

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局



(43) 国際公開日
2006年9月21日 (21.09.2006)

PCT

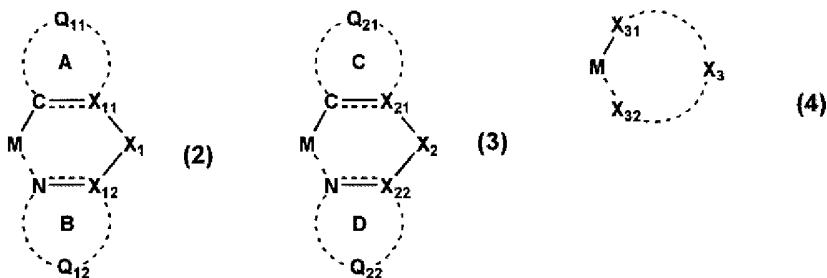
(10) 国際公開番号
WO 2006/098120 A1

- (51) 国際特許分類:
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C07F 15/00 (2006.01)
 - (21) 国際出願番号: PCT/JP2006/303110
 - (22) 国際出願日: 2006年2月22日 (22.02.2006)
 - (25) 国際出願の言語: 日本語
 - (26) 国際公開の言語: 日本語
 - (30) 優先権データ:
特願2005-075061 2005年3月16日 (16.03.2005) JP
 - (71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): コニカ
ミノルタホールディングス株式会社 (Konica Minolta
Holdings, Inc.) [JP/JP]; 〒1000005 東京都千代田区丸
の内1丁目6番1号 Tokyo (JP).
 - (72) 発明者; および
 - (75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 西関 雅人
(NISHIZEKI, Masato) [JP/JP]; 〒1928505 東京都八
王子市石川町2970番地コニカミノルタテクノ
ロジーセンター株式会社内 Tokyo (JP). 押山 智寛
(OSHIYAMA, Tomohiro) [JP/JP]; 〒1928505 東京都八
 - 王子市石川町2970番地コニカミノルタテクノ
ロジーセンター株式会社内 Tokyo (JP).
 - (81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が
可能): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR,
BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM,
DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU,
ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LC, LK,
LR, LS, LT, LU, LV, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MW,
MX, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO,
RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, SY, TJ, TM, TN, TR,
TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.
 - (84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可
能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD,
SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY,
KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AT, BE, BG,
CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE,
IS, IT, LT, LU, LV, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR),
OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML,
MR, NE, SN, TD, TG).
- 添付公開書類:
— 国際調査報告書

[続葉有]

(54) Title: ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICE MATERIAL AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DE-
VICE

(54) 発明の名称: 有機エレクトロルミネッセンス素子材料、有機エレクトロルミネッセンス素子



(57) Abstract: Disclosed is an organic EL device material exhibiting high luminous efficiency while having long emission life. Also disclosed are an organic EL device, an illuminating device, and a display. Specifically disclosed is an organic EL device material characterized by being composed of an orthometal complex represented by the following general formula (1). $ML_mL'_n$ (1) (In the formula, M represents a group 8-10 metal element of the periodic table; L and L' respectively represent a bidentate ligand different from each other; m represents 1 or 2; and n represents 1 or 2. In this connection, $m + n$ is 2 or 3 and equal to the electric charge of M. The partial structure ML is represented by the general formula (2) below, and the partial structure ML' is represented by the general formula (3) or (4) below.)

(57) 要約: 本発明は、高い発光効率を示し、かつ、発光寿命の長い有機EL素子材料、有機EL素子、照明装置及び表示装置を提供する。本発明に係わる有機EL素子材料は、下記一般式(1)で表されるオルトメタル錯体であることを特徴とする。一般式(1) $ML_mL'_n$ (式中、Mは元素周期表における第8~10族の金属元素を表す。L、L'は互いに異なる二座配位子を表し、mは1または2であり、nは1または2である。ただし、 $m+n$ は2または3でありMの電荷と一致する。部分構造MLは下記一般式(2)で表され、部分構造ML'は下記一般式(3)または(4)で表される。)



WO 2006/098120 A1



2文字コード及び他の略語については、定期発行される各PCTガゼットの巻頭に掲載されている「コードと略語のガイダンスノート」を参照。

明 細 書

有機エレクトロルミネッセンス素子材料、有機エレクトロルミネッセンス素子 技術分野

[0001] 本発明は、有機エレクトロルミネッセンス素子材料、有機エレクトロルミネッセンス素子、表示装置及び照明装置に関する。

背景技術

[0002] 従来、発光型の電子ディスプレイデバイスとして、エレクトロルミネッセンスディスプレイ(以下、ELDという)がある。ELDの構成要素としては、無機エレクトロルミネッセンス素子や有機エレクトロルミネッセンス素子(以下、有機EL素子という)が挙げられる。無機エレクトロルミネッセンス素子は平面型光源として使用されてきたが、発光素子を駆動させるためには交流の高電圧が必要である。有機EL素子は、発光する化合物を含有する発光層を陰極と陽極で挟んだ構成を有し、発光層に電子及び正孔を注入して、再結合させることにより励起子(エキシトン)を生成させ、このエキシトンが失活する際の光の放出(蛍光・燐光)を利用して発光する素子であり、数V~数十V程度の電圧で発光が可能であり、さらに、自己発光型であるために視野角に富み、視認性が高く、薄膜型の完全固体素子であるために省スペース、携帯性等の観点から注目されている。

[0003] しかしながら、今後の実用化に向けた有機EL素子においては、さらに低消費電力で効率よく高輝度に発光する有機EL素子の開発が望まれている。

[0004] 特許第3093796号明細書では、有機エレクトロルミネッセンス素子材料(以下、有機EL素子材料という)として、スチルベン誘導体、ジスチルルアリーレン誘導体またはトリスチルルアリーレン誘導体に、微量の蛍光体をドーブし、発光輝度の向上、有機EL素子の長寿命化を達成している。

[0005] また、8-ヒドロキシキノリンアルミニウム錯体をホスト化合物として、これに微量の蛍光体をドーブした有機発光層を有する有機EL素子(例えば、特開昭63-264692号公報)、8-ヒドロキシキノリンアルミニウム錯体をホスト化合物として、これにキナクリドン系色素をドーブした有機発光層を有する有機EL素子(例えば、特開平3-255

190号公報)等が知られている。

[0006] 以上のように、励起一重項からの発光を用いる場合、一重項励起子と三重項励起子の生成比が1:3であるため発光性励起種の生成確率が25%であり、光の取り出し効率が約20%であるため、外部取り出し量子効率(η_{ext})の限界は5%とされていた。

[0007] ところが、プリンストン大より励起三重項からの燐光発光を用いる有機EL素子の報告(M. A. Baldo et al., nature, 395巻, 151-154ページ(1998年))がされて以来、室温で燐光を示す材料の研究が活発になってきている。

[0008] 例えばM. A. Baldo et al., nature, 403巻, 17号, 750-753ページ(2000年)、また米国特許第6,097,147号明細書等にも開示されている。

[0009] 励起三重項を使用すると、内部量子効率の上限が100%となるため、励起一重項の場合に比べて原理的に発光効率が4倍となり、冷陰極管とほぼ同等の性能が得られる可能性があることから照明用途としても注目されている。

[0010] 例えば、S. Lamansky et al., J. Am. Chem. Soc., 123巻, 4304ページ(2001年)等においては、多くの化合物がイリジウム錯体系等重金属錯体を中心に合成検討されている。

[0011] また、前述のM. A. Baldo et al., nature, 403巻, 17号, 750-753ページ(2000年)においては、ドーパントとして、トリス(2-フェニルピリジン)イリジウムを用いた検討がされている。

[0012] その他、M. E. Tompson等は、The 10th International Workshop on Inorganic and Organic Electroluminescence(EL'00、浜松)において、ドーパントとして $L_2Ir(acac)$ 例えば $(ppy)_2Ir(acac)$ を、また、Moon-Jae Youn. Og, Tetsuo Tsutsui等は、やはり、The 10th International Workshop on Inorganic and Organic Electroluminescence(EL'00、浜松)において、ドーパントとして、トリス(2-(p-トリル)ピリジン)イリジウム($Ir(ppy)_3$)、トリス(ベンゾ[h]キノリン)イリジウム($Ir(bzq)_3$)等を用いた検討を行っている(なおこれらの金属錯体は一般にオルトメタル化イリジウム錯体と呼ばれている)。

[0013] また、前記、S. Lamansky et al., J. Am. Chem. Soc., 123巻, 4304ペー

ジ(2001年)等においても、各種イリジウム錯体を用いて素子化する試みがされている。

- [0014] また、高い発光効率を得るために、The 10th International Workshop on Inorganic and Organic Electroluminescence(EL'00、浜松)では、Ikai等はホール輸送性の化合物を燐光性化合物のホストとして用いている。また、M. E. Thompson等は、各種電子輸送性材料を燐光性化合物のホストとして、これらに新規なイリジウム錯体をドーピングして用いている。
- [0015] 中心金属をイリジウムの代わりに白金としたオルトメタル化錯体も注目されている。この種の錯体に関しては、配位子に特徴を持たせた例が多数知られている(例えば、特許文献1～5及び非特許文献1参照。)
- [0016] 何れの場合も発光素子とした場合の発光輝度や発光効率は、その発光する光が燐光に由来することから、従来の有機EL素子に比べ大幅に改良されるものであるが、有機EL素子の発光寿命については従来の有機EL素子よりも低いという問題点があった。このように、りん光性の高効率の発光材料は、発光波長の短波化と有機EL素子の発光寿命の改善が難しく実用に耐えうる性能を十分に達成できていないのが現状である。
- [0017] 波長の短波化に関しては、これまでフェニルピリジンにフッ素原子、トリフルオロメチル基、シアノ基等の電子吸引基を置換基として導入すること、配位子としてピコリン酸やピラザボール系の配位子を導入することが知られている(例えば、特許文献6～10及び非特許文献1～4参照。)が、これらの配位子では発光材料の発光波長が短波化して青色を達成し、高効率の素子を達成できる一方、有機EL素子の発光寿命は大幅に劣化するため、その改善が求められていた。

特許文献1:特開2002-332291号公報

特許文献2:特開2002-332292号公報

特許文献3:特開2002-338588号公報

特許文献4:特開2002-226495号公報

特許文献5:特開2002-234894号公報

特許文献6:WO02/15645号明細書

特許文献7:特開2003-123982号公報

特許文献8:特開2002-117978号公報

特許文献9:特開2003-146996号公報

特許文献10:WO04/016711号明細書

非特許文献1:Inorganic Chemistry, 第41巻, 第12号, 3055~3066ページ(2002年)

非特許文献2:Applied Physics Letters, 第79巻, 2082ページ(2001年)

非特許文献3:Applied Physics Letters, 第83巻, 3818ページ(2003年)

非特許文献4:New Journal of Chemistry, 第26巻, 1171ページ(2002年)

発明の開示

発明が解決しようとする課題

- [0018] 本発明に係る課題に鑑みてなされたものであり、本発明の目的は、高い発光効率を示し、かつ、発光寿命の長い有機EL素子材料、有機EL素子、照明装置及び表示装置を提供することである。

課題を解決するための手段

- [0019] 本発明の上記課題は、以下の構成により達成される。
本発明及び本発明の好ましい態様について以下に示す。
- [0020] (1) 下記一般式(1)で表されるオルトメタル錯体であることを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子材料。
- [0021] [化1]

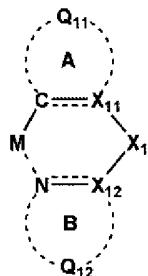
一般式(1)



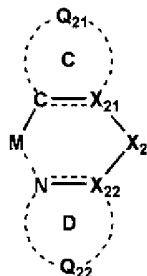
- [0022] (式中、Mは元素周期表における第8~10族の金属元素を表す。L、L' は互いに異なる二座配位子を表し、mは1または2であり、nは1または2である。ただし、m+nは2または3でありMの電荷と一致する。
- [0023] 二座配位子L、L' が金属Mに配位した部分構造MLは下記一般式(2)で表され、部分構造ML' は下記一般式(3)または(4)で表される。

[0024] [化2]

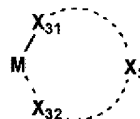
一般式(2)



一般式(3)



一般式(4)



[0025] X_{11} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{11} は炭素原子及び X_{11} と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Aを形成する原子群を表す。 X_{12} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{12} は窒素原子及び X_{12} と共に5～6員の芳香族複素環である環Bを形成する原子群を表す。 X_1 はO、S、 CH_2 、CHR、 CR_2 、NR、PR、 SiR_2 、C=O、C=NR、SOまたは SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。

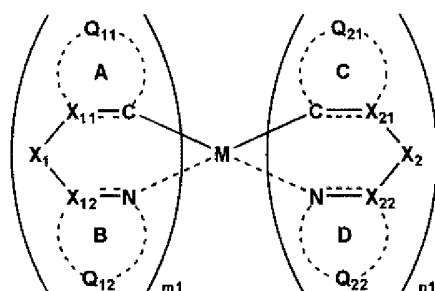
[0026] X_{21} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{21} は炭素原子及び X_{21} と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Cを形成する原子群を表す。 X_{22} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{22} は窒素原子及び X_{22} と共に5～6員の芳香族複素環である環Dを形成する原子群を表す。 X_2 はO、S、 CH_2 、CHR、 CR_2 、NR、PR、 SiR_2 、C=O、C=NR、SOまたは SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。

[0027] X_{31} 、 X_{32} は窒素原子またはリン原子を表し、 X_3 は X_{31} 、 X_{32} を介してMに配位している二座配位子を形成する原子群を表す。

(2) 下記一般式(5)で表されるオルトメタル錯体であることを特徴とする前記(1)に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[0028] [化3]

一般式(5)



[0029] (式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。m1は1または2であり、n1は1または2である。ただし、m1+n1は2または3でありMの電荷と一致する。X₁₁は炭素原子または窒素原子を表し、Q₁₁は炭素原子及びX₁₁と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Aを形成する原子群を表す。X₁₂は炭素原子または窒素原子を表し、Q₁₂は窒素原子及びX₁₂と共に5～6員の芳香族複素環である環Bを形成する原子群を表す。X₁はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SOまたはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。

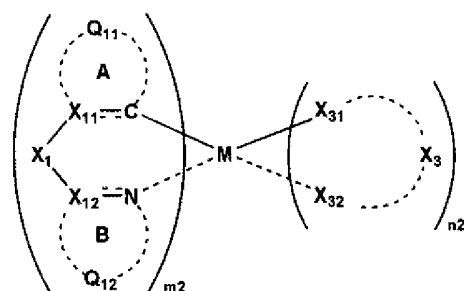
[0030] X₂₁は、炭素原子または窒素原子を表し、Q₂₁は炭素原子及びX₂₁と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Cを形成する原子群を表す。X₂₂は炭素原子または窒素原子を表し、Q₂₂は窒素原子及びX₂₂と共に5～6員の芳香族複素環である環Dを形成する原子群を表す。X₂はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SOまたはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。ただし、環Aと環C、環Bと環Dが同時に同じものになることはない。)

(3)前記一般式(5)において、芳香族複素環Bまたは芳香族複素環Dのうち少なくとも一方が6員環であり、他方が5員環であることを特徴とする前記(2)に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[0031] (4)下記一般式(6)で表されるオルトメタル錯体であることを特徴とする前記(1)に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[0032] [化4]

一般式(6)

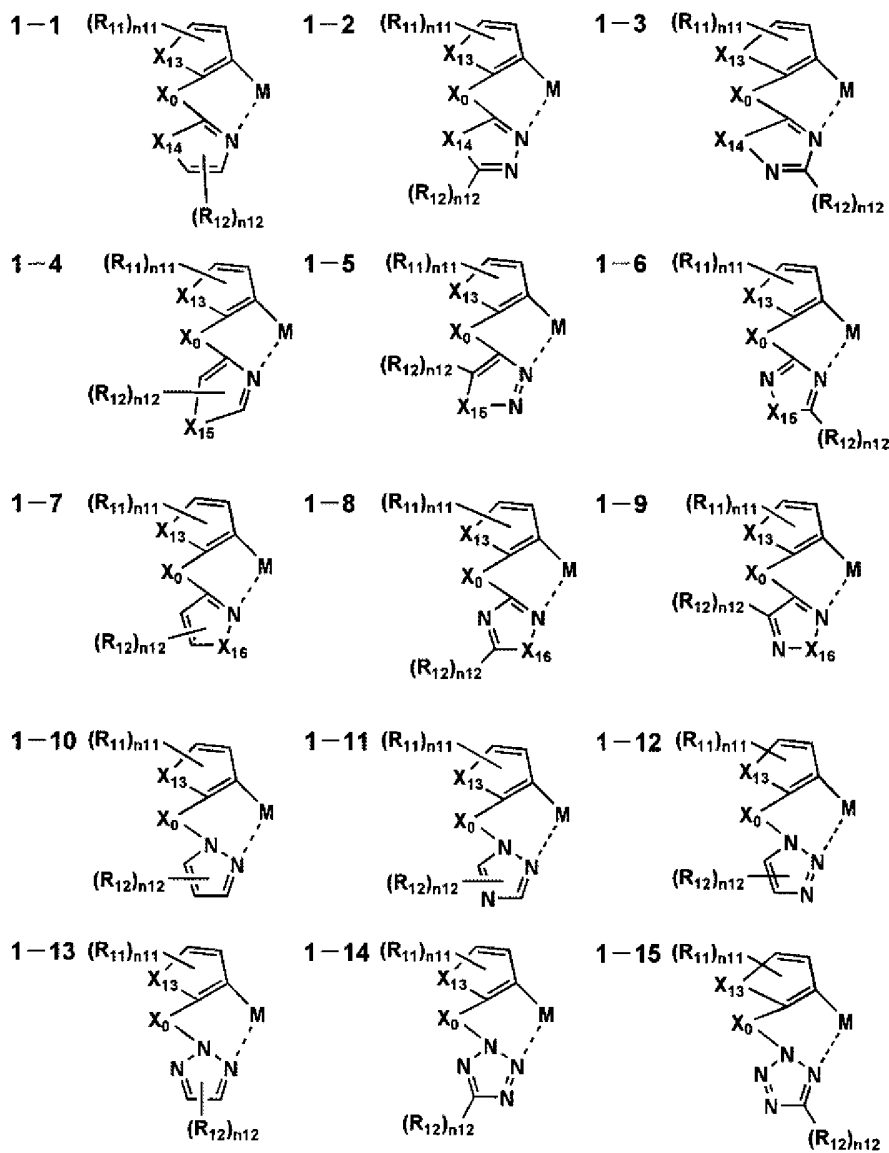


[0033] (式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。m2は1または2であり、n2は1または2である。ただし、m2+n2は2または3でありMの電荷と一致する。X₁₁は炭素原子または窒素原子を表し、Q₁₁は炭素原子及びX₁₁と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Aを形成する原子群を表す。X₁₂は炭素原子または窒素原子を表し、Q₁₂は窒素原子及びX₁₂と共に5～6員の芳香族複素環である環Bを形成する原子群を表す。X₁はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SOまたはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。X₃₁、X₃₂は窒素原子またはリン原子を表し、X₃はX₃₁、X₃₂を介してMに配位している二座配位子を形成する原子群を表す。)

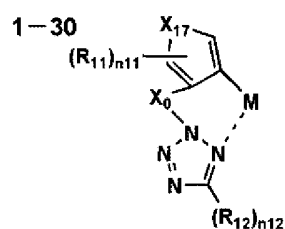
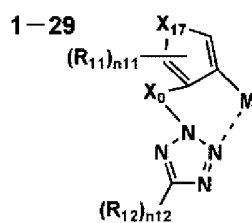
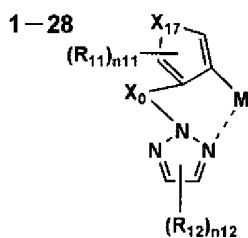
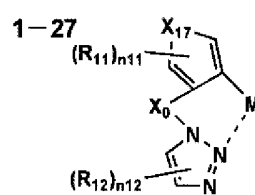
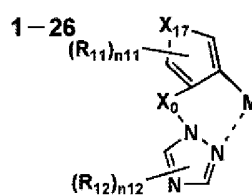
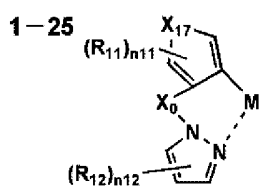
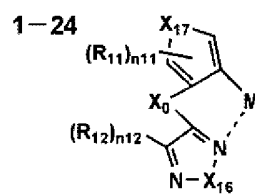
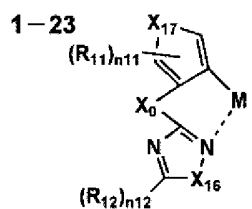
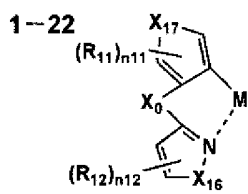
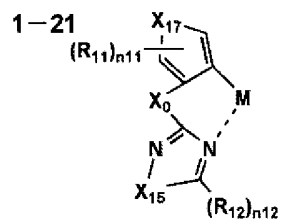
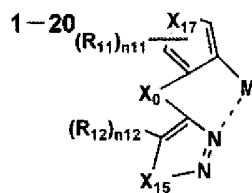
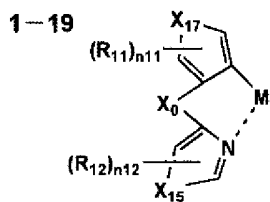
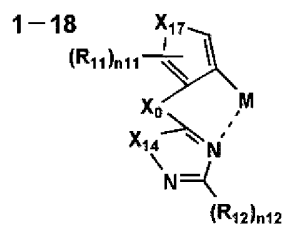
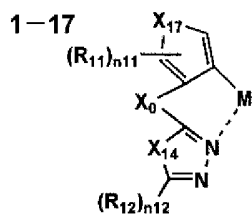
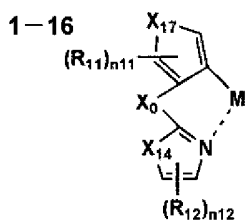
(5)前記一般式(6)において、芳香族複素環Bが6員環であることを特徴とする前記(4)に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[0034] (6)下記一般式(1-1)～(1-150)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする前記(1)～(4)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

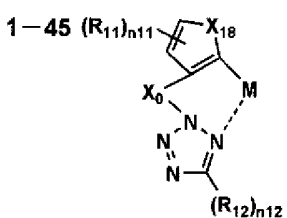
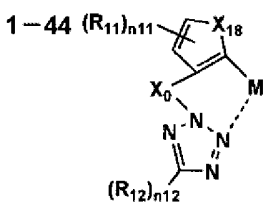
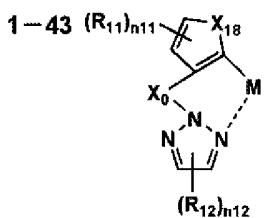
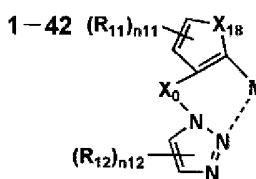
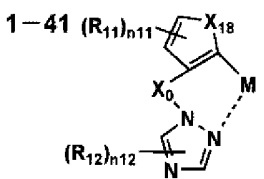
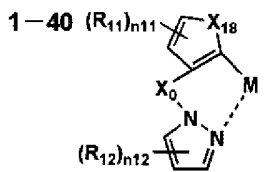
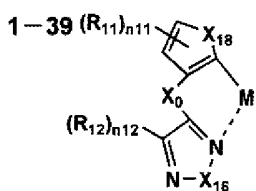
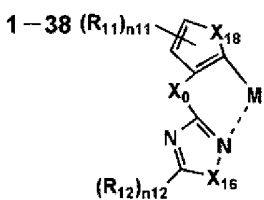
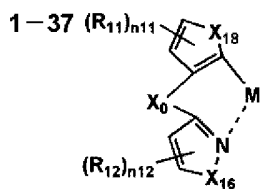
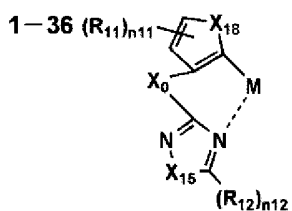
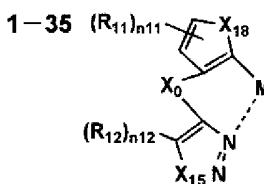
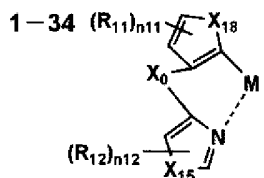
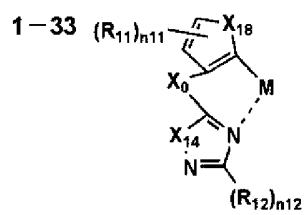
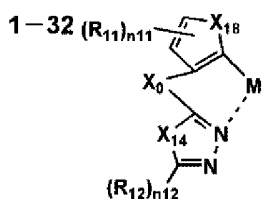
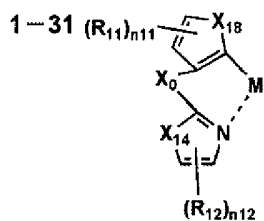
[0035] [化5]



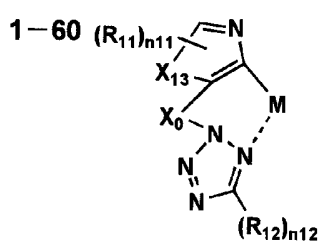
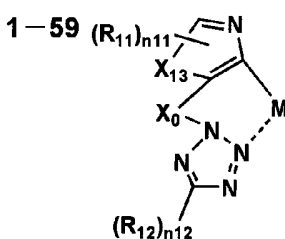
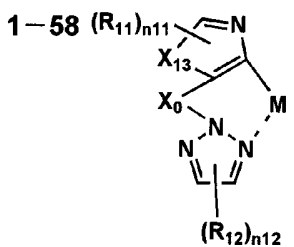
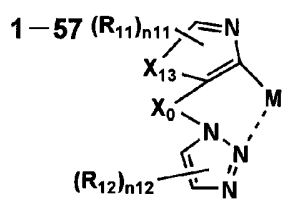
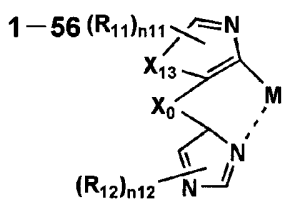
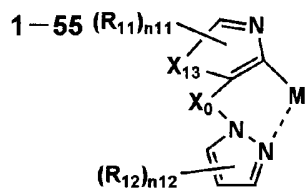
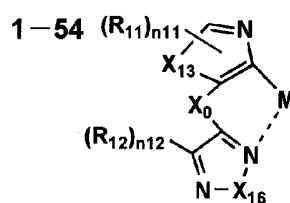
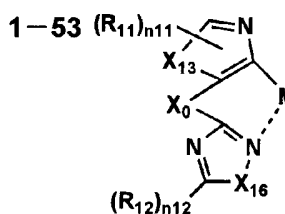
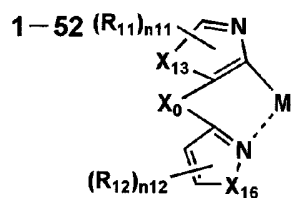
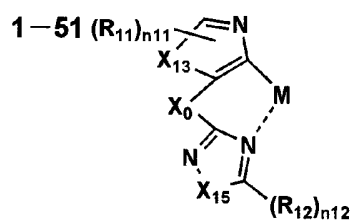
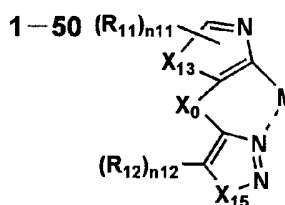
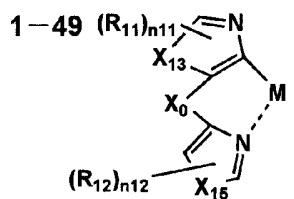
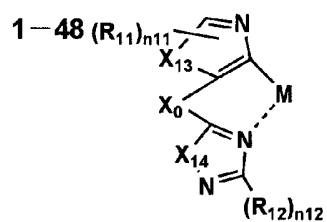
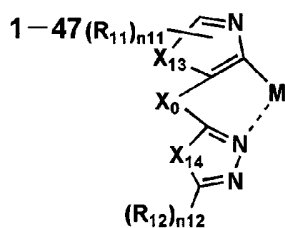
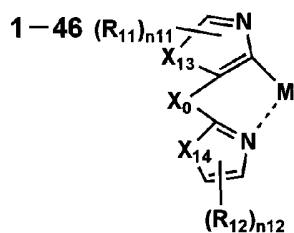
[0036] [化6]



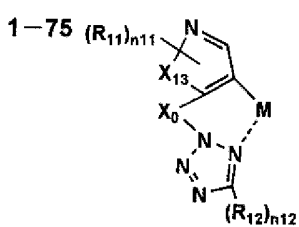
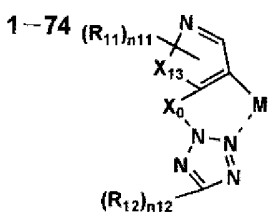
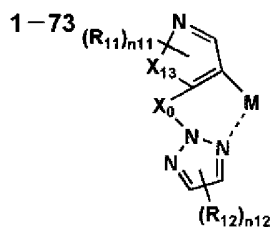
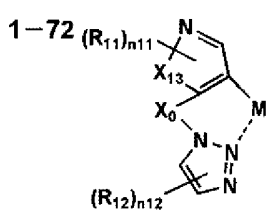
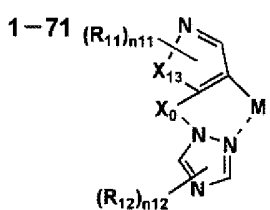
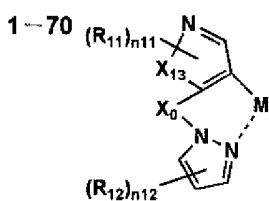
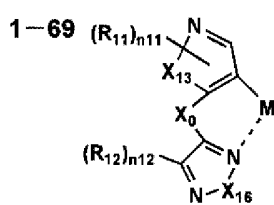
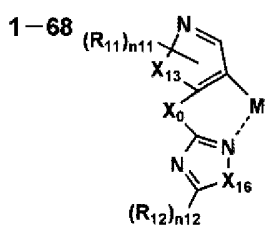
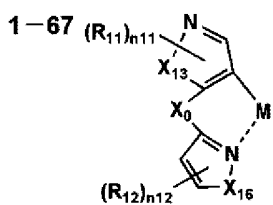
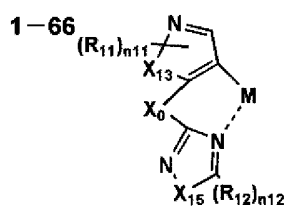
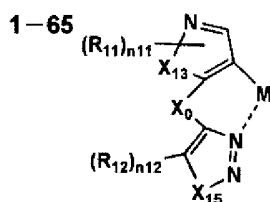
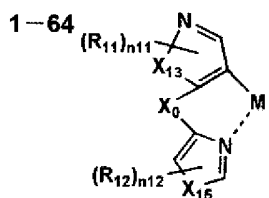
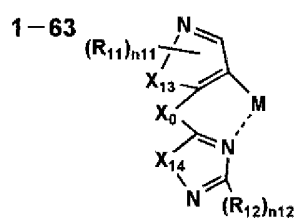
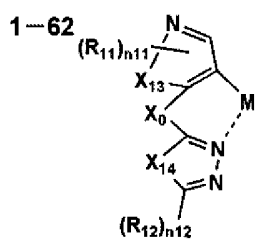
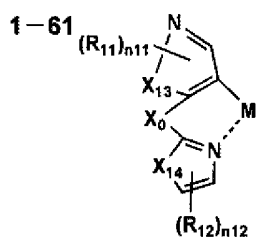
[0037] [化7]



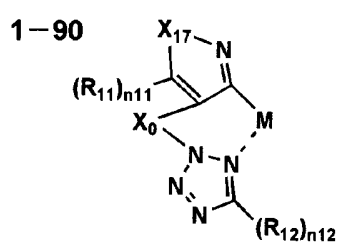
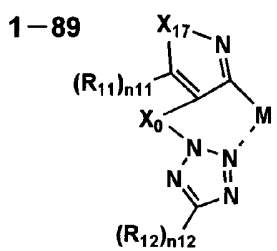
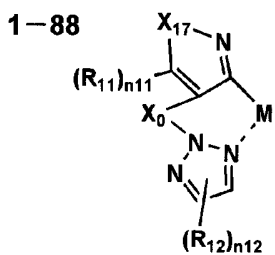
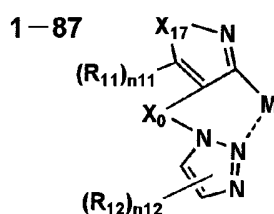
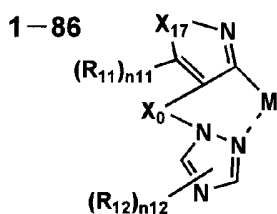
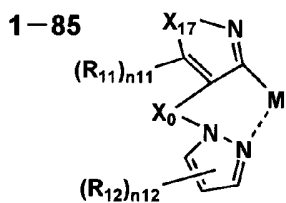
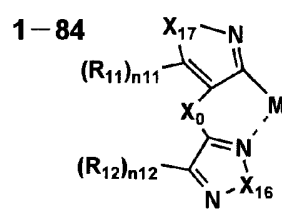
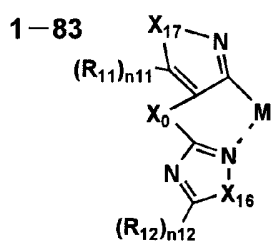
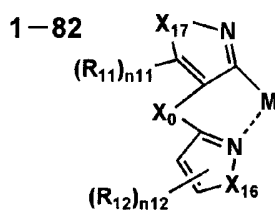
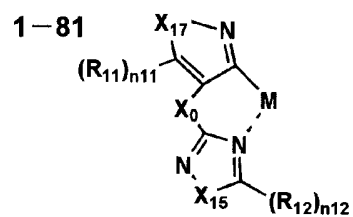
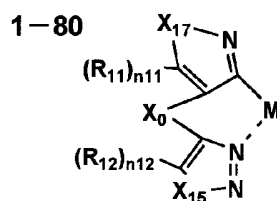
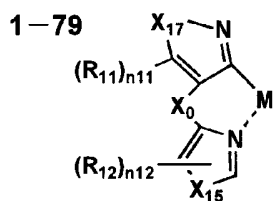
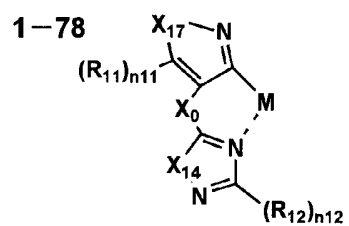
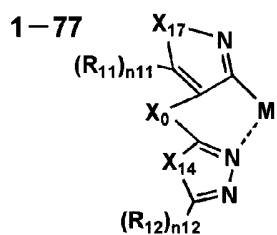
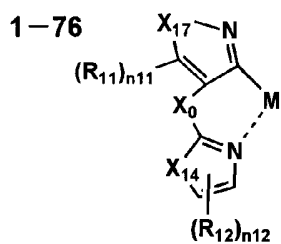
[0038] [化8]



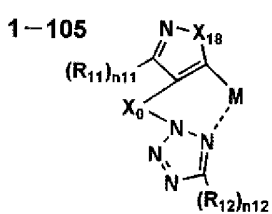
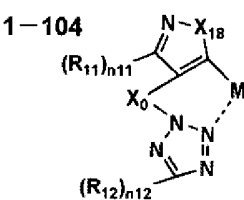
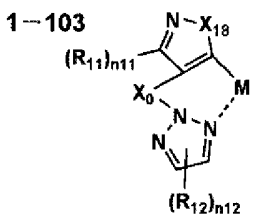
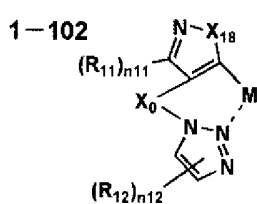
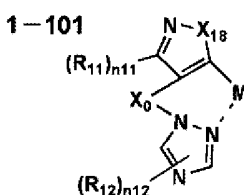
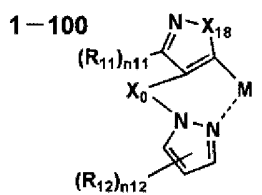
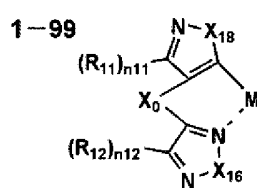
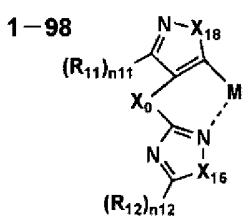
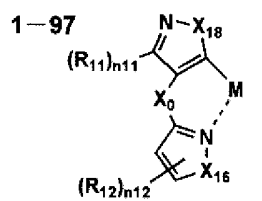
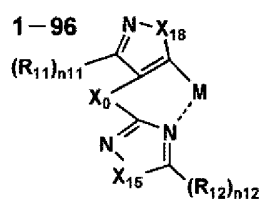
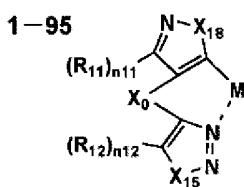
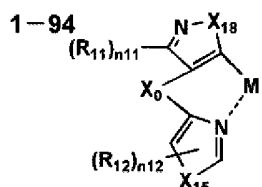
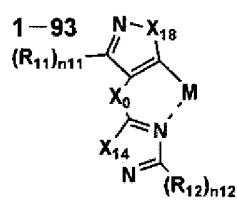
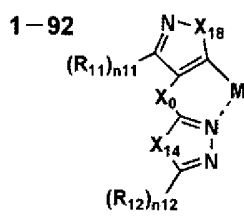
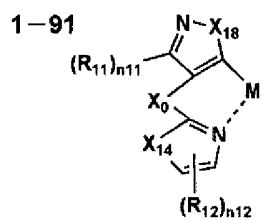
[0039] [化9]



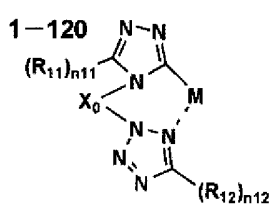
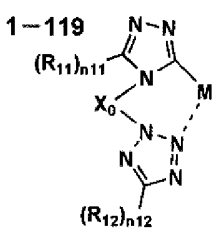
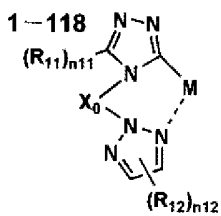
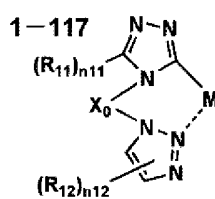
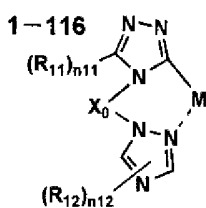
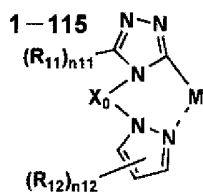
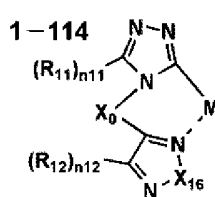
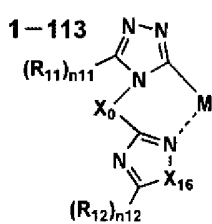
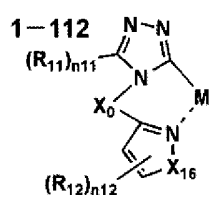
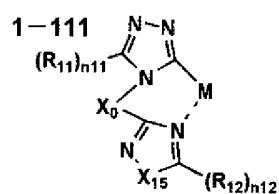
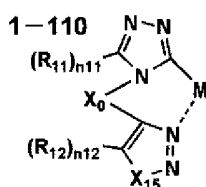
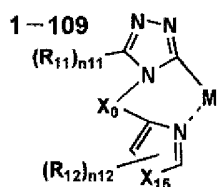
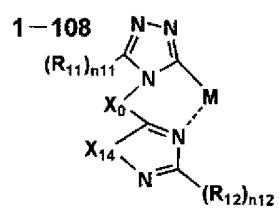
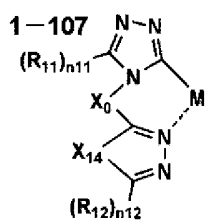
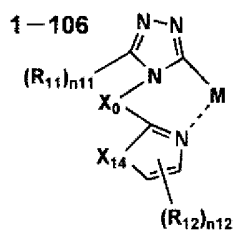
[0040] [化10]



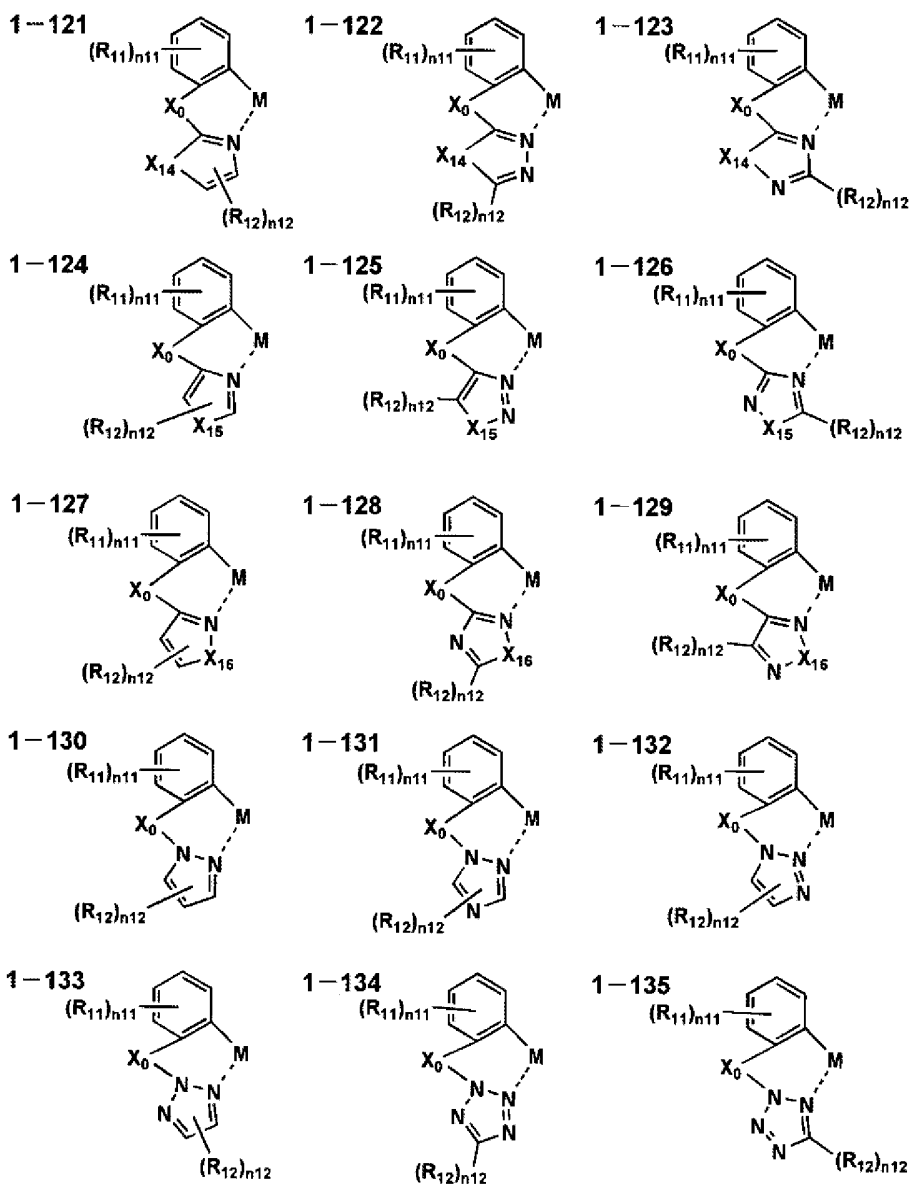
[0041] [化11]



[0042] [化12]



[0043] [化13]

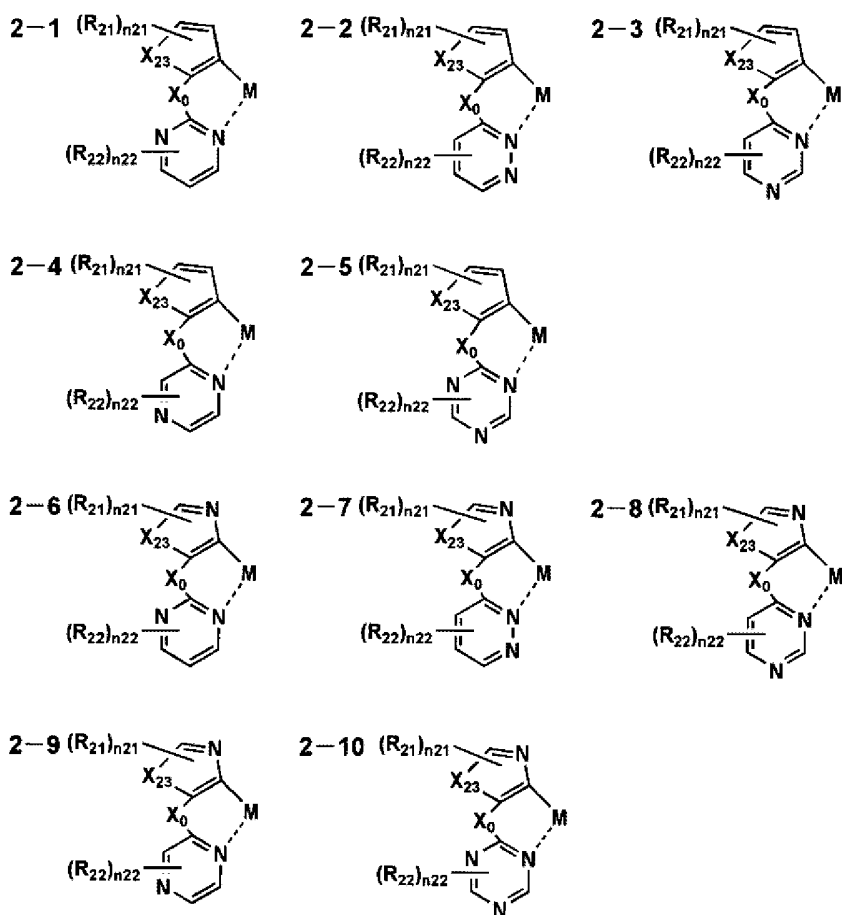


[0044] [化14]

