

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B1)

(11) 特許番号

特許第4729643号
(P4729643)

(45) 発行日 平成23年7月20日 (2011.7.20)

(24) 登録日 平成23年4月22日 (2011.4.22)

(51) Int. Cl.	F I
HO 1 L 51/50 (2006.01)	HO 5 B 33/14 B
CO 9 K 11/06 (2006.01)	HO 5 B 33/22 B
CO 7 F 15/00 (2006.01)	CO 9 K 11/06 6 9 0
	CO 9 K 11/06 6 6 0
	CO 7 F 15/00 E

請求項の数 13 (全 87 頁)

(21) 出願番号	特願2010-157356 (P2010-157356)	(73) 特許権者	306037311
(22) 出願日	平成22年7月9日 (2010.7.9)		富士フイルム株式会社
審査請求日	平成22年7月27日 (2010.7.27)		東京都港区西麻布2丁目26番30号
早期審査対象出願		(74) 代理人	100115107
前置審査			弁理士 高松 猛
		(74) 代理人	100132986
			弁理士 矢澤 清純
		(72) 発明者	林 誠之
			神奈川県足柄上郡開成町牛島577番地
			富士フイルム株式会社内
		(72) 発明者	伊勢 俊大
			神奈川県足柄上郡開成町牛島577番地
			富士フイルム株式会社内
		審査官	東松 修太郎
			最終頁に続く

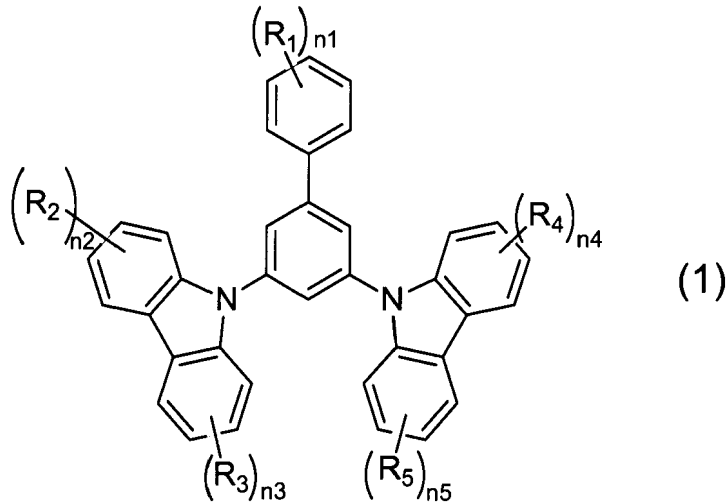
(54) 【発明の名称】 有機電界発光素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

基板上に、陽極及び陰極からなる一対の電極と、該電極間に発光層を有し、該発光層と該陰極の間に少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、
 該発光層に下記一般式(1)で表される化合物を少なくとも一つ含有し、
 該発光層に下記一般式(T-1)で表される燐光性発光材料を含有し、
 該発光層と該陰極の間の少なくとも一層の有機層に下記一般式(E-1)で表される化合物を少なくとも一つ含有する有機電界発光素子。

【化 1】



10

(一般式(1)中、 R_1 はアルキル基、又はアリール基を表し、更に置換基Zを有していてもよい。但し、 R_1 がカルバゾリル基又はペルフルオロアルキル基を表すことはない。 R_1 が複数存在する場合、複数の R_1 は、それぞれ同一でも異なってもよい。また複数の R_1 は、互いに結合して置換基Zを有していてもよいアリール環を形成してもよい。

20

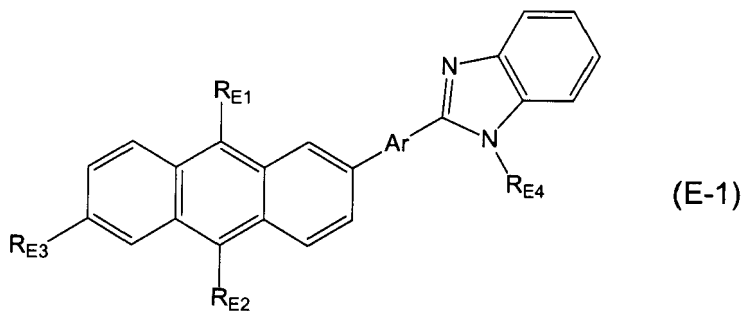
$R_2 \sim R_5$ はそれぞれ独立に、アルキル基、アリール基、シリル基、シアノ基又はフッ素原子を表し、更に置換基Zを有していてもよい。 $R_2 \sim R_5$ がそれぞれ複数存在する場合、複数の $R_2 \sim$ 複数の R_5 は、それぞれ同一でも異なってもよい。

置換基Zはアルキル基、アリール基、又はフッ素原子を表す。

n_1 は1～4の整数を表す。

$n_2 \sim n_5$ はそれぞれ独立に、0～4の整数を表す。)

【化 2】



30

(一般式(E-1)中、 R_{E1} 及び R_{E2} は、それぞれ独立に、無置換のアリール基、又は、無置換のピリジル基を表す。

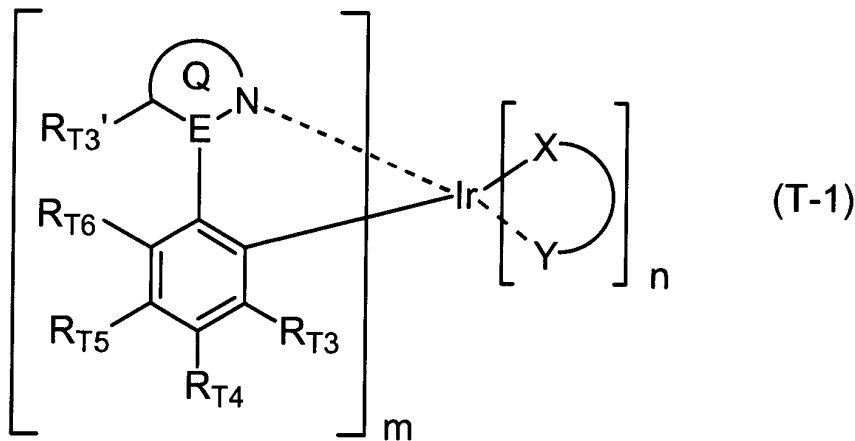
Ar は、無置換のアリーレン基、又は無置換の2価のピリジル基を表す。

R_{E3} は、水素原子、又は無置換のアリール基を表す。

R_{E4} は、無置換のアリール基、又は、無置換のピリジル基を表す。)

40

【化3】



10

(一般式(T-1)中、 $R_{T3'}$ 、 R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シアノ基、ペルフルオロアルキル基、トリフルオロビニル基、 $-CO_2R_T$ 、 $-C(O)R_T$ 、 $-N(R_T)_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-OR_T$ 、ハロゲン原子、アリール基又はヘテロアリール基を表し、更に置換基T

20

を有していてもよい。
Eは炭素原子又は窒素原子を表す。

Qは窒素を1つ以上含む5員又は6員の芳香族複素環又は縮合芳香族複素環である。

該環Qにおいて、EとNを結ぶ線は一本の線で表されているが、結合種は問わず、それぞれ単結合でも二重結合でも良い。

R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} は隣り合う任意の2つが互いに結合して縮合4~7員環を形成してもよく、該縮合4~7員環は、シクロアルキル、アリール又はヘテロアリールであり、該縮合4~7員環は更に置換基Tを有していてもよい。

$R_{T3'}$ と R_{T6} は、 $-C(R_T)_2-C(R_T)_2-$ 、 $-CR_T=CR_T-$ 、 $-C(R_T)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-NR_T-$ 、 $-O-C(R_T)_2-$ 、 $-NR_T-C(R_T)_2-$ 及び $-N=CR_T-$ から選択される連結基によって連結されて環を形成してもよく、 R_T はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し、更に置換基Tを有していてもよい。

30

置換基Tはそれぞれ独立に、フッ素原子、 $-R'$ 、 $-OR'$ 、 $-N(R')_2$ 、 $-SR'$ 、 $-C(O)R'$ 、 $-C(O)OR'$ 、 $-C(O)N(R')_2$ 、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-SO_2$ 、 $-SOR'$ 、 $-SO_2R'$ 、又は $-SO_3R'$ を表し、 R' はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、ペルフルオロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基又はヘテロアリール基を表す。

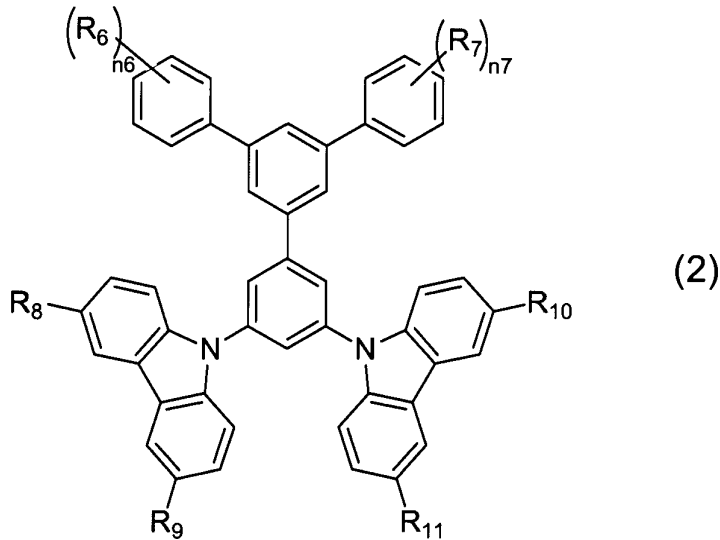
(X-Y)は、配位子を表す。mは1~3の整数、nは0~2の整数を表す。m+nは3である。)

40

【請求項2】

前記一般式(1)で表される化合物が、下記一般式(2)で表される、請求項1に記載の有機電界発光素子。

【化 4】



10

(一般式(2)中、 R_6 及び R_7 はそれぞれ独立に、アルキル基、アリール基、又はフッ素原子を表す。 R_6 及び R_7 がそれぞれ複数存在する場合、複数の R_6 及び複数の R_7 は、それぞれ同一でも異なっていてもよい。また複数の R_6 及び複数の R_7 は、それぞれ互いに結合して置換基Zを有していてもよいアリール環を形成してもよい。

20

n_6 及び n_7 はそれぞれ独立に、 $0 \sim 2$ の整数を表す。

$R_8 \sim R_{11}$ はそれぞれ独立に、水素原子、置換基Zを有していてもよいアルキル基、アルキル基を有していてもよいアリール基、置換基Zを有していてもよいシリル基、シアノ基又はフッ素原子を表す。

置換基Zはアルキル基、アリール基、又はフッ素原子を表す。)

【請求項 3】

前記一般式(E-1)において、 R_{E4} が無置換のアリール基である、請求項1又は2に記載の有機電界発光素子。

30

【請求項 4】

前記一般式(E-1)において、Arが無置換のアリール基である、請求項1~3のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【請求項 5】

前記一般式(E-1)において、 R_{E4} がフェニル基である、請求項1~4のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【請求項 6】

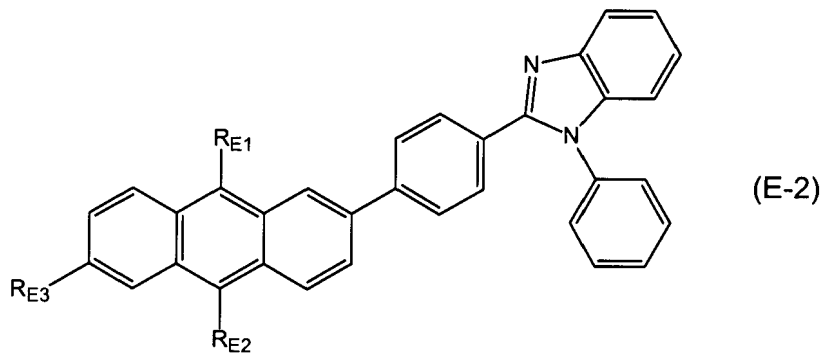
前記一般式(E-1)において、Arがフェニレン基である、請求項1~5のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【請求項 7】

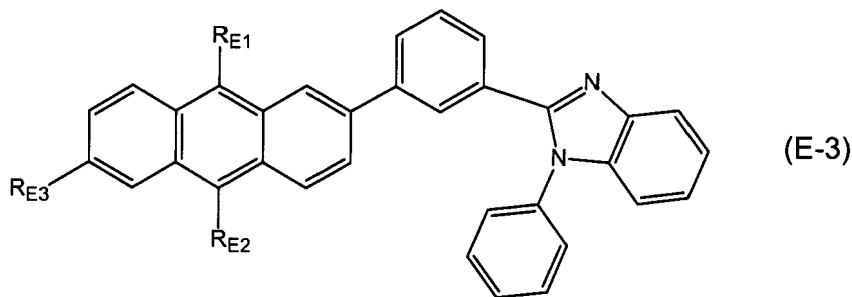
前記一般式(E-1)が下記一般式(E-2)又は下記一般式(E-3)で表される、請求項1~6のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

40

【化5】



10



20

(一般式(E-2)及び(E-3)中、 R_{E1} 及び R_{E2} は、それぞれ独立に、無置換のアリール基、又は、無置換のピリジル基を表す。)

R_{E3} は、水素原子、又は、無置換のアリール基を表す。)

【請求項8】

30

前記 R_{E3} が水素原子である、請求項1～7のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【請求項9】

前記 R_{E1} 及び R_{E2} が各々独立にナフチル基である、請求項1～8のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【請求項10】

前記発光層、及び前記陽極と前記陰極の間に存在するその他の有機層のうちいずれか少なくとも1層が溶液塗布プロセスにより形成された、請求項1～9のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【請求項11】

40

請求項1～10のいずれか1項に記載の有機電界発光素子を用いた発光装置。

【請求項12】

請求項1～10のいずれか1項に記載の有機電界発光素子を用いた表示装置。

【請求項13】

請求項1～10のいずれか1項に記載の有機電界発光素子を用いた照明装置。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は有機電界発光素子に関する。

【背景技術】

50

【 0 0 0 2 】

有機電界発光素子（以下、「素子」、「有機EL素子」ともいう）は、低電圧駆動で高輝度の発光が得られることから活発に研究開発が行われている。有機電界発光素子は、一对の電極間に有機層を有し、陰極から注入された電子と陽極から注入された正孔とが有機層において再結合し、生成した励起子のエネルギーを発光に利用するものである。

【 0 0 0 3 】

近年、燐光発光材料を用いることにより、素子の高効率化が進んでいる。また、発光材料をホスト材料中にドーブした発光層を用いるドーブ型素子が広く採用されている。

例えば、特許文献1には、発光層において、燐光発光材料としてイリジウム錯体を用い、ホスト材料としてカルバゾール構造を含む化合物を用いた有機電界発光素子が記載されている。

10

【 0 0 0 4 】

また、有機電界発光素子の効率及び耐久性等の向上を目的として、電子輸送性を有する化合物の開発も行われている。

例えば特許文献2には蛍光発光材料を含む発光層と陰極との間に、アントラセン構造とベンゾイミダゾール構造を含む特定の化合物からなる電子輸送層を設けた有機電界発光素子が記載されている。

【 0 0 0 5 】

また、特許文献3には、発光層において、燐光発光材料としてイリジウム錯体を用い、ホスト材料としてカルバゾール構造を含む化合物を用い、かつ発光層と陰極との間に、アントラセン構造とベンゾイミダゾール構造を含む特定の化合物からなる電子輸送層を設けた有機電界発光素子が記載されている。

20

【 先行技術文献 】

【 特許文献 】

【 0 0 0 6 】

【 特許文献 1 】 特開 2 0 0 8 - 1 4 7 3 5 3 号 公 報

【 特許文献 2 】 特許 第 4 3 0 8 6 6 3 号 公 報

【 特許文献 3 】 国際公開 第 0 8 / 0 1 5 9 4 9 号

【 発明の概要 】

【 発明が解決しようとする課題 】

30

【 0 0 0 7 】

例えば、照明用途等では 1万 cd/m^2 程度の高輝度での駆動も考えられるが、本発明者らの検討によると、従来の有機電界発光素子では、高輝度駆動時には低輝度駆動時に比べて効率の低下（ロールオフ現象）が顕著であることが分かった。

また、従来の有機電界発光素子では、ホスト材料の電子輸送性が低いため、発光層と電子輸送層の界面付近で発光が起こり、電子輸送層の膜厚が変化すると発光色度が大きく変化するという問題があることが分かった。

また、上記問題を解決しつつ、発光効率が高く、駆動電圧が低く、かつ耐久性が高い素子が求められている。

【 0 0 0 8 】

40

本発明の目的は、上記事情に鑑み、発光効率、駆動電圧、耐久性の観点で優れ、高輝度駆動時の効率の低下が少なく、かつ発光層と陰極の間の、電子輸送性を有する化合物を含む層の膜厚に素子の発光色度が依存しにくい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 】

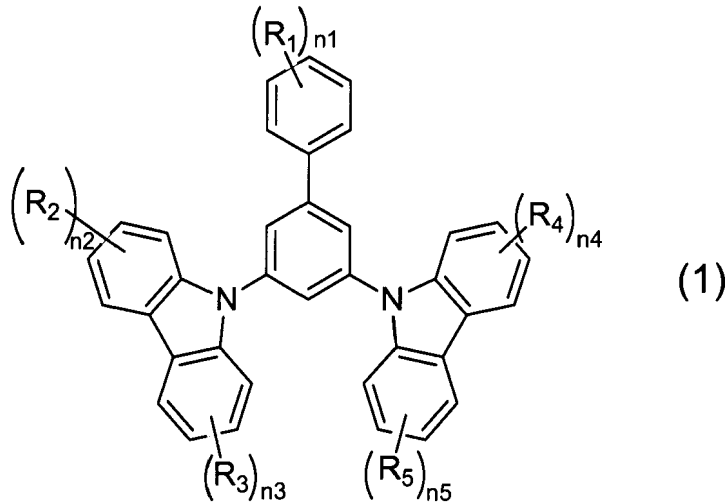
【 0 0 0 9 】

本発明者らの検討によると、発光層にカルバゾール構造を含む特定の化合物を含有し、該発光層より陰極側の層にアントラセン構造とベンゾイミダゾール構造を含む特定の化合物を含有することにより、前記課題を解決し得ることを見出した。

すなわち、本発明は下記的手段により達成することができる。

基板上に、陽極及び陰極からなる一対の電極と、該電極間に発光層を有し、該発光層と該陰極の間に少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、
 該発光層に下記一般式(1)で表される化合物を少なくとも一つ含有し、
 該発光層に下記一般式(T-1)で表される燐光性発光材料を含有し、
 該発光層と該陰極の間の少なくとも一層の有機層に下記一般式(E-1)で表される化合物を少なくとも一つ含有する有機電界発光素子。

【化61】



(一般式(1)中、 R_1 はアルキル基、又はアリール基を表し、更に置換基Zを有していてもよい。但し、 R_1 がカルbazolリル基又はペルフルオロアルキル基を表すことはない。 R_1 が複数存在する場合、複数の R_1 は、それぞれ同一でも異なってもよい。また複数の R_1 は、互いに結合して置換基Zを有していてもよいアリール環を形成してもよい。

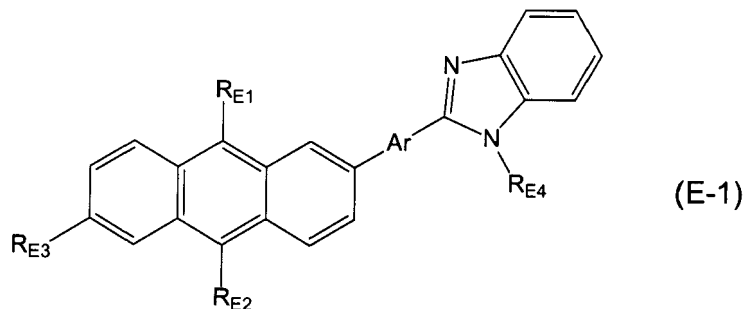
$R_2 \sim R_5$ はそれぞれ独立に、アルキル基、アリール基、シリル基、シアノ基又はフッ素原子を表し、更に置換基Zを有していてもよい。 $R_2 \sim R_5$ がそれぞれ複数存在する場合、複数の $R_2 \sim$ 複数の R_5 は、それぞれ同一でも異なってもよい。

置換基Zはアルキル基、アリール基、又はフッ素原子を表す。

n_1 は1~4の整数を表す。

$n_2 \sim n_5$ はそれぞれ独立に、0~4の整数を表す。)

【化62】

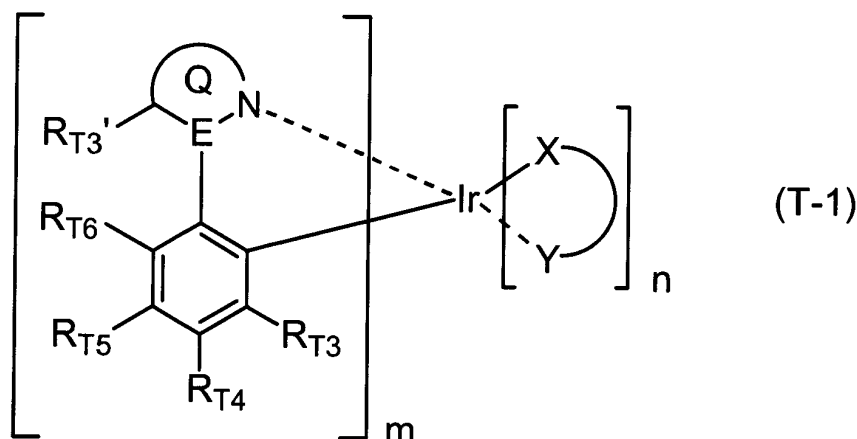


(一般式(E-1)中、 R_{E1} 及び R_{E2} は、それぞれ独立に、無置換のアリール基、又は、無置換のピリジル基を表す。

Arは、無置換のアリーレン基、又は無置換の2価のピリジル基を表す。

R_{E3} は、水素原子、又は無置換のアリール基を表す。

R_{E4} は、無置換のアリール基、又は、無置換のピリジル基を表す。)
 【化 6 3】



10

(一般式 (T-1) 中、 $R_{T3'}$ 、 R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シアノ基、ペルフルオロアルキル基、トリフルオロビニル基、 $-CO_2R_T$ 、 $-C(O)R_T$ 、 $-N(R_T)_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-OR_T$ 、ハロゲン原子、アリール基又はヘテロアリール基を表し、更に置換基 T を有していてもよい。

20

E は炭素原子又は窒素原子を表す。

Q は窒素を 1 つ以上含む 5 員又は 6 員の芳香族複素環又は縮合芳香族複素環である。

該環 Q において、E と N を結ぶ線は一本の線で表されているが、結合種は問わず、それぞれ単結合でも二重結合でも良い。

R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} は隣り合う任意の 2 つが互いに結合して縮合 4 ~ 7 員環を形成してもよく、該縮合 4 ~ 7 員環は、シクロアルキル、アリール又はヘテロアリールであり、該縮合 4 ~ 7 員環は更に置換基 T を有していてもよい。

$R_{T3'}$ と R_{T6} は、 $-C(R_T)_2-C(R_T)_2-$ 、 $-CR_T=CR_T-$ 、 $-C(R_T)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-NR_T-$ 、 $-O-C(R_T)_2-$ 、 $-NR_T-C(R_T)_2-$ 及び $-N=CR_T-$ から選択される連結基によって連結されて環を形成してもよく、 R_T はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し、更に置換基 T を有していてもよい。

30

置換基 T はそれぞれ独立に、フッ素原子、 $-R'$ 、 $-OR'$ 、 $-N(R')_2$ 、 $-SR'$ 、 $-C(O)R'$ 、 $-C(O)OR'$ 、 $-C(O)N(R')_2$ 、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-SO_2$ 、 $-SOR'$ 、 $-SO_2R'$ 、又は $-SO_3R'$ を表し、 R' はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、ペルフルオロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基又はヘテロアリール基を表す。

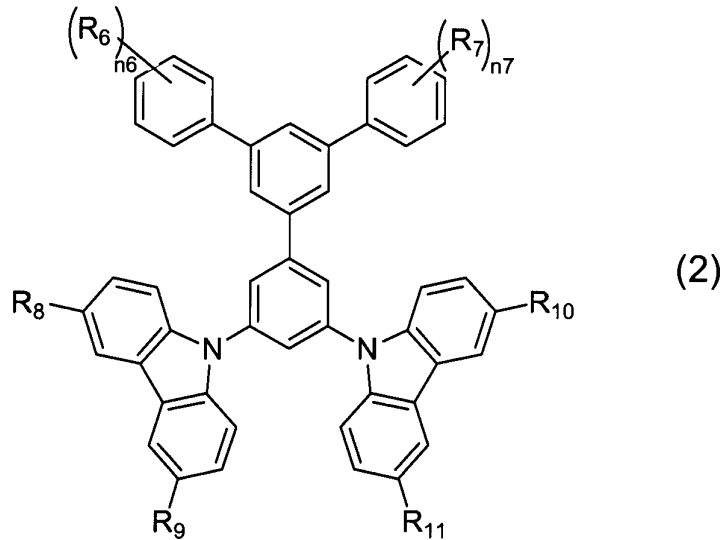
(X-Y) は、配位子を表す。m は 1 ~ 3 の整数、n は 0 ~ 2 の整数を表す。m+n は 3 である。)

40

< 2 >

前記一般式 (1) で表される化合物が、下記一般式 (2) で表される、上記 < 1 > に記載の有機電界発光素子。

【化 6 4】



10

(一般式(2)中、 R_6 及び R_7 はそれぞれ独立に、アルキル基、アリール基、又はフッ素原子を表す。 R_6 及び R_7 がそれぞれ複数存在する場合、複数の R_6 及び複数の R_7 は、それぞれ同一でも異なっていてもよい。また複数の R_6 及び複数の R_7 は、それぞれ互いに結合して置換基Zを有していてもよいアリール環を形成してもよい。

20

n_6 及び n_7 はそれぞれ独立に、 $0 \sim 2$ の整数を表す。

$R_8 \sim R_{11}$ はそれぞれ独立に、水素原子、置換基Zを有していてもよいアルキル基、アルキル基を有していてもよいアリール基、置換基Zを有していてもよいシリル基、シアノ基又はフッ素原子を表す。

置換基Zはアルキル基、アリール基、又はフッ素原子を表す。)

< 3 >

前記一般式(E-1)において、 R_{E4} が無置換のアリール基である、上記< 1 >又は< 2 >に記載の有機電界発光素子。

30

< 4 >

前記一般式(E-1)において、Arが無置換のアリーレン基である、上記< 1 > ~ < 3 >のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

< 5 >

前記一般式(E-1)において、 R_{E4} がフェニル基である、上記< 1 > ~ < 4 >のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

< 6 >

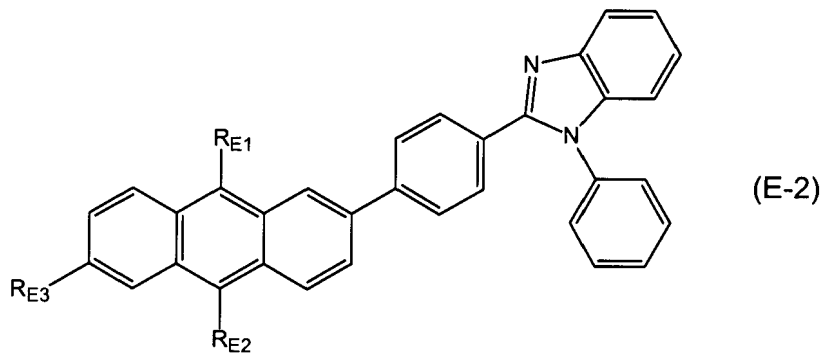
前記一般式(E-1)において、Arがフェニレン基である、上記< 1 > ~ < 5 >のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

< 7 >

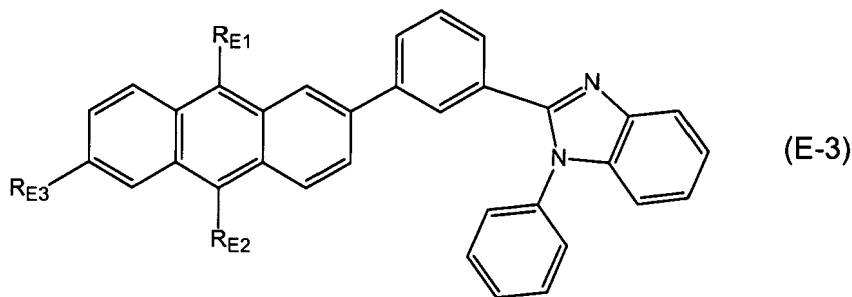
40

前記一般式(E-1)が下記一般式(E-2)又は下記一般式(E-3)で表される、上記< 1 > ~ < 6 >のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【化 6 5】



10



20

(一般式(E-2)及び(E-3)中、 R_{E1} 及び R_{E2} は、それぞれ独立に、無置換のアリール基、又は、無置換のピリジル基を表す。

R_{E3} は、水素原子、又は、無置換のアリール基を表す。)

< 8 >

前記 R_{E3} が水素原子である、上記< 1 > ~ < 7 >のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

< 9 >

前記 R_{E1} 及び R_{E2} が各々独立にナフチル基である、上記< 1 > ~ < 8 >のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

< 10 >

前記発光層、及び前記陽極と前記陰極の間に存在するその他の有機層のうちいずれか少なくとも1層が溶液塗布プロセスにより形成された、上記< 1 > ~ < 9 >のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

< 11 >

上記< 1 > ~ < 10 >のいずれか1項に記載の有機電界発光素子を用いた発光装置。

< 12 >

上記< 1 > ~ < 10 >のいずれか1項に記載の有機電界発光素子を用いた表示装置。

< 13 >

上記< 1 > ~ < 10 >のいずれか1項に記載の有機電界発光素子を用いた照明装置。

なお、本発明は、上記< 1 > ~ < 13 >に関するものであるが、参考のため、その他の事項(例えば下記〔1〕~〔15〕に記載の事項等)についても記載した。

【0010】

〔1〕

基板上に、陽極及び陰極からなる一対の電極と、該電極間に発光層を有し、該発光層と

50

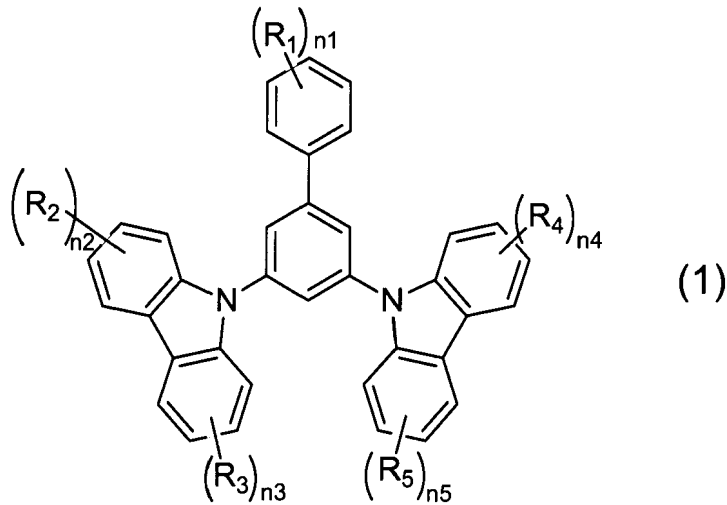
該陰極の間に少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、

該発光層に下記一般式(1)で表される化合物を少なくとも一つ含有し、

該発光層と該陰極の間の少なくとも一層の有機層に下記一般式(E-1)で表される化合物を少なくとも一つ含有する有機電界発光素子。

【0011】

【化1】



10

20

【0012】

(一般式(1)中、 R_1 はアルキル基、アリール基、又はシリル基を表し、更に置換基Zを有していてもよい。但し、 R_1 がカルbazolリル基又はペルフルオロアルキル基を表すことはない。 R_1 が複数存在する場合、複数の R_1 は、それぞれ同一でも異なってもよい。また複数の R_1 は、互いに結合して置換基Zを有していてもよいアリール環を形成してもよい。

$R_2 \sim R_5$ はそれぞれ独立に、アルキル基、アリール基、シリル基、シアノ基又はフッ素原子を表し、更に置換基Zを有していてもよい。 $R_2 \sim R_5$ がそれぞれ複数存在する場合、複数の $R_2 \sim$ 複数の R_5 は、それぞれ同一でも異なってもよい。

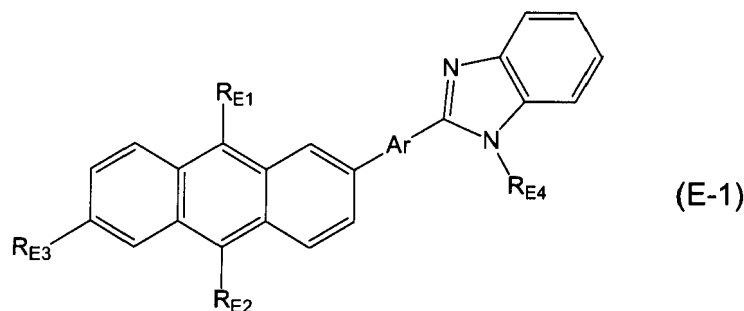
置換基Zはアルキル基、アルケニル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、フェノキシ基、フッ素原子、シリル基、アミノ基、シアノ基又はこれらを組み合わせて成る基を表し、複数の置換基Zは互いに結合してアリール環を形成しても良い。

n_1 は0～5の整数を表す。

$n_2 \sim n_5$ はそれぞれ独立に、0～4の整数を表す。)

【0013】

【化2】



40

【0014】

(一般式(E-1)中、 R_{E1} 及び R_{E2} は、それぞれ独立に、水素原子、脂肪族炭化水素基、置換若しくは無置換のアリール基、又は、置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環

50

基を表す。但し、 R_{E1} 及び R_{E2} が同時に水素原子であることはない。

Ar は、置換若しくは無置換のアリーレン基、又は置換若しくは無置換の 2 価の芳香族ヘテロ環基を表す。

R_{E3} は、水素原子、脂肪族炭化水素、置換若しくは無置換のアリール基、又は、置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す。

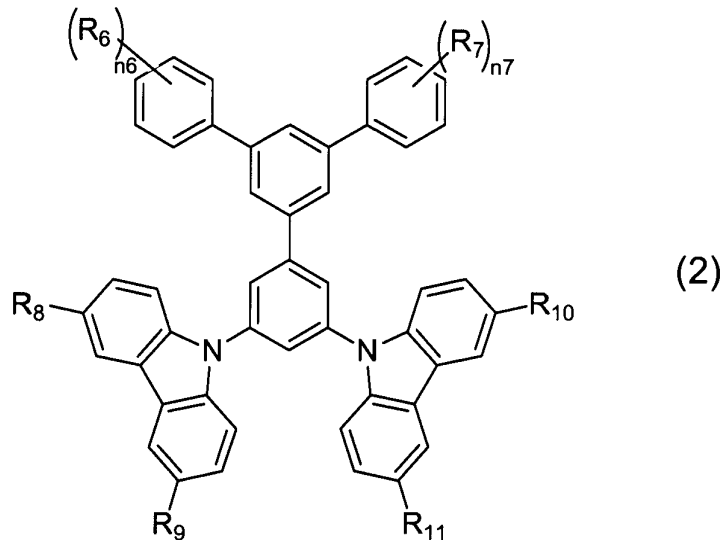
R_{E4} は、水素原子、脂肪族炭化水素、置換若しくは無置換のアリール基、又は、置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す。)

〔 2 〕

前記一般式 (1) で表される化合物が、下記一般式 (2) で表される、上記〔 1 〕に記載の有機電界発光素子。

【 0 0 1 5 】

【 化 3 】



【 0 0 1 6 】

(一般式 (2) 中、 R_6 及び R_7 はそれぞれ独立に、置換基 Z を有していてもよいアルキル基、アルキル基を有していてもよいアリール基、シアノ基又はフッ素原子を表す。 R_6 及び R_7 がそれぞれ複数存在する場合、複数の R_6 及び複数の R_7 は、それぞれ同一でも異なってもよい。また複数の R_6 及び複数の R_7 は、それぞれ互いに結合して置換基 Z を有していてもよいアリール環を形成してもよい。

n_6 及び n_7 はそれぞれ独立に、0 ~ 5 の整数を表す。

$R_8 \sim R_{11}$ はそれぞれ独立に、水素原子、置換基 Z を有していてもよいアルキル基、アルキル基を有していてもよいアリール基、置換基 Z を有していてもよいシリル基、シアノ基又はフッ素原子を表す。

