれを含む有機電界発光素子を提供することである。

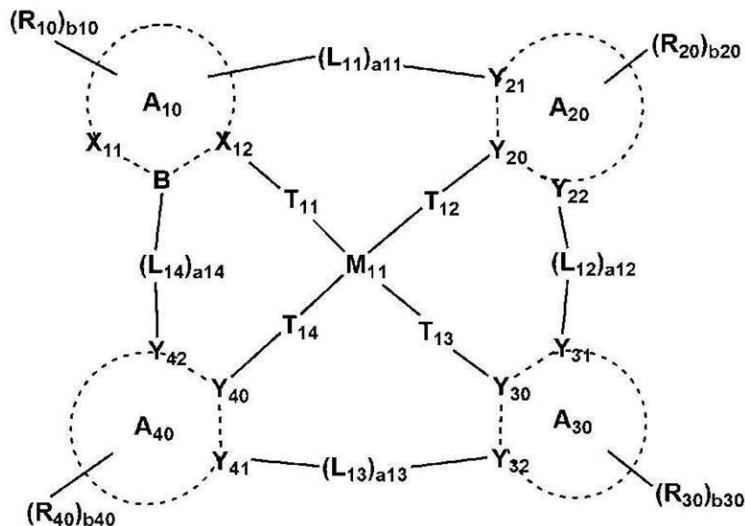
【課題を解決するための手段】

【0006】

一実施形態によれば、下記化学式1で表される有機金属化合物が提供される。

20

【化1】



30

・・・(化学式1)

化学式1において、

M₁₁は、白金(Pt)、パラジウム(Pd)、銅(Cu)、銀(Ag)、金(Au)、ロジウム(Rh)、イリジウム(Ir)、ルテニウム(Ru)、オスミウム(Os)、チタン(Ti)、ジルコニウム(Zr)、ハフニウム(Hf)、ユウロピウム(Eu)、テルビウム(Tb)及びツリウム(Tm)のうちから選択され、

40

A₁₀は、(i)5員環のヘテロ環基、あるいは(ii)C₃-C₆₀炭素環基及びC₁-C₆₀ヘテロ環基のうち少なくとも一つが縮合された5員環のヘテロ環基であり、

A₂₀、A₃₀及びA₄₀は、互いに独立して、C₅-C₆₀炭素環基及びC₁-C₆₀ヘテロ環基のうちから選択され、

X₁₁及びX₁₂は、互いに独立して、N(R₅₀)_{b50}、OまたはSであり、

Y₂₀、Y₃₀及びY₄₀は、互いに独立して、NまたはCであり、

Y₂₁、Y₂₂、Y₃₁、Y₃₂、Y₄₁及びY₄₂は、互いに独立して、NまたはCであり、

50

$T_{11} \sim T_{14}$ は、互いに独立して、配位結合、共有結合、 $*-O-*'$ 及び $*-S-*'$ のうちから選択され、

$L_{11} \sim L_{14}$ は、互いに独立して、単結合、 $*-O-*'$ 、 $*-S-*'$ 、 $*-C(R_1)(R_2)-*'$ 、 $*-C(R_1)=*'$ 、 $*=C(R_1)-*'$ 、 $*-C(R_1)=C(R_2)-*'$ 、 $*-C(=O)-*'$ 、 $*-C(=S)-*'$ 、 $*-C \equiv C-*'$ 、 $*-R_1(R_2)-*'$ 、 $*-N(R_1)-*'$ 、 $*-P(R_1)-*'$ 、 $*-Si(R_1)(R_2)-*'$ 、 $*-P(R_1)(R_2)-*'$ 及び $*-Ge(R_1)(R_2)-*'$ のうちから選択され、

$a_{11} \sim a_{14}$ は、互いに独立して、0、1、2、3、4及び5のうちから選択され、

R_1 、 R_2 、 R_{10} 、 R_{20} 、 R_{30} 、 R_{40} 及び R_{50} は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリールチオ基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-P(Q_1)(Q_2)$ 、 $-C(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、 $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 、及び $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ のうちから選択され、

R_1 、 R_2 、 R_{10} 、 R_{20} 、 R_{30} 、 R_{40} 及び R_{50} のうち隣接する2以上が選択的に互いに結合し、置換もしくは無置換の C_5-C_{60} 炭素環基、または置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロ環基を形成することができ、

b_{10} 、 b_{20} 、 b_{30} 及び b_{40} は、互いに独立して、1、2、3、4、5、6、7及び8のうちから選択され、

b_{50} は、0または1であり、

$*$ 及び $*'$ は、隣接原子との結合位置であり、

前述の置換された C_1-C_{60} アルキル基、置換された C_2-C_{60} アルケニル基、置換された C_2-C_{60} アルキニル基、置換された C_1-C_{60} アルコキシ基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換された C_6-C_{60} アリール基、置換された C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換された C_6-C_{60} アリールチオ基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基は、

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$ 、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-B(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-C(=O)(Q_{11})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{11})$ 及び $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ

10

20

30

40

50

基；

C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$ 、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-B(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-C(=O)(Q_{21})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{21})$ 及び $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択され、

前述の $Q_1 \sim Q_3$ 、 $Q_{11} \sim Q_{13}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{23}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリールオキシ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリールチオ基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、重水素・ $-F$ 及びシアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換された C_1-C_{60} アルキル基、重水素・ $-F$ 及びシアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換された C_6-C_{60} アリール基、ビフェニル基、及びターフェニル基のうちから選択される。

【0007】

他の実施形態によれば、第1電極と、第1電極に対向した第2電極と、第1電極と第2電極との間に介在された、発光層を含む有機層と、を含み、

前述の化学式1で表される有機金属化合物を1種以上含む有機電界発光素子が提供される。

【発明の効果】

【0008】

本発明の一実施形態に係る有機金属化合物を含む有機電界発光素子は、低駆動電圧、高輝度、高効率、高色純度及び長寿命を有することができる。

【図面の簡単な説明】

【0009】

【図1】一実施形態による有機電界発光素子の構造を概略的に示した図面である。

【図2】一実施形態による有機電界発光素子の構造を概略的に示した図面である。

【図3】一実施形態による有機電界発光素子の構造を概略的に示した図面である。

【図4】一実施形態による有機電界発光素子の構造を概略的に示した図面である。

【発明を実施するための形態】

【0010】

〔置換基の一般的な定義〕

本明細書において、 C_1-C_{60} アルキル基は、炭素数1～60の直鎖状または分枝状の脂肪族炭化水素一価基を意味し、具体的な例には、メチル基、エチル基、プロピル基、イソブチル基、sec-ブチル基、tert-ブチル基、ペンチル基、iso-アミル基、ヘキシル基などが含まれる。本明細書において、 C_1-C_{60} アルキレン基は、前述の C_1-C_{60} アルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

〔0011〕

本明細書において、 C_2-C_{60} アルケニル基は、前述の C_2-C_{60} アルキル基の中間または末端に、1以上の炭素二重結合を含む炭化水素基を意味し、その具体的な例には、エテニル基、プロペニル基、ブテニル基などが含まれる。本明細書において、 C_2-C_{60} アルケニレン基は、前述の C_2-C_{60} アルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

10

〔0012〕

本明細書において、 C_2-C_{60} アルキニル基は、前述の C_2-C_{60} アルキル基の中間または末端に、1以上の炭素三重結合を含む炭化水素基を意味し、その具体的な例には、エチニル基、プロピニル基などが含まれる。本明細書において、 C_2-C_{60} アルキニレン基は、前述の C_2-C_{60} アルキニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

〔0013〕

本明細書において、 C_1-C_{60} アルコキシ基は、 $-OA_{101}$ （ここで、 A_{101} は、前述の C_1-C_{60} アルキル基である）の化学式を有する一価基を意味し、その具体的な例には、メトキシ基、エトキシ基、イソプロピルオキシ基などが含まれる。

20

〔0014〕

本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルキル基は、 C_3-C_{10} 一価飽和炭化水素単環基を意味し、その具体例には、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、シクロヘプチル基などが含まれる。本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルキレン基は、前述の C_3-C_{10} シクロアルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

〔0015〕

本明細書において、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基は、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含む C_1-C_{10} 一価単環基を意味し、その具体例には、1,2,3,4-オキサトリアゾリジニル基、テトラヒドロフラニル基、テトラヒドロチオフエニル基などが含まれる。本明細書において、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基は、前述の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基と同一構造を有する二価基を意味する。

30

〔0016〕

本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基は、 C_3-C_{10} 一価単環基であり、環内に少なくとも1つの二重結合を有するが、芳香族性 (aromaticity) を有さない基を意味し、その具体例には、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、シクロヘプテニル基などが含まれる。本明細書において、 C_3-C_{10} シクロアルケニレン基は、前述の C_3-C_{10} シクロアルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

40

〔0017〕

本明細書において、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基は、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含む C_1-C_{10} 一価単環基であり、環内に少なくとも1つの二重結合を有する。 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基の具体例には、4,5-ジヒドロ-1,2,3,4-オキサトリアゾリル基、2,3-ジヒドロフラニル基、2,3-ジヒドロチオフエニル基などが含まれる。本明細書において、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基は、前述の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基と同一構造を有する二価基を意味する。

〔0018〕

本明細書において、 C_6-C_{60} アリール基は、 C_6-C_{60} 炭素環芳香族系を有する一

50

価基を意味し、 C_6-C_{60} アリーレン基は、 C_6-C_{60} 炭素環芳香族系を有する二価基を意味する。 C_6-C_{60} アリール基の具体例には、フェニル基、ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、ピレニル基、クリセニル基などを含まれる。前述の C_6-C_{60} アリール基及び C_6-C_{60} アリーレン基が2以上の環を含む場合、該2以上の環は、互いに縮合されてもよい。

【0019】

本明細書において、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基は、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、 C_1-C_6 ヘテロ環芳香族系を有する一価基を意味し、 C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基は、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を環形成原子として含み、 C_1-C_6 ヘテロ環芳香族系を有する二価基を意味する。 C_1-C_{60} ヘテロアリール基の具体例には、ピリジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基などが含まれる。 C_1-C_{60} ヘテロアリール基及び C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基が2以上の環を含む場合、該2以上の環は、互いに縮合されてもよい。

【0020】

本明細書において、 C_6-C_{60} アリールオキシ基は、 $-OA_{102}$ （ここで、 A_{102} は、前述の C_6-C_{60} アリール基である）を示し、 C_6-C_{60} アリールチオ基は、 $-SA_{103}$ （ここで、 A_{103} は、前述の C_6-C_{60} アリール基である）を示す。

【0021】

本明細書において、一価非芳香族縮合多環基は、2以上の環が互いに縮合されており、環形成原子として炭素のみを含み、分子全体が非芳香族性（non-aromaticity）を有する一価基（例えば、炭素数8～60である）を意味する。一価非芳香族縮合多環基の具体例には、フルオレニル基などが含まれる。本明細書において、二価非芳香族縮合多環基は、前述の一価非芳香族縮合多環基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0022】

本明細書において、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基は、2以上の環が互いに縮合されており、環形成原子として炭素以外に、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を含み、分子全体が非芳香族性を有する一価基（例えば、炭素数1～60である）を意味する。一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の具体例には、カルバゾリル基などが含まれる。本明細書において、二価非芳香族ヘテロ縮合多環基は、前述の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基と同一構造を有する二価基を意味する。

【0023】

本明細書において、 C_4-C_{60} 炭素環基とは、環形成原子として炭素のみを含む炭素数4～60の単環または多環基を意味する。 C_4-C_{60} 炭素環基は、芳香族炭素環基または非芳香族炭素環基である。 C_4-C_{60} 炭素環基は、ベンゼンのような環、フェニル基のような一価基、またはフェニレン基のような二価基であってもよい。また、 C_4-C_{60} 炭素環基に結合された置換基の個数により、 C_4-C_{60} 炭素環基は、三価基または四価基でもあるというように、多様な変形が可能である。

【0024】

本明細書において、 C_2-C_{60} ヘテロ環基とは、前述の C_4-C_{60} 炭素環基と同一構造を有するが、環形成原子として、炭素（炭素数は、2～60である）以外に、N、O、Si、P及びSのうちから選択された少なくとも1つのヘテロ原子を含む基を意味する。

【0025】

本明細書において、前述の置換された C_4-C_{60} 炭素環基、置換された C_2-C_{60} ヘテロ環基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキレン基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニレン基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基、置換された C_6-C_{60} アリーレン基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基、置換された二価非芳香族縮合多環基、置換された二価非芳香族ヘテロ縮合多環基、置換された C_1-C_{60} アルキル基、置換された C_2-C_{60} アルケ

ニル基、置換された C_2-C_{60} アルキニル基、置換された C_1-C_{60} アルコキシ基、置換された C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換された C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換された C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換された C_6-C_{60} アリール基、置換された C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換された C_6-C_{60} アリールチオ基、置換された C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換された一価非芳香族縮合多環基、及び置換された一価非芳香族ヘテロ縮合多環基の置換基は、

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

10

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{11})(Q_{12})(Q_{13})$ 、 $-N(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-B(Q_{11})(Q_{12})$ 、 $-C(=O)(Q_{11})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{11})$ 及び $-P(=O)(Q_{11})(Q_{12})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基及び C_1-C_{60} アルコキシ基；

20

C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{21})(Q_{22})(Q_{23})$ 、 $-N(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-B(Q_{21})(Q_{22})$ 、 $-C(=O)(Q_{21})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{21})$ 及び $-P(=O)(Q_{21})(Q_{22})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_6-C_{60} アリールオキシ基、 C_6-C_{60} アリールチオ基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基及び一価非芳香族ヘテロ縮合多環基；並びに

30

$-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択され、

40

前述の $Q_{11} \sim Q_{13}$ 、 $Q_{21} \sim Q_{23}$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{60} アルキル基、 C_2-C_{60} アルケニル基、 C_2-C_{60} アルキニル基、 C_1-C_{60} アルコキシ基、 C_3-C_{10} シクロアルキル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、 C_3-C_{10} シクロアルケニル基、 C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、 C_6-C_{60} アリール基、 C_1-C_{60} ヘテロアリール基、一価非芳香族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、重水素、 $-F$ 及びシアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換された C_1-C_{60} アルキル基、重水素、 $-F$ 及びシアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換された C_6-C_{60} アリール基、ビフェリニル基、及びターフェニリル基のうちから選択される。

50

【0026】

本明細書において、「Ph」は、フェニル基を意味し、「Me」は、メチル基を意味し、「Et」は、エチル基を意味し、「ter-Bu」または「Bu^t」は、tert-ブチル基を意味し、「OMe」は、メトキシ基を意味する。

【0027】

本明細書において、「ビフェニリル基」は、「フェニル基で置換されたフェニル基」を意味する。「ビフェニリル基」は、置換基が「C₆-C₆₀アリール基」である「置換されたフェニル基」に属する。

【0028】

本明細書において、「ターフェニリル基」は、「ビフェニリル基で置換されたフェニル基」を意味する。「ターフェニリル基」は、置換基が「C₆-C₆₀アリール基で置換されたC₆-C₆₀アリール基」である「置換されたフェニル基」に属する。

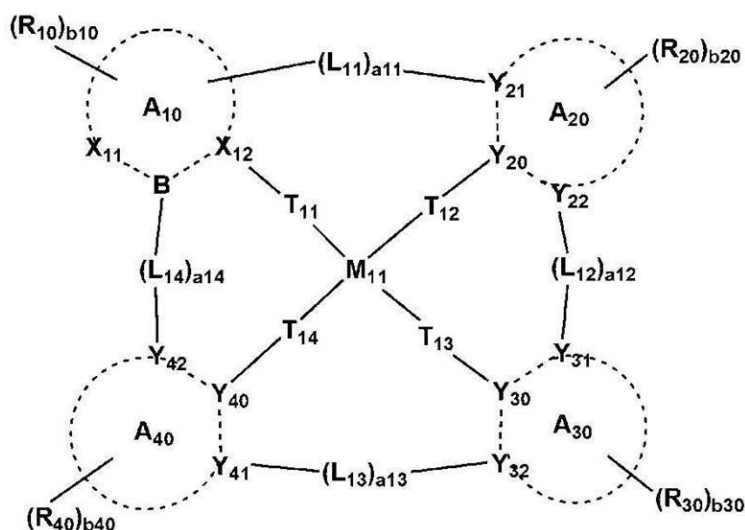
【0029】

本明細書において、*、*’及び*”は、他の定義がない限り、当該化学式において、隣接原子との結合位置を意味する。

【0030】

本発明の一実施形態に係る有機金属化合物は、下記化学式1で表される。

【化2】



・・・(化学式1)

【0031】

化学式1において、M₁₁は、白金(Pt)、パラジウム(Pd)、銅(Cu)、銀(Ag)、金(Au)、ロジウム(Rh)、イリジウム(Ir)、ルテニウム(Ru)、オスミウム(Os)、チタン(Ti)、ジルコニウム(Zr)、ハフニウム(Hf)、ユウロピウム(Eu)、テルビウム(Tb)及びツリウム(Tm)のうちから選択される。

【0032】

一実施形態によれば、M₁₁は、Pt、Pd、Cu、Ag、Au、Rh、Ir、Ru及びOsのうちから選択されてもよい。例えば、M₁₁は、Ptであってもよい。

【0033】

化学式1において、A₁₀は、(i) 5員環のヘテロ環基、あるいは(ii) C₃-C₆₀炭素環基及びC₁-C₆₀ヘテロ環基のうち少なくとも一つが縮合された5員環のヘテロ環基である。

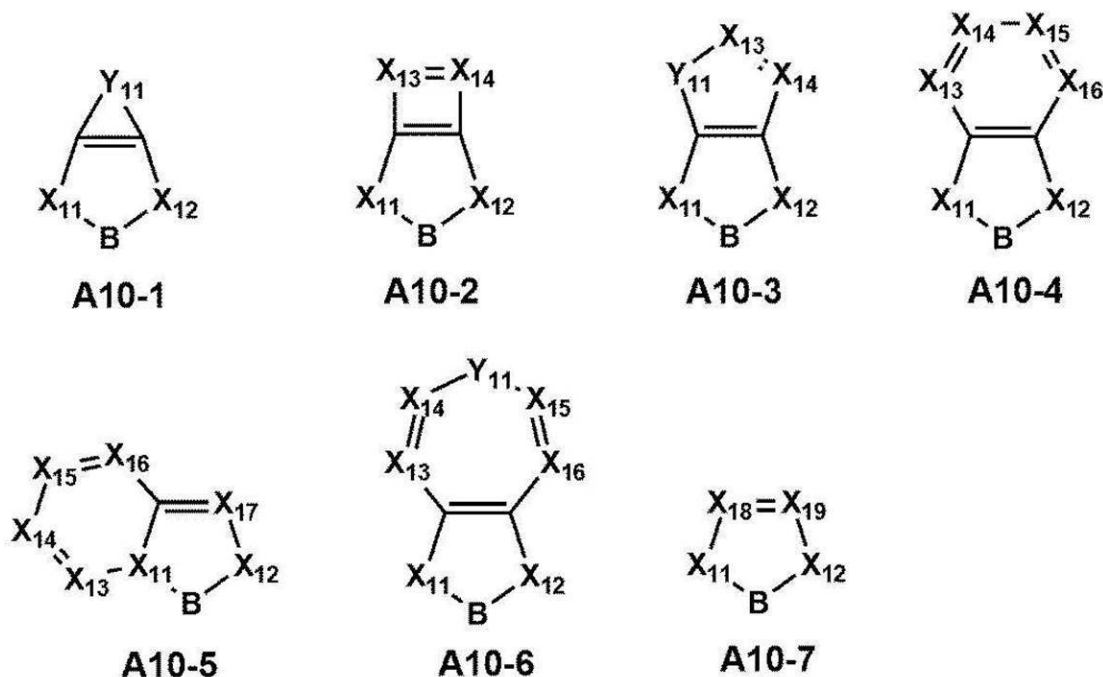
【0034】

一実施形態によれば、A₁₀は、(i) 5員環のヘテロ環基、(ii) 6員環の炭素環基が縮合された5員環のヘテロ環基、あるいは(iii) 6員環のヘテロ環基が縮合された5員環のヘテロ環基であってもよい。

【0035】

一実施形態によれば、A₁₀は、下記化学式A₁₀-1～化学式A₁₀-7のうちから選択されたいずれか一つで表わされる基であってもよい。

【化3】



10

20

【0036】

化学式A₁₀-1～化学式A₁₀-7において、

X₁₁及びX₁₂は、それぞれ本明細書に記載されたところと同一であり、

Y₁₁は、O、S、N(R₁₁)またはC(R₁₁)(R₁₂)であり、

X₁₃は、NまたはC(R₁₃)であり、X₁₄は、NまたはC(R₁₄)であり、X₁₅は、NまたはC(R₁₅)であり、X₁₆は、NまたはC(R₁₆)であり、X₁₇は、NまたはC(R₁₇)であり、X₁₈は、NまたはC(R₁₈)であり、X₁₉は、NまたはC(R₁₉)であり、

30

R₁₁～R₁₉についての説明は、互いに独立して、後述するR₁₀についての説明を参照する。

【0037】

化学式1において、A₂₀、A₃₀及びA₄₀は、互いに独立して、C₅～C₆₀炭素環基及びC₁～C₆₀ヘテロ環基のうちから選択される。

【0038】

一実施形態によれば、A₂₀、A₃₀及びA₄₀は、互いに独立して、ベンゼン環、ナフタレン環、アントラセン環、フェナントレン環、トリフェニレン環、ピレン環、クリセン環、シクロペンタジエン環、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン環、フラン環、チオフェン環、シロール環、インデン環、プオレン環、インドール環、カルバゾール環、ベンゾフラン環、ジベンゾフラン環、ベンゾチオフェン環、ジベンゾチオフェン環、ベンゾシロール環、ジベンゾシロール環、インデノピリジン環、インドロピリジン環、ベンゾフロピリジン環、ベンゾチエノピリジン環、ベンゾシロロピリジン環、インデノピリミジン環、インドロピリミジン環、ベンゾフロピリミジン環、ベンゾチエノピリミジン環、ベンゾシロロピリミジン環、ジヒドロピリジン環、ピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、ピリダジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、キノキサリン環、キナゾリン環、フェナントロリン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、2,3-ジヒドロイミダゾール環、トリアゾール環、2,3-ジヒドロトリアゾール環、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、オキサジアゾール環、チ

40

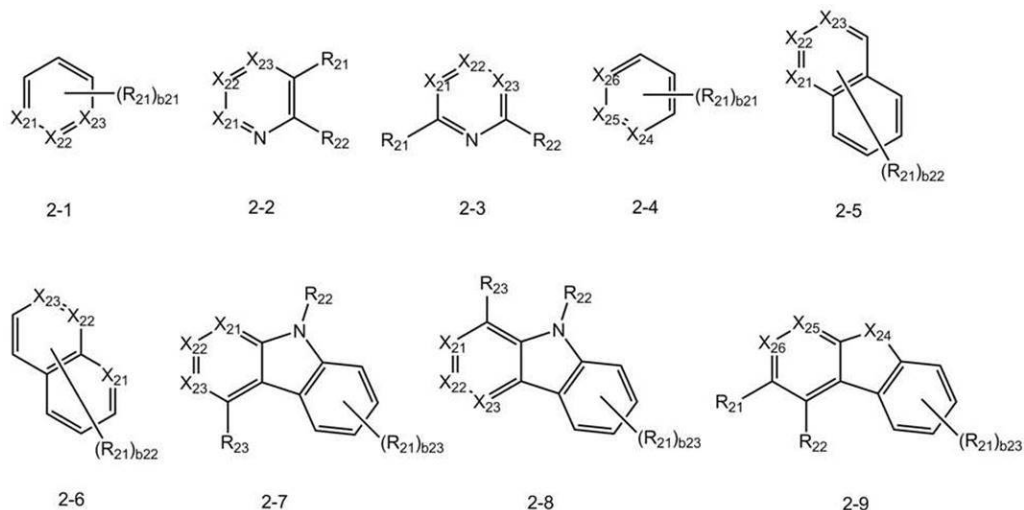
50

アジアゾール環、ベンゾピラゾール環、ベンズイミダゾール環、2,3-ジヒドロベンズイミダゾール環、イミダゾピリジン環、2,3-ジヒドロイミダゾピリジン環、イミダゾピリミジン環、2,3-ジヒドロイミダゾピリミジン環、イミダゾピラジン環、2,3-ジヒドロイミダゾピラジン環、ベンゾオキサゾール環、ベンゾチアゾール環、ベンゾオキサジアゾール環、ベンゾチアジアゾール環、5,6,7,8-テトラヒドロイソキノリン環及び5,6,7,8-テトラヒドロキノリン環のうちから選択される環構造を有してもよい。

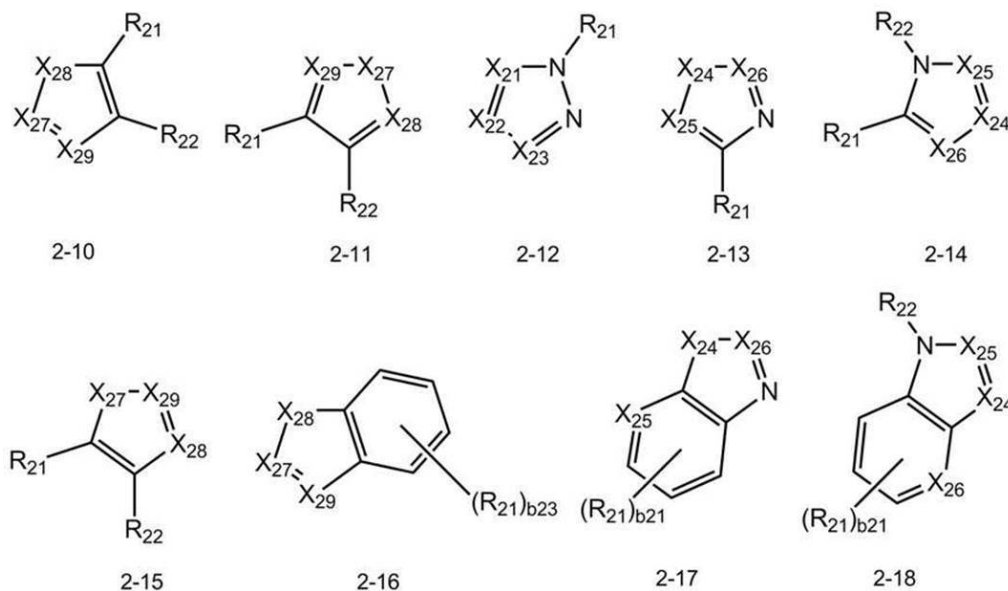
【0039】

一実施形態によれば、A₂₀、A₃₀及びA₄₀は、互いに独立して、下記化学式2-1～化学式2-43のうちいずれか一つで表わされる基のうちから選択される。

【化4】



【化5】



10

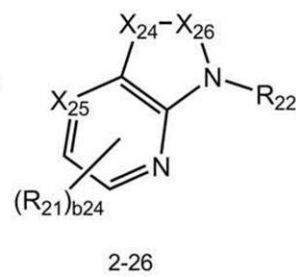
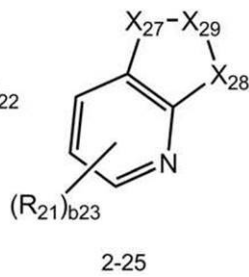
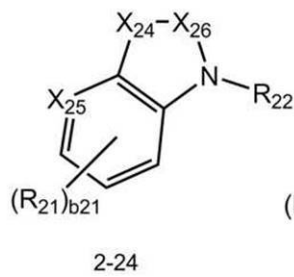
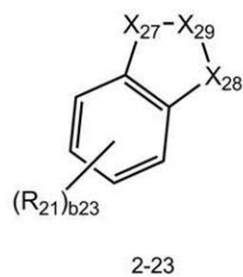
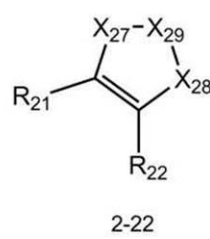
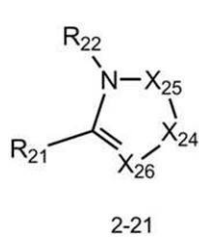
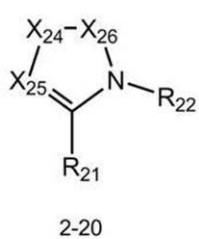
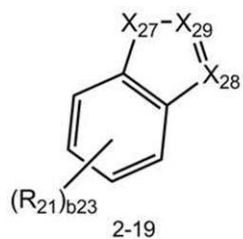
20

30

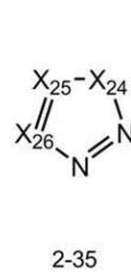
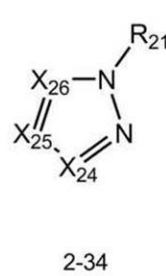
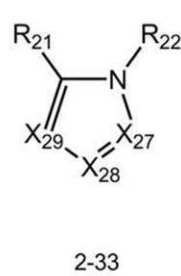
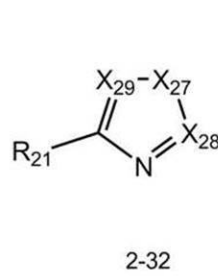
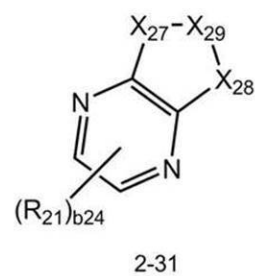
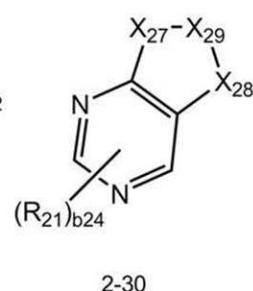
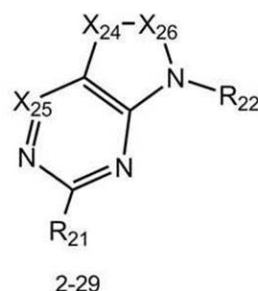
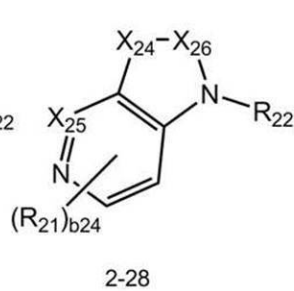
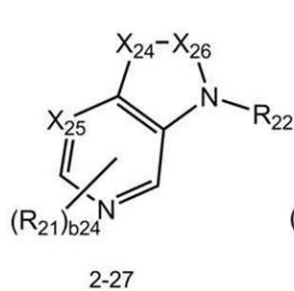
40

50

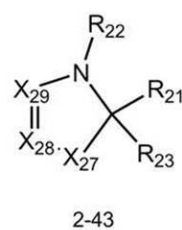
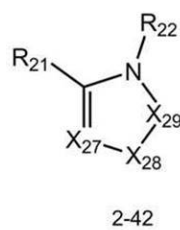
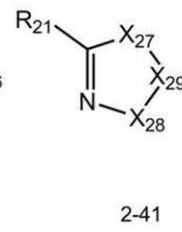
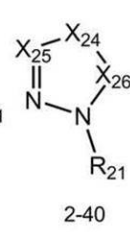
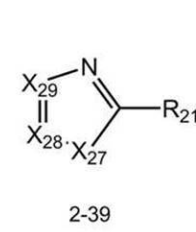
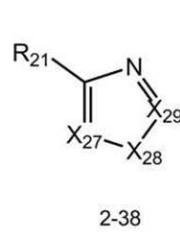
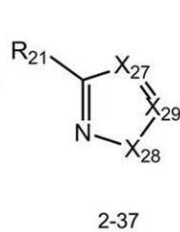
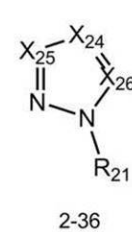
【化 6】



【化 7】



【化 8】



10

20

30

40

50

【0040】

化学式2-1～化学式2-43において、

$X_{21} \sim X_{23}$ は、互いに独立して、 $C(R_{24})$ 及び $C-*$ のうちから選択され、 $X_{21} \sim X_{23}$ のうち少なくとも2以上は、 $C-*$ であり、