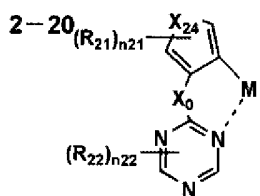
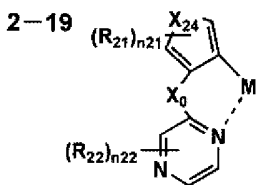
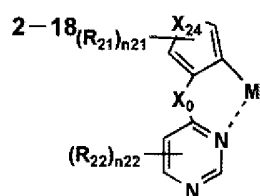
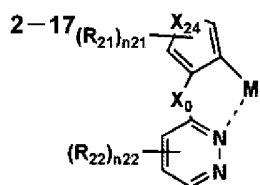
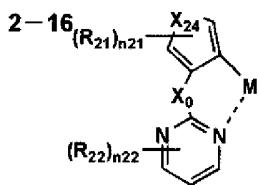
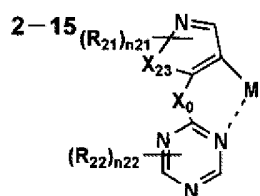
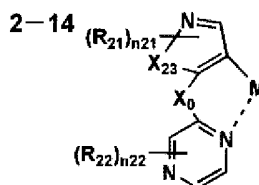
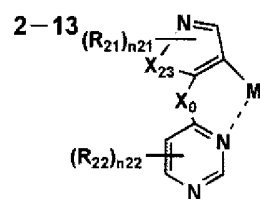
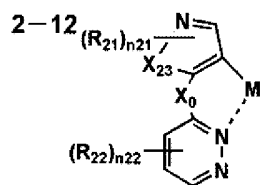
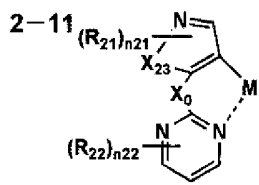
、 X_{19c} は、各々CHまたはNを表し、任意の1つまたは2つがNである。 X_0 はO、S、C、 H_2 、CHR、 CR_2 、NR、PR、 SiR_2 、C=O、C=NR、SOまたは SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。)

(7) 下記一般式(2-1)～(2-50)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする前記(1)～(5)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材料。

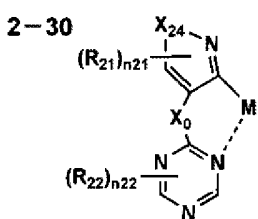
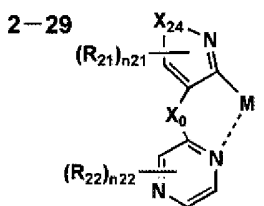
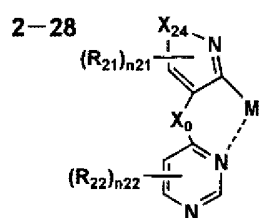
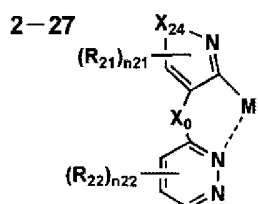
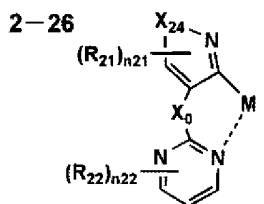
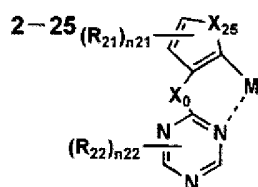
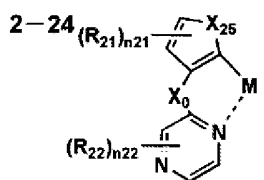
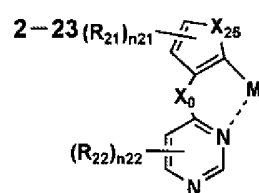
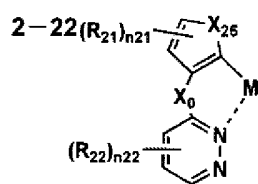
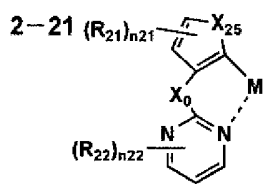
[0046] [化15]



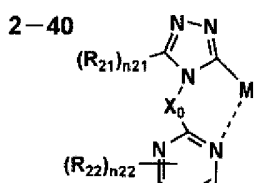
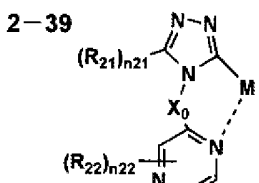
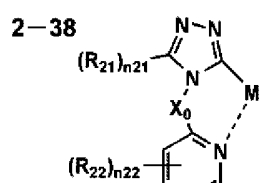
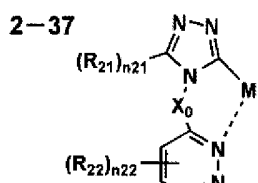
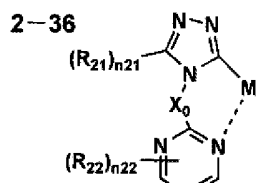
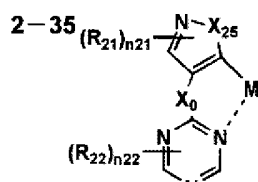
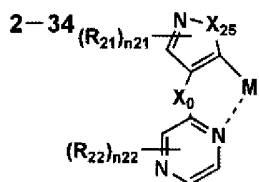
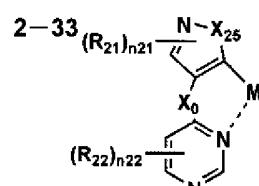
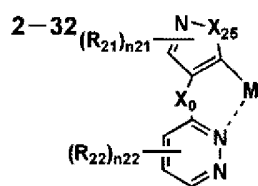
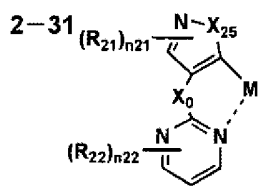
[0047] [化16]



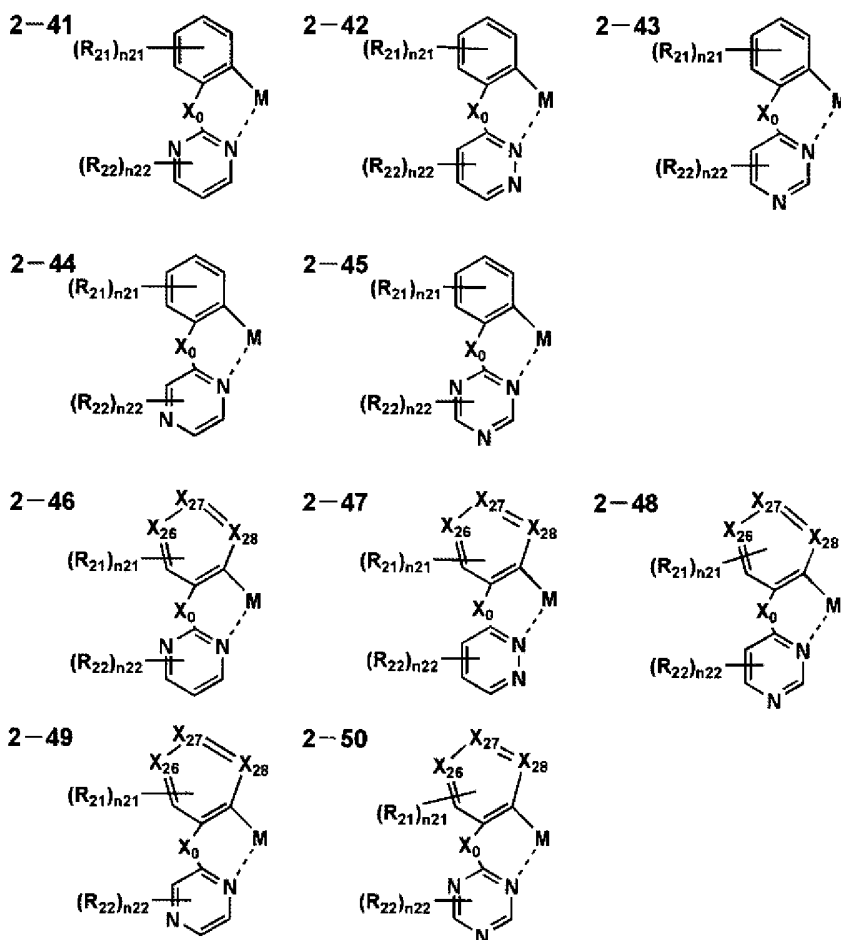
[0048] [化17]



[0049] [化18]



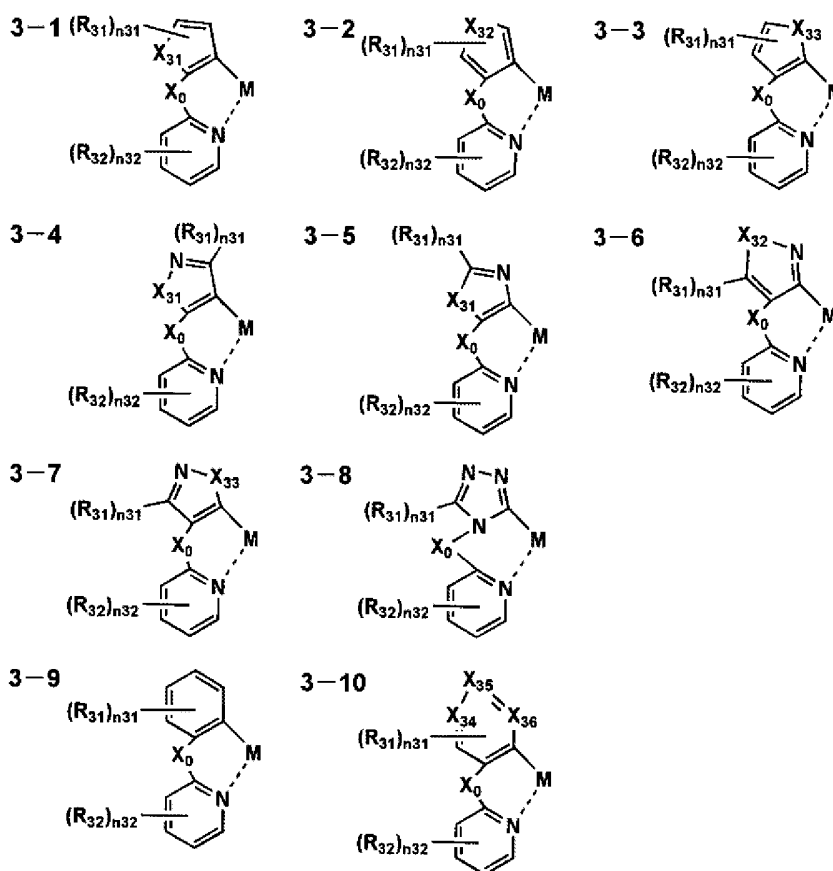
[0050] [化19]



[0051] (式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。R₂₁、R₂₂は各々置換基を表し、n₂₁、n₂₂は0～2から選ばれる整数を表す。X₂₃は、>N-R₂₃、-O-または-S-を表す。R₂₃は、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。X₂₄、X₂₅は、>N-R₂₄、-O-または-S-を表す。R₂₄は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。X₂₆、X₂₇、X₂₈は各々CHまたはNを表し、任意の1つまたは2つがNである。X₀はO、S、CH₂、CHR₂、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SOまたはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。)

(8) 下記一般式(3-1)～(3-10)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする前記(1)～(5)のいずれか1項の記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[0052] [化20]

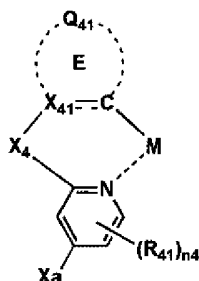


[0053] (式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。 R_{31} 、 R_{32} は各々置換基を表し、 n_{31} 、 n_{32} は0～2から選ばれる整数を表す。 X_{31} は、 $>N-R_{31}$ 、 $-O-$ または $-S-$ を表す。 R_{33} はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。 X_{32} 、 X_{33} は、 $>N-R_{32}$ 、 $-O-$ または $-S-$ を表す。 R_{34} は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。 X_{34} 、 X_{35} 、 X_{36} は各々CHまたはNを表し、任意の1つまたは2つがNである。 X_0 はO、S、 CH_2 、 CHR 、 CR_2 、NR、PR、 SiR_2 、 $C=O$ 、 $C=NR$ 、SOまたは SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。)

(9) 下記一般式(7)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする前記(1)～(5)、(8)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[0054] [化21]

一般式(7)

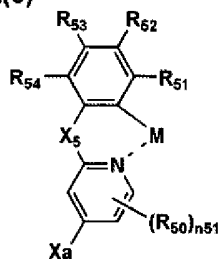


[0055] (式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。X₄₁は炭素原子または窒素原子を表し、Q₄₁は炭素原子及びX₄₁と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Eを形成する原子群を表す。R₄₁は置換基を表し、n₄₁は0～3から選ばれる整数を表す。Xaは-N(Ra)₂、-O-Raまたは-S-Raを表す。Raはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。Xaが-N(Ra)₂の場合、2つのRaは同じであっても異なってもよい。X₄はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SOまたはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。)

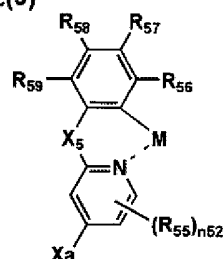
(10) 下記一般式(8)または(9)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする前記(9)に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[0056] [化22]

一般式(8)



一般式(9)



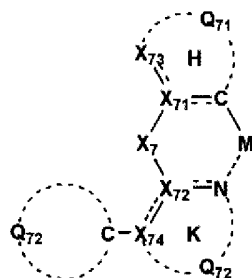
[0057] (式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。R₅₁、R₅₂、R₅₃、R₅₄

51 52 53 54

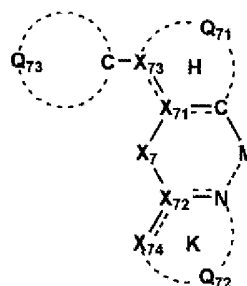
(12) 下記一般式(11)～(14)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする前記(10)に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[0060] [化24]

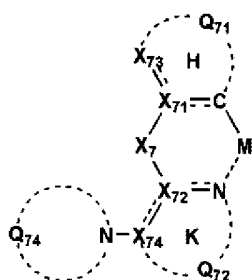
一般式(11)



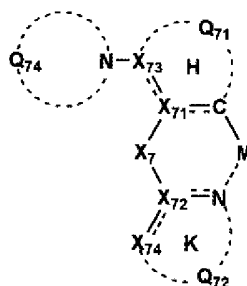
一般式(12)



一般式(13)



一般式(14)

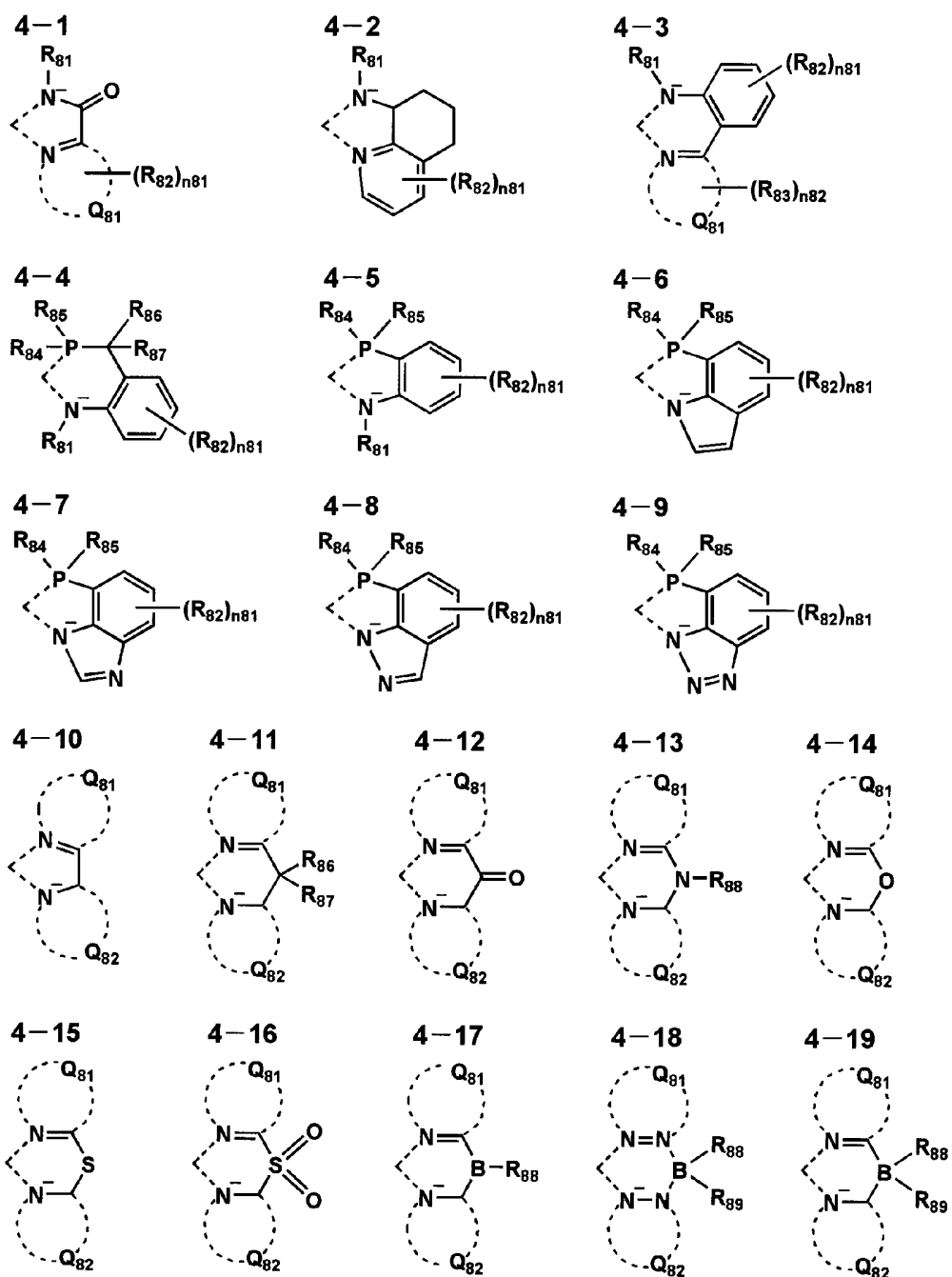


[0061] (式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。X₇₁、X₇₂、X₇₃、X₇₄は、各々炭素原子または窒素原子を表し、Q₇₁は炭素原子、X₇₁、X₇₃と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Hを形成する原子群を表し、Q₇₂は窒素原子、X₇₂、X₇₄と共に5～6員の芳香族複素環である環Kを形成する原子群を表す。Q₇₃は炭素原子と共に芳香族炭化水素環または芳香族複素環を形成する原子群を表す。Q₇₄は窒素原子と共に芳香族複素環を形成する原子群を表す。X₇はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SOまたはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。)

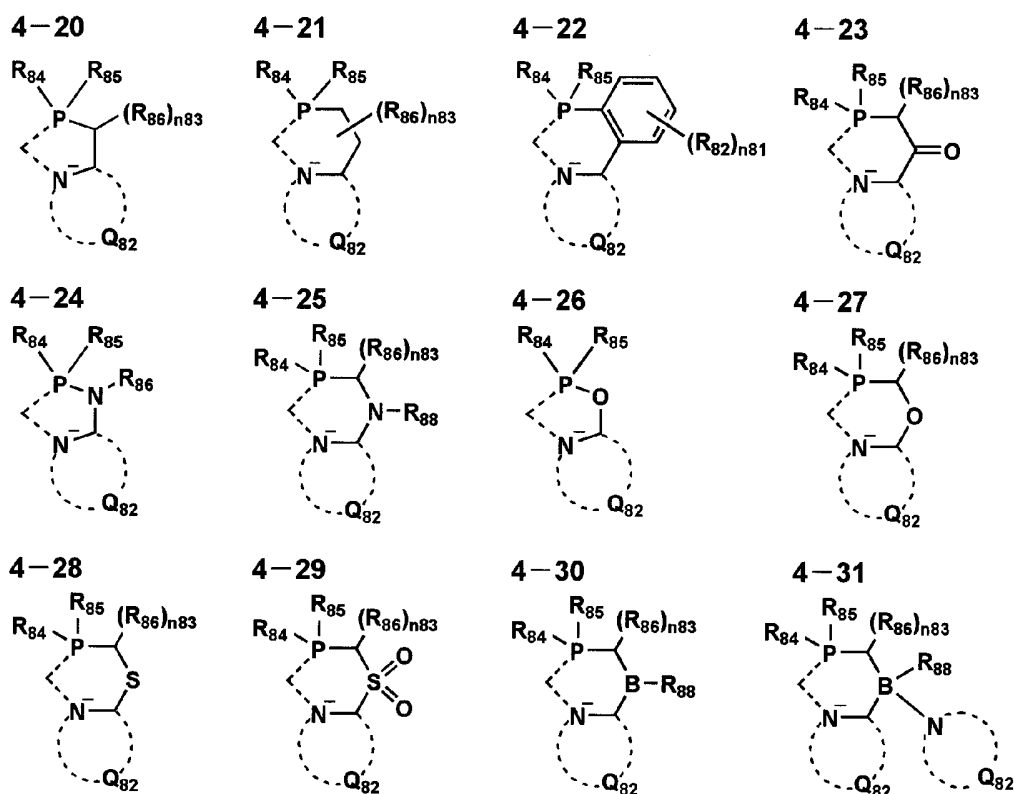
(13) 前記一般式(4)または一般式(6)のX₃₁-X₃-X₃₂によって形成される二座配位子が、下記一般式(4-1)～(4-31)で表される部分構造またはまたはその互変

異性体を部分構造として有することを特徴とする前記(1)、(4)～(12)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[0062] [化25]



[0063] [化26]



[0064] (式中、R₈₁はR₈₀-CO-またはR₈₀-SO₂-を表し、R₈₀はアルキル基、シクロアルキル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。R₈₂、R₈₃、R₈₆、R₈₇は置換基を表し、n₈₁は0~3の整数を表し、n₈₂、n₈₃は0~2の整数を表す。R₈₄、R₈₅、R₈₉はアルキル基、シクロアルキル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。Q₈₁は炭素、窒素と共に5~6員の芳香族複素環を形成する原子群を表し、Q₈₂、Q₈₃は炭素、窒素と共に5員の芳香族複素環を形成する原子群を表す。)

(14) Mがイリジウムまたは白金であることを特徴とする前記(1)~(13)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[0065] (15) 前記(1)~(14)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料を含有することを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0066] (16) 構成層として発光層を有し、該発光層が前記(1)~(14)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料を含有することを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子。

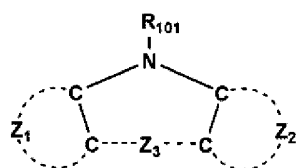
[0067] (17) 構成層として正孔阻止層を有し、該正孔阻止層が前記(1)~(14)のいずれ

か1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料を含有することを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0068] (18) 下記一般式(1A)で表される化合物を含有することを特徴とする前記(15)～(17)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。

[0069] [化27]

一般式(1A)



[0070] (式中、 Z_1 は芳香族複素環を表し、 Z_2 は芳香族複素環または芳香族炭化水素環を表し、 Z_3 は2価の連結基または単なる結合手を表す。 R_{101} は水素原子または置換基を表す。)

(19) 前記一般式(1A)で表される化合物の Z_1 が6員環であることを特徴とする前記(18)に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0071] (20) 前記一般式(1A)で表される化合物の Z_2 が6員環であることを特徴とする前記(18)または(19)に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

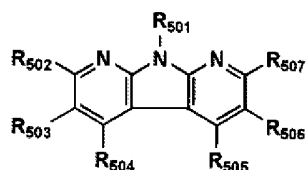
[0072] (21) 前記一般式(1A)で表される化合物の Z_3 が結合手であることを特徴とする前記(18)～(20)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0073] (22) 前記一般式(1A)で表される化合物が分子量450以上であることを特徴とする前記(18)～(21)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。

[0074] (23) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(1A-1)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0075] [化28]

一般式(1A-1)

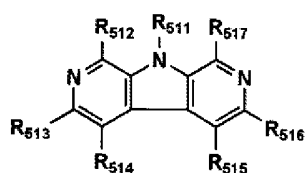


[0076] (式中、 $R_{501} \sim R_{507}$ は各々独立に水素原子または置換基を表す。)

(24) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(1A-2)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0077] [化29]

一般式(1A-2)

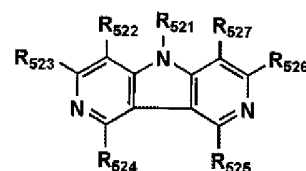


[0078] (式中、 $R_{511} \sim R_{517}$ は各々独立に水素原子または置換基を表す。)

(25) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(1A-3)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0079] [化30]

一般式(1A-3)



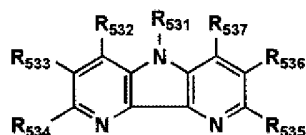
[0080] (式中、 $R_{521} \sim R_{527}$ は各々独立に水素原子または置換基を表す。)

(26) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(1A-4)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス

素子。

[0081] [化31]

一般式(1A-4)

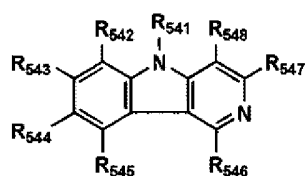


[0082] (式中、 $R_{531} \sim R_{537}$ は各々独立に水素原子または置換基を表す。)

(27) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(1A-5)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0083] [化32]

一般式(1A-5)

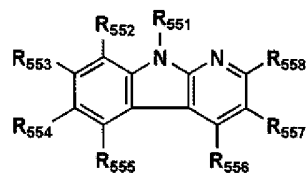


[0084] (式中、 $R_{541} \sim R_{548}$ は各々独立に水素原子または置換基を表す。)

(28) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(1A-6)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0085] [化33]

一般式(1A-6)

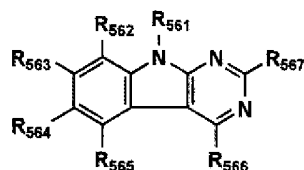


[0086] (式中、 $R_{551} \sim R_{558}$ は各々独立に水素原子または置換基を表す。)

(29) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(1A-7)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0087] [化34]

一般式(1A-7)

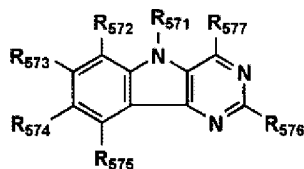


[0088] (式中、 R_{561} ～ R_{567} は各々独立に水素原子または置換基を表す。)

(30) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(1A-8)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0089] [化35]

一般式(1A-8)

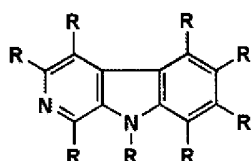


[0090] (式中、 R_{571} ～ R_{577} は各々独立に水素原子または置換基を表す。)

(31) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(1A-9)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0091] [化36]

一般式(1A-9)

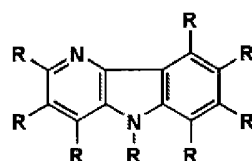


[0092] (式中、Rは水素原子または置換基を表す。また、複数のRは各々同一でもよく、異なってもよい。)

(32)前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(1A-10)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0093] [化37]

一般式(1A-10)

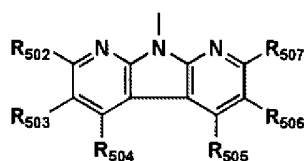


[0094] (式中、Rは水素原子または置換基を表す。また、複数のRは各々同一でもよく、異なってもよい。)

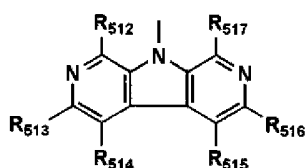
(33)前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(2A-1)～(2A-10)のいずれかで表される基を少なくとも一つ有することを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0095] [化38]

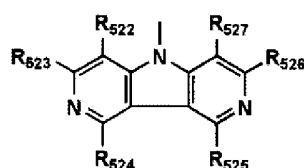
一般式(2A-1)



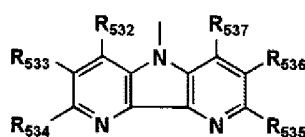
一般式(2A-2)



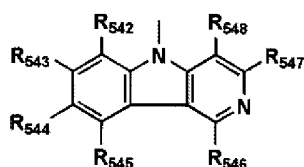
一般式(2A-3)



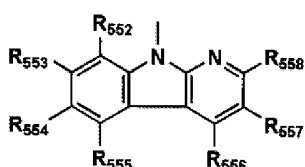
一般式(2A-4)



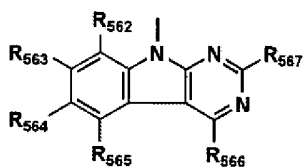
一般式(2A-5)



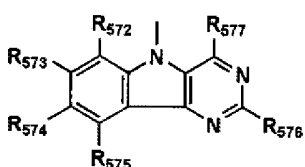
一般式(2A-6)



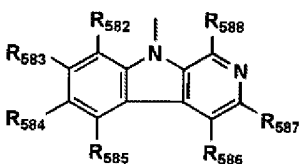
一般式(2A-7)



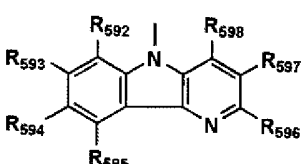
一般式(2A-8)



一般式(2A-9)



一般式(2A-10)

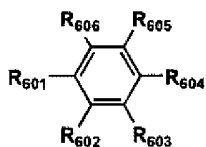


[0096] (式中、 $R_{502} \sim R_{507}$ 、 $R_{512} \sim R_{517}$ 、 $R_{522} \sim R_{527}$ 、 $R_{532} \sim R_{537}$ 、 $R_{542} \sim R_{547}$ 、 $R_{552} \sim R_{557}$ 、 $R_{562} \sim R_{567}$ 、 $R_{572} \sim R_{577}$ 、 $R_{582} \sim R_{587}$ 、 $R_{592} \sim R_{597}$ は各々独立に水素原子または置換基を表し、該置換基は各々同一でもよく、異なってもよい。)

(34) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(3A)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0097] [化39]

一般式(3A)

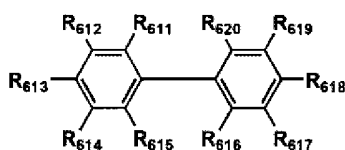


[0098] (式中、 $R_{601} \sim R_{606}$ は各々独立に水素原子または置換基を表すが、 $R_{601} \sim R_{606}$ の少なくとも一つは前記一般式(2-1)～(2-10)で表される基から選ばれる少なくとも一つの基を表す。)

(35)前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(4A)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0099] [化40]

一般式(4A)

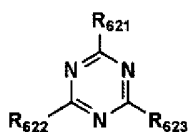


[0100] (式中、 $R_{611} \sim R_{620}$ は各々独立に水素原子または置換基を表すが、 $R_{611} \sim R_{620}$ の少なくとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)で表される基から選ばれる少なくとも一つの基を表す。)

(36)前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(5A)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0101] [化41]

一般式(5A)



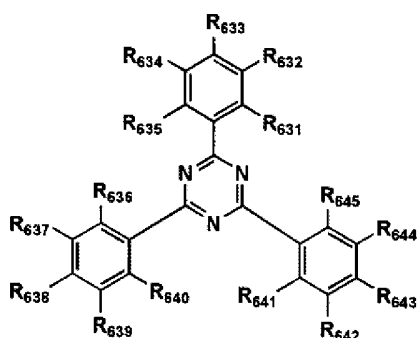
[0102] (式中、 $R_{621} \sim R_{623}$ は各々独立に水素原子または置換基を表すが、 $R_{621} \sim R_{623}$ の少な

くとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)で表される基から選ばれる少なくとも一つの基を表す。)

(37)前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(6A)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0103] [化42]

一般式(6A)

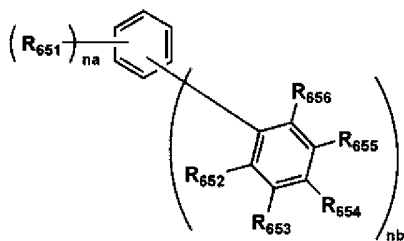


[0104] (式中、 $R_{631} \sim R_{645}$ は各々独立に水素原子または置換基を表すが、 $R_{631} \sim R_{645}$ の少なくとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)で表される基から選ばれる少なくとも一つの基を表す。)

(38)前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(7A)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0105] [化43]

一般式(7A)



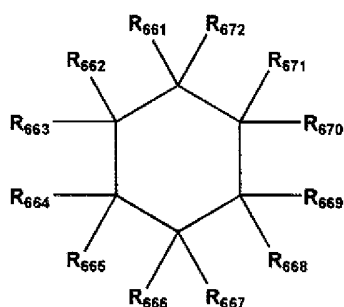
[0106] (式中、 $R_{651} \sim R_{656}$ は各々独立に水素原子または置換基を表すが、 $R_{651} \sim R_{656}$ の少なくとも一つは前記一般式(2-1)～(2-10)で表される基から選ばれる少なくとも一つの基を表す。naは0～5の整数を表し、nbは1～6の整数を表すが、naとnbの和は

6である。)

(39) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(8A)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0107] [化44]

一般式(8A)

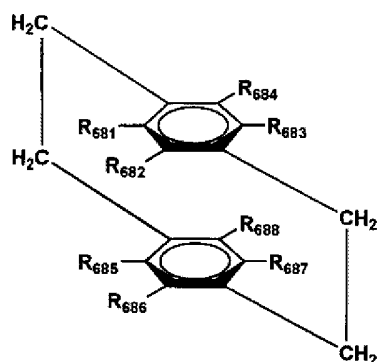


[0108] (式中、R₆₆₁～R₆₇₂は各々独立に水素原子または置換基を表すが、R₆₆₁～R₆₇₂の少なくとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)で表される基から選ばれる少なくとも一つの基を表す。)

(40) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(9A)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0109] [化45]

一般式(9A)

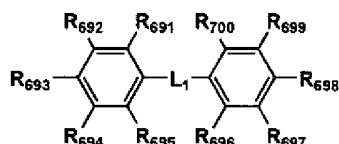


[0110] (式中、R₆₈₁～R₆₈₈は各々独立に水素原子または置換基を表すが、R₆₈₁～R₆₈₈の少なくとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)で表される基から選ばれる少なくとも一つの基を表す。)

(41) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(10A)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0111] [化46]

一般式(10A)

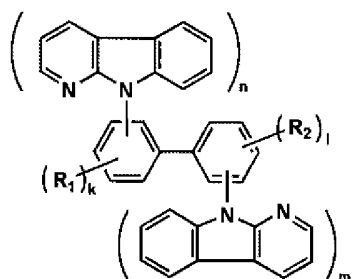


[0112] (式中、 $R_{691} \sim R_{700}$ は各々独立に水素原子または置換基を表すが、 L_1 は2価の連結基を表す。 $R_{691} \sim R_{700}$ の少なくとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)で表される基から選ばれる少なくとも一つの基を表す。)

(42) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(11A)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0113] [化47]

一般式(11A)

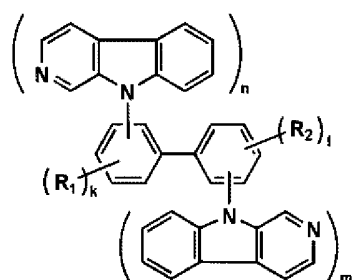


[0114] (式中、 R_1, R_2 は各々独立に水素原子または置換基を表す。 n, m は各々1～2の整数を表し、 k, l は各々3～4の整数を表す。但し、 $n+k=5$ 、かつ $l+m=5$ である。)

(43) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(12A)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0115] [化48]

一般式(12A)

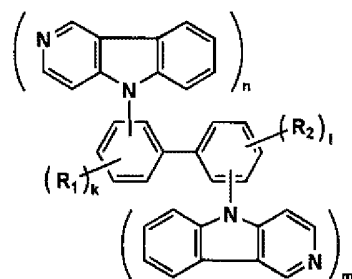


[0116] (式中、 R_1 、 R_2 は各々独立に水素原子または置換基を表す。 n 、 m は各々1~2の整数を表し、 k 、 l は各々3~4の整数を表す。但し、 $n+k=5$ 、かつ $l+m=5$ である。)

(44)前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(13A)で表されることを特徴とする前記(18)~(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0117] [化49]

一般式(13A)

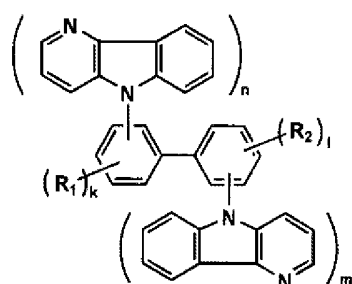


[0118] (式中、 R_1 、 R_2 は各々独立に水素原子または置換基を表す。 n 、 m は各々1~2の整数を表し、 k 、 l は各々3~4の整数を表す。但し、 $n+k=5$ 、かつ $l+m=5$ である。)

(45)前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(14A)で表されることを特徴とする前記(18)~(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0119] [化50]

一般式(14A)

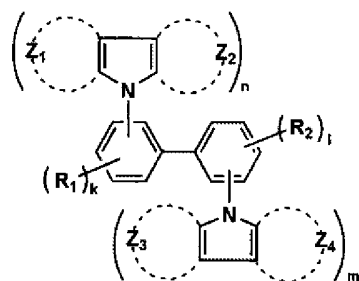


[0120] (式中、 R_1 、 R_2 は各々独立に水素原子または置換基を表す。 n 、 m は各々1~2の整数を表し、 k 、 l は各々3~4の整数を表す。但し、 $n+k=5$ 、かつ $l+m=5$ である。)

(46) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(15A)で表されることを特徴とする前記(18)~(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0121] [化51]

一般式(15A)

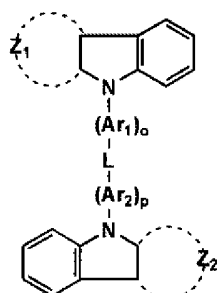


[0122] (式中、 R_1 、 R_2 は各々独立に水素原子または置換基を表す。 n 、 m は各々1~2の整数を表し、 k 、 l は各々3~4の整数を表す。但し、 $n+k=5$ 、かつ $l+m=5$ である。 Z_1 、 Z_2 、 Z_3 、 Z_4 は各々窒素原子を少なくとも一つ含む6員の芳香族複素環を表す。)

(47) 前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(16A)で表されることを特徴とする前記(18)~(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0123] [化52]

一般式(16A)

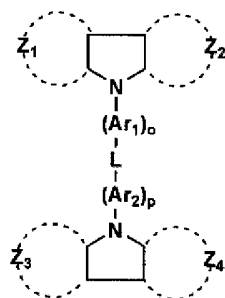


[0124] (式中、 o 、 p は各々1～3の整数を表し、 Ar_1 、 Ar_2 は各々アリーレン基または2価の芳香族複素環基を表す。 Z_1 、 Z_2 は各々窒素原子を少なくとも一つ含む6員の芳香族複素環を表し、 L は2価の連結基を表す。)

(48)前記一般式(1A)で表される化合物が下記一般式(17A)で表されることを特徴とする前記(18)～(22)のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[0125] [化53]

一般式(17A)



[0126] (式中、 o 、 p は各々1～3の整数を表し、 Ar_1 、 Ar_2 は各々アリーレン基または2価の芳香族複素環基を表す。 Z_1 、 Z_2 、 Z_3 、 Z_4 は各々窒素原子を少なくとも一つ含む6員の芳香族複素環を表し、 L は2価の連結基を表す。)

(49)前記(15)～(48)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有することを特徴とする表示装置。

[0127] (50)前記(15)～(48)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有することを特徴とする照明装置。

発明の効果

[0128] 本発明により、高い発光効率を示し、かつ、発光寿命の長い有機EL素子材料、有機EL素子、照明装置及び表示装置を提供することができる。

図面の簡単な説明

[0129] [図1]有機EL素子から構成される表示装置の一例を示した模式図である。

[図2]表示部Aの模式図である。

[図3]画素の模式図である。

[図4]パッシブマトリックス方式による表示装置の模式図である。

[図5]照明装置の概略図である。

[図6]照明装置の断面図である。

符号の説明

- [0130]
- 1 ディスプレイ
 - 3 画素
 - 5 走査線
 - 6 データ線
 - 7 電源ライン
 - 10 有機EL素子
 - 11 スイッチングトランジスタ
 - 12 駆動トランジスタ
 - 13 コンデンサ
 - A 表示部
 - B 制御部
 - 101 有機EL素子
 - 102 ガラスカバー
 - 105 陰極
 - 106 有機EL層
 - 107 透明電極付きガラス基板
 - 108 窒素ガス

109 捕水剤

発明を実施するための最良の形態

- [0131] 本発明者等は、従来のオルトメタル錯体の問題点について鋭意検討を行った結果、オルトメタル錯体の配位子として特定の構造を有する異なった配位子を複数組み合わせ合わせた化合物を用いて作製した有機EL素子は、従来よりも高い発光効率を示し、かつ、発光寿命が大幅に改善されることを見出した。この有機EL素子を用いて作製した照明装置及び表示装置は同様に優れた特性を示した。
- [0132] このような効果が得られる機構については解明していないが、異なった配位子を複数組み合わせることにより、発光中心となる有機EL素子材料の自己組織化あるいは自己集合化によるエキシマー発光が抑制され、高い発光効率を達成するものと推定している。
- [0133] 以下、本発明に係る各構成要素の詳細について、順次説明する。
- [0134] 本発明において、上記有機EL素子材料を含有する有機EL素子とは、有機EL素子材料が有機EL素子を構成するいずれかの有機層を形成するか、または有機層に含有された有機EL素子を表す。本発明の有機EL素子の層構成については、別途、詳細に説明する。
- [0135] 本発明に係る前記金属錯体(有機EL素子材料)の含有層としては、発光層及び／または正孔阻止層が好ましい。発光層に含有する場合は、発光層中の発光ドーパントとして用いることにより、本発明の目的である有機EL素子の発光寿命の長寿命化を達成することができる。
- [0136] [金属錯体]
本発明に係る前記一般式で表される金属錯体について説明する。
- [0137] 本発明及び本発明の好ましい態様(1)の有機EL素子材料は、前記一般式(1)で表されるオルトメタル錯体であることを特徴とする。
- [0138] 式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。L、L' は互いに異なる二座配位子を表し、mは1または2であり、nは1または2である。ただし、m+nは2または3でありMの電荷と一致する。
- [0139] 部分構造MLは前記一般式(2)で表され、部分構造ML' は前記一般式(3)また

は(4)で表される。

- [0140] X_{11} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{11} は炭素原子及び X_{11} と共に6員の芳香族炭化水素環または5~6員の芳香族複素環である環Aを形成する原子群を表す。 X_{12} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{12} は窒素原子及び X_{12} と共に5~6員の芳香族複素環である環Bを形成する原子群を表す。 X_1 はO、S、 CH_2 、CHR、 CR_2 、NR、P、R、 SiR_2 、C=O、C=NR、SOまたは SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。
- [0141] X_{21} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{21} は炭素原子及び X_{21} と共に6員の芳香族炭化水素環または5~6員の芳香族複素環である環Cを形成する原子群を表す。 X_{22} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{22} は窒素原子及び X_{22} と共に5~6員の芳香族複素環である環Dを形成する原子群を表す。 X_2 はO、S、 CH_2 、CHR、 CR_2 、NR、P、R、 SiR_2 、C=O、C=NR、SOまたは SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。
- [0142] X_{31} 、 X_{32} は窒素原子またはリン原子を表し、 X_3 は X_{31} 、 X_{32} を介してMに配位している二座配位子を形成する原子群を表す。
- [0143] 前記6員の芳香族炭化水素環としては、ベンゼン環が挙げられる。
- [0144] 前記5~6員の芳香族複素環としては、オキサゾール環、チオフェン環、フラン環、ピロール環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、イミダゾール環、ピラゾール環、トリアゾール環等が挙げられる。
- [0145] これらの6員の芳香族炭化水素環、5~6員の芳香族複素環は、アルキル基(例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、(t)ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、ドデシル基、トリデシル基、テトラデシル基、ペンタデシル基等)、シクロアルキル基(例えば、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等)、アルケニル基(例えば、ビニル基、アリル基等)、アルキニル基(例えば、プロパルギル基等)、アリール基(芳香族炭化水素環基ともいい、例えば、フェニル基、トリル基、キシリル基、ナフチル基、ビフェニル基、アントリル基、フェナントリル基等)、複素環基(例えば、ピロリジル基、イミダゾリジル基、モルホルル基、オキサゾリジル基等)、芳香族複素環基(例えば、例えば、ピリジル基、ピリミジニル基、フリル基、ピロリル基、イミダゾリ

ル基、ベンゾイミダゾリル基、ピラゾリル基、ピラジニル基、トリアゾリル基(例えば、1, 2, 4-トリアゾール-1-イル基、1, 2, 3-トリアゾール-1-イル基等)、オキサゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、チアゾリル基、イソオキサゾリル基、イソチアゾリル基、フラザニル基、チエニル基、キノリル基、ベンゾフリル基、ジベンゾフリル基、ベンゾチエニル基、ジベンゾチエニル基、インドリル基、カルバゾリル基、カルボリニル基、ジアザカルバゾリル基(カルボリン環を構成する炭素原子の一つが窒素原子で置き換わったものを示す)、キノキサリニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キナゾリニル基、フタラジニル基等)、アルコキシル基(例えば、メキシ基、エトキシ基、プロピルオキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、オクチルオキシ基、ドデシルオキシ基等)、シクロアルコキシル基(例えば、シクロペンチルオキシ基、シクロヘキシルオキシ基等)、アリールオキシ基(例えば、フェノキシ基、ナフチルオキシ基等)、アルキルチオ基(例えば、メチルチオ基、エチルチオ基、プロピルチオ基、ペンチルチオ基、ヘキシルチオ基、オクチルチオ基、ドデシルチオ基等)、シクロアルキルチオ基(例えば、シクロペンチルチオ基、シクロヘキシルチオ基等)、アリールチオ基(例えば、フェニルチオ基、ナフチルチオ基等)、アルコキシカルボニル基(例えば、メチルオキシカルボニル基、エチルオキシカルボニル基、ブチルオキシカルボニル基、オクチルオキシカルボニル基、ドデシルオキシカルボニル基等)、アリールオキシカルボニル基(例えば、フェニルオキシカルボニル基、ナフチルオキシカルボニル基等)、スルファモイル基(例えば、アミノスルホニル基、メチルアミノスルホニル基、ジメチルアミノスルホニル基、ブチルアミノスルホニル基、ヘキシルアミノスルホニル基、シクロヘキシルアミノスルホニル基、オクチルアミノスルホニル基、ドデシルアミノスルホニル基、フェニルアミノスルホニル基、ナフチルアミノスルホニル基、2-ピリジルアミノスルホニル基等)、ウレイド基(例えば、メチルウレイド基、エチルウレイド基、ペンチルウレイド基、シクロヘキシルウレイド基、オクチルウレイド基、ドデシルウレイド基、フェニルウレイド基、ナフチルウレイド基、2-ピリジルアミノウレイド基等)、アシル基(例えば、アセチル基、エチルカルボニル基、プロピルカルボニル基、ペンチルカルボニル基、シクロヘキシルカルボニル基、オクチルカルボニル基、2-エチルヘキシルカルボニル基、ドデシルカルボニル基、フェニルカルボニル基、ナフチルカルボニル基、ピリジルカルボニル