置換基 Z はアルキル基、アルケニル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、フェノキシ基、フッ素原子、シリル基、アミノ基、シアノ基又はこれらを組み合わせて成る基を表し、複数の置換基 Z は互いに結合してアリール環を形成しても良い。)

〔 3 〕

前記一般式 (E - 1) において、 R_{E4} が無置換のアリール基である、上記〔 1 〕又は〔 2 〕に記載の有機電界発光素子。

〔 4 〕

前記一般式 (E - 1) において、 Ar が無置換のアリーレン基である、上記〔 1 〕 ~ 〔 3 〕のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

〔 5 〕

前記一般式 (E - 1) において、 R_{E4} がフェニル基である、上記〔 1 〕 ~ 〔 4 〕のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

10

20

30

40

50

〔 6 〕

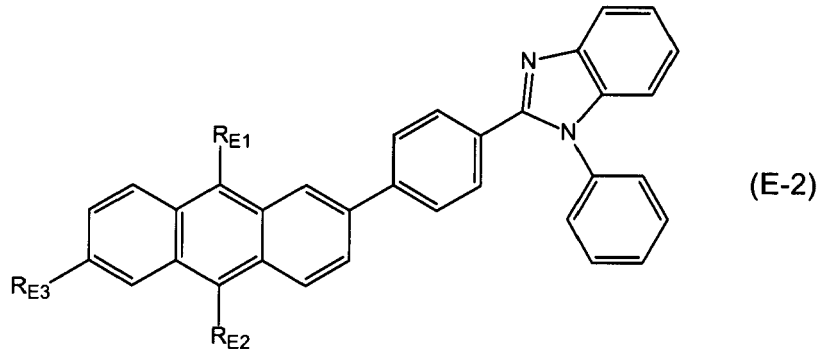
前記一般式 (E - 1) において、 A_r がフェニレン基である、上記〔 1 〕 ~〔 5 〕のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

〔 7 〕

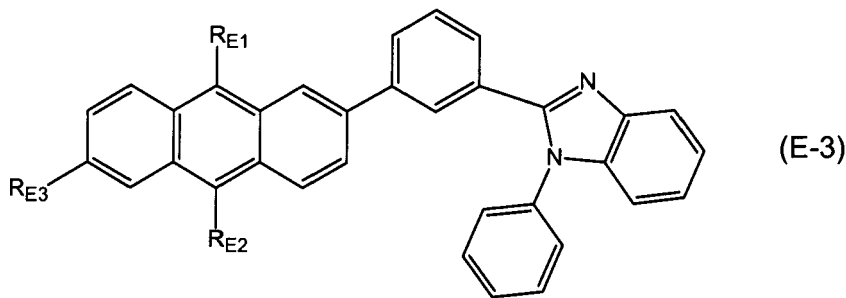
前記一般式 (E - 1) が下記一般式 (E - 2) 又は下記一般式 (E - 3) で表される、上記〔 1 〕 ~〔 6 〕のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

【 0 0 1 7 〕

【 化 4 〕



10



20

30

【 0 0 1 8 〕

(一般式 (E - 2) 及び (E - 3) 中、 R_{E1} 及び R_{E2} は、それぞれ独立に、水素原子、脂肪族炭化水素基、置換若しくは無置換のアリール基、又は、置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す。但し、 R_{E1} 及び R_{E2} が同時に水素原子であることはない。

R_{E3} は、水素原子、脂肪族炭化水素基、置換若しくは無置換のアリール基、又は、置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す。)

〔 8 〕

前記 R_{E3} が水素原子である、上記〔 1 〕 ~〔 7 〕のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

40

〔 9 〕

前記 R_{E1} 及び R_{E2} が各々独立にナフチル基である、上記〔 1 〕 ~〔 8 〕のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

〔 1 0 〕

前記発光層に燐光性発光材料を含有する、上記〔 1 〕 ~〔 9 〕のいずれか 1 項に記載の有機電界発光素子。

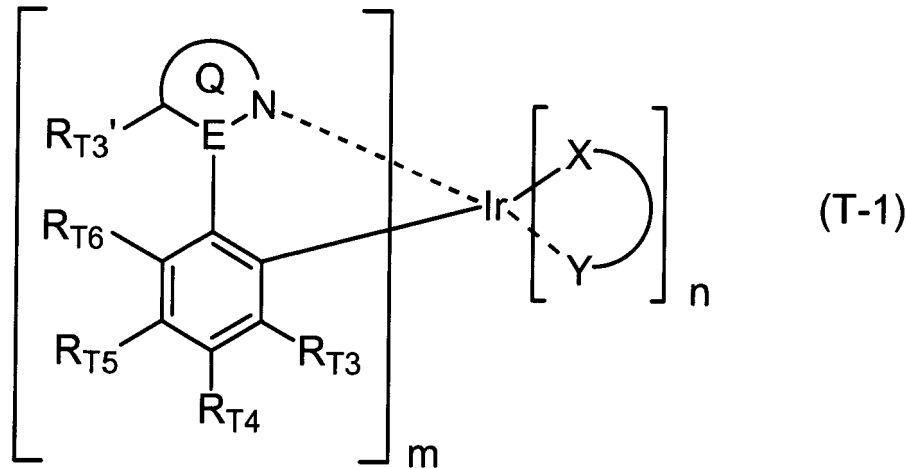
〔 1 1 〕

前記燐光性発光材料が、下記一般式 (T - 1) で表される化合物である、上記〔 1 0 〕に記載の有機電界発光素子。

50

【 0 0 1 9 】

【 化 5 】



10

【 0 0 2 0 】

(一般式(T-1)中、 $R_{T3'}$ 、 R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シアノ基、ペルフルオロアルキル基、トリフルオロビニル基、 $-CO_2R_T$ 、 $-C(O)R_T$ 、 $-N(R_T)_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-OR_T$ 、ハロゲン原子、アリール基又はヘテロアリール基を表し、更に置換基Tを有していてもよい。

20

Eは炭素原子又は窒素原子を表す。

Qは窒素を1つ以上含む5員又は6員の芳香族複素環又は縮合芳香族複素環である。

該環Qにおいて、EとNを結ぶ線は一本の線で表されているが、結合種は問わず、それぞれ単結合でも二重結合でも良い。

R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} は隣り合う任意の2つが互いに結合して縮合4~7員環を形成してもよく、該縮合4~7員環は、シクロアルキル、アリール又はヘテロアリールであり、該縮合4~7員環は更に置換基Tを有していてもよい。

$R_{T3'}$ と R_{T6} は、 $-C(R_T)_2-C(R_T)_2-$ 、 $-CR_T=CR_T-$ 、 $-C(R_T)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-NR_T-$ 、 $-O-C(R_T)_2-$ 、 $-NR_T-C(R_T)_2-$ 及び $-N=CR_T-$ から選択される連結基によって連結されて環を形成してもよく、 R_T はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し、更に置換基Tを有していてもよい。

30

置換基Tはそれぞれ独立に、フッ素原子、 $-R'$ 、 $-OR'$ 、 $-N(R')_2$ 、 $-SR'$ 、 $-C(O)R'$ 、 $-C(O)OR'$ 、 $-C(O)N(R')_2$ 、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-SO_2$ 、 $-SOR'$ 、 $-SO_2R'$ 、又は $-SO_3R'$ を表し、 R' はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、ペルフルオロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基又はヘテロアリール基を表す。

(X-Y)は、配位子を表す。mは1~3の整数、nは0~2の整数を表す。m+nは3である。) 40

【 1 2 】

前記発光層、及び前記陽極と前記陰極の間に存在するその他の有機層のうちいずれか少なくとも1層が溶液塗布プロセスにより形成された、上記【1】~【11】のいずれか1項に記載の有機電界発光素子。

【 1 3 】

上記【1】~【12】のいずれか1項に記載の有機電界発光素子を用いた発光装置。

【 1 4 】

上記【1】~【12】のいずれか1項に記載の有機電界発光素子を用いた表示装置。

【 1 5 】

50

上記〔1〕～〔12〕のいずれか1項に記載の有機電界発光素子を用いた照明装置。

【発明の効果】

【0021】

本発明によれば、発光効率、駆動電圧、耐久性の観点で優れ、高輝度駆動時の効率の低下が少なく、かつ発光層と陰極の間の、電子輸送性を有する化合物を含む層の膜厚に素子の発光色度が依存しにくい有機電界発光素子を提供することができる。

【図面の簡単な説明】

【0022】

【図1】本発明に係る有機電界発光素子の構成の一例を示す概略図である。

【図2】本発明に係る発光装置の一例を示す概略図である。

10

【図3】本発明に係る照明装置の一例を示す概略図である。

【発明を実施するための形態】

【0023】

一般式(1)及び一般式(E-1)の説明における水素原子は同位体(重水素原子等)も含み、また更に置換基を構成する原子は、その同位体も含んでいることを表す。

【0024】

本発明において、置換基群A、置換基群B、及び置換基Zを下記のように定義する。

(置換基群A)

アルキル基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～10であり、例えばメチル、エチル、イソプロピル、t-ブチル、n-オクチル、n-デシル、n-ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシル、ネオペンチルなどが挙げられる。)、アルケニル基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニルなどが挙げられる。)、アルキニル基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニルなどが挙げられる。)、アリール基(好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、特に好ましくは炭素数6～12であり、例えばフェニル、4-メチルフェニル、2,6-ジメチルフェニルなどが挙げられる。)、アミノ基(好ましくは炭素数0～30、より好ましくは炭素数0～20、特に好ましくは炭素数0～10であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシ基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～10であり、例えばメトキシ、エトキシ、プトキシ、2-エチルヘキシロキシなどが挙げられる。)、アリーロキシ基(好ましくは炭素数6～30、より好ましくは炭素数6～20、特に好ましくは炭素数6～12であり、例えばフェニルオキシ、1-ナフチルオキシ、2-ナフチルオキシなどが挙げられる。)、ヘテロ環オキシ基(好ましくは炭素数1～30、より好ましくは炭素数1～20、特に好ましくは炭素数1～12であり、例えばピリジルオキシ、ピラジルオキシ、ピリミジルオキシ、キノリルオキシなどが挙げられる。)、アシル基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～12であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、ピバロイルなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニル基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～12であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。)、アリーロキシカルボニル基(好ましくは炭素数7～30、より好ましくは炭素数7～20、特に好ましくは炭素数7～12であり、例えばフェニルオキシカルボニルなどが挙げられる。)、アシルオキシ基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。)、アシルアミノ基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～20、特に好ましくは炭素数2～10であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数2～30、より好ましくは炭素数2～2

20

30

40

50

0、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、アリアルオキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数 7 ~ 30、より好ましくは炭素数 7 ~ 20、特に好ましくは炭素数 7 ~ 12 であり、例えばフェニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、スルホニルアミノ基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメタン
 10 スルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。)、スルファモイル基(好ましくは炭素数 0 ~ 30、より好ましくは炭素数 0 ~ 20、特に好ましくは炭素数 0 ~ 12 であり、例えばスルファモイル、メチルスルファモイル、ジメチルスルファモイル、フェニルスルファモイルなどが挙げられる。)、カルバモイル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えば
 カルバモイル、メチルカルバモイル、ジエチルカルバモイル、フェニルカルバモイルなどが挙げられる。)、アルキルチオ基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが
 15 挙げられる。)、アリアルチオ基(好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロ環チオ基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばピリジルチオ、2 - ベンズイミゾリルチオ、2 -
 ベンズオキサゾリルチオ、2 - ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、スルホニル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素
 20 数 1 ~ 12 であり、例えばメシル、トシルなどが挙げられる。)、スルフィニル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばメタンスルフィニル、ベンゼンスルフィニルなどが挙げられる。)、ウレ
 イド基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばウレイド、メチルウレイド、フェニルウレイドなどが挙げら
 25 れる。)、リン酸アミド基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、例えばジエチルリン酸アミド、フェニルリン酸
 アミドなどが挙げられる。)、ヒドロキシ基、メルカプト基、ハロゲン原子(例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子)、シアノ基、スルホ基、カルボキシル基、ニ
 トロ基、ヒドロキサム酸基、スルフィノ基、ヒドラジノ基、イミノ基、ヘテロ環基(芳香族ヘテロ環基も包含し、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 12 であ
 30 り、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子、リン原子、ケイ素原子、セレン原子、テルル原子であり、具体的にはピリジル、ピラジニル、ピリミジル、ピリ
 ダジニル、ピロリル、ピラゾリル、トリアゾリル、イミダゾリル、オキサゾリル、チアゾ
 リル、イソキサゾリル、イソチアゾリル、キノリル、フリル、チエニル、セレノフェニル、テルロフェニル、ピペリジル、ピペリジノ、モルホリノ、ピロリジル、ピロリジノ、ベン
 ゾオキサゾリル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾチアゾリル、カルバゾリル基、アゼピニ
 ル基、シロリル基などが挙げられる。)、シリル基(好ましくは炭素数 3 ~ 40、より好
 ましくは炭素数 3 ~ 30、特に好ましくは炭素数 3 ~ 24 であり、例えばトリメチルシリ
 ル、トリフェニルシリルなどが挙げられる。)、シリルオキシ基(好ましくは炭素数 3 ~
 40 40、より好ましくは炭素数 3 ~ 30、特に好ましくは炭素数 3 ~ 24 であり、例えばトリ
 メチルシリルオキシ、トリフェニルシリルオキシなどが挙げられる。)、ホスホリル基
 (例えばジフェニルホスホリル基、ジメチルホスホリル基などが挙げられる。)が挙げら
 れる。これらの置換基は更に置換されてもよく、更なる置換基としては、以上に説明した
 置換基群 A から選択される基を挙げることができる。

【0025】

(置換基群 B)

アルキル基(好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 20、特に好ま
 しくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメチル、エチル、イソプロピル、t - ブチル、n - オ
 クチル、n - デシル、n - ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキ
 シルなどが挙げられる。)、アルケニル基(好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは
 50

炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばビニル、アリル、2 - ブテニル、3 - ペンテニルなどが挙げられる。) 、アルキニル基 (好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばプロパルギル、3 - ペンチニルなどが挙げられる。) 、アリール基 (好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 であり、例えばフェニル、p - メチルフェニル、ナフチル、アントラニルなどが挙げられる。) 、シアノ基、ヘテロ環基 (芳香族ヘテロ環基も包含し、好ましくは炭素数 1 ~ 30、より好ましくは炭素数 1 ~ 12 であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子、リン原子、ケイ素原子、セレン原子、テルル原子であり、具体的にはピリジル、ピラジニル、ピリミジル、ピリダジニル、ピロリル、ピラゾリル、トリアゾリル、イミダゾリル、オキサゾリル、チアゾリル、イソキサゾリル、イソチアゾリル、キノリル、フリル、チエニル、セレノフェニル、テルロフェニル、ピペリジル、ピペリジノ、モルホリノ、ピロリジル、ピロリジノ、ベンゾオキサゾリル、ベンゾイミダゾリル、ベンゾチアゾリル、カルバゾリル基、アゼピニル基、シロリル基などが挙げられる。) これらの置換基は更に置換されてもよく、更なる置換基としては、前記置換基群 B から選択される基を挙げることができる。また、置換基に置換した置換基は更に置換されてもよく、さらなる置換基としては、以上に説明した置換基群 B から選択される基を挙げることができる。また、置換基に置換した置換基に置換した置換基は更に置換されてもよく、さらなる置換基としては、以上に説明した置換基群 B から選択される基を挙げることができる。

10

【0026】

20

(置換基 Z)

アルキル基、アルケニル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、フェノキシ基、フッ素原子、シリル基、アミノ基、シアノ基又はこれらを組み合わせて成る基を表し、複数の置換基 Z は互いに結合してアリール環を形成しても良い。

【0027】

置換基 Z が表すアルキル基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 8 のアルキル基であり、より好ましくは炭素数 1 ~ 6 のアルキル基であり、例えばメチル基、エチル基、n - プロピル基、イソプロピル基、イソブチル基、t - ブチル基、n - ブチル基、シクロプロピル基等が挙げられ、メチル基、エチル基、イソブチル基、又は t - ブチル基が好ましく、メチル基がより好ましい。

30

置換基 Z が表すアルケニル基としては、好ましくは炭素数 2 ~ 8 のアルケニル基であり、より好ましくは炭素数 2 ~ 6 のアルケニル基であり、例えばビニル基、n - プロペニル基、イソプロペニル基、イソブテニル基、n - ブテニル基等が挙げられ、ビニル基、n - プロペニル基、イソブテニル基、又は n - ブテニル基が好ましく、ビニル基がより好ましい。

置換基 Z が表すアリール基としては、好ましくは炭素数 6 ~ 18 のアリール基であり、より好ましくは炭素数 6 ~ 12 のアリール基である。例えば、フェニル基、ピフェニル基、ナフチル基、トリル基、キシリル基等が挙げられ、これらのうちフェニル基、ピフェニル基が好ましく、フェニル基がより好ましい。

【0028】

40

置換基 Z が表す芳香族ヘテロ環基としては、好ましくは炭素数 4 ~ 12 の芳香族ヘテロ環基であり、例えばピリジル基、フリル基、チエニル基等が挙げられ、ピリジル基又はフリル基が好ましく、ピリジル基がより好ましい。

置換基 Z が表すアルコキシ基としては、好ましくは炭素数 1 ~ 8 のアルコキシ基であり、より好ましくは炭素数 1 ~ 4 のアルコキシ基であり、例えばメトキシ基、エトキシ基、n - プロポキシ基、イソプロポキシ基、イソブトキシ基、t - ブトキシ基、n - ブトキシ基、シクロプロピルオキシ基等が挙げられ、メトキシ基、エトキシ基、イソブトキシ基、又は t - ブトキシ基が好ましく、メトキシ基がより好ましい。

置換基 Z が表すシリル基及びアミノ基としては、前述の置換基群 A におけるシリル基及びアミノ基と同様のものが挙げられる。

50

複数の置換基 Z が互いに結合して形成するアリール環としては、ベンゼン環、ナフタレン環等が挙げられ、ベンゼン環が好ましい。

【 0 0 2 9 】

本発明の有機電界発光素子は、基板上に、陽極及び陰極からなる一对の電極と、該電極間に発光層を有し、該発光層と該陰極の間に少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、

該発光層に一般式 (1) で表される化合物を少なくとも一つ含有し、

該発光層と該陰極の間の少なくとも一層の有機層に一般式 (E - 1) で表される化合物を少なくとも一つ含有する。

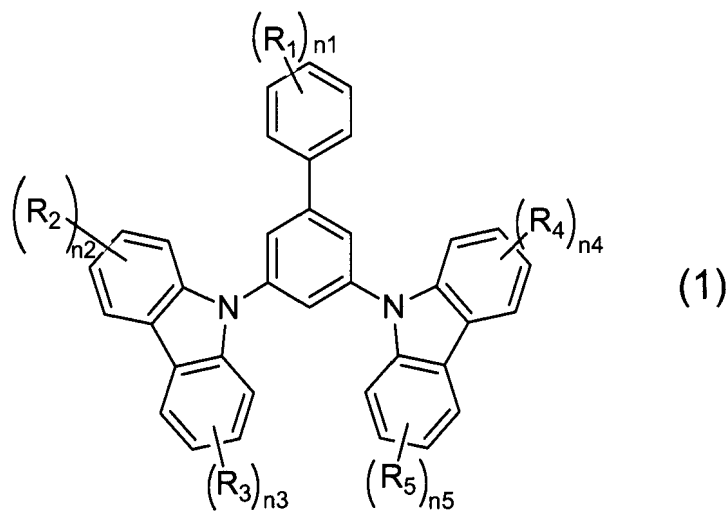
【 0 0 3 0 】

〔一般式 (1) で表される化合物〕

以下、一般式 (1) で表される化合物について説明する。

【 0 0 3 1 】

【化 6】



【 0 0 3 2 】

〔一般式 (1) 中、 R_1 はアルキル基、アリール基、又はシリル基を表し、更に置換基 Z を有していてもよい。但し、 R_1 がカルバゾリル基又はペルフルオロアルキル基を表すことはない。 R_1 が複数存在する場合、複数の R_1 は、それぞれ同一でも異なっていてもよい。また複数の R_1 は、互いに結合して置換基 Z を有していてもよいアリール環を形成してもよい。

$R_2 \sim R_5$ はそれぞれ独立に、アルキル基、アリール基、シリル基、シアノ基又はフッ素原子を表し、更に置換基 Z を有していてもよい。 $R_2 \sim R_5$ がそれぞれ複数存在する場合、複数の $R_2 \sim$ 複数の R_5 は、それぞれ同一でも異なっていてもよい。

置換基 Z はアルキル基、アルケニル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、フェノキシ基、フッ素原子、シリル基、アミノ基、シアノ基又はこれらを組み合わせて成る基を表し、複数の置換基 Z は互いに結合してアリール環を形成しても良い。

n_1 は 0 ~ 5 の整数を表す。

$n_2 \sim n_5$ はそれぞれ独立に、0 ~ 4 の整数を表す。)

【 0 0 3 3 】

R_1 で表されるアルキルは、置換基を有していてもよく、飽和であっても不飽和であってもよい。置換基を有する場合の置換基としては、前述の置換基 Z が挙げられ、置換基 Z としては、フッ素原子が好ましい。但し、 R_1 で表されるアルキル基は、ペルフルオロアルキル基となることはない。 R_1 で表されるアルキル基は、好ましくは炭素数 1 ~ 8 のアルキル基であり、より好ましくは炭素数 1 ~ 6 のアルキル基であり、更に好ましくは炭素数 1 ~ 4 のアルキル基である。例えばメチル基、エチル基、 n -プロピル基、イソプロピ

10

20

30

40

50

ル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*sec*-ブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、イソペンチル基、2-メチルペンチル基、ネオペンチル基、*n*-ヘキシル基、4-メチルペンチル基、3-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、3,3-ジメチルブチル基、2,2-ジメチルブチル基、1,1-ジメチルブチル基、1,2-ジメチルブチル基、1,3-ジメチルブチル基、2,3-ジメチルブチル基等が挙げられ、これらのうち、メチル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基、又はネオペンチル基が好ましく、メチル基又は*t*-ブチル基がより好ましく、*t*-ブチル基が更に好ましい。

【0034】

R_1 で表されるアリール基は、縮環していてもよく、置換基を有していてもよい。置換基を有する場合の置換基としては、前述の置換基Zが挙げられ、置換基Zとしては、フッ素原子で置換されていてもよいアルキル基、アリール基、フッ素原子又はシアノ基が好ましく、アルキル基がより好ましい。 R_1 で表されるアリール基は、好ましくは炭素数6~30のアリール基であり、より好ましくは炭素数6~18のアリール基である。炭素数6~18のアリール基は、好ましくは炭素数1~6のフッ素原子で置換されていてもよいアルキル基、フッ素原子又はシアノ基を有していてもよい炭素数6~18のアリール基であり、より好ましくは炭素数1~4のアルキル基を有していてもよい炭素数6~18のアリール基である。例えば、フェニル基、ジメチルフェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、メチルナフチル基、*t*-ブチルナフチル基、アントラニル基、フェナントリル基、クリセニル基、シアノフェニル基、トリフルオロメチルフェニル基、フッ化フェニル基等が挙げられ、これらのうちフェニル基、ジメチルフェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、メチルナフチル基、又は*t*-ブチルナフチル基が好ましく、フェニル基、ピフェニル基、又はターフェニル基がより好ましい。

【0035】

R_1 で表されるシリル基は、置換基を有していてもよい。置換基を有する場合の置換基としては、前述の置換基Zが挙げられ、置換基Zとしては、アルキル基又はフェニル基が好ましく、フェニル基がより好ましい。 R_1 で表されるシリル基は、好ましくは炭素数0~18のシリル基であり、より好ましくは炭素数3~18のシリル基である。炭素数3~18のシリル基は、好ましくは炭素数1~6のアルキル基若しくはフェニル基で置換された炭素数3~18のシリル基であり、シリル基の3つの水素原子の全てが、炭素数1~6のアルキル基及びフェニル基のいずれかで置換されていることがより好ましく、フェニル基で置換されていることが更に好ましい。例えば、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、*t*-ブチルジメチルシリル基、ジエチルイソプロピルシリル基、ジメチルフェニルシリル基、ジフェニルメチルシリル基、トリフェニルシリル基等が挙げられ、これらのうち、トリメチルシリル基、ジメチルフェニルシリル基又はトリフェニルシリル基が好ましく、トリフェニルシリル基がより好ましい。

【0036】

R_1 が複数存在する場合、複数の R_1 は、それぞれ同一でも異なっていてもよい。また複数の R_1 は、互いに結合して前述の置換基Zを有していてもよいアリール環を形成してもよい。置換基Zとしては、アルキル基又はアリール基が好ましく、アルキル基がより好ましい。

複数の R_1 が互いに結合して形成するアリール環は、該複数の R_1 が置換する炭素原子を含め、好ましくは炭素数6~30のアリール環であり、より好ましくは炭素数6~14のアリール環である。形成する環としてはベンゼン環、ナフタレン環及びフェナントレン環のいずれかであることが好ましく、ベンゼン環又はフェナントレン環であることがより好ましく、ベンゼン環であることが更に好ましい。なお、複数の R_1 によって形成される環は複数存在してもよく、例えば、複数の R_1 がそれぞれ互いに結合して2つのベンゼン環を形成し、該複数の R_1 が置換するベンゼン環とともに、フェナントレン環を形成してもよい。

【0037】

R_1 は、電荷輸送能及び電荷に対する安定性の観点から、好ましくはアルキル基、アル

10

20

30

40

50

キル基を有していてもよいアリール基、及びアルキル基若しくはフェニル基で置換されたシリル基のいずれかであり、より好ましくは炭素数 1 ~ 6 のアルキル基を有していてもよい炭素数 6 ~ 18 のアリール基であり、更に好ましくは炭素数 1 ~ 4 のアルキル基を有していてもよい炭素数 6 ~ 18 のアリール基である。

なかでも、 R_1 は、好ましくは、メチル基、*t*-ブチル基、ネオペンチル基、無置換のフェニル基、シアノ基若しくはフッ素原子若しくはトリフルオロメチル基により置換されたフェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、無置換のナフチル基、メチル基若しくは *t*-ブチル基により置換されたナフチル基、トリフェニルシリル基、複数のアルキル基又はアリール基がそれぞれ互いに結合して形成されたベンゼン環又はフェナントレン環であり、より好ましくは無置換のフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、又はターフェニル基であり、更に好ましくは無置換のフェニル基、無置換のビフェニル基、又は無置換のナフチル基である。

10

【0038】

n_1 は、0 ~ 4 の整数であることが好ましく、0 ~ 3 の整数であることがより好ましく、0 ~ 2 の整数であることが更に好ましい。

【0039】

$R_2 \sim R_5$ で表されるアリール基、シリル基の具体例及び好ましい例は、前記 R_1 で表されるアリール基、シリル基の具体例及び好ましい例と同様である。

$R_2 \sim R_5$ で表されるアルキル基としては、前記 R_1 で表されるアルキル基の例示に加え、トリフルオロメチル基等のペルフルオロアルキル基が挙げられる。これらのうち、メチル基、トリフルオロメチル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基、又はネオペンチル基が好ましく、メチル基又は *t*-ブチル基がより好ましく、*t*-ブチル基が更に好ましい。

20

【0040】

$R_2 \sim R_5$ はそれぞれ独立に、電荷輸送能及び電荷に対する安定性の観点から、好ましくはアルキル基、アリール基、アルキル基若しくはフェニル基で置換されたシリル基、シアノ基、及びフッ素原子のいずれかであり、より好ましくは炭素数 1 ~ 6 のアルキル基、炭素数 6 ~ 18 のアリール基、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基若しくはフェニル基で置換された炭素数 3 ~ 18 のシリル基、シアノ基、及びフッ素原子のいずれかであり、更に好ましくは炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、炭素数 6 ~ 12 のアリール基、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基若しくはフェニル基で置換された炭素数 3 ~ 18 のシリル基、シアノ基、及びフッ素原子のいずれかである。

30

なかでも、 $R_2 \sim R_5$ はそれぞれ独立に、好ましくはメチル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基、ネオペンチル基、トリフルオロメチル基、フェニル基、ジメチルフェニル基、トリメチルシリル基、トリフェニルシリル基、フッ素原子、及びシアノ基のいずれかであり、より好ましくは *t*-ブチル基、フェニル基、トリメチルシリル基、トリフェニルシリル基、及びシアノ基のいずれかであり、更に好ましくは *t*-ブチル基、フェニル基、トリフェニルシリル基、及びシアノ基のいずれかである。

【0041】

$n_2 \sim n_5$ はそれぞれ独立に、0 ~ 2 の整数であることが好ましく、0 又は 1 であることがより好ましい。カルバゾール骨格に置換基を導入する場合、カルバゾール骨格の 3 位及び 6 位が反応活性位であり、合成の容易さ、及び化学的安定性向上の観点から、この位置に置換基を導入することが好ましい。

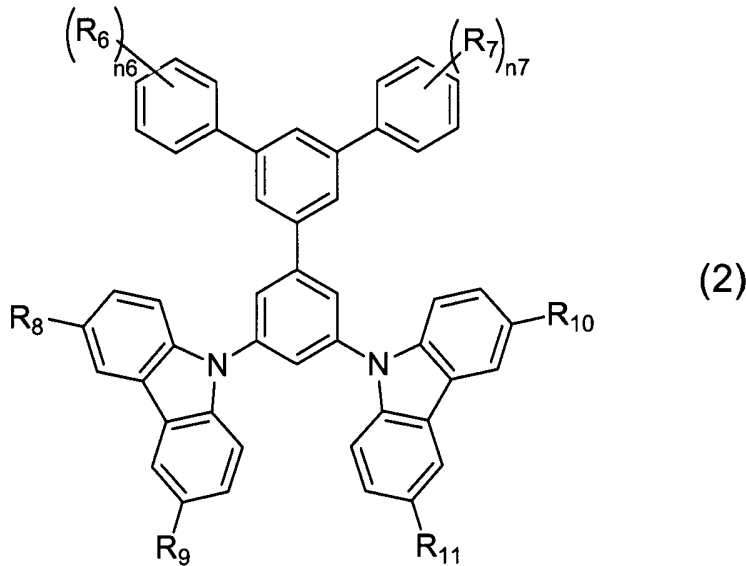
40

【0042】

一般式 (1) で表される化合物は、下記一般式 (2) で表されることがより好ましい。

【0043】

【化7】



10

【0044】

(一般式(2)中、 R_6 及び R_7 はそれぞれ独立に、置換基Zを有していてもよいアルキル基、アルキル基を有していてもよいアリール基、シアノ基又はフッ素原子を表す。 R_6 及び R_7 がそれぞれ複数存在する場合、複数の R_6 及び複数の R_7 は、それぞれ同一でも異なってもよい。また複数の R_6 及び複数の R_7 は、それぞれ互いに結合して置換基Zを有していてもよいアリール環を形成してもよい。

20

n_6 及び n_7 はそれぞれ独立に、0～5の整数を表す。

$R_8 \sim R_{11}$ はそれぞれ独立に、水素原子、置換基Zを有していてもよいアルキル基、アルキル基を有していてもよいアリール基、置換基Zを有していてもよいシリル基、シアノ基又はフッ素原子を表す。

置換基Zはアルキル基、アルケニル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、アルコキシ基、フェノキシ基、フッ素原子、シリル基、アミノ基、シアノ基又はこれらを組み合わせて成る基を表し、複数の置換基Zは互いに結合してアリール環を形成しても良い。))

30

【0045】

R_6 及び R_7 で表されるアルキル基は、置換基を有していてもよく、飽和であっても不飽和であってもよい。置換基を有する場合の置換基としては、前述の置換基Zが挙げられ、置換基Zとしては、フッ素原子が好ましい。

R_6 及び R_7 で表されるアルキル基は、好ましくは炭素数1～6のアルキル基であり、より好ましくは炭素数1～4のアルキル基である。 R_6 及び R_7 で表されるアルキル基の具体例及び好ましい例は、前記一般式(1)中の、 $R_2 \sim R_5$ で表されるアルキル基の具体例及び好ましい例と同様である。

【0046】

R_6 及び R_7 で表される、アルキル基を有していてもよいアリール基におけるアルキル基は、好ましくは炭素数1～6のアルキル基であり、より好ましくは炭素数1～4のアルキル基である。該アルキル基の具体例及び好ましい例は、前記一般式(1)中の、 $R_2 \sim R_5$ で表されるアルキル基の具体例及び好ましい例と同様である。

40

R_6 及び R_7 で表される、アルキル基を有していてもよいアリール基におけるアリール基は、好ましくは炭素数6～18のアリール基であり、より好ましくは炭素数6～12のアリール基である。例えば、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アントラニル基、フェナントリル基、クリセニル基等が挙げられ、これらのうちフェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、又はナフチル基が好ましく、フェニル基、ピフェニル基、又はターフェニル基がより好ましい。

R_6 及び R_7 で表される、アルキル基を有していてもよいアリール基は、無置換のアリ

50

ール基であることが好ましい。

R_6 及び R_7 で表される、アルキル基を有していてもよいアリーール基としては、例えば、フェニル基、ジメチルフェニル基、*t*-ブチルフェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、メチルナフチル基、*t*-ブチルナフチル基、アントラニル基、フェナントリル基、クリセニル基等が挙げられ、フェニル基、*t*-ブチルフェニル基、又はピフェニル基が好ましく、フェニル基がより好ましい。

【0047】

R_6 及び R_7 がそれぞれ複数存在する場合、複数の R_6 及び複数の R_7 は、それぞれ同一でも異なってもよい。また複数の R_6 及び複数の R_7 は、それぞれ互いに結合して前述の置換基 Z を有していてもよいアリーール環を形成してもよい。置換基 Z としては、アルキル基又はアリーール基が好ましく、アルキル基がより好ましい。

複数の R_6 及び複数の R_7 が、それぞれ互いに結合して形成するアリーール環は、該複数の R_6 及び該複数の R_7 のそれぞれが置換する炭素原子を含め、好ましくは炭素数 6 ~ 30 のアリーール環であり、より好ましくは炭素数 6 ~ 14 のアリーール環であり、更に好ましく炭素数 1 ~ 4 のアルキル基を有していてもよい炭素数 6 ~ 14 のアリーール環である。形成する環としては、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基を有していてもよい、ベンゼン環、ナフタレン環及びフェナントレン環のいずれかであることが好ましく、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基を有していてもよいベンゼン環がより好ましく、例えば、ベンゼン環、*t*-ブチル基で置換されたベンゼン環等が挙げられる。なお、複数の R_6 又は複数の R_7 によって形成される環は複数存在してもよく、例えば、複数の R_6 又は複数の R_7 がそれぞれ互いに結合して 2 つのベンゼン環を形成し、該複数の R_6 又は該複数の R_7 が置換するベンゼン環とともに、フェナントレン環を形成してもよい。

【0048】

R_6 及び R_7 は、電荷輸送能及び電荷に対する安定性の観点から、好ましくは炭素数 1 ~ 6 のアルキル基、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基を有していてもよい炭素数 6 ~ 18 のアリーール基、シアノ基及びフッ素原子のいずれかであり、更に好ましくは炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基を有していてもよい炭素数 6 ~ 12 のアリーール基、シアノ基及びフッ素原子のいずれかである。電荷輸送能及び電荷に対する安定性の観点から、 R_6 及び R_7 はそれぞれ独立に、アルキル基、又はアルキル基を有していてもよいアリーール基を表すことも好ましい。

