

(19) 日本国特許庁(JP)

再公表特許(A1)

(11) 国際公開番号

W02020/122118

発行日 令和3年10月21日 (2021.10.21)

(43) 国際公開日 令和2年6月18日 (2020.6.18)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/14 B	3K107
C09K 11/06 (2006.01)	C09K 11/06 690	4C050
C07D 409/10 (2006.01)	C07D 409/10 CSP	4C063
C07D 405/10 (2006.01)	C07D 405/10	
C07D 491/048 (2006.01)	C07D 491/048	

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 184 頁) 最終頁に続く

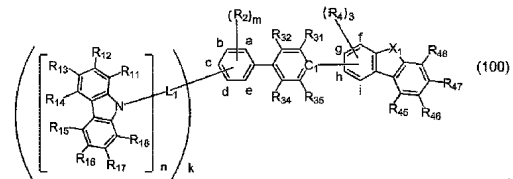
出願番号 特願2020-559283 (P2020-559283)	(71) 出願人 000183646 出光興産株式会社 東京都千代田区大手町一丁目2番1号
(21) 国際出願番号 PCT/JP2019/048468	
(22) 国際出願日 令和1年12月11日 (2019.12.11)	
(31) 優先権主張番号 特願2018-234819 (P2018-234819)	(74) 代理人 110000637 特許業務法人樹之下知的財産事務所
(32) 優先日 平成30年12月14日 (2018.12.14)	(72) 発明者 塩見 拓史 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
(33) 優先権主張国・地域又は機関 日本国 (JP)	(72) 発明者 中野 裕美 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
	Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 BB08 CC04 CC12 CC21 DD53 DD59 DD66 DD68 DD69 FF19 4C050 AA01 BB04 CC16 EE01 FF01 GG01 HH02

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 有機エレクトロルミネッセンス素子、化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、及び電子機器

(57) 【要約】

陽極と、陰極と、陽極と陰極との間に含まれる発光層と、を有し、発光層は、遅延蛍光性の化合物M2と、一般式(100)で表される化合物M3と、を含み、化合物M2の一重項エネルギーS₁(M2)と、化合物M3の一重項エネルギーS₁(M3)とが、数式(数1)の関係を満たす有機EL素子。一般式(100)において、X₁は酸素原子又は硫黄原子であり、C₁は炭素原子であり、R₁₁~R₁₈、R₂、R₃₁、R₃₂、R₃₄、R₃₅、R₄及びR₄₅~R₄₈は、各々独立に、水素原子又は置換基等であり、nは、1、2、又は3であり、ただし、L₁が単結合である場合、nは1であり、kは、1、2、又は3であり、mは、2、3、又は4であり、k+m=5であり、L₁は、単結合又は連結基である。



$$S_1(M3) > S_1(M2) \quad (\text{数1})$$

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

陽極と、

陰極と、

前記陽極と前記陰極との間に含まれる発光層と、を有し、

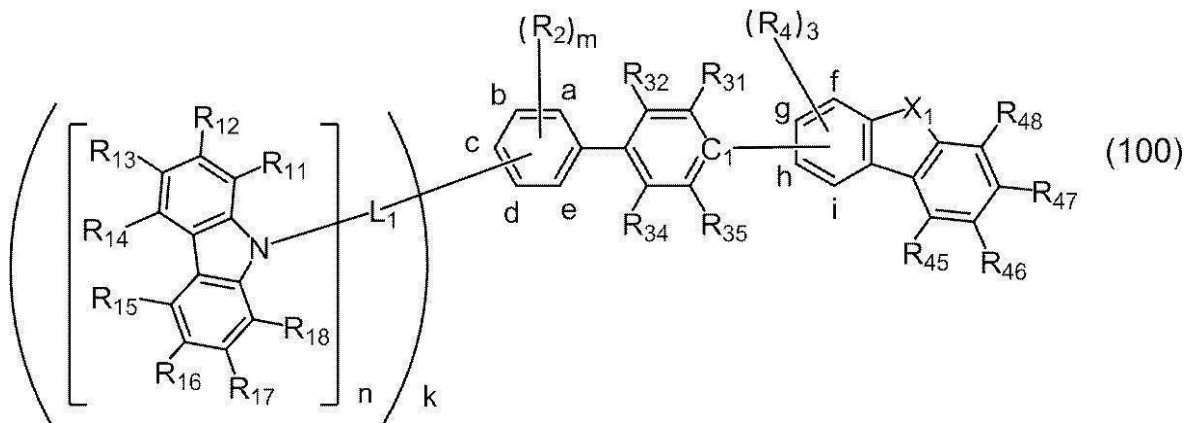
前記発光層は、遅延蛍光性の化合物 M 2 と、下記一般式 (1 0 0) で表される化合物 M 3 と、を含み、

前記化合物 M 2 の一重項エネルギー $S_1 (M 2)$ と、前記化合物 M 3 の一重項エネルギー $S_1 (M 3)$ とが、下記数式 (数 1) の関係を満たす、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$S_1 (M 3) > S_1 (M 2) \quad (数 1)$$

【化 1】



(前記一般式 (1 0 0) において、 X_1 は酸素原子又は硫黄原子であり、 C_1 は炭素原子であり、

n は、 1、 2、 又は 3 であり、

k は、 1、 2、 又は 3 であり、

m は、 2、 3、 又は 4 であり、 $k + m = 5$ であり、

$R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、 n 及び k の少なくとも一方が 2 以上である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

L_1 は、単結合又は連結基であり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は 1 であり、

k が 2 以上である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なり、

連結基としての L_1 は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基から誘導される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基から誘導される基からなる群から選択される 2 つの基が結合した基であり、

k が 1 であり、 m が 4 であるとき、 4 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (1 0 0) に示す a、 b、 c、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、 1 つの L_1 は、前記 R_2 と結合しない a、 b、 c、 d 又は e の位置の炭素原子と結合し、

10

20

30

40

50

k が 2 であり、m が 3 であるとき、3 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、2 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

k が 3 であり、m が 2 であるとき、2 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、3 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、m が 2 以上の場合、複数の R_2 は互いに同一であるか又は異なり、

R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成するか、又は複数の R_4 のうちの 2 つ以上からなる組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、ただし、3 つの R_4 は互いに同一であるか又は異なり、3 つの R_4 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す f、g、h 及び i の位置のいずれかの炭素原子と結合し、 C_1 は、前記 R_4 と結合しない f、g、h 及び i の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

置換基としての $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基である。))

【請求項 2】

請求項 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記発光層は、さらに蛍光発光性の化合物 M1 を含み、

前記化合物 M2 の一重項エネルギー $S_1(M2)$ と、前記化合物 M1 の一重項エネルギー $S_1(M1)$ とが、下記数式 (数 2) の関係を満たす、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$S_1(M2) > S_1(M1) \quad (\text{数 2})$$

【請求項 3】

請求項 1 又は請求項 2 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、且つ

R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、 R_{47} 及び R_{48} の組、並びに複数の

R₄のうち2つ以上からなる組が互いに結合しない、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項4】

請求項1又は請求項2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
R₁₁及びR₁₂の組、R₁₂及びR₁₃の組、R₁₃及びR₁₄の組、R₁₅及びR₁₆の組、
R₁₆及びR₁₇の組、R₁₇及びR₁₈の組、R₄₅及びR₄₆の組、R₄₆及びR₄₇の組、
R₄₇及びR₄₈の組、並びに複数のR₄のうち2つ以上からなる組が互いに結合しない、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項5】

請求項1から請求項4のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

R₂、R₃₁、R₃₂、R₃₄及びR₃₅は、水素原子であり、
L₁は、単結合であるか、又は
無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基、もしくは
無置換の環形成原子数5～30の複素環基から誘導される基である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項6】

請求項1から請求項5のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

nは、1又は2であり、
kは、1又は2である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項7】

請求項1から請求項6のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

nは、1であり、
kは、1又は2である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項8】

請求項1から請求項6のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

nは、2であり、
kは、1又は2である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項9】

請求項1から請求項8のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

R₁₁～R₁₈、R₄及びR₄₅～R₄₈は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、又は
置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項10】

請求項1から請求項9のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

R₁₁～R₁₈、R₄及びR₄₅～R₄₈は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は

10

20

30

40

50

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 11】

請求項 1 から請求項 10 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

$R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、
水素原子、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 12】

請求項 1 から請求項 11 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

$R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、
水素原子、又は
置換もしくは無置換のフェニル基である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 13】

請求項 1 から請求項 12 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

$R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、
水素原子、又は
置換もしくは無置換のフェニル基であり、
 R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、
水素原子である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 14】

請求項 1 から請求項 13 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

L_1 は、単結合であるか、又は
無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 15】

請求項 1 から請求項 14 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

L_1 は、単結合であるか、又は
無置換のベンゼン環から誘導される基である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 16】

請求項 1 から請求項 15 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

L_1 は、単結合である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 17】

請求項 1 又は請求項 2 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記一般式 (100) で表される化合物 M3 は、下記一般式 (100A) 又は下記一般式 (100B) で表される化合物である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

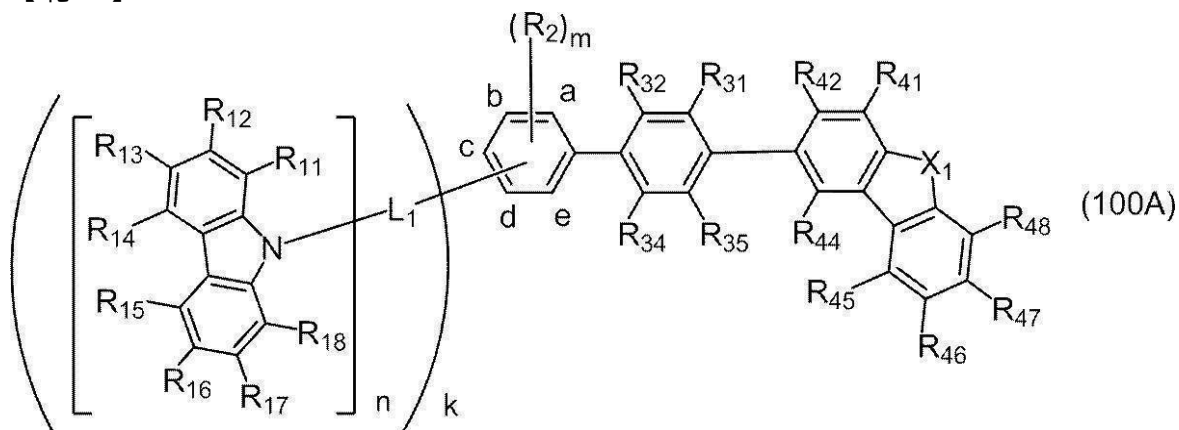
10

20

30

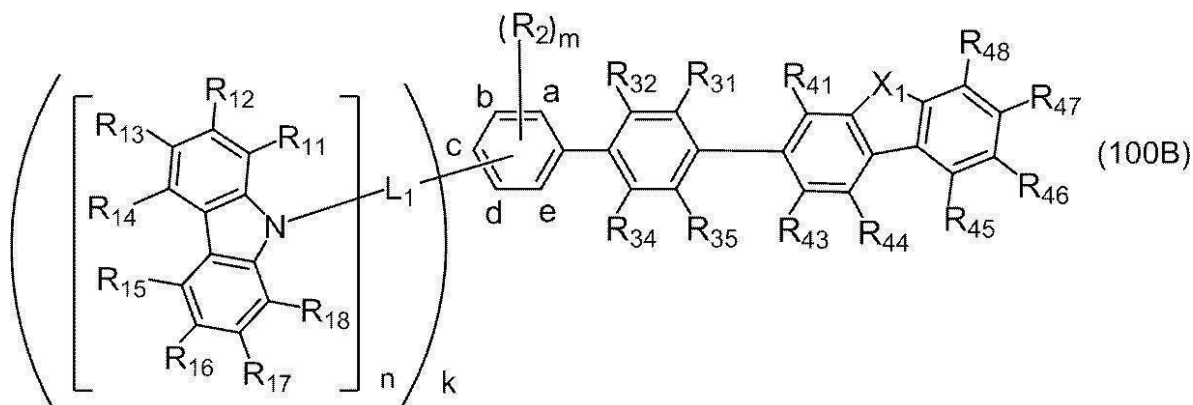
40

【化 2】



10

【化 3】



20

(前記一般式(100A)及び一般式(100B)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義であり、 $R_{41} \sim R_{44}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_4 と同義である。)

30

【請求項 18】

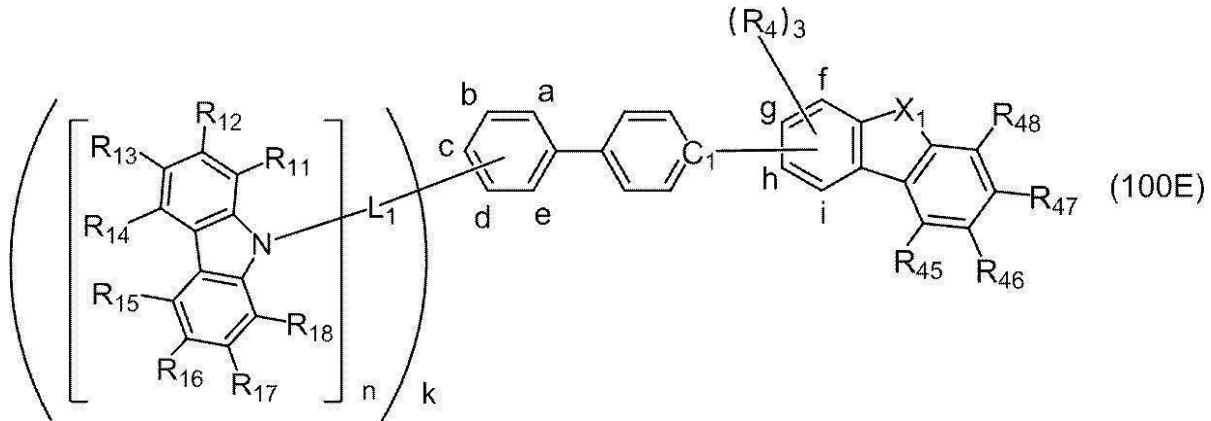
請求項 17 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記一般式(100)で表される化合物 M3 は、前記一般式(100A)で表される化合物である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 19】

請求項 1 又は請求項 2 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記一般式(100)で表される化合物 M3 は、下記一般式(100E)で表される化合物である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【化4】



10

(前記一般式(100E)において、 X_1 及び C_1 は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 及び C_1 と同義であり、

n は、1又は2であり、

k は、1又は2であり、

$R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であり、

n 及び k の少なくとも一方が2である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

ただし、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、 R_{17} 及び R_{18} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、 R_{47} 及び R_{48} の組、並びに複数の R_4 のうち2つ以上からなる組が互いに結合せず、

L_1 は、単結合であるか、又は

無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基であり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は1であり、 k が2である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なり、

k が1のとき、1つの L_1 は、 a 、 b 、 c 、 d 又は e の位置の炭素原子と結合し、

k が2のとき、2つの L_1 は、それぞれ、 a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合する。)

【請求項20】

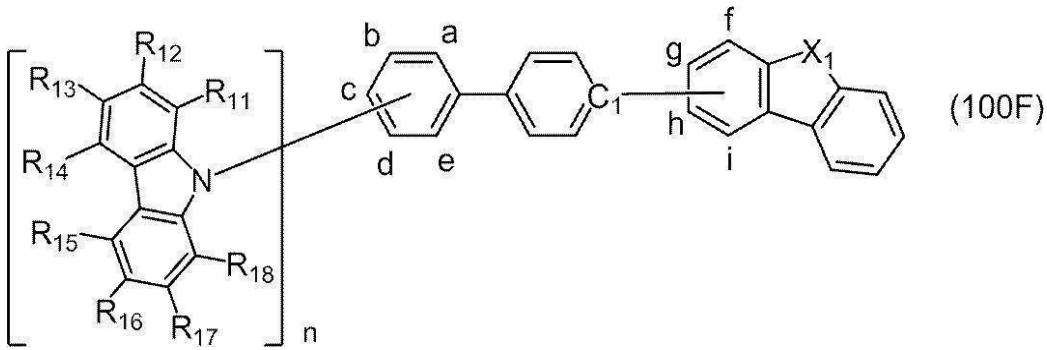
請求項1又は請求項2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記一般式(100)で表される化合物M3は、下記一般式(100F)で表される化合物である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【化5】



10

(前記一般式(100F)において、 X_1 及び C_1 は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 及び C_1 と同義であり、

n は、1又は2であり、

n が1のとき、前記一般式(100F)に示す、1つのカルバゾール環の9位の窒素原子は、前記一般式(100F)に示すa、b、c、d又はeの位置の炭素原子と結合し、
 n が2のとき、前記一般式(100F)に示す、2つのカルバゾール環の9位の窒素原子は、それぞれ、a、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、

$R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、又は

置換もしくは無置換のフェニル基であり、

20

n が2である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

ただし、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組が互いに結合しない。))

【請求項21】

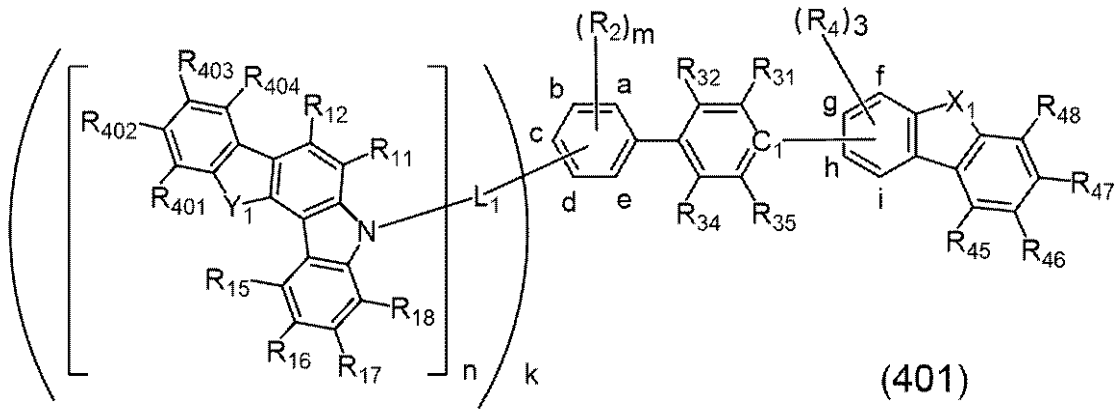
請求項1又は請求項2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

30

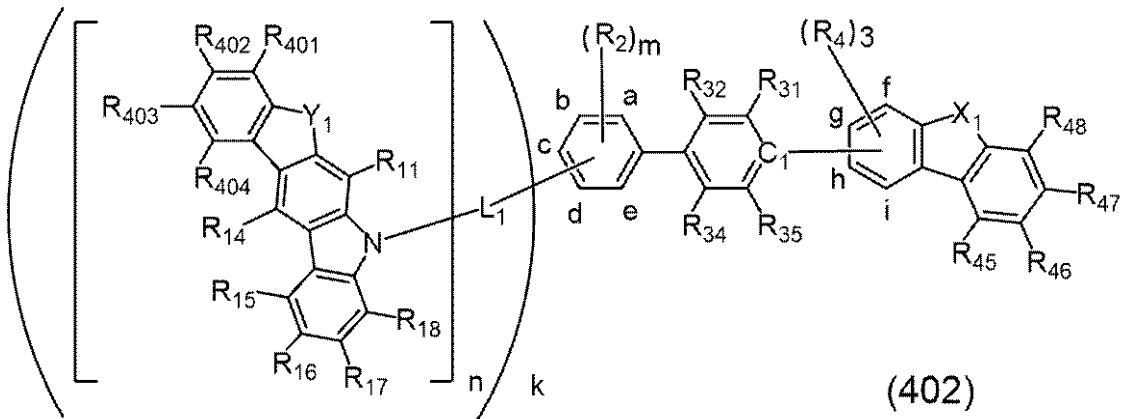
前記一般式(100)で表される化合物M3は、下記一般式(401)~(406)のいずれかで表される化合物である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

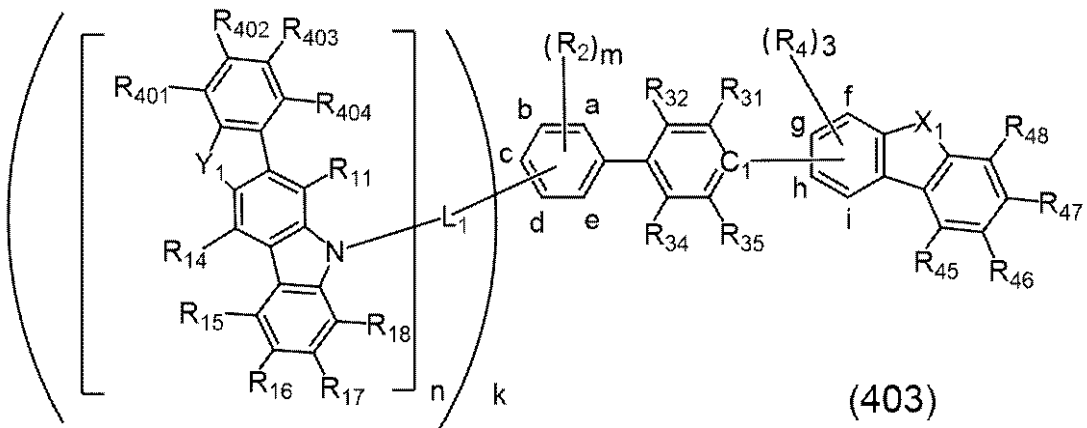
【化 6】



10

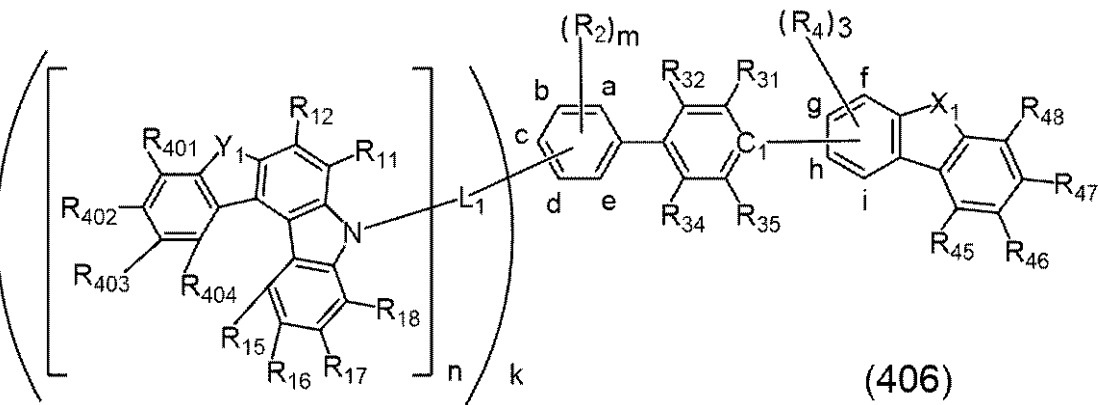
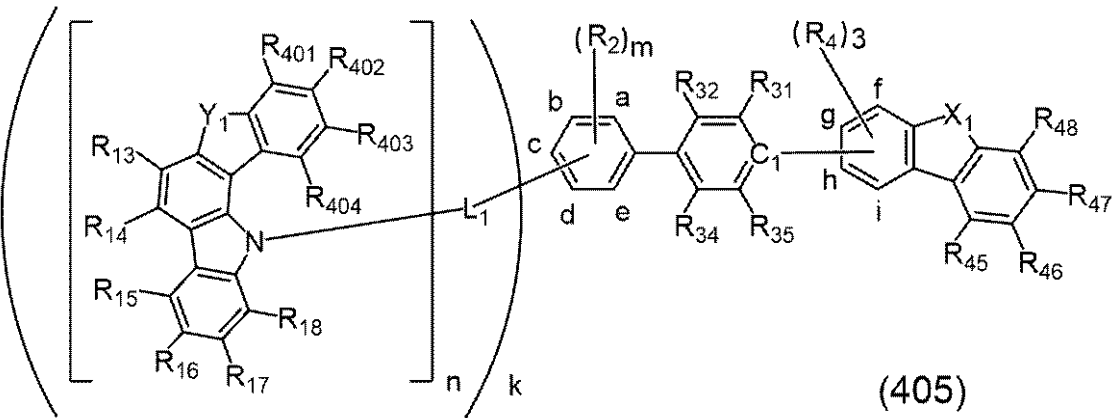
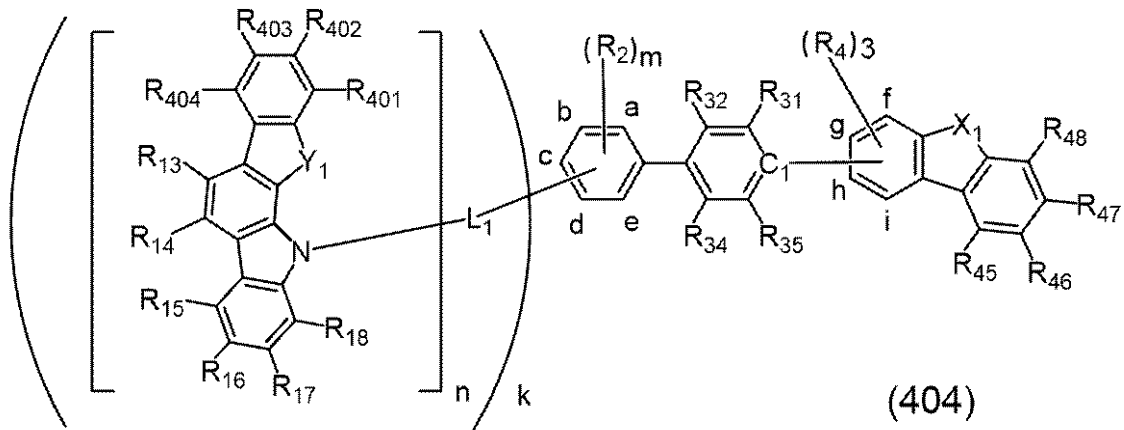


20



30

【化 7】



(前記一般式(401)~(406)において、 X_1 、 R_4 、 $R_{45} \sim R_{48}$ 、 C_1 、 $R_{31} \sim R_{32}$ 、 $R_{34} \sim R_{35}$ 、 R_2 、 L_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 m 、 n 、及び k は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 R_4 、 $R_{45} \sim R_{48}$ 、 C_1 、 $R_{31} \sim R_{32}$ 、 $R_{34} \sim R_{35}$ 、 R_2 、 L_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 m 、 n 、及び k と同義であり、 Y_1 は、酸素原子又は硫黄原子であり、 $R_{401} \sim R_{404}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における $R_{11} \sim R_{18}$ と同義であり、ただし、 R_{401} 及び R_{402} の組、 R_{402} 及び R_{403} の組、並びに R_{403} 及び R_{404} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成するか又は形成しない。)

40

【請求項 22】

請求項 21 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

n は、1 又は 2 であり、

k は、1 又は 2 である、

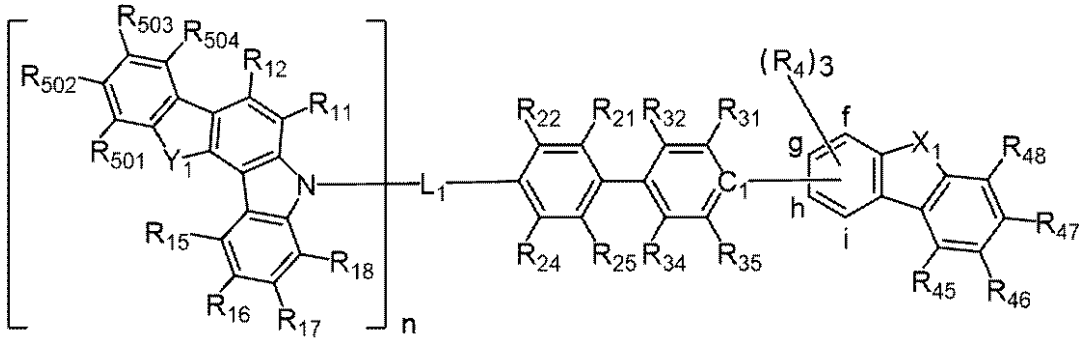
有機エレクトロルミネッセンス素子。

50

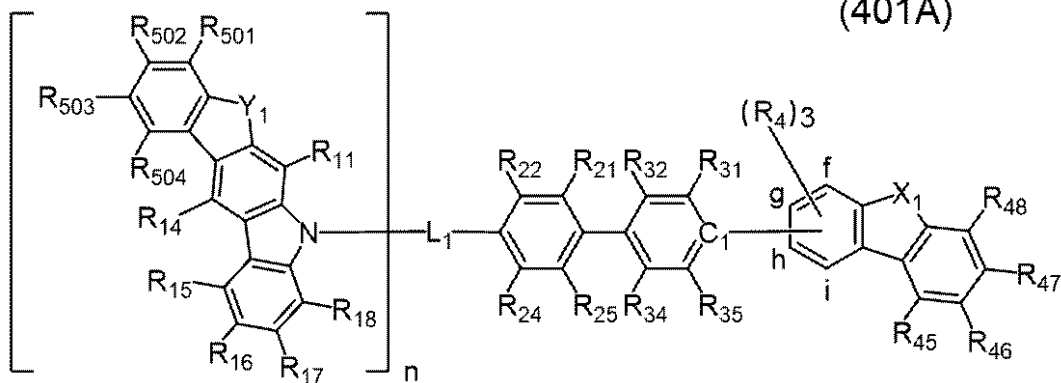
【請求項 2 3】

請求項 2 1 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記一般式 (1 0 0) で表される化合物 M 3 は、下記一般式 (4 0 1 A) ~ (4 0 6 A)
のいずれかで表される化合物である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

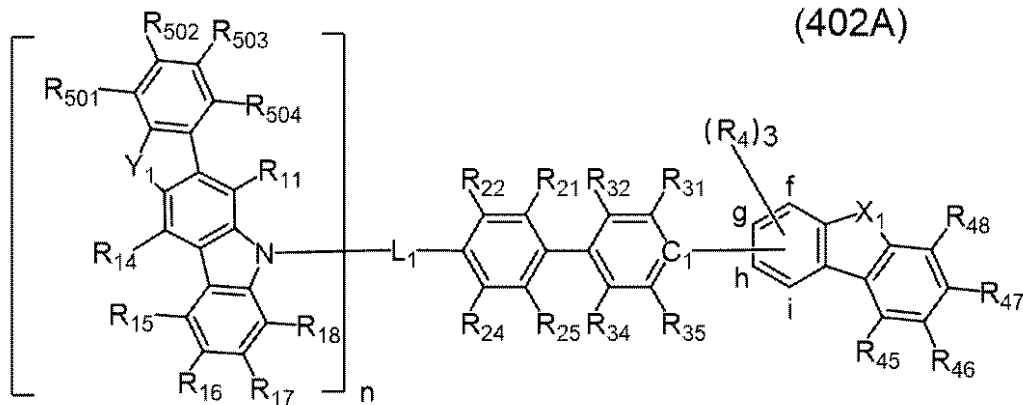
【化 8】



10



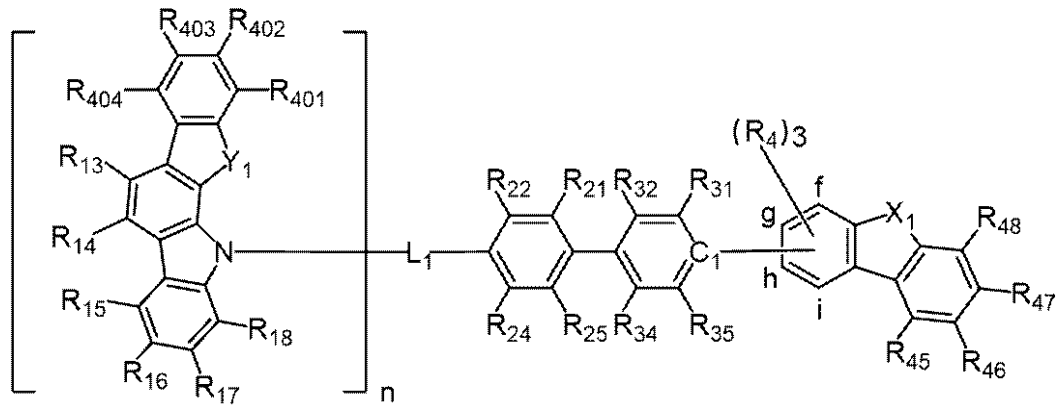
20



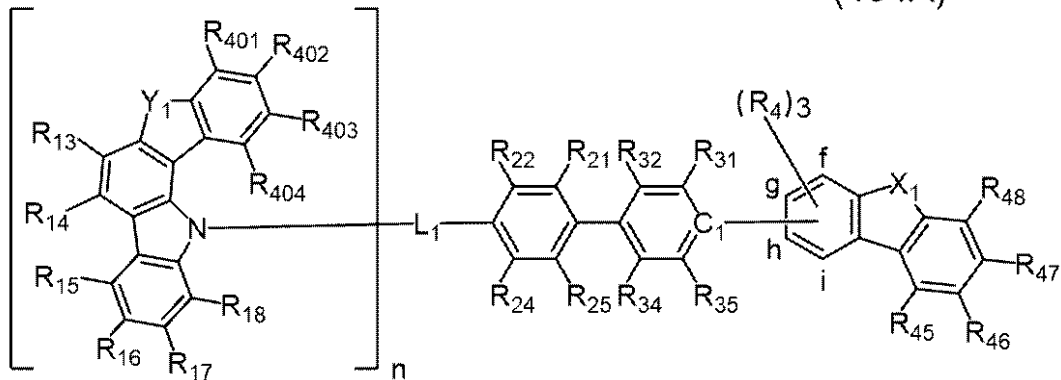
30

40

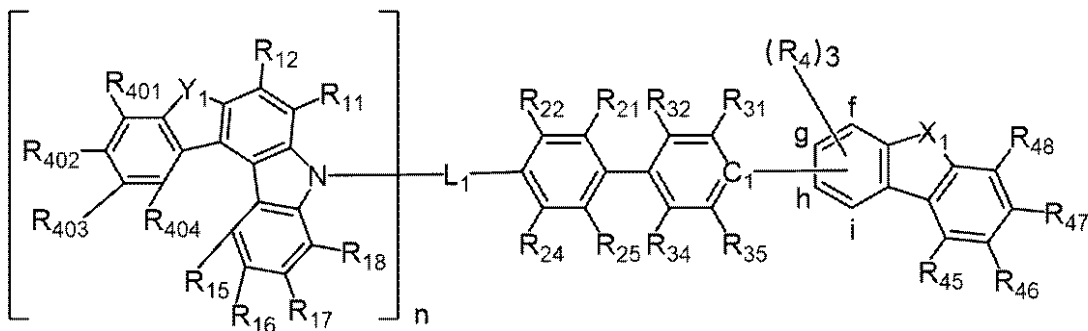
【化 9】



(404A)



(405A)



(406A)

(前記一般式(401A)~(406A)において、 X_1 、 R_4 、 R_{45} ~ R_{48} 、 C_1 、 R_{31} ~ R_{32} 、 R_{34} ~ R_{35} 、 L_1 、 R_{11} ~ R_{18} 、及び n は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 R_4 、 R_{45} ~ R_{48} 、 C_1 、 R_{31} ~ R_{32} 、 R_{34} ~ R_{35} 、 L_1 、 R_{11} ~ R_{18} 、及び n と同義であり、 R_{21} ~ R_{22} 及び R_{24} ~ R_{25} は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_2 と同義であり、 Y_1 は、酸素原子又は硫黄原子であり、 R_{401} ~ R_{404} は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_{11} ~ R_{18} と同義であり、ただし、 R_{401} 及び R_{402} の組、 R_{402} 及び R_{403} の組、並びに R_{403} 及び R_{404} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成するか又は形成しない。)

【請求項 24】

請求項 23 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

10

20

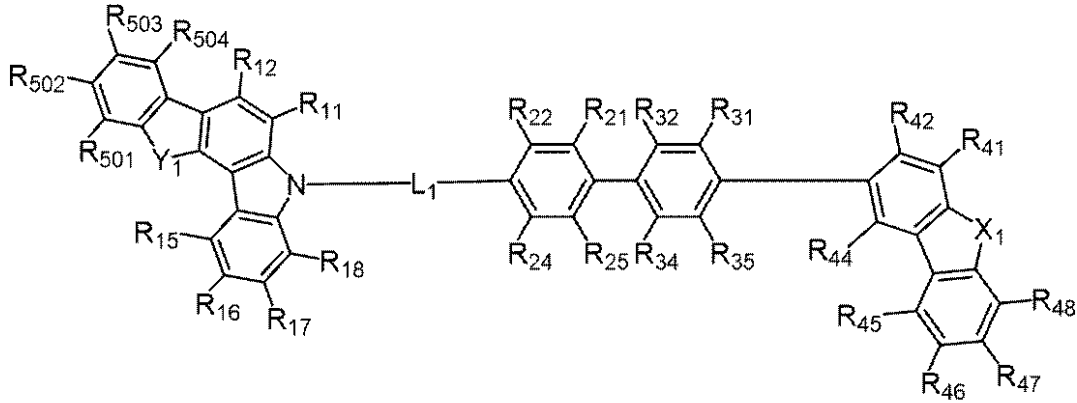
30

40

50

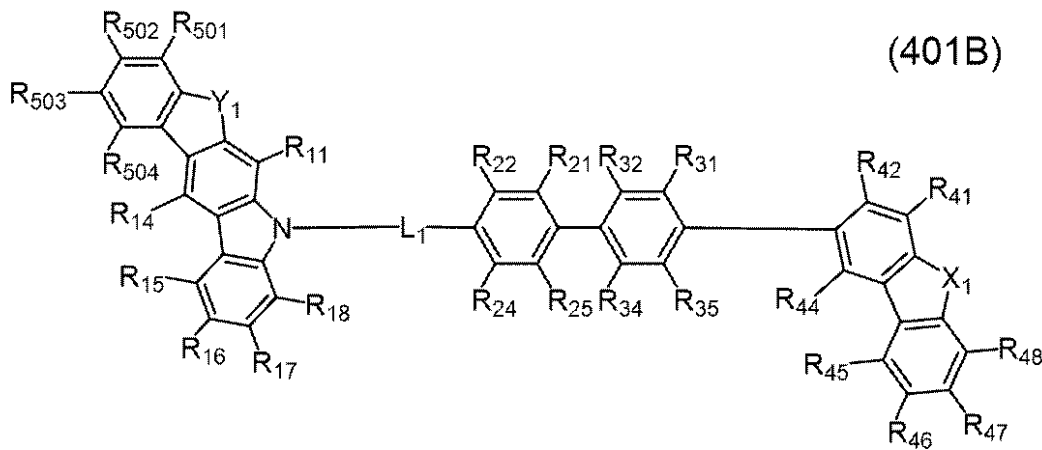
前記一般式(100)で表される化合物M3は、下記一般式(401B)~(406B)のいずれかで表される化合物である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化10】



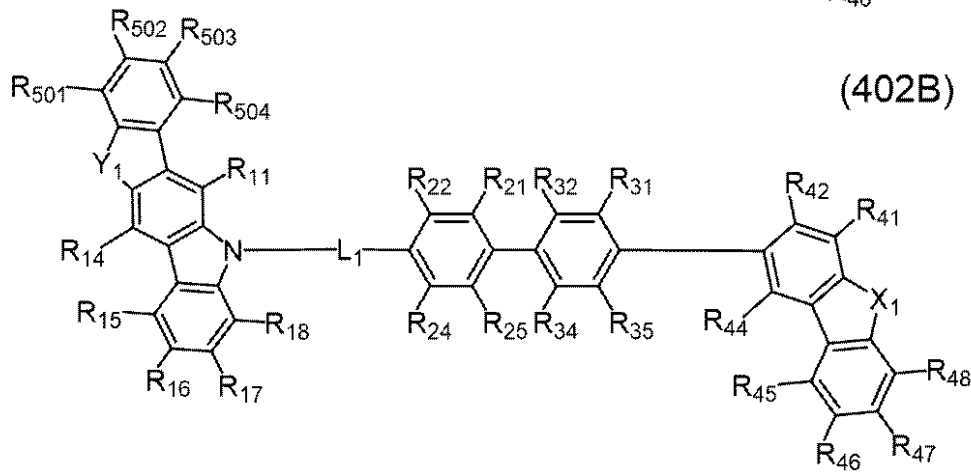
(401B)

10



(402B)

20

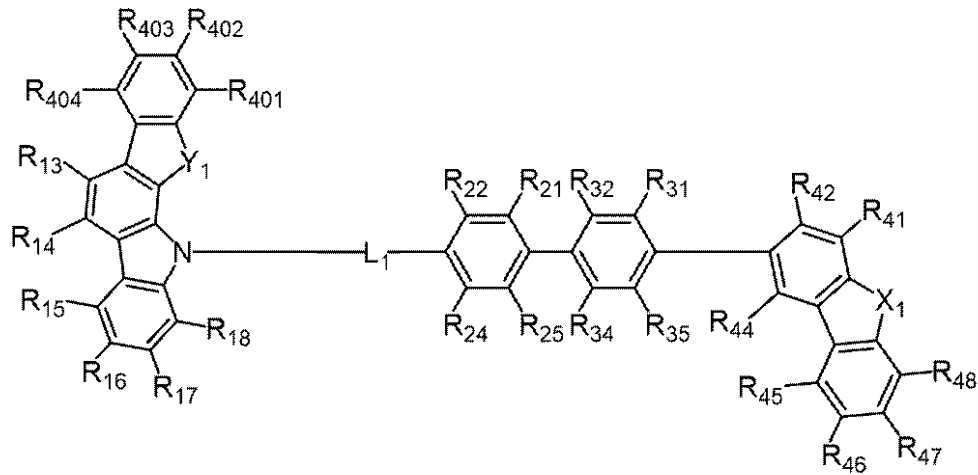


(403B)

30

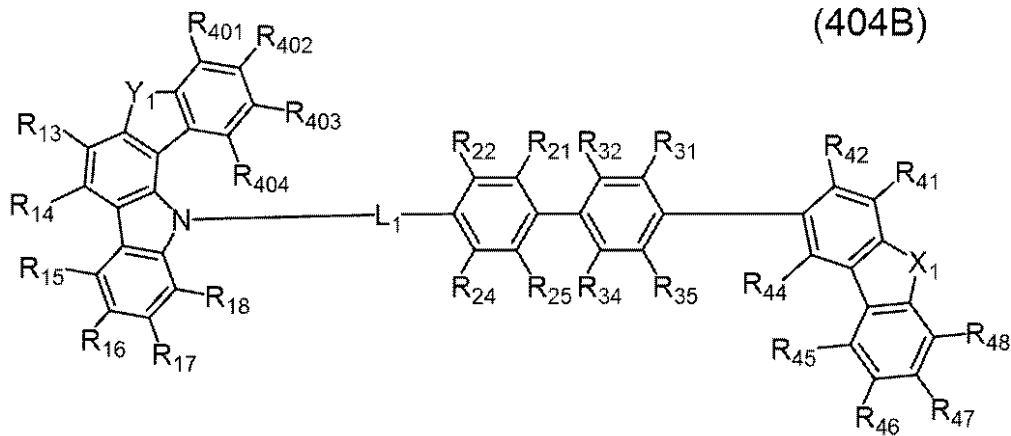
40

【化 1 1】



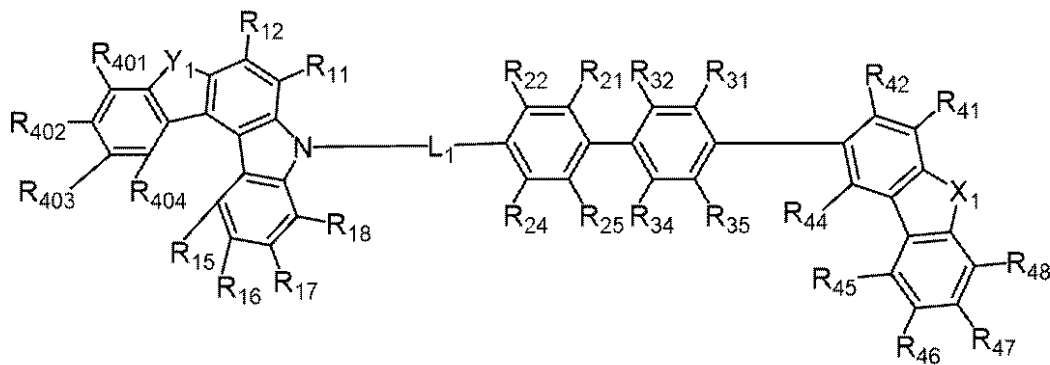
10

(404B)



20

(405B)



30

(406B)

40

(前記一般式(401B)~(406B)において、 X_1 、 $R_{45} \sim R_{48}$ 、 $R_{31} \sim R_{32}$ 、 $R_{34} \sim R_{35}$ 、 L_1 及び $R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 $R_{45} \sim R_{48}$ 、 $R_{31} \sim R_{32}$ 、 $R_{34} \sim R_{35}$ 、 L_1 及び $R_{11} \sim R_{18}$ と同義であり、 R_{41} 、 R_{42} 及び R_{44} は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_4 と同義であり、 $R_{21} \sim R_{22}$ 及び $R_{24} \sim R_{25}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_2 と同義であり、 Y_1 は、酸素原子又は硫黄原子であり、 $R_{401} \sim R_{404}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における $R_{11} \sim R_{18}$ と同義であり、ただし、 R_{401} 及び R_{402} の組、 R_{402} 及び R_{403} の組、並びに R_{403} 及び R_{404} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成するか又は形成しない。)

50

【請求項 25】

請求項 21 から請求項 24 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、 R_{47} 及び R_{48} の組、 R_{41} 及び R_{42} の組、並びに複数の R_4 のうちの 2 つ以上からなる組が互いに結合しない、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 26】

請求項 21 から請求項 25 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

R_2 、 $R_{21} \sim R_{22}$ 、 $R_{24} \sim R_{25}$ 、 $R_{31} \sim R_{32}$ 及び $R_{34} \sim R_{35}$ は、水素原子であり、

L_1 は、単結合であるか、又は

無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基、もしくは
無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基から誘導される基である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 27】

請求項 1 から請求項 26 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

X_1 は、酸素原子である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

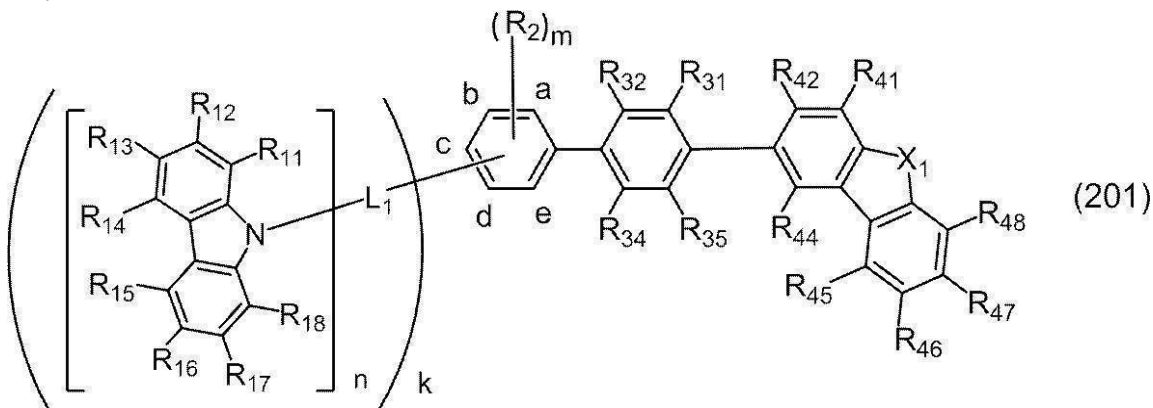
【請求項 28】

請求項 1 から請求項 27 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器。

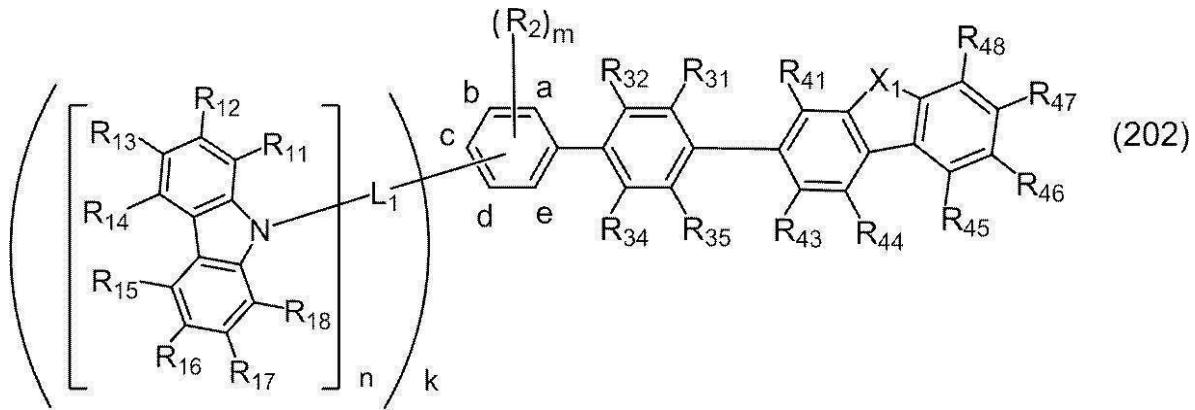
【請求項 29】

下記一般式 (201)、下記一般式 (202)、又は下記一般式 (203) で表される化合物。

【化 12】

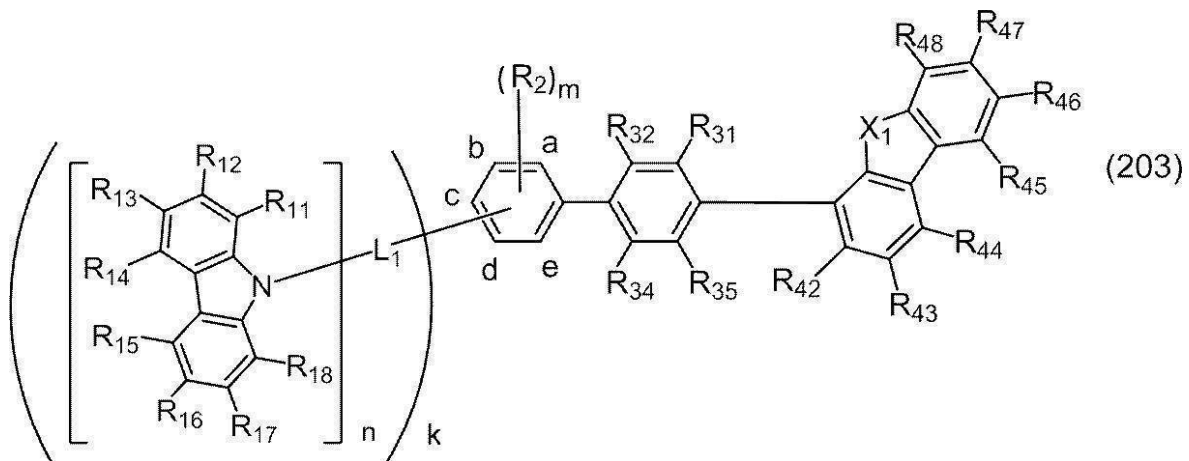


【化13】



10

【化14】



20

(前記一般式(201)~(203)において、 X_1 は酸素原子又は硫黄原子であり、

n は、1、2、又は3であり、

k は、1、2、又は3であり、

m は、2、3、又は4であり、 $k + m = 5$ であり、

30

$R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組が互いに結合せず、 n 及び k の少なくとも一方が2以上である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

