

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7253502号
(P7253502)

(45)発行日 令和5年4月6日(2023.4.6)

(24)登録日 令和5年3月29日(2023.3.29)

(51)国際特許分類	F I	
C 0 7 D 307/91 (2006.01)	C 0 7 D 307/91	C S P
H 1 0 K 50/00 (2023.01)	H 0 5 B 33/14	A
H 1 0 K 50/15 (2023.01)	H 0 5 B 33/22	D

請求項の数 17 (全53頁)

(21)出願番号	特願2019-567202(P2019-567202)	(73)特許権者	000183646 出光興産株式会社 東京都千代田区大手町一丁目2番1号
(86)(22)出願日	平成31年1月28日(2019.1.28)	(74)代理人	110002620 弁理士法人大谷特許事務所
(86)国際出願番号	PCT/JP2019/002729	(72)発明者	伊藤 裕勝 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
(87)国際公開番号	WO2019/146781	(72)発明者	羽毛田 匡 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
(87)国際公開日	令和1年8月1日(2019.8.1)	(72)発明者	工藤 裕 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
審査請求日	令和3年8月16日(2021.8.16)	審査官	三木 寛
(31)優先権主張番号	特願2018-12793(P2018-12793)		
(32)優先日	平成30年1月29日(2018.1.29)		
(33)優先権主張国・地域又は機関	日本国(JP)		

最終頁に続く

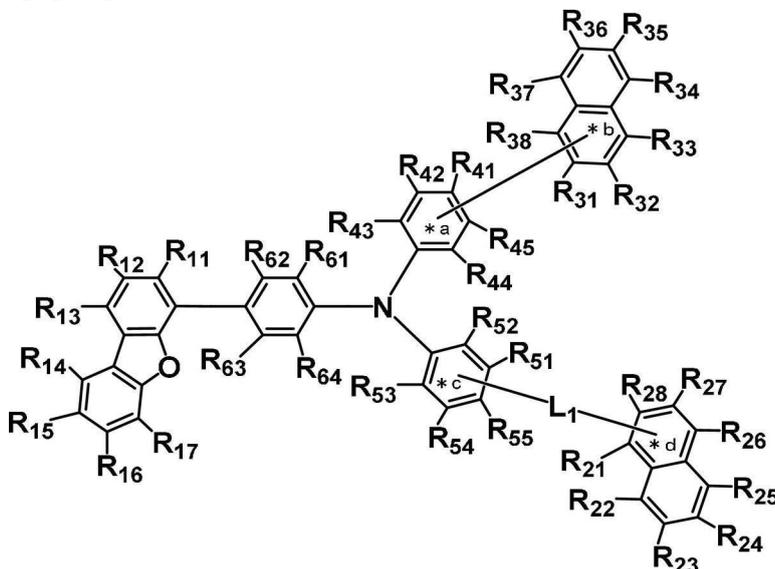
(54)【発明の名称】 化合物及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記式(1)で表される化合物。

【化1】



[式 (1) において、

$R_{11} \sim R_{17}$ 及び $R_{61} \sim R_{64}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、又は無置換の環形成原子数 3 ~ 50 のヘテロアリール基である。

$R_{41} \sim R_{45}$ の 1 つは、* a に結合する単結合を表し、* a に結合する単結合以外の $R_{41} \sim R_{45}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、又は無置換の環形成原子数 3 ~ 50 のヘテロアリール基である。

$R_{51} \sim R_{55}$ の 1 つは、* c に結合する単結合を表し、* c に結合する単結合以外の $R_{51} \sim R_{55}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、又は無置換の環形成原子数 3 ~ 50 のヘテロアリール基である。

$R_{21} \sim R_{28}$ の 1 つは、* d に結合する単結合を表し、* d に結合する単結合以外の $R_{21} \sim R_{28}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 12 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ~ 50 のヘテロアリール基である。

10

$R_{31} \sim R_{38}$ の 1 つは、* b に結合する単結合を表し、* b に結合する単結合以外の $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 20 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 12 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 3 ~ 50 のヘテロアリール基である。

L_1 は、単結合、置換もしくは無置換のフェニレン基、又は置換もしくは無置換のビフェニレン基である。

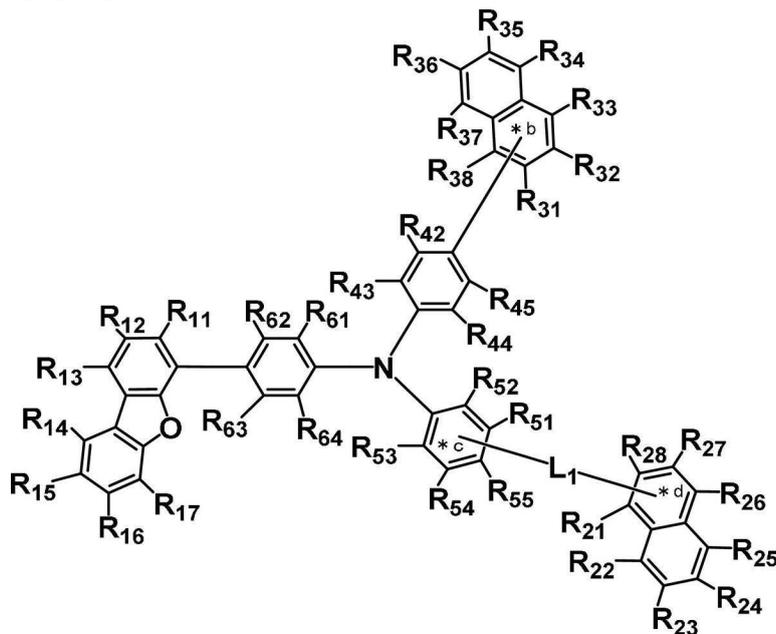
$R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 及び $R_{61} \sim R_{64}$ において、隣接する置換基同士が互いに結合することはなく、環を形成しない。]

20

【請求項 2】

前記式 (1) で表される化合物が、下記式 (2 - 1) 又は式 (2 - 2) で表される、請求項 1 に記載の化合物。

【化 2】

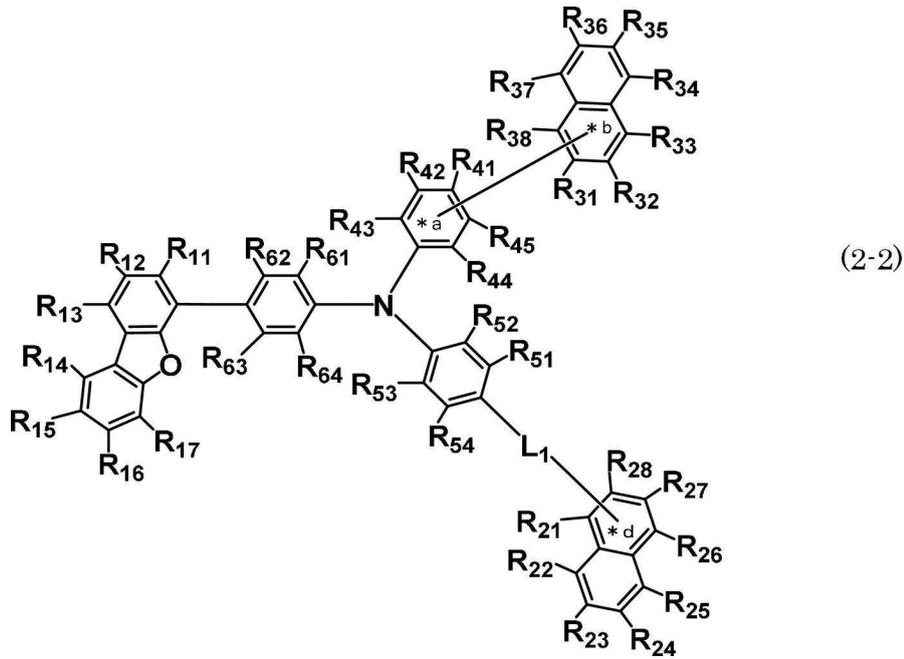


30

40

50

【化3】



10

[式(2-1)、式(2-2)において、

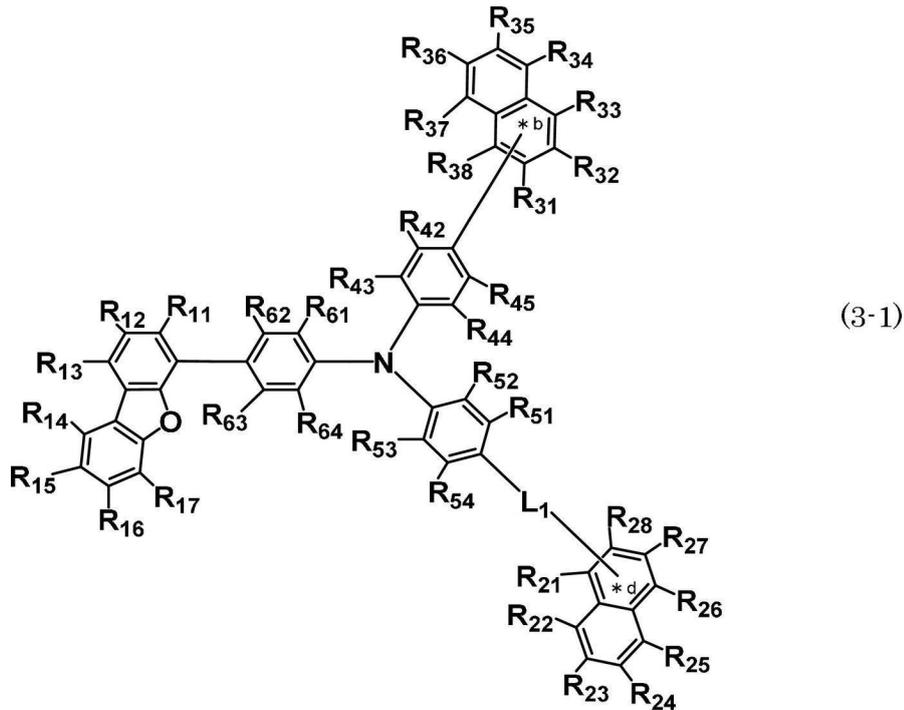
R₁₁ ~ R₁₇、R₂₁ ~ R₂₈、R₃₁ ~ R₃₈、R₄₁ ~ R₄₅、R₅₁ ~ R₅₅、R₆₁ ~ R₆₄ 及び L₁ は、前記と同じである。]

20

【請求項3】

前記式(1)で表される化合物が、下記式(3-1)で表される、請求項1又は2に記載の化合物。

【化4】



30

40

[式(3-1)において、

R₁₁ ~ R₁₇、R₂₁ ~ R₂₈、R₃₁ ~ R₃₈、R₄₂ ~ R₄₅、R₅₁ ~ R₅₄、R₆₁ ~ R₆₄ 及び L₁ は、前記と同じである。]

【請求項4】

前記 L₁ が、単結合、無置換のフェニレン基、又は無置換のビフェニレン基である、請求

50

項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 5】

前記 L₁ が、単結合、又は無置換のフェニレン基である、請求項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 6】

前記 L₁ が、単結合である、請求項 1 ~ 3 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 7】

前記 R₁₁ ~ R₁₇、*a に結合する単結合以外の前記 R₄₁ ~ R₄₅、*c に結合する単結合以外の前記 R₅₁ ~ R₅₅ 及び前記 R₆₁ ~ R₆₄ が、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数 1 ~ 5 のアルキル基であり、*d に結合する単結合以外の前記 R₂₁ ~ R₂₈ 及び *b に結合する単結合以外の前記 R₃₁ ~ R₃₈ が、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 5 のアルキル基である、請求項 1 ~ 6 のいずれか 1 項に記載の化合物。

10

【請求項 8】

前記 R₁₁ ~ R₁₇ が、水素原子である、請求項 1 ~ 7 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 9】

*a に結合する単結合以外の前記 R₄₁ ~ R₄₅、*c に結合する単結合以外の前記 R₅₁ ~ R₅₅ 及び R₆₁ ~ R₆₄ が、水素原子である、請求項 1 ~ 8 のいずれか 1 項に記載の化合物。

【請求項 10】

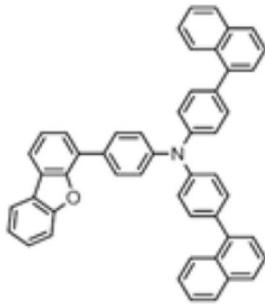
*d に結合する単結合以外の前記 R₂₁ ~ R₂₈ 及び *b に結合する単結合以外の前記 R₃₁ ~ R₃₈ が、水素原子である、請求項 1 ~ 9 のいずれか 1 項に記載の化合物。

20

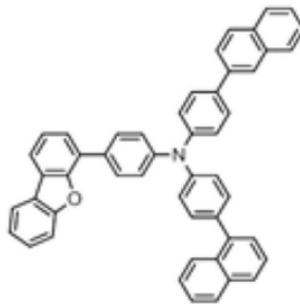
【請求項 11】

前記化合物が、下記化合物 1 ~ 6 から選択される、請求項 1 に記載の化合物。

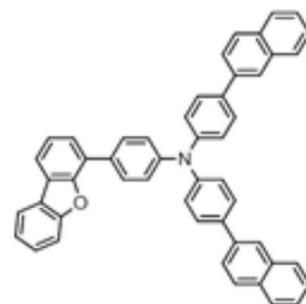
【化 5】



化合物 1

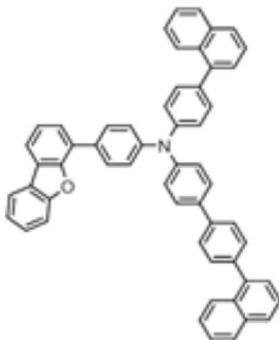


化合物 2

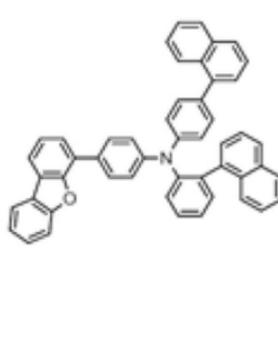


化合物 3

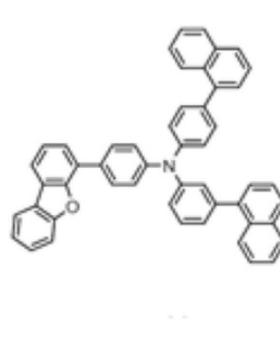
30



化合物 4



化合物 5



化合物 6

40

【請求項 12】

50

請求項 1 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の化合物からなる、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 13】

陽極、陰極、及び該陽極と陰極の間に有機層を有し、該有機層が発光層を含む有機エレクトロルミネッセンス素子であって、該有機層の少なくとも 1 層が請求項 1 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 14】

前記陽極と前記発光層の間に有機層を有し、該有機層が前記化合物を含む、請求項 13 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 15】

前記有機層は前記発光層と正孔輸送層とを含み、且つ、前記陽極と該発光層の間に該正孔輸送層を有し、該正孔輸送層が前記化合物を含む、請求項 13 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 16】

前記正孔輸送層が第一正孔輸送層及び第二正孔輸送層を含み、該第二正孔輸送層が前記化合物を含む、請求項 15 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 17】

請求項 13 ~ 16 のいずれか 1 項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を備えた電子機器。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、化合物及びそれを用いた有機エレクトロルミネッセンス素子に関する。

【背景技術】

【0002】

一般に有機エレクトロルミネッセンス (EL) 素子は陽極、陰極、及び陽極と陰極に挟まれた 1 層以上の有機薄膜層から構成されている。両電極間に電圧が印加されると、陰極側から電子、陽極側から正孔が発光領域に注入され、注入された電子と正孔は発光領域において再結合して励起状態を生成し、励起状態が基底状態に戻る際に光を放出する。従って、電子又は正孔を効率よく発光領域に輸送し、電子と正孔との再結合を容易にする化合物の開発は高効率有機 EL 素子を得る上で重要である。また、近年、有機 EL 素子を使用した、スマートフォン、有機 EL テレビ、有機 EL 照明等のさらなる普及にあたり、高効率と同時に十分な素子寿命を満たす化合物の要求がある。

【0003】

特許文献 1 ~ 7 には、例えば、ジベンゾフラン構造、アリール基を有する、下記式 (C-1) ~ (C-8) で表される化合物が開示されている。

10

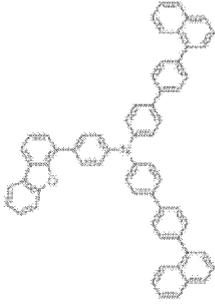
20

30

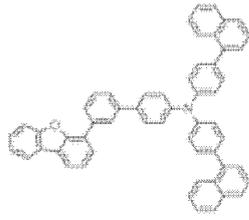
40

50

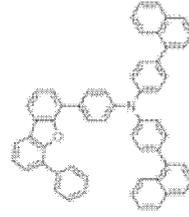
【化1】



(C-1)

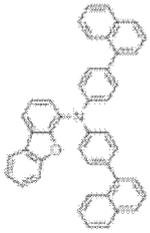


(C-2)

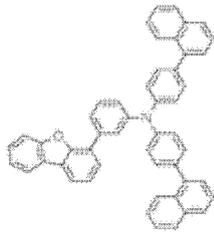


(C-3)

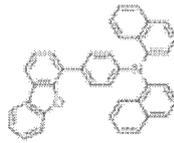
10



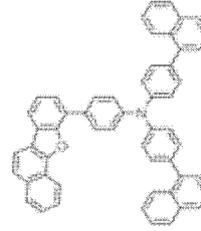
(C-4)



(C-5)

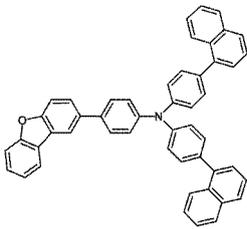


(C-6)



(C-7)

20



(C-8)

【0004】

30

しかし、これらに記載されている化合物は、例えば、有機EL素子の正孔輸送層として使用した場合、発光効率及び寿命が十分ではないことから、より高い発光効率及び長寿命を有する化合物の開発が求められていた。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0005】

【文献】国際公開第2009/145016号公報

韓国特許1579490号公報

特開2016-86155号公報

国際公開第2016/064111号公報

米国特許公開2016/133848号公報

米国特許公開2016/118596号公報

国際公開第2016/190600号公報

40

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

本発明は、前記の課題を解決するためになされたもので、外部量子効率が高く、かつ長寿命の有機EL素子及びこれを実現することができる化合物を提供する。

【課題を解決するための手段】

【0007】

50

本発明者らは、前記目的を達成するために鋭意研究を重ねた結果、式(1)で表される化合物が、前述した式(C-1)~(C-8)で表される化合物に比べ、耐性(分子内における電子受容性の抑制)を高めながら、発光層へ励起子を効率的に閉じ込められることを見出した。また、これらの特性を有する化合物を用いることにより、外部量子効率が高く、かつ長寿命の有機EL素子が得られることを見出した。

【0008】

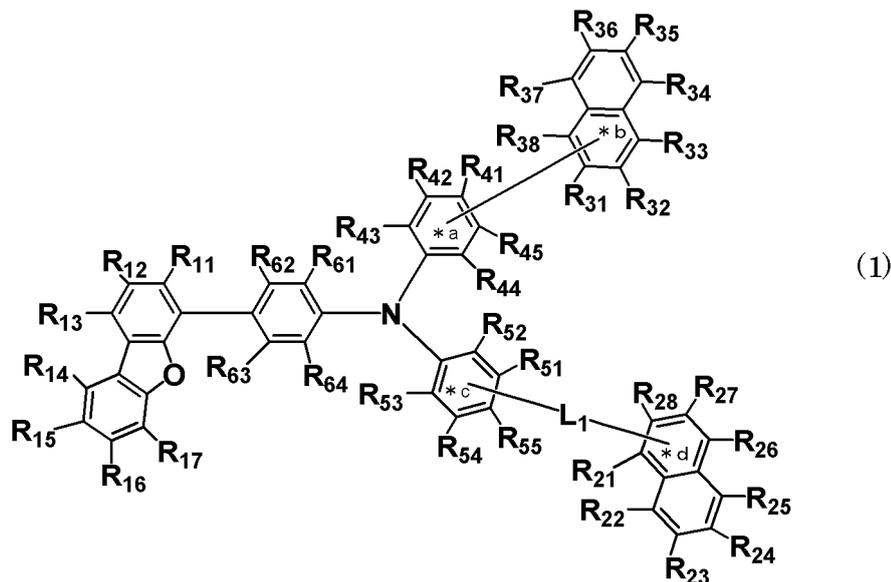
すなわち、一態様において、本発明は下記式(1)で表される化合物(以下、「化合物(1)」と称することもある)を提供する。

【0009】

下記式(1)で表される化合物。

10

【化2】



20

(式(1)において、

$R_{11} \sim R_{17}$ 及び $R_{61} \sim R_{64}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数1~20のアルキル基、又は無置換の環形成原子数3~50のヘテロアリール基である。

30

$R_{41} \sim R_{45}$ の1つは、*aに結合する単結合を表し、*aに結合する単結合以外の $R_{41} \sim R_{45}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数1~20のアルキル基、又は無置換の環形成原子数3~50のヘテロアリール基である。

$R_{51} \sim R_{55}$ の1つは、*cに結合する単結合を表し、*cに結合する単結合以外の $R_{51} \sim R_{55}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数1~20のアルキル基、又は無置換の環形成原子数3~50のヘテロアリール基である。

$R_{21} \sim R_{28}$ の1つは、*dに結合する単結合を表し、*dに結合する単結合以外の $R_{21} \sim R_{28}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数3~50のヘテロアリール基である。

40

$R_{31} \sim R_{38}$ の1つは、*bに結合する単結合を表し、*bに結合する単結合以外の $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~20のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数3~50のヘテロアリール基である。

L_1 は、単結合、置換もしくは無置換のフェニレン基、又は置換もしくは無置換のビフェニレン基である。

$R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 及び $R_{61} \sim R_{64}$ において、隣接する置換基同士が互いに結合することはなく、環を形成しない。))

【0010】

50

他の態様において、本発明は前記化合物(1)からなる有機EL素子用材料を提供する。

【0011】

さらに他の態様において、本発明は陽極、陰極、及び該陽極と陰極の間に有機層を有し、該有機層が発光層を含む有機エレクトロルミネッセンス素子であって、該有機層の少なくとも1層が前記化合物(1)を含有する有機EL素子を提供する。

【0012】

さらにまた他の態様において、本発明は前記有機EL素子を備えた電子機器を提供する。

【発明の効果】

【0013】

前記化合物(1)を用いることにより、外部量子効率が高く、かつ長寿命の有機EL素子が得られる。

10

【図面の簡単な説明】

【0014】

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

【発明を実施するための形態】

【0015】

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

20

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

【0016】

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

30

【0017】

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

40

【0018】

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

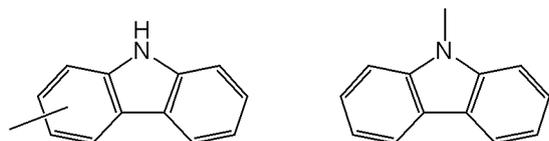
50

本明細書中において、「ヘテロアリール基」、「ヘテロアリーレン基」及び「複素環基」は、環形成原子として、少なくとも1つのヘテロ原子を含む基であり、該ヘテロ原子としては、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子及びセレン原子から選ばれる1種以上であることが好ましい。