基等)、アシルオキシ基(例えば、アセチルオキシ基、エチルカルボニルオキシ基、ブチルカルボニルオキシ基、オクチルカルボニルオキシ基、ドデシルカルボニルオキシ基、フェニルカルボニルオキシ基等)、アミド基(例えば、メチルカルボニルアミノ基、エチルカルボニルアミノ基、ジメチルカルボニルアミノ基、プロピルカルボニルアミノ基、ペンチルカルボニルアミノ基、シクロヘキシルカルボニルアミノ基、2-エチルヘキシルカルボニルアミノ基、オクチルカルボニルアミノ基、ドデシルカルボニルアミノ基、フェニルカルボニルアミノ基、ナフチルカルボニルアミノ基等)、カルバモイル基(例えば、アミノカルボニル基、メチルアミノカルボニル基、ジメチルアミノカルボニル基、プロピルアミノカルボニル基、ペンチルアミノカルボニル基、シクロヘキシルアミノカルボニル基、オクチルアミノカルボニル基、2-エチルヘキシルアミノカルボニル基、ドデシルアミノカルボニル基、フェニルアミノカルボニル基、ナフチルアミノカルボニル基、2-ピリジルアミノカルボニル基等)、スルフィニル基(例えば、メチルスルフィニル基、エチルスルフィニル基、ブチルスルフィニル基、シクロヘキシルスルフィニル基、2-エチルヘキシルスルフィニル基、ドデシルスルフィニル基、フェニルスルフィニル基、ナフチルスルフィニル基、2-ピリジルスルフィニル基等)、アルキルスルホニル基またはアリールスルホニル基(例えば、メチルスルホニル基、エチルスルホニル基、ブチルスルホニル基、シクロヘキシルスルホニル基、2-エチルヘキシルスルホニル基、ドデシルスルホニル基、フェニルスルホニル基、ナフチルスルホニル基、2-ピリジルスルホニル基等)、アミノ基(例えば、アミノ基、エチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ブチルアミノ基、シクロペンチルアミノ基、2-エチルヘキシルアミノ基、ドデシルアミノ基、アニリノ基、ナフチルアミノ基、2-ピリジルアミノ基等)、ニトロ基、シアノ基等の置換基を有していてもよく、さらに、上記芳香族炭化水素環や芳香族複素環上の置換基同士が環構造を形成して、もう一つの芳香族炭化水素環や芳香族複素環が付いた縮環構造をとることも可能である。

[0146] 前記Rで表される、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基、芳香族複素環基は、各々、前記6員の芳香族炭化水素環、5~6員の芳香族複素環の置換基として述べたアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基、芳香族複素環基と同義である。

- [0147] 前記態様(2)の有機EL素子材料は、前記一般式(5)で表されるオルトメタル錯体であることを特徴とする。
- [0148] 式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。m1は1または2であり、n1は1または2である。ただし、m1+n1は2または3でありMの電荷と一致する。X₁₁は炭素原子または窒素原子を表し、Q₁₁は炭素原子及びX₁₁と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Aを形成する原子群を表す。X₁₂は炭素原子または窒素原子を表し、Q₁₂は窒素原子及びX₁₂と共に5～6員の芳香族複素環である環Bを形成する原子群を表す。X₁はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SOまたはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。
- [0149] X₂₁は、炭素原子または窒素原子を表し、Q₂₁は炭素原子及びX₂₁と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Cを形成する原子群を表す。X₂₂は炭素原子または窒素原子を表し、Q₂₂は窒素原子及びX₂₂と共に5～6員の芳香族複素環である環Dを形成する原子群を表す。X₂はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SOまたはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。ただし、環Aと環C、環Bと環Dが同時に同じものになることはない。
- [0150] 前記6員の芳香族炭化水素環、5～6員の芳香族複素環、Rは、前記態様(1)で述べたものと同義である。
- [0151] 前記一般式(5)において、芳香族複素環Bまたは芳香族複素環Dのうち少なくとも一方が6員環であり、他方が5員環であることが好ましい。
- [0152] 前記態様(4)の有機EL素子材料は、前記一般式(6)で表されるオルトメタル錯体であることを特徴とする。
- [0153] 式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。m2は1または2であり、n2は1または2である。ただし、m2+n2は2または3でありMの電荷と一致する。X₁₁は炭素原子または窒素原子を表し、Q₁₁は炭素原子及びX₁₁と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Aを形成する原子群を表す。X₁₂は炭素原子または窒素原子を表し、Q₁₂は窒素原子及びX₁₂と共に5～6員の芳香族

複素環である環Bを形成する原子群を表す。X₁はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SOまたはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。X₃₁、X₃₂は窒素原子またはリン原子を表し、X₃はX₃₁、X₃₂を介してMに配位している二座配位子を形成する原子群を表す。

- [0154] 前記6員の芳香族炭化水素環、5～6員の芳香族複素環、Rは、前記態様(1)で述べたものと同義である。
- [0155] 前記一般式(6)において、芳香族複素環Bが6員環であることが好ましい。
- [0156] 前記態様(6)の有機EL素子材料は、前記一般式(1-1)～(1-150)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする。
- [0157] 式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。R₁₁、R₁₂は各々置換基を表し、n11、n12は各々0～2から選ばれる整数を表す。X₁₃、X₁₄は各々>N-R₁₃、-O-または-S-を表す。R₁₃はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。X₁₅、X₁₆、X₁₇、X₁₈は、各々>N-R₁₆、-O-または-S-を表す。R₁₆は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。X_{19a}、X_{19b}、X_{19c}は、各々CHまたはNを表し、任意の1つまたは2つがNである。X₀はO、S、C、H₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SOまたはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。
- [0158] 前記R₁₁、R₁₂で表される置換基は、前記態様(1)で述べた6員の芳香族炭化水素環、5～6員の芳香族複素環の置換基と同義である。前記アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基は、前記態様(1)で述べたものと同義である。
- [0159] 前記態様(7)の有機EL素子材料は、前記一般式(2-1)～(2-50)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする。

- [0160] 式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。R₂₁、R₂₂は各々置換基を表し、n₂₁、n₂₂は0～2から選ばれる整数を表す。X₂₃は、>N-R₂₃、-O-または-S-を表す。R₂₃は、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。X₂₄、X₂₅は、>N-R₂₄、-O-または-S-を表す。R₂₄は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。X₂₆、X₂₇、X₂₈は各々CHまたはNを表し、任意の1つまたは2つがNである。X₀はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SOまたはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。
- [0161] 前記R₂₁、R₂₂で表される置換基は、前記態様(1)で述べた6員の芳香族炭化水素環、5～6員の芳香族複素環の置換基と同義である。前記アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基は、前記態様(1)で述べたものと同義である。
- [0162] 前記態様(8)の有機EL素子材料は、前記一般式(3-1)～(3-10)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする。
- [0163] 式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。R₃₁、R₃₂は各々置換基を表し、n₃₁、n₃₂は0～2から選ばれる整数を表す。X₃₁は、>N-R₃₁、-O-または-S-を表す。R₃₃はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。X₃₂、X₃₃は、>N-R₃₄、-O-または-S-を表す。R₂₅は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。X₃₄、X₃₅、X₃₆は各々CHまたはNを表し、任意の1つまたは2つがNである。X₀はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SOまたはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。
- [0164] 前記R₃₁、R₃₂で表される置換基は、前記態様(1)で述べた6員の芳香族炭化水素環、5～6員の芳香族複素環の置換基と同義である。前記アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基は、前記態様(1)

)で述べたものと同義である。

- [0165] 前記態様(9)の有機EL素子材料は、前記一般式(7)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする。
- [0166] 式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。X₄₁は炭素原子または窒素原子を表し、Q₄₁は炭素原子及びX₄₁と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Eを形成する原子群を表す。R₄₁は置換基を表し、n₄₁は0～3から選ばれる整数を表す。Xaは-N(Ra)₂、-O-Raまたは-S-Raを表す。Raはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。Xaが-N(Ra)₂の場合、2つのRaは同じであっても異なってもよい。X₄はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SO₂またはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。
- [0167] 前記R₄₁で表される置換基は、前記態様(1)で述べた6員の芳香族炭化水素環、5～6員の芳香族複素環の置換基と同義である。前記アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基は、前記態様(1)で述べたものと同義である。
- [0168] 一般式(7)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体は、前記一般式(8)または(9)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることが好ましい。
- [0169] 式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。R₅₁、R₅₂、R₅₃、R₅₄は、各々水素原子または電子供与性の置換基を表し、少なくとも1つは電子供与性の置換基である。R₅₆、R₅₇、R₅₈、R₅₉は、各々水素原子または置換基を表し、R₅₆、R₅₈の少なくとも一方は電子吸引性の置換基である。R₅₀、R₅₅は置換基を表し、n₅₁、n₅₂は0～3から選ばれる整数を表す。Xaは-N(Ra)₂、-O-Raまたは-S-Raを表す。Raはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。Xaが-N(Ra)₂の場合、2つのRaは同じであっても異なってもよい。X₅はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SO₂またはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基

、複素環基または芳香族複素環基を表す。

- [0170] 前記電子供与性の置換基は、下記に記載のハメットの σ_p 値が負の値を示す置換基のことであり、そのような置換基は水素原子と比べて結合原子側に電子を与えやすい特性を有する。
- [0171] 電子供与性を示す置換基の具体例としては、ヒドロキシル基、アルコキシ基(例えば、メキシ基、)、アセチルオキシ基、アミノ基、ジメチルアミノ基、アセチルアミノ基、アルキル基(例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、tert-ブチル基等)、アリール基(例えば、フェニル基、メシチル基等)が挙げられる。
- [0172] 例えば、 σ_p が -0.20 以下の電子供与性基としては、シクロプロピル基 (-0.21)、シクロヘキシル基 (-0.22)、tert-ブチル基 (-0.20)、 $-\text{CH}_2\text{Si}(\text{CH}_3)_3$ (-0.21)、アミノ基 (-0.66)、ヒドロキシルアミノ基 (-0.34)、 $-\text{NHNH}_2$ (-0.55)、 $-\text{NHCONH}_2$ (-0.24)、 $-\text{NHCH}_3$ (-0.84)、 $-\text{NHC}_2\text{H}_5$ (-0.61)、 $-\text{NHC ONHC}_2\text{H}_5$ (-0.26)、 $-\text{NHC}_4\text{H}_9$ (-0.51)、 $-\text{NHC}_6\text{H}_5$ (-0.40)、 $-\text{N}=\text{CHC}_6\text{H}_5$ (-0.55)、 $-\text{OH}$ (-0.37)、 $-\text{OCH}_3$ (-0.27)、 $-\text{OCH}_2\text{COOH}$ (-0.33)、 $-\text{OC}_2\text{H}_5$ (-0.24)、 $-\text{OC}_3\text{H}_7$ (-0.25)、 $-\text{OCH}(\text{CH}_3)_2$ (-0.45)、 $-\text{OC}_5\text{H}_{11}$ (-0.34)、 $-\text{OCH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ (-0.42) 等が挙げられる。
- [0173] また、ハメットの σ_p 値については、例えば、下記文献等が参照できる。
- [0174] ハメットの σ_p 値とは、ハメットの置換基定数 σ_p を指す。ハメットの σ_p の値は、Hammett 等によって安息香酸エチルの加水分解に及ぼす置換基の電子的効果から求められた置換基定数であり、「薬物の構造活性相関」(南江堂:1979年)、「Substituent Constants for Correlation Analysis in chemistry and biology」(C. Hansch and A. Leo, John Wiley & Sons, New York, 1979年)等に記載の基を引用することができる。
- [0175] 電子供与性の置換基としては、前記の基の中、最も好ましくはアルキル基、アルコキシ基、アルキルアミノ基が挙げられる。
- [0176] 前記置換基としては、前記態様(1)で述べた6員の芳香族炭化水素環、5~6員の芳香族複素環の置換基と同義である。前記アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基は、前記態様(1)で述べたもの

と同義である。

[0177] 前記態様(11)の有機EL素子材料は、前記一般式(10)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする。

[0178] 式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。 X_{61} 、 X_{62} 、 X_{63} 、 X_{64} は、各々炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{61} は炭素原子及び X_{61} 、 X_{63} と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Fを形成する原子群を表し、 Q_{62} は窒素原子及び X_{62} 、 X_{64} と共に5～6員の芳香族複素環である環Gを形成する原子群を表す。 X_h 、 X_k はファンデルワールス体積が 20 \AA^3 以上である置換基を表し、 m_6 、 n_6 は0または1を表す。ただし、 $m_6 + n_6 \geq 1$ である。 X_6 はO、S、 CH_2 、CHR、 CR_2 、NR、PR、 SiR_2 、C=O、C=NR、SOまたは SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。

[0179] 前記6員の芳香族炭化水素環、5～6員の芳香族複素環は前記態様(1)で述べたものと同義である。

[0180] 置換基のファンデルワールス(VDW)体積とは、アクセルリス社製分子シミュレーションソフトCerius2を用いて求められるパラメーターを用いるが、ベンゼン環に置換基を導入し、Dreiding Force Fieldを用いて、MM計算で分子構造を最適化して、Connolly Surfaceを用いて求めたVolume値と定義する。具体的な置換基のファンデルワールス(VDW)体積を下記に示す。

[0181] 置換基	\AA^3
メチル基	25.4
エチル基	42.6
イソプロピル基	59.5
tert-ブチル基	76.2
フェニル基	74.9
メキシ基	34.0
アミノ基	22.2
ヒドロキシル基	16.7
塩素原子	22.4

臭素原子	26.5
フッ素原子	13.3
トリフルオロメチル基	42.5

前記アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基は、前記態様(1)で述べたものと同義である。

[0182] 一般式(10)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体は、前記一般式(11)～(14)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることが好ましい。

[0183] 式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。 X_{71} 、 X_{72} 、 X_{73} 、 X_{74} は、各々炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{71} は炭素原子、 X_{71} 、 X_{73} と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Hを形成する原子群を表し、 Q_{23} は窒素原子、 X_{72} 、 X_{74} と共に5～6員の芳香族複素環である環Kを形成する原子群を表す。 Q_{73} は炭素原子と共に芳香族炭化水素環または芳香族複素環を形成する原子群を表す。 Q_{74} は窒素原子と共に芳香族複素環を形成する原子群を表す。 X_7 はO、S、 CH_2 、CHR、 CR_2 、NR、PR、 SiR_2 、C=O、C=NR、SOまたは SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。

[0184] 前記6員の芳香族炭化水素環、5～6員の芳香族複素環は前記態様(1)で述べたものと同義である。

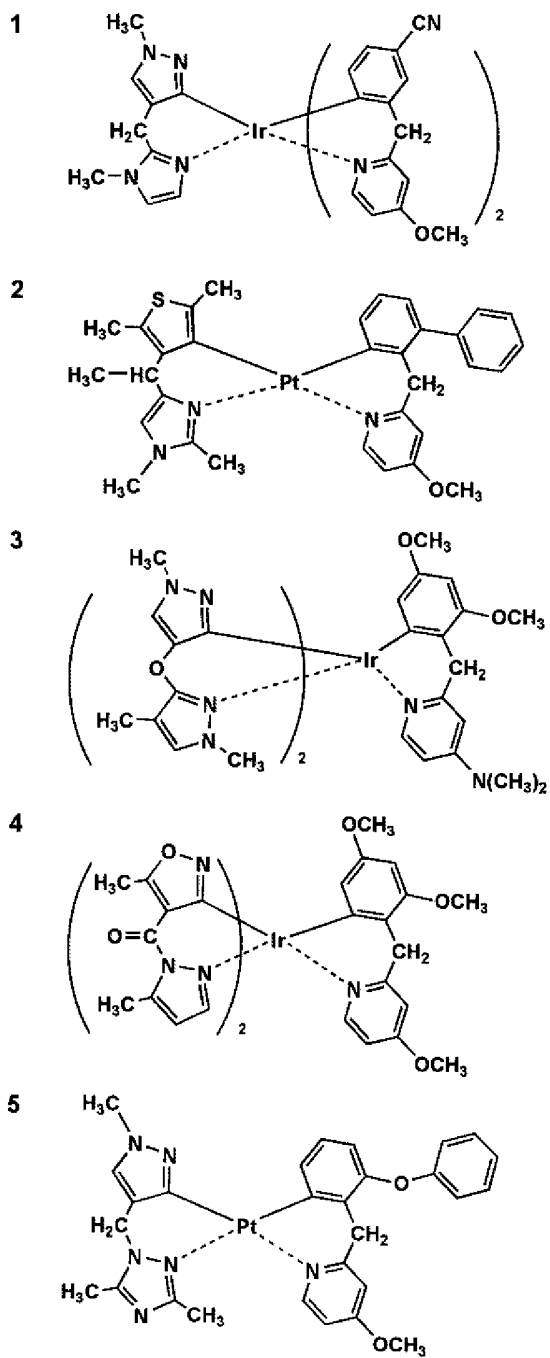
[0185] 前記アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基は、前記態様(1)で述べたものと同義である。

[0186] 前記態様(13)の有機EL素子材料は、前記一般式(4)または一般式(6)の X_{31} — X_3 — X_{32} によって形成される二座配位子が、前記一般式(4-1)～(4-31)で表される部分構造またはまたはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする。

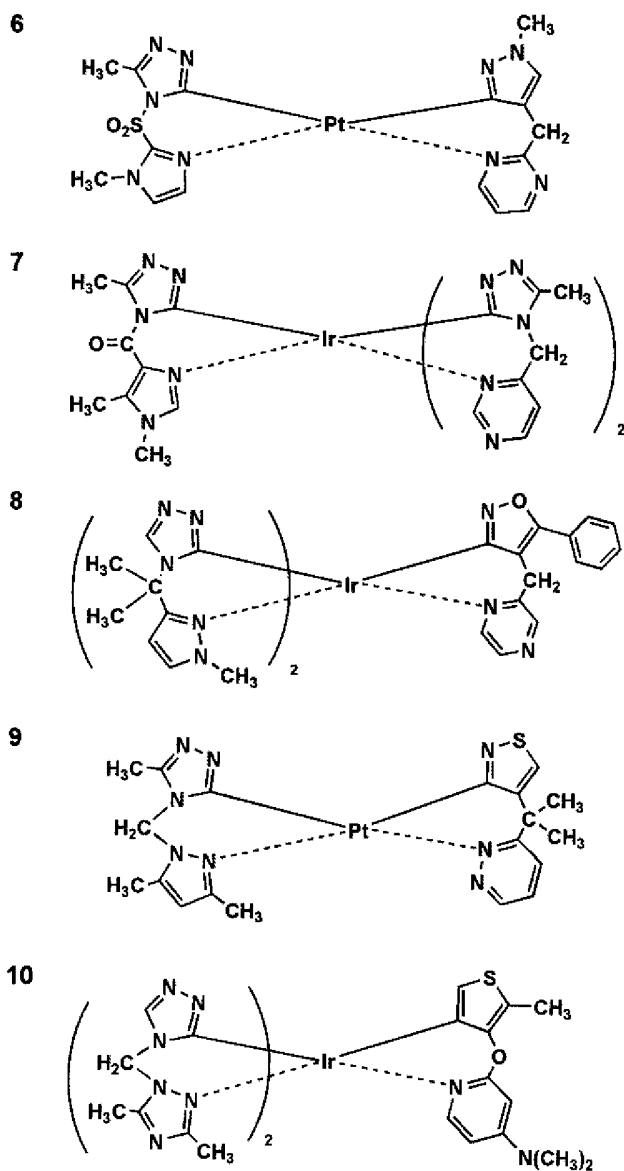
[0187] 式中、 R_{81} —CO—または R_{80} — SO_2 —を表し、 R_{80} はアルキル基、シクロアルキル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。 R_{82} 、 R_{83} 、 R_{86} 、 R_{87} は置換基を表し、 n_{81} は0～3の整数を表し、 n_{82} 、 n_{83} は0～2の整数を表す。 R_{84} 、 R_{85} 、 R_{88}

R₈₉ はアルキル基、シクロアルキル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。Q₈₁ は炭素、窒素と共に5～6員の芳香族複素環を形成する原子群を表し、Q₈₂、Q₈₃ は炭素、窒素と共に5員の芳香族複素環を形成する原子群を表す。

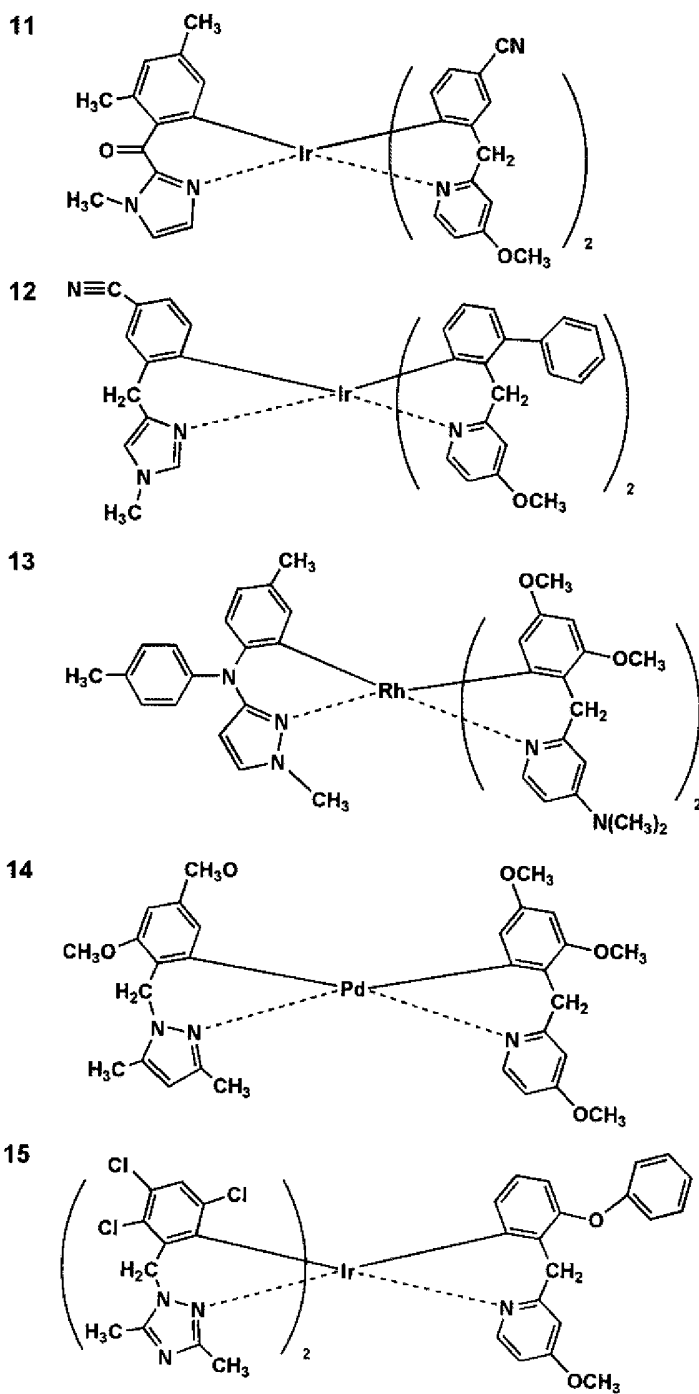
- [0188] 前記5～6員の芳香族複素環は前記態様(1)で述べたものと同義である。
- [0189] 前記アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基は、前記態様(1)で述べたものと同義である。
- [0190] 前記態様(14)の有機EL素子材料は、前記全ての一般式において、Mがイリジウムまたは白金であるオルトメタル錯体であることを特徴とする。
- [0191] 本発明に好ましく用いられるオルトメタル錯体を下記に示す。
- [0192] [化54]



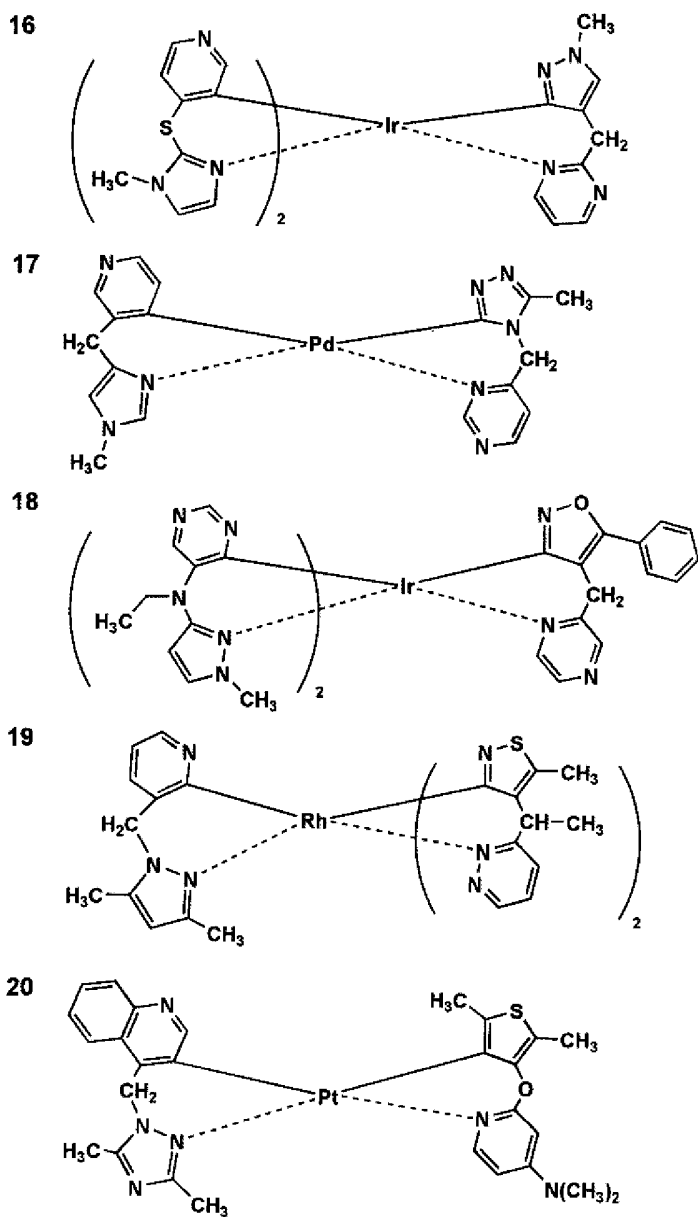
[0193] [化55]



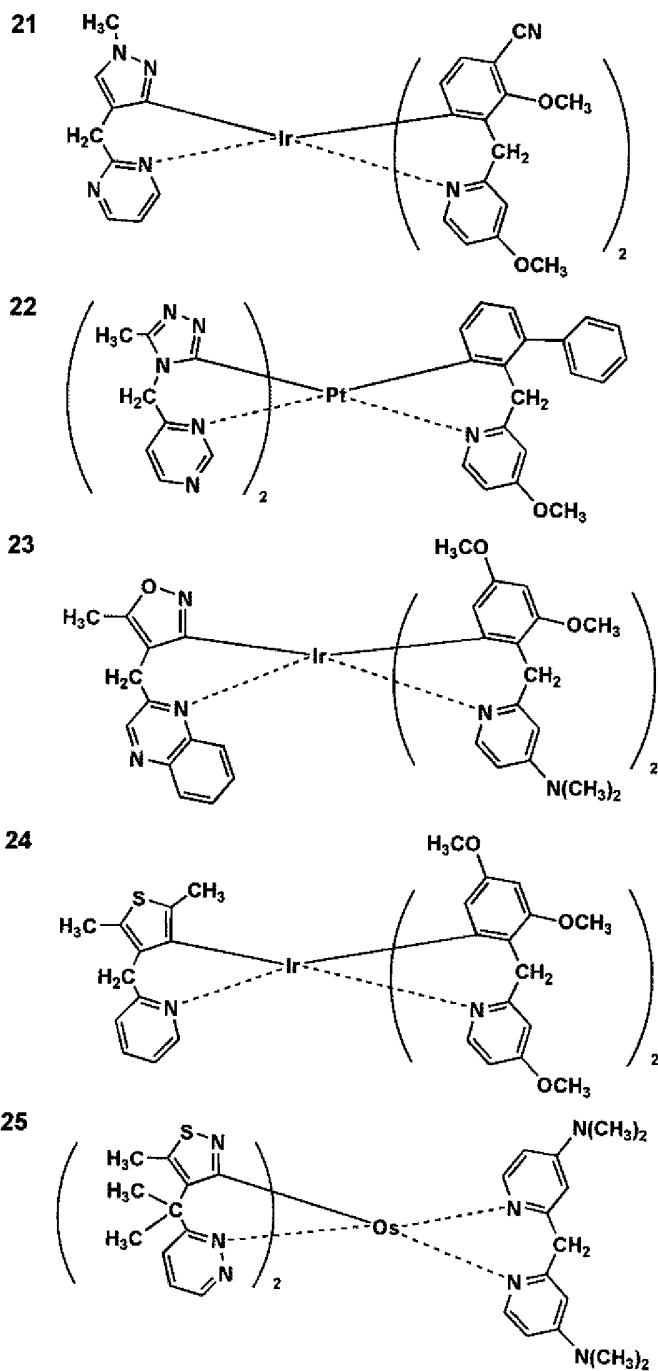
[0194] [化56]



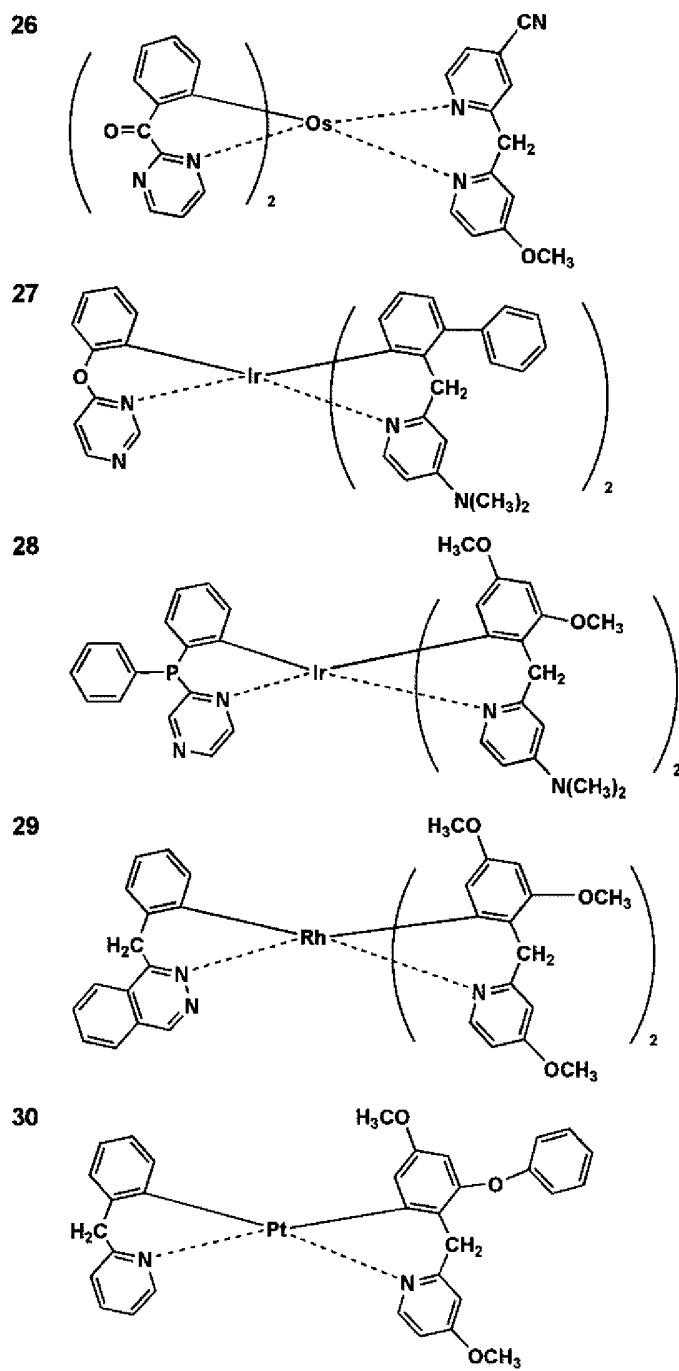
[0195] [化57]



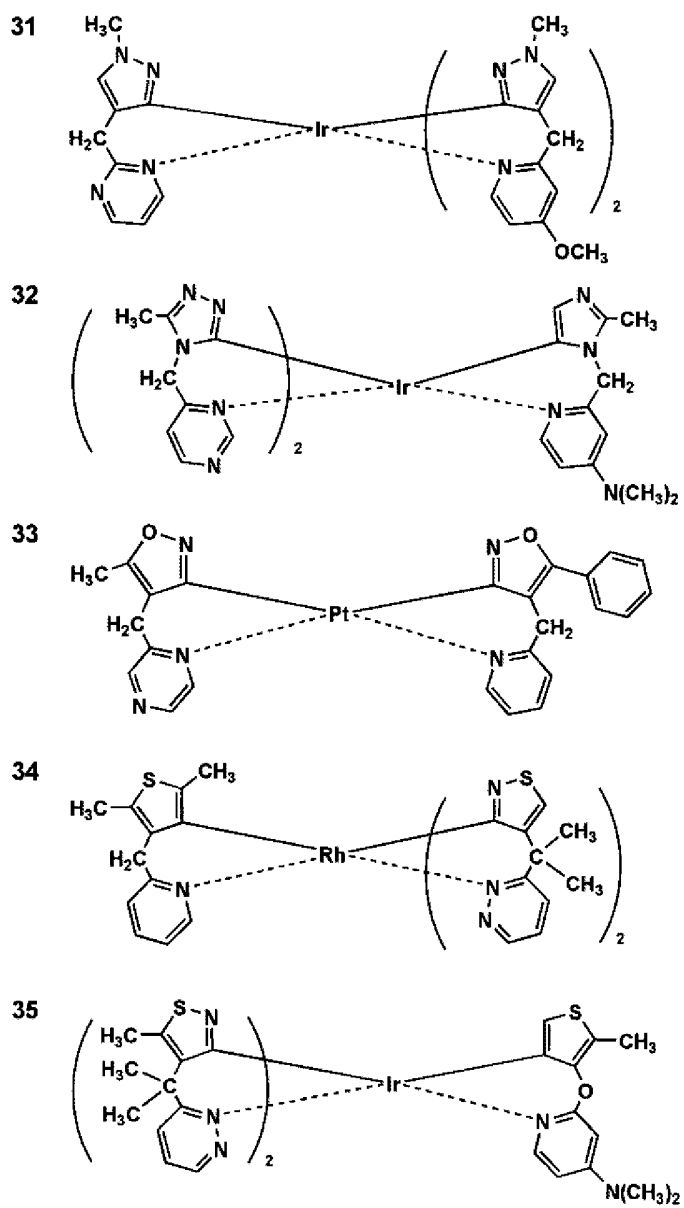
[0196] [化58]



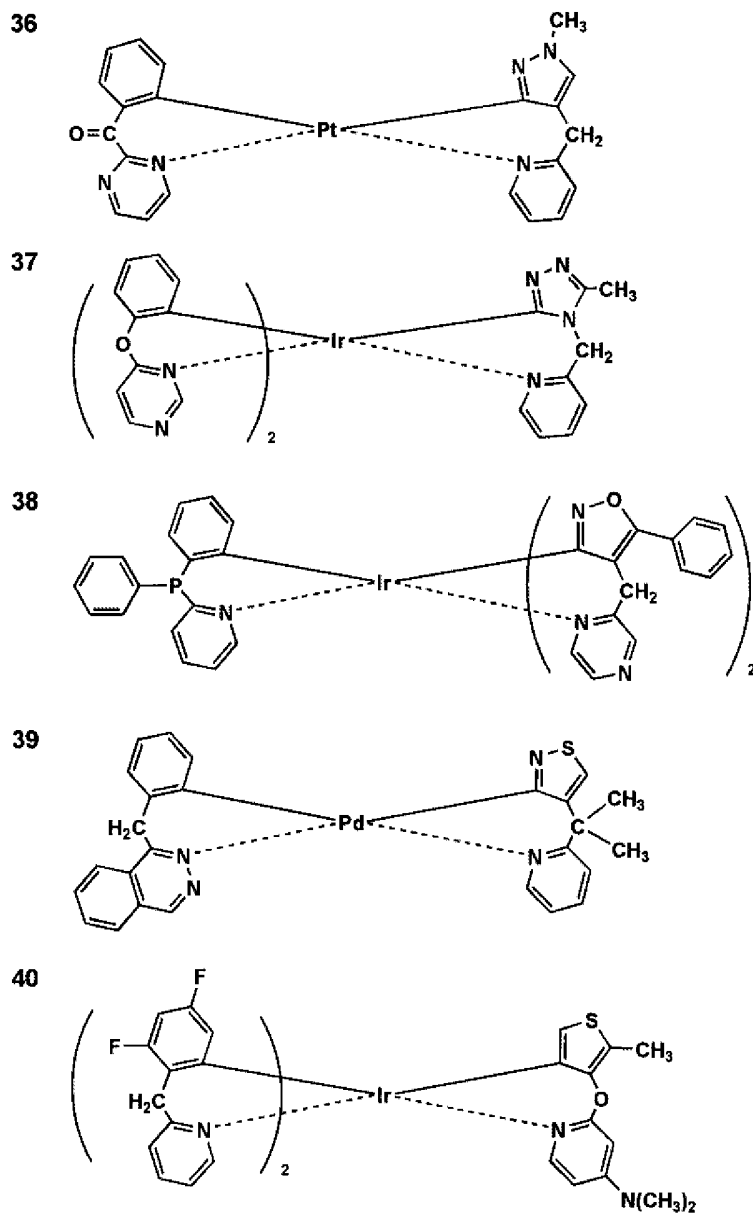
[0197] [化59]



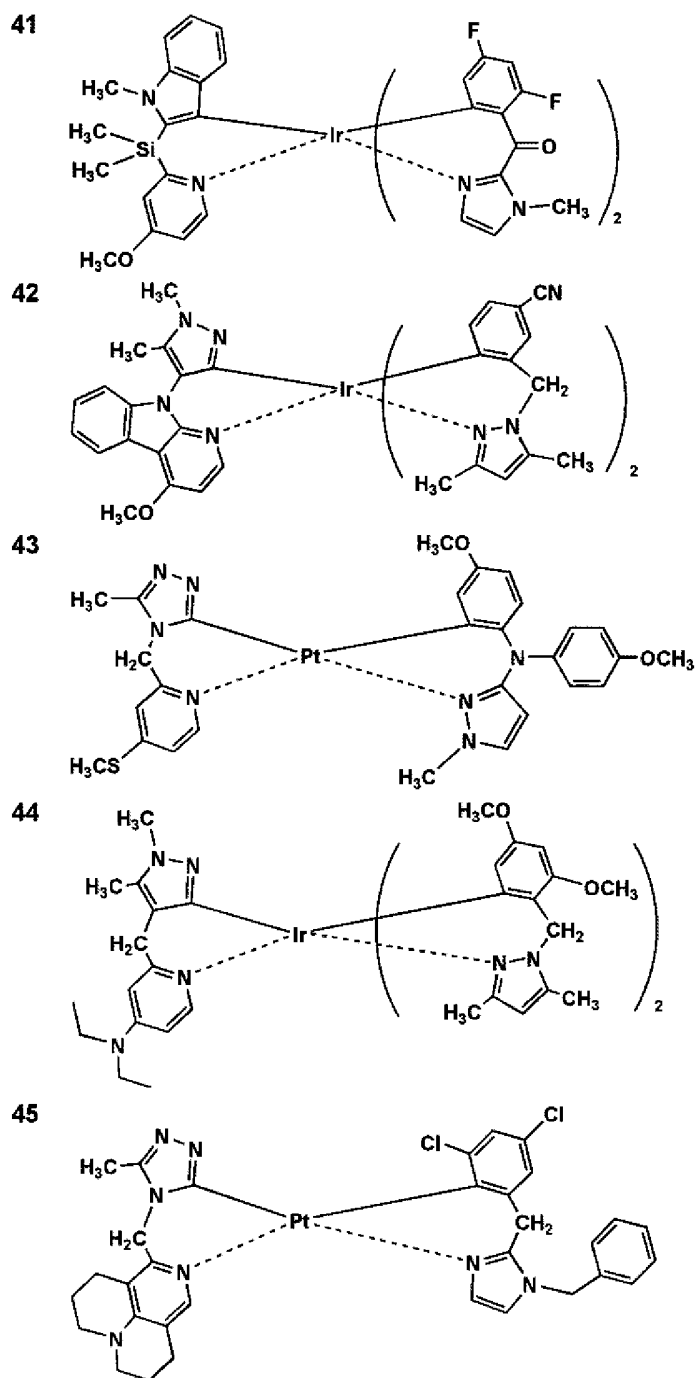
[0198] [化60]



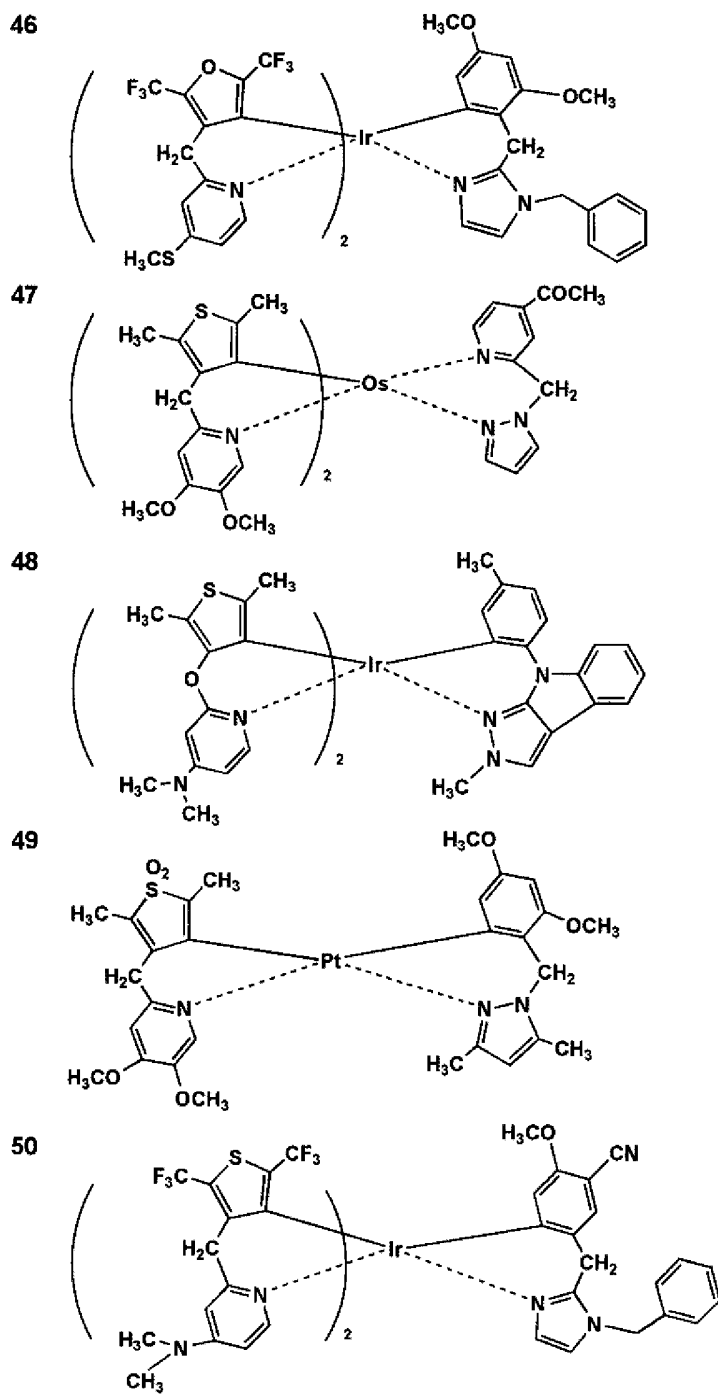
[0199] [化61]



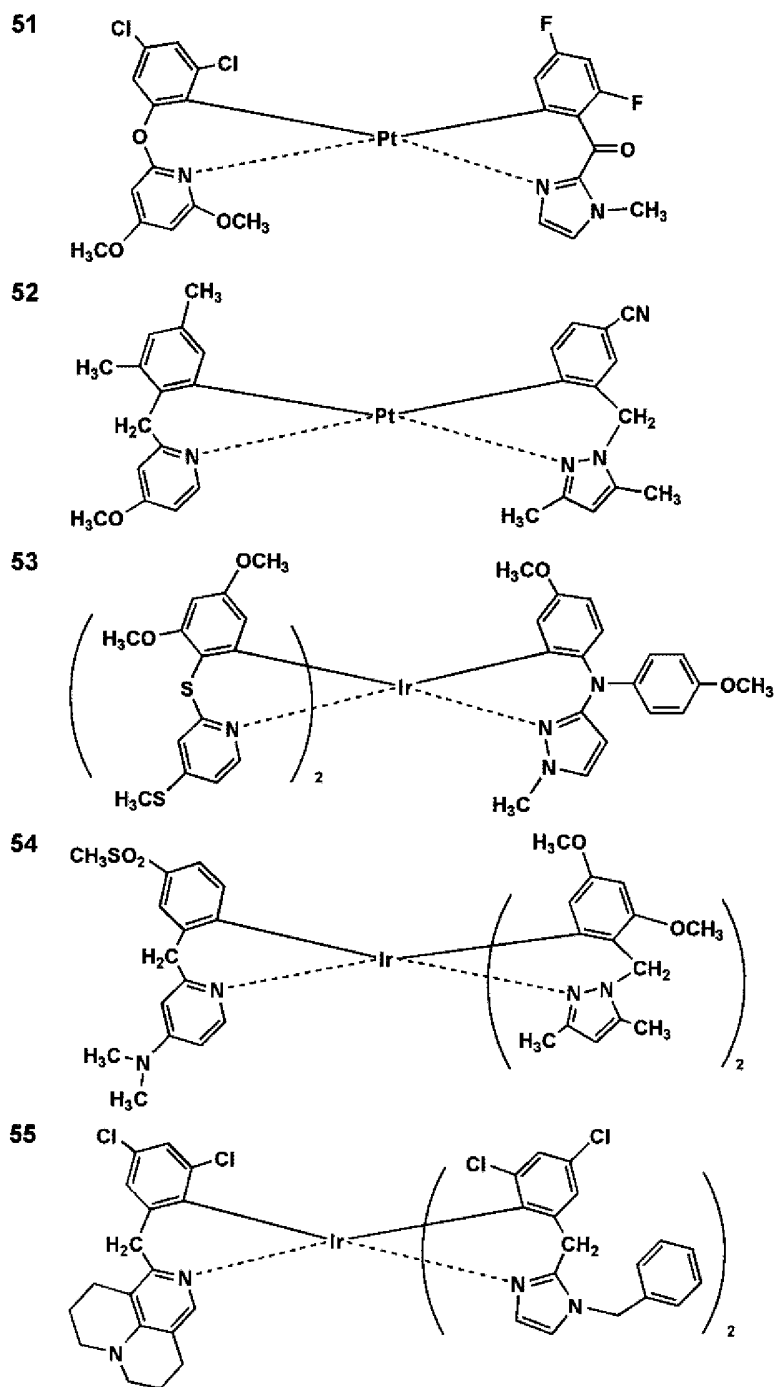
[0200] [化62]



