

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第5677035号
(P5677035)

(45) 発行日 平成27年2月25日(2015.2.25)

(24) 登録日 平成27年1月9日(2015.1.9)

(51) Int.Cl.

F I

C07D 311/86	(2006.01)	C07D 311/86	CSP
H01L 51/50	(2006.01)	H05B 33/14	B
H05B 33/08	(2006.01)	H05B 33/22	B
C09K 11/06	(2006.01)	H05B 33/08	
C07F 15/00	(2006.01)	C09K 11/06	690

請求項の数 11 (全 32 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2010-247857 (P2010-247857)
 (22) 出願日 平成22年11月4日(2010.11.4)
 (65) 公開番号 特開2012-97051 (P2012-97051A)
 (43) 公開日 平成24年5月24日(2012.5.24)
 審査請求日 平成25年11月1日(2013.11.1)

(73) 特許権者 000001007
 キヤノン株式会社
 東京都大田区下丸子3丁目30番2号
 (74) 代理人 100126240
 弁理士 阿部 琢磨
 (74) 代理人 100124442
 弁理士 黒岩 創吾
 (72) 発明者 堀内 貴行
 東京都大田区下丸子3丁目30番2号キヤ
 ノン株式会社内
 (72) 発明者 鎌谷 淳
 東京都大田区下丸子3丁目30番2号キヤ
 ノン株式会社内

最終頁に続く

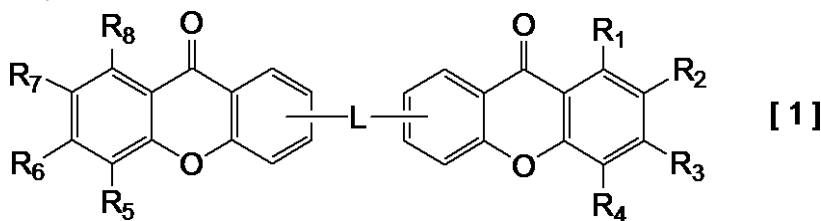
(54) 【発明の名称】 キサントン化合物およびそれを有する有機発光素子

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記一般式[1]で示されることを特徴とするキサントン化合物。

【化1】



一般式[1]において、R₁乃至R₈は水素原子または炭素数1乃至4のアルキル基、置換あるいは無置換のフェニル基、置換あるいは無置換のナフチル基、置換あるいは無置換のフェナントリル基、置換あるいは無置換のフルオレニル基、置換あるいは無置換のトリフェニレニル基、置換あるいは無置換のクリセニル基、置換あるいは無置換のジベンゾフラニル基、置換あるいは無置換のジベンゾチエニル基からそれぞれ独立に選ばれ、

Lは置換あるいは無置換の2価のベンゼン、置換あるいは無置換の2価のビフェニル、置換あるいは無置換の2価のターフェニル、置換あるいは無置換の2価のナフタレン、置換あるいは無置換の2価のフェナントレン、置換あるいは無置換の2価のフルオレン、置換あるいは無置換の2価のトリフェニレン、置換あるいは無置換の2価のクリセン、置換

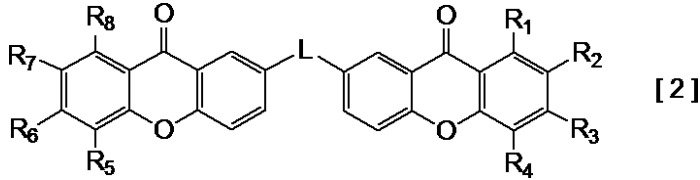
あるいは無置換の2価のジベンゾフラン、置換あるいは無置換の2価のジベンゾチオフェンのいずれかである。

前記ベンゼンおよび前記ビフェニルおよび前記ターフェニルおよび前記ナフタレンおよび前記フェナントレンおよび前記フルオレンおよび前記トリフェニレンおよび前記クリセンおよび前記ジベンゾフランおよび前記ジベンゾチオフェンは、炭素数1乃至4のアルキル基を置換基として有してよい。

【請求項2】

下記一般式[2]で示されることを特徴とする請求項1に記載のキサントン化合物。

【化2】



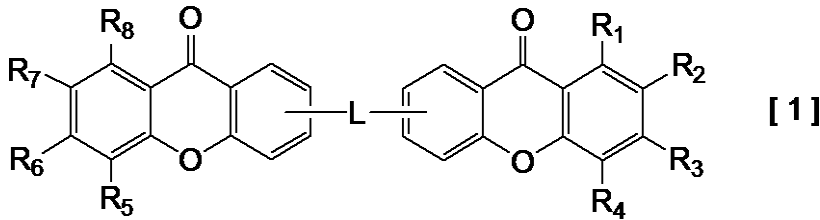
10

【請求項3】

一对の電極と前記一对の電極の間に配置された有機化合物層とを有する有機発光素子であって、

前記有機化合物層は下記一般式[1]で示されるキサントン化合物を有することを特徴とする有機発光素子。

【化3】



20

一般式[1]において、R₁乃至R₈は水素原子または炭素数1乃至4のアルキル基、置換あるいは無置換のフェニル基、置換あるいは無置換のナフチル基、置換あるいは無置換のフェナントリル基、置換あるいは無置換のフルオレニル基、置換あるいは無置換のトリフェニレニル基、置換あるいは無置換のクリセニル基、置換あるいは無置換のジベンゾフラニル基、置換あるいは無置換のジベンゾチエニル基からそれぞれ独立に選ばれ、

30

Lは単結合または置換あるいは無置換の2価のベンゼン、置換あるいは無置換の2価のビフェニル、置換あるいは無置換の2価のターフェニル、置換あるいは無置換の2価のナフタレン、置換あるいは無置換の2価のフェナントレン、置換あるいは無置換の2価のフルオレン、置換あるいは無置換の2価のトリフェニレン、置換あるいは無置換の2価のクリセン、置換あるいは無置換の2価のジベンゾフラン、置換あるいは無置換の2価のジベンゾチオフェンのいずれかである。

前記ベンゼンおよび前記ビフェニルおよび前記ターフェニルおよび前記ナフタレンおよび前記フェナントレンおよび前記フルオレンおよび前記トリフェニレンおよび前記クリセンおよび前記ジベンゾフランおよび前記ジベンゾチオフェンは、炭素数1乃至4のアルキル基を置換基として有してよい。

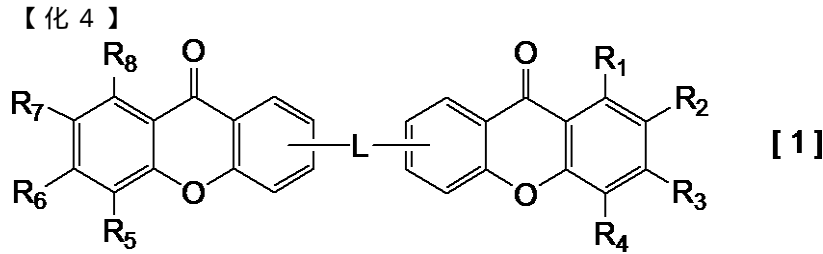
40

【請求項4】

一对の電極と前記一对の電極の間に配置された有機化合物層とを有する有機発光素子であって、

前記有機化合物層は発光層を有し、

前記発光層は下記一般式[1]で示されるキサントン化合物を有することを特徴とする有機発光素子。



一般式 [1] において、 R_1 乃至 R_8 は水素原子または炭素数 1 乃至 4 のアルキル基、置換あるいは無置換のフェニル基、置換あるいは無置換のナフチル基、置換あるいは無置換のフェナントリル基、置換あるいは無置換のフルオレニル基、置換あるいは無置換のトリフェニル基、置換あるいは無置換のクリセニル基、置換あるいは無置換のジベンゾフラニル基、置換あるいは無置換のジベンゾチエニル基からそれぞれ独立に選ばれ、

10

L は単結合または置換あるいは無置換の 2 価のベンゼン、置換あるいは無置換の 2 価のビフェニル、置換あるいは無置換の 2 価のターフェニル、置換あるいは無置換の 2 価のナフタレン、置換あるいは無置換の 2 価のフェナントレン、置換あるいは無置換の 2 価のフルオレン、置換あるいは無置換の 2 価のトリフェニレン、置換あるいは無置換の 2 価のクリセン、置換あるいは無置換の 2 価のジベンゾフラン、置換あるいは無置換の 2 価のジベンゾチオフェンのいずれかである。

前記ベンゼンおよび前記ビフェニルおよび前記ターフェニルおよび前記ナフタレンおよび前記フェナントレンおよび前記フルオレンおよび前記トリフェニレンおよび前記クリセンおよび前記ジベンゾフランおよび前記ジベンゾチオフェンは、炭素数 1 乃至 4 のアルキル基を置換基として有してよい。

20

【請求項 5】

前記有機化合物層は発光層と前記発光層に接する電子輸送層と電極から供給される電子を前記電子輸送層に輸送する電子注入層とを有し、

前記電子輸送層または前記電子注入層の少なくともいずれか一方は前記キサントン化合物を有することを特徴とする請求項 3 に記載の有機発光素子。

【請求項 6】

前記発光層はホスト材料とゲスト材料とを有し、

前記ホスト材料は前記キサントン化合物であり、

前記ゲスト材料はイリジウム錯体であることを特徴とする請求項 4 乃至 5 のいずれか一項に記載の有機発光素子。

30

【請求項 7】

複数の画素を有し、前記画素は請求項 3 乃至 6 のいずれか一項に記載の有機発光素子と前記有機発光素子に接続するスイッチング素子とを有することを特徴とする表示装置。

【請求項 8】

画像を出力するための表示部と画像情報を入力するための入力部とを有し、前記表示部は複数の画素を有し、前記画素は請求項 3 乃至 6 のいずれか一項に記載の有機発光素子と前記有機発光素子に接続するスイッチング素子とを有することを特徴とする画像入力装置

40

【請求項 9】

請求項 3 乃至 6 のいずれか一項に記載の有機発光素子を有することを特徴とする照明装置。

【請求項 10】

露光光源を有する電子写真方式の画像形成装置であって、

前記露光光源は、請求項 3 乃至 6 のいずれか一項に記載の有機発光素子を有することを特徴とする画像形成装置。

【請求項 11】

電子写真方式の画像形成装置に設けられる露光光源であって、

50

前記露光光源は、請求項 3 乃至 6 のいずれか一項に記載の有機発光素子を有することを特徴とする画像形成装置。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明はキサントン化合物およびそれを有する有機発光素子に関する。

【背景技術】

【0002】

有機発光素子は陽極と陰極と、それら両電極間に配置される有機化合物層とを有する素子である。有機発光素子は、前記各電極から注入させる正孔（ホール）及び電子が有機化合物層内で再結合することで励起子が生成し、励起子が基底状態に戻る際に光が放出される。有機発光素子は有機エレクトロルミネッセント素子、あるいは有機 EL 素子とも呼ばれる。有機発光素子の最近の進歩は著しく、駆動電圧が低く、多様な発光波長、高速応答性、薄型、軽量の発光デバイス化が可能である。

10

【0003】

燐光発光素子は前記有機化合物層中に燐光発光材料を有し、その三重項励起子由来の発光が得られる有機発光素子である。高性能の燐光発光素子を提供するにあたり、これまでに新規な有機化合物の創出が盛んに行われている。

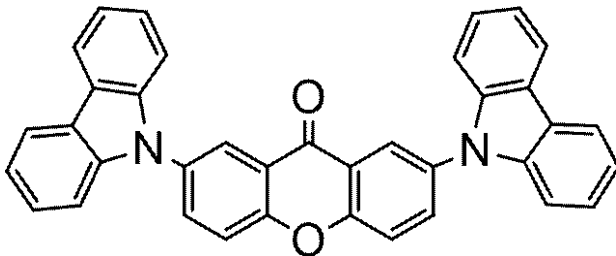
【0004】

例えば、燐光発光素子の青または緑を発する発光層のホスト材料として、カルバゾリル基を有するキサントン誘導体である化合物 1 が特許文献 1 に記載されている。

20

【0005】

【化 1】



化合物 1

30

【先行技術文献】

【特許文献】

【0006】

【特許文献 1】国際公開 2006 / 114966 パンフレット

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0007】

特許文献 1 に記載の化合物 1 は最低励起三重項 (T_1) エネルギーが低いため、青色または緑色燐光発光素子における発光層のホスト材料や発光層に隣接するキャリア輸送層を構成する材料としては十分でない。