なかでも、 R_6 及び R_7 はそれぞれ独立に、好ましくは、メチル基、トリフルオロメチル基、*t*-ブチル基、無置換のフェニル基、*t*-ブチル基により置換されたフェニル基、ピフェニル基、シアノ基、フッ素原子、及び複数のアルキル基がそれぞれ互いに結合して形成された無置換のベンゼン環又は *t*-ブチル基により置換されたベンゼン環のいずれかであり、より好ましくはメチル基、トリフルオロメチル基、無置換のフェニル基、シアノ基、フッ素原子、及び複数のアルキル基がそれぞれ互いに結合して形成された無置換のベンゼン環又は *t*-ブチル基により置換されたベンゼン環のいずれかであり、最も好ましくは無置換のフェニル基である。

【0049】

n_6 及び n_7 はそれぞれ独立に、0 ~ 4 の整数であることが好ましく、0 ~ 2 の整数であることがより好ましく、0 又は 1 であることが更に好ましい。

【0050】

$R_8 \sim R_{11}$ で表されるアルキル基は、置換基を有していてもよく、飽和であっても不飽和であってもよい。置換基を有する場合の置換基としては、前述の置換基 Z が挙げられ、置換基 Z としては、フッ素原子が好ましい。

$R_8 \sim R_{11}$ で表されるアルキル基は、好ましくは炭素数 1 ~ 6 のアルキル基であり、より好ましくは炭素数 1 ~ 4 のアルキル基である。 $R_8 \sim R_{11}$ で表されるアルキル基の具体例及び好ましい例は、前記一般式 (1) 中の、 $R_2 \sim R_5$ で表されるアルキル基の具体例及び好ましい例と同様である。

【0051】

10

20

30

40

50

$R_8 \sim R_{11}$ で表される、アルキル基を有していてもよいアリール基は、好ましくは炭素数 1 ~ 6 のアルキル基を有していてもよい炭素数 6 ~ 18 のアリール基であり、より好ましくは炭素数 1 ~ 4 のアルキル基を有していてもよい炭素数 6 ~ 12 のアリール基である。

$R_8 \sim R_{11}$ で表される、アルキル基を有していてもよいアリール基の具体例及び好ましい例は、前述の R_6 及び R_7 で表される、アルキル基を有していてもよいアリール基における、具体例及び好ましい例と同様である。

【0052】

$R_8 \sim R_{11}$ で表されるシリル基は、置換基を有していてもよい。置換基を有する場合の置換基としては、前述の置換基 Z が挙げられ、置換基 Z としては、アルキル基又はフェニル基が好ましく、フェニル基がより好ましい。 $R_8 \sim R_{11}$ で表されるシリル基は、好ましくは炭素数 3 ~ 18 のシリル基であり、 $R_8 \sim R_{11}$ で表される炭素数 3 ~ 18 のシリル基の具体例及び好ましい例は、前記一般式 (1) 中の、 R_1 で表されるシリル基における、炭素数 3 ~ 18 のシリル基の具体例及び好ましい例と同様である。

10

【0053】

$R_8 \sim R_{11}$ はそれぞれ独立に、電荷輸送能及び電荷に対する安定性の観点から、好ましくは水素原子、アルキル基、アルキル基を有していてもよいアリール基、アルキル基若しくはフェニル基で置換されたシリル基、シアノ基、及びフッ素原子のいずれかであり、より好ましくは水素原子、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基を有していてもよい炭素数 6 ~ 18 のアリール基、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基若しくはフェニル基で置換された炭素数 3 ~ 18 のシリル基、シアノ基、及びフッ素原子のいずれかであり、更に好ましくは水素原子、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基を有していてもよい炭素数 6 ~ 12 のアリール基、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基若しくはフェニル基で置換された炭素数 3 ~ 18 のシリル基、シアノ基、及びフッ素原子のいずれかである。

20

なかでも、 $R_8 \sim R_{11}$ はそれぞれ独立に、好ましくは水素原子、メチル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基、ネオペンチル基、トリフルオロメチル基、フェニル基、ジメチルフェニル基、トリメチルシリル基、トリフェニルシリル基、フッ素原子、及びシアノ基のいずれかであり、より好ましくは水素原子、*t*-ブチル基、フェニル基、トリメチルシリル基、トリフェニルシリル基、及びシアノ基のいずれかであり、更に好ましくは水素原子、*t*-ブチル基、フェニル基、トリフェニルシリル基、及びシアノ基のいずれかである。

30

【0054】

一般式 (1) 又は (2) で表される化合物は、炭素原子、水素原子及び窒素原子のみからなる場合が最も好ましい。

【0055】

一般式 (1) 又は (2) で表される化合物のガラス転移温度 (T_g) は 80 以上 400 以下であることが好ましく、100 以上 400 以下であることがより好ましく、120 以上 400 以下であることが更に好ましい。

【0056】

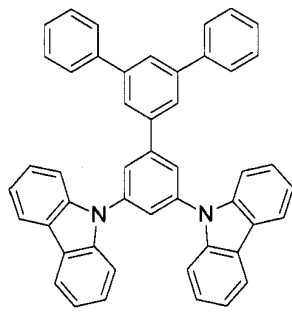
一般式 (1) 又は (2) が水素原子を有する場合、同位体 (重水素原子等) も含む。この場合化合物中の全ての水素原子が同位体に置き換わっていてもよく、また一部が同位体を含む化合物である混合物でもよい。

40

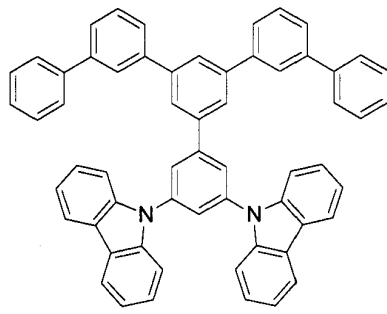
以下に、一般式 (1) 又は (2) で表される化合物の具体例を例示するが、本発明はこれらに限定されるものではない。

【0057】

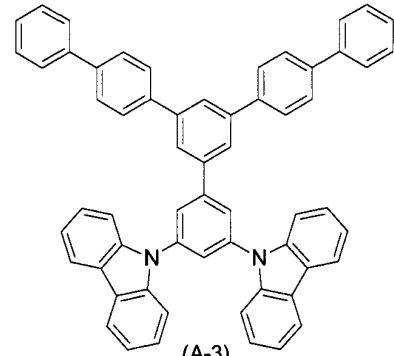
【化 8】



(A-1)

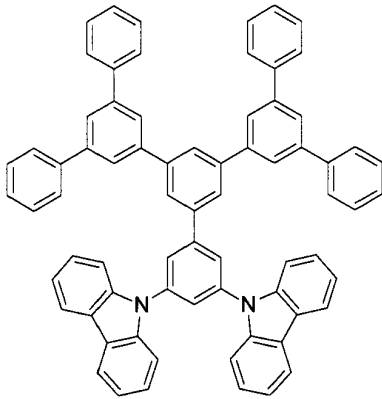


(A-2)

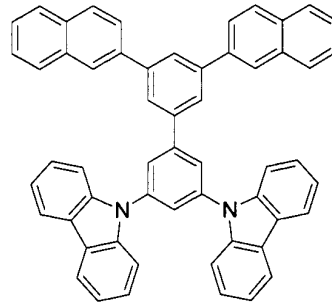


(A-3)

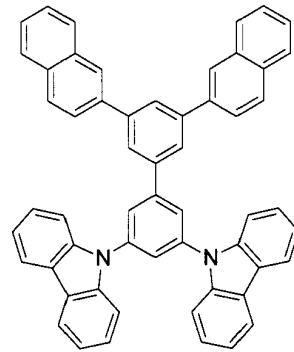
10



(A-4)

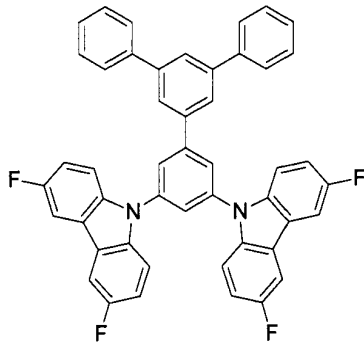


(A-5)

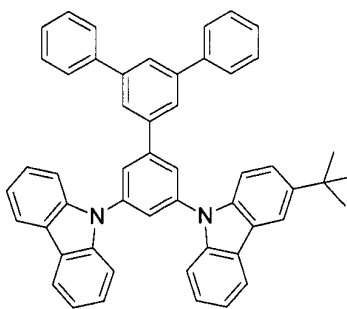


(A-6)

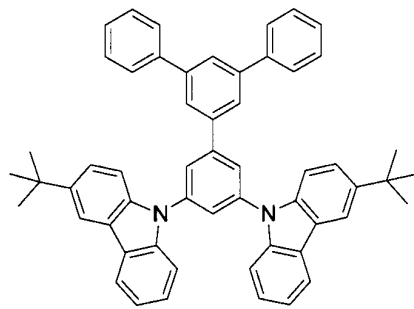
20



(A-7)

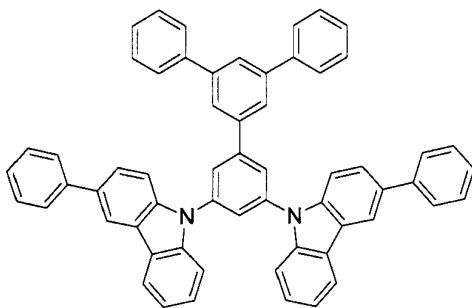


(A-8)

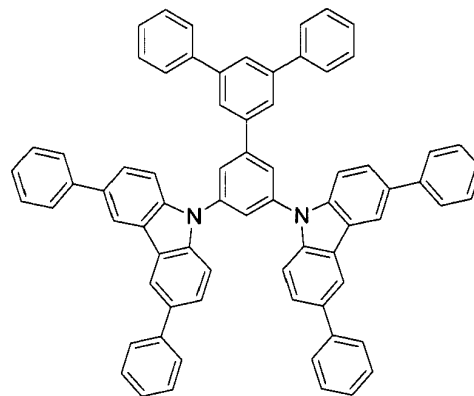


(A-9)

30



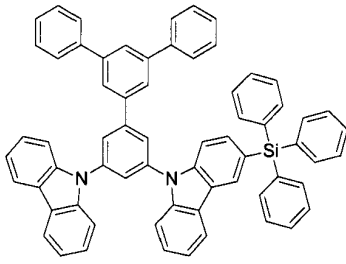
(A-10)



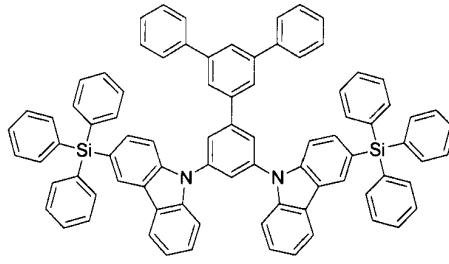
(A-11)

40

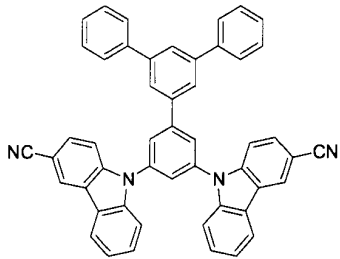
【化9】



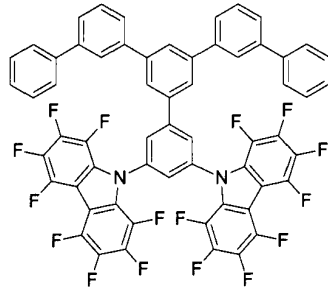
(A-12)



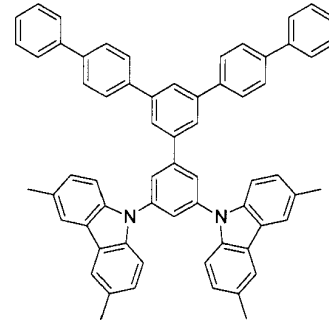
(A-13)



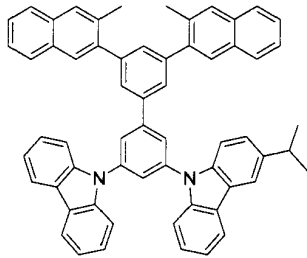
(A-14)



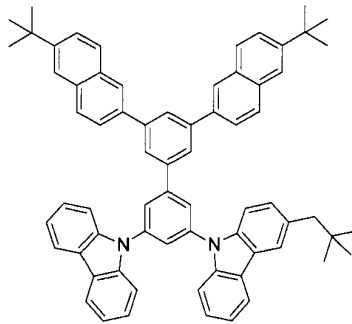
(A-15)



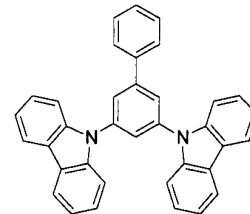
(A-16)



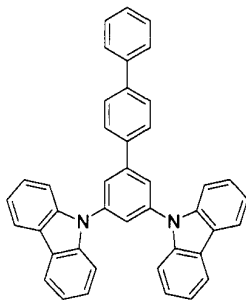
(A-17)



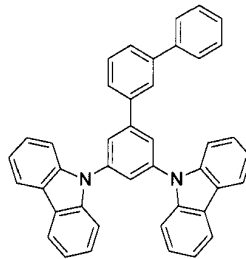
(A-18)



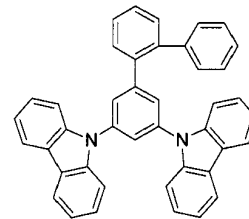
(A-19)



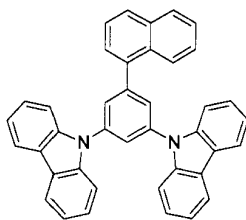
(A-20)



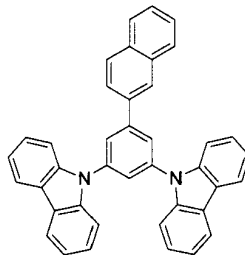
(A-21)



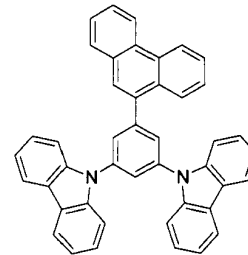
(A-22)



(A-23)



(A-24)



(A-25)

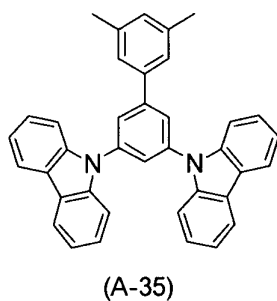
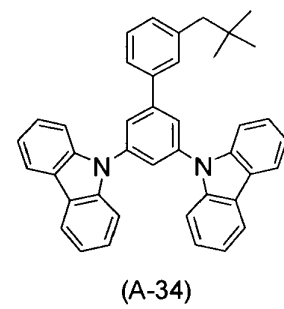
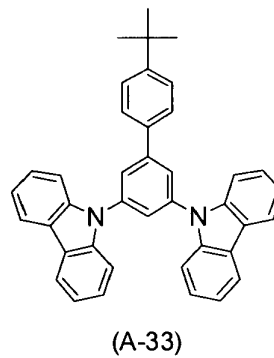
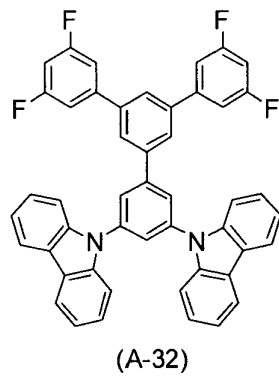
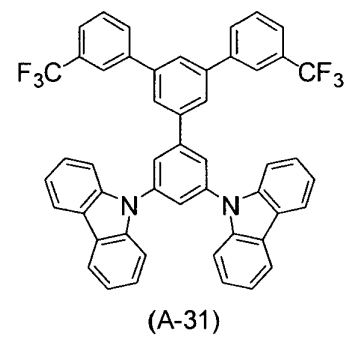
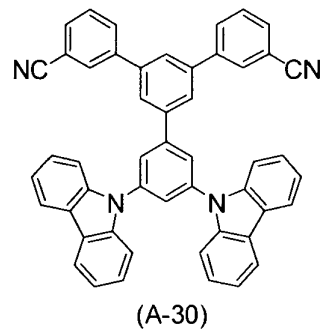
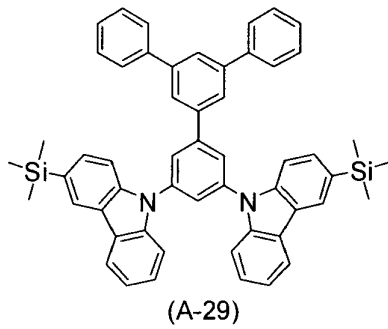
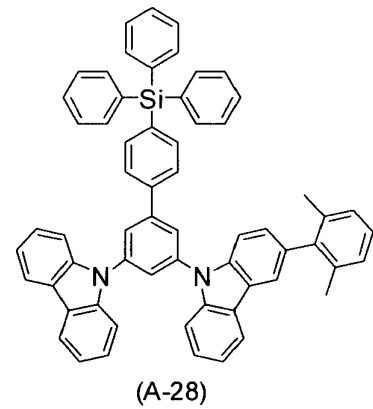
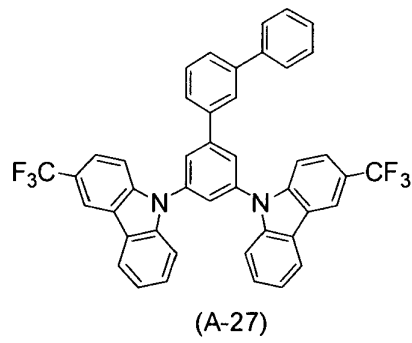
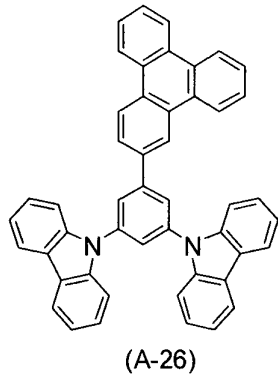
10

20

30

40

【化10】



【0060】

上記一般式(1)又は(2)で表される化合物として例示した化合物は、国際公開第2004/074399号パンフレット等を参考に合成できる。例えば、化合物(A-1)は国際公開第2004/074399号52項22行~54項15行に記載の方法で合成できる。

【0061】

本発明において、一般式(1)又は(2)で表される化合物は、発光層に含有されるが、その用途が限定されることはなく、有機層内のいずれの層に更に含有されてもよい。一

10

20

30

40

50

一般式(1)又は(2)で表される化合物の導入層としては、発光層、正孔注入層、正孔輸送層、電子輸送層、電子注入層、励起子ブロック層、電荷ブロック層のいずれかを挙げることができる。

一般式(1)又は(2)で表される化合物は発光層の全質量に対して50~99.9質量%含ませることが好ましく、50~99質量%含ませることがより好ましく、60~98質量%含ませることがより好ましい。一般式(1)又は(2)で表される化合物を発光層以外の層に更に含有させる場合は、該層の全質量に対して70~100質量%含まれることが好ましく、85~100質量%含まれることがより好ましい。

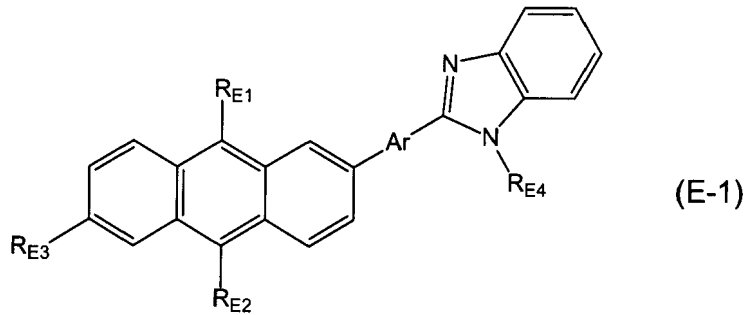
【0062】

〔一般式(E-1)で表される化合物〕

下記一般式(E-1)で表される化合物について説明する。

【0063】

【化11】



【0064】

〔一般式(E-1)中、 R_{E1} 及び R_{E2} は、それぞれ独立に、水素原子、脂肪族炭化水素基、置換若しくは無置換のアリール基、又は、置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す。但し、 R_{E1} 及び R_{E2} が同時に水素原子であることはない。〕

A_r は、置換若しくは無置換のアリール基、又は置換若しくは無置換の2価の芳香族ヘテロ環基を表す。

R_{E3} は、水素原子、脂肪族炭化水素、置換若しくは無置換のアリール基、又は、置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す。

R_{E4} は、水素原子、脂肪族炭化水素、置換若しくは無置換のアリール基、又は、置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す。)

【0065】

本発明の有機電界発光素子において、一般式(E-1)で表される化合物は陰極と発光層の間の少なくとも一層の有機層に含有されるが、その他の層に更に含有されてもよい。

【0066】

本発明の素子では、高輝度駆動時の効率低下が抑制されることが分かった。これは、発光層に一般式(1)で表される化合物を含有し、かつ発光層と陰極の間の少なくとも一層の有機層に一般式(E-1)で表される化合物を含有することで、一般式(E-1)で表される化合物と一般式(1)で表される化合物との電子親和力が最適な範囲となり、低電圧からの電子輸送層の電子輸送性が向上し、発光層に大量に電子を輸送できるようになるためであると推測される。

また、本発明の素子では、発光色度の電子輸送層膜厚依存が抑制されることが分かった。これは従来からの知見からは予想できないことであるが、発光層に一般式(1)で表される化合物を含有し、かつ発光層と陰極の間の有機層に一般式(E-1)で表される化合物を含有することで、発光層に電子が十分入るようになり、発光分布が広がるため、上記効果が得られるものと推測される。

【0067】

一般式(E-1)において、 R_{E1} 及び R_{E2} は、それぞれ独立に、水素原子、脂肪族炭化水素基、置換若しくは無置換のアリール基、又は、置換若しくは無置換の芳香族ヘテ

10

20

30

40

50

口環基を表す。

【0068】

R_{E1} 及び R_{E2} が脂肪族炭化水素基を表す場合、該脂肪族炭化水素基としては、炭素数 1 ~ 20 の脂肪族炭化水素基が好ましく、アルキル基（好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメチル基、エチル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基、*n*-オクチル基、*n*-デシル基、*n*-ヘキサデシル基、シクロプロピル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、ネオペンチル基などが挙げられる。）、アルケニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニルなどが挙げられる。）、又はアルキニル基（好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニルなどが挙げられる。）がより好ましく、アルキル基であることが更に好ましく、メチル基、エチル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基、又はシクロヘキシル基であることが特に好ましい。

10

【0069】

R_{E1} 及び R_{E2} が置換若しくは無置換のアリール基を表す場合、該アリール基としては、好ましくは炭素数 6 ~ 30、より好ましくは炭素数 6 ~ 20、特に好ましくは炭素数 6 ~ 12 のアリール基である。該アリール基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基、ビフェニル基、アントリル基、ターフェニル基、フルオレニル基、フェナントリル基、ピレニル基、トリフェニレニル基などが挙げられ、フェニル基、ナフチル基、ビフェニル基、アントリル基、又はターフェニル基が好ましく、フェニル基、ナフチル基、ピフェニル基、又はアントリル基がより好ましく、ナフチル基が最も好ましい。ナフチル基が好ましい理由としては、分子間の適度な相互作用を生み出すことができるためと考えられ、それにより駆動電圧の低下や安定な膜質が得られる。

20

該アリール基が置換基を有する場合、該置換基としては、前記置換基群 A から選択される置換基が挙げられ、好ましくはアルキル基（好ましくは炭素数 1 ~ 8 のアルキル基であり、より好ましくは炭素数 1 ~ 6 のアルキル基であり、例えばメチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ブチル基、シクロプロピル基等が挙げられ、メチル基、エチル基、イソブチル基、又は *t*-ブチル基が好ましい。）、アリール基（好ましくは炭素数 6 ~ 18 のアリール基であり、より好ましくは炭素数 6 ~ 12 のアリール基であり、例えば、フェニル基、ビフェニル基、フルオレニル基、ナフチル基等が挙げられ、フェニル基、又はビフェニル基が好ましい。）、ハロゲン原子（好ましくはフッ素原子）、シアノ基、アルコキシ基、又は芳香族ヘテロ環基（好ましくは炭素数 4 ~ 12 の芳香族ヘテロ環基であり、例えばピリジル基、フリル基、チエニル基等が挙げられ、ピリジル基がより好ましい。）である。

30

【0070】

R_{E1} 及び R_{E2} が置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す場合、該芳香族ヘテロ環基としては、好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 の芳香族ヘテロ環基である。該芳香族ヘテロ環基としては、例えば、アゾール基、ジアゾール基、トリアゾール基、オキサゾール基、チアゾール基、ピリジル基、フリル基、チエニル基等が挙げられ、アゾール基、ジアゾール基、ピリジル基が好ましく、ピリジル基がより好ましい。

40

該芳香族ヘテロ環基が置換基を有する場合、該置換基としては、前記 R_{E1} 及び R_{E2} がアリール基の場合に有しても良い置換基と具体例及び好ましい範囲は同様である。

【0071】

R_{E1} 及び R_{E2} は、好ましくは、置換若しくは無置換のアリール基であり、無置換のアリール基であることが分子間の適度な相互作用を得られるという観点から、より好ましい。 R_{E1} 及び R_{E2} がアリール基である場合の具体例及び好ましい範囲は前記の通りである。

【0072】

R_{E1} 及び R_{E2} は互いに異なっても、同じであってもよいが、合成上の観点から同じであることが好ましい。但し、 R_{E1} 及び R_{E2} が同時に水素原子であることはない

50

【0073】

一般式(E-1)において、Arは、置換若しくは無置換のアリーレン基、又は置換若しくは無置換の2価の芳香族ヘテロ環基を表す。

【0074】

Arが置換若しくは無置換のアリーレン基を表す場合、該アリーレン基としては、好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12のアリーレン基である。該アリーレン基としては、例えば、フェニレン基、ナフチレン基、ピフェニレン基、アントリレン基、ターフェニレン基、フルオレニレン基、フェナントリレン基、ピレニレン基、トリフェニレニレン基などが挙げられ、フェニレン基、ナフチレン基、ピフェニレン基、又はアントリレン基が好ましく、フェニレン基、ナフチレン基、がより好ましく、フェニレン基が最も好ましい。

10

該アリーレン基が置換基を有する場合、該置換基としては、前記R_{E1}及びR_{E2}がアリール基の場合に有しても良い置換基と具体例及び好ましい範囲は同様である。

【0075】

Arが置換若しくは無置換の2価の芳香族ヘテロ環基を表す場合、該2価の芳香族ヘテロ環基としては、好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~12の2価の芳香族ヘテロ環基である。該2価の芳香族ヘテロ環基としては、例えば、2価のアゾール基、2価のジアゾール基、2価のトリアゾール基、2価のオキサゾール基、2価のチアゾール基、2価のピリジル基、2価のフリル基、2価のチエニル基等が挙げられ、2価のアゾール基、2価のジアゾール基、2価のピリジル基が好ましく、2価のピリジル基(ピリジレン基)がより好ましい。

20

該2価の芳香族ヘテロ環基が置換基を有する場合、該置換基としては、前記R_{E1}及びR_{E2}がアリール基の場合に有しても良い置換基と具体例及び好ましい範囲は同様である。

【0076】

Arは置換若しくは無置換のアリーレン基を表すことが好ましく、無置換のアリーレン基を表すことがより好ましい。Arがアリーレン基である場合の具体例及び好ましい範囲は前記の通りである。

【0077】

一般式(E-1)において、R_{E3}は、水素原子、脂肪族炭化水素、置換若しくは無置換のアリール基、又は、置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す。

30

【0078】

R_{E3}が脂肪族炭化水素基を表す場合、該脂肪族炭化水素基としては、炭素数1~20が好ましく、アルキル基(好ましくは炭素数1~10であり、例えばメチル基、エチル基、イソプロピル基、t-ブチル基、n-オクチル基、n-デシル基、n-ヘキサデシル基、シクロプロピル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、ネオペンチル基などが挙げられる。)、アルケニル基(好ましくは炭素数2~10であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニルなどが挙げられる。)、又はアルキニル基(好ましくは炭素数2~10であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニルなどが挙げられる。)がより好ましく、アルキル基であることが更に好ましく、メチル基、エチル基、イソプロピル基、t-ブチル基、又はシクロヘキシル基であることが特に好ましい。

40

【0079】

R_{E3}が置換若しくは無置換のアリール基を表す場合、該アリール基としては、好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12のアリール基である。該アリール基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基、ピフェニル基、アントリル基、ターフェニル基、フルオレニル基、フェナントリル基、ピレニル基、トリフェニレニル基などが挙げられ、フェニル基、ナフチル基、ピフェニル基、又はアントリル基が好ましく、フェニル基がより好ましい。

該アリール基が置換基を有する場合、該置換基としては、前記置換基群Aから選択され

50

る置換基が挙げられ、好ましくはアルキル基（好ましくは炭素数 1 ~ 8 のアルキル基であり、より好ましくは炭素数 1 ~ 6 のアルキル基であり、例えばメチル基、エチル基、n - プロピル基、イソプロピル基、イソブチル基、t - ブチル基、n - ブチル基、シクロプロピル基等が挙げられ、メチル基、エチル基、イソブチル基、又は t - ブチル基が好ましい。）、アリール基（好ましくは炭素数 6 ~ 18 のアリール基であり、より好ましくは炭素数 6 ~ 12 のアリール基であり、例えば、フェニル基、ビフェニル基、フルオレニル基、ナフチル基等が挙げられ、フェニル基、又はビフェニル基が好ましい。）、ハロゲン原子（好ましくはフッ素原子）、シアノ基、アルコキシ基、又は芳香族ヘテロ環基（好ましくは炭素数 2 ~ 12 の芳香族ヘテロ環基であり、例えばアゾール基、ジアゾール基、トリアゾール基、オキサゾール基、チアゾール基、ピリジル基、フリル基、チエニル基等が挙げられ、アゾール基、ジアゾール基、ピリジル基が好ましく、特に好ましくはベンゾイミダゾリル基である。）である。

10

また、これらの置換基は可能であれば更に置換基を有してもよく、該更なる置換基としては前記置換基群 A から選択される置換基が挙げられ、好ましくはアルキル基、アリール基、又は芳香族ヘテロ環基であり、これらの具体例及び好ましい範囲は前記 R_{E3} が置換アリール基を表す場合の置換基の具体例及び好ましい範囲と同様である。

R_{E3} が置換基を有するアリール基を表す場合、該置換基は互いに結合して環を形成してもよく、該環としては、脂肪族炭化水素環、芳香族環、芳香族ヘテロ環などが挙げられ、芳香族環が好ましく、ベンゼン環、フルオレン環、アントラセン環、ナフチル環、又はこれらを組み合わせてなる構造の環などが挙げられ、フルオレン環、アントラセン環、又はこれらを組み合わせてなる構造の環が好ましい。

20

【0080】

R_{E3} が置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す場合、該芳香族ヘテロ環基としては、好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 12 の芳香族ヘテロ環基である。該芳香族ヘテロ環基としては、例えば、アゾール基、ジアゾール基、トリアゾール基、オキサゾール基、チアゾール基、ピリジル基、フリル基、チエニル基等が挙げられ、アゾール基、ジアゾール基、ピリジル基が好ましく、特に好ましくはベンゾイミダゾリル基である。

該芳香族ヘテロ環基が置換基を有する場合、該置換基としては、前記置換基群 A から選択される置換基が挙げられ、好ましくはアルキル基（好ましくは炭素数 1 ~ 8 のアルキル基であり、より好ましくは炭素数 1 ~ 6 のアルキル基であり、例えばメチル基、エチル基、n - プロピル基、イソプロピル基、イソブチル基、t - ブチル基、n - ブチル基、シクロプロピル基等が挙げられ、メチル基、エチル基、イソブチル基、又は t - ブチル基が好ましい。）、アリール基（好ましくは炭素数 6 ~ 18 のアリール基であり、より好ましくは炭素数 6 ~ 12 のアリール基であり、例えば、フェニル基、ビフェニル基、フルオレニル基、ナフチル基等が挙げられ、フェニル基、又はビフェニル基が好ましく、フェニル基がより好ましい。）、ハロゲン原子（好ましくはフッ素原子）、シアノ基、アルコキシ基、又は芳香族ヘテロ環基（好ましくは炭素数 2 ~ 12 の芳香族ヘテロ環基であり、例えばピリジル基、フリル基、チエニル基等が挙げられ、ピリジル基がより好ましい。）である。これらの中でもアリール基が特に好ましい。

30

40

【0081】

R_{E3} は、好ましくは水素原子、又は、置換若しくは無置換のアリール基であり、分子間の適度な相互作用を得られるという観点から、より好ましくは水素原子である。

【0082】

一般式 (E - 1) において、R_{E4} は、水素原子、脂肪族炭化水素、置換若しくは無置換のアリール基、又は、置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す。

【0083】

R_{E4} が脂肪族炭化水素基を表す場合、該脂肪族炭化水素基としては、炭素数 1 ~ 12 が好ましく、アルキル基（好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメチル基、エチル基、イソプロピル基、t - ブチル基、n - オクチル基、n - デシル基、シクロプロピル基、

50

シクロペンチル基、シクロヘキシル基、ネオペンチル基などが挙げられる。)、アルケニル基(好ましくは炭素数2~10であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニルなどが挙げられる。)、又はアルキニル基(好ましくは炭素数2~10であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニルなどが挙げられる。)がより好ましく、アルキル基であることが更に好ましく、メチル基、エチル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基、又はシクロヘキシル基であることが特に好ましい。

【0084】

R_{E4} が置換若しくは無置換のアリール基を表す場合、該アリール基としては、好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12のアリール基である。該アリール基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基、ビフェニル基、アントリル基、ターフェニル基、フルオレニル基、フェナントリル基、ピレニル基、トリフェニレニル基などが挙げられ、フェニル基、ナフチル基、ビフェニル基、又はアントリル基が好ましく、フェニル基又はナフチル基がより好ましく、フェニル基が更に好ましい。

10

該アリール基が置換基を有する場合、該置換基としては、前記 R_{E1} 及び R_{E2} がアリール基の場合に有しても良い置換基と具体例及び好ましい範囲は同様である。

【0085】

R_{E4} が置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す場合、該芳香族ヘテロ環基としては、好ましくは炭素数2~30、より好ましくは炭素数2~20、特に好ましくは炭素数2~12の芳香族ヘテロ環基である。該芳香族ヘテロ環基としては、例えば、アゾール基、ジアゾール基、トリアゾール基、オキサゾール基、チアゾール基、ピリジル基、フリル基、チエニル基等が挙げられ、アゾール基、ジアゾール基、ピリジル基が好ましく、ピリジル基がより好ましい。

20

該芳香族ヘテロ環基が置換基を有する場合、該置換基としては、前記 R_{E1} 及び R_{E2} がアリール基の場合に有しても良い置換基と具体例及び好ましい範囲は同様である。

【0086】

R_{E4} は、好ましくは、分子間の適度な相互作用を得られるという観点から、置換若しくは無置換のアリール基であることが好ましく、無置換のアリール基であることがより好ましい。 R_{E4} がアリール基である場合の具体例及び好ましい範囲は前記の通りである。

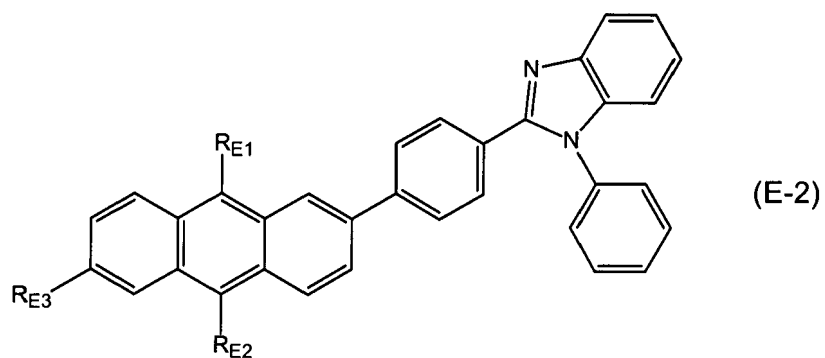
【0087】

一般式(E-1)で表される化合物は下記一般式(E-2)又は下記一般式(E-3)で表されることが好ましい。

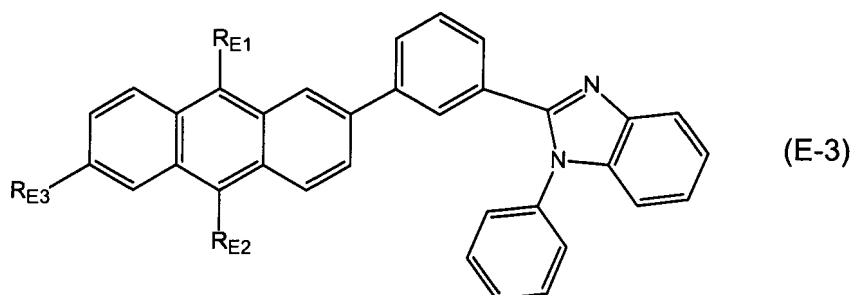
30

【0088】

【化 1 2】



10



20

【0089】

(一般式(E-2)及び(E-3)中、 R_{E1} 及び R_{E2} は、それぞれ独立に、水素原子、脂肪族炭化水素基、置換若しくは無置換のアリール基、又は、置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す。但し、 R_{E1} 及び R_{E2} が同時に水素原子であることはない。