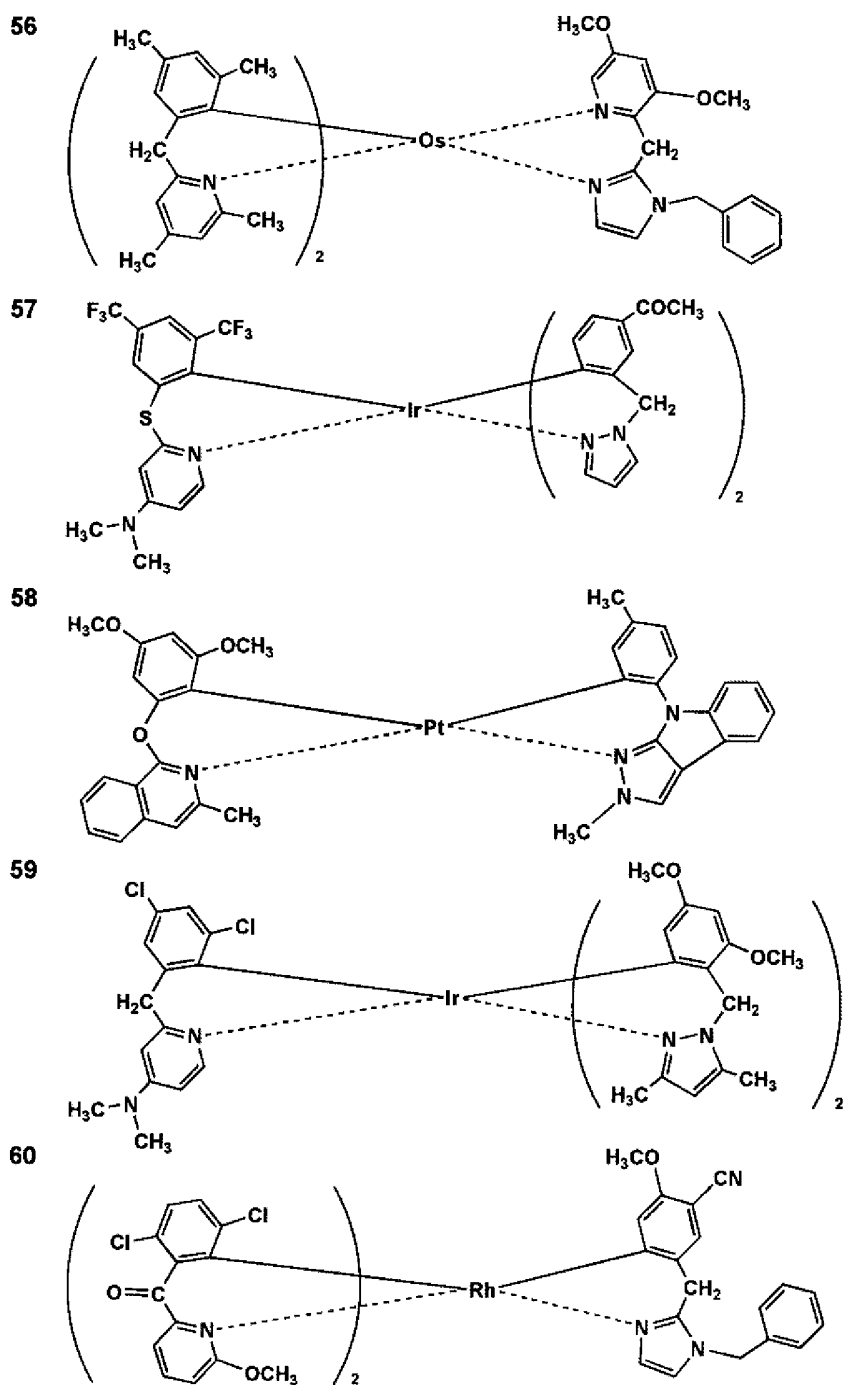
[0201] [163]



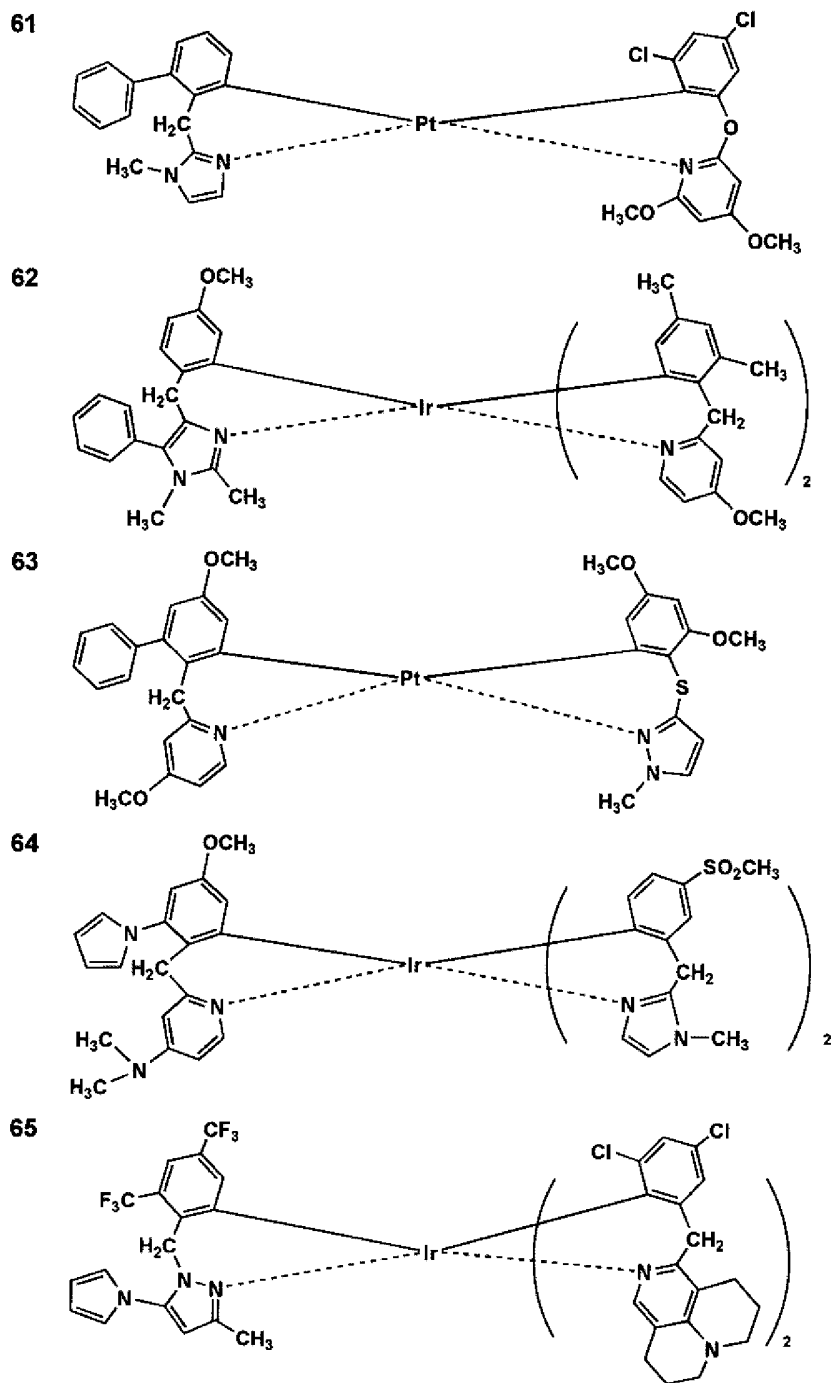
[0202] [化64]



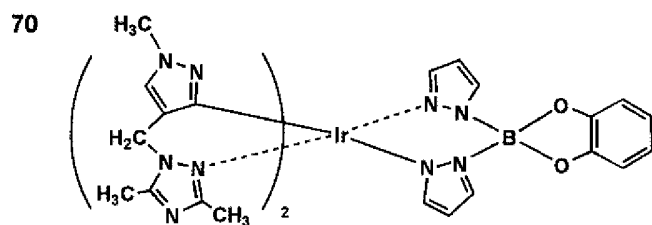
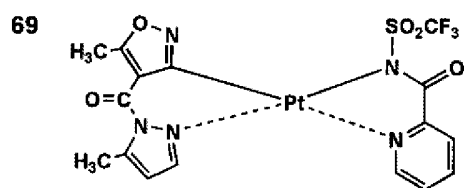
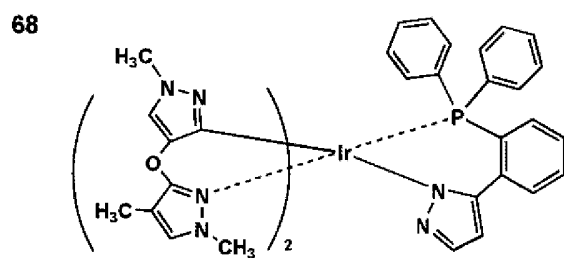
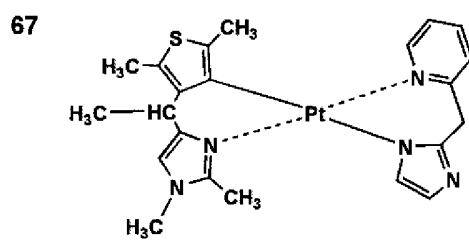
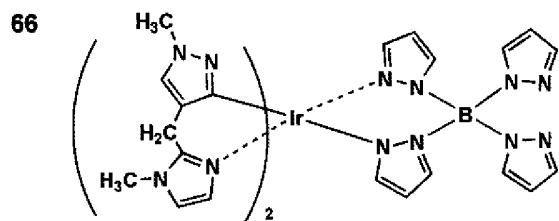
[0203] [化65]



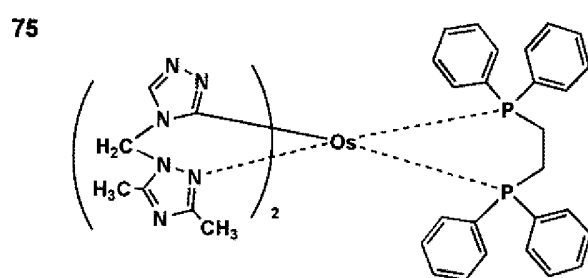
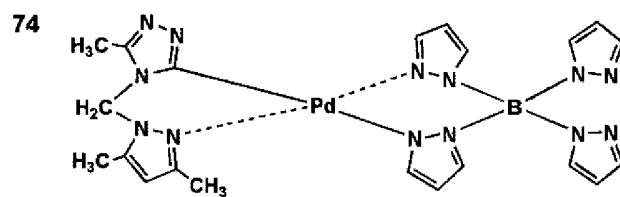
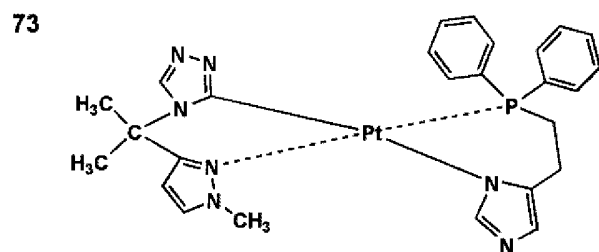
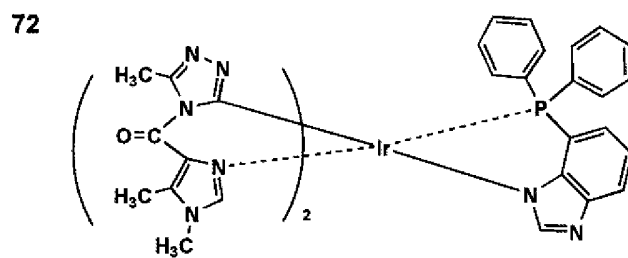
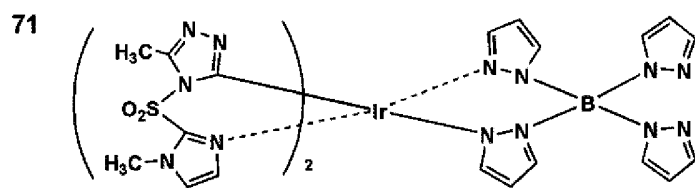
[0204] [化66]



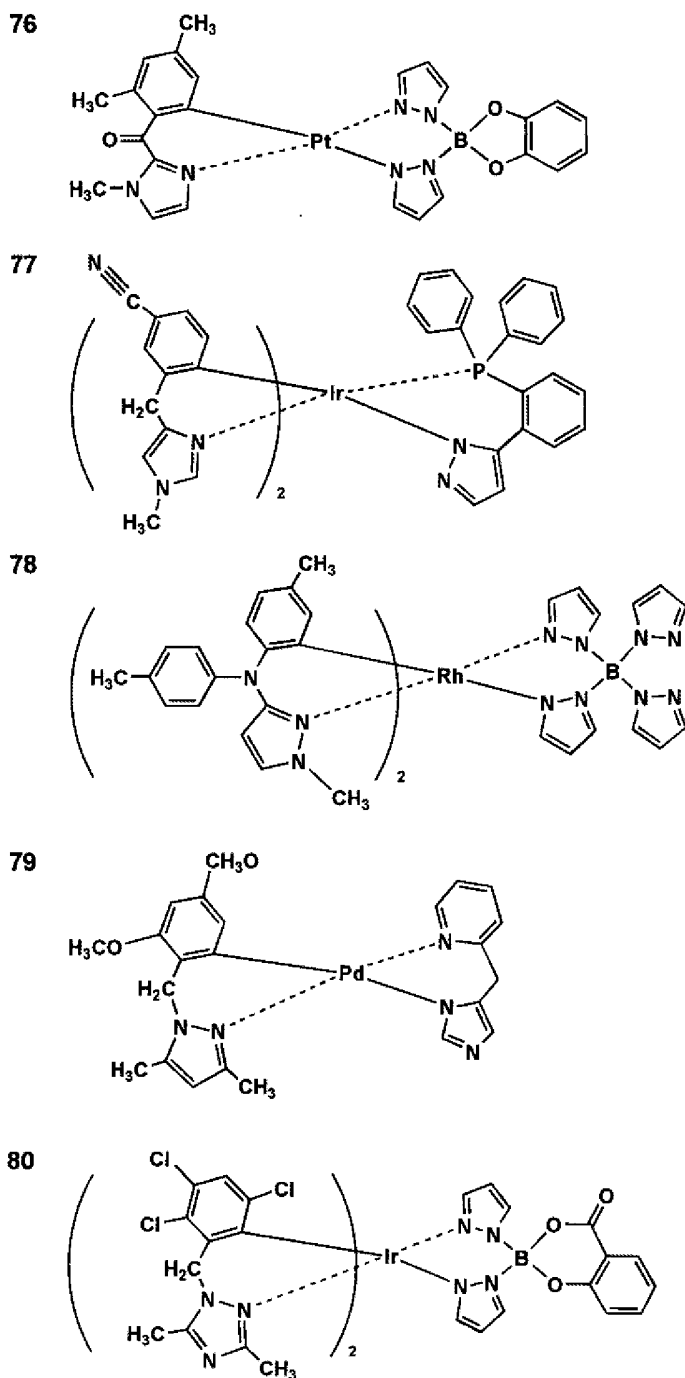
[0205] [化67]



[0206] [化68]

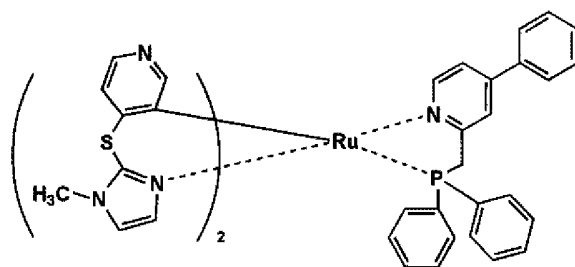


[0207] [化69]

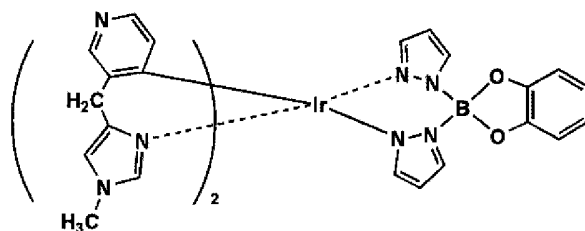


[0208] [化70]

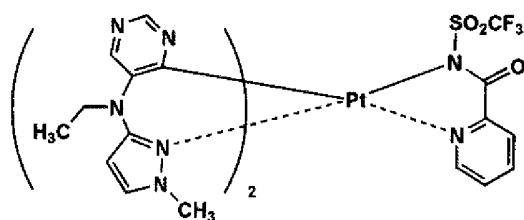
81



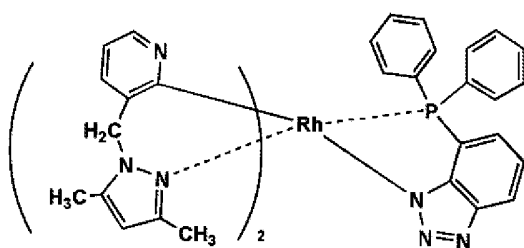
82



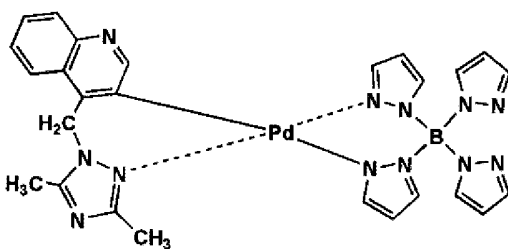
83



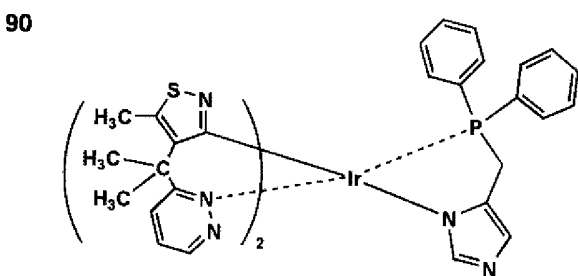
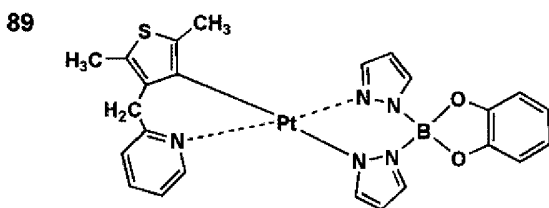
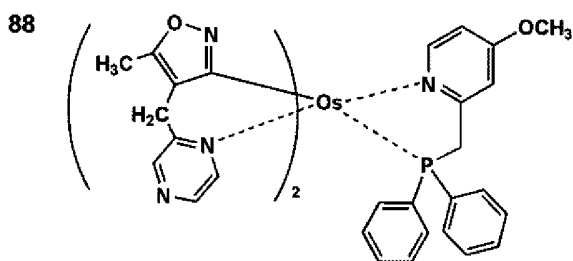
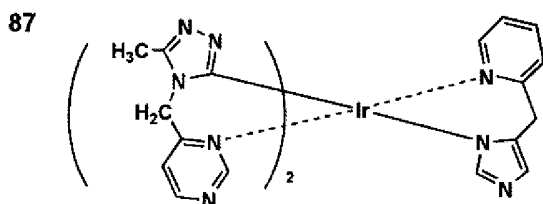
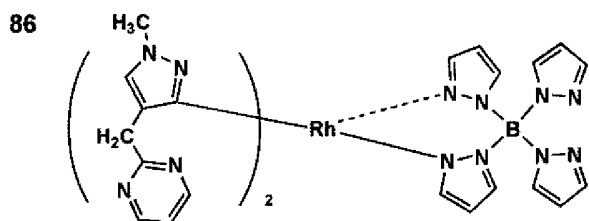
84



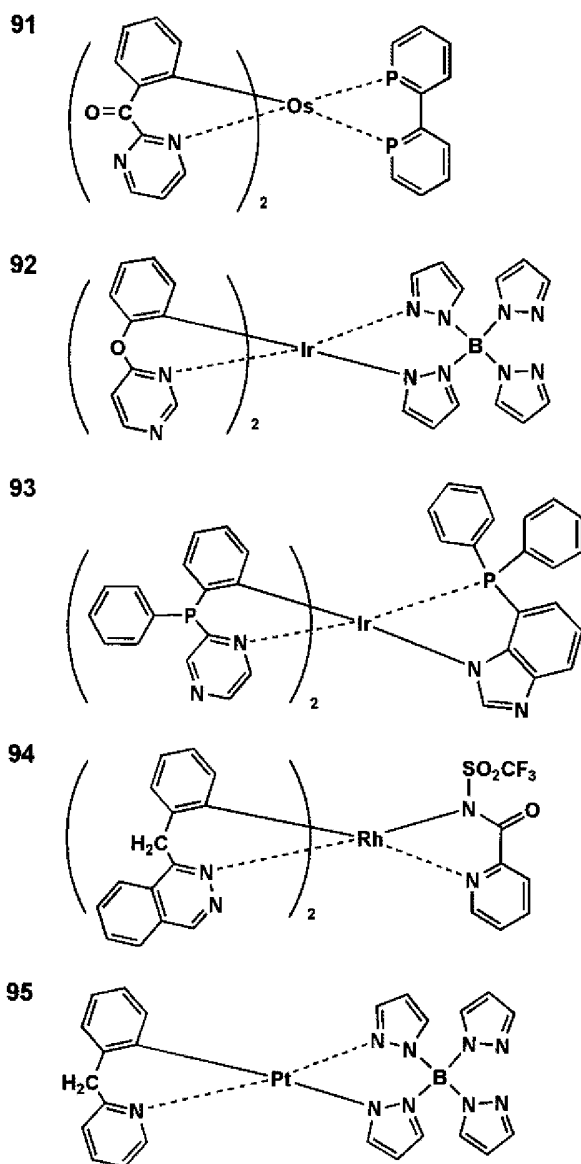
85



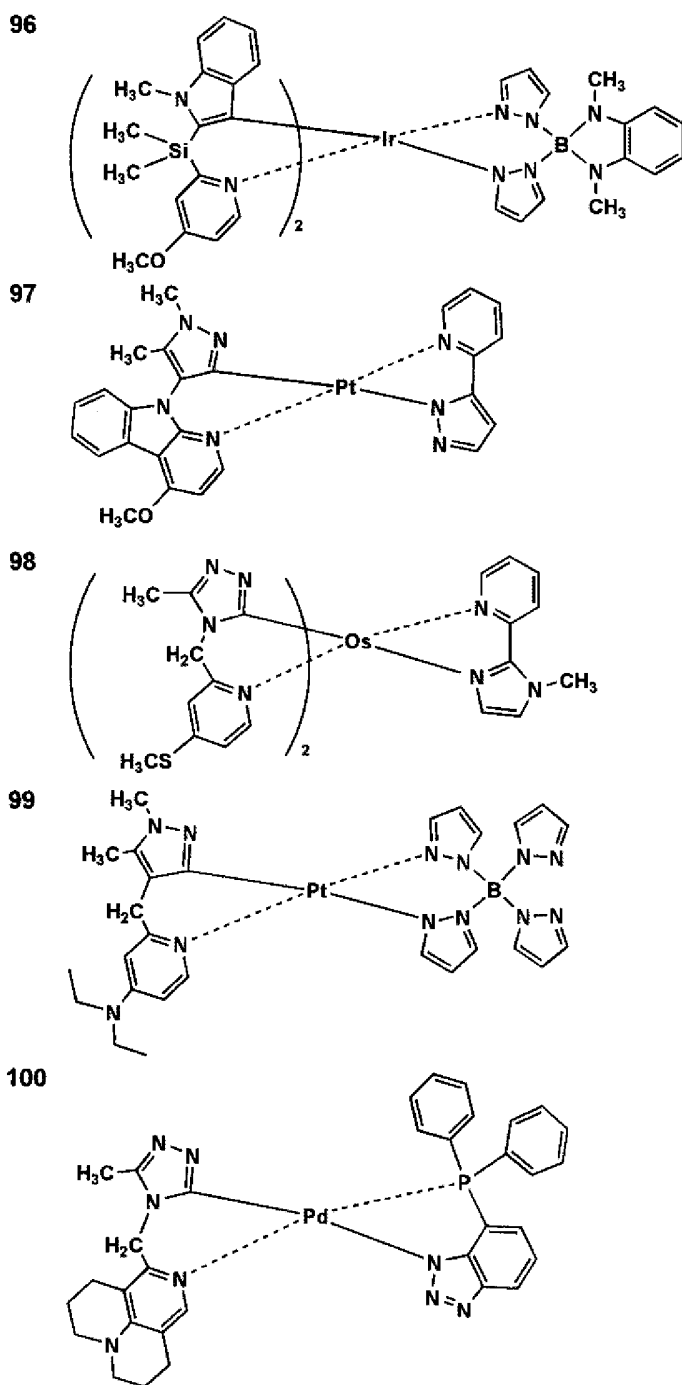
[0209] [化71]



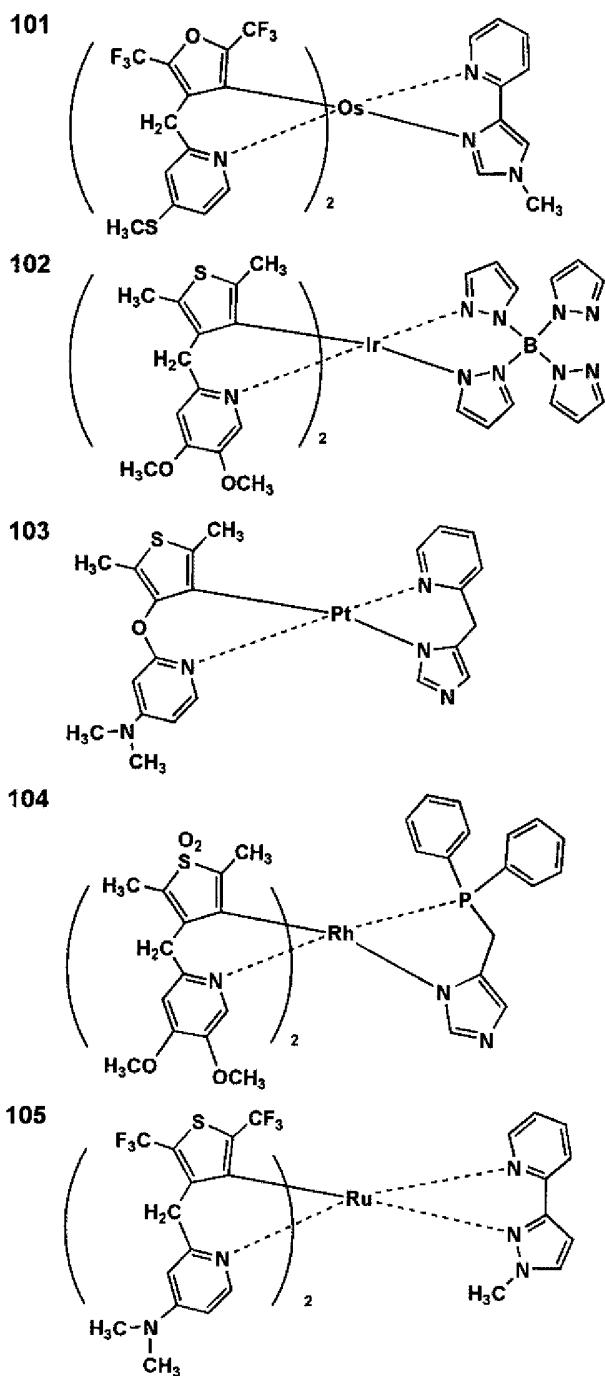
[0210] [化72]



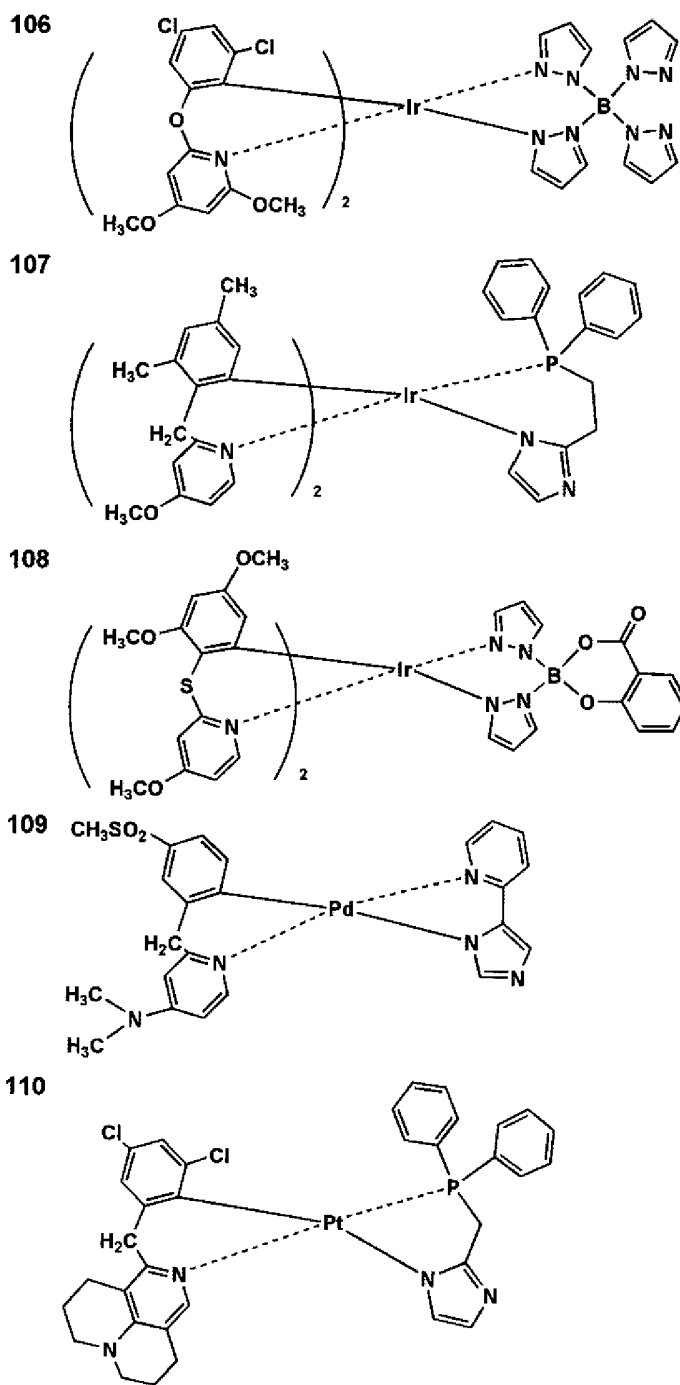
[0211] [化73]



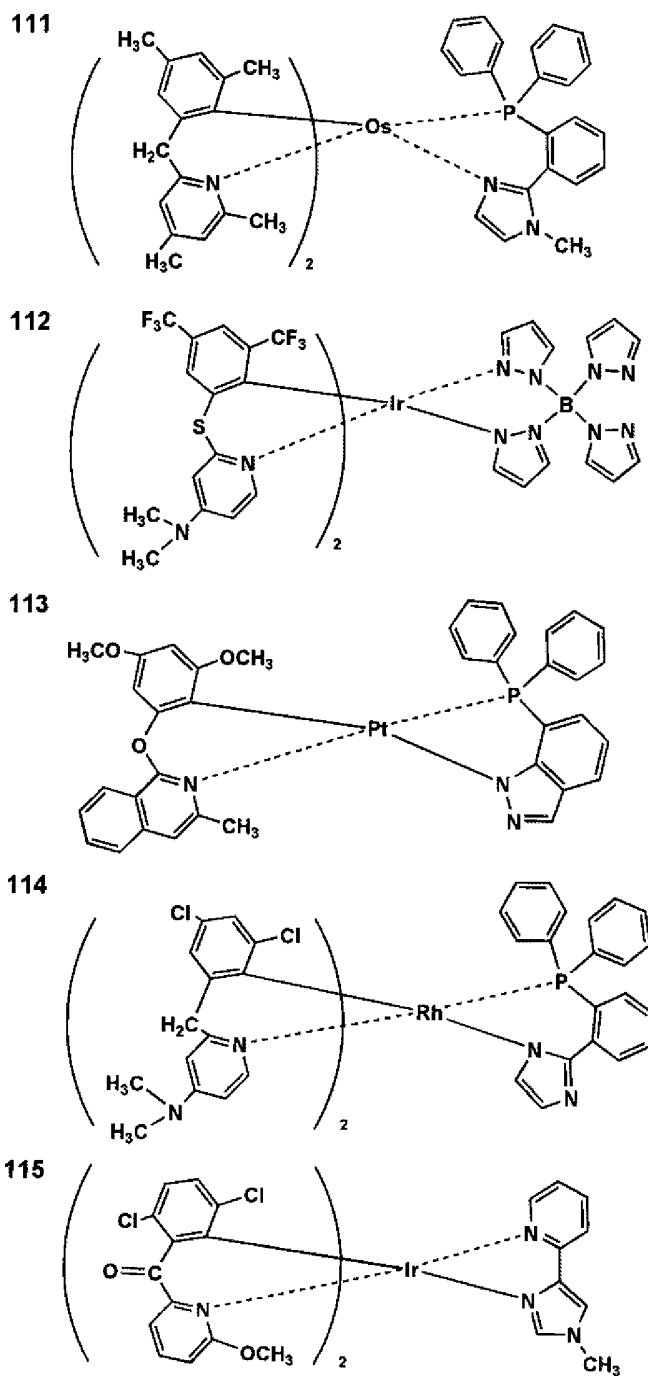
[0212] [化74]



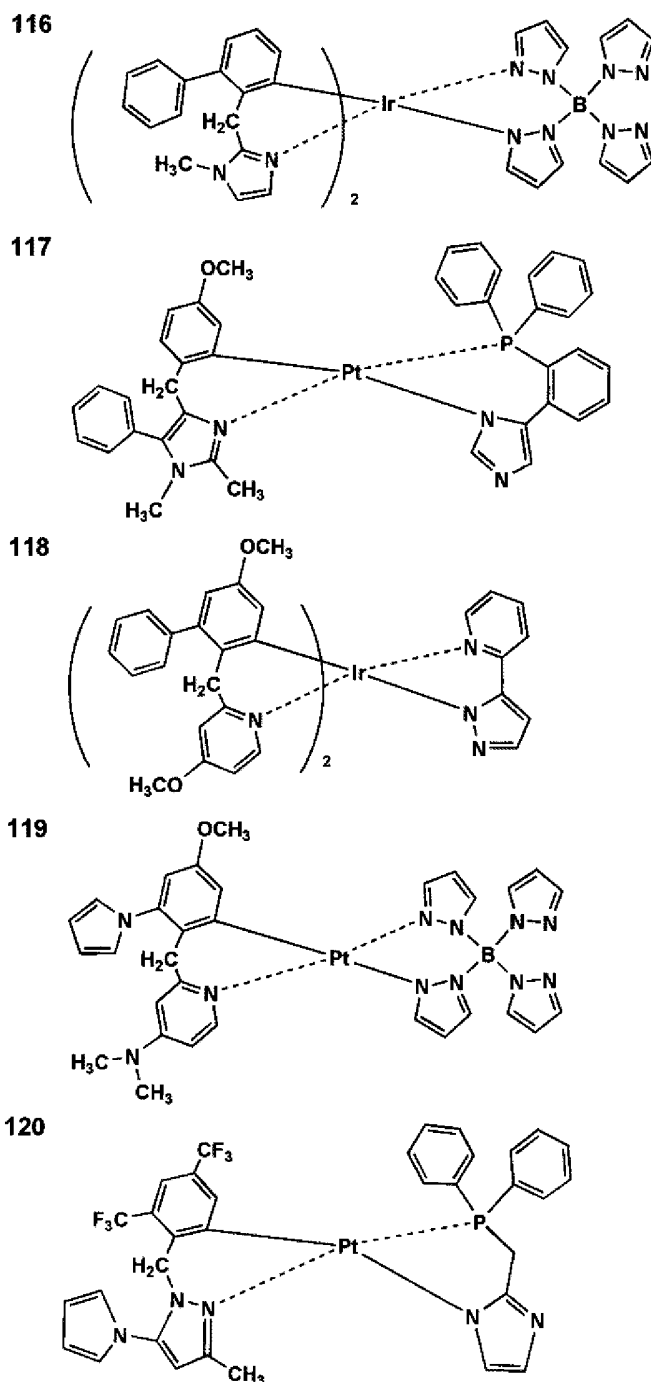
[0213] [175]



[0214] [化76]



[0215] [化77]



[0216] これらの化合物は、例えば、Organic Letter, vol13, No. 16, p2579~2581(2001)、Inorganic Chemistry, vol30, No. 8, p1685~1687(1991)、J. Am. Chem. Soc. , vol123, p4304(2001)、Inorganic Chemistry, vol41, No. 12, p13056~3066(2002)、New Journal of Chemistry, vol26, p1171(2002)、さらにこれらの文献中に記載の参考文献等の方法を適用することにより合成で

きる。

- [0217] 本発明においては、上記有機EL素子材料を、有機EL素子を構成するいずれかの構成層(有機層)に含有させ有機EL素子を作製する。
- [0218] 有機EL素子が構成層として発光層を有し、該発光層が上記有機EL素子材料を含有することが好ましい。発光層に含有する場合は、発光層中の発光ドーパントとして用いることにより、本発明の目的である有機EL素子の発光寿命の長寿命化を達成することができる。
- [0219] また、有機EL素子が構成層として正孔阻止層を有し、該正孔阻止層が上記有機EL素子材料を含有することが好ましい。
- [0220] 前記態様(18)の有機EL素子は、前記一般式(1A)で表される化合物を含有することを特徴とする。
- [0221] 式中、 Z_1 は芳香族複素環を表し、 Z_2 は芳香族複素環または芳香族炭化水素環を表し、 Z_3 は2価の連結基または単なる結合手を表す。 R_{101} は水素原子または置換基を表す。
- [0222] 前記一般式(1A)において、 Z_1 は置換基を有してもよい芳香族複素環を表し、 Z_2 は置換基を有してもよい芳香族複素環、もしくは芳香族炭化水素環を表し、 Z_3 は2価の連結基、もしくは単なる結合手を表す。 R_{101} は水素原子、もしくは置換基を表す。
- [0223] Z_1 、 Z_2 で表される芳香族複素環としては、フラン環、チオフェン環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、ベンゾイミダゾール環、オキサジアゾール環、トリアゾール環、イミダゾール環、ピラゾール環、チアゾール環、インドール環、ベンゾイミダゾール環、ベンゾチアゾール環、ベンゾオキサゾール環、キノキサリン環、キナゾリン環、フタラジン環、カルバゾール環、カルボリン環、ジアザカルバゾール環(カルボリン環を構成する炭化水素環の炭素原子の一つがさらに窒素原子で置換されている環を示す)等が挙げられる。さらに前記芳香族複素環は、後述する R_{101} で表される置換基を有してもよい。
- [0224] Z_2 で表される芳香族炭化水素環としては、ベンゼン環、ビフェニル環、ナフタレン環、アズレン環、アントラセン環、フェナントレン環、ピレン環、クリセン環、ナフタセン環、トリフェニレン環、o-テルフェニル環、m-テルフェニル環、p-テルフェニル環、ア

セナフテン環、コロネン環、フルオレン環、フルオラントレン環、ナフタセン環、ペンタセン環、ペリレン環、ペンタフェン環、ピセン環、ピレン環、ピラントレン環、アンスラアントレン環等が挙げられる。さらに前記芳香族炭化水素環は、後述するR₁₀₁で表される置換基を有してもよい。

[0225] R₁₀₁で表される置換基としては、アルキル基(例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、tert-ブチル基、ペンチル基、ヘキシル基、オクチル基、ドデシル基、トリデシル基、テトラデシル基、ペンタデシル基等)、シクロアルキル基(例えば、シクロペンチル基、シクロヘキシル基等)、アルケニル基(例えば、ビニル基、アリル基等)、アルキニル基(例えば、エチニル基、プロパルギル基等)、アリール基(例えば、フェニル基、ナフチル基等)、芳香族複素環基(例えば、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、ピラゾリル基、チアゾリル基、キナゾリニル基、フタラジニル基等)、複素環基(例えば、ピロリジル基、イミダゾリジル基、モルホルル基、オキサゾリジル基等)、アルコキシル基(例えば、メキシ基、エトキシ基、プロピルオキシ基、ペンチルオキシ基、ヘキシルオキシ基、オクチルオキシ基、ドデシルオキシ基等)、シクロアルコキシル基(例えば、シクロペンチルオキシ基、シクロヘキシルオキシ基等)、アリールオキシ基(例えば、フェノキシ基、ナフチルオキシ基等)、アルキルチオ基(例えば、メチルチオ基、エチルチオ基、プロピルチオ基、ペンチルチオ基、ヘキシルチオ基、オクチルチオ基、ドデシルチオ基等)、シクロアルキルチオ基(例えば、シクロペンチルチオ基、シクロヘキシルチオ基等)、アリールチオ基(例えば、フェニルチオ基、ナフチルチオ基等)、アルコキシカルボニル基(例えば、メチルオキシカルボニル基、エチルオキシカルボニル基、ブチルオキシカルボニル基、オクチルオキシカルボニル基、ドデシルオキシカルボニル基等)、アリールオキシカルボニル基(例えば、フェニルオキシカルボニル基、ナフチルオキシカルボニル基等)、スルファモイル基(例えば、アミノスルホニル基、メチルアミノスルホニル基、ジメチルアミノスルホニル基、ブチルアミノスルホニル基、ヘキシルアミノスルホニル基、シクロヘキシルアミノスルホニル基、オクチルアミノスルホニル基、ドデシルアミノスルホニル基、フェニルアミノスルホニル基、ナフチルアミノスルホニル基、2-ピリジリアミノスルホニル基等)、アシル基(例えば、アセチル基

、エチルカルボニル基、プロピルカルボニル基、ペンチルカルボニル基、シクロヘキシルカルボニル基、オクチルカルボニル基、2-エチルヘキシルカルボニル基、ドデシルカルボニル基、フェニルカルボニル基、ナフチルカルボニル基、ピリジルカルボニル基等)、アシルオキシ基(例えば、アセチルオキシ基、エチルカルボニルオキシ基、ブチルカルボニルオキシ基、オクチルカルボニルオキシ基、ドデシルカルボニルオキシ基、フェニルカルボニルオキシ基等)、アミド基(例えば、メチルカルボニルアミノ基、エチルカルボニルアミノ基、ジメチルカルボニルアミノ基、プロピルカルボニルアミノ基、ペンチルカルボニルアミノ基、シクロヘキシルカルボニルアミノ基、2-エチルヘキシルカルボニルアミノ基、オクチルカルボニルアミノ基、ドデシルカルボニルアミノ基、フェニルカルボニルアミノ基、ナフチルカルボニルアミノ基等)、カルバモイル基(例えば、アミノカルボニル基、メチルアミノカルボニル基、ジメチルアミノカルボニル基、プロピルアミノカルボニル基、ペンチルアミノカルボニル基、シクロヘキシルアミノカルボニル基、オクチルアミノカルボニル基、2-エチルヘキシルアミノカルボニル基、ドデシルアミノカルボニル基、フェニルアミノカルボニル基、ナフチルアミノカルボニル基、2-ピリジルアミノカルボニル基等)、ウレイド基(例えば、メチルウレイド基、エチルウレイド基、ペンチルウレイド基、シクロヘキシルウレイド基、オクチルウレイド基、ドデシルウレイド基、フェニルウレイド基、ナフチルウレイド基、2-ピリジルアミノウレイド基等)、スルフィニル基(例えば、メチルスルフィニル基、エチルスルフィニル基、ブチルスルフィニル基、シクロヘキシルスルフィニル基、2-エチルヘキシルスルフィニル基、ドデシルスルフィニル基、フェニルスルフィニル基、ナフチルスルフィニル基、2-ピリジルスルフィニル基等)、アルキルスルホニル基(例えば、メチルスルホニル基、エチルスルホニル基、ブチルスルホニル基、シクロヘキシルスルホニル基、2-エチルヘキシルスルホニル基、ドデシルスルホニル基等)、アリールスルホニル基(フェニルスルホニル基、ナフチルスルホニル基、2-ピリジルスルホニル基等)、アミノ基(例えば、アミノ基、エチルアミノ基、ジメチルアミノ基、ブチルアミノ基、シクロペンチルアミノ基、2-エチルヘキシルアミノ基、ドデシルアミノ基、アニリノ基、ナフチルアミノ基、2-ピリジルアミノ基等)、ハロゲン原子(例えば、フッ素原子、塩素原子、臭素原子等)、フッ化炭化水素基(例えば、フルオロメチル基、トリフルオロメチル基、ペンタフルオ

ロエチル基、ペンタフルオロフェニル基等)、シアノ基、ニトロ基、ヒドロキシル基、メルカプト基、シリル基(例えば、トリメチルシリル基、トリイソプロピルシリル基、トリフェニルシリル基、フェニルジエチルシリル基等)、等が挙げられる。

[0226] これらの置換基は上記の置換基によってさらに置換されていてもよい。また、これらの置換基は複数が互いに結合して環を形成していてもよい。好ましい置換基としては、アルキル基、シクロアルキル基、フッ化炭化水素基、アリール基、芳香族複素環基である。

[0227] Z_3 で表される2価の連結基としては、アルキレン、アルケニレン、アルキニレン、アリーレン等の炭化水素基の他、ヘテロ原子を含むものであってもよく、またチオフェン-2, 5-ジイル基やピラジン-2, 3-ジイル基のような芳香族複素環を有する化合物(ヘテロ芳香族化合物ともいう)に由来する2価の連結基であつてもよいし、酸素や硫黄等のカルコゲン原子であつてもよい。また、アルキルイミノ基、ジアルキルシランジイル基やジアリールゲルマンジイル基のようなヘテロ原子を会して連結する基でもよい。

[0228] 単なる結合手とは、連結する置換基同士を直接結合する結合手である。

[0229] 本発明においては、前記一般式(1A)の Z_1 が6員環であることが好ましい。これにより、より発光効率を高くすることができる。さらに一層長寿命化させることができる。また、本発明においては、 Z_2 が6員環であることが好ましい。これにより、より発光効率を高くすることができる。さらにより一層長寿命化させることができる。さらに Z_1 と Z_2 を共に6員環とすることで、より一層発光効率と高くすることができるので好ましい。さらにより一層長寿命化させることができるので好ましい。また、 Z_3 は結合手であることが好ましい。これによりより発光効率を高くことができ、一層長寿命化させることができる。更に一般式(1A)で表される化合物は分子量が450以上であることが好ましく、これにより発光効率を高くことができ、長寿命化することができる。