40

【0008】

発光層のホスト材料の T_1 エネルギーが低い場合、発光層のゲスト材料にエネルギーが十分に移動しないので、十分な発光を得られないため好ましくない。

【0009】

また、発光層に隣接するキャリア輸送層の T_1 エネルギーが低い場合、発光層から隣接層へエネルギーが移動することを抑制できないため好ましくない。

【0010】

そこで、本発明は、高い T_1 エネルギー及び良好な電子注入性を有するキサントン化合物を提供することを目的とする。また、そのようなキサントン化合物を有する発光効率が高くかつ駆動電圧が低い有機発光素子を提供することを目的とする。

50

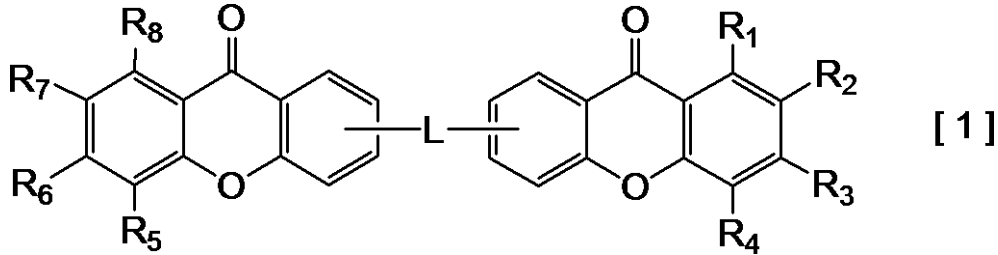
【課題を解決するための手段】

【0011】

よって本発明は、下記一般式 [1] で示されることを特徴とするキサントン化合物を提供する。

【0012】

【化2】



10

【0013】

一般式 [1] において、 R_1 乃至 R_8 は水素原子または炭素数 1 乃至 4 のアルキル基、置換あるいは無置換のフェニル基、置換あるいは無置換のナフチル基、置換あるいは無置換のフェナントリル基、置換あるいは無置換のフルオレニル基、置換あるいは無置換のトリフェニル基、置換あるいは無置換のクリセニル基、置換あるいは無置換のジベンゾフラニル基、置換あるいは無置換のジベンゾチエニル基からそれぞれ独立に選ばれ、

L は単結合または置換あるいは無置換の 2 価のベンゼン、置換あるいは無置換の 2 価のビフェニル、置換あるいは無置換の 2 価のターフェニル、置換あるいは無置換の 2 価のナフタレン、置換あるいは無置換の 2 価のフェナントレン、置換あるいは無置換の 2 価のフルオレン、置換あるいは無置換の 2 価のトリフェニレン、置換あるいは無置換の 2 価のクリセン、置換あるいは無置換の 2 価のジベンゾフラン、置換あるいは無置換の 2 価のジベンゾチオフェンのいずれかである。

20

【0014】

前記ベンゼンおよび前記ビフェニルおよび前記ターフェニルおよび前記ナフタレンおよび前記フェナントレンおよび前記フルオレンおよび前記トリフェニレンおよび前記クリセンおよび前記ジベンゾフランおよび前記ジベンゾチオフェンは、炭素数 1 乃至 4 のアルキル基を置換基として有してよい。

30

【発明の効果】

【0015】

本発明によれば、高い T_1 エネルギー及び良好な電子注入性を有するキサントン化合物を提供できる。そして、それを有する発光効率が高くかつ駆動電圧が低い有機発光素子を提供できる。

【図面の簡単な説明】

【0016】

【図1】有機発光素子とこの有機発光素子に接続するスイッチング素子とを表す断面模式図である。

【発明を実施するための形態】

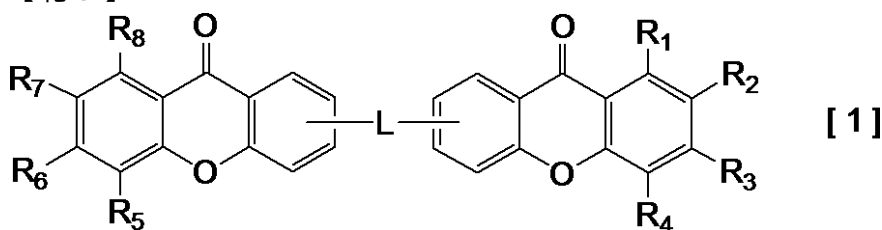
40

【0017】

本発明は下記一般式 [1] で示されることを特徴とするキサントン化合物である。

【0018】

【化3】



50

【0019】

一般式[1]において、 R_1 乃至 R_8 は水素原子または炭素数1乃至4のアルキル基、置換あるいは無置換のフェニル基、置換あるいは無置換のナフチル基、置換あるいは無置換のフェナントリル基、置換あるいは無置換のフルオレニル基、置換あるいは無置換のトリフェニレニル基、置換あるいは無置換のクリセニル基、置換あるいは無置換のジベンゾフラニル基、置換あるいは無置換のジベンゾチエニル基からそれぞれ独立に選ばれる。

【0020】

炭素数1乃至4のアルキル基とは、メチル基、エチル基、ノルマルプロピル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、セカンダリブチル基、イソブチル基、ターシャリブチル基である。

10

【0021】

R_1 乃至 R_8 で示されるフェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、フルオレニル基、トリフェニレニル基、クリセニル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基は置換基をさらに有してよい。

【0022】

その置換基とは、炭素数1以上4以下のアルキル基またはフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、フルオレニル基、クリセニル基、トリフェニレニル基等のアリール基またはジベンゾフラニル基またはジベンゾチエニル基である。

【0023】

Lは単結合または置換あるいは無置換の2価のベンゼン、置換あるいは無置換の2価のビフェニル、置換あるいは無置換の2価のターフェニル、置換あるいは無置換の2価のナフタレン、置換あるいは無置換の2価のフェナントレン、置換あるいは無置換の2価のフルオレン、置換あるいは無置換の2価のトリフェニレン、置換あるいは無置換の2価のクリセン、置換あるいは無置換の2価のジベンゾフラン、置換あるいは無置換の2価のジベンゾチオフェンのいずれかである。

20

【0024】

前記ベンゼンおよび前記ビフェニルおよび前記ターフェニルおよび前記ナフタレンおよび前記フェナントレンおよび前記フルオレンおよび前記トリフェニレンおよび前記クリセンおよび前記ジベンゾフランおよび前記ジベンゾチオフェンは、炭素数1乃至4のアルキル基を置換基として有してよい。

30

【0025】

Lが単結合である場合、一般式[1]で示されるキサントン化合物は2つのキサントン骨格が直接結合した構造を有する。

【0026】

一方、Lが2価の連結基である場合、一般式[1]で示されるキサントン化合物は連結基を介して2つのキサントン骨格が結合した構造である。

【0027】

Lで示される置換基は炭素数1以上4以下のアルキル基を置換基として有してよい。

【0028】

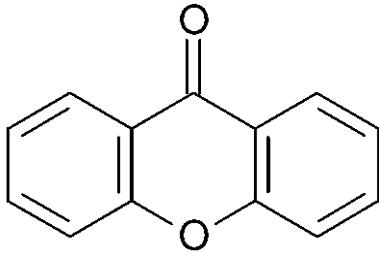
(本発明に係るキサントン化合物の性質)

40

本発明に係るキサントン化合物は以下構造式Aで示されるキサントン骨格を二つ有する化合物である。ここでは構造式Aで示したものをキサントン骨格と呼ぶ。

【0029】

【化4】



構造式 [A]

【0030】

キサントン骨格はカルボニル基を有しているため、電子親和性が高いので、電子注入性が高い化合物である。

【0031】

また、分子間での重なりが起りやすいので、固体状態での分子間電子移動が起きやすい。つまり、電子移動度が高い。

【0032】

また、本発明に係るキサントン化合物はキサントン骨格を二つ有するため、キサントン骨格が一つの場合よりもアモルファス性が高い。ここで、アモルファス性とは、固体状態において、化合物が高温の条件下であっても、結晶化せずアモルファス状態を保つ性能を指す。

【0033】

アモルファス性が高い化合物は、有機発光素子の有機化合物層に用いられることが好ましい。

【0034】

本発明に係るキサントン化合物は最低励起三重項 (T_1) エネルギーが高い。それを説明するために構造式 A で示すキサントン骨格自体の T_1 エネルギーを測定した。

【0035】

上記キサントン骨格の希薄トルエン溶液を 77 K の条件で、燐光スペクトル測定をし、そのスペクトルの 0-0 バンドから T_1 エネルギーを見積もった。

【0036】

その結果、構造式 A で示されるキサントン骨格の T_1 エネルギーは、3.02 eV、波長換算値で 410 nm であった。この値は、青色の波長領域 (440 nm 以上 480 nm 以下) よりも高い T_1 エネルギーである。

【0037】

本発明に係るキサントン化合物は、置換基を有することで、アモルファス性をさらに向上させることができる。置換基は一般式 [1] で示される R_1 乃至 R_8 の位置に設けられる。

【0038】

本発明に係るキサントン化合物は置換基を設けることで、アモルファス性の向上の他に溶媒に対する溶解性を向上することができる。また、置換基を設けることは、真空蒸着を行う際には化合物が熱分解しにくくなるので好ましい。

【0039】

また、置換基は、化合物全体の T_1 エネルギーを下げるのが好ましい。

【0040】

上述した置換基は T_1 を下げることなく、アモルファス性や溶解性や蒸着容易性が高い。

【0041】

本発明に係るキサントン化合物にアルキル基を置換基として設ける場合、炭素数は 1 以上 4 以下が好ましい。炭素数が 5 以上の化合物は、 T_1 エネルギーに与える影響は小さいが、真空蒸着で使用する事が困難になるためである。

10

20

30

40

50

【0042】

本発明に係るキサントン化合物にアリール基を置換基として設ける場合、ベンゼン、ナフタレン、フェナントレン、フルオレン、トリフェニレン、クリセン、ピレン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェンから選ばれることが好ましい。中でもベンゼン、ナフタレン、フェナントレン、フルオレン、トリフェニレン、クリセンから選ばれることがさらに好ましい。

【0043】


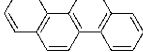

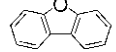
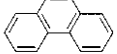
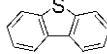
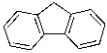
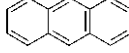
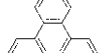
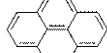
これらのアリール基は T_1 エネルギーが高いので、本発明に係るキサントン化合物の T_1 エネルギーを低下させないため好ましい。これら置換基と参考としてのアントラセンおよびピレンの T_1 エネルギーの波長換算値を表1に示す。

10

【0044】

【表1】

表1

	構造式	T_1 エネルギー 波長換算値		構造式	T_1 エネルギー 波長換算値
ベンゼン		339nm	クリセン		500nm
ナフタレン		472nm	ジベンゾフラン		417nm
フェナンスレン		459nm	ジベンゾチオフェン		415nm
フルオレン		422nm	アントラセン		672nm
トリフェニレン		427nm	ピレン		589nm

20

【0045】

本発明に係るキサントン化合物は、一般式[1]における R_1 乃至 R_8 のうち、 R_2 または R_7 の少なくともいずれか一方に置換基を有することが好ましい。さらに好ましくは、 R_2 および R_7 のいずれにも置換基を有することである。

30

【0046】

一般式[1]における R_2 および R_7 が結合する炭素原子は求電子反応を受けやすいので、 R_2 および R_7 に置換基を設けると分子全体の安定性が向上する。

【0047】

R_2 および R_7 が結合する炭素原子が求電子反応を受けやすいのは、キサントン骨格内のエーテル結合を形成する酸素原子と結合する炭素原子に対してパラ位に位置することに起因する。

【0048】

特許文献1に記載の化合物1およびカルbazolリル基を有するキサントン2量体である化合物2の T_1 エネルギーを密度汎関数法(Density Functional Theory)を用いて、B3LYP/6-31G*レベルでの分子軌道計算を行った。