【0019】

本明細書中において、「置換もしくは無置換のカルバゾリル基」は、下記のカルバゾリル基、

【化3】



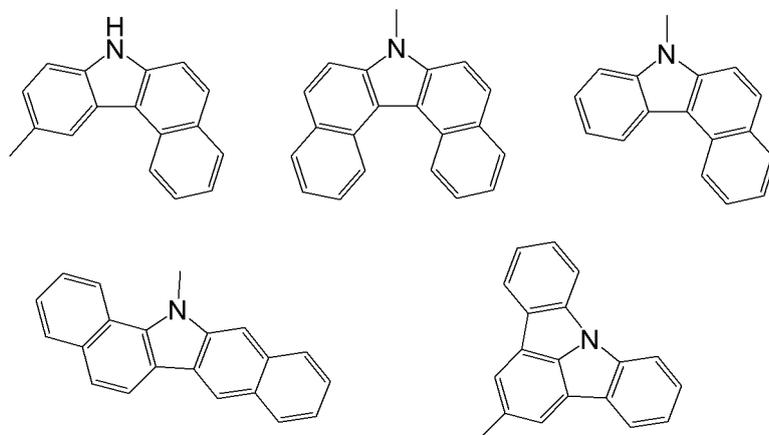
10

及び上記の基に対して、さらに任意の置換基を有する置換カルバゾリル基を表す。

なお、当該置換カルバゾリル基は、任意の置換基同士が互いに結合して縮環してもよく、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子及びセレン原子等のヘテロ原子を含んでもよく、また、結合位置は1位～9位のいずれであってもよい。このような置換カルバゾリル基の具体例として、例えば、下記に示す基が挙げられる。

【0020】

【化4】



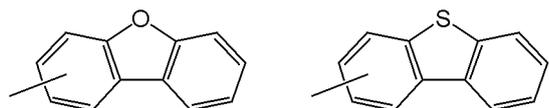
20

30

【0021】

本明細書において、「置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基」及び「置換もしくは無置換のジベンゾチオフェニル基」は、下記のジベンゾフラニル基及びジベンゾチオフェニル基、

【化5】



40

及び上記の基に対して、さらに任意の置換基を有する置換ジベンゾフラニル基及び置換ジベンゾチオフェニル基を表す。

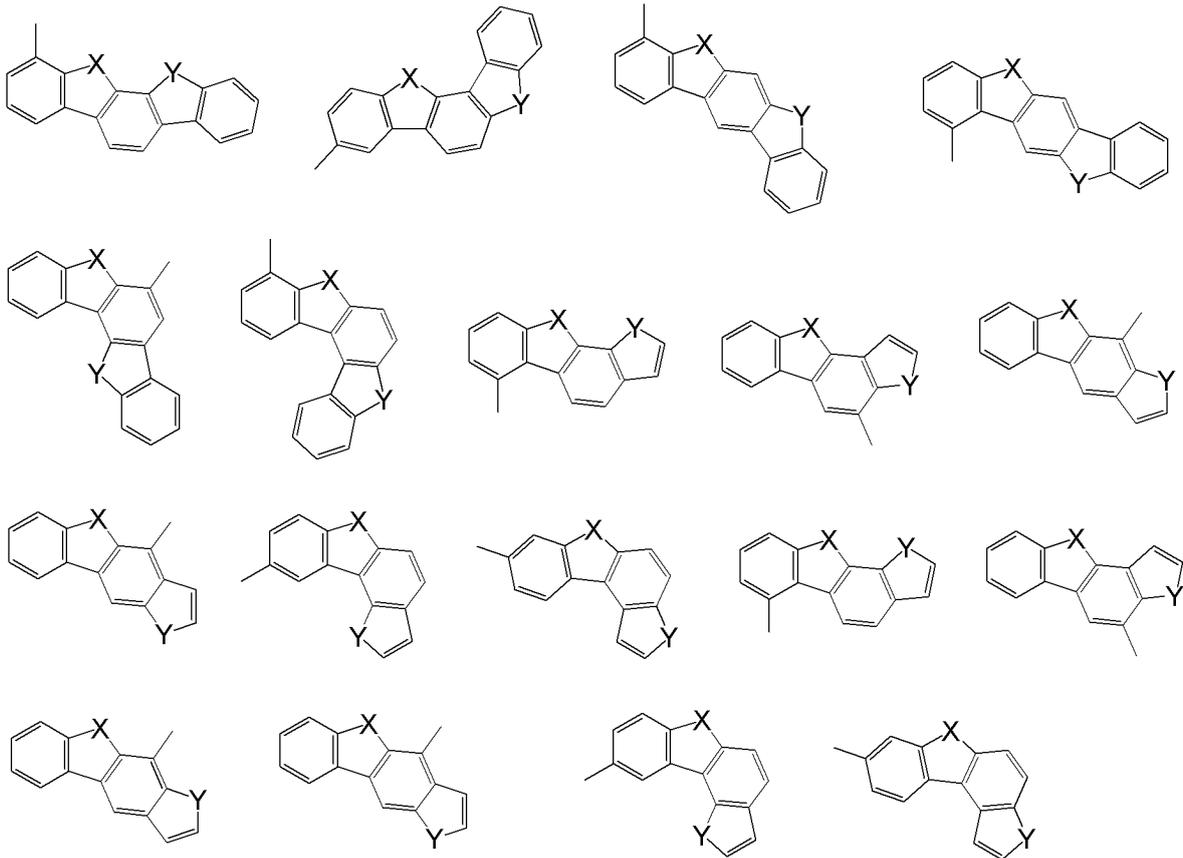
なお、当該置換ジベンゾフラニル基及び置換ジベンゾチオフェニル基は、任意の置換基同士が互いに結合して縮環してもよく、窒素原子、酸素原子、硫黄原子、ケイ素原子及びセレン原子等のヘテロ原子を含んでもよく、また、結合位置は1位～8位のいずれであってもよい。

このような置換ジベンゾフラニル基及び置換ジベンゾチオフェニル基の具体例として、例えば、下記に示す基が挙げられる。

50

【 0 0 2 2 】

【 化 6 】



10

20

[上記式中、Xは酸素原子又は硫黄原子を表し、Yは酸素原子、硫黄原子、NH、NR^a (R^aはアルキル基又はアリール基である。)、CH₂、又は、CR^b₂ (R^bはアルキル基又はアリール基である。)を表す。]

【 0 0 2 3 】

また、「置換基」、又は「置換もしくは無置換」との記載における置換基としては、別段の定めのない限り、炭素数1~50(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のアルキル基；環形成炭素数3~50(好ましくは3~10、より好ましくは3~8、さらに好ましくは5又は6)のシクロアルキル基；環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、より好ましくは6~18)のアリール基；環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、より好ましくは6~18)のアリール基を有する炭素数7~51(好ましくは7~30、より好ましくは7~20)のアラルキル基；アミノ基；炭素数1~50(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のアルキル基及び環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、より好ましくは6~18)のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基；炭素数1~50(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のアルキル基を有するアルコキシ基；環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、より好ましくは6~18)のアリール基を有するアリールオキシ基；炭素数1~50(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のアルキル基及び環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、より好ましくは6~18)のアリール基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基；環形成原子数5~50(好ましくは5~24、より好ましくは5~13)のヘテロアリール基；炭素数1~50(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のハロアルキル基；ハロゲン原子(フッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子)；シアノ基；ニトロ基；炭素数1~50(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のアルキル基及び環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、より好ましくは6~18)のアリール基から選ばれる置換基を有するスルホニル基；炭素数1~50

30

40

50

(好ましくは1~18、より好ましくは1~8)のアルキル基及び環形成炭素数6~50(好ましくは6~25、より好ましくは6~18)のアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換ホスフォルル基;アルキルスルホニルオキシ基;アリールスルホニルオキシ基;アルキルカルボニルオキシ基;アリールカルボニルオキシ基;ホウ素含有基;亜鉛含有基;スズ含有基;ケイ素含有基;マグネシウム含有基;リチウム含有基;ヒドロキシ基;アルキル置換又はアリール置換カルボニル基;カルボキシ基;ビニル基;(メタ)アクリロイル基;エポキシ基;並びにオキセタニル基からなる群より選ばれる少なくとも1つが好ましいが、特にこれらに制限されるものではない。

これらの置換基は、さらに上述の任意の置換基により置換されていてもよい。また、これらの置換基は、複数の置換基が互いに結合して環を形成していてもよい。

「置換もしくは無置換の」という場合における「無置換」とは前記置換基で置換されておらず、水素原子が結合していることを意味する。

【0024】

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

【0025】

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

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

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

前記環形成炭素数6~50のアリール基を有する炭素数7~51のアラルキル基の具体例としては、アリール基部位が前記環形成炭素数6~50のアリール基の具体例であるも

10

20

30

40

50

のが挙げられ、アルキル基部位が前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の具体例であるものが挙げられる。前記炭素数 7 ~ 51 のアラルキル基の好ましい例としては、前記アリアル基部位が前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基の好ましい例であるものが挙げられ、前記アルキル基部位が前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の好ましい例であるものが挙げられる。より好ましい具体例、さらに好ましい具体例についても同様である。

前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基の具体例としては、アリアル基部位が前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基の具体例であるものが挙げられ、アルキル基部位が前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の具体例であるものが挙げられる。前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基から選ばれる置換基を有するモノ置換又はジ置換アミノ基の好ましい例としては、前記アリアル基部位が前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基の好ましい例であるものが挙げられ、前記アルキル基部位が前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の好ましい例であるものが挙げられる。より好ましい具体例、さらに好ましい具体例、特に好ましい具体例についても同様である。

10

前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基を有するアルコキシ基の具体例としては、アルキル基部位が前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の具体例であるものが挙げられる。前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基を有するアルコキシ基の好ましい例としては、前記アルキル基部位が前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の好ましい例であるものが挙げられる。より好ましい具体例、さらに好ましい具体例、特に好ましい具体例についても同様である。

前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基を有するアリアルオキシ基の具体例としては、アリアル基部位が前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基の具体例であるものが挙げられる。前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基を有するアリアルオキシ基の好ましい例としては、前記アリアル基部位が前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基の好ましい例であるものが挙げられる。より好ましい具体例、さらに好ましい具体例についても同様である。

20

前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基としては、モノアルキルシリル基、ジアルキルシリル基、トリアルキルシリル基；モノアリアルシリル基、ジアリアルシリル基、トリアリアルシリル基；モノアルキルジアリアルシリル基、ジアルキルモノアリアルシリル基が挙げられ、これらのアルキル基部位及びアリアル部位を、それぞれ、前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基、炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の具体例とした例が挙げられる。また、前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基から選ばれる置換基を有するモノ置換、ジ置換又はトリ置換シリル基の好ましい例としては、モノアルキルシリル基、ジアルキルシリル基、トリアルキルシリル基；モノアリアルシリル基、ジアリアルシリル基、トリアリアルシリル基；モノアルキルジアリアルシリル基、ジアルキルモノアリアルシリル基のアルキル基部位及びアリアル部位が、それぞれ、前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリアル基、炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の好ましい例であるものが挙げられる。より好ましい具体例、さらに好ましい具体例、特に好ましい具体例についても同様である。

30

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

40

50

げられる。これらの中でも、ピリジル基、イミダゾピリジル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、トリアジニル基、ベンズイミダゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、カルバゾリル基、9-フェニルカルバゾリル基、フェナントロリニル基、キナゾリニル基が好ましい。

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

前記炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基の具体例としては、前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の水素原子が前記ハロゲン原子で置換された例が挙げられ、その場合の好ましいアルキル基は、前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の好ましい例であるものが挙げられる。より好ましい具体例、さらに好ましい具体例、特に好ましい具体例についても同様である。

前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するスルホニル基、前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換ホスフォリル基、アルキルスルホニルオキシ基、アリールスルホニルオキシ基、アルキルカルボニルオキシ基、アリールカルボニルオキシ基、アルキル置換又はアリール置換カルボニル基の例としては、それぞれのアリール基部位とアルキル基部位を、それぞれ、前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の具体例とした例が挙げられる。また、前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するスルホニル基、前記炭素数 1 ~ 50 のアルキル基及び環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基から選ばれる置換基を有するジ置換ホスフォリル基、アルキルスルホニルオキシ基、アリールスルホニルオキシ基、アルキルカルボニルオキシ基、アリールカルボニルオキシ基、アルキル置換又はアリール置換カルボニル基の好ましい例としては、それぞれのアリール基部位とアルキル基部位が、それぞれ、前記環形成炭素数 6 ~ 50 のアリール基、炭素数 1 ~ 50 のアルキル基の好ましい例であるものが挙げられる。より好ましい具体例、さらに好ましい具体例、特に好ましい具体例についても同様である。

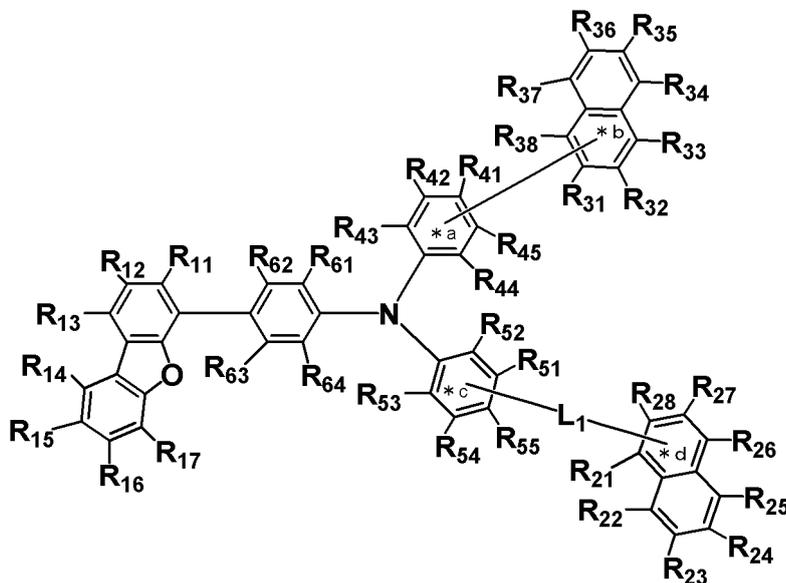
【 0 0 2 6 】

本明細書中、好ましいとする態様（例えば、化合物、各種基、数値範囲等）は、他のあらゆる態様（例えば、化合物、各種基、数値範囲等）と任意に組み合わせることができ、また、好ましいとする態様（より好ましい態様、更に好ましい態様、特に好ましい態様を含む。）の組み合わせはより好ましいと言える。

【 0 0 2 7 】

前記化合物（1）は下記式（1）で表される。

【 化 7 】



【 0 0 2 8 】

式(1)において、 $R_{11} \sim R_{17}$ 及び $R_{61} \sim R_{64}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数1~20、好ましくは1~5、より好ましくは1~4のアルキル基、又は無置換の環形成原子数3~50、好ましくは3~24、より好ましくは3~12のヘテロアリール基である。

$R_{41} \sim R_{45}$ の1つは、*aに結合する単結合を表し、*aに結合する単結合以外の $R_{41} \sim R_{45}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数1~20、好ましくは1~5、より好ましくは1~4のアルキル基、又は無置換の環形成原子数3~50、好ましくは3~24、より好ましくは3~12のヘテロアリール基である。

$R_{51} \sim R_{55}$ の1つは、*cに結合する単結合を表し、*cに結合する単結合以外の $R_{51} \sim R_{55}$ は、それぞれ独立に、水素原子、無置換の炭素数1~20、好ましくは1~5、より好ましくは1~4のアルキル基、又は無置換の環形成原子数3~50、好ましくは3~24、より好ましくは3~12のヘテロアリール基である。

10

$R_{21} \sim R_{28}$ の1つは、*dに結合する単結合を表し、*dに結合する単結合以外の $R_{21} \sim R_{28}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~20、好ましくは1~5、より好ましくは1~4のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50、好ましくは6~24、より好ましくは6~12のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数3~50、好ましくは3~24、より好ましくは3~12のヘテロアリール基である。

$R_{31} \sim R_{38}$ の1つは、*bに結合する単結合を表し、*bに結合する単結合以外の $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1~20、好ましくは1~5、より好ましくは1~4のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~50、好ましくは6~24、より好ましくは6~12のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数3~50、好ましくは3~24、より好ましくは3~12のヘテロアリール基である。

20

L_1 は、単結合、置換もしくは無置換のフェニレン基、又は置換もしくは無置換のビフェニレン基である。

$R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 及び $R_{61} \sim R_{64}$ において、隣接する置換基同士が互いに結合することはない。

【0029】

30

式(1)において、好ましくは $R_{11} \sim R_{17}$ は、すべて水素原子であり、より好ましくは $R_{11} \sim R_{17}$ 、*aに結合する単結合以外の前記 $R_{41} \sim R_{45}$ 、*cに結合する単結合以外の前記 $R_{51} \sim R_{55}$ 及び $R_{61} \sim R_{64}$ はすべて水素原子である。

【0030】

式(1)において、好ましくは、*dに結合する単結合以外の前記 $R_{21} \sim R_{28}$ 及び*bに結合する単結合以外の前記 $R_{31} \sim R_{38}$ が、すべて水素原子である。

【0031】

式(1)において、特に好ましくは、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 $R_{41} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、及び $R_{31} \sim R_{38}$ が、すべて水素原子である。

【0032】

40

式(1)において、 L_1 は、好ましくは単結合、無置換のフェニレン基、又は無置換のビフェニレン基、より好ましくは単結合、又は無置換のフェニレン基、さらに好ましくは、単結合である。

【0033】

$R_{11} \sim R_{17}$ 、*aに結合する単結合以外の前記 $R_{41} \sim R_{45}$ 、*cに結合する単結合以外の前記 $R_{51} \sim R_{55}$ 及び $R_{61} \sim R_{64}$ における、前記無置換の炭素数1~20アルキル基、また、*dに結合する単結合以外の前記 $R_{21} \sim R_{28}$ 及び*bに結合する単結合以外の前記 $R_{31} \sim R_{38}$ における、前記置換もしくは無置換の炭素数1~20アルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、*t*-ブチル基、ペンチル基(異性体基を含む)、ヘキシ

50

ル基（異性体基を含む）、ヘブチル基（異性体基を含む）、オクチル基（異性体基を含む）、ノニル基（異性体基を含む）、デシル基（異性体基を含む）、ウンデシル基（異性体基を含む）、及びドデシル基（異性体基を含む）等が挙げられ、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、*t*-ブチル基、及びペンチル基（異性体基を含む）が好ましく、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*s*-ブチル基、及び*t*-ブチル基がより好ましく、メチル基及び*t*-ブチル基がさらに好ましい。

【0034】

前記環形成原子数3～50のヘテロアリアル基は、少なくとも1個、好ましくは1～3個の同一又は異なるヘテロ原子（例えば、窒素原子、硫黄原子及び酸素原子）を含む。

$R_{11} \sim R_{17}$ 、*aに結合する単結合以外の前記 $R_{41} \sim R_{45}$ 、*cに結合する単結合以外の前記 $R_{51} \sim R_{55}$ 及び $R_{61} \sim R_{64}$ における、前記無置換の環形成原子数3～50のヘテロアリアル基、また、*dに結合する単結合以外の前記 $R_{21} \sim R_{28}$ 及び*bに結合する単結合以外の前記 $R_{31} \sim R_{38}$ における、前記置換もしくは無置換の環形成原子数3～50のヘテロアリアル基としては、例えば、ピロリル基、フリル基、チエニル基、ピリジル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、トリアジニル基、イミダゾリル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、ピラゾリル基、イソオキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、トリアゾリル基、インドリル基、イソインドリル基、ベンゾフラニル基、イソベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、インドリジニル基、キノリジニル基、キノリル基、イソキノリル基、シンノリル基、フタラジニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、ベンズイミダゾリル基、ベンズオキサゾリル基、ベンズチアゾリル基、インダゾリル基、ベンズイソキサゾリル基、ベンズイソチアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、カルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、フェノキサジニル基、及びキサンテニル基などが挙げられ、フリル基、チエニル基、ピリジル基、ピリダジニル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、トリアジニル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、カルバゾリル基、が好ましく、ベンゾフラニル基、ベンゾチオフェニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、カルバゾリル基がより好ましい。

【0035】

*dに結合する単結合以外の前記 $R_{21} \sim R_{28}$ 及び*bに結合する単結合以外の前記 $R_{31} \sim R_{38}$ における、前記置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリアル基としては、例えば、フェニル基、ナフチルフェニル基、ピフェニルイル基、ターフェニルイル基、ピフェニレニル基、ナフチル基、フェニルナフチル基、アセナフチレニル基、アントリル基、ベンゾアントリル基、アセアントリル基、フェナントリル基、ベンゾフェナントリル基、フェナレニル基、フルオレニル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、7-フェニル-9,9-ジメチルフルオレニル基、ペンタセニル基、ピセニル基、ペンタフェニル基、プレニル基、クリセニル基、ベンゾクリセニル基、*s*-インダセニル基、*as*-インダセニル基、フルオランテニル基、及びペリレニル基等が挙げられ、フェニル基、ナフチルフェニル基、ピフェニルイル基、ターフェニルイル基、ナフチル基、9,9-ジメチルフルオレニル基が好ましく、フェニル基、ピフェニルイル基、ナフチル基、9,9-ジメチルフルオレニル基がより好ましく、フェニル基がさらに好ましい。

【0036】

本発明の一態様において、化合物(1)は、下記式(2-1)又は式(2-2)で表されると好ましい。

10

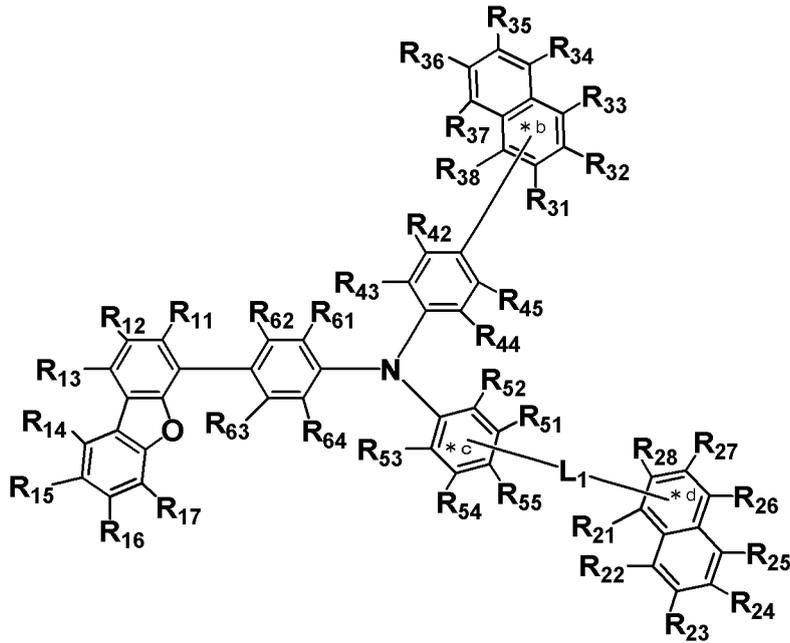
20

30

40

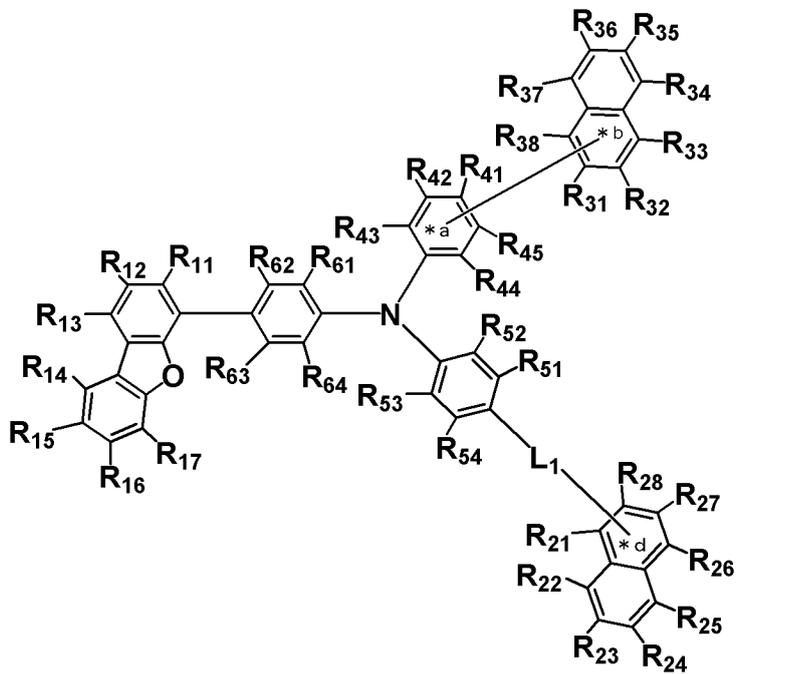
50

【化 8】



10

【化 9】



20

30

(式(2-1)、式(2-2)において、R₁₁~R₁₇、R₂₁~R₂₈、R₃₁~R₃₈、R₄₁~R₄₅、R₅₁~R₅₅、R₆₁~R₆₄、L₁は、前記と同じである。)