L_1 は、単結合又は連結基であり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は1であり、

40

k が2以上である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なり、

連結基としての L_1 は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基から誘導される基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基から誘導される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基から誘導される基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基から誘導される基からなる群から選択される2つの基が結合した基であり、

k が1であり、 m が4であるとき、4つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(201)、(202)、又は(203)に示すa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、1つの L_1 は、前記 R_2 と結合しないa、b、c、d又はeの位置の炭素原子と

50

結合し、

k が 2 であり、m が 3 であるとき、3 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (2 0 1)、(2 0 2)、又は (2 0 3) に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、2 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

k が 3 であり、m が 2 であるとき、2 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (2 0 1)、(2 0 2)、又は (2 0 3) に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、3 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、m が 2 以上の場合、複数の R_2 は互いに同一であるか又は異なり、

$R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{43} 及び R_{44} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリアルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリアルホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリアルアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルチオ基であり、

ただし、 $R_{11} \sim R_{18}$ のうち、少なくともいずれか 1 つ以上が無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基である。))

【請求項 30】

下記一般式 (3 0 0) で表される化合物。

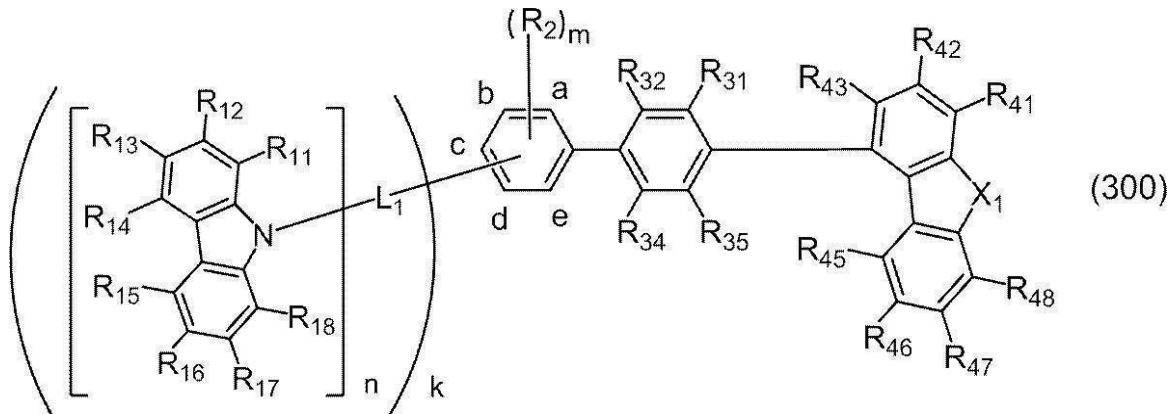
10

20

30

40

【化 1 5】



10

(前記一般式(300)において、 X_1 は酸素原子又は硫黄原子であり、

n は、1、2、又は3であり、

k は、1、2、又は3であり、

m は、2、3、又は4であり、 $k + m = 5$ であり、

$R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、 n 及び k の少なくとも一方が2以上である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

20

L_1 は、単結合又は連結基であり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は1であり、

k が2以上である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なり、

連結基としての L_1 は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基から誘導される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基から誘導される基からなる群から選択される2つの基が結合した基であり、

30

k が1であり、 m が4であるとき、4つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(300)に示すa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、1つの L_1 は、前記 R_2 と結合しないa、b、c、d又はeの位置の炭素原子と結合し、

k が2であり、 m が3であるとき、3つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(300)に示すa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、2つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しないa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、

40

k が3であり、 m が2であるとき、2つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(300)に示すa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、3つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しないa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、

R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、 m が2以上の場合、複数の R_2 は互いに同一であるか又は異なり、

R_{41} 、 R_{42} 、 R_{43} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 $R_{41} \sim R$

50

4 3、及び R₄₅ ~ R₄₈ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基である。) 10

【請求項 3 1】

請求項 2 9 又は請求項 3 0 に記載の化合物において、

R₁₁ 及び R₁₂ の組、R₁₂ 及び R₁₃ の組、R₁₃ 及び R₁₄ の組、R₁₅ 及び R₁₆ の組、R₁₆ 及び R₁₇ の組、並びに R₁₇ 及び R₁₈ の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、且つ

R₄₁ 及び R₄₂ の組、R₄₂ 及び R₄₃ の組、R₄₃ 及び R₄₄ の組、R₄₅ 及び R₄₆ の組、R₄₆ 及び R₄₇ の組、並びに R₄₇ 及び R₄₈ の組が互いに結合しない、化合物。 20

【請求項 3 2】

請求項 2 9 又は請求項 3 0 に記載の化合物において、

R₁₁ 及び R₁₂ の組、R₁₂ 及び R₁₃ の組、R₁₃ 及び R₁₄ の組、R₁₅ 及び R₁₆ の組、R₁₆ 及び R₁₇ の組、R₁₇ 及び R₁₈ の組、R₄₁ 及び R₄₂ の組、R₄₂ 及び R₄₃ の組、R₄₃ 及び R₄₄ の組、R₄₅ 及び R₄₆ の組、R₄₆ 及び R₄₇ の組、並びに R₄₇ 及び R₄₈ の組が互いに結合しない、化合物。 30

【請求項 3 3】

請求項 2 9 から請求項 3 2 のいずれか一項に記載の化合物において、

R₂、R₃₁、R₃₂、R₃₄ 及び R₃₅ は、水素原子であり、

L₁ は、単結合であるか、又は

無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基、もしくは

無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基から誘導される基である、

化合物。 40

【請求項 3 4】

請求項 2 9 から請求項 3 3 のいずれか一項に記載の化合物において、

n は、1 又は 2 であり、

k は、1 又は 2 である、

化合物。

【請求項 3 5】

請求項 2 9 から請求項 3 4 のいずれか一項に記載の化合物において、 50

$R_{11} \sim R_{18}$ 及び $R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、又は
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基である、
 化合物。

【請求項 36】

請求項 29 から請求項 35 のいずれか一項に記載の化合物において、
 L_1 は、
 単結合であるか、又は
 無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基である、
 化合物。

10

【請求項 37】

請求項 29 に記載の化合物において、
 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、水素原子であり、
 n は、1 又は 2 であり、
 k は、1 又は 2 であり、
 $R_{11} \sim R_{18}$ 及び $R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、
 水素原子、又は
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であり、
 ただし、 R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{43} 及び R_{44} の組、 R_{45}
 5 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組が互いに結合せ
 ず、
 L_1 は、
 単結合であるか、又は
 無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基である、
 化合物。

20

【請求項 38】

請求項 29 に記載の化合物において、
 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、水素原子であり、
 n は、1 又は 2 であり、
 k は、1 又は 2 であり、
 $R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、
 水素原子、又は
 置換もしくは無置換のフェニル基であり、
 $R_{41} \sim R_{48}$ は、水素原子であり、
 L_1 は、単結合である、
 化合物。

30

【請求項 39】

請求項 30 に記載の化合物において、
 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、水素原子であり、
 n は、1 又は 2 であり、
 k は、1 又は 2 であり、
 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 $R_{41} \sim R_{43}$ 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、
 水素原子、又は
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であり、
 ただし、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15}
 5 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、 R_{17} 及び R_{18} の組、 R_{41} 及び R_{42} の
 組、 R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47}
 7 及び R_{48} の組が互いに結合せず、

40

50

L₁ は、
 単結合であるか、又は
 無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基である、
 化合物。

【請求項 40】

請求項 30 に記載の化合物において、

R₂、R₃₁、R₃₂、R₃₄ 及び R₃₅ は、水素原子であり、

n は、1 又は 2 であり、

k は、1 又は 2 であり、

R₁₁ ~ R₁₈ は、それぞれ独立に、

水素原子、又は

置換もしくは無置換のフェニル基であり、

ただし、R₁₁ 及び R₁₂ の組、R₁₂ 及び R₁₃ の組、R₁₃ 及び R₁₄ の組、R₁₅ 及び R₁₆ の組、R₁₆ 及び R₁₇ の組、並びに R₁₇ 及び R₁₈ の組が互いに結合せず、

R₄₁ ~ R₄₃ 及び R₄₅ ~ R₄₈ は、水素原子であり、

L₁ は、単結合である、

化合物。

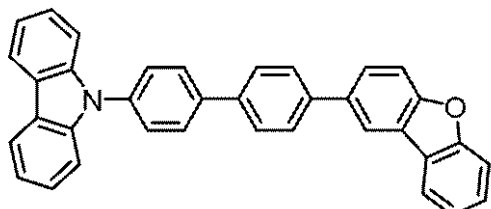
10

【請求項 41】

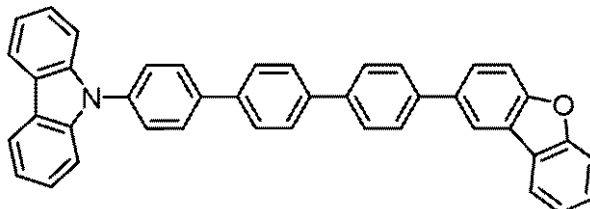
下記一般式 (501) ~ (514) のいずれかで表される化合物。

20

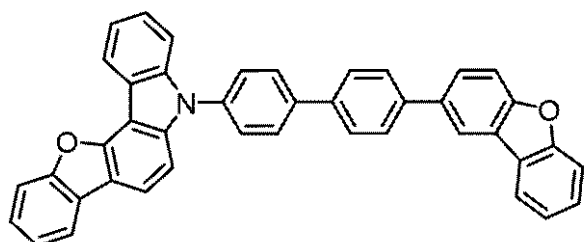
【化 16】



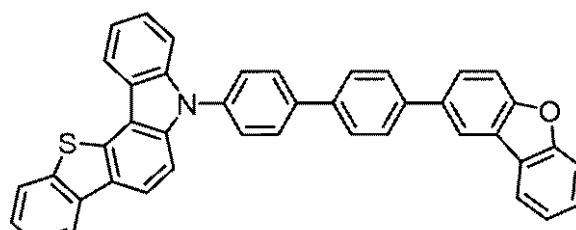
(501)



(502)

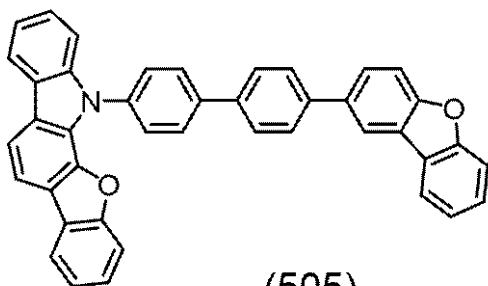


(503)

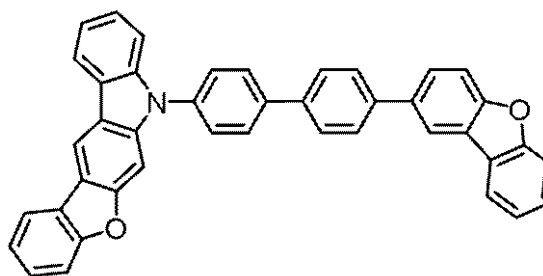


(504)

30



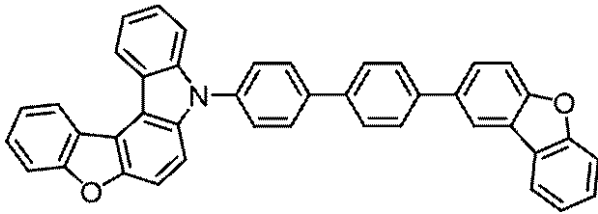
(505)



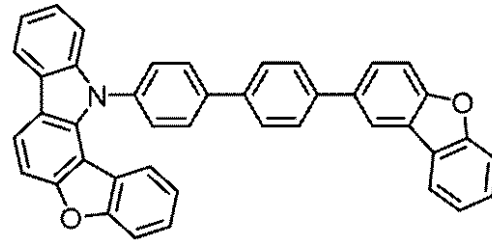
(506)

40

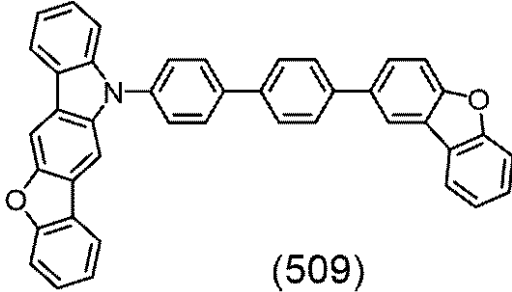
【化 17】



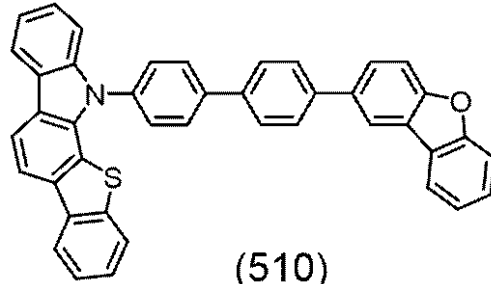
(507)



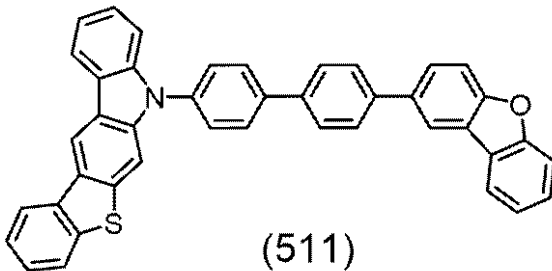
(508)



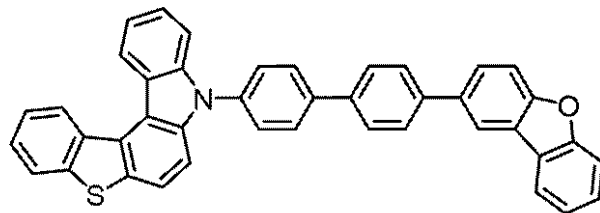
(509)



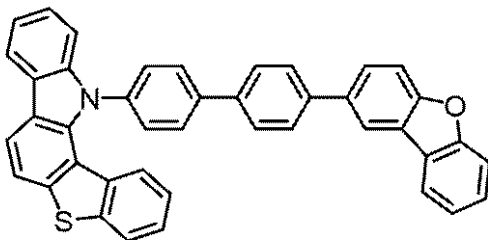
(510)



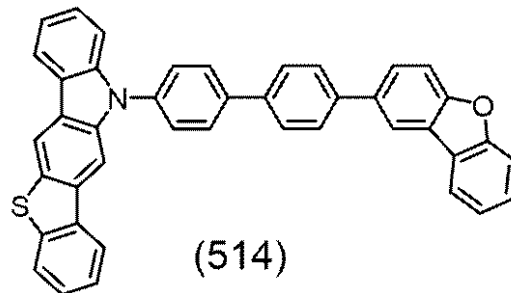
(511)



(512)



(513)



(514)

【請求項 4 2】

請求項 29 から請求項 41 のいずれか一項に記載の化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【発明の詳細な説明】

【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、化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、及び電子機器に関する。

【背景技術】

【0002】

有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、「有機 EL 素子」という場合がある。）に電圧を印加すると、陽極から正孔が発光層に注入され、また陰極から電子が発光層に注入される。そして、発光層において、注入された正孔と電子とが再結合し、励起子が形成される。このとき、電子スピンの統計則により、一重項励起子が 25% の割合で生成し、及び三重項励起子が 75% の割合で生成する。

一重項励起子からの発光を用いる蛍光型の有機 EL 素子は、携帯電話及びテレビ等のフルカラーディスプレイへ応用されつつあるが、内部量子効率 25% が限界といわれている

10

20

30

40

50

。そのため、有機EL素子の性能を向上するための検討が行われている。

【0003】

また、一重項励起子に加えて三重項励起子を利用し、有機EL素子をさらに効率的に発光させることが期待されている。このような背景から、熱活性化遅延蛍光（以下、単に「遅延蛍光」という場合がある。）を利用した高効率の蛍光型の有機EL素子が提案され、研究がなされている。

例えば、TADF（Thermally Activated Delayed Fluorescence、熱活性化遅延蛍光）機構（メカニズム）が研究されている。このTADFメカニズムは、一重項準位と三重項準位とのエネルギー差（ S_T ）の小さな材料を用いた場合に、三重項励起子から一重項励起子への逆項間交差が熱的に生じる現象を利用するメカニズムである。熱活性化遅延蛍光については、例えば、『安達千波矢編、「有機半導体のデバイス物性」、講談社、2012年4月1日発行、261-268ページ』に記載されている。

非特許文献1には、アシストドーパントとしてのTADF化合物と、ホスト材料としてのmCP（1,3-Bis(N-carbazolyl)benzene）、mCBP（3,3'-di(9H-carbazol-9-yl)biphenyl、又はCBP（4,4'-bis(9-carbazolyl)-1,1'-biphenyl）と、蛍光発光材料とを含んだ発光層を備える有機発光ダイオードが開示されている。

特許文献1には、補助ドーパントと、ホスト材料と、蛍光ドーパントとを含んだ発光層を備える有機EL素子が開示されている。補助ドーパントとしては、トリアジン環と縮合カルバゾール環とがフェニレン基を介して結合した化合物が開示されている。

特許文献2には、りん光発光性の金属錯体とともに用いられる有機EL素子用材料として、ジベンゾチオフェン環又はジベンゾフラン環に、アリール基が結合した構造を有する化合物が開示されている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0004】

【特許文献1】米国特許出願公開第2017/0062718号明細書

【特許文献2】国際公開第2009/008099号

【非特許文献】

【0005】

【非特許文献1】Hajime Nakanotani et al, "High-efficiency organic light-emitting diodes with fluorescent emitters", Nature Communications, 5, 4016, 2014

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

TADFメカニズムを利用した有機EL素子においては、さらなる高性能化、例えば長寿命化が求められている。

前記有機EL素子のさらなる高性能化を実現するためには、TADF化合物と共に用いる材料の分子構造の選定が重要である。

【0007】

本発明の目的は、高性能の有機EL素子、例えば長寿命で発光させることのできる有機EL素子、並びに当該有機EL素子を搭載した電子機器を提供することである。

また、本発明の目的は、高性能の有機EL素子、例えば長寿命で発光する有機EL素子及び電子機器を実現させることのできる化合物、及び当該化合物を含む有機EL素子用材料を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【0008】

本発明の一態様によれば、
陽極と、
陰極と、

10

20

30

40

50

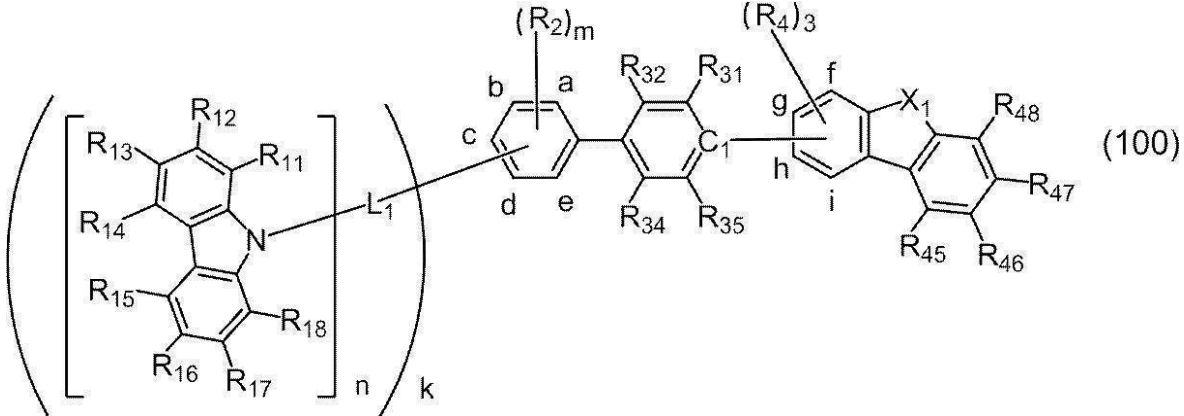
前記陽極と前記陰極との間に含まれる発光層と、を有し、
前記発光層は、遅延蛍光性の化合物 M 2 と、下記一般式 (1 0 0) で表される化合物 M 3 と、を含み、

前記化合物 M 2 の一重項エネルギー $S_1 (M 2)$ と、前記化合物 M 3 の一重項エネルギー $S_1 (M 3)$ とが、下記数式 (数 1) の関係を満たす、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

$$S_1 (M 3) > S_1 (M 2) \quad (数 1)$$

【 0 0 0 9 】

【 化 1 】



10

20

【 0 0 1 0 】

前記一般式 (1 0 0) において、 X_1 は酸素原子又は硫黄原子であり、 C_1 は炭素原子であり、

n は、1、2、又は3であり、

k は、1、2、又は3であり、

m は、2、3、又は4であり、 $k + m = 5$ であり、

$R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、 n 及び k の少なくとも一方が2以上である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

30

L_1 は、単結合又は連結基であり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は1であり、

k が2以上である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なり、

連結基としての L_1 は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基から誘導される基、又は

40

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基から誘導される基からなる群から選択される2つの基が結合した基であり、

k が1であり、 m が4であるとき、4つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (1 0 0) に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、1つの L_1 は、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 又は e の位置の炭素原子と結合し、

k が2であり、 m が3であるとき、3つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (1 0 0) に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、2つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

k が3であり、 m が2であるとき、2つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (1 0 0) に

50

示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、3つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、m が 2 以上の場合、複数の R_2 は互いに同一であるか又は異なり、

R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成するか、又は複数の R_4 のうちの 2 つ以上からなる組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、ただし、3つの R_4 は互いに同一であるか又は異なり、3つの R_4 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す f、g、h 及び i の位置のいずれかの炭素原子と結合し、 C_1 は、前記 R_4 と結合しない f、g、h 及び i の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

置換基としての $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基である。

【0011】

本発明の一態様によれば、前述の本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器が提供される。

【0012】

本発明の一態様によれば、下記一般式 (201)、下記一般式 (202)、又は下記一般式 (203) で表される化合物が提供される。

【0013】

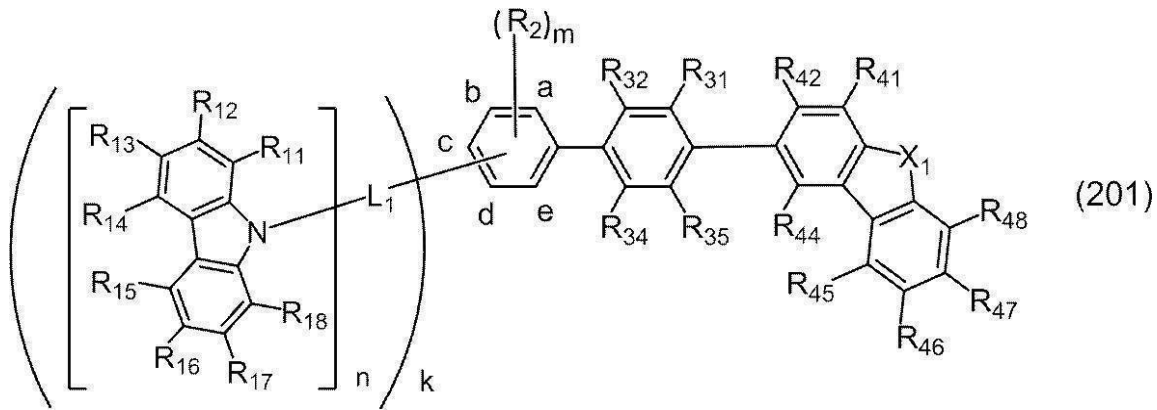
10

20

30

40

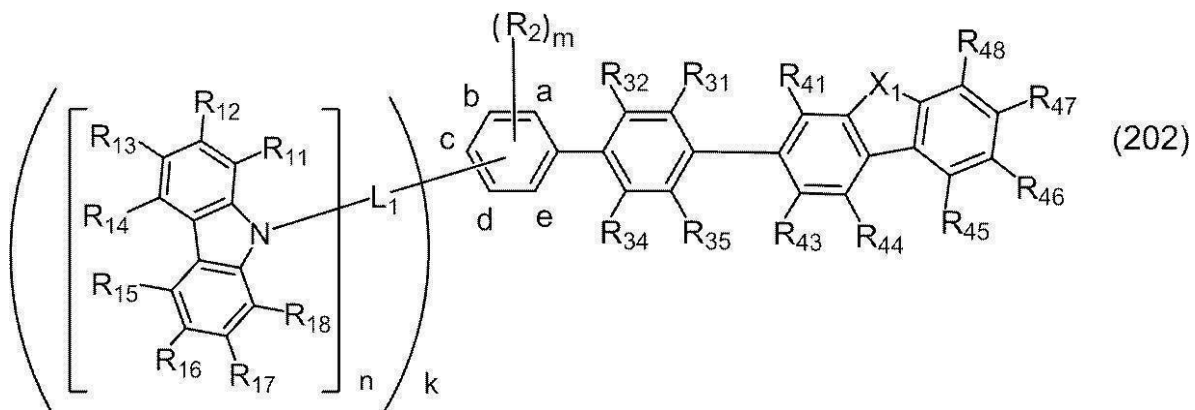
【化2】



10

【0014】

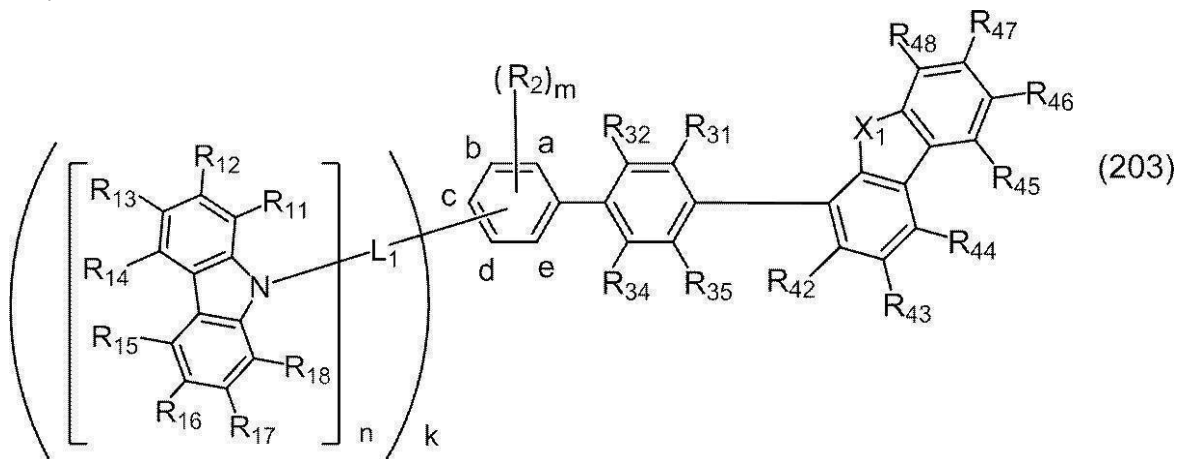
【化3】



20

【0015】

【化4】



30

【0016】

40

前記一般式(201)~(203)において、 X_1 は酸素原子又は硫黄原子であり、

n は、1、2、又は3であり、

k は、1、2、又は3であり、

m は、2、3、又は4であり、 $k + m = 5$ であり、

$R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組が互いに結合せず、 n 及び k の少なくとも一方が2以上である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又

50

は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

L_1 は、単結合又は連結基であり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は 1 であり、 k が 2 以上である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なり、連結基としての L_1 は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基から誘導される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基から誘導される基からなる群から選択される 2 つの基が結合した基であり、

k が 1 であり、 m が 4 であるとき、4 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (201)、(202)、又は (203) に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、1 つの L_1 は、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 又は e の位置の炭素原子と結合し、

k が 2 であり、 m が 3 であるとき、3 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (201)、(202)、又は (203) に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、2 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

k が 3 であり、 m が 2 であるとき、2 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (201)、(202)、又は (203) に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、3 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、 m が 2 以上の場合、複数の R_2 は互いに同一であるか又は異なり、

$R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{43} 及び R_{44} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基であり、

10

20

30

40

50

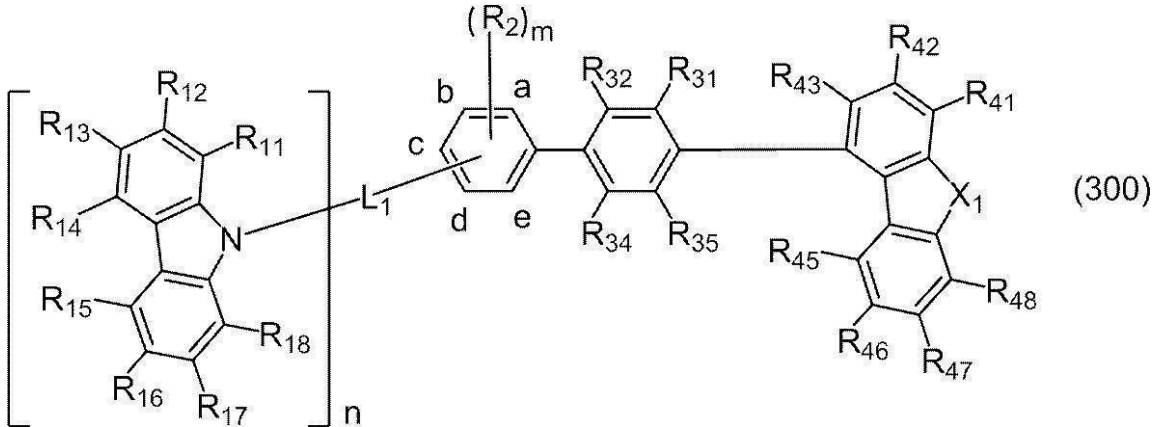
ただし、 $R_{11} \sim R_{18}$ のうち、少なくともいずれか1つ以上が無置換の環形成炭素数6～30のアリール基である。

【0017】

本発明の一態様によれば、下記一般式(300)で表される化合物が提供される。

【0018】

【化5】



10

【0019】

前記一般式(300)において、 X_1 は酸素原子又は硫黄原子であり、

n は、1、2、又は3であり、

k は、1、2、又は3であり、

m は、2、3、又は4であり、 $k + m = 5$ であり、

$R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、 n 及び k の少なくとも一方が2以上である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

20

30

L_1 は、単結合又は連結基であり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は1であり、

k が2以上である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なり、

連結基としての L_1 は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基から誘導される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基から誘導される基からなる群から選択される2つの基が結合した基であり、

k が1であり、 m が4であるとき、4つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(300)に示すa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、1つの L_1 は、前記 R_2 と結合しないa、b、c、d又はeの位置の炭素原子と結合し、

40

k が2であり、 m が3であるとき、3つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(300)に示すa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、2つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しないa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、

k が3であり、 m が2であるとき、2つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(300)に示すa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、3つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しないa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、

R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、 m が2以上の場合、複数の R_2 は互いに同一であるか又は異なり、

50

R_{41} 、 R_{42} 、 R_{43} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 $R_{41} \sim R_{43}$ 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基である。

10

20

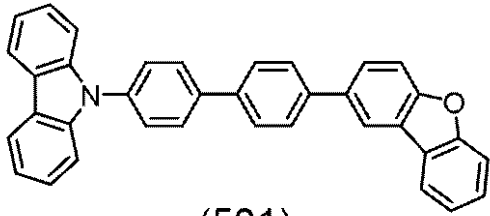
【0020】

本発明の一態様によれば、下記一般式(501)～下記一般式(514)のいずれかで表される化合物が提供される。

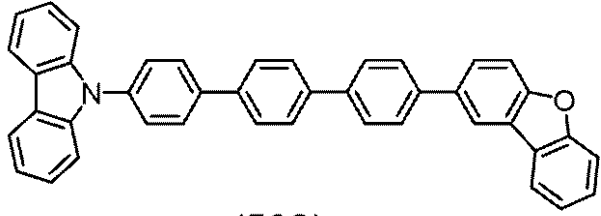
【0021】

30

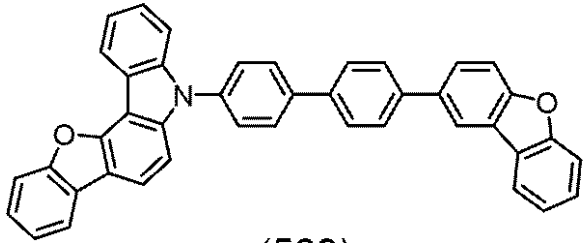
【化 6】



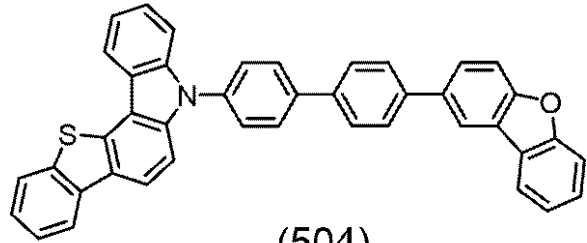
(501)



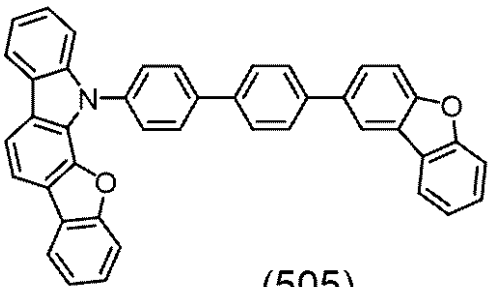
(502)



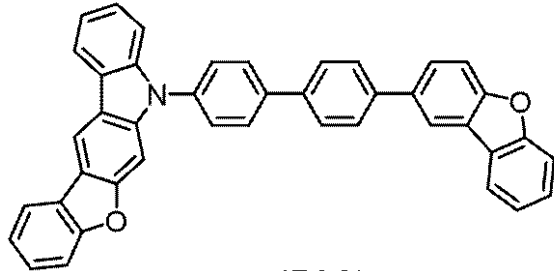
(503)



(504)



(505)



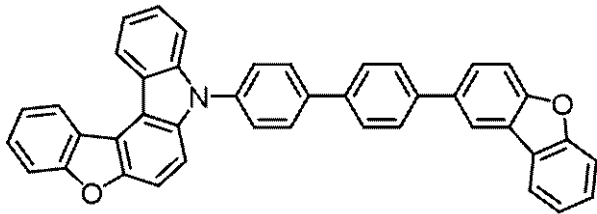
(506)

【 0 0 2 2 】

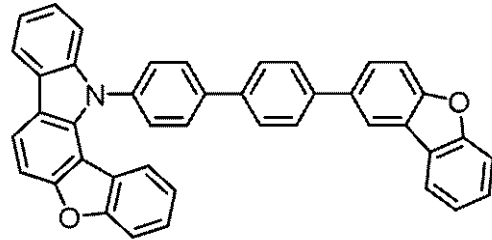
10

20

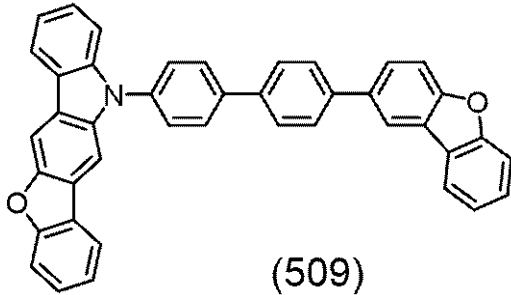
【化 7】



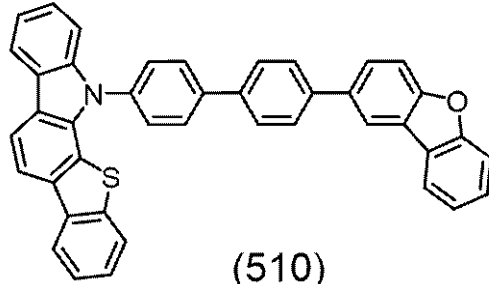
(507)



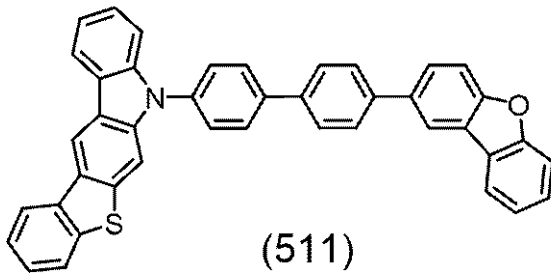
(508)



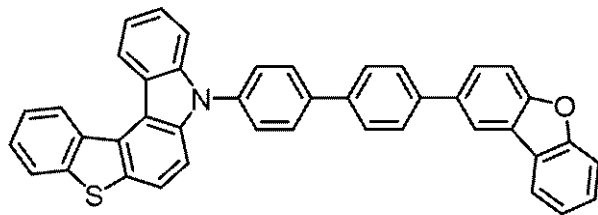
(509)



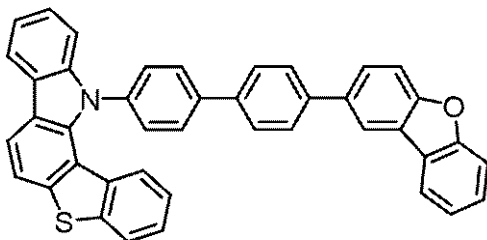
(510)



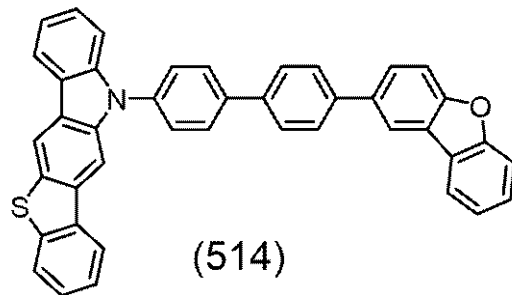
(511)



(512)



(513)



(514)

【 0 0 2 3 】

本発明の一態様によれば、前述の本発明の一態様に係る化合物を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料が提供される。

【 0 0 2 4 】

本発明の一態様によれば、高性能の有機EL素子、例えば長寿命で発光させることのできる有機EL素子、並びに当該有機EL素子を搭載した電子機器を提供することができる。

本発明の一態様によれば、高性能の有機EL素子、例えば長寿命で発光する有機EL素子及び電子機器を実現させることのできる化合物、及び当該化合物を含む有機EL素子用材料を提供することができる。

【 図面の簡単な説明 】

【 0 0 2 5 】

【図1】本発明の第一実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の概略構成を示す図である。

【図2】過渡PLを測定する装置の概略図である。

【図3】過渡PLの減衰曲線の一例を示す図である。

【図4】本発明の第一実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の発光層

10

20

30

40

50

における化合物 M 3、及び化合物 M 2 のエネルギー準位、並びにエネルギー移動の関係を示す図である。

【図 5】本発明の第二実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の発光層における化合物 M 3、化合物 M 2、及び化合物 M 1 のエネルギー準位、並びにエネルギー移動の関係を示す図である。

【発明を実施するための形態】

【0026】

〔第一実施形態〕

本発明の第一実施形態に係る有機 EL 素子の構成について説明する。

有機 EL 素子は、陽極および陰極の両電極間に有機層を備える。この有機層は、有機化合物で構成される層を少なくとも一つ含む。あるいは、この有機層は、有機化合物で構成される複数の層が積層されてなる。有機層は、無機化合物をさらに含んでもよい。本実施形態の有機 EL 素子において、有機層のうち少なくとも一層は、発光層である。ゆえに、有機層は、例えば、一つの発光層で構成されていてもよいし、有機 EL 素子に採用され得る層を含んでもよい。有機 EL 素子に採用され得る層としては、特に限定されないが、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層、及び障壁層からなる群から選択される少なくともいずれかの層が挙げられる。

本実施形態の有機 EL 素子は、陽極と陰極との間に含まれる発光層を有する。

【0027】

図 1 に、本実施形態における有機 EL 素子の一例の概略構成を示す。

有機 EL 素子 1 は、透光性の基板 2 と、陽極 3 と、陰極 4 と、陽極 3 と陰極 4 との間に配置された有機層 10 と、を含む。有機層 10 は、陽極 3 側から順に、正孔注入層 6、正孔輸送層 7、発光層 5、電子輸送層 8、および電子注入層 9 が、この順番で積層されて構成される。

【0028】

発光層 5 は、金属錯体を含んでもよい。

発光層 5 は、燐光発光性材料（ドーパント材料）を含まないことが好ましい。

発光層 5 は、重金属錯体及び燐光発光性の希土類金属錯体を含まないことが好ましい。ここで、重金属錯体としては、例えば、イリジウム錯体、オスmium錯体、及び白金錯体等が挙げられる。

また、発光層 5 は、金属錯体を含まないことも好ましい。

本実施形態の有機 EL 素子 1 において、発光層 5 は、遅延蛍光性の化合物 M 2 と、前記一般式 (100) で表される化合物 M 3 と、を含む。

この態様の場合、化合物 M 2 は、ドーパント材料（ゲスト材料、エミッター、発光材料と称する場合もある。）であることが好ましく、化合物 M 3 は、ホスト材料（マトリックス材料と称する場合もある。）であることが好ましい。

化合物 M 3 は、遅延蛍光性の化合物でもよいし、遅延蛍光性を示さない化合物でもよい。

【0029】

本発明者らは、前記一般式 (100) で表される化合物 M 3 を、遅延蛍光性の化合物 M 2 と共に用いることにより、高性能の有機 EL 素子を実現できることを見出した。

化合物 M 3 は、電子輸送部位であるジベンゾフラン環又はジベンゾチオフエン環に、[1, 1'-ピフェニル]-ジイル基の 4 位の炭素原子、又は 4' 位の炭素原子が置換した構造を有する。そのため、本実施形態における化合物 M 3 は、ジベンゾフラン環又はジベンゾチオフエン環に、例えば、[1, 1'-ピフェニル]-ジイル基の 3 位の炭素原子、又は 3' 位の炭素原子が置換した構造を有する化合物に比べ、電子輸送部位全体として共役長が伸長している。

【0030】

本実施形態においては、電子輸送部位の共役長が伸長した化合物 M 3 を、発光層に含ませることによって、発光層の内部まで電子を運ぶことができ、電子と正孔との再結合領域

10

20

30

40

50

を広げることができると考えられる。その結果、発光層の負荷を減少できると考えられる。一般的に、遅延蛍光性の化合物は、STを小さくするために、分子内にLUMO（最低空分子軌道）の絶対値が大きな部位が導入されることが多い。しかし、当該部分が導入された遅延蛍光性の化合物を発光層に含めると、発光層の電子輸送性を阻害することがある。

本実施形態では、遅延蛍光性の化合物M2と共に、電子輸送部位の共役長が伸長した化合物M3を発光層に含ませるので、発光層の電子輸送性が阻害されるのが抑制され、その結果、発光層の負荷の減少度合いを大きくできると考えられる。

また、電子輸送部位の共役長が伸長した化合物M3は、化合物自体の電子輸送における負荷も減少できると考えられる。

さらに、化合物M3は、前記一般式(X)で表される部分構造に、正孔注入部位であるカルバゾール環が、単結合でもしくは連結基を介して結合しているため、適当な量の正孔を発光層に注入できる構造を有している。

したがって、本実施形態によれば、高性能の有機EL素子を実現することができる。

本実施形態における「高性能」とは、長寿命で発光すること、発光効率が向上すること、駆動電圧が低下すること、及び輝度が向上することのうち、少なくとも一つを意味する。

【0031】

以下、本実施形態の有機EL素子の構成について詳細に説明する。以下、符号の記載を省略する。

【0032】

<発光層>

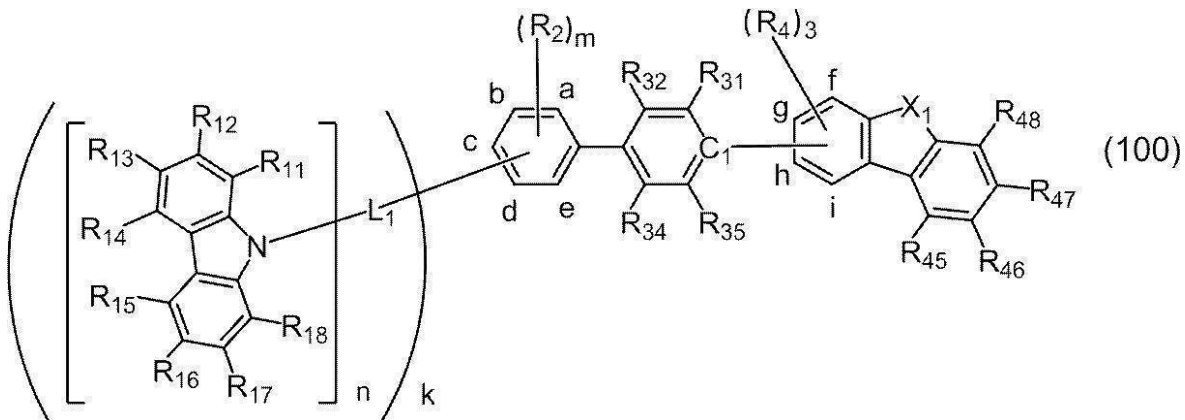
(化合物M3)

本実施形態の発光層は、下記一般式(100)で表される化合物M3を含む。

本実施形態の化合物M3は、熱活性化遅延蛍光性の化合物でもよいし、熱活性化遅延蛍光性を示さない化合物でもよいが、熱活性化遅延蛍光性を示さない化合物であることが好ましい。

【0033】

【化8】



【0034】

前記一般式(100)において、X₁は酸素原子又は硫黄原子であり、C₁は炭素原子であり、

nは、1、2、又は3であり、kは、1、2、又は3であり、

mは、2、3、又は4であり、k+m=5であり、

R₁₁~R₁₈は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR₁₁及びR₁₂の組、R₁₂及びR₁₃の組、R₁₃及びR₁₄の組、R₁₅及びR₁₆の組、R₁₆及びR₁₇の組、並びにR₁₇及びR₁₈の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、n及びkの少なくとも一方が2以上である場合、複数のR₁₁は互いに同一であるか又は異なり、複数のR₁₂は互いに同一であるか又は異なり、複数のR₁

10

20

30

40

50

R_3 は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

L_1 は、単結合又は連結基であり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は 1 であり、 k が 2 以上である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なり、連結基としての L_1 は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基から誘導される基、
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基から誘導される基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基から誘導される基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基から誘導される基からなる群から選択される 2 つの基が結合した基であり、

k が 1 であり、 m が 4 であるとき、4 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、1 つの L_1 は、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 又は e の位置の炭素原子と結合し、

k が 2 であり、 m が 3 であるとき、3 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、2 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

k が 3 であり、 m が 2 であるとき、2 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、3 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、 m が 2 以上の場合、複数の R_2 は互いに同一であるか又は異なり、

R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成するか、又は複数の R_4 のうちの 2 つ以上からなる組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、ただし、3 つの R_4 は互いに同一であるか又は異なり、3 つの R_4 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す f 、 g 、 h 及び i の位置のいずれかの炭素原子と結合し、 C_1 は、前記 R_4 と結合しない f 、 g 、 h 及び i の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

置換基としての $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリアルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリアルホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリアルアミノ基、

チオール基、

10

20

30

40

50

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基である。

【0035】

一般式(100)において、 R_2 及び L_1 と、一般式(100)に示す a、b、c、d、及び e の位置の炭素原子との、具体的な結合態様は以下の通りである。

n が 1 であり、 L_1 が 2 価の連結基であり、k が 1 であり、m が 4 である場合、4 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(100)に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、1 つの L_1 は、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 又は e の位置の炭素原子と結合する。ただし、複数の R_2 は、同じ位置の炭素原子に結合しない。

n が 1 であり、 L_1 が 2 価の連結基であり、k が 2 であり、m が 3 である場合、3 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(100)に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、2 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合する。ただし、複数の R_2 は、同じ位置の炭素原子に結合しない。

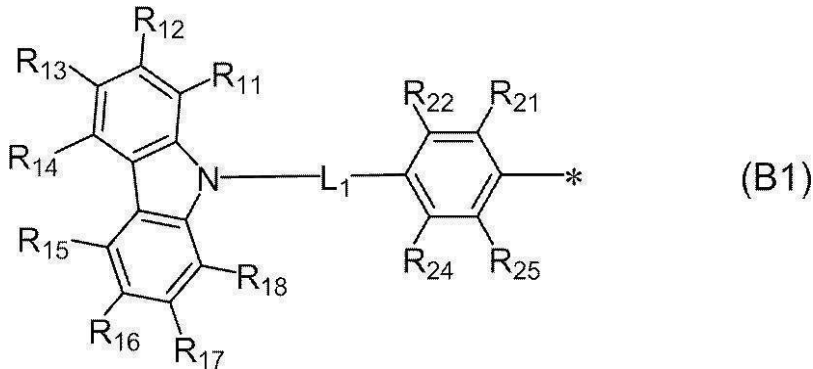
n が 1 であり、 L_1 が 2 価の連結基であり、k が 3 であり、m が 2 である場合、2 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(100)に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、3 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合する。ただし、複数の R_2 は、同じ位置の炭素原子に結合しない。

【0036】

例えば、n が 1 であり、 L_1 が 2 価の連結基であり、k が 1 であり、m が 4 である場合において、4 つの R_2 が、それぞれ、一般式(100)に示す a、b、d、及び e の位置の炭素原子と結合し、且つ 1 つの L_1 が、一般式(100)に示す c の位置の炭素原子と結合する場合の結合態様は下記一般式(B1)で表される。

【0037】

【化9】



【0038】

一般式(B1)において、 $R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ、前記一般式(100)における $R_{11} \sim R_{18}$ と同義であり、 R_{21} 、 R_{22} 、 R_{24} 、及び R_{25} は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_2 と同義である。一般式(B1)中、* は、前記一般式(100)において、 R_{32} に結合するベンゼン環の炭素原子、及び R_{34} に結合するベンゼン環の炭素原子の間にある炭素原子との結合位置を表す。

【0039】

n が 2 であり、 L_1 が 3 価の連結基であり、k が 1 であり、m が 4 である場合、4 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(100)に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、1 つの L_1 は、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 又は e の位置の炭素原子と結合する。ただし、複数の R_2 は、同じ位置の炭素原子に結合しない。

n が 2 であり、 L_1 が 3 価の連結基であり、k が 2 であり、m が 3 である場合、3 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(100)に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、2 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 及

び e の位置のいずれかの炭素原子と結合する。ただし、複数の R_2 は、同じ位置の炭素原子に結合しない。

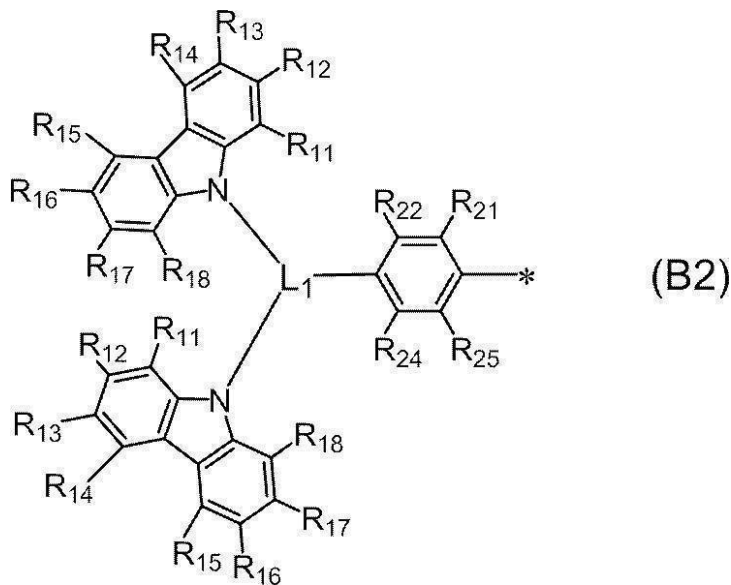
n が 2 であり、 L_1 が 3 価の連結基であり、k が 3 であり、m が 2 である場合、2 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、3 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合する。ただし、複数の R_2 は、同じ位置の炭素原子に結合しない。

【0040】

例えば、n が 2 であり、 L_1 が 3 価の連結基であり、k が 1 であり、m が 4 である場合において、4 つの R_2 が、それぞれ、一般式 (100) に示す a、b、d、及び e の位置の炭素原子と結合し、且つ 1 つの L_1 が、一般式 (100) に示す c の位置の炭素原子と結合する場合の結合態様は下記一般式 (B2) で表される。