40

【0049】

本発明に係るキサントン化合物の T_1 エネルギーについても計算を行い、希薄トルエン溶液中の燐光スペクトルを測定した結果と比較した。表2にこれらの値を示す。

【0050】

【表 2】

表 2

	構造	T ₁ エネルギー 波長換算値 (計算値)	T ₁ エネルギー 波長換算値 (実測値)
例示化合物 A-7		411 nm	443 nm
例示化合物 C-1		427 nm	446 nm
化合物 1		486 nm	—
化合物 2		470 nm	—

10

20

【0051】

本発明に係る2種類のキサントン化合物のT₁エネルギーにおける計算値と実測値の差は19 nmと32 nmとであった。

【0052】

この結果から、化合物1および化合物2においても計算値と実測値の差が20から30 nmと予測できる。すると、化合物1のT₁エネルギーの実測値は506 nmから516 nm程度と推定される。

【0053】

この値は、キサントン骨格自体のT₁エネルギーよりも小さい。

30

【0054】

化合物1および化合物2が有するカルバゾリル基は、キサントン骨格のT₁エネルギーに影響を与えるため、分子全体のT₁エネルギーが小さいことがわかる。

【0055】

この理由を考察するため分子軌道計算による電子分布に着目すると、化合物1および化合物2ではHOMO軌道はN-カルバゾリル基に局在し、LUMO軌道はキサントン骨格に局在している。

【0056】

このため、化合物1は電子移動(CT)励起状態を生じてしまい、励起一重項(S₁)及びT₁エネルギーが大きく低下する。

40

【0057】

このことから、キサントン骨格の高いT₁エネルギーを保持するためには、カルバゾリル基のように高いHOMO準位エネルギーを有する置換基を設けることは好ましくない。

【0058】

また、N-カルバゾリル基やアミノ基などの電子供与性置換基を導入することは、キサントン骨格の電子受容性低下という観点から考慮しても好ましくない。

【0059】

本発明に係るキサントン化合物は、連結基Lを有する。連結基Lも置換基と同様に分子全体のT₁エネルギーに影響を与える。

【0060】

50

従って、一般式 [1] における L はベンゼン、ナフタレン、フェナントレン、フルオレン、トリフェニレン、クリセン、ジベンゾフラン、ジベンゾチオフェン、ビフェニル、ターフェニルが好ましい。

【 0 0 6 1 】

置換基のアリール基として挙げた置換基の他にも、ビフェニルおよびターフェニルを連結基として用いることができる。これは、ビフェニルの T_1 は 4 4 5 nm であり、o-ターフェニルの T_1 は 4 6 4 nm であり、m-ターフェニルの T_1 は 4 4 5 nm であり、p-ターフェニルの T_1 は 4 9 1 nm であり、十分大きい T_1 を有するためである。

【 0 0 6 2 】

一般式 [1] における L は、炭素数 1 以上 4 以下のアルキル基を置換基として有してもよい。L がアルキル基を置換基として有する場合、分子全体の熱安定性やアモルファス性が向上するので好ましい。

【 0 0 6 3 】

一般式 [1] における L は、アリール基等の T_1 エネルギーに影響を与える置換基を有さないことが好ましい。

【 0 0 6 4 】

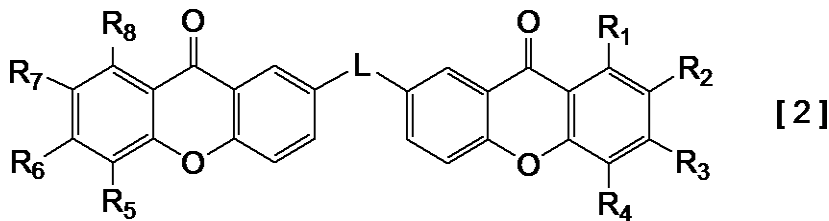
一般式 [1] における L の結合する位置により、化合物の安定性を向上できる。

【 0 0 6 5 】

具体的には一般式 [1] における L は下記一般式 [2] で示される結合位置が好ましい。

【 0 0 6 6 】

【化 5】

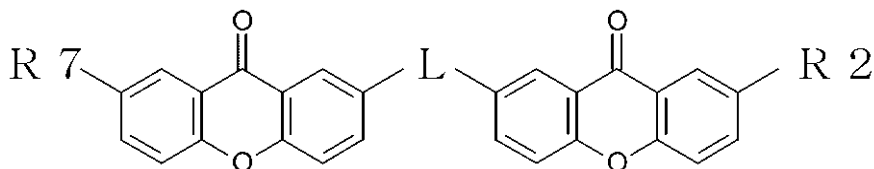


【 0 0 6 7 】

一般式 [2] における R 1 乃至 R 8 および L は、一般式 [1] と同じである。さらに、化合物の安定性を向上させるために R 2 および R 7 に置換基を有することが好ましい。従って、一般式 [3] で示されるキサントン化合物がさらに好ましい。

【 0 0 6 8 】

【化 6】



[3]

【 0 0 6 9 】

一般式 [3] における R 2 および R 7 は、水素原子ではないことを除けば、一般式 [1] と同じである。一般式 [3] における L は一般式 [1] と同じである。

【 0 0 7 0 】

本発明に係るキサントン化合物は T_1 が高くかつ電子移動度が高いので、有機発光素子が有する有機化合物層に用いることが好ましい。

【 0 0 7 1 】

具体的には、発光層のホスト材料または発光層の陰極側に隣接する層の材料に用いられることが好ましい。

【 0 0 7 2 】

10

20

30

40

50

ここで、ホスト材料とは発光層を構成する材料の中で、重量比が最も大きい材料である。ゲスト材料とは、発光層を構成する材料の中で、重量比がホスト材料よりも小さくかつ主たる発光をする材料である。アシスト材料とは、発光層を構成する材料の中で、重量比がホスト材料よりも小さくかつゲスト材料の発光を助ける材料である。アシスト材料はホスト材料 2 とも呼ばれる。

【 0 0 7 3 】

本発明に係るキサントン化合物は、青色または緑色を発する燐光発光素子の発光層のホスト材料として用いることができる。

【 0 0 7 4 】

ここで、青色とは発光波長が 4 4 0 n m 以上 4 8 0 n m 以下の領域を指し、緑色とは発光波長が 5 0 0 n m 以上 5 3 0 n m 以下の領域を指す。

10

【 0 0 7 5 】

また、本発明に係るキサントン化合物は、電子移動度が高いので、青色または緑色を発する燐光発光素子の電子輸送層または電子注入層に用いることができる。

【 0 0 7 6 】

電子輸送層とは、有機発光素子が有する有機化合物層のうち、発光層に接し、電子を輸送する層である。または、有機発光素子が有する有機化合物層のうち、発光層の陰極側に接する層であるということもできる。

【 0 0 7 7 】

この層には、発光層から隣接層へエネルギーが移動しないように発光材料よりも高い T₁ エネルギーを有することが好ましい。

20

【 0 0 7 8 】

電子注入層とは、電極から供給される電子を受け取り、電子輸送層へ輸送する層である。
または、陰極に接し、電子輸送層と陰極との間に配置される層であるということもできる。

【 0 0 7 9 】

この層は電子注入性が高いことが好ましいので、化合物の L U M O 準位が深いことが好ましい。

【 0 0 8 0 】

ここで、L U M O 準位や H O M O 準位が深いとは真空準位から離れていることを示し、L U M O 準位が浅いとは真空準位に近いことを示す。

30

【 0 0 8 1 】

さらに、本発明に係るキサントン化合物は L U M O 準位が低いので、これを電子注入材料、電子輸送材料またはホールブロッキング層または発光層のホスト材料に用いると、素子の駆動電圧を低くできる。