40

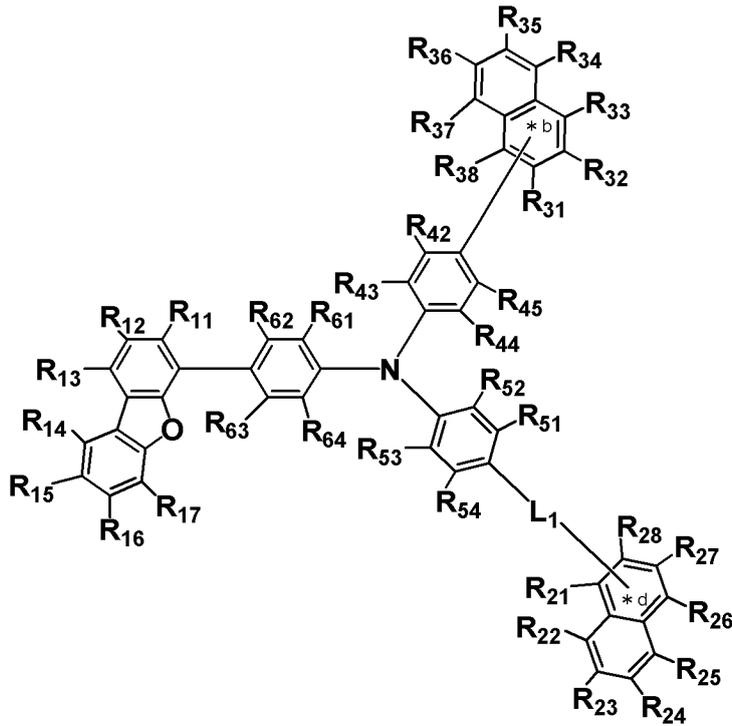
式(2-1)、式(2-2)において、R₁₁~R₁₇、R₂₁~R₂₈、R₃₁~R₃₈、R₄₁~R₄₅、R₅₁~R₅₅、R₆₁~R₆₄、L₁の各基の具体例、好ましい炭素数及び原子数等は前記と同じである。また、R₁₁~R₁₇、R₂₁~R₂₈、R₃₁~R₃₈、R₄₁~R₄₅、R₅₁~R₅₅、R₆₁~R₆₄において、隣接する置換基同士が互いに結合することはなく、環を形成しない。

【0037】

本発明の一態様において、化合物(1)は、下記式(3-1)で表されるとより好ましい。

50

【化10】



(3-1)

10

20

(式(3-1)において、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 は、前記と同じである。)

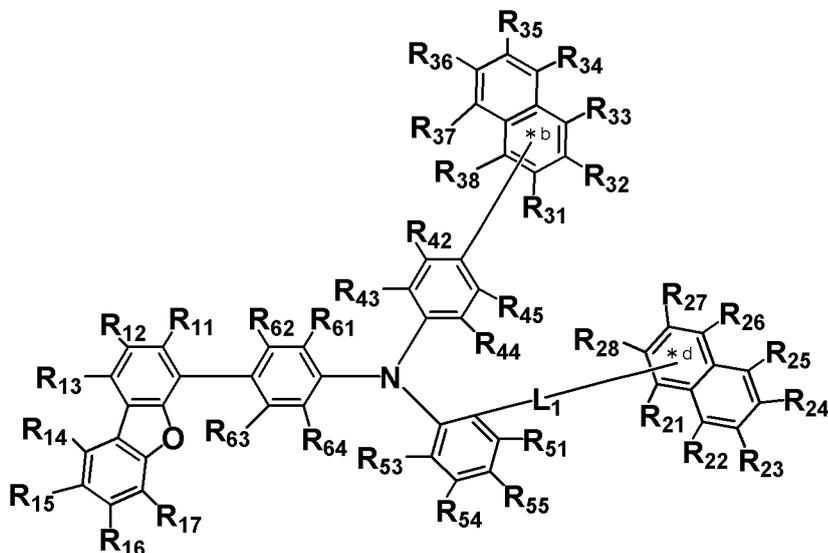
式(3-1)において、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 の各基の具体例、好ましい炭素数及び原子数等は前記と同じである。また、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{54}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ において、隣接する置換基同士が互いに結合することはなく、環を形成しない。

【0038】

本発明の一態様において、化合物(1)は、下記式(3-2)～式(3-9)のいずれかで表されるとより好ましい。

30

【化11】

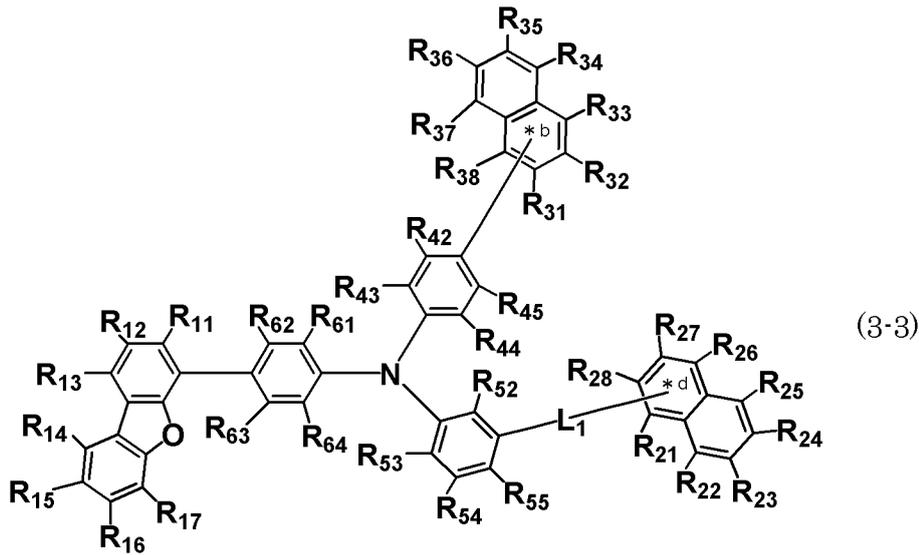


(3-2)

40

50

【化 1 2】



10

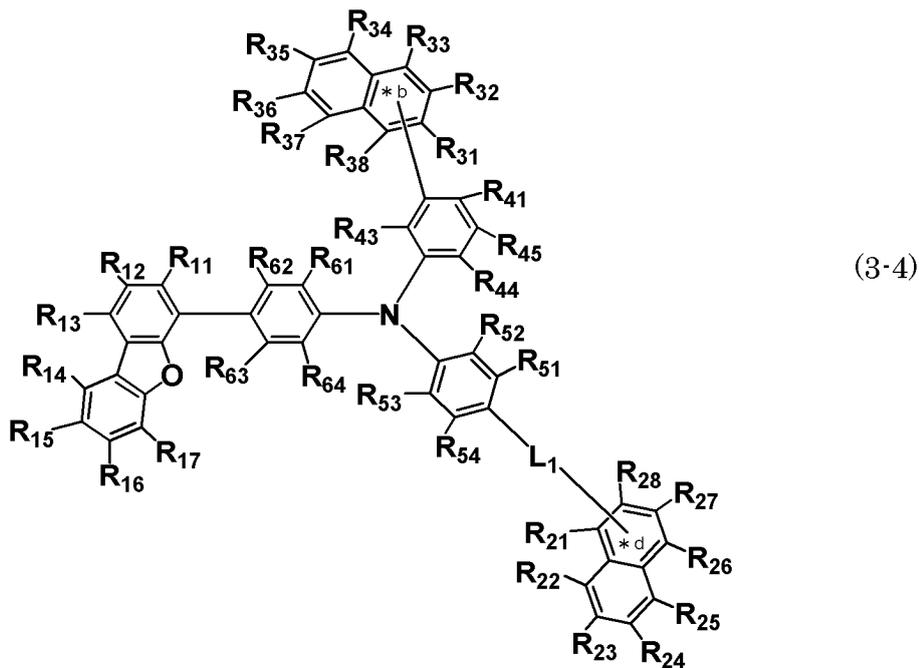
(式(3-2)、式(3-3)において、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 は、前記と同じである。)

式(3-2)、式(3-3)において、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 の各基の具体例、好ましい炭素数及び原子数等は前記と同じである。また、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $R_{42} \sim R_{45}$ 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ において、隣接する置換基同士が互いに結合することはなく、環を形成しない。

20

【0039】

【化 1 3】

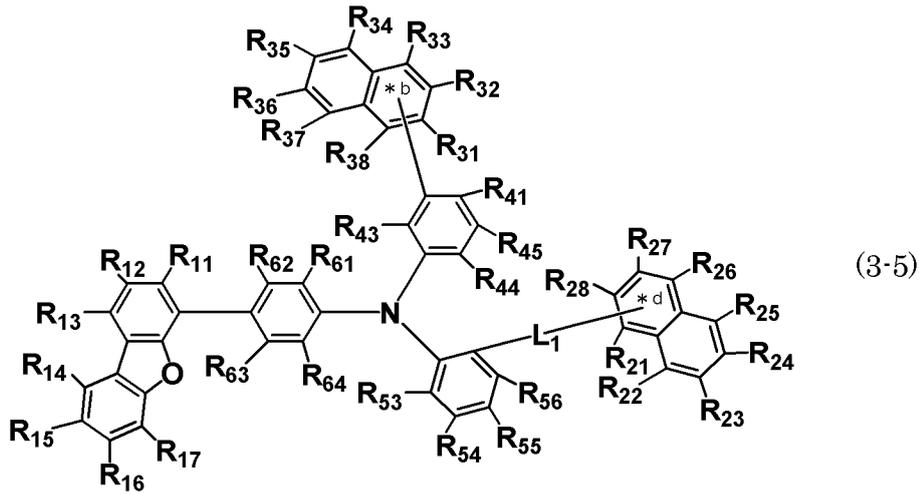


30

40

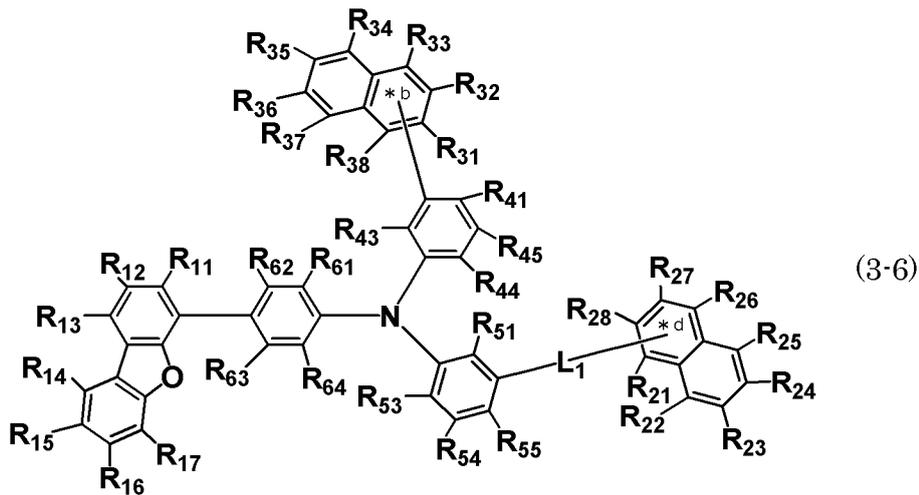
50

【化 1 4】



10

【化 1 5】



20

30

(式(3-4)、式(3-5)及び式(3-6)において、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 R_{41} 、 $R_{43} \sim R_{45}$ 、 $R_{53} \sim R_{56}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 は、前記と同じである。)

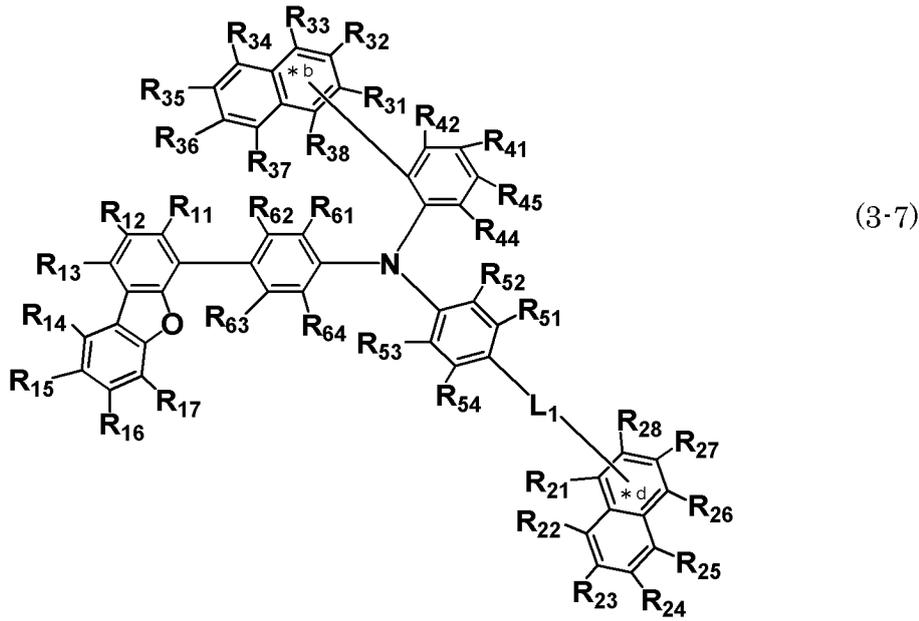
式(3-4)、式(3-5)及び式(3-6)において、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 R_{41} 、 $R_{43} \sim R_{45}$ 、 $R_{53} \sim R_{56}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 の各基の具体例、好ましい炭素数及び原子数等は前記と同じである。また、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 R_{41} 、 $R_{43} \sim R_{45}$ 、 $R_{53} \sim R_{56}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ において、隣接する置換基同士が互いに結合することはなく、環を形成しない。

【0040】

40

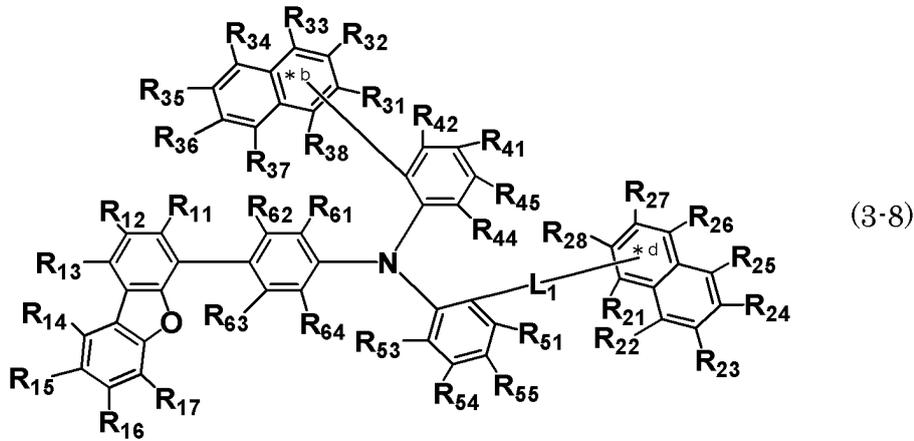
50

【化 1 6】



10

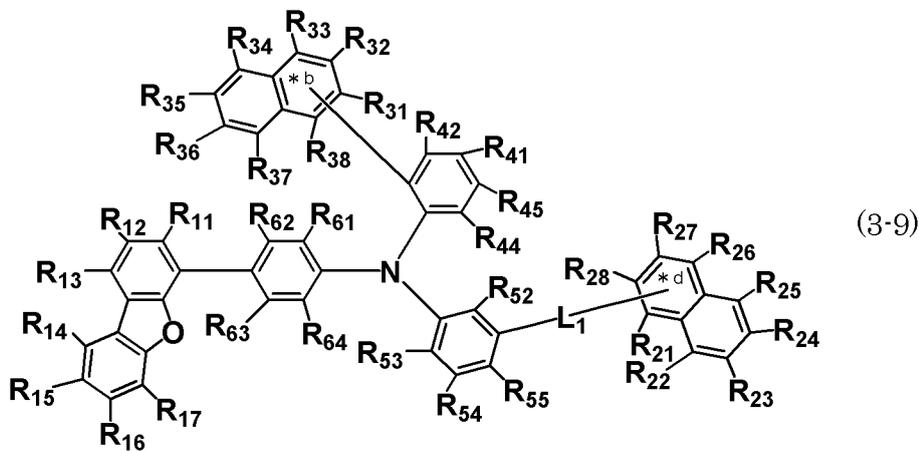
【化 1 7】



20

30

【化 1 8】



40

(式(3-7)、式(3-8)及び式(3-9)において、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 R_{41} 、 R_{42} 、 R_{44} 、 R_{45} 、 $R_{51} \sim R_{55}$ 、 $R_{61} \sim R_{64}$ 、 L_1 は、前記と同じである。)

式(3-7)、式(3-8)及び式(3-9)において、 $R_{11} \sim R_{17}$ 、 $R_{21} \sim R_{28}$

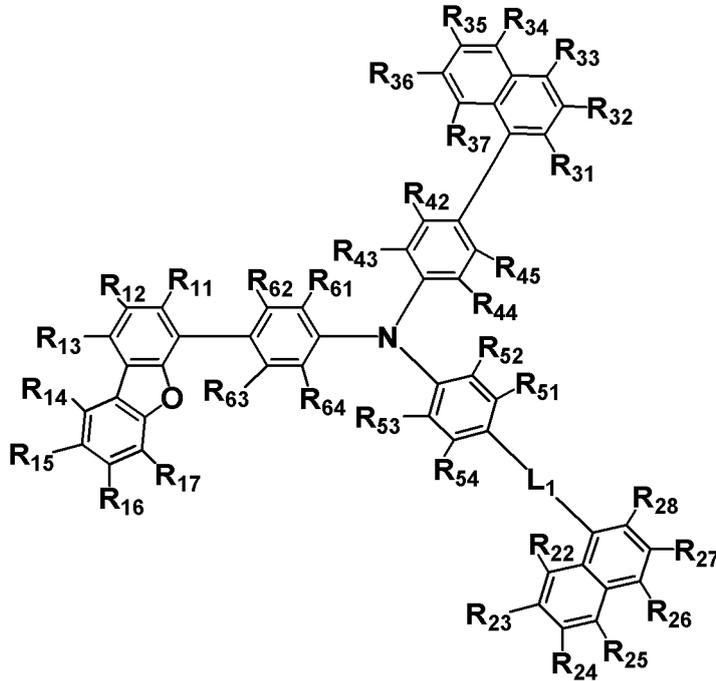
50

8、R₃₁~R₃₈、R₄₁、R₄₂、R₄₄、R₄₅、R₅₁~R₅₅、R₆₁~R₆₄、L₁の各基の具体例、好ましい炭素数及び原子数等は前記と同じである。また、R₁₁~R₁₇、R₂₁~R₂₈、R₃₁~R₃₈、R₄₁、R₄₂、R₄₄、R₄₅、R₅₁~R₅₅、R₆₁~R₆₄において、隣接する置換基同士が互いに結合することはなく、環を形成しない。

【0041】

本発明の他の一態様において、化合物(1)は、下記式(3-1-1)~式(3-1-4)のいずれかで表されるとさらに好ましい。

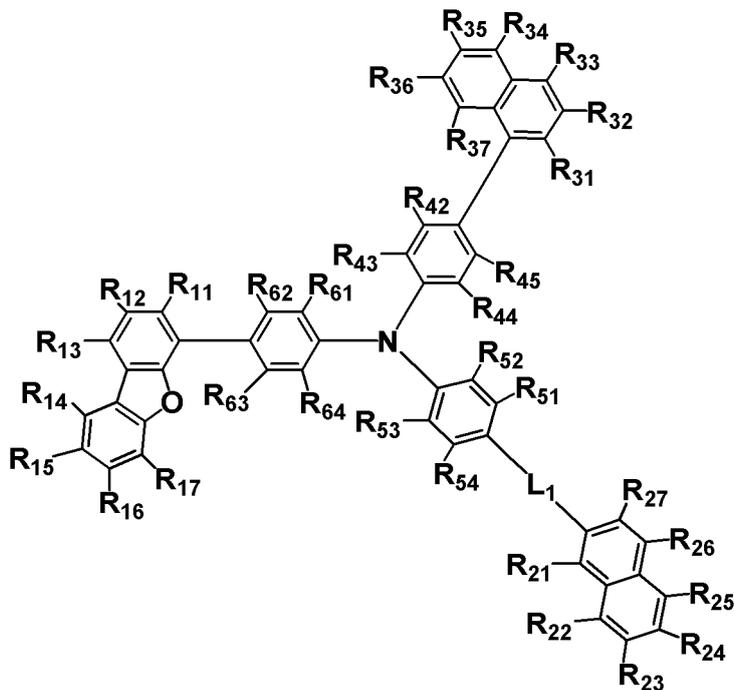
【化19】



10

20

【化20】

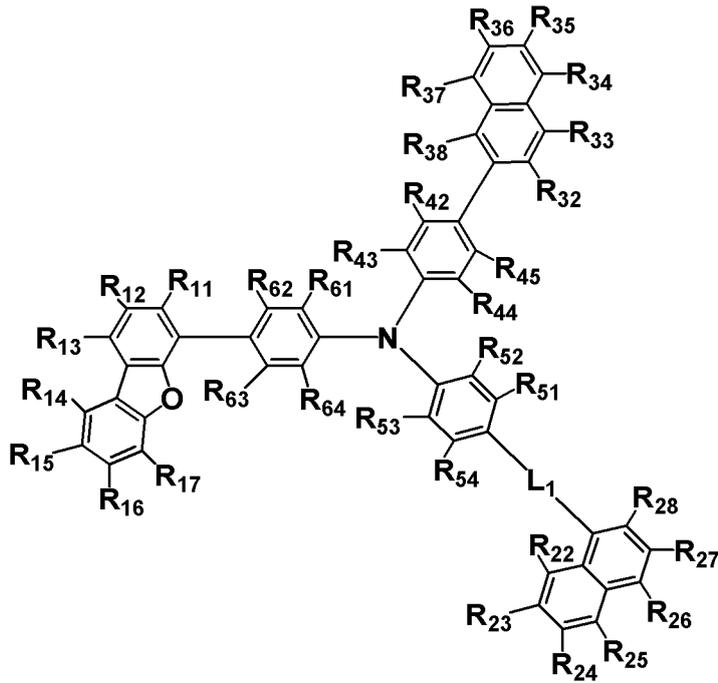


30

40

50

【化 2 1】

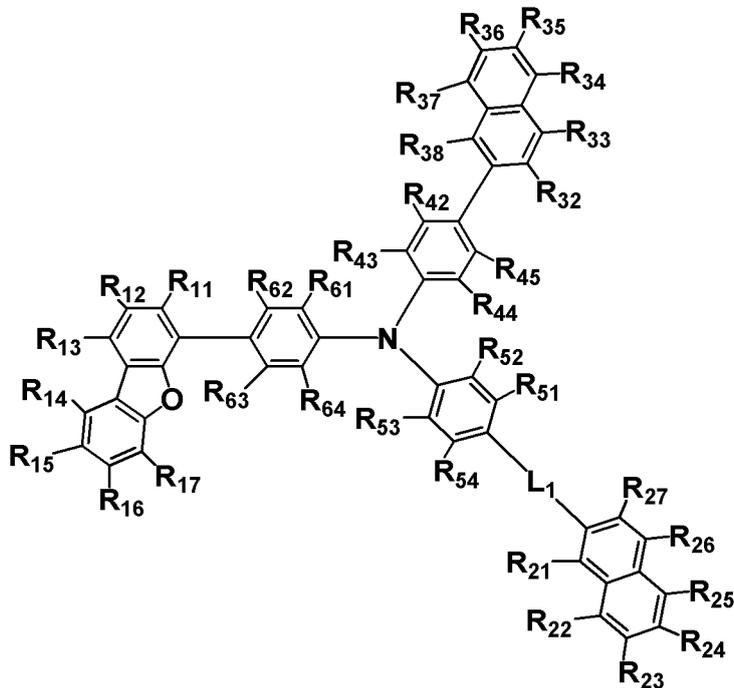


(3-1-3)