R_{E3} は、水素原子、脂肪族炭化水素、置換若しくは無置換のアリール基、又は、置換若しくは無置換の芳香族ヘテロ環基を表す。)

30

【0090】

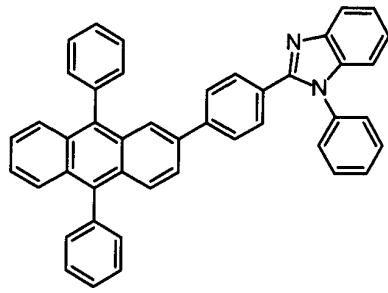
一般式(E-2)及び(E-3)中、 R_{E1} 、 R_{E2} 、及び R_{E3} は、各々一般式(E-1)における R_{E1} 、 R_{E2} 、及び R_{E3} と同義であり、好ましい範囲も同じである。

【0091】

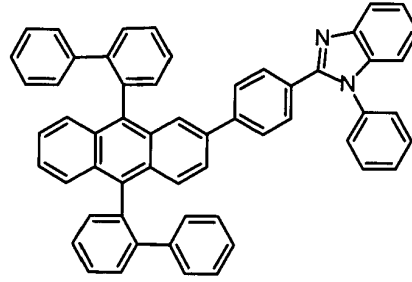
一般式(E-1)で表される化合物の具体例を以下に示すが、これらに限定されない。

【0092】

【化 1 3】

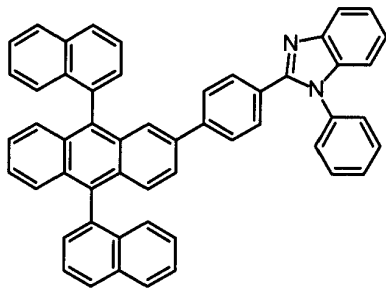


(e-1)

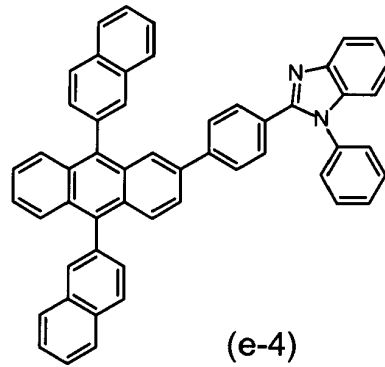


(e-2)

10

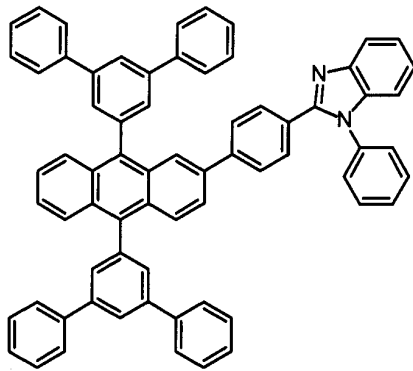


(e-3)

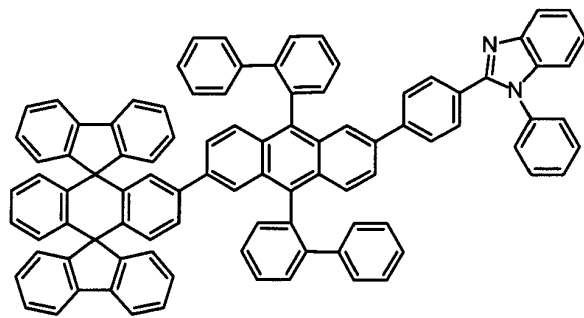


(e-4)

20

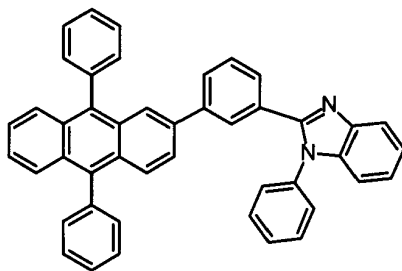


(e-5)

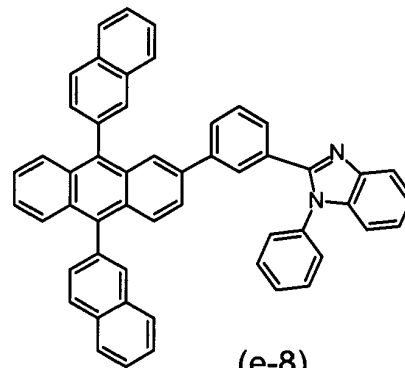


(e-6)

30



(e-7)

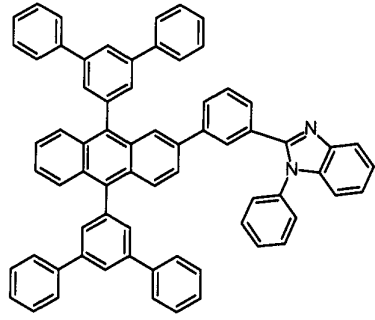


(e-8)

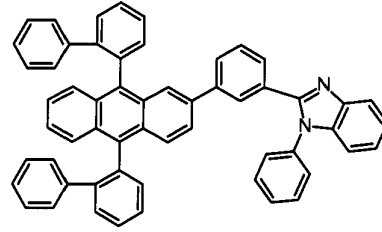
40

【 0 0 9 3】

【化 1 4】

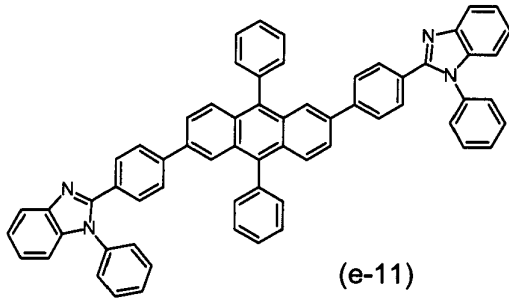


(e-9)

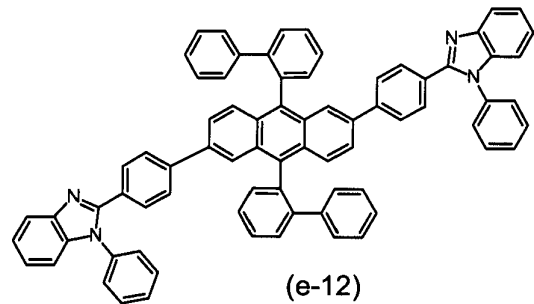


(e-10)

10

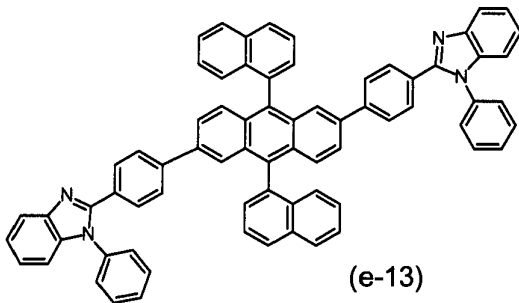


(e-11)

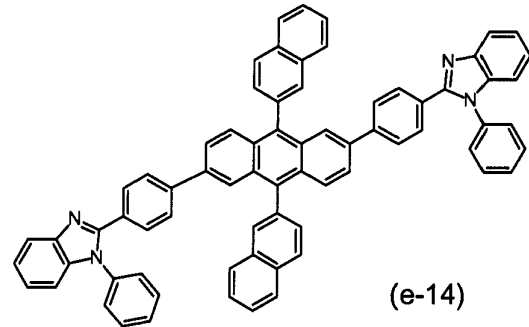


(e-12)

20

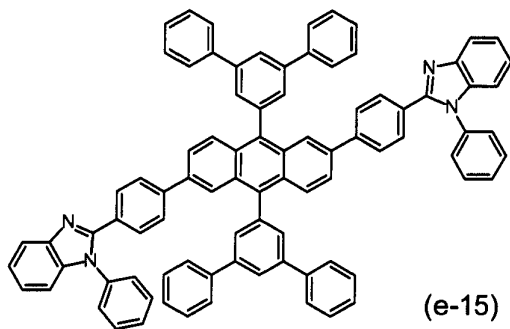


(e-13)



(e-14)

30

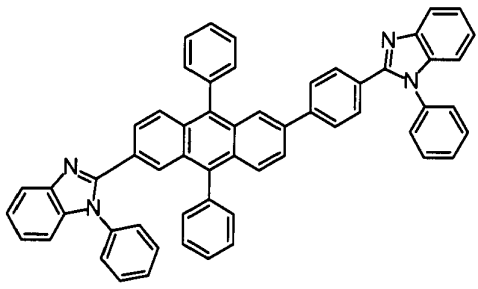


(e-15)

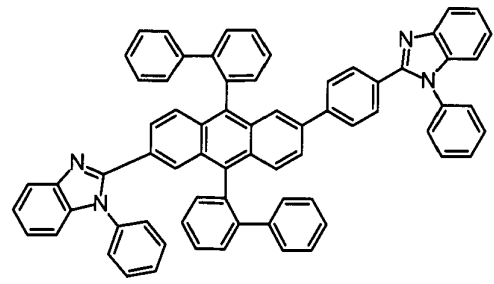
40

【 0 0 9 4】

【化 1 5】

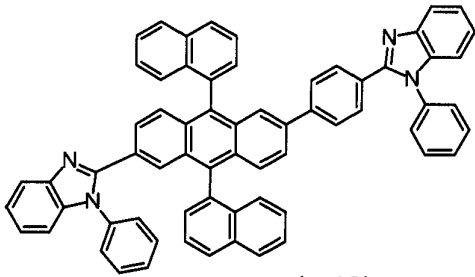


(e-16)

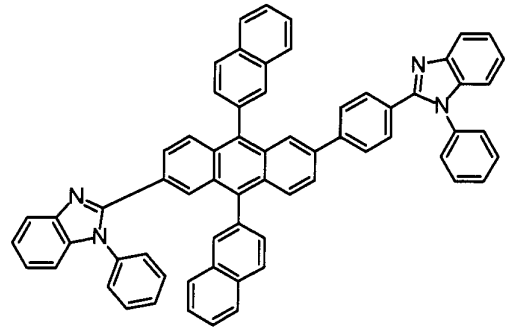


(e-17)

10

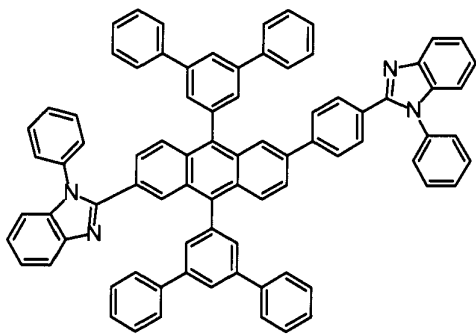


(e-18)



(e-19)

20

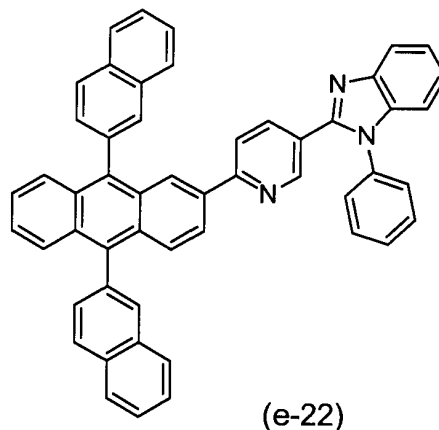
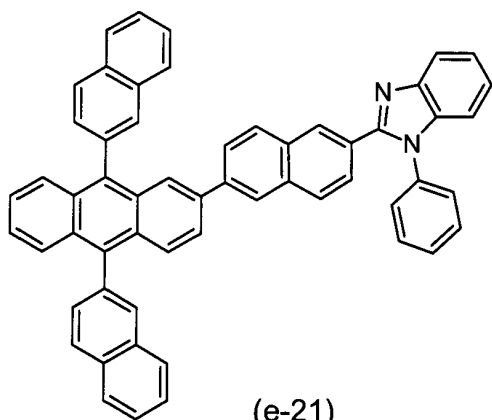


(e-20)

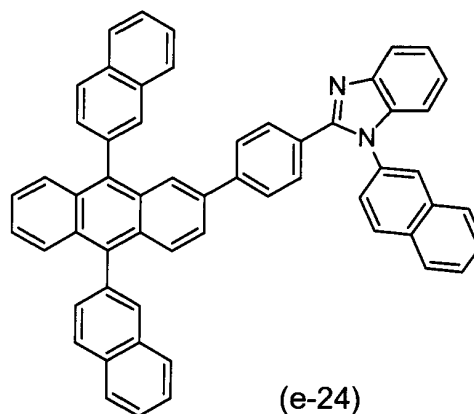
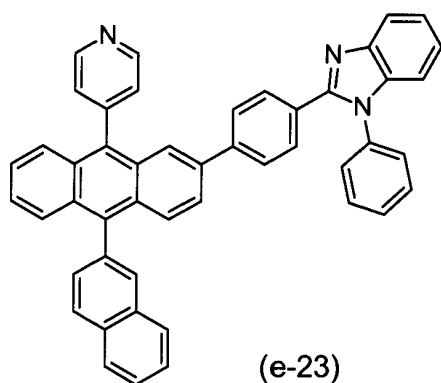
30

【 0 0 9 5 】

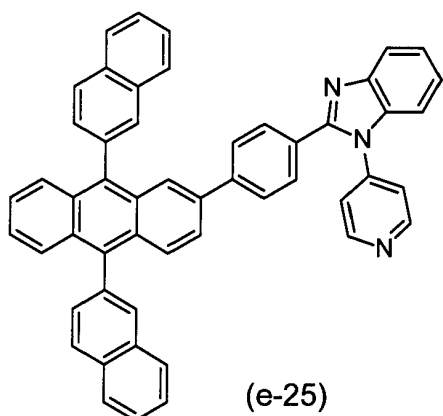
【化 1 6】



10



20



30

40

【0096】

上記具体例のうち、(e-1)~(e-10)がより好ましく、(e-1)~(e-4)、及び(e-6)~(e-10)が更に好ましく、(e-3)、(e-4)及び(e-8)が特に好ましい。

【0097】

一般式(E-1)で表される化合物は、特許第4308663号公報に記載の方法で合成できる。

合成後、カラムクロマトグラフィー、再結晶等による精製を行った後、昇華精製により精製することが好ましい。昇華精製により、有機不純物を分離できるだけでなく、無機塩や残留溶媒等を効果的に取り除くことができる。

50

【 0 0 9 8 】

本発明の発光素子において、一般式（E - 1）で表される化合物は発光層と陰極の間の少なくとも一層の有機層に含有されるが、その用途が限定されることはなく、その他のいずれの層に更に含有されてもよい。本発明にかかる一般式（E - 1）で表される化合物の導入層としては、発光層、正孔注入層、正孔輸送層、電子輸送層、電子注入層、励起子ブロック層、電荷ブロック層のいずれか、若しくは複数に含有することができる。

一般式（E - 1）で表される化合物が含有される発光層と陰極の間の有機層は、電荷ブロック層又は電子輸送層であることがより好ましく、電子輸送層であることが更に好ましい。

【 0 0 9 9 】

10

〔有機電界発光素子〕

本発明の素子について詳細に説明する。

本発明の有機電界発光素子は、基板上に、陽極及び陰極からなる一对の電極と、該電極間に発光層を有し、発光層と陰極の間に少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、発光層に前記一般式（1）で表される化合物を少なくとも一つ含有し、発光層と陰極の間の有機層の少なくとも一層に前記一般式（E - 1）で表される化合物を少なくとも一つ含有する。

【 0 1 0 0 】

本発明の有機電界発光素子において、発光層は有機層であり、発光層と陰極の間に更に少なくとも一層の有機層を含むが、更に有機層を有していてもよい。

20

発光素子の性質上、陽極及び陰極のうち少なくとも一方の電極は、透明若しくは半透明であることが好ましい。

図1は、本発明に係る有機電界発光素子の構成の一例を示している。

図1に示される本発明に係る有機電界発光素子10は、支持基板2上において、陽極3と陰極9との間に発光層6が挟まれている。具体的には、陽極3と陰極9との間に正孔注入層4、正孔輸送層5、発光層6、正孔ブロック層7、及び電子輸送層8がこの順に積層されている。

【 0 1 0 1 】

< 有機層の構成 >

前記有機層の層構成としては、特に制限はなく、有機電界発光素子の用途、目的に応じて適宜選択することができるが、前記透明電極上に又は前記背面電極上に形成されるのが好ましい。この場合、有機層は、前記透明電極又は前記背面電極上の前面又は一面に形成される。

30

有機層の形状、大きさ、及び厚み等については、特に制限はなく、目的に応じて適宜選択することができる。

【 0 1 0 2 】

具体的な層構成として、下記が挙げられるが本発明はこれらの構成に限定されるものではない。

- ・ 陽極 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 陰極、
- ・ 陽極 / 正孔輸送層 / 発光層 / ブロック層 / 電子輸送層 / 陰極、
- ・ 陽極 / 正孔輸送層 / 発光層 / ブロック層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極、
- ・ 陽極 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極、
- ・ 陽極 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / ブロック層 / 電子輸送層 / 陰極、
- ・ 陽極 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / ブロック層 / 電子輸送層 / 電子注入層 / 陰極。

40

有機電界発光素子の素子構成、基板、陰極及び陽極については、例えば、特開2008-270736号公報に詳述されており、該公報に記載の事項を本発明に適用することができる。

【 0 1 0 3 】

< 基板 >

50

本発明で使用する基板としては、有機層から発せられる光を散乱又は減衰させない基板であることが好ましい。有機材料の場合には、耐熱性、寸法安定性、耐溶剤性、電気絶縁性、及び加工性に優れていることが好ましい。

【0104】

<陽極>

陽極は、通常、有機層に正孔を供給する電極としての機能を有していればよく、その形状、構造、大きさ等については特に制限はなく、発光素子の用途、目的に応じて、公知の電極材料の中から適宜選択することができる。前述のごとく、陽極は、通常透明陽極として設けられる。

【0105】

<陰極>

陰極は、通常、有機層に電子を注入する電極としての機能を有していればよく、その形状、構造、大きさ等については特に制限はなく、発光素子の用途、目的に応じて、公知の電極材料の中から適宜選択することができる。

【0106】

基板、陽極、陰極については、特開2008-270736号公報の段落番号〔0070〕～〔0089〕に記載の事項を本発明に適用することができる。

【0107】

<有機層>

本発明における有機層について説明する。

【0108】

〔有機層の形成〕

本発明の有機電界発光素子において、各有機層は、蒸着法やスパッタ法等の乾式成膜法、転写法、印刷法、スピコート法、バーコート法等の溶液塗布プロセスのいずれによっても好適に形成することができる。本発明の素子において、発光層、該発光層と陰極の間の有機層、及び前記陽極と前記陰極の間に存在するその他の有機層のうちいずれか少なくとも1層が溶液塗布プロセスにより形成されたことが好ましい。

【0109】

〔発光層〕

発光層は、電界印加時に、陽極、正孔注入層、又は正孔輸送層から正孔を受け取り、陰極、電子注入層、又は電子輸送層から電子を受け取り、正孔と電子の再結合の場を提供して発光させる機能を有する層である。

【0110】

基板、陽極、陰極、有機層、発光層については、例えば、特開2008-270736、特開2007-266458に詳述されており、これらの公報に記載の事項を本発明に適用することができる。更に、発光層中に電荷輸送性を有さず、発光しない材料を含んでも良い。

【0111】

〔発光材料〕

本発明における発光材料としては、燐光性発光材料、蛍光性発光材料等いずれも用いることができる。

本発明における発光層は、色純度を向上させるためや発光波長領域を広げるために2種類以上の発光材料を含有することができる。発光材料の少なくとも一種が燐光発光材料であることが好ましい。

本発明における発光材料は、更に前記宿主材料との間で、 $1.2\text{ eV} > I_p > 0.2\text{ eV}$ 、及び/又は $1.2\text{ eV} > E_a > 0.2\text{ eV}$ の関係を満たすことが駆動耐久性の観点で好ましい。ここで、 I_p は、宿主材料と発光材料の I_p 値の差を、 E_a は宿主材料と発光材料の E_a 値の差を意味する。

前記発光材料の少なくとも一種が白金錯体材料又はイリジウム錯体材料であることが好ましく、イリジウム錯体材料であることがより好ましい。

10

20

30

40

50

蛍光発光材料、燐光発光材料については、例えば、特開 2008-270736 の段落番号〔0100〕～〔0164〕、特開 2007-266458 の段落番号〔0088〕～〔0090〕に詳述されており、これらの公報に記載の事項を本発明に適用することができる。

【0112】

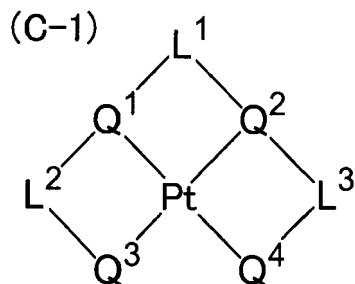
発光効率等の観点からは、燐光発光材料が好ましい。本発明に使用できる燐光発光材料としては、例えば、US 6303238 B1、US 6097147、WO 00/57676、WO 00/70655、WO 01/08230、WO 01/39234 A2、WO 01/41512 A1、WO 02/02714 A2、WO 02/15645 A1、WO 02/44189 A1、WO 05/19373 A2、特開 2001-247859、特開 2002-302671、特開 2002-117978、特開 2003-133074、特開 2002-235076、特開 2003-123982、特開 2002-170684、EP 1211257、特開 2002-226495、特開 2002-234894、特開 2001-247859、特開 2001-298470、特開 2002-173674、特開 2002-203678、特開 2002-203679、特開 2004-357791、特開 2006-256999、特開 2007-19462、特開 2007-84635、特開 2007-96259 等の特許文献に記載の燐光発光化合物などが挙げられ、中でも、更に好ましい発光性ドーパントとしては、Ir 錯体、Pt 錯体、Cu 錯体、Re 錯体、W 錯体、Rh 錯体、Ru 錯体、Pd 錯体、Os 錯体、Eu 錯体、Tb 錯体、Gd 錯体、Dy 錯体、及び Ce 錯体が挙げられる。特に好ましくは、Ir 錯体、Pt 錯体、又は Re 錯体であり、中でも金属-炭素結合、金属-窒素結合、金属-酸素結合、金属-硫黄結合の少なくとも一つの配位様式を含む Ir 錯体、Pt 錯体、又は Re 錯体が好ましい。更に、発光効率、駆動耐久性、色度等の観点で、Ir 錯体、Pt 錯体が特に好ましく、Ir 錯体が最も好ましい。

【0113】

白金錯体として好ましくは、下記一般式 (C-1) で表される白金錯体である。

【0114】

【化 17】



【0115】

(式中、 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 はそれぞれ独立に Pt に配位する配位子を表す。 L^1 、 L^2 及び L^3 はそれぞれ独立に単結合又は二価の連結基を表す。)

【0116】

一般式 (C-1) について説明する。 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 はそれぞれ独立に Pt に配位する配位子を表す。この時、 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 と Pt の結合は、共有結合、イオン結合、配位結合などいずれであっても良い。 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 中の Pt に結合する原子としては、炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、リン原子が好ましく、 Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 中の Pt に結合する原子の内、少なくとも一つが炭素原子であることが好ましく、二つが炭素原子であることがより好ましく、二つが炭素原子で、二つが窒素原子であることが特に好ましい。

炭素原子で Pt に結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 としては、アニオン性の配位子でも中性の配位子でもよく、アニオン性の配位子としてはビニル配位子、芳香族炭化水素環配位子 (例えばベンゼン配位子、ナフタレン配位子、アントラセン配位子、フェナントレ

ン配位子など)、ヘテロ環配位子(例えばフラン配位子、チオフェン配位子、ピリジン配位子、ピラジン配位子、ピリミジン配位子、ピリダジン配位子、トリアジン配位子、チアゾール配位子、オキサゾール配位子、ピロール配位子、イミダゾール配位子、ピラゾール配位子、トリアゾール配位子及び、それらを含む縮環体(例えばキノリン配位子、ベンゾチアゾール配位子など))が挙げられる。中性の配位子としてはカルベン配位子が挙げられる。

窒素原子でPtに結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 としては、中性の配位子でもアニオン性の配位子でもよく、中性の配位子としては含窒素芳香族ヘテロ環配位子(ピリジン配位子、ピラジン配位子、ピリミジン配位子、ピリダジン配位子、トリアジン配位子、イミダゾール配位子、ピラゾール配位子、トリアゾール配位子、オキサゾール配位子、チアゾール配位子及びそれらを含む縮環体(例えばキノリン配位子、ベンゾイミダゾール配位子など))、アミン配位子、ニトリル配位子、イミン配位子が挙げられる。アニオン性の配位子としては、アミノ配位子、イミノ配位子、含窒素芳香族ヘテロ環配位子(ピロール配位子、イミダゾール配位子、トリアゾール配位子及びそれらを含む縮環体(例えばインドール配位子、ベンゾイミダゾール配位子など))が挙げられる。

10

酸素原子でPtに結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 としては、中性の配位子でもアニオン性の配位子でもよく、中性の配位子としてはエーテル配位子、ケトン配位子、エステル配位子、アミド配位子、含酸素ヘテロ環配位子(フラン配位子、オキサゾール配位子及びそれらを含む縮環体(ベンゾオキサゾール配位子など))が挙げられる。アニオン性の配位子としては、アルコキシ配位子、アリーロキシ配位子、ヘテロアリーロキシ配位子、アシルオキシ配位子、シリロキシ配位子などが挙げられる。

20

硫黄原子でPtに結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 としては、中性の配位子でもアニオン性の配位子でもよく、中性の配位子としてはチオエーテル配位子、チオケトン配位子、チオエステル配位子、チオアミド配位子、含硫黄ヘテロ環配位子(チオフェン配位子、チアゾール配位子及びそれらを含む縮環体(ベンゾチアゾール配位子など))が挙げられる。アニオン性の配位子としては、アルキルメルカプト配位子、アリールメルカプト配位子、ヘテロアリールメルカプト配位子などが挙げられる。

リン原子でPtに結合する Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 としては、中性の配位子でもアニオン性の配位子でもよく、中性の配位子としてはホスフィン配位子、リン酸エステル配位子、亜リン酸エステル配位子、含リンヘテロ環配位子(ホスフィニン配位子など)が挙げられ、アニオン性の配位子としては、ホスフィノ配位子、ホスフィニル配位子、ホスホリル配位子などが挙げられる。

30

Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 で表される基は、置換基を有していてもよく、置換基としては前記置換基群Aとして挙げたものが適宜適用できる。また置換基同士が連結していても良い(Q^3 と Q^4 が連結した場合、環状四座配位子のPt錯体になる)。

【0117】

Q^1 、 Q^2 、 Q^3 及び Q^4 で表される基として好ましくは、炭素原子でPtに結合する芳香族炭化水素環配位子、炭素原子でPtに結合する芳香族ヘテロ環配位子、窒素原子でPtに結合する含窒素芳香族ヘテロ環配位子、アシルオキシ配位子、アルキルオキシ配位子、アリーロキシ配位子、ヘテロアリーロキシ配位子、シリロキシ配位子であり、より好ましくは、炭素原子でPtに結合する芳香族炭化水素環配位子、炭素原子でPtに結合する芳香族ヘテロ環配位子、窒素原子でPtに結合する含窒素芳香族ヘテロ環配位子、アシルオキシ配位子、アリーロキシ配位子であり、更に好ましくは炭素原子でPtに結合する芳香族炭化水素環配位子、炭素原子でPtに結合する芳香族ヘテロ環配位子、窒素原子でPtに結合する含窒素芳香族ヘテロ環配位子、アシルオキシ配位子である。

40

【0118】

L^1 、 L^2 及び L^3 は、単結合又は二価の連結基を表す。 L^1 、 L^2 及び L^3 で表される二価の連結基としては、アルキレン基(メチレン、エチレン、プロピレンなど)、アリーレン基(フェニレン、ナフタレンジイル)、ヘテロアリーレン基(ピリジンジイル、チオフェンジイルなど)、イミノ基(-NR-) (フェニルイミノ基など)、オキシ基(-

50

O -)、チオ基 (- S -)、ホスフィニデン基 (- P R -) (フェニルホスフィニデン基など)、シリレン基 (- Si R R' -) (ジメチルシリレン基、ジフェニルシリレン基など)、又はこれらを組み合わせたものが挙げられる。ここで、R及びR'としては各々独立してアルキル基、アリール基等が挙げられる。これらの連結基は、更に置換基を有していてもよい。

錯体の安定性及び発光量子収率の観点から、 L^1 、 L^2 及び L^3 として好ましくは単結合、アルキレン基、アリーレン基、ヘテロアリーレン基、イミノ基、オキシ基、チオ基、シリレン基であり、より好ましくは単結合、アルキレン基、アリーレン基、イミノ基であり、更に好ましくは単結合、アルキレン基、アリーレン基であり、更に好ましくは、単結合、メチレン基、フェニレン基であり、更に好ましくは単結合、ジ置換のメチレン基であり、更に好ましくは単結合、ジメチルメチレン基、ジエチルメチレン基、ジイソブチルメチレン基、ジベンジルメチレン基、エチルメチルメチレン基、メチルプロピルメチレン基、イソブチルメチルメチレン基、ジフェニルメチレン基、メチルフェニルメチレン基、シクロヘキサンジイル基、シクロペンタンジイル基、フルオレンジイル基、フルオロメチルメチレン基である。

10

L^1 は特に好ましくはジメチルメチレン基、ジフェニルメチレン基、シクロヘキサンジイル基であり、最も好ましくはジメチルメチレン基である。

L^2 及び L^3 として最も好ましくは単結合である。

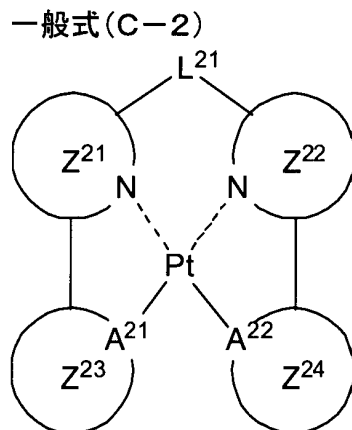
【0119】

一般式(C-1)で表される白金錯体のうち、より好ましくは下記一般式(C-2)で表される白金錯体である。

20

【0120】

【化18】



30

【0121】

(式中、 L^{21} は単結合又は二価の連結基を表す。 A^{21} 、 A^{22} はそれぞれ独立に炭素原子又は窒素原子を表す。 Z^{21} 、 Z^{22} はそれぞれ独立に含窒素芳香族ヘテロ環を表す。 Z^{23} 、 Z^{24} はそれぞれ独立にベンゼン環又は芳香族ヘテロ環を表す。)

【0122】

一般式(C-2)について説明する。 L^{21} は、前記一般式(C-1)中の L^1 と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

40

【0123】

A^{21} 、 A^{22} はそれぞれ独立に炭素原子又は窒素原子を表す。 A^{21} 、 A^{22} の内、少なくとも一方は炭素原子であることが好ましく、 A^{21} 、 A^{22} が共に炭素原子であることが、錯体の安定性の観点及び錯体の発光量子収率の観点から好ましい。

【0124】

Z^{21} 、 Z^{22} は、それぞれ独立に含窒素芳香族ヘテロ環を表す。 Z^{21} 、 Z^{22} で表される含窒素芳香族ヘテロ環としては、ピリジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、イミダゾール環、ピラゾール環、オキサゾール環、チアゾール環、トリアゾール

50

環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環などが挙げられる。錯体の安定性、発光波長制御及び発光量子収率の観点から、 Z^{21} 、 Z^{22} で表される環として好ましくは、ピリジン環、ピラジン環、イミダゾール環、ピラゾール環であり、より好ましくはピリジン環、イミダゾール環、ピラゾール環であり、更に好ましくはピリジン環、ピラゾール環であり、特に好ましくはピリジン環である。

【0125】

前記 Z^{21} 、 Z^{22} で表される含窒素芳香族ヘテロ環は置換基を有していてもよく、炭素原子上の置換基としては前記置換基群Aが、窒素原子上の置換基としては前記置換基群Bが適用できる。炭素原子上の置換基として好ましくはアルキル基、ペルフルオロアルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、ジアルキルアミノ基、ジアリールアミノ基、アルコキシ基、シアノ基、フッ素原子である。置換基は発光波長や電位の制御のために適宜選択されるが、短波長化させる場合には電子供与性基、フッ素原子、芳香環基が好ましく、例えばアルキル基、ジアルキルアミノ基、アルコキシ基、フッ素原子、アリール基、芳香族ヘテロ環基などが選択される。また長波長化させる場合には電子求引性基が好ましく、例えばシアノ基、ペルフルオロアルキル基などが選択される。窒素原子上の置換基として好ましくは、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基であり、錯体の安定性の観点からアルキル基、アリール基が好ましい。前記置換基同士は連結して縮合環を形成していてもよく、形成される環としては、ベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、イミダゾール環、オキサゾール環、チアゾール環、ピラゾール環、チオフェン環、フラン環などが挙げられる。

【0126】

Z^{23} 、 Z^{24} は、それぞれ独立にベンゼン環又は芳香族ヘテロ環を表す。 Z^{23} 、 Z^{24} で表される含窒素芳香族ヘテロ環としては、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、イミダゾール環、ピラゾール環、オキサゾール環、チアゾール環、トリアゾール環、オキサジアゾール環、チアジアゾール環、チオフェン環、フラン環などが挙げられる。錯体の安定性、発光波長制御及び発光量子収率の観点から Z^{23} 、 Z^{24} で表される環として好ましくは、ベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、イミダゾール環、ピラゾール環、チオフェン環であり、より好ましくはベンゼン環、ピリジン環、ピラゾール環であり、更に好ましくはベンゼン環、ピリジン環である。

【0127】

前記 Z^{23} 、 Z^{24} で表されるベンゼン環、含窒素芳香族ヘテロ環は置換基を有していてもよく、炭素原子上の置換基としては前記置換基群Aが、窒素原子上の置換基としては前記置換基群Bが適用できる。炭素上の置換基として好ましくはアルキル基、ペルフルオロアルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、ジアルキルアミノ基、ジアリールアミノ基、アルコキシ基、シアノ基、フッ素原子である。置換基は発光波長や電位の制御のために適宜選択されるが、長波長化させる場合には電子供与性基、芳香環基が好ましく、例えばアルキル基、ジアルキルアミノ基、アルコキシ基、アリール基、芳香族ヘテロ環基などが選択される。また短波長化させる場合には電子求引性基が好ましく、例えばフッ素原子、シアノ基、ペルフルオロアルキル基などが選択される。窒素原子上の置換基として好ましくは、アルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基であり、錯体の安定性の観点からアルキル基、アリール基が好ましい。前記置換基同士は連結して縮合環を形成していてもよく、形成される環としては、ベンゼン環、ピリジン環、ピラジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、イミダゾール環、オキサゾール環、チアゾール環、ピラゾール環、チオフェン環、フラン環などが挙げられる。