X_{24} は、 $N-*$ であり、 X_{25} 及び X_{26} は、互いに独立して、 $C(R_{24})$ 及び $C-*$ のうちから選択され、 X_{25} 及び X_{26} のうち少なくとも1以上は、 $C-*$ であり、

X_{27} 及び X_{28} は、互いに独立して、 N 、 $N(R_{25})$ 及び $N-*$ のうちから選択され、 X_{29} は、 $C(R_{24})$ 及び $C-*$ のうちから選択され、i) X_{27} 及び X_{28} のうち1以上は、 $N-*$ であり、 X_{29} は、 $C-*$ であるか、あるいはii) X_{27} 及び X_{28} は、 $N-*$ であり、 X_{29} は、 $C(R_{24})$ であってもよく、

$R_{21} \sim R_{25}$ は、互いに独立して、本明細書において、後述する R_{20} についての説明を参照し、

b21は、1、2及び3のうちから選択され、

b22は、1、2、3、4及び5のうちから選択され、

b23は、1、2、3及び4のうちから選択され、

b24は、1及び2のうちから選択され、

*は、隣接原子との結合位置である。

【0041】

一実施形態によれば、 A_{20} は、 N （窒素）含有の C_1-C_{60} ヘテロ環基であってもよい。

【0042】

一実施形態によれば、 A_{20} は、前述の化学式2-10～化学式2-43のうちいずれか一つで表わされる基であってもよい。

【0043】

一実施形態によれば、 A_{20} は、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、2,3-ジヒドロイミダゾール環、トリアゾール環、2,3-ジヒドロトリアゾール環、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、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、ベンゾピラゾール環、ベンズイミダゾール環、2,3-ジヒドロベンズイミダゾール環、イミダゾピリジン環、2,3-ジヒドロイミダゾピリジン環、イミダゾピリミジン環、2,3-ジヒドロイミダゾピリミジン環、イミダゾピラジン環、2,3-ジヒドロイミダゾピラジン環、ベンゾオキサゾール環、ベンゾチアゾール環、ベンゾオキサジアゾール環、ベンゾチアジアゾール環、ピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、ピリダジン環、トリアジン環、キノリン環、イソキノリン環、キノキサリン環、キナゾリン環、フェナントリン環、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、イミダゾピリジン環、2,3-ジヒドロイミダゾピリジン環、イミダゾピリミジン環、2,3-ジヒドロイミダゾピリミジン環、イミダゾピラジン環、2,3-ジヒドロイミダゾピラジン環、5,6,7,8-テトラヒドロイソキノリン環及び5,6,7,8-テトラヒドロキノリン環のうちから選択される環構造を有してもよい。

【0044】

例えば、 A_{20} は、ピロール環、ピラゾール環、イミダゾール環、トリアゾール環及びピリジン環のうちから選択される環構造であってもよい。

【0045】

一実施形態によれば、 A_{30} 及び A_{40} は、互いに独立して、前述の化学式2-1～化学式2-9のうちいずれか一つで表わされる基であってもよい。

【0046】

例えば、前 A_{30} 及び A_{40} は、互いに独立して、ベンゼン環、ピリジン環、ピリミジン環及びトリアジン環のうちから選択される環構造であってもよい。

【0047】

化学式1において、 X_{11} 及び X_{12} は、互いに独立して、 $N(R_{50})$ 、 b_{50} 、 O または S である。

10

20

30

40

50

【0048】

一実施形態によれば、 X_{11} は、 $N(R_{50})_{b50}$ であってもよい。ここで、 b_{50} は、0または1である。例えば、 X_{11} は、 N または $N(R_{50})$ である。

【0049】

一実施形態によれば、 X_{11} は、 O または S であってもよい。

【0050】

一実施形態によれば、 X_{12} は、 O または S であってもよい。

【0051】

一実施形態によれば、 X_{11} 及び X_{12} は、互いに同一であってもよい。また、一実施形態によれば、 X_{11} 及び X_{12} は、互いに異なってもよい。

10

【0052】

化学式1において、 Y_{20} 、 Y_{30} 及び Y_{40} は、互いに独立して、 N または C である。

【0053】

一実施形態によれば、 Y_{20} 及び Y_{30} は、 C であり、 Y_{40} は、 N であってもよく、 Y_{20} 及び Y_{40} は、 C であり、 Y_{30} は、 N であってもよく、あるいは Y_{30} 及び Y_{40} は、 C であり、 Y_{20} は、 N であってもよい。

【0054】

一実施形態によれば、 Y_{20} 、 Y_{30} 及び Y_{40} は、 C である。

【0055】

一実施形態によれば、 Y_{40} は、 C であり、 Y_{20} 及び Y_{30} は、 N であってもよく、 Y_{40} は、 N であり、 Y_{20} 及び Y_{30} は、 C であってもよく、あるいは Y_{20} は、 C であり、 Y_{30} 及び Y_{40} は、 N であってもよい。

20

【0056】

一実施形態によれば、 Y_{20} は、 N であり、 Y_{30} 及び Y_{40} は、 C であってもよく、 Y_{30} は、 C であり、 Y_{20} 及び Y_{40} は、 N であってもよく、あるいは Y_{30} は、 N であり、 Y_{20} 及び Y_{40} は、 C であってもよい。

【0057】

化学式1において、 Y_{21} 、 Y_{22} 、 Y_{31} 、 Y_{32} 、 Y_{41} 及び Y_{42} は、互いに独立して、 N または C である。

【0058】

化学式1において、 $T_{11} \sim T_{14}$ は、互いに独立して、配位結合、共有結合、 $*-O-*'$ 及び $*-S-*'$ のうちから選択される。

30

【0059】

T_{11} は、配位結合または共有結合であってもよい。 T_{12} は、配位結合または共有結合であってもよい。 T_{13} は、配位結合または共有結合であってもよい。 T_{14} は、配位結合または共有結合であってもよい。

【0060】

一実施形態によれば、 $T_{11} \sim T_{14}$ はそれぞれ配位結合または共有結合である。

【0061】

一実施形態によれば、 T_{11} は、 $*-O-*'$ 及び $*-S-*'$ のうちから選択され、 $T_{12} \sim T_{14}$ は、配位結合または共有結合である。

40

【0062】

一実施形態によれば、 T_{12} は、 $*-O-*'$ 及び $*-S-*'$ のうちから選択され、 T_{11} 、 T_{13} 及び T_{14} は、配位結合または共有結合である。

【0063】

一実施形態によれば、 T_{13} は、 $*-O-*'$ 及び $*-S-*'$ のうちから選択され、 T_{11} 、 T_{12} 及び T_{14} は、配位結合または共有結合である。

【0064】

一実施形態によれば、 T_{14} は、 $*-O-*'$ 及び $*-S-*'$ のうちから選択され、 T_{11} 、 T_{12} 及び T_{13} は、配位結合または共有結合である。

50

【0065】

一実施形態によれば、 $T_{11} \sim T_{14}$ のうちいずれか2個が配位結合であり、残り2個が共有結合であってもよい。それにより、本開示の有機金属化合物は、陽イオンと陰イオンとからなる塩の形態を有さず、電氣的に中性 (electrically neutral) となり得る。

【0066】

一実施形態によれば、 T_{11} 及び T_{12} は、配位結合であり、 T_{13} 及び T_{14} は、それぞれ共有結合である。

【0067】

一実施形態によれば、 T_{11} 及び T_{13} は、配位結合であり、 T_{12} 及び T_{14} は、それぞれ共有結合である。

【0068】

化学式1において、 $L_{11} \sim L_{14}$ は、互いに独立して、単結合、 $*-O-*$ 、 $*-S-*$ 、 $*-C(R_1)(R_2)-*$ 、 $*-C(R_1)=*$ 、 $*=C(R_1)-*$ 、 $*-C(R_1)=C(R_2)-*$ 、 $*-C(=O)-*$ 、 $*-C(=S)-*$ 、 $*-C \equiv C-*$ 、 $*-B(R_1)-*$ 、 $*-N(R_1)-*$ 、 $*-P(R_1)-*$ 、 $*-Si(R_1)(R_2)-*$ 、 $*-P(R_1)(R_2)-*$ 及び $*-Ge(R_1)(R_2)-*$ のうちから選択される。

【0069】

一実施形態によれば、 $L_{11} \sim L_{14}$ は、互いに独立して、単結合、 $*-O-*$ 、 $*-S-*$ 、 $*-N(R_1)-*$ 、 $*-C(R_1)(R_2)-*$ 、 $*-Si(R_1)(R_2)-*$ 及び $*-B(R_1)-*$ のうちから選択される。

【0070】

一実施形態によれば、 L_{12} は、単結合及び $*-N(R_1)-*$ のうちから選択される。

【0071】

一実施形態によれば、 L_{13} は、 $*-O-*$ 及び $*-S-*$ のうちから選択される。

【0072】

一実施形態によれば、 L_{14} は、単結合及び $*-N(R_1)-*$ のうちから選択される。例えば、 L_{14} は、単結合であってもよい。

【0073】

化学式1において、 $a_{11} \sim a_{14}$ は、互いに独立して、0、1、2、3、4及び5のうちから選択される。

【0074】

一実施形態によれば、 a_{11} は、0であってもよい。 a_{11} が0である場合、 A_{10} と A_2 とは互いに結合しない。

【0075】

一実施形態によれば、前述の $a_{12} \sim a_{14}$ は、互いに独立して、1または2である。例えば、前述の $a_{12} \sim a_{14}$ は、それぞれ1であってもよい。

【0076】

化学式1において、 R_1 、 R_2 、 R_{10} 、 R_{20} 、 R_{30} 、 R_{40} 及び R_{50} は、互いに独立して、水素、重水素 ($-D$)、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルキル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルケニル基、置換もしくは無置換の C_2-C_{60} アルキニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} アルコキシ基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリールチオ基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基 (non-aromatic con

10

20

30

40

50

densed polycyclic group)、置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基 (non-aromatic condensed heteropolycyclic group)、 $-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-P(Q_1)(Q_2)$ 、 $-C(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、 $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 、及び $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ のうちから選択される。

【0077】

一実施形態によれば、 R_1 、 R_2 、 R_{10} 、 R_{20} 、 R_{30} 、 R_{40} 及び R_{50} は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基、 C_1-C_{20} アルキル基及び C_1-C_{20} アルコキシ基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基、フェニル基及びビフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{20} アルキル基及び C_1-C_{20} アルコキシ基；

シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタセニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、シロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、インドリル基、イソインドリル基、インダゾリル基、プリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、イソキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、ベンゾキノキサリニル基、キナゾリニル基、ベンゾキナゾリニル基、シンノリニル基、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、ベンズイミダゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ベンゾシロリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾイソオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ジベンゾシロリル基、ベンゾカルバゾリル基、ナフトベンゾフラニル基、ナフトベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾシロリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジナフトフラニル基、ジナフトチオフェニル基、ジナフトシロリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、オキサゾロピリジニル基、チアゾロピリジニル基、ベンゾナフチリジニル基、アザフルオレニル基、アザスピロ-ビフルオレニル基、アザカルバゾリル基、アザジベンゾフラニル基、アザジベンゾチオフェニル基、アザジベンゾシロリル基、インデノピロリル基、インドロピロリル基、インデノカルバゾリル基及びインドロカルバゾリル基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタセニル基、ピロリル基、チオフェニル基、フラニル基、シロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、インドリル基、イソインドリル基、インダゾリル基、プリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、イソキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、ベンゾキノキサリニル基、キナゾリニル基、ベンゾキナゾリニル基、シンノリニル基、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、ベンズイミダ

10

20

30

40

50

ゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフエニル基、ベンゾシロリル基、ベンゾチアゾ
 リル基、ベンゾイソチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾイソオキサゾリル基、
 トリアゾリル基、テトラゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニ
 ル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、ジベンゾシロリ
 ル基、ベンゾカルバゾリル基、ナフトベンゾフラニル基、ナフトベンゾチオフエニル基、
 ナフトベンゾシロリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジナフトフラニル基、ジナフトチオ
 フェニル基、ジナフトシロリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、オ
 キサゾロピリジニル基、チアゾロピリジニル基、ベンゾナフチリジニル基、アザフルオレ
 ニル基、アザスピロ-ビフルオレニル基、アザカルバゾリル基、アザジベンゾフラニル基
 、アザジベンゾチオフエニル基、アザジベンゾシロリル基、インデノピロリル基、インド
 ロピロリル基、インデノカルバゾリル基、インドロカルバゾリル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 、 $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ 及び $-P(=S)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで
 置換された、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニ
 ル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ペンタレ
 ニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、
 フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレ
 ニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基
 、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタセニル基、ピ
 ロリル基、チオフエニル基、フラニル基、シロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、
 チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、ピリジニル基
 、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、インドリル基、イソインドリル基、
 インダゾリル基、プリニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、
 イソキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、ベンゾキノ
 キサリニル基、キナゾリニル基、ベンゾキナゾリニル基、シンノリニル基、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、ベンズイミダゾリ
 ル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフエニル基、ベンゾシロリル基、ベンゾチアゾリル
 基、ベンゾイソチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾイソオキサゾリル基、トリ
 アゾリル基、テトラゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、トリアジニル基
 、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、ジベンゾシロリル基
 、ベンゾカルバゾリル基、ナフトベンゾフラニル基、ナフトベンゾチオフエニル基、ナフ
 トベンゾシロリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジナフトフラニル基、ジナフトチオフエ
 ニル基、ジナフトシロリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、オキサ
 ゾロピリジニル基、チアゾロピリジニル基、ベンゾナフチリジニル基、アザフルオレニル
 基、アザスピロ-ビフルオレニル基、アザカルバゾリル基、アザジベンゾフラニル基、ア
 ザジベンゾチオフエニル基、アザジベンゾシロリル基、インデノピロリル基、インドロピ
 ロリル基、インデノカルバゾリル基及びインドロカルバゾリル基；並びに

$-Si(Q_1)(Q_2)(Q_3)$ 、 $-B(Q_1)(Q_2)$ 、 $-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-P(Q_1)(Q_2)$ 、 $-C(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)(Q_1)$ 、 $-S(=O)_2(Q_1)$ 、 $-P(=O)(Q_1)(Q_2)$ 及び $-P(=S)(Q_1)(Q_2)$ のうちから選択され、

$Q_1 \sim Q_3$ 、及び $Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラ
 ザノ基、 $C_1 \sim C_{60}$ アルキル基、 $C_2 \sim C_{60}$ アルケニル基、 $C_2 \sim C_{60}$ アルキニル基
 、 $C_1 \sim C_{60}$ アルコキシ基、 $C_3 \sim C_{10}$ シクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{10}$ ヘテロシクロ
 アルキル基、 $C_3 \sim C_{10}$ シクロアルケニル基、 $C_1 \sim C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、
 $C_6 \sim C_{60}$ アリール基、 $C_6 \sim C_{60}$ アリールオキシ基、 $C_6 \sim C_{60}$ ヘテロアリール基
 、 $C_1 \sim C_{60}$ ヘテロアリールオキシ基、 $C_1 \sim C_{60}$ ヘテロアリールチオ基、一価非芳香
 族縮合多環基、一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、重水素・ $-F$ 及びシアノ基のうちから選

10

20

30

40

50

択された少なくとも一つで置換された $C_1 - C_{60}$ アルキル基、重水素・ $-F$ 及びシアノ基のうちから選択された少なくとも一つで置換された $C_6 - C_{60}$ アリール基、ビフェニル基、及びターフェニル基のうちから選択される。

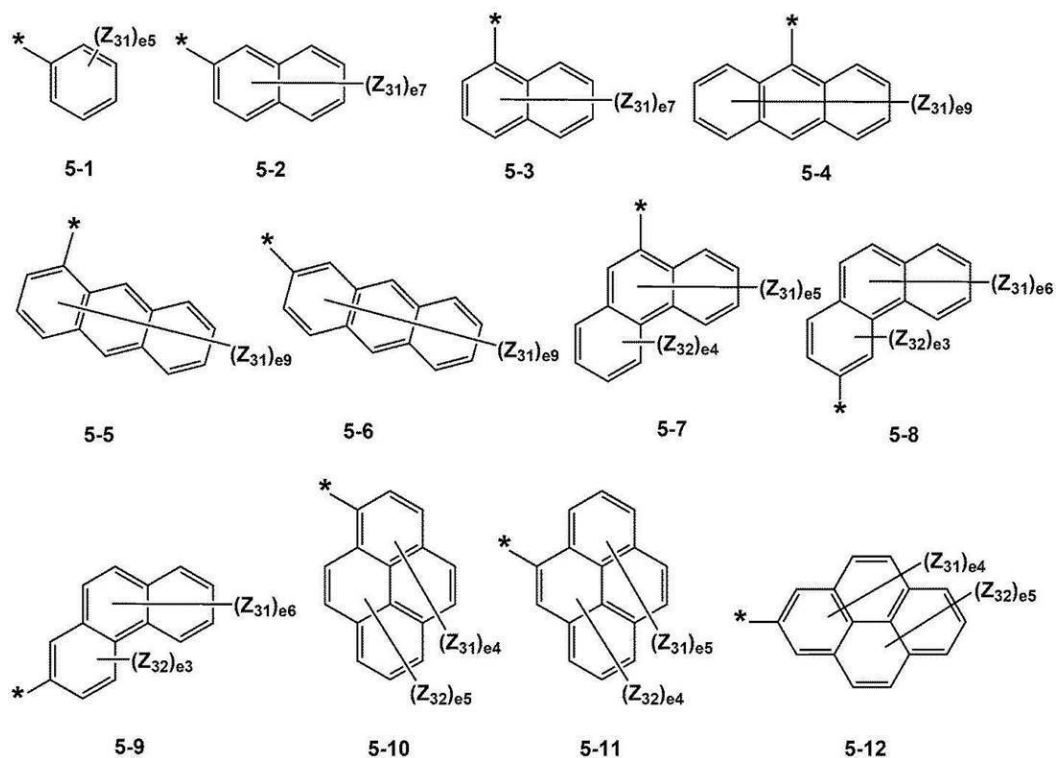
【0078】

一実施形態によれば、 R_1 、 R_2 、 R_{10} 、 R_{20} 、 R_{30} 、 R_{40} 及び R_{50} は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基及び $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基；

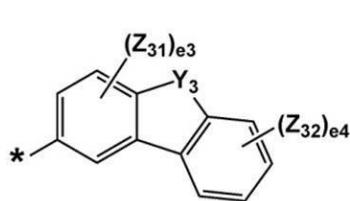
重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、シアノ基、フェニル基及びビフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基及び $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基；並びに

下記化学式 5-1～化学式 5-27、及び化学式 6-1～化学式 6-55 のうちいずれか一つで表わされる基のうちから選択される。

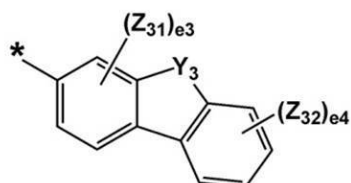
【化9】



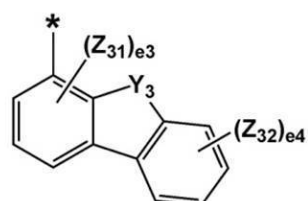
【化 1 0】



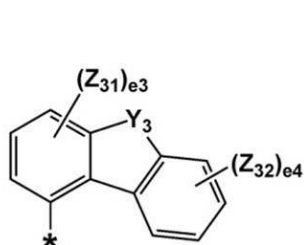
5-13



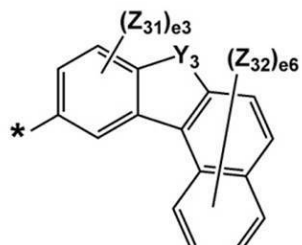
5-14



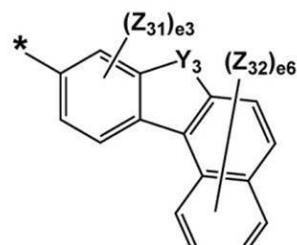
5-15



5-16

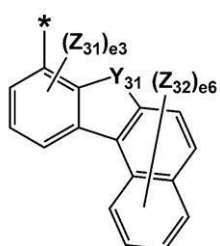


5-17

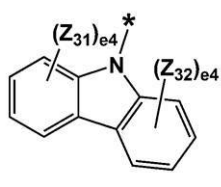


5-18

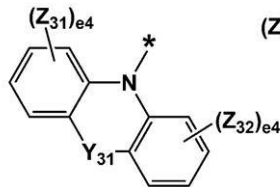
【化 1 1】



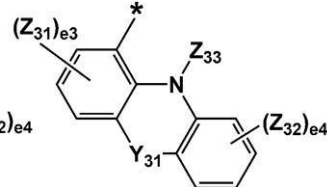
5-19



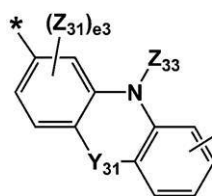
5-20



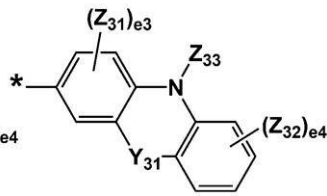
5-21



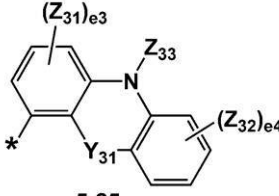
5-22



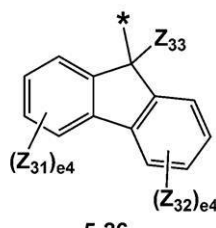
5-23



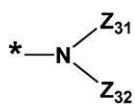
5-24



5-25



5-26



5-27

10

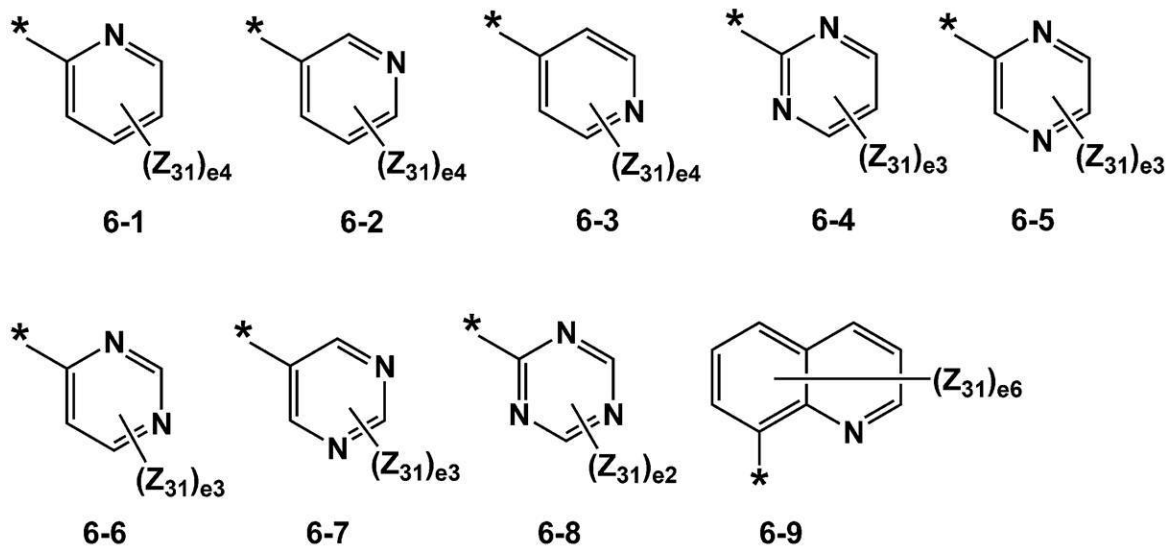
20

30

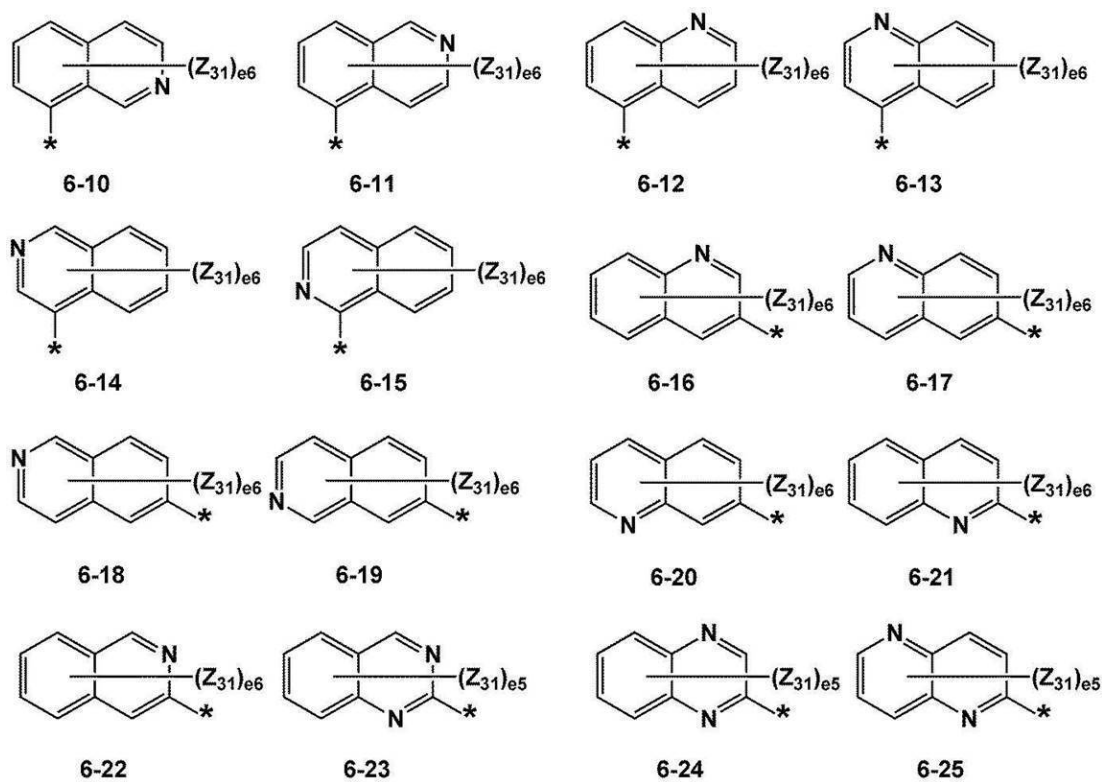
40

50

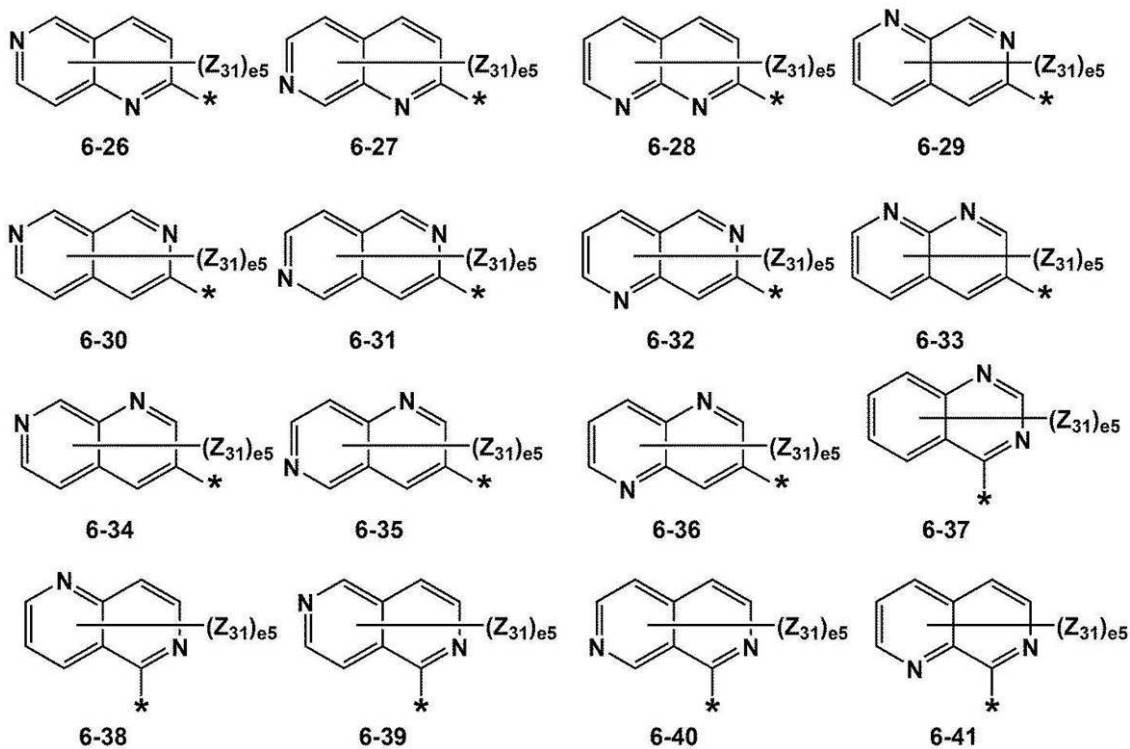
【化 1 2】



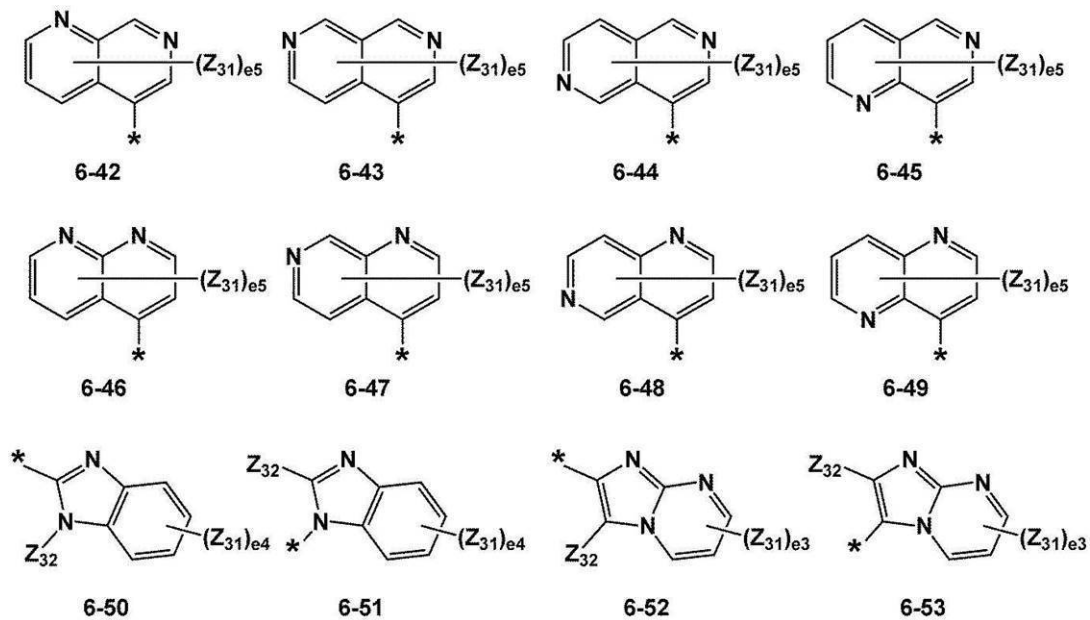
【化 1 3】



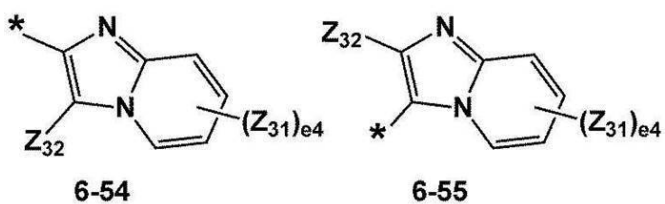
【化 1 4】



【化 1 5】



【化 1 6】



【0 0 7 9】

化学式 5-1～化学式 5-27、及び化学式 6-1～化学式 6-55 において、
 Y_3 は、O、S、C (Z_{34}) (Z_{35})、N (Z_{34}) または Si (Z_{34}) (Z_{35})
 であり、