【 0 0 8 2 】

なぜなら L U M O 準位が低い場合、発光層の陰極側に隣接する電子輸送層またはホールブロッキング層からの電子注入障壁が小さくなるからである。

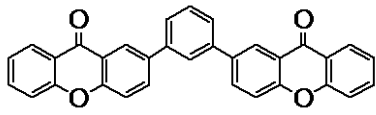
【 0 0 8 3 】

以下に本発明に係るキサントン化合物を具体的な構造式を示して例示する。本発明はこれら例示化合物に限定されるものではない。

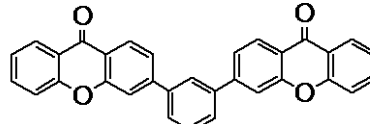
40

【 0 0 8 4 】

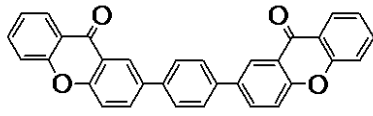
【化7】



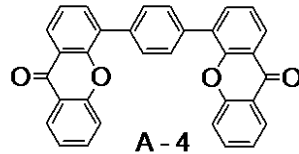
A-1



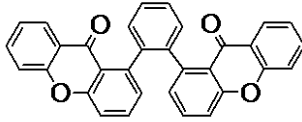
A-2



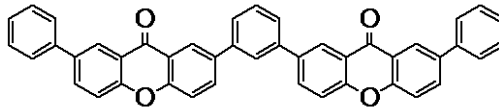
A-3



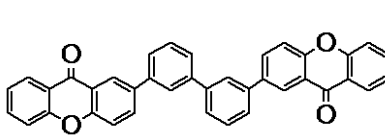
A-4



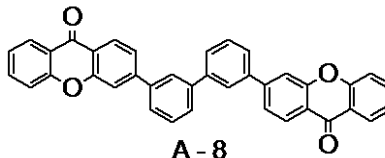
A-5



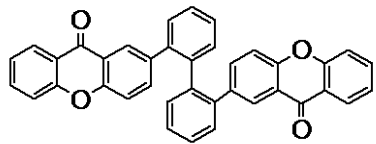
A-6



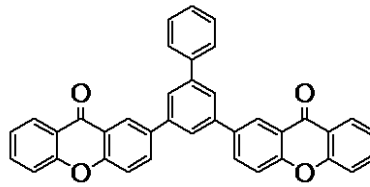
A-7



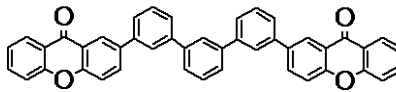
A-8



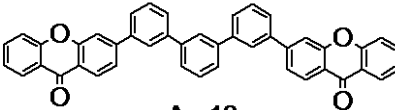
A-9



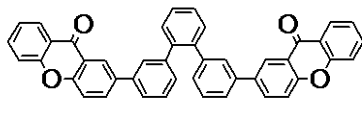
A-10



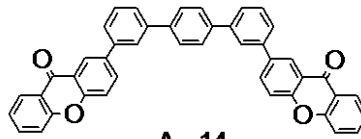
A-11



A-12



A-13



A-14

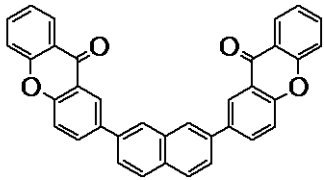
【0085】

10

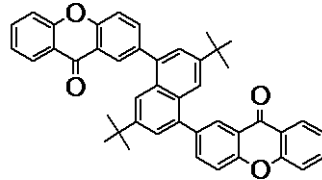
20

30

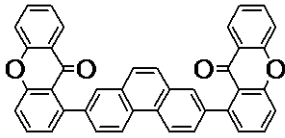
【化 8】



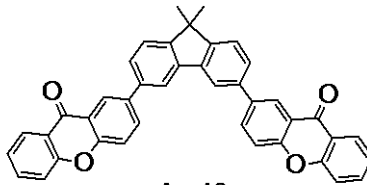
A-15



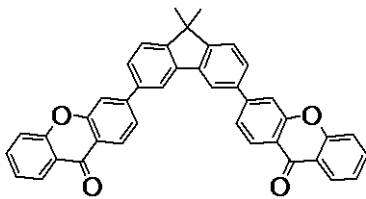
A-16



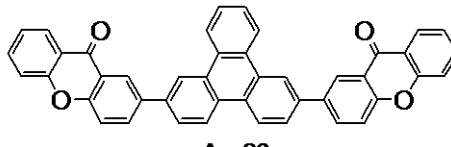
A-17



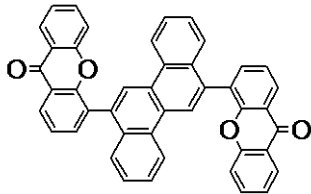
A-18



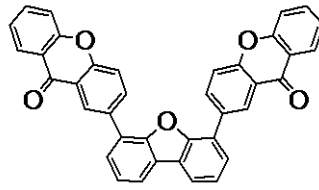
A-19



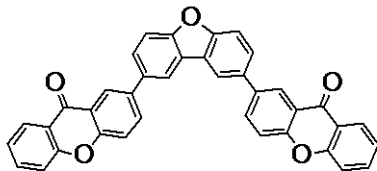
A-20



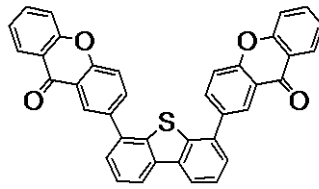
A-21



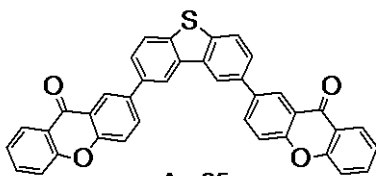
A-22



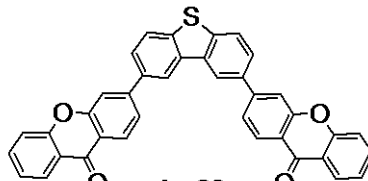
A-23



A-24



A-25



A-26

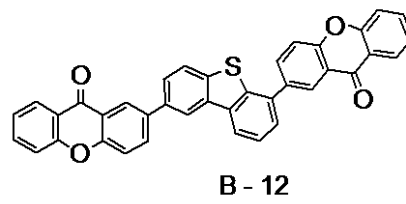
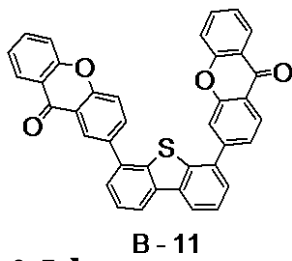
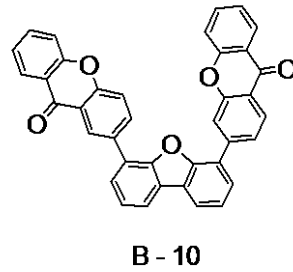
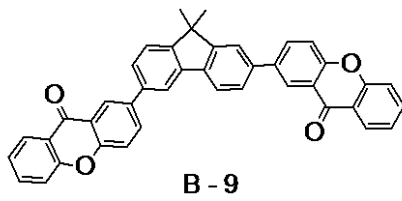
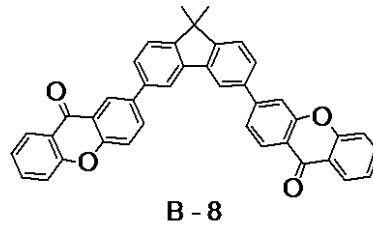
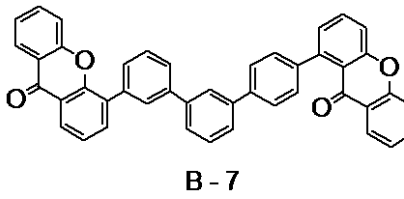
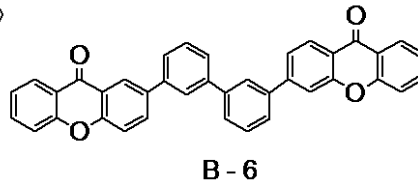
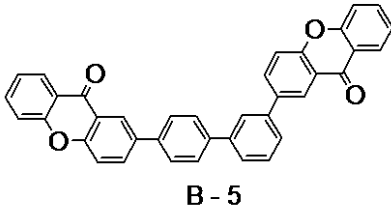
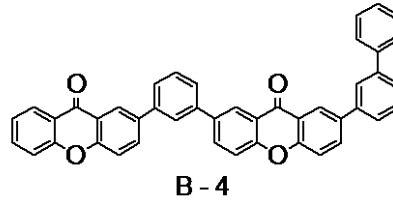
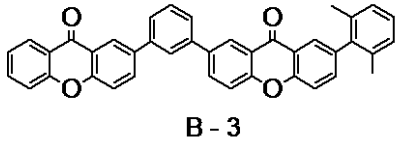
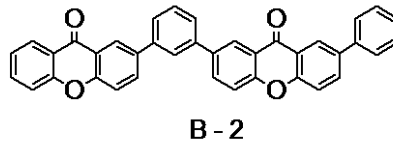
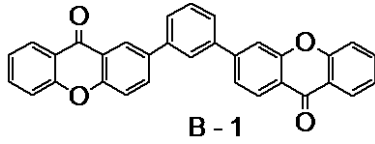
【 0 0 8 6 】

10

20

30

【化 9】



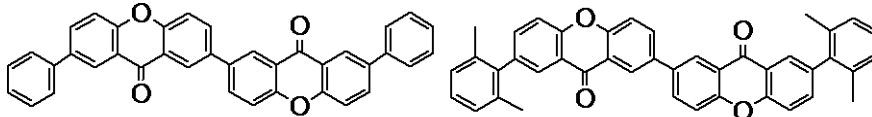
【 0 0 8 7 】

10

20

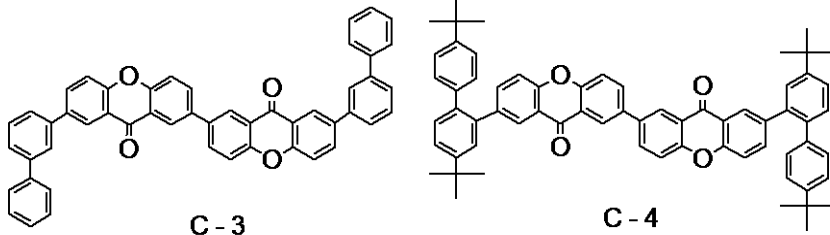
30

【化 1 0】



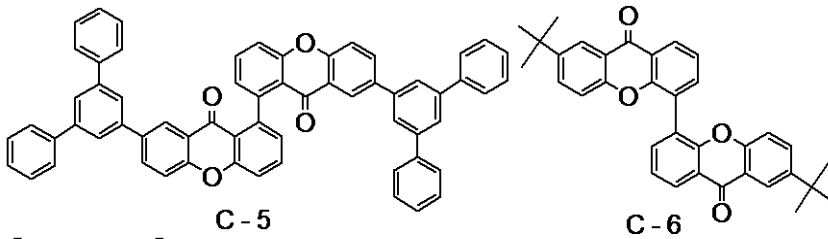
C-1

C-2



C-3

C-4

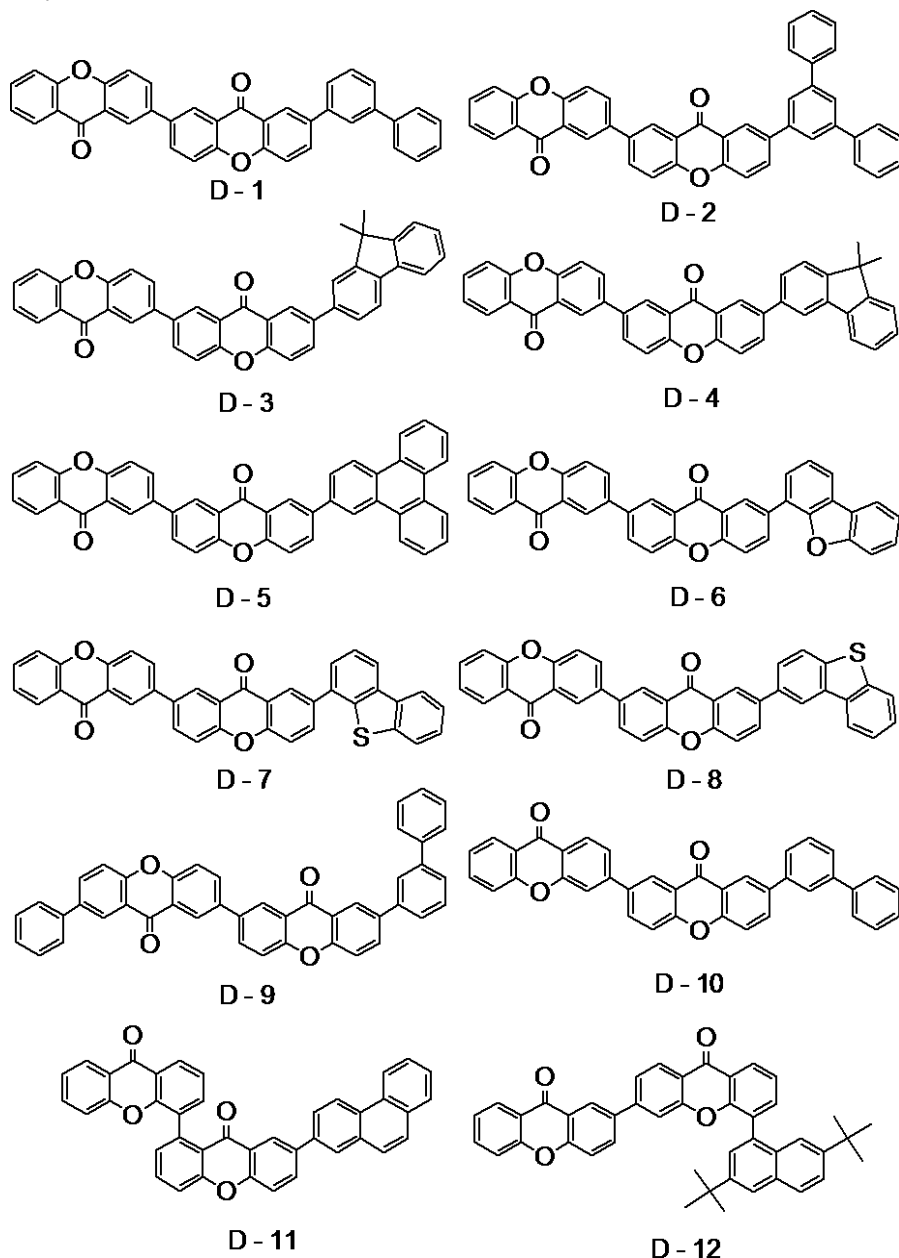


C-5

C-6

【 0 0 8 8 】

【化 1 1】



10

20

30

【0089】

(例示した化合物のそれぞれの性質)

例示化合物のうちA群に示すものはLが芳香環置換基であり、分子内に対称面または対称軸を持つ。2つのキサントン骨格はそれぞれ似た電子状態であり、電子分布に偏りがなく安定である。

【0090】

また、B群に示すものはLが芳香環置換基であり、分子内に対称面または対称軸を持たない。従って、アモルファス状態においてより高い安定性を実現できる。また置換基の位置や種類を様々に変化させることで物性値の細かい調節が可能である。

40

【0091】

また、C群に示すものはLが単結合であり、分子内に対称面または対称軸を持つ。電子分布に偏りがなく安定であると同時に、2つのキサントン骨格が直接結合しているため電子受容性が一層高まり、有機発光素子の低電圧化に効果的である。

【0092】

さらに、D群に示すものはLが単結合であり、分子内に対称面または対称軸を持たない。従って、低電圧化とアモルファス性向上に効果的である。また置換基の位置や種類を様

50

々に変化させることで物性値の細かい調節が可能である。

【0093】

(合成ルートの説明)