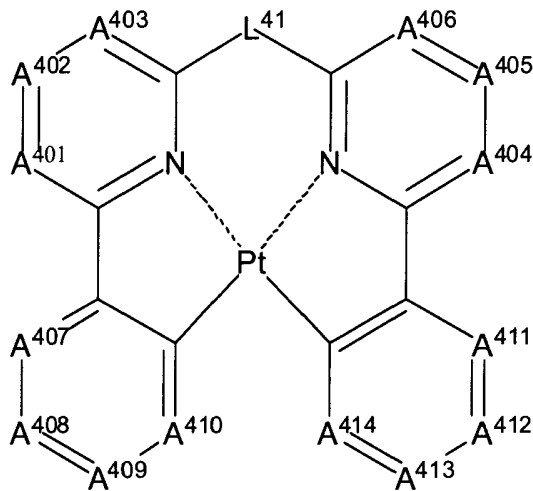
【0128】

一般式(C-2)で表される白金錯体のうち、より好ましい態様の一つは下記一般式(C-4)で表される白金錯体である。

【0129】

【化19】

一般式 (C-4)



10

【0130】

(一般式 (C-4) 中、 $A^{401} \sim A^{414}$ はそれぞれ独立に C-R 又は窒素原子を表す。R は水素原子又は置換基を表す。 L^{41} は単結合又は二価の連結基を表す。)

【0131】

一般式 (C-4) について説明する。

$A^{401} \sim A^{414}$ はそれぞれ独立に C-R 又は窒素原子を表す。R は水素原子又は置換基を表す。

R で表される置換基としては、前記置換基群 A として挙げたものが適用できる。

$A^{401} \sim A^{406}$ として好ましくは C-R であり、R 同士が互いに連結して環を形成していても良い。 $A^{401} \sim A^{406}$ が C-R である場合に、 A^{402} 、 A^{405} の R として好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素原子、シアノ基であり、より好ましくは水素原子、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素原子であり、特に好ましくは水素原子、フッ素原子である。 A^{401} 、 A^{403} 、 A^{404} 、 A^{406} の R として好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素原子、シアノ基であり、より好ましくは水素原子、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素原子であり、特に好ましくは水素原子である。

30

L^{41} は、前記一般式 (C-1) 中の L^1 と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0132】

$A^{407} \sim A^{414}$ としては、 $A^{407} \sim A^{410}$ と $A^{411} \sim A^{414}$ のそれぞれにおいて、N (窒素原子) の数は、0 ~ 2 が好ましく、0 ~ 1 がより好ましい。発光波長を短波長側にシフトさせる場合、 A^{408} 及び A^{412} のいずれかが窒素原子であることが好ましく、 A^{408} と A^{412} が共に窒素原子であることが更に好ましい。

40

$A^{407} \sim A^{414}$ が C-R を表す場合に、 A^{408} 、 A^{412} の R として好ましくは水素原子、アルキル基、ペルフルオロアルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素原子、シアノ基であり、より好ましくは水素原子、ペルフルオロアルキル基、アルキル基、アリール基、フッ素原子、シアノ基であり、特に好ましくは、水素原子、フェニル基、ペルフルオロアルキル基、シアノ基である。 A^{407} 、 A^{409} 、 A^{411} 、 A^{413} の R として好ましくは水素原子、アルキル基、ペルフルオロアルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、フッ素原子、シアノ基であり、より好ましくは水素原子、ペルフルオロアルキル基、フッ素原子、シアノ基であり、特に好ましくは水素原子、フェニル基、フッ素原子である。 A^{410} 、 A^{414} の R として好ましくは水素原子、フッ素原子であり、より好ましくは水素原子である。 A^4

50

07 ~ A⁴⁰⁹、A⁴¹¹ ~ A⁴¹³ のいずれかが C - R を表す場合に、R 同士が互いに連結して環を形成していても良い。

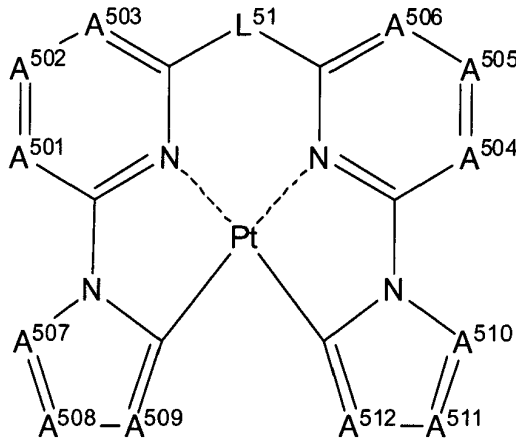
【0133】

一般式 (C - 2) で表される白金錯体のうち、より好ましい態様の一つは下記一般式 (C - 5) で表される白金錯体である。

【0134】

【化20】

(C-5)



10

20

【0135】

(一般式 (C - 5) 中、A⁵⁰¹ ~ A⁵¹² は、それぞれ独立に、C - R 又は窒素原子を表す。R は水素原子又は置換基を表す。L⁵¹ は単結合又は二価の連結基を表す。)

【0136】

一般式 (C - 5) について説明する。A⁵⁰¹ ~ A⁵⁰⁶ 及び L⁵¹ は、前記一般式 (C - 4) における A⁴⁰¹ ~ A⁴⁰⁶ 及び L⁴¹ と同義であり、好ましい範囲も同様である。

【0137】

A⁵⁰⁷、A⁵⁰⁸ 及び A⁵⁰⁹ と A⁵¹⁰、A⁵¹¹ 及び A⁵¹² は、及びそれぞれ独立に、C - R 又は窒素原子を表す。R は水素原子又は置換基を表す。R で表される置換基としては、前記置換基群 A として挙げたものが適用できる。A⁵⁰⁷、A⁵⁰⁸ 及び A⁵⁰⁹ と A⁵¹⁰、A⁵¹¹ 及び A⁵¹² が C - R である場合に、R として好ましくは水素原子、アルキル基、ペルフルオロアルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基、ジアルキルアミノ基、ジアリールアミノ基、アルキルオキシ基、シアノ基、フッ素原子であり、より好ましくは、水素原子、アルキル基、ペルフルオロアルキル基、アリール基、ジアルキルアミノ基、シアノ基、フッ素原子、更に好ましくは、水素原子、アルキル基、トリフルオロメチル基、フッ素原子である。また可能な場合は置換基同士が連結して、縮環構造を形成してもよい。A⁵⁰⁷、A⁵⁰⁸ 及び A⁵⁰⁹ と A⁵¹⁰、A⁵¹¹ 及び A⁵¹² のうち少なくとも一つは窒素原子であることが好ましく、特に A⁵¹⁰ 又は A⁵⁰⁷ が窒素原子であることが好ましい。

30

40

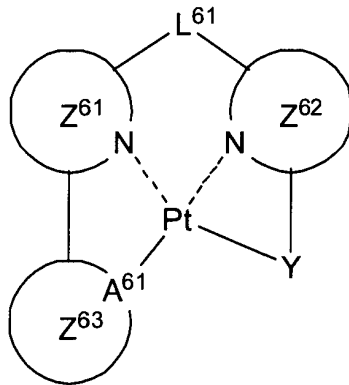
【0138】

一般式 (C - 1) で表される白金錯体のうち、より好ましい別の態様は下記一般式 (C - 6) で表される白金錯体である。

【0139】

【化 2 1】

一般式(C-6)



10

【0140】

(式中、 L^{61} は単結合又は二価の連結基を表す。 A^{61} はそれぞれ独立に炭素原子又は窒素原子を表す。 Z^{61} 、 Z^{62} はそれぞれ独立に含窒素芳香族ヘテロ環を表す。 Z^{63} はそれぞれ独立にベンゼン環又は芳香族ヘテロ環を表す。 Y はPtに結合するアニオン性の非環状配位子である。)

【0141】

一般式(C-6)について説明する。 L^{61} は、前記一般式(C-1)中の L^1 と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

20

【0142】

A^{61} は炭素原子又は窒素原子を表す。錯体の安定性の観点及び錯体の発光量子収率の観点から A^{61} は炭素原子であることが好ましい。

【0143】

Z^{61} 、 Z^{62} は、それぞれ前記一般式(C-2)における Z^{21} 、 Z^{22} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 Z^{63} は、前記一般式(C-2)における Z^{23} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0144】

Y はPtに結合するアニオン性の非環状配位子である。非環状配位子とはPtに結合する原子が配位子の状態では環を形成していないものである。 Y 中のPtに結合する原子としては、炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子が好ましく、窒素原子、酸素原子がより好ましく、酸素原子が最も好ましい。

30

炭素原子でPtに結合する Y としてはビニル配位子が挙げられる。窒素原子でPtに結合する Y としてはアミノ配位子、イミノ配位子が挙げられる。酸素原子でPtに結合する Y としては、アルコキシ配位子、アリールオキシ配位子、ヘテロアリールオキシ配位子、アシルオキシ配位子、シリルオキシ配位子、カルボキシル配位子、リン酸配位子、スルホン酸配位子などが挙げられる。硫黄原子でPtに結合する Y としては、アルキルメルカプト配位子、アリールメルカプト配位子、ヘテロアリールメルカプト配位子、チオカルボン酸配位子などが挙げられる。

40

Y で表される配位子は、置換基を有していてもよく、置換基としては前記置換基群Aとして挙げたものが適宜適用できる。また置換基同士が連結していても良い。

【0145】

Y で表される配位子として好ましくは酸素原子でPtに結合する配位子であり、より好ましくはアシルオキシ配位子、アルキルオキシ配位子、アリールオキシ配位子、ヘテロアリールオキシ配位子、シリルオキシ配位子であり、更に好ましくはアシルオキシ配位子である。

【0146】

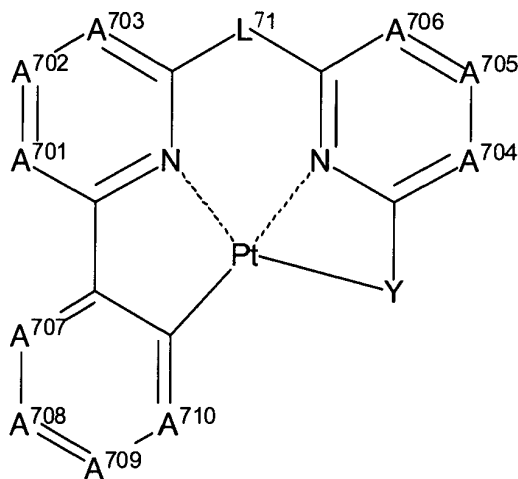
一般式(C-6)で表される白金錯体のうち、より好ましい態様の一つは下記一般式(C-7)で表される白金錯体である。

50

【 0 1 4 7 】

【 化 2 2 】

一般式(C-7)



10

【 0 1 4 8 】

(式中、 $A^{701} \sim A^{710}$ は、それぞれ独立に、C-R又は窒素原子を表す。Rは水素原子又は置換基を表す。 L^{71} は単結合又は二価の連結基を表す。YはPtに結合するアニオン性の非環状配位子である。)

20

【 0 1 4 9 】

一般式(C-7)について説明する。 L^{71} は、前記一般式(C-6)中の L^{61} と同義であり、また好ましい範囲も同様である。 $A^{701} \sim A^{710}$ は一般式(C-4)における $A^{401} \sim A^{410}$ と同義であり、また好ましい範囲も同様である。Yは一般式(C-6)におけるYと同義であり、また好ましい範囲も同様である。

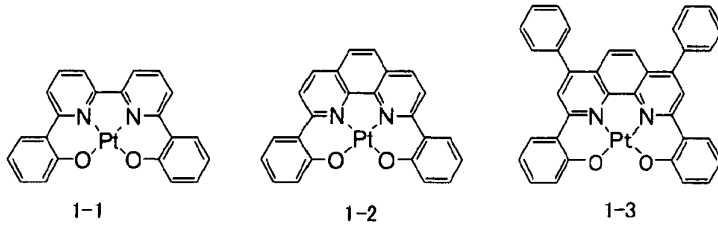
【 0 1 5 0 】

一般式(C-1)で表される白金錯体として具体的には、特開2005-310733号公報の【0143】～【0152】、【0157】～【0158】、【0162】～【0168】に記載の化合物、特開2006-256999号公報の【0065】～【0083】に記載の化合物、特開2006-93542号公報の【0065】～【0090】に記載の化合物、特開2007-73891号公報の【0063】～【0071】に記載の化合物、特開2007-324309号公報の【0079】～【0083】に記載の化合物、特開2006-93542号公報の【0065】～【0090】に記載の化合物、特開2007-96255号公報の【0055】～【0071】に記載の化合物、特開2006-313796号公報の【0043】～【0046】が挙げられ、その他以下に例示する白金錯体が挙げられる。

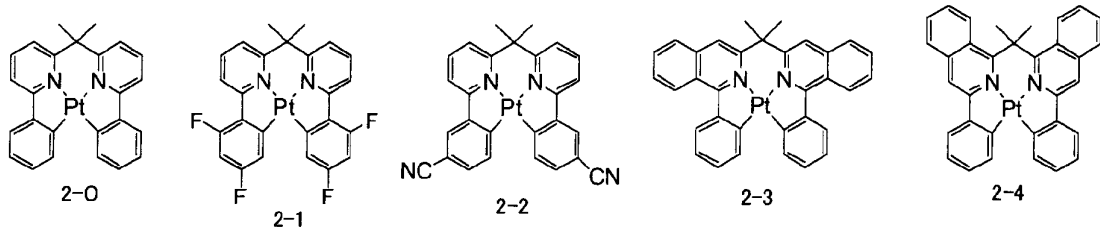
30

【 0 1 5 1 】

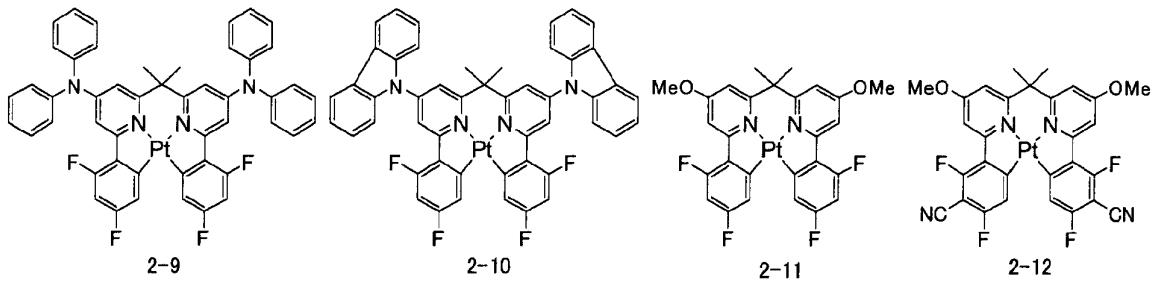
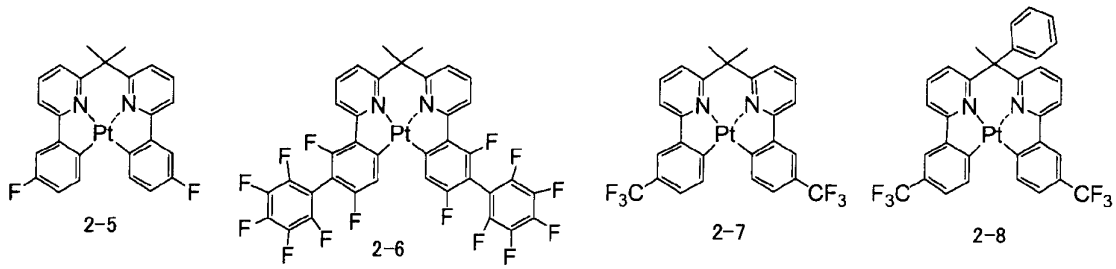
【化 2 3】



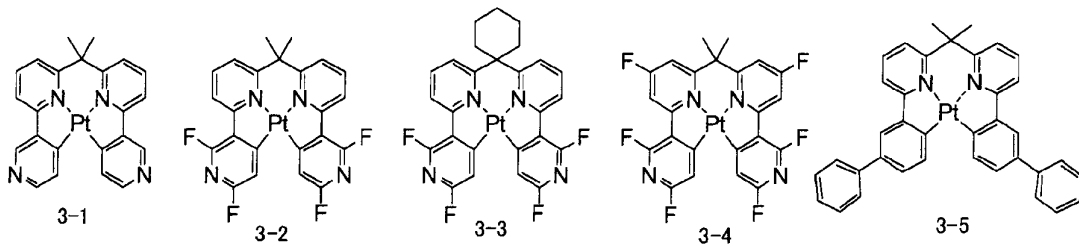
10



20



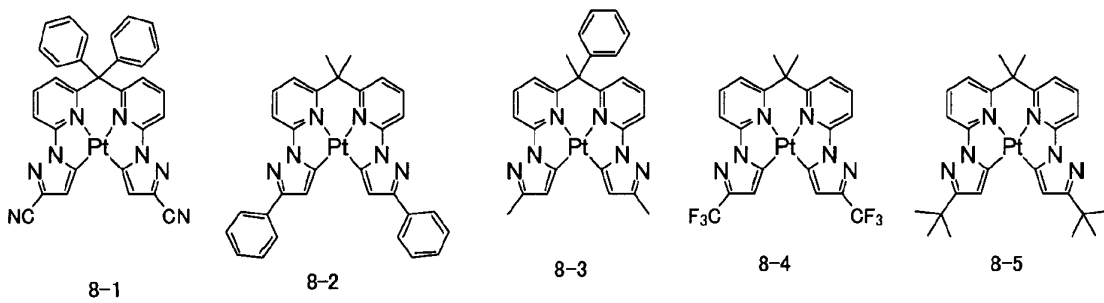
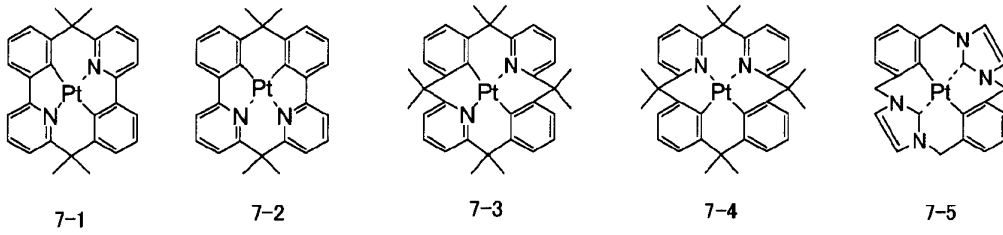
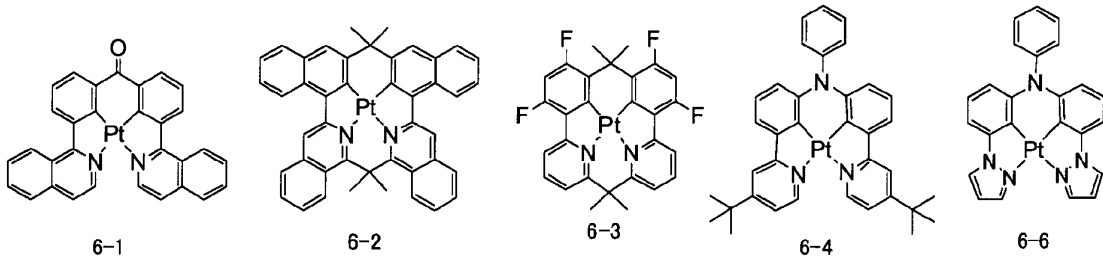
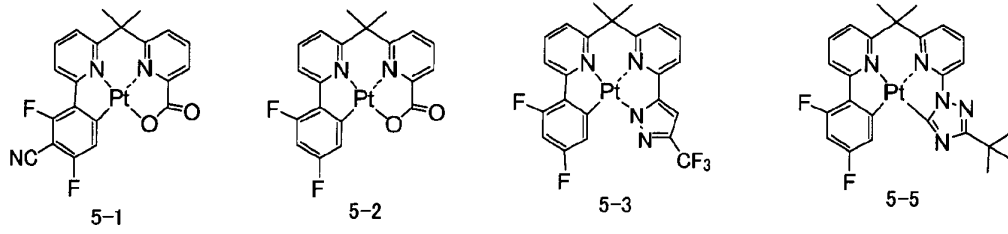
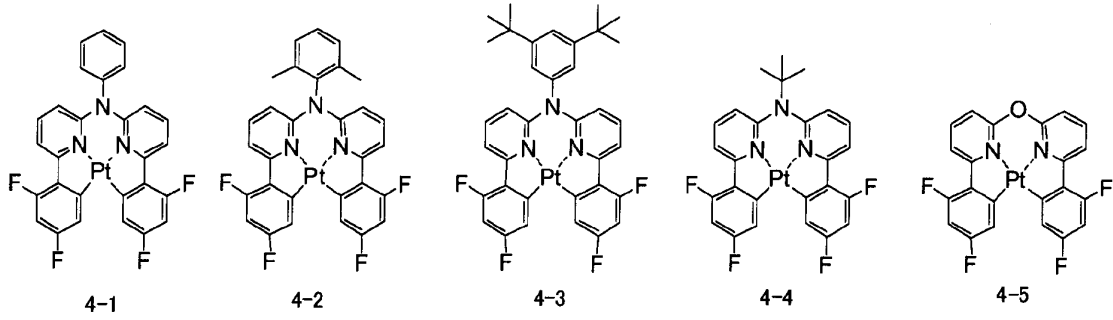
30



40

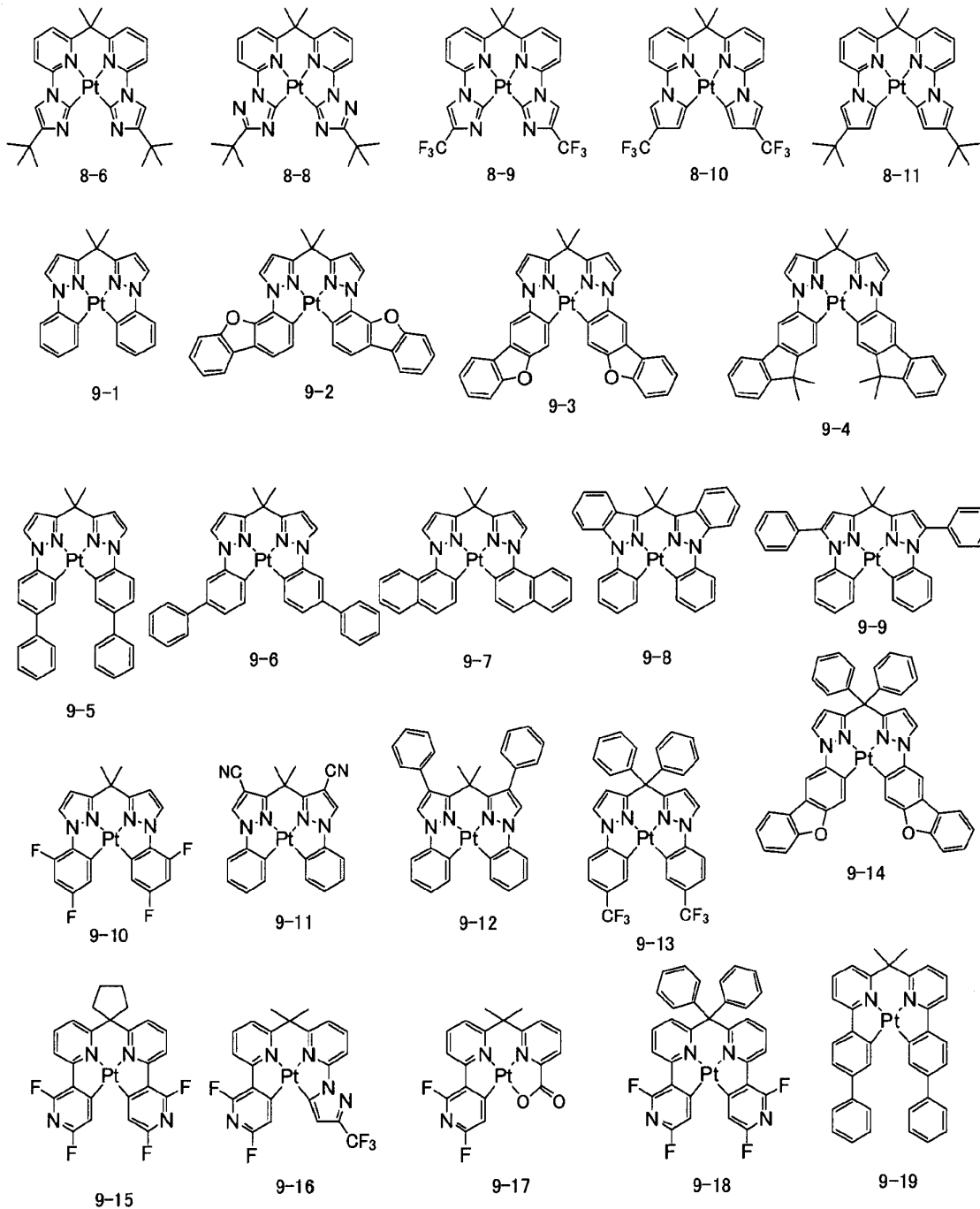
【 0 1 5 2】

【化 2 4】



【 0 1 5 3 】

【化25】



10

20

30

【0154】

一般式(C-1)で表される白金錯体化合物は、例えば、*Journal of Organic Chemistry* 53, 786, (1988)、G. R. Newkome et al.)の、789頁、左段53行~右段7行に記載の方法、790頁、左段18行~38行に記載の方法、790頁、右段19行~30行に記載の方法及びその組み合わせ、*Chemische Berichte* 113, 2749 (1980)、H. Lexyほか)の、2752頁、26行~35行に記載の方法等、種々の手法で合成できる。

40

例えば、配位子、又はその解離体と金属化合物を溶媒(例えば、ハロゲン系溶媒、アルコール系溶媒、エーテル系溶媒、エステル系溶媒、ケトン系溶媒、ニトリル系溶媒、アミド系溶媒、スルホン系溶媒、スルホキサイド系溶媒、水などが挙げられる)の存在下、若しくは、溶媒非存在下、塩基の存在下(無機、有機の種々の塩基、例えば、ナトリウムメ

50

トキシド、*t*-ブトキシカリウム、トリエチルアミン、炭酸カリウムなどが挙げられる)、若しくは、塩基非存在下、室温以下、若しくは加熱し(通常の加熱以外にもマイクロウェーブで加熱する手法も有効である)得ることができる。

【0155】

本発明の発光層における一般式(C-1)で表される化合物の含有量は発光層中1~30質量%であることが好ましく、3~25質量%であることがより好ましく、5~20質量%であることが更に好ましい。

【0156】

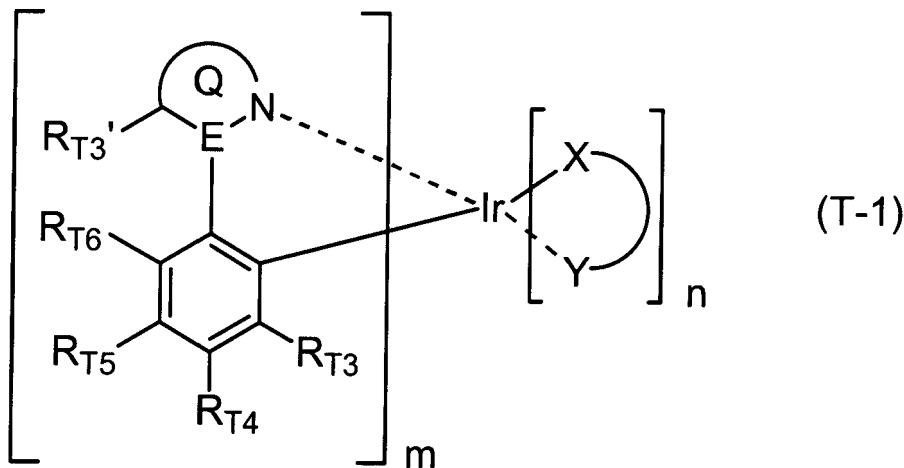
イリジウム錯体として好ましくは、下記一般式(T-1)で表されるイリジウム錯体である。

(一般式(T-1)で表される化合物)

一般式(T-1)で表される化合物について説明する。

【0157】

【化26】



【0158】

(一般式(T-1)中、 $R_{T3'}$ 、 R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シアノ基、ペルフルオロアルキル基、トリフルオロビニル基、 $-CO_2R_T$ 、 $-C(O)R_T$ 、 $-N(R_T)_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-OR_T$ 、ハロゲン原子、アリール基又はヘテロアリール基を表し、更に置換基Tを有していてもよい。

Eは炭素原子又は窒素原子を表す。

Qは窒素を1つ以上含む5員又は6員の芳香族複素環又は縮合芳香族複素環である。

該環Qにおいて、EとNを結ぶ線は一本の線で表されているが、結合種は問わず、それぞれ単結合でも二重結合でも良い。

R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} は隣り合う任意の2つが互いに結合して縮合4~7員環を形成してもよく、該縮合4~7員環は、シクロアルキル、アリール又はヘテロアリールであり、該縮合4~7員環は更に置換基Tを有していてもよい。

$R_{T3'}$ と R_{T6} は、 $-C(R_T)_2-C(R_T)_2-$ 、 $-CR_T=CR_T-$ 、 $-C(R_T)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-NR_T-$ 、 $-O-C(R_T)_2-$ 、 $-NR_T-C(R_T)_2-$ 及び $-N=CR_T-$ から選択される連結基によって連結されて環を形成してもよく、 R_T はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し、更に置換基Tを有していてもよい。

置換基Tはそれぞれ独立に、フッ素原子、 $-R'$ 、 $-OR'$ 、 $-N(R')_2$ 、 $-SR'$ 、 $-C(O)R'$ 、 $-C(O)OR'$ 、 $-C(O)N(R')_2$ 、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-SO_2$ 、 $-SOR'$ 、 $-SO_2R'$ 、又は $-SO_3R'$ を表し、 R' はそれぞれ独立に

、水素原子、アルキル基、ペルフルオロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基又はヘテロアリール基を表す。

(X - Y) は、配位子を表す。m は 1 ~ 3 の整数、n は 0 ~ 2 の整数を表す。m + n は 3 である。)

【0159】

アルキル基としては、置換基を有していてもよく、飽和であっても不飽和であってもよく、置換してもよい基としては、前述の置換基 T を挙げるができる。R_{T3'}、R_{T3}、R_{T4}、R_{T5}、R_{T6} で表されるアルキル基として、好ましくは総炭素原子数 1 ~ 8 のアルキル基であり、より好ましくは総炭素原子数 1 ~ 6 のアルキル基であり、例えばメチル基、エチル基、i - プロピル基、シクロヘキシル基、t - ブチル基等が挙げられる。

10

シクロアルキル基としては、置換基を有していてもよく、飽和であっても不飽和であってもよく、置換してもよい基としては、前述の置換基 T を挙げるができる。R_{T3'}、R_{T3}、R_{T4}、R_{T5}、R_{T6} で表されるシクロアルキル基として、好ましくは環員数 4 ~ 7 のシクロアルキル基であり、より好ましくは総炭素原子数 5 ~ 6 のシクロアルキル基であり、例えばシクロペンチル基、シクロヘキシル基等が挙げられる。

R_{T3'}、R_{T3}、R_{T4}、R_{T5}、R_{T6} で表されるアルケニル基としては好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばビニル、アリル、1 - プロペニル、1 - イソプロペニル、1 - ブテニル、2 - ブテニル、3 - ペンテニルなどが挙げられる。

20

R_{T3'}、R_{T3}、R_{T4}、R_{T5}、R_{T6} で表されるアルキニル基としては、好ましくは炭素数 2 ~ 30、より好ましくは炭素数 2 ~ 20、特に好ましくは炭素数 2 ~ 10 であり、例えばエチニル、プロパルギル、1 - プロピニル、3 - ペンチニルなどが挙げられる。

【0160】

R_{T3'}、R_{T3}、R_{T4}、R_{T5}、R_{T6} で表されるヘテロアルキル基は前記アルキル基の少なくとも 1 つの炭素が O、NR_T、又は S に置き換わった基を挙げるができる。

【0161】

R_{T3'}、R_{T3}、R_{T4}、R_{T5}、R_{T6} で表されるハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子が挙げられ、フッ素原子であることが好ましい。

30

【0162】

R_{T3'}、R_{T3}、R_{T4}、R_{T5}、R_{T6} で表されるアリール基としては、好ましくは、炭素数 6 から 30 の置換若しくは無置換のアリール基であり、より好ましくは炭素数 6 ~ 20 のアリール基である。該アリール基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基、ビフェニル基、アントリル基、ターフェニル基、フルオレニル基、フェナントリル基、ピレニル基、トリフェニレニル基、トリル基などが挙げられ、フェニル基、フルオレニル基、ナフチル基、ビフェニル基、アントリル基、又はターフェニル基が好ましく、フェニル基、フルオレニル基、ナフチル基がより好ましい。

【0163】

R_{T3'}、R_{T3}、R_{T4}、R_{T5}、R_{T6} で表されるヘテロアリール基としては、好ましくは、炭素数 5 ~ 8 のヘテロアリール基であり、より好ましくは、5 又は 6 員の置換若しくは無置換のヘテロアリール基であり、例えば、ピリジル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリニル基、イソキノリニル基、キナゾリニル基、シンノリニル基、フタラジニル基、キノキサリニル基、ピロリル基、インドリル基、フリル基、ベンゾフリル基、チエニル基、ベンゾチエニル基、ピラゾリル基、イミダゾリル基、ベンズイミダゾリル基、トリアゾリル基、オキサゾリル基、ベンズオキサゾリル基、チアゾリル基、ベンゾチアゾリル基、イソチアゾリル基、ベンズイソチアゾリル基、チアジアゾリル基、イソオキサゾリル基、ベンズイソオキサゾリル基、ピロリジニル基、ピペリジニル基、ピペラジニル基、イミダゾリジニル基、チアゾリニル基、スルホラ

40

50

ニル基、カルバゾリル基、ジベンゾフリル基、ジベンゾチエニル基、ピリドインドリル基などが挙げられる。好ましい例としては、ピリジル基、ピリミジニル基、イミダゾリル基、チエニル基であり、より好ましくは、ピリジル基、ピリミジニル基である。

【0164】

$R_{T3'}$ 、 R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} として好ましくは、水素原子、アルキル基、シアノ基、トリフルオロメチル基、ペルフルオロアルキル基、ジアルキルアミノ基、フッ素原子、アリール基、ヘテロアリール基であり、より好ましくは水素原子、アルキル基、シアノ基、トリフルオロメチル基、フッ素原子、アリール基であり、更に好ましくは、水素原子、アルキル基、アリール基である。置換基 T としては、アルキル基、アルコキシ基、フッ素原子、シアノ基、ジアルキルアミノ基が好ましく、水素原子がより好ましい。

10

【0165】

R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} は隣り合う任意の 2 つが互いに結合して縮合 4 ~ 7 員環を形成してもよく、該縮合 4 ~ 7 員環は、シクロアルキル、アリール又はヘテロアリールであり、該縮合 4 ~ 7 員環は更に置換基 T を有していてもよい。形成されるシクロアルキル、アリール、ヘテロアリールの定義及び好ましい範囲は $R_{T3'}$ 、 R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 、 R_{T6} で定義したシクロアルキル基、アリール基、ヘテロアリール基と同じである。

【0166】

環 Q が表す芳香族複素環としては、ピリジン環、ピラジン環、ピリミジン環、ピラゾール環、ピロール環、イミダゾール環、トリアゾール環、オキサゾール環、オキサジアゾール環、チアゾール環、チアジアゾール環、等が挙げられる。好ましくはピリジン環、ピラジン環、ピラゾール環であり、より好ましくはピリジン環又はピラゾール環である。

20

【0167】

環 Q が表す縮合芳香族複素環としては、キノリン環、イソキノリン環、キノキサリン環等が挙げられる。好ましくはキノリン環、イソキノリン環であり、より好ましくはキノリン環である。

【0168】

m は 1 ~ 3 であることが好ましく、2 又は 3 であることがより好ましい。すなわち、n は 0 又は 1 であることが好ましい。錯体中の配位子の種類は 1 又は 2 種類から構成されることが好ましく、更に好ましくは 1 種類である。錯体分子内に反応性基を導入する際には合成容易性という観点から配位子が 2 種類からなることも好ましい。