10

20

【化 2 2】



(3-1-4)

30

40

(式(3-1-1)、式(3-1-2)、式(3-1-3)及び式(3-1-4)において、R₁₁~R₁₇、R₂₁~R₂₈、R₃₁~R₃₈、R₄₂~R₄₅、R₅₁~R₅₄、R₆₁~R₆₄、L₁は、前記と同じである。)

式(3-1-1)、式(3-1-2)、式(3-1-3)及び式(3-1-4)において、R₁₁~R₁₇、R₂₁~R₂₈、R₃₁~R₃₈、R₄₂~R₄₅、R₅₁~R₅₄、R₆₁~R₆₄、L₁の各基の具体例、好ましい炭素数及び原子数等は前記と同じである。また、R₁₁~R₁₇、R₂₁~R₂₈、R₃₁~R₃₈、R₄₂~R₄₅、R₅₁~R₅₄、R₆₁~R₆₄において、隣接する置換基同士が互いに結合することはなく、環を形成しない。

【0042】

50

R₁₁~R₁₇、R₂₁~R₂₈、R₃₁~R₃₈、R₄₁~R₄₅、R₅₁~R₅₅及びR₆₁~R₆₄において、隣接する置換基同士が互いに結合することはない。

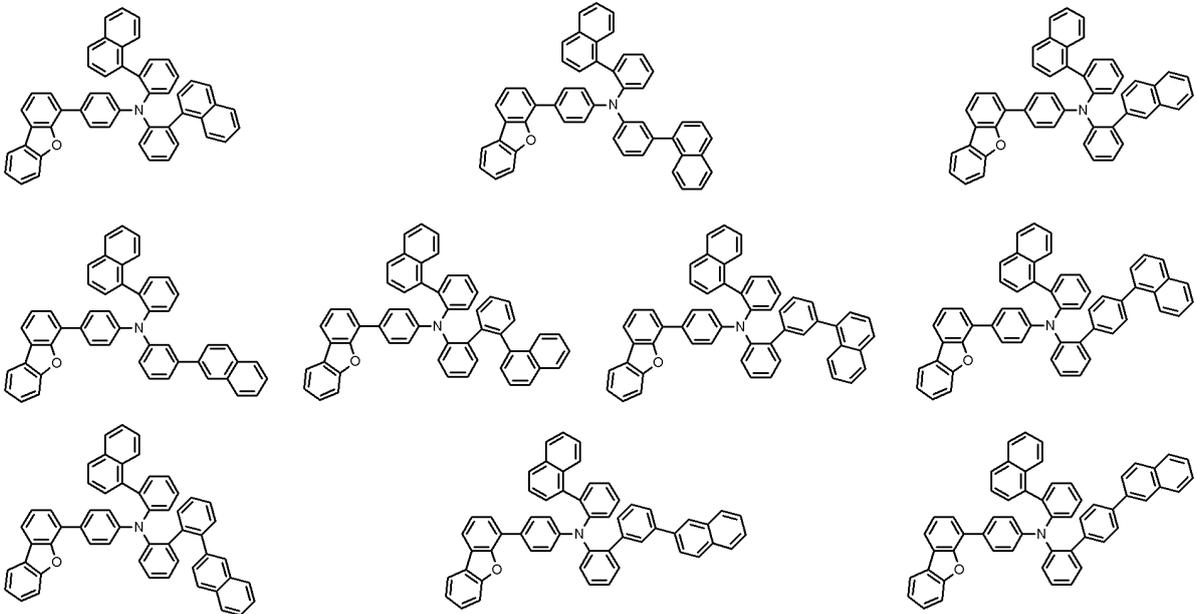
すなわち、R₁₁~R₁₇、R₂₁~R₂₈、R₃₁~R₃₈、R₄₁~R₄₅、R₅₁~R₅₅及びR₆₁~R₆₄において、隣接する置換基同士で環を形成しない。