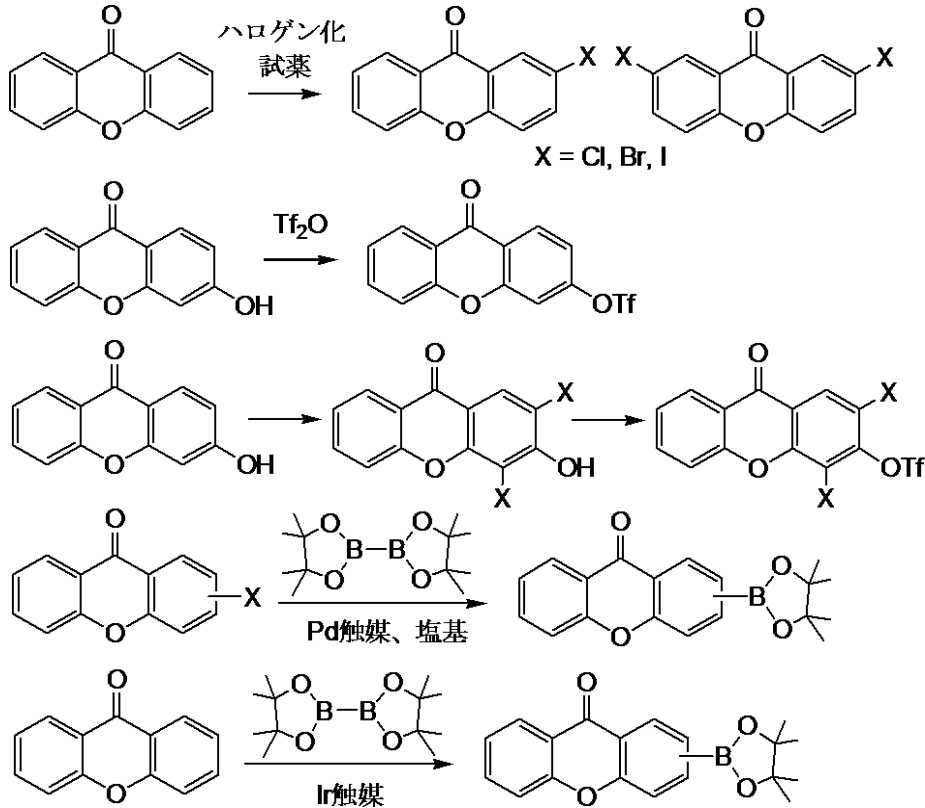
本発明に係る有機化合物の合成ルートの一例を説明する。以下に反応式を記す。

【0094】

まず、キサントン及びその誘導体は広く市販されているから、それらを原料にしてハロゲン体やトリフラート体、ボロン酸エステル体を合成することが出来る。

【0095】

【化12】



10

20

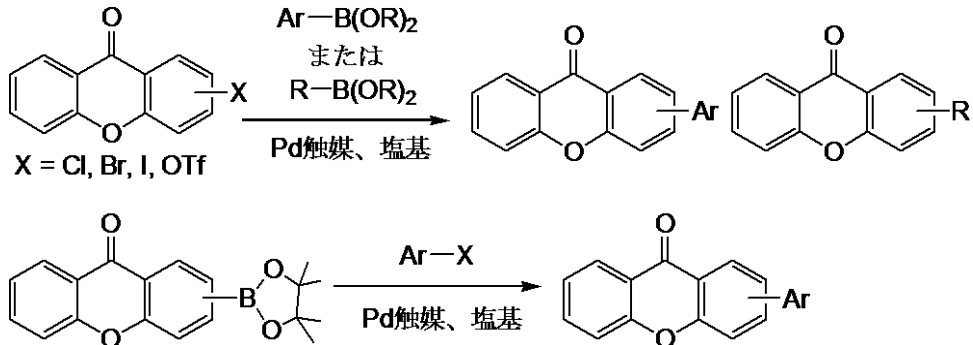
30

【0096】

次に、上記ハロゲン体、トリフラート体、ボロン酸エステル体を鈴木カップリング反応に用いることで、キサントン骨格にアルキル基及び芳香環基を導入することができる。

【0097】

【化13】



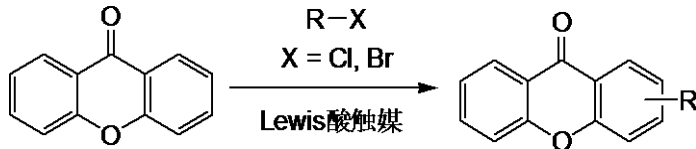
40

【0098】

キサントン骨格にアルキル基を導入する場合、Friedel-Crafts反応を用いても良い。

【0099】

【化14】

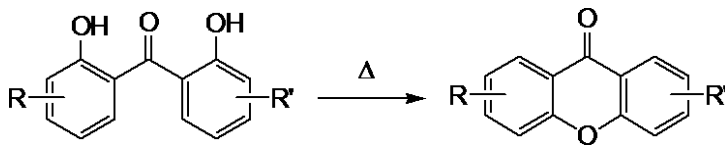


【0100】

一方、既に反応性官能基や芳香環基を有したジヒドロキシベンゾフェノン誘導体を用いて脱水縮合反応を行い、後からキサントン骨格を構築する方法もある。

【0101】

【化15】

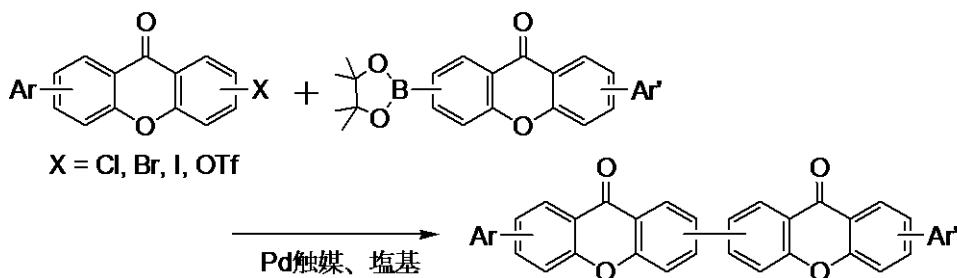
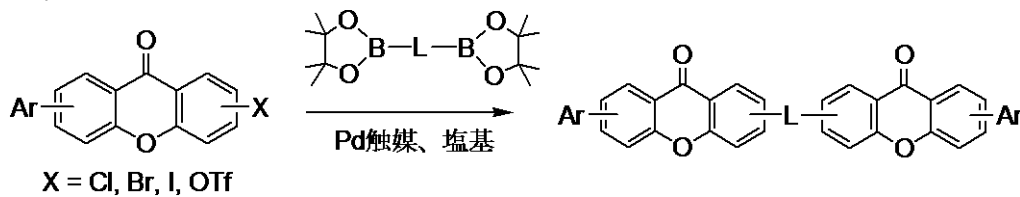


【0102】

上記基本反応を様々な組み合わせることにより、一般式[1]においてR₁乃至R₈の任意の位置に所望の置換基を導入したキサントン化合物を合成することができる。

【0103】

【化16】



【0104】

(本実施形態に係る有機発光素子の性質について)

本実施形態に係る有機発光素子は、一对の電極の一例である陽極と陰極とこの陽極および陰極の間に配置される有機化合物層を有する有機発光素子である。この有機化合物層のうち燐光発光材料を有するのが発光層である。

【0105】

本実施形態に係る有機発光素子は、有機化合物層に一般式[1]で示されるキサントン化合物を有する。

【0106】

本実施形態に係る有機発光素子が有する有機化合物層は単層であっても、複数層であってもよい。

【0107】

単層とは、有機化合物層が発光層のみの場合を指す。

【0108】

複数層とは、ホール注入層、ホール輸送層、発光層、ホールブロック層、電子輸送層、電子注入層、エキシトンブロック層等から適宜選択される層である。もちろん、上記群の中から複数を選択し、かつそれらを組み合わせて用いることができる。

【0109】

10

20

30

40

50

本実施形態に係る有機発光素子の構成はこれらに限定されるものではない。例えば、電極と有機化合物層界面に絶縁性層を設ける、接着層あるいは干渉層を設ける、電子輸送層もしくはホール輸送層がイオン化ポテンシャルの異なる二層から構成されるなど多様な層構成をとることができる。

【0110】

その場合の素子形態は、基板側の電極から光を取り出すいわゆるトップエミッション方式でも、基板と逆側から光を取り出すいわゆるボトムエミッション方式でも良く、両面取り出しの構成でも使用することができる。

【0111】

本実施形態に係る有機発光素子は、電子輸送層の材料または発光層のホスト材料として一般式[1]で示されるキサントン化合物を有することが好ましい。

10

【0112】

電子輸送層に用いられる場合は、単独で用いられても、他の化合物と合わせて用いられてもよい。

【0113】

発光層のホスト材料の濃度は、発光層の全体量に対して、50wt%以上99.9wt%以下であり、好ましくは80wt%以上99.9wt%以下である。濃度消光を防ぐためにゲスト材料の濃度は0.01wt%以上10wt%以下であることが望ましい。

【0114】

またゲスト材料はホスト材料からなる層全体に均一に含まれてもよいし、濃度勾配を有して含まれてもよいし、特定の領域に部分的に含ませてゲスト材料を含まないホスト材料層の領域を設けてもよい。

20

【0115】

本実施形態に係る有機発光素子は、一般式[1]で示されるキサントン化合物を発光層のアシスト材料として有してもよい。その際の発光層のホスト材料はホール輸送性が高い化合物であることが好ましい。

【0116】

なぜならば、本発明に係るキサントン化合物は電子輸送性が高い化合物だからである。

【0117】

ホール輸送性が高い化合物と電子輸送性が高い化合物を共に用いることで、発光層はバイポーラ性を有する。

30

【0118】

二つの化合物の輸送性を合わせることで発光層内のキャリアバランスを整える効果が期待できる。

【0119】

なおホール輸送性または電子輸送性が高いとは、移動度が $10^{-4} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上のことを指す。これら値はTime Of Flight (TOF)法で測定することができる。

【0120】

このとき燐光発光材料の発光色は特に限定されないが、その最大発光ピーク波長が440nm以上530nm以下の範囲にある青色から緑色発光材料であることが好ましい。

40

【0121】

燐光発光素子においては、ホスト材料の T_1 から非放射失活による発光効率の低下を防ぐために、ホスト材料の T_1 エネルギーはゲスト材料である燐光発光材料の T_1 エネルギーよりも高いことが好ましい。

【0122】

本発明に係るキサントン化合物はその中心となるキサントン骨格の T_1 エネルギーが410nmであるので、青色燐光発光材料の T_1 エネルギーよりも高い。

【0123】

従って、これを青色から緑色の燐光発光素子の発光層もしくはその周辺層に用いると発

50

光効率の高い燐光発光素子を得ることができる。

【 0 1 2 4 】

本発明に係るキサントン化合物が燐光発光層の電子輸送材料、アシスト材料、もしくはホスト材料として用いられる場合、ゲスト材料として用いられる燐光発光材料はイリジウム錯体、白金錯体、レニウム錯体、銅錯体、ユーロピウム錯体、ルテニウム錯体等の金属錯体である。なかでも燐光発光性の強いイリジウム錯体であるが好ましい。また、励起子やキャリアの伝達を補助することを目的として、発光層が複数の燐光発光材料を有していてもよい。