10

20

30

40

50

Z₃₁～Z₃₅は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、C₁-C₂₀アルキル基、C₁-C₂₀アルケニル基、C₁-C₂₀アルキニル基、C₁-C₂₀アルコキシ基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、トリフェリレニル基、ピリジニル基、ピリミジニル基、カルバゾリル基及びトリアジニル基のうちから選択され、

e₂は、1または2であり、

e₃は、1～3のうちから選択された整数であり、

e₄は、1～4のうちから選択された整数であり、

e₅は、1～5のうちから選択された整数であり、

e₆は、1～6のうちから選択された整数であり、

e₇は、1～7のうちから選択された整数であり、

e₉は、1～9のうちから選択された整数であり、

*は、隣接原子との結合位置である。

【0080】

一実施形態によれば、化学式1において、R₁、R₂、R₁₀、R₂₀、R₃₀、R₄₀及びR₅₀は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、シアノ基、C₁-C₂₀アルキル基及びC₁-C₂₀アルコキシ基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、シアノ基、フェニル基及びビフェニリル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、C₁-C₂₀アルキル基及びC₁-C₂₀アルコキシ基；

フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ペントレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、カルバゾリル基、アクリジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基及びジベンゾカルバゾリル基；並びに

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、シアノ基、C₁-C₂₀アルキル基、C₁-C₂₀アルコキシ基、フェニル基及びビフェニリル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ペントレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、カルバゾリル基、アクリジニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基及びジベンゾカルバゾリル基；のうちから選択される。

【0081】

化学式1において、R₁、R₂、R₁₀、R₂₀、R₃₀、R₄₀及びR₅₀のうち隣接する2以上が選択的に互いに結合し、置換もしくは無置換のC₅-C₆₀炭素環基、または置換もしくは無置換のC₁-C₆₀ヘテロ環基を形成することができる。

【0082】

一例によれば、R₁、R₂、R₁₀、R₂₀、R₃₀、R₄₀及びR₅₀のうち隣接する2以上が選択的に互いに結合し、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ナフチル基、フルオレニル基及びカルバゾリル基；並びに

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、シアノ基、C₁-C₂₀アルキル基、C₁-C₂₀アルコキシ基、フェニル基及びビフェニリル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基、ナフチル基、フルオレニル基及びカルバゾリル基；のうちから選択されたいずれか1つの基を形成することができる。

【0083】

また、一例によれば、R₁、R₂、R₁₀、R₂₀、R₃₀、R₄₀及びR₅₀のうち隣接する2以上が選択的に互いに結合し、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フェニル基

10

20

30

40

50

、ナフチル基、フルオレニル基またはカルbazリル基を形成することができる。

【0084】

また、一例によれば、 R_1 、 R_2 、 R_{10} 、 R_{20} 、 R_{30} 、 R_{40} 及び R_{50} のうち隣接する2以上が選択的に互いに結合し、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、フルオレニル基またはカルbazリル基を形成することができる。

【0085】

例えば、 R_1 及び R_{20} 、 R_1 及び R_{30} 、並びに R_1 及び R_{40} のうち少なくとも一つが互いに結合し、カルbazリル基を形成してもよい。

【0086】

化学式1において、 b_{10} 、 b_{20} 、 b_{30} 及び b_{40} は、互いに独立して、1、2、3、4、5、6、7及び8のうちから選択される。

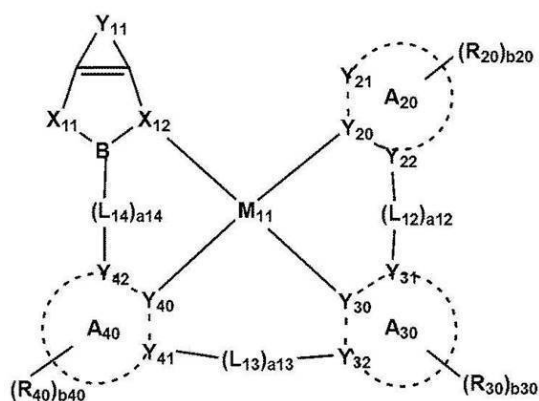
【0087】

化学式1において、 b_{50} は、0または1である。

【0088】

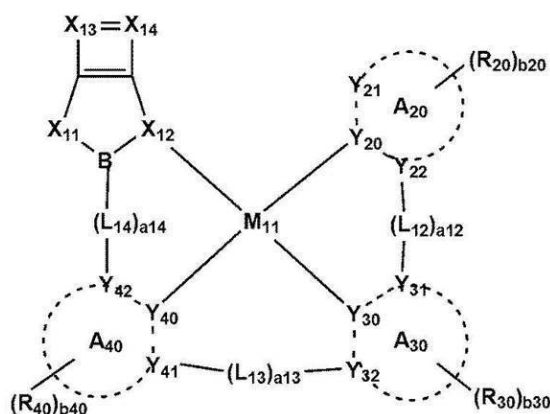
一実施形態によれば、化学式1で表される有機金属化合物は、下記化学式1A～化学式1Gのうちから選択されたいずれか一つで表わされる化合物であってもよい。

【化17】



・・・(化学式1A)

【化18】



・・・(化学式1B)

10

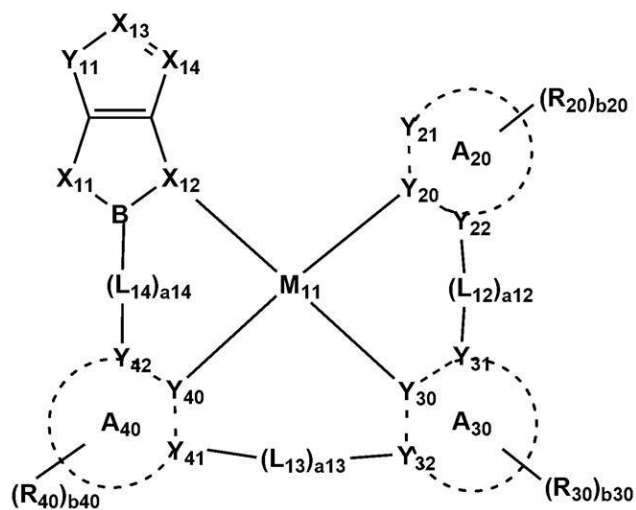
20

30

40

50

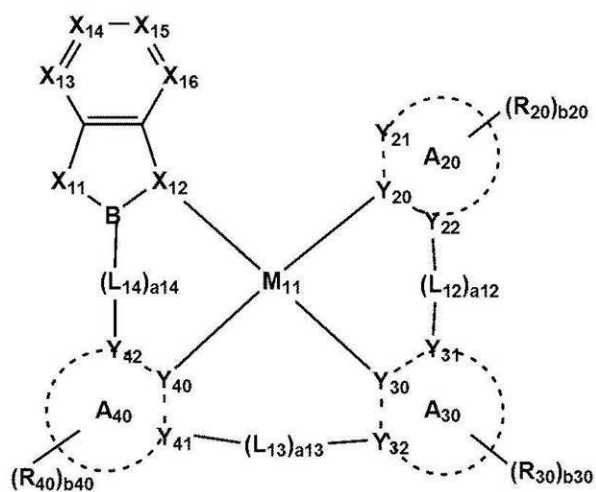
【化 1 9】



10

... (化学式 1 C)

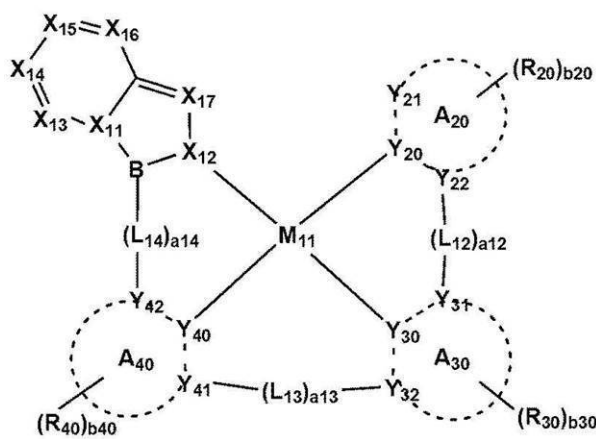
【化 2 0】



20

... (化学式 1 D)

【化 2 1】

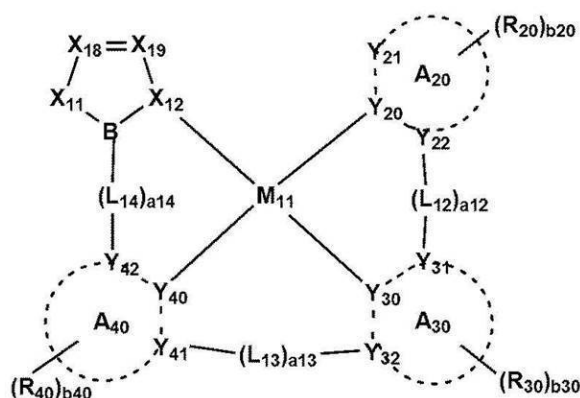


40

... (化学式 1 E)

50

【化 2 3】



【 0 0 8 9 】

M₁₁、A₂₀、A₃₀、A₄₀、L₁₂～L₁₄、a₁₂～a₁₄、X₁₁、X₁₂、Y₂₀～Y₂₂、Y₃₀～Y₃₂、Y₄₀～Y₄₂、R₂₀、R₃₀、R₄₀、b₂₀、b₃₀、及びb₄₀についての説明は、それぞれ本明細書に記載されたところを参照し、

X₁₃は、NまたはC (R₁₃) であり、X₁₄は、NまたはC (R₁₄) であり、X₁₅は、NまたはC (R₁₅) であり、X₁₆は、NまたはC (R₁₆) であり、X₁₇は、NまたはC (R₁₇) であり、X₁₈は、NまたはC (R₁₈) であり、X₁₉は、NまたはC (R₁₉) であり、

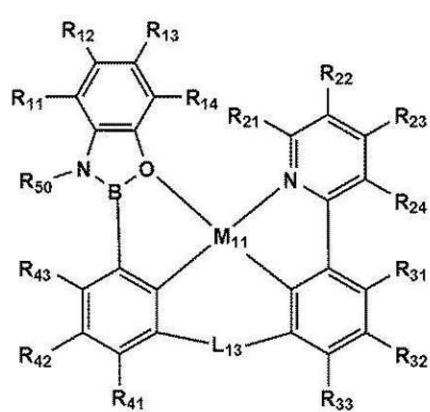
【 0 0 9 0 】

【 0 0 9 1 】

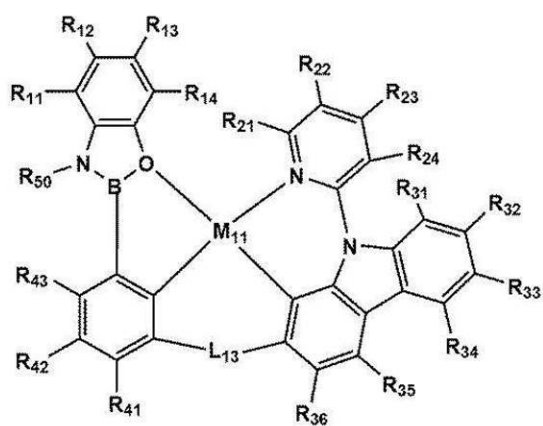
【 0 0 9 2 】

一実施形態によれば、化学式 1 で表される有機金属化合物は、下記化学式 10-1 ~ 化

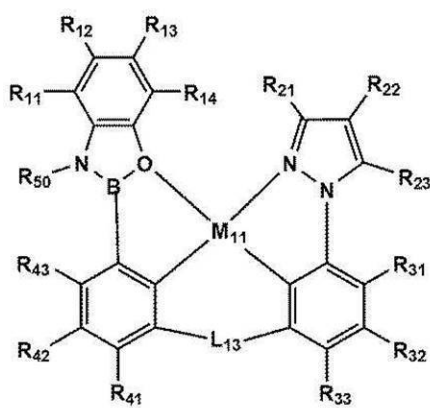
学式 10-25 のうちから選択されたいずれか一つで表わされる化合物であってもよい。
【化 24】