[0230] 前記一般式(1A)で表される化合物で好ましいのは、前記一般式(1A-1)~(1A-10)で各々表される化合物である。

[0231] 前記一般式(1A-1)において、 $R_{501} \sim R_{507}$ は各々独立に水素原子もしくは置換基を表す。一般式(1A-1)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有

機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。

[0232] 前記一般式(1A-2)において、 $R_{511} \sim R_{517}$ は各々独立に水素原子もしくは置換基を表す。一般式(1A-2)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。

[0233] 前記一般式(1A-3)において、 $R_{521} \sim R_{527}$ は各々独立に水素原子もしくは置換基を表す。一般式(1A-3)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。

[0234] 前記一般式(1A-4)において、 $R_{531} \sim R_{537}$ は各々独立に水素原子もしくは置換基を表す。一般式(1A-4)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。

[0235] 前記一般式(1A-5)において、 $R_{541} \sim R_{548}$ は各々独立に水素原子もしくは置換基を表す。一般式(1A-5)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。

[0236] 前記一般式(1A-6)において、 $R_{551} \sim R_{558}$ は各々独立に水素原子もしくは置換基を表す。一般式(1A-6)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。

[0237] 前記一般式(1A-7)において、 $R_{561} \sim R_{567}$ は各々独立に水素原子もしくは置換基を表す。一般式(1A-7)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。

[0238] 前記一般式(1A-8)において、 $R_{571} \sim R_{577}$ は各々独立に水素原子もしくは置換基を表す。一般式(1A-8)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。

[0239] 前記一般式(1A-9)において、Rは水素原子もしくは置換基を表す。また、複数のRは各々同一でもよく、異なってもよい。一般式(1A-9)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。

[0240] 前記一般式(1A-10)において、Rは水素原子もしくは置換基を表す。また、複数のRは各々同一でもよく、異なってもよい。一般式(1A-10)で表される化合物

を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらに長寿命の有機EL素子とすることができる。

- [0241] また、前記一般式(1A)で表される化合物で好ましいものは、前記一般式(2A-1)～(2A-10)のいずれかで表される基を少なくとも一つを有する化合物である。特に、分子内に前記一般式(2A-1)～(2A-10)のいずれかで表される基を2つから4つ有することがより好ましい。このとき、前記一般式(1A)で表される構造において、 R_{101} を除いた部分が前記一般式(2A-1)～(2A-10)に置き換わる場合を含む。
- [0242] このとき、特に前記一般式(3A)～(17A)で表される化合物であることが本発明の効果を得る上で好ましい。
- [0243] 前記一般式(3A)において、 $R_{601} \sim R_{606}$ は水素原子もしくは置換基を表すが、 $R_{601} \sim R_{606}$ の少なくとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)のいずれかで表される基を表す。一般式(3A)で表される化合物を用いることにより、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。
- [0244] 前記一般式(4A)において、 $R_{611} \sim R_{620}$ は水素原子もしくは置換基を表すが、 $R_{611} \sim R_{620}$ の少なくとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)のいずれかで表される基を表す。一般式(4A)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。
- [0245] 前記一般式(5A)において、 $R_{621} \sim R_{623}$ は水素原子もしくは置換基を表すが、 $R_{621} \sim R_{623}$ の少なくとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)のいずれかで表される基を表す。一般式(5A)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。
- [0246] 前記一般式(6A)において、 $R_{631} \sim R_{645}$ は水素原子もしくは置換基を表すが、 $R_{631} \sim R_{645}$ の少なくとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)のいずれかで表される基を表す。一般式(6A)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。
- [0247] 前記一般式(7A)において、 $R_{651} \sim R_{656}$ は水素原子もしくは置換基を表すが、 $R_{651} \sim R_{656}$ の少なくとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)のいずれかで表される基を表す。naは0～5の整数を表し、nbは1～6の整数を表すが、naとnbの和が6であ

る。一般式(7A)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。

[0248] 前記一般式(8A)において、 $R_{661} \sim R_{672}$ は水素原子もしくは置換基を表すが、 $R_{661} \sim R_{672}$ の少なくとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)のいずれかで表される基を表す。一般式(8A)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。

[0249] 前記一般式(9A)において、 $R_{681} \sim R_{688}$ は水素原子もしくは置換基を表すが、 $R_{681} \sim R_{688}$ の少なくとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)のいずれかで表される基を表す。一般式(9A)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。

[0250] 前記一般式(10A)において、 $R_{691} \sim R_{700}$ は水素原子もしくは置換基を表すが、 $R_{691} \sim R_{700}$ の少なくとも一つは前記一般式(2A-1)～(2A-10)のいずれかで表される基を表す。

[0251] L_1 で表される2価の連結基としては、アルキレン基(例えば、エチレン基、トリメチレン基、テトラメチレン基、プロピレン基、エチルエチレン基、ペンタメチレン基、ヘキサメチレン基、2, 2, 4-トリメチルヘキサメチレン基、ヘプタメチレン基、オクタメチレン基、ノナメチレン基、デカメチレン基、ウンデカメチレン基、ドデカメチレン基、シクロヘキシレン基(例えば、1, 6-シクロヘキサンジイル基等)、シクロペンチレン基(例えば、1, 5-シクロペンタンジイル基等)等)、アルケニレン基(例えば、ビニレン基、プロペニレン基等)、アルキニレン基(例えば、エチニレン基、3-ペンチニレン基等)、アリーレン基等の炭化水素基の他、ヘテロ原子を含む基(例えば、-O-、-S-等のカルコゲン原子を含む2価の基、-N(R)-基、ここでRは水素原子またはアルキル基を表し、該アルキル基は、前記一般式(1A)において R_{101} で表されるアルキル基と同義である)等が挙げられる。また、上記のアルキレン基、アルケニレン基、アルキニレン基、アリーレン基の各々においては、2価の連結基を構成する炭素原子の少なくとも一つが、カルコゲン原子(酸素、硫黄等)や前記-N(R)-基等で置換されていてもよい。

[0252] さらに L_1 で表される2価の連結基としては、例えば、2価の複素環基を有する基が用

いられ、例えば、オキサゾールジイル基、ピリミジンジイル基、ピリダジンジイル基、ピランジイル基、ピロリンジイル基、イミダゾリンジイル基、イミダゾリジンジイル基、ピラゾリジンジイル基、ピラゾリンジイル基、ピペリジンジイル基、ピペラジンジイル基、モルホリンジイル基、キヌクリジンジイル基等が挙げられ、またチオフェン-2, 5-ジイル基や、ピラジン-2, 3-ジイル基のような、芳香族複素環を有する化合物(ヘテロ芳香族化合物ともいう)に由来する2価の連結基であってもよい。また、アルキルイミノ基、ジアルキルシランジイル基やジアリールゲルマンジイル基のようなヘテロ原子を会して連結する基であってもよい。

- [0253] 前記一般式(10A)で表される化合物を用いることで、より発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより長寿命の有機EL素子とすることができる。
- [0254] 前記一般式(11A)～一般式(15A)で各々表される化合物において、 R_1 、 R_2 で各々表される置換基としては、前記一般式(1A)において R_{101} で表される置換基と同義である。
- [0255] 前記一般式(15A)において、 Z_1 、 Z_2 、 Z_3 、 Z_4 で各々表される、各々窒素原子を少なくとも一つ含む6員の芳香族複素環としては、例えば、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環等が挙げられる。
- [0256] 前記一般式(16A)において、 Z_1 、 Z_2 で各々表される、各々窒素原子を少なくとも一つ含む6員の芳香族複素環としては、例えば、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環等が挙げられる。
- [0257] Ar_1 、 Ar_2 で各々表されるアリーレン基としては、o-フェニレン基、m-フェニレン基、p-フェニレン基、ナフタレンジイル基、アントラセンジイル基、ナフタセンジイル基、ピレンジイル基、ナフチルナフタレンジイル基、ビフェニルジイル基(例えば、3, 3'-ビフェニルジイル基、3, 6-ビフェニルジイル基等)、テルフェニルジイル基、クアテルフェニルジイル基、キンクフェニルジイル基、セキシフェニルジイル基、セプチフェニルジイル基、オクチフェニルジイル基、ノビフェニルジイル基、デシフェニルジイル基等が挙げられる。また前記アリーレン基は、さらに後述する置換基を有してもよい。 Ar_1 、 Ar_2 で各々表される2価の芳香族複素環基は、フラン環、チオフェン環、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環、トリアジン環、ベンゾイミダゾール

環、オキサジアゾール環、トリアゾール環、イミダゾール環、ピラゾール環、チアゾール環、インドール環、ベンゾイミダゾール環、ベンゾチアゾール環、ベンゾオキサゾール環、キノキサリン環、キナゾリン環、フタラジン環、カルバゾール環、カルボリン環、カルボリン環を構成する炭化水素環の炭素原子がさらに窒素原子で置換されている環等から導出される2価の基等が挙げられる。さらに前記芳香族複素環基は、前記R₁₀₁で表される置換基を有してもよい。

[0258] Lで表される2価の連結基としては、前記一般式(10A)において、L₁で表される2価の連結基と同義であるが、好ましくはアルキレン基、-O-、-S-等のカルコゲン原子を含む2価の基であり、最も好ましくはアルキレン基である。

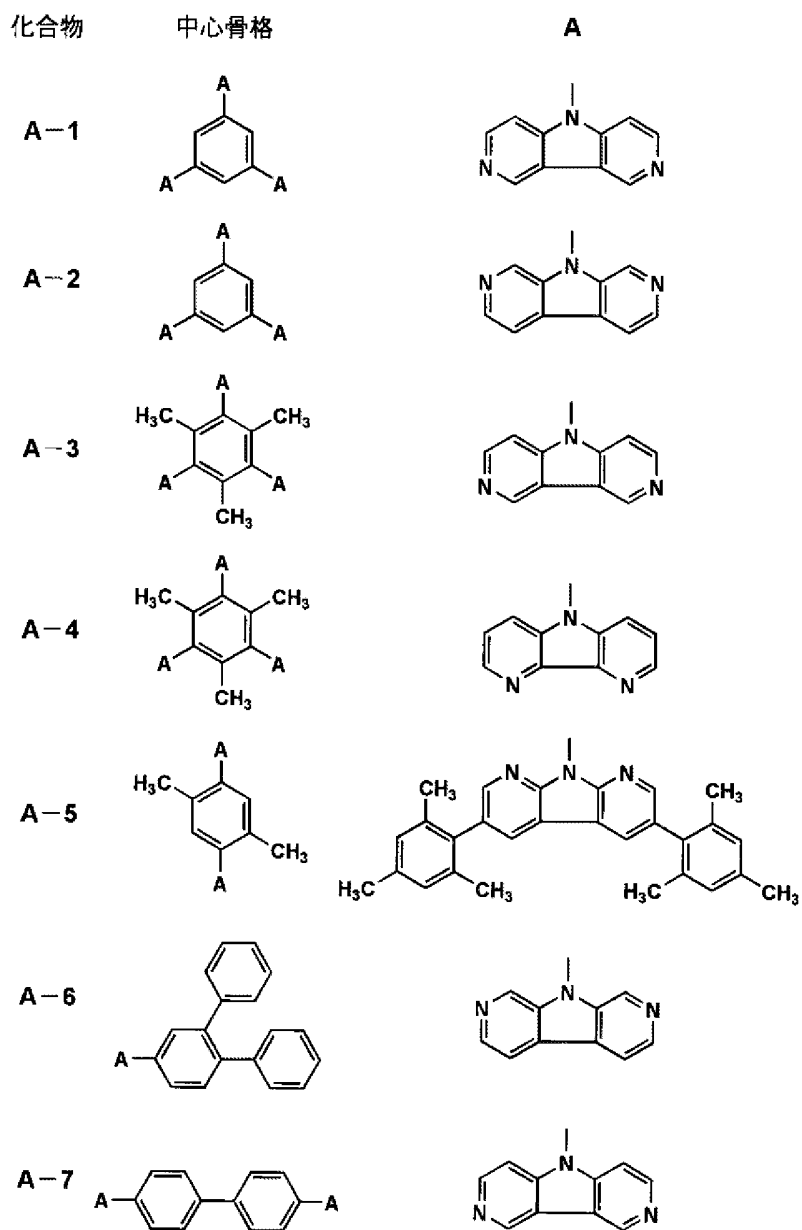
[0259] 前記一般式(17A)において、Ar₁、Ar₂で各々表されるアリーレン基は、前記一般式(16A)においてAr₁、Ar₂で各々表されるアリーレン基と同義である。Ar₁、Ar₂で各々表される芳香族複素環基は、前記一般式(16A)においてAr₁、Ar₂で各々表される2価の芳香族複素環基と同義である。

[0260] Z₁、Z₂、Z₃、Z₄で各々表される、各々窒素原子を少なくとも一つ含む6員の芳香族複素環としては、例えば、ピリジン環、ピリダジン環、ピリミジン環、ピラジン環等が挙げられる。

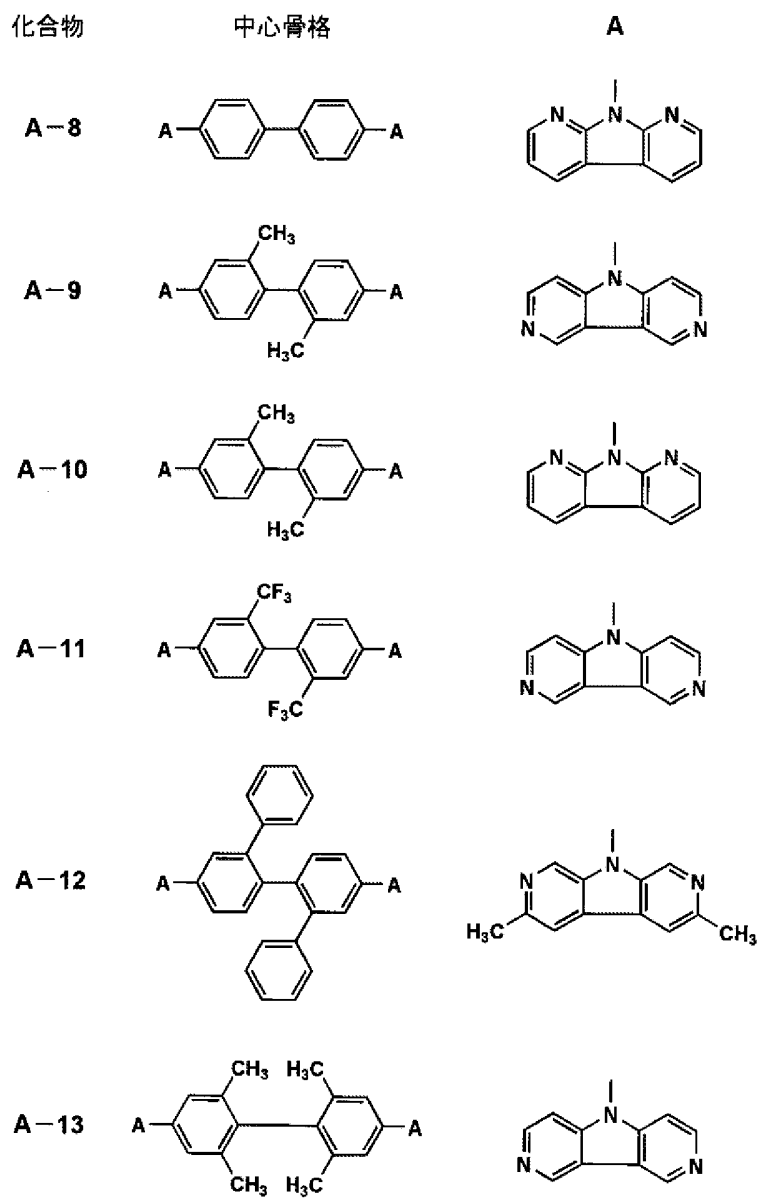
[0261] Lで表される2価の連結基としては、前記一般式(10A)において、L₁で表される2価の連結基と同義であるが、好ましくはアルキレン基、-O-、-S-等のカルコゲン原子を含む2価の基であり、最も好ましくはアルキレン基である。

[0262] 以下に、本発明に係る一般式(1A)で表される化合物の具体例を示すが、本発明はこれらに限定されない。

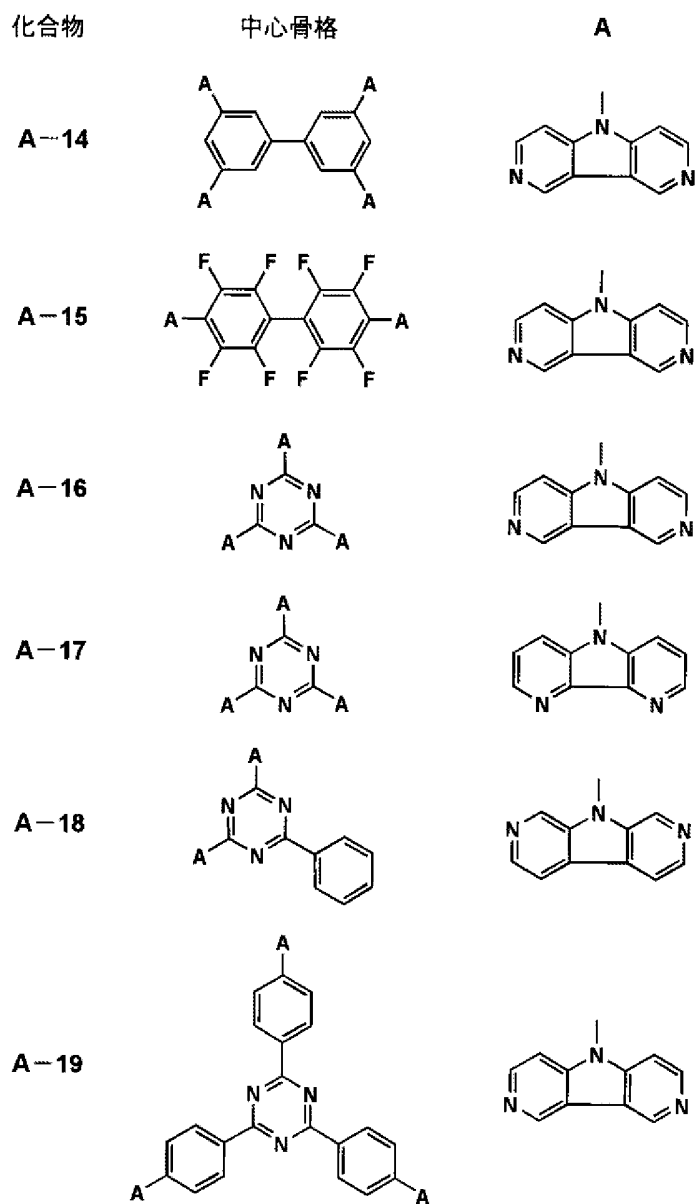
[0263] [化78]



[0264] [化79]



[0265] [化80]



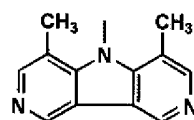
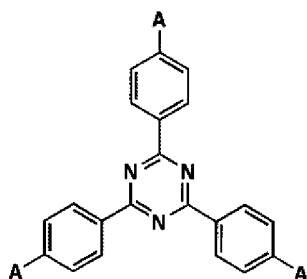
[0266] [化81]

化合物

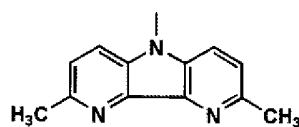
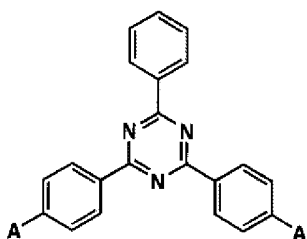
中心骨格

A

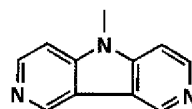
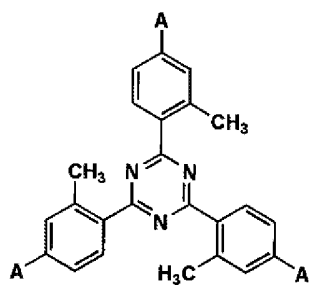
A-20



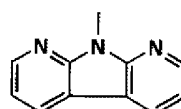
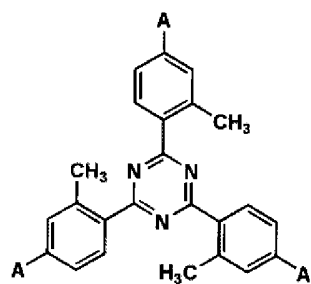
A-21



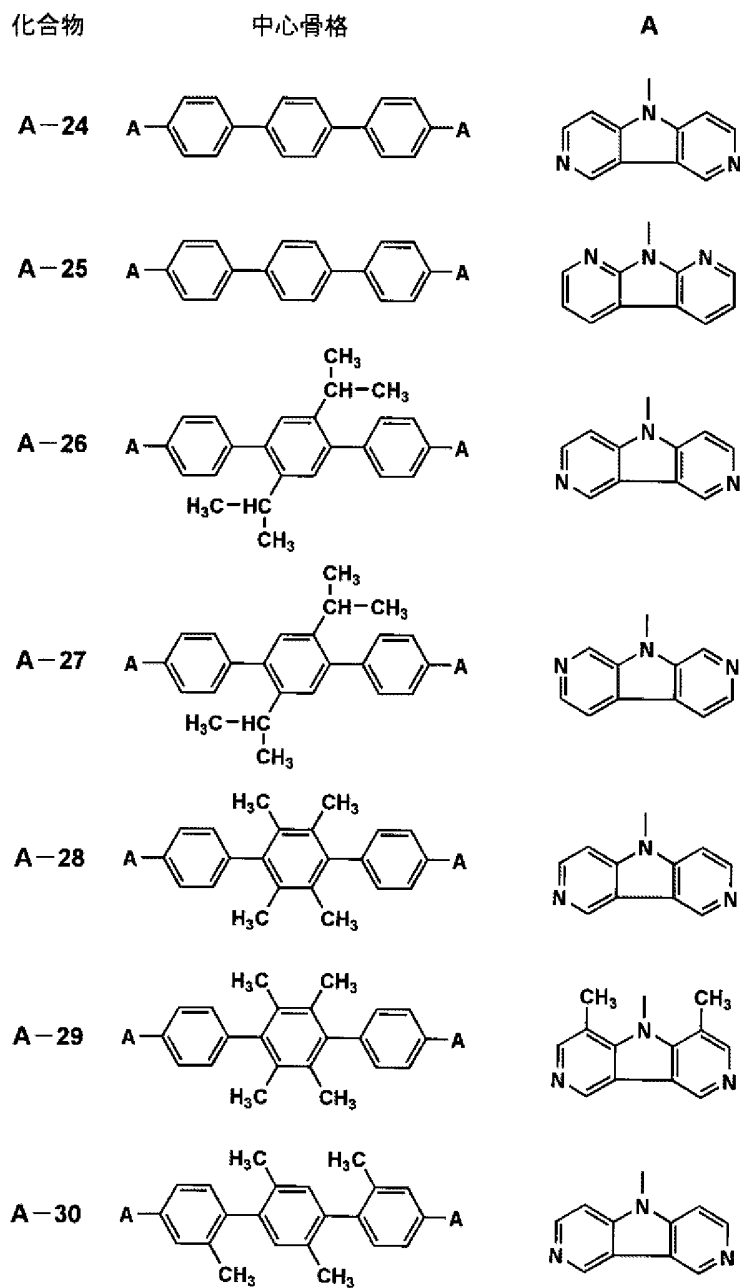
A-22



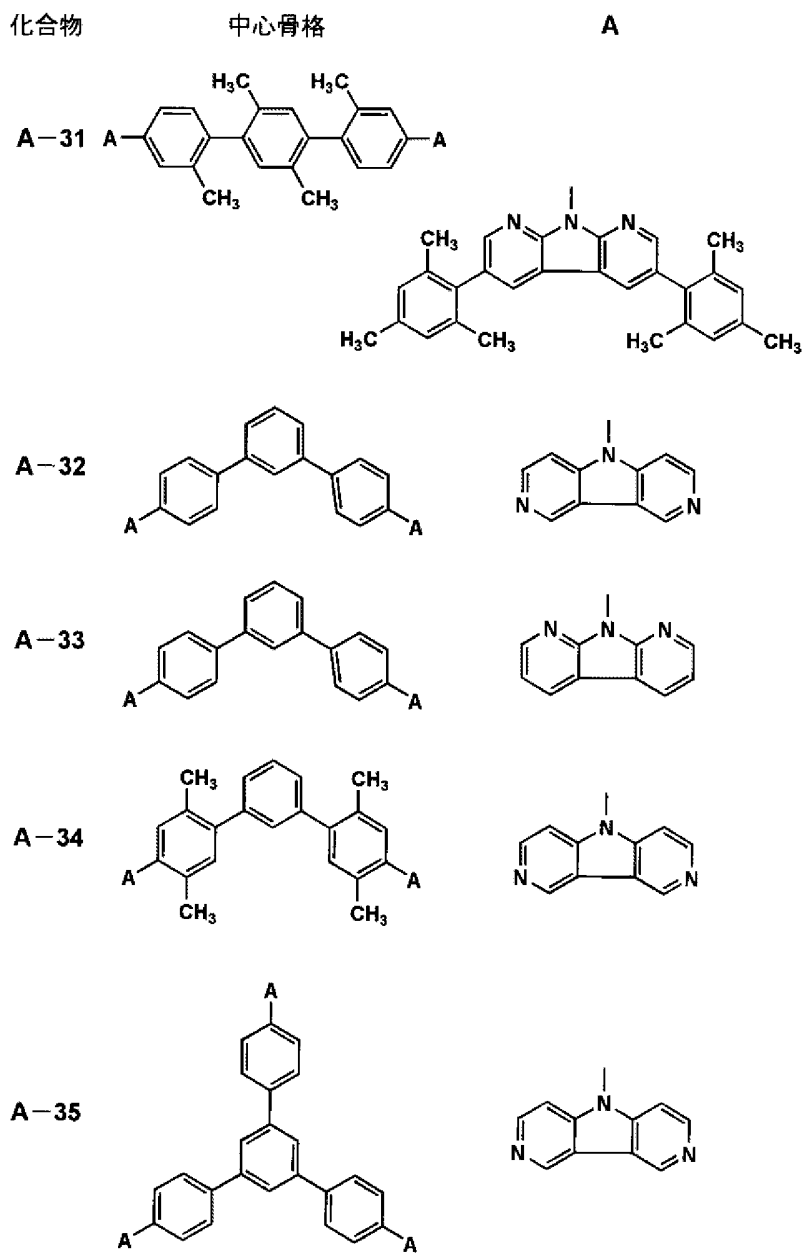
A-23



[0267] [化82]



[0268] [化83]



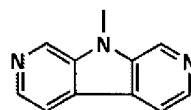
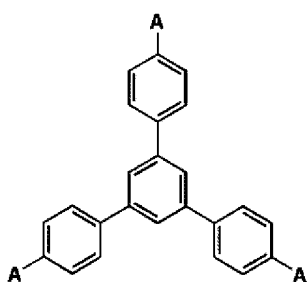
[0269] [化84]

化合物

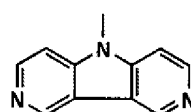
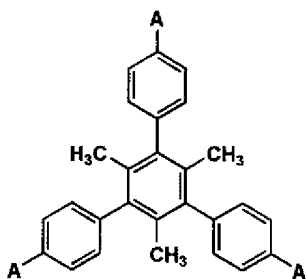
中心骨格

A

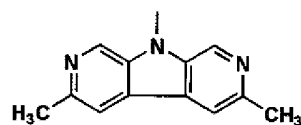
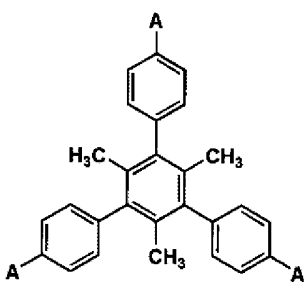
A-36



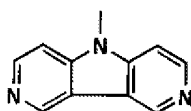
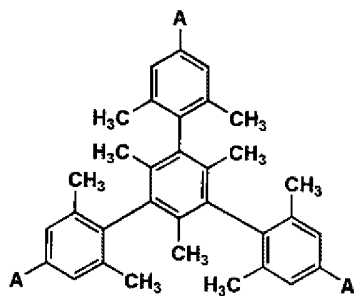
A-37



A-38



A-39

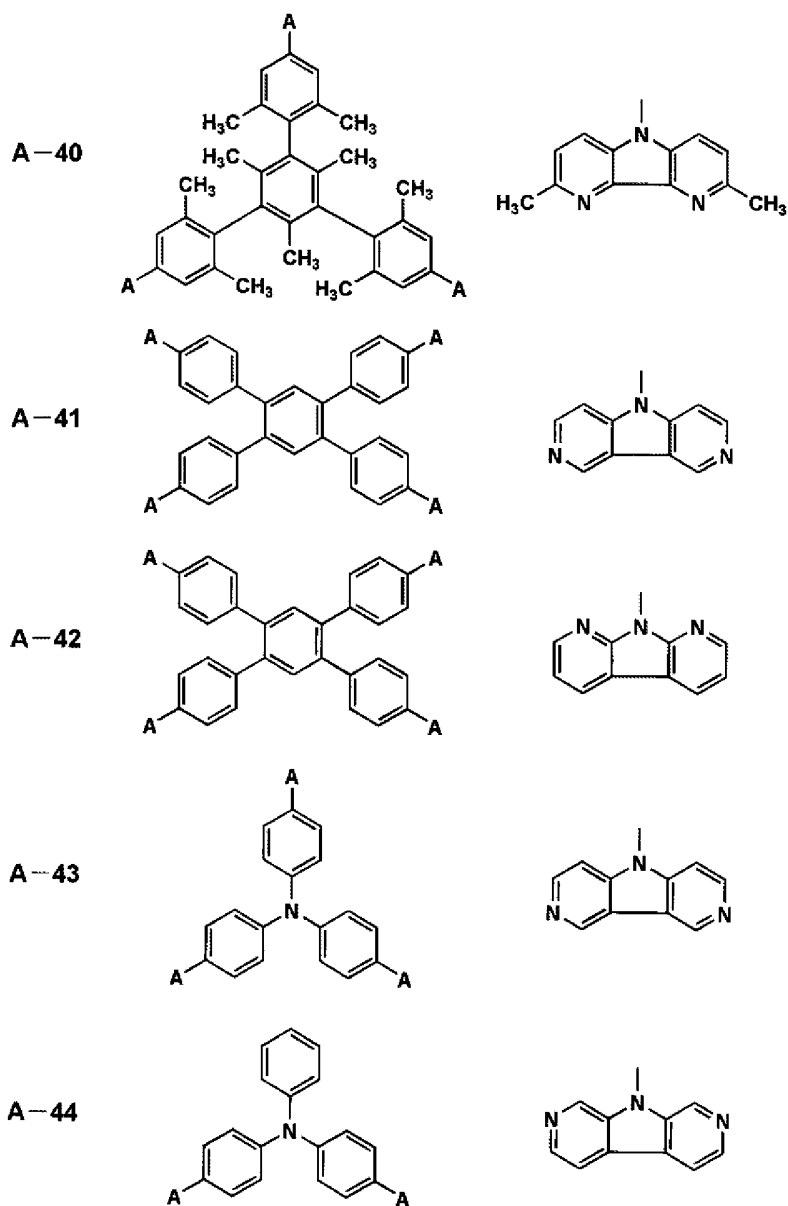


[0270] [化85]

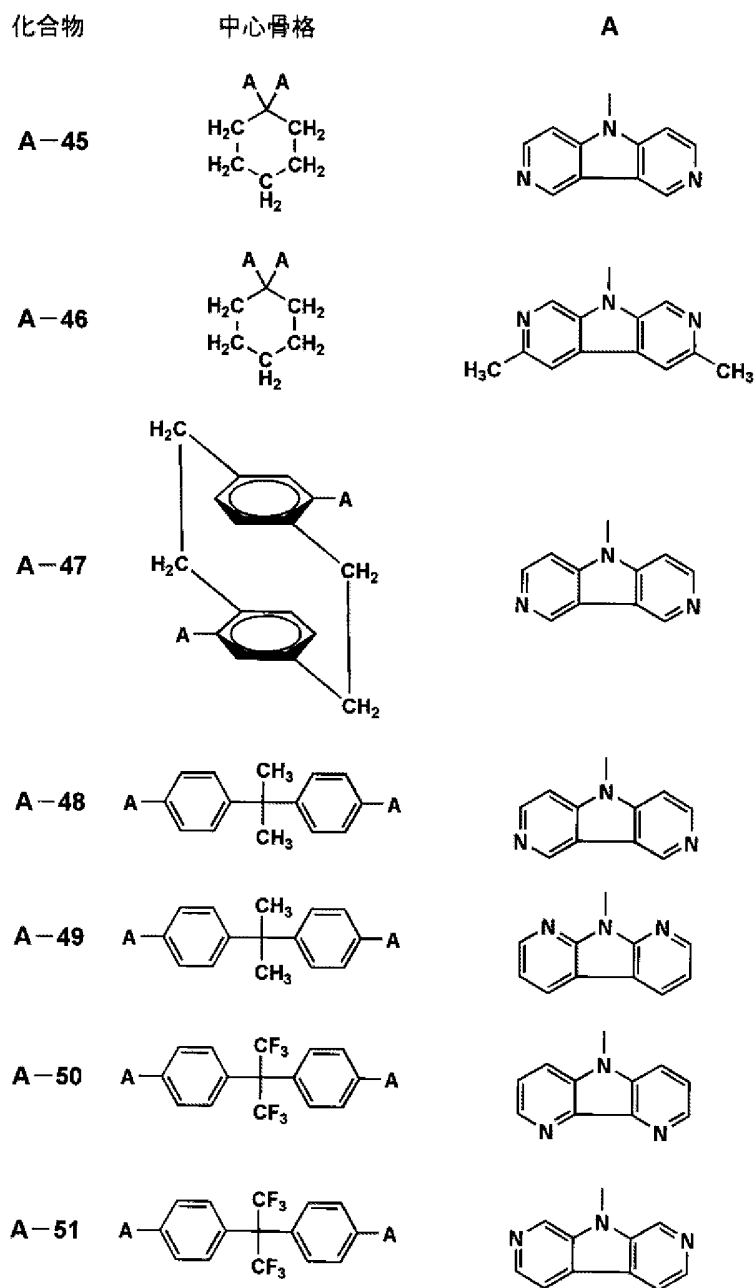
化合物

中心骨格

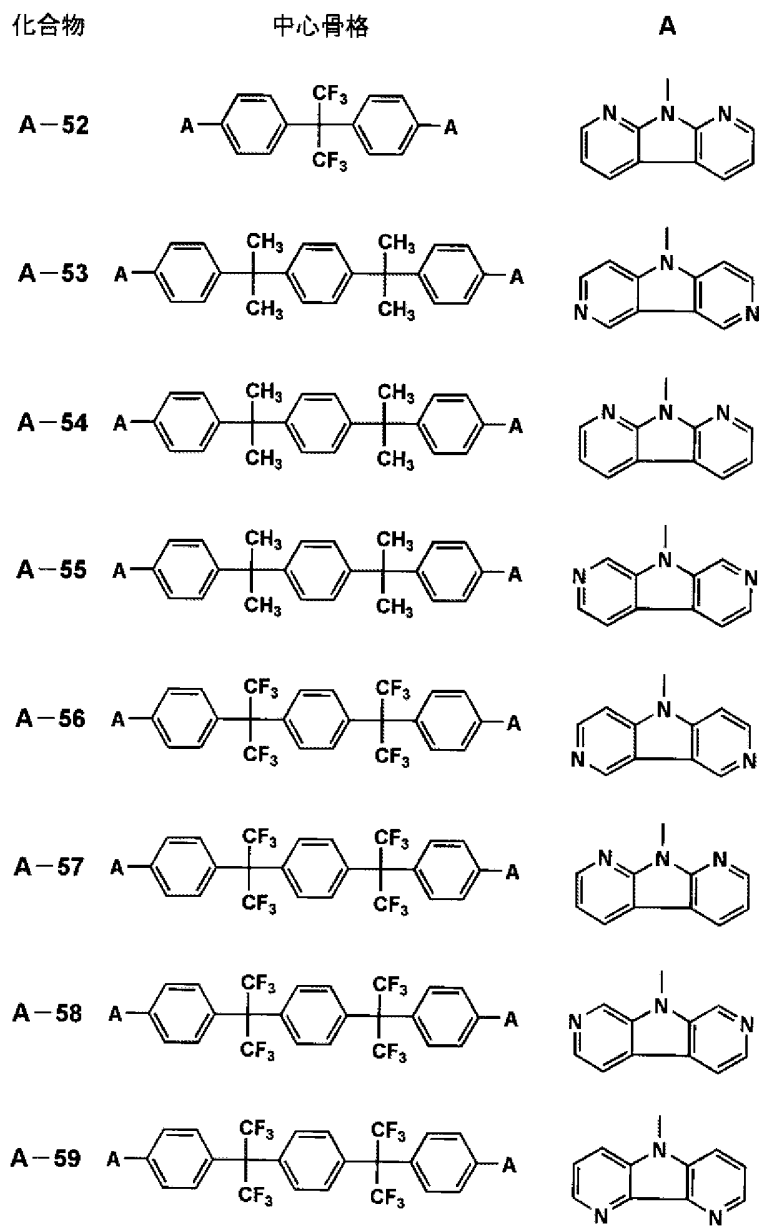
A



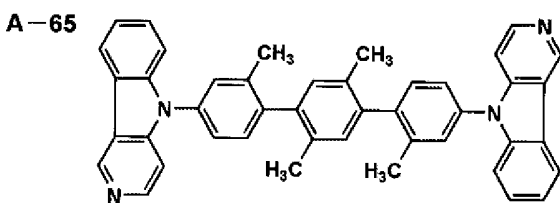
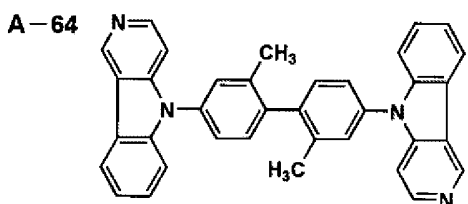
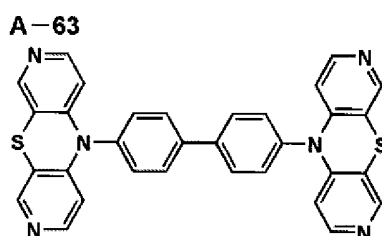
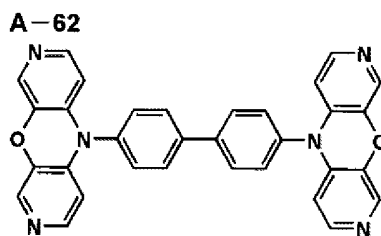
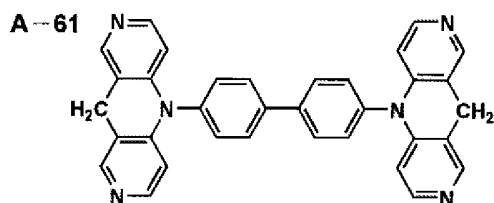
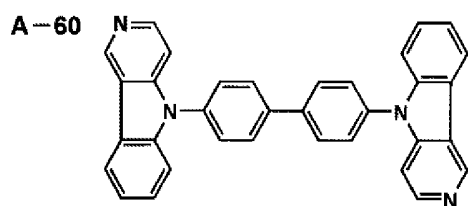
[0271] [化86]



[0272] [化87]

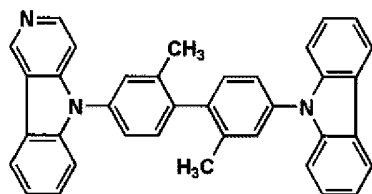


[0273] [化88]

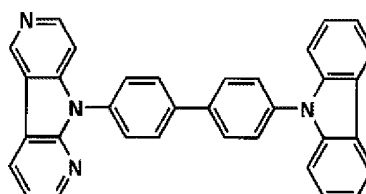


[0274] [化89]

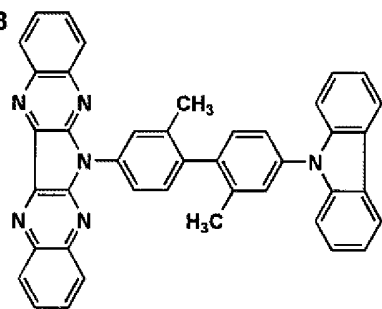
A-66



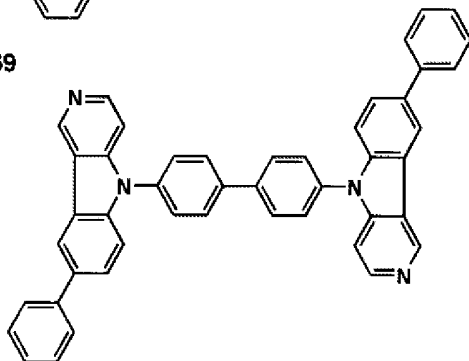
A-67



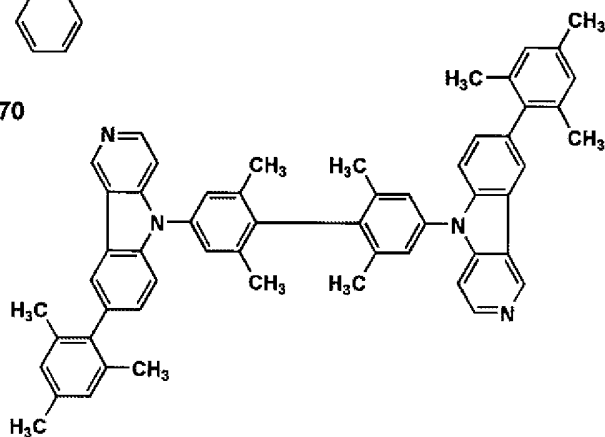
A-68



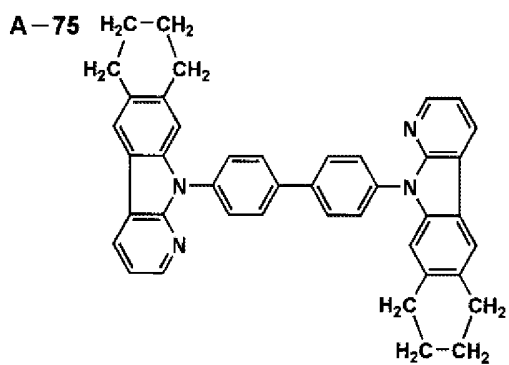
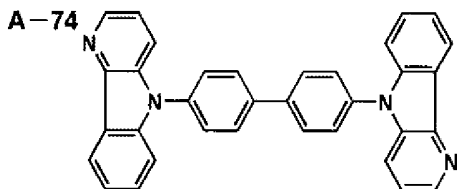
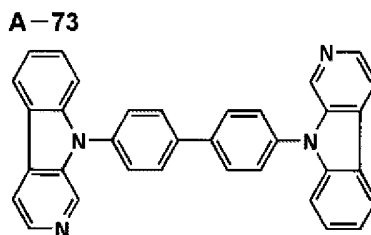
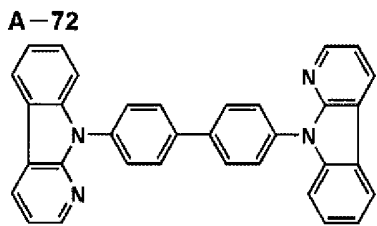
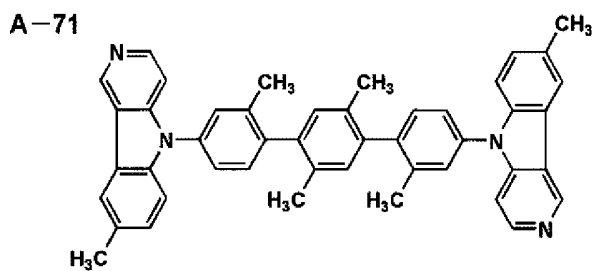
A-69



A-70

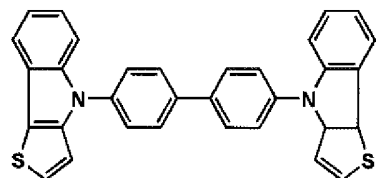


[0275] [化90]

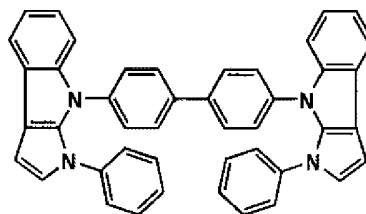


[0276] [化91]

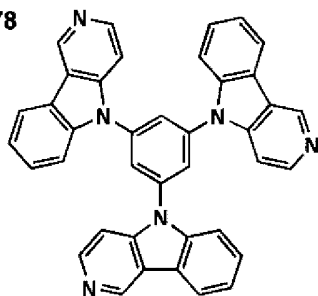
A-76



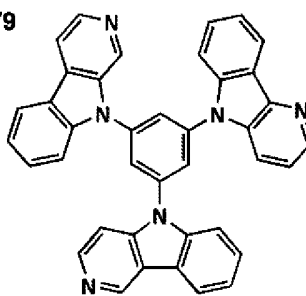
A-77



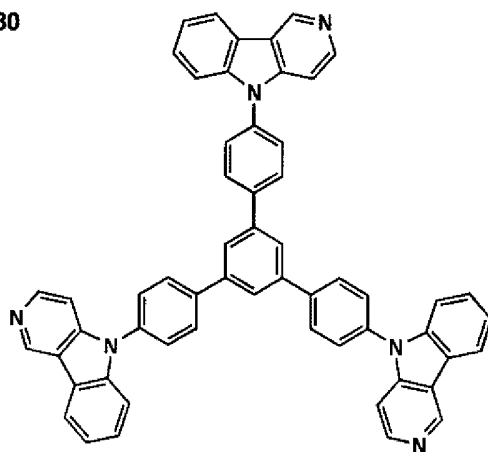
A-78



A-79

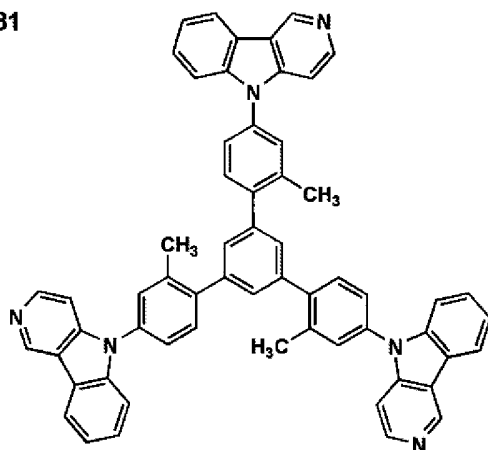


A-80

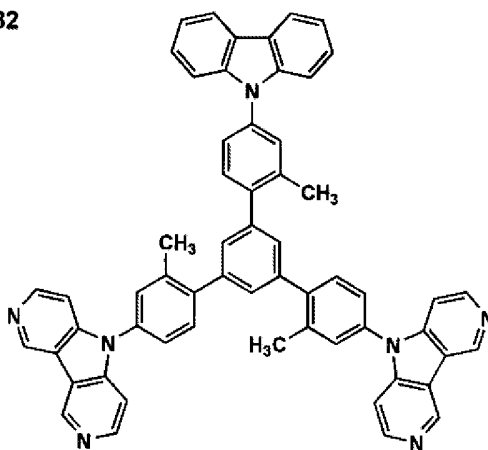


[0277] [化92]