【0043】

本発明に係る化合物の具体例を以下に挙げるが、特にこれらに制限されるものではない。

【0044】

【化23】

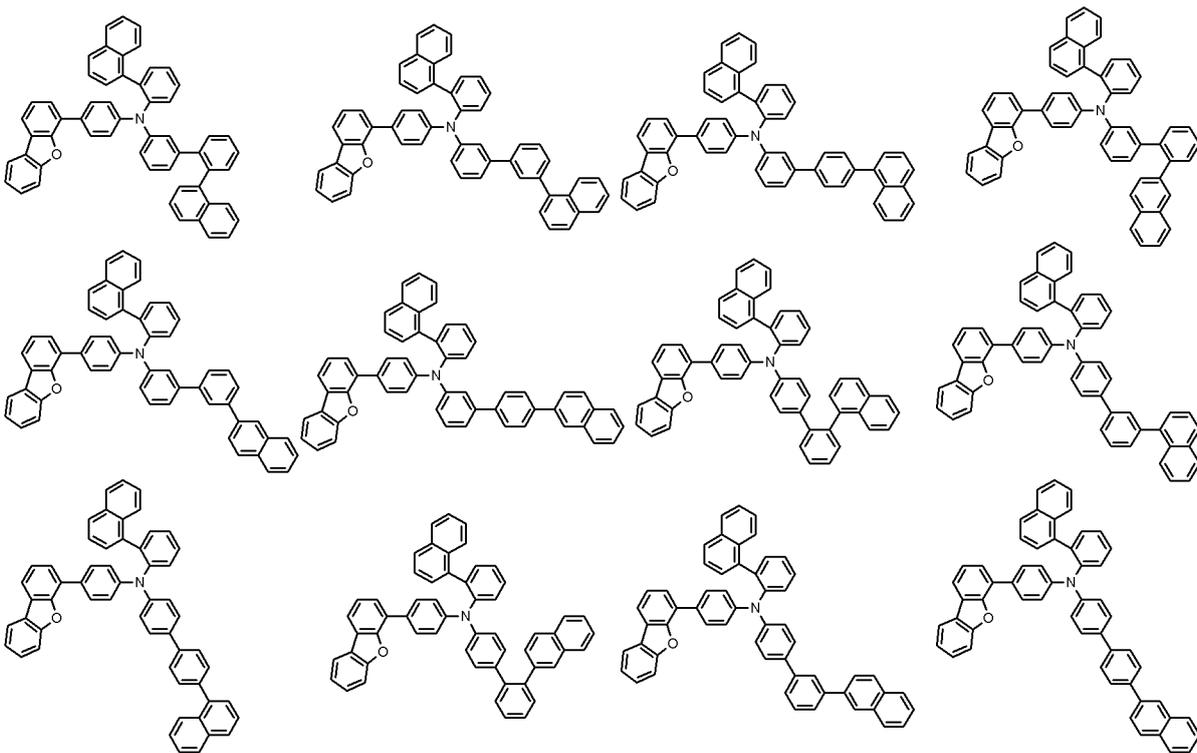


10

20

【0045】

【化24】



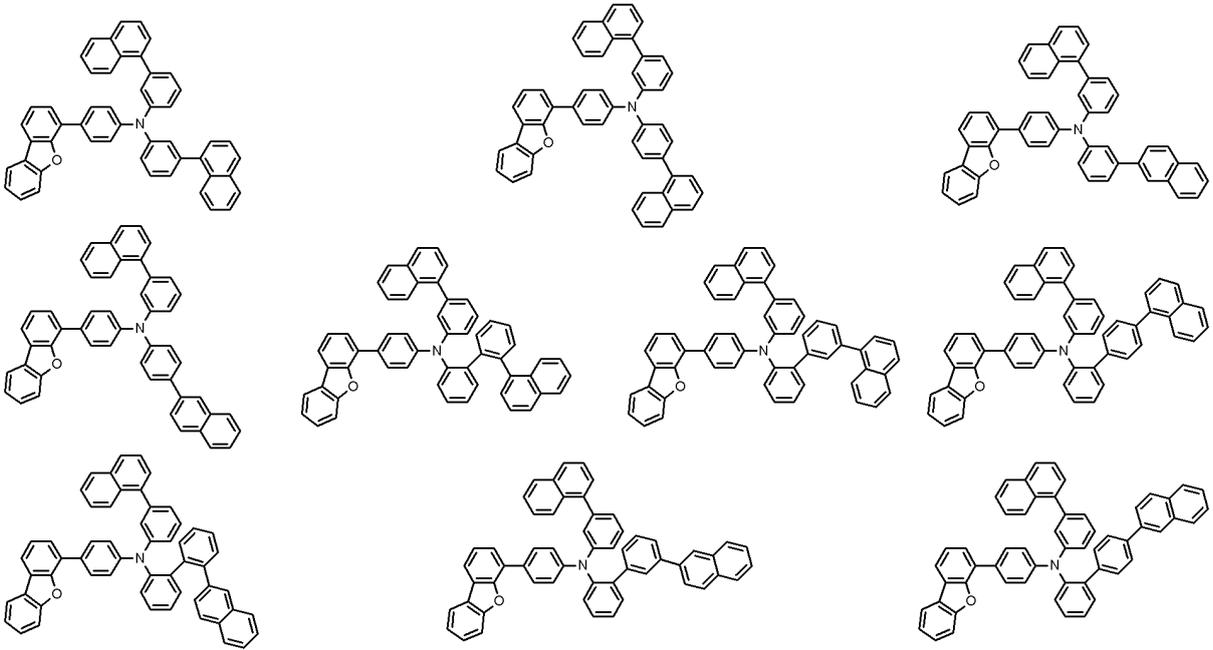
30

40

【0046】

50

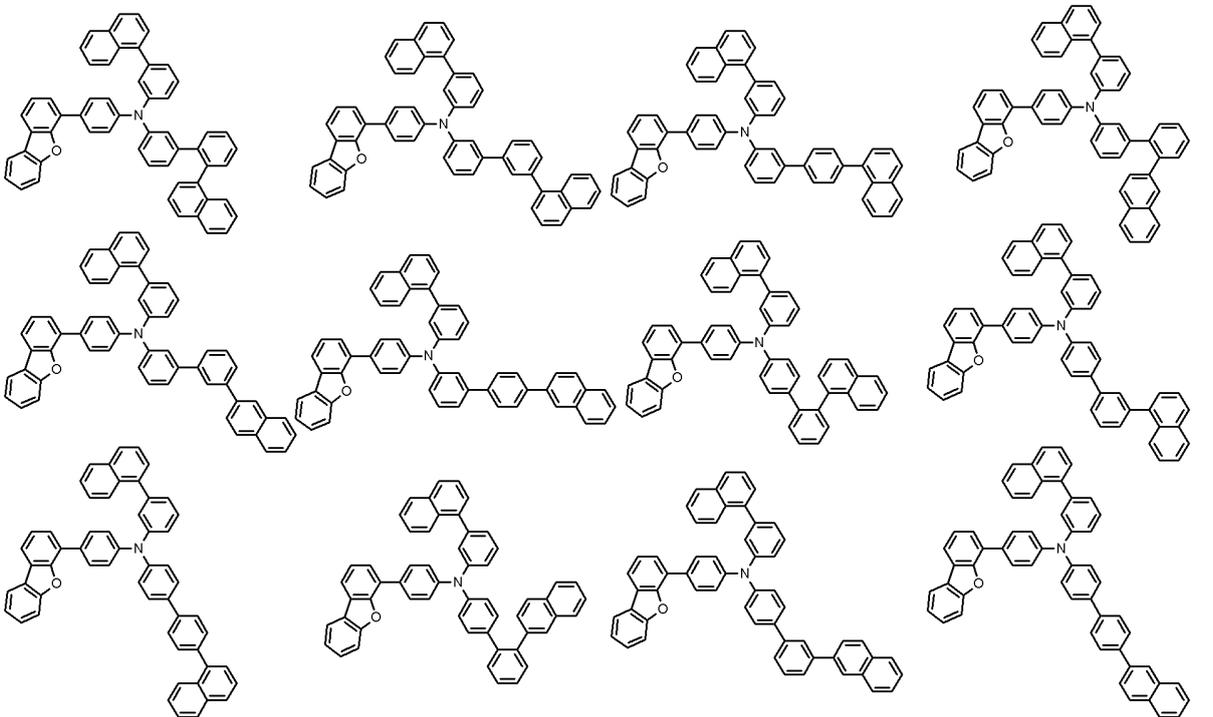
【化 2 5】



10

【 0 0 4 7】

【化 2 6】



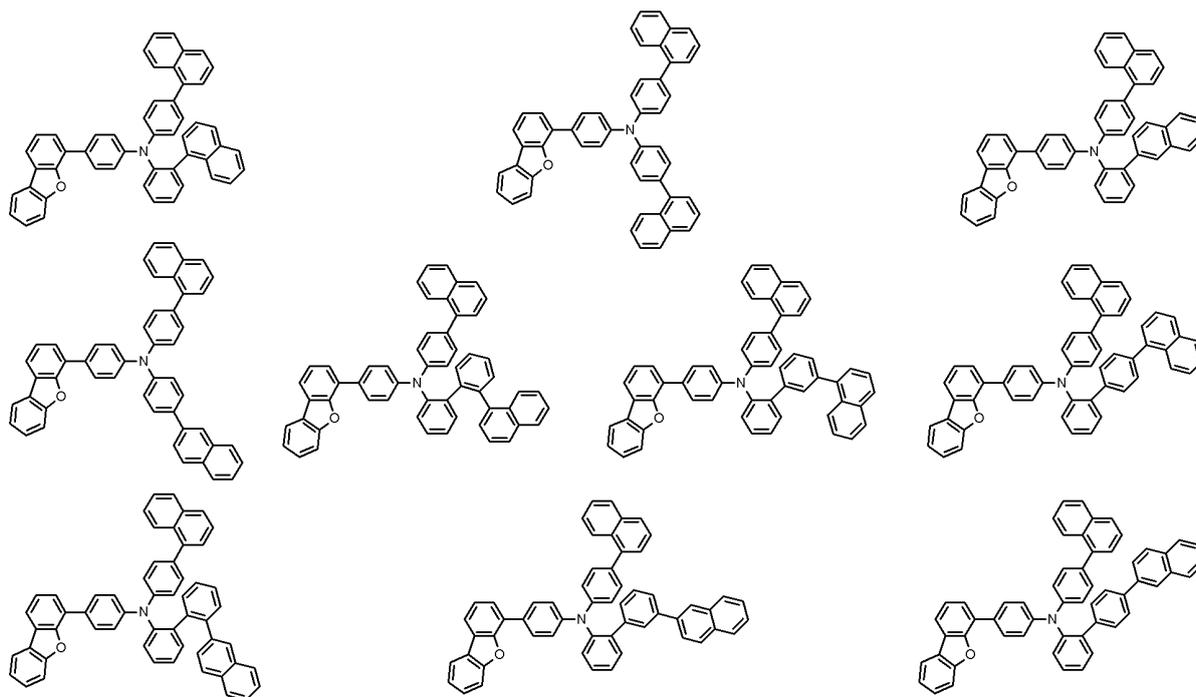
20

30

40

【 0 0 4 8】

【化 2 7】

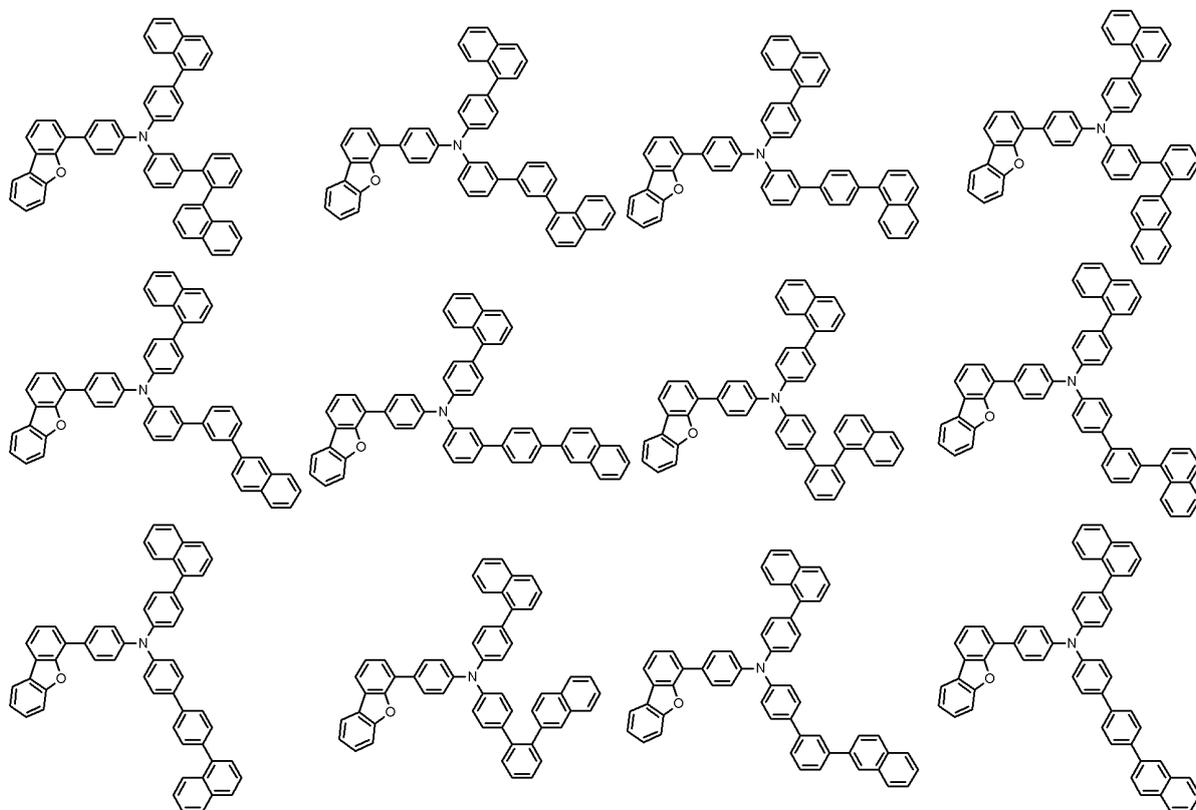


10

20

【 0 0 4 9】

【化 2 8】

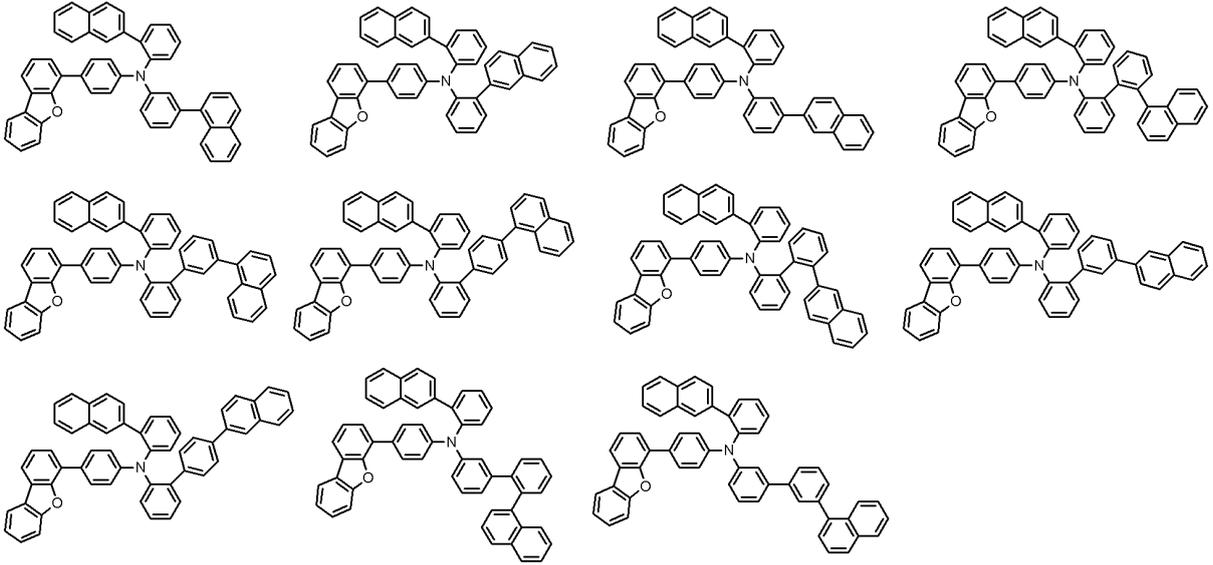


30

40

【 0 0 5 0】

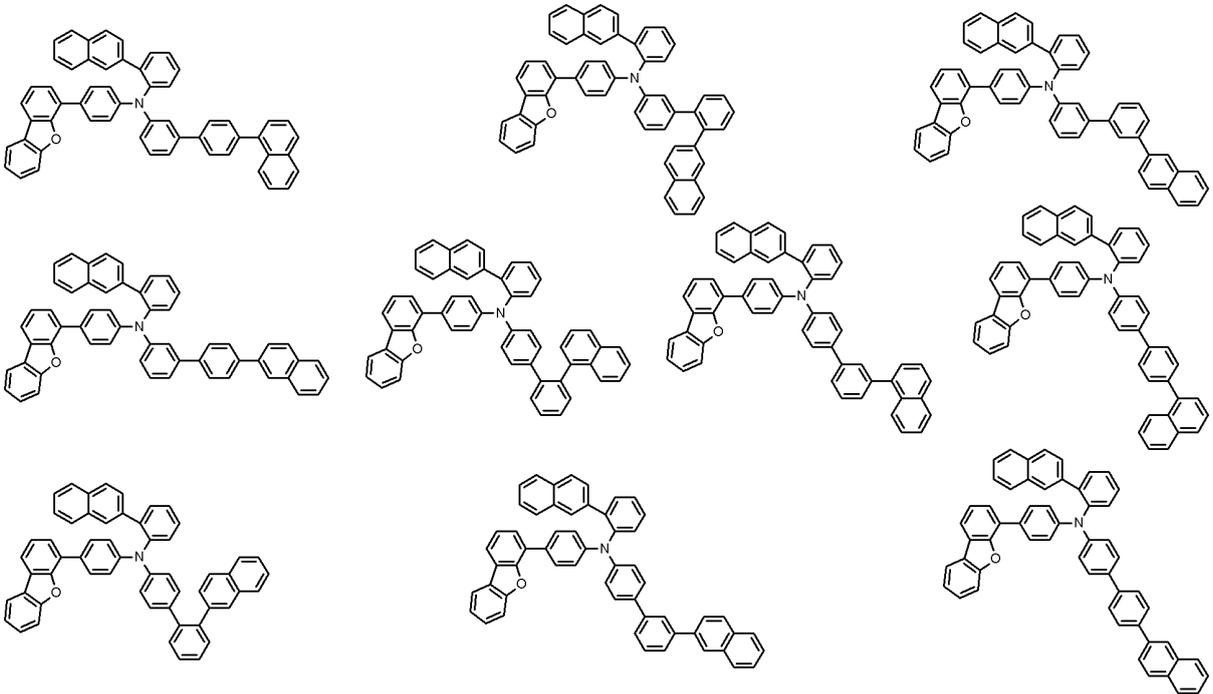
【化 2 9】



10

【 0 0 5 1】

【化 3 0】



20

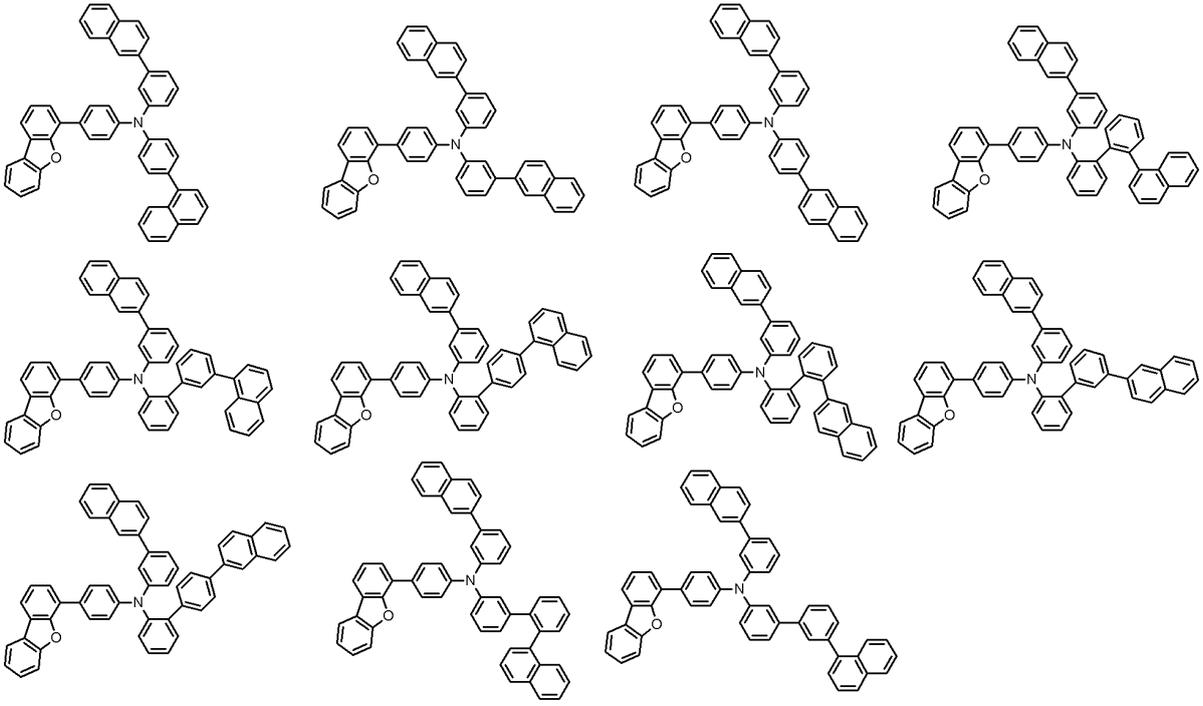
30

【 0 0 5 2】

40

50

【化 3 1】

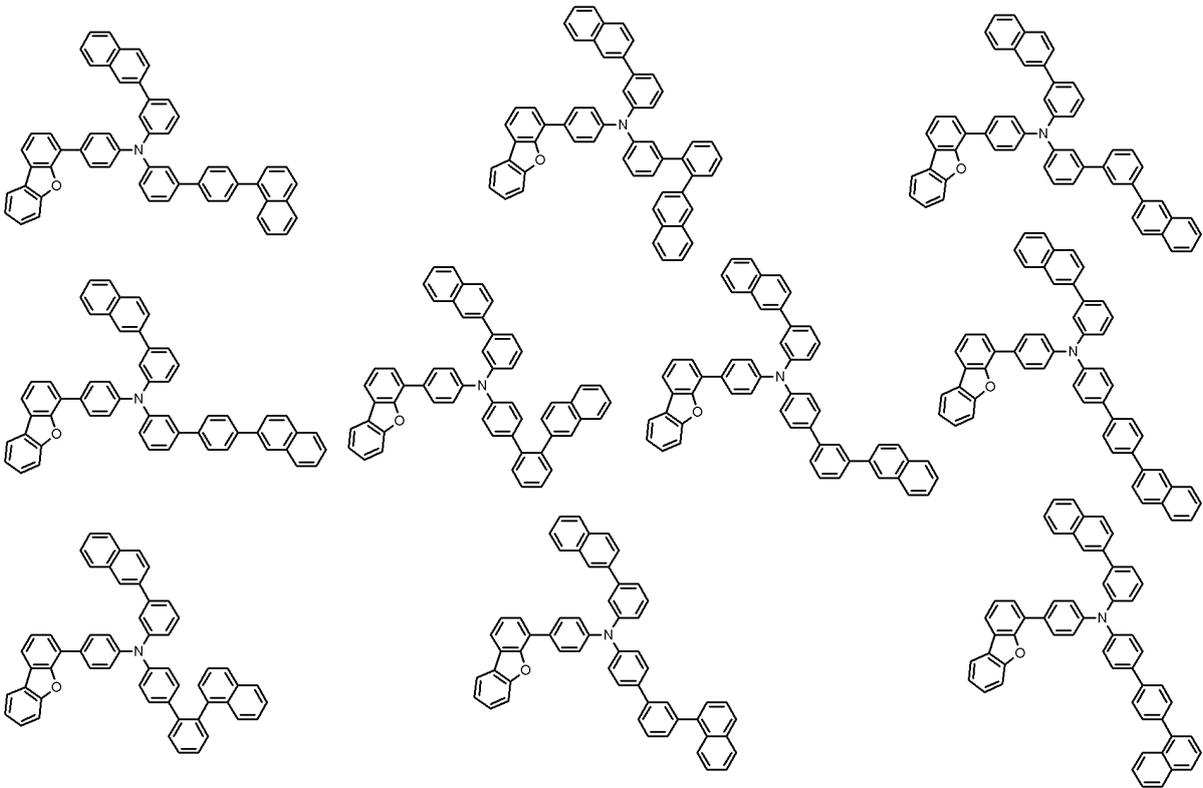


10

20

【 0 0 5 3】

【化 3 2】

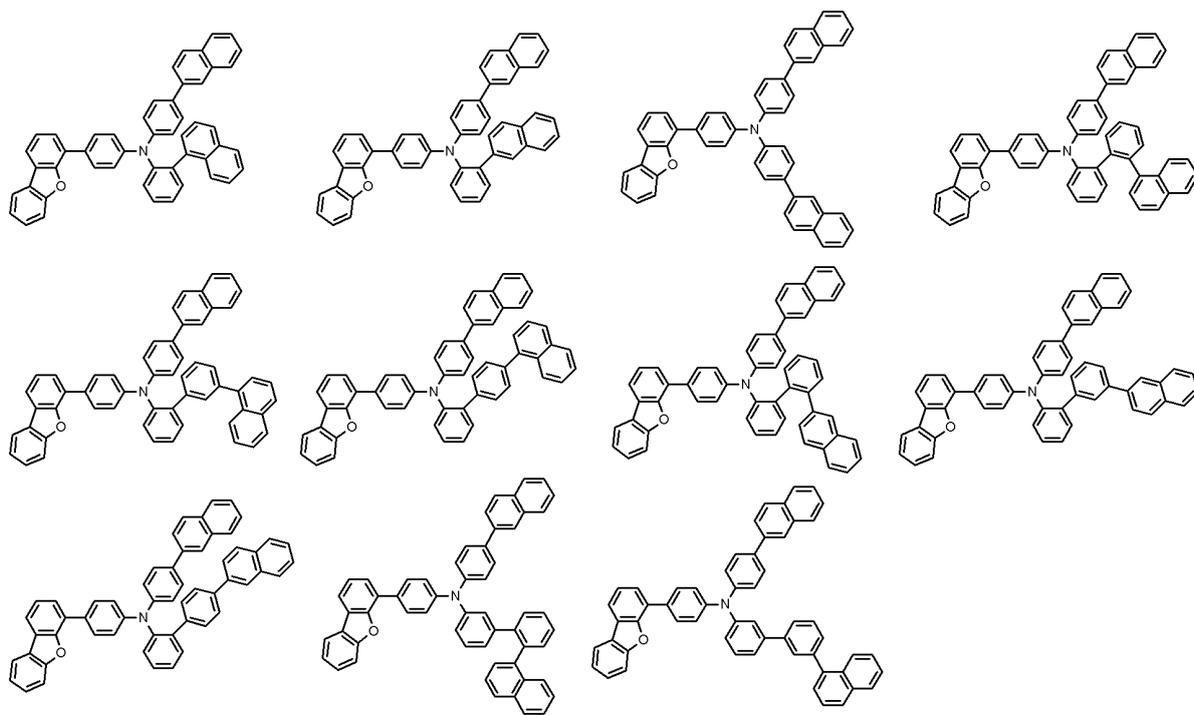


30

40

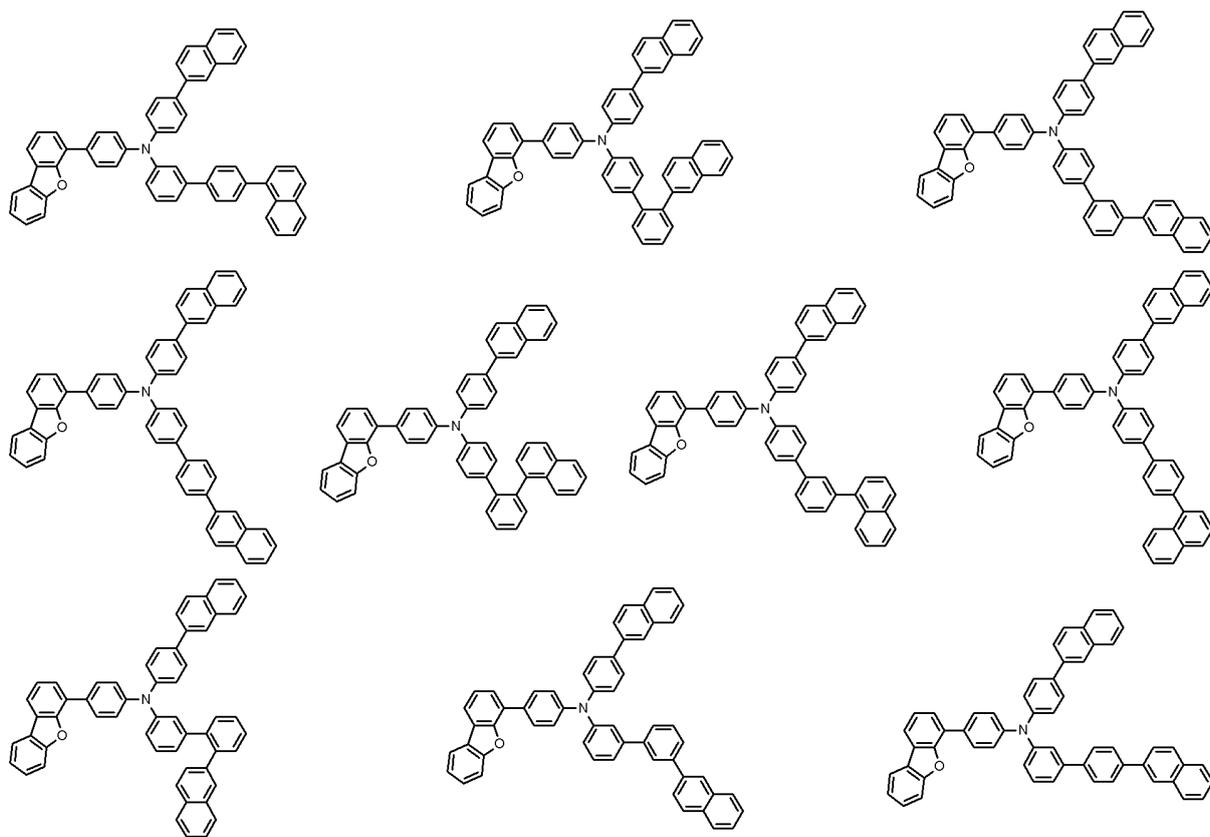
【 0 0 5 4】

【化 3 3】



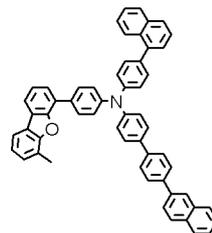
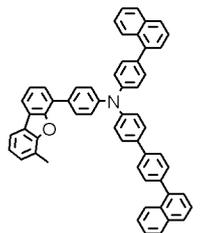
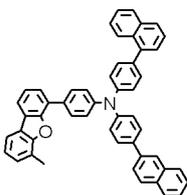
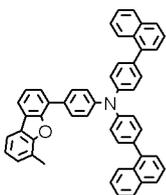
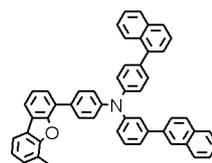
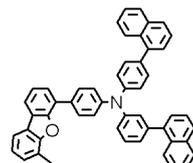
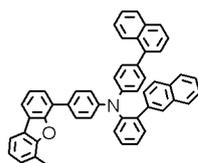
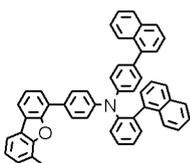
【 0 0 5 5】

【化 3 4】

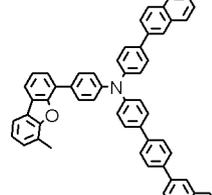
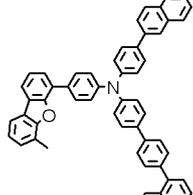
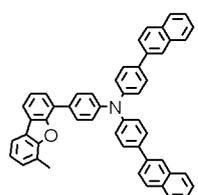
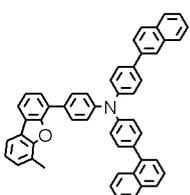
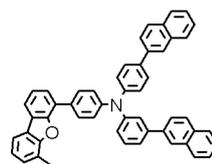
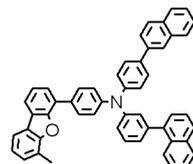
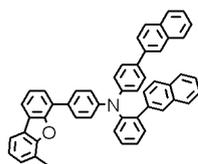
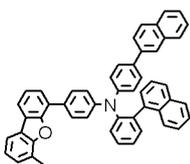


【 0 0 5 6】

【化 3 5】



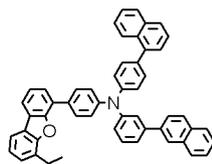
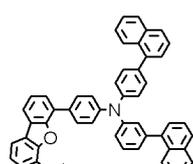
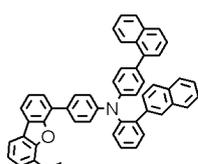
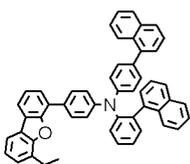
10



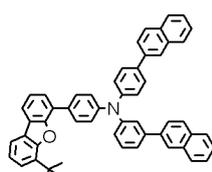
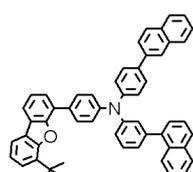
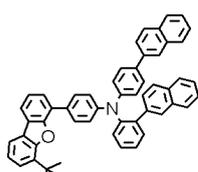
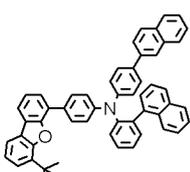
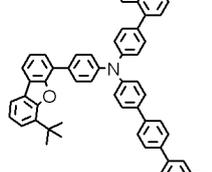
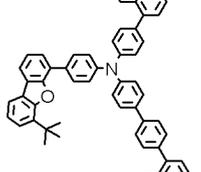
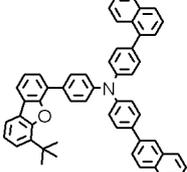
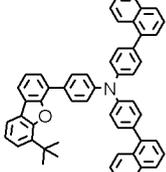
20

【 0 0 5 7】

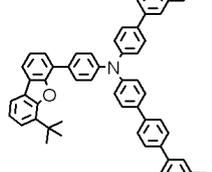
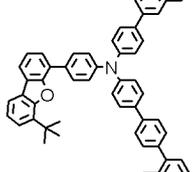
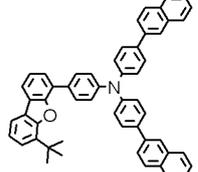
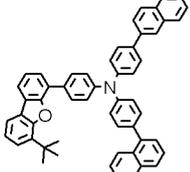
【化 3 6】



30



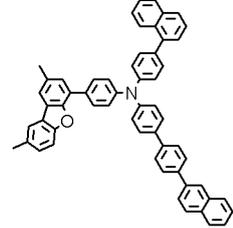
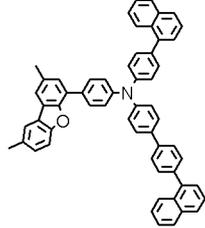
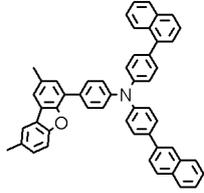
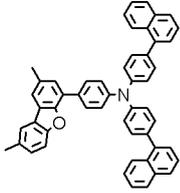
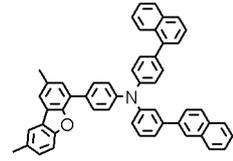
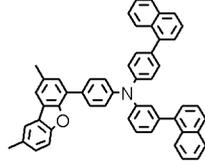
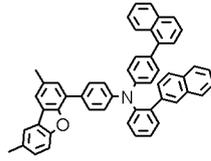
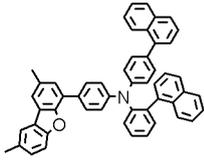
40



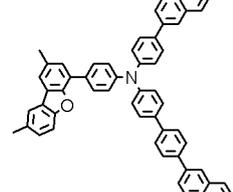
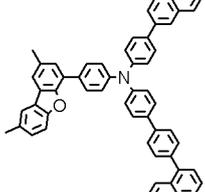
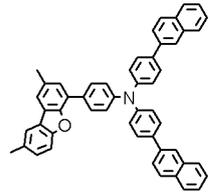
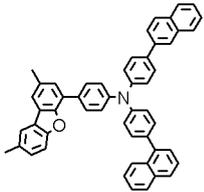
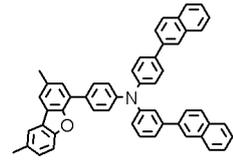
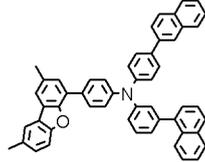
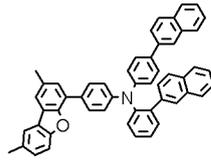
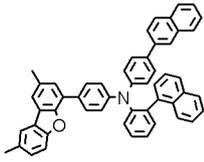
【 0 0 5 8】