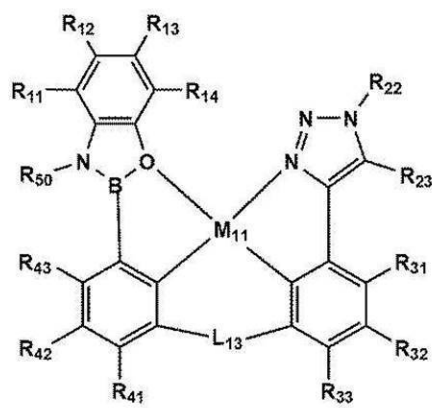
10-1



10-2



10-3



10-4

10

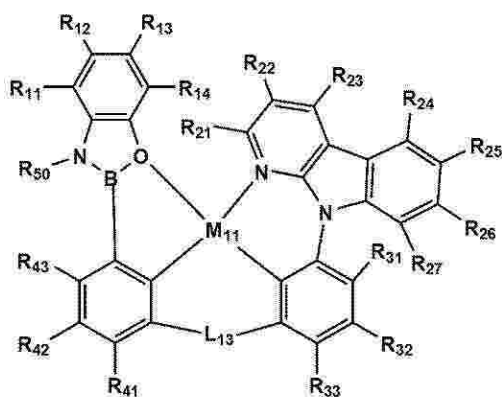
20

30

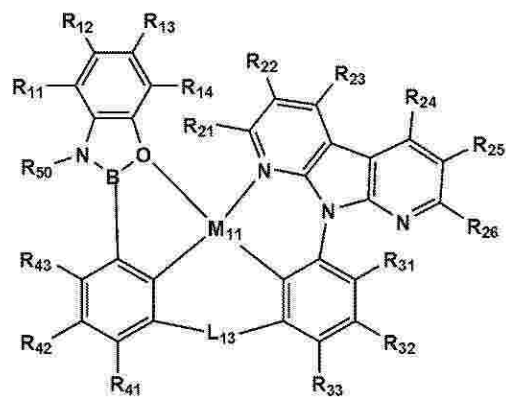
40

50

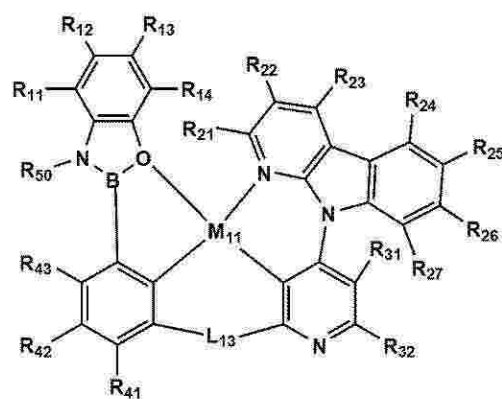
【化 2 5】



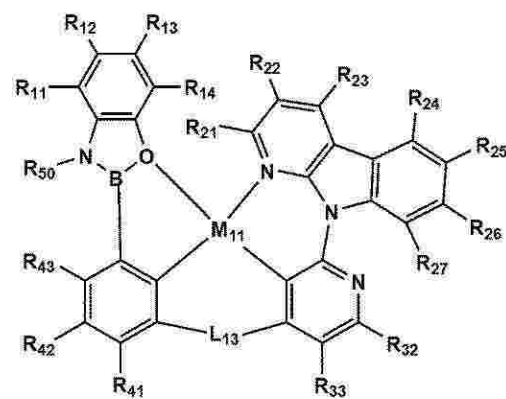
10-5



10-6



10-7



10-8

10

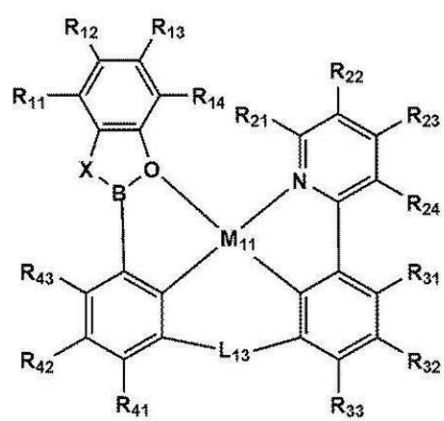
20

30

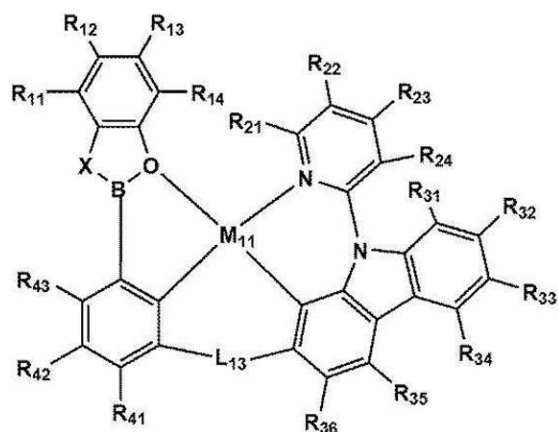
40

50

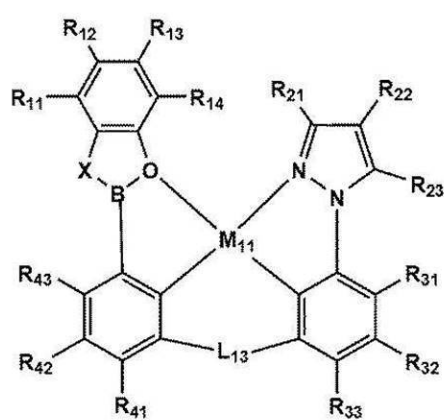
【化 2 6】



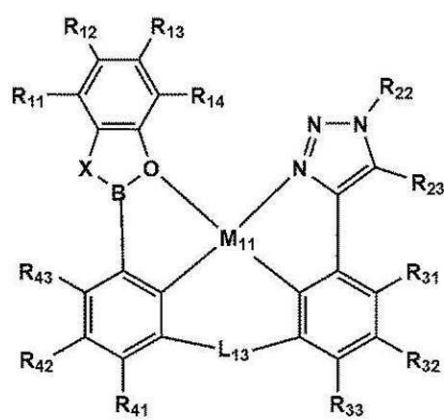
10-9



10-10



10-11



10-12

10

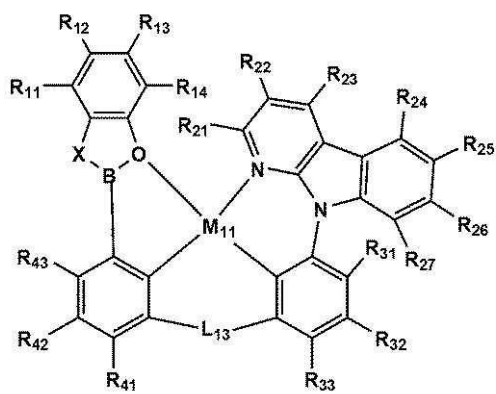
20

30

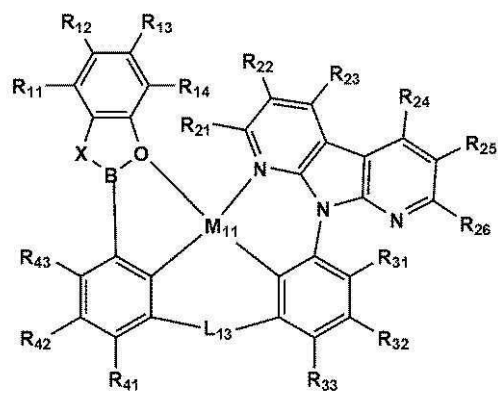
40

50

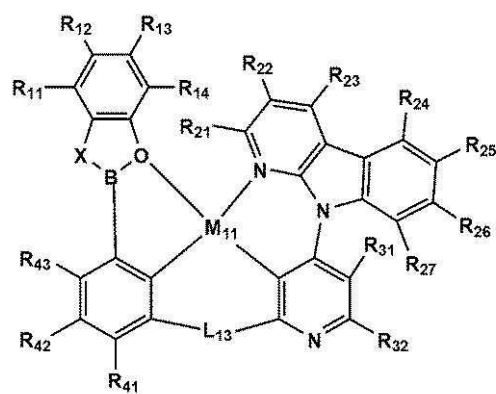
【化 2 7】



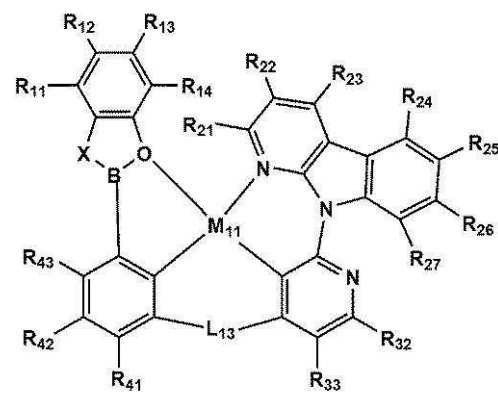
10-13



10-14



10-15



10-16

10

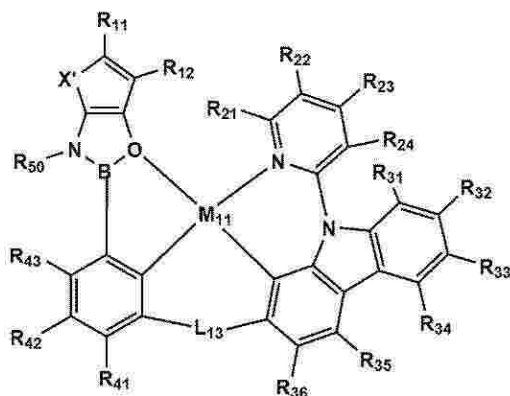
20

30

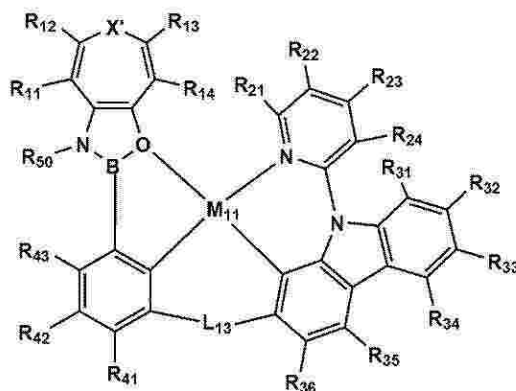
40

50

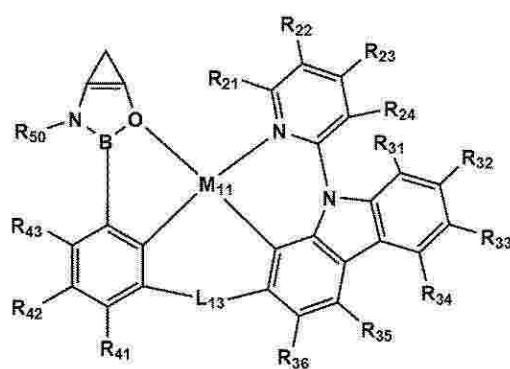
【化 2 8】



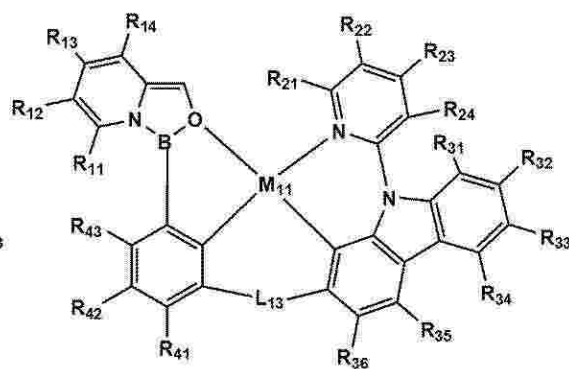
10-17



10-18

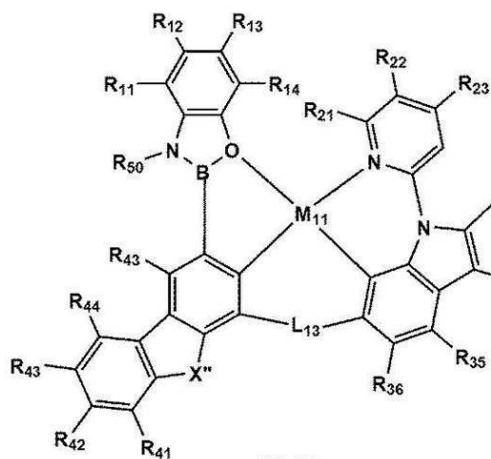


10-19

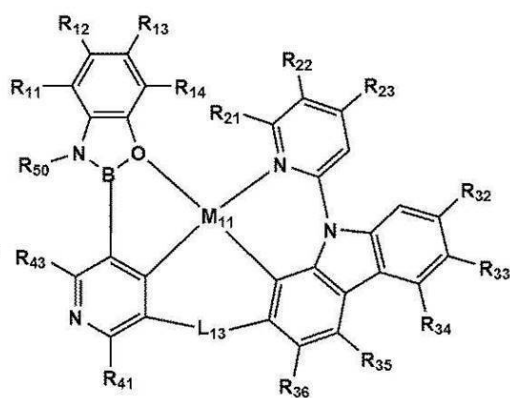


10-20

【化 2 9】



10-21



10-22

10

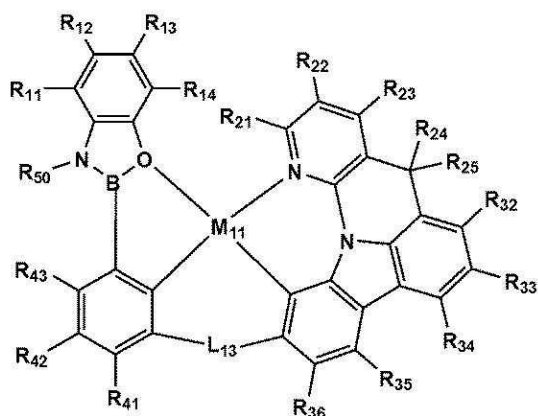
20

30

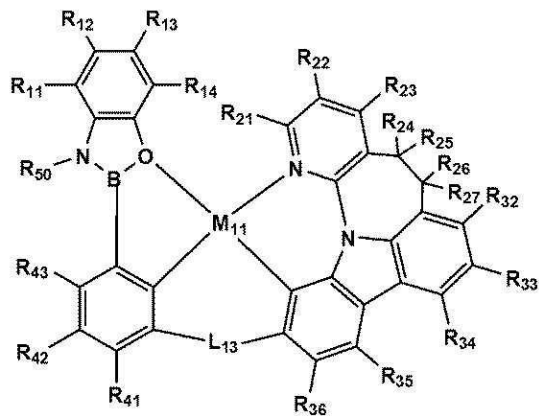
40

50

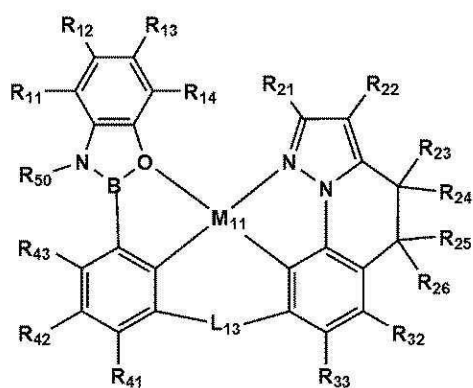
【化 3 0】



10-23



10-24



10-25

【 0 0 9 3 】

化学式 10-1 ～ 化学式 10-25 において、

M₁₁、L₁₃ 及び R₅₀ についての説明は、それぞれ本明細書に記載されたところを参照し、

X、X' 及び X'' は、互いに独立して、O または S であり、

R₁₁ ～ R₁₄ についての説明は、互いに独立して、R₁₀ についての説明を参照し、

R₂₁ ～ R₂₇ についての説明は、互いに独立して、R₂₀ についての説明を参照し、

R₃₁ ～ R₃₆ についての説明は、互いに独立して、R₃₀ についての説明を参照し、

R₄₁ ～ R₄₃ についての説明は、互いに独立して、R₄₀ についての説明を参照する。

【 0 0 9 4 】

一実施形態によれば、化学式 1 で表される有機金属化合物は、下記化合物 1 ～ 化合物 86 のうちから選択されてもよいが、これらに限定されるものではない。

10

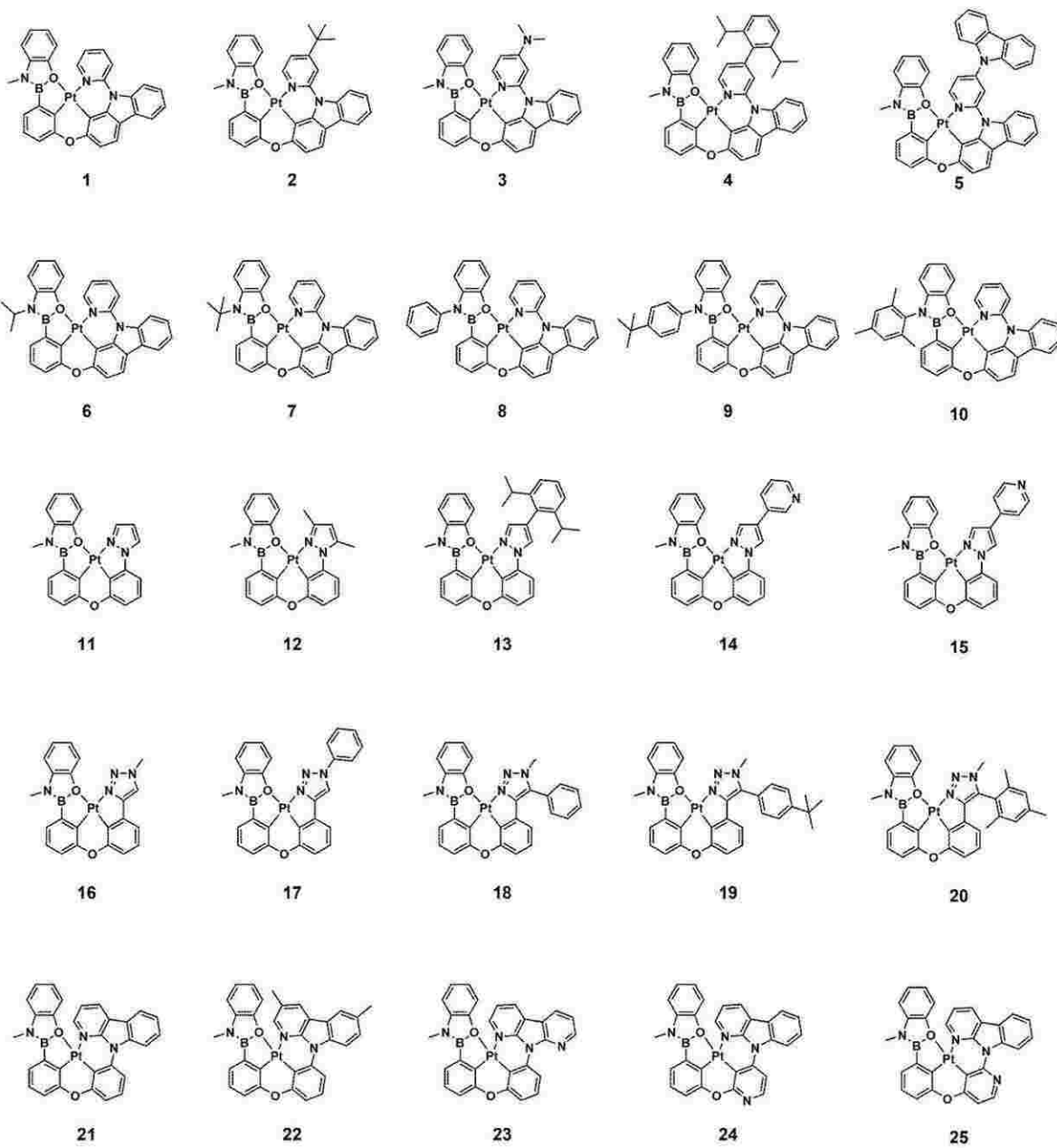
20

30

40

50

【化 3 1】



10

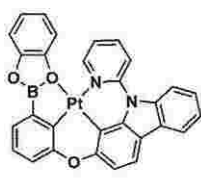
20

30

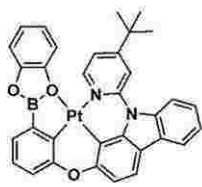
40

50

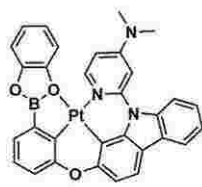
【化 3 2】



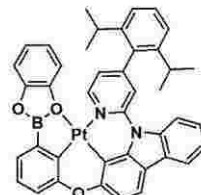
26



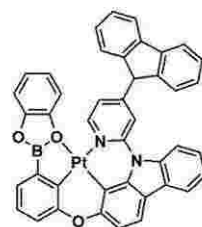
27



28



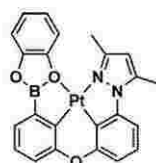
29



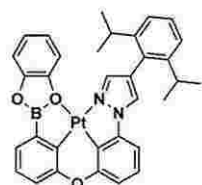
30



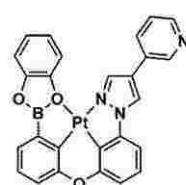
31



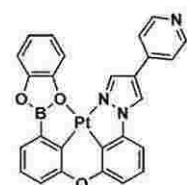
32



33



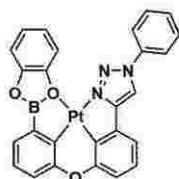
34



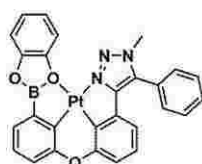
35



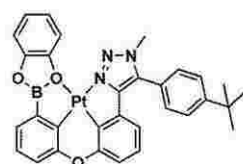
36



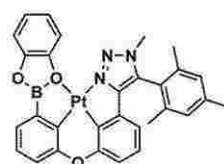
37



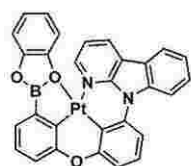
38



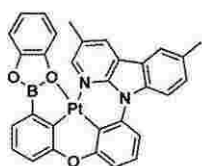
39



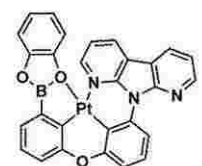
40



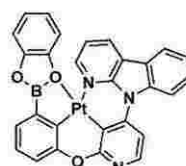
41



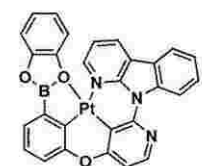
42



43



44



45

10

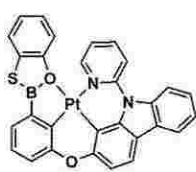
20

30

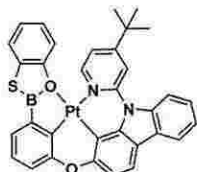
40

50

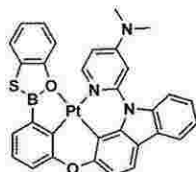
【化 3 3】



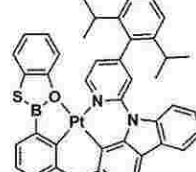
46



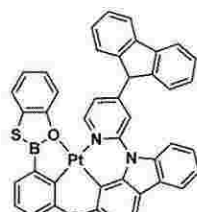
47



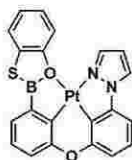
48



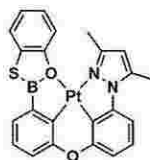
49



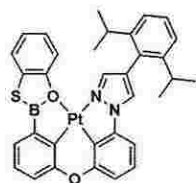
50



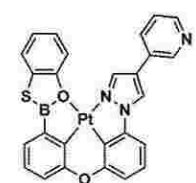
51



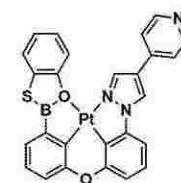
52



53



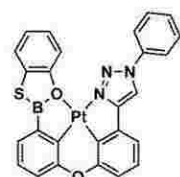
54



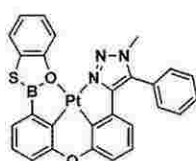
55



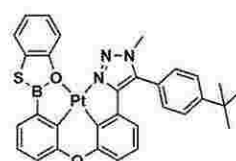
56



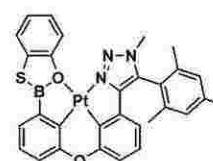
57



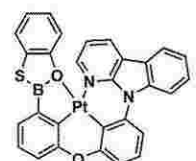
58



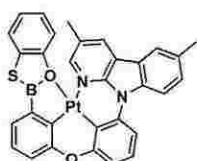
59



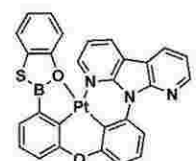
60



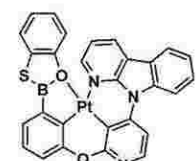
61



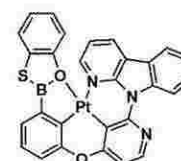
62



63



64



65

10

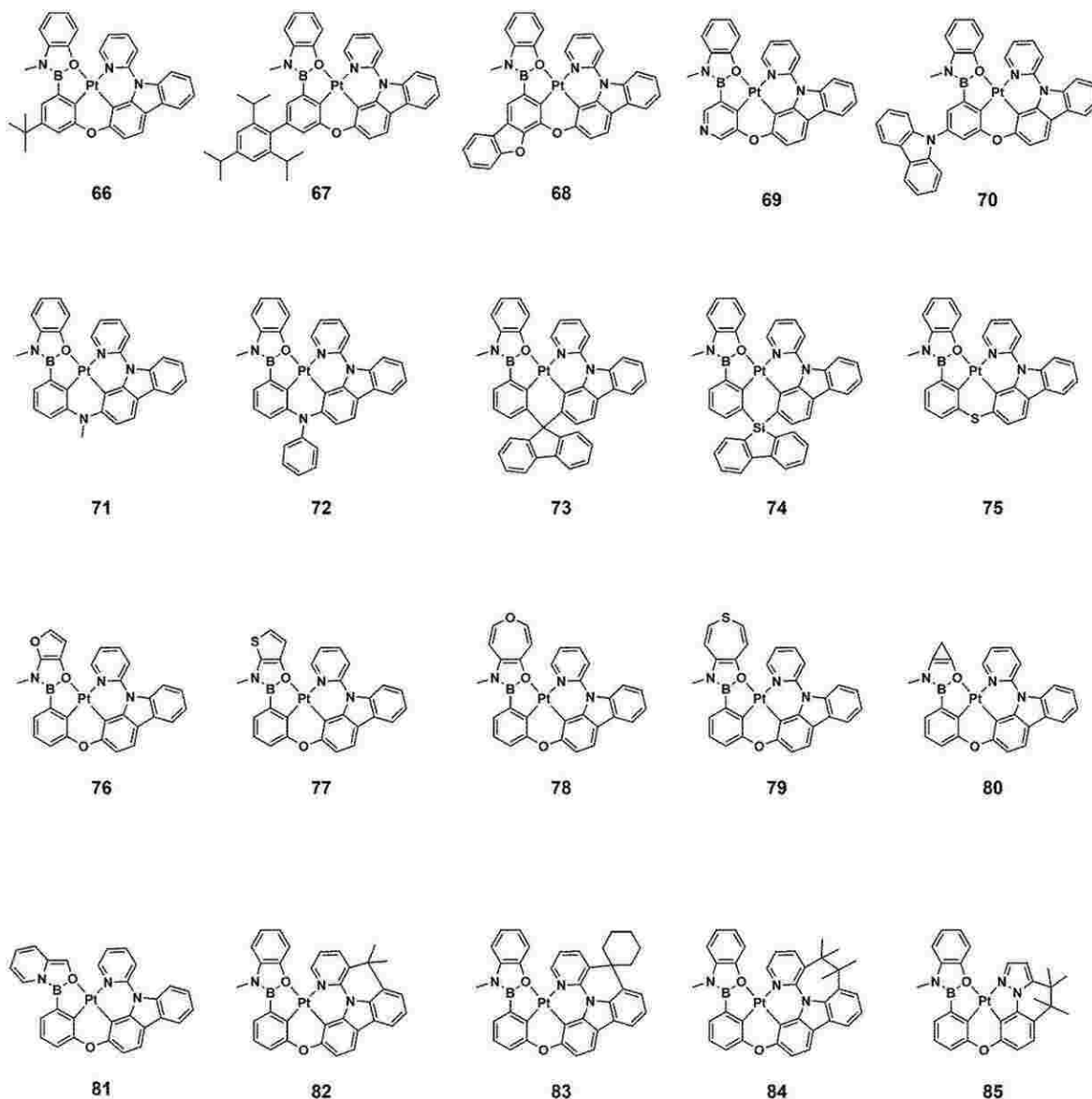
20

30

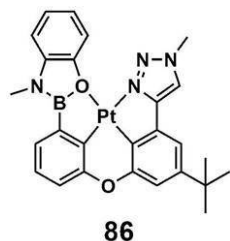
40

50

【化 3 4】



【化 3 5】



【0095】

化学式1で表される有機金属化合物は、A₁₀環において、B原子がA₄₀環に結合される構造のリガンドを含む。また、A₁₀環は、X₁₁-B-X₁₂で表示されるヘテロ原子を含むことにより、リガンドと金属M₁₁との結合エネルギーを増大させ、化合物の安定性にすぐれる。従って、該有機金属化合物を有機電界発光素子に適用すると、エネルギー伝達に有利であり、発光効率が高いだけでなく、高色純度を実現することができ、寿命特性が向上する。

【0096】

本開示の有機金属化合物は、青色光を放出することができる。例えば、該有機金属化合物は、400nm以上及び500nm未満の最大発光波長、例えば、410nm以上及び

10

20

30

40

50

490 nm以下の最大発光波長を有する青色光（背面発光CIE_{x, y}色座標0.15, 0.15～0.30）を放出することができ、それにより、化学式1で表される有機金属化合物は、青色光を放出する有機電界発光素子の作製にも有用に使用される。尚、本開示の有機金属化合物のが放出する光の波長は、前述の波長範囲に限定されるわけではない。

【0097】

化学式1で表される有機金属化合物の合成方法は、後述する実施例を参照して当業者が認識することができるであろう。

【0098】

化学式1で表される有機金属化合物のうち少なくとも一つは、有機電界発光素子の1対の電極間に使用されてもよい。例えば、該有機金属化合物は、発光層に含まれる。発光層に含まれた有機金属化合物は、ドーパントとしての役割を行うことができる。または、化学式1で表される有機金属化合物は、有機電界発光素子の1対の電極外側に位置したキャッピング層の材料として使用されてもよい。

【0099】

従って、第1電極と、該第1電極に対向した第2電極と、第1電極と第2電極との間に介在され、発光層を含む有機層と、を含み、化学式1で表される有機金属化合物を1種以上含む有機電界発光素子が提供される。

【0100】

本明細書において、「（有機層が）有機金属化合物を1種以上含む」とは、「（有機層が）化学式1の範疇に属する1種の有機金属化合物、または化学式1の範疇に属する互いに異なる2種以上の有機金属化合物を含んでもよい」と解釈される。

【0101】

例えば、有機層は、本開示の有機金属化合物として、前述の化合物1のみを含んでもよい。このとき、化合物1は、有機電界発光素子の発光層に存在してもよい。また、有機層は、本開示の有機金属化合物として、化合物1と化合物2とを含んでもよい。このとき、化合物1と化合物2は、同一層に存在（例えば、化合物1と化合物2は、いずれも発光層に存在する）してもよく、あるいは互いに異なる層に存在（例えば、化合物1は、発光層に存在し、化合物2は、電子輸送領域に存在する）してもよい。

【0102】

一実施形態によれば、
有機電界発光素子の第1電極は、アノードであり、
有機電界発光素子の第2電極は、カソードであり、
有機層は、第1電極と発光層との間に介在された正孔輸送領域（hole transport region）、及び発光層と前記第2電極との間に介在された電子輸送領域（electron transport region）をさらに含み、

正孔輸送領域は、正孔注入層、正孔輸送層、発光補助層、電子阻止層、またはそれらの任意の組み合わせを含み、

電子輸送領域は、正孔阻止層、電子輸送層、電子注入層、またはそれらの任意の組み合わせを含んでもよい。

【0103】

本明細書において、「有機層」は、有機電界発光素子において、第1電極と第2電極との間に介在された単一及び／または複数の全ての層を示す用語である。「有機層」の層に含まれた物質が有機物に限定されるものではない。

【0104】

他の実施形態によれば、発光層に、化学式1で表される有機金属化合物が含まれており、発光層は、ホストをさらに含み、発光層におけるホストの含量は、発光層における本開示の有機金属化合物の含量よりも多くなる。

【0105】

一実施形態によれば、正孔輸送領域が電子阻止層を含み、電子阻止層に、本開示の有機金属化合物が含まれていてもよく、あるいは

電子輸送領域が正孔阻止層を含み、正孔阻止層に、本開示の有機金属化合物が含まれていてもよい。

【0106】

一実施形態によれば、正孔輸送領域は、LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) エネルギー準位が -3.5 eV 以下であるp-ドーパントを含んでもよい。

【0107】

[有機電界発光素子10]

図1は、本発明の一実施形態による有機電界発光素子10の断面図を概略的に示したものである。有機電界発光素子10は、第1電極110、有機層150及び第2電極190を含む。

【0108】

以下、図1を参照し、本発明の一実施形態による有機電界発光素子10の構造及び製造方法について、以下に説明する。

【0109】

[第1電極110]

図1の第1電極110の下部、または第2電極190の上部には、基板が追加しても配置されてもよい。基板としては、機械的強度、熱安定性、透明性、表面平滑性、取り扱い容易性及び防水性にすぐれるガラス基板またはプラスチック基板を使用することができる。

【0110】

第1電極110は、例えば、基板上部に、蒸着法またはスパッタリング法などを利用して第1電極用物質を設けることによって形成される。第1電極110がアノードである場合、正孔注入が容易であるように、第1電極用物質は、高い仕事関数を有する物質のうちから選択されることが好ましい。

【0111】

第1電極110は、反射型電極、半透過型電極または透過型電極である。透過型電極である第1電極110を形成するためには、第1電極用物質は、酸化インジウムスズ (ITO)、酸化インジウム亜鉛 (IZO)、酸化スズ (SnO_2)、酸化亜鉛 (ZnO)、及びこれらの任意の組み合わせ (combination) のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。また、半透過型電極または反射型電極である第1電極110を形成するためには、第1電極用物質は、マグネシウム (Mg)、銀 (Ag)、アルミニウム (Al)、アルミニウム-リチウム (Al-Li)、カルシウム (Ca)、マグネシウム-インジウム (Mg-In)、マグネシウム-銀 (Mg-Ag)、及びこれらの任意の組み合わせのうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0112】

第1電極110は、単一層である単層構造、または複数の層を有する多層構造を有することができる。例えば、第1電極110は、ITO/Ag/ITOの3層構造を有することができるが、これに限定されるものではない。

【0113】

[有機層150]

第1電極110上部には、有機層150が配置されている。有機層150は、発光層を含む。

【0114】

有機層150は、第1電極110と発光層との間に介在された正孔輸送領域、及び発光層と第2電極190との間に介在された電子輸送領域をさらに含んでもよい。

【0115】

[有機層150における正孔輸送領域]

正孔輸送領域は、i) 単一物質からなる単層構造、ii) 複数の互いに異なる物質からなる単層構造、あるいはiii) 複数の互いに異なる物質からなる複数の層を有する多層構造を有することができる。

【0116】

10

20

30

40

50

正孔輸送領域は、正孔注入層（HIL）、正孔輸送層（HTL）、発光補助層及び電子阻止層（EBL）のうちから選択された少なくとも1層の層を含んでもよい。

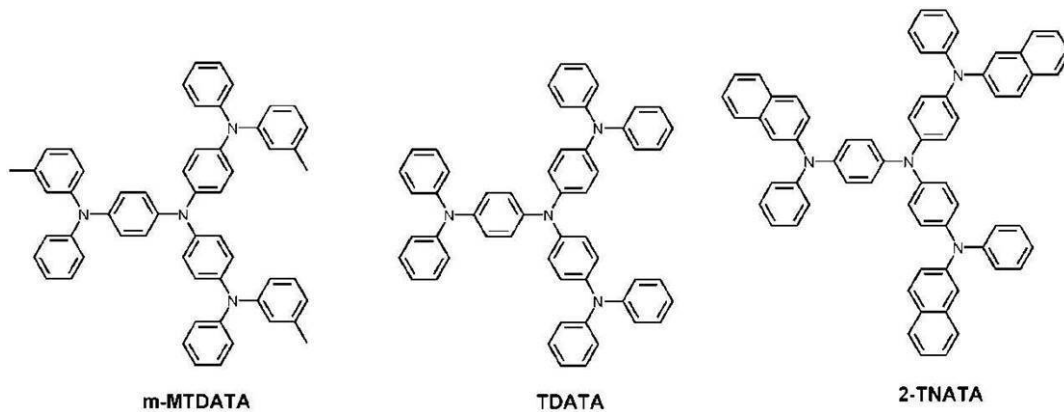
【0117】

例えば、正孔輸送領域は、複数の互いに異なる物質からなる単層構造を有するか、あるいは第1電極110から順に積層された正孔注入層／正孔輸送層、正孔注入層／正孔輸送層／発光補助層、正孔注入層／発光補助層、正孔輸送層／発光補助層または正孔注入層／正孔輸送層／電子阻止層の多層構造を有することができるが、これらに限定されるものではない。

【0118】

正孔輸送領域は、*m*-MTDATA、TDATA、2-TNATA、NPB（NPD）、 β -NPB、TPD、spiro-TPD、spiro-NPB、メチル化された-NPB、TAPC、HMTPD、4,4',4''-トリス（*N*-カルbazolil）トリフェニルアミン（TCTA）、ポリアニリン／ドデシルベンゼンスルホン酸（Pani/DBSA）、ポリ（3,4-エチレンジオキシチオフェン）／ポリ（4-スチレンスルホネート）（PEDOT/PSS）、ポリアニリン／カンファースルホン酸（Pani/CSA）、ポリアニリン／ポリ（4-スチレンスルホネート）（PANI/PSS）、下記化学式201で表わされる化合物、及び下記化学式202で表わされる化合物のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよい。

【化36】



10

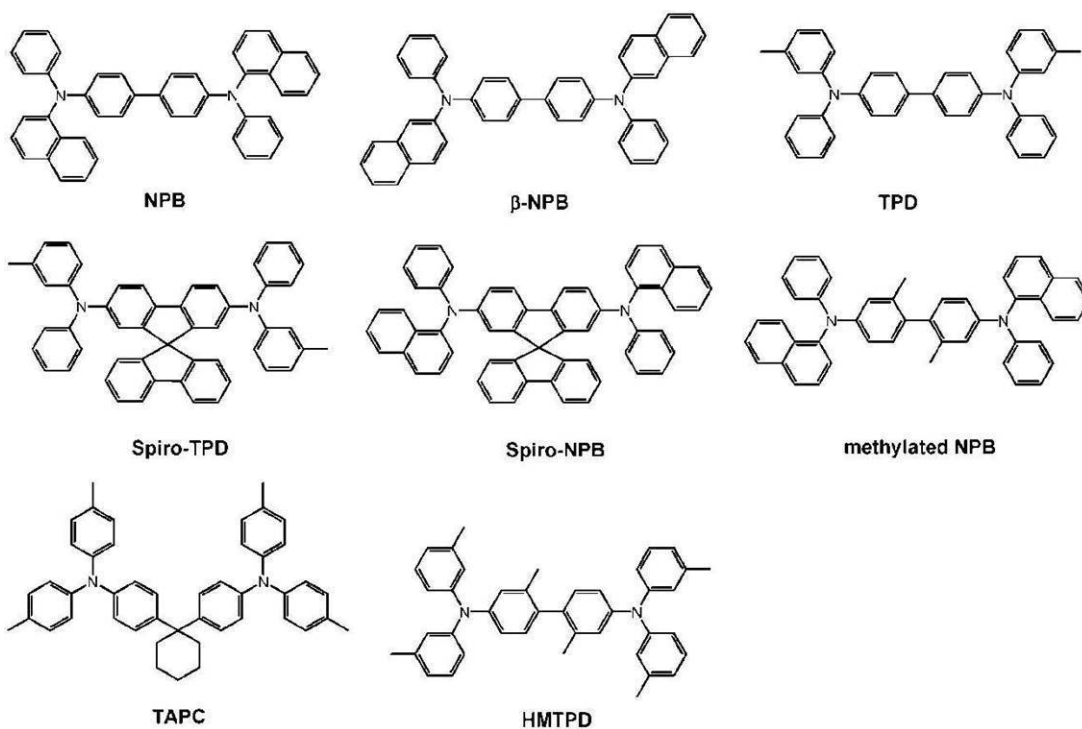
20

30

40

50

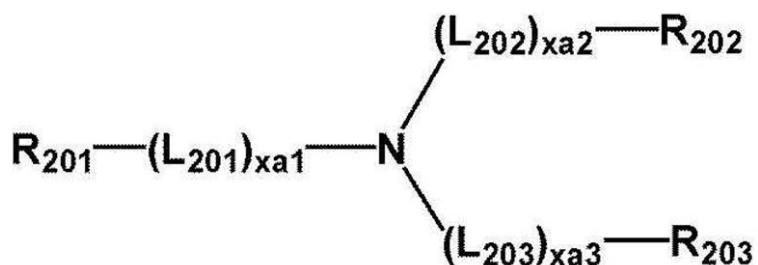
【化 3 7】



10

20

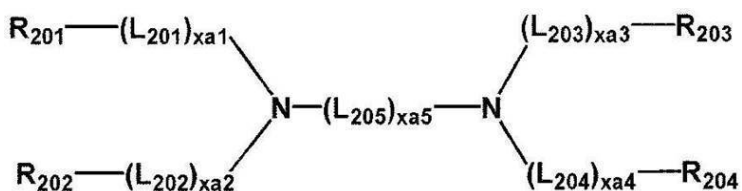
【化 3 8】



30

... (化学式 2 0 1)

【化 3 9】



... (化学式 2 0 2)

【0 1 1 9】

化学式 2 0 1 及び化学式 2 0 2 において、

$L_{201} \sim L_{204}$ は、互いに独立して、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

L_{205} は、 $* - O - *$ 、 $* - S - *$ 、 $* - N (201) - *$ 、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{20}$ アルキレン基、置換もしくは無置換の $C_2 - C_{20}$ アルケニレン基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテ

40

50

ロシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリーレン基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

$x_{a1} \sim x_{a4}$ は、互いに独立して、0～3の整数のうちから選択され、

x_{a5} は、1～10の整数のうちから選択され、

$R_{201} \sim R_{204}$ 、及び Q_{201} は、互いに独立して、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択される。

【0120】

例えば、化学式202において、 R_{201} と R_{202} は、選択的に、単結合、ジメチルメチレン基またはジフェニルメチレン基を介して互いに結合されてもよく、 R_{203} と R_{204} は、選択的に、単結合、ジメチルメチレン基またはジフェニルメチレン基を介して互いに結合されてもよい。

【0121】

一例によれば、化学式201及び化学式202において、

$L_{201} \sim L_{205}$ は、互いに独立して、

フェニレン基、ペンタレニレン基、インデニレン基、ナフチレン基、アズレニレン基、ヘプタレニレン基、インダセニレン基、アセナフチレン基、フルオレニレン基、スピロビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ナフタセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、ルビセニレン基、コロネニレン基、オバレニレン基、チオフエニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフエニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフエニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基及びピリジニレン基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、 C_1-C_{10} アルキル基で置換されたフェニル基、 $-F$ で置換されたフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフエニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフエニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、及び $-N(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ペンタレニレン基、インデニレン基、ナフチレン基、アズレニレン基、ヘプタレニレン基、インダセニレン基、アセナフチレン基、フルオレニレン基、スピロビフルオレニレン基、ベンゾフルオ

レニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ナフタセニレン基、ピセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、ルビセニレン基、コロネニレン基、オバレニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基及びピリジニレン基；のうちから選択され、

前述の $Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、 $C_{1} - C_{10}$ アルキル基、 $C_{1} - C_{10}$ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基及びナフチル基のうちから選択される。

10

【0122】

他の例によれば、 $x_{a1} \sim x_{a4}$ は、互いに独立して、0、1または2であってもよい。

【0123】

さらに他の例によれば、 x_{a5} は、1、2、3または4であってもよい。

【0124】

さらに他の例によれば、 $R_{201} \sim R_{204}$ 、及び Q_{201} は、互いに独立して、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基；並びに

20

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_{1} - C_{20}$ アルキル基、 $C_{1} - C_{20}$ アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、 $C_{1} - C_{10}$ アルキル基で置換されたフェニル基、 $-F$ で置換されたフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、及び $-N(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルビセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル

30

40

50

基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基；のうちから選択され、

前述の $Q_{31} \sim Q_{33}$ についての説明は、本明細書に記載されたところを参照する。

【0125】

さらに他の例によれば、化学式201において、 $R_{201} \sim R_{203}$ のうち少なくとも一つは、互いに独立して、

フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 \sim C_{20}$ アルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、 $C_1 \sim C_{10}$ アルキル基で置換されたフェニル基、 $-F$ で置換されたフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、及びジベンゾチオフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基；のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0126】

さらに他の例によれば、化学式202において、i) R_{201} と R_{202} は、単結合を介して互いに結合されてもよく、及び／あるいはii) R_{203} と R_{204} は、単結合を介して互いに結合されてもよい。

【0127】

さらに他の例によれば、化学式202において、 $R_{201} \sim R_{204}$ のうち少なくとも一つは、

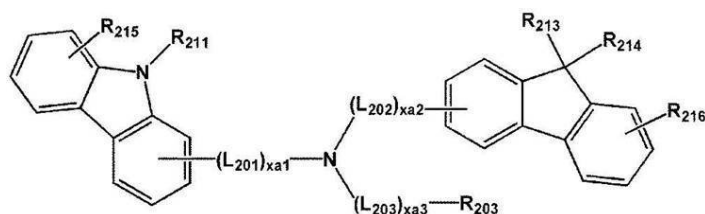
カルバゾリル基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 \sim C_{20}$ アルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、 $C_1 \sim C_{10}$ アルキル基で置換されたフェニル基、 $-F$ で置換されたフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、及びジベンゾチオフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換されたカルバゾリル基；のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0128】

化学式201で表わされる化合物は、下記化学式201Aで表わされてもよい。

【化40】



・・・（化学式201A）

【0129】

例えば、化学式201で表わされる化合物は、下記化学式201A（1）で表わされてもよいが、これに限定されるものではない。

10

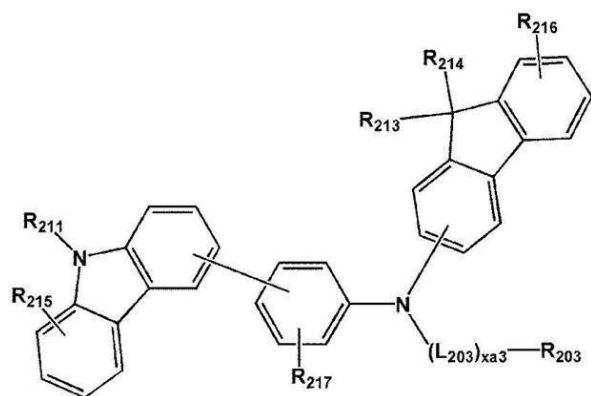
20

30

40

50

【化 4 1】



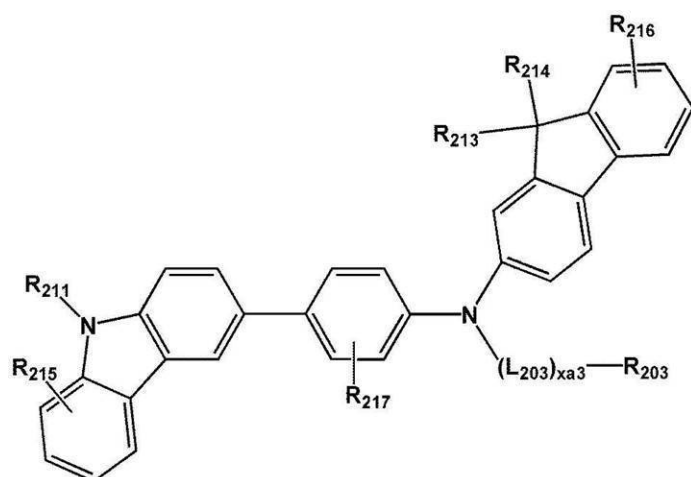
10

・・・（化学式 2 0 1 A （ 1 ））

【 0 1 3 0】

他の例として、化学式 2 0 1 で表わされる化合物は、下記化学式 2 0 1 A - 1 で表されてもよいが、これに限定されるものではない。

【化 4 2】



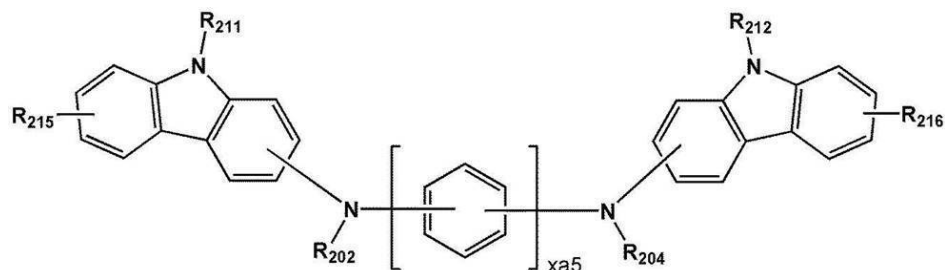
20

・・・（化学式 2 0 1 A - 1）

【 0 1 3 1】

一方、化学式 2 0 2 で表わされる化合物は、下記化学式 2 0 2 A で表わされてもよい。

【化 4 3】



40

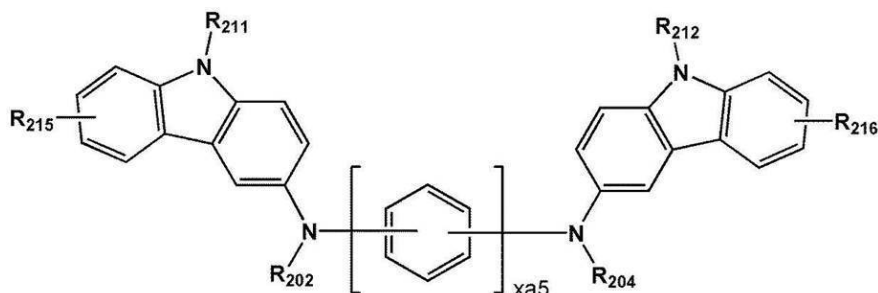
・・・（化学式 2 0 2 A）

【 0 1 3 2】

他の例によれば、化学式 2 0 2 で表わされる化合物は、下記化学式 2 0 2 A - 1 で表されてもよい。

50

【化 4 4】



・・・（化学式 202A-1）

【0133】

化学式 201A，化学式 201A（1），化学式 201A-1，化学式 202A 及び化学式 202A-1 において、

L201～L203、xa1～xa3、xa5、及び R202～R204 についての説明は、本明細書に記載されたところを参照し、

R211 及び R212 についての説明は、本明細書において、R203 についての説明を参照し、

R213～R217 は、互いに独立して、水素、重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、C₁～C₂₀アルキル基、C₁～C₂₀アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、シクロペンテニル基、シクロヘキセニル基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、C₁～C₁₀アルキル基で置換されたフェニル基、-F で置換されたフェニル基、ペンタレニル基、インデニル基、ナフチル基、アズレニル基、ヘプタレニル基、インダセニル基、アセナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、ルピセニル基、コロネニル基、オバレニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、及びピリジニル基のうちから選択される。

【0134】

正孔輸送領域は、下記化合物 HT1～化合物 HT39 のうちから選択された少なくとも 1 つの化合物を含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