A-81

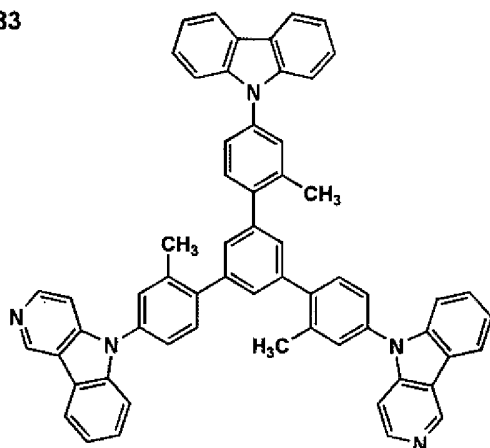


A-82

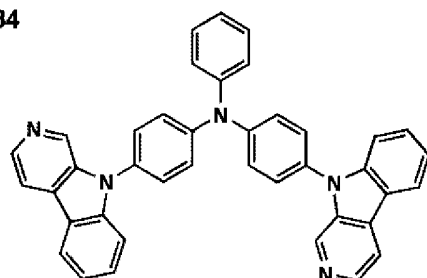


[0278] [1793]

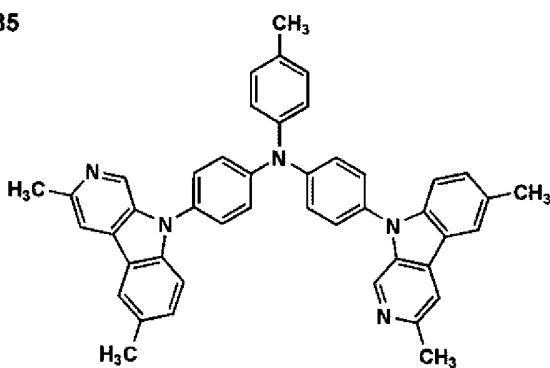
A-83



A-84

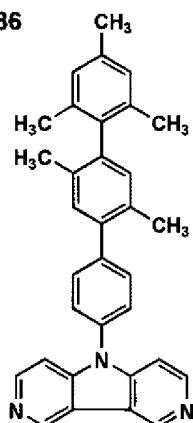


A-85

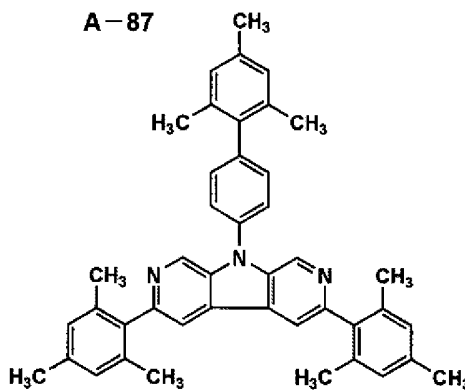


[0279] [化94]

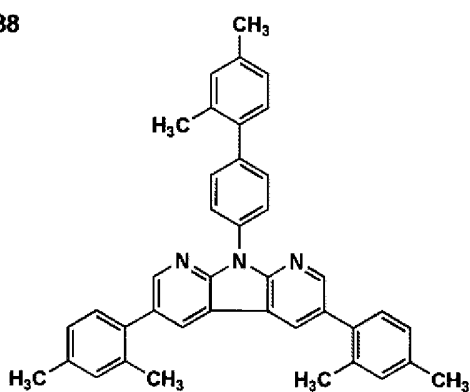
A-86



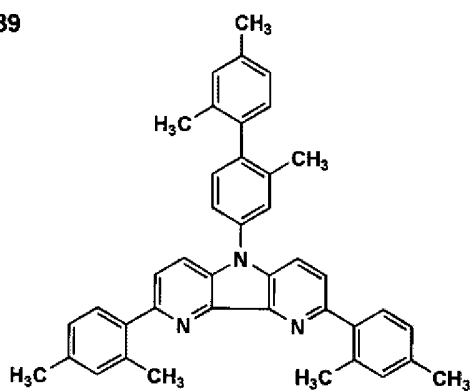
A-87



A-88

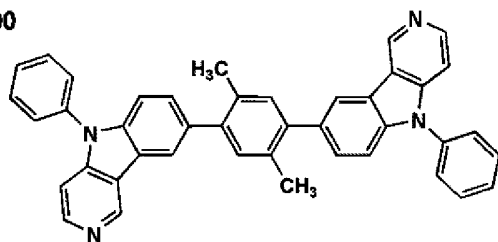


A-89

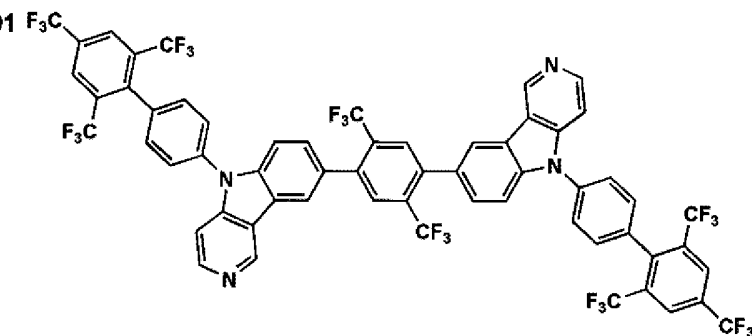


[0280] [化95]

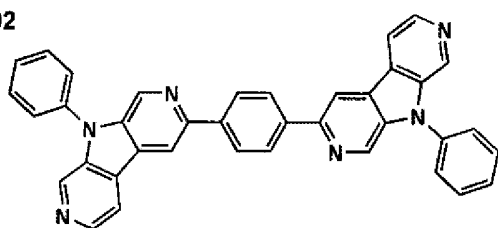
A-90



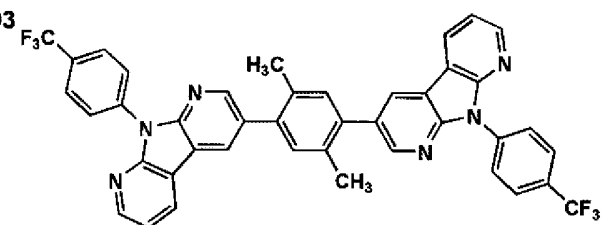
A-91



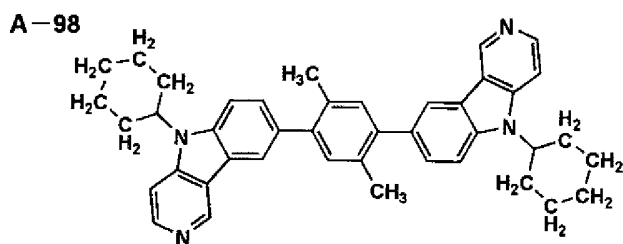
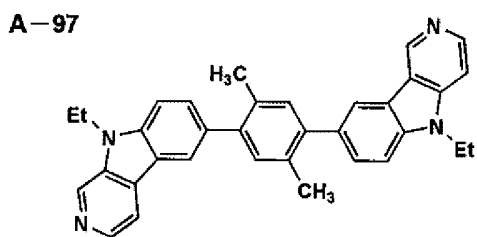
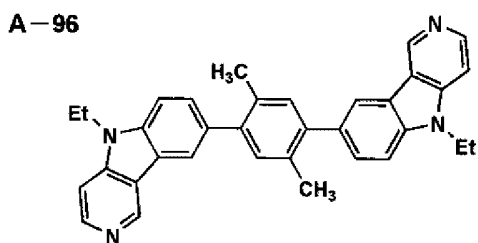
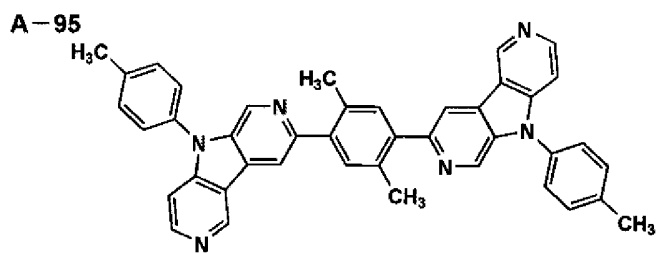
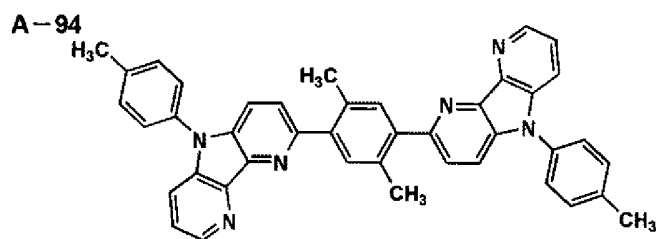
A-92



A-93

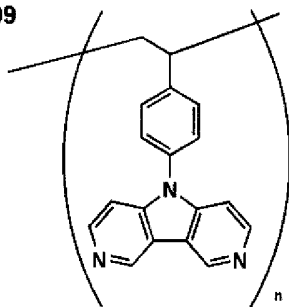


[0281] [1496]

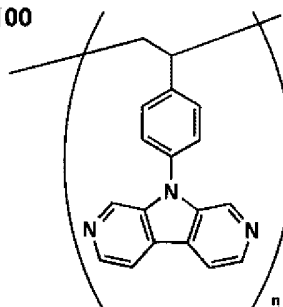


[0282] [1497]

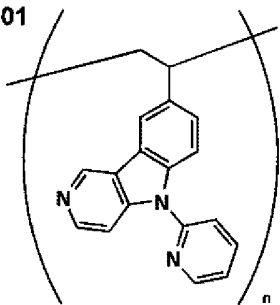
A-99



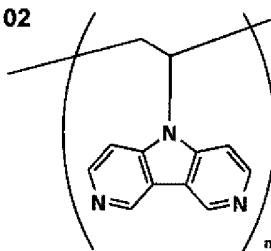
A-100



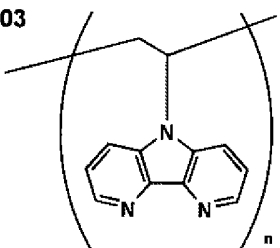
A-101



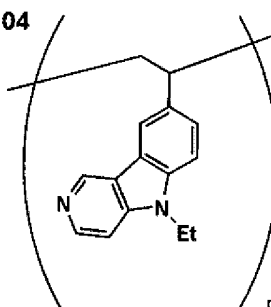
A-102



A-103

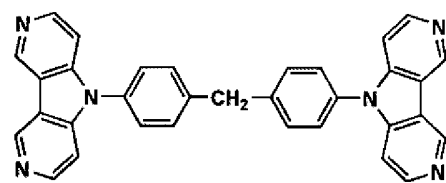


A-104

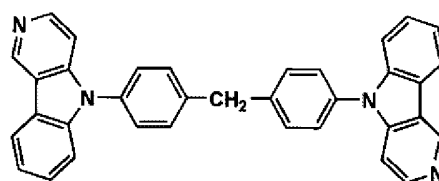


[0283] [化98]

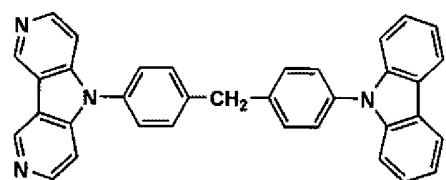
A-105



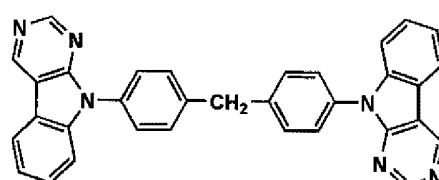
A-106



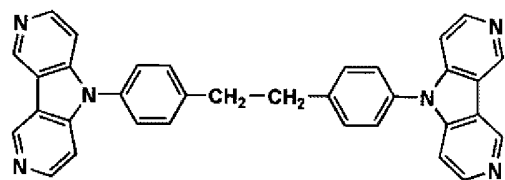
A-107



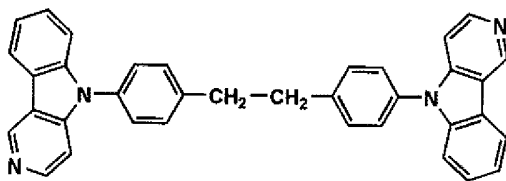
A-108



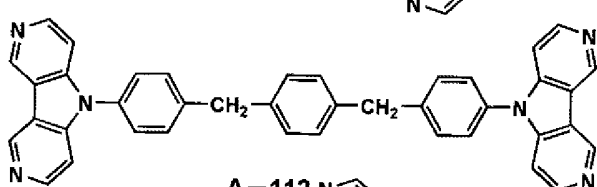
A-109



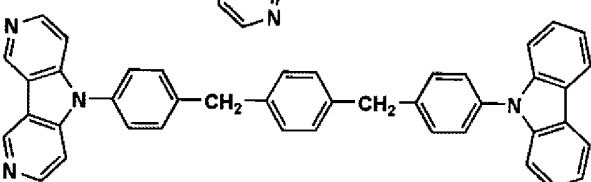
A-110



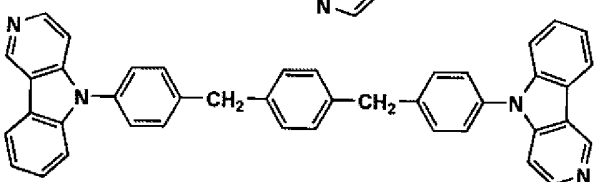
A-111



A-112

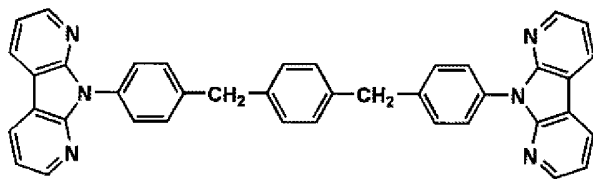


A-113

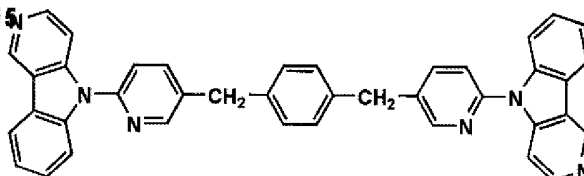


[0284] [化99]

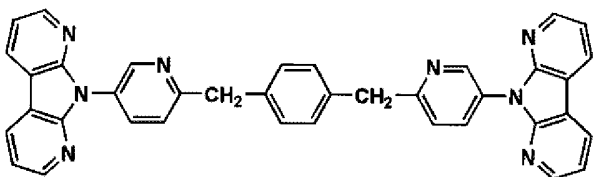
A-114



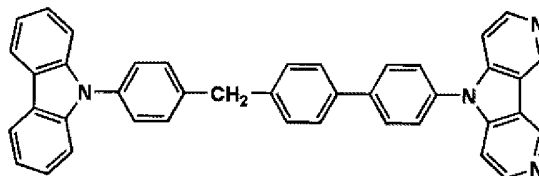
A-115



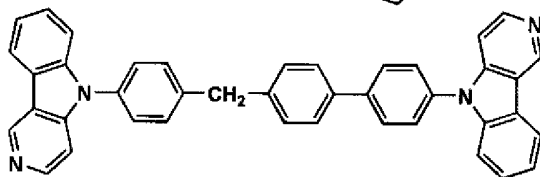
A-116



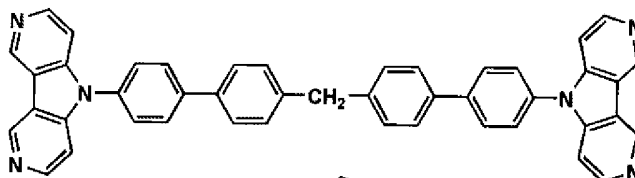
A-117



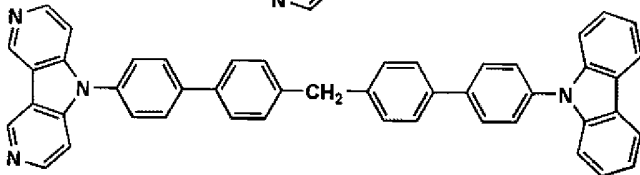
A-118



A-119

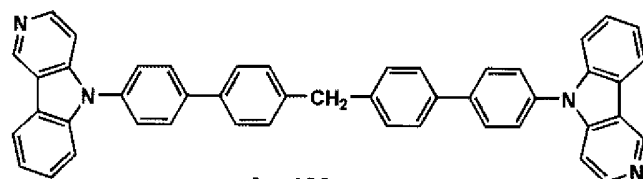


A-120

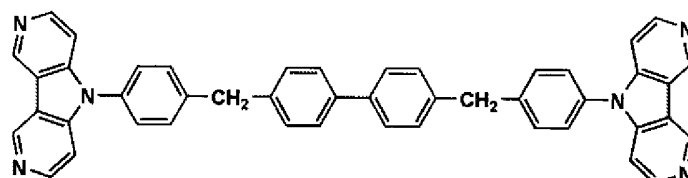


[0285] [化100]

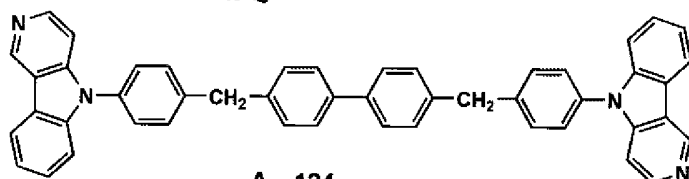
A-121



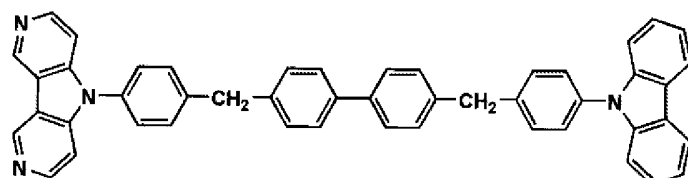
A-122



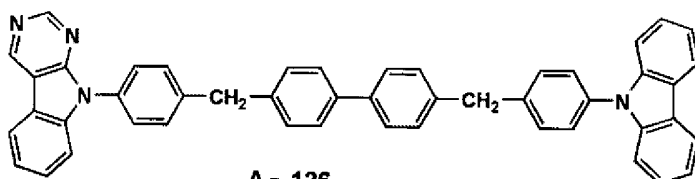
A-123



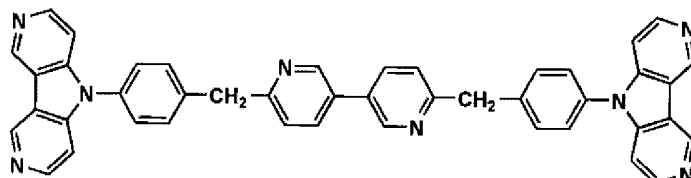
A-124



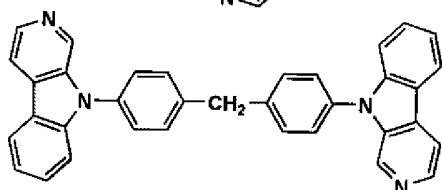
A-125



A-126

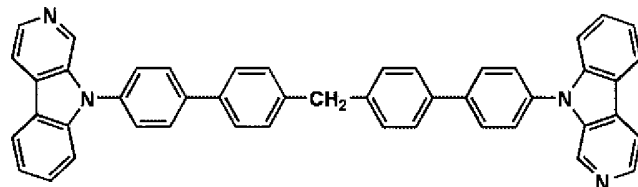


A-127

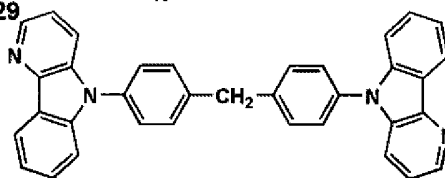


[0286] [化101]

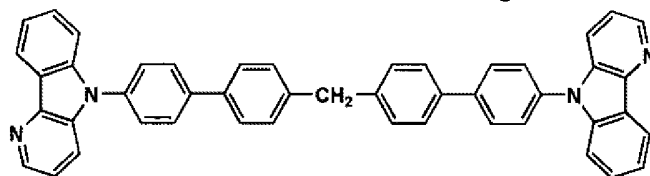
A-128



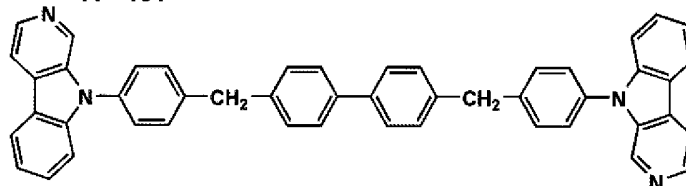
A-129



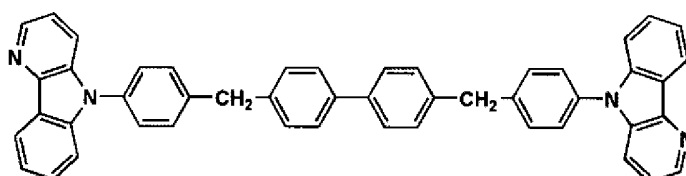
A-130



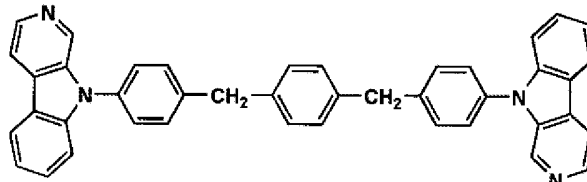
A-131



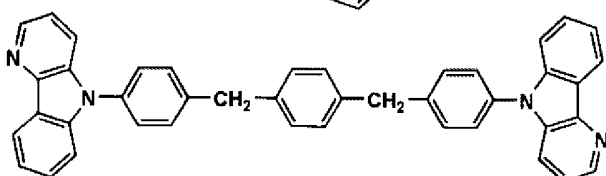
A-132



A-133

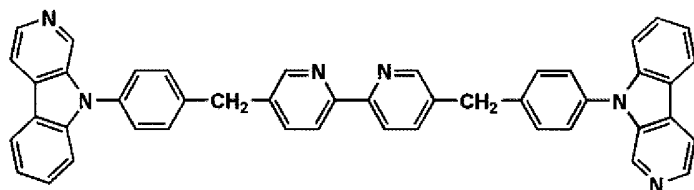


A-134

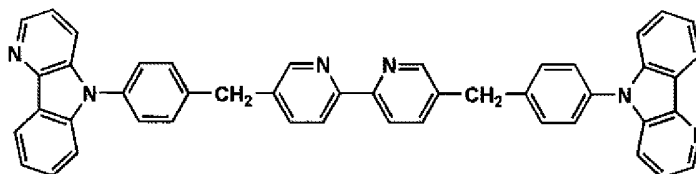


[0287] [化102]

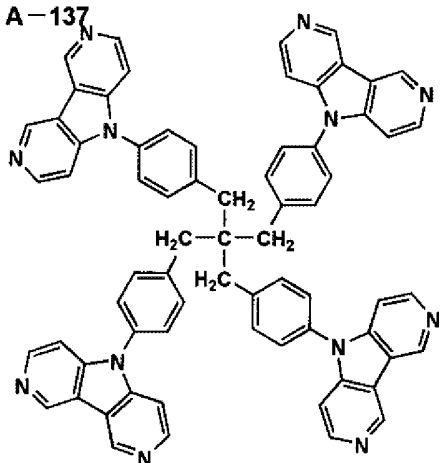
A-135



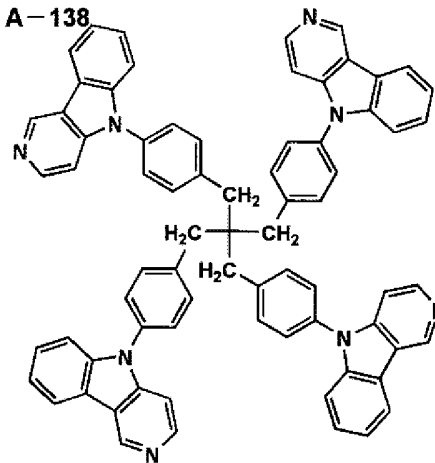
A-136



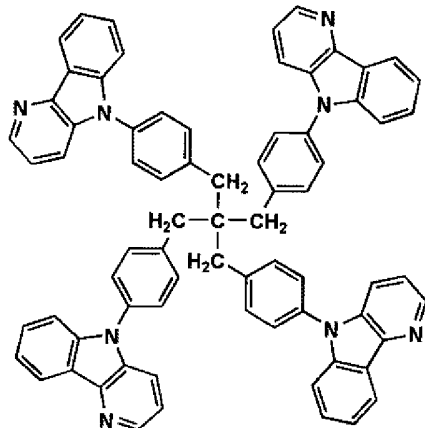
A-137



A-138

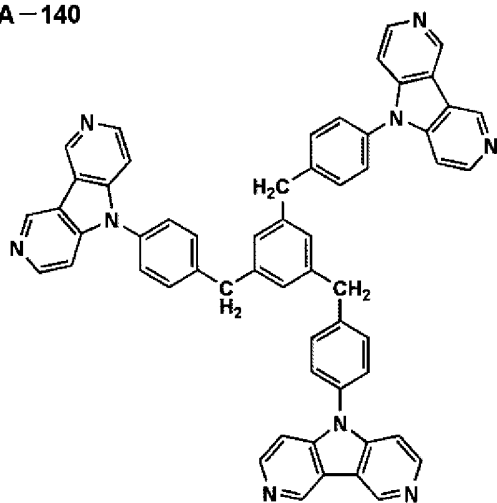


A-139

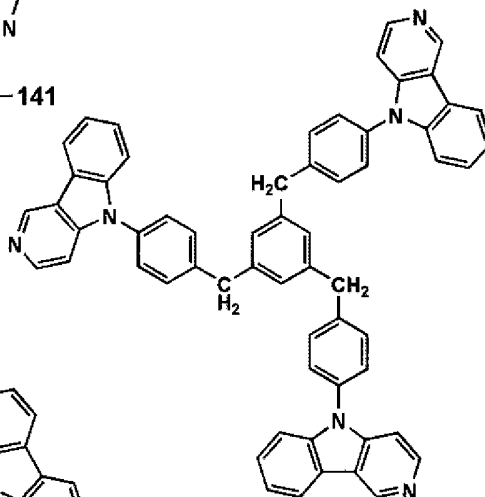


[0288] [化103]

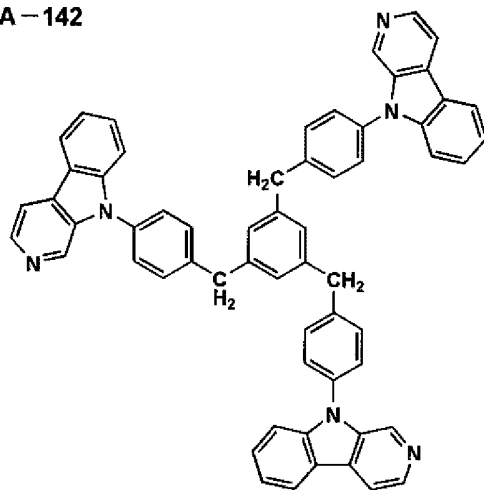
A-140



A-141

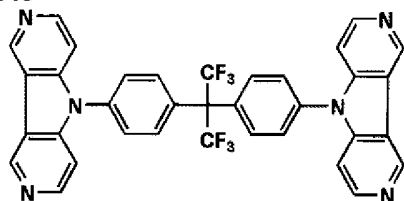


A-142

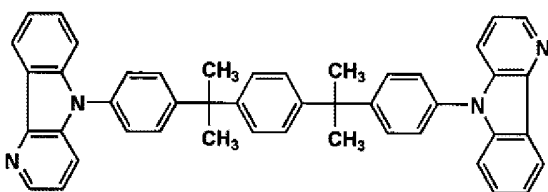


[0289] [化104]

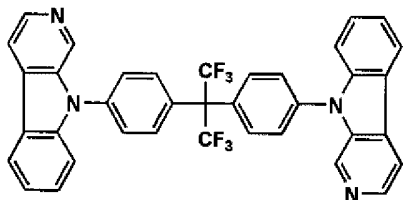
A-143



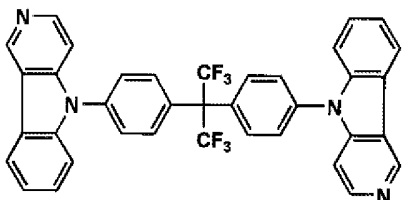
A-144



A-145

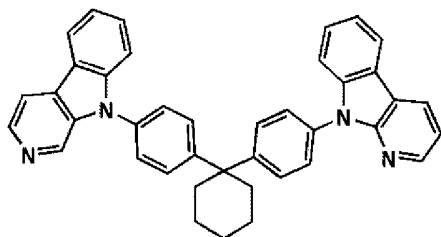


A-146

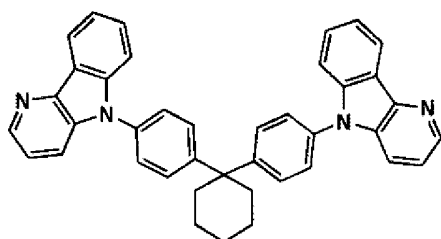


[0290] [化105]

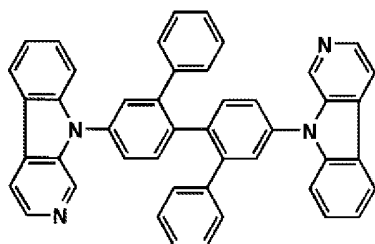
A-147



A-148

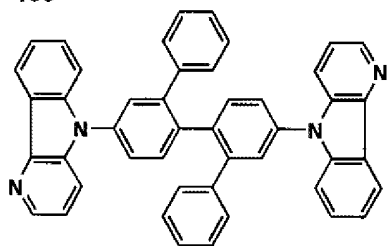


A-149

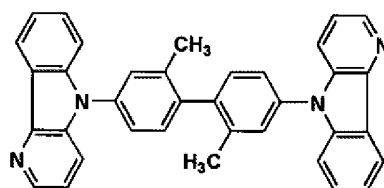


[0291] [化106]

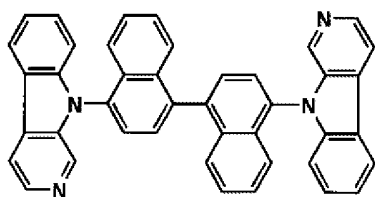
A-150



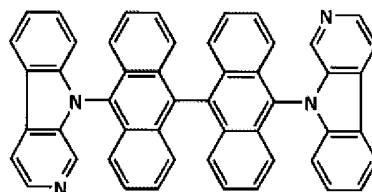
A-151



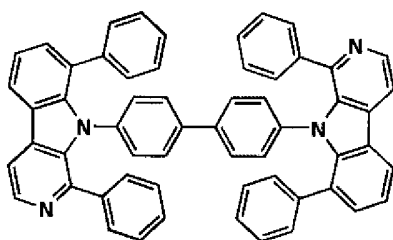
A-152



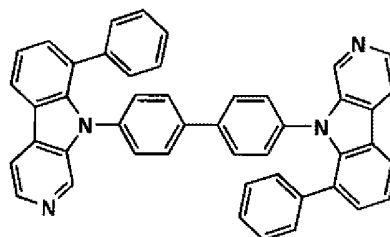
A-153



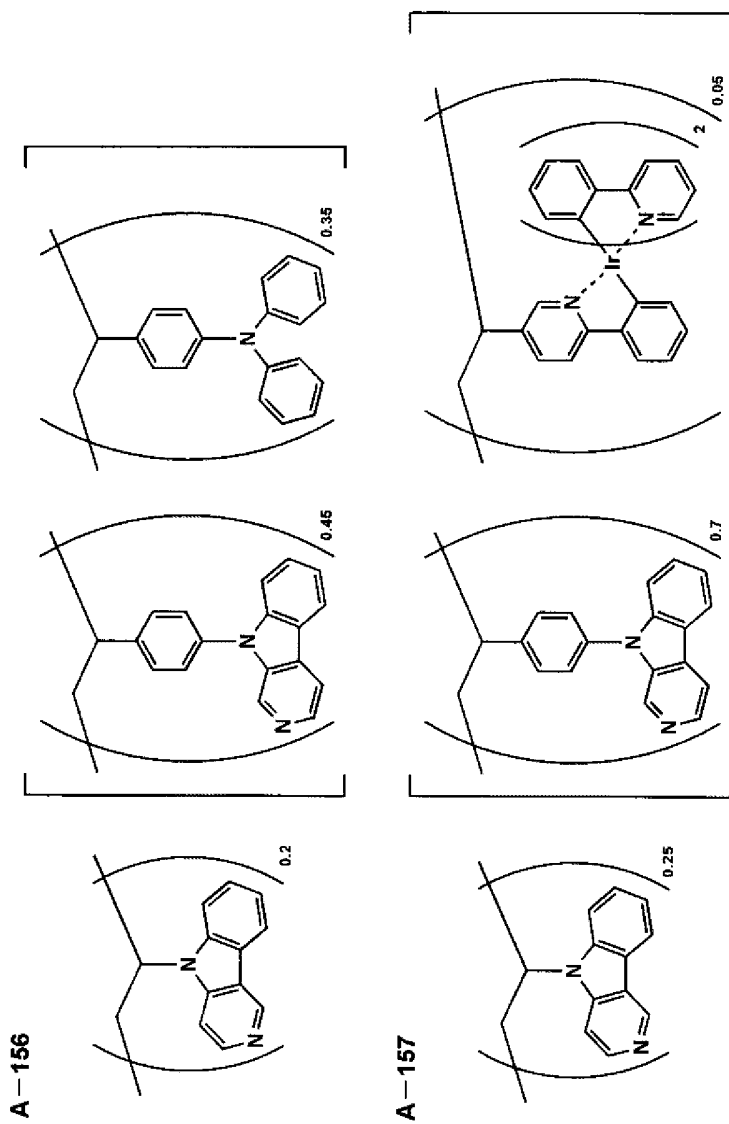
A-154



A-155

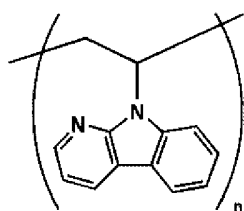


[0292] [化107]

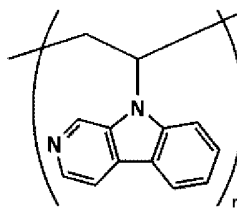


[0293] [化108]

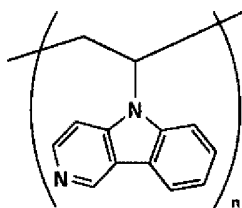
A-158



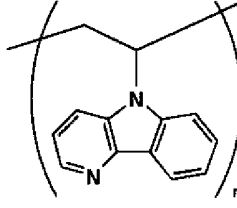
A-159



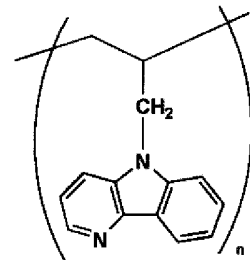
A-160



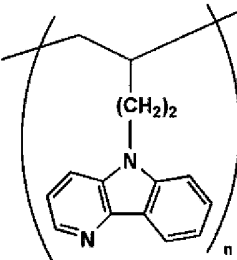
A-161



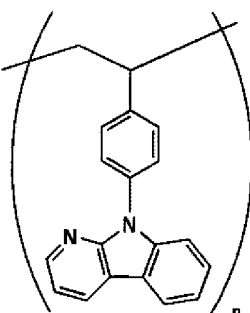
A-162



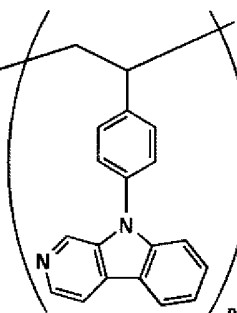
A-163



A-164

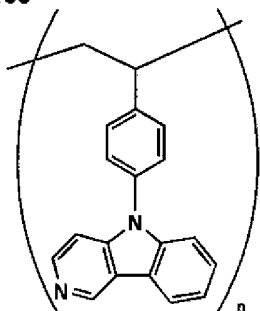


A-165

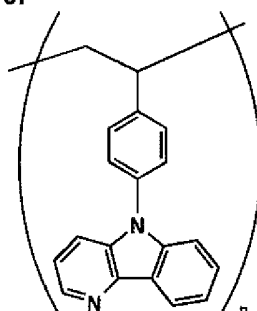


[0294] [化109]

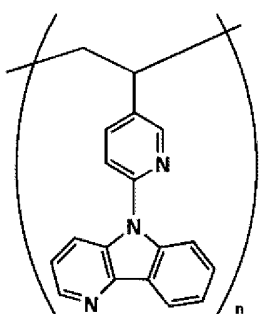
A-166



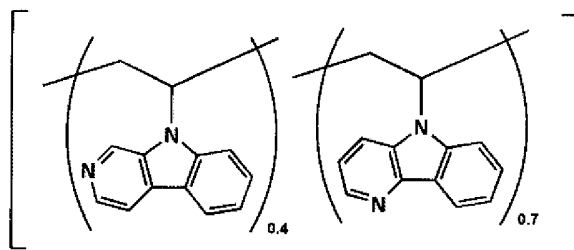
A-167



A-168

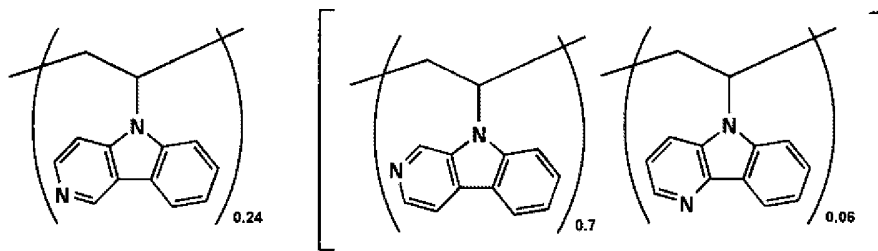


A-169



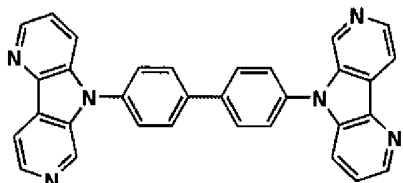
[0295] [化110]

A-170

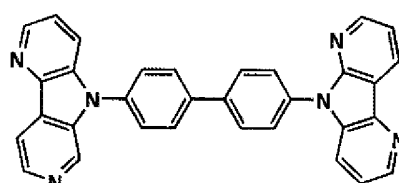


[0296] [化111]

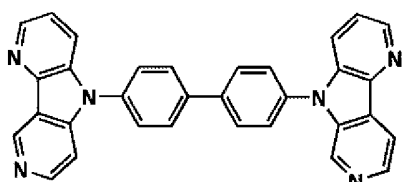
A-171



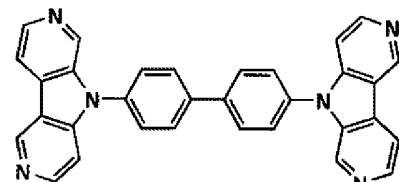
A-172



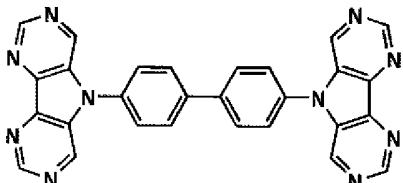
A-173



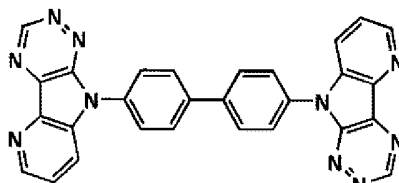
A-174



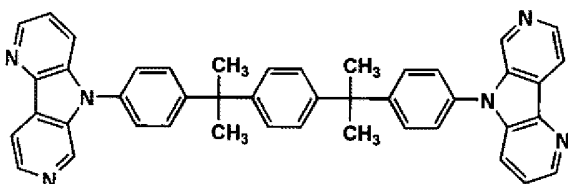
A-175



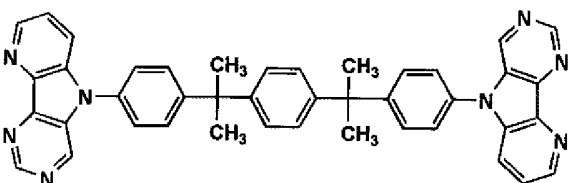
A-176



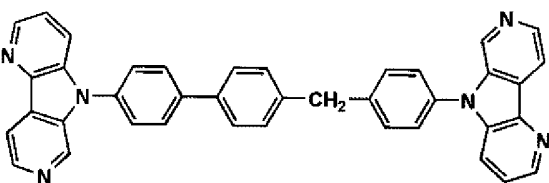
A-177



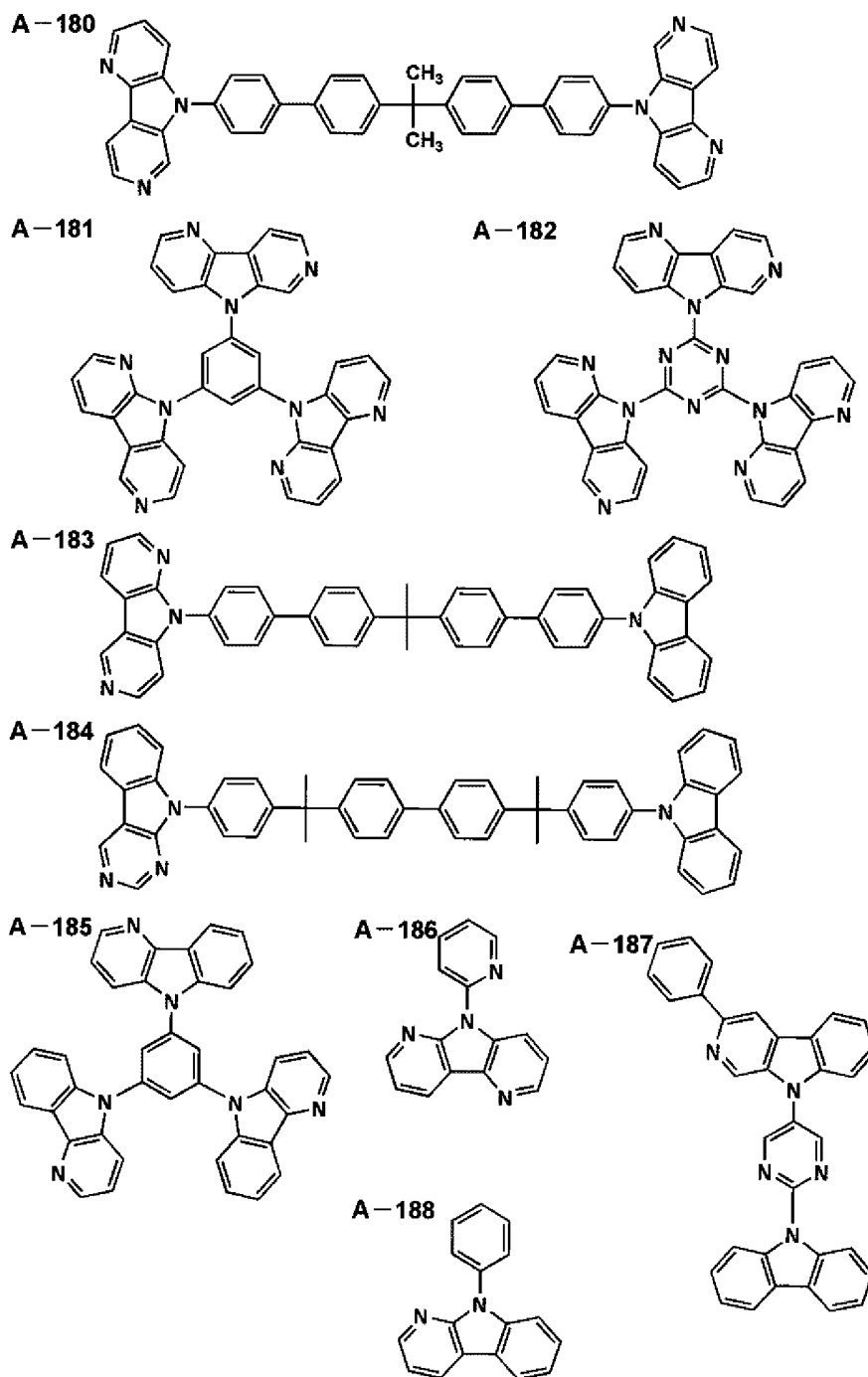
A-178



A-179



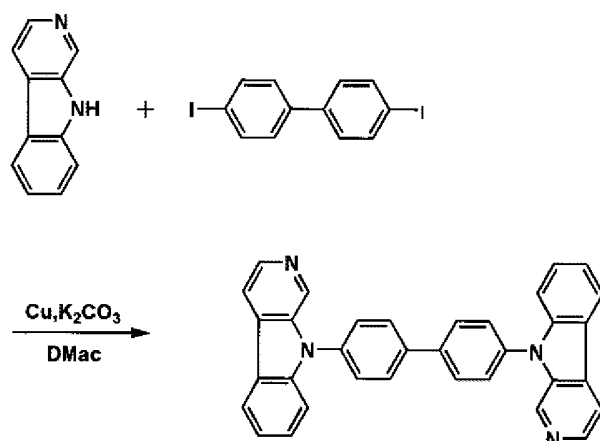
[0297] [化112]



[0298] 以下に、本発明に係る化合物の代表的な合成例を示すが、本発明はこれらに限定されない。

[0299] (例示化合物A-73の合成)

[0300] [化113]



[0301] 4, 4' -ジヨードビフェニル6. 87g、 β -カルボリン6. 00gをN, N-ジメチルアセトアミド50ml中に添加した混合液に、銅粉4. 5g、炭酸カリウム7. 36gを加え、15時間加熱還流した。放冷後水クロロホルムを加え、不溶物を濾去した。有機層を分離し、水、飽和食塩水で洗浄した後、減圧下に濃縮し、得られた残渣を酢酸に溶解し、活性炭処理後、再結晶して、例示化合物A-73の無色結晶4. 2gを得た。

[0302] 例示化合物A-73の構造は¹H-NMRスペクトル及び質量分析スペクトルによって確認した。例示化合物A-73の物性データ、スペクトルデータを下記に示す。