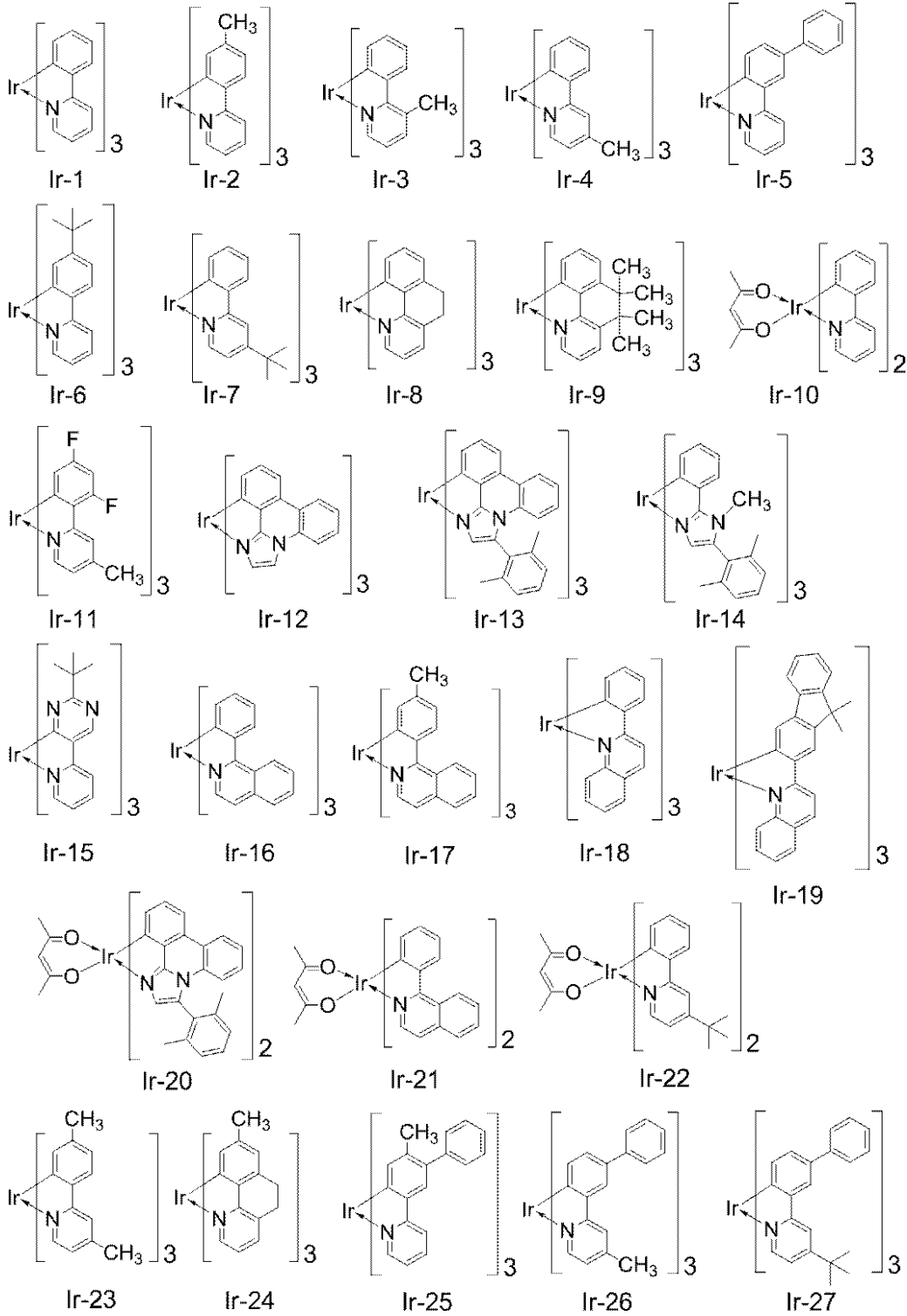
【 0 1 2 5 】

以下に本発明の燐光発光材料として用いられるイリジウム錯体の具体例とホスト材料の具体例を示すが、本発明はこれらに限定されるものではない。

10

【 0 1 2 6 】

【化 1 7】



10

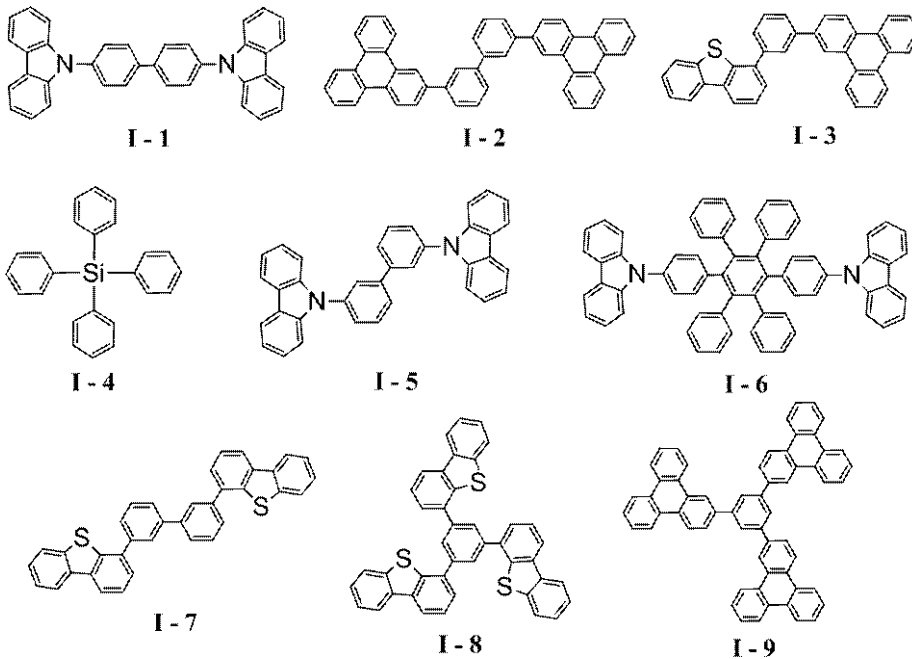
20

30

40

【 0 1 2 7】

【化18】



10

【0128】

ここで、本発明の化合物以外にも、必要に応じて従来公知の低分子系及び高分子系の化合物を使用することができる。より具体的にはホール注入性化合物あるいは輸送性化合物あるいはホスト材料あるいは発光性化合物あるいは電子注入性化合物あるいは電子輸送性化合物等を一緒に使用することができる。

20

以下にこれらの化合物例を挙げる。

【0129】

ホール注入材料およびホール輸送材料としては、陽極からのホールの注入が容易で、注入されたホールを発光層へと輸送することができるように、ホール移動度が高い材料が好ましい。ホール注入輸送性能を有する低分子及び高分子系材料としては、トリアリールアミン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、スチルベン誘導体、フタロシアニン誘導体、ポルフィリン誘導体、ポリ(ビニルカルバゾール)、ポリ(チオフェン)、その他導電性高分子が挙げられる。

30

【0130】

主に発光機能に関わる発光材料としては、前述の燐光発光ゲスト材料、もしくはその誘導体以外に、縮環化合物(例えばフルオレン誘導体、ナフタレン誘導体、ピレン誘導体、ペリレン誘導体、テトラセン誘導体、アントラセン誘導体、ルブレン等)、キナクリドン誘導体、クマリン誘導体、スチルベン誘導体、トリス(8-キノリノラート)アルミニウム等の有機アルミニウム錯体、有機ベリリウム錯体、及びポリ(フェニレンビニレン)誘導体、ポリ(フルオレン)誘導体、ポリ(フェニレン)誘導体等の高分子誘導体が挙げられる。

【0131】

電子注入材料および電子輸送材料としては、陰極からの電子の注入が容易で注入された電子を発光層へと輸送することができるものから任意に選ぶことができ、ホール注入輸送性材料のホール移動度とのバランス等を考慮して選択される。電子注入輸送性能を有する材料としては、オキサジアゾール誘導体、オキサゾール誘導体、ピラジン誘導体、トリアゾール誘導体、トリアジン誘導体、キノリン誘導体、キノキサリン誘導体、フェナントロリン誘導体、有機アルミニウム錯体等が挙げられる。

40

【0132】

陽極材料としては仕事関数ができるべく大きなものがよい。例えば金、白金、銀、銅、ニッケル、パラジウム、コバルト、セレン、バナジウム、タングステン等の金属単体あるいはこれらを組み合わせた合金、酸化錫、酸化亜鉛、酸化インジウム、酸化錫インジウム(

50

ITO)、酸化亜鉛インジウム等の金属酸化物が使用できる。またポリアニリン、ポリピロール、ポリチオフェン等の導電性ポリマーも使用できる。これらの電極物質は一種類を単独で使用してもよいし、二種類以上を併用して使用してもよい。また、陽極は一層で構成されていてもよく、複数の層で構成されていてもよい。

【0133】

一方、陰極材料としては仕事関数の小さなものがよい。例えばリチウム等のアルカリ金属、カルシウム等のアルカリ土類金属、アルミニウム、チタニウム、マンガン、銀、鉛、クロム等の金属単体が挙げられる。あるいはこれら金属単体を組み合わせた合金も使用することができる。例えばマグネシウム-銀、アルミニウム-リチウム、アルミニウム-マグネシウム等が使用できる。酸化錫インジウム(ITO)等の金属酸化物の利用も可能である。これらの電極物質は一種類を単独で使用してもよいし、二種類以上を併用して使用してもよい。また陰極は一層構成でもよく、多層構成でもよい。

10

【0134】

本発明に係る有機発光素子において、本発明に係るキサントン化合物を含有する層及びその他の有機化合物からなる層は、以下に示す方法により形成される。一般には真空蒸着法、イオン化蒸着法、スパッタリング、プラズマあるいは、適当な溶媒に溶解させて公知の塗布法(例えば、スピニング、ディッピング、キャスト法、LB法、インクジェット法等)により薄膜を形成する。ここで真空蒸着法や溶液塗布法等によって層を形成すると、結晶化等が起こりにくく経時安定性に優れる。また塗布法で成膜する場合は、適当なバインダー樹脂と組み合わせて膜を形成することもできる。

20

【0135】

上記バインダー樹脂としては、ポリビニルカルバゾール樹脂、ポリカーボネート樹脂、ポリエステル樹脂、ABS樹脂、アクリル樹脂、ポリイミド樹脂、フェノール樹脂、エポキシ樹脂、シリコン樹脂、尿素樹脂等が挙げられるが、これらに限定されるものではない。また、これらバインダー樹脂は、ホモポリマー又は共重合体として一種単独で使用してもよいし、二種以上を混合して使用してもよい。さらに必要に応じて、公知の可塑剤、酸化防止剤、紫外線吸収剤等の添加剤を併用してもよい。

【0136】

(有機発光素子に用途)

本発明に係る有機発光素子は、表示装置や照明装置に用いることができる。他にも電子写真方式の画像形成装置の露光光源や液晶表示装置のバックライトなどがある。

30

【0137】

表示装置は本実施形態に係る有機発光素子を表示部に有する。この表示部は複数の画素を有する。この画素は本実施形態に係る有機発光素子と発光輝度を制御するためのスイッチング素子の一例としてTFE素子とを有し、この有機発光素子の陽極または陰極とTFE素子のドレイン電極またはソース電極とが接続されている。表示装置はPC等の画像表示装置として用いることができる。

【0138】

表示装置は、エリアCCD、リニアCCD、メモリーカード等からの画像情報を入力する入力部を有し、入力された画像を表示部へ出力する画像入力装置でもよい。また、撮像装置やインクジェットプリンタが有する表示部として、外部から入力された画像情報を表示する画像出力機能と操作パネルとして画像への加工情報を入力する入力機能との両方を有してもよい。また表示装置はマルチファンクションプリンタの表示部に用いられてもよい。

40

【0139】

次に、本実施形態に係る有機発光素子を使用した表示装置について図1を用いて説明する。

【0140】

図1は、本実施形態に係る有機発光素子と、有機発光素子に接続するスイッチング素子の一例であるTFE素子とを示した表示装置の断面模式図である。本図では有機発光素子

50

とTFT素子との組が2組図示されている。構造の詳細を以下に説明する。

【0141】

この表示装置は、ガラス等の基板1とその上部にTFT素子又は有機化合物層を保護するための防湿膜2が設けられている。また符号3は金属のゲート電極3である。符号4はゲート絶縁膜4であり、5は半導体層である。

【0142】

TFT素子8は半導体層5とドレイン電極6とソース電極7とを有している。TFT素子8の上部には絶縁膜9が設けられている。コンタクトホール10を介して有機発光素子の陽極11とソース電極7とが接続されている。表示装置はこの構成に限られず、陽極または陰極のうちいずれか一方とTFT素子ソース電極またはドレイン電極のいずれか一方とが接続されていればよい。

10

【0143】

有機化合物層12は本図では多層の有機化合物層を1つの層の如く図示をしている。陰極13の上には有機発光素子の劣化を抑制するための第一の保護層14や第二の保護層15が設けられている。