10

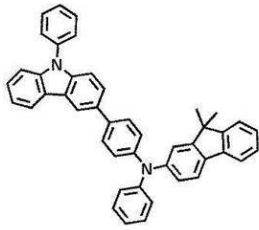
20

30

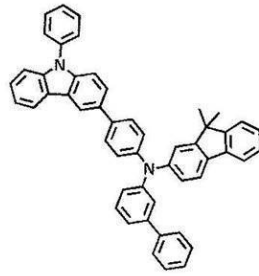
40

50

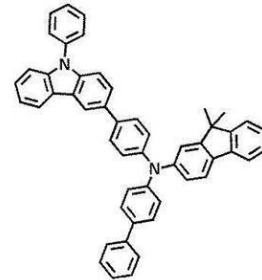
【化 4 5】



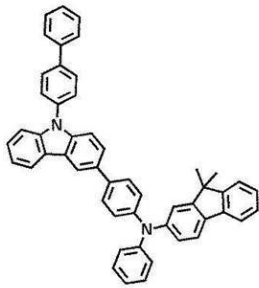
HT1



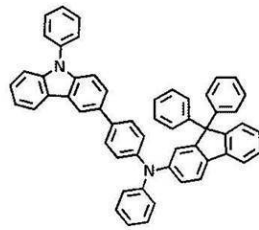
HT2



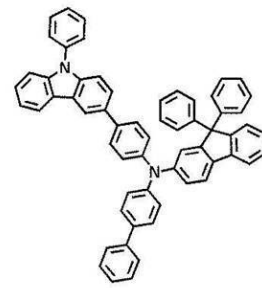
HT3



HT4

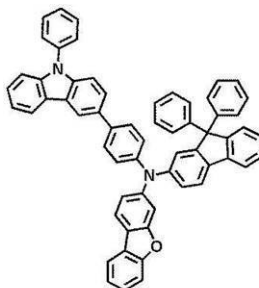


HT5

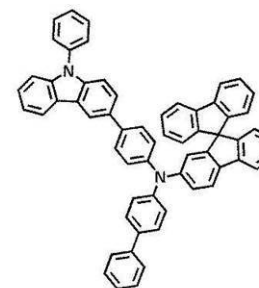


HT6

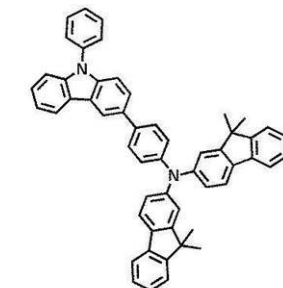
【化 4 6】



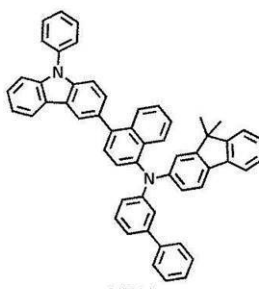
HT7



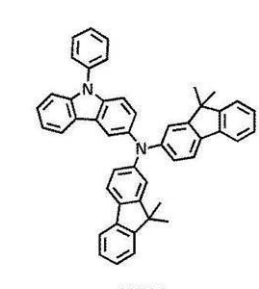
HT8



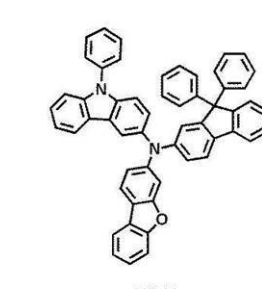
HT9



HT10



HT11



HT12

10

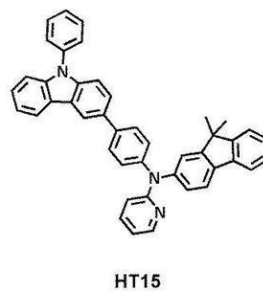
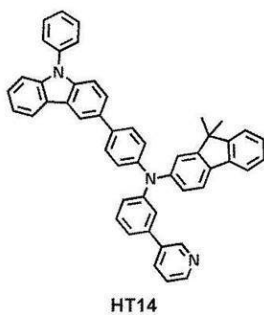
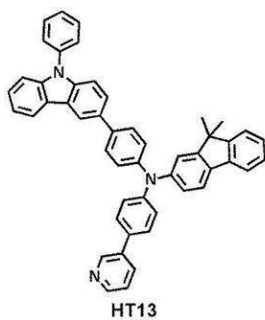
20

30

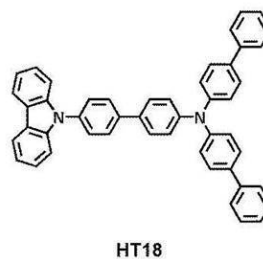
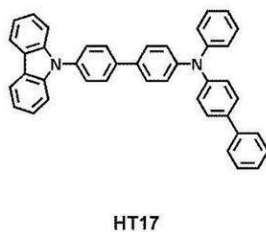
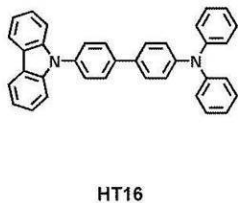
40

50

【化 4 7】

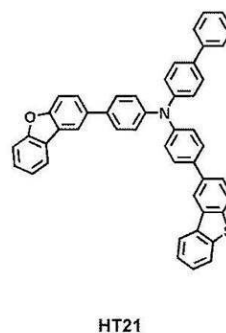
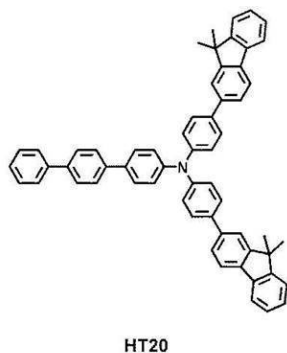
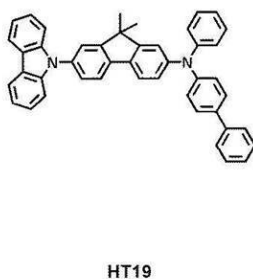


10

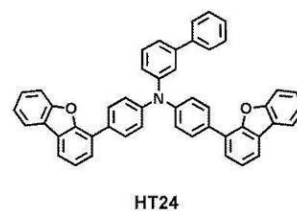
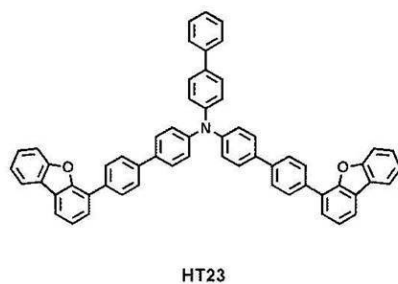
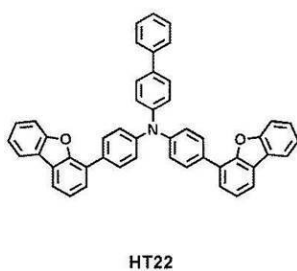


【化 4 8】

20



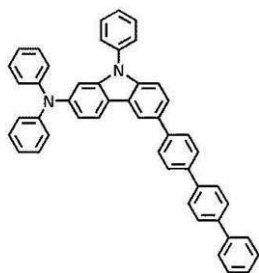
30



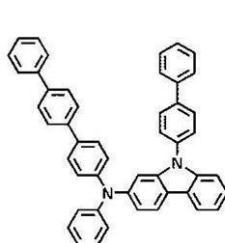
40

50

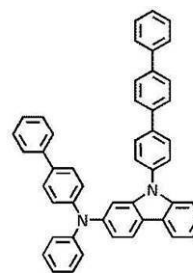
【化 4 9】



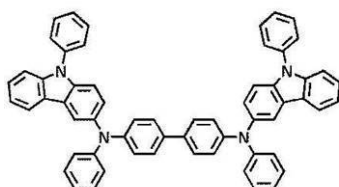
HT25



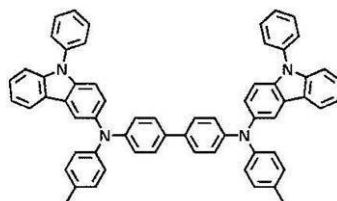
HT26



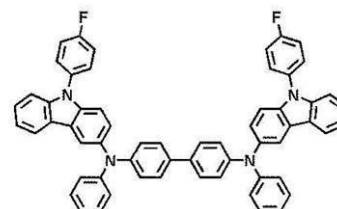
HT27



HT28

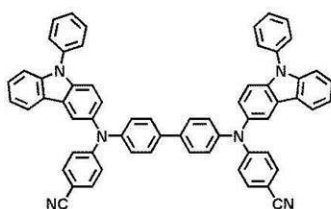


HT29

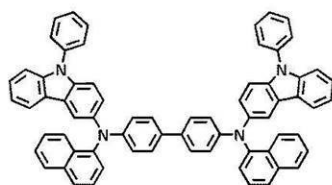


HT30

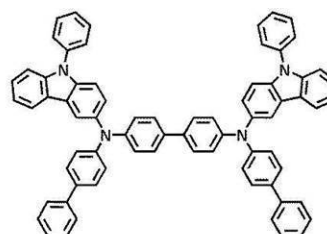
【化 5 0】



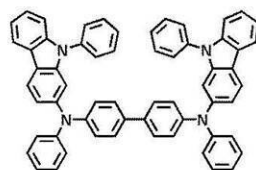
HT31



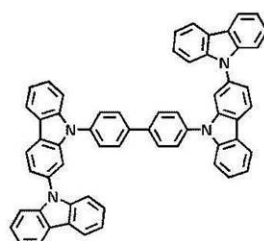
HT32



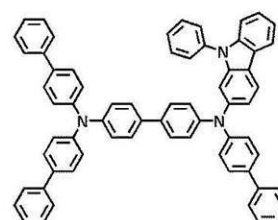
HT33



HT34

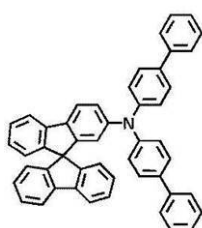


HT35

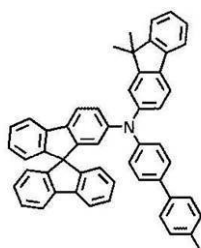


HT36

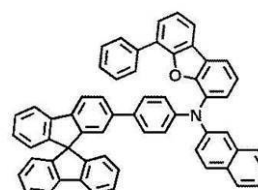
【化 5 1】



HT37



HT38



HT39

【0135】

正孔輸送領域の厚みは、約10nm～約1,000nm、例えば、約10nm～約100nmであってもよい。正孔輸送領域が正孔注入層及び正孔輸送層のうち少なくとも1層

10

20

30

40

50

を含むならば、正孔注入層の厚みは、約 10 nm～約 900 nm、例えば、約 10 nm～約 100 nmであってもよく、正孔輸送層の厚みは、約 5 nm～約 200 nm、例えば、約 10 nm～約 150 nmであってもよい。正孔輸送領域、正孔注入層及び正孔輸送層の厚みが前述のような範囲を満たす場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、十分な正孔輸送特性を得ることができる。

【0136】

発光補助層は、発光層から放出される光の波長による光学的共振距離を補償し、光放出効率を上昇させる役割を行う層であり、電子阻止層は、電子輸送領域からの電子注入を防止する役割を行う層である。発光補助層及び電子阻止層には、前述のような物質が含まれている。

10

【0137】

〔p-ドーパント〕

正孔輸送領域は、前述のような物質以外に、導電性向上のために、電荷生成物質をさらにも含んでもよい。電荷生成物質は、正孔輸送領域内に、均一に分散されていてもよく、不均一に分散されていてもよい。

【0138】

該電荷生成物質としては、例えば、p-ドーパントである。

【0139】

一例によれば、該 p-ドーパントの LUMO は、 -3.5 eV 以下であってもよい。

【0140】

p-ドーパントは、キノン誘導体、金属酸化物及びシアノ基含有化合物のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

20

【0141】

例えば、p-ドーパントは、

テトラシアノキノジメタン (TCNQ) 及び 2, 3, 5, 6-テトラフルオロ-7, 7, 8, 8-テトラシアノキノジメタン (F4-TCNQ) のようなキノン誘導体；

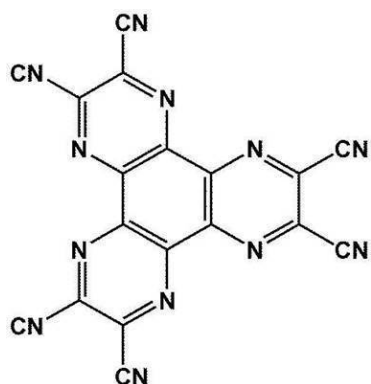
タングステン酸化物及びモリブデン酸化物のような金属酸化物；

1, 4, 5, 8, 9, 12-ヘキサアザトリフェニレン-ヘキサカルボニトリル (HAT-CN)；並びに

下記化学式 221 で表わされる化合物；のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

30

【化 52】

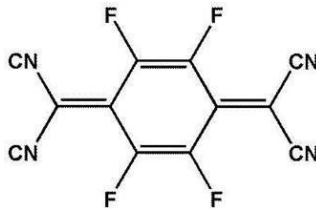


40

・・・＜HAT-CN＞

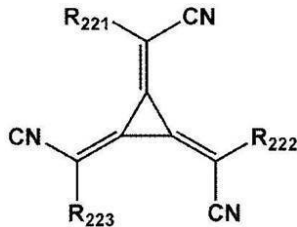
50

【化 5 3】



・・・＜F 4－T C N Q＞

【化 5 4】



・・・（化学式 2 2 1）

【0 1 4 2】

化学式 2 2 1 において、

R₂₂₁～R₂₂₃は、互いに独立して、置換もしくは無置換のC₃－C₁₀シクロアルキル基、置換もしくは無置換のC₁－C₁₀ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換のC₃－C₁₀シクロアルケニル基、置換もしくは無置換のC₁－C₁₀ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換のC₆－C₆₀アリール基、置換もしくは無置換のC₁－C₆₀ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択されるが、前述のR₂₂₁～R₂₂₃のうち少なくとも一つは、シアノ基、－F、－Cl、－Br、－I、－Fで置換されたC₁－C₂₀アルキル基、－Clで置換されたC₁－C₂₀アルキル基、－Brで置換されたC₁－C₂₀アルキル基、及び－Iで置換されたC₁－C₂₀アルキル基のうちから選択された少なくとも1つの置換基を有する。

【0 1 4 3】

〔有機層 1 5 0 における発光層〕

有機電界発光素子 1 0 がフルカラー有機電界発光素子である場合、発光層は、個別副画素別に、赤色発光層、緑色発光層及び青色発光層にパターンニングされてもよい。また、発光層は、赤色発光層、緑色発光層及び青色発光層のうちから選択された 2 以上の層が接触又は離隔されて積層された構造を有するか、あるいは赤色光放出物質、緑色光放出物質及び青色光放出物質のうちから選択された 2 以上の物質が層区分なしに混合された構造を有し、白色光を放出してもよい。

【0 1 4 4】

発光層は、ホスト及びドーパントを含んでもよい。ドーパントは、リン光ドーパント及び蛍光ドーパントのうち少なくとも一つを含んでもよい。また、リン光ドーパントは、本明細書における、化学式 1 で表される有機金属化合物を含んでもよい。

【0 1 4 5】

発光層におけるドーパントの含量は、一般的に、ホスト約 1 0 0 重量部に対して、約 0 . 0 1 ～約 1 5 重量部の範囲から選択されるが、これに限定されるものではない。

【0 1 4 6】

発光層の厚みは、約 1 0 nm ～約 1 0 0 nm、例えば、約 2 0 nm ～約 6 0 nm であってもよい。発光層の厚みが前述のような範囲を満たす場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、十分な発光特性を示すことができる。

【0 1 4 7】

10

20

30

40

50

[発光層におけるホスト]

ホストは、下記化学式 301 で表わされる化合物を含んでもよい。

$[Ar_{301}]_{xb11} - [(L_{301})_{xb1} - R_{301}]_{xb21} \cdots$ (化学式 301)
[0148]

化学式 301 において、

Ar_{301} は、置換もしくは無置換の $C_5 - C_{60}$ 炭素環基、または置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロ環基であり、

$xb11$ は、1、2 または 3 であり、

L_{301} は、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリーレン基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

$xb1$ は、0 ～ 5 の整数のうちから選択され、

R_{301} は、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ アルキル基、置換もしくは無置換の $C_2 - C_{60}$ アルケニル基、置換もしくは無置換の $C_2 - C_{60}$ アルキニル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ アルコキシ基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の $C_3 - C_{10}$ シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{10}$ ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリール基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリールオキシ基、置換もしくは無置換の $C_6 - C_{60}$ アリールチオ基、置換もしくは無置換の $C_1 - C_{60}$ ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{301})(Q_{302})(Q_{303})$ 、 $-N(Q_{301})(Q_{302})$ 、 $-B(Q_{301})(Q_{302})$ 、 $-C(=O)(Q_{301})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{301})$ 及び $-P(=O)(Q_{301})(Q_{302})$ のうちから選択され、

$xb21$ は、1 ～ 5 の整数のうちから選択され、

$Q_{301} \sim Q_{303}$ は、互いに独立して、 $C_1 - C_{10}$ アルキル基、 $C_1 - C_{10}$ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

[0149]

一例によれば、化学式 301 における Ar_{301} は、

ナフタレン、フルオレン、スピロ-ビフルオレン、ベンゾフルオレン、ジベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェン、インデノアントラセン、ジベンゾフラン及びジベンゾチオフエン；から選択される環構造、並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ナフタレン、フルオレン、スピロ-ビフルオレン、ベンゾフルオレン、ジベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェン、インデノアントラセン、ジベンゾフラン及びジベンゾチオフエン；から選択される環構造のうちから選択され、

$Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、 $C_1 - C_{10}$ アルキル基、 $C_1 - C_{10}$ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちから選択され

るが、これらに限定されるものではない。

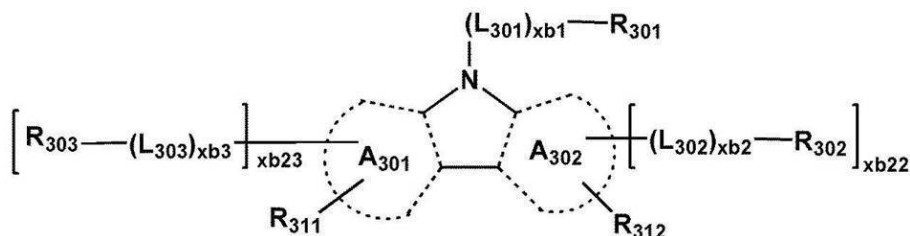
【0150】

化学式301において、 x_{b11} が2以上である場合、2以上の A_{r301} は、単結合を介して互いに結合されてもよい。

【0151】

他の例によれば、化学式301で表わされる化合物は、下記化学式301-1または化学式301-2によって表わされる。

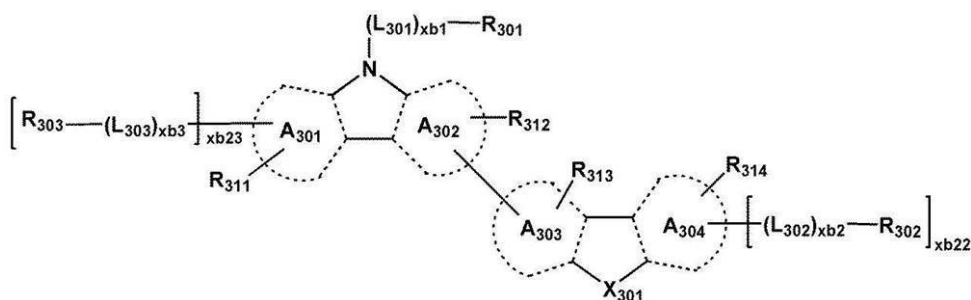
【化55】



10

・・・(化学式301-1)

【化56】



20

・・・(化学式301-2)

【0152】

化学式301-1～化学式301-2において、

$A_{301} \sim A_{304}$ は、互いに独立して、ベンゼン、ナフタレン、フェナントレン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ピリジン、ピリミジン、インデン、フルオレン、スピロビフルオレン、ベンゾフルオレン、ジベンゾフルオレン、インドール、カルバゾール、ベンゾカルバゾール、ジベンゾカルバゾール、フラン、ベンゾフラン、ジベンゾフラン、ナフトフラン、ベンゾナフトフラン、ジナフトフラン、チオフェン、ベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、ナフトチオフェン、ベンゾナフトチオフェン及びジナフトチオフェンのうちから選択される環構造であり、

30

X_{301} は、O、Sまたは $N - [(L_{304})_{x_{b4}} - R_{304}]$ であり、

$R_{311} \sim R_{314}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシ基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 - C_{20}$ アルキル基、 $C_1 - C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択され、

40

x_{b22} 及び x_{b23} は、互いに独立して、0、1または2であり、

L_{301} 、 x_{b1} 、 R_{301} 、及び $Q_{31} \sim Q_{33}$ についての説明は、本明細書に記載されたところを参照し、

$L_{302} \sim L_{304}$ についての説明は、互いに独立して、前述の L_{301} についての説明を参照し、

$x_{b2} \sim x_{b4}$ についての説明は、互いに独立して、前述の x_{b1} についての説明を参照し、

50

R₃₀₂～R₃₀₄についての説明は、互いに独立して、前述のR₃₀₁についての説明を参照する。

【0153】

例えば、化学式301、化学式301-1及び化学式301-2において、L₃₀₁～L₃₀₄は、互いに独立して、

フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフエニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフエニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフエニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、チアジアゾリレン基、オキサジアゾリレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾキノリニレン基、フタラジニレン基、ナフチリジニレン基、キノキサリニレン基、キナゾリニレン基、シンノリニレン基、フェナントリジニレン基、アクリジニレン基、フェナントロリニレン基、フェナジニレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イソベンゾチアゾリレン基、ベンゾオキサゾリレン基、イソベンゾオキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、イミダゾピリジニレン基、イミダゾピリミジニレン基及びアザカルバゾリレン基；並びに

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、C₁-C₂₀アルキル基、C₁-C₂₀アルコキシ基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフエニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフエニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、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、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、アザカルバゾリル基、-Si(Q₃₁)(Q₃₂)(Q₃₃)、-N(Q₃₁)(Q₃₂)、-B(Q₃₁)(Q₃₂)、-C(=O)(Q₃₁)、-S(=O)₂(Q₃₁)及び-P(=O)(Q₃₁)(Q₃₂)のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフエニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフエニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフエニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、チアジアゾリレン基、オキサジアゾリレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジ

10

20

30

40

50

ニレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾキノリニレン基、フタラジニレン基、ナフチリジニレン基、キノキサリニレン基、キナゾリニレン基、シンノリニレン基、フェナントリジニレン基、アクリジニレン基、フェナントロリニレン基、フェナジニレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イソベンゾチアゾリレン基、ベンゾオキサゾリレン基、イソベンゾオキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、イミダゾピリジニレン基、イミダゾピリミジニレン基及びアザカルバゾリレン基；のうちから選択され、

前述の $Q_{31} \sim Q_{33}$ についての説明は、本明細書に記載されたところを参照することができる。

【0154】

他の例として、化学式 301，化学式 301-1 及び化学式 301-2 において、 $R_{301} \sim R_{304}$ は、互いに独立して、

フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、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、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_1 \sim C_{20}$ アルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、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、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基、アザカルバゾリル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-N(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-B(Q_{31})(Q_{32})$ 、 $-C(=O)(Q_{31})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基

10

20

30

40

50

、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、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、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基；のうちから選択され、

10

前述のQ₃₁～Q₃₃についての説明は、本明細書に記載されたところを参照することができる。

【0155】

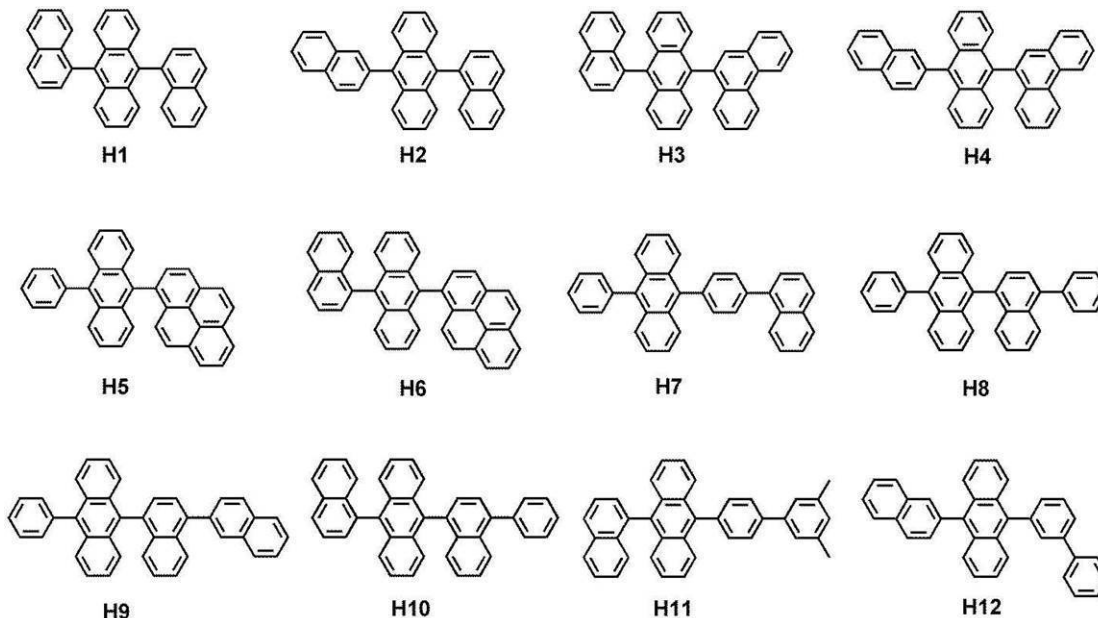
さらに他の例として、ホストは、アルカリ土類金属錯体を含んでもよい。例えば、ホストは、Be錯体（例えば、下記化合物H55）、Mg錯体及びZn錯体のうちから選択されてもよい。

【0156】

ホストは、9,10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(ADN)、2-メチル-9,10-ビス(ナフタレン-2-イル)アントラセン(MADN)、9,10-ジ(2-ナフチル)-2-セーブチル-アントラセン(TBADN)、4,4'-ビス(N-カルバゾリル)-1,1'-ビフェニル(CBP)、1,3-ジ(9-カルバゾリル)ベンゼン(mCP)、1,3,5-トリ(カルバゾール-9-イル)ベンゼン(TCP)、及び下記化合物H1～化合物H55のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

20

【化57】

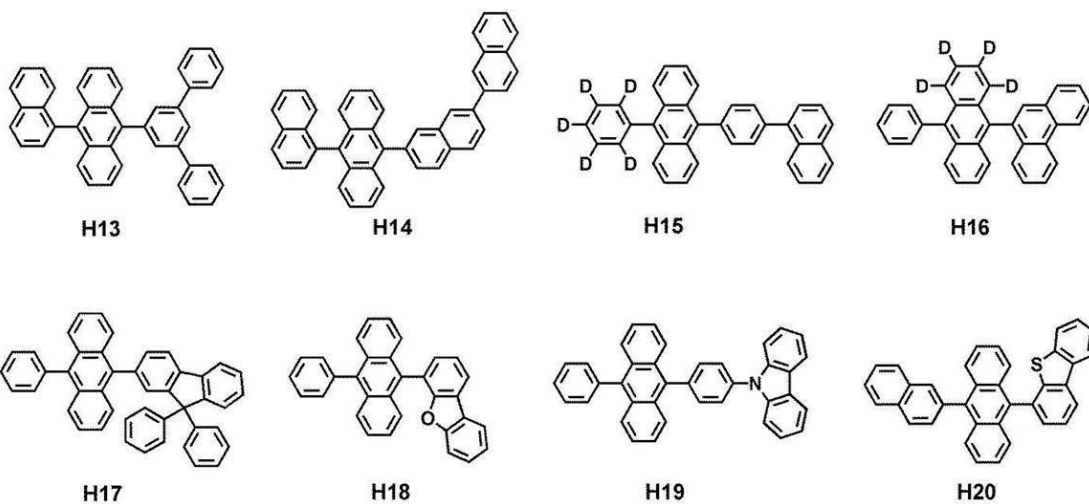


30

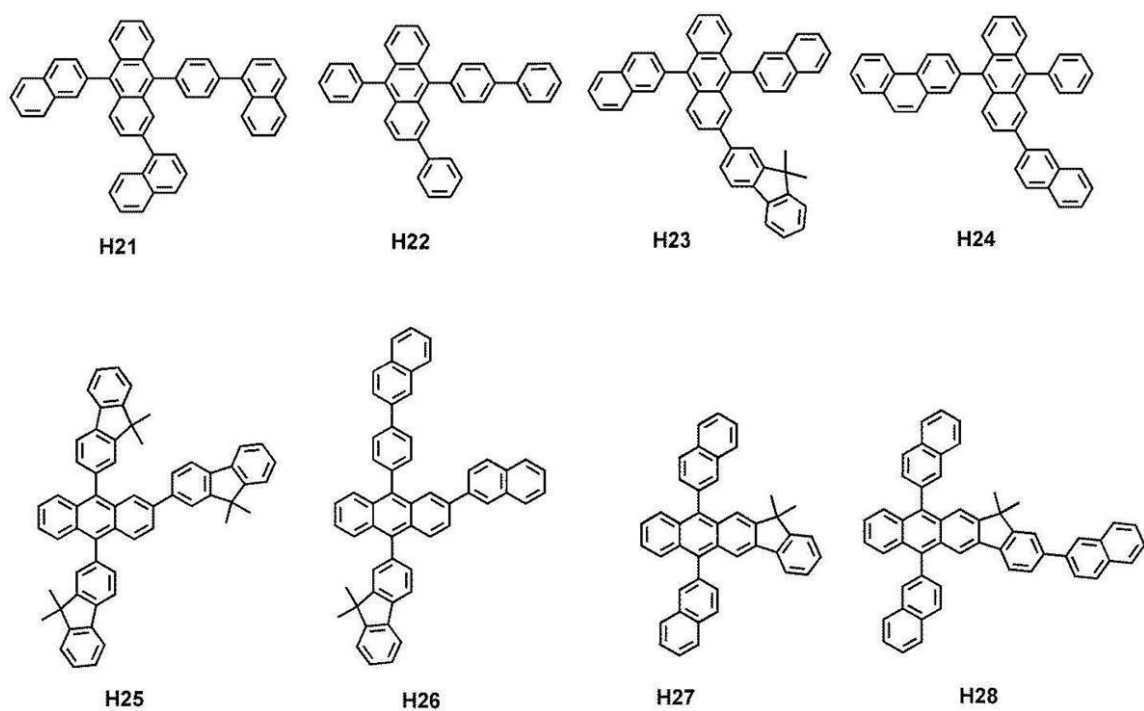
40

50

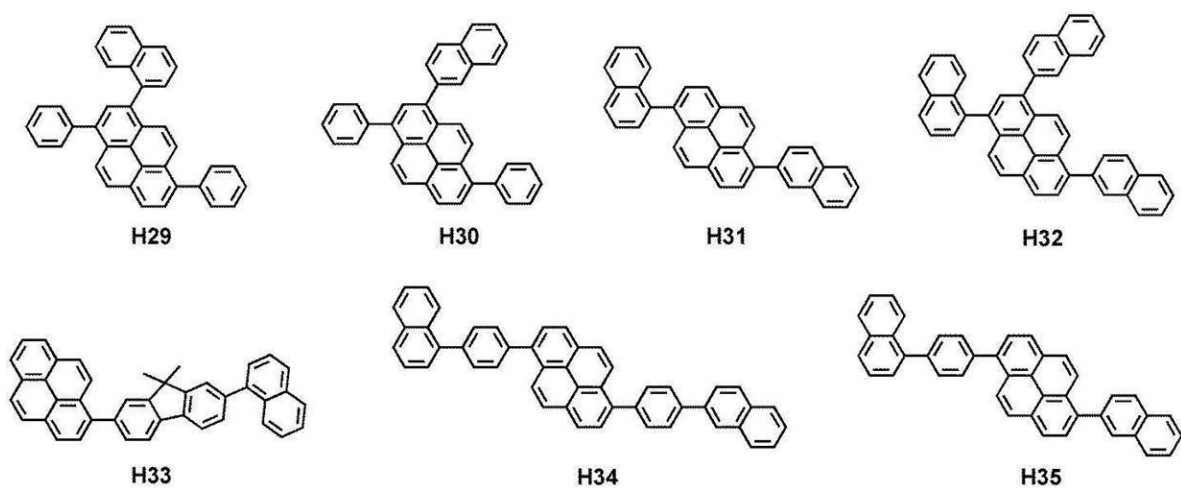
【化 5 8】



【化 5 9】



【化 6 0】



10

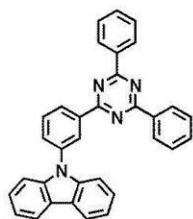
20

30

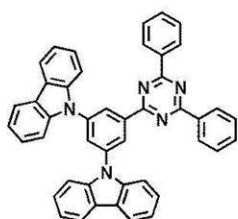
40

50

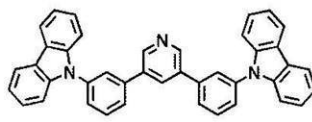
【化 6 1】



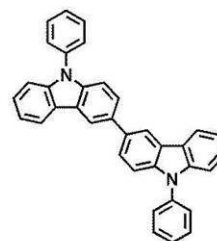
H36



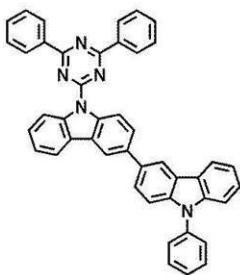
H37



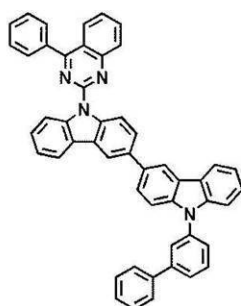
H38



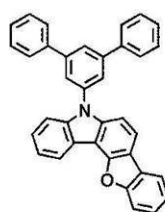
H39



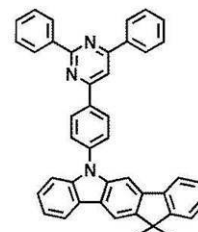
H40



H41

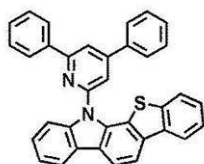


H42

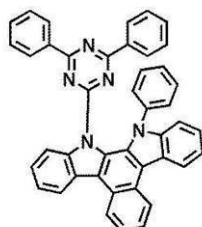


H43

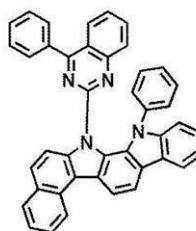
【化 6 2】



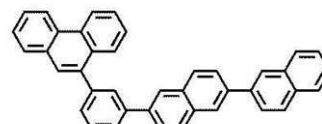
H44



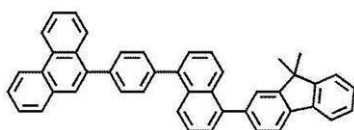
H45



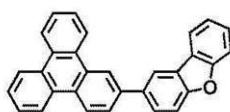
H46



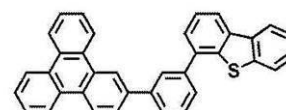
H47



H48

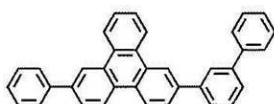


H49

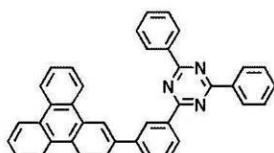


H50

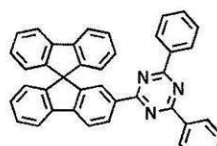
【化 6 3】



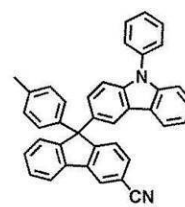
H51



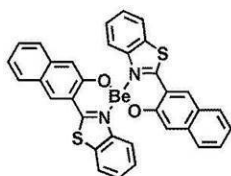
H52



H53



H54



H55

【 0 1 5 7 】

また、ホストは、シリコン含有化合物（例えば、下記実施例で使用されたビス（４－（９Ｈ－カルバゾール－９－イル）フェニル）ジフェニルシラン（ＢＣＰＤＳ）など）及びホスフィンオキシド含有化合物（例えば、下記実施例で使用された４－（１－（４－（ジフェニルアミノ）フェニル）シクロヘキシル）フェニル）ジフェニル－ホスフィンオキシド（ＰＯＰＣＰＡ）など）のうち少なくとも一つを含んでもよい。