50

【化 3 7】



10



20

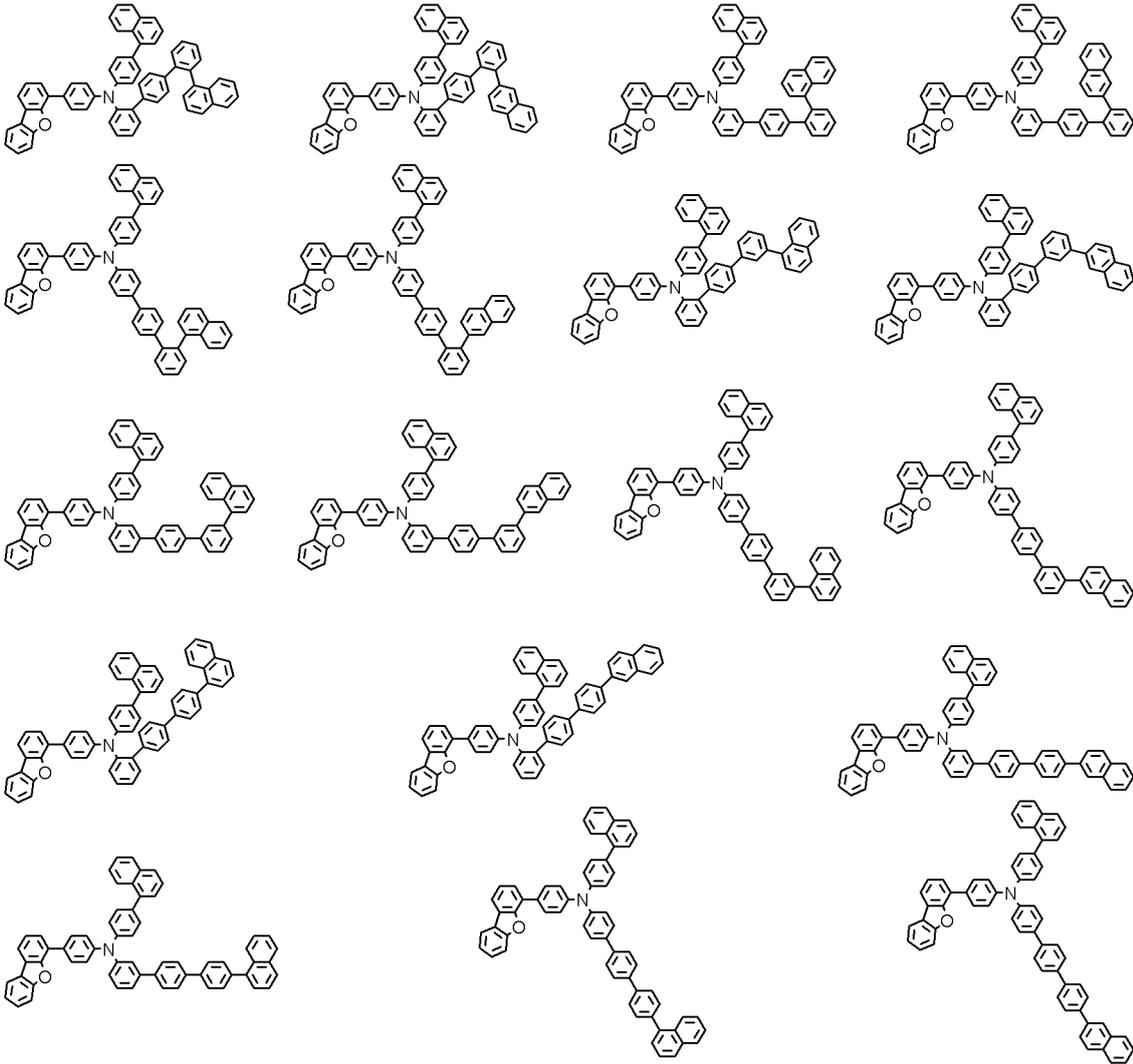
【 0 0 5 9 】

30

40

50

【化 3 8】



10

20

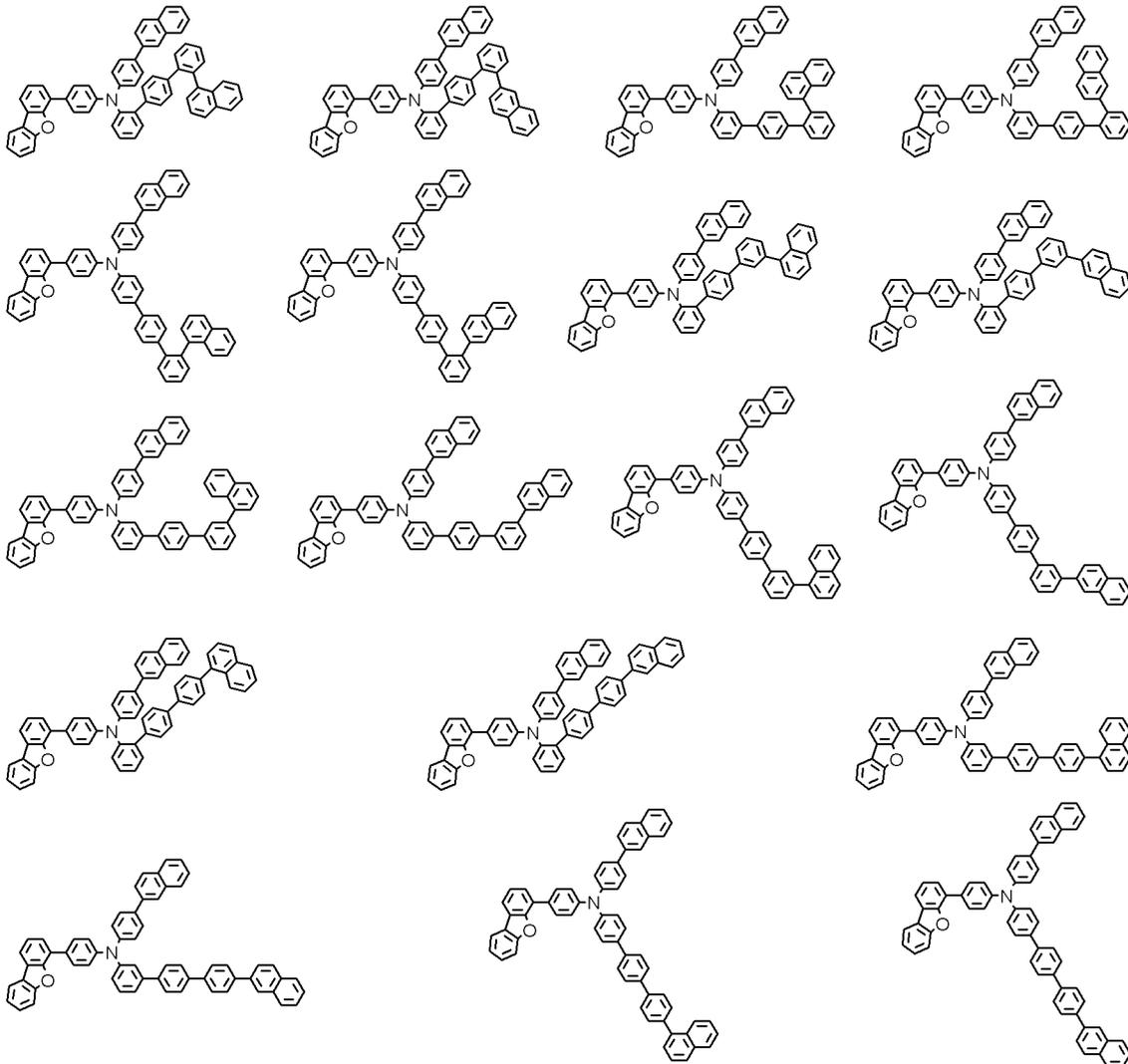
30

【 0 0 6 0】

40

50

【化 3 9】



10

20

30

【0061】

化合物(1)は有機EL素子用材料、正孔輸送材料、陽極と発光層の間に設けられた有機層、例えば、正孔注入層及び正孔輸送層の材料として有用である。該化合物(1)の製造方法は特に制限されず、当業者であれば本明細書の実施例を参照しながら、公知の合成反応を利用及び変更して容易に製造することができる。

【0062】

以下、有機EL素子構成について説明する。

有機EL素子の代表的な素子構成としては、以下の(1)~(13)を挙げることができるが、特にこれらに限定されるものではない。なお、(8)の素子構成が好ましく用いられる。

(1) 陽極 / 発光層 / 陰極

(2) 陽極 / 正孔注入層 / 発光層 / 陰極

(3) 陽極 / 発光層 / 電子注入層 / 陰極

(4) 陽極 / 正孔注入層 / 発光層 / 電子注入層 / 陰極

(5) 陽極 / 有機半導体層 / 発光層 / 陰極

(6) 陽極 / 有機半導体層 / 電子障壁層 / 発光層 / 陰極

(7) 陽極 / 有機半導体層 / 発光層 / 付着改善層 / 陰極

(8) 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

(9) 陽極 / 絶縁層 / 発光層 / 絶縁層 / 陰極

(10) 陽極 / 無機半導体層 / 絶縁層 / 発光層 / 絶縁層 / 陰極

40

50

(1 1) 陽極 / 有機半導体層 / 絶縁層 / 発光層 / 絶縁層 / 陰極

(1 2) 陽極 / 絶縁層 / 正孔注入層 / 正孔輸送層 / 発光層 / 絶縁層 / 陰極

(1 3) 陽極 / 絶縁層 / 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

【 0 0 6 3 】

前記化合物 (1) は有機 E L 素子のいずれの有機層に用いてもよいが、外部量子効率及び寿命の向上に寄与する観点から、正孔注入層又は正孔輸送層に用いることが好ましく、正孔輸送層に用いることがより好ましい。

【 0 0 6 4 】

前記化合物 (1) の有機層、好ましくは正孔注入層又は正孔輸送層中の含有量は、その有機層の成分の全モル量に対して、好ましくは 3 0 ~ 1 0 0 モル %、より好ましくは 5 0 ~ 1 0 0 モル %、さらに好ましくは 8 0 ~ 1 0 0 モル % であり、特に好ましくは実質的に 1 0 0 モル % である。

【 0 0 6 5 】

以下、前記化合物 (1) を正孔注入層、正孔輸送層に使用した有機 E L 素子を例として、各層について説明する。

【 0 0 6 6 】

(基板)

基板は、有機 E L 素子の支持体として用いられる。基板としては、例えば、ガラス、石英、プラスチックなどの板を用いることができる。また、可撓性基板を用いてもよい。可撓性基板とは、折り曲げることができる (フレキシブル) 基板のことであり、例えば、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエーテルスルホン、ポリプロピレン、ポリエステル、ポリフッ化ビニル、ポリ塩化ビニルからなるプラスチック基板等が挙げられる。また、無機蒸着フィルムを用いることもできる。

【 0 0 6 7 】

(陽極)

基板上に形成される陽極には、仕事関数の大きい (具体的には 4 . 0 e V 以上) 金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム - 酸化スズ (I T O : I n d i u m T i n O x i d e)、珪素若しくは酸化珪素を含有した酸化インジウム - 酸化スズ、酸化インジウム - 酸化亜鉛、酸化タングステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、グラフェン等が挙げられる。その他、金 (A u)、白金 (P t)、ニッケル (N i)、タングステン (W)、クロム (C r)、モリブデン (M o)、鉄 (F e)、コバルト (C o)、銅 (C u)、パラジウム (P d)、チタン (T i)、または前記金属の窒化物 (例えば、窒化チタン) 等が挙げられる。

【 0 0 6 8 】

これらの材料は、通常、スパッタリング法により成膜される。例えば、酸化インジウム - 酸化亜鉛は、酸化インジウムに対し 1 ~ 1 0 w t % の酸化亜鉛を加えたターゲットを、酸化タングステンおよび酸化亜鉛を含有した酸化インジウムは、酸化インジウムに対し酸化タングステンを 0 . 5 ~ 5 w t %、酸化亜鉛を 0 . 1 ~ 1 w t % 含有したターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。その他、真空蒸着法、塗布法、インクジェット法、スピコート法などにより作製してもよい。

【 0 0 6 9 】

陽極に接して形成される正孔注入層は、陽極の仕事関数に関係なく正孔注入が容易である材料を用いて形成されるため、電極材料として一般的に使用される材料 (例えば、金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物、元素周期表の第 1 族または第 2 族に属する元素) を用いることができる。

仕事関数の小さい材料である、元素周期表の第 1 族または第 2 族に属する元素、すなわちリチウム (L i) やセシウム (C s) 等のアルカリ金属、およびマグネシウム (M g)、カルシウム (C a)、ストロンチウム (S r) 等のアルカリ土類金属、およびこれらを

10

20

30

40

50

含む合金（例えば、MgAg、AlLi）、ユーロピウム（Eu）、イッテルビウム（Yb）等の希土類金属およびこれらを含む合金等を用いることもできる。なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、およびこれらを含む合金を用いて陽極を形成する場合には、真空蒸着法やスパッタリング法を用いることができる。さらに、銀ペーストなどを用いる場合には、塗布法やインクジェット法などを用いることができる。

【0070】

（正孔注入層）

正孔注入層は、正孔注入性の高い材料を含む層である。前記化合物（1）を単独又は下記の化合物と組み合わせて正孔注入層に用いてもよい。

【0071】

正孔注入性の高い物質としては、モリブデン酸化物、チタン酸化物、バナジウム酸化物、レニウム酸化物、ルテニウム酸化物、クロム酸化物、ジルコニウム酸化物、ハフニウム酸化物、タンタル酸化物、銀酸化物、タングステン酸化物、マンガン酸化物等を用いることができる。

【0072】

低分子の有機化合物である4,4',4''-トリス(N,N-ジフェニルアミノ)トリフェニルアミン（略称：TDATA）、4,4',4''-トリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン（略称：MTDATA）、4,4'-ビス[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル（略称：DPAB）、4,4'-ビス(N-{4-[N'-(3-メチルフェニル)-N'-フェニルアミノ]フェニル}-N-フェニルアミノ)ビフェニル（略称：DNTPD）、1,3,5-トリス[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]ベンゼン（略称：DPA3B）、3-[N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)-N-フェニルアミノ]-9-フェニルカルバゾール（略称：PCzPCA1）、3,6-ビス[N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)-N-フェニルアミノ]-9-フェニルカルバゾール（略称：PCzPCA2）、3-[N-(1-ナフチル)-N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)アミノ]-9-フェニルカルバゾール（略称：PCzPCN1）等の芳香族化合物等も正孔注入層材料として挙げられる。

【0073】

高分子化合物（オリゴマー、 dendrimer、ポリマー等）を用いることもできる。例えば、ポリ(N-ビニルカルバゾール)（略称：PVK）、ポリ(4-ビニルトリフェニルアミン)（略称：PVTPA）、ポリ[N-(4-{N'-[4-(4-ジフェニルアミノ)フェニル]フェニル}-N'-フェニルアミノ)フェニル]メタクリルアミド]（略称：PTPDMA）、ポリ[N,N'-ビス(4-ブチルフェニル)-N,N'-ビス(フェニル)ベンジジン]（略称：Poly-TPD）などの高分子化合物が挙げられる。また、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）、ポリアニリン/ポリ(スチレンスルホン酸)（PANI/PSS）等の酸を添加した高分子化合物を用いることもできる。

【0074】

（正孔輸送層）

正孔輸送層は、正孔輸送性の高い材料を含む層である。前記化合物（1）を単独又は下記の化合物と組み合わせて正孔輸送層に用いてもよい。

【0075】

正孔輸送層には、芳香族化合物、カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体等を使用することができる。具体的には、4,4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル（略称：NPB）やN,N'-ビス(3-メチルフェニル)-N,N'-ジフェニル-[1,1'-ビフェニル]-4,4'-ジアミン（略称：TPD）、4-フェニル-4'-(9-フェニルフルオレン-9-イル)トリフェニルアミン（略称：BAFLP）、4,4'-ビス[N-(9,9-ジメチルフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル（略称：DFLDPBi）、4,4',4''-トリス(N,N-ジフェニル

10

20

30

40

50

アミノ)トリフェニルアミン(略称:TDATA)、4,4',4''-トリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン(略称:MTDATA)、4,4'-ビス[N-(スピロ-9,9'-ビフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:BSPB)などの芳香族化合物等を用いることができる。ここに述べた物質は、主に10-6cm²/Vs以上の正孔移動度を有する物質である。

【0076】

正孔輸送層には、CBP、CzPA、PCzPAのようなカルバゾール誘導体や、t-BuDNA、DNA、DPAnthのようなアントラセン誘導体を用いても良い。ポリ(N-ビニルカルバゾール)(略称:PVK)やポリ(4-ビニルトリフェニルアミン)(略称:PVTPA)等の高分子化合物を用いることもできる。

10

但し、電子よりも正孔の輸送性の高い材料であれば、これら以外のものを用いてもよい。なお、正孔輸送性の高い材料を含む層は、単層のものだけでなく、上記物質からなる層が二層以上積層したものとしてもよい。例えば、正孔輸送層は第一正孔輸送層(陽極側)と第二正孔輸送層(陰極側)の二層構造にしてもよい。この場合、前記化合物(1)は第一正孔輸送層と第二正孔輸送層のいずれに含まれていてもよく、本発明の効果をより得やすくする観点から、発光層側(陰極側)に配置される第二正孔輸送層に含まれることがより好ましい。

【0077】

(発光層のゲスト材料)

発光層は、発光性の高い物質(ゲスト材料)を含む層であり、種々の材料を用いることができる。例えば、ゲスト材料としては、蛍光性化合物や燐光性化合物を用いることができる。蛍光性化合物は一重項励起状態から発光可能な化合物であり、燐光性化合物は三重項励起状態から発光可能な化合物である。

20

発光層に用いることができる青色系の蛍光発光材料として、ピレン誘導体、スチリルアミン誘導体、クリセン誘導体、フルオランテン誘導体、フルオレン誘導体、ジアミン誘導体、トリアリールアミン誘導体等が使用できる。具体的には、N,N'-ビス[4-(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル]-N,N'-ジフェニルスチルベン-4,4'-ジアミン(略称:YGAS)、4-(9H-カルバゾール-9-イル)-4'-(10-フェニル-9-アントリル)トリフェニルアミン(略称:YGAPA)、4-(10-フェニル-9-アントリル)-4'-(9-フェニル-9H-カルバゾール-3-イル)トリフェニルアミン(略称:PCBAPA)などが挙げられる。

30

【0078】

発光層に用いることができる緑色系の蛍光発光材料として、芳香族アミン誘導体等を使用できる。具体的には、N-(9,10-ジフェニル-2-アントリル)-N,9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン(略称:2PCAPA)、N-[9,10-ビス(1,1'-ビフェニル-2-イル)-2-アントリル]-N,9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン(略称:2PCABPhA)、N-(9,10-ジフェニル-2-アントリル)-N,N',N'-トリフェニル-1,4-フェニレンジアミン(略称:2DPAPA)、N-[9,10-ビス(1,1'-ビフェニル-2-イル)-2-アントリル]-N,N',N'-トリフェニル-1,4-フェニレンジアミン(略称:2DPABPhA)、N-[9,10-ビス(1,1'-ビフェニル-2-イル)]-N-[4-(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル]-N-フェニルアントラセン-2-アミン(略称:2YGABPhA)、N,N,9-トリフェニルアントラセン-9-アミン(略称:DPHAPhA)などが挙げられる。

40

【0079】

発光層に用いることができる赤色系の蛍光発光材料として、テトラセン誘導体、ジアミン誘導体等が使用できる。具体的には、N,N,N',N'-テトラキス(4-メチルフェニル)テトラセン-5,11-ジアミン(略称:p-mPhTD)、7,14-ジフェニル-N,N,N',N'-テトラキス(4-メチルフェニル)アセナフト[1,2-a]フルオランテン-3,10-ジアミン(略称:p-mPhAFD)などが挙げられる。

50

【0080】

発光層に用いることができる青色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、オスミウム錯体、白金錯体等の金属錯体が使用される。具体的には、ビス[2-(4',6'-ジフルオロフェニル)ピリジナト-N,C2']イリジウム(III)テトラキス(1-ピラゾリル)ボラート(略称:FIr6)、ビス[2-(4',6'-ジフルオロフェニル)ピリジナト-N,C2']イリジウム(III)ピコリナート(略称:FIrpic)、ビス[2-(3',5'-ピストリフルオロメチルフェニル)ピリジナト-N,C2']イリジウム(III)ピコリナート(略称:Ir(CF3ppy)2(pic))、ビス[2-(4',6'-ジフルオロフェニル)ピリジナト-N,C2']イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:FIracac)などが挙げられる。

10

【0081】

発光層に用いることができる緑色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体等が使用される。トリス(2-フェニルピリジナト-N,C2')イリジウム(III)(略称:Ir(ppy)3)、ビス(2-フェニルピリジナト-N,C2')イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(ppy)2(acac))、ビス(1,2-ジフェニル-1H-ベンゾイミダゾラト)イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(pbi)2(acac))、ビス(ベンゾ[h]キノリナト)イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(bzq)2(acac))などが挙げられる。

【0082】

発光層に用いることができる赤色系の燐光発光材料として、イリジウム錯体、白金錯体、テルビウム錯体、ユーロピウム錯体等の金属錯体が使用される。具体的には、ビス[2-(2'-ベンゾ[4,5-]チエニル)ピリジナト-N,C3']イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(btp)2(acac))、ビス(1-フェニルイソキノリナト-N,C2')イリジウム(III)アセチルアセトナート(略称:Ir(piq)2(acac))、(アセチルアセトナト)ビス[2,3-ビス(4-フルオロフェニル)キノキサリナト]イリジウム(III)(略称:Ir(Fdpq)2(acac))、2,3,7,8,12,13,17,18-オクタエチル-21H,23H-ポルフィリン白金(II)(略称:PtOEP)等の有機金属錯体が挙げられる。

20

【0083】

また、トリス(アセチルアセトナト)(モノフェナントロリン)テルビウム(III)(略称:Tb(acac)3(Phen))、トリス(1,3-ジフェニル-1,3-プロパンジオナト)(モノフェナントロリン)ユーロピウム(III)(略称:Eu(DBM)3(Phen))、トリス[1-(2-テノイル)-3,3,3-トリフルオロアセトナト](モノフェナントロリン)ユーロピウム(III)(略称:Eu(TTA)3(Phen))等の希土類金属錯体は、希土類金属イオンからの発光(異なる多重度間の電子遷移)であるため、燐光性化合物として用いることができる。

30

【0084】

(発光層のホスト材料)

発光層としては、上述したゲスト材料を他の物質(ホスト材料)に分散させた構成としてもよい。ホスト材料としては、各種のものを用いることができ、ゲスト材料よりも最低空軌道準位(LUMO準位)が高く、最高占有軌道準位(HOMO準位)が低い物質を用いることが好ましい。

40

【0085】

ホスト材料としては、

- (1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、若しくは亜鉛錯体等の金属錯体、
- (2) オキサジアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、若しくはフェナントロリン誘導体等の複素環化合物、
- (3) カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体、フェナントレン誘導体、ピレン誘導体、若しくはクリセン誘導体等の縮合芳香族化合物、
- (4) トリアリールアミン誘導体、若しくは縮合多環芳香族アミン誘導体等の芳香族化合

50

物が使用される。

具体的には、トリス(8-キノリノラト)アルミニウム(III)(略称:Alq)、トリス(4-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(III)(略称:Almq3)、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム(II)(略称:BeBq2)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(4-フェニルフェノラト)アルミニウム(III)(略称:BA1q)、ビス(8-キノリノラト)亜鉛(II)(略称:Znq)、ビス[2-(2-ベンゾオキサゾリル)フェノラト]亜鉛(II)(略称:ZnPBO)、ビス[2-(2-ベンゾチアゾリル)フェノラト]亜鉛(II)(略称:ZnBTZ)などの金属錯体、2-(4-ピフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(略称:PBD)、1,3-ビス[5-(p-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル]ベンゼン(略称:OXD-7)、3-(4-ピフェニル)-4-フェニル-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称:TAZ)、2,2',2''-(1,3,5-ベンゼントリイル)トリス(1-フェニル-1H-ベンゾイミダゾール)(略称:TPBI)、バソフェナントロリン(略称:BPhen)、バソキュプロイン(略称:BCP)などの複素環化合物、9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(略称:CzPA)、3,6-ジフェニル-9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(略称:DPCzPA)、9,10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(略称:DNA)、2-tert-ブチル-9,10-ジ(2-ナフチル)アントラセン(略称:t-BuDNA)、9,9'-ピアントリル(略称:BANt)、9,9'-(スチルベン-3,3'-ジイル)ジフェナントレン(略称:DPNS)、9,9'-(スチルベン-4,4'-ジイル)ジフェナントレン(略称:DPNS2)、3,3',3''-(ベンゼン-1,3,5-トリイル)トリピレン(略称:TPB3)、9,10-ジフェニルアントラセン(略称:DPAnth)、6,12-ジメトキシ-5,11-ジフェニルクリセンなどの縮合芳香族化合物、N,N-ジフェニル-9-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール-3-アミン(略称:CzA1PA)、4-(10-フェニル-9-アントリル)トリフェニルアミン(略称:DPhPA)、N,9-ジフェニル-N-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル3]-9H-カルバゾール-3-アミン(略称:PCAPA)、N,9-ジフェニル-N-{4-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]フェニル}-9H-カルバゾール-3-アミン(略称:PCAPBA)、N-(9,10-ジフェニル-2-アントリル)-N,9-ジフェニル-9H-カルバゾール-3-アミン(略称:2PCAPA)、NPB(または-NPD)、TPD、DFLDPBi、BSPBなどの芳香族化合物などを用いることができる。また、ホスト材料は複数種用いることができる。

【0086】

(電子輸送層)

電子輸送層は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層には、

- (1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体、
- (2) イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、
- (3) 高分子化合物を使用することができる。

具体的には低分子の有機化合物として、Alq、トリス(4-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(略称:Almq3)、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム(略称:BeBq2)、BA1q、Znq、ZnPBO、ZnBTZなどの金属錯体等を用いることができる。また、金属錯体以外にも、2-(4-ピフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(略称:PBD)、1,3-ビス[5-(p-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル]ベンゼン(略称:OXD-7)、3-(4-tert-ブチルフェニル