【0041】

【化10】



【0042】

一般式 (B2) において、 $R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ、前記一般式 (100) における $R_{11} \sim R_{18}$ と同義であり、 R_{21} 、 R_{22} 、 R_{24} 、及び R_{25} は、それぞれ独立に、前記一般式 (100) における R_2 と同義である。一般式 (B2) 中、* は、前記一般式 (100) において、 R_{32} に結合するベンゼン環の炭素原子、及び R_{34} に結合するベンゼン環の炭素原子の間にある炭素原子との結合位置を表す。

一般式 (B2) において、2 つの R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、2 つの R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、2 つの R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、2 つの R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、2 つの R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、2 つの R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、2 つの R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、2 つの R_{18} は互いに同一であるか又は異なる。

【0043】

n が 3 であり、 L_1 が 4 価の連結基であり、k が 1 であり、m が 4 である場合、4 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、1 つの L_1 は、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 又は e の位置の炭素原子と結合する。ただし、複数の R_2 は、同じ位置の炭素原子に結合しない。

n が 3 であり、 L_1 が 4 価の連結基であり、k が 2 であり、m が 3 である場合、3 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、2 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合する。ただし、複数の R_2 は、同じ位置の炭素原子に結合しない。

10

20

30

40

50

n が 3 であり、 L_1 が 4 個の連結基であり、 k が 3 であり、 m が 2 である場合、2 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、3 つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合する。ただし、複数の R_2 は、同じ位置の炭素原子に結合しない。

【0044】

一般式 (100) において、 R_2 及び一般式 (100) に示すカルバゾール環の 9 位の窒素原子と、一般式 (100) に示す a 、 b 、 c 、 d 、及び e の位置の炭素原子との、具体的な結合態様は以下の通りである。

n が 1 であり、 L_1 が単結合であり、 k が 1 であり、 m が 4 である場合、4 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、前記一般式 (100) に示す、1 つのカルバゾール環の 9 位の窒素原子は、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 又は e の位置の炭素原子と結合する。ただし、複数の R_2 は、同じ位置の炭素原子に結合しない。

n が 1 であり、 L_1 が単結合であり、 k が 2 であり、 m が 3 である場合、3 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、前記一般式 (100) に示す、2 つのカルバゾール環の 9 位の窒素原子は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合する。ただし、複数の R_2 は、同じ位置の炭素原子に結合しない。

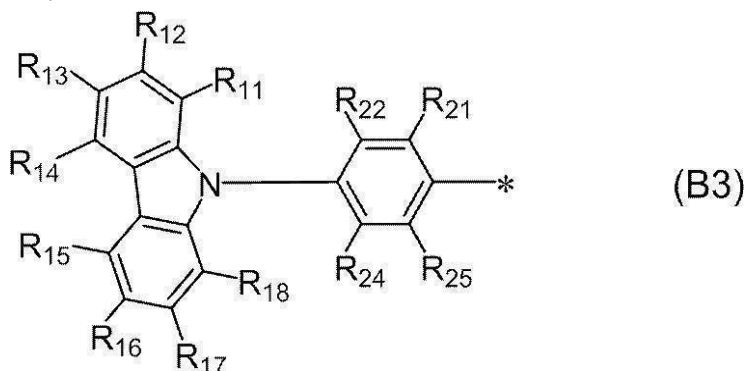
n が 1 であり、 L_1 が単結合であり、 k が 3 であり、 m が 2 である場合、2 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (100) に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、前記一般式 (100) に示す、3 つのカルバゾール環の 9 位の窒素原子は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合する。ただし、複数の R_2 は、同じ位置の炭素原子に結合しない。

【0045】

例えば、 n が 1 であり、 L_1 が単結合であり、 k が 1 であり、 m が 4 である場合において、4 つの R_2 が、それぞれ、一般式 (100) に示す a 、 b 、 d 、及び e の位置の炭素原子と結合し、且つ前記一般式 (100) に示す、1 つのカルバゾール環の 9 位の窒素原子が一般式 (100) に示す c の位置の炭素原子と結合する場合の結合態様は下記一般式 (B3) で表される。

【0046】

【化11】



【0047】

一般式 (B3) において、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_{21} 、 R_{22} 、 R_{24} 、及び R_{25} は、それぞれ、前記一般式 (B1) における $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_{21} 、 R_{22} 、 R_{24} 、及び R_{25} と同義である。一般式 (B3) 中、* は、前記一般式 (100) において、 R_{32} に結合するベンゼン環の炭素原子、及び R_{34} に結合するベンゼン環の炭素原子の間にある炭素原子との結合位置を表す。

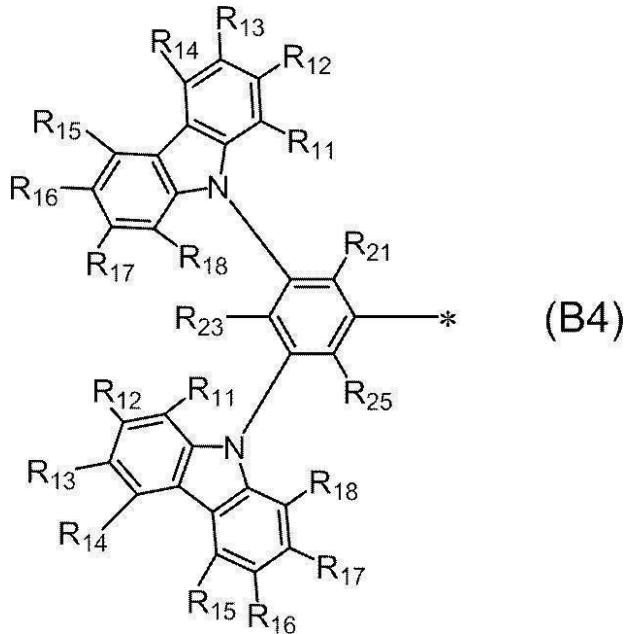
【0048】

例えば、 n が 1 であり、 L_1 が単結合であり、 k が 2 であり、 m が 3 である場合、3 つ

の R_2 が、それぞれ、一般式 (100) に示す a、c、及び e の位置の炭素原子と結合し、且つ前記一般式 (100) に示す、2つのカルbazol環の 9 位の窒素原子が、それぞれ、一般式 (100) に示す b、及び d の位置の炭素原子と結合する場合の結合態様は下記一般式 (B4) で表される。

【0049】

【化12】



10

20

【0050】

一般式 (B4) において、 $R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ、前記一般式 (B2) における $R_{11} \sim R_{18}$ と同義であり、 R_{21} 、 R_{23} 、及び R_{25} は、それぞれ独立に、前記一般式 (B2) における R_{21} 、 R_{22} 、 R_{24} 、及び R_{25} と同義である。一般式 (B4) 中、* は、前記一般式 (100) において、 R_{32} に結合するベンゼン環の炭素原子、及び R_{34} に結合するベンゼン環の炭素原子の間にある炭素原子との結合位置を表す。

30

【0051】

第一実施形態の化合物 M3 の好ましい態様について説明する。

以下の説明において、本実施形態の化合物 M3 を一般式で表すとき、各一般式中、前記一般式 (100) に示す a、b、c、d、e、f、g、h、及び i に対応する位置は、それぞれ a、b、c、d、e、f、g、h、及び i とする。各一般式において、a、b、c、d、e、f、g、h、及び i の記載は省略することがある。

【0052】

本実施形態の化合物 M3 において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} のいずれか 1 つ以上の組が、互いに結合して環を形成することが好ましい。

【0053】

本実施形態の化合物 M3 において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、且つ R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、 R_{47} 及び R_{48} の組、並びに複数の R_4 のうちの 2 つ以上からなる組が互いに結合しないことが好ましい。

40

【0054】

本実施形態の化合物 M3 において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組のいずれか 1 つの組が、互いに結合して環を形成することが好ましい。

【0055】

50

本実施形態の化合物 M3 において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組のいずれか 1 つの組が互いに結合して環を形成し、且つ R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、 R_{47} 及び R_{48} の組、並びに複数の R_4 のうちの 2 つ以上からなる組が互いに結合しないことが好ましい。

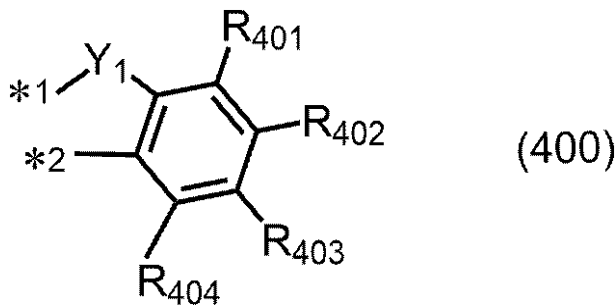
【0056】

本実施形態の化合物 M3 において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} のいずれか 1 つ以上の組が、互いに結合して環を形成する場合、当該環は、下記一般式 (400) で表される環構造を有することが好ましい。

10

【0057】

【化13】



20

【0058】

前記一般式 (400) において、 Y_1 は、酸素原子又は硫黄原子であり、 $R_{401} \sim R_{404}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (100) における $R_{11} \sim R_{18}$ と同義であり、ただし、 R_{401} 及び R_{402} の組、 R_{402} 及び R_{403} の組、並びに R_{403} 及び R_{404} の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成するか又は形成しない。

前記一般式 (100) において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組のうち 2 つ以上からなる組が、互いに結合して前記一般式 (400) で表される環構造を形成する場合、複数の Y_1 は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{401} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{402} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{403} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{404} は互いに同一であるか又は異なる。

30

前記一般式 (100) において、 n 及び k の少なくとも一方が 2 以上である場合、複数の Y_1 は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{401} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{402} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{403} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{404} は互いに同一であるか又は異なる。

前記一般式 (400) で表される環構造中の *1 及び *2 は、前記一般式 (100) 中において、 R_{11} 及び R_{12} がそれぞれ結合する 2 つの炭素原子の組、 R_{12} 及び R_{13} がそれぞれ結合する 2 つの炭素原子の組、 R_{13} 及び R_{14} がそれぞれ結合する 2 つの炭素原子の組、 R_{15} 及び R_{16} がそれぞれ結合する 2 つの炭素原子の組、 R_{16} 及び R_{17} がそれぞれ結合する 2 つの炭素原子の組、並びに R_{17} 及び R_{18} がそれぞれ結合する 2 つの炭素原子の組のうち少なくともいずれかの組の炭素原子を表す。

40

【0059】

前記一般式 (400) において、 R_{401} 及び R_{402} の組、 R_{402} 及び R_{403} の組、並びに R_{403} 及び R_{404} の組は互いに結合しないことが好ましい。

【0060】

前記一般式 (400) において、 Y_1 は、酸素原子であることが好ましい。

前記一般式 (400) において、 Y_1 は、硫黄原子であることも好ましい。

【0061】

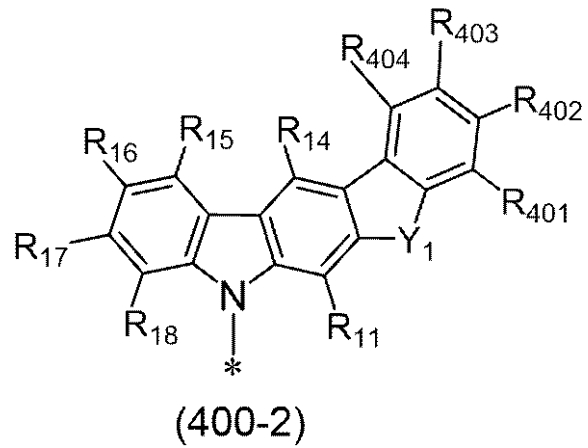
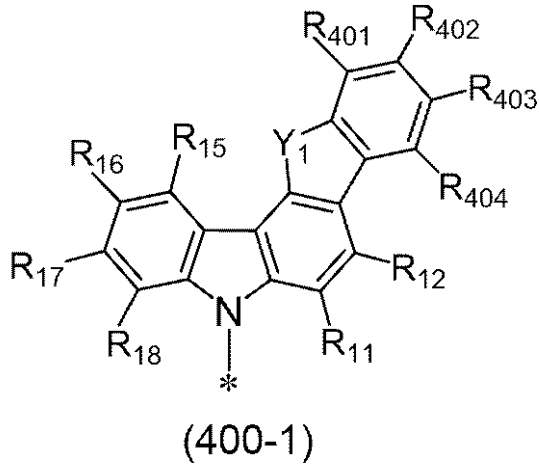
本実施形態の化合物 M3 において、例えば、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13}

50

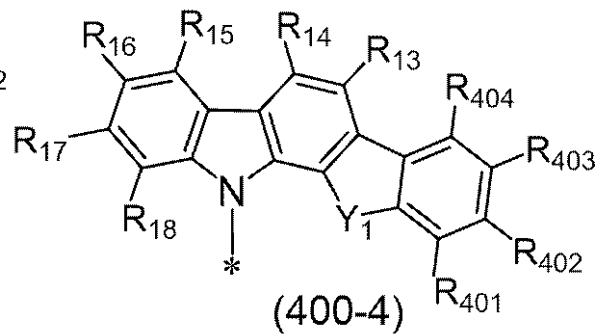
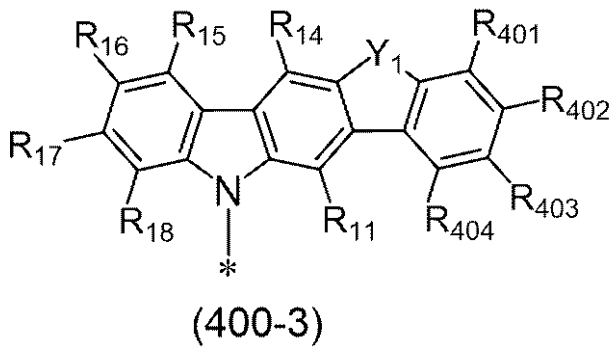
の組、並びに R_{13} 及び R_{14} の組のいずれか 1 つの組が互いに結合して前記一般式 (400) で表される環構造を形成する場合、前記一般式 (100) 中、 $R_{11} \sim R_{18}$ を有する環構造は、下記一般式 (400-1) ~ (400-6) のいずれかで表される。

【0062】

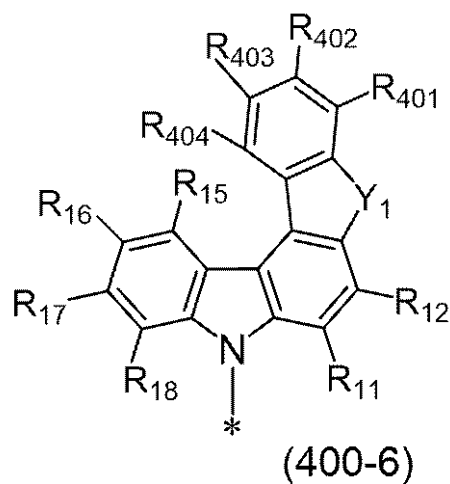
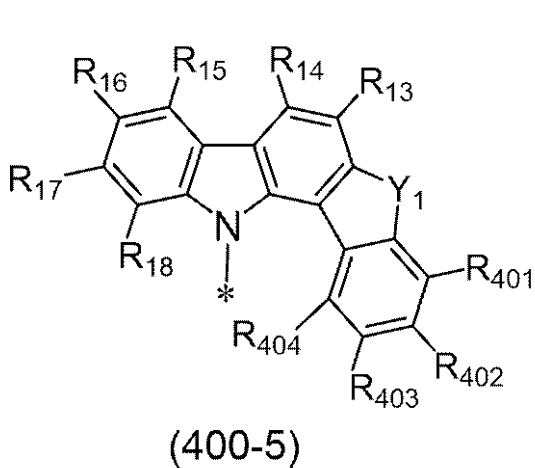
【化14】



10



20



30

40

【0063】

前記一般式 (400-1) ~ (400-6) において、 Y_1 及び $R_{401} \sim R_{404}$ は、それぞれ、前記一般式 (400) における Y_1 及び $R_{401} \sim R_{404}$ と同義であり、 $R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (100) における $R_{11} \sim R_{18}$ と同義である。

前記一般式 (100) 中における L_1 が連結基の場合、* は、 L_1 との結合部位を表す。

前記一般式 (100) 中における L_1 が単結合であって、 n が 1 であり、 k が 1 であり、 m が 4 である場合、* は、4 つの R_2 と結合しない a、b、c、d 又は e の位置の炭素

50

原子と結合する。

前記一般式(100)中における L_1 が単結合であって、 n が1であり、 k が2であり、 m が3である場合、*は、3つの R_2 と結合しないa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合する。

前記一般式(100)中における L_1 が単結合であって、 n が1であり、 k が3であり、 m が2である場合、*は、2つの R_2 と結合しないa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合する。

【0064】

前記一般式(400-1)~(400-6)において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、 R_{17} 及び R_{18} の組、 R_{401} 及び R_{402} の組、 R_{402} 及び R_{403} の組、並びに R_{403} 及び R_{404} の組は、互いに結合しないことが好ましい。

10

【0065】

前記一般式(400-1)~(400-6)において、 Y_1 は、酸素原子であることが好ましい。

前記一般式(400-1)~(400-6)において、 Y_1 は、硫黄原子であることも好ましい。

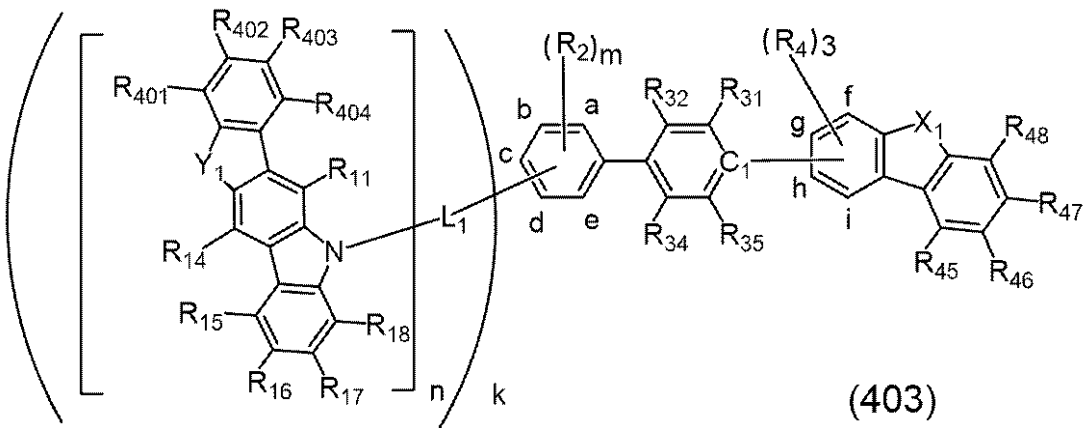
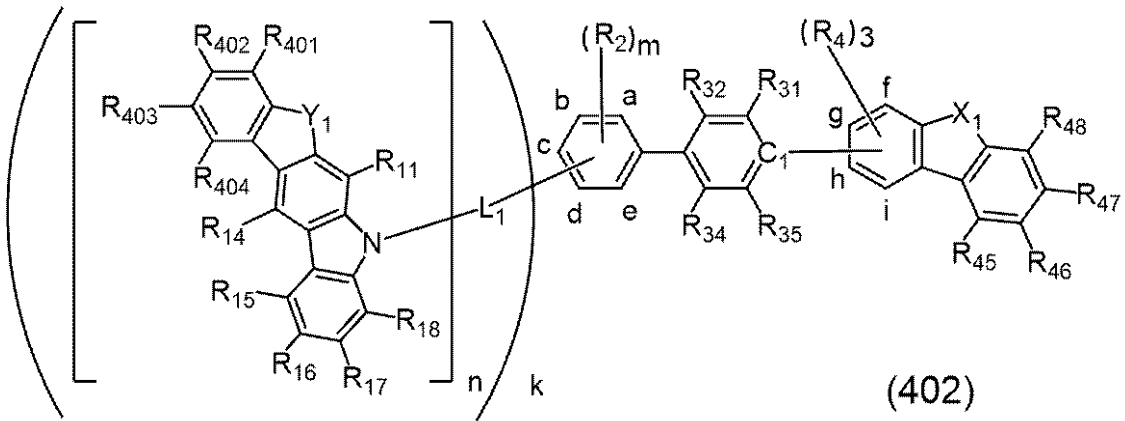
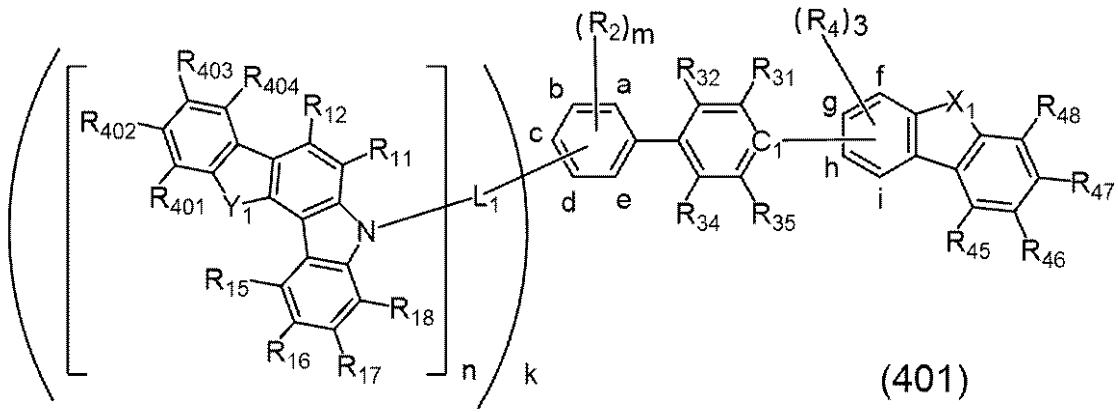
【0066】

前記一般式(100)中、例えば、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、並びに R_{13} 及び R_{14} の組のうち1つの組が、互いに結合して前記一般式(400)で表される環構造を形成する場合、本実施形態の化合物M3は、下記一般式(401)~(406)のいずれかで表される。

20

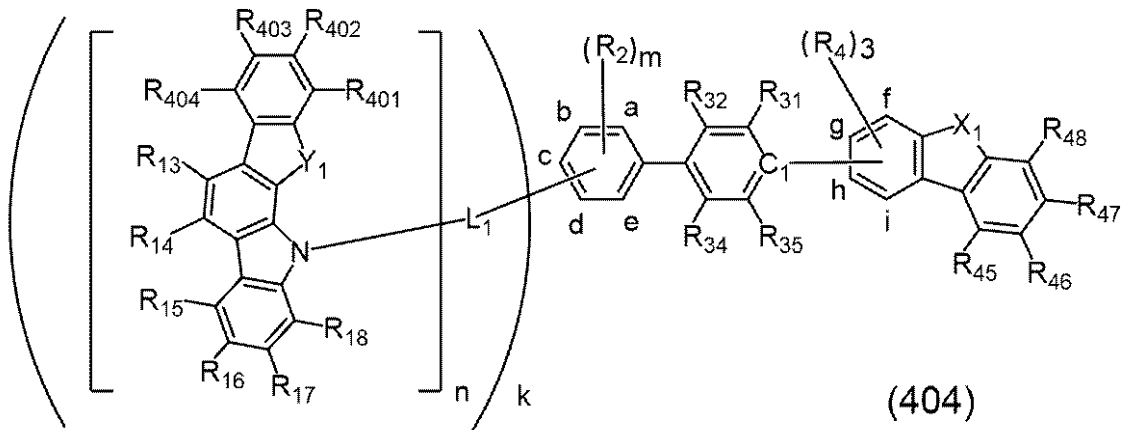
【0067】

【化 1 5】

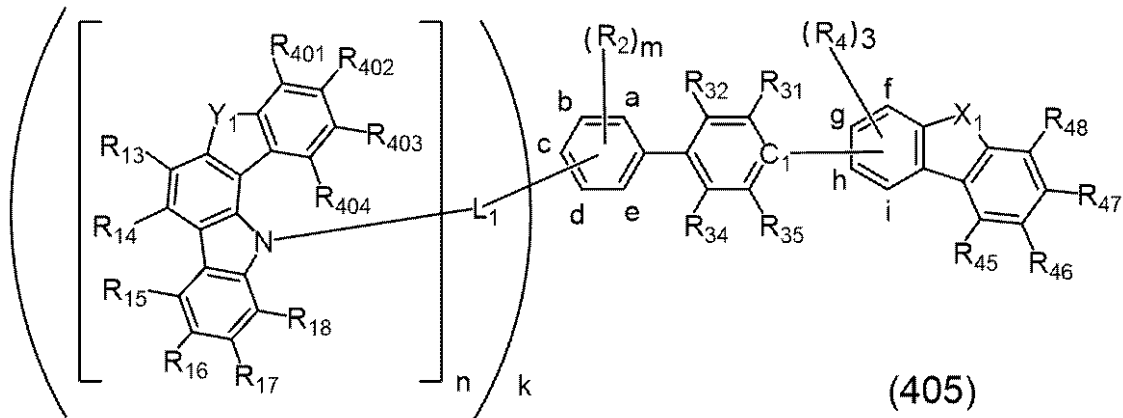


【 0 0 6 8 】

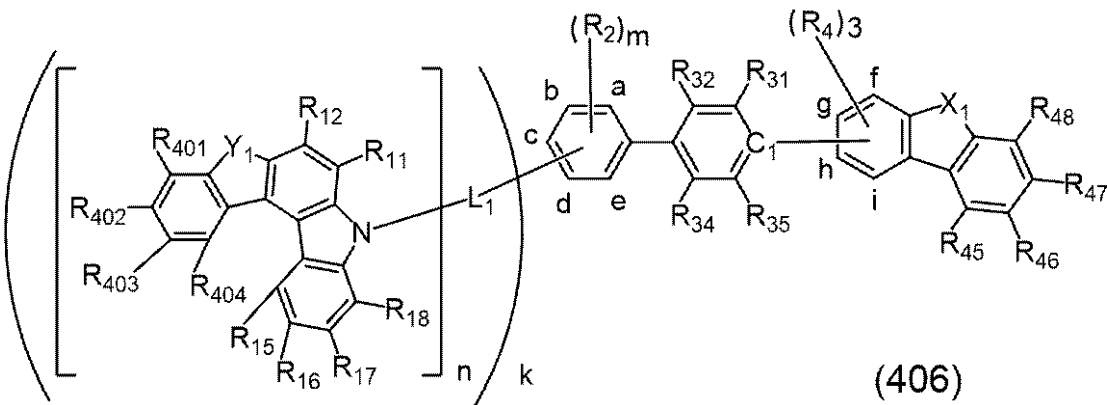
【化16】



10



20



30

【0069】

前記一般式(401)~(406)において、 X_1 、 R_4 、 $R_{45} \sim R_{48}$ 、 C_1 、 $R_{31} \sim R_{32}$ 、 $R_{34} \sim R_{35}$ 、 R_2 、 L_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 m 、 n 、及び k は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 R_4 、 $R_{45} \sim R_{48}$ 、 C_1 、 $R_{31} \sim R_{32}$ 、 $R_{34} \sim R_{35}$ 、 R_2 、 L_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 m 、 n 、及び k と同義であり、 Y_1 は、酸素原子又は硫黄原子であり、 $R_{401} \sim R_{404}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における $R_{11} \sim R_{18}$ と同義であり、ただし、 R_{401} 及び R_{402} の組、 R_{402} 及び R_{403} の組、並びに R_{403} 及び R_{404} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成するか又は形成しない。

40

前記一般式(401)~(406)において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{401} 及び R_{402} の組、 R_{402} 及び R_{403} の組、並びに R_{403} 及び R_{404} の組は、互いに結合しないことが好ましい。

【0070】

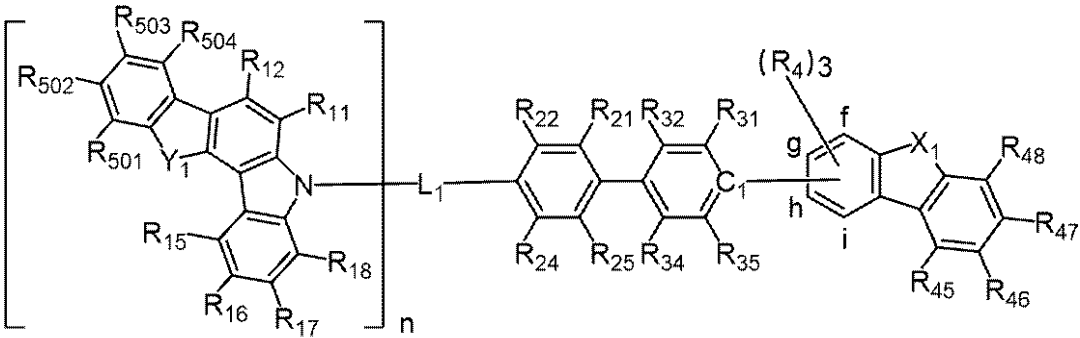
本実施形態の化合物M3は、下記一般式(401A)~(406A)のいずれかで表さ

50

れることが好ましい。

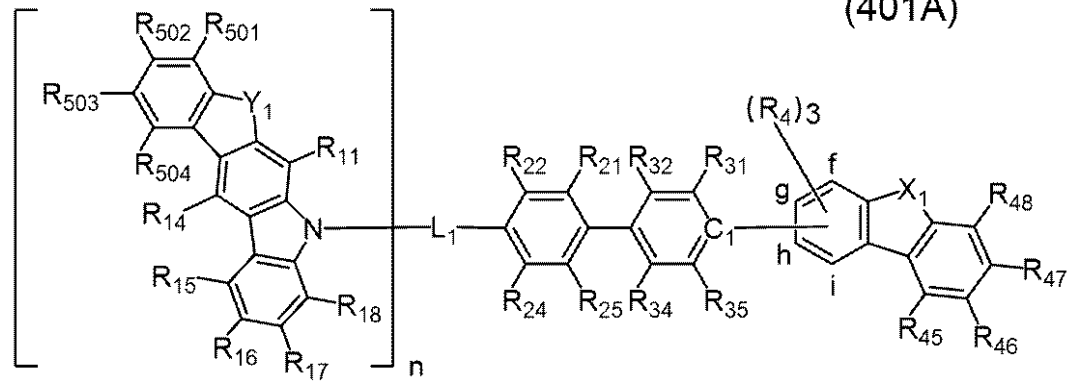
【 0 0 7 1 】

【 化 1 7 】



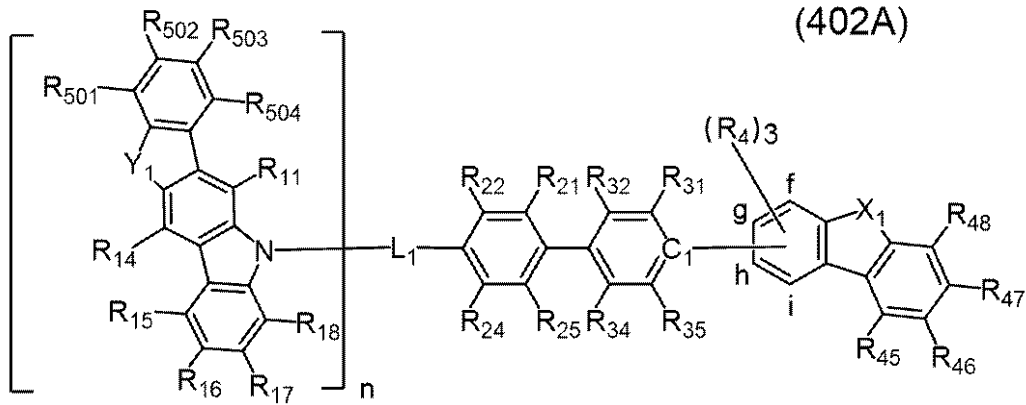
10

(401A)



20

(402A)

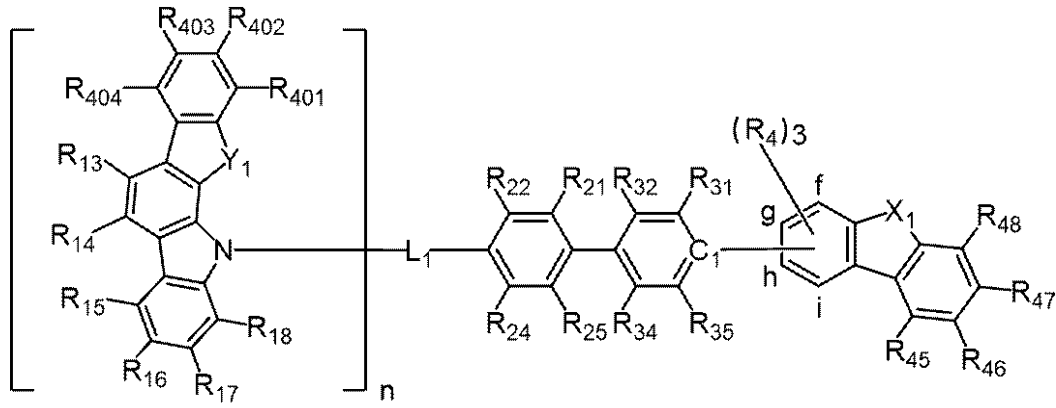


30

(403A)

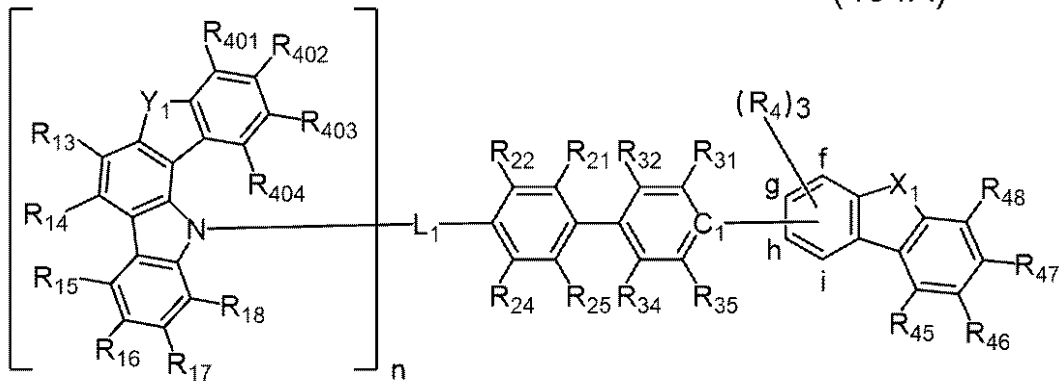
【 0 0 7 2 】

【化18】



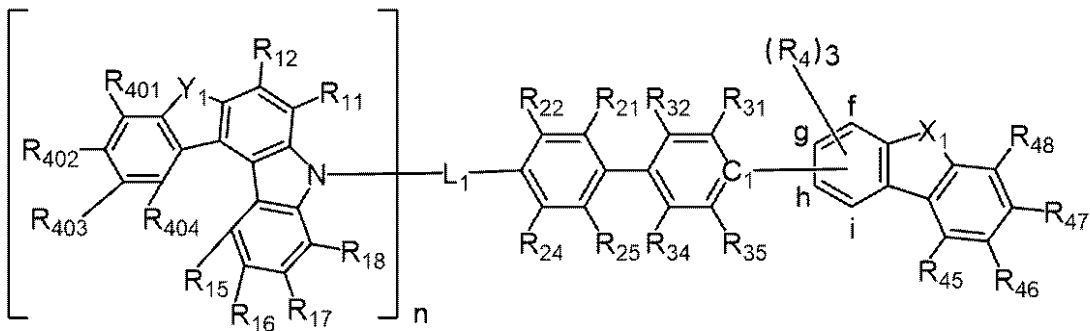
10

(404A)



20

(405A)



30

(406A)

【0073】

前記一般式(401A)~(406A)において、 X_1 、 R_4 、 R_{45} ~ R_{48} 、 C_1 、 R_{31} ~ R_{32} 、 R_{34} ~ R_{35} 、 L_1 、 R_{11} ~ R_{18} 、及び n は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 R_4 、 R_{45} ~ R_{48} 、 C_1 、 R_{31} ~ R_{32} 、 R_{34} ~ R_{35} 、 L_1 、 R_{11} ~ R_{18} 、及び n と同義であり、 R_{21} ~ R_{22} 及び R_{24} ~ R_{25} は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_2 と同義であり、 Y_1 は、酸素原子又は硫黄原子であり、 R_{401} ~ R_{404} は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_{11} ~ R_{18} と同義であり、ただし、 R_{401} 及び R_{402} の組、 R_{402} 及び R_{403} の組、並びに R_{403} 及び R_{404} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成するか又は形成しない。

40

前記一般式(401A)~(406A)において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{401} 及び R_{402} の組、 R_{402} 及び R_{403} の組、並びに R_{403} 及

50

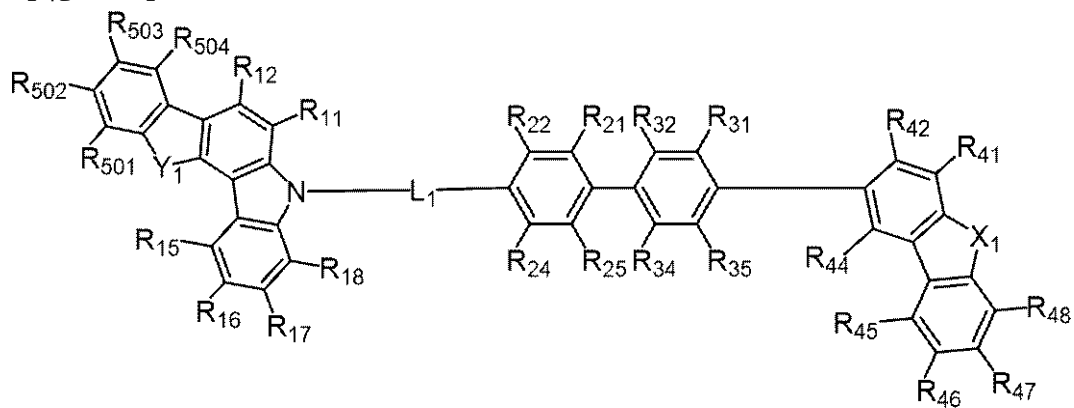
び R_{404} の組は、互いに結合しないことが好ましい。

【0074】

本実施形態の化合物 M3 は、下記一般式 (401B) ~ (406B) のいずれかで表されることも好ましい。

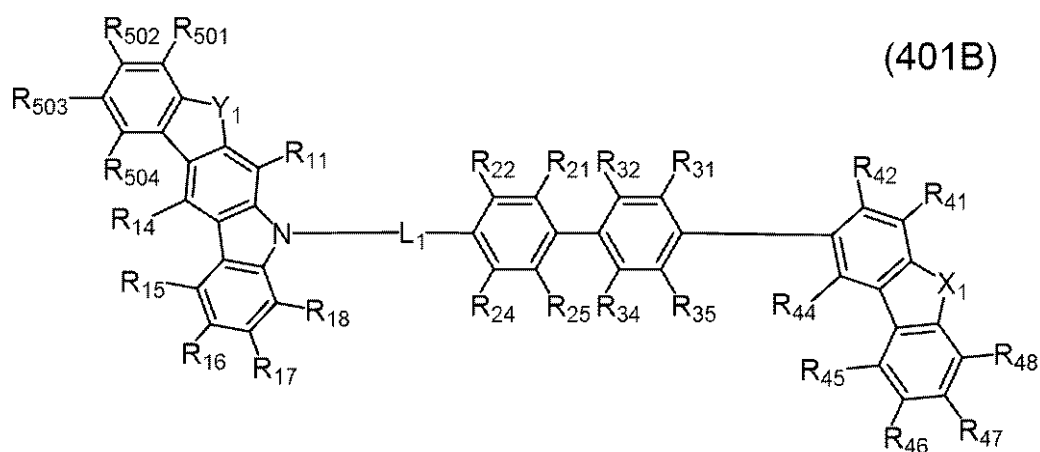
【0075】

【化19】



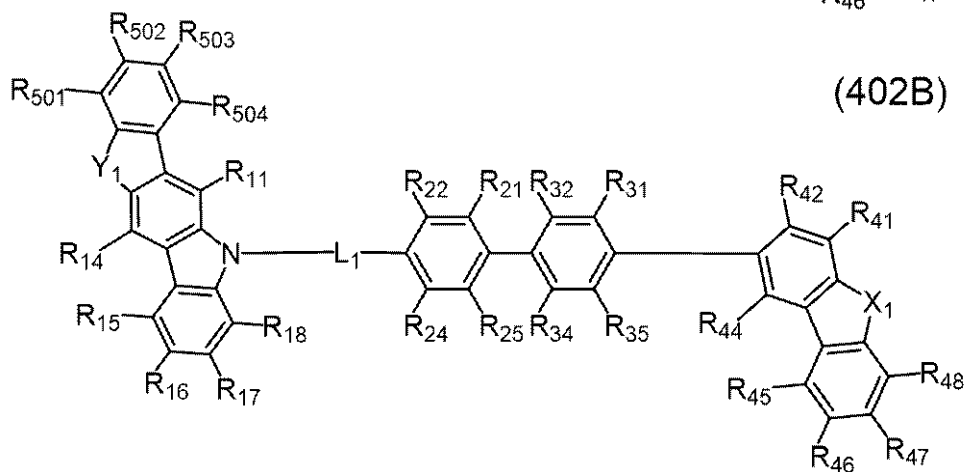
10

(401B)



20

(402B)



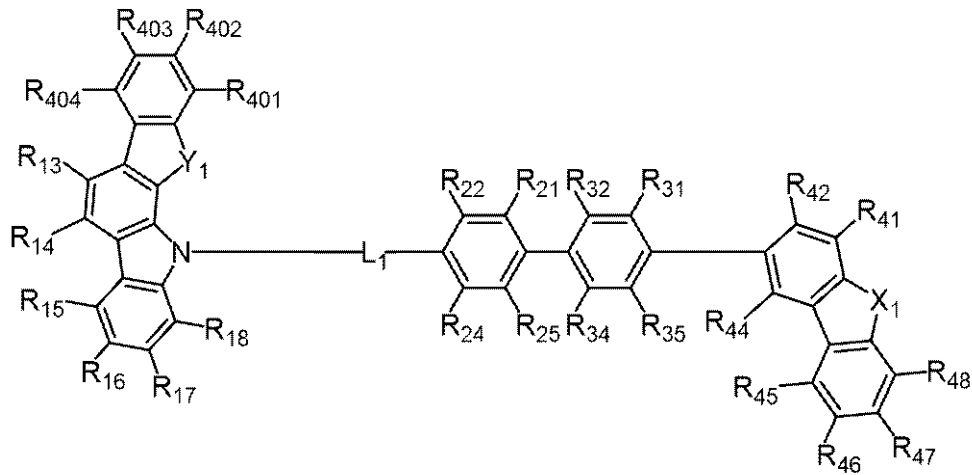
30

(403B)

40

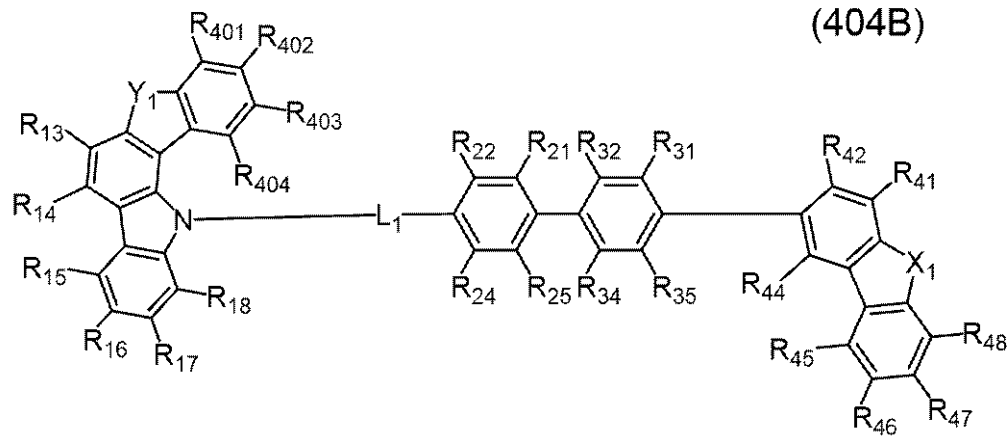
【0076】

【化 2 0】



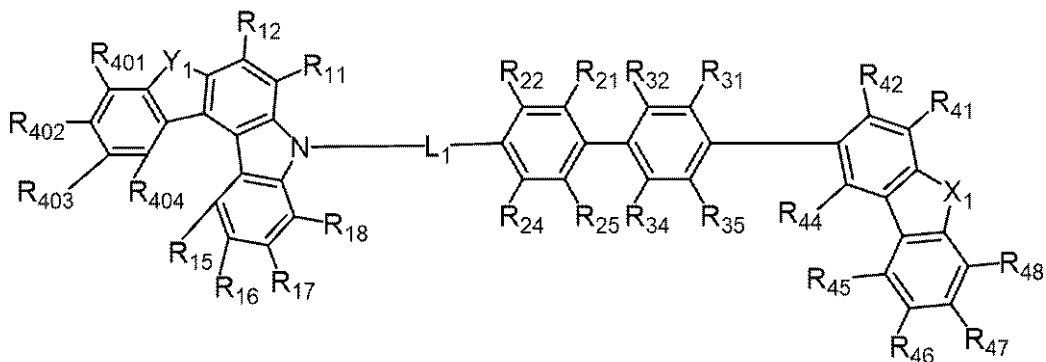
(404B)

10



(405B)

20



(406B)

30

【 0 0 7 7 】

40

前記一般式(401B)~(406B)において、 X_1 、 $R_{45} \sim R_{48}$ 、 $R_{31} \sim R_{32}$ 、 $R_{34} \sim R_{35}$ 、 L_1 及び $R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 $R_{45} \sim R_{48}$ 、 $R_{31} \sim R_{32}$ 、 $R_{34} \sim R_{35}$ 、 L_1 及び $R_{11} \sim R_{18}$ と同義であり、 R_{41} 、 R_{42} 及び R_{44} は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_4 と同義であり、 $R_{21} \sim R_{22}$ 及び $R_{24} \sim R_{25}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_2 と同義であり、 Y_1 は、酸素原子又は硫黄原子であり、 $R_{401} \sim R_{404}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における $R_{11} \sim R_{18}$ と同義であり、ただし、 R_{401} 及び R_{402} の組、 R_{402} 及び R_{403} の組、並びに R_{403} 及び R_{404} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成するか又は形成しない。

50

前記一般式(401B)~(406B)において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{401} 及び R_{402} の組、 R_{402} 及び R_{403} の組、並びに R_{403} 及び R_{404} の組は、互いに結合しないことが好ましい。

【0078】

本実施形態の化合物M3において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、 R_{17} 及び R_{18} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、 R_{47} 及び R_{48} の組、並びに複数の R_4 のうち2つ以上からなる組が互いに結合しないことも好ましい。

【0079】

本実施形態の化合物M3において、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、及び R_{35} は、水素原子であることが好ましい。

10

本実施形態の化合物M3が、前記一般式(401)~(406)、一般式(401A)~(406A)及び一般式(401B)~(406B)のいずれかで表される化合物である場合、 R_2 、 R_{21} ~ R_{22} 、 R_{24} ~ R_{25} 、 R_{31} ~ R_{32} 及び R_{34} ~ R_{35} は、水素原子であることが好ましい。

【0080】

本実施形態の化合物M3において、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、水素原子であり、 L_1 は、単結合であるか、又は無置換の環形成炭素数6~30のアリール基から誘導される基、もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基から誘導される基であることが好ましい。

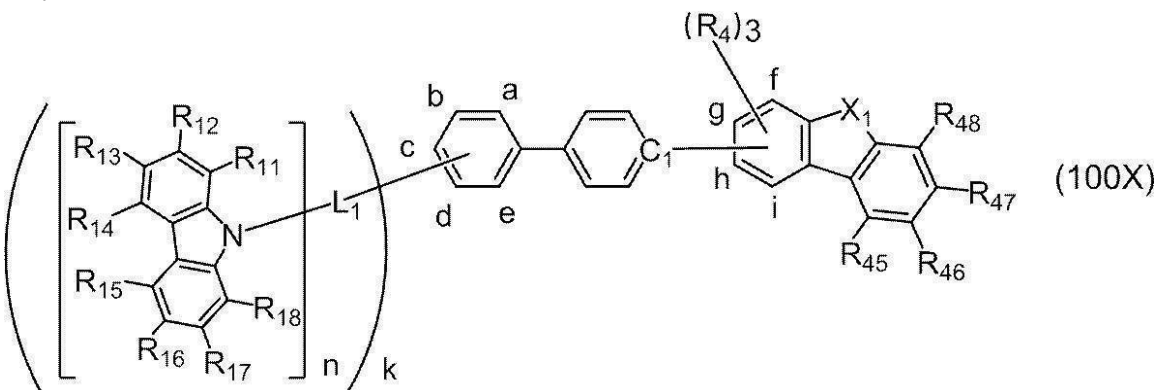
20

本実施形態の化合物M3が、前記一般式(401)~(406)、一般式(401A)~(406A)及び一般式(401B)~(406B)のいずれかで表される化合物である場合、 R_2 、 R_{21} ~ R_{22} 、 R_{24} ~ R_{25} 、 R_{31} ~ R_{32} 及び R_{34} ~ R_{35} は、水素原子であり、 L_1 は、単結合であるか、又は無置換の環形成炭素数6~30のアリール基から誘導される基、もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基から誘導される基であることが好ましい。

この態様における化合物M3は、具体的には、下記一般式(100X)で表される。

【0081】

【化21】



30

【0082】

40

前記一般式(100X)において、 X_1 、 R_4 、 R_{45} ~ R_{48} 、 C_1 、 R_{11} ~ R_{18} 、 n 、及び k は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 R_4 、 R_{45} ~ R_{48} 、 C_1 、 R_{11} ~ R_{18} 、 n 、及び k と同義であり、 L_1 は、単結合であるか、無置換の環形成炭素数6~30のアリール基から誘導される基、又は無置換の環形成原子数5~30の複素環基から誘導される基であり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は1であり、

k が2以上である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なる。

前記一般式(100X)において、 R_{11} ~ R_{18} を有する環構造は、前記一般式(400-1)~(400-6)のいずれかで表されることも好ましい。

【0083】

50

本実施形態の化合物 M3 において、n は 1 又は 2 であることが好ましく、n は 1 であることがより好ましい。

本実施形態の化合物 M3 において、k は 1 又は 2 であることが好ましい。

本実施形態の化合物 M3 において、n は 1 又は 2 であり、且つ k は 1 又は 2 であることもより好ましい。

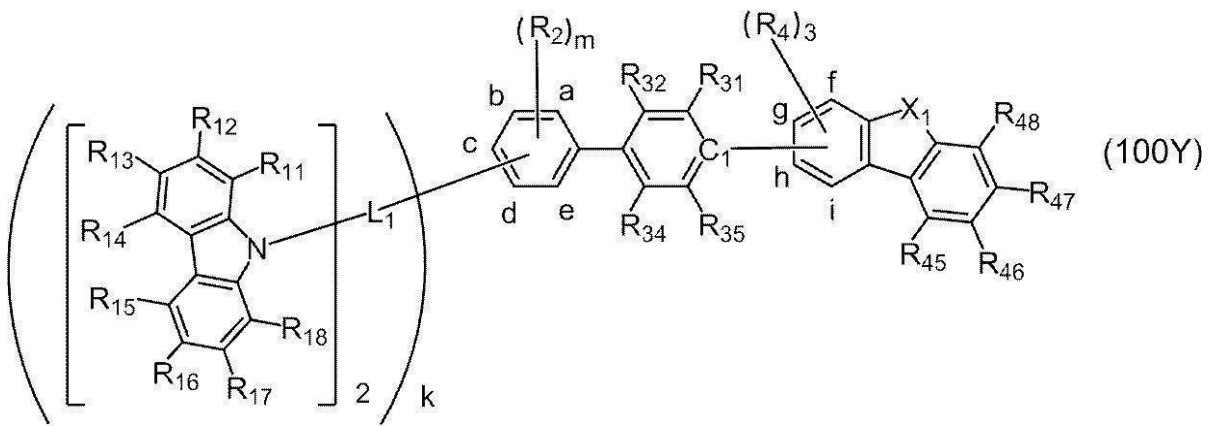
本実施形態の化合物 M3 において、n は 1 であり、且つ k は 1 又は 2 であることもより好ましい。