【０１５８】

ホストは、１種の化合物のみを含んでもよく、あるいは互いに異なる２種以上の化合物を含んでもよい。例えば、下記実施例のホストは、ＢＣＰＤＳ及びＰＯＰＣＰＡからなるように、多様な変形が可能である。

【０１５９】

〔有機層１５０における発光層に含まれたリン光ドーパント〕

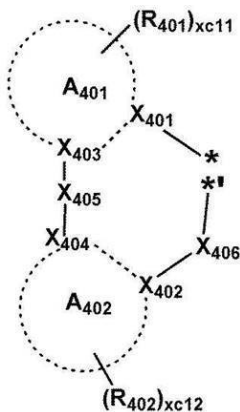
リン光ドーパントは、本明細書における化学式１で表される有機金属化合物を含んでもよい。

【０１６０】

また、リン光ドーパントは、下記化学式４０１及び化学式４０２で表わされる有機金属錯体を含んでもよい。

$M(L_{401})_{xc1}(L_{402})_{xc2} \cdots$ （化学式４０１）

【化６４】



・・・（化学式４０２）

【０１６１】

化学式４０１及び化学式４０２において、

Mは、イリジウム（Ir）、白金（Pt）、パラジウム（Pd）、オスミウム（Os）、チタン（Ti）、ジルコニウム（Zr）、ハフニウム（Hf）、ユウロピウム（Eu）、テルビウム（Tb）、ロジウム（Rh）及びツリウム（Tm）のうちから選択され、

L₄₀₁は、化学式４０２で表わされるリガンド（配位子）のうちから選択され、xc₁は、１、２または３であり、xc₁が２以上である場合、２以上のL₄₀₁は、互いに同一であるか、あるいは異なっており、

L₄₀₂は、有機リガンドであり、xc₂は、０～４の整数のうちから選択され、xc₂が２以上である場合、２以上のL₄₀₂は、互いに同一であるか、あるいは異なっており、

X₄₀₁～X₄₀₄は、互いに独立して、窒素または炭素であり、

X₄₀₁とX₄₀₃は、単結合または二重結合を介して結合され、X₄₀₂とX₄₀₄は、単結合または二重結合を介して結合され、

A₄₀₁及びA₄₀₂は、互いに独立して、C₅－C₆₀炭素環基またはC₁－C₆₀ヘテロ環基であり、

X₄₀₅は、単結合、*－O－*′、*－S－*′、*－C(=O)－*′、*－N(Q₄₁₁)－*′、*－C(Q₄₁₁)(Q₄₁₂)－*′、*－C(Q₄₁₁)＝C(Q₄₁₂)－*′、*－C(Q₄₁₁)＝*′または*＝C＝*′であり、前述のQ₄₁₁及びQ₄₁₂は、水素、重水素、C₁－C₂₀アルキル基、C₁－C₂₀アルコキシ基、フェニル基、ビフェ

10

20

30

40

50

ニリル基、ターフェニリル基またはナフチル基であり、

X_{406} は、単結合、O または S であり、

R_{401} 及び R_{402} は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{20} アルキル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{20} アルコキシ基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{401})(Q_{402})(Q_{403})$ 、 $-N(Q_{401})(Q_{402})$ 、 $-B(Q_{401})(Q_{402})$ 、 $-C(=O)(Q_{401})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{401})$ 、及び $-P(=O)(Q_{401})(Q_{402})$ のうちから選択され、前述の $Q_{401} \sim Q_{403}$ は、互いに独立して、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、 C_6-C_{20} アリール基及び C_1-C_{20} ヘテロアリール基のうちから選択され、

x_{c11} 及び x_{c12} は、互いに独立して、0～10の整数のうちから選択され、

化学式 402 において、* 及び *' は、化学式 401 における M との結合位置である。

【0162】

一例によれば、化学式 402 において、 A_{401} 及び A_{402} は、互いに独立して、ベンゼン、ナフタレン、フルオレン、スピロビフルオレン、インデン、ピロール、チオフェン、フラン、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、イソオキサゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン基ピリダジン、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、キノキサリン、キナゾリン、カルバゾール、ベンゾイミダゾール、ベンゾフラン、ベンゾチオフェン、イソベンゾチオフェン、ベンゾオキサゾール、イソベンゾオキサゾール、トリアゾール、テトラゾール、オキサジアゾール、トリアジン、ジベンゾフラン及びジベンゾチオフェンのうちから選択される環構造である。

【0163】

他の例によれば、化学式 402 において、i) X_{401} は、窒素であり、 X_{402} は、炭素であるか、あるいは ii) X_{401} と X_{402} とがいずれも窒素である。

【0164】

さらに他の例によれば、化学式 402 において、 R_{401} 及び R_{402} は、互いに独立して、

水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基及び C_1-C_{20} アルコキシ基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、フェニル基、ナフチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基及びノルボルネニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、 C_1-C_{20} アルキル基及び C_1-C_{20} アルコキシ基；

シクロペンチル基、シクロヘキシル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、フェニル基、ピフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基；

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基、フェニル基、ピフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フルオレニ

10

20

30

40

50

ル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、アダマンタニル基、ノルボルナニル基、ノルボルネニル基フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フルオレニル基、ピリジニル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基；並びに

−Si(Q401)(Q402)(Q403)、−N(Q401)(Q402)、−B(Q401)(Q402)、−C(=O)(Q401)、−S(=O)₂(Q401)及び−P(=O)(Q401)(Q402)；のうちから選択され、

10

前述のQ401~Q403は、互いに独立して、C₁−C₁₀アルキル基、C₁−C₁₀アルコキシ基、フェニル基、ビフェニリル基及びナフチル基のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0165】

さらに他の例によれば、化学式401において、xc1が2以上である場合、2以上のL401において、2個のA401は、選択的に、連結基であるX407を介して互いに連結されるか、あるいは2個のA402は、選択的に、連結基であるX408を介して互いに連結される（下記化合物PD1~化合物PD4、及び化合物PD7参照）。前述のX407及びX408は、互いに独立して、単結合、*−O−*′、*−S−*′、*−C(=O)−*′、*−N(Q13)−*′、*−C(Q13)(Q414)−*′または*−C(Q13)=C(Q414)−*′（ここで、Q13及びQ414は、互いに独立して、水素、重水素、C₁−C₂₀アルキル基、C₁−C₂₀アルコキシ基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基またはナフチル基）であるが、これらに限定されるものではない。

20

【0166】

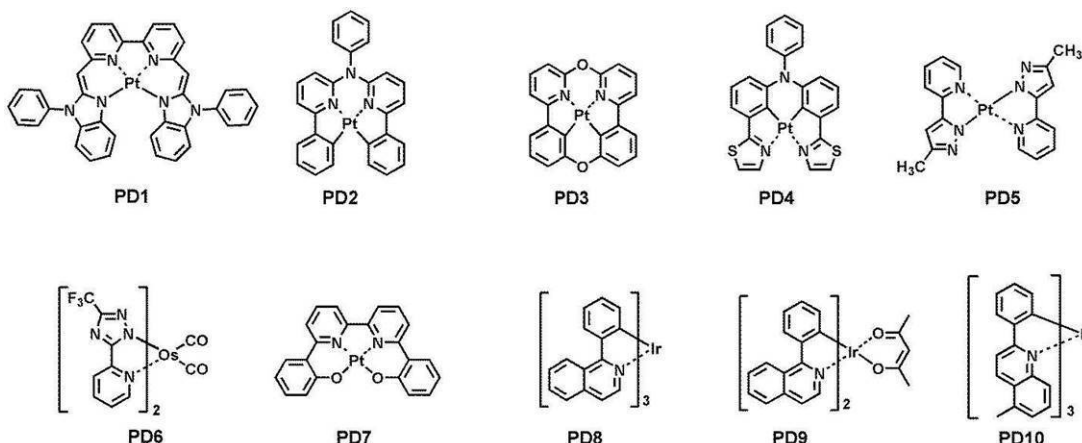
化学式401におけるL402は、任意の一価、二価または三価の有機リガンドである。例えば、L402は、ハロゲン、ジケトン（例えば、アセチルアセトネート）、カルボン酸（例えば、ピコリネート）、−C(=O)、イソニトリル、−CN及びホスホロス含有物質（例えば、ホスフィン（phosphine）、ホスファイト（phosphite））のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

30

【0167】

また、リン光ドーパントは、例えば、下記化合物PD1~化合物PD25のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

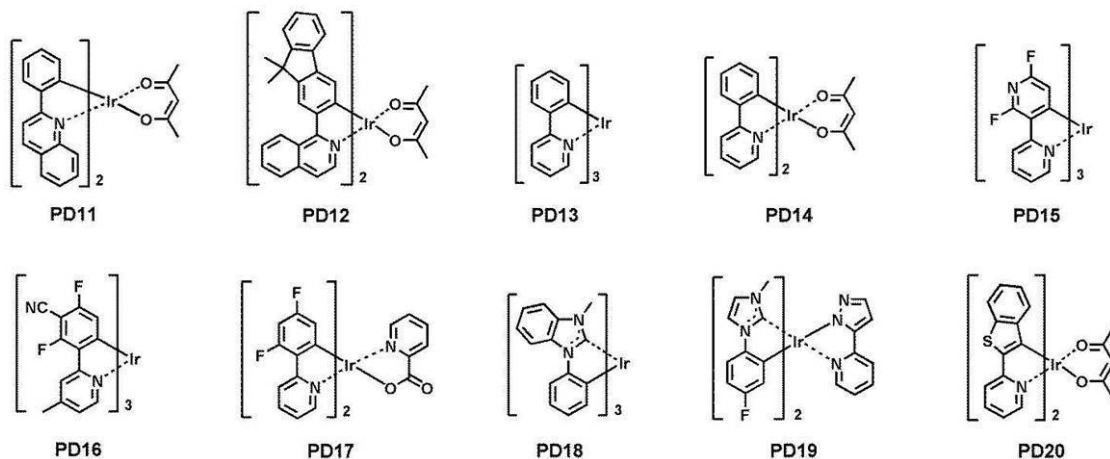
【化65】



40

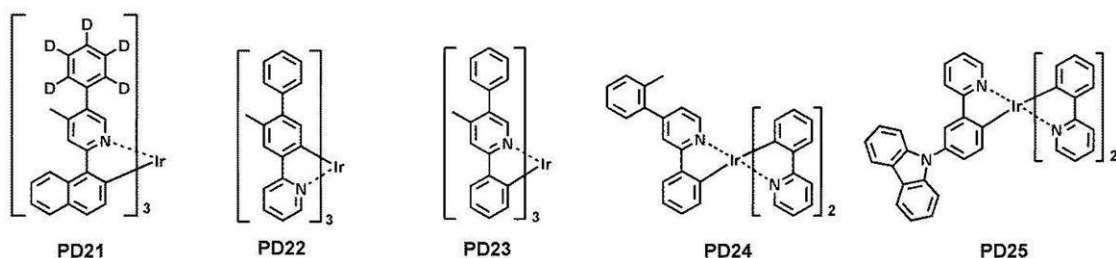
50

【化 6 6】



10

【化 6 7】



20

【0 1 6 8】

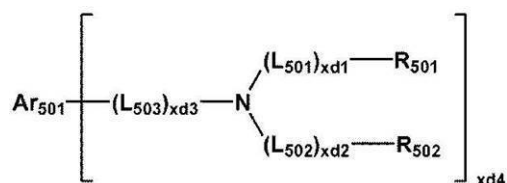
【発光層における蛍光ドーパント】

有機電界発光素子 10 は、上述したように、蛍光ドーパントを含んでもよい。蛍光ドーパントは、アリールアミン化合物またはスチリルアミン化合物を含んでもよい。

【0 1 6 9】

蛍光ドーパントは、下記化学式 501 で表わされる化合物を含んでもよい。

【化 6 8】



30

・・・ (化学式 501)

【0 1 7 0】

化学式 501 において、

Ar_{501} は、置換もしくは無置換の $\text{C}_5 - \text{C}_{60}$ 炭素環基、または置換もしくは無置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{60}$ ヘテロ環基であり、

40

$\text{L}_{501} \sim \text{L}_{503}$ は、互いに独立して、置換もしくは無置換の $\text{C}_3 - \text{C}_{10}$ シクロアルキレン基、置換もしくは無置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の $\text{C}_3 - \text{C}_{10}$ シクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の $\text{C}_6 - \text{C}_{60}$ アリーレン基、置換もしくは無置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{60}$ ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

$x_{d1} \sim x_{d3}$ は、互いに独立して、0～3の整数のうちから選択され、

R_{501} 及び R_{502} は、互いに独立して、置換もしくは無置換の $\text{C}_3 - \text{C}_{10}$ シクロアルキル基、置換もしくは無置換の $\text{C}_1 - \text{C}_{10}$ ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置

50

換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

$x d 4$ は、1～6の整数のうちから選択される。

【0171】

一例によれば、化学式501における Ar_{501} は、

ナフチル基、ヘプタレニル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、インデノアントラセニル基及びインデノフェナントレニル基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基及びナフチル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ナフチル基、ヘプタレニル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ナフタセニル基、ピセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、インデノアントラセニル基及びインデノフェナントレニル基；のうちから選択される。

【0172】

他の例によれば、化学式501において、 $L_{501} \sim L_{503}$ は、互いに独立して、

フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフエニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフエニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフエニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基及びピリジニレン基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフエニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフエニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフエニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフエニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフエニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基及びピリジニレン基；のうちから選択される。

【0173】

さらに他の例によれば、化学式 501 において、 R_{501} 及び R_{502} は、互いに独立して、

フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基及び $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基及びピリジニル基；のうちから選択され、

前述の $Q_{31} \sim Q_{33}$ は、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基及びナフチル基のうちから選択される。

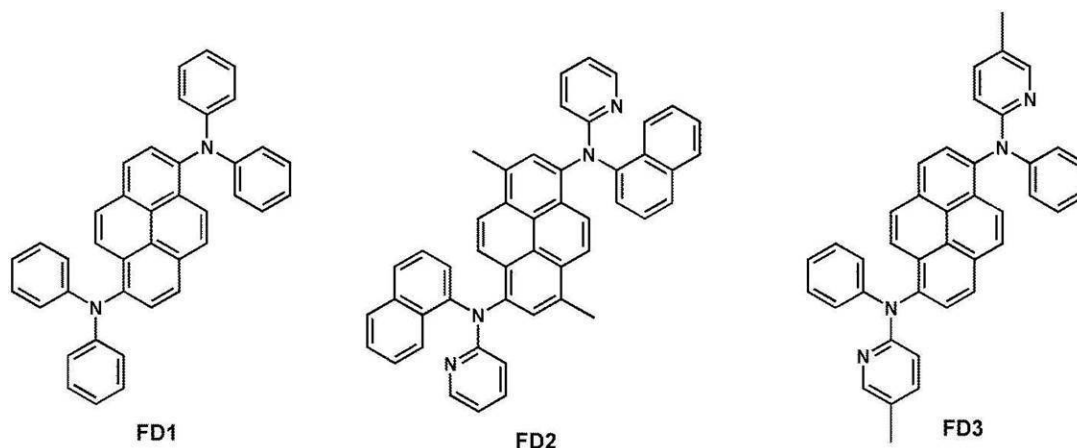
【0174】

さらに他の例によれば、化学式 501 における x_{d4} は、2 であってもよいが、これに限定されるものではない。

【0175】

例えば、蛍光ドーパントは、下記化合物 FD1～化合物 FD22 のうちから選択されてもよい。

【化69】



10

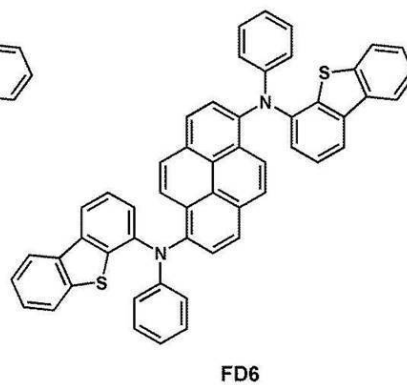
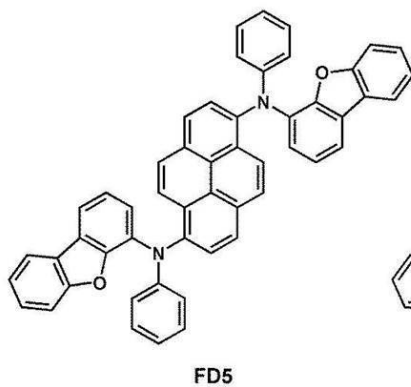
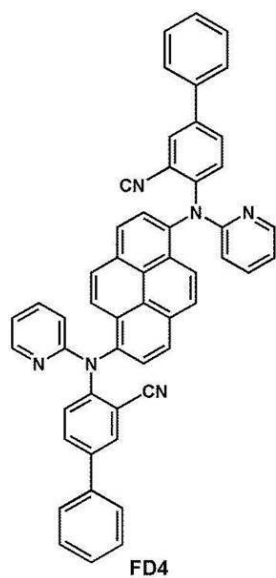
20

30

40

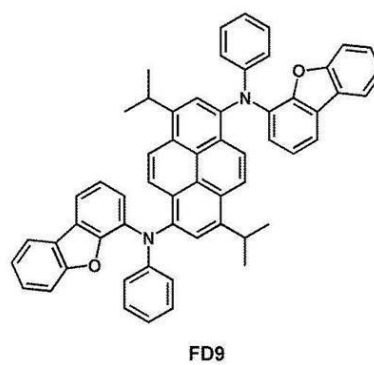
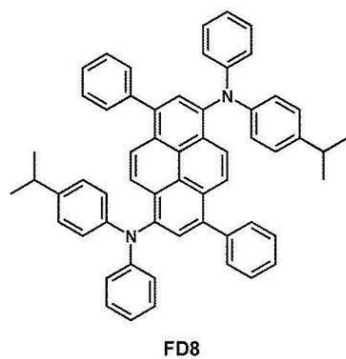
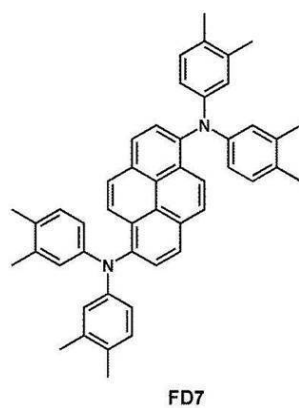
50

【化 7 0】



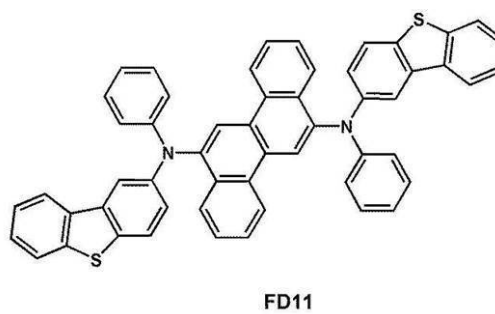
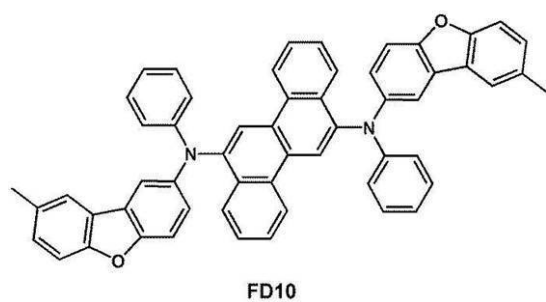
10

【化 7 1】



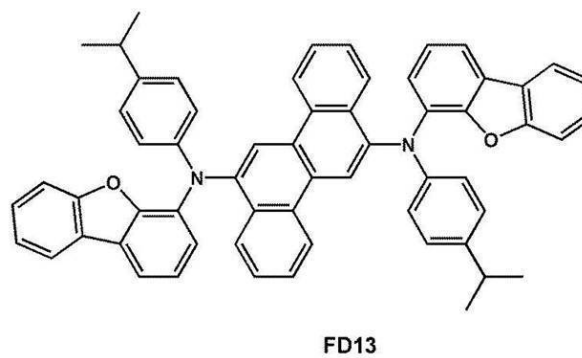
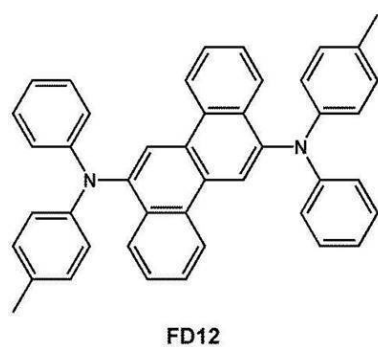
20

【化 7 2】



30

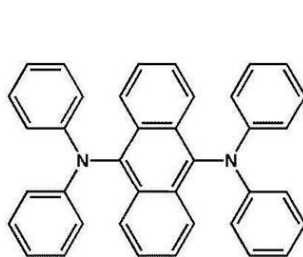
【化 7 3】



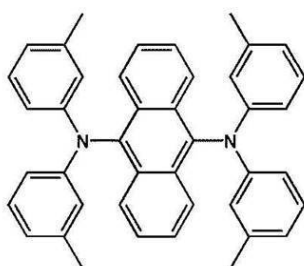
40

50

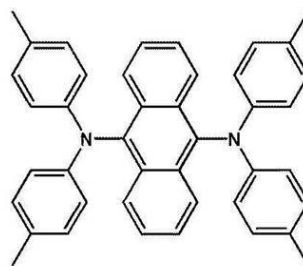
【化 7 4】



FD14

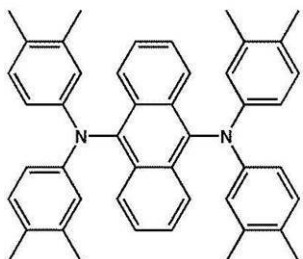


FD15

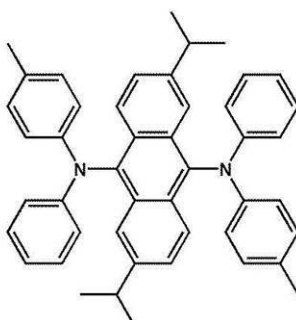


FD16

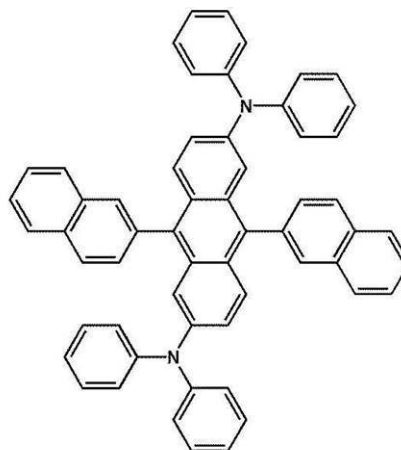
【化 7 5】



FD17

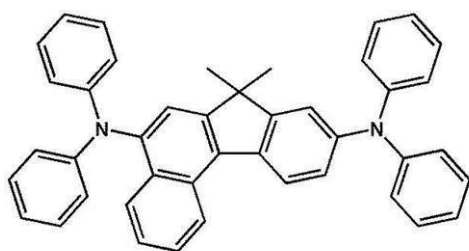


FD18

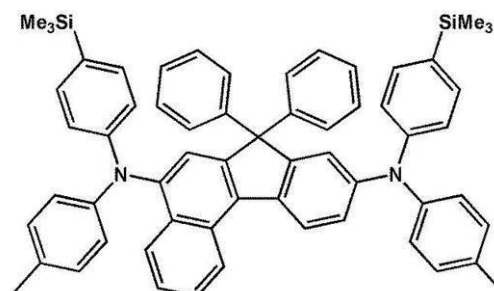


FD19

【化 7 6】

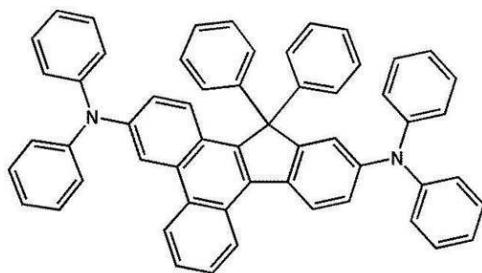


FD20



FD21

【化 7 7】



FD22

【 0 1 7 6】

また、蛍光ドーパントは、下記化合物のうちから選択されてもよいが、これらに限定されるものではない。

10

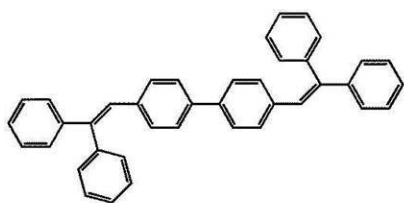
20

30

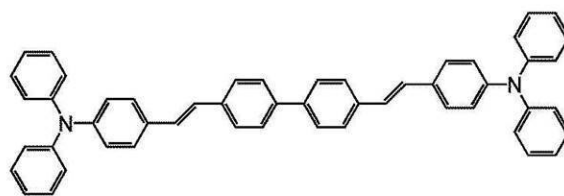
40

50

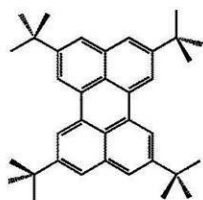
【化 7 8】



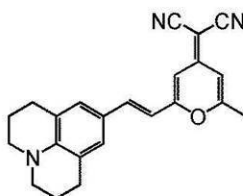
DPVBi



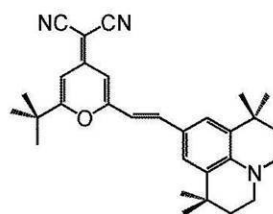
DPAVB



TBPe



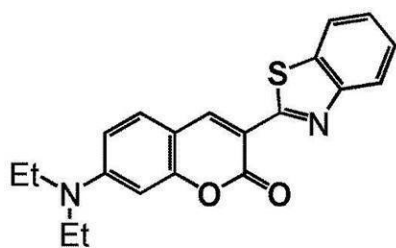
DCM



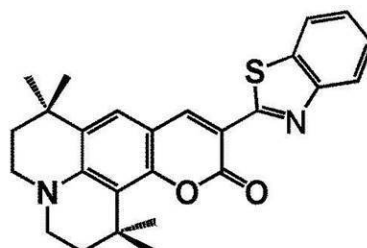
DCJT

10

【化 7 9】



Coumarin 6



C545T

20

【0 1 7 7】

【有機層 1 5 0 における電子輸送領域】

電子輸送領域は、i) 単一物質からなる単層構造、ii) 複数の互いに異なる物質からなる単層構造、あるいは iii) 複数の互いに異なる物質からなる複数の層を有する多層構造を有することができる。

30

【0 1 7 8】

電子輸送領域は、バッファ層、正孔阻止層、電子調節層、電子輸送層 (ETL) 及び電子注入層のうちから選択された少なくとも 1 層の層を含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

【0 1 7 9】

例えば、電子輸送領域は、発光層から順に積層された電子輸送層／電子注入層、正孔阻止層／電子輸送層／電子注入層、電子調節層／電子輸送層／電子注入層またはバッファ層／電子輸送層／電子注入層のような構造を有することができるが、これらに限定されるものではない。

40

【0 1 8 0】

電子輸送領域 (例えば、前記電子輸送領域における、バッファ層、正孔阻止層、電子調節層または電子輸送層) は、 π 電子欠乏性含窒素環を少なくとも一つ含む金属非含有化合物を含んでもよい。

【0 1 8 1】

「 π 電子欠乏性含窒素環」は、環形成部分構造であり、少なくとも 1 つの $*-N=*'$ 部分構造を有する C_1-C_{60} ヘテロ環基を意味する。

【0 1 8 2】

例えば、「 π 電子欠乏性含窒素環」は、i) 少なくとも 1 つの $*-N=*'$ 部分構造を有する 5 員環～7 員環のヘテロ単環基であるか、ii) 少なくとも 1 つの $*-N=*'$ 部分構