【0144】

本実施形態に係る表示装置においてスイッチング素子に特に制限はなく、単結晶シリコン基板やMIM素子、a-Si型の素子等を用いてもよい。

【実施例】

【0145】

20

以下、実施例を説明する。なお本発明はこれらに限定されるものではない。

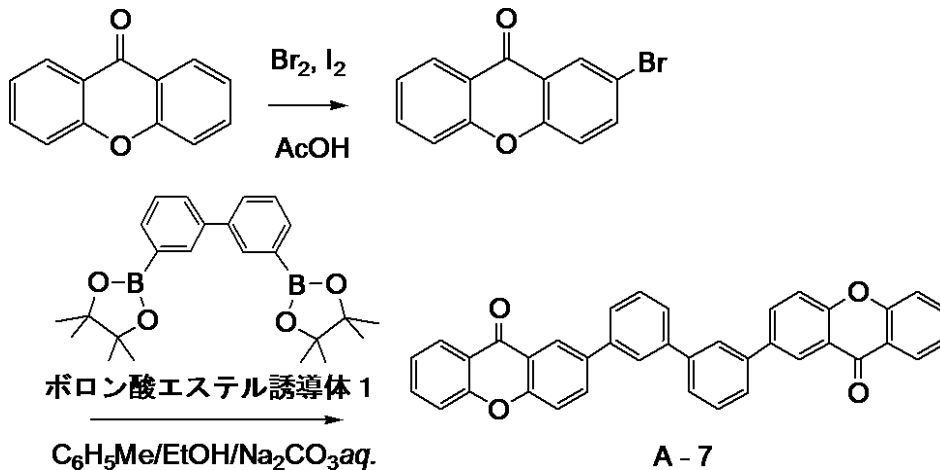
【0146】

(実施例1)

[例示化合物A-7の合成]

【0147】

【化19】



30

【0148】

以下に示す試薬、溶媒を100 mLナスフラスコに入れた。

40

キサントン：5.0 g (26 mmol)

臭素：1.6 g (10.2 mmol)

ヨウ素：50 mg (0.20 mmol)

酢酸：20 mL

この反応溶液を、窒素下、100 で攪拌しながら5時間加熱還流させた。反応終了後、反応溶液にクロロホルム、飽和亜硫酸ナトリウム水溶液を加えて臭素の色が消えるまで攪拌した。続いて有機層を分離して飽和炭酸ナトリウム水溶液で洗浄した後、硫酸マグネシウムで乾燥し、ろ過を行った。得られたろ液の溶媒を減圧留去して、析出した固体をシリカゲルカラム(トルエン：100%)によって精製し、2-プロモキサントンを2.9 g(収率41%)、2,7-ジプロモキサントンを2.2 g得た(収率25%)。

50

【0149】

続いて以下に示す試薬、溶媒を50 mLナスフラスコに入れた。

2-ブロモキサントン：1.5 g (5.4 mmol)

ボロン酸エステル誘導体1：1.0 g (2.5 mmol)

テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)：0.29 g (0.25 mmol)

トルエン：10 mL

エタノール：2 mL

2 M炭酸ナトリウム水溶液：6 mL

この反応溶液を、窒素下、撹拌しながら12時間加熱還流させた。反応終了後、析出した固体をろ過し、水、メタノール、アセトンで洗浄した。続いて、得られた固体をクロロベンゼンに加熱溶解し、溶液を熱ろ過することで不溶物を除いた。ろ液の溶媒を減圧留去して、析出した固体をクロロベンゼン/ヘプタン系で再結晶した。得られた結晶を150

10

で真空乾燥後、 10^{-1} Pa、370 の条件下で昇華精製を行い、高純度の例示化合物A-7を0.44 g得た(収率33%)。

【0150】

MALDI-TOF MS(マトリックス支援イオン化-飛行時間型質量分析)によりこの化合物の M^+ である542.2を確認した。

【0151】

さらに、 $^1\text{H-NMR}$ 測定によりこの化合物の構造を確認した。

20

$^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 500 MHz) (ppm) : 8.65 (2H, d), 8.39 (2H, dd), 8.08 (2H, dd), 7.96 (2H, bs), 7.78-7.74 (2H, m), 7.74-7.69 (4H, m), 7.65-7.58 (4H, m), 7.55 (2H, d), 7.44-7.39 (2H, m)

【0152】

また例示化合物A-7について、以下の方法で T_1 エネルギーの測定を行った。

例示化合物A-7の希薄トルエン溶液(1×10^{-5} M)について、Ar雰囲気下、77 K、励起波長350 nmにおいて燐光スペクトルの測定を行った。得られた燐光スペクトルの0-0バンド(第一発光ピーク)のピーク波長から T_1 エネルギーを求めると波長換算値で443 nmであった。

30

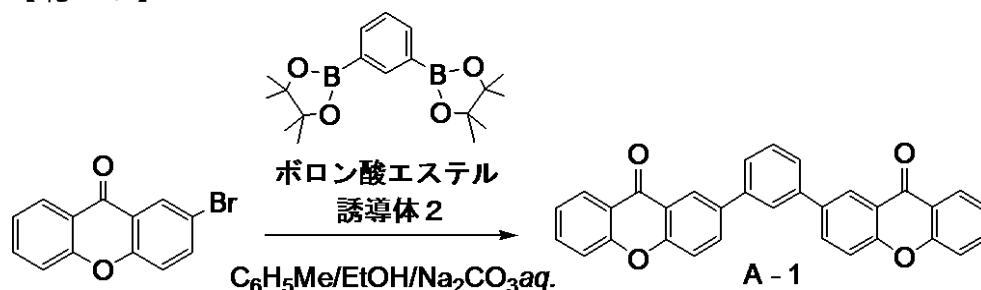
【0153】

(実施例2)

[例示化合物A-1の合成]

【0154】

【化20】



40

【0155】

実施例1で用いられるボロン酸エステル誘導体1をボロン酸エステル誘導体2に変更する以外は実施例1と同様の方法で例示化合物A-1を得た。

【0156】

MALDI-TOF MSによりこの化合物の M^+ である466.1を確認した。

【0157】

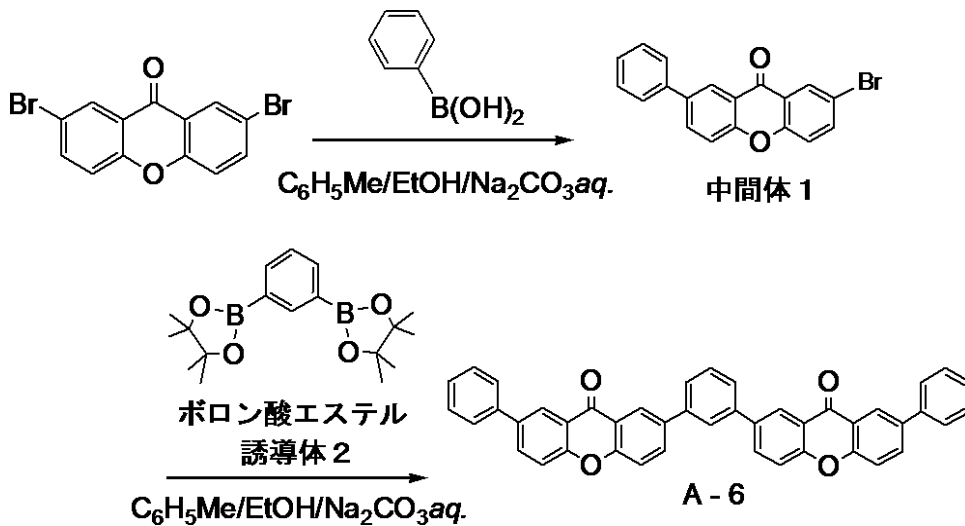
(実施例3)

50

[例示化合物 A - 6 の合成]

【 0 1 5 8 】

【 化 2 1 】



10

【 0 1 5 9 】

以下に示す試薬、溶媒を 100 mL ナスフラスコに入れた。

2, 7 - ジブロモキサントン : 3.1 g (8.6 mmol)

フェニルボロン酸 : 1.1 g (8.6 mmol)

テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) : 0.50 g (0.43 mmol)

トルエン : 20 mL

エタノール : 2 mL

2 M 炭酸ナトリウム水溶液 : 10 mL

この反応溶液を、窒素下、撹拌しながら 10 時間加熱還流させた。反応終了後、有機層を分離して硫酸マグネシウムで乾燥し、ろ過を行った。得られたる液の溶媒を減圧留去して、析出した固体をシリカゲルカラム(クロロホルム : ヘプタン = 1 : 1)によって精製し、中間体 1 を 1.24 g 得た(収率 41%)。

20

30

【 0 1 6 0 】

続いて実施例 2 で用いられる 2 - ブロモキサントンを中間体 1 に変更する以外は実施例 2 と同様の方法で例示化合物 A - 6 を得た。

【 0 1 6 1 】

MALDI - TOF MS によりこの化合物の M^+ である 618.2 を確認した。

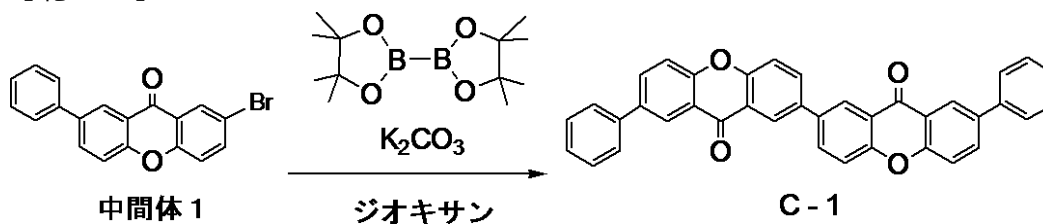
【 0 1 6 2 】

(実施例 4)

[例示化合物 C - 1 の合成]

【 0 1 6 3 】

【 化 2 2 】



40

【 0 1 6 4 】

以下に示す試薬、溶媒を 100 mL ナスフラスコに入れた。

中間体 1 : 1.0 g (2.9 mmol)

ビス(ピナコラト)ジボロン : 0.45 g (1.8 mmol)

50

炭酸カリウム：2.0 g (15 mmol)

ビス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(II)ジクロリド：0.20 g (0.29 mmol)

ジオキサソラン：15 mL

この反応溶液を、窒素下、撹拌しながら12時間加熱還流させた。反応終了後、析出した固体をろ過し、水、メタノール、アセトンで洗浄した。続いて、得られた固体をクロロベンゼンに加熱溶解し、溶液を熱ろ過することで不溶物を除いた。ろ液の溶媒を減圧留去して、析出した固体をクロロベンゼン/ヘプタン系で再結晶した。得られた結晶を150℃で真空乾燥後、 10^{-1} Pa、380℃の条件下で昇華精製を行い、高純度の例示化合物C-1を0.45 g得た(収率57%)。

10

【0165】

MALDI-TOF MSによりこの化合物の M^+ である542.2を確認した。

【0166】

さらに、 1H -NMR測定によりこの化合物の構造を確認した。

1H -NMR (CDCl₃, 500 MHz) (ppm): 8.69 (2H, d), 8.62 (2H, d), 8.14 (2H, dd), 8.02 (2H, dd), 7.74-7.70 (4H, m), 7.68 (2H, d), 7.64 (2H, d), 7.53-7.48 (4H, m), 7.43-7.39 (2H, m)

【0167】

また例示化合物C-1について、実施例1と同様の方法で T_1 エネルギーの測定を行ったところ、波長換算値で446 nmであった。

20

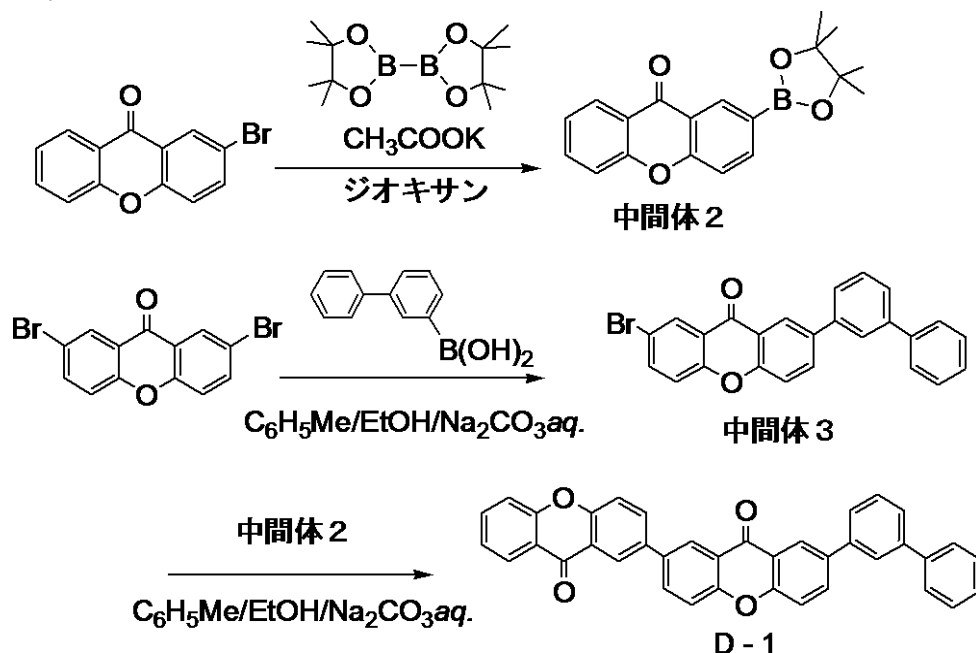
【0168】

(実施例5)