本実施形態の化合物 M3 において、n は 2 であり、且つ k は 1 又は 2 であることもより好ましい。

具体的に、n が 2 であるときの本実施形態の化合物 M3 は、下記一般式 (100Y) で表される。n が 1 であるときの本実施形態の化合物 M3 は、下記一般式 (100Z) で表される。

【0084】

【化22】



【0085】

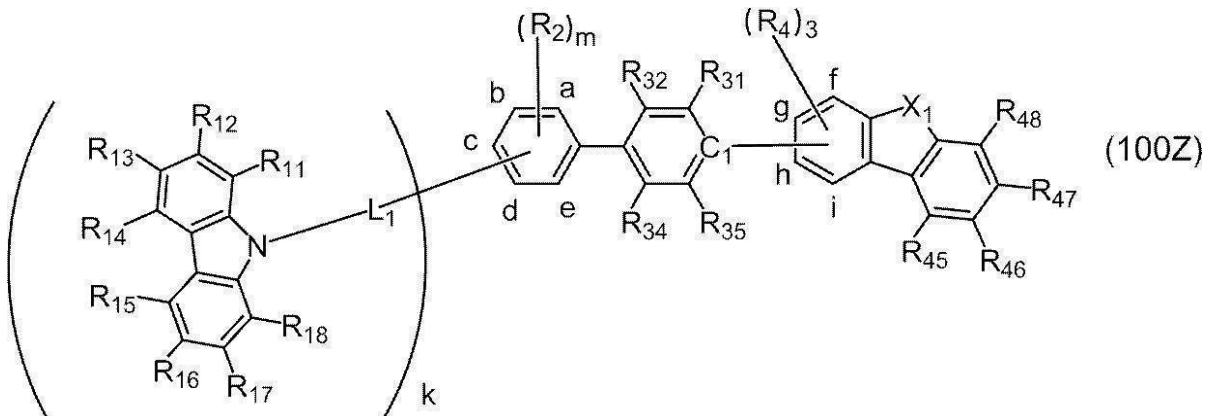
前記一般式 (100Y) において、X₁、R₄、R₄₅ ~ R₄₈、C₁、R₂、R₃₁、R₃₂、R₃₄、R₃₅、L₁、R₁₁ ~ R₁₈、m、及び k は、それぞれ、前記一般式 (100) における X₁、R₄、R₄₅ ~ R₄₈、C₁、R₂、R₃₁、R₃₂、R₃₄、R₃₅、L₁、R₁₁ ~ R₁₈、m、及び k と同義である。

前記一般式 (100Y) において、k は、1 又は 2 であることが好ましい。

前記一般式 (100Y) において、R₁₁ ~ R₁₈ を有する環構造は、前記一般式 (400-1) ~ (400-6) のいずれかで表されることも好ましい。

【0086】

【化23】



【0087】

前記一般式 (100Z) において、X₁、R₄、R₄₅ ~ R₄₈、C₁、R₂、R₃₁、R₃₂、R₃₄、R₃₅、L₁、R₁₁ ~ R₁₈、m、及び k は、それぞれ、前記一般式 (100) における X₁、R₄、R₄₅ ~ R₄₈、C₁、R₂、R₃₁、R₃₂、R₃₄、R₃₅、L₁、R₁₁ ~ R₁₈、m、及び k と同義である。

4、 R_{35} 、 L_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 m 、及び k と同義である。

前記一般式(100Z)において、 k は、1又は2であることが好ましい。

前記一般式(100Z)において、 $R_{11} \sim R_{18}$ を有する環構造は、前記一般式(400-1)~(400-6)のいずれかで表されることも好ましい。

【0088】

本実施形態の化合物M3において、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基であることが好ましい。

本実施形態の化合物M3において、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基であることがより好ましい。

10

本実施形態の化合物M3において、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることがさらに好ましい。

本実施形態の化合物M3において、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換のフェニル基であることがよりさらに好ましい。

【0089】

本実施形態の化合物M3において、 $R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換のフェニル基であり、 R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子であることが好ましい。

20

【0090】

本実施形態の化合物M3が前記一般式(401)~(406)、一般式(401A)~(406A)及び一般式(401B)~(406B)のいずれかで表される化合物である場合、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 $R_{401} \sim R_{404}$ 、 R_4 及び R_{41} 、 R_{42} 及び $R_{44} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基であることが好ましく、

水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基であることがより好ましく、

30

水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることがさらに好ましく、

水素原子、又は置換もしくは無置換のフェニル基であることがよりさらに好ましい。

【0091】

本実施形態の化合物M3が前記一般式(401)~(406)、一般式(401A)~(406A)及び一般式(401B)~(406B)のいずれかで表される化合物である場合、 $R_{11} \sim R_{18}$ 及び $R_{401} \sim R_{404}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換のフェニル基であり、 R_4 及び R_{41} 、 R_{42} 及び $R_{44} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子であることが好ましい。

40

【0092】

本実施形態の化合物M3において、 L_1 は、単結合であるか、又は無置換の環形成炭素数6~30のアリール基から誘導される基であることが好ましい。

本実施形態の化合物M3において、 L_1 は、単結合であるか、又は無置換のベンゼン環から誘導される基であることがより好ましい。

本実施形態の化合物M3において、 L_1 は、単結合であることが好ましい。

【0093】

本実施形態の化合物M3は、下記一般式(100A)又は下記一般式(100B)で表される化合物であることも好ましい。

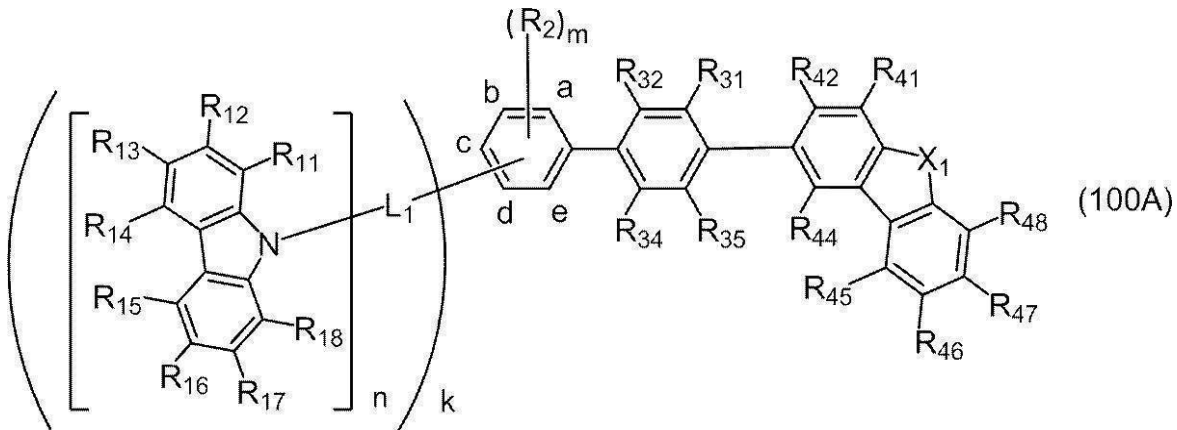
本実施形態の化合物M3は、下記一般式(100A)で表される化合物であることもよ

50

り好ましい。

【0094】

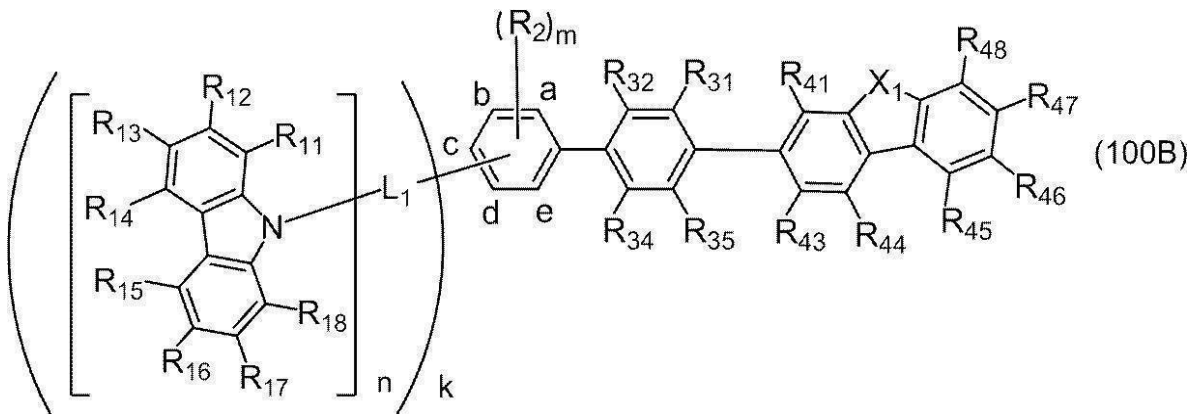
【化24】



10

【0095】

【化25】



20

【0096】

前記一般式(100A)及び一般式(100B)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義であり、 $R_{41} \sim R_{44}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_4 と同義である。

30

前記一般式(100A)中、 $R_{11} \sim R_{18}$ を有する環構造は、前記一般式(400-1)～(400-6)のいずれかで表されることも好ましい。

前記一般式(100B)中、 $R_{11} \sim R_{18}$ を有する環構造は、前記一般式(400-1)～(400-6)のいずれかで表されることも好ましい。

【0097】

本実施形態の化合物M3において、 L_1 が連結基であるとき、当該 L_1 は、前記一般式(100)に示すb、c、又はdの位置の炭素原子と結合することが好ましい。

40

本実施形態の化合物M3において、 L_1 が2価の連結基であり、 n が1であり、且つ k が1のとき、当該 L_1 は、前記一般式(100)に示すcの位置の炭素原子と結合することが好ましい。

本実施形態の化合物M3において、 L_1 が3価の連結基であり、 n が2であり、且つ k が1のとき、当該 L_1 は、前記一般式(100)に示すcの位置の炭素原子と結合することが好ましい。

本実施形態の化合物M3において、 L_1 が単結合であり、 n が1であり、且つ k が1のとき、前記一般式(100)に示すカルバゾール環の9位の窒素原子は、前記一般式(100)に示すcの位置の炭素原子と結合することが好ましい。

本実施形態の化合物M3において、 L_1 が単結合であり、 n が2であり、且つ k が2の

50

とき、前記一般式(100)に示す、2つのカルbazol環の9位の窒素原子は、それぞれ、前記一般式(100)に示すb及びdの位置の炭素原子と結合することが好ましい。

本実施形態の化合物M3において、 L_1 が単結合であり、 n が3であり、且つ k が3のとき、前記一般式(100)に示す、3つのカルbazol環の9位の窒素原子は、それぞれ、前記一般式(100)に示すb、c及びdの位置の炭素原子と結合することが好ましい。

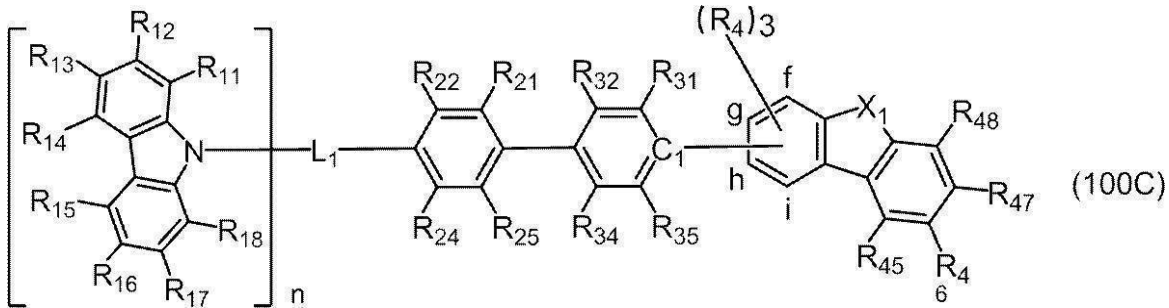
【0098】

本実施形態の化合物M3は、下記一般式(100C)で表される化合物であることも好ましい。

【0099】

10

【化26】



【0100】

20

前記一般式(100C)において、 X_1 、 C_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 L_1 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_4 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 C_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 L_1 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_4 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義であり、 R_{21} 、 R_{22} 、 R_{24} 、及び R_{25} は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_2 と同義である。

前記一般式(100C)中、 $R_{11} \sim R_{18}$ を有する環構造は、前記一般式(400-1)~(400-6)のいずれかで表されることも好ましい。

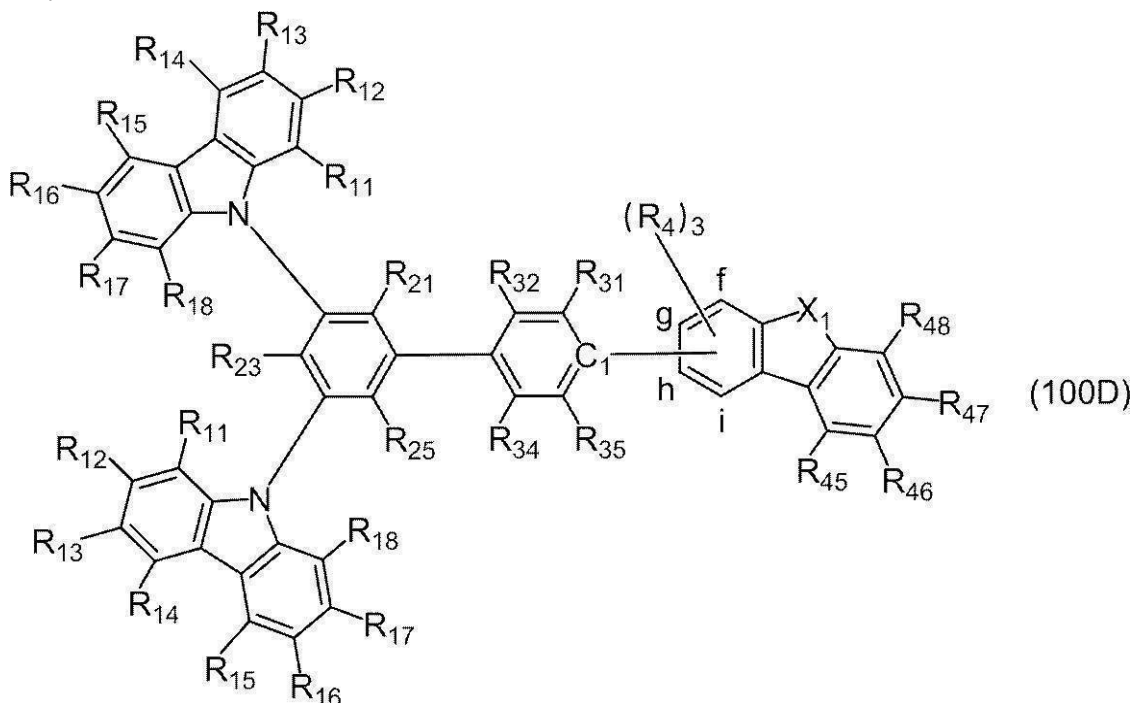
【0101】

本実施形態の化合物M3は、下記一般式(100D)で表される化合物であることも好ましい。

30

【0102】

【化27】



40

50

【0103】

前記一般式(100D)において、 X_1 、 C_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_4 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 C_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_4 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義であり、 R_{21} 、 R_{23} 、及び R_{25} は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_2 と同義である。

前記一般式(100D)において、2つの R_{11} は同一であるか又は異なり、2つの R_{12} は同一であるか又は異なり、2つの R_{13} は同一であるか又は異なり、2つの R_{14} は同一であるか又は異なり、2つの R_{15} は同一であるか又は異なり、2つの R_{16} は同一であるか又は異なり、2つの R_{17} は同一であるか又は異なり、2つの R_{18} は同一であるか又は異なる。

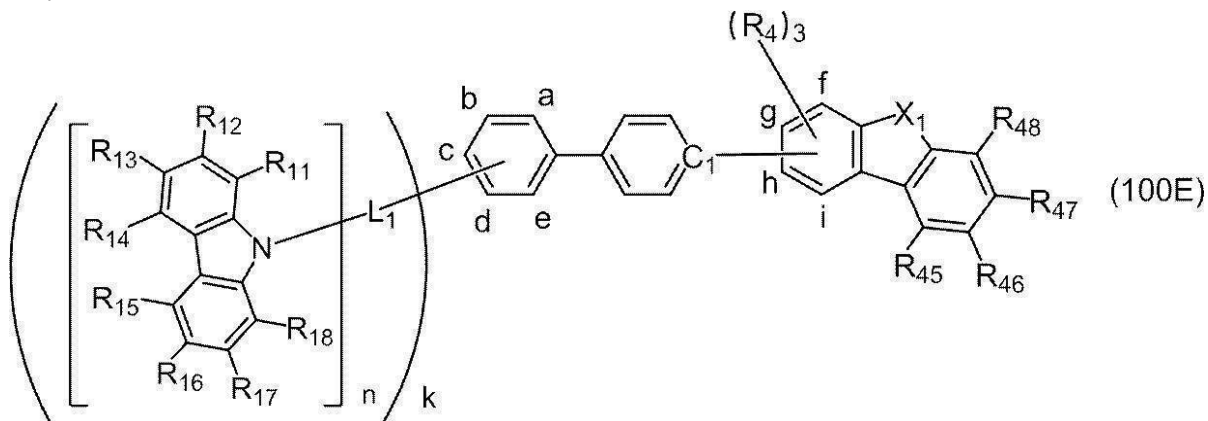
前記一般式(100D)において、 $R_{11} \sim R_{18}$ を有する2つの環構造は、それぞれ独立に、前記一般式(400-1)~(400-6)のいずれかで表されることも好ましい。

【0104】

本実施形態の化合物M3は、下記一般式(100E)で表される化合物であることも好ましい。

【0105】

【化28】



【0106】

前記一般式(100E)において、 X_1 及び C_1 は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 及び C_1 と同義であり、 n は、1又は2であり、 k は、1又は2であり、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_4 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であり、 n 及び k の少なくとも一方が2である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

ただし、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、 R_{17} 及び R_{18} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、 R_{47} 及び R_{48} の組、並びに複数の R_4 のうち2つ以上からなる組が互いに結合せず、

L_1 は、単結合であるか、又は無置換の環形成炭素数6~30のアリール基から誘導される基であり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は1であり、

k が2である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なり、

L_1 が連結基であり、 k が1のとき、1つの L_1 は、 a 、 b 、 c 、 d 又は e の位置の炭素原子と結合し、

L_1 が連結基であり、 k が2のとき、2つの L_1 は、それぞれ、 a 、 b 、 c 、 d 及び e

の位置のいずれかの炭素原子と結合し、ただし、複数の L_1 は、同じ位置の炭素原子に結合せず、

L_1 が単結合であり、 k が 1 のとき、前記一般式 (100E) に示す、1つのカルバゾール環の 9 位の窒素原子は、前記一般式 (100E) に示す a、b、c、d 又は e の位置の炭素原子と結合し、

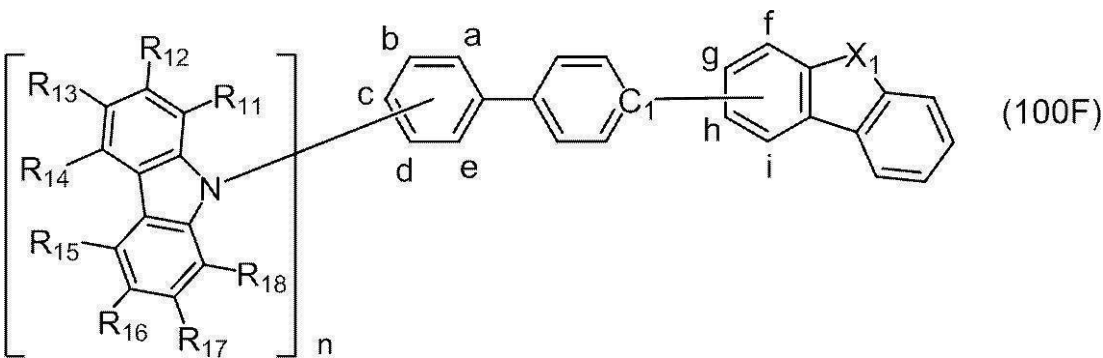
L_1 が単結合であり、 k が 2 のとき、前記一般式 (100E) に示す、2つのカルバゾール環の 9 位の窒素原子は、それぞれ、前記一般式 (100E) に示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、ただし、複数のカルバゾール環の 9 位の窒素原子は、同じ位置の炭素原子に結合しない。

【0107】

本実施形態の化合物 M3 は、下記一般式 (100F) で表される化合物であることも好ましい。

【0108】

【化29】



【0109】

前記一般式 (100F) において、 X_1 及び C_1 は、それぞれ、前記一般式 (100) における X_1 及び C_1 と同義であり、 n は、1 又は 2 であり、

n が 1 のとき、前記一般式 (100F) に示す、1つのカルバゾール環の 9 位の窒素原子は、前記一般式 (100F) に示す a、b、c、d 又は e の位置の炭素原子と結合し、

n が 2 のとき、前記一般式 (100F) に示す、2つのカルバゾール環の 9 位の窒素原子は、それぞれ、a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、ただし、複数のカルバゾール環の 9 位の窒素原子は、同じ位置の炭素原子に結合せず、 $R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換のフェニル基であり、 n が 2 である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

ただし、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組が互いに結合しない。

【0110】

本実施形態の化合物 M3 において、 X_1 は、酸素原子であることが好ましい。

【0111】

本実施形態の化合物 M3 において、前記一般式 (100) における C_1 が一般式 (100) に示す「h」の位置の炭素原子と結合し、

R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組が互いに結合せず、かつ $R_{11} \sim R_{18}$ のうち、少なくともいずれか 1 つ以上が無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であることも好ましい。

この態様における化合物 M3 は、下記一般式 (201A) で表される。

10

20

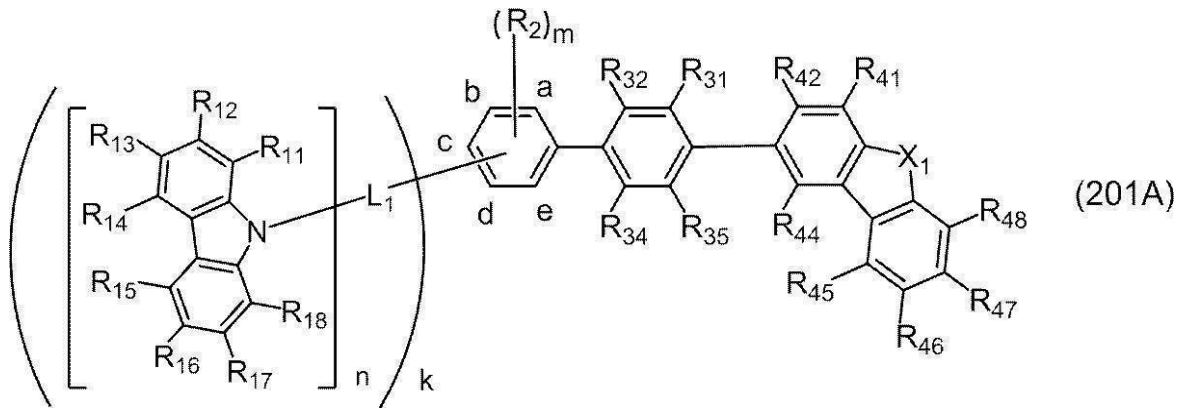
30

40

50

【 0 1 1 2 】

【 化 3 0 】



10

【 0 1 1 3 】

前記一般式(201A)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義であり、 R_{41} 、 R_{42} 及び R_{44} は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_4 と同義である。ただし、前記一般式(201A)において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組が互いに結合せず、かつ $R_{11} \sim R_{18}$ のうち、少なくともいずれか1つ以上が無置換の環形成炭素数6~30のアリール基である。

20

【 0 1 1 4 】

前記一般式(201A)で表される化合物は、後述する第四実施形態に係る一般式(201)で表される化合物と同義である。

すなわち、前記一般式(201A)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_{41} 、 R_{42} 、 R_{44} 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、一般式(201)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_{41} 、 R_{42} 、 R_{44} 及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義である。

30

第四実施形態の化合物は、高性能の有機EL素子、例えば長寿命で発光する有機EL素子を実現させることのできる化合物である。したがって、第一実施形態における化合物M3として、第四実施形態の化合物を使用することができる。

【 0 1 1 5 】

本実施形態の化合物M3において、前記一般式(100)における C_1 が一般式(100)に示す「g」の位置の炭素原子と結合し、

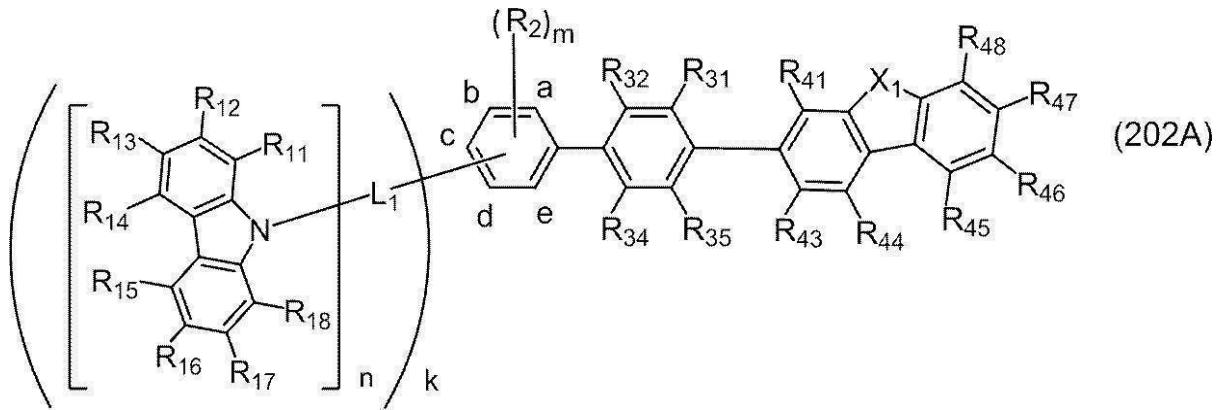
R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組が互いに結合せず、かつ $R_{11} \sim R_{18}$ のうち、少なくともいずれか1つ以上が無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることも好ましい。

40

この態様における化合物M3は、下記一般式(202A)で表される。

【 0 1 1 6 】

【化 3 1】



10

【0117】

前記一般式(202A)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義であり、 R_{41} 、 R_{43} 及び R_{44} は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_4 と同義である。ただし、前記一般式(202A)において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組が互いに結合せず、かつ $R_{11} \sim R_{18}$ のうち、少なくともいずれか1つ以上が無置換の環形成炭素数6~30のアリール基である。

20

【0118】

前記一般式(202A)で表される化合物は、後述する第四実施形態に係る一般式(202)で表される化合物と同義である。

すなわち、前記一般式(202A)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_{41} 、 R_{43} 、 R_{44} 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、一般式(201)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_{41} 、 R_{43} 、 R_{44} 及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義である。

30

第四実施形態の化合物は、高性能の有機EL素子、例えば長寿命で発光する有機EL素子を実現させることのできる化合物である。したがって、第一実施形態における化合物M3として、第四実施形態の化合物を使用することができる。

【0119】

本実施形態の化合物M3において、前記一般式(100)における C_1 が一般式(100)に示す「f」の位置の炭素原子と結合し、

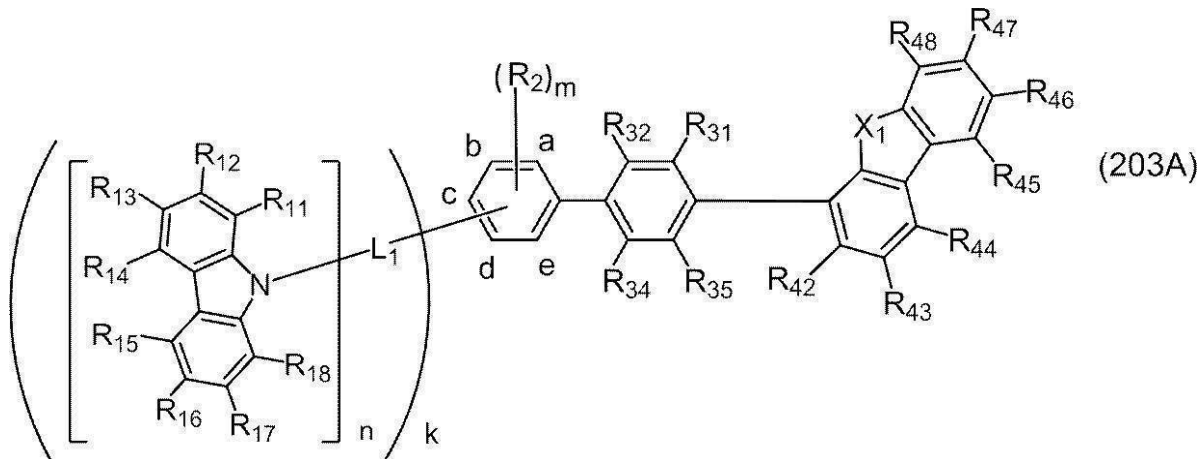
R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組が互いに結合せず、かつ $R_{11} \sim R_{18}$ のうち、少なくともいずれか1つ以上が無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることも好ましい。

40

この態様における化合物M3は、下記一般式(203A)で表される。

【0120】

【化32】



10

【0121】

前記一般式(203A)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義であり、 $R_{42} \sim R_{44}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_4 と同義である。ただし、前記一般式(203A)において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組が互いに結合せず、かつ $R_{11} \sim R_{18}$ のうち、少なくともいずれか1つ以上が無置換の環形成炭素数6~30のアリール基である。

20

【0122】

前記一般式(203A)で表される化合物は、後述する第四実施形態に係る一般式(203)で表される化合物と同義である。

すなわち、前記一般式(203A)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 $R_{42} \sim R_{44}$ 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、一般式(201)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 $R_{42} \sim R_{44}$ 及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義である。

30

第四実施形態の化合物は、高性能の有機EL素子、例えば長寿命で発光する有機EL素子を実現させることのできる化合物である。したがって、第一実施形態における化合物M3として、第四実施形態の化合物を使用することができる。

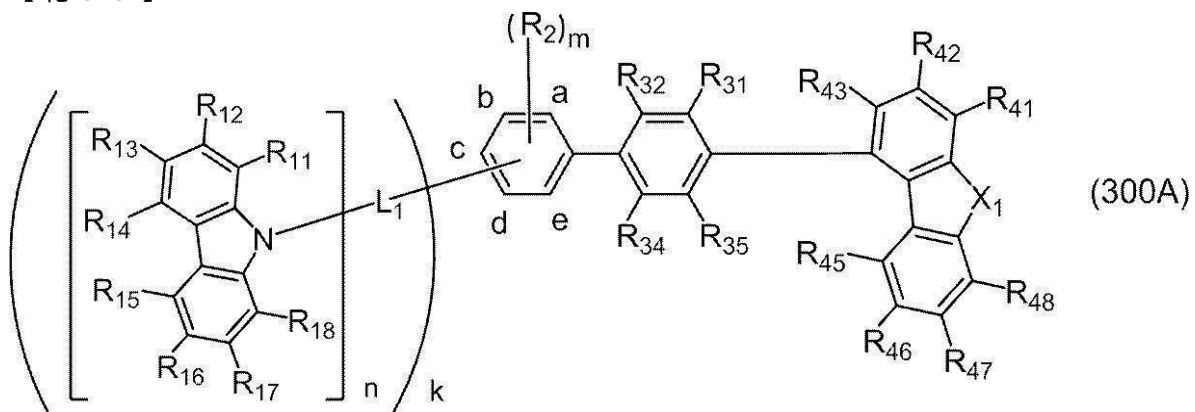
【0123】

本実施形態の化合物M3において、前記一般式(100)における C_1 が一般式(100)に示す「i」の位置の炭素原子と結合していることも好ましい。

この態様における化合物M3は、下記一般式(300A)で表される。

【0124】

【化33】



40

50

【0125】

前記一般式(300A)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、前記一般式(100)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義であり、 $R_{41} \sim R_{43}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(100)における R_4 と同義である。

【0126】

前記一般式(300A)で表される化合物は、後述する第五実施形態に係る一般式(300)で表される化合物と同義である。

すなわち、前記一般式(300A)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 $R_{41} \sim R_{43}$ 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、一般式(300)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 $R_{41} \sim R_{43}$ 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義である。

前記一般式(300A)において、 $R_{11} \sim R_{18}$ を有する環構造は、前記一般式(400-1)～(400-6)のいずれかで表されることも好ましい。

第五実施形態の化合物は、高性能の有機EL素子、例えば長寿命で発光する有機EL素子を実現させることのできる化合物である。したがって、第一実施形態における化合物M3として、第五実施形態の化合物を使用することができる。

【0127】

・本実施形態の化合物M3の製造方法

本実施形態の化合物M3は、例えば、後述する実施例に記載の方法により製造することができる。本実施形態の化合物M3は、後述する実施例で説明する反応に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応や原料を用いることで、製造することができる。

【0128】

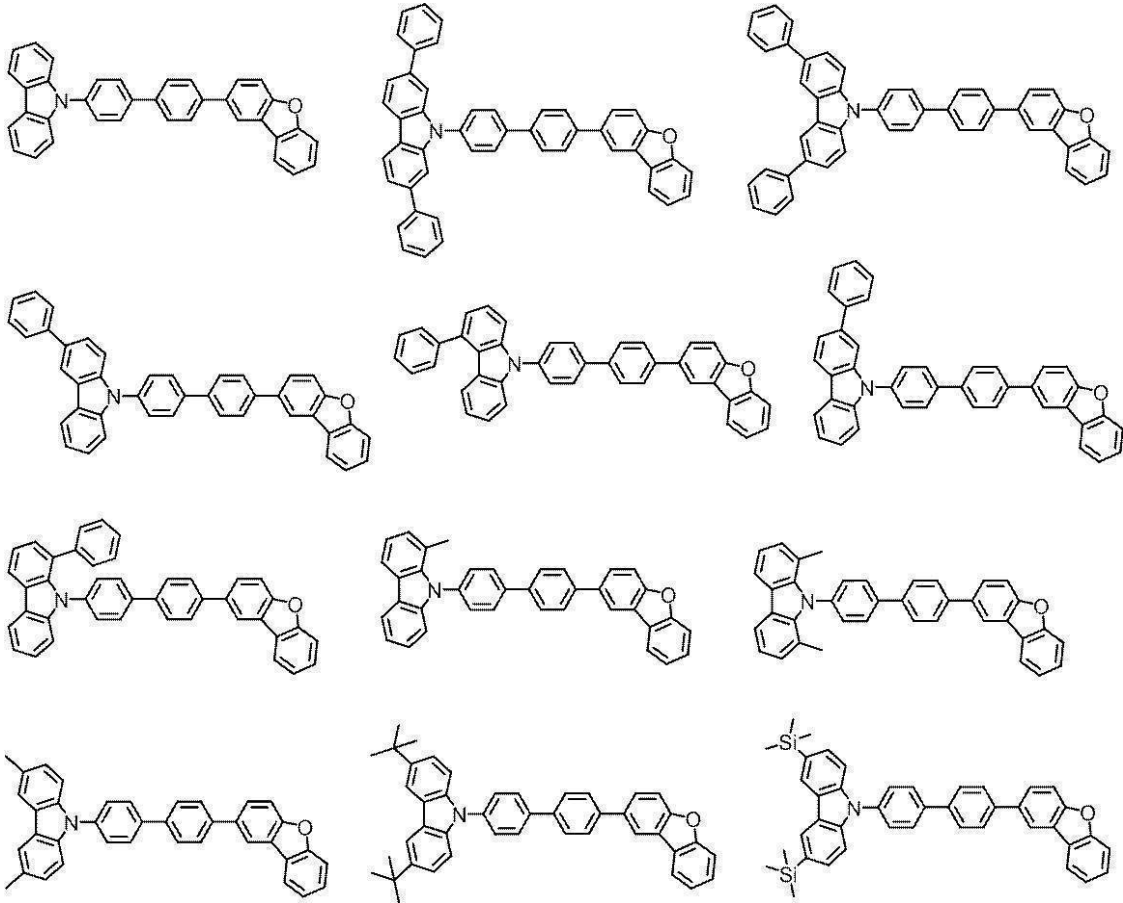
本実施形態の化合物M3の具体例としては、例えば、以下の化合物が挙げられる。ただし、本発明は、これら化合物の具体例に限定されない。

【0129】

10

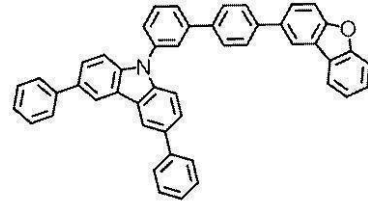
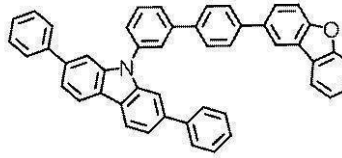
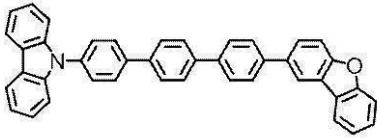
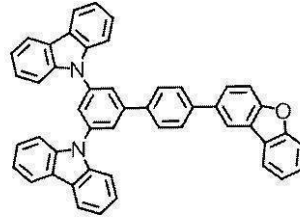
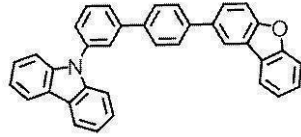
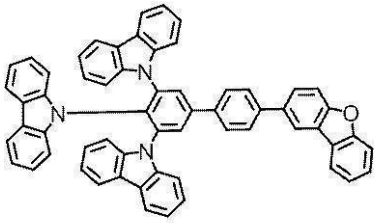
20

【化 3 4】

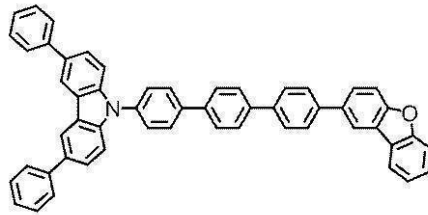
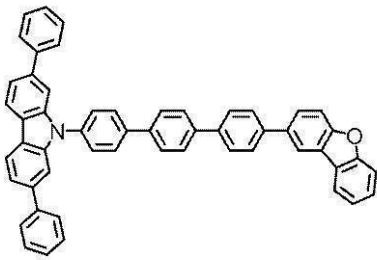


【 0 1 3 0】

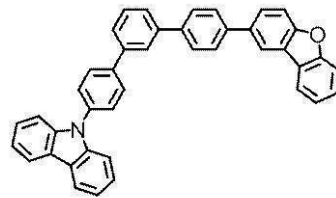
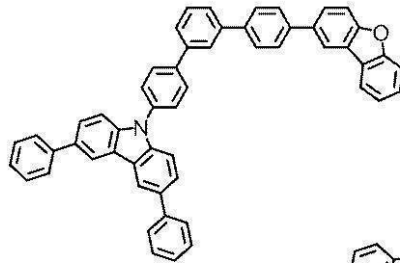
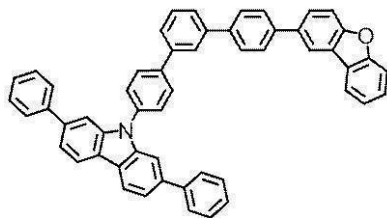
【化 3 5】



10



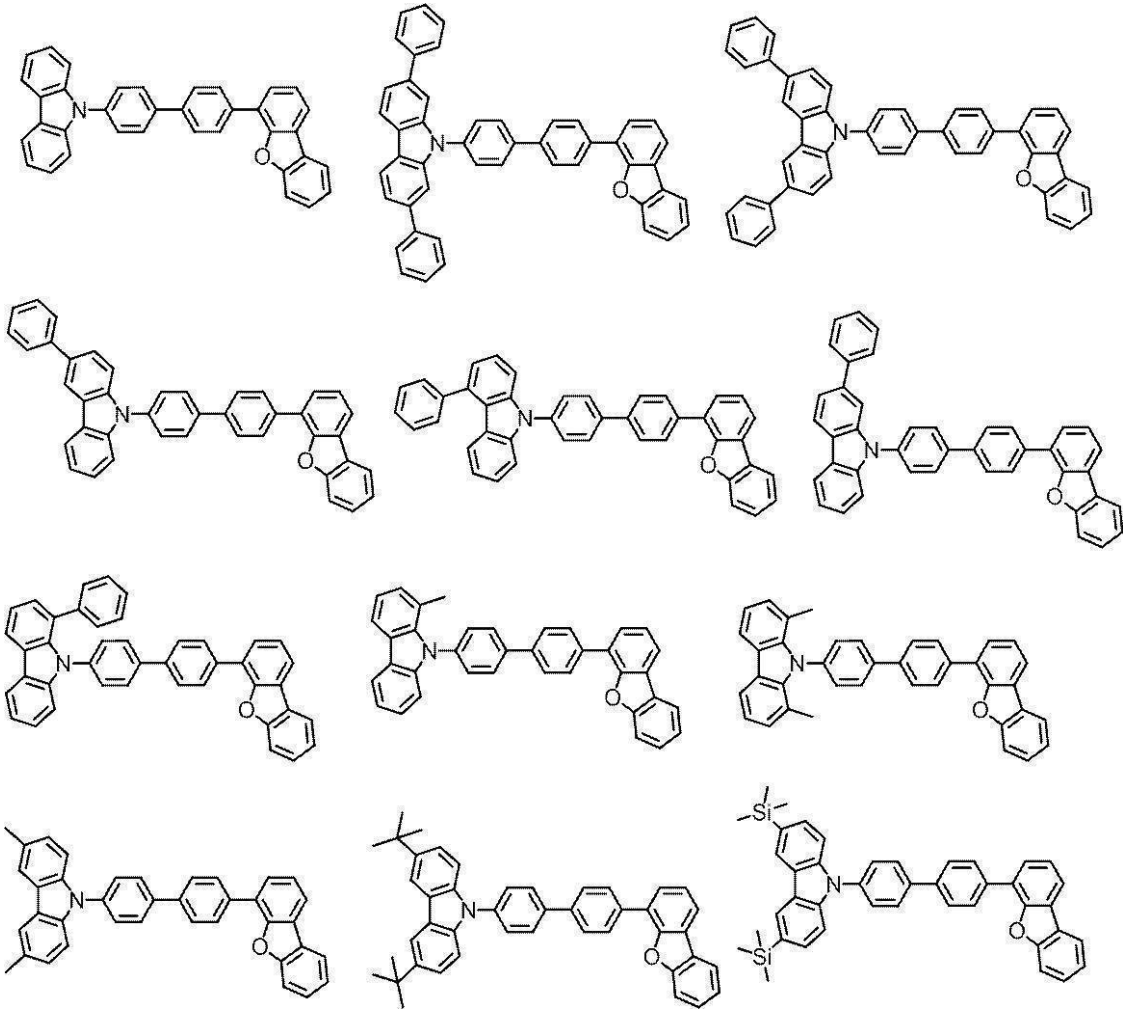
20



30

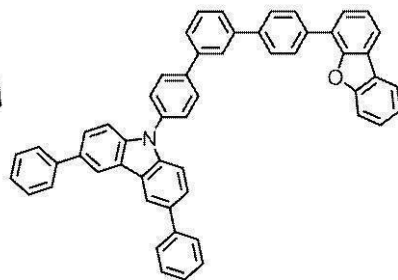
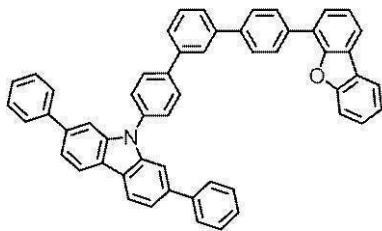
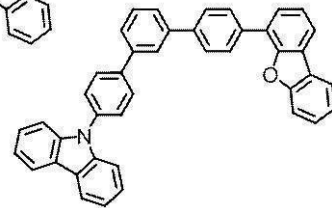
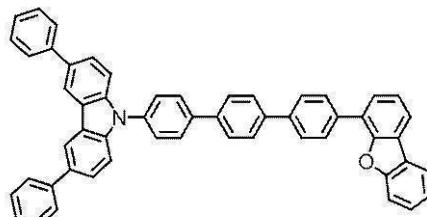
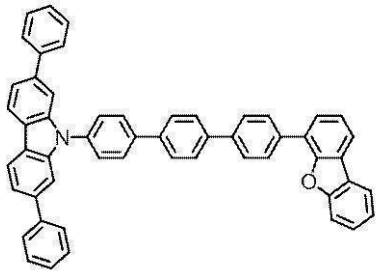
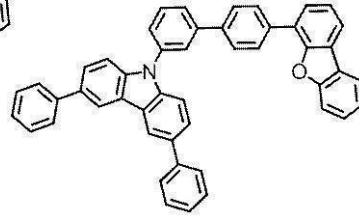
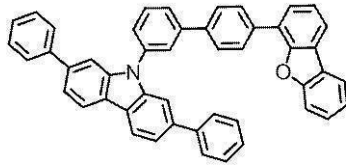
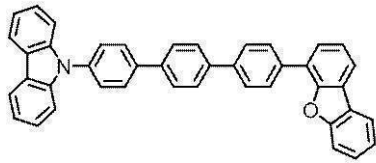
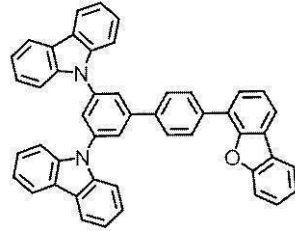
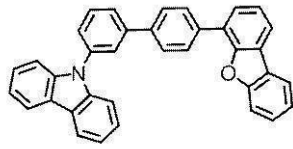
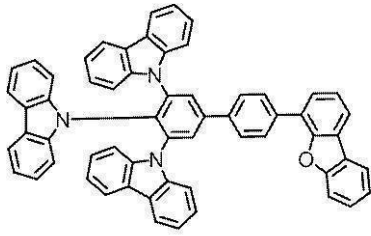
【 0 1 3 1 】