) - 4 - フェニル - 5 - (4 - ビフェニル) - 1 , 2 , 4 - トリアゾール (略称 : T A Z)、 3 - (4 - t e r t - ブチルフェニル) - 4 - (4 - エチルフェニル) - 5 - (4 - ビフェニル) - 1 , 2 , 4 - トリアゾール (略称 : p - E t T A Z)、 パソフェナントロリン (略称 : B P h e n)、 パソキプロイン (略称 : B C P)、 4 , 4 ' - ビス (5 - メチルベンゾオキサゾール - 2 - イル) スチルベン (略称 : B z O s) などの複素芳香族化合物も用いることができる。上記材料は、主に 10^{-6} cm² / V s 以上の電子移動度を有する材料である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い材料であれば、上記以外の材料を電子輸送層として用いてもよい。また、電子輸送層は、単層のものだけでなく、上記材料からなる層が二層以上積層したものとしてもよい。

また、電子輸送層には、高分子化合物を用いることもできる。例えば、ポリ [(9 , 9 - ジヘキシルフルオレン - 2 , 7 - ジイル) - c o - (ピリジン - 3 , 5 - ジイル)] (略称 : P F - P y)、ポリ [(9 , 9 - ジオクチルフルオレン - 2 , 7 - ジイル) - c o - (2 , 2 ' - ビピリジン - 6 , 6 ' - ジイル)] (略称 : P F - B P y) などを用いることができる。

【 0 0 8 7 】

(電子注入層)

電子注入層は、電子注入性の高い材料を含む層である。電子注入層には、リチウム (L i)、セシウム (C s)、カルシウム (C a)、フッ化リチウム (L i F)、フッ化セシウム (C s F)、フッ化カルシウム (C a F 2)、リチウム酸化物 (L i O x) 等のアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を用いることができる。その他、電子輸送性を有する材料にアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を含有させたもの、具体的には A l q 中にマグネシウム (M g) を含有させたもの等を用いてもよい。なお、この場合には、陰極からの電子注入をより効率良く行うことができる。

あるいは、電子注入層に、有機化合物と電子供与体 (ドナー) とを混合してなる複合材料を用いてもよい。このような複合材料は、有機化合物が電子供与体から電子を受け取るため、電子注入性および電子輸送性に優れている。この場合、有機化合物としては、受け取った電子の輸送に優れた材料であることが好ましく、具体的には、例えば上述した電子輸送層を構成する材料 (金属錯体や複素芳香族化合物等) を用いることができる。電子供与体としては、有機化合物に対し電子供与性を示す材料であればよい。具体的には、アルカリ金属、アルカリ土類金属及び希土類金属が好ましく、リチウム、セシウム、マグネシウム、カルシウム、エルビウム、イッテルビウム等が挙げられる。また、アルカリ金属酸化物やアルカリ土類金属酸化物が好ましく、リチウム酸化物、カルシウム酸化物、バリウム酸化物等が挙げられる。また、酸化マグネシウムのようなルイス塩基を用いることもできる。また、テトラシアフルバレン (略称 : T T F) 等の有機化合物を用いることもできる。

【 0 0 8 8 】

(陰極)

陰極には、仕事関数の小さい (具体的には $3 \sim 8$ e V 以下) 金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。このような陰極材料の具体例としては、元素周期表の第 1 族または第 2 族に属する元素、すなわちリチウム (L i) やセシウム (C s) 等のアルカリ金属、およびマグネシウム (M g)、カルシウム (C a)、ストロンチウム (S r) 等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金 (例えば、M g A g、A l L i)、ユーロピウム (E u)、イッテルビウム (Y b) 等の希土類金属およびこれらを含む合金等が挙げられる。

なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、これらを含む合金を用いて陰極を形成する場合には、真空蒸着法やスパッタリング法を用いることができる。また、銀ペーストなどを用いる場合には、塗布法やインクジェット法などを用いることができる。

なお、電子注入層を設けることにより、仕事関数の大小に関わらず、A l、A g、I T O、グラフェン、珪素若しくは酸化珪素を含有した酸化インジウム - 酸化スズ等様々な導電性材料を用いて陰極を形成することができる。これらの導電性材料は、スパッタリング

10

20

30

40

50

法やインクジェット法、スピコート法等を用いて成膜することができる。

【0089】

(絶縁層)

有機EL素子は、超薄膜に電界を印加するために、リークやショートによる画素欠陥が生じやすい。これを防止するために、一对の電極間に絶縁性の薄膜層からなる絶縁層を挿入してもよい。

絶縁層に用いられる材料としては、例えば、酸化アルミニウム、弗化リチウム、酸化リチウム、弗化セシウム、酸化セシウム、酸化マグネシウム、弗化マグネシウム、酸化カルシウム、弗化カルシウム、窒化アルミニウム、酸化チタン、酸化珪素、酸化ゲルマニウム、窒化珪素、窒化ホウ素、酸化モリブデン、酸化ルテニウム、酸化バナジウム等が挙げられる。なお、これらの混合物や積層物を用いてもよい。

10

【0090】

また、有機EL素子の、温度、湿度、雰囲気等に対する安定性の向上の観点から、有機EL素子の表面に保護層を設けてもよいし、シリコンオイル、樹脂等により有機EL素子全体を保護してもよい。

【0091】

有機EL素子の各層の形成には、真空蒸着、スパッタリング、プラズマ、イオンプレーティング等の乾式成膜法やスピコーティング、ディッピング、フローコーティング等の湿式成膜法のいずれの方法を用いることができる。

【0092】

湿式成膜法の場合、各層を形成する材料を、エタノール、クロロホルム、テトラヒドロフラン、ジオキサン等の適切な溶媒に溶解又は分散させた溶液又は分散液を用いて薄膜を形成する。また、該溶液又は分散液は成膜性向上、膜のピンホール防止等のために樹脂や添加剤を含んでいてもよい。該樹脂としては、ポリスチレン、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリアステル、ポリアミド、ポリウレタン、ポリスルホン、ポリメチルメタクリレート、ポリメチルアクリレート、セルロース等の絶縁性樹脂及びそれらの共重合体、ポリ-N-ビニルカルバゾール、ポリシラン等の光導電性樹脂、ポリチオフェン、ポリピロール等の導電性樹脂が挙げられる。また、添加剤としては、酸化防止剤、紫外線吸収剤、可塑剤等が挙げられる。

20

【0093】

各層の膜厚は特に限定されるものではなく、良好な素子性能が得られるように選択すればよい。膜厚が厚すぎると、一定の光出力を得るために大きな印加電圧が必要になり効率が悪くなる。膜厚が薄すぎるとピンホール等が発生して、電界を印加しても十分な発光輝度が得られない。膜厚は通常5 nm ~ 10 μmであり、10 nm ~ 0.2 μmがより好ましい。

30

【0094】

前記化合物(1)を用いて得られる有機EL素子は、有機ELパネルモジュール等の表示部品；テレビ、携帯電話、パーソナルコンピュータ等の表示装置；照明、車両用灯具の発光装置などの電子機器に使用できる。

【実施例】

40

【0095】

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

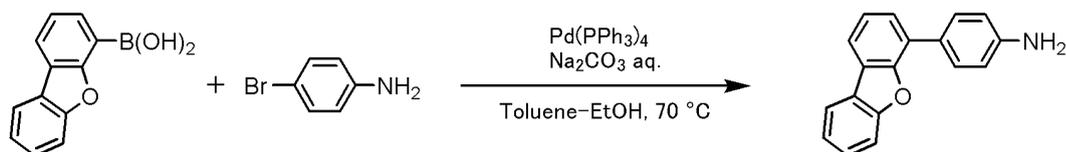
【0096】

合成実施例1(化合物1の合成)

(1) 中間体1の合成

50

【化 4 0】



中間体1

【0097】

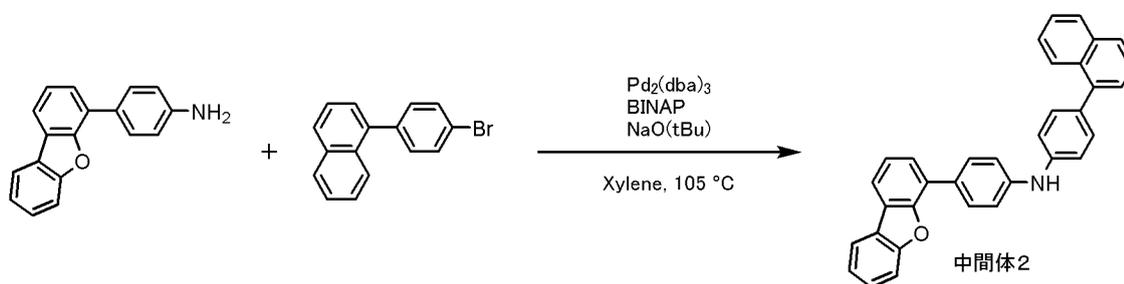
アルゴン雰囲気下、4 - プロモアニリン 23.7 g (138 mmol)、ジベンゾフラン - 4 - イルボロン酸 29.2 g (138 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) 3.18 g (2.75 mmol)、2 M 炭酸ナトリウム水溶液 (138 mL)、トルエン (300 mL)、エタノール (100 mL) の混合物を 70 °C にて 2 時間攪拌した。室温に戻し、反応溶液をトルエンで抽出し、トルエン層を無水硫酸マグネシウムで乾燥後、ろ過し、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーおよび再結晶にて生成し、中間体 1 (20.9 g) を得た。収率 58% であった。

10

【0098】

(2) 中間体 2 の合成

【化 4 1】



中間体1

中間体2

20

【0099】

アルゴン雰囲気下、中間体 1 20.9 g (80.6 mmol)、1 - (4 - プロモフェニル)ナフタレン 17.6 g (62 mmol) のキシレン (350 mL) 溶液を 85 °C に加熱し、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(0) 852 mg (0.93 mmol)、2,2'-ビス(ジフェニルホスフィノ)-1,1'-ビナフチル 1.16 g (1.86 mmol)、ナトリウム - t - ブトキシド 11.9 g (124 mmol) を加え、105 °C まで昇温し、16 時間攪拌した。室温に戻し、反応液に水を加え、分液し、有機層を減圧濃縮後、カラムクロマトグラフィーにて精製し、中間体 2 (17.8 g) を得た。収率 60% であった。

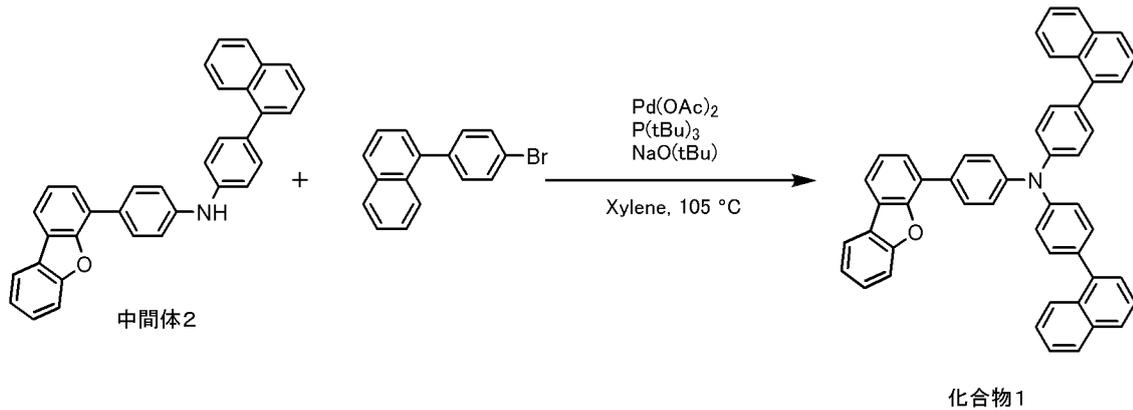
30

【0100】

(3) 化合物 1 の合成

40

【化 4 2】



10

【0101】

アルゴン雰囲気下、酢酸パラジウム (II) 89 mg (0.39 mmol) およびトリ-*t*-ブチルホスフィン 160 mg (0.79 mmol) のキシレン (140 mL) 溶液を室温にて30分間攪拌した。反応液に中間体2 9.1 g (19.7 mmol)、1-(4-プロモフェニル)ナフタレン 5.58 g (19.7 mmol) を加え90 で攪拌した後、ナトリウム-*t*-ブトキシド 2.27 g (23.7 mmol) を加え、105にて2時間半攪拌した。室温に戻し、反応液にメタノールを加え、生成した固体をろ取した。得られた固体をシリカゲルカラムクロマトグラフィーおよび再結晶にて生成し、白色固体 (9.3 g) を得た。

20

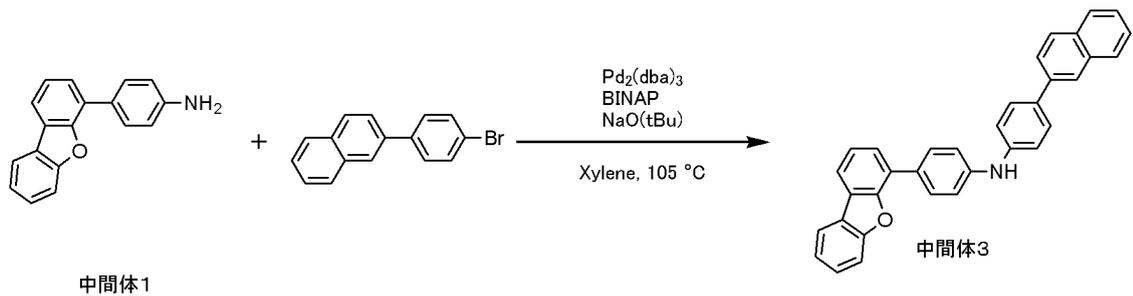
得られた固体をマスマスペクトルにて分析し、目的の化合物1であることを確認した。分子量 633.26 に対し $m/e = 633$ であった。収率 71% であった。

【0102】

合成実施例 2 (化合物 2 の合成)

(1) 中間体 3 の合成

【化 4 3】



30

【0103】

中間体 2 の合成において、1-(4-プロモフェニル)ナフタレンの代わりに2-(4-プロモフェニル)ナフタレンを用いる以外は、中間体 2 の合成と同様の操作を行い中間体 3 を得た。

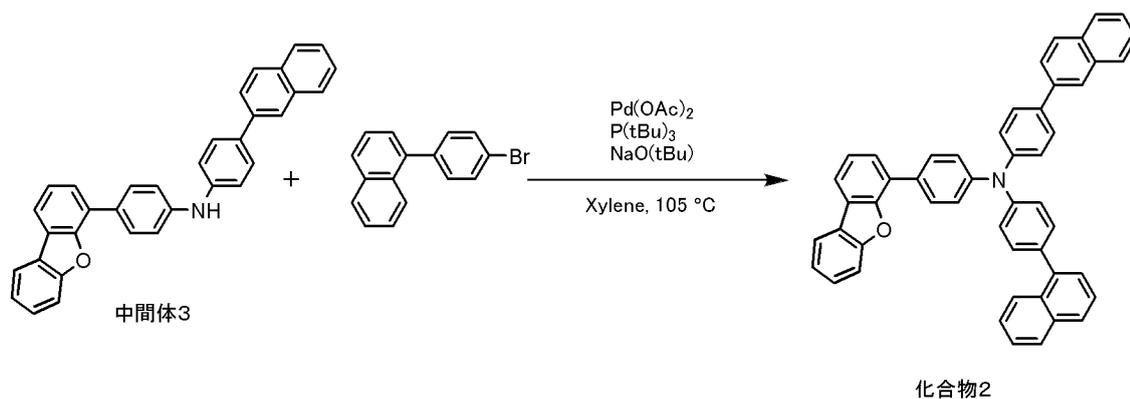
40

【0104】

(2) 化合物 2 の合成

50

【化 4 4】



10

【 0 1 0 5】

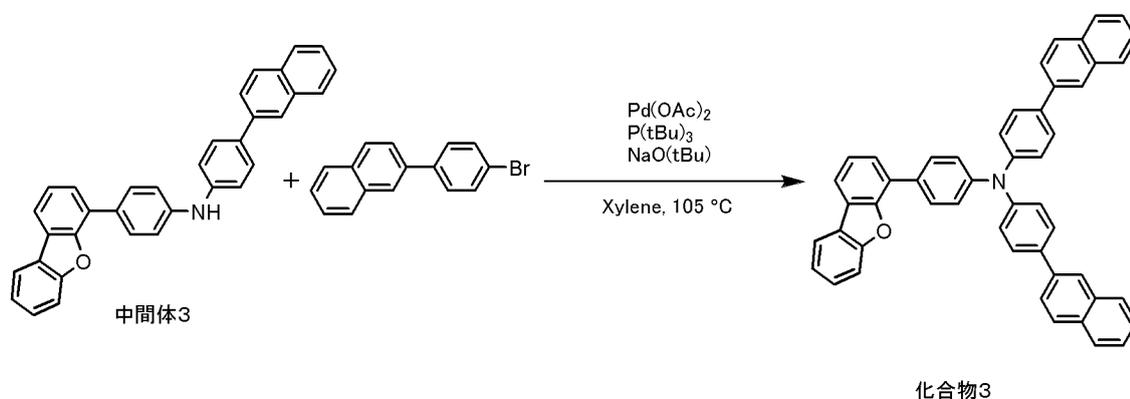
合成実施例 1 (3) において、中間体 2 の代わりに中間体 3 を用いる以外は、合成実施例 1 (3) と同様の操作を行い、白色固体を得た。

得られた固体をマスマスペクトルにて分析し、目的の化合物 2 であることを確認した。分子量 633.26 に対し $m/e = 633$ であった。収率 68% であった。

【 0 1 0 6】

合成実施例 3 (化合物 3 の合成)

【化 4 5】



20

30

【 0 1 0 7】

合成実施例 1 (3) において、中間体 2 の代わりに中間体 3 を、1 - (4 - プロモフェニル) ナフタレンの代わりに 2 - (4 - プロモフェニル) ナフタレンを用いる以外は、合成実施例 1 (3) と同様の操作を行い、白色固体を得た。

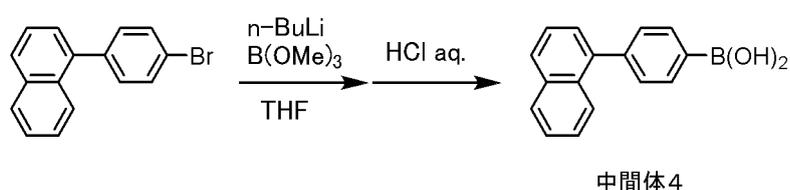
得られた固体をマスマスペクトルにて分析し、目的の化合物 3 であることを確認した。分子量 633.26 に対し $m/e = 633$ であった。収率 70% であった。

【 0 1 0 8】

合成実施例 4 (化合物 4 の合成)

(1) 中間体 4 の合成

【化 4 6】



40

【 0 1 0 9】

アルゴン雰囲気下、1 - (4 - プロモフェニル) ナフタレン 7.08 g (25 mmol) の THF (125 ml) 溶液をドライアイス / アセトンバスにて冷却し、1.6 M n

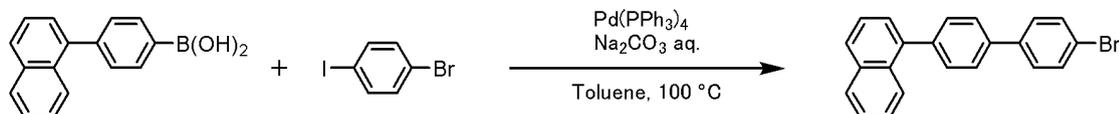
50

- ブチルリチウムヘキサン溶液 17.2 ml (27.5 mmol) を滴下して加え、2時間攪拌した。ホウ酸トリメチル 3.35 ml (30 mmol) の THF (10 mL) 溶液を滴下し、1時間攪拌し、ドライアイス/アセトンバスをはずして室温へ昇温した。反応を氷水浴で冷却し、2 M 塩酸を加えた後、室温に昇温して1時間攪拌した。得られた反応液を酢酸エチルで抽出し、有機層を水洗の後、無水硫酸ナトリウムで乾燥し、減圧濃縮した。得られた残渣を結晶化し、中間体 4 4.03 g を得た。収率 65% であった。

【0110】

(2) 中間体 5 の合成

【化 47】



中間体4

中間体5

10

【0111】

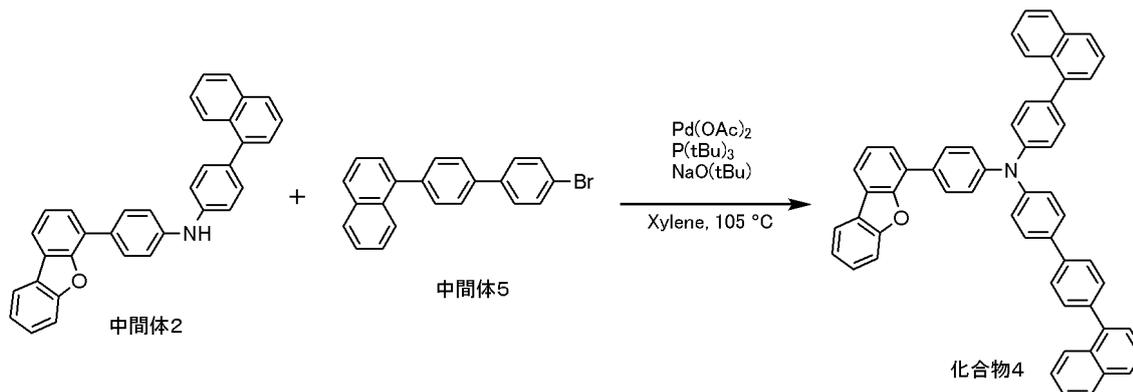
アルゴン雰囲気下、中間体 4 3.72 g (15 mmol)、4 - プロモヨードベンゼン 4.24 g (15 mmol)、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム (0) 347 mmol (0.30 mmol), 2 M 炭酸ナトリウム水溶液 22.5 mL およびトルエン 45 mL の混合物を 100 にて7時間攪拌した。室温に戻し、水を加え、トルエンで抽出を行い、得られたトルエン層を無水硫酸ナトリウムで乾燥し、減圧濃縮した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、中間体 5 2.96 g を得た。収率 55% であった。

20

【0112】

(3) 化合物 4 の合成

【化 48】



中間体2

中間体5

化合物4

30

【0113】

合成実施例 1 (3) において、1 - (4 - プロモフェニル) ナフタレンの代わりに中間体 5 を用いる以外は、合成実施例 1 (3) と同様の操作を行い、白色固体を得た。

40

得られた固体をマススペクトルにて分析し、目的の化合物 4 であることを確認した。分子量 739.29 に対し $m/e = 739$ であった。収率 62% であった。

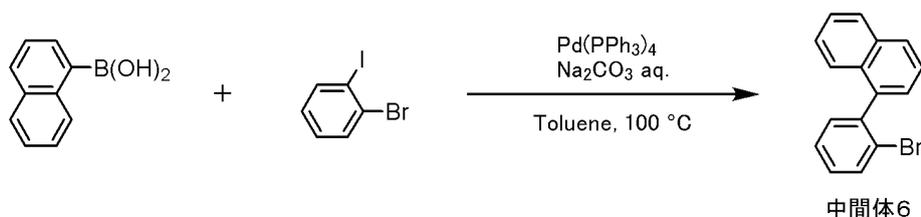
【0114】

合成実施例 5 (化合物 5 の合成)