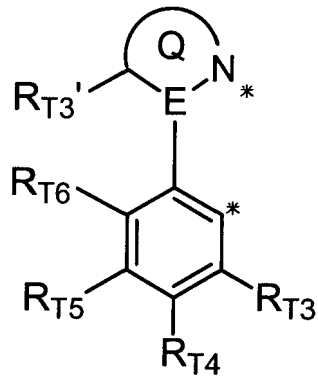
30

【0169】

一般式 (T-1) で表される金属錯体は、一般式 (T-1) における下記一般式 (T-1-A) で表される配位子若しくはその互変異性体と、(X-Y) で表される配位子若しくはその互変異性体との組み合わせを含んで構成されるか、該金属錯体の配位子の全てが下記一般式 (T-1-A) で表される配位子又はその互変異性体のみで構成されていてもよい。

【0170】

【化27】



10

【0171】

(一般式(T-1-A)中、 $R_{T3'}$ 、 R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 、 R_{T6} 、E及びQは、一般式(T-1)における、 $R_{T3'}$ 、 R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 、 R_{T6} 、E及びQと同義である。*はイリジウムへの配位位置を表す。)

【0172】

更に従来公知の金属錯体形成に用いられる、所謂配位子として当該業者が周知の配位子(配位化合物ともいう)を必要に応じて(X-Y)で表される配位子として有していてもよい。

20

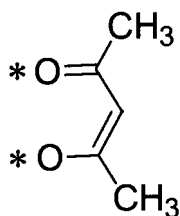
【0173】

従来公知の金属錯体に用いられる配位子としては、種々の公知の配位子があるが、例えば、「Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds」Springer-Verlag社 H. Yersin著 1987年発行、「有機金属化学-基礎と応用-」裳華房社 山本明夫著 1982年発行等に記載の配位子(例えば、ハロゲン配位子(好ましくは塩素配位子)、含窒素ヘテロアリアル配位子(例えば、ピピリジル、フェナントロリンなど)、ジケトン配位子(例えば、アセチルアセトンなど)が挙げられる。(X-Y)で表される配位子として好ましくは、ジケトン類あるいはピコリン酸誘導体であり、錯体の安定性と高い発光効率を得られる観点から以下に示されるアセチルアセトネート(acac)であることが最も好ましい。

30

【0174】

【化28】



acac

40

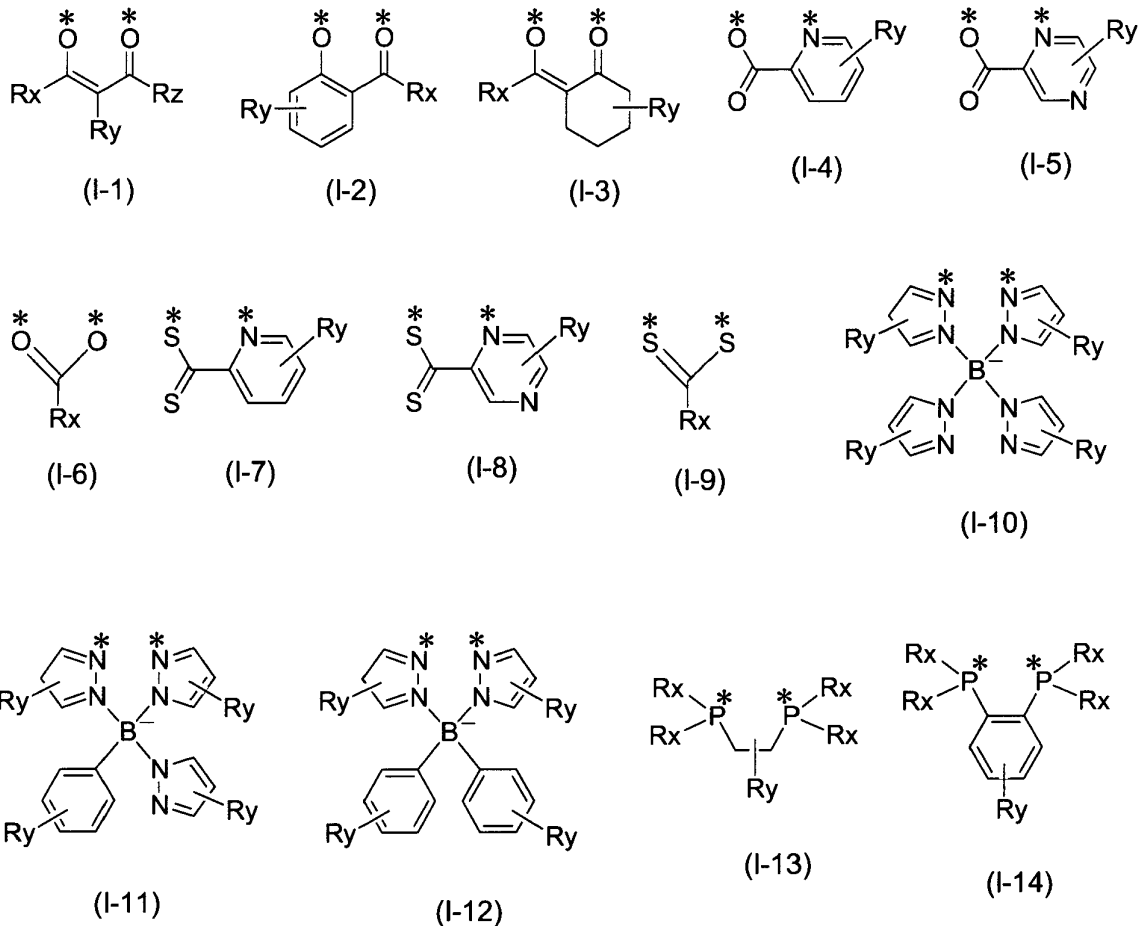
【0175】

*はイリジウムへの配位位置を表す。

以下に、(X-Y)で表される配位子の例を具体的に挙げるが、本発明はこれらに限定されない。

【0176】

【化 2 9】



10

20

【 0 1 7 7】

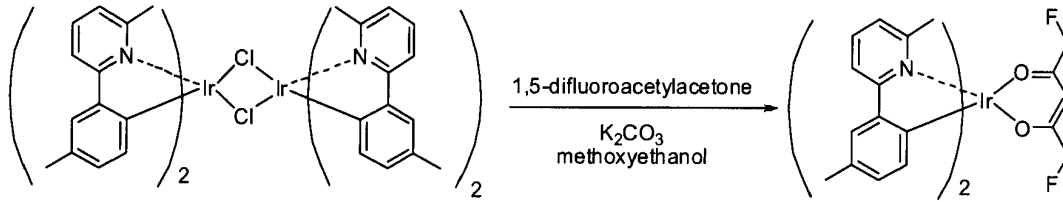
上記 (X - Y) で表される配位子の例において、* は一般式 (T - 1) におけるイリジウムへの配位位置を表す。Rx、Ry 及び Rz はそれぞれ独立に水素原子又は置換基を表す。該置換基としては前記置換基群 A から選ばれる置換基が挙げられる。好ましくは、Rx、Rz はそれぞれ独立にアルキル基、ペルフルオロアルキル基、フッ素原子、アリール基のいずれかであり、より好ましくは炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、炭素数 1 ~ 4 のペルフルオロアルキル基、フッ素原子、置換されていても良いフェニル基であり、最も好ましくはメチル基、エチル基、トリフルオロメチル基、フッ素原子、フェニル基である。Ry は好ましくは水素原子、アルキル基、ペルフルオロアルキル基、フッ素原子、アリール基のいずれかであり、より好ましくは水素原子、炭素数 1 ~ 4 のアルキル基、置換されていても良いフェニル基であり、最も好ましくは水素原子、メチル基のいずれかである。これら配位子は素子中で電荷を輸送したり励起によって電子が集中する部位ではないと考えられるため、Rx、Ry、Rz は化学的に安定な置換基であれば良く、本発明の効果にも影響を及ぼさない。錯体合成が容易であるため好ましくは (I - 1)、(I - 4)、(I - 5) であり、最も好ましくは (I - 1) である。これらの配位子を有する錯体は、対応する配位子前駆体を用いることで公知の合成例と同様に合成できる。例えば国際公開 2009 - 073245 号 46 ページに記載の方法と同様に、市販のジフルオロアセチルアセトンを用いて以下に示す方法で合成する事ができる。

30

40

【 0 1 7 8】

【化30】

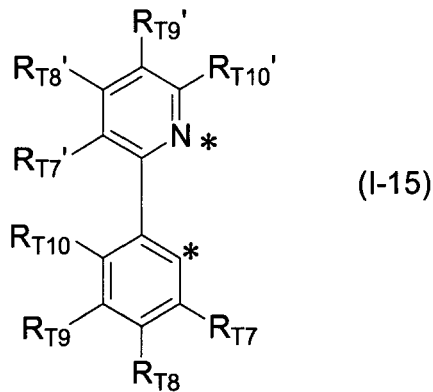


【0179】

また、配位子として一般式(I-15)に示すモノアニオン性配位子を用いる事もできる。 10

【0180】

【化31】



20

【0181】

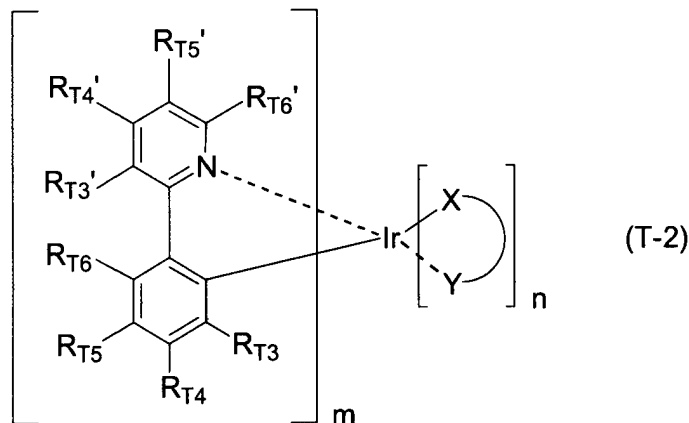
一般式(I-15)における $R_{T7} \sim R_{T10}$ は、一般式(T-1)における $R_{T3} \sim R_{T6}$ と同義であり、好ましい範囲も同様である。 $R_{T7'} \sim R_{T10'}$ は、 $R_{T3'}$ と同義であり、好ましい範囲も $R_{T3'}$ と同様である。*はイリジウムへの配位位置を表す。 30

【0182】

前記一般式(T-1)で表される化合物は、好ましくは下記一般式(T-2)で表される化合物である。

【0183】

【化32】



40

【0184】

(一般式(T-2)中、 $R_{T3'} \sim R_{T6'}$ 及び $R_{T3} \sim R_{T6}$ はそれぞれ独立に、 50

水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、 $-CN$ 、ペルフルオロアルキル基、トリフルオロビニル基、 $-CO_2R_T$ 、 $-C(O)R_T$ 、 $-N(R_T)_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-OR_T$ 、フッ素原子、アリール基又はヘテロアリール基を表し、更に置換基Tを有していてもよい。

R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} は隣り合う任意の2つが互いに結合して縮合4~7員環を形成してもよく、該縮合4~7員環は更に置換基Zを有していてもよい。

R_{T3}' と R_{T6} は、 $-C(R_T)_2-C(R_T)_2-$ 、 $-CR_T=CR_T-$ 、 $-C(R_T)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-NR_T-$ 、 $-O-C(R_T)_2-$ 、 $-NR_T-C(R_T)_2-$ 及び $-N=CR_T-$ から選択される連結基によって連結されて環を形成してもよい。

R_T はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し、更に置換基Tを有していてもよい。

10

置換基Tはそれぞれ独立に、フッ素原子、 $-R'$ 、 $-OR'$ 、 $-N(R')_2$ 、 $-SR'$ 、 $-C(O)R'$ 、 $-C(O)OR'$ 、 $-C(O)N(R')_2$ 、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-SO_2$ 、 $-SOR'$ 、 $-SO_2R'$ 、又は $-SO_3R'$ を表し、 R' はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、ペルフルオロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基又はヘテロアリール基を表す。

($X-Y$)は、配位子を表す。 m は1~3の整数、 n は0~2の整数を表す。 $m+n$ は3である。)

【0185】

20

一般式(T-2)における R_{T3}' 、 $R_{T3} \sim R_{T6}$ 、($X-Y$)、 m 及び n の好ましい範囲は、一般式(T-1)における R_{T3}' 、 $R_{T3} \sim R_{T6}$ 、($X-Y$)、 m 及び n の好ましい範囲と同様である。

R_{T4}' は水素原子、アルキル基、アリール基、フッ素原子が好ましく、水素原子がより好ましい。

R_{T5}' 及び R_{T6}' は水素原子を表すか、又は互いに結合して縮合4~7員環式基を形成することが好ましく、該縮合4~7員環式基は、シクロアルキル、シクロヘテロアルキル、アリール、又はヘテロアリールであることがより好ましく、アリールであることが更に好ましい。

$R_{T4}' \sim R_{T6}'$ における置換基Tとしてはアルキル基、アルコキシ基、フッ素原子、シアノ基、アルキルアミノ基、ジアリールアミノ基が好ましく、アルキル基がより好ましい。

30

【0186】

前記一般式(T-2)で表される化合物の好ましい形態の一つは、一般式(T-2)において R_{T3}' 、 R_{T4}' 、 R_{T5}' 、 R_{T6}' 、 R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} のうち、隣り合う任意の2つが互いに結合して縮合環を形成しない場合である。

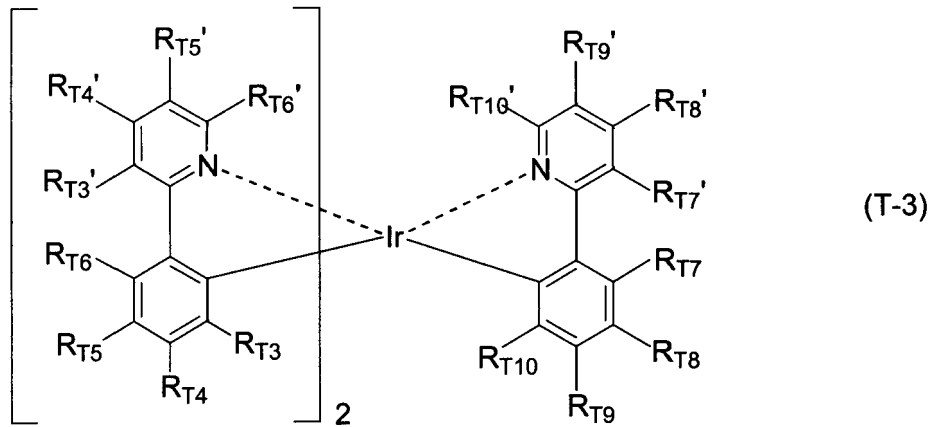
【0187】

前記一般式(T-2)で表される化合物の好ましい形態の一つは、下記一般式(T-3)で表される場合である。

【0188】

40

【化33】



10

【0189】

一般式(T-3)における $R_{T3}' \sim R_{T6}'$ 、 $R_{T3} \sim R_{T6}$ は、一般式(T-2)における $R_{T3}' \sim R_{T6}'$ 、 $R_{T3} \sim R_{T6}$ と同義であり、好ましい範囲も同様である。

$R_{T7} \sim R_{T10}$ は、 $R_{T3} \sim R_{T6}$ と同義であり、好ましい範囲も同様である。 $R_{T7}' \sim R_{T10}'$ は、 $R_{T3}' \sim R_{T6}'$ と同義であり、好ましい範囲も同様である。

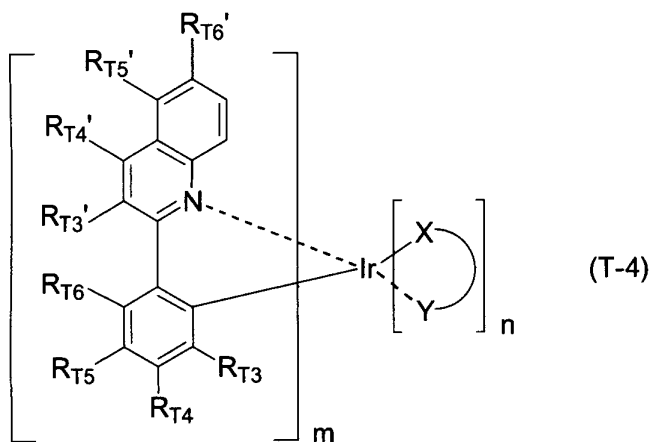
20

【0190】

前記一般式(T-2)で表される化合物の好ましい別の形態は、下記一般式(T-4)で表される化合物である。

【0191】

【化34】



30

【0192】

一般式(T-4)における $R_{T3}' \sim R_{T6}'$ 、 $R_{T3} \sim R_{T6}$ 、(X-Y)、m及びnは、一般式(T-2)における $R_{T3}' \sim R_{T6}'$ 、 $R_{T3} \sim R_{T6}$ 、(X-Y)、m及びnと同義であり、好ましい範囲も同様である。 $R_{T3}' \sim R_{T6}'$ 及び $R_{T3} \sim R_{T6}$ のうち、0~2つがアルキル基又はフェニル基で残りが全て水素原子である場合が特に好ましく、 $R_{T3}' \sim R_{T6}'$ 及び $R_{T3} \sim R_{T6}$ のうち、1つ又は2つがアルキル基で残りが全て水素原子である場合が更に好ましい。

40

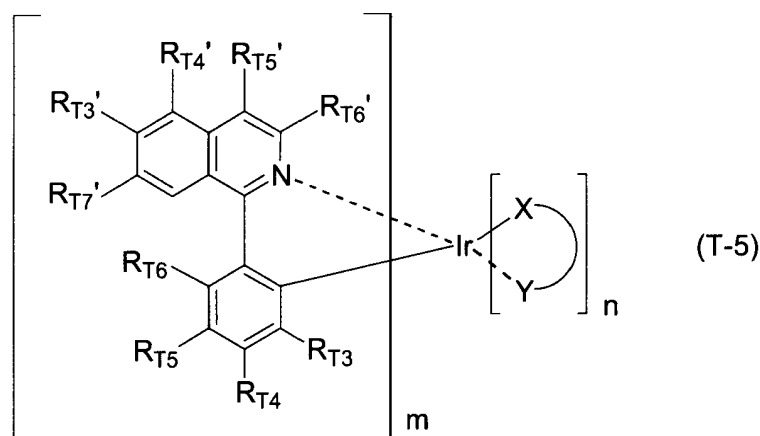
【0193】

前記一般式(T-2)で表される化合物の好ましい別の形態は、下記一般式(T-5)で表される化合物である。

50

【 0 1 9 4 】

【 化 3 5 】



10

【 0 1 9 5 】

一般式 (T - 5) における $R_{T3}' \sim R_{T7}'$ 、 $R_{T3} \sim R_{T6}$ 、 $(X - Y)$ 、 m 及び n は、一般式 (T - 2) における $R_{T3}' \sim R_{T6}'$ 、 $R_{T3} \sim R_{T6}$ 、 $(X - Y)$ 、 m 及び n と同義であり、好ましいものも同様である。

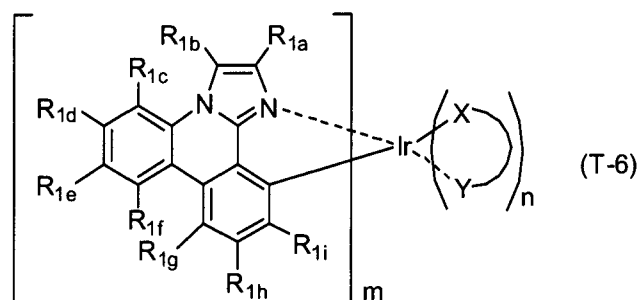
20

【 0 1 9 6 】

一般式 (T - 1) で表される化合物の好ましい別の形態は、下記一般式 (T - 6) で表される場合である。

【 0 1 9 7 】

【 化 3 6 】



30

【 0 1 9 8 】

一般式 (T - 6) 中、 $R_{1a} \sim R_{1i}$ の定義や好ましい範囲は一般式 (T - 1) における $R_{T3} \sim R_{T6}$ におけるものと同様である。また $R_{1a} \sim R_{1i}$ のうち、 $0 \sim 2$ つがアルキル基又はアリアル基で残りが全て水素原子である場合が特に好ましい。 $(X - Y)$ 、 m 、及び n の定義や好ましい範囲は一般式 (T - 1) における $(X - Y)$ 、 m 、及び n と同様である。

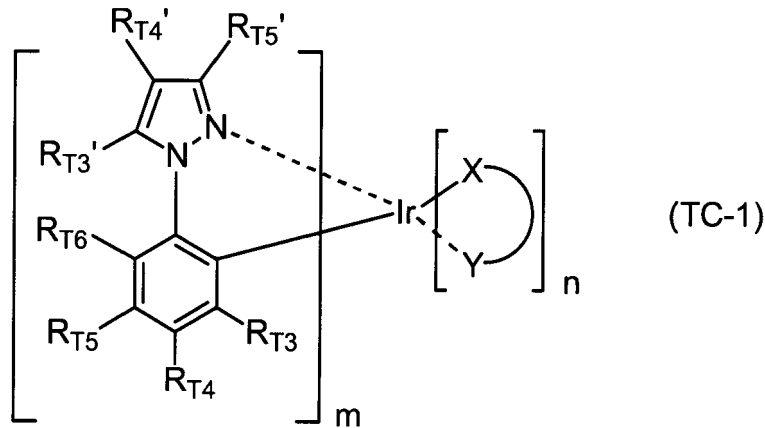
40

【 0 1 9 9 】

一般式 (T - 1) で表される化合物の好ましい別の形態は、下記一般式 (T C - 1) で表される場合である。

【 0 2 0 0 】

【化 3 7】



10

【0201】

(一般式(TC-1)中、 $R_{T3'}$ ~ $R_{T5'}$ 及び R_{T3} ~ R_{T6} はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シアノ基、ペルフルオロアルキル基、トリフルオロビニル基、 $-CO_2R_T$ 、 $-C(O)R_T$ 、 $-N(R_T)_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-OR_T$ 、ハロゲン原子、アリール基又はヘテロアリール基を表し、更に置換基Tを有していてもよい。

20

R_{T3} 、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} は隣り合う任意の2つが互いに結合して縮合4~7員環を形成してもよく、該縮合4~7員環は更に置換基Tを有していてもよい。

$R_{T3'}$ 、 $R_{T4'}$ 、及び $R_{T5'}$ は隣り合う任意の2つが互いに結合して縮合4~7員環を形成してもよく、該縮合4~7員環は更に置換基Tを有していてもよい。

$R_{T3'}$ と R_{T6} は、 $-C(R_T)_2-C(R_T)_2-$ 、 $-CR_T=CR_T-$ 、 $-C(R_T)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-NR_T-$ 、 $-O-C(R_T)_2-$ 、 $-NR_T-C(R_T)_2-$ 及び $-N=CR_T-$ から選択される連結基によって連結されて環を形成してもよい。

R_T はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し、更に置換基Tを有していてもよい。

30

置換基Tはそれぞれ独立に、フッ素原子、 $-R'$ 、 $-OR'$ 、 $-N(R')_2$ 、 $-SR'$ 、 $-C(O)R'$ 、 $-C(O)OR'$ 、 $-C(O)N(R')_2$ 、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-SO_2$ 、 $-SOR'$ 、 $-SO_2R'$ 、又は $-SO_3R'$ を表し、 R' はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、ペルフルオロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基又はヘテロアリール基を表す。

(X-Y)は、配位子を表す。mは1~3の整数、nは0~2の整数を表す。m+nは3である。)

【0202】

一般式(TC-1)における $R_{T3'}$ 、 R_{T3} ~ R_{T6} 、(X-Y)、m及びnの好ましい範囲は、一般式(T-1)における $R_{T3'}$ 、 R_{T3} ~ R_{T6} 、(X-Y)、m及びnの好ましい範囲と同様である。

40

$R_{T4'}$ は水素原子、アルキル基、アリール基が好ましく、水素原子又はアリール基がより好ましい。該アリール基として、好ましくは炭素数6から30の置換若しくは無置換のアリール基であり、より好ましくは炭素数6~20のアリール基である。該アリール基としては、例えば、フェニル基、ナフチル基、ピフェニル基、アントリル基、ターフェニル基、フルオレニル基、フェナントリル基、ピレニル基、トリフェニレニル基、トリル基などが挙げられ、フェニル基、フルオレニル基、ナフチル基、ピフェニル基、トリフェニレニル基、アントリル基、又はターフェニル基が好ましく、フェニル基、ピフェニル基、ナフチル基、トリフェニレニル基がより好ましい。

【0203】

50

R_{T5} は水素原子、アルキル基、又はアリール基が好ましく、水素原子又はアルキル基がより好ましい。該アルキル基として、好ましくは炭素数 1 ~ 10 であり、例えばメチル基、エチル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基、*n*-オクチル基、*n*-デシル基、*n*-ヘキサデシル基、シクロプロピル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、ネオペンチル基などが挙げられ、好ましくはメチル基、エチル基、イソプロピル基、*t*-ブチル基であり、より好ましくはメチル基である。

【0204】

前記一般式 (TC-1) の好ましい形態の一つは、 R_{T4} 、 R_{T5} 及び R_{T6} のうち、隣り合う任意の 2 つが互いに結合して縮合環を形成する場合である。該環としてはシクロアルキル、シクロヘテロアルキル、アリール、又はヘテロアリールであることがより好ましい。特に、 R_{T4} 、 R_{T5} が互いに結合してヘテロアリール環を形成することが好ましい。

10

【0205】

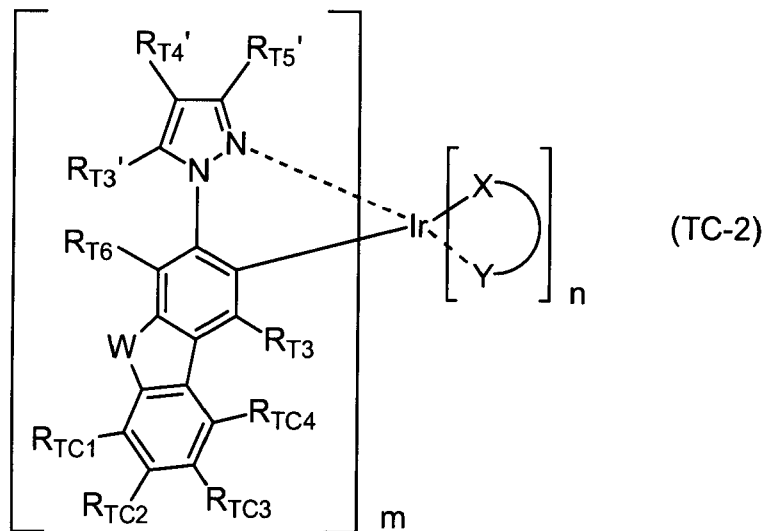
一般式 (TC-1) において、 m は 3 であることが好ましく、 n は 0 であることが好ましい。

【0206】

一般式 (TC-1) は、好ましくは下記一般式 (TC-2) である。

【0207】

【化38】



20

30

【0208】

(一般式 (TC-2) 中、 $R_{T3'}$ ~ $R_{T5'}$ 、 R_{T3} 、 R_{T6} 、及び R_{TC1} ~ R_{TC4} はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シアノ基、ペルフルオロアルキル基、トリフルオロビニル基、 $-CO_2R_T$ 、 $-C(O)R_T$ 、 $-N(R_T)_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-OR_T$ 、ハロゲン原子、アリール基又はヘテロアリール基を表し、更に置換基 T を有していてもよい。

40

$R_{T3'}$ 、 $R_{T4'}$ 、及び $R_{T5'}$ は隣り合う任意の 2 つが互いに結合して縮合 4 ~ 7 員環を形成してもよく、該縮合 4 ~ 7 員環は更に置換基 T を有していてもよい。

$R_{T3'}$ と R_{T6} は、 $-C(R_T)_2-C(R_T)_2-$ 、 $-CR_T=CR_T-$ 、 $-C(R_T)_2-$ 、 $-O-$ 、 $-NR_T-$ 、 $-O-C(R_T)_2-$ 、 $-NR_T-C(R_T)_2-$ 及び $-N=CR_T-$ から選択される連結基によって連結されて環を形成してもよい。

R_T はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基、又はヘテロアリール基を表し、更に置換基 T を有していてもよい。

置換基 T はそれぞれ独立に、フッ素原子、 $-R'$ 、 $-OR'$ 、 $-N(R')_2$ 、 $-SR$

50

'、 $-C(O)R'$ 、 $-C(O)OR'$ 、 $-C(O)N(R')_2$ 、 $-CN$ 、 $-NO_2$ 、 $-SO_2$ 、 $-SOR'$ 、 $-SO_2R'$ 、又は $-SO_3R'$ を表し、 R' はそれぞれ独立に、水素原子、アルキル基、ペルフルオロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ヘテロアルキル基、アリール基又はヘテロアリール基を表す。

Wは、水素原子若しくは置換基Tが結合した炭素原子、酸素原子、又は硫黄原子を表す。

(X-Y)は、配位子を表す。mは1~3の整数、nは0~2の整数を表す。m+nは3である。)

【0209】

一般式(TC-2)における $R_{T3}' \sim R_{T5}'$ 、 R_{T3} 及び R_{T6} 、(X-Y)、m及びnの好ましい範囲は、一般式(TC-1)における $R_{T3}' \sim R_{T5}'$ 、 R_{T3} 及び R_{T6} 、(X-Y)、m及びnの好ましい範囲と同様である。

10

$R_{TC1} \sim R_{TC4}$ の好ましい範囲は R_{T3} の好ましい範囲と同様であり、水素原子、アルキル基、アリール基であることが好ましく、水素原子であることがより好ましい。

Wは置換基Tを有する炭素原子であることが好ましく、該置換基Tとしてはアルキル基が好ましく、該アルキル基としては、好ましくはメチル基、エチル基、イソプロピル基、t-ブチル基であり、より好ましくはメチル基である。

また、一般式(TC-1)については特開2008-147353号公報にも記載されている。

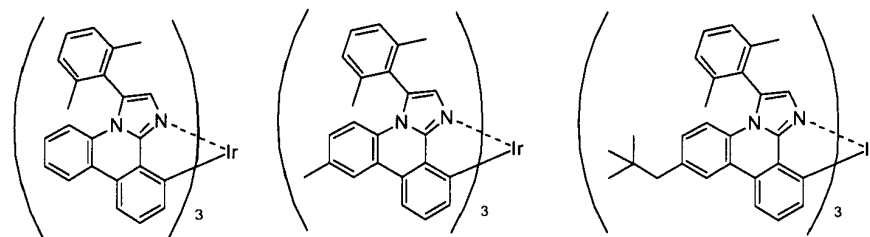
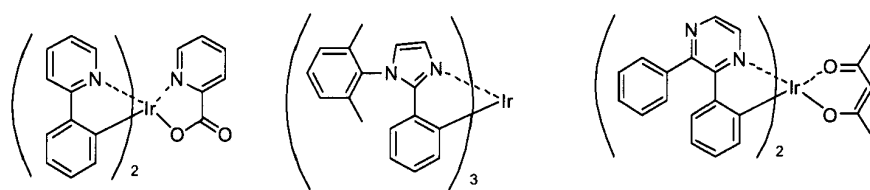
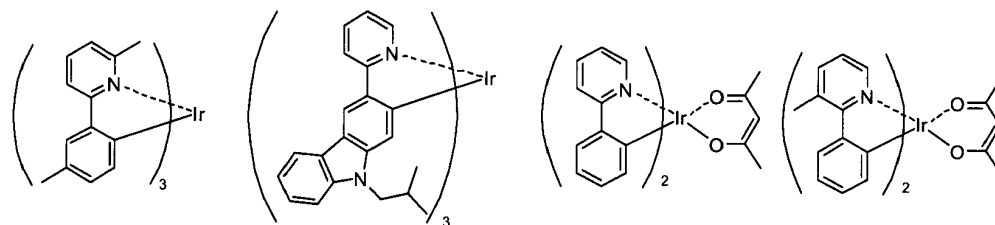
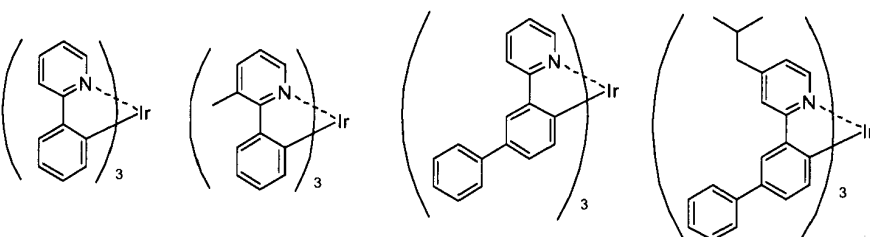
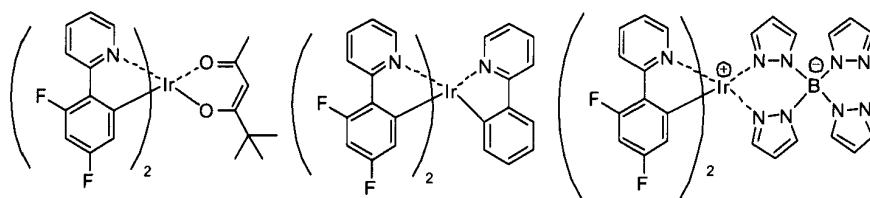
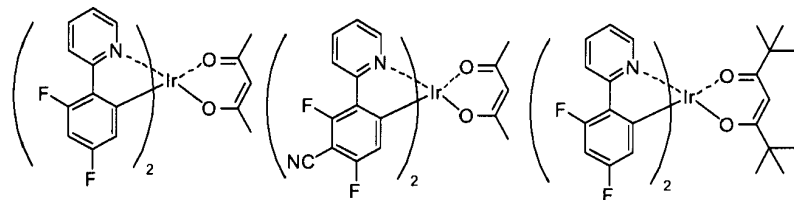
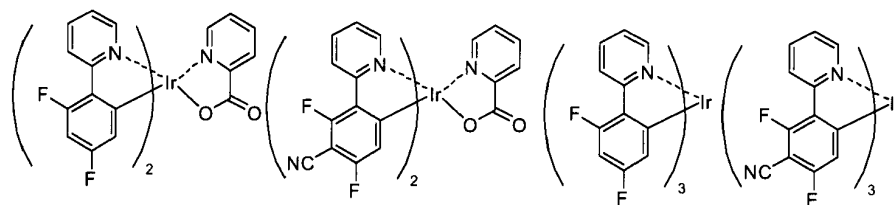
【0210】