【化 3 6】



【 0 1 3 2】

【化 3 7】



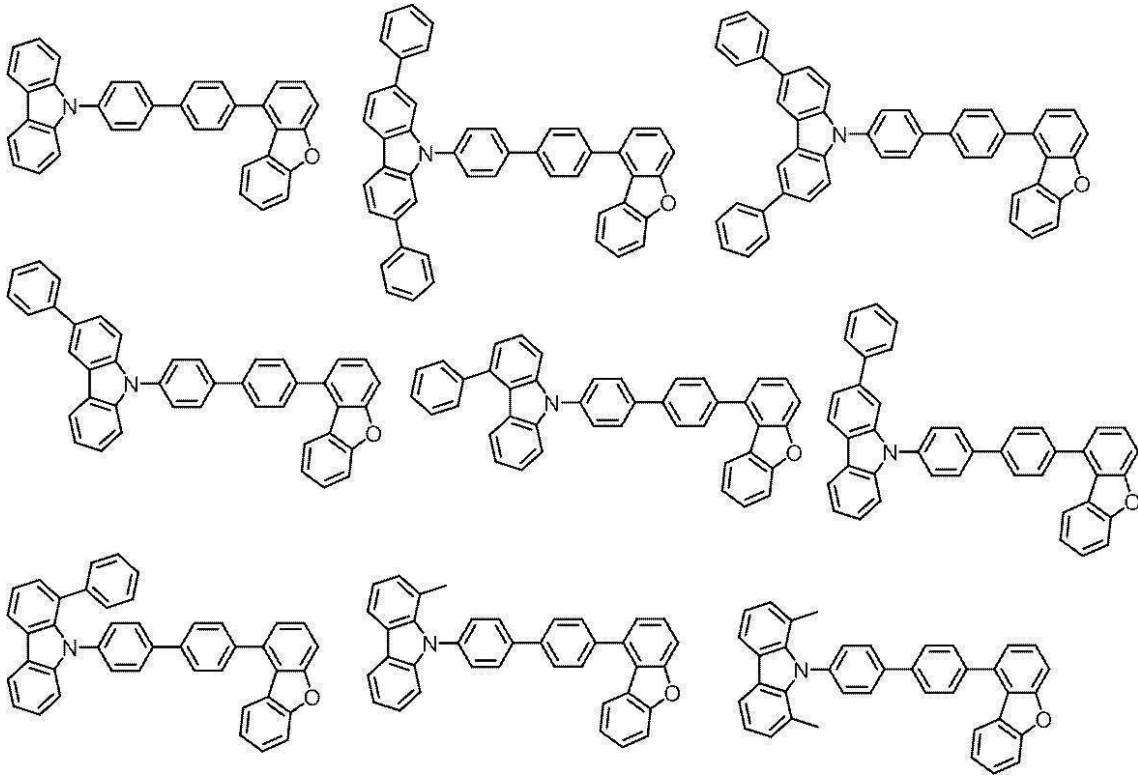
【 0 1 3 3】

10

20

30

【化 3 8】

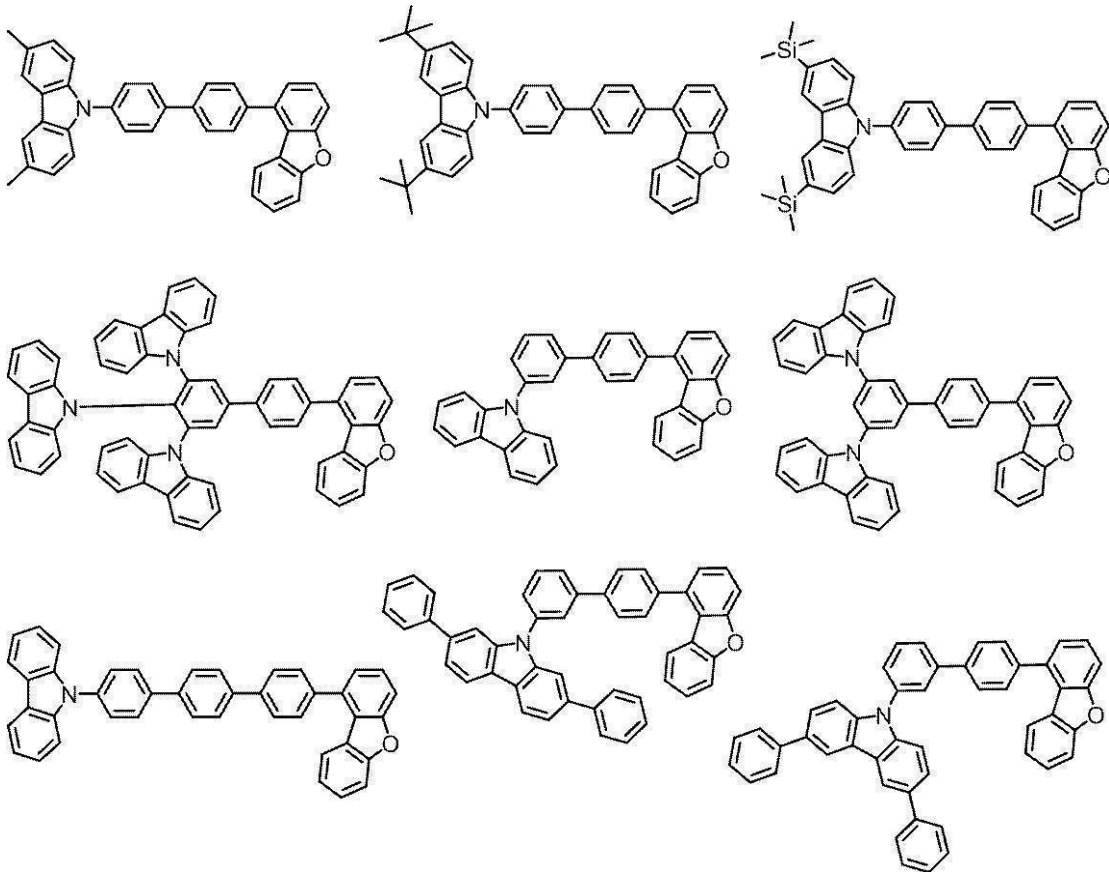


10

20

【 0 1 3 4】

【化 3 9】

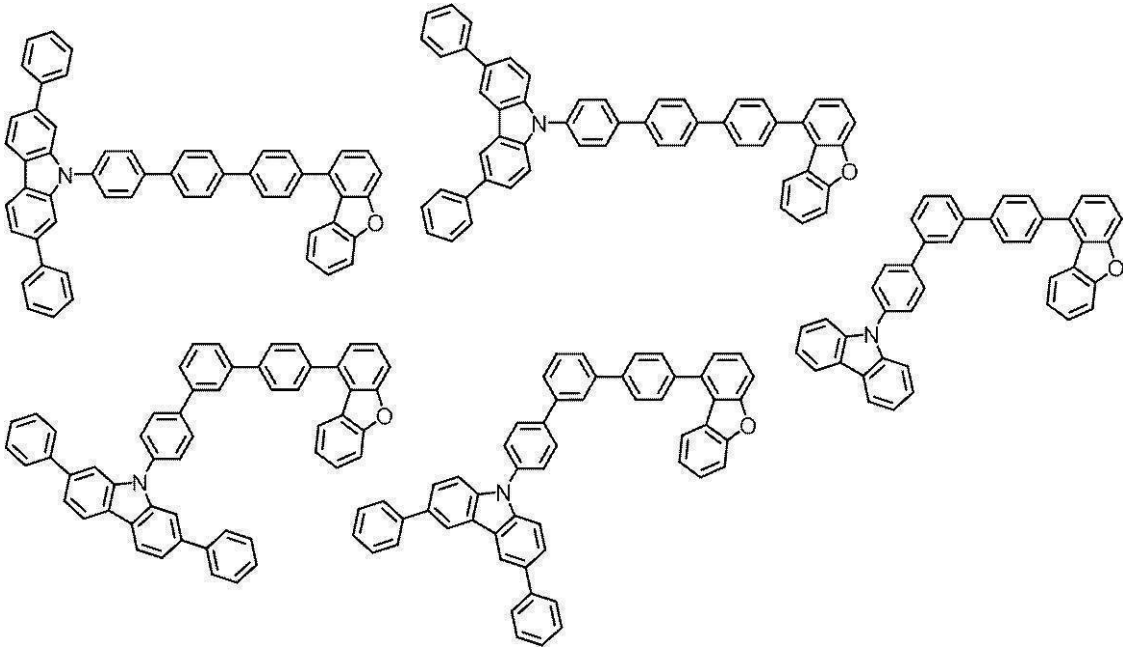


30

40

【 0 1 3 5】

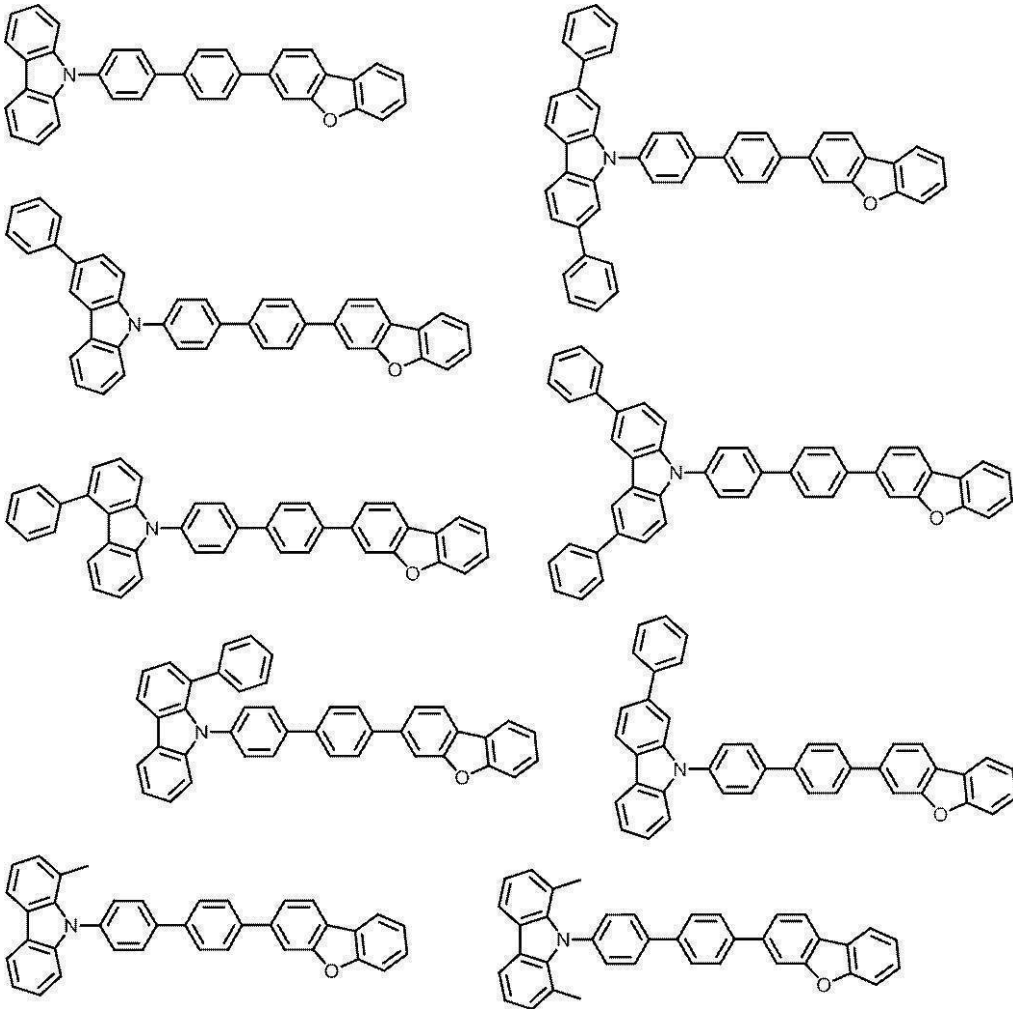
【化 4 0】



10

【 0 1 3 6】

【化 4 1】



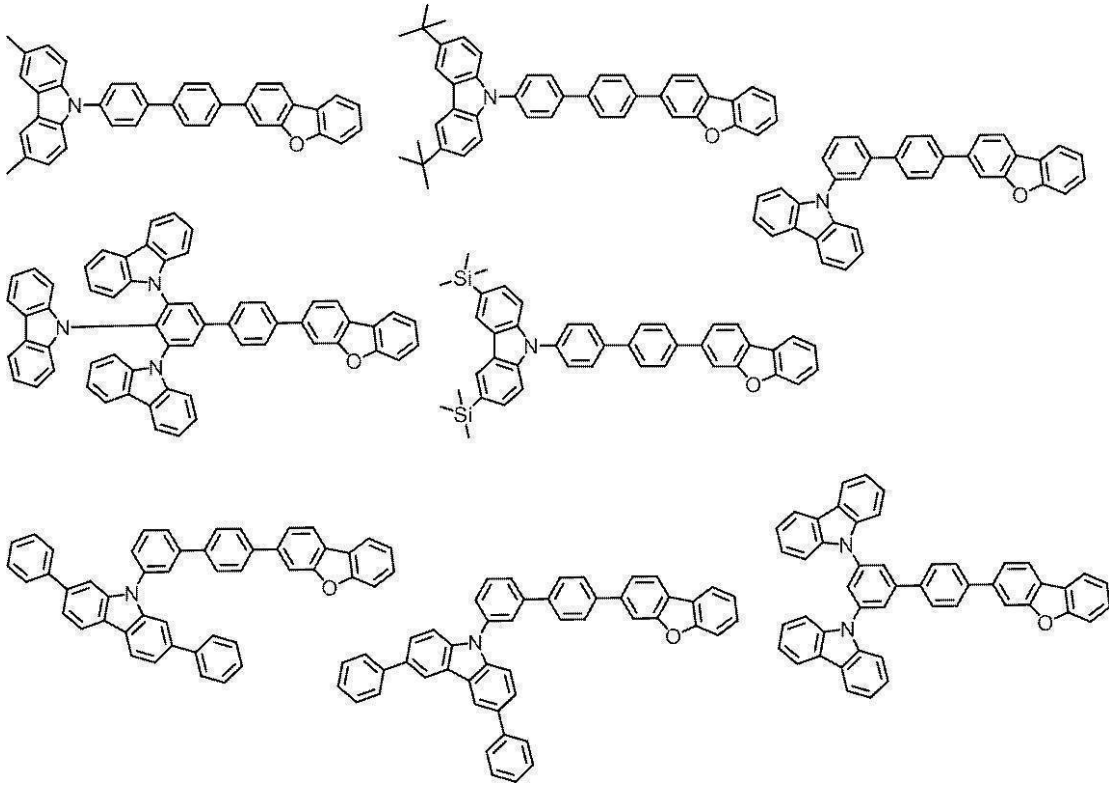
20

30

40

【 0 1 3 7】

【化 4 2】

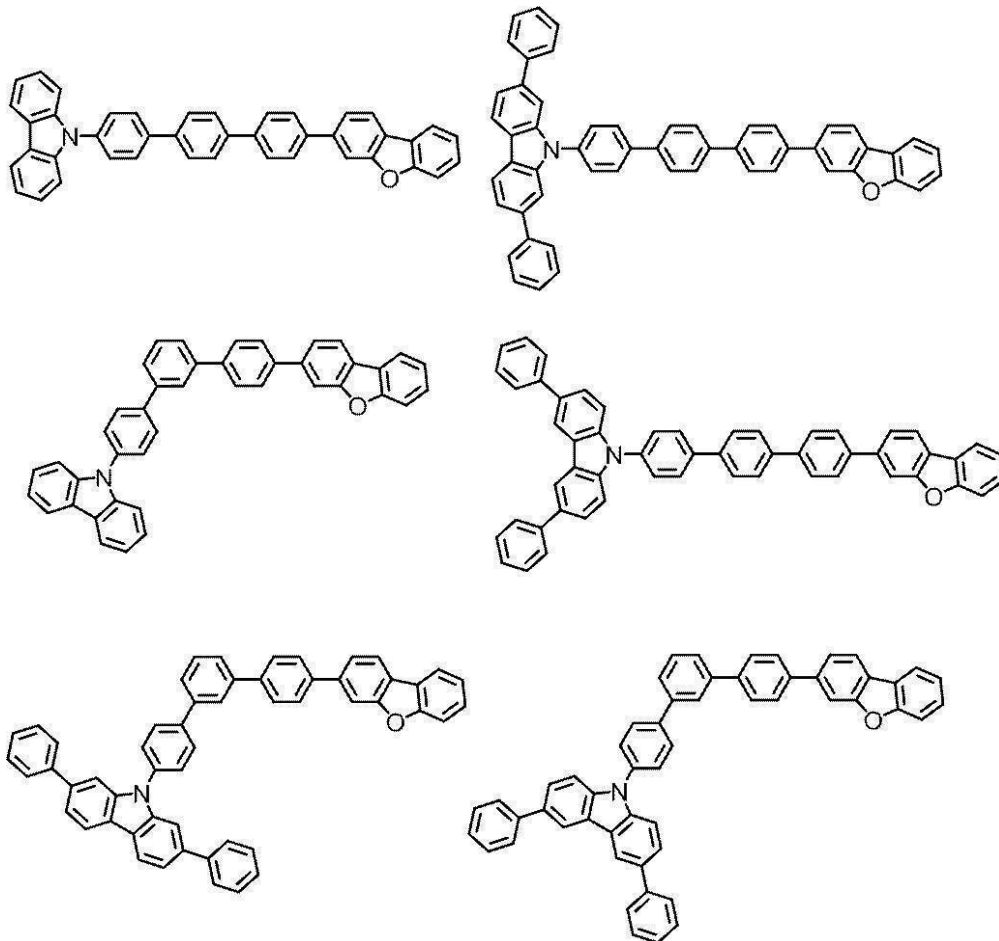


10

20

【 0 1 3 8】

【化 4 3】



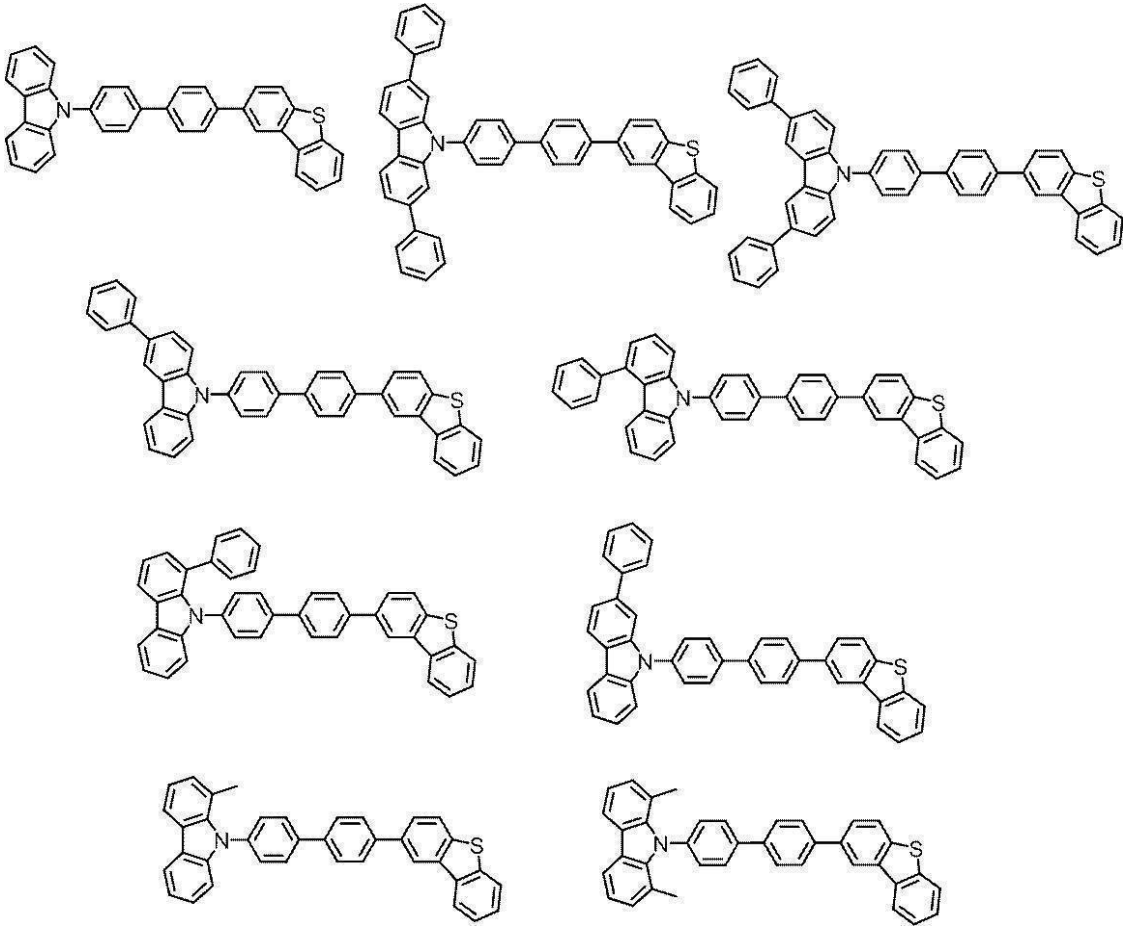
30

40

【 0 1 3 9】

50

【化 4 4】

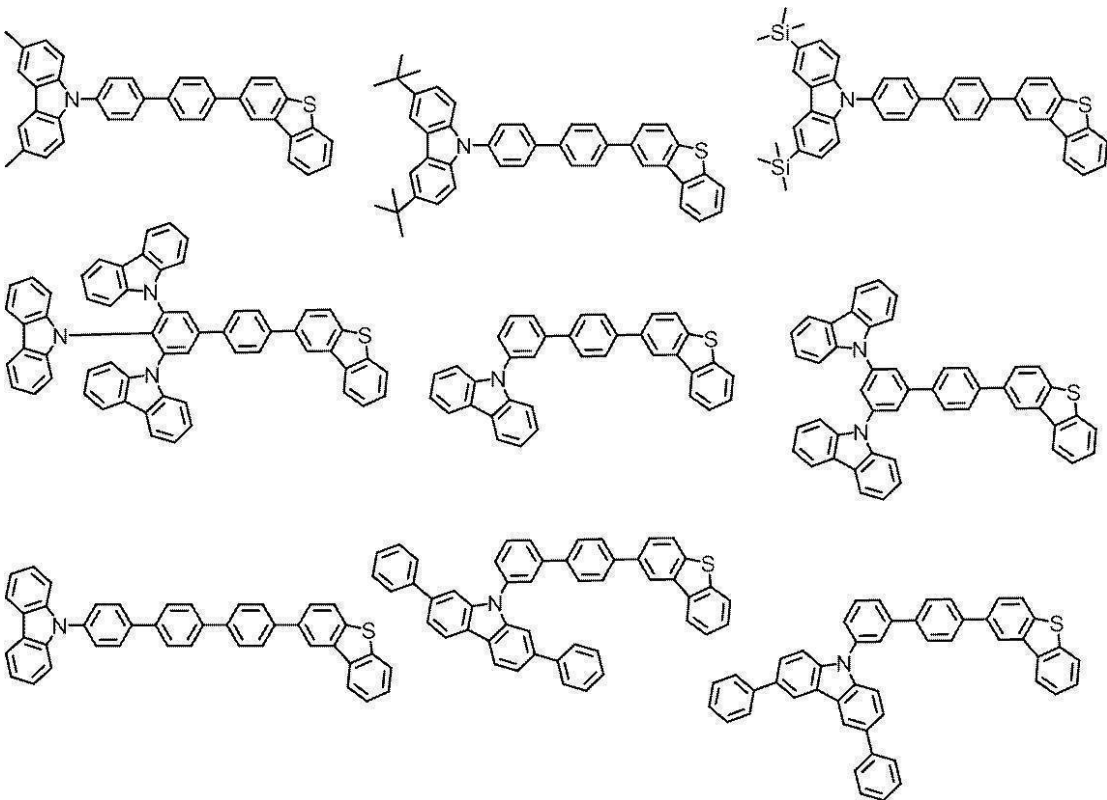


10

20

【 0 1 4 0】

【化 4 5】

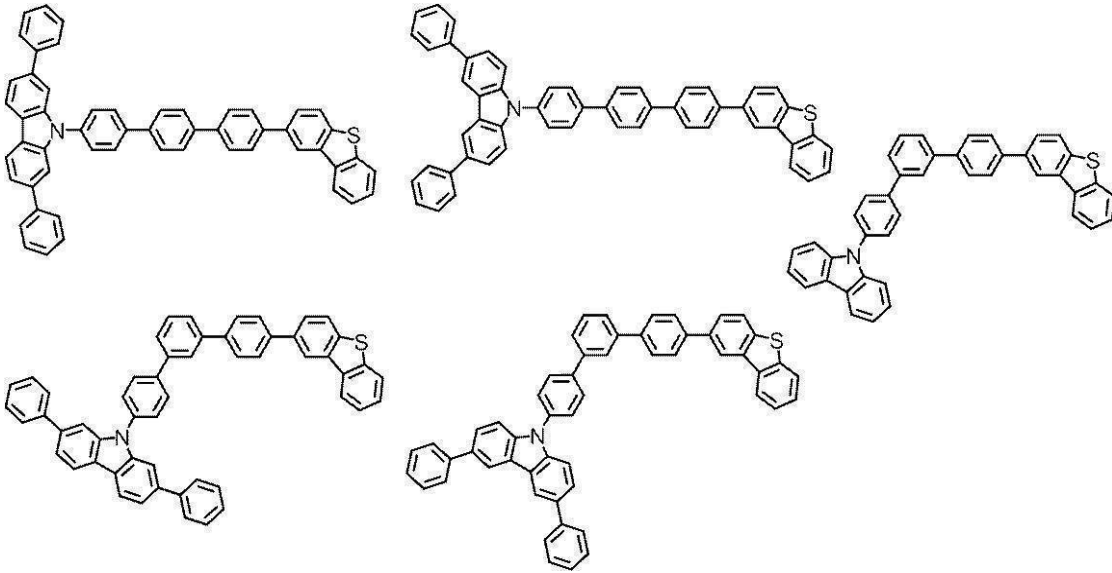


30

40

【 0 1 4 1】

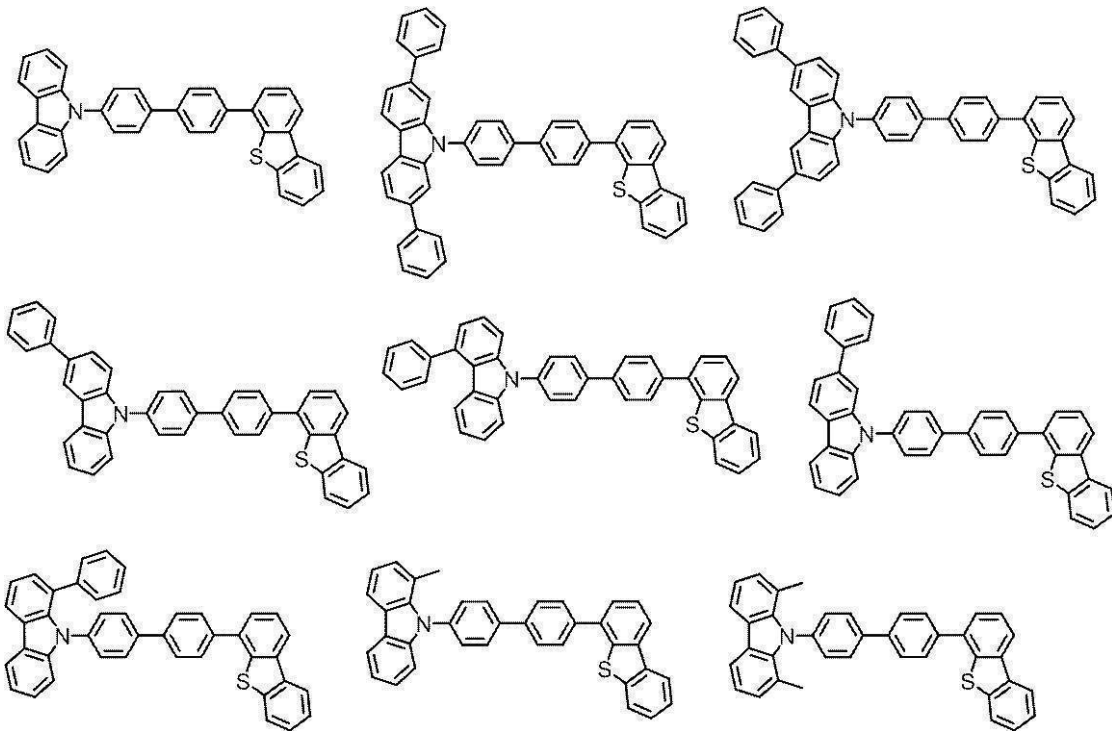
【化 4 6】



10

【 0 1 4 2】

【化 4 7】

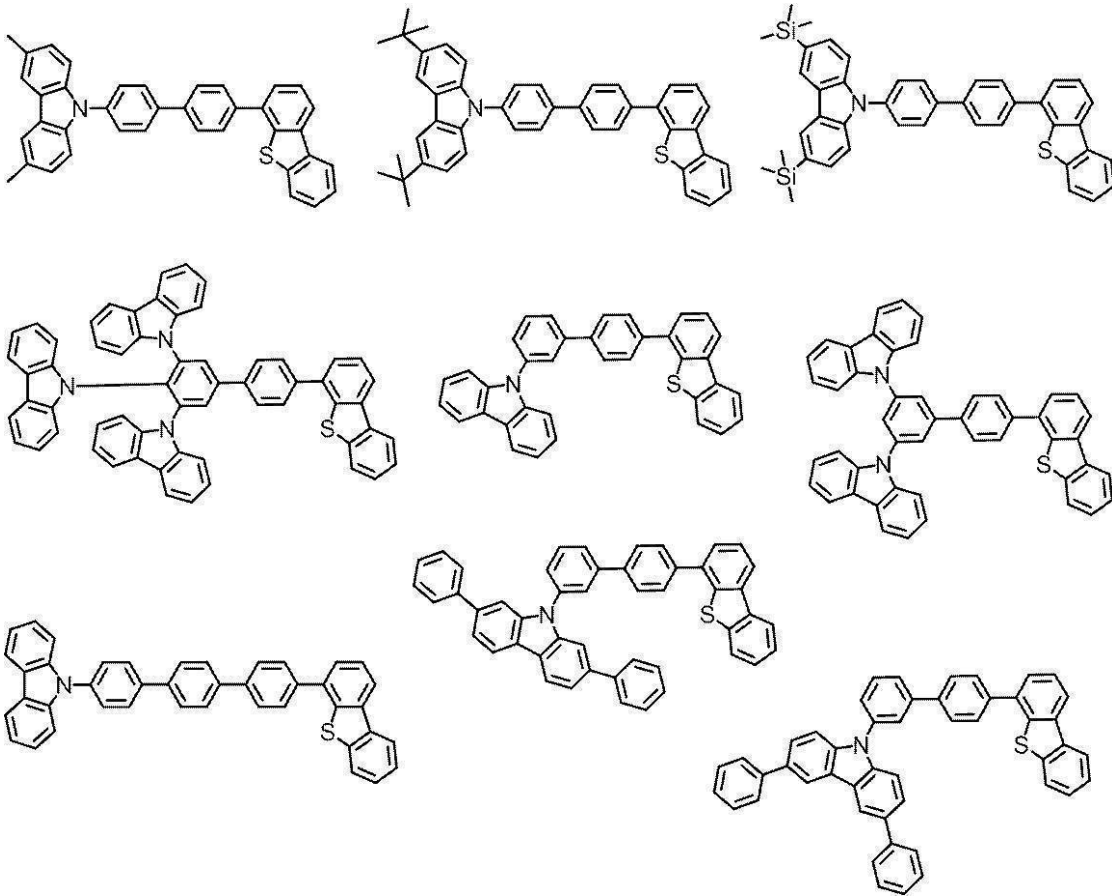


20

30

【 0 1 4 3】

【化 4 8】

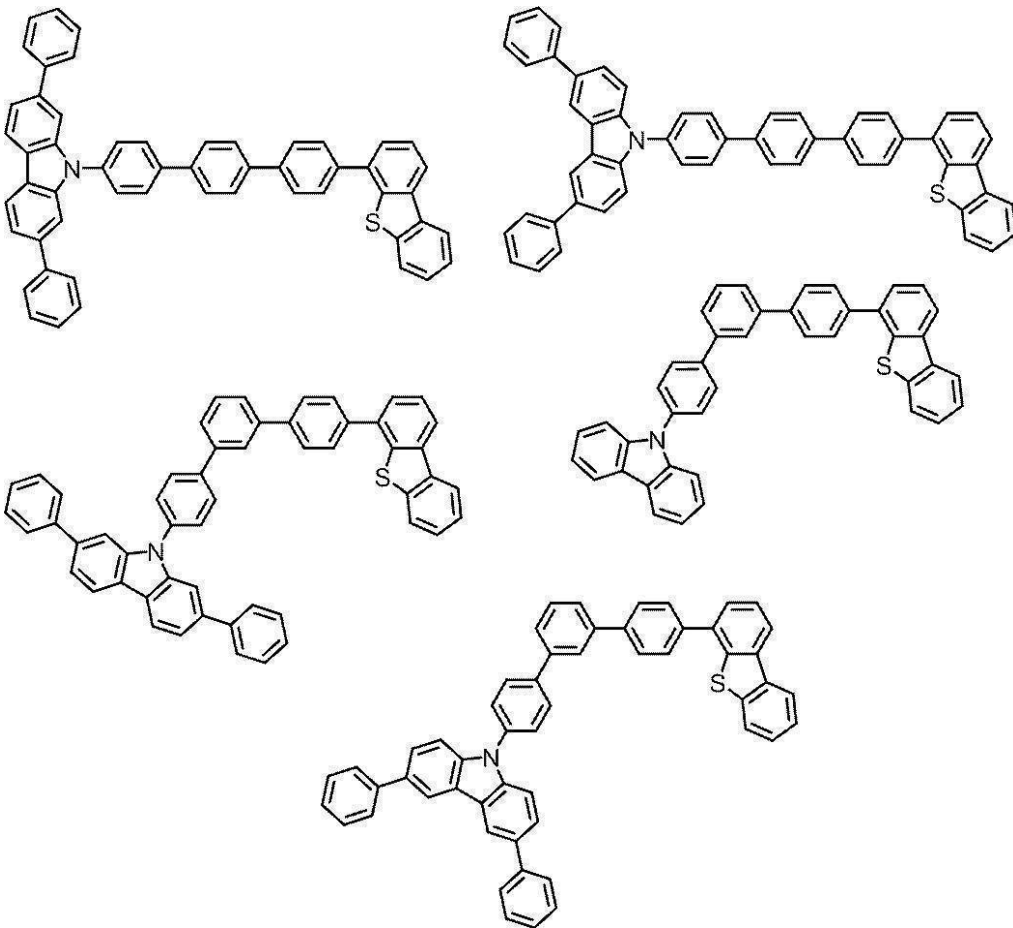


10

20

【 0 1 4 4】

【化 4 9】



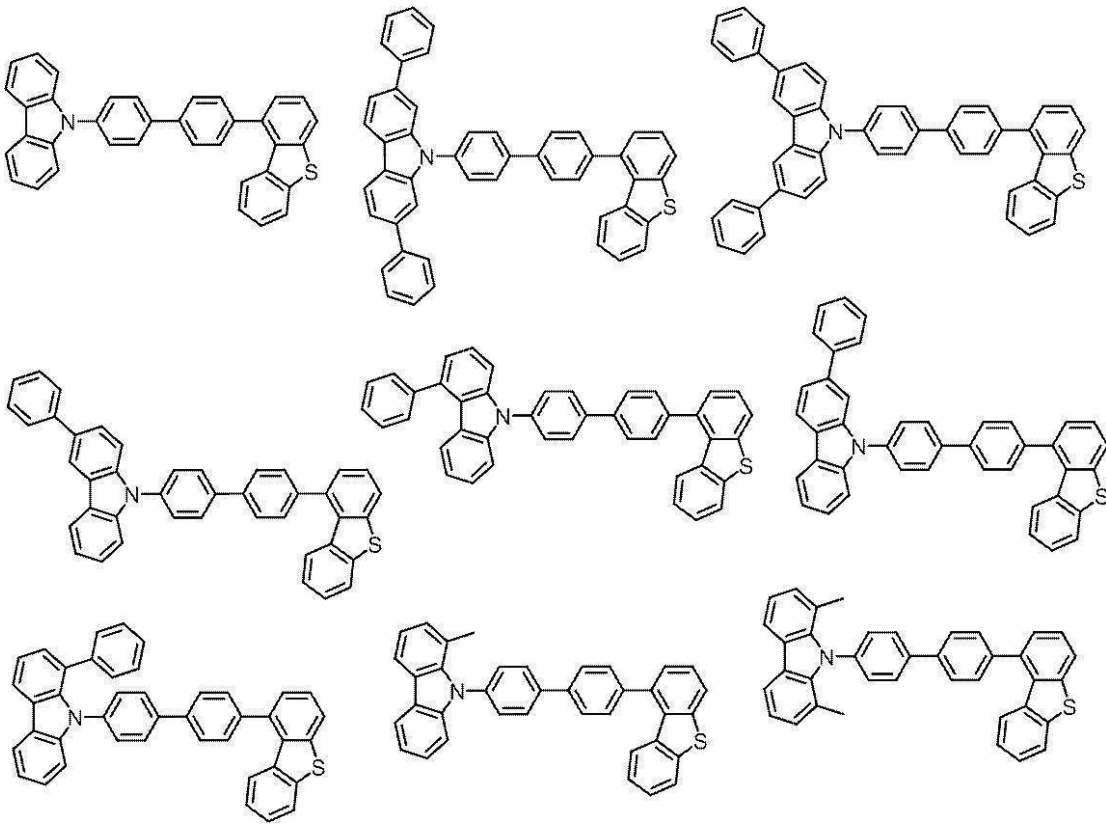
30

40

50

【 0 1 4 5 】

【 化 5 0 】

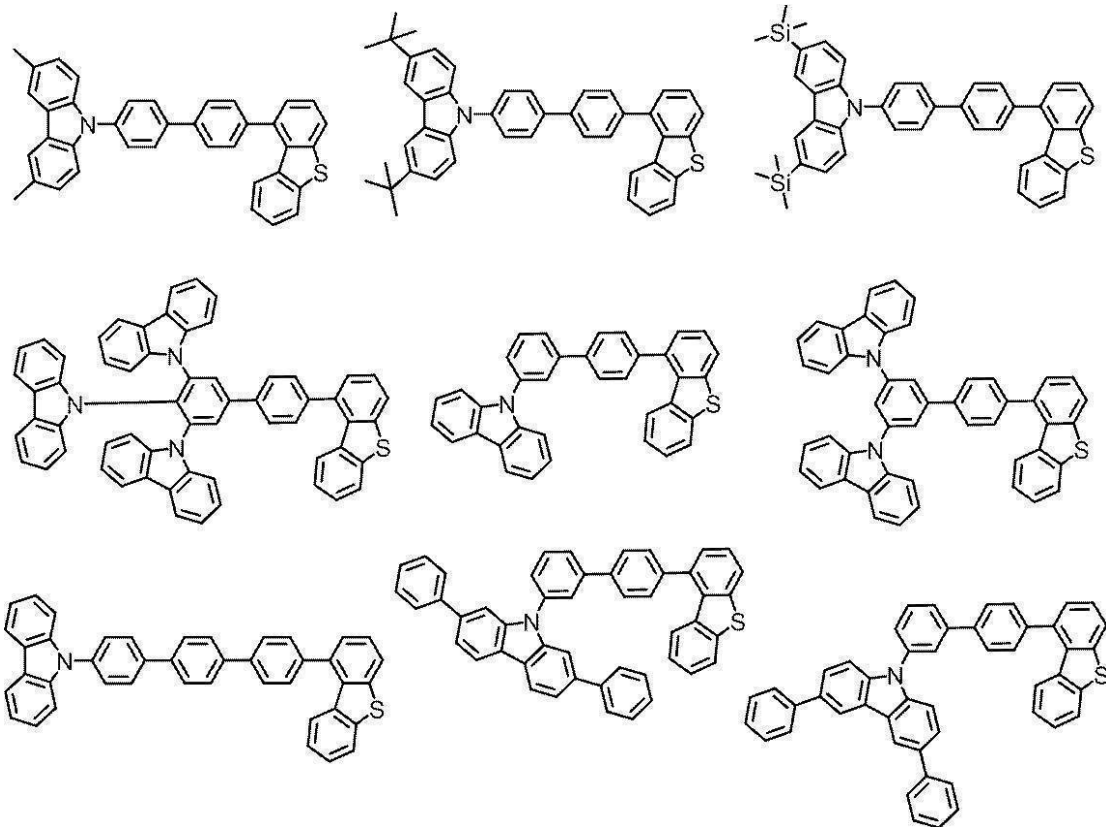


10

20

【 0 1 4 6 】

【 化 5 1 】

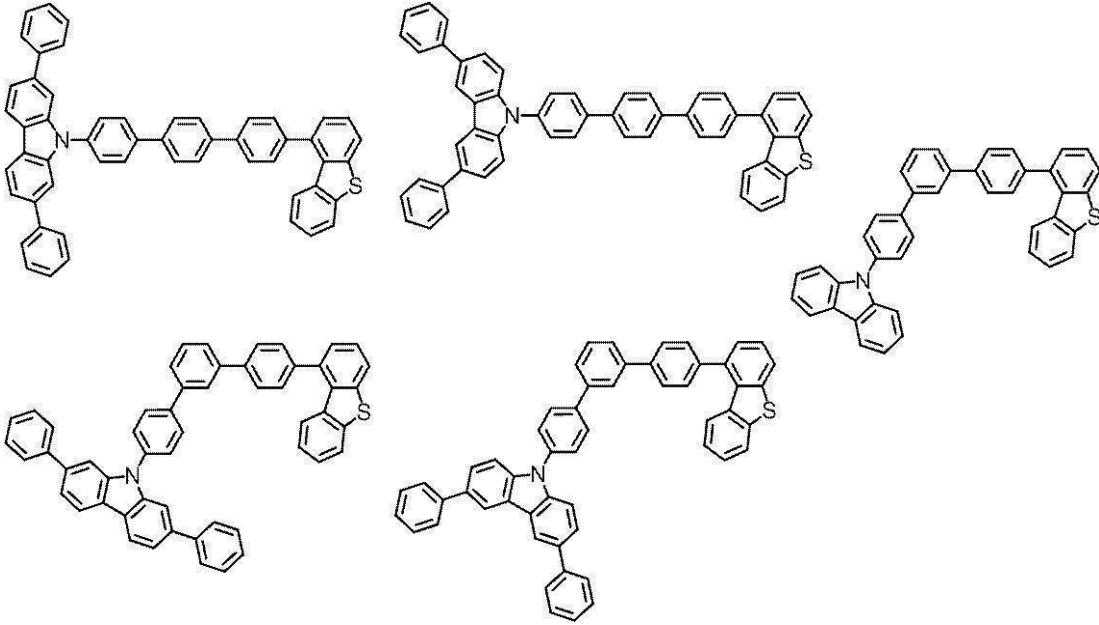


30

40

【 0 1 4 7 】

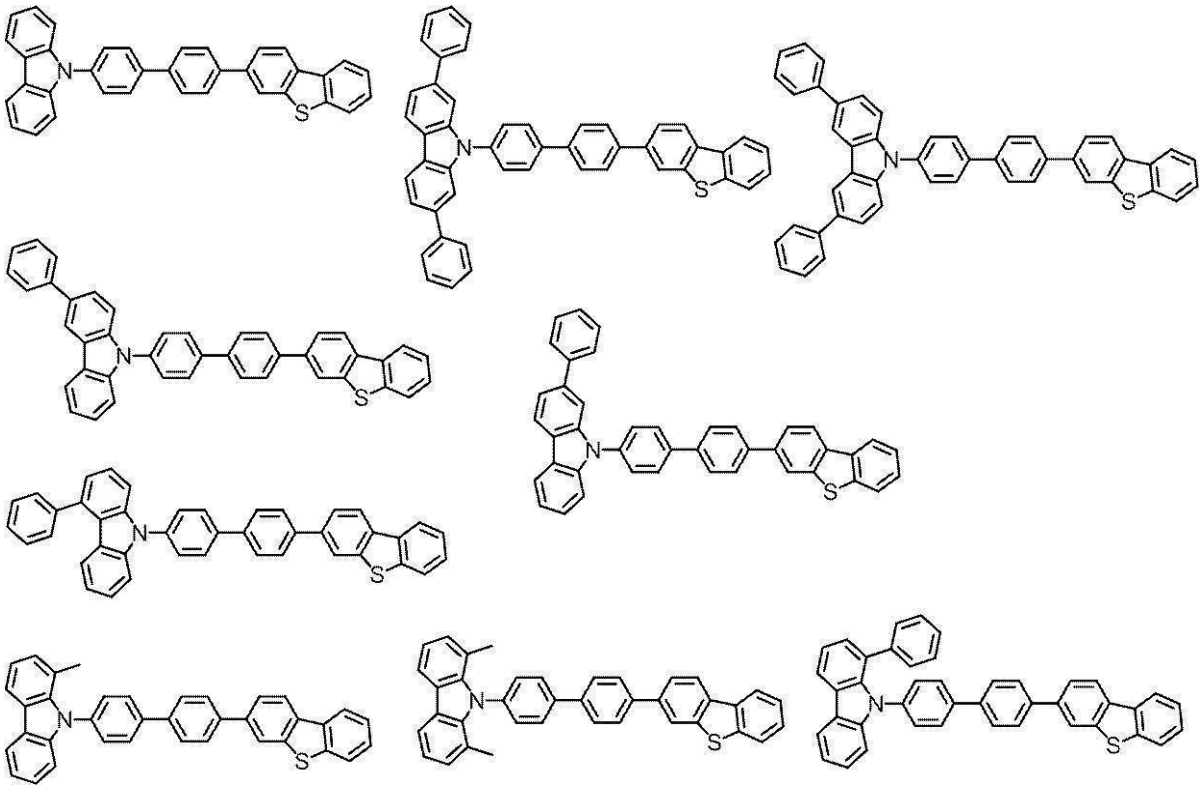
【化 5 2】



10

【 0 1 4 8】

【化 5 3】



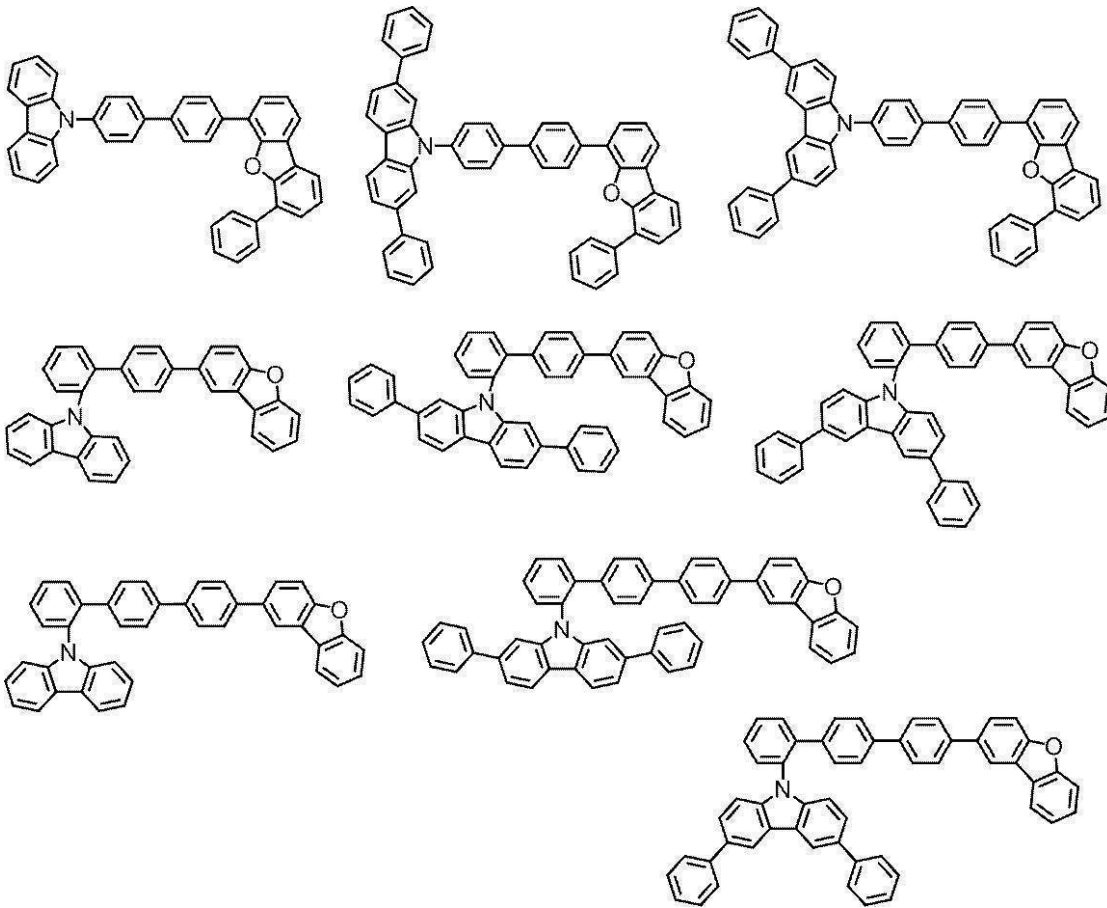
20

30

40

【 0 1 4 9】

【化 5 6】

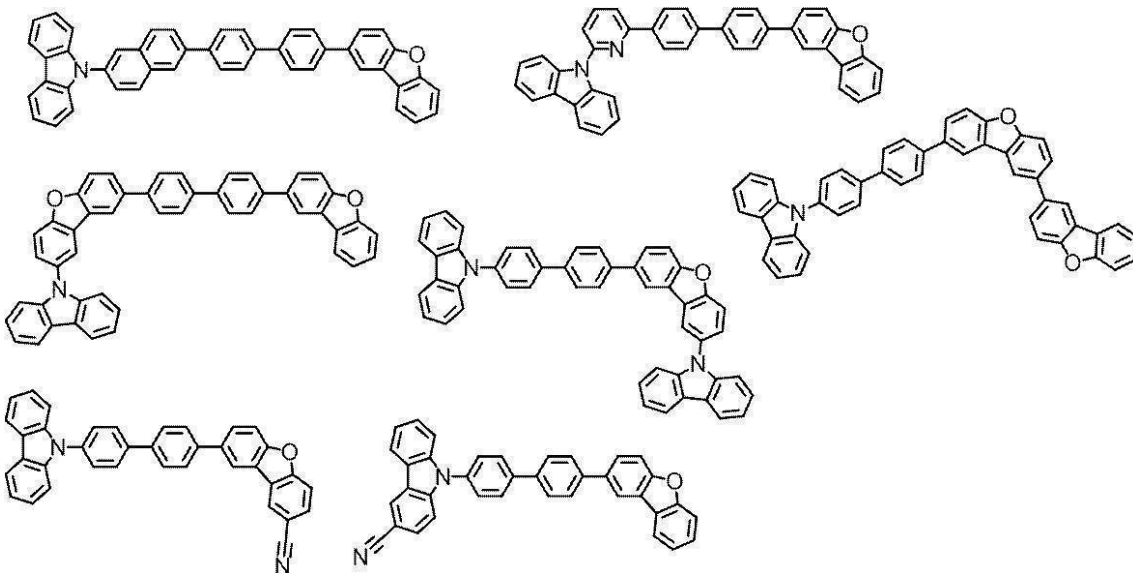


10

20

【 0 1 5 2】

【化 5 7】

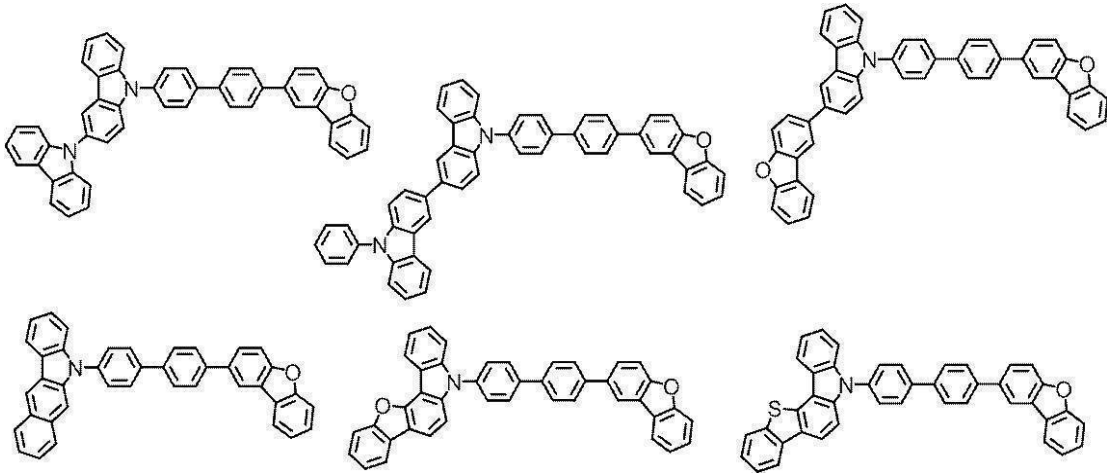


30

40

【 0 1 5 3】

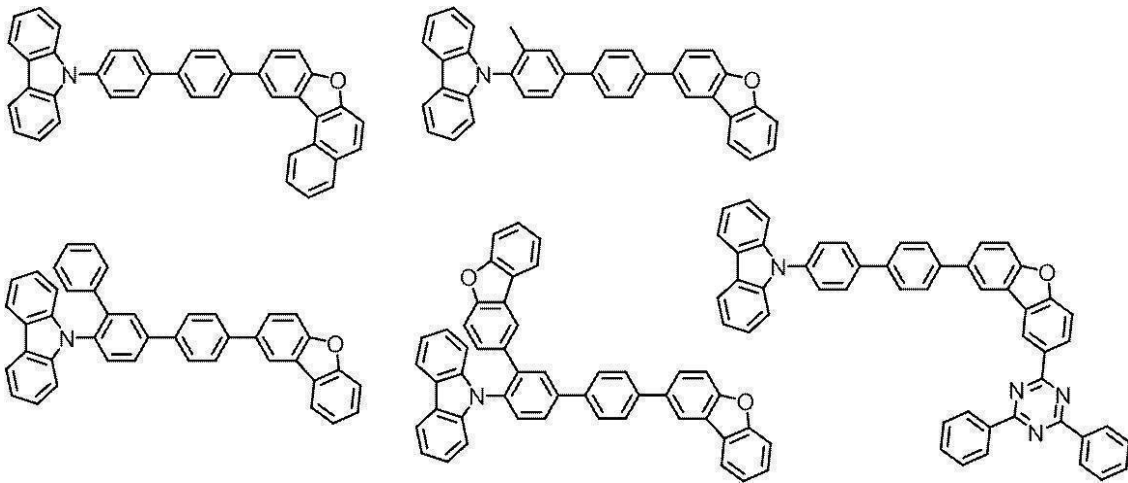
【化 5 8】



10

【 0 1 5 4】

【化 5 9】

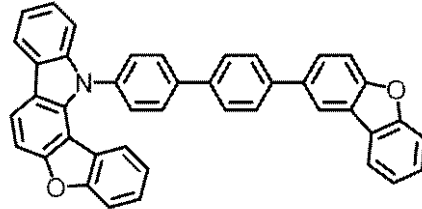
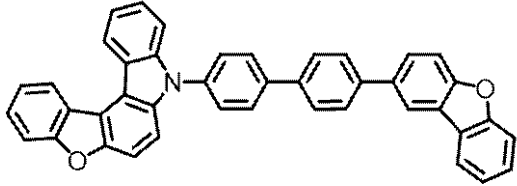
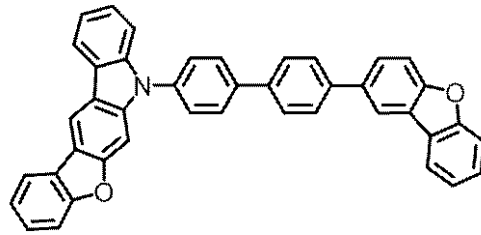
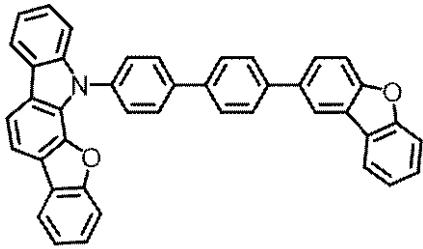


20

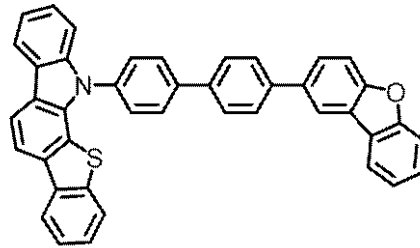
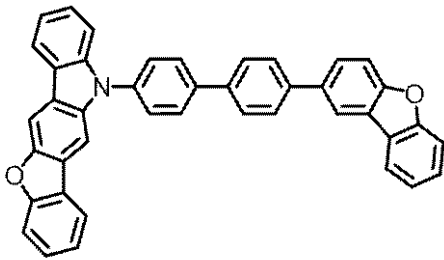
【 0 1 5 5】