50

造を有する5員環～7員環のヘテロ単環基のうち2以上が互いに縮合されているヘテロ多環基であるか、あるいはiii) 少なくとも1つの $\ast-N=\ast$ 部分構造を有する5員環～7員環のヘテロ単環基のうち少なくとも一つと、少なくとも1つの C_5-C_{60} 炭素環基とが互いに縮合されているヘテロ多環基である。

【0183】

π 電子欠乏性含窒素環の具体例としては、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、イソオキサゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、インダゾール、プリン、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、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、ベンゾイミダゾール、イソベンゾチアゾール、ベンゾオキサゾール、イソベンゾオキサゾール、トリアゾール、テトラゾール、オキサジアゾール、トリアジン、チアジアゾール、イミダゾピリジン、イミダゾピリミジン、アザカルバゾールなどを挙げるができるが、これらに限定されるものではない。

【0184】

例えば、電子輸送領域は、下記化学式601で表わされる化合物を含んでもよい。

$[Ar_{601}]_{xe11} - [(L_{601})_{xe1} - R_{601}]_{xe21} \cdots$ (化学式601)

【0185】

化学式601において、

Ar_{601} は、置換もしくは無置換の C_5-C_{60} 炭素環基、または置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロ環基であり、

$xe11$ は、1、2または3であり、

L_{601} は、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキレン基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキレン基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニレン基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリーレン基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリーレン基、置換もしくは無置換の二価非芳香族縮合多環基、及び置換もしくは無置換の二価非芳香族ヘテロ縮合多環基のうちから選択され、

$xe1$ は、0～5の整数のうちから選択され、

R_{601} は、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルキル基、置換もしくは無置換の C_3-C_{10} シクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_1-C_{10} ヘテロシクロアルケニル基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリール基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールオキシ基、置換もしくは無置換の C_6-C_{60} アリールチオ基、置換もしくは無置換の C_1-C_{60} ヘテロアリール基、置換もしくは無置換の一価非芳香族縮合多環基、置換もしくは無置換の一価非芳香族ヘテロ縮合多環基、 $-Si(Q_{601})(Q_{602})(Q_{603})$ 、 $-C(=O)(Q_{601})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{601})$ 、及び $-P(=O)(Q_{601})(Q_{602})$ のうちから選択され、

前述の $Q_{601} \sim Q_{603}$ は、互いに独立して、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基またはナフチル基であり、

$xe21$ は、1～5の整数のうちから選択される。

【0186】

一例によれば、 $xe11$ 個の Ar_{601} 、及び $xe21$ 個の R_{601} のうち少なくとも一つは、前述のような π 電子欠乏性含窒素環を含んでもよい。

【0187】

一例によれば、化学式601における環 Ar_{601} は、

ベンゼン、ナフタレン、フルオレン、スピロビフルオレン、ベンゾフルオレン、ジベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェン、インデノアントラセン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフエン、カルバゾール、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、イソオキサゾール、ピリジン、

ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、インダゾール、プリン、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、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、ベンゾイミダゾール、イソベンゾチアゾール、ベンゾオキサゾール、イソベンゾオキサゾール、トリアゾール、テトラゾール、オキサジアゾール、トリアジン、チアジアゾール、イミダゾピリジン、イミダゾピリミジン及びアザカルバゾール；のうちから選択された環構造、並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ピフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、 $-Si(Q_{31})(Q_{32})(Q_{33})$ 、 $-S(=O)_2(Q_{31})$ 及び $-P(=O)(Q_{31})(Q_{32})$ のうちから選択された少なくとも一つで置換された、ベンゼン、ナフタレン、フルオレン、スピロビフルオレン、ベンゾフルオレン、ジベンゾフルオレン、フェナレン、フェナントレン、アントラセン、フルオランテン、トリフェニレン、ピレン、クリセン、ナフタセン、ピセン、ペリレン、ペンタフェン、インデノアントラセン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、カルバゾール、イミダゾール、ピラゾール、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、イソオキサゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、インダゾール、プリン、キノリン、イソキノリン、ベンゾキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、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、ベンゾイミダゾール、イソベンゾチアゾール、ベンゾオキサゾール、イソベンゾオキサゾール、トリアゾール、テトラゾール、オキサジアゾール、トリアジン、チアジアゾール、イミダゾピリジン、イミダゾピリミジン及びアザカルバゾール；のうちから選択された環構造であり、

前述の $Q_{31} \sim Q_{33}$ は、互いに独立して、 C_1-C_{10} アルキル基、 C_1-C_{10} アルコキシ基、フェニル基、ピフェニリル基、ターフェニリル基及びナフチル基のうちから選択される。

【0188】

化学式601において、 x_{e11} が2以上である場合、2以上の Ar_{601} は、単結合を介して互いに結合されてもよい。

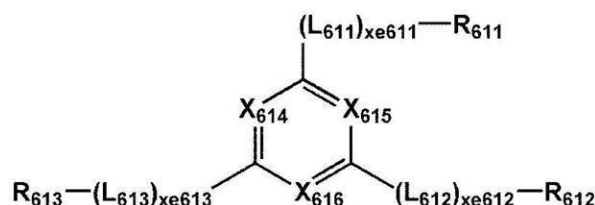
【0189】

他の例によれば、化学式601における Ar_{601} は、アントラセン環であってもよい。

【0190】

さらに他の例によれば、化学式601で表わされる化合物は、下記化学式601-1によって表わされてもよい。

【化80】



・・・(化学式601-1)

【0191】

化学式601-1において、

X_{614} は、NまたはC(R_{614})であり、 X_{615} は、NまたはC(R_{615})であり、 X_{616} は、NまたはC(R_{616})であり、 $X_{614} \sim X_{616}$ のうち少なくとも一つは、Nであり、

$L_{611} \sim L_{613}$ は、互いに独立して、前述の L_{601} についての説明を参照し、

$x_{e611} \sim x_{e613}$ は、互いに独立して、前述の x_{e1} についての説明を参照し、

$R_{611} \sim R_{613}$ は、互いに独立して、前述の R_{601} についての説明を参照し、

$R_{614} \sim R_{616}$ は、互いに独立して、水素、重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、

ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基及びナフチル基のうちから選択される。

【0192】

一例によれば、化学式601及び化学式601-1において、 L_{601} 、及び $L_{611} \sim L_{613}$ は、互いに独立して、

フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、チアジアゾリレン基、オキサジアゾリレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾキノリニレン基、フタラジニレン基、ナフチリジニレン基、キノキサリニレン基、キナゾリニレン基、シンノリニレン基、フェナントリジニレン基、アクリジニレン基、フェナントロリニレン基、フェナジニレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イソベンゾチアゾリレン基、ベンゾオキサゾリレン基、イソベンゾオキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、イミダゾピリジニレン基、イミダゾピリミジニレン基及びアザカルバゾリレン基；並びに

重水素、 $-F$ 、 $-Cl$ 、 $-Br$ 、 $-I$ 、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミジノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 C_1-C_{20} アルキル基、 C_1-C_{20} アルコキシ基、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、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、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニレン基、ナフチレン基、フルオレニレン基、スピロ-ビフルオレニレン基、ベンゾフルオレニレン基、ジベンゾフルオレニレン基、フェナントレニレン基、アントラセニレン基、フルオランテニレン基、トリフェニレニレン基、ピレニレン基、クリセニレン基、ペリレニレン基、ペンタフェニレン基、ヘキサセニレン基、ペンタセニレン基、チオフェニレン基、フラニレン基、カルバゾリレン基、インドリレン基、イソインドリレン基、ベンゾフラニレン基、ベンゾチオフェニレン基、ジベンゾフラニレン基、ジベンゾチオフェニレン基、ベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾカルバゾリレン基、ジベンゾシロリレン基、ピリジニレン基、イミダゾリレン基、ピラゾリレン基、チアゾリレン基、イソチアゾリレン基、オキサゾリレン基、イソキサゾリレン基、チアジアゾリレン基、オキサジアゾリレン基、ピラジニレン基、ピリミジニレン基、ピリダジニレン基、トリアジニレン基、キノリニレン基、イソキノリニレン基、ベンゾキノリニレン基、フタラジニレン基、

ナフチリジニレン基、キノキサリニレン基、キナゾリニレン基、シンノリニレン基、フェナントリジニレン基、アクリジニレン基、フェナントロリニレン基、フェナジニレン基、ベンゾイミダゾリレン基、イソベンゾチアゾリレン基、ベンゾオキサゾリレン基、イソベンゾオキサゾリレン基、トリアゾリレン基、テトラゾリレン基、イミダゾピリジニレン基、イミダゾピリミジニレン基及びアザカルバゾリレン基；のうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0193】

他の例によれば、化学式601及び化学式601-1において、 $x \in 1$ 及び $x \in 611 \sim 613$ は、互いに独立して、0、1または2である。

【0194】

さらに他の例によれば、化学式601及び化学式601-1において、 R_{601} 、及び $R_{611} \sim R_{613}$ は、互いに独立して、

フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、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、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基；

重水素、-F、-Cl、-Br、-I、ヒドロキシル基、シアノ基、ニトロ基、アミノ基、ヒドラジノ基、ヒドラゾノ基、 $C_{1} \sim C_{20}$ アルキル基、 $C_{1} \sim C_{20}$ アルコキシ基、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、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、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基のうちから選択された少なくとも一つで置換された、フェニル基、ビフェニリル基、ターフェニリル基、ナフチル基、フルオレニル基、スピロ-ビフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、フェナントレニル基、アントラセニル基、フルオランテニル基、トリフェニレニル基、ピレニル基、クリセニル基、ペリレニル基、ペンタフェニル基、ヘキサセニル基、ペンタセニル基、チオフェニル基、フラニル基、カルバゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、

10

20

30

40

50

ベンゾカルバゾリル基、ジベンゾカルバゾリル基、ジベンゾシロリル基、ピリジニル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、チアジアゾリル基、オキサジアゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、ベンゾキノリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、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、ベンゾイミダゾリル基、イソベンゾチアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、イソベンゾオキサゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、イミダゾピリジニル基、イミダゾピリミジニル基及びアザカルバゾリル基；並びに

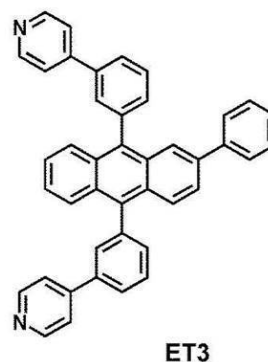
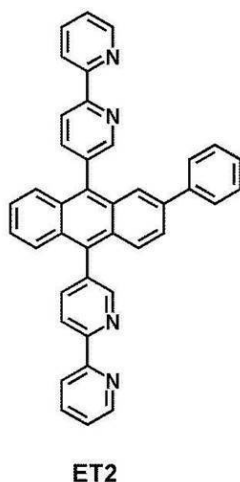
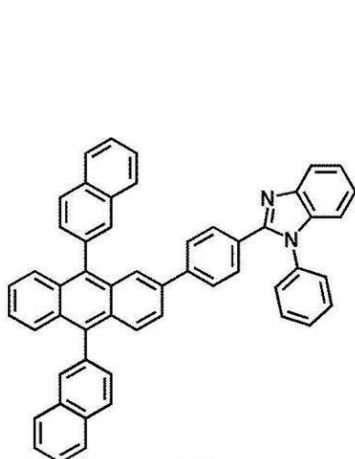
－S(=O)₂(Q601)及び－P(=O)(Q601)(Q602)；のうちから選択され、

前述のQ601及びQ602についての説明は、本明細書に記載されたところを参照する。

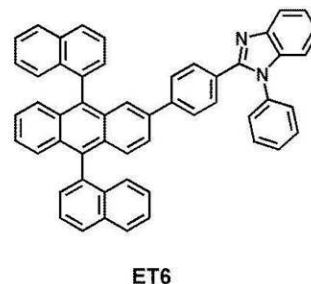
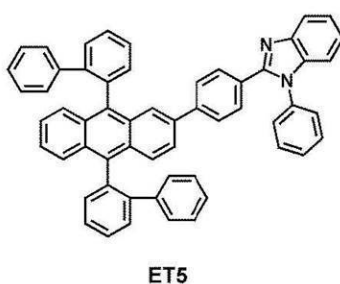
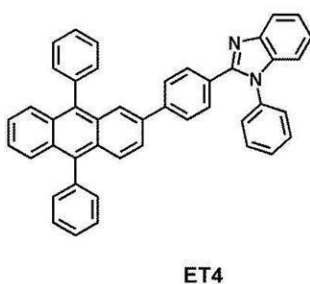
【0195】

電子輸送領域は、下記化合物ET1～化合物ET36のうちから選択された少なくとも1つの化合物を含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

【化81】



【化82】



10

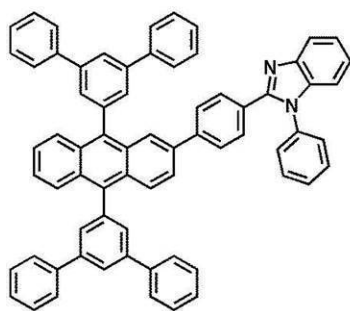
20

30

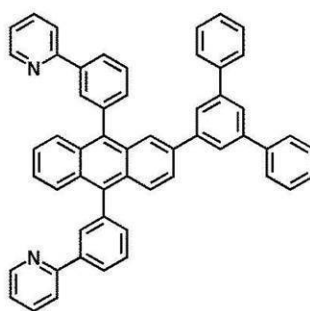
40

50

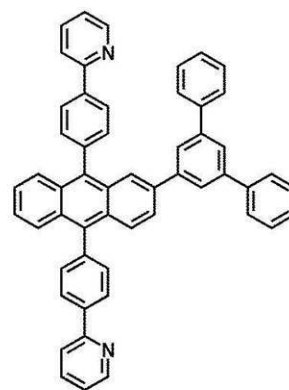
【化 8 3】



ET7



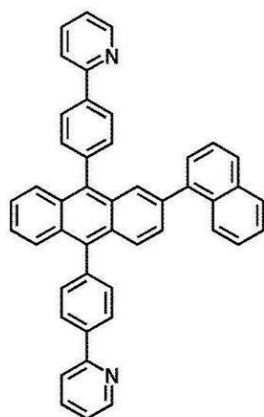
ET8



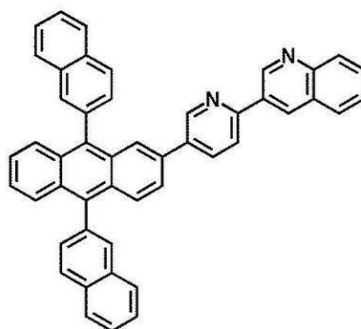
ET9

10

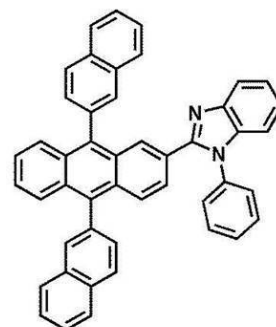
【化 8 4】



ET10



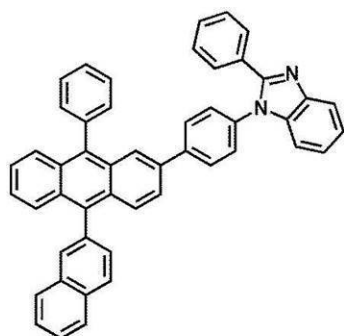
ET11



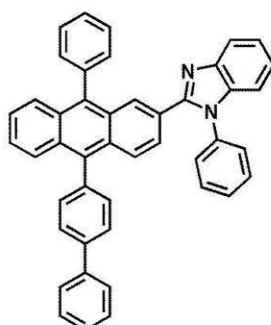
ET12

20

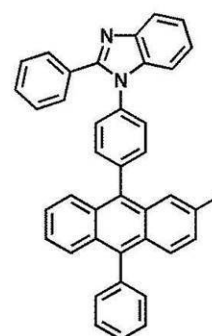
【化 8 5】



ET13



ET14



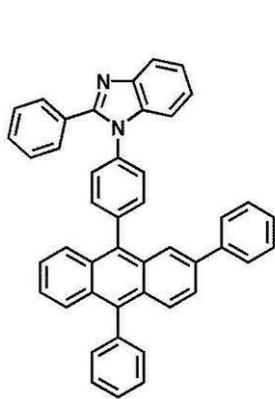
ET15

30

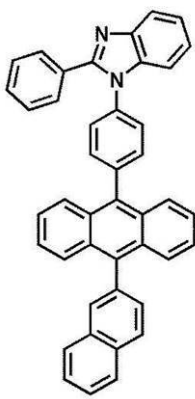
40

50

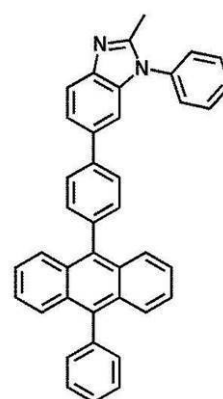
【化 8 6】



ET16



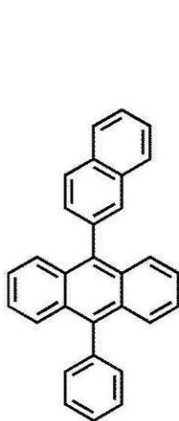
ET17



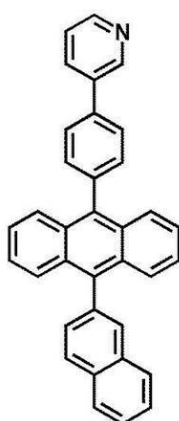
ET18

10

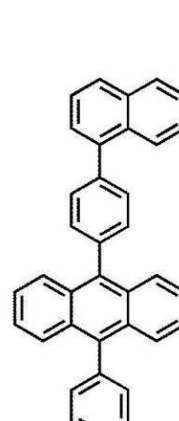
【化 8 7】



ET19



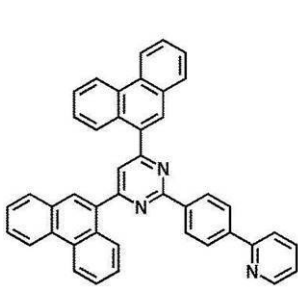
ET20



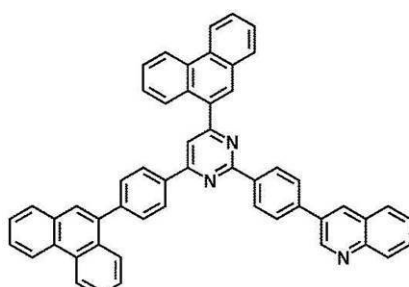
ET21

20

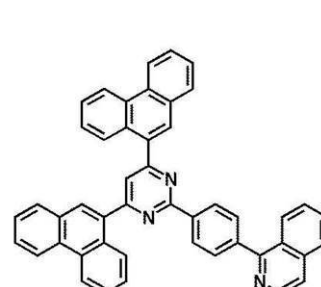
【化 8 8】



ET22



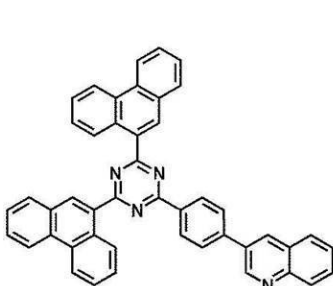
ET23



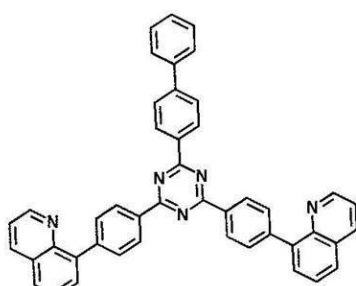
ET24

30

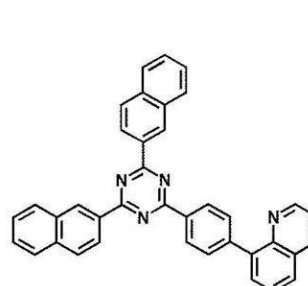
【化 8 9】



ET25



ET26

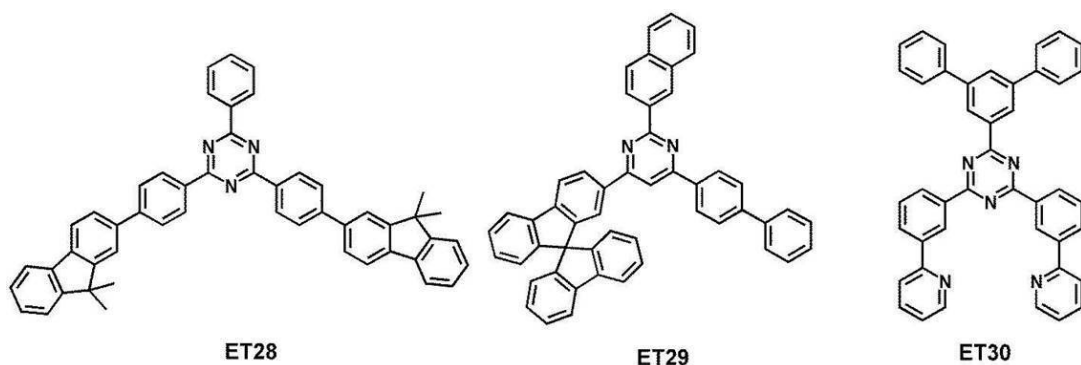


ET27

40

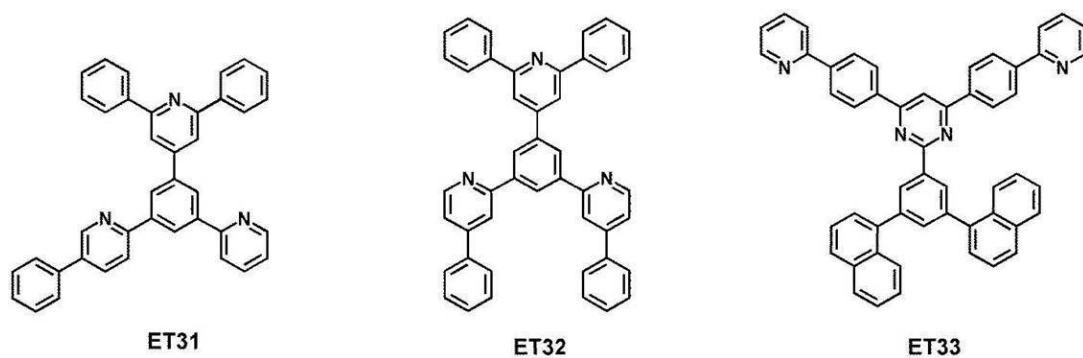
50

【化 9 0】



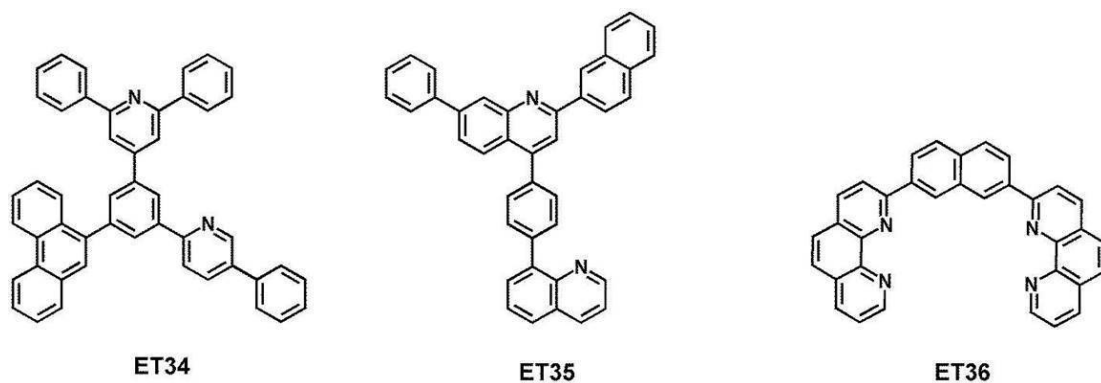
10

【化 9 1】



20

【化 9 2】



30

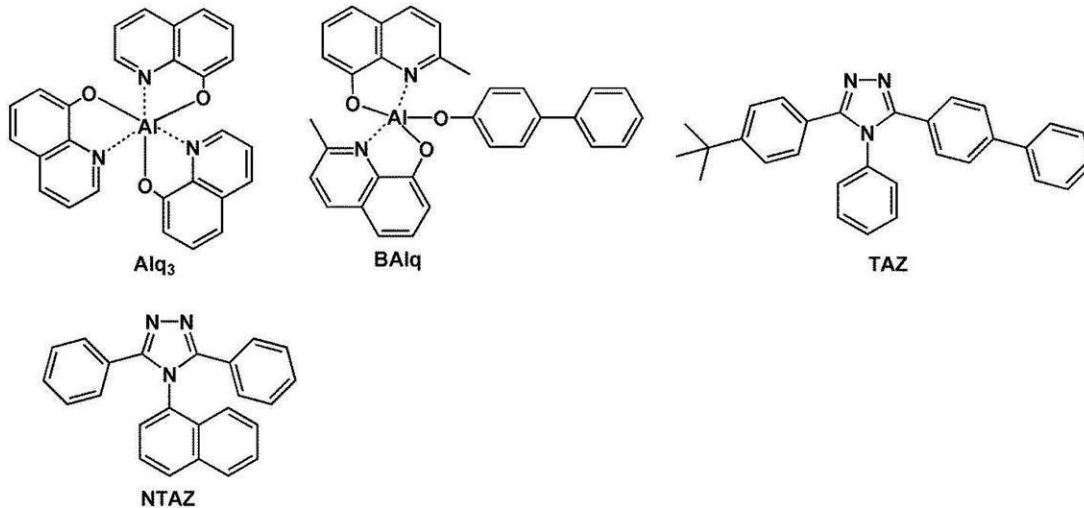
【0196】

また、電子輸送領域は、2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン (BCP)、4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン (Bphen)、Alq3、BALq、3-(ビフェニル-4-イル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-4-フェニル-4H-1,2,4-トリアゾール (TAZ) 及びNTAZのうちから選択された少なくとも1つの化合物を含んでもよい。

40

50

【化 9 3】



10

【0197】

さらに他の例として、電子輸送領域は、ホスフィンオキシド含有化合物などを使用することができるが、これに限定されるものではない。一実施形態によれば、ホスフィンオキシド含有化合物は、電子輸送領域において、正孔阻止層にも使用されてもよいが、これに限定されるものではない。

20

【0198】

のバッファ層、正孔阻止層または電子調節層の厚みは、互いに独立して、約2 nm～約100 nm、例えば、約3 nm～約30 nmであってもよい。バッファ層、正孔阻止層または電子調節層の厚みが前述のような範囲を満たす場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、十分な正孔阻止特性または電子調節特性を得ることができる。

【0199】

電子輸送層の厚みは、約10 nm～約100 nm、例えば、約15 nm～約50 nmであってもよい。電子輸送層の厚みが前述のような範囲を満たす場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、十分な電子輸送特性を得ることができる。

【0200】

電子輸送領域（例えば、電子輸送領域における電子輸送層）は、前述のような物質以外に、金属含有物質をさらに含んでもよい。

30

【0201】

金属含有物質は、アルカリ金属錯体及びアルカリ土類金属錯体のうちから選択された少なくとも一つを含んでもよい。アルカリ金属錯体の金属イオンは、Liイオン、Naイオン、Kイオン、Rbイオン及びCsイオンのうちから選択され、アルカリ土類金属錯体の金属イオンは、Beイオン、Mgイオン、Caイオン、Srイオン及びBaイオンのうちから選択される。アルカリ金属錯体及びアルカリ土類金属錯体の金属イオンに配位されたリガンド（配位子）は、互いに独立して、ヒドロキシキノリン、ヒドロキシイソキノリン、ヒドロキシベンゾキノリン、ヒドロシアクリジン、ヒドロキシフェナントリジン、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、ヒドロキシジフェニルオキサジアゾール、ヒドロキシジフェニルチアジアゾール、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、ヒドロキシフェニルベンゾチアゾール、ピピリジン、フェナントロリン及びシクロペンタジエンのうちから選択されてもよいが、これらに限定されるものではない。

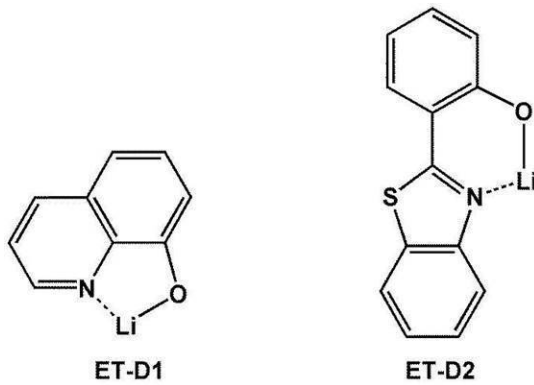
40

【0202】

例えば、金属含有物質は、Li錯体を含んでもよい。Li錯体は、例えば、下記化合物ET-D1（リチウムキノレート（LiQ））またはET-D2を含んでもよい。

50

【化 9 4】



10

【0203】

電子輸送領域は、第2電極190からの電子注入を容易にする電子注入層を含んでもよい。電子注入層は、第2電極190と直接接触してもよい。

【0204】

電子注入層は、i) 単一物質からなる単層構造、ii) 複数の互いに異なる物質からなる単層構造、あるいはiii) 複数の互いに異なる物質からなる複数の層を有する多層構造を有することができる。

【0205】

電子注入層は、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物、希土類金属化合物、アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体、希土類金属錯体またはそれらのうち任意の組み合わせを含んでもよい。

20

【0206】

アルカリ金属は、Li、Na、K、Rb及びCsのうちから選択される。一例によれば、アルカリ金属は、Li、NaまたはCsである。他の例によれば、アルカリ金属は、LiまたはCsであるが、これらに限定されるものではない。

【0207】

アルカリ土類金属は、Mg、Ca、Sr、及びBaのうちから選択される。

【0208】

希土類金属は、Sc、Y、Ce、Tb、Yb及びGdのうちから選択される。

30

【0209】

アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物及び希土類金属化合物は、アルカリ金属、アルカリ土類金属及び希土類金属の酸化物及びハロゲン化物（例えば、フッ化物、塩化物、臭化物、ヨウ化物など）のうちから選択されてもよい。

【0210】

アルカリ金属化合物は、 Li_2O 、 Cs_2O 、 K_2O のようなアルカリ金属酸化物、及びLiF、NaF、CsF、KF、LiI、NaI、CsI、KIのようなアルカリ金属ハロゲン化物のうちから選択されてもよい。一例によれば、アルカリ金属化合物は、LiF、 Li_2O 、NaF、LiI、NaI、CsI、KIのうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

40

【0211】

アルカリ土類金属化合物は、BaO、SrO、CaO、 $\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$)、 $\text{Ba}_x\text{Ca}_{1-x}\text{O}$ ($0 < x < 1$)のようなアルカリ土類金属化合物のうちから選択されてもよい。一例によれば、アルカリ土類金属化合物は、BaO、SrO及びCaOのうちから選択されるが、これらに限定されるものではない。

【0212】

希土類金属化合物は、 YbF_3 、 ScF_3 、 Sc_2O_3 、 Y_2O_3 、 Ce_2O_3 、 GdF_3 及び TbF_3 のうちから選択されてもよい。一例によれば、希土類金属化合物は、 YbF_3 、 ScF_3 、 TbF_3 、 YbI_3 、 ScI_3 、 TbI_3 のうちから選択されるが、これらに

50

限定されるものではない。

【0213】

アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体及び希土類金属錯体は、前述のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属及び希土類金属のイオンを含み、アルカリ金属錯体、アルカリ土類金属錯体及び希土類金属錯体の金属イオンに配位されたりガンドは、互いに独立して、ヒドロキシキノリン、ヒドロキシイソキノリン、ヒドロキシベンゾキノリン、ヒドロキシアクリジン、ヒドロキシフェナントリジン、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、ヒドロキシジフェニルオキサジアゾール、ヒドロキシジフェニルチアジアゾール、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、ヒドロキシフェニルベンゾチアゾール、ビピリジン、フェナントロリン及びシクロペンタジエンのうちから選択されてもよいが、これらに限定されるものではない。