20

一般式(T-1)で表される化合物の好ましい具体例を以下に列挙するが、以下に限定されるものではない。

【0211】

【化 3 9】



【 0 2 1 2 】

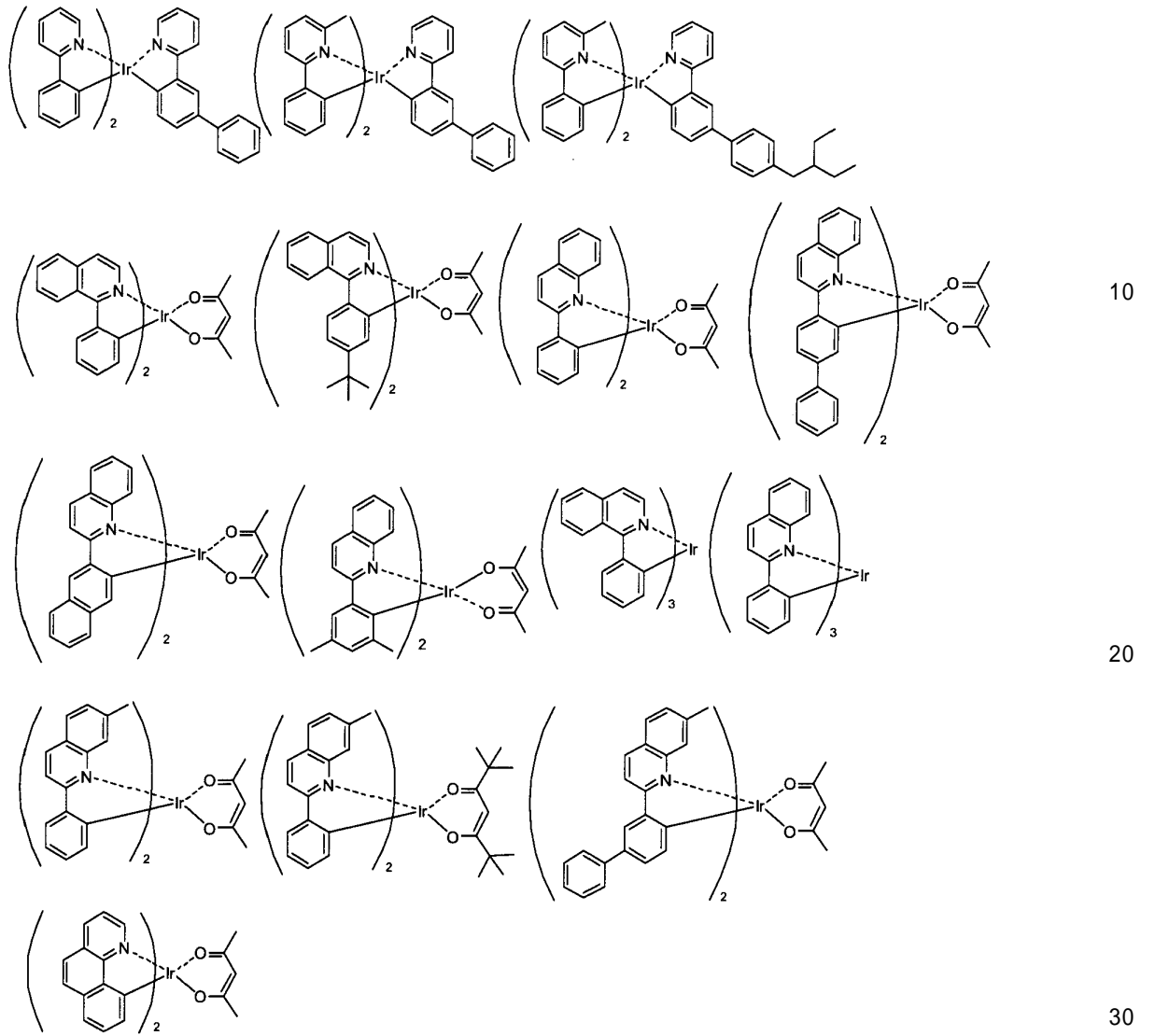
10

20

30

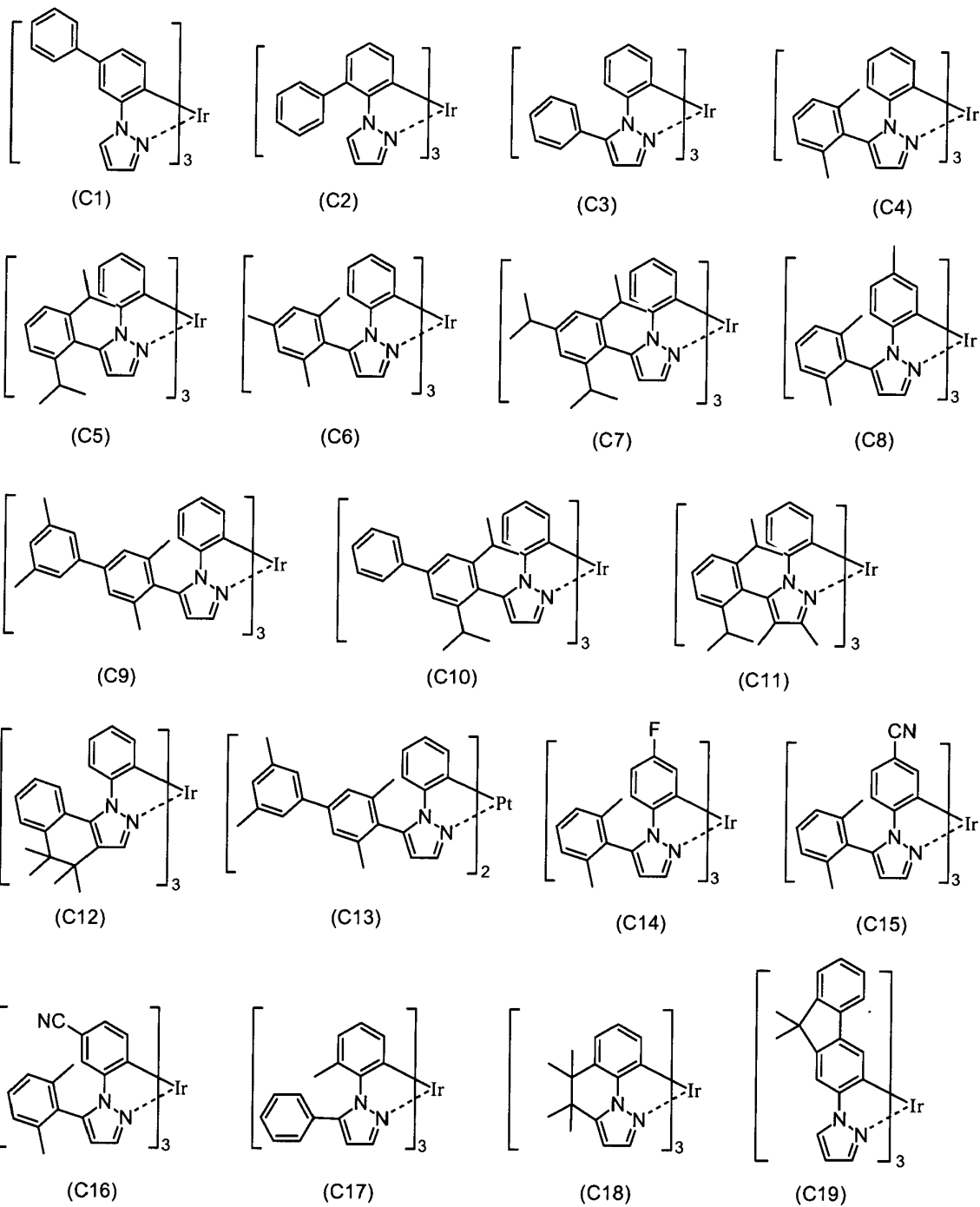
40

【化 4 0】



【 0 2 1 3 】

【化 4 1】



10

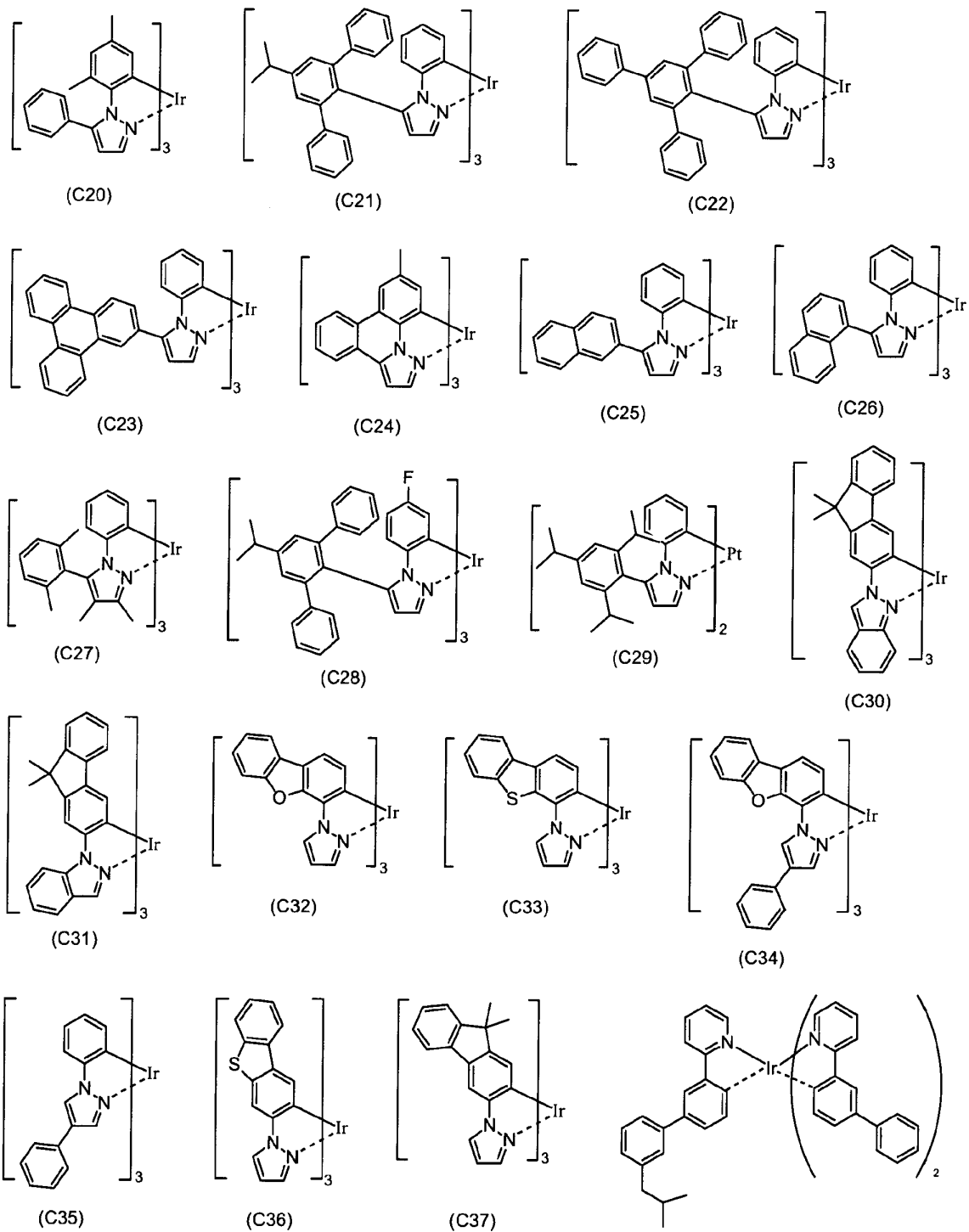
20

30

【 0 2 1 4 】

40

【化42】



10

20

30

40

【0215】

上記一般式(T-1)で表される化合物として例示した化合物は、特開2009-99783号公報に記載の方法や、米国特許7279232号等に記載の種々の方法で合成できる。合成後、カラムクロマトグラフィー、再結晶等による精製を行った後、昇華精製により精製することが好ましい。昇華精製により、有機不純物を分離できるだけでなく、無機塩や残留溶媒等を効果的に取り除くことができる。

【0216】

一般式(T-1)で表される化合物は、発光層に含有されるが、その用途が限定されることはなく、更に有機層内のいずれの層に更に含有されてもよい。

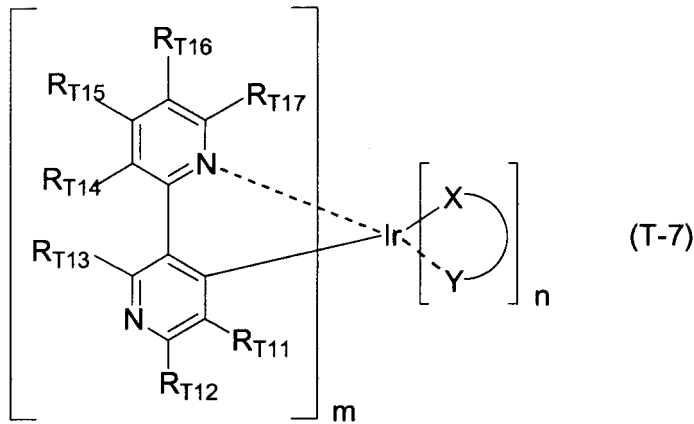
50

【 0 2 1 7 】

イリジウム錯体として、一般式 (T - 1) で表される化合物以外に、下記一般式 (T - 7) で表される化合物や、カルベンを配位子として有するものも好ましく用いることができる。

【 0 2 1 8 】

【 化 4 3 】



10

【 0 2 1 9 】

一般式 (T - 7) 中、 $R_{T11} \sim R_{T17}$ は、一般式 (T - 2) における $R_{T3} \sim R_{T6}$ と同義であり、好ましい範囲も同様である。また、(X - Y)、 n 、及び m は一般式 (T - 2) における (X - Y)、 n 、及び m と同義であり、好ましい範囲も同様である。

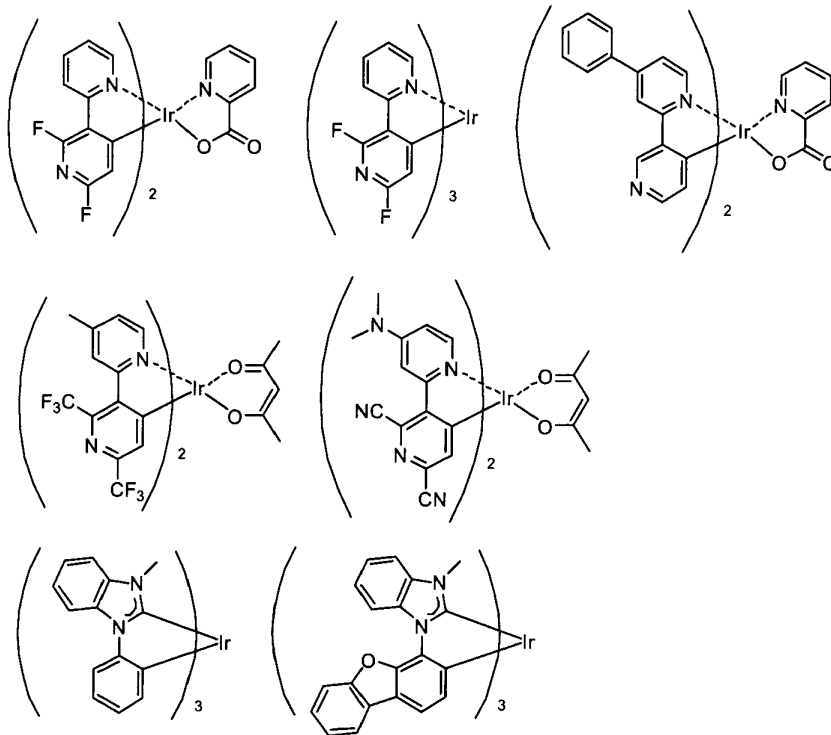
20

【 0 2 2 0 】

これらの好ましい具体例を以下に列挙するが、以下に限定されるものではない。

【 0 2 2 1 】

【 化 4 4 】



30

40

【 0 2 2 2 】

発光層中の発光材料は、発光層中に一般的に発光層を形成する全化合物質量に対して、

50

0.1質量%～50質量%含有されるが、耐久性、外部量子効率の観点から1質量%～50質量%含有されることが好ましく、2質量%～40質量%含有されることがより好ましい。

【0223】

発光層の厚さは、特に限定されるものではないが、通常、2nm～500nmであるのが好ましく、中でも、外部量子効率の観点で、3nm～200nmであるのがより好ましく、5nm～100nmであるのが更に好ましい。

【0224】

本発明の素子における発光層は、ホスト材料と発光材料の混合層とした構成でも良い。発光材料は蛍光発光材料でも燐光発光材料であっても良く、ドーパントは一種であっても二種以上であっても良い。ホスト材料は電荷輸送材料であることが好ましい。ホスト材料は一種であっても二種以上であっても良く、例えば、電子輸送性のホスト材料とホール輸送性のホスト材料を混合した構成が挙げられる。更に、発光層中に電荷輸送性を有さず、発光しない材料を含んでいても良い。

10

また、発光層は一層であっても二層以上の多層であってもよい。また、それぞれの発光層が異なる発光色で発光してもよい。

【0225】

<ホスト材料>

本発明に用いられるホスト材料は、一般式(1)で表される化合物であることが好ましい。

20

【0226】

本発明に用いられるホスト材料として、一般式(1)で表される化合物の他、以下の化合物を含有していても良い。

ホスト材料は電子輸送材料及びホール輸送性材料を上げることができ、電荷輸送材料であることが好ましい。ホスト材料は1種であっても2種以上であっても良く、例えば、電子輸送性のホスト材料とホール輸送性のホスト材料を混合した構成が挙げられる。

例えば、ピロール、インドール、カルバゾール(例えばCBP(4,4'-ジ(9-カルバゾリル)ピフェニル)、3,3'-ジ(9-カルバゾリル)ピフェニル)、アザインドール、アザカルバゾール、トリアゾール、オキサゾール、オキサジアゾール、ピラゾール、イミダゾール、チオフェン、ポリアリールアルカン、ピラゾリン、ピラゾロン、フェニレンジアミン、アリールアミン、アミノ置換カルコン、スチリルアントラセン、フルオレノン、ヒドラゾン、スチルベン、シラザン、芳香族第三級アミン化合物、スチリルアミン化合物、ポルフィリン系化合物、ポリシラン系化合物、ポリ(N-ビニルカルバゾール)、アニリン系共重合体、チオフェンオリゴマー、ポリチオフェン等の導電性高分子オリゴマー、有機シラン、カーボン膜、ピリジン、ピリミジン、トリアジン、イミダゾール、ピラゾール、トリアゾール、オキサゾール、オキサジアゾール、フルオレノン、アントラキノジメタン、アントロン、ジフェニルキノン、チオピランジオキシド、カルボジイミド、フルオレニリデンメタン、ジスチリルピラジン、フッ素置換芳香族化合物、ナフタレンペリレン等の複素環テトラカルボン酸無水物、フタロシアニン、8-キノリノール誘導体の金属錯体やメタルフタロシアニン、ベンゾオキサゾールやベンゾチアゾールを配位子とする金属錯体に代表される各種金属錯体及びそれらの誘導体(置換基や縮環を有していてもよい)等を上げることができる。

30

40

【0227】

本発明における発光層において、前記ホスト材料三重項最低励起エネルギー(T_1 エネルギー)が、前記燐光発光材料の T_1 エネルギーより高いことが色純度、発光効率、駆動耐久性の点で好ましい。

【0228】

また、本発明におけるホスト化合物の含有量は、特に限定されるものではないが、発光効率、駆動電圧の観点から、発光層を形成する全化合物質量に対して15質量%以上95質量%以下であることが好ましい。

50

【 0 2 2 9 】

(電荷輸送層)

電荷輸送層とは、有機電界発光素子に電圧を印加した際に電荷移動が起こる層をいう。具体的には正孔注入層、正孔輸送層、電子ブロック層、発光層、正孔ブロック層、電子輸送層又は電子注入層が挙げられる。好ましくは、正孔注入層、正孔輸送層、電子ブロック層又は発光層である。塗布法により形成される電荷輸送層が正孔注入層、正孔輸送層、電子ブロック層又は発光層であれば、低コストかつ高効率な有機電界発光素子の製造が可能となる。また、電荷輸送層として、より好ましくは、正孔注入層、正孔輸送層又は電子ブロック層である。

【 0 2 3 0 】

(正孔注入層、正孔輸送層)

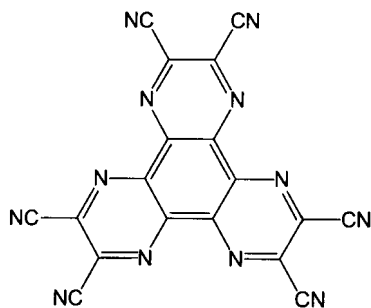
正孔注入層、正孔輸送層は、陽極又は陽極側から正孔を受け取り陰極側に輸送する機能を有する層である。

正孔注入層、正孔輸送層については、例えば、特開 2 0 0 8 - 2 7 0 7 3 6、特開 2 0 0 7 - 2 6 6 4 5 8 に詳述されており、これらの公報に記載の事項を本発明に適用することができる。

また、下記化合物も正孔注入材料として好ましく用いることができる。

【 0 2 3 1 】

【化 4 5】



【 0 2 3 2 】

正孔注入層には電子受容性ドーパントを含有することが好ましい。正孔注入層に電子受容性ドーパントを含有することにより、正孔注入性が向上し、駆動電圧が低下する、効率が向上するなどの効果がある。電子受容性ドーパントとは、ドーパされる材料から電子を引き抜き、ラジカルカチオンを発生させることが可能な材料であれば有機材料、無機材料のうちいかなるものでもよいが、例えば、テトラシアノキノジメタン (TCNQ)、テトラフルオロテトラシアノキノジメタン (F₄-TCNQ)、酸化モリブデンなどが挙げられる。

【 0 2 3 3 】

正孔注入層中の電子受容性ドーパントは、正孔注入層を形成する全化合物質量に対して、0.1質量%~50質量%含有されることが好ましく、0.1質量%~40質量%含有されることがより好ましく、0.5質量%~30質量%含有されることがより好ましい。

【 0 2 3 4 】

(電子注入層、電子輸送層)

電子注入層、電子輸送層は、陰極又は陰極側から電子を受け取り陽極側に輸送する機能を有する層である。これらの層に用いる電子注入材料、電子輸送材料は低分子化合物であっても高分子化合物であってもよい。

電子注入層、電子輸送層については、例えば、特開 2 0 0 8 - 2 7 0 7 3 6、特開 2 0 0 7 - 2 6 6 4 5 8 に詳述されており、これらの公報に記載の事項を本発明に適用することができる。

本発明の素子においては、電子輸送層には前記一般式 (E - 1) で表される化合物を含

10

20

30

40

50

有することが好ましい。

電子注入層には電子供与性ドーパントを含有することが好ましい。電子注入層に電子供与性ドーパントを含有させることにより、電子注入性が向上し、駆動電圧が低下する、効率が向上するなどの効果がある。電子供与性ドーパントとは、ドーパされる材料に電子を与え、ラジカルアニオンを発生させることが可能な材料であれば有機材料、無機材料のうちいかなるものでもよいが、例えば、テトラシアフルバレン(TTF)、テトラシアナフタセン(TTT)、リチウム、セシウムなどが挙げられる。

【0235】

電子注入層中の電子供与性ドーパントは、電子注入層を形成する全化合物質量に対して、0.1質量%~50質量%含有されることが好ましく、0.1質量%~40質量%含有されることがより好ましく、0.5質量%~30質量%含有されることがより好ましい。

10

【0236】

正孔注入層に電子受容性ドーパントを、電子注入層に電子供与性ドーパントを含有させることで、一般に電極からの電荷注入を促進し、駆動電圧を低下させることが可能となるが、それらにより素子内の電荷バランスがくずれると、発光位置が変化し、発光効率の低下や駆動耐久性の低下、高輝度駆動時の各種変化が促進される場合がある。本発明の素子は陰極側の発光層隣接層/発光層界面での電荷注入障壁や発光層や陰極側の発光層隣接層における電荷トラップが小さいため素子中での電荷の蓄積が起こりにくい、陰極側の発光層隣接層の電子移動度と発光層のホール移動度及び電子移動度のバランスが良い、等の理由により、電荷注入量の変化に対して電荷のバランスがくずれにくい素子であるため、正孔注入層に電子受容性ドーパントを、電子注入層に電子供与性ドーパントを含有させることで、効率、耐久性、高輝度駆動時の各種変化等を悪化させることなく駆動電圧を低下させることができる。

20

【0237】

(正孔ブロック層)

正孔ブロック層は、陽極側から発光層に輸送された正孔が、陰極側に通りぬけることを防止する機能を有する層である。本発明において、発光層と陰極側で隣接する有機層として、正孔ブロック層を設けることができる。

正孔ブロック層を構成する有機化合物の例としては、本発明における一般式(1)で表される化合物のほか、アルミニウム(III)ビス(2-メチル-8-キノリナト)4-フェニルフェノレート(Aluminum(III)bis(2-methyl-8-quinolinato)4-phenylphenolate(BAlqと略記する))等のアルミニウム錯体、トリアゾール誘導体、2,9-ジメチル-4,7-ジフェニル-1,10-フェナントロリン(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline(BCPと略記する))等のフェナントロリン誘導体、トリフェニレン誘導体、カルバゾール誘導体等が挙げられる。

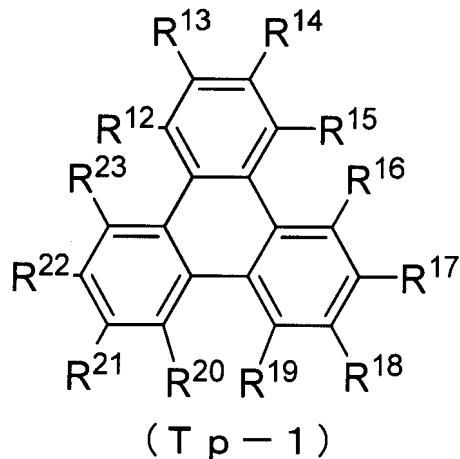
30

前記トリフェニレン誘導体は例えば国際公開第05/013388号、国際公開第06/130598号、国際公開第09/021107号に記載されている。トリフェニレン誘導体は、下記一般式(Tp-1)で表される化合物が好ましい。

【0238】

40

【化 4 6】



10

【0239】

(一般式(T_p - 1)において、R^{1 2} ~ R^{2 3}はそれぞれ独立に水素原子、アルキル基又はアルキル基、フェニル基、フルオレニル基、ナフチル基、若しくはトリフェニレニル基で置換されていてもよいフェニル基、フルオレニル基、ナフチル基、若しくはトリフェニレニル基を表す。ただし、R^{1 2} ~ R^{2 3}が全て水素原子になることはない。)

【0240】

R^{1 2} ~ R^{2 3}が表すアルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、イソプロピル基、n - ブチル基、t - ブチル基、n - オクチル基、n - デシル基、n - ヘキサデシル基、シクロプロピル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基などが挙げられ、好ましくはメチル基、エチル基、イソプロピル基、t - ブチル基、シクロヘキシル基であり、より好ましくはメチル基、エチル基、又はt - ブチル基である。

20

【0241】

R^{1 2} ~ R^{2 3}として好ましくは、炭素数1 ~ 4のアルキル基又は炭素数1 ~ 4のアルキル基、フェニル基、フルオレニル基、ナフチル基、若しくはトリフェニレニル基(これらは更にアルキル基、フェニル基、フルオレニル基、ナフチル基、若しくはトリフェニレニル基で置換されていてもよい)で置換されていてもよい、フェニル基、フルオレニル基、ナフチル基、若しくはトリフェニレニル基であることが更に好ましい。

30

正孔ブロック層の厚さとしては、1 nm ~ 500 nmであるのが好ましく、5 nm ~ 200 nmであるのがより好ましく、10 nm ~ 100 nmであるのが更に好ましい。

正孔ブロック層は、上述した材料の一種又は二種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

【0242】

(電子ブロック層)

電子ブロック層は、陰極側から発光層に輸送された電子が、陽極側に通りぬけることを防止する機能を有する層である。本発明において、発光層と陽極側で隣接する有機層として、電子ブロック層を設けることができる。

40

電子ブロック層を構成する有機化合物の例としては、例えば前述の正孔輸送材料として挙げたものが適用できる。

電子ブロック層の厚さとしては、1 nm ~ 500 nmであるのが好ましく、5 nm ~ 200 nmであるのがより好ましく、10 nm ~ 100 nmであるのが更に好ましい。

電子ブロック層は、上述した材料の一種又は二種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成又は異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。

【0243】

(保護層)

本発明において、有機EL素子全体は、保護層によって保護されていてもよい。

保護層に含まれる材料としては、水分や酸素等の素子劣化を促進するものが素子内に入

50

ることを抑止する機能を有しているものであればよい。

保護層については、特開 2008-270736 号公報の段落番号〔0169〕～〔0170〕に記載の事項を本発明に適用することができる。

【0244】

(封止容器)

本発明の素子は、封止容器を用いて素子全体を封止してもよい。

封止容器については、特開 2008-270736 号公報の段落番号〔0171〕に記載の事項を本発明に適用することができる。

また、封止容器と発光素子の間の空間に水分吸収剤又は不活性液体を封入してもよい。水分吸収剤としては、特に限定されることはないが、例えば、酸化バリウム、酸化ナトリウム、酸化カリウム、酸化カルシウム、硫酸ナトリウム、硫酸カルシウム、硫酸マグネシウム、五酸化リン、塩化カルシウム、塩化マグネシウム、塩化銅、フッ化セシウム、フッ化ニオブ、臭化カルシウム、臭化バナジウム、モレキュラーシーブ、ゼオライト、酸化マグネシウム等を挙げることができる。不活性液体としては、特に限定されることはないが、例えば、パラフィン類、流動パラフィン類、ペルフルオロアルカンやペルフルオロアミン、ペルフルオロエーテル等のフッ素系溶剤、塩素系溶剤、シリコンオイル類が挙げられる。

10

【0245】

(駆動)

本発明の有機電界発光素子は、陽極と陰極との間に直流(必要に応じて交流成分を含んでもよい)電圧(通常 2 ボルト～15 ボルト)、又は直流電流を印加することにより、発光を得ることができる。

20

本発明の有機電界発光素子の駆動方法については、特開平 2-148687 号、同 6-301355 号、同 5-29080 号、同 7-134558 号、同 8-234685 号、同 8-241047 号の各公報、特許第 2784615 号、米国特許 5828429 号、同 6023308 号の各明細書等に記載の駆動方法を適用することができる。

【0246】

本発明の有機電界発光素子の外部量子効率としては、5%以上が好ましく、7%以上がより好ましい。外部量子効率の値は 20 で素子を駆動したときの外部量子効率の最大値、若しくは、20 で素子を駆動したときの 100～300 cd/m² 付近での外部量子効率の値を用いることができる。

30

【0247】

本発明の有機電界発光素子の内部量子効率は、30%以上であることが好ましく、50%以上が更に好ましく、70%以上が更に好ましい。素子の内部量子効率は、外部量子効率を光取り出し効率で除して算出される。通常の有機 EL 素子では光取り出し効率は約 20%であるが、基板の形状、電極の形状、有機層の膜厚、無機層の膜厚、有機層の屈折率、無機層の屈折率等を工夫することにより、光取り出し効率を 20%以上にすることが可能である。

【0248】

本発明の有機電界発光素子は、350 nm 以上 700 nm 以下に極大発光波長(発光スペクトルの最大強度波長)を有するものが好ましく、より好ましくは 350 nm 以上 600 nm 以下、更に好ましくは 400 nm 以上 520 nm 以下、特に好ましくは 400 nm 以上 465 nm 以下である。

40

【0249】

(本発明の発光素子の用途)

本発明の発光素子は、発光装置、ピクセル、表示素子、ディスプレイ、バックライト、電子写真、照明光源、記録光源、露光光源、読み取り光源、標識、看板、インテリア、又は光通信等に好適に利用できる。特に、照明装置、表示装置等の発光輝度が高い領域で駆動されるデバイスに好ましく用いられる。

【0250】

50

(発光装置)

次に、図2を参照して本発明の発光装置について説明する。

本発明の発光装置は、前記有機電界発光素子を用いてなる。

図2は、本発明の発光装置の一例を概略的に示した断面図である。

図2の発光装置20は、基板(支持基板)2、有機電界発光素子10、封止容器16等により構成されている。

【0251】

有機電界発光素子10は、基板2上に、陽極(第一電極)3、有機層11、陰極(第二電極)9が順次積層されて構成されている。また、陰極9上には、保護層12が積層されており、更に、保護層12上には接着層14を介して封止容器16が設けられている。なお、各電極3、9の一部、隔壁、絶縁層等は省略されている。

10

ここで、接着層14としては、エポキシ樹脂等の光硬化型接着剤や熱硬化型接着剤を用いることができ、例えば熱硬化性の接着シートを用いることもできる。

【0252】

本発明の発光装置の用途は特に制限されるものではなく、例えば、照明装置のほか、テレビ、パーソナルコンピュータ、携帯電話、電子ペーパー等の表示装置とすることができる。

【0253】

(照明装置)

次に、図3を参照して本発明の実施形態に係る照明装置について説明する。

20

図3は、本発明の実施形態に係る照明装置の一例を概略的に示した断面図である。

本発明の実施形態に係る照明装置40は、図3に示すように、前述した有機EL素子10と、光散乱部材30とを備えている。より具体的には、照明装置40は、有機EL素子10の基板2と光散乱部材30とが接触するように構成されている。

光散乱部材30は、光を散乱できるものであれば特に制限されないが、図3においては、透明基板31に微粒子32が分散した部材とされている。透明基板31としては、例えば、ガラス基板を好適に挙げることができる。微粒子32としては、透明樹脂微粒子を好適に挙げることができる。ガラス基板及び透明樹脂微粒子としては、いずれも、公知のものを使用できる。このような照明装置40は、有機電界発光素子10からの発光が光散乱部材30の光入射面30Aに入射されると、入射光を光散乱部材30により散乱させ、散乱光を光出射面30Bから照明光として出射するものである。

30

【実施例】

【0254】

以下、実施例により本発明を更に詳細に説明するが、本発明はこれらに限定されるものではない。

【0255】

実施例で使用した一般式(1)で表される化合物は、国際公開第2004/074399号パンフレット等を参考に合成した。例えば、化合物(1)は国際公開第2004/074399号52ページ22行~54ページ15行に記載の方法で合成できる。

一般式(E-1)で表される化合物は特許第4308663号公報を参考に合成した。

40

【0256】

なお、本実施例に用いた有機材料は全て昇華精製したものをを用い、高速液体クロマトグラフィー(東ソーTSKgel ODS-100Z)により分析し、254nmの吸収強度面積比で特に断りがなければ純度99.9%以上のものをを用いた。

【0257】

[実施例1]

<有機電界発光素子の作製>

厚み0.7mm、2.5cm角の酸化インジウム錫(ITO)膜を有するガラス基板(ITO膜厚は100nm)を洗浄容器に入れ、2-プロパノール中で超音波洗浄した後、30分間UV-オゾン処理を行った。このガラス基板上に真空蒸着装置(トッキ社製、S

50

m a l l - E L V E S S) を用いて真空蒸着法にて以下の各層を蒸着した。なお、以下の実施例及び比較例における真空蒸着法は、全て同条件で行い、蒸着速度は、特に断りのない場合は 0.2 nm/秒 である。蒸着速度は水晶振動子を用いて測定した。また、圧力は、 $1 \times 10^{-4} \text{ Pa}$ 以下である。また、以下の各層の厚みは水晶振動子を用いて測定した。

陽極 (ITO) 上に、正孔注入層として H I L - 1 (純度 97%) を厚みが 10 nm になるように真空蒸着することにより形成した。

次に、正孔注入層上に、正孔輸送層として N , N' - ジナフチル - N , N' - ジフェニル - [1 , 1' - ピフェニル] - 4 , 4' - ジアミン (NPD) を厚みが 30 nm となるように真空蒸着することにより形成した。

次に、正孔輸送層上に、化合物 (A - 1) (ホスト材料) と発光材料である I r - A (ゲスト) を質量比で 85 : 15 含む発光層を、厚みが 30 nm となるように真空蒸着することにより成膜した。

次に、発光層上に、H B L - A を厚みが 10 nm となるように真空蒸着することにより正孔阻止層を成膜した。

次に、正孔阻止層上に、電子輸送層として e - 4 を、厚みが 30 nm となるように真空蒸着することにより成膜した。

次に、電子輸送層上に電子注入層として L i F を、厚みが 1 nm となるように真空蒸着することにより成膜した。

次に、陰極としてパタ - ニングしたマスク (発光領域が $2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ となるマスク) を設置し、金属アルミニウムを厚み 100 nm となるように真空蒸着することにより成膜した。

以上により作製した積層体を、アルゴンガスで置換したグローブボックス内に入れ、ガラス製の封止缶、及び紫外線硬化型の接着剤 (X N R 5 5 1 6 H V、長瀬チバ株式会社製) を用いて封止した。以上により、実施例 1 の有機電界発光素子を作製した。

また、色度の電子輸送層膜厚による変化量を測定するために、電子輸送層を 10 nm 厚くした以外は上記と同様にして作製した素子と、電子輸送層を 10 nm 薄くした以外は上記と同様にして作製した素子も作製した。

【0258】

(評価)

作製した実施例 1 の有機電界発光素子の発光効率、及び色度を以下のように評価しロールオフ (高輝度駆動時の効率低下) と、電子輸送層膜厚が 10 nm あたりの色度 x の変化量を算出した。

【0259】

< 発光効率及び駆動電圧の測定 >

一定電流密度 (10 mA/cm^2) で駆動した有機電界発光素子の発光輝度を分光放射輝度計 (トプコン社製、S R - 3) にて測定し、外部量子効率 (%) を求めた。

またそのときの電圧を測定し駆動電圧 (V) とした。

結果は、表 1 においては比較例 3 の外部量子効率及び駆動電圧を 100 とし、表 2 においては比較例 11 の外部量子効率及び駆動電圧を 100 とし、表 3 においては比較例 17 の外部量子効率及び駆動電圧を 100 とし、表 4 においては比較例 24 の外部量子効率及び駆動電圧を 100 とし、相対値で示した。