(1) 中間体 6 の合成

50

【化 4 9】



【0115】

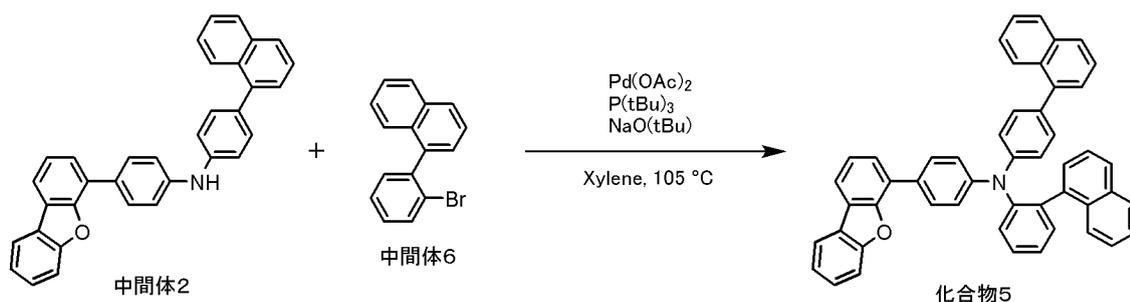
中間体5の合成において、中間体4の代わりに1-ナフタレンボロン酸を、4-ブロモヨードベンゼンの代わりに2-ブロモヨードベンゼンを用いる以外は、中間体5の合成と同様の操作を行い、中間体6を得た。

10

【0116】

(2) 化合物5の合成

【化 5 0】



20

【0117】

合成実施例1(3)において、1-(4-ブロモフェニル)ナフタレンの代わりに中間体6を用いる以外は、合成実施例1(3)と同様の操作を行い、白色固体を得た。

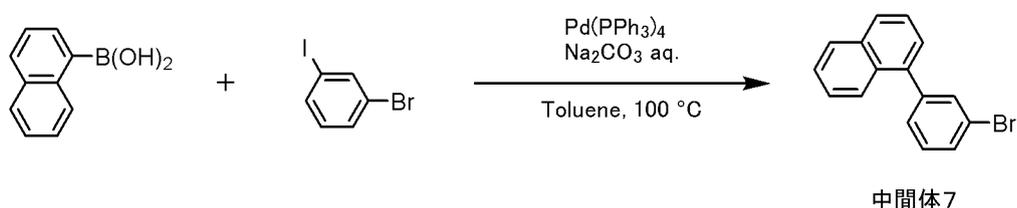
得られた固体をマスマスペクトルにて分析し、目的の化合物5であることを確認した。分子量633.26に対し $m/e = 633$ であった。収率58%であった。

【0118】

合成実施例6(化合物6の合成)

(1) 中間体7の合成

【化 5 1】



40

【0119】

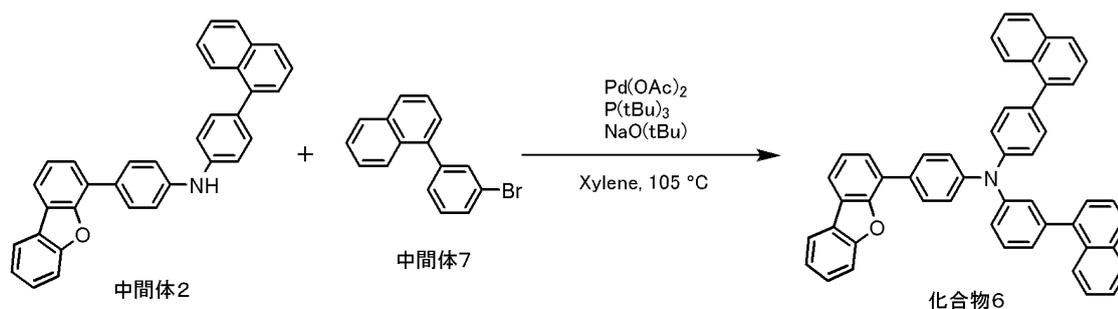
中間体5の合成において、中間体4の代わりに1-ナフタレンボロン酸を、4-ブロモヨードベンゼンの代わりに3-ブロモヨードベンゼンを用いる以外は、中間体5の合成と同様の操作を行い、中間体7を得た。

【0120】

(2) 化合物6の合成

50

【化52】



10

【0121】

合成実施例1(3)において、1-(4-プロモフェニル)ナフタレンの代わりに中間体7を用いる以外は、合成実施例1(3)と同様の操作を行い、白色固体を得た。

得られた固体をマスマスペクトルにて分析し、目的の化合物6であることを確認した。分子量633.26に対し $m/e = 633$ であった。収率66%であった。

【0122】

<有機EL素子の作製>

有機EL素子を以下のように作製した。

(実施例1)

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

20

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

この正孔注入層の上に、HT-1を蒸着し、膜厚80nmの第一正孔輸送層を形成した。この第一正孔輸送層の上に、合成実施例1で得られた化合物1を蒸着し、膜厚10nmの第二正孔輸送層を形成した。続けて、この第二正孔輸送層の上に、BH-1(ホスト材料)とBD-1(ドーパント材料)とを共蒸着し、膜厚25nmの発光層を形成した。発光層内におけるBD-1(ドーパント材料)の濃度を4質量%とした。

30

続けて、この発光層の上に、ET-1を蒸着し、膜厚10nmの第一電子輸送層を形成した。続けて、この第一電子輸送層の上に、ET-2を蒸着し、膜厚15nmの第二電子輸送層を形成した。

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

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

実施例1の有機EL素子は、下記構成とした。

ITO(130)/HI-1(5)/HT-1(80)/化合物1(10)/BH-1
:BD-1(25:4質量%)/ET-1(10)/ET-2(15)/LiF(1)/
Al(80)

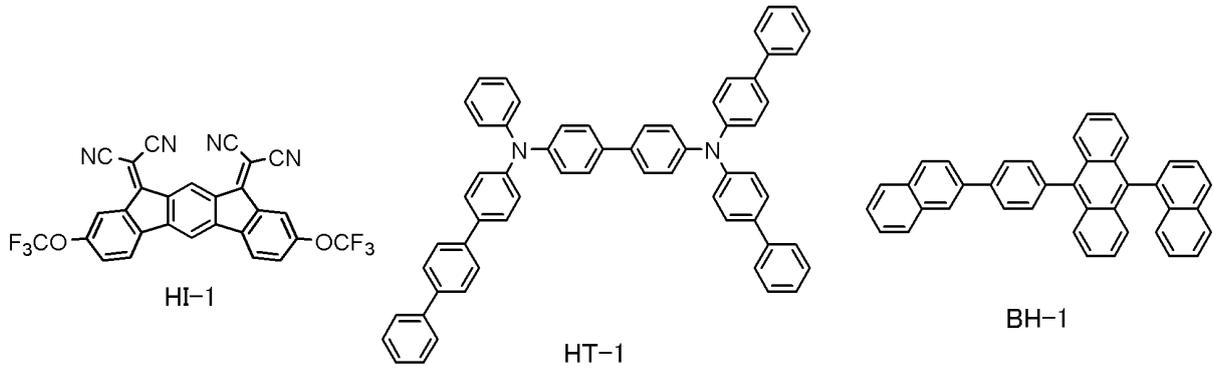
40

なお、括弧内の数字は、膜厚(単位:nm)を示す。

【0123】

50

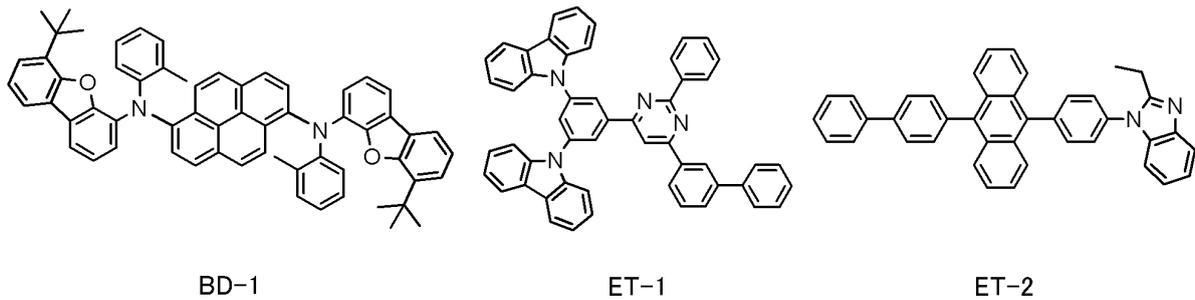
【化 5 3】



10

【 0 1 2 4】

【化 5 4】



20

【 0 1 2 5】

(実施例 2)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、合成実施例 2 で得られた化合物 2 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

【 0 1 2 6】

(実施例 3)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、合成実施例 3 で得られた化合物 3 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

30

【 0 1 2 7】

(実施例 4)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、合成実施例 4 で得られた化合物 4 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

【 0 1 2 8】

(実施例 5)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、合成実施例 5 で得られた化合物 5 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

【 0 1 2 9】

(実施例 6)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、合成実施例 6 で得られた化合物 6 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

40

【 0 1 3 0】

(比較例 1)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、下記比較化合物 1 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

【 0 1 3 1】

(比較例 2)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、下記比較化合物 2 を用いたこと

50

以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

【 0 1 3 2 】

(比較例 3)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、下記比較化合物 3 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

【 0 1 3 3 】

(比較例 4)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、下記比較化合物 4 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

【 0 1 3 4 】

(比較例 5)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、下記比較化合物 5 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

【 0 1 3 5 】

(比較例 6)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、下記比較化合物 6 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

【 0 1 3 6 】

(比較例 7)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、下記比較化合物 7 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

【 0 1 3 7 】

(比較例 8)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、下記比較化合物 8 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

【 0 1 3 8 】

(比較例 9)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、下記比較化合物 9 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 E L 素子を作製した。

【 0 1 3 9 】

10

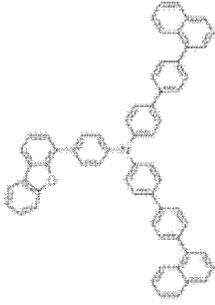
20

30

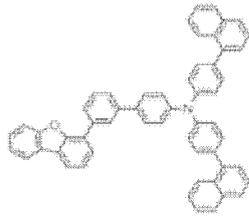
40

50

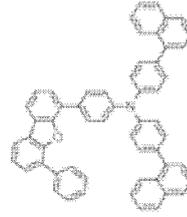
【化 5 5】



比較化合物 1

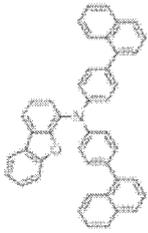


比較化合物 2

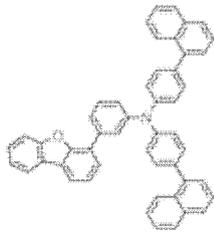


比較化合物 3

10



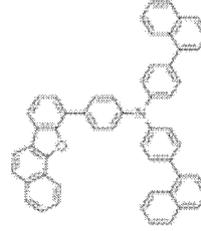
比較化合物 4



比較化合物 5

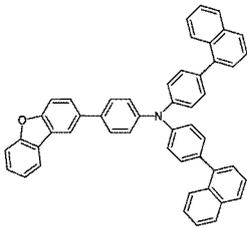


比較化合物 6

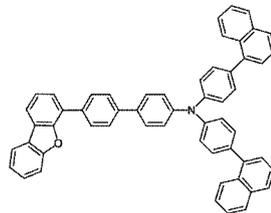


比較化合物 7

20



比較化合物 8



比較化合物 9

30

【0140】

<有機EL素子の評価1>

作製した有機EL素子について、電流密度が 10 mA/cm^2 となるように有機EL素子に電圧を印加し、外部量子効率の評価を行った。また、電流密度が 50 mA/cm^2 となるように有機EL素子に電圧を印加し、90%寿命(LT90)の評価を行った。結果を表1に示す。ここで90%寿命(LT90)とは、定電流駆動時において、輝度が初期輝度の90%に低下するまでの時間(hr)をいう。

【0141】

40

50

【表 1】

表 1

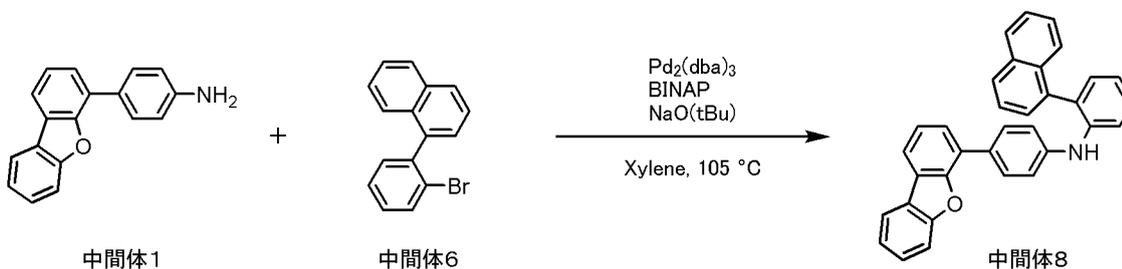
	正孔輸送材料	外部量子効率 (%)	90%寿命 (h r)
実施例 1	化合物 1	9.5	170
実施例 2	化合物 2	9.4	160
実施例 3	化合物 3	9.4	150
実施例 4	化合物 4	9.2	170
実施例 5	化合物 5	9.6	130
実施例 6	化合物 6	9.5	140
比較例 1	比較化合物 1	8.6	130
比較例 2	比較化合物 2	9.2	80
比較例 3	比較化合物 3	8.7	130
比較例 4	比較化合物 4	9.0	70
比較例 5	比較化合物 5	9.0	80
比較例 6	比較化合物 6	8.8	75
比較例 7	比較化合物 7	8.4	90
比較例 8	比較化合物 8	9.3	50
比較例 9	比較化合物 9	8.5	130

【0142】

合成実施例 7 (化合物 7 の合成)

(1) 中間体 8 の合成

【化 56】



【0143】

中間体 2 の合成において、1-(4-プロモフェニル)ナフタレンの代わりに中間体 6 を用いる以外は、中間体 2 の合成と同様の操作を行い中間体 8 を得た。

【0144】

(2) 化合物 7 の合成

10

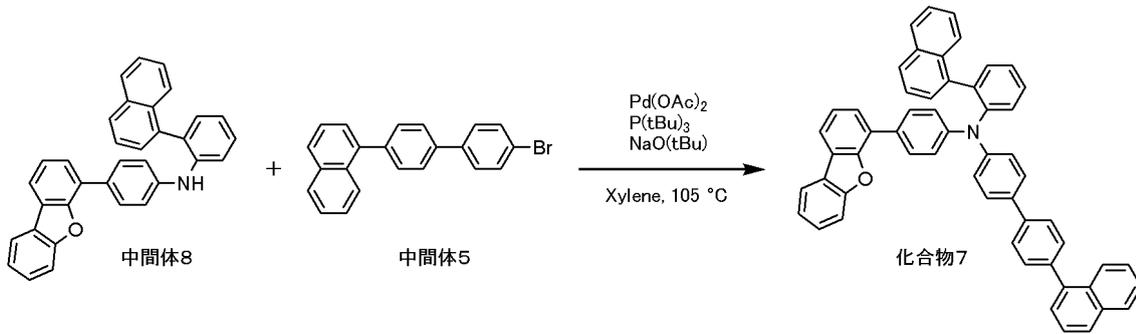
20

30

40

50

【化 5 7】



10

【0145】

合成実施例 1 (3) において、中間体 2 の代わりに中間体 8 を、1 - (4 - プロモフェニル) ナフタレンの代わりに中間体 5 を用いる以外は、合成実施例 1 (3) と同様の操作を行い、白色固体を得た。

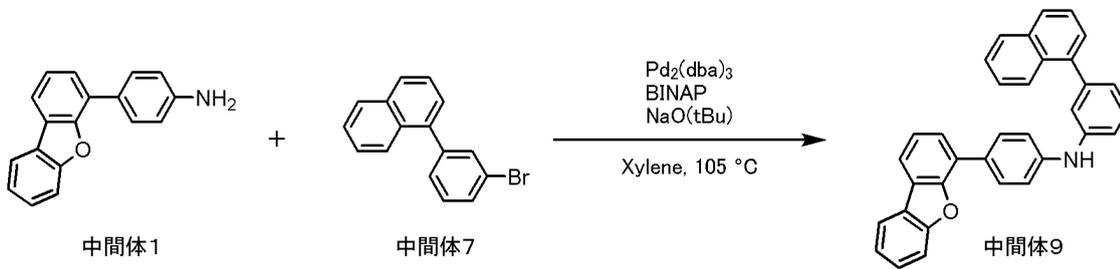
得られた固体をマスペクトルにて分析し、目的の化合物 7 であることを確認した。分子量 739.29 に対し $m/e = 739$ であった。収率 55% であった。

【0146】

合成実施例 8 (化合物 8 の合成)

(1) 中間体 9 の合成

【化 5 8】



20

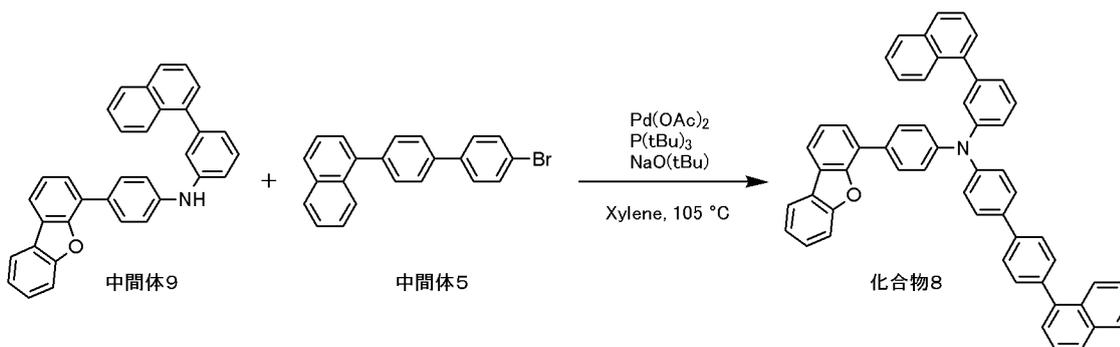
【0147】

中間体 2 の合成において、1 - (4 - プロモフェニル) ナフタレンの代わりに中間体 7 を用いる以外は、中間体 2 の合成と同様の操作を行い中間体 9 を得た。

【0148】

(2) 化合物 8 の合成

【化 5 9】



40

【0149】

合成実施例 1 (3) において、中間体 2 の代わりに中間体 9 を、1 - (4 - プロモフェニル) ナフタレンの代わりに中間体 5 を用いる以外は、合成実施例 1 (3) と同様の操作を行い、白色固体を得た。

得られた固体をマスペクトルにて分析し、目的の化合物 8 であることを確認した。分

50

量子 739.29 に対し $m/e = 739$ であった。収率 60% であった。

【0150】

(実施例 7)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、合成実施例 7 で得られた化合物 7 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 EL 素子を作製した。

【0151】

(実施例 8)

実施例 1 の第二正孔輸送層に用いた化合物 1 に代えて、合成実施例 8 で得られた化合物 8 を用いたこと以外、実施例 1 と同様にして有機 EL 素子を作製した。

【0152】

<有機 EL 素子の評価 2 >

作製した有機 EL 素子について、実施例 1 ~ 6 と同様に、外部量子効率及び 90% 寿命 (LT90) の評価を行った。結果を表 2 に示す。

【0153】

【表 2】

表 2

	正孔輸送材料	外部量子効率 (%)	90% 寿命 (hr)
実施例 7	化合物 7	9.5	150
実施例 8	化合物 8	9.4	140

【0154】

表 1 及び表 2 から明らかなように、特定の構造を有する化合物 (1) に包含される化合物 1 ~ 8 を有機 EL 素子の正孔輸送材料として用いることにより、比較化合物 1 ~ 9 では実現されない、高い外部量子効率と長寿命を同時に満たす有機 EL 素子が得られることが分かる。

本発明の材料は、比較化合物 1 のように 3 連結以上の環構造による側鎖を複数有さず、比較化合物 3、7 のように共役系の広がり最も大きなジベンゾフラン部位にアリアル置換基や縮合環形成を導入せず、比較化合物 9 のように窒素原子との間のリンカーをベンゼン 2 つにすることなく、化合物 1 ~ 8 のように 1 つに限ることにより、一重項エネルギーギャップを大きく保っていると考えられる。このことにより発光層に励起子を封じ込め、エネルギーをロス無く光に変換することで、高い効率を実現すると考えられる。また、比較化合物 4、6 のようにナフタレン環やジベンゾフラン環の電子受容性の相対的に高い部位が窒素原子に直結する場合、材料が電子を保持した場合に中心窒素原子に強く作用することで不安定になると考えられるため、これらの環はアミン原子とはリンカーを介して結合する本願の構造が長寿命を実現していると考えられる。さらに、比較化合物 2、5 のように、もっとも電子受容性の高いジベンゾフランに関しては、リンカーが屈曲型であると電子を受けた際に分子が不安定化すると考えられるため、パラフェニレンリンカーを有する本発明の材料が長寿命を実現していると考えられる。さらにまた、比較化合物 8 のように、ジベンゾフラン環が、2 位からの延長で中心窒素原子に対して結合することなく、化合物 1 ~ 8 のように 4 位からの延長で中心窒素原子に対して結合をすることで構造が安定化すると考えられ、既知の 2 位置換体よりも長寿命を実現している。

【符号の説明】

【0155】

- 1 有機エレクトロルミネッセンス素子
- 2 基板
- 3 陽極
- 4 陰極

10

20

30

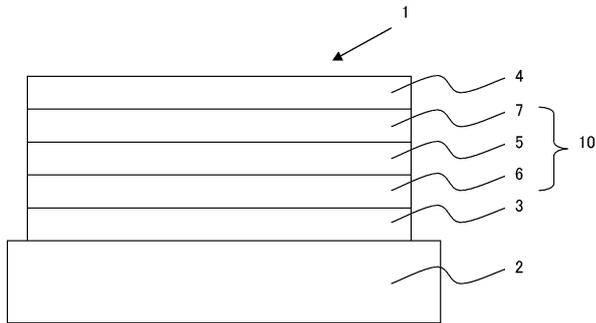
40

50

- 5 発光層
- 6 正孔注入層 / 正孔輸送層
- 7 電子注入層 / 電子輸送層
- 10 発光ユニット

【図面】

【図 1】



10

20

30

40

50

フロントページの続き

- (56)参考文献 韓国公開特許第10 - 2017 - 0100709 (KR, A)
米国特許出願公開第2017/0244047 (US, A1)
国際公開第2016/208862 (WO, A1)
韓国公開特許第10 - 2016 - 0149879 (KR, A)
米国特許出願公開第2016/0351819 (US, A1)
国際公開第2016/178544 (WO, A1)
国際公開第2016/175533 (WO, A1)
特表2016 - 509368 (JP, A)
国際公開第2011/059099 (WO, A1)
米国特許出願公開第2017/0317290 (US, A1)
米国特許出願公開第2016/0118596 (US, A1)
国際公開第2009/145016 (WO, A1)
米国特許出願公開第2017/0084843 (US, A1)
国際公開第2016/190600 (WO, A1)
特開2017 - 008023 (JP, A)
特開2016 - 086155 (JP, A)
特開2016 - 092297 (JP, A)
- (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)
C07D 307/91
H10K 50/00
H10K 50/15
Caplus/REGISTRY (STN)