10

【0214】

電子注入層は、前述のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物、希土類金属化合物、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、またはそれらのうち任意の組み合わせのみから構成されてもよいが、有機物をさらに含んでもよい。電子注入層が有機物をさらに含む場合、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類金属、アルカリ金属化合物、アルカリ土類金属化合物、希土類金属化合物、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、またはそれらのうち任意の組み合わせは、該有機物からなるマトリックスに、均一に分散されてもよく、不均一に分散されてもよい。

20

【0215】

電子注入層の厚みは、約0.1nm～約10nm、約0.3nm～約9nmであってもよい。電子注入層の厚みが前述のような範囲を満たす場合、実質的な駆動電圧の上昇なしに、十分な電子注入特性を得ることができる。

【0216】

〔第2電極190〕

前述のような有機層150上部には、第2電極190が配置されている。第2電極190は、電子注入電極であるカソードであるが、このとき、第2電極190用物質としては、低い仕事関数を有する金属、合金、電気伝導性化合物、及びそれらの組み合わせを使用することができる。

30

【0217】

第2電極190は、リチウム(Li)、銀(Ag)、マグネシウム(Mg)、アルミニウム(Al)、アルミニウム-リチウム(Al-Li)、カルシウム(Ca)、マグネシウム-インジウム(Mg-In)、マグネシウム-銀(Mg-Ag)、ITO及びIZOのうちから選択された少なくとも一つを含んでもよいが、これらに限定されるものではない。第2電極190は、透過型電極、半透過型電極または反射型電極である。

【0218】

第2電極190は、単層構造、または複数の層を有する多層構造を有することができる。

【0219】

〔有機電界発光素子20～40〕

図2の有機電界発光素子20は、第1キャッピング層210、第1電極110、有機層150及び第2電極190が順に積層された構造を有し、図3の有機電界発光素子30は、第1電極110、有機層150、第2電極190及び第2キャッピング層220が順に積層された構造を有し、図4の有機電界発光素子40は、第1キャッピング層210、第1電極110、有機層150、第2電極190及び第2キャッピング層220が順に積層された構造を有する。

40

【0220】

図2～図4において、第1電極110、有機層150及び第2電極190についての説明は、図1についての説明を参照する。

【0221】

50

有機電界発光素子 20, 40 の有機層 150 において、発光層で生成された光は、半透過型電極または透過型電極である第 1 電極 110 及び第 1 キャッピング層 210 を経て、外部で取り出され、有機電界発光素子 30, 40 の有機層 150 において、発光層で生成された光は、半透過型電極または透過型電極である第 2 電極 190 及び第 2 キャッピング層 220 を経て、外部に取り出される。

【0222】

前述の第 1 キャッピング層 210 及び第 2 キャッピング層 220 は、補強干渉の原理により、外部発光効率を向上させる役割を行うことができる。

【0223】

前述の第 1 キャッピング層 210 及び第 2 キャッピング層 220 は、互いに独立して、有機物からなる有機キャッピング層、無機物からなる無機キャッピング層、または有機物及び無機物を含む複合キャッピング層であってもよい。

10

【0224】

前述の第 1 キャッピング層 210 及び第 2 キャッピング層 220 のうち少なくとも 1 層は、互いに独立して、炭素環式化合物、ヘテロ環式化合物、アミン系化合物、ポルフィン誘導体 (porphine derivatives)、フタロシアン誘導体 (phthalocyanine derivatives)、ナフタロシアン誘導体 (naphthalocyanine derivatives)、アルカリ金属錯体及びアルカリ土類金属錯体のうちから選択された少なくとも 1 つの物質を含んでもよい。前述の炭素環式化合物、ヘテロ環式化合物及びアミン系化合物は、選択的に、O、N、S、Se、Si、F、Cl、Br 及び I のうちから選択された少なくとも 1 つの元素を含む置換基で置換される。一例によれば、第 1 キャッピング層 210 及び第 2 キャッピング層 220 のうち少なくとも 1 層は、互いに独立して、アミン系化合物を含んでもよい。

20

【0225】

他の例によれば、第 1 キャッピング層 210 及び第 2 キャッピング層 220 のうち少なくとも 1 層は、互いに独立して、化学式 201 で表わされる化合物、または化学式 202 で表わされる化合物を含んでもよい。

【0226】

さらに他の例によれば、第 1 キャッピング層 210 及び第 2 キャッピング層 220 のうち少なくとも 1 層は、互いに独立して、前述の化合物 HT28～化合物 HT33、及び下記化合物 CP1～化合物 CP5 のうちから選択された化合物を含んでもよいが、これらに限定されるものではない。

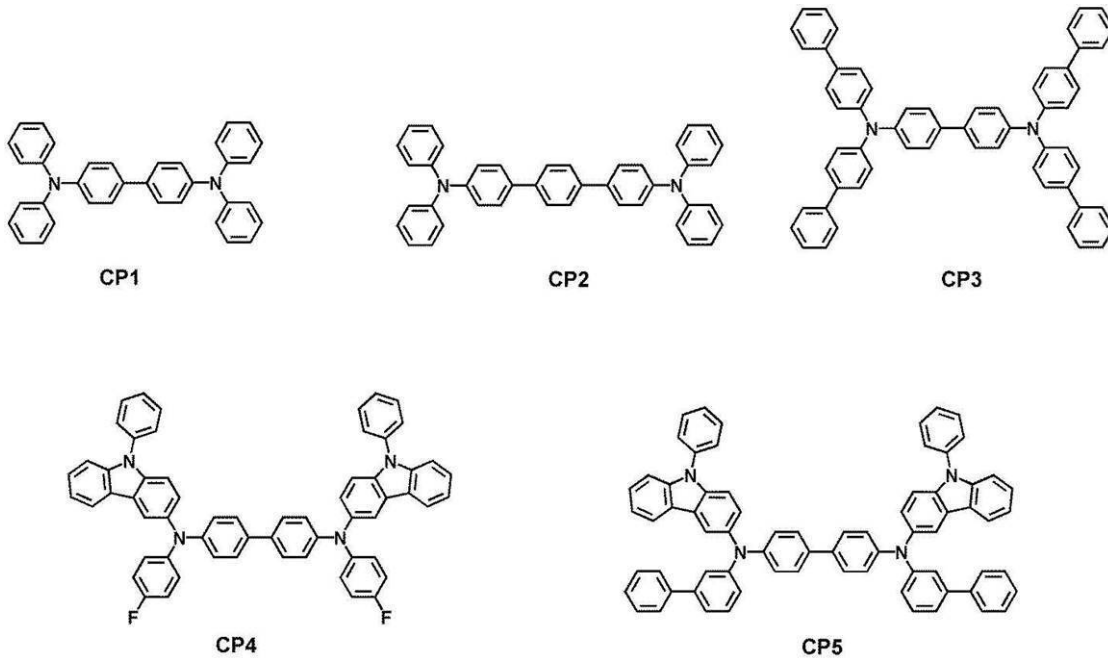
30

【0227】

40

50

【化 9 5】



10

【0 2 2 8】

以上、本開示の一実施形態に係る有機電界発光素子について、図 1 ～図 4 を参照して説明したが、これらに限定されるものではない。

20

【0 2 2 9】

正孔輸送領域に含まれた各層、発光層、及び電子輸送領域に含まれた各層は、それぞれ、真空蒸着法、スピンコーティング法、キャスト法、LB (Langmuir-Blodgett) 法、インクジェットプリンティング法、レーザプリンティング法、レーザ熱転写法 (LITI: laser induced thermal imaging) のような多様な方法を利用し、所定領域に形成される。

【0 2 3 0】

真空蒸着法により、前述の正孔輸送領域に含まれた各層、発光層、及び電子輸送領域に含まれた各層をそれぞれ形成する場合、蒸着条件は、例えば、約 100°C ～約 500°C の蒸着温度、約 10^{-8} torr ～約 10^{-3} torr の真空度、及び約 $0.01 \text{ \AA}/\text{sec}$ ～約 $100 \text{ \AA}/\text{sec}$ の蒸着速度の範囲内で、形成する層に含まれる材料、及び形成する層の構造を考慮して選択される。

30

【0 2 3 1】

スピンコーティング法により、前述の正孔輸送領域に含まれた各層、発光層、及び電子輸送領域に含まれた各層をそれぞれ形成する場合、コーティング条件は、例えば、約 $2,000 \text{ rpm}$ ～約 $5,000 \text{ rpm}$ のコーティング速度、及び約 80°C ～ 200°C の熱処理温度の範囲内で、形成する層に含まれる材料、及び形成する層の構造を考慮して選択される。

【実施例】

40

【0 2 3 2】

以下、合成例及び実施例を挙げ、本発明の一実施形態による化合物及び有機電界発光素子についてさらに具体的に説明する。下記合成例において、「『A』の代わりに『B』を使用した」という表現において、「A」のモル当量と「B」のモル当量は、互いに同一である。

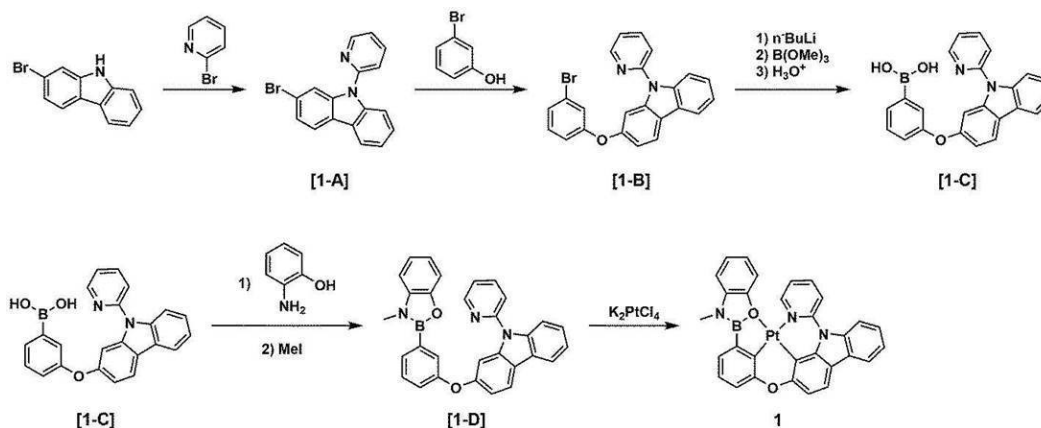
【0 2 3 3】

[合成例]

合成例 1：化合物 1 の合成

50

【化 9 6】



10

【0 2 3 4】

(1) 中間体 [1-A] の合成

2-ブロモカルバゾール 24.6 g (100 mmol)、2-ブロモピリジン 19.0 g (120 mmol)、三リン酸カリウム 42.5 g (200 mmol)、 CuI 3.7 g (20 mmol) 及びピコリン酸 2.3 g (20 mmol) を反応容器に入れ、ジメチルスルホキシド 200 mL に懸濁させた。反応混合物を加温し、 160°C で 24 時間撹拌した。反応終結後、常温に冷やし、600 mL 蒸留水を加え、酢酸エチルで抽出した。抽出された有機層を、飽和塩化ナトリウム水溶液で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させた。溶媒を除去した残余物を、カラムクロマトグラフィを利用して分離し、中間体 [1-A] 26.2 g (81 mmol) を得た。

20

【0 2 3 5】

(2) 中間体 [1-B] の合成

中間体 [1-A] 26.2 g (81 mmol)、3-ブロモフェノール 9.3 g (54 mmol)、三リン酸カリウム 34.4 g (162 mmol)、 CuI 3.0 g (16.2 mmol) 及びピコリン酸 1.9 g (16.2 mmol) を反応容器に入れ、ジメチルスルホキシド 160 mL に懸濁させた。反応混合物を加温し、 160°C で 24 時間撹拌した。反応終結後、常温に冷やし、500 mL 蒸留水を加え、酢酸エチルで抽出した。抽出された有機層を、飽和塩化ナトリウム水溶液で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させた。溶媒を除去した残余物を、カラムクロマトグラフィを利用して分離し、中間体 [1-B] 25.3 g (61 mmol) を得た。

30

【0 2 3 6】

(3) 中間体 [1-C] の合成

中間体 [1-B] 25.3 g (61 mmol) を 350 mL のテトラヒドロフランに溶解させた後、反応温度を -78°C まで低下させた。 $n\text{-BuLi}$ 溶液 (ヘキサン中 2.0 M) 27 mL を添加した後、同一温度で 1 時間撹拌した。次に、 B(OMe)_3 を 7.0 g (67.1 mmol) 添加し、反応温度を常温に昇温させ、24 時間撹拌した。反応終結後、2 N の HCl 溶液を加え、酢酸エチルで抽出した。抽出された有機層を、飽和塩化ナトリウム水溶液で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させた。溶媒を除去した残余物を、カラムクロマトグラフィを利用して分離し、中間体 [1-C] 17.2 g (45.1 mmol) を得た。

40

【0 2 3 7】

(4) 中間体 [1-D] の合成

中間体 [1-C] 17.2 g (45.1 mmol)、2-アミノフェノール 6.4 g (58.6 mmol) を反応容器に入れ、300 mL のトルエンに懸濁させた。ディーンスタクトラップが設けられた状態で反応混合物を加温し、 110°C で 24 時間撹拌した。その後、過量のヨードメタンを入れ、さらに 12 時間撹拌した。反応終結後、常温に冷やし、500 mL 蒸留水を加え、酢酸エチルで抽出した。抽出された有機層を、飽和塩化ナ

50

トリウム水溶液で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させた。溶媒を除去した残余物を、カラムクロマトグラフィを利用して分離し、中間体 [1-D] 4.4 g (9.5 mmol) を得た。

【0238】

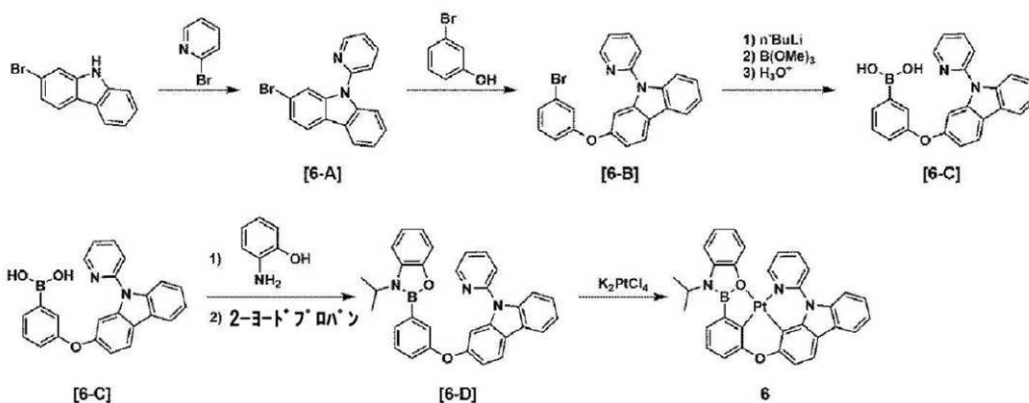
(5) 化合物 1 の合成

中間体 [1-D] 4.4 g (9.5 mmol) とカリウムテトラクロロプラチネート 4.0 g (9.5 mmol)、テトラアムモニウムブロミン 300 mg (1.0 mmol) をドデカン 190 mL に懸濁させ、120℃で72時間攪拌した。反応終了後、常温に冷やし、200 mL 蒸留水を加え、固体化合物を濾過した。濾過された固体化合物を、カラムクロマトグラフィを利用して分離し、化合物 1 を 0.4 g (0.6 mmol) 得た。

【0239】

合成例 2：化合物 6 の合成

【化 97】



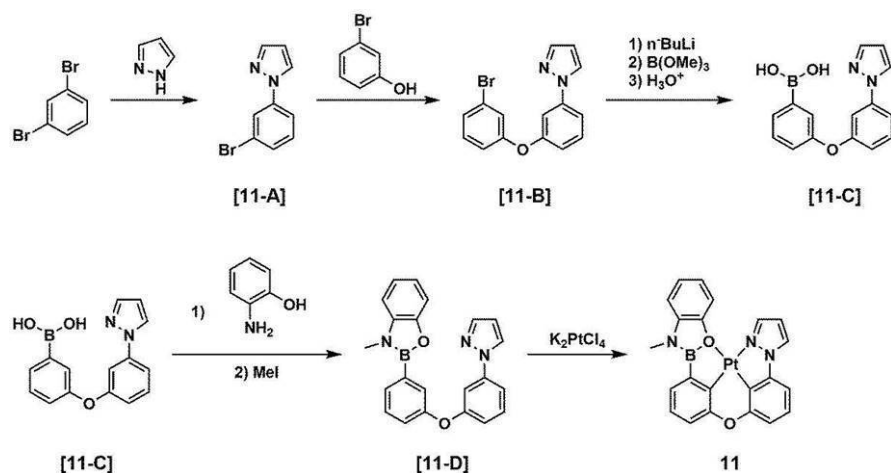
【0240】

ヨードメタンの代わりに、2-ヨードプロパンを使用したことを除いては、前述の合成例 1 と同一の方法を利用し、化合物 6 を 0.48 g (0.7 mmol) 得た。

【0241】

合成例 3：化合物 11 の合成

【化 98】



【0242】

(1) 中間体 [11-A] の合成

1,3-ジブロモベンゼン 28.3 g (120 mmol)、ピラゾール 6.8 g (100 mmol)、三リン酸カリウム 42.5 g (200 mmol)、CuI 3.7 g (20 mmol) 及びピコリン酸 2.3 g (20 mmol) を反応容器に入れ、ジメチルスルホキシド 200 mL に懸濁させた。反応混合物を加温し、160℃で24時間攪拌した。反

応終結後、常温に冷やし、600 mL 蒸留水を加え、酢酸エチルで抽出した。抽出された有機層を、飽和塩化ナトリウム水溶液で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させた。溶媒を除去した残余物を、カラムクロマトグラフィを利用して分離し、中間体 [11-A] 17.6 g (79 mmol) を得た。

【0243】

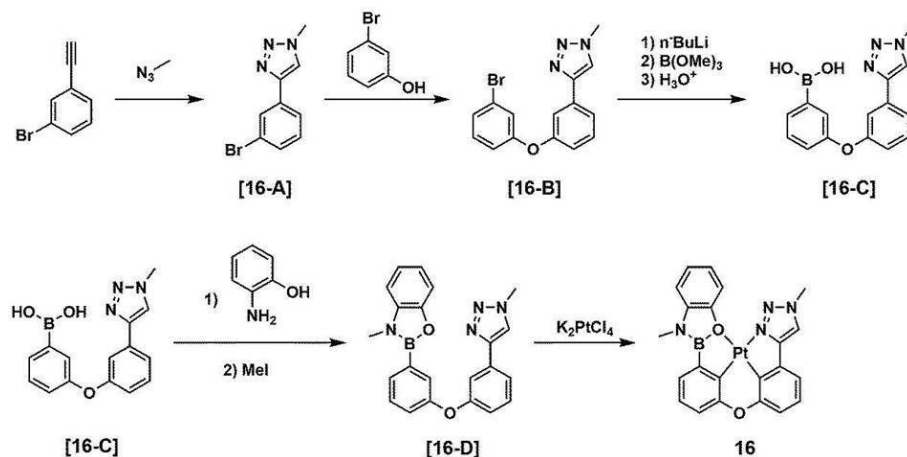
(2) 化合物 11 の合成

その後、前述の合成例 1 と同一方法を利用し、化合物 11 を 0.28 g (0.5 mmol) 得た。

【0244】

合成例 4：化合物 16 の合成

【化99】



【0245】

(1) 中間体 [16-A] の合成

1-ブromo-3-エチニルベンゼン 18.1 g (100 mmol)、アジドメタン 6.8 g (120 mmol)、CuI を 3.7 g (20 mmol) 及び L-アスコルビン酸 3.5 g (20 mmol) を反応容器に入れ、水 200 mL に懸濁させた。反応混合物を常温で 6 時間攪拌した。反応終結後、酢酸エチルで抽出した。抽出された有機層を、飽和塩化ナトリウム水溶液で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させた。溶媒を除去した残余物を、カラムクロマトグラフィを利用して分離し、中間体 [16-A] 20.2 g (85 mmol) を得た。

【0246】

(2) 化合物 16 の合成

その後、合成例 1 と同一方法を利用し、化合物 16 を 0.46 g (0.8 mmol) 得た。

【0247】

合成例 5：化合物 21 の合成

10

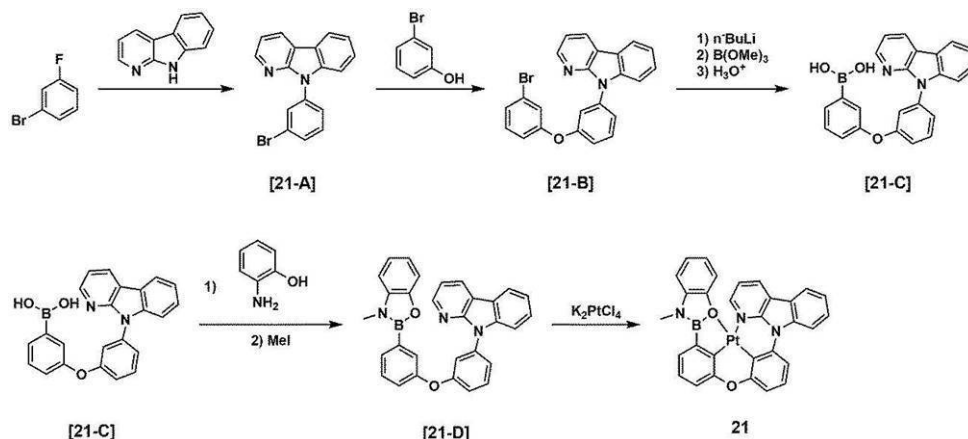
20

30

40

50

【化 100】



10

【0248】

(1) 中間体 [21-A] の合成

1-ブロモフルオロベンゼン 17.5 g (100 mmol)、 α -カルボリン 20.2 g (120 mmol) 及び三リン酸カリウム 42.5 g (200 mmol) を反応容器に入れ、ジメチルスルホキシド 200 mL に懸濁させた。反応混合物を加熱し、160℃で24時間撹拌した。反応終了後、常温に冷やし、600 mL 蒸留水を加え、酢酸エチルで抽出した。抽出された有機層を、飽和塩化ナトリウム水溶液で洗浄し、硫酸ナトリウムで乾燥させた。溶媒を除去した残余物を、カラムクロマトグラフィを利用して分離し、中間体 [21-A] 29.4 g (91 mmol) を得た。

20

【0249】

(2) 化合物 21 の合成

その後、合成例 1 と同一方法を利用し、化合物 21 を 0.20 g (0.3 mmol) 得た。

【0250】

上述の合成例において合成された化合物の ^1H NMR 及び MS / FAB を下記表 1 に示した。

30

40

50

【表 1】

化合物番号	¹ H NMR (CDCl ₃ , 400 MHz)	MS/FAB	
		found	calc.
1	8.53-8.43 (2H, m), 8.19-8.08 (3H, m), 7.58-7.47 (3H, m), 7.31-7.20 (3H, m), 7.00-6.80 (2H, m), 6.71-6.50 (4H, m), 2.78 (3H, s)	660.1293	660.1296
6	8.54-8.29 (2H, m), 8.19-8.06 (3H, m), 7.58-7.47 (3H, m), 7.31-7.20 (3H, m), 6.99-6.80 (2H, m), 6.71-6.55 (4H, m), 2.83 (1H, q), 1.18 (6H, d)	688.1608	688.1609
11	8.33-8.30 (2H, m), 7.46-7.30 (4H, m), 7.01-6.88 (3H, m), 6.78-6.72 (2H, m), 6.63-6.49 (2H, m), 2.76 (3H, s)	560.0981	560.0983
16	8.11 (1H, s), 7.48-7.47 (2H, m), 7.36-7.30 (2H, m), 7.10-7.01 (2H, m), 6.79-6.72 (2H, m), 6.63-6.55 (2H, m), 3.78 (3H, s), 2.76 (3H, s)	575.1090	575.1092
21	8.58-8.52 (3H, m), 7.94 (1H, m), 7.46-7.43 (3H, m), 7.36-7.31 (3H, m), 7.15-7.01 (3H, m), 6.79-6.72 (2H, m), 6.63-6.51 (2H, m), 2.75 (3H, s)	660.1294	660.1296

【0251】

表 1 に示された化合物以外の他の化合物も、前述の合成経路及び原料物質を参照し、当該技術分野の当業者であるならば、その合成方法を容易に認識することができるであろう。

【0252】

実施例 1

基板及びアノードとして、コーニング (Corning) 社の $15 \Omega / \text{cm}^2$ (1, 200 Å) ITO が形成されたガラス基板を、50 mm × 50 mm × 0.7 mm サイズに切り、イソプロピルアルコールと純水を利用し、各 5 分間超音波洗浄した後、30 分間紫外線を照射してオゾンに露出させて洗浄し、真空蒸着装置に該ガラス基板を設置した。

【0253】

ガラス基板に形成された ITO アノード上部に、2-TNATA を真空蒸着し、60 nm 厚の正孔注入層を形成し、正孔注入層上部に NPB を真空蒸着し、30 nm 厚の正孔輸送層を形成した。

【0254】

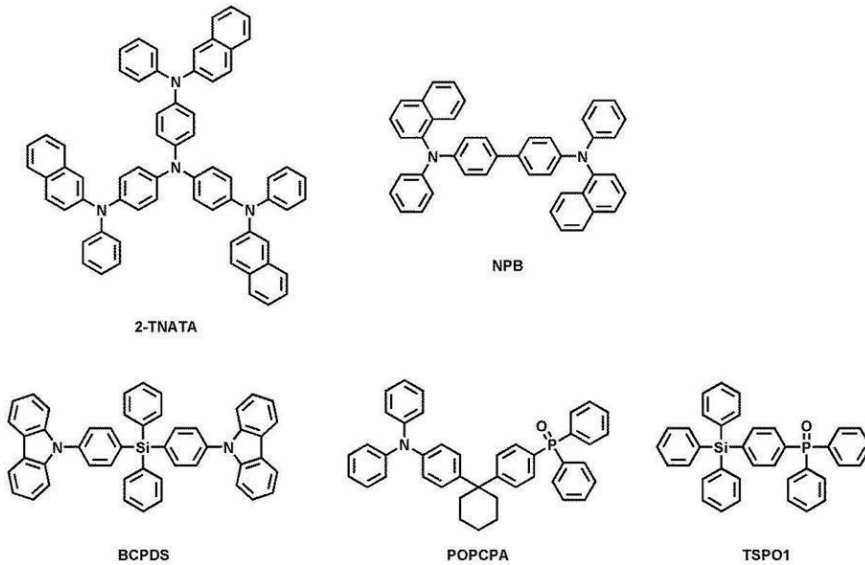
正孔輸送層上部に、コホストである BCPDS 及び POPCPA (BCPDS と POPCPA との重量比は、1 : 1 である) と、ドープアントである化合物 1 を、コホストとドープアントとの重量比が 90 : 10 になるように共蒸着し、30 nm 厚の発光層を形成した。

【0255】

発光層上部に、ジフェニル (4- (トリフェニルシリル) フェニル) -ホスフィンオキ

シド (TSPO1) を蒸着して 5 nm 厚の正孔阻止層を形成し、正孔阻止層上部に Alq3 を蒸着し、30 nm 厚の電子輸送層を形成した後、電子輸送層上部に LiF を蒸着し、1 nm 厚の電子注入層を形成した後、電子注入層上部に Al を真空蒸着し、300 nm 厚のカソードを形成し、有機電界発光素子を作製した。

【化 101】



【0256】

実施例 2～4、及び比較例 1～3

発光層の形成時、ドーパントとして化合物 1 の代わりに、表 2 に記載された化合物をそれぞれ使用したという点を除いては、前述の実施例 1 と同一方法を利用し、有機電界発光素子を作製した。

【0257】

評価例 1

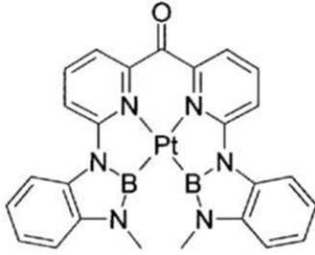
前述の実施例 1～4、及び比較例 1～3 で作製された有機電界発光素子の駆動電圧、電流密度、輝度、発光効率、発光光及び最大発光波長を、Keithley SMU 236 及び輝度計 PR650 を利用して測定し、その結果を表 2 に示した。

【表 2】

	発光層	駆動電圧(V)	電流密度 (mA/cm ²)	輝度 (cd/m ²)	効率 (cd/A)	発光光	発光波長 (nm)
実施例 1	化合物 1	5.55	50	4,001	8.01	青色	480
実施例 2	化合物 6	5.43	50	4,050	8.05	青色	481
実施例 3	化合物 11	5.36	50	4,201	8.30	青色	465
実施例 4	化合物 16	5.45	50	4,112	8.24	青色	460
比較例 1	Flrpic	6.56	50	3,870	7.74	青色	478
比較例 2	化合物 A	6.44	50	3,780	7.25	赤色	690
比較例 3	化合物 B	6.66	50	3,501	6.98	緑青色	515

【0258】

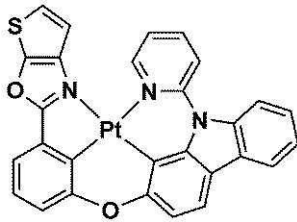
【化 1 0 2】



・・・＜化合物 A＞

10

【化 1 0 3】



・・・＜化合物 B＞

20

【 0 2 5 9】

表 2 を参照し、実施例 1 ～ 4 の有機電界発光素子は、比較例 1 ～ 3 の有機電界発光素子に比べ、駆動電圧が低く、輝度及び発光効率が高いことを確認した。

【符号の説明】

【 0 2 6 0】

- 1 0 有機電界発光素子
- 1 1 0 第 1 電極
- 1 5 0 有機層
- 1 9 0 第 2 電極
- 2 1 0 第 1 キャッピング層
- 2 2 0 第 2 キャッピング層

30

40

50

【図面】

【図 1】

10

【図 2】

20

190
150
110

190
150
110
210

10

20

30

40

50

【図 3】

30

220
190
150
110

【図 4】

40

220
190
150
110
210

10

20

30

40

50

フロントページの続き

(51)国際特許分類

F I

H 1 0 K	50/16	(2023.01)	H 1 0 K	50/16
H 1 0 K	50/18	(2023.01)	H 1 0 K	50/18
H 1 0 K	85/40	(2023.01)	H 1 0 K	85/40
H 1 0 K	85/60	(2023.01)	H 1 0 K	85/60
H 1 0 K	85/30	(2023.01)	H 1 0 K	85/30
H 1 0 K	101/10	(2023.01)	H 1 0 K	101/10

(72)発明者	大韓民国 京畿道 龍仁市 器興区 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内 キム スンブム
(72)発明者	大韓民国 京畿道 龍仁市 器興区 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内 キム ヘジン
(72)発明者	大韓民国 京畿道 龍仁市 器興区 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内 シン スジン
(72)発明者	大韓民国 京畿道 龍仁市 器興区 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内 アン ウンソ
(72)発明者	大韓民国 京畿道 龍仁市 器興区 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内 イ ウンヨン
(72)発明者	大韓民国 京畿道 龍仁市 器興区 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内 イ ジェスン
(72)発明者	大韓民国 京畿道 龍仁市 器興区 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内 イ ヒュンジュン
(72)発明者	大韓民国 京畿道 龍仁市 器興区 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内 チョン ミナ
(72)発明者	大韓民国 京畿道 龍仁市 器興区 三星路 1 三星ディスプレイ株式會社内

審査官 藤岡 善行

(56)参考文献 特表 2 0 1 2 - 5 2 7 4 7 2 (J P , A)

(58)調査した分野 (Int.Cl., D B 名)

H 1 0 K 8 5 / 3 0

H 1 0 K 5 0 / 1 2

C A p l u s / R E G I S T R Y (S T N)