< 耐久性の測定 >

輝度 $1,000 \text{ cd/m}^2$ での電流密度を維持したまま有機電界発光素子を連続発光させ輝度 500 cd/m^2 になるまでの時間 (h) を耐久性として算出した。

結果は、表 1 においては比較例 3 の耐久性を 100 とし、表 2 においては比較例 11 の耐久性を 100 とし、表 3 においては比較例 17 の耐久性を 100 とし、表 4 においては比較例 24 の耐久性を 100 とし、相対値で示した。

【0260】

< ロールオフの算出 >

輝度 $1,000 \text{ cd/m}^2$ での発光効率で、輝度 $10,000 \text{ cd/m}^2$ での発光効率を割った値でロールオフを評価した。該値が大きいほどロールオフが抑制されているといえる。なお、発光効率は上記と同様に測定した。

【0261】

<色度の測定>

東陽テクニカ製ソースメジャーユニット2400型を用いて、直流定電圧を実施例1の有機電界発光素子に印加して発光させた。得られた発光スペクトルを島津製作所製の発光スペクトル測定システム(ELS1500)で測定し、得られたスペクトルからCIE表色系を用いx値を算出した。なお、x値は、電流密度が 10 mA/cm^2 での値である。

【0262】

<電子輸送層膜厚が 10 nm あたりの色度xの変化量の算出>

電子輸送層膜厚の異なる3つの素子について測定した色度xから最小二乗法により電子輸送層 10 nm あたりの色度xの変化量(x軸に膜厚、y軸に色度をとったときのx軸 10 nm あたりの傾き)を算出した。

【0263】

[実施例2~31、及び33、並びに比較例1~27、及び29]

素子構成、各層の厚さ、並びに各層に使用した化合物、及びその含有量を下記表1~4に示すように変更した以外は、実施例1と同様に素子を作製し、評価した。なお、表1~4において、発光層のゲスト含有量は発光層の全質量に対する質量%である。

[実施例32及び比較例28]

前記洗浄済の酸化インジウム錫(ITO)膜を有するガラス基板表面に、ポリ(3,4-エチレンジオキシチオフェン)-ポリ(スチレンスルホン酸(PEDOT・PSS))水溶液(Bayer社製)を $3000 \sim 4000 \text{ rpm}$ 程度の回転数でスピンコーティングし、発光領域以外の膜を除去した後 200°C で焼成することにより正孔注入層を形成したこと以外は実施例22と同様に実施例32の素子を作製し評価した。また、発光層のホスト材料をmCPに変更する以外は実施例32と同様にして比較例28の素子を作製し評価した。

【0264】

10

20

【表 1】

表1

層構成	実施例1	実施例2	実施例3	実施例4	実施例5	実施例6
陰極	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO
正孔注入層	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1
正孔輸送層	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD
発光層(ゲスト含有量:15質量%)	A-1/Ir-A	A-1/Ir-A	A-1/Ir-A	A-26/Ir-A	A-26/Ir-A	A-26/Ir-A
正孔阻止層	HBL-A	HBL-A	HBL-A	HBL-A	HBL-A	HBL-A
電子輸送層	e-4	e-6	e-1	e-10	e-5	e-7
電子注入層	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif
陰極	Al	Al	Al	Al	Al	Al
厚さ	100 nm	100 nm	100 nm	100 nm	100 nm	100 nm
ロールオフ	0.87	0.84	0.82	0.83	0.81	0.83
電子輸送層 10nmあたりの色度変化量	0.0102	0.0115	0.0111	0.0109	0.0121	0.0106
発光効率(相対値)	110	117	111	108	107	109
駆動電圧(相対値)	89	87	89	88	90	86
耐久性(相対値)	136	119	124	114	131	117

表1(続き)

層構成	比較例1	比較例2	比較例3	比較例4	比較例5	比較例6	比較例7	比較例8	比較例9
陰極	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO
正孔注入層	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1
正孔輸送層	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD
発光層(ゲスト含有量:15質量%)	A-1/Ir-A	A-1/Ir-A	A-1/Ir-A	A-1/Ir-A	A-1/Ir-A	mCP/Ir-A	mCP/Ir-A	mCP/Ir-A	mCBP/Ir-A
正孔阻止層	HBL-A	HBL-A	HBL-A	HBL-A	HBL-A	HBL-A	HBL-A	HBL-A	HBL-A
電子輸送層	Alq	BAlq	ETL-A	ETL-B	ETL-C	e-4	e-4	ETL-C	ETL-C
電子注入層	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif
陰極	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al
厚さ	100 nm	100 nm	100 nm	100 nm	100 nm	100 nm	100 nm	100 nm	100 nm
ロールオフ	0.62	0.57	0.68	0.62	0.69	0.69	0.61	0.59	0.6
電子輸送層 10nmあたりの色度変化量	0.0284	0.027	0.0225	0.0239	0.024	0.0226	0.0227	0.0265	0.0253
発光効率(相対値)	101	104	100	98	96	101	98	99	97
駆動電圧(相対値)	125	131	100	104	103	107	99	96	93
耐久性(相対値)	111	118	100	91	90	93	89	90	91

【表 2】

表 2

層構成	厚さ	実施例7	実施例8	実施例9	実施例10	実施例11	実施例12	実施例13
陽極	100 nm	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO
正孔注入層	10 nm	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1
正孔輸送層	30 nm	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD
発光層(ゲスト含有量:15質量%)	30 nm	A-1/Ir-B	A-7/Ir-B	A-34/Ir-B	A-27/Ir-B	A-14/Ir-B	A-9/Ir-B	A-24/Ir-B
正孔阻止層	10 nm	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B
電子輸送層	30 nm	e-4	e-4	e-4	e-4	e-4	e-4	e-4
電子注入層	1 nm	LiF	LiF	LiF	LiF	LiF	LiF	LiF
陰極	100 nm	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al
ロールオフ		0.79	0.77	0.78	0.79	0.8	0.77	0.78
電子輸送層 10nmあたりの色度変化量		0.0168	0.0181	0.0174	0.0172	0.0169	0.0177	0.0168
発光効率(相対値)		108	111	109	110	106	108	112
駆動電圧(相対値)		92	90	91	89	92	88	91
耐久性(相対値)		127	119	118	122	124	120	128

表 2(続き)

層構成	厚さ	比較例10	比較例11	比較例12	比較例13	比較例14	比較例15
陽極	100 nm	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO
正孔注入層	10 nm	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1
正孔輸送層	30 nm	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD
発光層(ゲスト含有量:15質量%)	30 nm	A-7/Ir-B	A-7/Ir-B	A-7/Ir-B	mCP/Ir-B	mCBP/Ir-B	mCBP/Ir-B
正孔阻止層	10 nm	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B
電子輸送層	30 nm	BAIq	ETL-A	ETL-B	e-4	e-4	ETL-B
電子注入層	1 nm	LiF	LiF	LiF	LiF	LiF	LiF
陰極	100 nm	Al	Al	Al	Al	Al	Al
ロールオフ		0.54	0.59	0.59	0.61	0.6	0.55
電子輸送層 10nmあたりの色度変化量		0.0282	0.0274	0.0266	0.0257	0.0251	0.0253
発光効率(相対値)		98	100	102	94	95	101
駆動電圧(相対値)		126	100	101	104	106	103
耐久性(相対値)		122	100	89	88	102	105

表3

層構成	厚さ	実施例14	実施例15	実施例16	実施例17	実施例18	実施例19	実施例20	実施例33
陽極	100 nm	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO
正孔注入層	10 nm	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1
正孔輸送層	30 nm	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD
発光層(ゲスト含有量:10質量%)	30 nm	A-1/Ir-C	A-3/Ir-C	A-25/Ir-C	A-29/Ir-C	A-11/Ir-C	A-13/Ir-C	A-5/Ir-C	A-5/Pt-A
正孔阻止層	5 nm	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B
電子輸送層	45 nm	e-4	e-8	e-8	e-8	e-8	e-8	e-8	e-8
電子注入層	1 nm	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif
陰極	100 nm	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al
ロールオフ		0.93	0.91	0.95	0.9	0.89	0.91	0.94	0.9
電子輸送層 10nmあたりの色度変化量		0.0213	0.0221	0.0235	0.0233	0.0246	0.0215	0.0212	0.0236
発光効率(相対値)		121	110	112	126	119	115	114	108
駆動電圧(相対値)		84	85	84	88	89	83	84	79
耐久性(相対値)		133	123	131	132	140	129	127	134

表3(続き)

層構成	厚さ	比較例16	比較例17	比較例18	比較例19	比較例20	比較例21	比較例29
陽極	100 nm	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO
正孔注入層	10 nm	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1
正孔輸送層	30 nm	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD
発光層(ゲスト含有量:10質量%)	30 nm	A-3/Ir-C	A-3/Ir-C	A-3/Ir-C	mCP/Ir-C	CBP/Ir-C	CBP/Ir-C	CBP/Pt-A
正孔阻止層	5 nm	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B	HBL-B
電子輸送層	45 nm	BAIq	ETL-A	ETL-C	e-8	e-8	ETL-C	e-8
電子注入層	1 nm	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif
陰極	100 nm	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al
ロールオフ		0.76	0.81	0.82	0.82	0.81	0.77	0.8
電子輸送層 10nmあたりの色度変化量		0.031	0.0323	0.0325	0.0317	0.0314	0.0332	0.0344
発光効率(相対値)		92	100	91	95	94	95	91
駆動電圧(相対値)		129	100	97	105	104	105	90
耐久性(相対値)		125	100	90	81	83	79	86

【 表 4 】

構成要素	実施例21	実施例22	実施例23	実施例24	実施例25	実施例26	実施例27	実施例28	実施例29	実施例30	実施例31	実施例32
膜厚	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO
正孔注入層	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1
正孔輸送層	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD
発光層(ゲスト含有量:5質量%)	A-1/Ir-D	A-26/Ir-D	A-26/Ir-D	A-26/Ir-D	A-26/Ir-D	A-26/Ir-D	A-26/Ir-D	A-26/Ir-D	A-26/Ir-D	A-26/Ir-D	A-26/Ir-D	A-26/Ir-D
電子輸送層	e-4	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	e-23	e-24	e-25	e-4
電子注入層	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif
蒸着	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al
ローレオプ	0.84	0.84	0.86	0.81	0.82	0.85	0.83	0.83	0.84	0.82	0.85	0.81
電子輸送層10nmあたりの色度変化量	0.00462	0.00513	0.00481	0.00498	0.00474	0.00473	0.00499	0.00474	0.00485	0.00492	0.00508	0.00488
発光効率(相対値)	126	134	135	132	127	128	124	136	134	133	131	130
駆動電圧(相対値)	81	83	80	84	84	82	85	86	84	85	85	83
耐久性(相対値)	142	138	151	140	135	129	133	127	131	137	122	74

表4(続き)

構成要素	比較例22	比較例23	比較例24	比較例25	比較例26	比較例27	比較例28
膜厚	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO	ITO
正孔注入層	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1	HIL-1
正孔輸送層	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	NPD	PEDOT-PSS
発光層(ゲスト含有量:5質量%)	A-26/Ir-D	A-26/Ir-D	A-26/Ir-D	mCP/Ir-D	CBP/Ir-D	CBP/Ir-D	mCP/Ir-D
電子輸送層	Alq	BAlq	ETL-C	e-4	e-4	ETL-C	e-4
電子注入層	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif	Lif
蒸着	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al
ローレオプ	0.66	0.63	0.69	0.7	0.73	0.68	0.69
電子輸送層10nmあたりの色度変化量	0.00864	0.00984	0.00972	0.00891	0.00969	0.00945	0.00945
発光効率(相対値)	95	98	100	91	92	90	90
駆動電圧(相対値)	128	133	100	105	110	106	105
耐久性(相対値)	109	121	100	95	96	97	85

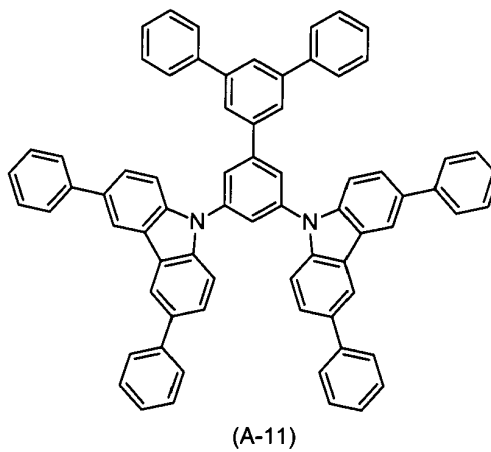
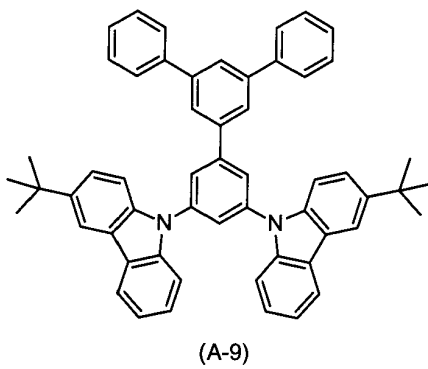
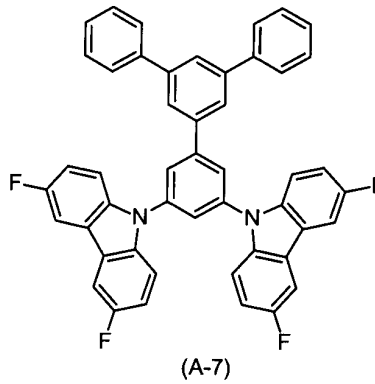
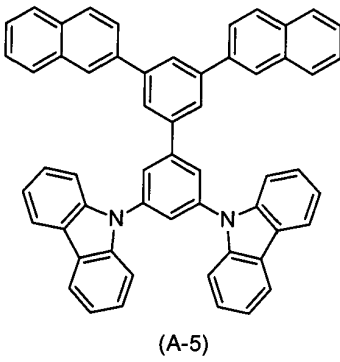
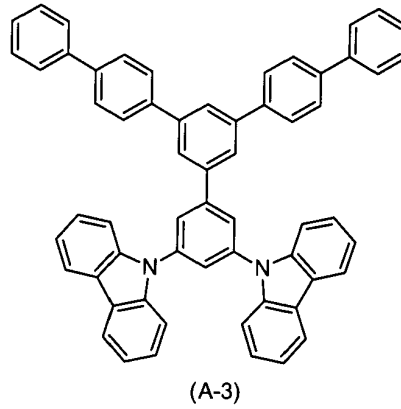
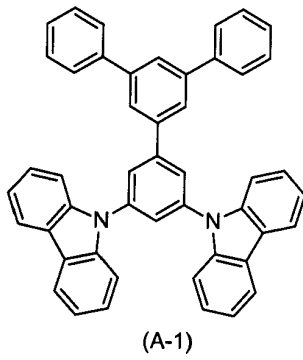
実施例の素子は比較例の素子に対して、ロールオフが抑制され、かつ色度の電子輸送層膜厚依存性が小さいことが表 1 ~ 4 の結果より分かる。なお、表 3 に記載の実施例 3 3 は「実施例」とあるのを「参考例」と読み替えるものとする。

【 0 2 6 9 】

以下に実施例及び比較例で用いた化合物を示す。

【 0 2 7 0 】

【 化 4 7 】



【 0 2 7 1 】

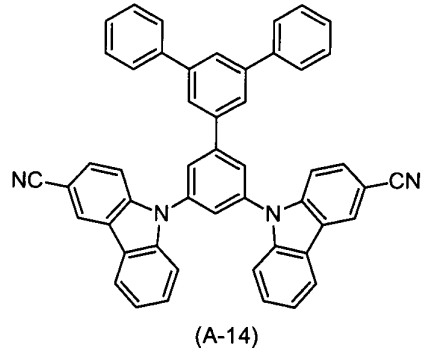
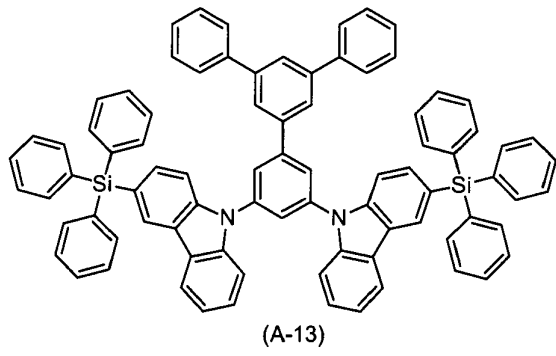
10

20

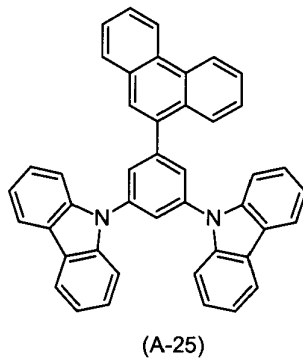
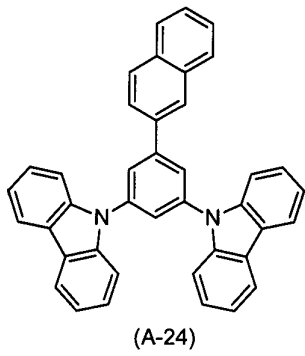
30

40

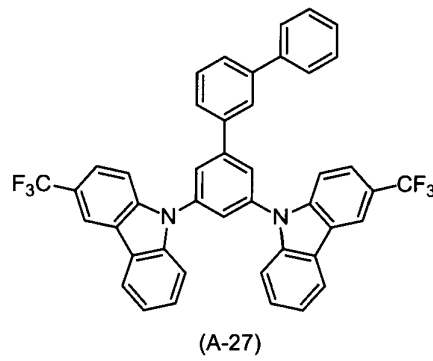
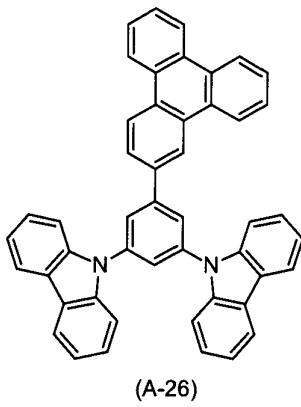
【化 4 8】



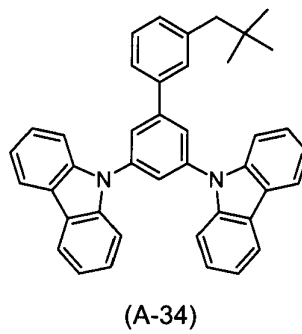
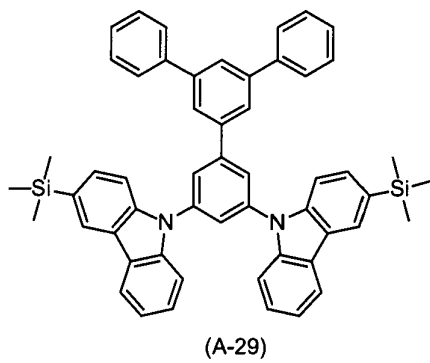
10



20



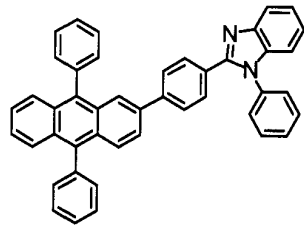
30



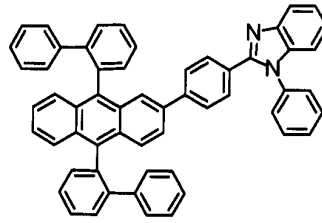
40

【 0 2 7 2 】

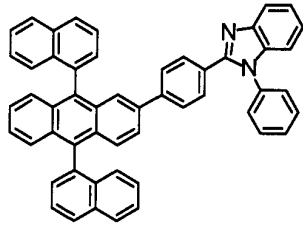
【化 4 9】



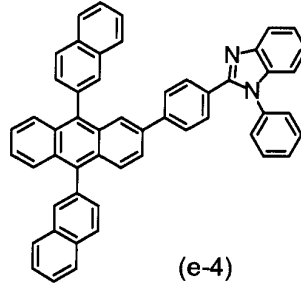
(e-1)



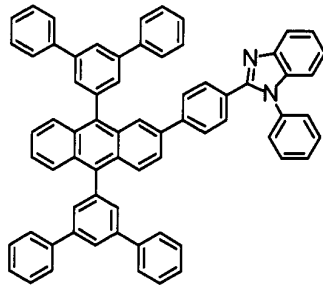
(e-2)



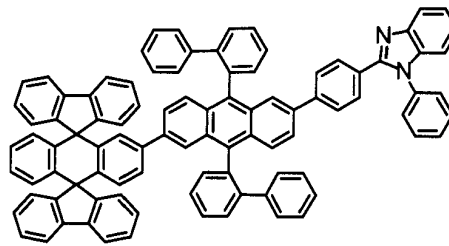
(e-3)



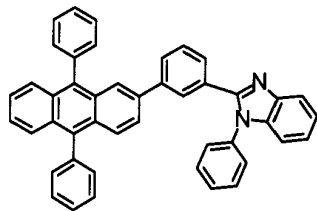
(e-4)



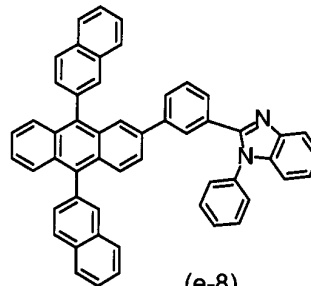
(e-5)



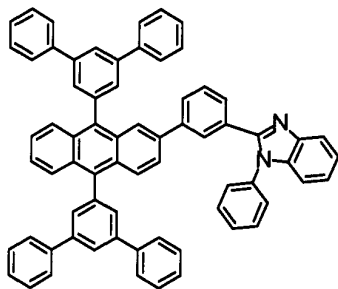
(e-6)



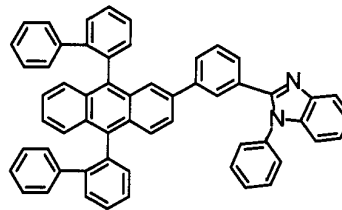
(e-7)



(e-8)



(e-9)



(e-10)

【 0 2 7 3】

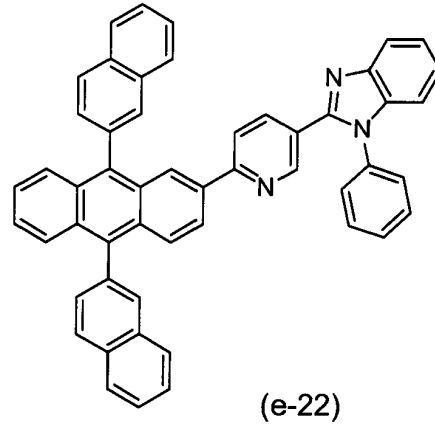
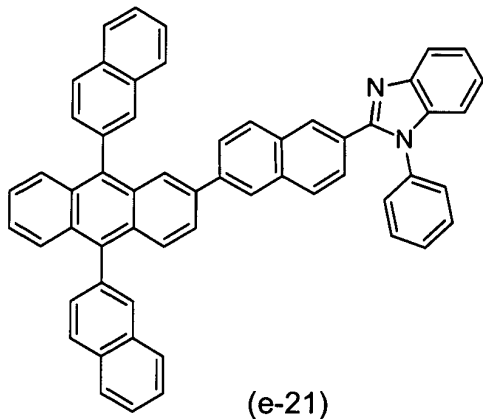
10

20

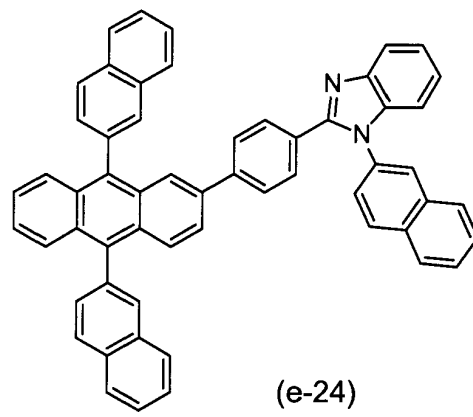
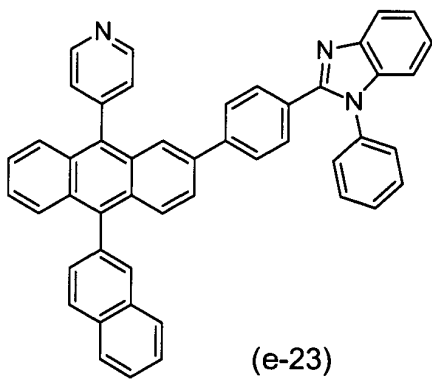
30

40

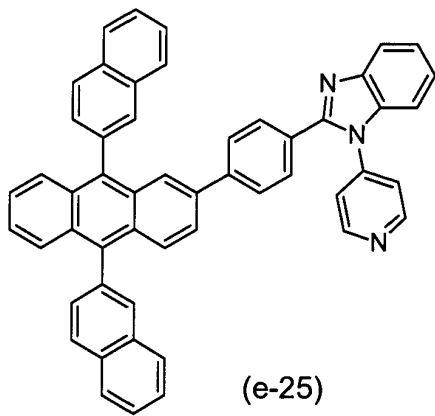
【化 5 0】



10



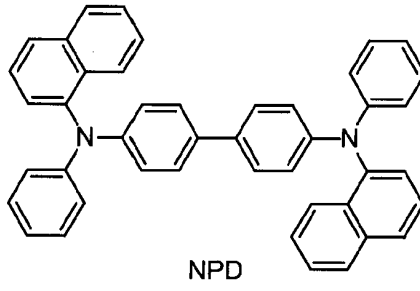
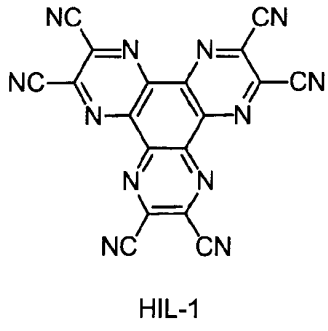
20



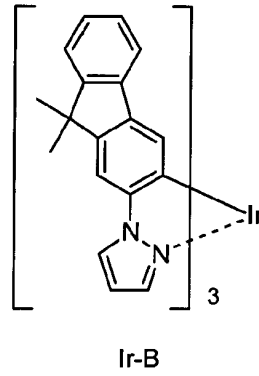
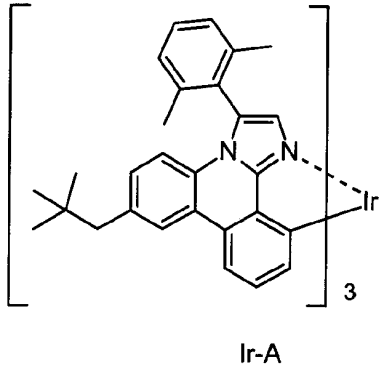
30

【 0 2 7 4 】

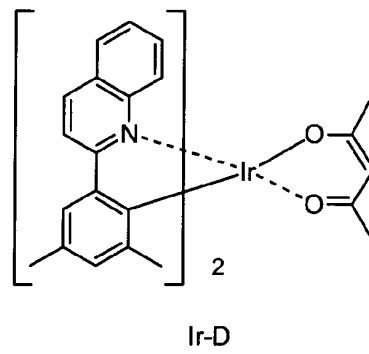
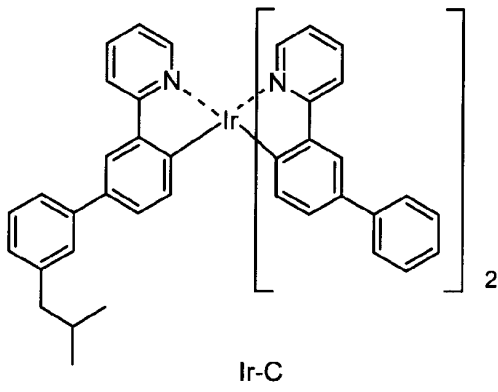
【化 5 1】



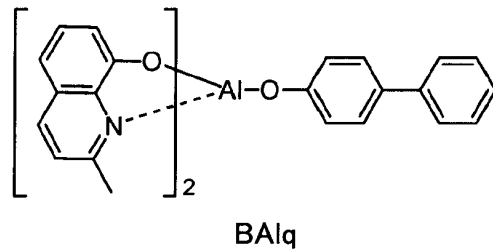
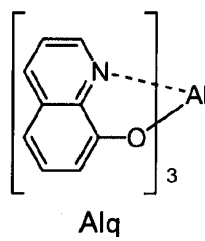
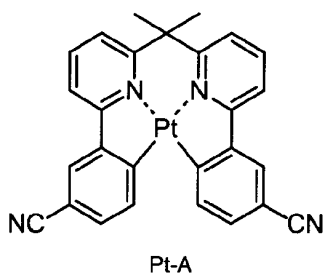
10



20



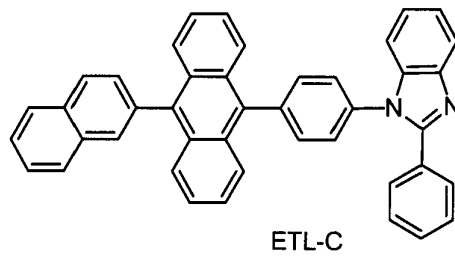
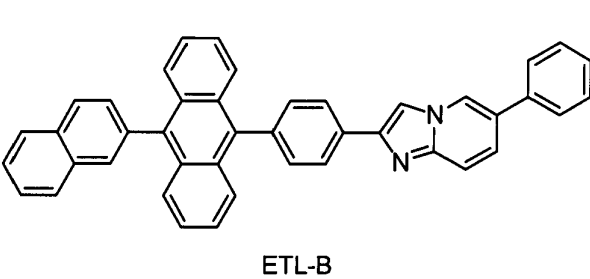
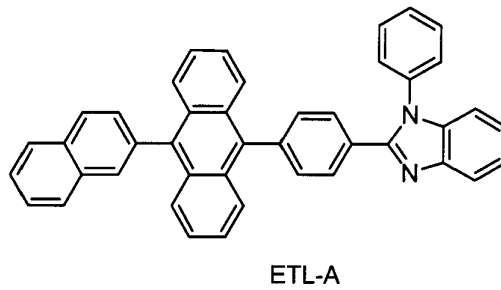
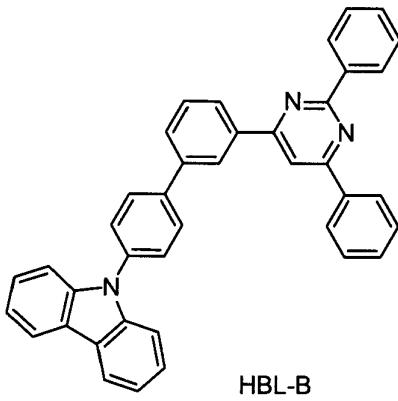
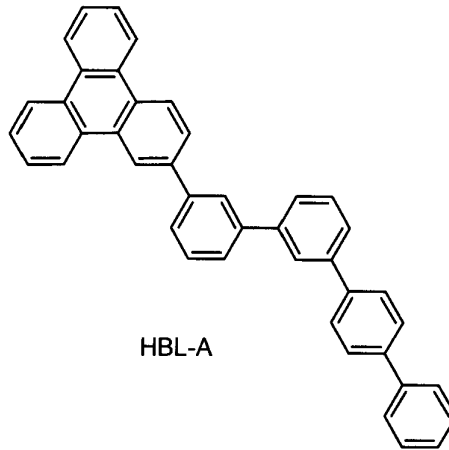
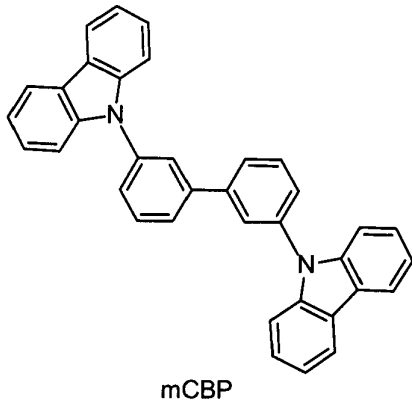
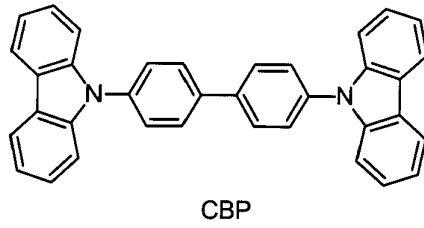
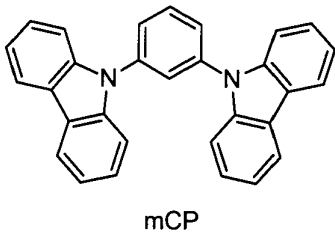
30



40

【 0 2 7 5 】

【化52】



【符号の説明】

【0276】

- 2・・・基板
- 3・・・陽極
- 4・・・正孔注入層
- 5・・・正孔輸送層
- 6・・・発光層
- 7・・・正孔ブロック層

10

20

30

40

50

- 8 . . . 電子輸送層
- 9 . . . 陰極
- 10 . . . 有機電界発光素子
- 11 . . . 有機層
- 12 . . . 保護層
- 14 . . . 接着層
- 16 . . . 封止容器
- 20 . . . 発光装置
- 30 . . . 光散乱部材
- 31 . . . 透明基板
- 30A . . . 光入射面
- 30B . . . 光出射面
- 32 . . . 微粒子
- 40 . . . 照明装置

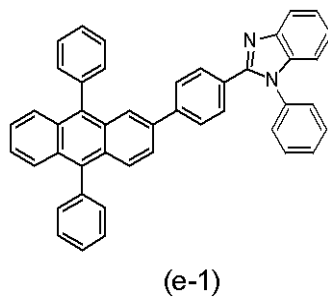
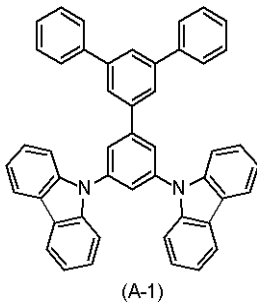
10

【要約】

【課題】本発明の目的は、上記事情に鑑み、発光効率、駆動電圧、耐久性の観点で優れ、高輝度駆動時の効率の低下が少なく、かつ発光層と陰極の間の、電子輸送性を有する化合物を含む層の膜厚に素子の発光色度が依存しにくい有機電界発光素子を提供することである。

【解決手段】基板上に、陽極及び陰極からなる一対の電極と、該電極間に発光層を有し、該発光層と該陰極の間に少なくとも一層の有機層を有する有機電界発光素子であって、該発光層に例えば下記(A-1)を含有し、該発光層と該陰極の間の少なくとも一層の有機層に例えば下記(e-1)を含有する有機電界発光素子。

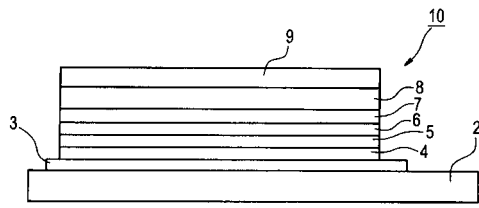
20



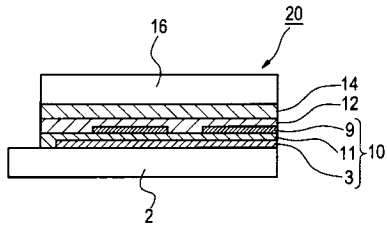
30

【選択図】なし

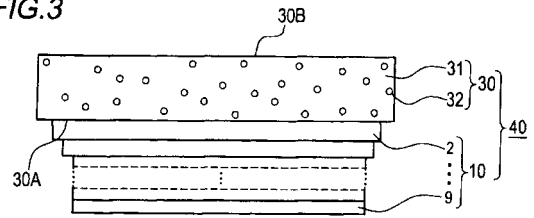
【 図 1 】
FIG.1



【 図 2 】
FIG.2



【 図 3 】
FIG.3



フロントページの続き

(56)参考文献 国際公開第2008/015949(WO, A1)
国際公開第2008/133483(WO, A1)
特表2005-515233(JP, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

H01L 51/50 - 51/56
C07F 15/00
C09K 11/06
CA/REGISTRY(STN)