30

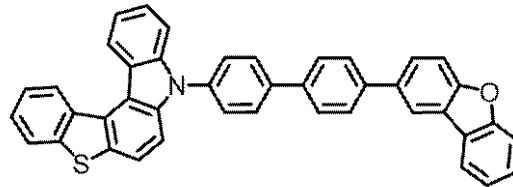
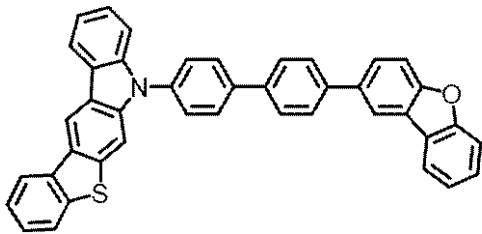
【化 6 0】



10



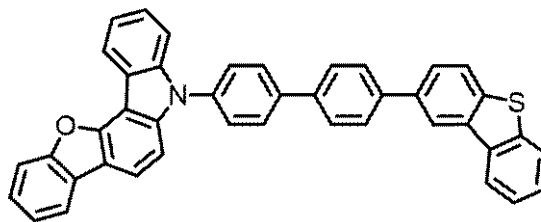
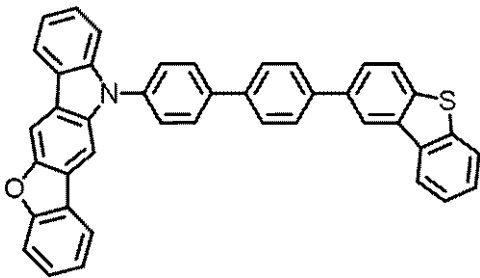
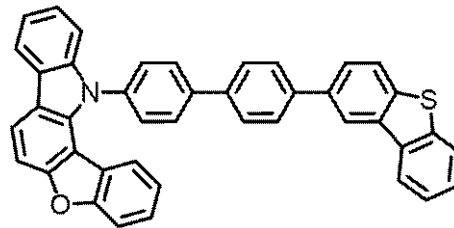
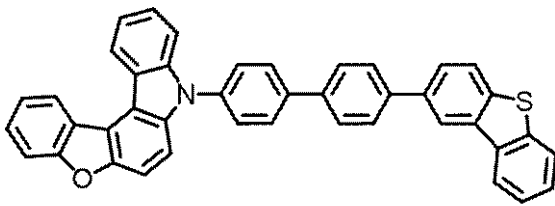
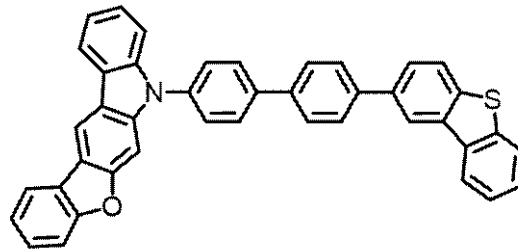
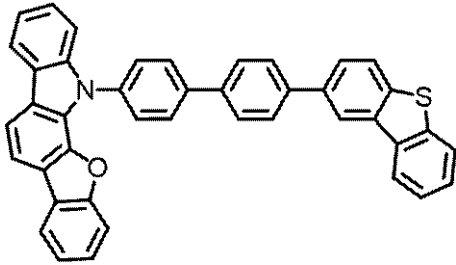
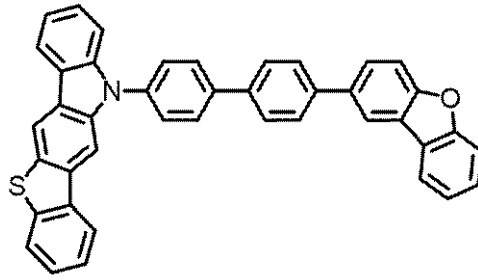
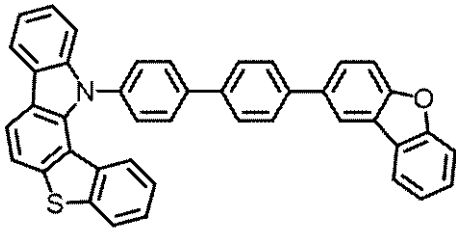
20



30

【 0 1 5 6】

【化 6 1】



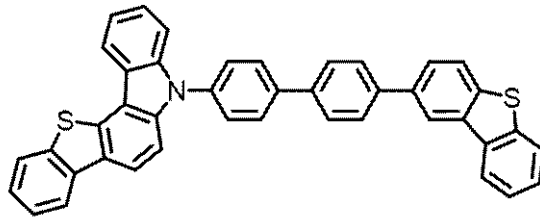
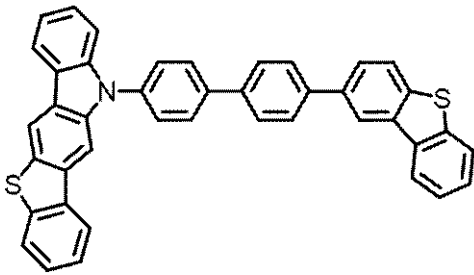
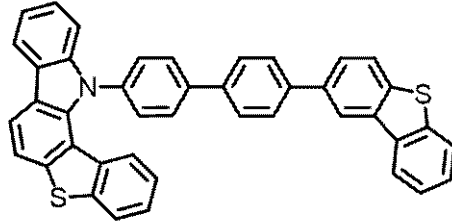
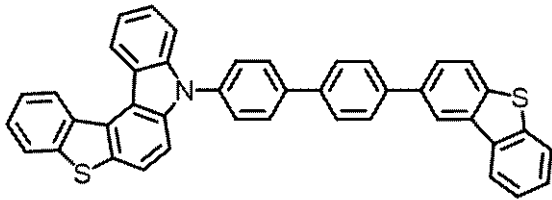
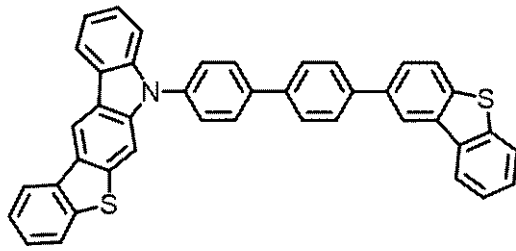
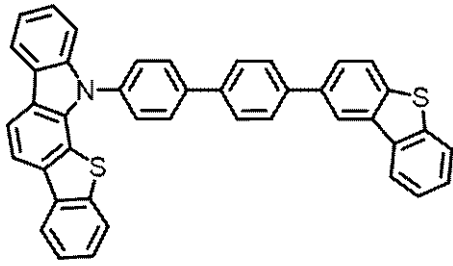
【 0 1 5 7】

10

20

30

【化 6 2】

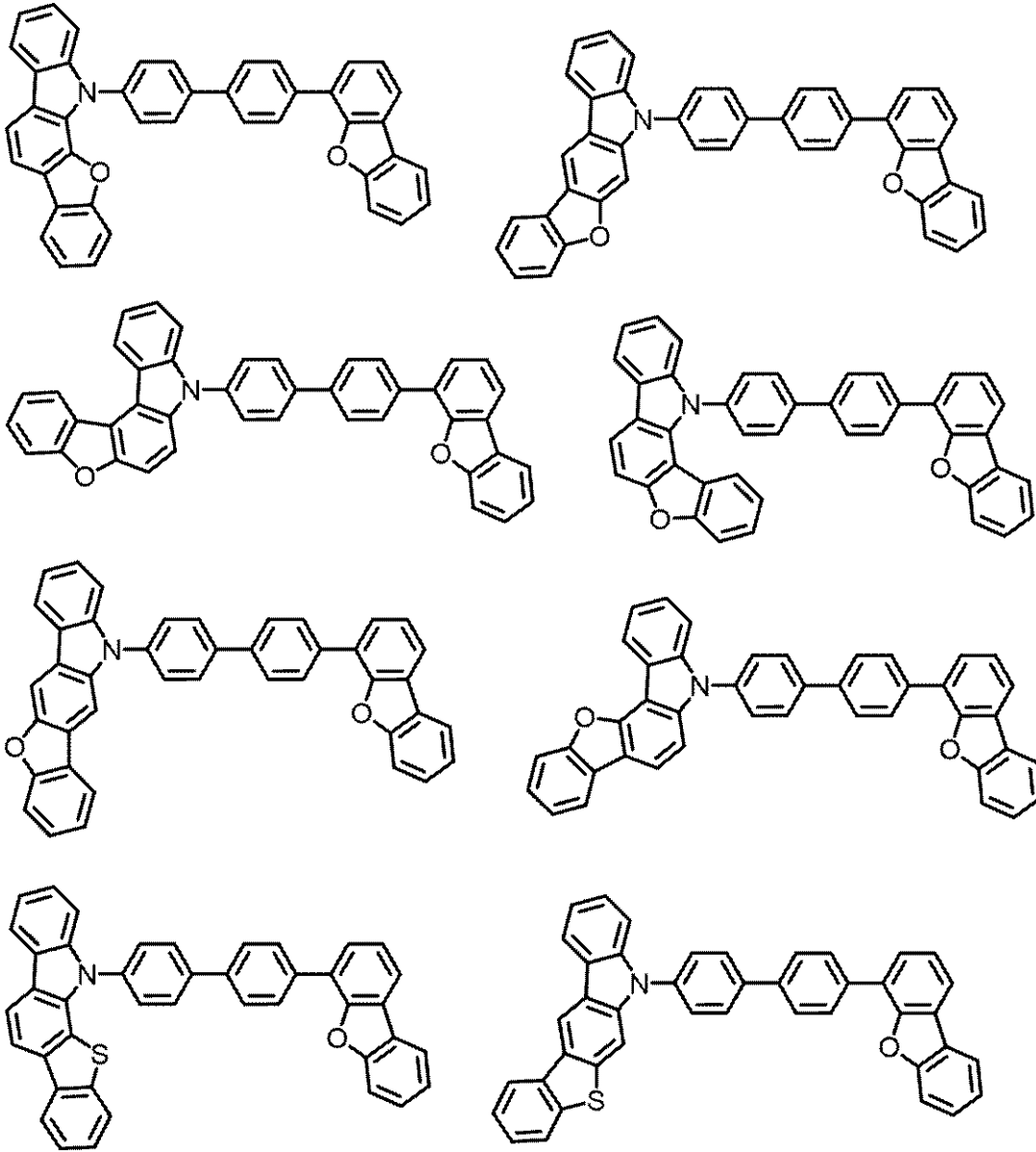


【 0 1 5 8】

10

20

【化 6 3】



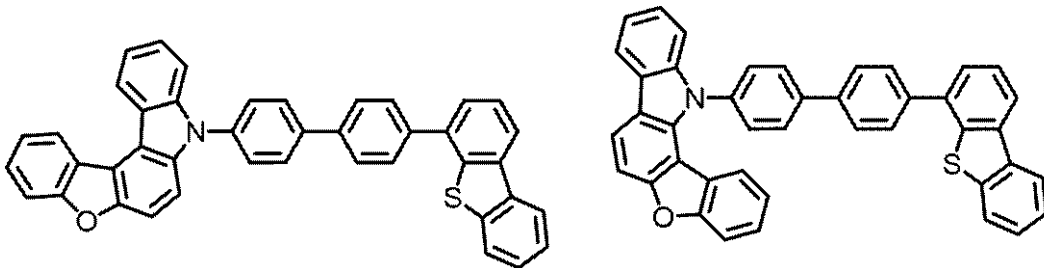
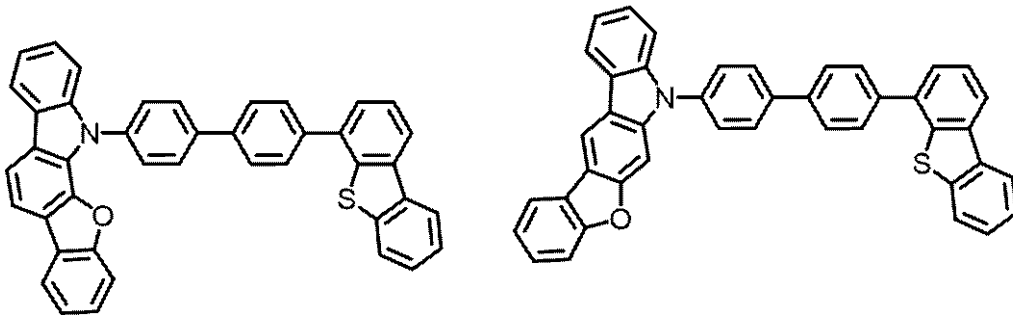
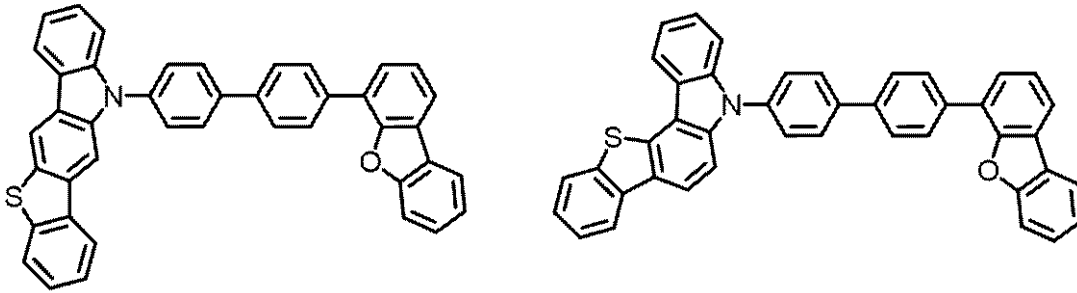
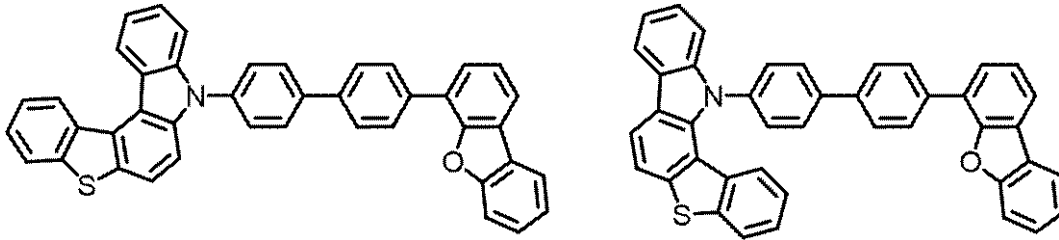
10

20

30

【 0 1 5 9】

【化 6 4】



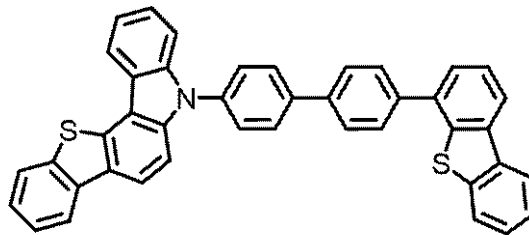
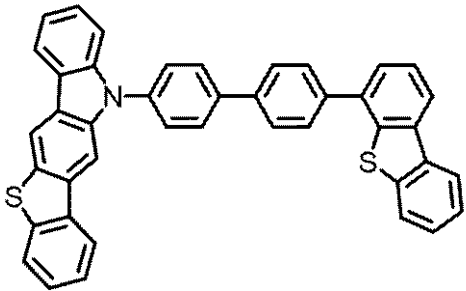
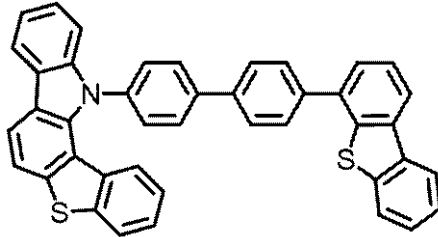
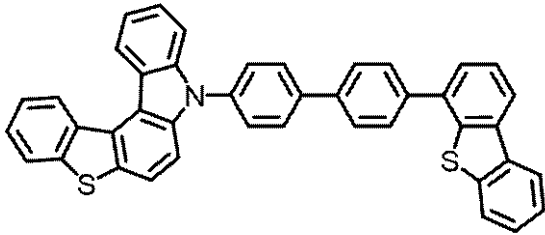
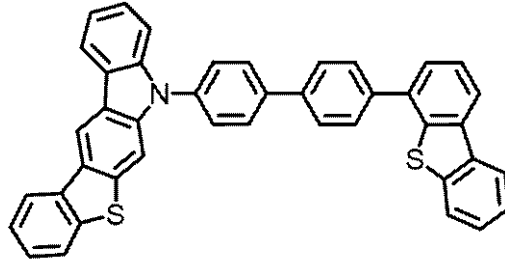
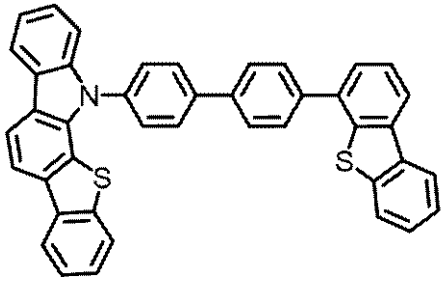
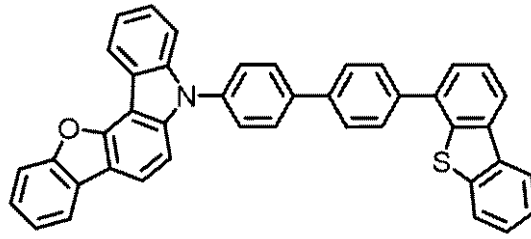
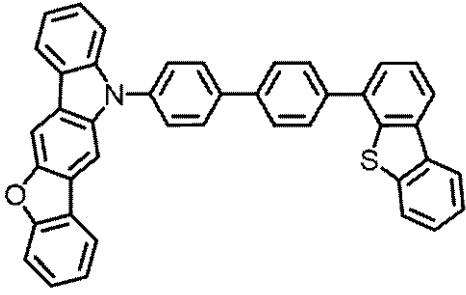
【 0 1 6 0】

10

20

30

【化 6 5】



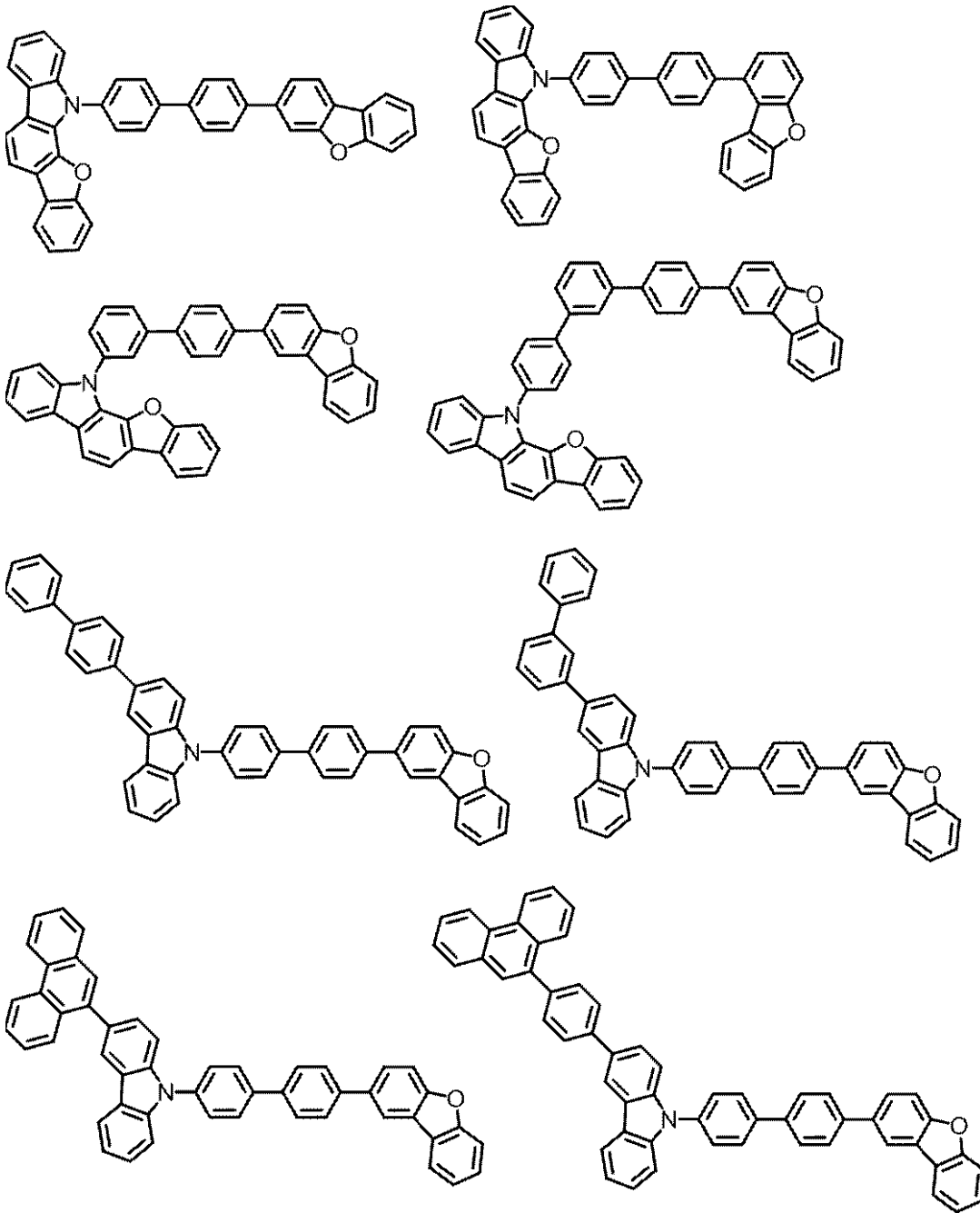
【 0 1 6 1】

10

20

30

【化 6 6】



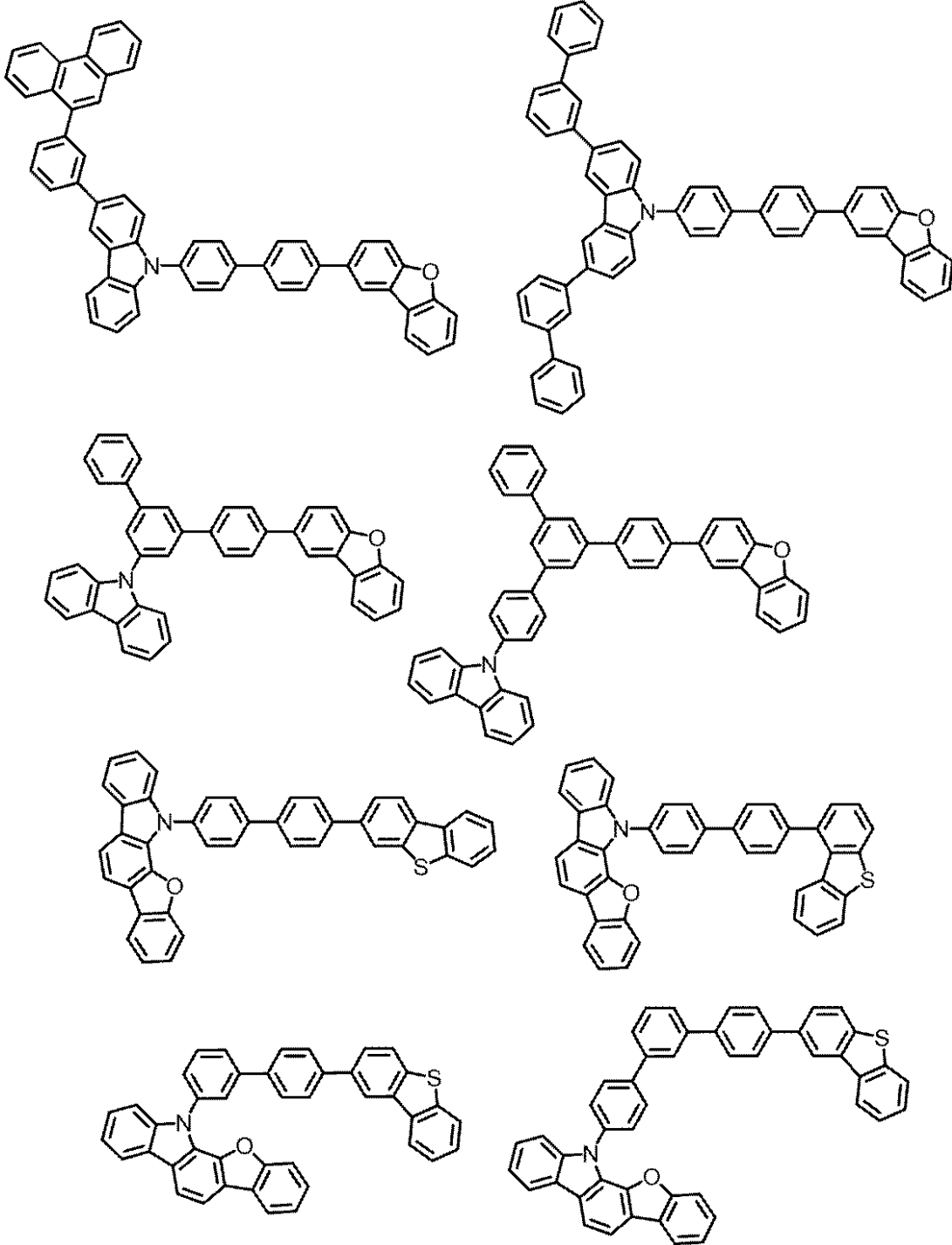
10

20

30

【 0 1 6 2】

【化 6 7】



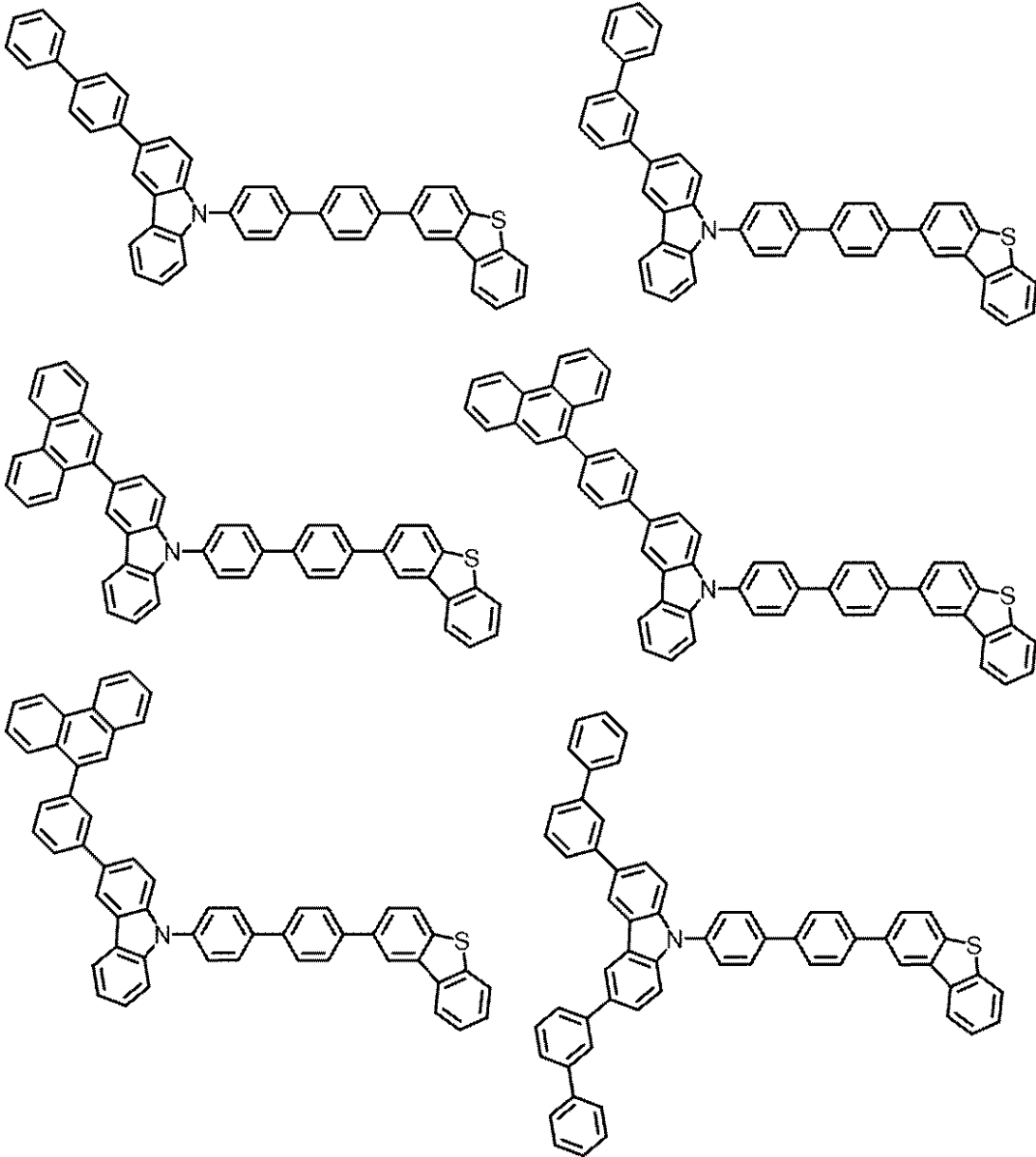
10

20

30

【 0 1 6 3 】

【化 6 8】



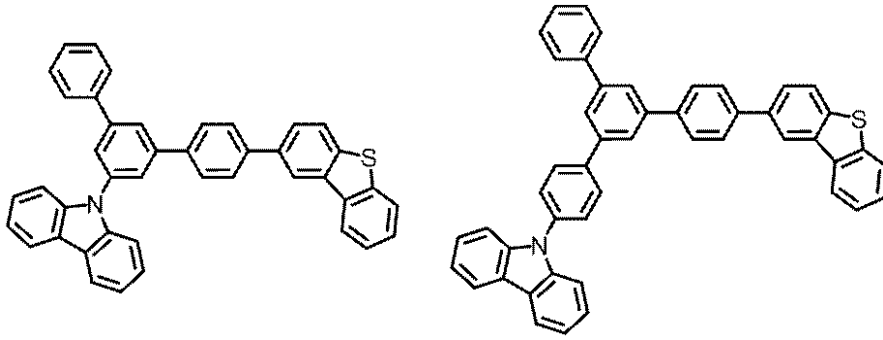
10

20

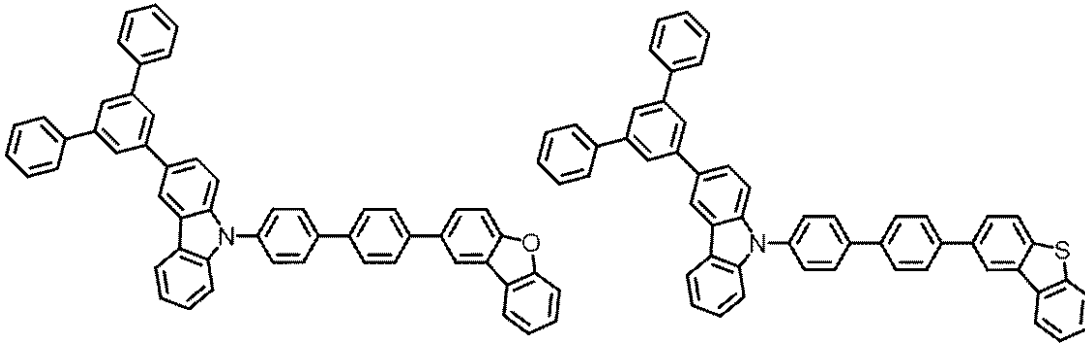
30

【 0 1 6 4】

【化 6 9】



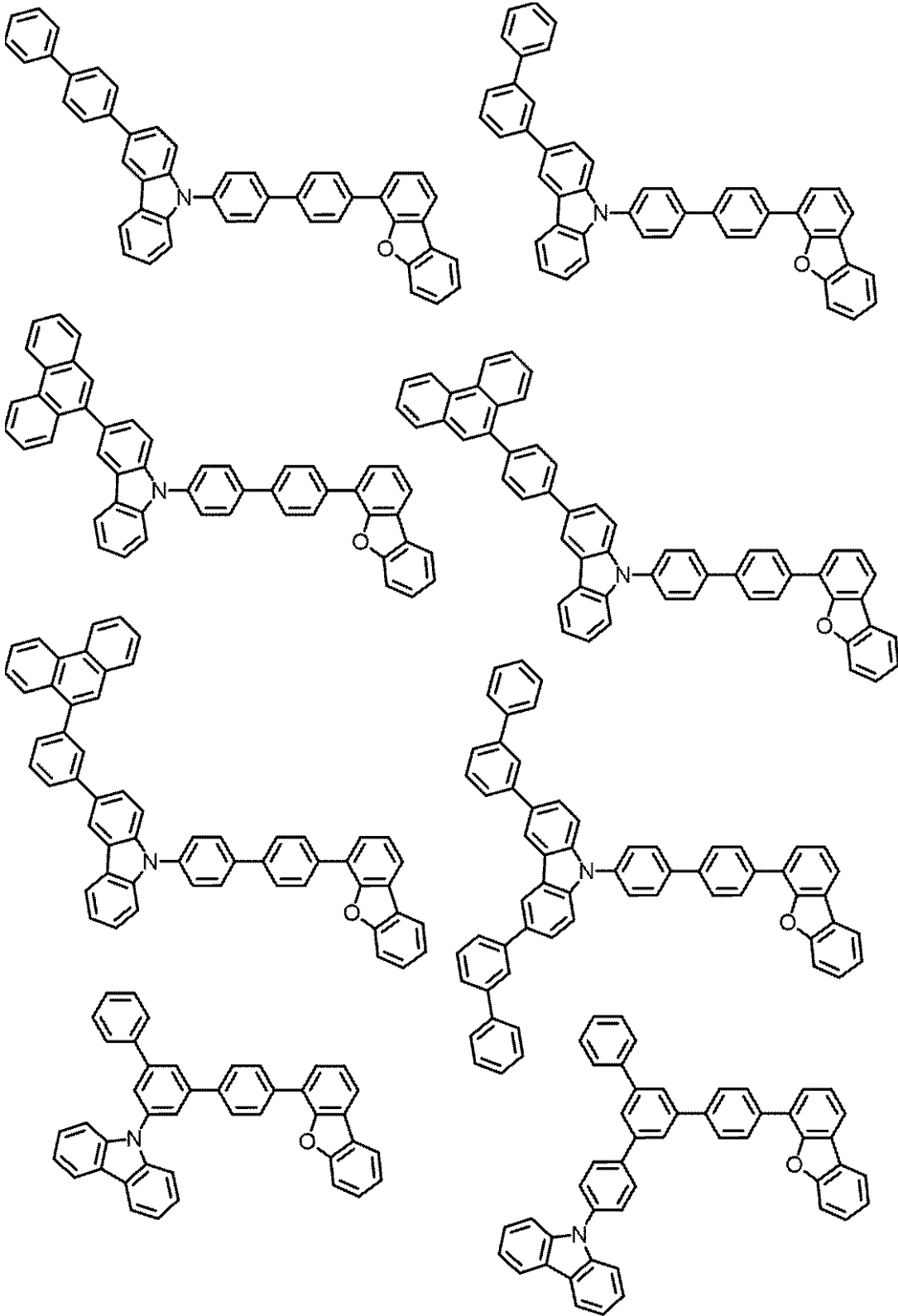
10



20

【 0 1 6 5】

【化 7 0】



10

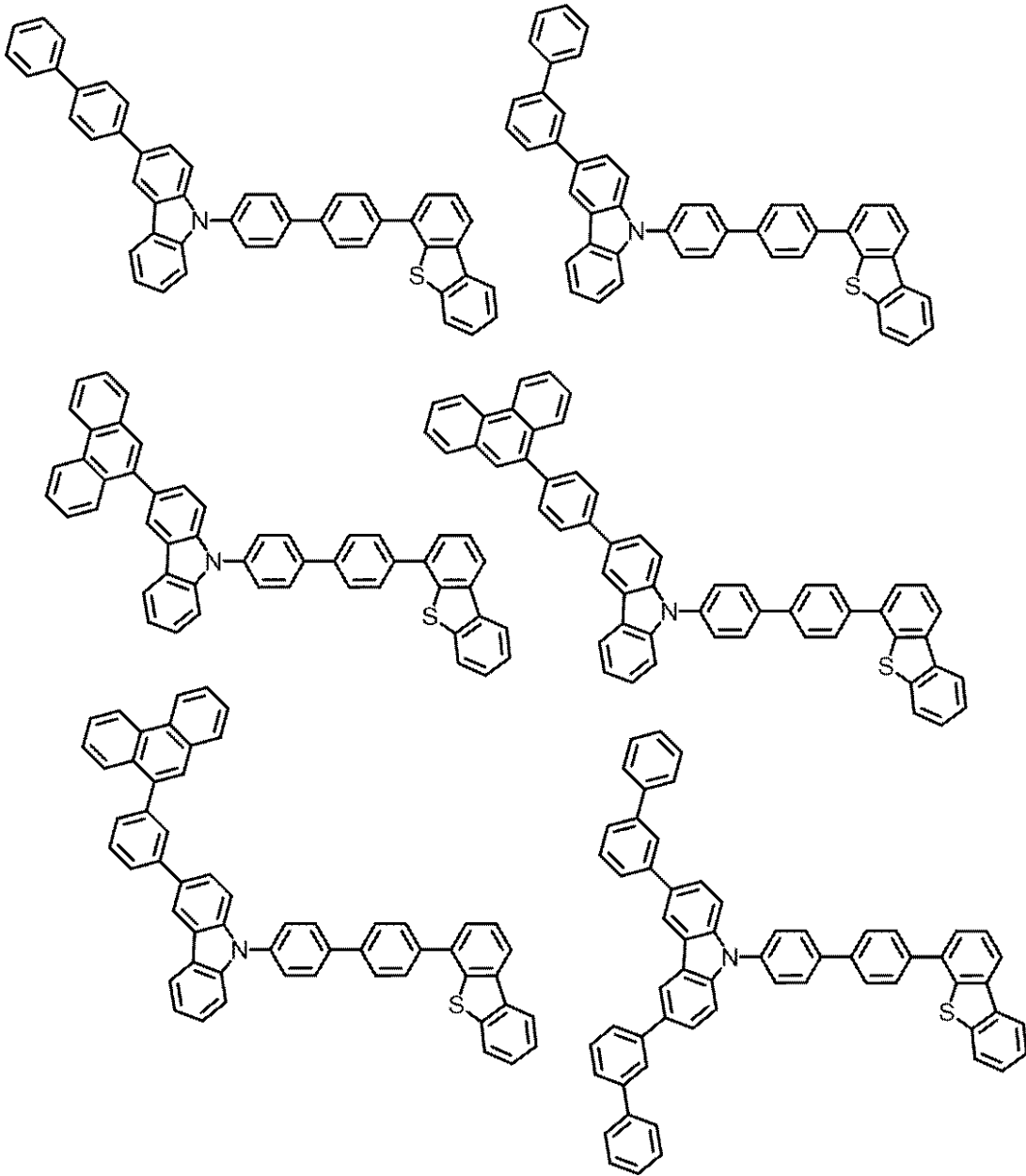
20

30

40

【 0 1 6 6】

【化 7 1】



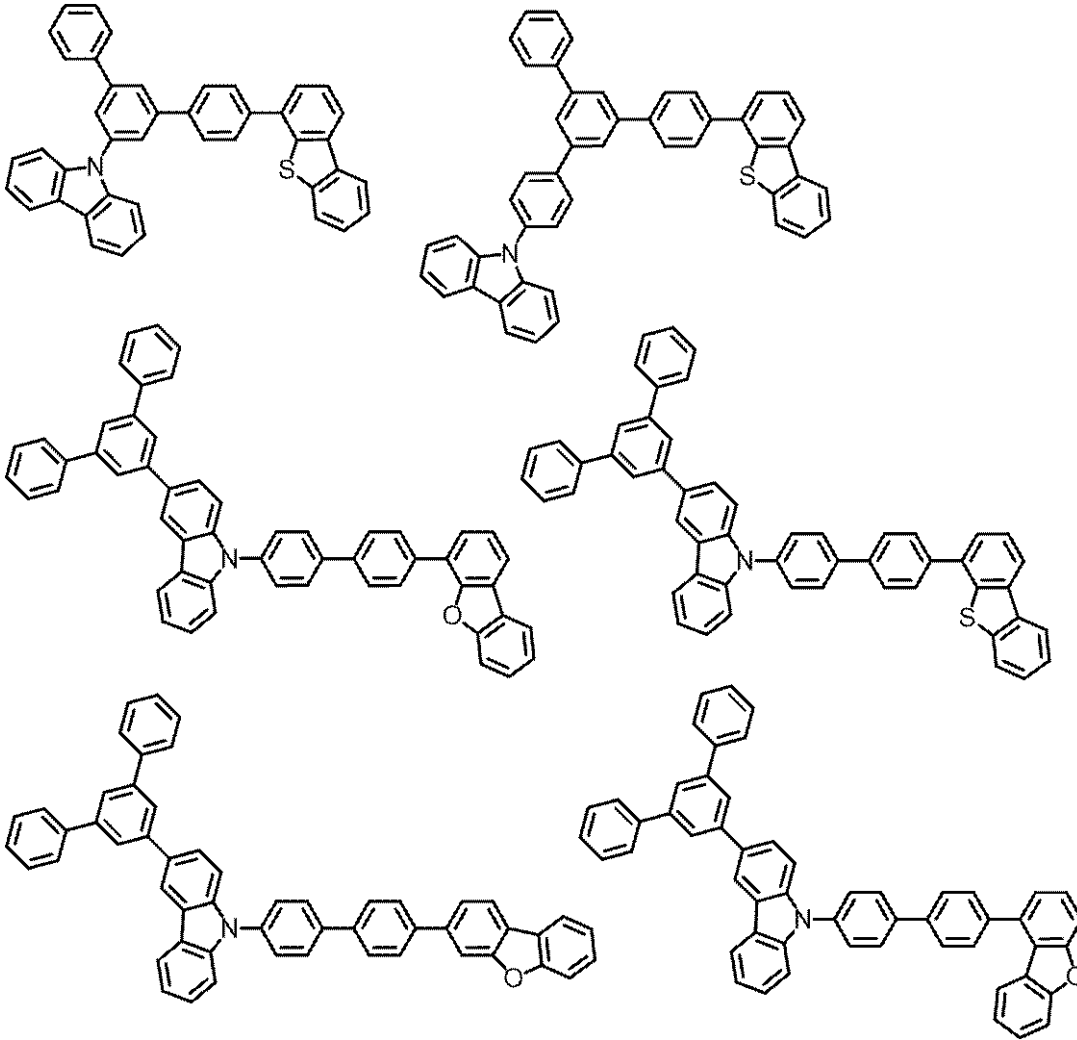
10

20

30

【 0 1 6 7 】

【化 7 2】



10

20

【0168】

(化合物 M 2)

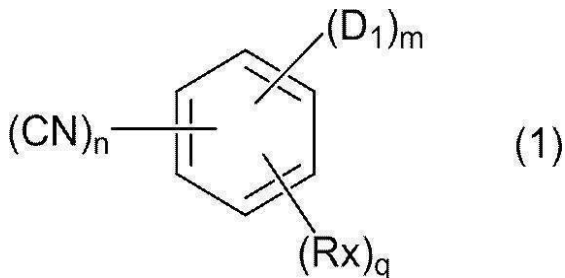
30

本実施形態の発光層は、遅延蛍光性の化合物 M 2 を含む。

遅延蛍光性の化合物 M 2 としては、例えば、下記一般式 (1) で表される化合物が挙げられる。

【0169】

【化 7 3】



40

【0170】

前記一般式 (1) において、 n は、1 以上 4 以下の整数であり、 m は、1 以上 4 以下の整数であり、 q は、0 以上 4 以下の整数であり、 $m + n + q = 6$ であり、

CN は、シアノ基であり、

前記 D_1 は、下記一般式 (2)、下記一般式 (3) 又は下記一般式 (3x) で表される基であり、 D_1 が複数ある場合、複数の D_1 は互いに同一であるか又は異なり、

Rx は、水素原子もしくは置換基であるか、又は隣接する Rx 同士の間が互いに結合し

50

て環を形成し、 R_x が複数ある場合、複数の R_x は、互いに同一であるか又は異なり、置換基としての R_x は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、

置換もしくは無置換のアミノ基、

置換もしくは無置換のカルボニル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～30のアルキルシリル基、または

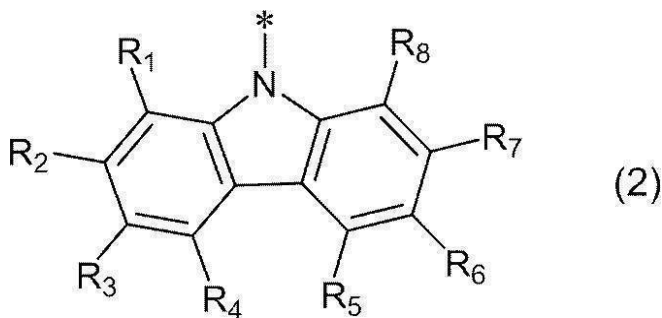
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールシリル基であり、

CN、 D_1 及び R_x は、それぞれ6員環の炭素原子に結合する。

10

【0171】

【化74】



20

【0172】

前記一般式(2)において、 $R_1 \sim R_8$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_1 及び R_2 の組、 R_2 及び R_3 の組、 R_3 及び R_4 の組、 R_5 及び R_6 の組、 R_6 及び R_7 の組、並びに R_7 及び R_8 の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_1 \sim R_8$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールシリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基である。

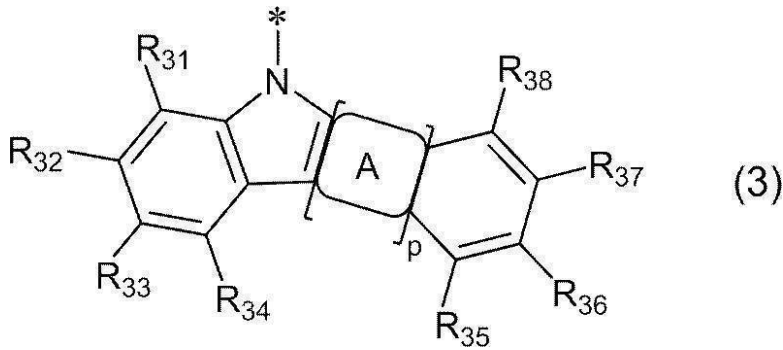
*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

30

40

【0173】

【化75】



10

【0174】

前記一般式(3)において、 $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{31} 及び R_{32} の組、 R_{32} 及び R_{33} の組、 R_{33} 及び R_{34} の組、 R_{35} 及び R_{36} の組、 R_{36} 及び R_{37} の組、並びに R_{37} 及び R_{38} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

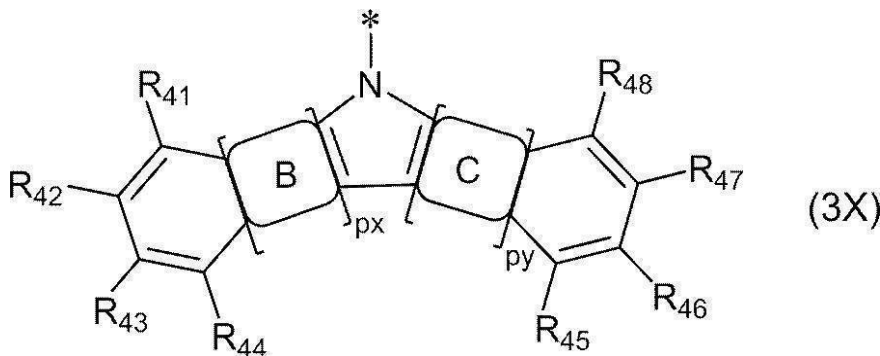
置換基としての $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における $R_1 \sim R_8$ と同義であり、

Aは、下記一般式(131)又は下記一般式(132)で表される環構造を示し、この環構造Aは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、 p は、1以上4以下の整数であり、 p が2以上の整数の場合、複数の環構造Aは、互いに同一であるか又は異なる。*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

20

【0175】

【化76】



30

【0176】

前記一般式(3X)において、 $R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{43} 及び R_{44} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

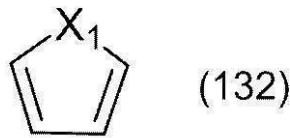
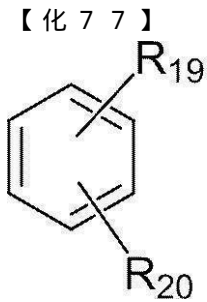
置換基としての $R_{41} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(3)における置換基としての $R_{31} \sim R_{38}$ と同義であり、

Bは、下記一般式(131)又は下記一般式(132)で表される環構造を示し、この環構造Bは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、 p_x は、1以上4以下の整数であり、 p_x が2以上の整数の場合、複数の環構造Bは、互いに同一であるか又は異なり、

40

Cは、下記一般式(131)又は下記一般式(132)で表される環構造を示し、この環構造Cは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、 p_y は、1以上4以下の整数であり、 p_y が2以上の整数の場合、複数の環構造Cは、互いに同一であるか又は異なる。*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

【0177】



【 0 1 7 8 】

前記一般式(131)において、 R_{19} 及び R_{20} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、隣接する環構造の一部と互いに結合して環を形成するか、又は R_{19} 及び R_{20} の組が互いに結合して環を形成し、

10

前記一般式(132)において、 X_1 は、 CR_{50} R_{51} 、 NR_{52} 、硫黄原子、もしくは酸素原子であり、 R_{50} 、 R_{51} 及び R_{52} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{50} 及び R_{51} が互いに結合して環を形成し、

置換基としての R_{19} 、 R_{20} 、 R_{50} 、 R_{51} 及び R_{52} は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における置換基としての $R_1 \sim R_8$ と同義である。

【 0 1 7 9 】

一般式(131)において、 R_{19} 及び R_{20} は、それぞれ独立に、隣接する環構造の一部と互いに結合して環を形成するとは、具体的には、以下の(I)~(IV)のいずれかをいう。

20

また、一般式(131)において、 R_{19} 及び R_{20} の組が互いに結合して環を形成するとは、具体的には、以下の(V)をいう。(I)一般式(131)で表される環構造同士が隣接する場合に、隣接する2つの環のうち、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{19} の組、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{20} の組、並びに一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{20} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成すること。

(II)一般式(131)で表される環構造と、一般式(3)における $R_{35} \sim R_{38}$ を有するベンゼン環とが隣接する場合に、隣接する2つの環のうち、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{35} の組、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{38} の組、一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{35} の組、並びに一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{38} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成すること。

30

(III)一般式(131)で表される環構造と、一般式(3X)における $R_{41} \sim R_{44}$ を有するベンゼン環とが隣接する場合に、隣接する2つの環のうち、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{41} の組、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{44} の組、一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{41} の組、並びに一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{44} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成すること。

(IV)一般式(131)で表される環構造と、一般式(3X)における $R_{45} \sim R_{48}$ を有するベンゼン環とが隣接する場合に、隣接する2つの環のうち、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{45} の組、一方の環の R_{19} 及び他方の環の R_{48} の組、一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{45} の組、並びに一方の環の R_{20} 及び他方の環の R_{48} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成すること。

40

(V)一般式(131)で表される環構造の R_{19} 及び R_{20} の組が互いに結合して環を形成すること。すなわち、(V)は、同じ環に結合する R_{19} 及び R_{20} の組が互いに結合して環を形成することをいう。

【 0 1 8 0 】

本実施形態の化合物M2において、 R_x は、それぞれ独立に、

水素原子、

無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、

無置換の環形成原子数5~30の複素環基、または

無置換の炭素数1~30のアルキル基であり、

50

R_xが無置換の環形成原子数5～30の複素環基である場合、無置換の環形成原子数5～30の複素環基としてのR_xは、ピリジル基、ピリジニル基、トリアジニル基、ジベンゾフラニル基、またはジベンゾチエニル基であることが好ましい。