[例示化合物D-1の合成]

【0169】

【化23】



30

40

【0170】

以下に示す試薬、溶媒を200 mLナスフラスコに入れた。

2-プロモキサントン：5.0 g (18 mmol)

ビス(ピナコラト)ジボロン：5.5 g (22 mmol)

[1,1'-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)ジクロリド

ジクロロメタン付加物：0.74 g (0.91 mmol)

酢酸カリウム：3.2 g (33 mmol)

50

ジオキサソ : 40 mL

この反応溶液を、窒素下、攪拌しながら3時間加熱還流させた。反応終了後、析出した塩をろ過によって除いた。得られたる液の溶媒を減圧留去して、析出した固体をシリカゲルカラム(酢酸エチル:ヘプタン=1:2)によって精製し、中間体2を5.1g得た(収率87%)。

【0171】

続いて実施例3; 中間体1の合成で用いられるフェニルボロン酸を3-ビフェニルボロン酸に変更する以外は実施例3; 中間体1の合成と同様の方法で中間体3を得た。

【0172】

続いて実施例1; 例示化合物A-7の合成で用いられる2-ブロモキサントンを中間体3に変更し、またボロン酸エステル誘導体1を中間体2(中間体3に対して1.1当量)に変更する以外は実施例1; 例示化合物A-7の合成と同様の方法で例示化合物D-1を得た。

10

【0173】

MALDI-TOF MSによりこの化合物のM⁺である542.2を確認した。

【0174】

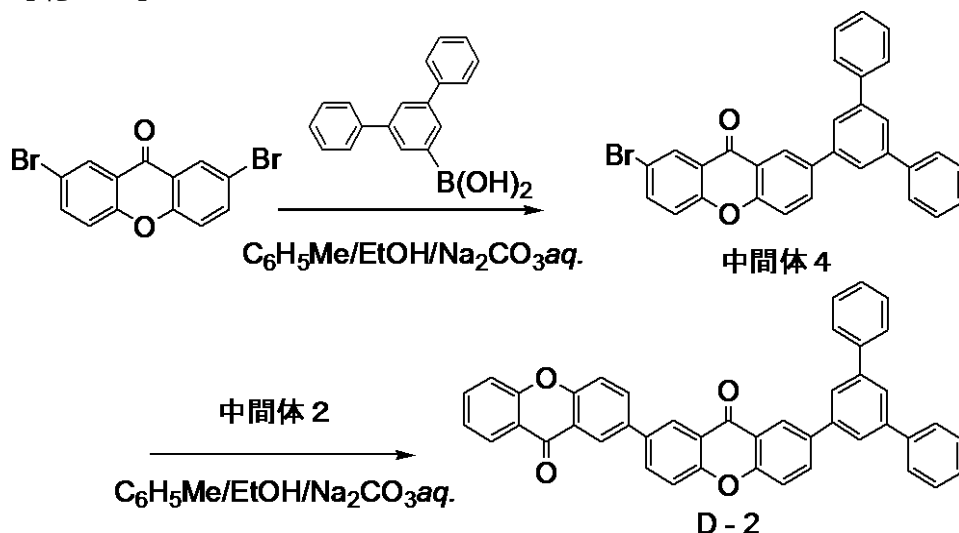
(実施例6)

[例示化合物D-2の合成]

【0175】

【化24】

20



30

【0176】

実施例3; 中間体1の合成で用いられるフェニルボロン酸を3,5-ジフェニルフェニルボロン酸に変更する以外は実施例3; 中間体1の合成と同様の方法で中間体4を得た。

【0177】

続いて実施例5; 例示化合物D-1の合成で用いられる中間体3を中間体4に変更する以外は実施例5; 例示化合物D-1の合成と同様の方法で例示化合物D-2を得た。

40

【0178】

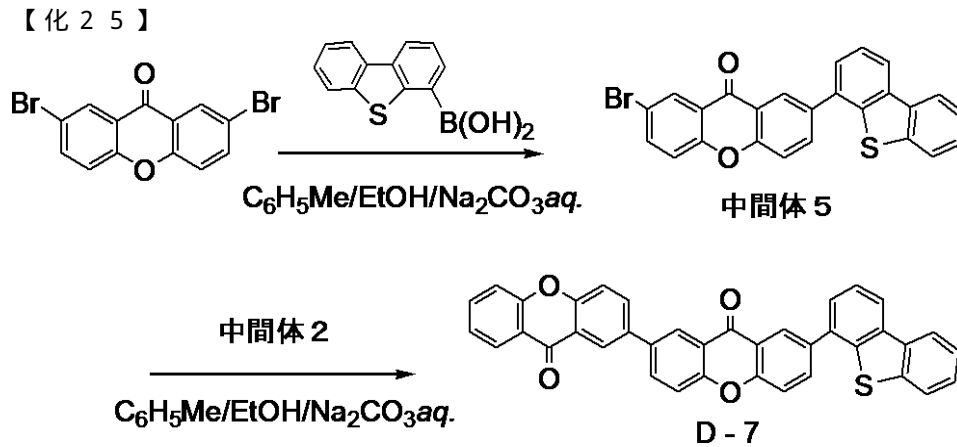
MALDI-TOF MSによりこの化合物のM⁺である618.2を確認した。

【0179】

(実施例7)

[例示化合物D-7の合成]

【0180】



10

【0181】

実施例3；中間体1の合成で用いられるフェニルボロン酸をジベンゾチオフェン-4-イルボロン酸に変更する以外は実施例3；中間体1の合成と同様の方法で中間体5を得た。

【0182】

続いて実施例5；例示化合物D-1の合成で用いられる中間体3を中間体5に変更する以外は実施例5；例示化合物D-1の合成と同様の方法で例示化合物D-7を得た。

【0183】

MALDI-TOF MSによりこの化合物の M^+ である572.1を確認した。

20

【0184】

(実施例8)

[有機発光素子の作製]

本実施例では、基板上に順次陽極/ホール輸送層/発光層/ホールブロッキング層/電子輸送層/陰極が設けられた構成の有機発光素子を以下に示す方法で作製した。

【0185】

ガラス基板上に、陽極としてITOをスパッタ法にて膜厚120nmで成膜したものを透明導電性支持基板(ITO基板)として使用した。このITO基板上に、以下に示す有機化合物層及び電極層を、 10^{-5} Paの真空チャンバー内で抵抗加熱による真空蒸着によって連続的に成膜した。このとき対向する電極面積は 3mm^2 になるように作製した。

30

ホール輸送層(40nm) HTL-1

発光層(30nm) ホスト材料1：I-1、ホスト材料2：なし、ゲスト材料：Ir-1(10wt%)

ホールブロッキング(HB)層(10nm) A-7

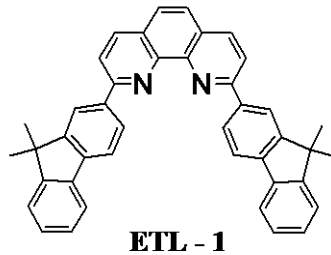
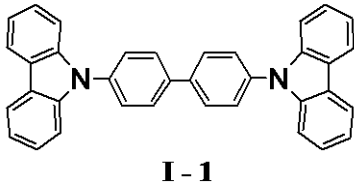
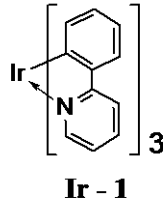
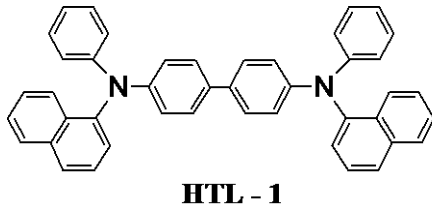
電子輸送層(30nm) ETL-1

金属電極層1(0.5nm) LiF

金属電極層2(100nm) Al

【0186】

【化26】



10

【0187】

次に、有機発光素子が水分の吸着によって素子劣化が起こらないように、乾燥空気雰囲気中で保護用ガラス板をかぶせアクリル樹脂系接着材で封止した。以上のようにして有機発光素子を得た。

【0188】

得られた有機発光素子について、電流電圧特性をケースレー社製・電流計2700で測定し、発光輝度は、トプコン社製BM7 fastで測定した。ITO電極を正極、Al電極を負極にして、5.0Vの印加電圧をかけたところ、発光効率が56cd/Aで、輝度1920cd/m²の緑色発光が観測された。またこの素子においてCIE色度座標は、(x, y) = (0.34, 0.62)であった。

20

【0189】

(実施例9-19)

実施例8において、ホールブロッキング材料(HB材料)、発光層のホスト材料1、ホスト材料2(15wt%)、ゲスト材料(10wt%)を代えた他は、実施例8と同様の方法で素子を作製した。また得られた素子について実施例8と同様に評価を行った。2000cd/m²時の発光効率、印加電圧、発光色を表3に示す。

30

【0190】

【表3】

表3

実施例番号	HB材料	ホスト材料1	ホスト材料2	ゲスト材料	発光効率(c d / A)	電圧(V)	発光色
9	A-7	I-1	A-7	Ir-1	61	5.0	緑
10	A-7	I-5	なし	Ir-13	10	6.6	青
11	A-6	I-1	なし	Ir-1	53	5.4	緑
12	A-6	I-2	A-6	Ir-1	58	5.2	緑
13	C-1	I-2	なし	Ir-1	56	5.2	緑
14	C-1	I-1	D-1	Ir-3	63	4.9	緑
15	D-1	I-1	なし	Ir-1	52	5.5	緑
16	D-1	I-3	D-1	Ir-4	56	5.6	緑
17	D-2	I-4	なし	Ir-15	12	6.5	青緑
18	D-2	I-5	D-7	Ir-15	16	6.4	青緑
19	A-1	I-6	A-1	Ir-13	11	6.8	青

40

【0191】

この様に、本発明に係るキサントン化合物は燐光発光素子において、電子輸送材料もしくは発光層材料として用いることで良好な発光効率を得られることが分かった。

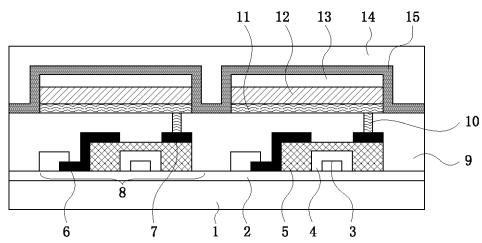
【符号の説明】

【0192】

50

- 8 TFT素子
- 1 1 陽極
- 1 2 有機化合物層
- 1 3 陰極

【図1】



フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I
C 0 7 D 409/14 (2006.01) C 0 9 K 11/06 6 6 0
C 0 7 F 15/00 E
C 0 7 D 409/14

- (72)発明者 山田 直樹
東京都大田区下丸子3丁目30番2号キヤノン株式会社内
(72)発明者 岸野 賢悟
東京都大田区下丸子3丁目30番2号キヤノン株式会社内
(72)発明者 怒 健一
東京都大田区下丸子3丁目30番2号キヤノン株式会社内
(72)発明者 齊藤 章人
東京都大田区下丸子3丁目30番2号キヤノン株式会社内

審査官 伊藤 幸司

- (56)参考文献 国際公開第2006/114966(WO, A1)
Organic Letters, 2001年, 3(15), pp. 2337~2340
Chemische Berichte, 1965年, 98(8), pp. 2539~2544

- (58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
C 0 7 D
C 0 9 K
H 0 1 L
H 0 5 B
CAPLUS/REGISTRY(STN)