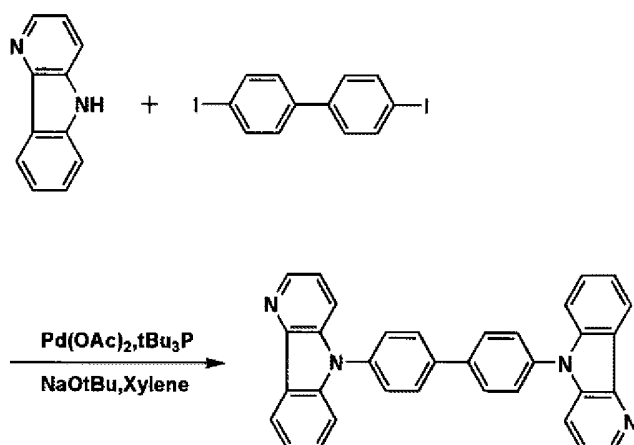
[0303] 無色結晶、融点200°C

MS (FAB) m/z: 487 (M+1)

¹H-NMR (400MHz, CDCl₃): δ / ppm 7. 3-7. 5 (m, 2H)、7. 5-7. 6 (m, 4H)、7. 7-7. 8 (m, 4H)、7. 9-8. 0 (m, 4H)、8. 06 (d, J=5. 1Hz, 2H)、8. 24 (d, J=7. 8Hz, 2H)、8. 56 (d, J=5. 1Hz, 2H)、8. 96 (s, 2H)

(例示化合物A-74の合成)

[0304] [化114]



[0305] 酢酸パラジウム0.32g、トリ-tert-ブチルホスフィン1.17gを無水トルエン10mlに溶解し、水素化ホウ素ナトリウム50mgを添加し、室温で10分間攪拌した後、 δ -カルボリン5.00g、4,4'-ジヨードビフェニル5.87g、ナトリウム-tert-ブトキシド3.42gを無水キシレン50ml中に分散し、窒素雰囲気下、還流温度にて10時間攪拌した。得られた反応混合物を放冷後クロロホルムと水を加えて有機層を分離し、有機層を、水、飽和食塩水で洗浄した後、減圧下に濃縮し、得られた残渣をテトラヒドロフランに溶解し、活性炭処理を施した後、再結晶して例示化合物A-74の無色結晶5.0gを得た。

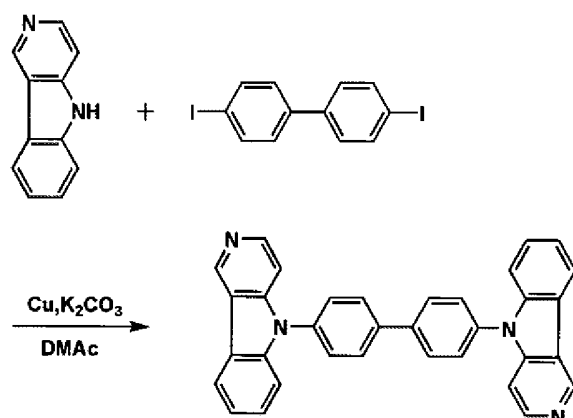
[0306] 例示化合物A-74の構造は¹H-NMRスペクトル及び質量分析スペクトルによって確認した。例示化合物A-74の物性データ、スペクトルデータを下記に示す。

[0307] MS (FAB) m/z: 487 (M+1)

¹H-NMR (400MHz, CDCl₃): δ / ppm 7.37 (dd, J=4.7Hz, J=8.3Hz, 2H)、7.4-7.5 (m, 2H)、7.5-7.6 (m, 4H)、7.7-7.8 (m, 4H)、7.81 (dd, J=1.2Hz, J=8.3Hz, 2H)、7.9-8.0 (m, 4H)、8.48 (d, J=7.8Hz, 2H)、8.65 (dd, J=1.2Hz, J=4.6Hz, 2H)

(例示化合物A-60の合成)

[0308] [化115]



[0309] 4, 4' -ジヨードビフェニル6. 87g、 γ -カルボリン6. 00gをN, N-ジメチルアセトアミド50ml中に添加した混合液に、銅粉4. 5g、炭酸カリウム7. 36gを加え、15時間加熱還流した。放冷後水クロロホルムを加え、不溶物を濾去した。有機層を分離し、水、飽和食塩水で洗浄した後、減圧下に濃縮し、得られた残渣をシリカゲルクロマトグラフィーに付した後、ジクロロメタン/シクロヘキサン中で結晶化させ、例示化合物A-60の無色結晶4. 3gを得た。

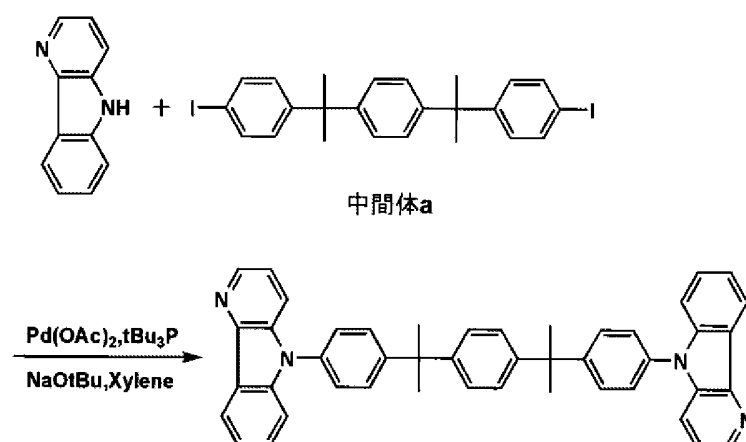
[0310] 例示化合物A-60の構造は、¹H-NMRスペクトル及び質量分析スペクトルによって確認した。例示化合物A-60の物性データ、スペクトルデータを下記に示す。

[0311] MS (FAB) m/z: 487 (M+1)

¹H-NMR (400MHz, CDCl₃): δ /ppm 7. 4-7. 4(m, 4H)、7. 4-7. 5(m, 4H)、7. 7-7. 8(m, 4H) 7. 9-8. 0(m, 4H)、8. 25(d, J=7. 8Hz, 2H)、8. 57(d, J=5. 6Hz, 2H)、9. 42(s, 1H)

(例示化合物A-144の合成)

[0312] [化116]



[0313] 酢酸パラジウム0.16g、トリ-tert-ブチルホスフィン0.58gを無水トルエン10mlに溶解し、水素化ホウ素ナトリウム25mgを添加し、室温で10分間攪拌した後、 δ -カルボリン2.00g、中間体a3.20g、ナトリウム-tert-ブトキシド1.37gを無水キシレン50ml中に分散し、窒素雰囲気下、還流温度にて10時間攪拌した。放冷後クロロホルムと水を加えて有機層を分離し、有機層を水、飽和食塩水で洗浄した後減圧下に濃縮し、得られた残渣を酢酸から再結晶して例示化合物A-144の無色結晶1.5gを得た。

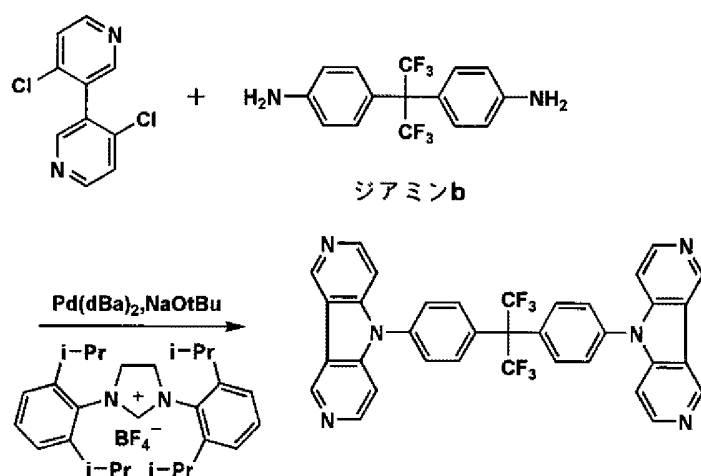
[0314] 例示化合物A-144の構造は、 $^1\text{H-NMR}$ スペクトル及び質量分析スペクトルによって確認した。例示化合物A-144のスペクトルデータは以下の通りである。

[0315] MS (FAB) m/z : 647 (M+1)

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3): δ / ppm 1.80 (s, 12H)、7.27 (s, 4H)、7.34 (dd, $J=4.9\text{Hz}$, $J=8.3\text{Hz}$, 2H)、7.3-7.4 (m, 2H)、7.4-7.5 (m, 12H)、7.76 (dd, $J=1.3\text{Hz}$, $J=8.3\text{Hz}$, 2H)、8.45 (d, $J=7.8\text{Hz}$, 2H)、8.63 (dd, $J=1.3\text{Hz}$, $J=4.9\text{Hz}$, 2H)

(例示化合物A-143の合成)

[0316] [化117]



[0317] 4, 4' -ジクロロ-3, 3' -ビピリジル0. 85g、ジアミン**b**0. 59g、ジベンジリデンアセトンパラジウム44mg、イミダゾリウム塩36mg、ナトリウム-tert-ブトキシド1. 09gをジメトキシエタン5mlに添加し、80°Cで24時間加温攪拌した。放冷後クロロホルムと水を加えて有機層を分離し、有機層を水、飽和食塩水で洗浄した後減圧下に濃縮し、得られた残渣を酢酸エチルから再結晶して例示化合物A-143の無色結晶0. 3gを得た。

[0318] 例示化合物A-143の構造は、¹H-NMRスペクトル及び質量分析スペクトルによって確認した。例示化合物A-143のスペクトルデータを下記に示す。

[0319] MS (FAB) m/z: 639 (M+1)

¹H-NMR (400MHz, CDCl₃): δ / ppm 7. 46 (d, J=5. 7Hz, 4H)、7. 6-7. 7 (m, 4H)、7. 8-7. 9 (m, 4H)、8. 67 (d, J=5. 7Hz, 4H)、9. 51 (s, 4H)
(例示化合物A-145の合成)

例示化合物A-143の合成において、4, 4' -ジクロロ-3, 3' -ビピリジルの一方のピリジン環をベンゼンに変更した、3-(2-クロロフェニル)-4-クロロピリジンを用いた以外は同様にして、例示化合物A-145を合成した。

[0320] 例示化合物A-145の構造は、¹H-NMRスペクトル及び質量分析スペクトルによって確認した。例示化合物A-145のスペクトルデータを下記に示す。

[0321] MS (FAB) m/z: 637 (M+1)

¹H-NMR (400MHz, CDCl₃): δ / ppm 7. 3-7. 4 (m, 2H)、7. 6-7. 7 (

m, 4H)、7.7–7.8(m, 4H) 7.8–7.9(m, 4H)、8.06(d, J=5.3Hz, 2H)、8.23(d, J=7.8Hz, 2H)、8.56(d, J=5.3Hz, 2H)、8.96(S, 2H)

なお、上記の合成例以外に、これらの化合物のアザカルバゾール環やその類縁体は、J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1, 1505–1510(1999)、Pol. J. Chem., 54, 1585(1980)、(Tetrahedron

Lett. 41(2000), 481–484)に記載される合成法に従って合成することができる。合成されたアザカルバゾール環やその類縁体と、芳香環、複素環、アルキル基等の、コア、連結基への導入は、ウルマンカップリング、Pd触媒を用いたカップリング、スズキカップリング等公知の方法を用いることができる。

[0322] 本発明に係る化合物は分子量が400以上であることが好ましく、450以上であることがより好ましく、さらに好ましくは600以上であり、特に好ましくは分子量が800以上である。これによりガラス転移温度を上昇させ熱安定性が向上し、より一層長寿命化をさせることができる。

[0323] 次に、本発明の有機EL素子の構成層について詳細に説明する。本発明において、有機EL素子の層構成の好ましい具体例を以下に示すが、本発明はこれらに限定されない。(i)陽極/発光層/電子輸送層/陰極(ii)陽極/正孔輸送層/発光層/電子輸送層/陰極(iii)陽極/正孔輸送層/発光層/正孔阻止層/電子輸送層/陰極(iv)陽極/正孔輸送層/発光層/正孔阻止層/電子輸送層/陰極バッファ層/陰極(v)陽極/陽極バッファ層/正孔輸送層/発光層/正孔阻止層/電子輸送層/陰極バッファ層/陰極

《陽極》

有機EL素子における陽極としては、仕事関数の大きい(4eV以上)金属、合金、電気伝導性化合物及びこれらの混合物を電極物質とするものが好ましく用いられる。このような電極物質の具体例としてはAu等の金属、CuI、インジウムチンオキサイド(ITO)、SnO₂、ZnO等の導電性透明材料が挙げられる。また、IDIXO(In₂O₃-ZnO)等非晶質で透明導電膜を作製可能な材料を用いてもよい。陽極はこれらの電極物質を蒸着やスパッタリング等の方法により、薄膜を形成させ、フォトリソグラフィ法で所望の形状のパターンを形成してもよく、あるいはパターン精度をあまり必要としない場合

は(100 μ m以上程度)、上記電極物質の蒸着やスパッタリング時に所望の形状のマスクを介してパターンを形成してもよい。この陽極より発光を取り出す場合には、透過率を10%より大きくすることが望ましく、また陽極としてのシート抵抗は数百 Ω / \square 以下が好ましい。さらに膜厚は材料にもよるが、通常10~1000nm、好ましくは10~2000nmの範囲で選ばれる。

[0324] 《陰極》

一方、陰極としては、仕事関数の小さい(4eV以下)金属(電子注入性金属と称する)、合金、電気伝導性化合物及びこれらの混合物を電極物質とするものが用いられる。このような電極物質の具体例としては、ナトリウム、ナトリウム-カリウム合金、マグネシウム、リチウム、マグネシウム/銅混合物、マグネシウム/銀混合物、マグネシウム/アルミニウム混合物、マグネシウム/インジウム混合物、アルミニウム/酸化アルミニウム(Al_2O_3)混合物、インジウム、リチウム/アルミニウム混合物、希土類金属等が挙げられる。これらの中で、電子注入性及び酸化等に対する耐久性の点から、電子注入性金属とこれより仕事関数の値が大きく安定な金属である第二金属との混合物、例えば、マグネシウム/銀混合物、マグネシウム/アルミニウム混合物、マグネシウム/インジウム混合物、アルミニウム/酸化アルミニウム(Al_2O_3)混合物、リチウム/アルミニウム混合物、アルミニウム等が好適である。陰極はこれらの電極物質を蒸着やスパッタリング等の方法により薄膜を形成させることにより、作製することができる。また、陰極としてのシート抵抗は数百 Ω / \square 以下が好ましく、膜厚は通常10nm~5 μ m、好ましくは50~200nmの範囲で選ばれる。なお、発光した光を透過させるため、有機EL素子の陽極または陰極のいずれか一方が、透明または半透明であれば発光輝度が向上し好都合である。

[0325] また、陰極に上記金属を1~20nmの膜厚で作製した後に、陽極の説明で挙げた導電性透明材料をその上に作製することで、透明または半透明の陰極を作製することができ、これを応用することで陽極と陰極の両方が透過性を有する素子を作製することができる。

[0326] 次に、本発明の有機EL素子の構成層として用いられる、注入層、阻止層、電子輸送層等について説明する。

[0327] 《注入層:電子注入層、正孔注入層》

注入層は必要に応じて設け、電子注入層と正孔注入層があり、上記のごとく陽極と発光層または正孔輸送層の間、及び陰極と発光層または電子輸送層との間に存在させてもよい。

[0328] 注入層とは、駆動電圧低下や発光輝度向上のために電極と有機層間に設けられる層のことで、「有機EL素子とその工業化最前線(1998年11月30日エヌ・ティー・エス社発行)」の第2編第2章「電極材料」(123～166頁)に詳細に記載されており、正孔注入層(陽極バッファー層)と電子注入層(陰極バッファー層)とがある。

[0329] 陽極バッファー層(正孔注入層)は、特開平9-45479号公報、同9-260062号公報、同8-288069号公報等にもその詳細が記載されており、具体例として、銅フタロシアンに代表されるフタロシアンバッファー層、酸化バナジウムに代表される酸化物バッファー層、アモルファスカーボンバッファー層、ポリアニリン(エメラルディン)やポリチオフェン等の導電性高分子を用いた高分子バッファー層等が挙げられる。

[0330] 陰極バッファー層(電子注入層)は、特開平6-325871号公報、同9-17574号公報、同10-74586号公報等にもその詳細が記載されており、具体的にはストロンチウムやアルミニウム等に代表される金属バッファー層、フッ化リチウムに代表されるアルカリ金属化合物バッファー層、フッ化マグネシウムに代表されるアルカリ土類金属化合物バッファー層、酸化アルミニウムに代表される酸化物バッファー層等が挙げられる。上記バッファー層(注入層)はごく薄い膜であることが望ましく、素材にもよるがその膜厚は0.1nm～5 μ mの範囲が好ましい。

[0331] 《阻止層:正孔阻止層、電子阻止層》

阻止層は、上記のごとく、有機化合物薄膜の基本構成層の他に必要に応じて設けられるものである。例えば、特開平11-204258号公報、同11-204359号公報、及び「有機EL素子とその工業化最前線(1998年11月30日エヌ・ティー・エス社発行)」の237頁等に記載されている正孔阻止(ホールブロック)層がある。

[0332] 正孔阻止層とは広い意味では電子輸送層であり、電子を輸送する機能を有しつつ正孔を輸送する能力が著しく小さい正孔阻止材料からなり、電子を輸送しつつ正孔

を阻止することで電子と正孔の再結合確率を向上させることができる。

[0333] 本発明の有機EL素子の正孔阻止層は、発光層に隣接して設けられている。

[0334] 本発明では、正孔阻止層の正孔阻止材料として前述した本発明に係る化合物を含有させることが好ましい。これにより、より一層発光効率の高い有機EL素子とすることができる。さらにより一層長寿命化させることができる。

[0335] 一方、電子阻止層とは広い意味では正孔輸送層であり、正孔を輸送する機能を有しつつ電子を輸送する能力が著しく小さい材料からなり、正孔を輸送しつつ電子を阻止することで電子と正孔の再結合確率を向上させることができる。

[0336] 《発光層》

本発明に係る発光層は、電極または電子輸送層、正孔輸送層から注入されてくる電子及び正孔が再結合して発光する層であり、発光する部分は発光層の層内であっても発光層と隣接層との界面であってもよい。

[0337] (ホスト化合物)

本発明の有機EL素子の発光層には、以下に示す、ホスト化合物とリン光性化合物(リン光発光性化合物ともいう)が含有されることが好ましく、本発明においては、ホスト化合物として前述した本発明に係る化合物を用いることが好ましい。これにより、より一層発光効率を高くすることができる。また、ホスト化合物として、上記の本発明に係る化合物以外の化合物を含有してもよい。

[0338] ここで、本発明においてホスト化合物とは、発光層に含有される化合物のうちで室温(25℃)においてリン光発光のリン光量子収率が、0.01未満の化合物と定義される。

[0339] さらに公知のホスト化合物を複数種併用して用いてもよい。ホスト化合物を複数種用いることで、電荷の移動を調整することが可能であり、有機EL素子を高効率化することができる。また、リン光性化合物を複数種用いることで、異なる発光を混ぜることが可能となり、これにより任意の発光色を得ることができる。リン光性化合物の種類、ドーパ量を調整することで白色発光が可能であり、照明、バックライトへの応用もできる。

[0340] これらの公知のホスト化合物としては、正孔輸送能、電子輸送能を有しつつ、かつ

発光の長波長化を防ぎ、なおかつ高T_g(ガラス転移温度)である化合物が好ましい。

- [0341] 公知のホスト化合物の具体例としては、以下の文献に記載されている化合物が挙げられる。
- [0342] 特開2001-257076号公報、同2002-308855号公報、同2001-313179号公報、同2002-319491号公報、同2001-357977号公報、同2002-334786号公報、同2002-8860号公報、同2002-334787号公報、同2002-15871号公報、同2002-334788号公報、同2002-43056号公報、同2002-334789号公報、同2002-75645号公報、同2002-338579号公報、同2002-105445号公報、同2002-343568号公報、同2002-141173号公報、同2002-352957号公報、同2002-203683号公報、同2002-363227号公報、同2002-231453号公報、同2003-3165号公報、同2002-234888号公報、同2003-27048号公報、同2002-255934号公報、同2002-260861号公報、同2002-280183号公報、同2002-299060号公報、同2002-302516号公報、同2002-305083号公報、同2002-305084号公報、同2002-308837号公報等。
- [0343] また、発光層は、ホスト化合物としてさらに蛍光極大波長を有するホスト化合物を含有していてもよい。この場合、他のホスト化合物とリン光性化合物から蛍光性化合物へのエネルギー移動で、有機EL素子としての電界発光は蛍光極大波長を有する他のホスト化合物からの発光も得られる。蛍光極大波長を有するホスト化合物として好ましいのは、溶液状態で蛍光量子収率が高いものである。ここで、蛍光量子収率は10%以上、特に30%以上が好ましい。具体的な蛍光極大波長を有するホスト化合物としては、クマリン系色素、ピラン系色素、シアニン系色素、クロコニウム系色素、スクアリウム系色素、オキソベンツアントラセン系色素、フルオレセイン系色素、ローダミン系色素、ピリリウム系色素、ペリレン系色素、スチルベン系色素、ポリチオフェン系色素等が挙げられる。蛍光量子収率は、前記第4版実験化学講座7の分光IIの362頁(1992年版、丸善)に記載の方法により測定することができる。
- [0344] (リン光性化合物)
- 発光層に使用される材料(以下、発光材料という)としては、上記のホスト化合物を含有すると同時に、リン光性化合物を含有することが好ましい。これにより、より発光

効率の高い有機EL素子とすることができる。

[0345] 本発明に係るリン光性化合物は、励起三重項からの発光が観測される化合物であり、室温(25℃)にてリン光発光する化合物であり、リン光量子収率が、25℃において0.01以上の化合物である。リン光量子収率は好ましくは0.1以上である。上記リン光量子収率は、第4版実験化学講座7の分光IIの398頁(1992年版、丸善)に記載の方法により測定できる。溶液中でのリン光量子収率は種々の溶媒を用いて測定できるが、本発明に用いられるリン光性化合物は、任意の溶媒のいずれかにおいて上記リン光量子収率が達成されればよい。

[0346] リン光性化合物の発光は原理としては2種挙げられ、一つはキャリアが輸送されるホスト化合物上でキャリアの再結合が起こってホスト化合物の励起状態が生成し、このエネルギーをリン光性化合物に移動させることでリン光性化合物からの発光を得るというエネルギー移動型、もう一つはリン光性化合物がキャリアトラップとなり、リン光性化合物上でキャリアの再結合が起こりリン光性化合物からの発光が得られるというキャリアトラップ型であるが、いずれの場合においても、リン光性化合物の励起状態のエネルギーはホスト化合物の励起状態のエネルギーよりも低いことが条件である。

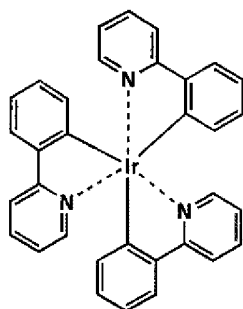
[0347] リン光性化合物は、有機EL素子の発光層に使用される公知のものの中から適宜選択して用いることができる。

[0348] 本発明で用いられるリン光性化合物としては、好ましくは元素の周期表で8族～10族の金属を含有する錯体系化合物であり、さらに好ましくはイリジウム化合物、オスmium化合物、または白金化合物(白金錯体系化合物)、希土類錯体であり、中でも最も好ましいのはイリジウム化合物である。

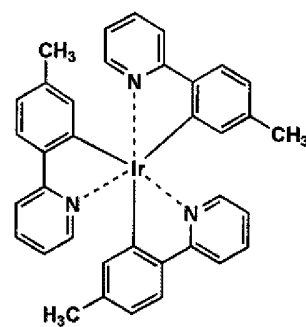
[0349] 以下に、リン光性化合物の具体例を示すが、本発明はこれらに限定されない。これらの化合物は、例えば、Inorg. Chem. 40巻、1704～1711に記載の方法等により合成できる。

[0350] [化118]

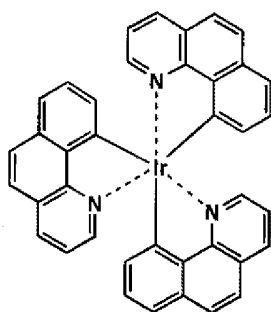
Ir-1



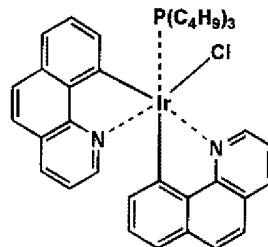
Ir-2



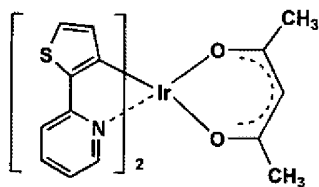
Ir-3



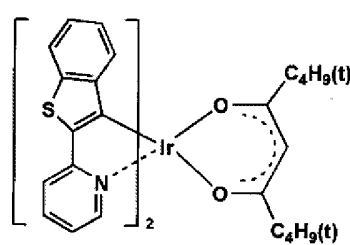
Ir-4



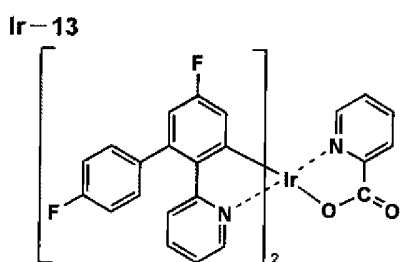
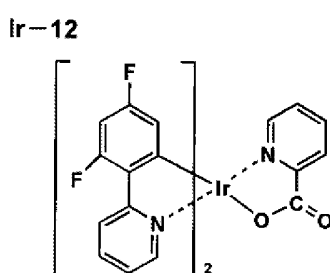
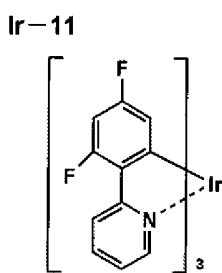
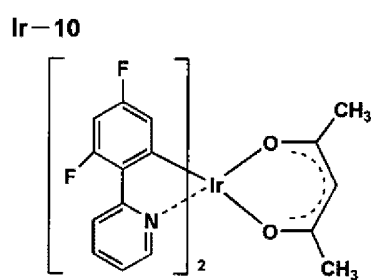
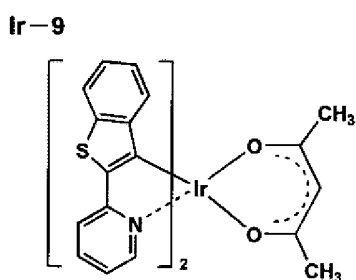
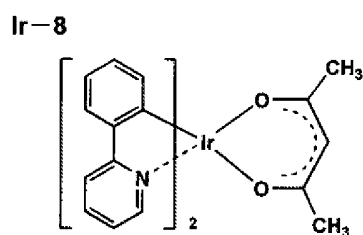
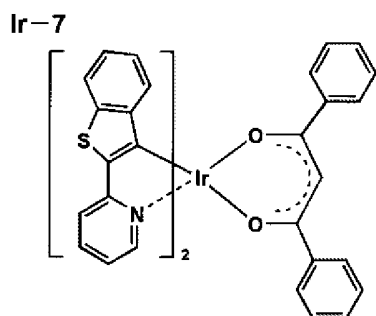
Ir-5



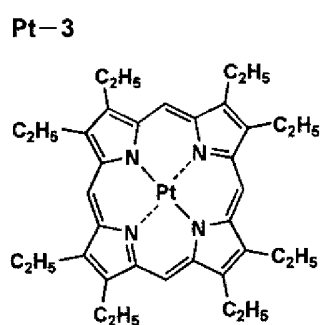
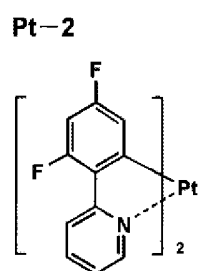
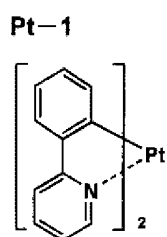
Ir-6



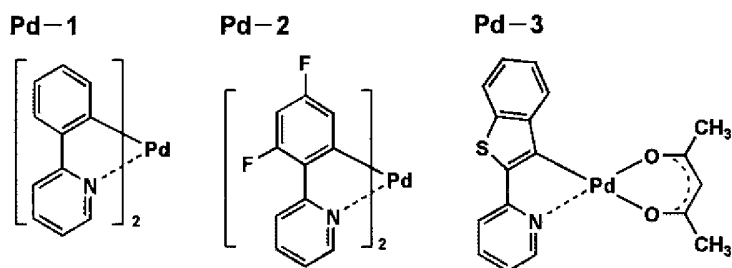
[0351] [化119]



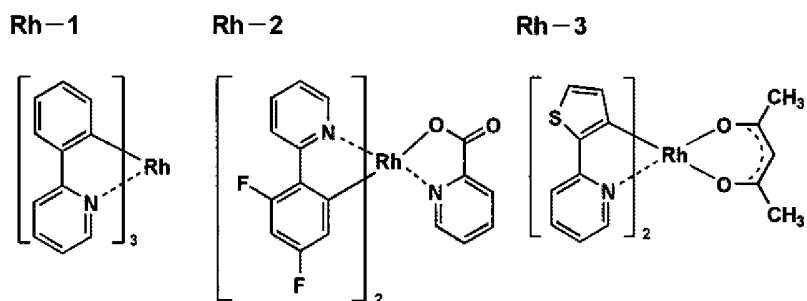
[0352] [化120]



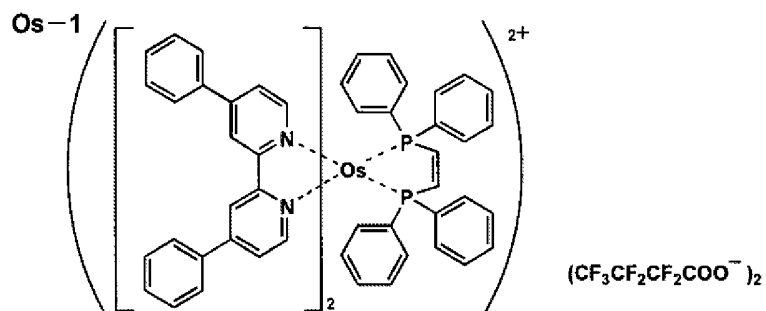
[0353] [化121]



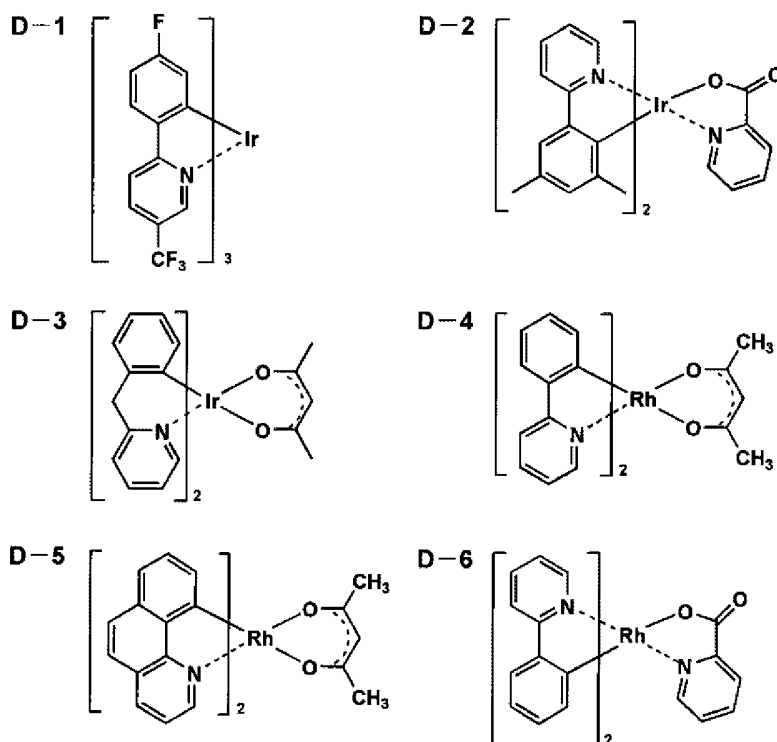
[0354] [化122]



[0355] [化123]



[0356] [化124]



[0357] 本発明においては、リン光性化合物のリン光発光極大波長としては特に制限されるものではなく、原理的には中心金属、配位子、配位子の置換基等を選択することで得られる発光波長を変化させることができるが、リン光性化合物のリン光発光波長が380～480nmにリン光発光の極大波長を有することが好ましい。このような青色リン光発光の有機EL素子や、白色リン光発光の有機EL素子で、より一層発光効率を高めることができる。

[0358] 本発明の有機EL素子や本発明に係る化合物の発光する色は、「新編色彩科学ハンドブック」(日本色彩学会編、東京大学出版会、1985)の108頁の図4.16において、分光放射輝度計CS-1000(コニカミノルタセンシング社製)で測定した結果をCIE色度座標に当てはめたときの色で決定される。

[0359] 発光層は上記化合物を、例えば真空蒸着法、スピコート法、キャスト法、LB法、インクジェット法等の公知の薄膜化法により製膜して形成することができる。発光層としての膜厚は特に制限はないが、通常は5nm～5 μ m、好ましくは5～200nmの範囲で選ばれる。この発光層はこれらのリン光性化合物やホスト化合物が1種または2種以上からなる一層構造であってもよいし、あるいは同一組成または異種組成の複数

層からなる積層構造であってもよい。

[0360] 《正孔輸送層》

正孔輸送層とは正孔を輸送する機能を有する正孔輸送材料からなり、広い意味で正孔注入層、電子阻止層も正孔輸送層に含まれる。正孔輸送層は単層または複数層設けることができる。

[0361] 正孔輸送材料としては、正孔の注入または輸送、電子の障壁性のいずれかを有するものであり、有機物、無機物のいずれであってもよい。例えば、トリアゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、ポリアリールアルカン誘導体、ピラゾリン誘導体及びピラゾロン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、アリールアミン誘導体、アミノ置換カルコン誘導体、オキサゾール誘導体、スチリルアントラセン誘導体、フルオレン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、シラザン誘導体、アニリン系共重合体、また導電性高分子オリゴマー、特にチオフェンオリゴマー等が挙げられる。

[0362] 正孔輸送材料としては上記のものを使用することができるが、ポルフィリン化合物、芳香族第三級アミン化合物及びスチリルアミン化合物、特に芳香族第三級アミン化合物を用いることが好ましい。

[0363] 芳香族第三級アミン化合物及びスチリルアミン化合物の代表例としては、N, N, N', N' -テトラフェニル-4, 4' -ジアミノフェニル; N, N' -ジフェニル-N, N' -ビス(3-メチルフェニル)-[1, 1' -ビフェニル]-4, 4' -ジアミン(TPD); 2, 2-ビス(4-ジ-p-トリルアミノフェニル)プロパン; 1, 1-ビス(4-ジ-p-トリルアミノフェニル)シクロヘキサン; N, N, N', N' -テトラ-p-トリル-4, 4' -ジアミノビフェニル; 1, 1-ビス(4-ジ-p-トリルアミノフェニル)-4-フェニルシクロヘキサン; ビス(4-ジメチルアミノ-2-メチルフェニル)フェニルメタン; ビス(4-ジ-p-トリルアミノフェニル)フェニルメタン; N, N' -ジフェニル-N, N' -ジ(4-メトキシフェニル)-4, 4' -ジアミノビフェニル; N, N, N', N' -テトラフェニル-4, 4' -ジアミノジフェニルエーテル; 4, 4' -ビス(ジフェニルアミノ)クオードリフェニル; N, N, N-トリ(p-トリル)アミン; 4-(ジ-p-トリルアミノ)-4' -[4-(ジ-p-トリルアミノ)スチリル]スチルベン; 4-N, N-ジフェニルアミノ-(2-ジフェニル

ルビニル)ベンゼン;3-メキシ-4'-N, N-ジフェニルアミノスチルベンゼン;N-フェニルカルバゾール、さらには米国特許第5, 061, 569号明細書に記載されている2個の縮合芳香族環を分子内に有するもの、例えば、4, 4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(NPD)、特開平4-308688号公報に記載されているトリフェニルアミンユニットが3つスターバースト型に連結された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(MTDATA)等が挙げられる。

- [0364] さらに、これらの材料を高分子鎖に導入した、またはこれらの材料を高分子の主鎖とした高分子材料を用いることもできる。また、p型-Si、p型-SiC等の無機化合物も正孔注入材料、正孔輸送材料として使用することができる。
- [0365] 正孔輸送層は上記正孔輸送材料を、例えば、真空蒸着法、スピコート法、キャスト法、インクジェット法を含む印刷法、LB法等の公知の方法により、薄膜化することにより形成することができる。正孔輸送層の膜厚については特に制限はないが、通常は5nm~5 μ m程度、好ましくは5~200nmである。この正孔輸送層は上記材料の1種または2種以上からなる一層構造であってもよい。
- [0366] 《電子輸送層》
- 電子輸送層とは電子を輸送する機能を有する材料からなり、広い意味で電子注入層、正孔阻止層も電子輸送層に含まれる。電子輸送層は単層または複数層設けることができる。
- [0367] 従来、単層の電子輸送層、及び複数層とする場合は発光層に対して陰極側に隣接する電子輸送層に用いられる電子輸送材料(正孔阻止材料を兼ねる)としては、陰極より注入された電子を発光層に伝達する機能を有していればよく、その材料としては従来公知の化合物の中から任意のものを選択して用いることができ、例えば、ニトロ置換フルオレン誘導体、ジフェニルキノ誘導体、チオピランジオキシド誘導体、カルボジイミド、フレオレニリデンメタン誘導体、アントラキノジメタン及びアントロン誘導体、オキサジアゾール誘導体等が挙げられる。さらに、上記オキサジアゾール誘導体において、オキサジアゾール環の酸素原子を硫黄原子に置換したチアジアゾール誘導体、電子吸引基として知られているキノキサリン環を有するキノキサリン誘導体も、

電子輸送材料として用いることができる。さらにこれらの材料を高分子鎖に導入した、またはこれらの材料を高分子の主鎖とした高分子材料を用いることもできる。

[0368] また、8-キノリノール誘導体の金属錯体、例えば、トリス(8-キノリノール)アルミニウム(Alq)、トリス(5, 7-ジクロロ-8-キノリノール)アルミニウム、トリス(5, 7-ジブromo-8-キノリノール)アルミニウム、トリス(2-メチル-8-キノリノール)アルミニウム、トリス(5-メチル-8-キノリノール)アルミニウム、ビス(8-キノリノール)亜鉛(Znq)等、及びこれらの金属錯体の中心金属がIn、Mg、Cu、Ca、Sn、GaまたはPbに置き替わった金属錯体も、電子輸送材料として用いることができる。その他、メタルフリーもしくはメタルフタロシアニン、またはそれらの末端がアルキル基やスルホン酸基等で置換されているものも、電子輸送材料として好ましく用いることができる。また、発光層の材料として例示したジスチリルピラジン誘導体も、電子輸送材料として用いることができるし、正孔注入層、正孔輸送層と同様に、n型-Si、n型-SiC等の無機半導体も電子輸送材料として用いることができる。

[0369] 電子輸送層は上記電子輸送材料を、例えば、真空蒸着法、スピコート法、キャスト法、インクジェット法を含む印刷法、LB法等の公知の方法により、薄膜化することにより形成することができる。電子輸送層の膜厚については特に制限はないが、通常は5nm~5 μ m程度、好ましくは5~200nmである。電子輸送層は上記材料の1種または2種以上からなる一層構造であってもよい。

[0370] 《基体》

本発明の有機EL素子は、基体上に形成されているのが好ましい。

[0371] 本発明の有機EL素子に用いることのできる基体(以下、基板、基材、支持体等ともいう)としては、ガラス、プラスチック等の種類には特に限定はなく、また、透明のものであれば特に制限はないが、好ましく用いられる基板としては、例えば、ガラス、石英、光透過性樹脂フィルムを挙げることができる。特に好ましい基体は、有機EL素子にフレキシブル性を与えることが可能な樹脂フィルムである。

[0372] 樹脂フィルムとしては、例えば、ポリエチレンテレフタレート(PET)、ポリエチレンナフタレート(PEN)、ポリエーテルスルホン(PES)、ポリエーテルイミド、ポリエーテルエーテルケトン、ポリフェニレンスルフィド、ポリアリレート、ポリイミド、ポリカーボネート

(PC)、セルローストリアセテート(TAC)、セルロースアセテートプロピオネート(CAP)等からなるフィルム等が挙げられる。樹脂フィルムの表面には、無機物、有機物の被膜またはその両者のハイブリッド被膜が形成されていてもよい。

[0373] 本発明の有機EL素子の発光の室温における外部取り出し効率率は1%以上であることが好ましく、より好ましくは5%以上である。ここに、外部取り出し量子効率(%) = 有機EL素子外部に発光した光子数 / 有機EL素子に流した電子数 × 100である。

[0374] また、カラーフィルター等の色相改良フィルター等を併用しても、有機EL素子からの発光色を蛍光体を用いて多色へ変換する色変換フィルターを併用してもよい。色変換フィルターを用いる場合においては、有機EL素子の発光の λ_{\max} は480nm以下が好ましい。

[0375] 《有機EL素子の作製方法》

本発明の有機EL素子の作製方法の一例として、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 / 陰極からなる有機EL素子の作製法について説明する。

[0376] まず適当な基体上に所望の電極物質、例えば、陽極用物質からなる薄膜を1 μ m以下、好ましくは10~200nmの膜厚になるように、蒸着やスパッタリング等の方法により形成させ、陽極を作製する。次に、この上に有機EL素子材料である正孔注入層、正孔輸送層、発光層、電子輸送層、電子注入層、正孔阻止層の有機化合物薄膜を形成させる。

[0377] この有機化合物薄膜の薄膜化の方法としては、前記の如く蒸着法、ウェットプロセス(スピコート法、キャスト法、インクジェット法、印刷法)等があるが、均質な膜が得られやすく、かつピンホールが生成しにくい等の点から、真空蒸着法、スピコート法、インクジェット法、印刷法が特に好ましい。さらに層ごとに異なる製膜法を適用してもよい。製膜に蒸着法を採用する場合、その蒸着条件は使用する化合物の種類等により異なるが、一般にボート加熱温度50~450°C、真空度 10^{-6} ~ 10^{-2} Pa、蒸着速度0.01~50nm/秒、基板温度-50~300°C、膜厚0.1nm~5 μ m、好ましくは5~200nmの範囲で適宜選ぶことが望ましい。

[0378] これらの層を形成後、その上に陰極用物質からなる薄膜を、1 μ m以下好ましくは5

0nm～200nmの範囲の膜厚になるように、例えば、蒸着やスパッタリング等の方法により形成させ、陰極を設けることにより所望の有機EL素子が得られる。この有機EL素子の作製は、一回の真空引きで一貫して正孔注入層から陰極まで作製するのが好ましいが、途中で取り出して異なる製膜法を施しても構わない。その際、作業を乾燥不活性ガス雰囲気下で行う等の配慮が必要となる。

- [0379] 本発明の多色の表示装置は発光層形成時のみシャドーマスクを設け、他層は共通であるのでシャドーマスク等のパターニングは不要であり、一面に蒸着法、キャスト法、スピコート法、インクジェット法、印刷法等で膜を形成できる。発光層のみパターニングを行う場合、その方法に限定はないが、好ましくは蒸着法、インクジェット法、印刷法である。蒸着法を用いる場合においては、シャドーマスクを用いたパターニングが好ましい。
- [0380] また作製順序を逆にして、陰極、電子注入層、電子輸送層、発光層、正孔輸送層、正孔注入層、陽極の順に作製することも可能である。このようにして得られた多色の表示装置に、直流電圧を印加する場合には、陽極を+、陰極を-の極性として電圧2～40V程度を印加すると、発光が観測できる。また交流電圧を印加してもよい。なお、印加する交流の波形は任意でよい。
- [0381] 本発明の表示装置は、表示デバイス、ディスプレイ、各種発光光源として用いることができる。表示デバイス、ディスプレイにおいて、青、赤、緑発光の3種の有機EL素子を用いることにより、フルカラーの表示が可能となる。
- [0382] 表示デバイス、ディスプレイとしてはテレビ、パソコン、モバイル機器、AV機器、文字放送表示、自動車内の情報表示等が挙げられる。特に静止画像や動画像を再生する表示装置として使用してもよく、動画再生用の表示装置として使用する場合の駆動方式は単純マトリックス(パッシブマトリックス)方式でもアクティブマトリックス方式でもどちらでもよい。
- [0383] 本発明の照明装置は家庭用照明、車内照明、時計や液晶用のバックライト、看板広告、信号機、光記憶媒体の光源、電子写真複写機の光源、光通信処理機の光源、光センサの光源等が挙げられるがこれに限定するものではない。
- [0384] また、本発明の有機EL素子に共振器構造を持たせた有機EL素子として用いても

よい。このような共振器構造を有した有機EL素子の使用目的としては、光記憶媒体の光源、電子写真複写機の光源、光通信処理機の光源、光センサの光源等が挙げられるが、これらに限定されない。また、レーザ発振をさせることにより、上記用途に使用してもよい。

[0385] 本発明の有機EL素子は、照明用や露光光源のような1種のランプとして使用してもよいし、画像を投影するタイプのプロジェクション装置や、静止画像や動画像を直接視認するタイプの表示装置(ディスプレイ)として使用してもよい。動画再生用の表示装置として使用する場合の駆動方式は単純マトリックス(パッシブマトリックス)方式でもアクティブマトリックス方式でもどちらでもよい。または、異なる発光色を有する本発明の有機EL素子を3種以上使用することにより、フルカラー表示装置を作製することが可能である。または、一色の発光色、例えば、白色発光を、カラーフィルターを用いてBGRにし、フルカラー化することも可能である。さらに有機ELの発光色を、色変換フィルターを用いて他色に変換しフルカラー化することも可能であるが、その場合、有機EL発光の λ_{\max} は480nm以下であることが好ましい。

[0386] 有機EL素子から構成される表示装置の一例を図面に基づいて以下に説明する。

[0387] 図1は、有機EL素子から構成される表示装置の一例を示した模式図である。有機EL素子の発光により画像情報の表示を行う、例えば、携帯電話等のディスプレイの模式図である。

[0388] ディスプレイ1は、複数の画素を有する表示部A、画像情報に基づいて表示部Aの画像走査を行う制御部B等からなる。

[0389] 制御部Bは、表示部Aと電氣的に接続され、複数の画素それぞれに外部からの画像情報に基づいて走査信号と画像データ信号を送り、走査信号により走査線毎の画素が画像データ信号に応じて順次発光して画像走査を行って画像情報を表示部Aに表示する。