本明細書において、トリアジニル基とは、1,3,5-トリアジン、1,2,4-トリアジン、又は1,2,3-トリアジンから水素原子1つを除いた基をいう。

トリアジニル基は、1,3,5-トリアジンから水素原子1つを除いた基であることが好ましい。

本実施形態の化合物M2において、R_xは、それぞれ独立に、
水素原子、

無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、または

無置換のジベンゾフラニル基、または

無置換のジベンゾチエニル基であることがより好ましい。

10

本実施形態の化合物M2において、R_xは、水素原子であることがさらに好ましい。

【0181】

本実施形態の化合物M2において、置換基としてのR₁～R₈、R₃₁～R₃₈、R₁₉～R₂₀、R₄₁～R₄₈、及びR₅₀～R₅₂は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

無置換の環形成原子数5～30の複素環基、または

無置換の炭素数1～30のアルキル基であることが好ましい。

20

【0182】

本実施形態の化合物M2は、下記一般式(1-1)～(1-47)のいずれかで表される化合物であることが好ましい。

【0183】

【化78】



(1-1)



(1-2)



(1-3)



(1-4)

30



(1-5)



(1-6)



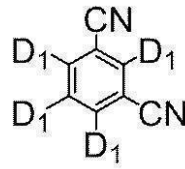
(1-7)



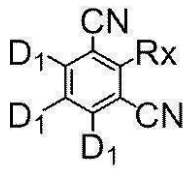
(1-8)



(1-9)



(1-10)



(1-11)



(1-12)

40

【0184】

【化 7 9】



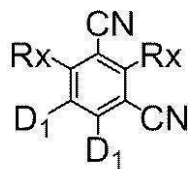
(1-13)



(1-14)



(1-15)



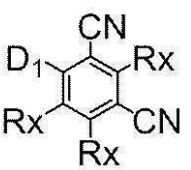
(1-16)



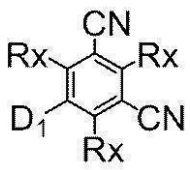
(1-17)



(1-18)



(1-19)



(1-20)

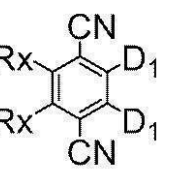
10



(1-21)



(1-22)



(1-23)



(1-24)

20

【 0 1 8 5】

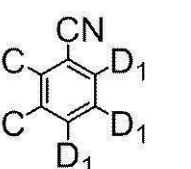
【化 8 0】



(1-25)



(1-26)

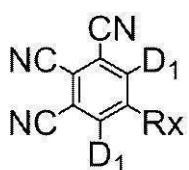


(1-27)



(1-28)

30



(1-29)



(1-30)



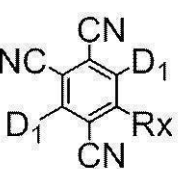
(1-31)



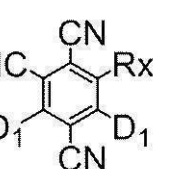
(1-32)



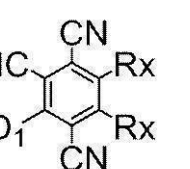
(1-33)



(1-34)



(1-35)



(1-36)

40

【 0 1 8 6】

【化 8 1】



(1-37)



(1-38)



(1-39)



(1-40)



(1-41)



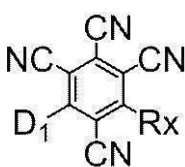
(1-42)



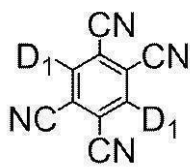
(1-43)



(1-44)



(1-45)



(1-46)



(1-47)

【0187】

前記一般式(1-1)~(1-47)における D_1 は、それぞれ独立に、前記一般式(1)における D_1 と同義であり、 R_x は、それぞれ独立に、前記一般式(1)における R_x と同義である。

【0188】

本実施形態の化合物M2は、一般式(1-4)~(1-7)、(1-14)~(1-17)及び(1-23)~(1-25)のいずれかで表される化合物であることが好ましい。

【0189】

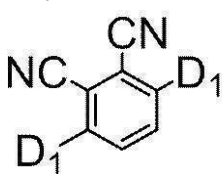
本実施形態の化合物M2は、一般式(1-6)、(1-23)又は(1-24)で表される化合物であることがより好ましい。

【0190】

本実施形態の化合物M2は、下記一般式(1-6A)、(1-23A)又は(1-24A)で表される化合物であることがさらに好ましい。

【0191】

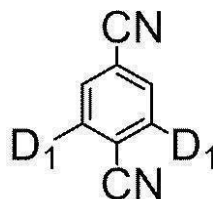
【化 8 2】



(1-6A)



(1-23A)



(1-24A)

【0192】

前記一般式(1-6A)、(1-23A)及び(1-24A)における D_1 は、それぞれ独立に、前記一般式(1)における D_1 と同義である。

【0193】

本実施形態の化合物M2は、一般式(1-6)で表される化合物であることも好ましい

10

20

30

40

50

。

【 0 1 9 4 】

本実施形態の化合物 M 2 は、一般式 (1 - 2 3) で表される化合物であることも好ましい。

【 0 1 9 5 】

本実施形態の化合物 M 2 は、一般式 (1 - 2 4) で表される化合物であることも好ましい。

【 0 1 9 6 】

本実施形態の化合物 M 2 は、一般式 (1 - 1)、(1 - 1 0) 又は (1 - 2 1) で表される化合物であることも好ましい。

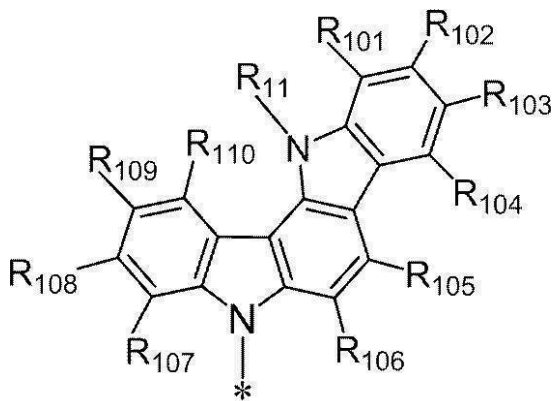
10

【 0 1 9 7 】

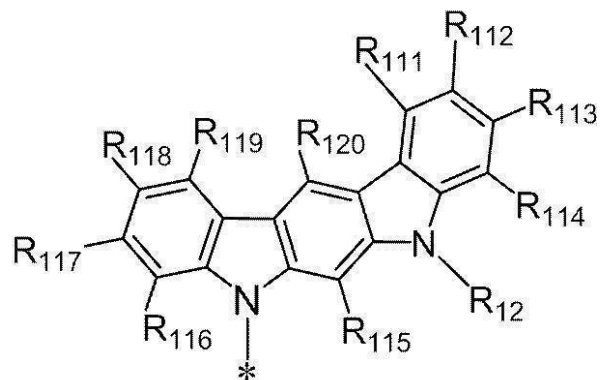
本実施形態の化合物 M 2 において、前記 D₁ は、下記一般式 (3 - 1) ~ (3 - 1 2) のいずれかで表される基であることが好ましい。

【 0 1 9 8 】

【 化 8 3 】



(3-1)

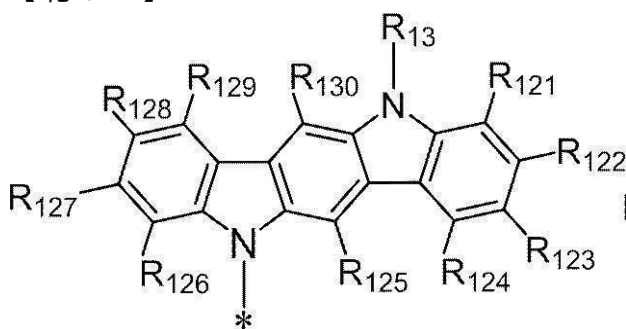


(3-2)

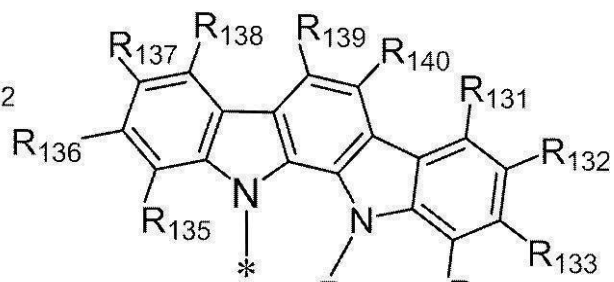
20

【 0 1 9 9 】

【 化 8 4 】



(3-3)



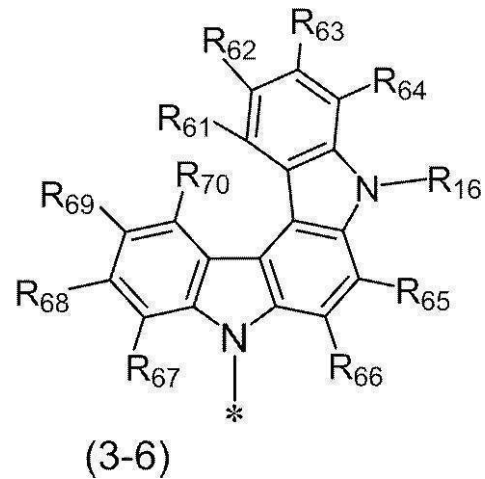
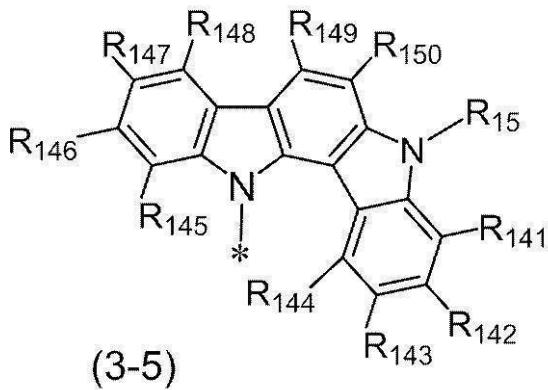
(3-4)

30

【 0 2 0 0 】

40

【化 8 5】



10

【 0 2 0 1】

前記一般式(3-1)~(3-6)において、 $R_{11} \sim R_{16}$ は、置換基であり、 $R_{101} \sim R_{150}$ 及び $R_{61} \sim R_{70}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、

置換基としての $R_{101} \sim R_{150}$ 及び $R_{61} \sim R_{70}$ は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6~14のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数5~14の複素環基、
置換もしくは無置換の炭素数1~6のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数3~6のアルキルシリル基、
ヒドロキシ基、

20

置換もしくは無置換の炭素数1~6のアルコキシ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6~14のアリールオキシ基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6~28のアリールアミノ基、
置換もしくは無置換の炭素数2~12のアルキルアミノ基、
チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1~6のアルキルチオ基、または
置換もしくは無置換の環形成炭素数6~14のアリールチオ基であり、

30

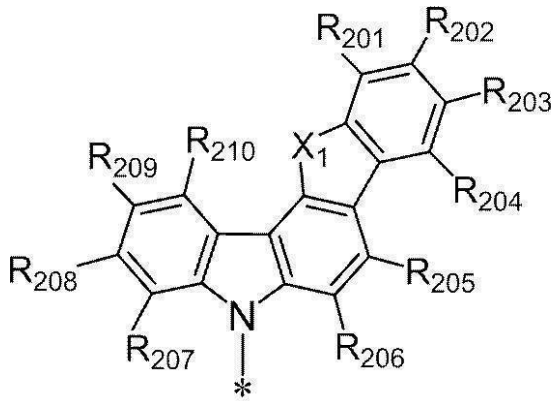
置換基としての $R_{11} \sim R_{16}$ は、それぞれ独立に、
置換もしくは無置換の炭素数1~6のアルキル基
置換もしくは無置換の環形成炭素数6~14のアリール基、
置換もしくは無置換の環形成原子数5~14の複素環基、
置換もしくは無置換の炭素数3~6のアルキルシリル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6~14のアリールオキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数2~12のアルキルアミノ基、
置換もしくは無置換の炭素数1~6のアルキルチオ基、または
置換もしくは無置換の環形成炭素数6~14のアリールチオ基である。

40

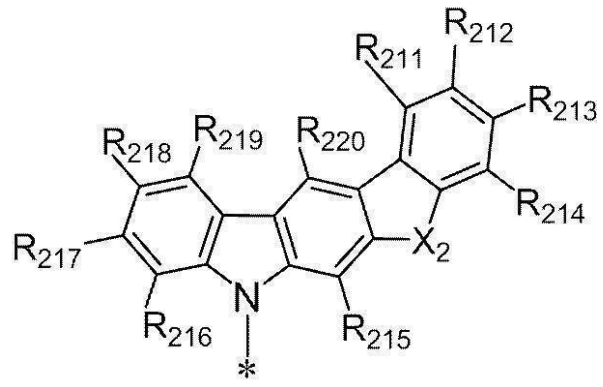
*は、前記一般式(1)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

【 0 2 0 2】

【化 8 6】



(3-7)

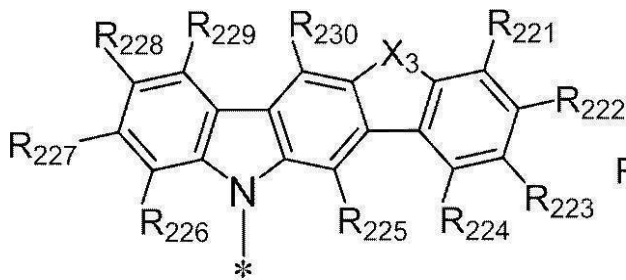


(3-8)

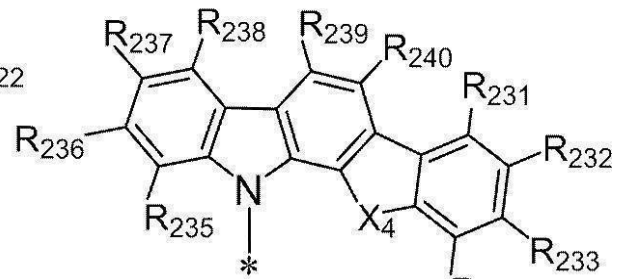
10

【 0 2 0 3】

【化 8 7】



(3-9)

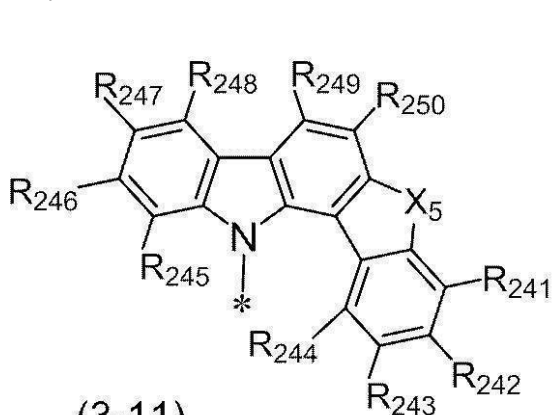


(3-10)

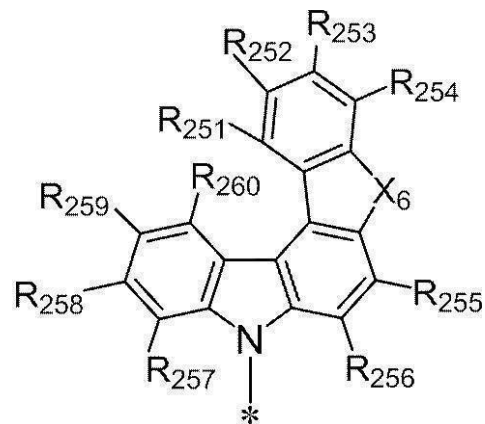
20

【 0 2 0 4】

【化 8 8】



(3-11)



(3-12)

30

【 0 2 0 5】

前記一般式(3-7)~(3-12)において、 $X_1 \sim X_6$ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、または $CR_{151}R_{152}$ であり、 $R_{201} \sim R_{260}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{151} 及び R_{152} が互いに結合して環を形成し、置換基としての $R_{201} \sim R_{260}$ 、 R_{151} 及び R_{152} は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~14のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5~14の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1~6のアルキル基、

40

50

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のハロゲン化アルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 6 のアルキルシリル基、
 ヒドロキシ基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルコキシ基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のハロゲン化アルコキシ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 14 のアリーロキシ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 28 のアリーロアミノ基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 12 のアルキルアミノ基、
 チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキルチオ基、または
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 14 のアリーロチオ基である。

10

* は、前記一般式 (1) 中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

【 0 2 0 6 】

本実施形態の化合物 M 2 は、前記 D₁ が、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) のいずれかで表される基であることも好ましく、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) における X₁ ~ X₆ は、硫黄原子であることも好ましい。

【 0 2 0 7 】

本実施形態の化合物 M 2 は、前記 D₁ が、一般式 (3 - 1 2) で表される基であることも好ましく、一般式 (3 - 1 2) における X₆ は、硫黄原子であることも好ましい。

【 0 2 0 8 】

本実施形態の化合物 M 2 は、前記 D₁ が、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) のいずれかで表される基であり、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) における X₁ ~ X₆ は、酸素原子であることも好ましい。

20

【 0 2 0 9 】

本実施形態の化合物 M 2 は、前記 D₁ が、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) のいずれかで表される基であり、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) における X₁ ~ X₆ は、C R_{1 5 1} R_{1 5 2} であることも好ましい。

【 0 2 1 0 】

本実施形態の化合物 M 2 は、前記 D₁ が、一般式 (3 - 1) ~ (3 - 6) のいずれかで表される基であることも好ましい。

30

【 0 2 1 1 】

本実施形態の化合物 M 2 は、一般式 (1 - 4) ~ (1 - 7)、(1 - 1 4) ~ (1 - 1 7) 及び (1 - 2 3) ~ (1 - 2 5) のいずれかで表される化合物であり、かつ、D₁ は、一般式 (3 - 1) ~ (3 - 1 2) のいずれかで表される基であることも好ましい。

【 0 2 1 2 】

本実施形態の化合物 M 2 は、一般式 (1 - 4) ~ (1 - 7)、(1 - 1 4) ~ (1 - 1 7) 及び (1 - 2 3) ~ (1 - 2 5) のいずれかで表される化合物であり、D₁ は、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) のいずれかで表される基であり、かつ、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) における X₁ ~ X₆ は、硫黄原子であることも好ましい。

【 0 2 1 3 】

本実施形態の化合物 M 2 は、一般式 (1 - 6)、(1 - 2 3) 又は (1 - 2 4) で表される化合物であり、D₁ は、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) のいずれかで表される基であり、かつ、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) における X₁ ~ X₆ は、硫黄原子であることも好ましい。

40

【 0 2 1 4 】

本実施形態の化合物 M 2 は、一般式 (1 - 4) ~ (1 - 7)、(1 - 1 4) ~ (1 - 1 7) 及び (1 - 2 3) ~ (1 - 2 5) のいずれかで表される化合物であり、D₁ は、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) のいずれかで表される基であり、かつ、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) における X₁ ~ X₆ は、酸素原子であることも好ましい。

【 0 2 1 5 】

50

本実施形態の化合物 M 2 は、一般式 (1 - 6)、(1 - 2 3) 又は (1 - 2 4) で表される化合物であり、D₁ は、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) のいずれかで表される基であり、かつ、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) における X₁ ~ X₆ は、酸素原子であることも好ましい。

【 0 2 1 6 】

本実施形態の化合物 M 2 は、一般式 (1 - 4) ~ (1 - 7)、(1 - 1 4) ~ (1 - 1 7) 及び (1 - 2 3) ~ (1 - 2 5) のいずれかで表される化合物であり、D₁ は、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) のいずれかで表される基であり、かつ、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) における X₁ ~ X₆ は、C R_{1 5 1} R_{1 5 2} であることも好ましい。

【 0 2 1 7 】

本実施形態の化合物 M 2 は、一般式 (1 - 6)、(1 - 2 3) 又は (1 - 2 4) で表される化合物であり、D₁ は、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) のいずれかで表される基であり、かつ、一般式 (3 - 7) ~ (3 - 1 2) における X₁ ~ X₆ は、C R_{1 5 1} R_{1 5 2} であることも好ましい。

【 0 2 1 8 】

本実施形態の化合物 M 2 は、一般式 (1 - 4) ~ (1 - 7)、(1 - 1 4) ~ (1 - 1 7) 及び (1 - 2 3) ~ (1 - 2 5) のいずれかで表される化合物であり、D₁ は、一般式 (3 - 1) ~ (3 - 6) のいずれかで表される基であることも好ましい。

【 0 2 1 9 】

本実施形態の化合物 M 2 は、一般式 (1 - 6)、(1 - 2 3) 又は (1 - 2 4) で表される化合物であり、D₁ は、一般式 (3 - 1) ~ (3 - 6) のいずれかで表される基であることも好ましい。

【 0 2 2 0 】

本実施形態の化合物 M 2 において、置換基としての R_{1 0 1} ~ R_{1 5 0} 及び R_{6 1} ~ R_{7 0} は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 4 のアリール基、
無置換の環形成原子数 5 ~ 1 4 の複素環基、または
無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキル基であり、

置換基としての R_{1 1} ~ R_{1 6} は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 4 のアリール基、または
無置換の環形成原子数 5 ~ 1 4 の複素環基であることが好ましい。

【 0 2 2 1 】

本実施形態の化合物 M 2 において、R_{1 0 1} ~ R_{1 5 0} 及び R_{6 1} ~ R_{7 0} は、水素原子であり、

置換基としての R_{1 1} ~ R_{1 6} は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 4 のアリール基、または
無置換の環形成原子数 5 ~ 1 4 の複素環基であることも好ましい。

【 0 2 2 2 】

本実施形態の化合物 M 2 において、置換基としての R_{2 0 1} ~ R_{2 6 0} は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、
無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 4 のアリール基、
無置換の環形成原子数 5 ~ 1 4 の複素環基、
無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキル基、

置換基としての R_{1 5 1} 及び R_{1 5 2} は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 4 のアリール基、または
無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキル基であることが好ましい。

また、本実施形態の化合物 M 2 において、置換基としての R_{2 0 1} ~ R_{2 6 0} は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 4 のアリール基、

10

20

30

40

50

無置換の環形成原子数 5 ~ 14 の複素環基、
 無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキル基、
 置換基としての R₁₅₁ 及び R₁₅₂ は、それぞれ独立に、
 無置換の環形成炭素数 6 ~ 14 のアリール基、または
 無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキル基であることがより好ましい。

【0223】

本実施形態の化合物 M2 において、R₂₀₁ ~ R₂₆₀ は、水素原子であり、
 置換基としての R₁₅₁ 及び R₁₅₂ は、それぞれ独立に、
 無置換の環形成炭素数 6 ~ 14 のアリール基、または
 無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキル基であることも好ましい。

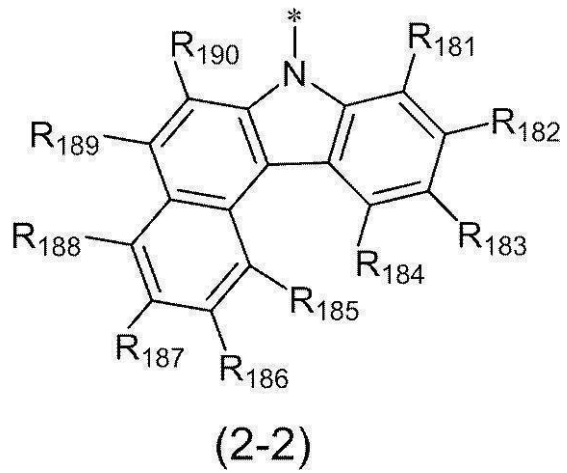
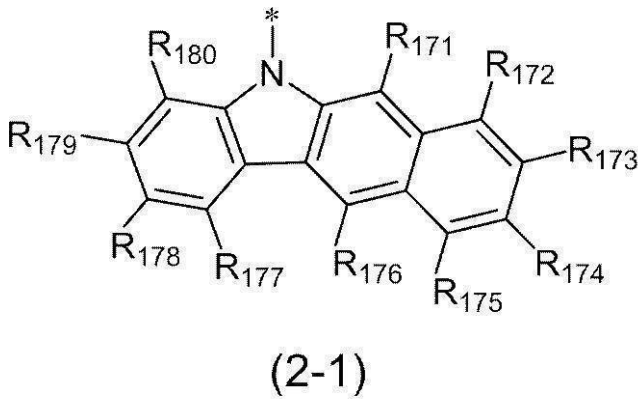
10

【0224】

本実施形態の化合物 M2 において、前記 D₁ は、下記一般式 (2-1)、(2-2)、
 (2-3) 又は (2-4) で表される基であることも好ましい。

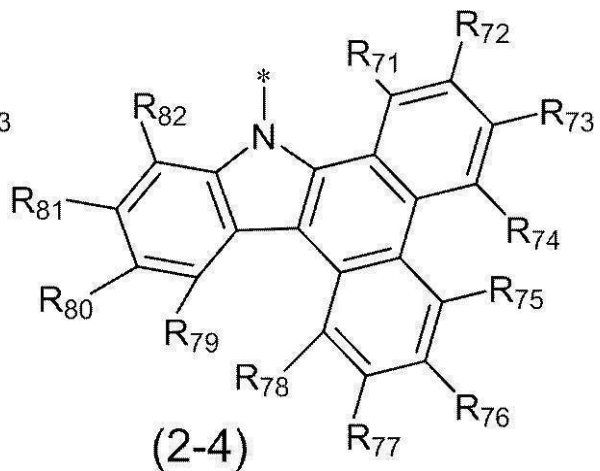
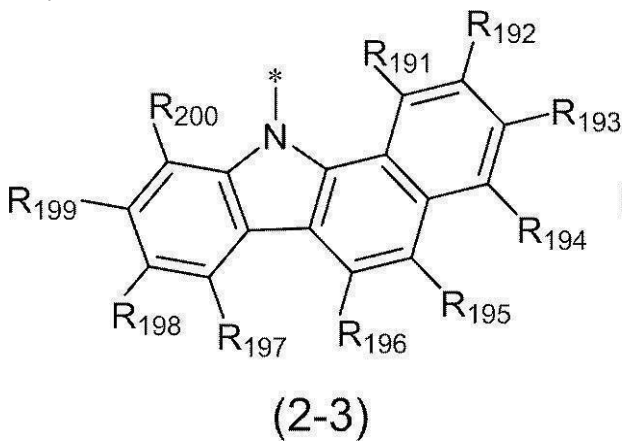
【0225】

【化89】



20

【化90】



30

40

【0226】

前記一般式 (2-1) ~ (2-4) において、R₁₇₁ ~ R₂₀₀ 及び R₇₁ ~ R₈₂ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R₁₇₁ 及び R₁₇₂ の組、R₁₇₂ 及び R₁₇₃ の組、R₁₇₃ 及び R₁₇₄ の組、R₁₇₄ 及び R₁₇₅ の組、R₁₇₅ 及び R₁₇₆ の組、R₁₇₇ 及び R₁₇₈ の組、R₁₇₈ 及び R₁₇₉ の組、R₁₇₉ 及び R₁₈₀ の組、R₁₈₁ 及び R₁₈₂ の組、R₁₈₂ 及び R₁₈₃ の組、R₁₈₃ 及び R₁₈₄ の組、R₁₈₅ 及び R₁₈₆ の組、R₁₈₆ 及び R₁₈₇ の組、R₁₈₇ 及び R₁₈₈ の組、R₁₈₈ 及び R₁₈₉ の組、R₁₈₉ 及び R₁₉₀ の組、R₁₉₁

50

及び R₁₉₂ の組、R₁₉₂ 及び R₁₉₃ の組、R₁₉₃ 及び R₁₉₄ の組、R₁₉₄ 及び R₁₉₅ の組、R₁₉₅ 及び R₁₉₆ の組、R₁₉₇ 及び R₁₉₈ の組、R₁₉₈ 及び R₁₉₉ の組、R₁₉₉ 及び R₂₀₀ の組、R₇₁ 及び R₇₂ の組、R₇₂ 及び R₇₃ の組、R₇₃ 及び R₇₄ の組、R₇₅ 及び R₇₆ の組、R₇₆ 及び R₇₇ の組、R₇₇ 及び R₇₈ の組、R₇₉ 及び R₈₀ の組、R₈₀ 及び R₈₁ の組、並びに R₈₁ 及び R₈₂ の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての R₁₇₁ ~ R₂₀₀ 及び R₇₁ ~ R₈₂ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 14 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 14 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 6 のアルキルシリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のハロゲン化アルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 14 のアリールオキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 12 のアルキルアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキルチオ基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 14 のアリールチオ基である。

* は、前記一般式 (1) 中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

【0227】

本実施形態の化合物 M2 において、前記 D₁ は、一般式 (2-1)、(2-3)、又は (2-4) で表される基であることもより好ましい。

本実施形態の化合物 M2 において、前記 D₁ は、一般式 (2-1) 又は (2-3) で表される基であることもさらに好ましい。

【0228】

本実施形態の化合物 M2 は、一般式 (1-1)、(1-4) ~ (1-7)、(1-10)、(1-14) ~ (1-17)、(1-21) 及び (1-23) ~ (1-25) のいずれかで表される化合物であり、かつ、D₁ は、一般式 (2-1)、(2-2)、(2-3)、又は (2-4) で表される基であることも好ましい。

【0229】

本実施形態の化合物 M2 は、一般式 (1-6)、(1-23) 又は (1-24) で表される化合物であり、かつ、D₁ は、一般式 (2-1)、(2-2)、(2-3)、又は (2-4) で表される基であることも好ましい。

【0230】

本実施形態の化合物 M2 は、一般式 (1-1)、(1-10) 又は (1-21) で表される化合物であり、かつ、D₁ は、一般式 (2-1)、(2-2)、(2-3)、又は (2-4) で表される基であることも好ましく、一般式 (2-1)、(2-3)、又は (2-4) で表される基であることもより好ましい。

【0231】

本実施形態の化合物 M2 において、置換基としての R₁₇₁ ~ R₂₀₀ 及び R₇₁ ~ R₈₂ は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数 6 ~ 14 のアリール基、

無置換の環形成原子数 5 ~ 14 の複素環基、または

無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキル基であることが好ましい。

【0232】

本実施形態の化合物 M2 において、R₁₇₁ ~ R₂₀₀ 及び R₇₁ ~ R₈₂ は、水素原子であることも好ましい。

10

20

30

40

50

【 0 2 3 3 】

・本実施形態の化合物 M 2 の製造方法

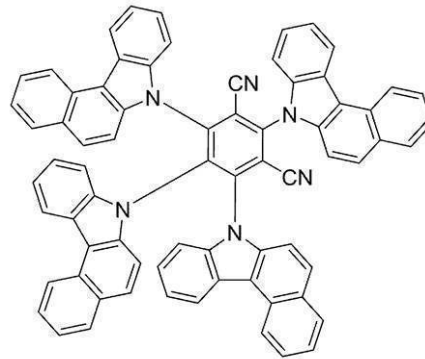
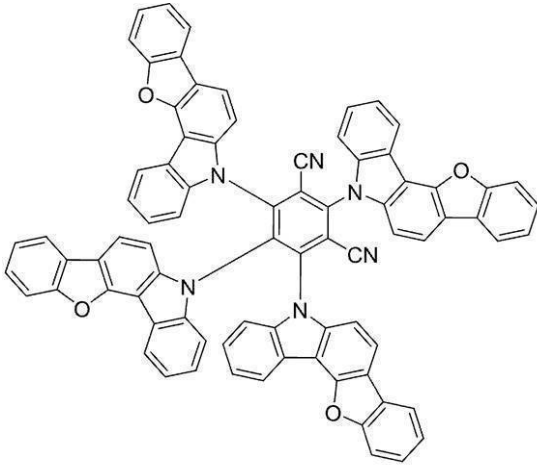
本実施形態の化合物 M 2 は、公知の方法により製造することができる。

【 0 2 3 4 】

本実施形態の化合物 M 2 の具体例としては、例えば、以下の化合物が挙げられる。ただし、本発明は、これら化合物の具体例に限定されない。

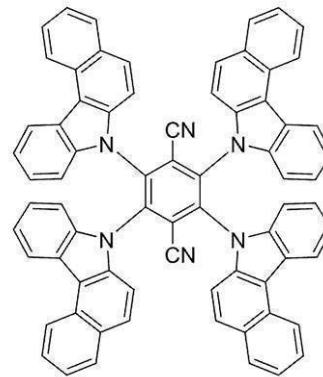
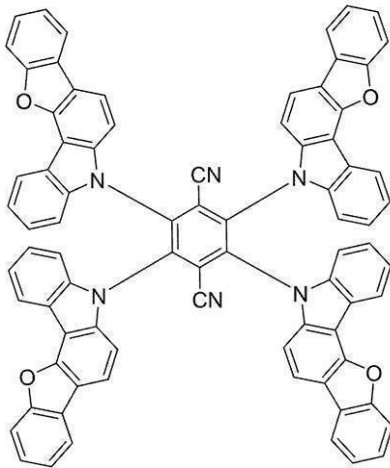
【 0 2 3 5 】

【 化 9 1 】

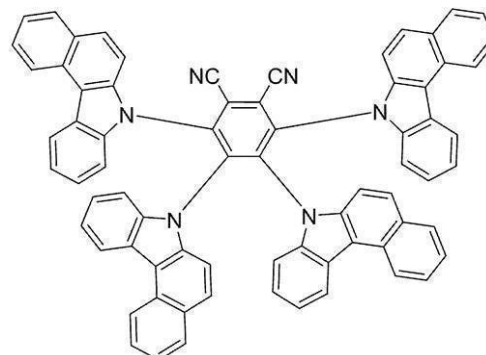
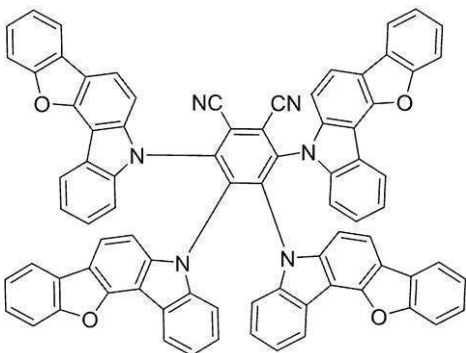


10

20



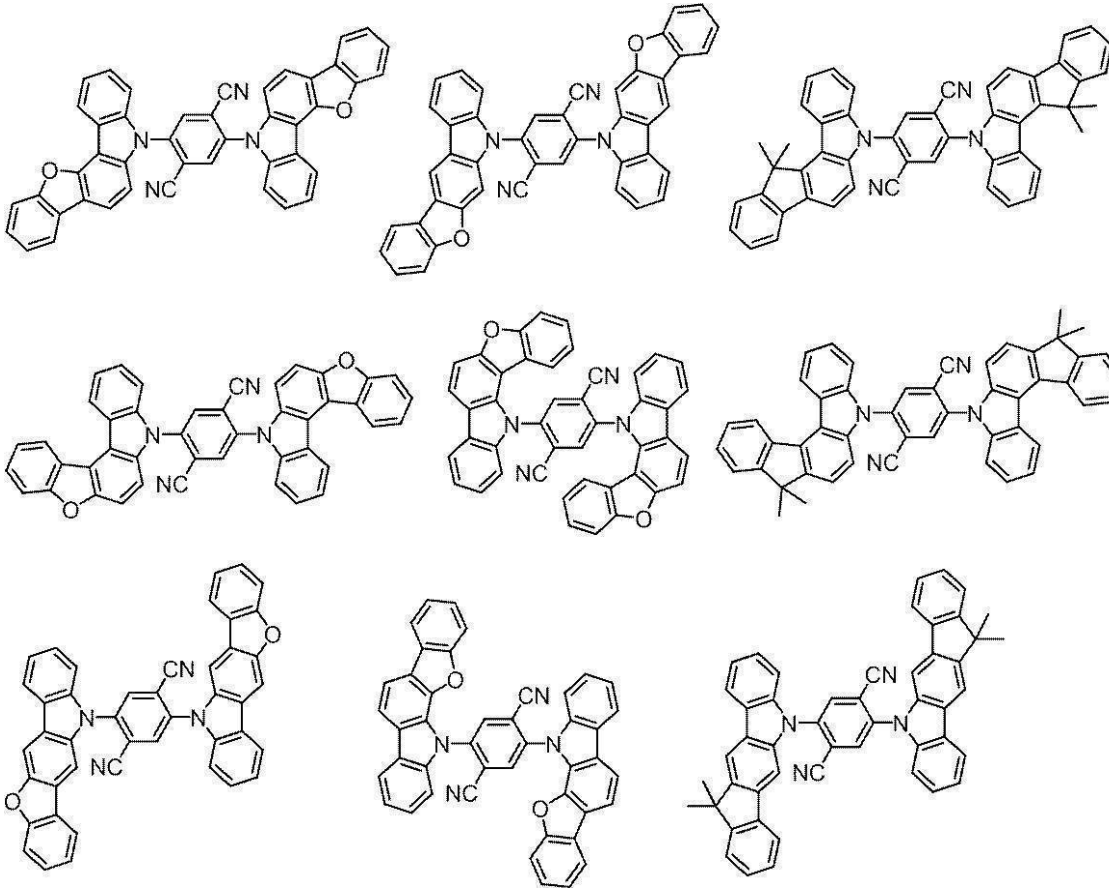
30



40

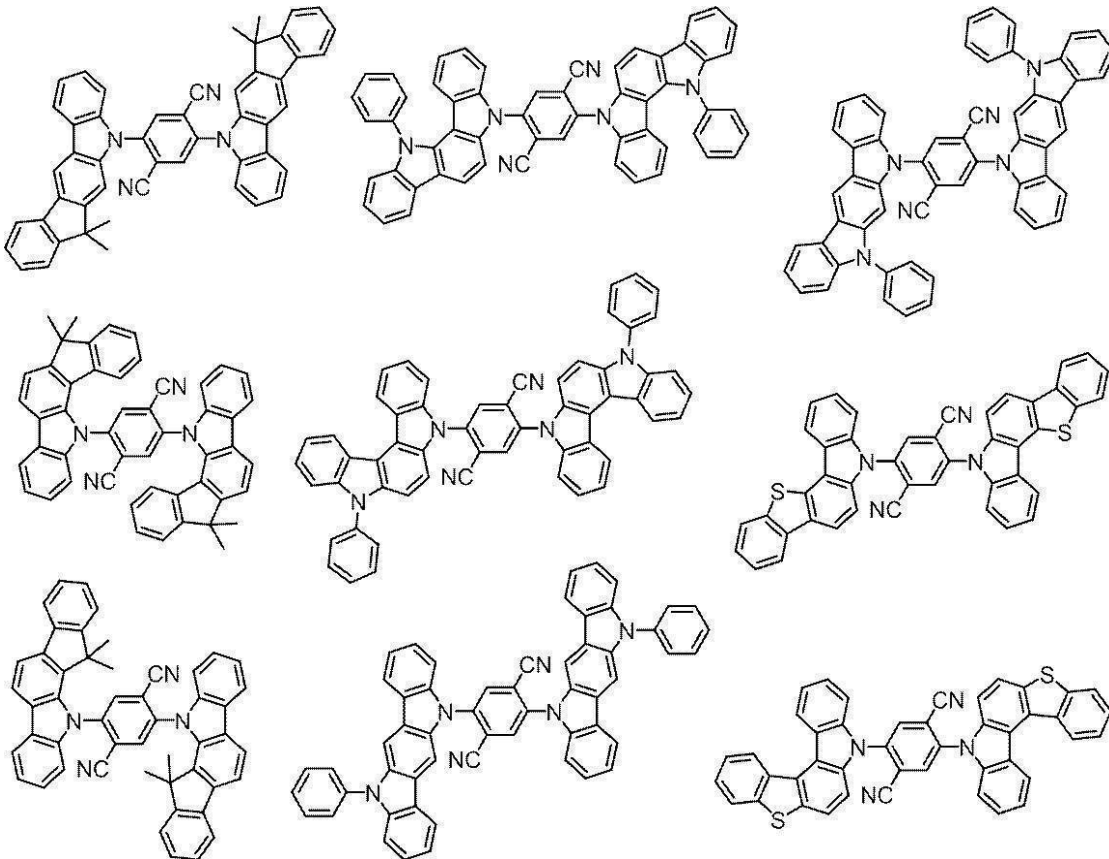
【 0 2 3 6 】

【化 9 2】



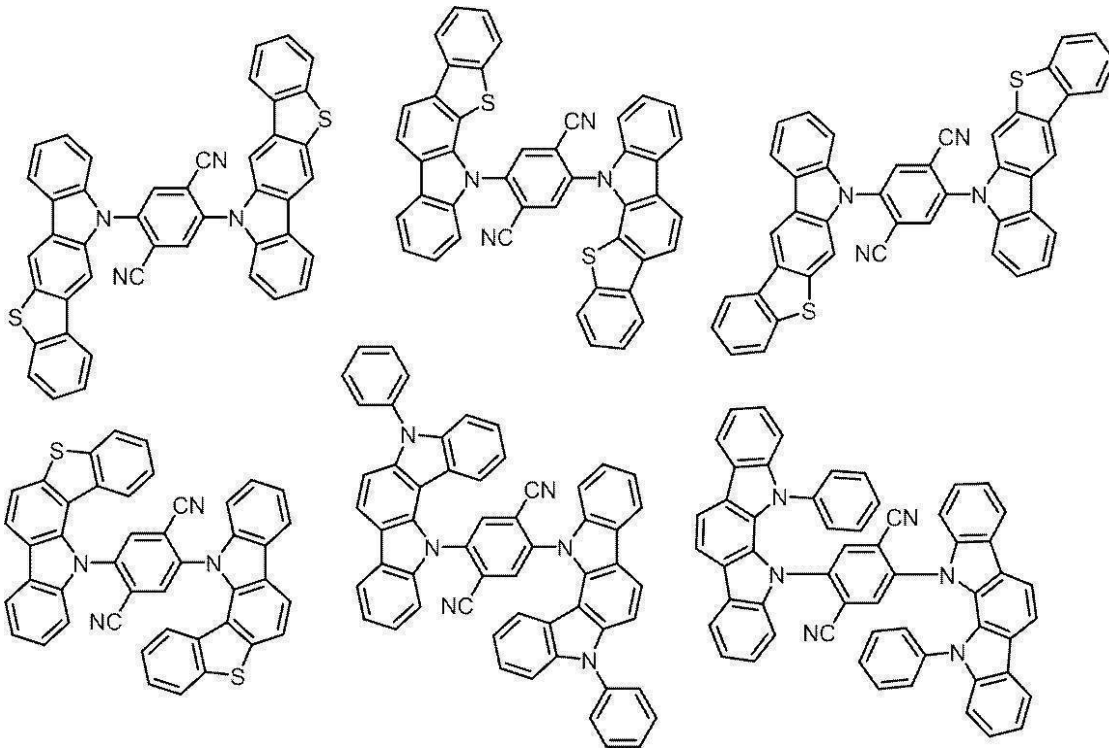
【 0 2 3 7】

【化 9 3】



【 0 2 3 8】

【化 9 4】

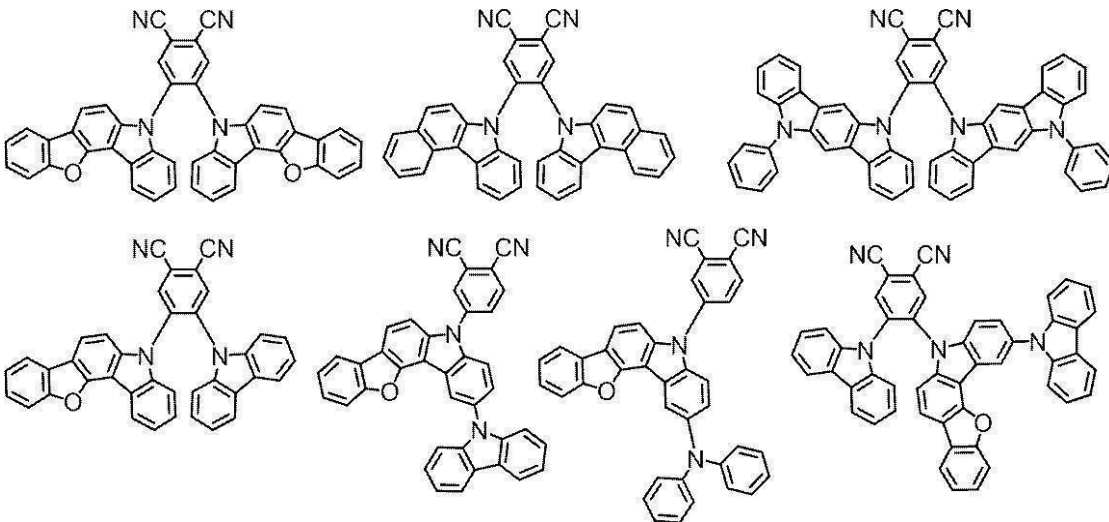


10

20

【 0 2 3 9 】

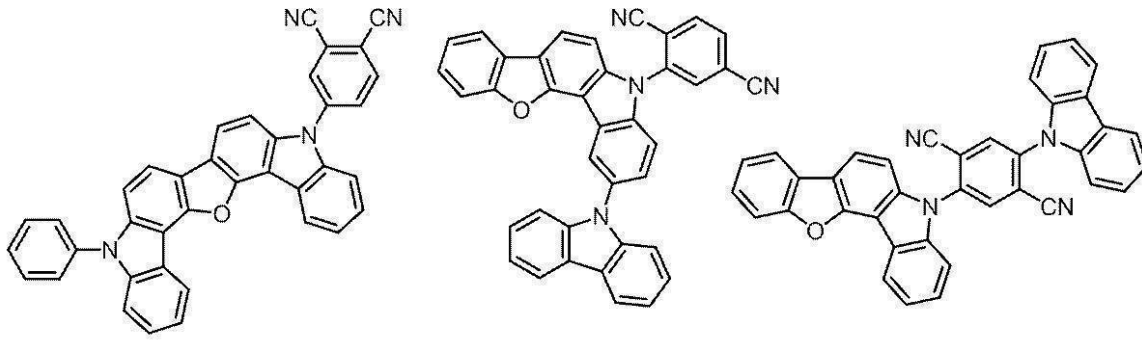
【化 9 5】



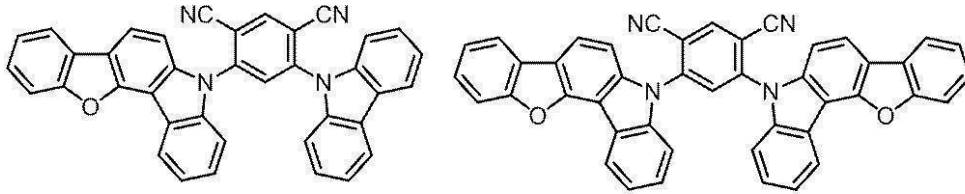
30

【 0 2 4 0 】

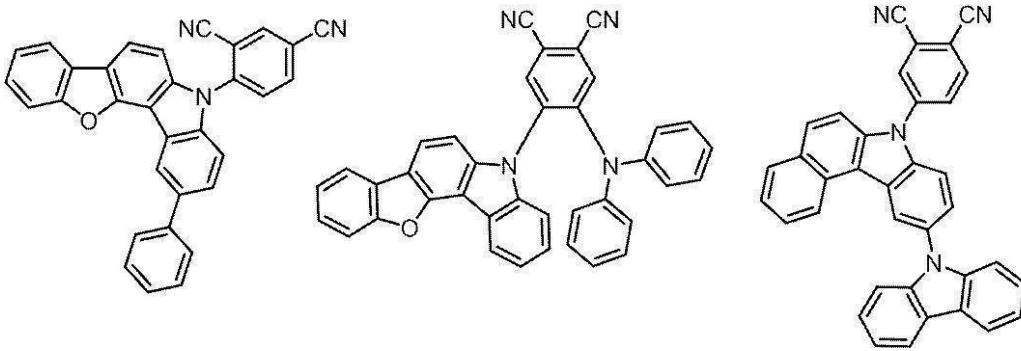
【化96】



10

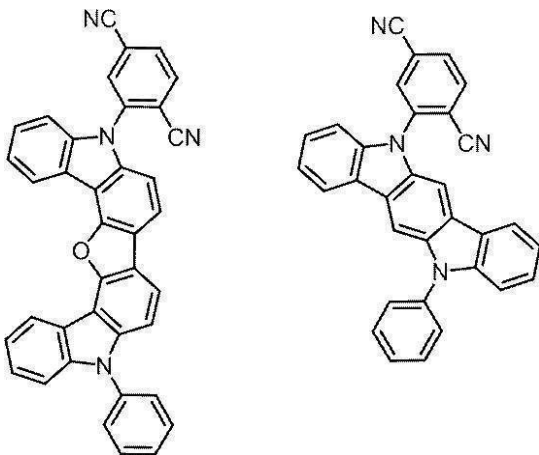


20



【0241】

【化97】

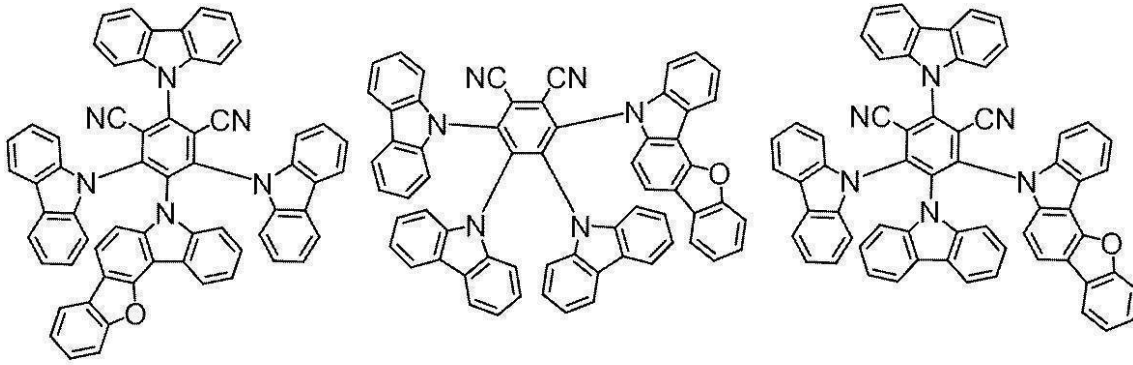


30

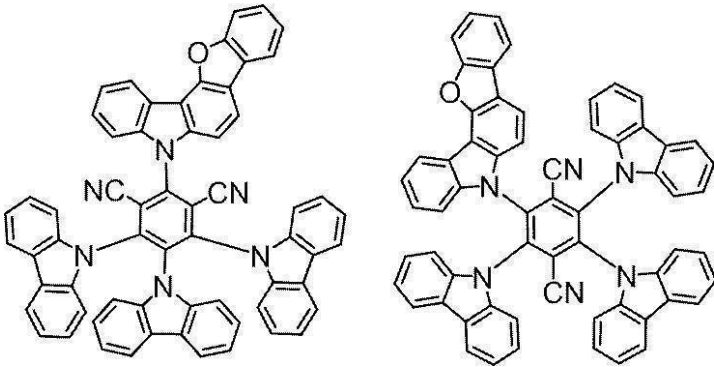
【0242】

40

【化 9 8】



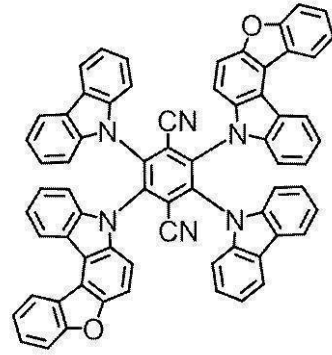
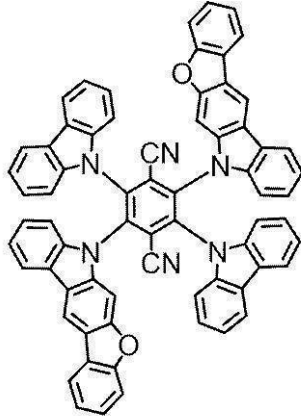
10