[0390] 図2は、表示部Aの模式図である。

[0391] 表示部Aは基板上に、複数の走査線5及びデータ線6を含む配線部と、複数の画素3等とを有する。表示部Aの主要な部材の説明を以下に行う。図2においては、画素3の発光した光が、白矢印方向(下方向)へ取り出される場合を示している。

- [0392] 配線部の走査線5及び複数のデータ線6は、各々導電材料からなり、走査線5とデータ線6は格子状に直交して、直交する位置で画素3に接続している(詳細は図示せず)。
- [0393] 画素3は、走査線5から走査信号が印加されると、データ線6から画像データ信号を受け取り、受け取った画像データに応じて発光する。発光の色が赤領域の画素、緑領域の画素、青領域の画素を、適宜、同一基板上に並置することによって、フルカラー表示が可能となる。
- [0394] 次に、画素の発光プロセスを説明する。
- [0395] 図3は、画素の模式図である。
- [0396] 画素は、有機EL素子10、スイッチングトランジスタ11、駆動トランジスタ12、コンデンサ13等を備えている。複数の画素に有機EL素子10として、赤色、緑色、青色発光の有機EL素子を用い、これらを同一基板上に並置することでフルカラー表示を行うことができる。
- [0397] 図3において、制御部Bからデータ線6を介してスイッチングトランジスタ11のドレインに画像データ信号が印加される。そして、制御部Bから走査線5を介してスイッチングトランジスタ11のゲートに走査信号が印加されると、スイッチングトランジスタ11の駆動がオンし、ドレインに印加された画像データ信号がコンデンサ13と駆動トランジスタ12のゲートに伝達される。
- [0398] 画像データ信号の伝達により、コンデンサ13が画像データ信号の電位に応じて充電されるとともに、駆動トランジスタ12の駆動がオンする。駆動トランジスタ12は、ドレインが電源ライン7に接続され、ソースが有機EL素子10の電極に接続されており、ゲートに印加された画像データ信号の電位に応じて電源ライン7から有機EL素子10に電流が供給される。
- [0399] 制御部Bの順次走査により走査信号が次の走査線5に移ると、スイッチングトランジスタ11の駆動がオフする。しかし、スイッチングトランジスタ11の駆動がオフしてもコンデンサ13は充電された画像データ信号の電位を保持するので、駆動トランジスタ12の駆動はオン状態が保たれて、次の走査信号の印加が行われるまで有機EL素子10の発光が継続する。順次走査により次に走査信号が印加されたとき、走査信号に

同期した次の画像データ信号の電位に応じて駆動トランジスタ12が駆動して有機EL素子10が発光する。

- [0400] 即ち、有機EL素子10の発光は、複数の画素それぞれの有機EL素子10に対して、アクティブ素子であるスイッチングトランジスタ11と駆動トランジスタ12を設けて、複数の画素3それぞれの有機EL素子10の発光を行っている。このような発光方法をアクティブマトリックス方式と呼んでいる。
- [0401] ここで、有機EL素子10の発光は、複数の階調電位を持つ多値の画像データ信号による複数の階調の発光でもよいし、2値の画像データ信号による所定の発光量のオン、オフでもよい。
- [0402] また、コンデンサ13の電位の保持は、次の走査信号の印加まで継続して保持してもよいし、次の走査信号が印加される直前に放電させてもよい。
- [0403] 本発明においては、上述したアクティブマトリックス方式に限らず、走査信号が走査されたときのみデータ信号に応じて有機EL素子が発光させるパッシブマトリックス方式の発光駆動でもよい。
- [0404] 図4は、パッシブマトリックス方式による表示装置の模式図である。図4において、複数の走査線5と複数の画像データ線6が画素3を挟んで対向して格子状に設けられている。
- [0405] 順次走査により走査線5の走査信号が印加されたとき、印加された走査線5に接続している画素3が画像データ信号に応じて発光する。パッシブマトリックス方式では画素3にアクティブ素子がなく、製造コストの低減が計れる。
- [0406] 本発明に係る有機EL材料は、また照明装置として、実質白色の発光を生じる有機EL素子に適用できる。複数の発光材料により複数の発光色を同時に発光させて混色により白色発光を得る。複数の発光色の組み合わせとしては、青色、緑色、青色の3原色の3つの発光極大波長を含有させたものでもよいし、青色と黄色、青緑と橙色等の補色の関係を利用した2つの発光極大波長を含有したものでもよい。
- [0407] また、複数の発光色を得るための発光材料の組み合わせは、複数のリン光または蛍光を発光する材料(発光ドーパント)を、複数組み合わせたもの、蛍光またはリン光を発光する発光材料と、該発光材料からの光を励起光として発光する色素材料とを

組み合わせたもののいずれでもよいが、本発明に係わる白色有機エレクトロルミネッセンス素子においては、発光ドーパントを複数組み合わせる方式が好ましい。

- [0408] 複数の発光色を得るための有機エレクトロルミネッセンス素子の層構成としては、複数の発光ドーパントを、一つの発光層中に複数存在させる方法、複数の発光層を有し、各発光層中に発光波長の異なるドーパントをそれぞれ存在させる方法、異なる波長に発光する微小画素をマトリクス状に形成する方法等が挙げられる。
- [0409] 本発明に係る白色有機エレクトロルミネッセンス素子においては、必要に応じ製膜時にメタルマスクやインクジェットプリンティング法等でパターンニングを施してもよい。パターンニングする場合は、電極のみをパターンニングしてもいいし、電極と発光層をパターンニングしてもいいし、素子全層をパターンニングしてもいい。
- [0410] 発光層に用いる発光材料としては特に制限はなく、例えば、液晶表示素子におけるバックライトであれば、CF(カラーフィルター)特性に対応した波長範囲に適合するように、本発明に係る白金錯体、また公知の発光材料の中から任意のものを選択して組み合わせることで白色化すればよい。
- [0411] このように、白色発光する本発明の発光有機EL素子は、前記表示デバイス、ディスプレイに加えて、各種発光光源、照明装置として、家庭用照明、車内照明、また露光光源のような一種のランプとして、また液晶表示装置のバックライト等、表示装置にも有用に用いられる。
- [0412] その他、時計等のバックライト、看板広告、信号機、光記憶媒体等の光源、電子写真複写機の光源、光通信処理機の光源、光センサの光源等、さらには表示装置を必要とする一般の家庭用電気器具等広い範囲の用途が挙げられる。

実施例

- [0413] 実施例1

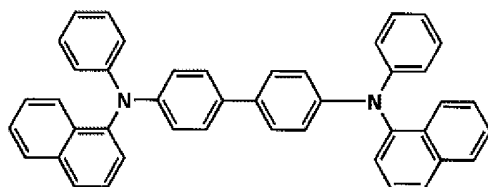
《有機EL素子1-1の作製》

陽極としてガラス上にITOを150nm成膜した基板(NHテクノグラス社製:NA-45)にパターンニングを行った後、このITO透明電極を設けた透明支持基板をiso-プロピルアルコールで超音波洗浄し、乾燥窒素ガスで乾燥し、UVオゾン洗浄を5分間行った。

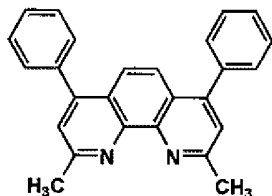
[0414] この透明支持基板を、市販の真空蒸着装置の基板ホルダーに固定し、一方、5つのタンタル製抵抗加熱ポートに、 α -NPD、CBP、Ir-12、BCP、Alq₃をそれぞれ入れて、真空蒸着装置(第1真空槽)に取付けた。

[0415] [化125]

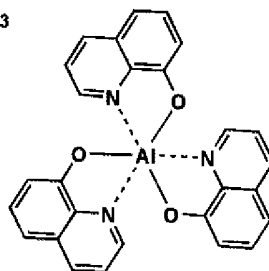
α -NPD



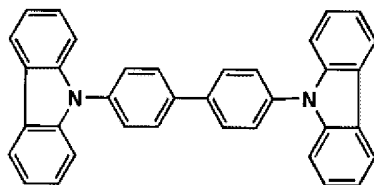
BCP



Alq₃



CBP



[0416] さらに、タンタル製抵抗加熱ポートにフッ化リチウムを、タングステン製抵抗加熱ポートにアルミニウムをそれぞれ入れ、真空蒸着装置の第2真空槽に取り付けた。

[0417] まず、第1の真空槽を 4×10^{-4} Paまで減圧した後、 α -NPDの入った前記加熱ポートに通電して加熱し、蒸着速度0.1~0.2nm/秒で透明支持基板に膜厚25nmの厚さになるように蒸着し、正孔注入/輸送層を設けた。

[0418] さらに、CBPの入った前記加熱ポートとIr-12の入ったポートをそれぞれ独立に通電して発光ホストであるCBPと発光ドーパントであるIr-12の蒸着速度が100:7になるように調節し膜厚30nmの厚さになるように蒸着し、発光層を設けた。

[0419] ついで、BCPの入った前記加熱ポートに通電して加熱し、蒸着速度0.1~0.2n

m/秒で厚さ10nmの正孔阻止層を設けた。さらに、Alq₃の入った前記加熱ボートを通電して加熱し、蒸着速度0.1~0.2nm/秒で膜厚40nmの電子輸送層を設けた。

[0420] 次に、前記の如く電子輸送層まで製膜した素子を真空のまま第2真空槽に移した後、電子輸送層の上にステンレス鋼製の長方形穴あきマスクが配置されるように装置外部からリモートコントロールして設置した。

[0421] 第2真空槽を 2×10^{-4} Paまで減圧した後、フッ化リチウム入りのボートに通電して蒸着速度0.01~0.02nm/秒で膜厚0.5nmの陰極バッファー層を設け、次いでアルミニウムの入ったボートに通電して蒸着速度1~2nm/秒で膜厚150nmの陰極をつけ、有機EL素子1-1を作製した。

[0422] 《有機EL素子1-2~1-20の作製》

上記の有機EL素子1-1の作製において、表1に記載のように発光ドーパント、発光ホスト、正孔阻止材料を変更した以外は同様にして、有機EL素子1-2~1-20を作製した。

[0423] 得られた有機EL素子1-1~1-20について下記のような評価を行った。

[0424] 《外部取り出し量子効率》

有機EL素子1-1~1-20を室温(約23~25°C)、 $2.5\text{mA}/\text{cm}^2$ の定電流条件下による点灯を行い、点灯開始直後の発光輝度(L)[cd/m^2]を測定することにより、外部取り出し量子効率(η)を算出した。ここで、発光輝度の測定は、CS-1000(ミノルタ製)を用いた。

[0425] また、外部取り出し量子効率は、有機EL素子1-1を100とした時の相対値で表した。

[0426] 《発光寿命》

有機EL素子1-1~1-20を室温下、 $2.5\text{mA}/\text{cm}^2$ の定電流条件下による連続点灯を行い、初期輝度の半分の輝度になるのに要する時間($\tau_{1/2}$)を測定した。また、発光寿命は、有機EL素子1-1を100とした時の相対値で表した。

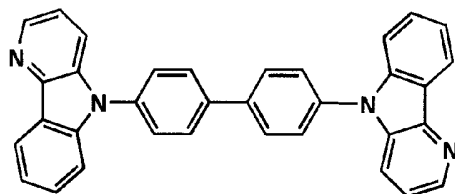
[0427] 得られた結果を表1に示す。

[0428] [表1]

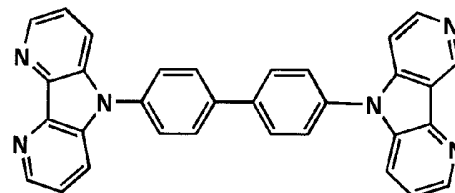
有機EL素子 No.	発光ホスト	発光ドーパント	正孔阻止 材料	外部取り出し 量子効率	発光寿命 ($\tau_{1/2}$)	備考
1-1	CBP	Ir-12	BCP	100	100	比較例
1-2	CBP	Ir-11	BCP	102	103	比較例
1-3	CBP	2	BCP	126	198	本発明
1-4	CBP	3	BCP	124	205	本発明
1-5	CBP	14	BCP	125	193	本発明
1-6	CBP	30	BCP	123	195	本発明
1-7	CBP	47	BCP	124	203	本発明
1-8	CBP	50	BCP	125	198	本発明
1-9	ACZ 1	43	BCP	133	217	本発明
1-10	ACZ 1	44	BCP	136	221	本発明
1-11	ACZ 2	49	BCP	134	232	本発明
1-12	ACZ 2	53	BCP	135	235	本発明
1-13	CBP	57	ACZ 1	142	246	本発明
1-14	CBP	63	ACZ 2	141	248	本発明
1-15	CBP	87	BCP	120	191	本発明
1-16	CBP	89	BCP	121	185	本発明
1-17	ACZ 1	103	BCP	131	209	本発明
1-18	ACZ 2	116	BCP	133	210	本発明
1-19	CBP	118	ACZ 1	140	234	本発明
1-20	CBP	120	ACZ 2	141	231	本発明

[0429] [化126]

ACZ1



ACZ2



[0430] 表1から、本発明に係る金属錯体を用いて作製した有機EL素子は、比較の有機EL素子に比べ、高い発光効率と発光寿命の長寿命化が達成できることが明らかであ

る。

[0431] カルボリン誘導体または該カルボリン誘導体のカルボリン環を構成する炭化水素環の炭素原子の少なくとも一つがさらに窒素原子で置換されている環構造を有する誘導体を発光層に併用することにより、また、カルボリン誘導体または該カルボリン誘導体のカルボリン環を構成する炭化水素環の炭素原子の少なくとも一つがさらに窒素原子で置換されている環構造を有する誘導体を正孔阻止層に使用することにより、さらに本発明に記載の効果の向上が見られた。

[0432] 実施例2

《フルカラー表示装置の作製》

(青色発光素子の作製)

実施例1の有機EL素子1-6を青色発光素子として用いた。

[0433] (緑色発光素子の作製)

実施例1の有機EL素子1-6において、Ir-1を緑色発光ドーパントとして用い緑色発光素子とした。

[0434] (赤色発光素子の作製)

実施例1の有機EL素子1-6において、Ir-9を赤色発光ドーパントとして用い赤色発光素子とした。

[0435] 上記で作製した、各々赤色、緑色、青色発光有機EL素子を同一基板上に並置し、図1に記載のような形態を有するアクティブマトリクス方式フルカラー表示装置を作製し、図2には、作製した前記表示装置の表示部Aの模式図のみを示した。即ち、同一基板上に、複数の走査線5及びデータ線6を含む配線部と、並置した複数の画素3(発光の色が赤領域の画素、緑領域の画素、青領域の画素等)とを有し、配線部の走査線5及び複数のデータ線6はそれぞれ導電材料からなり、走査線5とデータ線6は格子状に直交して、直交する位置で画素3に接続している(詳細は図示せず)。前記複数画素3は、それぞれの発光色に対応した有機EL素子、アクティブ素子であるスイッチングトランジスタと駆動トランジスタそれぞれが設けられたアクティブマトリクス方式で駆動されており、走査線5から走査信号が印加されると、データ線6から画像データ信号を受け取り、受け取った画像データに応じて発光する。この様に各赤、緑、

青の画素を適宜、並置することによって、フルカラー表示装置を作製した。

[0436] 該フルカラー表示装置を駆動することにより、輝度が高く、高耐久性を有し、かつ、鮮明なフルカラー動画表示が得られることが分かった。

[0437] 実施例3

《フルカラー表示装置の作製》

実施例2の青色発光素子の作製において、有機EL素子1-6を有機EL素子1-8に変更した以外は実施例2と同様にしてフルカラー表示装置を作製した。

[0438] 該フルカラー表示装置を駆動することにより、輝度が高く、高耐久性を有し、かつ、鮮明なフルカラー動画表示が得られることが分かった。

[0439] 実施例4

《フルカラー表示装置の作製》

実施例2の青色発光素子の作製において、有機EL素子1-6を有機EL素子1-13に変更した以外は実施例2と同様にしてフルカラー表示装置を作製した。

[0440] 該フルカラー表示装置を駆動することにより、輝度が高く、高耐久性を有し、かつ、鮮明なフルカラー動画表示が得られることが分かった。

[0441] 実施例5

《フルカラー表示装置の作製》

実施例2の青色発光素子の作製において、有機EL素子1-6を有機EL素子1-14に変更した以外は実施例2と同様にしてフルカラー表示装置を作製した。

[0442] 該フルカラー表示装置を駆動することにより、輝度が高く、高耐久性を有し、かつ、鮮明なフルカラー動画表示が得られることが分かった。

[0443] 実施例6

《白色発光素子及び白色照明装置の作製》

実施例1の透明電極基板の電極を20mm×20mmにパターンニングし、その上に実施例1と同様に正孔注入／輸送層として α -NPDを25nmの厚さで製膜し、さらに、CBPの入った前記加熱ボートと本発明の化合物44の入ったボート及びIr-9の入ったボートをそれぞれ独立に通電して発光ホストであるCBPと発光ドーパントである本発明の化合物44及びIr-9の蒸着速度が100:5:0.6になるように調節し膜厚30nm

mの厚さになるように蒸着し、発光層を設けた。

[0444] ついで、BCPを10nm製膜して正孔阻止層を設けた。さらに、Alq₃を40nmで製膜し電子輸送層を設けた。

[0445] 次に、実施例1と同様に、電子注入層の上にステンレス鋼製の透明電極とほぼ同じ形状の正方形穴あきマスクを設置し、陰極バッファ層としてフッ化リチウム0.5nm及び陰極としてアルミニウム150nmを蒸着製膜した。

[0446] この有機EL素子の非発光面をガラスケースで覆い、照明装置とした。照明装置は、発光効率が高く発光寿命の長い白色光を発する薄型の照明装置として使用することができた。図5は照明装置の概略図で、図6は照明装置の断面図である。有機EL素子101をガラスカバー102で覆った。105は陰極で106は有機EL層、107は透明電極付きガラス基板である。なおガラスカバー102内には窒素ガス108が充填され、捕水剤109が設けられている。

[0447] 実施例7

《白色発光素子及び白色照明装置の作製》

実施例6の白色発光素子の作製において、本発明の化合物44を47に変更した以外は実施例6と同様にして白色照明装置を作製した。

[0448] この照明装置に通電したところほぼ白色の光が得られ、照明装置として使用できることが分かった。

[0449] 実施例8

《白色発光素子及び白色照明装置の作製》

実施例6の白色発光素子の作製において、本発明の化合物44を49に変更した以外は実施例6と同様にして白色照明装置を作製した。

[0450] この照明装置に通電したところほぼ白色の光が得られ、照明装置として使用できることが分かった。

[0451] 実施例9

《塗布法による白色発光素子及び白色照明装置の作製》

25mm×25mm×0.5mmのガラス支持基板上に直流電源を用い、スパッタ法にてインジウム錫酸化物(ITO、インジウム/錫=95/5モル比)の陽極を形成した(厚

み200nm)。この陽極の表面抵抗は $10\Omega/\square$ であった。これにポリビニルカルバゾール(正孔輸送性バインダーポリマー)／本発明の化合物44(青発光性オルトメタル化錯体)／トリス(2-フェニルピリジン)イリジウム錯体(緑発光性オルトメタル化錯体: Ir-1)／ビス(2-ベンゾチオフェン[b]-2-イル-ピリジン)アセチルアセトナートイリジウム錯体(赤発光性オルトメタル化錯体: Ir-9)／2-(4-ビフェニル)-5-(4-t-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(電子輸送材)=200/2/5/2/50(質量比)を溶解したジクロロエタン溶液をスピコーターで塗布し、100nmの発光層を得た。この有機化合物層の上にパターンニングしたマスク(発光面積が5mm×5mmとなるマスク)を設置し、蒸着装置内で陰極バッファー層としてフッ化リチウム0.5nm及び陰極としてアルミニウム150nmを蒸着して陰極を設けた。陽極、陰極よりそれぞれアルミニウムのリード線を出して発光素子を作製した。該素子を窒素ガスで置換したグローブボックス内に入れ、ガラス製の封止容器で紫外線硬化型接着剤(長瀬チバ製、XNR5493)を用いて封止して照明装置を作製した。

[0452] この照明装置に通電したところほぼ白色の光が得られ、照明装置として使用できることが分かった。

[0453] 実施例10

《塗布法による白色発光素子及び白色照明装置の作製》

実施例9の白色発光素子の作製において、本発明の化合物44を53に変更した以外は実施例9と同様にして白色照明装置を作製した。

[0454] この照明装置に通電したところほぼ白色の光が得られ、照明装置として使用できることが分かった。

[0455] 実施例11

《塗布法による白色発光素子及び白色照明装置の作製》

実施例9の白色発光素子の作製において、本発明の化合物44を118に変更した以外は実施例9と同様にして白色照明装置を作製した。

[0456] この照明装置に通電したところほぼ白色の光が得られ、照明装置として使用できることが分かった。

[0457] 実施例12

《塗布法による白色発光素子及び白色照明装置の作製》

25mm×25mm×0.5mmのガラス支持基板上に直流電源を用い、スパッタ法にてインジウム錫酸化物(ITO、インジウム/錫=95/5モル比)の陽極を形成した(厚み200nm)。この陽極の表面抵抗は10Ω/□であった。これにポリビニルカルバゾール(正孔輸送性バインダーポリマー)/ACZ1(正孔輸送制御材)/本発明の化合物57(青発光性オルトメタル化錯体)/トリス(2-フェニルピリジン)イリジウム錯体(緑発光性オルトメタル化錯体:Ir-1)/ビス(2-ベンゾチオフェン[b]-2-イルピリジン)アセチルアセトナートイリジウム錯体(赤発光性オルトメタル化錯体:Ir-9)/2-(4-ビフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(電子輸送材)=150/50/2/5/2/50(質量比)を溶解したジクロロエタン溶液をスピンドクターで塗布し、100nmの発光層を得た。この有機化合物層の上にパターンニングしたマスク(発光面積が5mm×5mmとなるマスク)を設置し、蒸着装置内で陰極バッファー層としてフッ化リチウム0.5nm及び陰極としてアルミニウム150nmを蒸着して陰極を設けた。陽極、陰極よりそれぞれアルミニウムのリード線を出して発光素子を作成した。該素子を窒素ガスで置換したグローブボックス内に入れ、ガラス製の封止容器で紫外線硬化型接着剤(長瀬チバ製、XNR5493)を用いて封止して照明装置を作製した。

[0458] この照明装置に通電したところほぼ白色の光が得られ、照明装置として使用できることが分かった。

[0459] 実施例13

《白色発光素子及び白色照明装置の作製》

実施例12の白色発光素子の作製において、本発明の化合物57を61に変更した以外は実施例12と同様にして白色照明装置を作製した。

[0460] この照明装置に通電したところほぼ白色の光が得られ、照明装置として使用できることが分かった。

[0461] 実施例14

《白色発光素子及び白色照明装置の作製》

実施例12の白色発光素子の作製において、正孔輸送制御材ACZ1をACZ2に変

更した以外は実施例12と同様にして白色照明装置を作製した。

[0462] この照明装置に通電したところほぼ白色の光が得られ、照明装置として使用できることが分かった。

[0463] 実施例15

《有機EL素子2-1～2-13の作製》

実施例1の有機EL素子1-1において、発光ドーパントをIr-1に変更し、正孔阻止材料を表2に記載のように、変更した以外は同様にして、実施例1と同様にして有機EL素子2-1～2-13を作製した。

[0464] 得られた各々の素子の外部取り出し量子効率、発光寿命の測定を実施例1に記載の方法と同様にして行った。

[0465] この時、いずれも有機EL素子2-1の値を100として、各有機EL素子試料の値を相対値で表した。得られた結果を表2に示す。

[0466] [表2]

有機EL素子 No.	正孔阻止材料	外部取り出し量子効率	発光寿命 ($\tau_{1/2}$)	備考
2-1	BCP	100	100	比較例
2-2	5	114	253	本発明
2-3	8	113	254	本発明
2-4	22	115	256	本発明
2-5	28	116	255	本発明
2-6	36	113	252	本発明
2-7	54	118	255	本発明
2-8	61	113	253	本発明
2-9	66	120	255	本発明
2-10	73	115	250	本発明
2-11	77	113	251	本発明
2-12	92	116	250	本発明
2-13	110	114	249	本発明

[0467] 表2から、本発明の有機EL素子材料を正孔阻止材料に用いた有機EL素子は比較の有機EL素子に比べ、高い発光効率と発光寿命が得られることが分かった。なお、本発明の有機EL素子の発光色は全て緑色だった。

請求の範囲

- [1] 下記一般式(1)で表されるオルトメタル錯体であることを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[化1]

一般式(1)

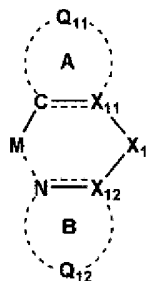


(式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。L、L' は互いに異なる二座配位子を表し、mは1または2であり、nは1または2である。ただし、m+nは2または3でありMの電荷と一致する。

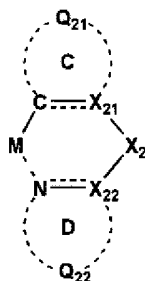
二座配位子L、L' が金属Mに配位した部分構造MLは下記一般式(2)で表され、部分構造ML' は下記一般式(3)または(4)で表される。

[化2]

一般式(2)



一般式(3)



一般式(4)



X_{11} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{11} は炭素原子及び X_{11} と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Aを形成する原子群を表す。 X_{12} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{12} は窒素原子及び X_{12} と共に5～6員の芳香族複素環である環Bを形成する原子群を表す。 X_1 はO、S、 CH_2 、CHR、 CR_2 、NR、PR、 SiR_2 、C=O、C=NR、SOまたは SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。

X_{21} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{21} は炭素原子及び X_{21} と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Cを形成する原子群を表す。 X_{22}

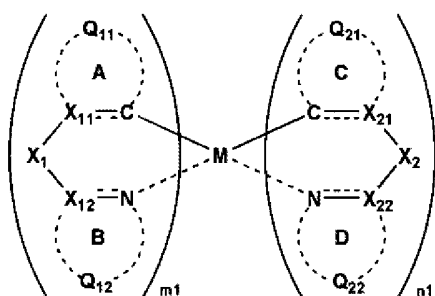
は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{22} は窒素原子及び X_{22} と共に5～6員の芳香族複素環である環Dを形成する原子群を表す。 X_{22} はO、S、 CH_2 、CHR、 CR_2 、NR、PR、 SiR_2 、C=O、C=NR、SOまたは SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。

X_{31} 、 X_{32} は窒素原子またはリン原子を表し、 X_3 は X_{31} 、 X_{32} を介してMに配位している二座配位子を形成する原子群を表す。)

- [2] 下記一般式(5)で表されるオルトメタル錯体であることを特徴とする請求の範囲第1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[化3]

一般式(5)



(式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。m1は1または2であり、n1は1または2である。ただし、m1+n1は2または3でありMの電荷と一致する。 X_{11} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{11} は炭素原子及び X_{11} と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Aを形成する原子群を表す。 X_{12} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{12} は窒素原子及び X_{12} と共に5～6員の芳香族複素環である環Bを形成する原子群を表す。 X_1 はO、S、 CH_2 、CHR、 CR_2 、NR、PR、 SiR_2 、C=O、C=NR、SOまたは SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。

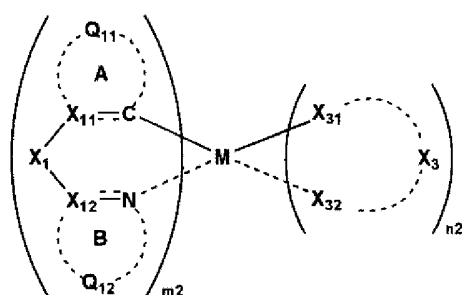
X_{21} は、炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{21} は炭素原子及び X_{21} と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Cを形成する原子群を表す。 X_{22} は炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{22} は窒素原子及び X_{22} と共に5～6員の芳香族複素環である環Dを形成する原子群を表す。 X_2 はO、S、 CH_2 、CHR、 CR_2 、NR、

PR、 SiR_2 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{NR}$ 、 SO または SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。ただし、環Aと環C、環Bと環Dが同時に同じものになることはない。)

- [3] 下記一般式(6)で表されるオルトメタル錯体であることを特徴とする請求の範囲第1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[化4]

一般式(6)

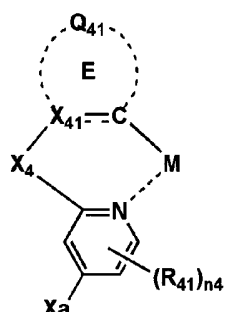


(式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。m2は1または2であり、n2は1または2である。ただし、m2+n2は2または3でありMの電荷と一致する。X₁₁は炭素原子または窒素原子を表し、Q₁₁は炭素原子及びX₁₁と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Aを形成する原子群を表す。X₁₂は炭素原子または窒素原子を表し、Q₁₂は窒素原子及びX₁₂と共に5～6員の芳香族複素環である環Bを形成する原子群を表す。X₁はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、 SiR_2 、 $\text{C}=\text{O}$ 、 $\text{C}=\text{NR}$ 、 SO または SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。X₃₁、X₃₂は窒素原子またはリン原子を表し、X₃はX₃₁、X₃₂を介してMに配位している二座配位子を形成する原子群を表す。)

- [4] 前記一般式(6)において、芳香族複素環Bが6員環であることを特徴とする請求の範囲第3項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。
- [5] 下記一般式(7)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする請求の範囲第1～4項のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[化5]

一般式(7)

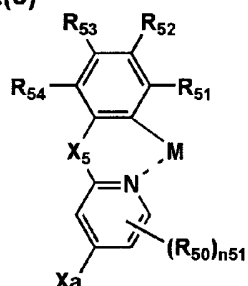


(式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。X₄₁は炭素原子または窒素原子を表し、Q₄₁は炭素原子及びX₄₁と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Eを形成する原子群を表す。R₄₁は置換基を表し、n₄₁は0～3から選ばれる整数を表す。Xaは-N(Ra)₂、-O-Raまたは-S-Raを表す。Raはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。Xaが-N(Ra)₂の場合、2つのRaは同じであっても異なってもよい。X₄はO、S、CH₂、CHR、CR₂、NR、PR、SiR₂、C=O、C=NR、SOまたはSO₂を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。)

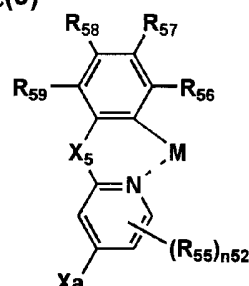
- [6] 下記一般式(8)または(9)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする請求の範囲第5項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[化6]

一般式(8)



一般式(9)

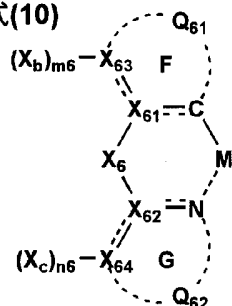


(式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。 R_{51} 、 R_{52} 、 R_{53} 、 R_{54} は、各々水素原子または電子供与性の置換基を表し、少なくとも1つは電子供与性の置換基である。 R_{56} 、 R_{57} 、 R_{58} 、 R_{59} は、各々水素原子または置換基を表し、 R_{56} 、 R_{58} の少なくとも一方は電子吸引性の置換基である。 R_{50} 、 R_{55} は置換基を表し、 n_{51} 、 n_{52} は0～3から選ばれる整数を表す。 X_a は $-N(Ra)_2$ 、 $-O-Ra$ または $-S-Ra$ を表す。 Ra はアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。 X_a が $-N(Ra)_2$ の場合、2つの Ra は同じであっても異なってもよい。 X_5 はO、S、 CH_2 、 CHR_2 、 CR_2 、NR、PR、 SiR_2 、 $C=O$ 、 $C=NR$ 、SOまたは SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。)

- [7] 下記一般式(10)で表される部分構造またはその互変異性体を部分構造として有するオルトメタル錯体であることを特徴とする請求の範囲第1～6項のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。

[化7]

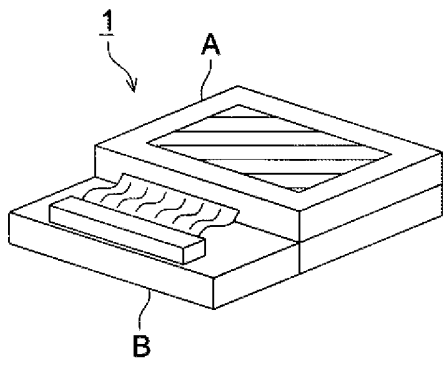
一般式(10)



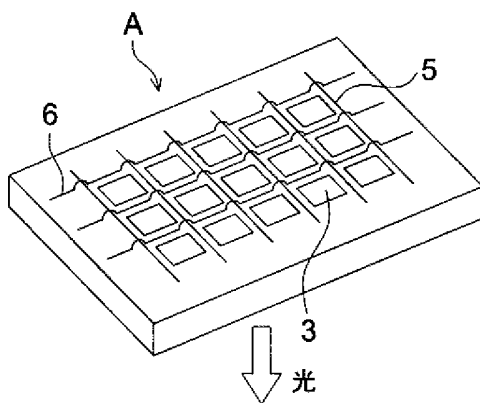
(式中、Mは元素周期表における第8～10族の金属元素を表す。 X_{61} 、 X_{62} 、 X_{63} 、 X_{64} は、各々炭素原子または窒素原子を表し、 Q_{61} は炭素原子及び X_{61} 、 X_{63} と共に6員の芳香族炭化水素環または5～6員の芳香族複素環である環Fを形成する原子群を表し、 Q_{62} は窒素原子及び X_{62} 、 X_{64} と共に5～6員の芳香族複素環である環Gを形成する原子群を表す。 X_b 、 X_c はファンデルワールス体積が 20 \AA^3 以上である置換基を表す。 m_6 、 n_6 は0または1を表す。ただし、 $m_6 + n_6 \geq 1$ である。 X_6 はO、S、 CH_2 、CHR、 CR_2 、NR、PR、 SiR_2 、C=O、C=NR、SOまたは SO_2 を表す。Rはアルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アリール基、複素環基または芳香族複素環基を表す。)

- [8] Mがイリジウムまたは白金であることを特徴とする請求の範囲第1～7項のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料。
- [9] 請求の範囲第1～8項のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料を含有することを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子。
- [10] 構成層として発光層を有し、該発光層が請求の範囲第1～8項のいずれか1項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子材料を含有することを特徴とする有機エレクトロルミネッセンス素子。

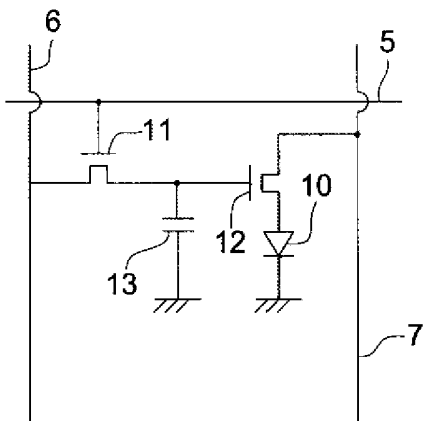
[図1]



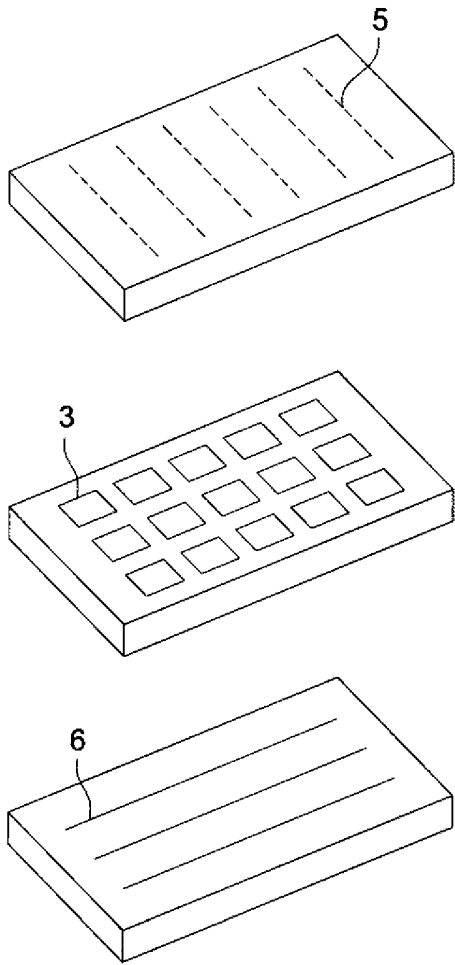
[図2]



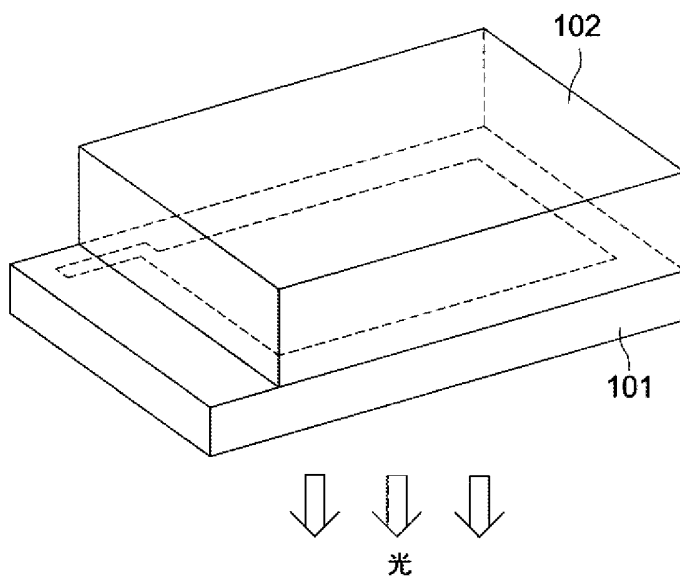
[図3]



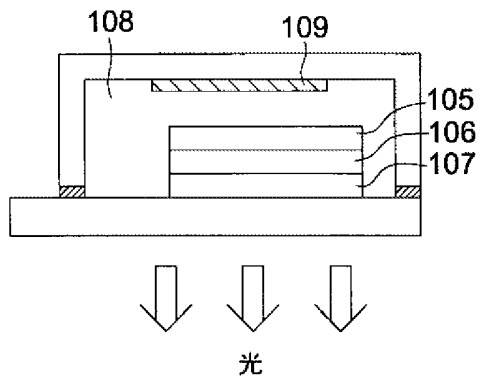
[図4]



[図5]



[図6]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2006/303110

<p>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER C09K11/06(2006.01) , C07F15/00(2006.01) , H01L51/50(2006.01)</p> <p>According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC</p>														
<p>B. FIELDS SEARCHED</p> <p>Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) C09K11/06 , H01L51/50</p> <p>Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2006 Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2006 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2006</p> <p>Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAPLUS (STN) , REGISTRY (STN)</p>														
<p>C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>Category*</th> <th>Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages</th> <th>Relevant to claim No.</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>A</td> <td>JP 2002-332291 A (Canon Inc.) , 22 November, 2002 (22.11.02) , Full text & US 2003/0068535 A1 & EP 1238981 A2</td> <td>1-10</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>JP 2002-332992 A (Canon Inc.) , 22 November, 2002 (22.11.02) , Full text & US 2003/0068536 A1 & EP 1239526 A2</td> <td>1-10</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>JP 2002-338588 A (Canon Inc.) , 27 November, 2002 (27.11.02) , Full text & US 2003/0085646 A1 & US 2005/0027123 A1 & EP 1244155 A2</td> <td>1-10</td> </tr> </tbody> </table>			Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.	A	JP 2002-332291 A (Canon Inc.) , 22 November, 2002 (22.11.02) , Full text & US 2003/0068535 A1 & EP 1238981 A2	1-10	A	JP 2002-332992 A (Canon Inc.) , 22 November, 2002 (22.11.02) , Full text & US 2003/0068536 A1 & EP 1239526 A2	1-10	A	JP 2002-338588 A (Canon Inc.) , 27 November, 2002 (27.11.02) , Full text & US 2003/0085646 A1 & US 2005/0027123 A1 & EP 1244155 A2	1-10
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.												
A	JP 2002-332291 A (Canon Inc.) , 22 November, 2002 (22.11.02) , Full text & US 2003/0068535 A1 & EP 1238981 A2	1-10												
A	JP 2002-332992 A (Canon Inc.) , 22 November, 2002 (22.11.02) , Full text & US 2003/0068536 A1 & EP 1239526 A2	1-10												
A	JP 2002-338588 A (Canon Inc.) , 27 November, 2002 (27.11.02) , Full text & US 2003/0085646 A1 & US 2005/0027123 A1 & EP 1244155 A2	1-10												
<p><input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input type="checkbox"/> See patent family annex.</p>														
<p>* Special categories of cited documents:</p> <table border="0"> <tr> <td>“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance</td> <td>“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention</td> </tr> <tr> <td>“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date</td> <td>“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone</td> </tr> <tr> <td>“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)</td> <td>“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art</td> </tr> <tr> <td>“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means</td> <td>“&” document member of the same patent family</td> </tr> <tr> <td>“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed</td> <td></td> </tr> </table>			“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance	“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention	“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date	“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone	“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)	“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art	“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means	“&” document member of the same patent family	“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed			
“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance	“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention													
“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date	“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone													
“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)	“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art													
“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means	“&” document member of the same patent family													
“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed														
<p>Date of the actual completion of the international search 06 June, 2006 (06.06.06)</p>		<p>Date of mailing of the international search report 20 June, 2006 (20.06.06)</p>												
<p>Name and mailing address of the ISA/ Japanese Patent Office</p>		<p>Authorized officer</p>												
<p>Facsimile No.</p>		<p>Telephone No.</p>												

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2006/303110

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2002-226495 A (Canon Inc.), 14 August, 2002 (14.08.02), Full text & US 2002/0094453 A1	1-10
A	JP 2002-234894 A (Canon Inc.), 23 August, 2002 (23.08.02), Full text & US 2002/0100906 A1	1-10
A	JP 2003-123982 A (Fuji Photo Film Co., Ltd.), 25 April, 2003 (25.04.03), Full text & US 2003/0080342 A1	1-10
A	JP 2002-117978 A (Fuji Photo Film Co., Ltd.), 19 April, 2002 (19.04.02), Full text & US 2002/0024293 A1	1-10
A	JP 2003-146996 A (Canon Inc.), 21 May, 2003 (21.05.03), Full text & US 2002/0064681 A1 & US 2005/0014025 A1 & EP 1191613 A2	1-10
A	WO 2004/016711 A1 (University of Southern California), 26 February, 2004 (26.02.04), Full text & US 2004/0086742 A1 & US 2004/0121184 A1 & EP 1534799 A2	1-10

<p>A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC)) Int.Cl. C09K11/06(2006.01), C07F15/00(2006.01), H01L51/50(2006.01)</p>														
<p>B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC)) Int.Cl. C09K11/06, H01L51/50</p>														
<p>最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの</p> <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2006年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2006年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2006年</td> </tr> </table>			日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2006年	日本国実用新案登録公報	1996-2006年	日本国登録実用新案公報	1994-2006年				
日本国実用新案公報	1922-1996年													
日本国公開実用新案公報	1971-2006年													
日本国実用新案登録公報	1996-2006年													
日本国登録実用新案公報	1994-2006年													
<p>国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語) Caplus (STN), REGISTRY (STN)</p>														
<p>C. 関連すると認められる文献</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>引用文献の カテゴリー*</th> <th>引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示</th> <th>関連する 請求の範囲の番号</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>A</td> <td>JP 2002-332291 A (キヤノン株式会社) 2002.11.22 全文 & US 2003/0068535 A1 & EP 1238981 A2</td> <td>1-10</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>JP 2002-332992 A (キヤノン株式会社) 2002.11.22 全文 & US 2003/0068536 A1 & EP 1239526 A2</td> <td>1-10</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>JP 2002-338588 A (キヤノン株式会社) 2002.11.27 全文 & US 2003/0085646 A1 & US 2005/0027123 A1 & EP 1244155 A2</td> <td>1-10</td> </tr> </tbody> </table>			引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号	A	JP 2002-332291 A (キヤノン株式会社) 2002.11.22 全文 & US 2003/0068535 A1 & EP 1238981 A2	1-10	A	JP 2002-332992 A (キヤノン株式会社) 2002.11.22 全文 & US 2003/0068536 A1 & EP 1239526 A2	1-10	A	JP 2002-338588 A (キヤノン株式会社) 2002.11.27 全文 & US 2003/0085646 A1 & US 2005/0027123 A1 & EP 1244155 A2	1-10
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号												
A	JP 2002-332291 A (キヤノン株式会社) 2002.11.22 全文 & US 2003/0068535 A1 & EP 1238981 A2	1-10												
A	JP 2002-332992 A (キヤノン株式会社) 2002.11.22 全文 & US 2003/0068536 A1 & EP 1239526 A2	1-10												
A	JP 2002-338588 A (キヤノン株式会社) 2002.11.27 全文 & US 2003/0085646 A1 & US 2005/0027123 A1 & EP 1244155 A2	1-10												
<p><input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。</p>														
<p>* 引用文献のカテゴリー</p> <table border="0"> <tr> <td>「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの</td> <td>「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの</td> </tr> <tr> <td>「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの</td> <td>「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの</td> </tr> <tr> <td>「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)</td> <td>「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの</td> </tr> <tr> <td>「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献</td> <td>「&」 同一パテントファミリー文献</td> </tr> <tr> <td>「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願</td> <td></td> </tr> </table>			「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの	「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの	「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの	「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの	「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)	「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの	「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献	「&」 同一パテントファミリー文献	「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願			
「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの	「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの													
「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの	「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの													
「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)	「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの													
「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献	「&」 同一パテントファミリー文献													
「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願														
<p>国際調査を完了した日 06.06.2006</p>	<p>国際調査報告の発送日 20.06.2006</p>													
<p>国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁 (ISA/JP) 郵便番号100-8915 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号</p>	<p>特許庁審査官 (権限のある職員) 滝口 尚良 電話番号 03-3581-1101 内線 3483</p>	<p>4V 8927</p>												

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
A	JP 2002-226495 A (キヤノン株式会社) 2002. 08. 14 全文 & US 2002/0094453 A1	1-10
A	JP 2002-234894 A (キヤノン株式会社) 2002. 08. 23 全文 & US 2002/0100906 A1	1-10
A	JP 2003-123982 A (富士写真フイルム株式会社) 2003. 04. 25 全文 & US 2003/0080342 A1	1-10
A	JP 2002-117978 A (富士写真フイルム株式会社) 2002. 04. 19 全文 & US 2002/0024293 A1	1-10
A	JP 2003-146996 A (キヤノン株式会社) 2003. 05. 21 全文 & US 2002/0064681 A1 & US 2005/0014025 A1 & EP 1191613 A2	1-10
A	WO 2004/016711 A1 (南カリフォルニア大学) 2004. 02. 26 全文 & US 2004/0086742 A1 & US 2004/0121184 A1 & EP 1534799 A2	1-10