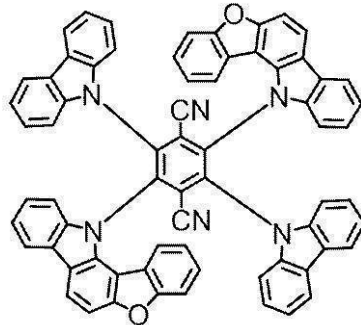
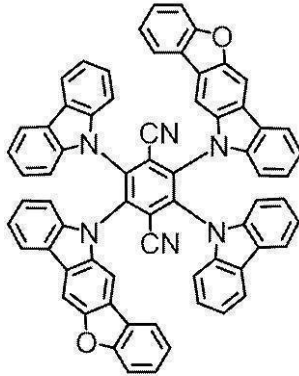
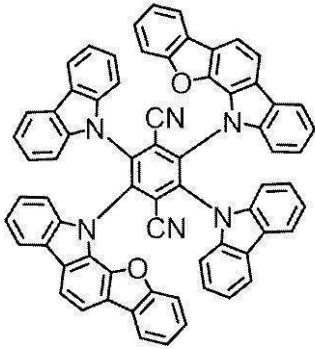
20

【 0 2 4 3 】

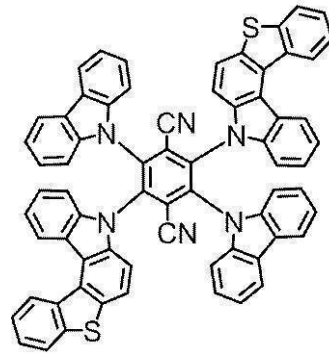
【化 9 9】



10



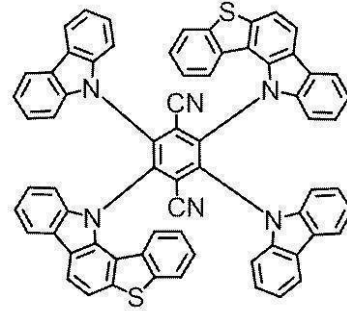
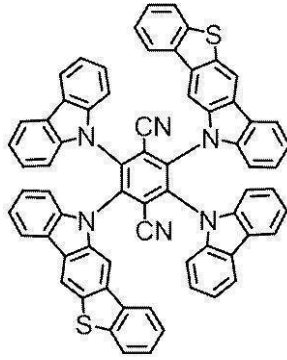
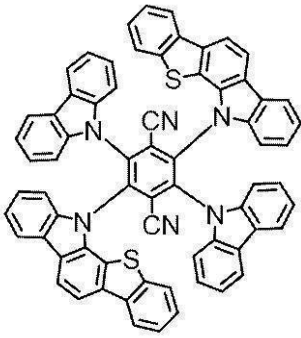
20



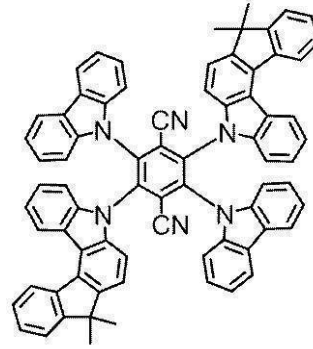
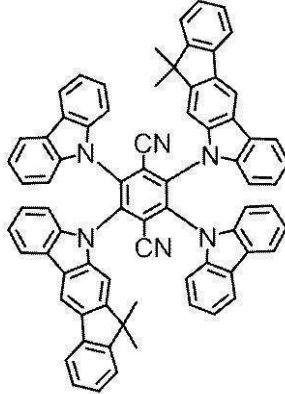
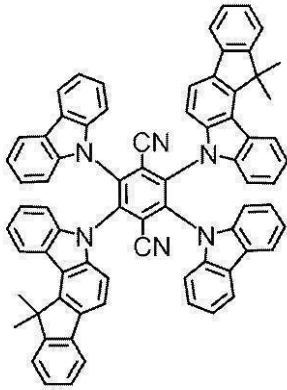
30

【 0 2 4 4】

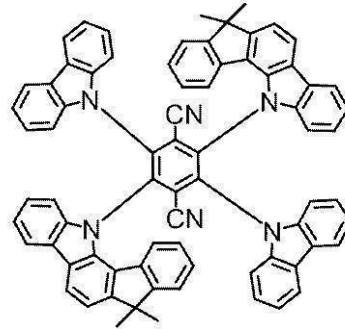
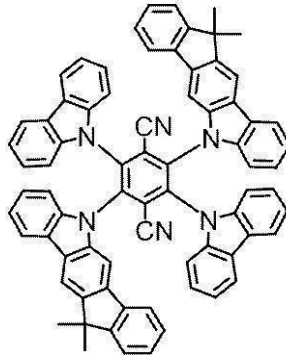
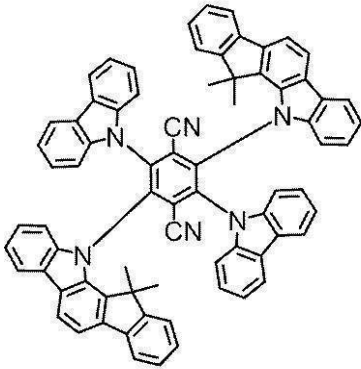
【化100】



10



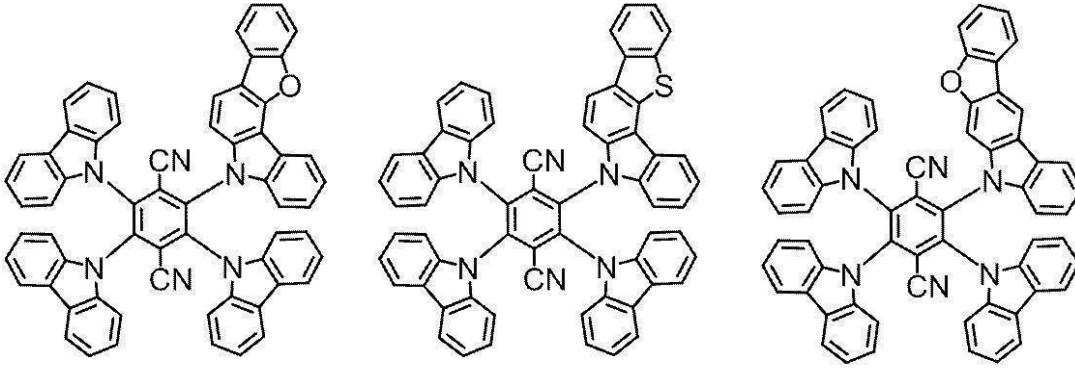
20



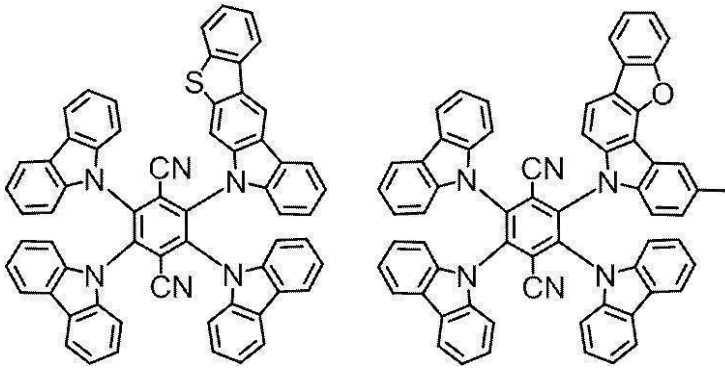
30

【0245】

【化 1 0 1】



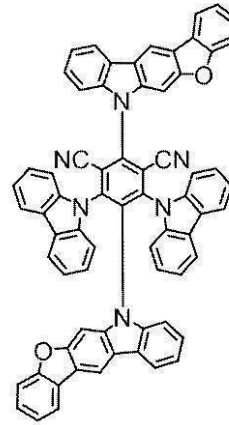
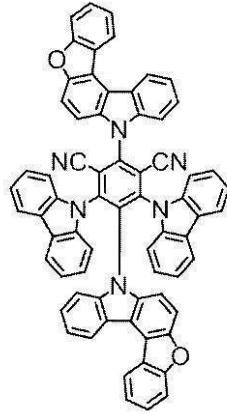
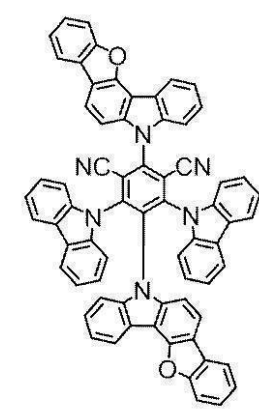
10



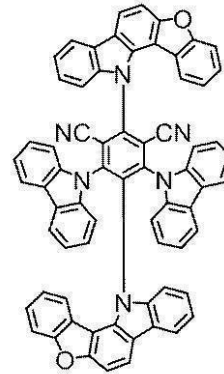
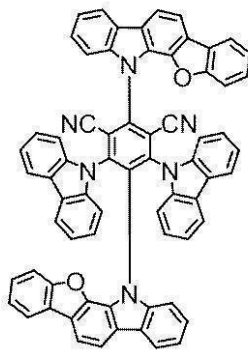
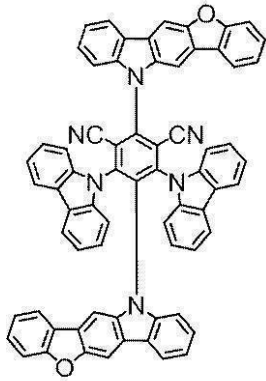
20

【 0 2 4 6 】

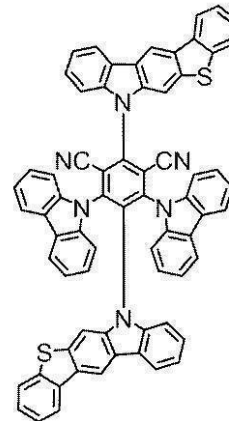
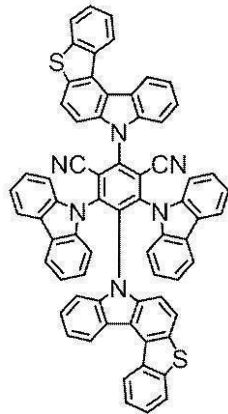
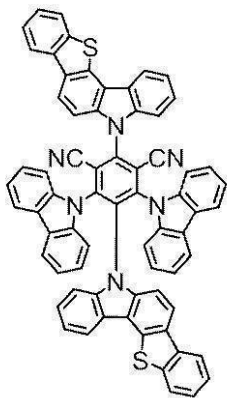
【化 1 0 2】



10



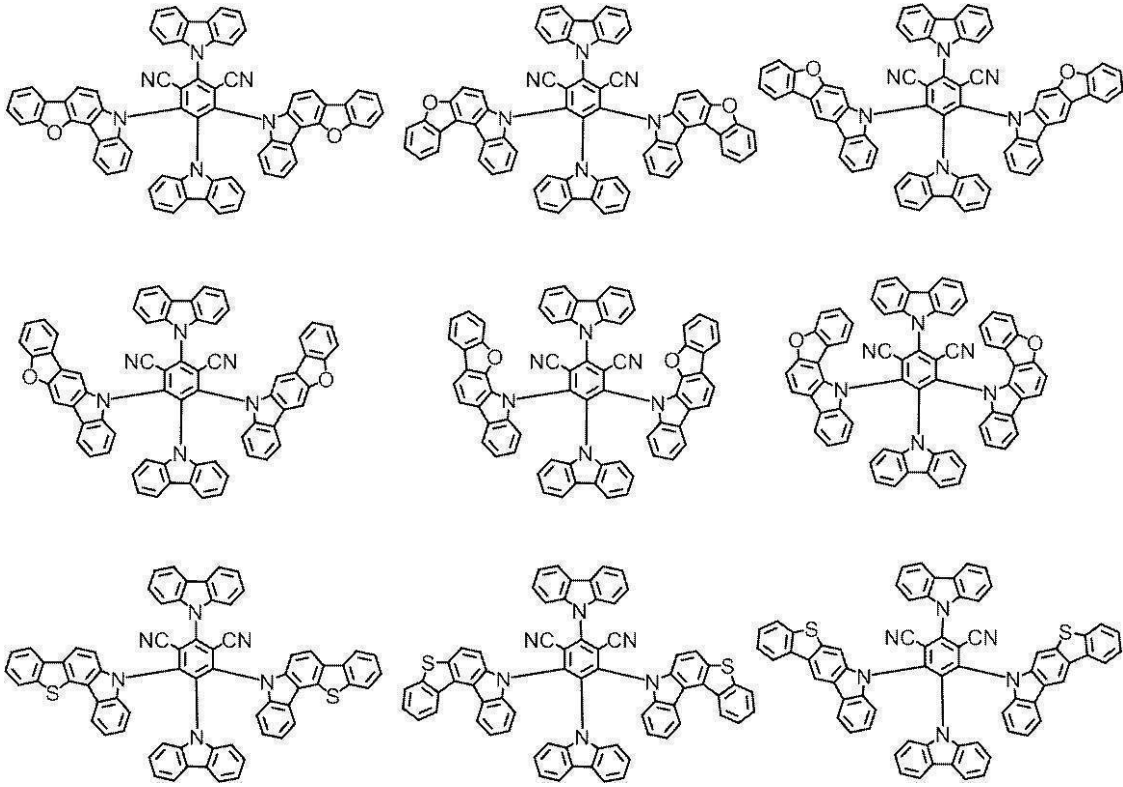
20



30

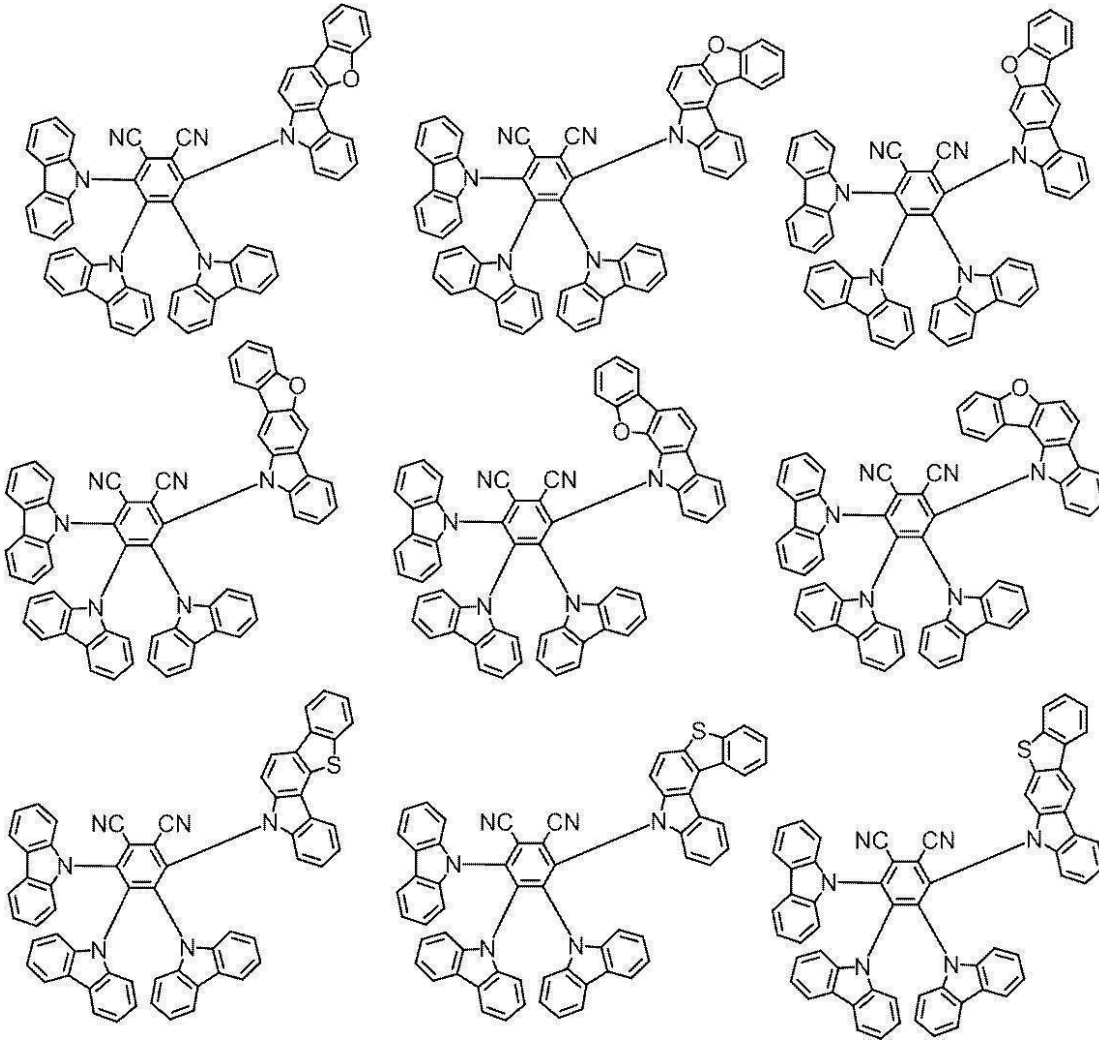
【 0 2 4 7】

【化 1 0 3】



【 0 2 4 8】

【化 1 0 4】



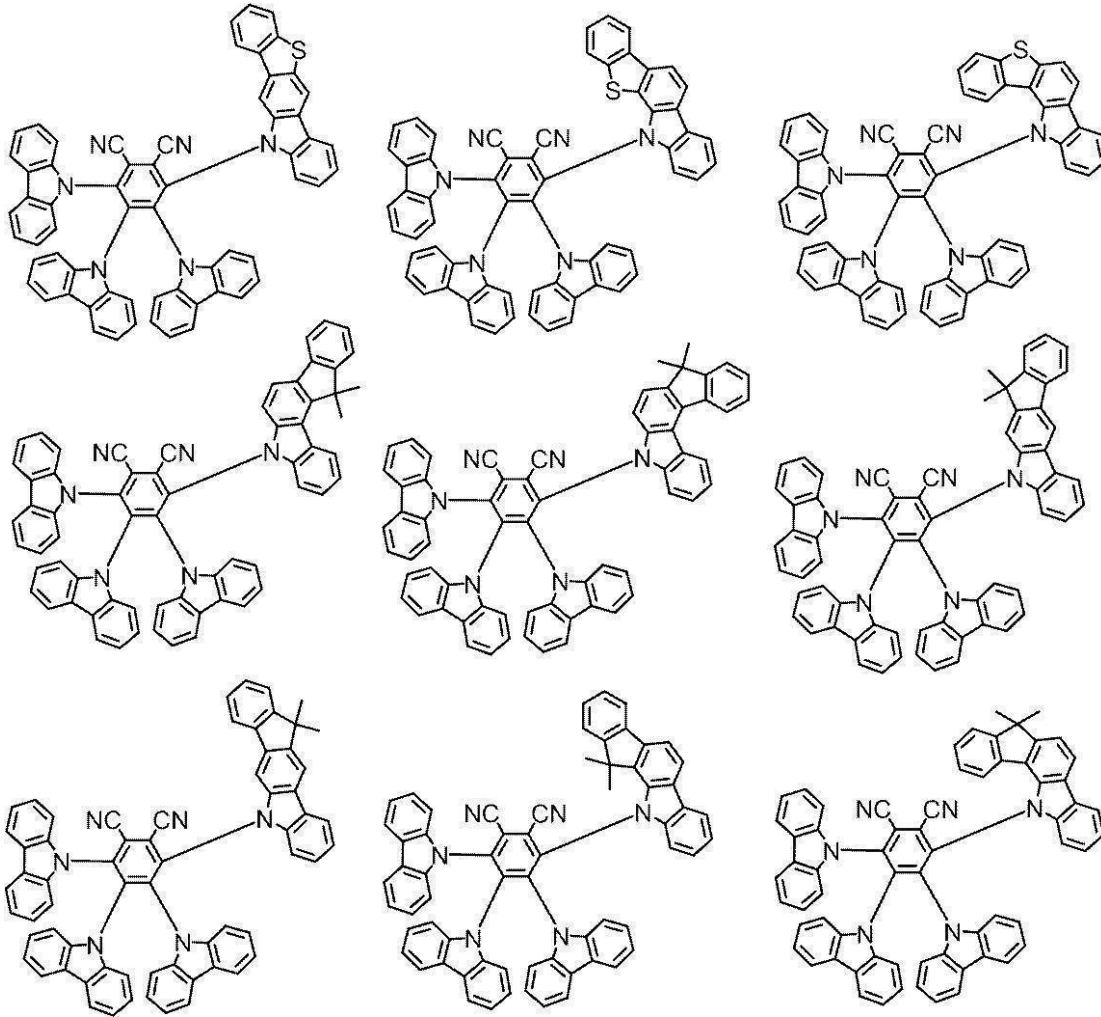
10

20

【 0 2 4 9】

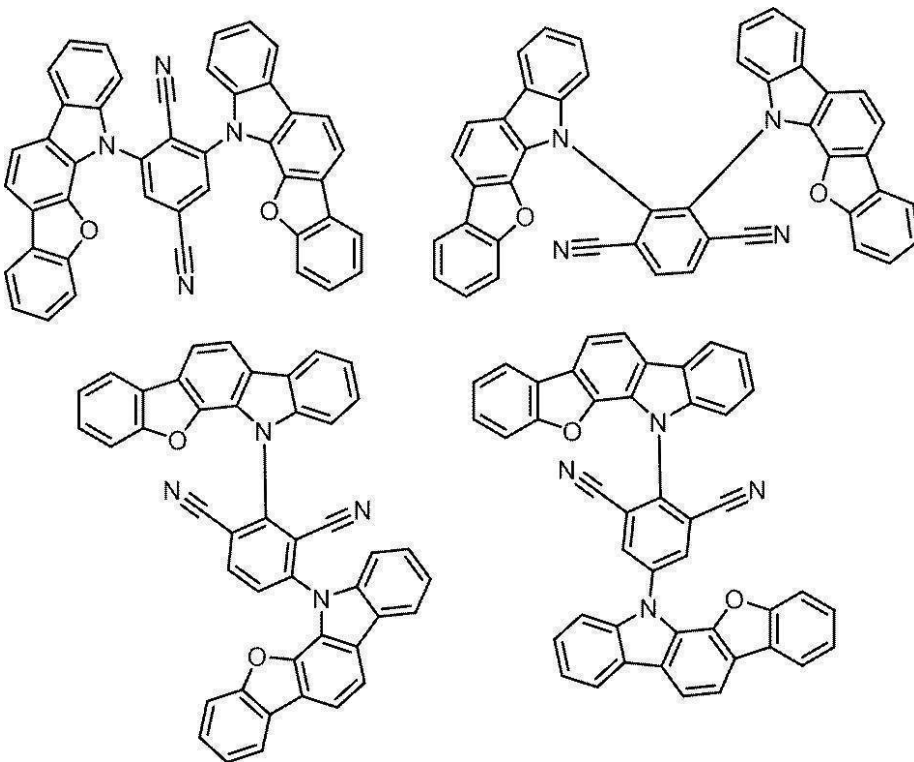
30

【化 1 0 5】

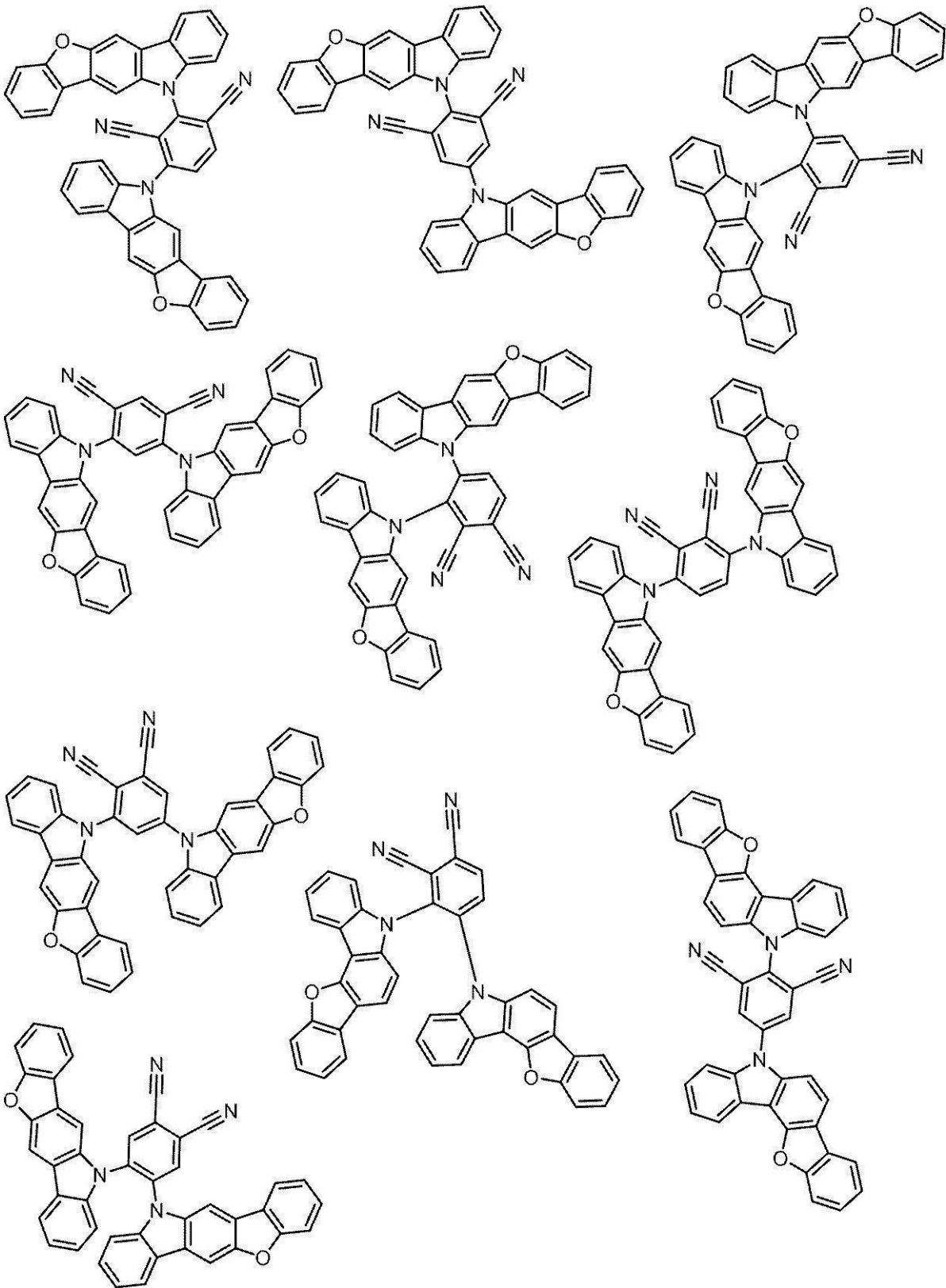


【 0 2 5 0】

【化 1 0 6】



【 0 2 5 1 】
【 化 1 0 7 】



10

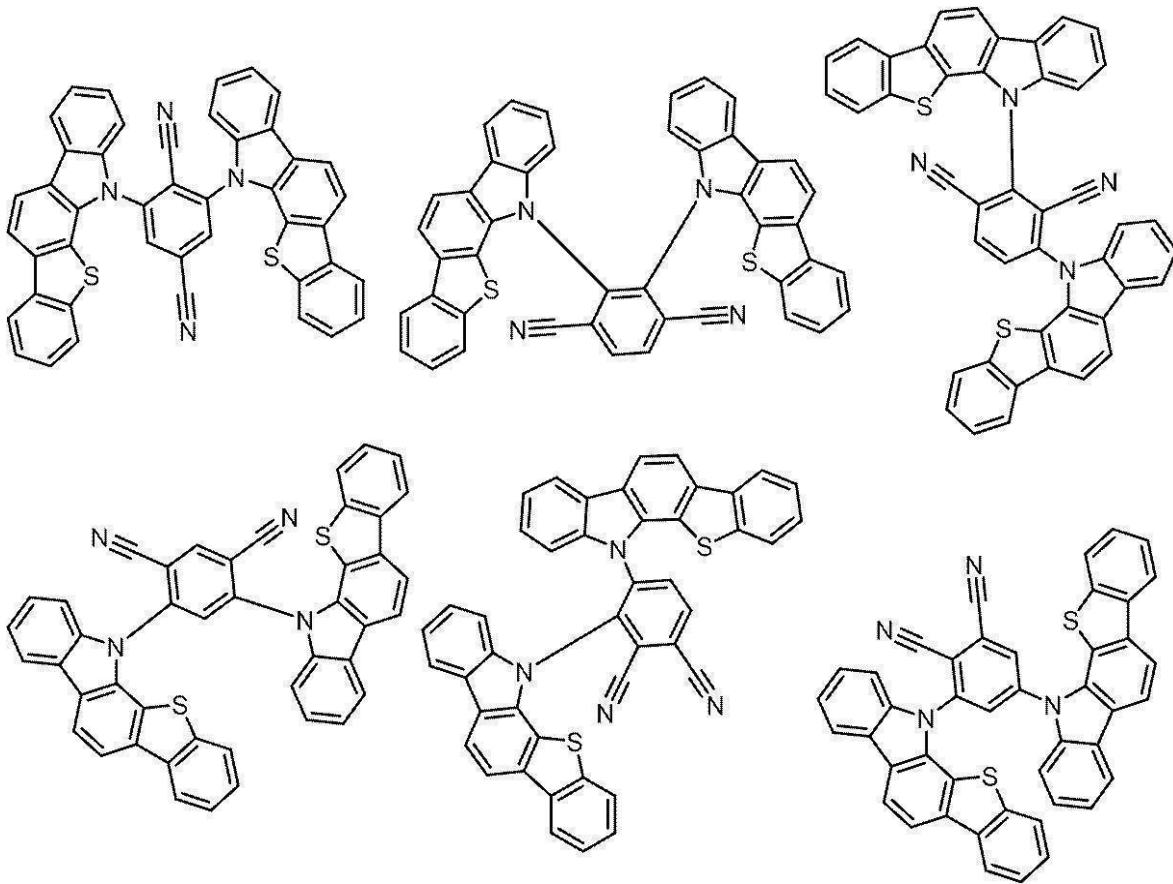
20

30

40

【 0 2 5 2 】

【化 1 0 8】

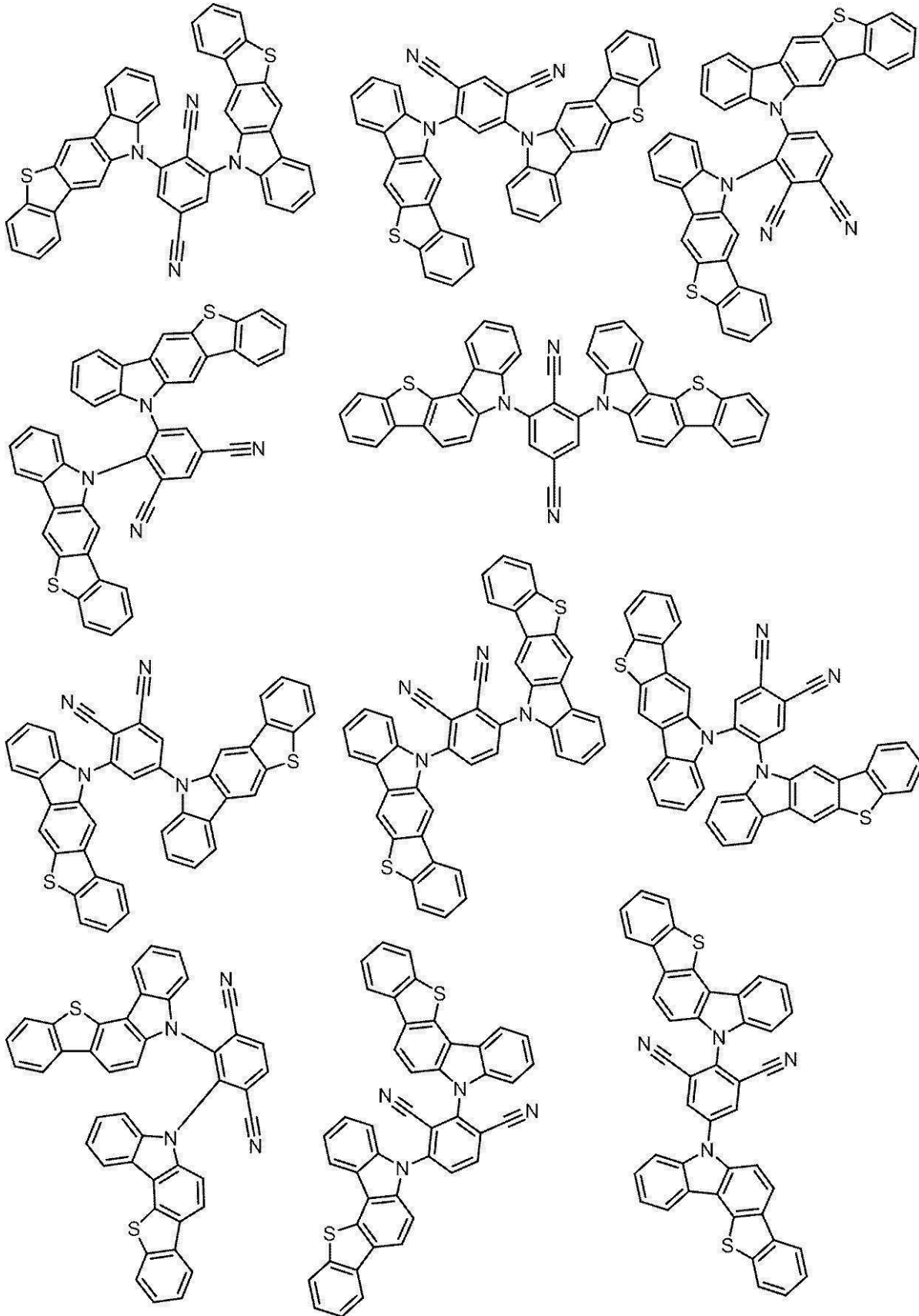


10

20

【 0 2 5 3】

【化109】



10

20

30

40

【0254】

・遅延蛍光性

遅延蛍光については、「有機半導体のデバイス物性」(安達千波矢編、講談社発行)の261~268ページで解説されている。その文献の中で、蛍光発光材料の励起一重項状態と励起三重項状態のエネルギー差 $E_{1,3}$ を小さくすることができれば、通常は遷移確

50

率が低い励起三重項状態から励起一重項状態への逆エネルギー移動が高効率で生じ、熱活性化遅延蛍光 (Thermally Activated delayed Fluorescence, TADF) が発現すると説明されている。さらに、当該文献中の図 10.38 で、遅延蛍光の発生メカニズムが説明されている。本実施形態における化合物 M2 は、このようなメカニズムで発生する熱活性化遅延蛍光を示す化合物であることが好ましい。

【0255】

一般に、遅延蛍光の発光は過渡 PL (Photoluminescence) 測定により確認できる。

【0256】

過渡 PL 測定から得た減衰曲線に基づいて遅延蛍光の挙動を解析することもできる。過渡 PL 測定とは、試料にパルスレーザーを照射して励起させ、照射を止めた後の PL 発光の減衰挙動 (過渡特性) を測定する手法である。TADF 材料における PL 発光は、最初の PL 励起で生成する一重項励起子からの発光成分と、三重項励起子を経由して生成する一重項励起子からの発光成分に分類される。最初の PL 励起で生成する一重項励起子の寿命は、ナノ秒オーダーであり、非常に短い。そのため、当該一重項励起子からの発光は、パルスレーザーを照射後、速やかに減衰する。

一方、遅延蛍光は、寿命の長い三重項励起子を経由して生成する一重項励起子からの発光のため、ゆるやかに減衰する。このように最初の PL 励起で生成する一重項励起子からの発光と、三重項励起子を経由して生成する一重項励起子からの発光とでは、時間的に大きな差がある。そのため、遅延蛍光由来の発光強度を求めることができる。

【0257】

図 2 には、過渡 PL を測定するための例示的装置の概略図が示されている。図 2 を用いた過渡 PL の測定方法、および遅延蛍光の挙動解析の一例を説明する。

【0258】

図 2 の過渡 PL 測定装置 100 は、所定波長の光を照射可能なパルスレーザー部 101 と、測定試料を収容する試料室 102 と、測定試料から放射された光を分光する分光器 103 と、2次元像を結像するためのストリークカメラ 104 と、2次元像を取り込んで解析するパーソナルコンピュータ 105 とを備える。なお、過渡 PL の測定は、図 2 に記載の装置に限定されない。

【0259】

試料室 102 に収容される試料は、マトリックス材料に対し、ドーピング材料が 12 質量%の濃度でドーピングされた薄膜を石英基板に成膜することで得られる。

【0260】

試料室 102 に収容された薄膜試料に対し、パルスレーザー部 101 からパルスレーザーを照射してドーピング材料を励起させる。励起光の照射方向に対して 90 度の方向へ発光を取り出し、取り出した光を分光器 103 で分光し、ストリークカメラ 104 内で 2次元像を結像する。その結果、縦軸が時間に対応し、横軸が波長に対応し、輝点が発光強度に対応する 2次元画像を得ることができる。この 2次元画像を所定の時間軸で切り出すと、縦軸が発光強度であり、横軸が波長である発光スペクトルを得ることができる。また、当該 2次元画像を波長軸で切り出すと、縦軸が発光強度の対数であり、横軸が時間である減衰曲線 (過渡 PL) を得ることができる。

【0261】

例えば、マトリックス材料として、下記参考化合物 H1 を用い、ドーピング材料として下記参考化合物 D1 を用いて上述のようにして薄膜試料 A を作製し、過渡 PL 測定を行った。

【0262】

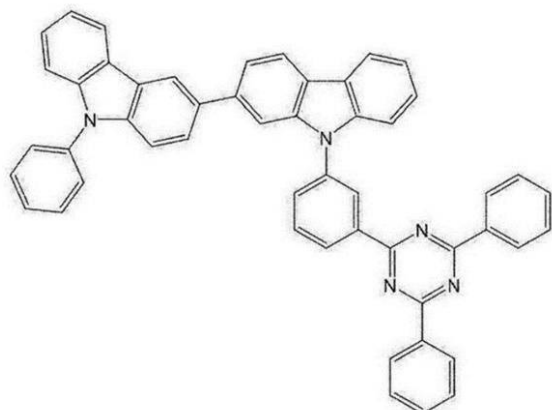
10

20

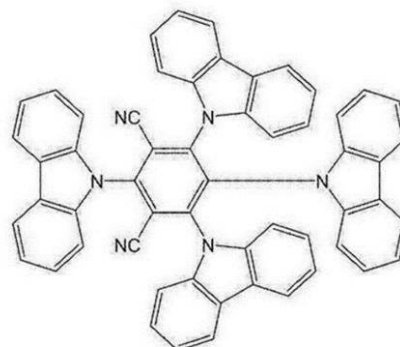
30

40

【化 1 1 0】



(参考化合物 H1)



(参考化合物 D1)

10

【 0 2 6 3】

ここでは、前述の薄膜試料 A、および薄膜試料 B を用いて減衰曲線を解析した。薄膜試料 B は、マトリックス材料として下記参考化合物 H 2 を用い、ドーピング材料として前記参考化合物 D 1 を用いて、上述のようにして薄膜試料を作製した。

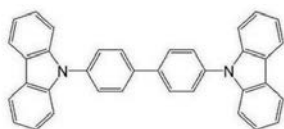
【 0 2 6 4】

図 3 には、薄膜試料 A および薄膜試料 B について測定した過渡 P L から得た減衰曲線が示されている。

20

【 0 2 6 5】

【化 1 1 1】



(参考化合物 H2)

【 0 2 6 6】

上記したように過渡 P L 測定によって、縦軸を発光強度とし、横軸を時間とする発光減衰曲線を得ることができる。この発光減衰曲線に基づいて、光励起により生成した一重項励起状態から発光する蛍光と、三重項励起状態を経由し、逆エネルギー移動により生成する一重項励起状態から発光する遅延蛍光との、蛍光強度比を見積もることができる。遅延蛍光性の材料では、素早く減衰する蛍光の強度に対し、緩やかに減衰する遅延蛍光の強度の割合が、ある程度大きい。

30

【 0 2 6 7】

具体的には、遅延蛍光性の材料からの発光としては、P r o m p t 発光（即時発光）と、D e l a y 発光（遅延発光）とが存在する。P r o m p t 発光（即時発光）とは、当該遅延蛍光性の材料が吸収する波長のパルス光（パルスレーザーから照射される光）で励起された後、当該励起状態から即座に観察される発光である。D e l a y 発光（遅延発光）とは、当該パルス光による励起後、即座には観察されず、その後観察される発光である。

40

【 0 2 6 8】

P r o m p t 発光と D e l a y 発光の量とその比は、“N a t u r e 4 9 2 , 2 3 4 - 2 3 8 , 2 0 1 2 ”（参考文献 1）に記載された方法と同様の方法により求めることができる。なお、P r o m p t 発光と D e l a y 発光の量の算出に使用される装置は、前記参考文献 1 に記載の装置、または図 2 に記載の装置に限定されない。

【 0 2 6 9】

また、本明細書では、化合物 M 2 の遅延蛍光性の測定には、次に示す方法により作製した試料を用いる。例えば、化合物 M 2 をトルエンに溶解し、自己吸収の寄与を取り除くた

50

め励起波長において吸光度が0.05以下の希薄溶液を調製する。また酸素による消光を防ぐため、試料溶液を凍結脱気した後にアルゴン雰囲気下で蓋付きのセルに封入することで、アルゴンで飽和された酸素フリーの試料溶液とする。

上記試料溶液の蛍光スペクトルを分光蛍光光度計FP-8600（日本分光社製）で測定し、また同条件で9,10-ジフェニルアントラセンのエタノール溶液の蛍光スペクトルを測定する。両スペクトルの蛍光面積強度を用いて、Morris et al. J. Phys. Chem. 80 (1976) 969中の(1)式により全蛍光量子収率を算出する。

【0270】

Prompt 発光と Delay 発光の量とその比は、“Nature 492, 234-238, 2012”（参考文献1）に記載された方法と同様の方法により求めることができる。なお、Prompt 発光と Delay 発光の量の算出に使用される装置は、前記参考文献1に記載の装置、または図2に記載の装置に限定されない。

本実施形態においては、測定対象化合物（化合物M2）の Prompt 発光（即時発光）の量を X_P とし、Delay 発光（遅延発光）の量を X_D としたときに、 X_D / X_P の値が0.05以上であることが好ましい。

本明細書における化合物M2以外の化合物の Prompt 発光と Delay 発光の量とその比の測定も、化合物M2の Prompt 発光と Delay 発光の量とその比の測定と同様である。

【0271】

< 発光層における化合物M3及び化合物M2の関係 >

本実施形態の有機EL素子において、化合物M2の一重項エネルギー $S_1(M2)$ と、化合物M3の一重項エネルギー $S_1(M3)$ とは、下記数式（数1）の関係を満たす。

$$S_1(M3) > S_1(M2) \quad (\text{数1})$$

【0272】

化合物M3の77[K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M3)$ は、化合物M2の77[K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M2)$ よりも大きいことが好ましい。すなわち、下記数式（数11）の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{77K}(M3) > T_{77K}(M2) \quad \dots (\text{数11})$$

【0273】

本実施形態の有機EL素子を発光させたときに、発光層において、化合物M3が主に発光していないことが好ましい。

【0274】

・三重項エネルギーと77[K]におけるエネルギーギャップとの関係

ここで、三重項エネルギーと77[K]におけるエネルギーギャップとの関係について説明する。本実施形態では、77[K]におけるエネルギーギャップは、通常定義される三重項エネルギーとは異なる点がある。

三重項エネルギーの測定は、次のようにして行われる。まず、測定対象となる化合物を適切な溶媒中に溶解した溶液を石英ガラス管内に封入した試料を作製する。この試料について、低温（77[K]）で燐光スペクトル（縦軸：燐光発光強度、横軸：波長とする。）を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値に基づいて、所定の換算式から三重項エネルギーを算出する。

ここで、本実施形態に係る化合物の内、熱活性遅延蛍光性の化合物は、 S_T が小さい化合物であることが好ましい。 S_T が小さいと、低温（77[K]）状態でも、項間交差、及び逆項間交差が起こりやすく、励起一重項状態と励起三重項状態とが混在する。その結果、上記と同様にして測定されるスペクトルは、励起一重項状態、及び励起三重項状態の両者からの発光を含んでおり、いずれの状態から発光したのかについて峻別することは困難であるが、基本的には三重項エネルギーの値が支配的と考えられる。

そのため、本実施形態では、通常三重項エネルギー T と測定手法は同じであるが、その厳密な意味において異なることを区別するため、次のようにして測定される値をエネルギー

10

20

30

40

50

ギーギャップ T_{77K} と称する。測定対象となる化合物を EPA (ジエチルエーテル：イソペンタン：エタノール = 5 : 5 : 2 (容積比)) 中に、濃度が $10 \mu\text{mol/L}$ となるように溶解し、この溶液を石英セル中に入れて測定試料とする。この測定試料について、低温 (77 [K]) で燐光スペクトル (縦軸：燐光発光強度、横軸：波長とする。) を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $e d g e \text{ [nm]}$ に基づいて、次の換算式 (F1) から算出されるエネルギー量を 77 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} とする。

$$\text{換算式 (F1)} : T_{77K} \text{ [eV]} = 1239.85 / e d g e$$

【0275】

燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線は以下のように引く。燐光スペクトルの短波長側から、スペクトルの極大値のうち、最も短波長側の極大値までスペクトル曲線上を移動する際に、長波長側に向けて曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち上がるにつれ (つまり縦軸が増加するにつれ)、傾きが増加する。この傾きの値が極大値をとる点において引いた接線 (すなわち変曲点における接線) が、当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

なお、スペクトルの最大ピーク強度の 15% 以下のピーク強度をもつ極大点は、上述の最も短波長側の極大値には含めず、最も短波長側の極大値に最も近い、傾きの値が極大値をとる点において引いた接線を当該燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対する接線とする。

燐光の測定には、(株)日立ハイテクノロジー製の F-4500 形分光蛍光光度計本体を用いることができる。なお、測定装置はこの限りではなく、冷却装置、及び低温用容器と、励起光源と、受光装置とを組み合わせることにより、測定してもよい。

【0276】

・一重項エネルギー S_1

溶液を用いた一重項エネルギー S_1 の測定方法 (溶液法と称する場合がある。) としては、下記の方法が挙げられる。

測定対象となる化合物の $10 \mu\text{mol/L}$ トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温 (300 K) でこの試料の吸収スペクトル (縦軸：吸収強度、横軸：波長とする。) を測定する。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 $e d g e \text{ [nm]}$ を次に示す換算式 (F2) に代入して一重項エネルギーを算出する。

$$\text{換算式 (F2)} : S_1 \text{ [eV]} = 1239.85 / e d g e$$

吸収スペクトル測定装置としては、例えば、日立社製の分光光度計 (装置名：U3310) が挙げられるが、これに限定されない。

【0277】

吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線は以下のように引く。吸収スペクトルの極大値のうち、最も長波長側の極大値から長波長方向にスペクトル曲線上を移動する際に、曲線上の各点における接線を考える。この接線は、曲線が立ち下がるにつれ (つまり縦軸の値が減少するにつれ)、傾きが減少しその後増加することを繰り返す。傾きの値が最も長波長側 (ただし、吸光度が 0.1 以下となる場合は除く) で極小値をとる点において引いた接線を当該吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対する接線とする。

なお、吸光度の値が 0.2 以下の極大点は、上記最も長波長側の極大値には含めない。

【0278】

本実施形態では、一重項エネルギー S_1 と、 77 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} との差 ($S_1 - T_{77K}$) を ST として定義する。

【0279】

本実施形態において、化合物 M2 の一重項エネルギー S_1 (M2) と、化合物 M2 の 77 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} (M2) との差 ST (M2) は、好ましくは 0.3 eV 未満、より好ましくは 0.2 eV 未満、さらに好ましくは 0.1 eV 未満、よりさらに好ましくは 0.01 eV 未満である。すなわち、 ST (M2) は、下記数

10

20

30

40

50

式(数1A)~(数1D)の関係を満たすことが好ましい。

$$ST(M2) = S_1(M2) - T_{77K}(M2) < 0.3 \text{ eV (数1A)}$$

$$ST(M2) = S_1(M2) - T_{77K}(M2) < 0.2 \text{ eV (数1B)}$$

$$ST(M2) = S_1(M2) - T_{77K}(M2) < 0.1 \text{ eV (数1C)}$$

$$ST(M2) = S_1(M2) - T_{77K}(M2) < 0.01 \text{ eV (数1D)}$$

【0280】

・発光層の膜厚

本実施形態に係る有機EL素子における発光層の膜厚は、好ましくは5nm以上50nm以下、より好ましくは7nm以上50nm以下、最も好ましくは10nm以上50nm以下である。5nm以上であると、発光層形成及び色度の調整が容易になりやすく、50nm以下であると、駆動電圧の上昇が抑制されやすい。

10

【0281】

・発光層における化合物の含有率

発光層に含まれている化合物M2及び化合物M3の含有率は、例えば、以下の範囲であることが好ましい。

化合物M2の含有率は、10質量%以上80質量%以下であることが好ましく、10質量%以上60質量%以下であることがより好ましく、20質量%以上60質量%以下であることがさらに好ましい。

化合物M3の含有率は、20質量%以上90質量%以下であることが好ましく、40質量%以上90質量%以下であることがより好ましく、40質量%以上80質量%以下であることがさらに好ましい。

20

なお、本実施形態は、発光層に、化合物M2及び化合物M3以外の材料が含まれることを除外しない。

発光層は、化合物M2を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。発光層は、化合物M3を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

【0282】

図4は、発光層における化合物M3、及び化合物M2のエネルギー準位、並びにエネルギー移動の関係を示す図である。図4において、S0は、基底状態を表す。S1(M2)は、化合物M2の最低励起一重項状態を表し、T1(M2)は、化合物M2の最低励起三重項状態を表す。S1(M3)は、化合物M3の最低励起一重項状態を表し、T1(M3)は、化合物M3の最低励起三重項状態を表す。図4中の破線の矢印は、各励起状態間のエネルギー移動を表す。化合物M3の最低励起一重項状態S1からのフェルスター移動、または最低励起三重項状態T1からのデクスター移動により、化合物M2の最低励起一重項状態S1または最低励起三重項状態T1に、それぞれエネルギー移動する。さらに、化合物M2としてST(M2)の小さな材料を用いると、化合物M2の最低励起三重項状態T1は熱エネルギーによって最低励起一重項状態S1に逆項間交差することが可能である。この結果、化合物M2の最低励起一重項状態S1からの蛍光発光を観測することができる。このTADF機構による遅延蛍光を利用することによっても、理論的に内部効率を100%まで高めることができると考えられている。

30

【0283】

本実施形態の有機EL素子は、発光層に、遅延蛍光性の化合物M2と、前記化合物M2よりも大きな一重項エネルギーを有する化合物M3(前記一般式(100)で表される化合物M3)と、を含んでいる。

40

本実施形態の有機EL素子は、表示装置および発光装置等の電子機器に使用できる。

【0284】

有機EL素子の構成についてさらに説明する。

【0285】

(基板)

基板は、有機EL素子の支持体として用いられる。基板としては、例えば、ガラス、石英、及びプラスチック等を用いることができる。また、可撓性基板を用いてもよい。可撓

50

性基板とは、折り曲げることができる（フレキシブル）基板のことであり、例えば、プラスチック基板等が挙げられる。プラスチック基板を形成する材料としては、例えば、ポリカーボネート、ポリアリレート、ポリエーテルスルホン、ポリプロピレン、ポリエステル、ポリフッ化ビニル、ポリ塩化ビニル、ポリイミド、及びポリエチレンナフタレート等が挙げられる。また、無機蒸着フィルムを用いることもできる。

【0286】

（陽極）

基板上に形成される陽極には、仕事関数の大きい（具体的には4.0 eV以上）金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム - 酸化スズ（ITO: Indium Tin Oxide）、珪素もしくは酸化珪素を含有した酸化インジウム - 酸化スズ、酸化インジウム - 酸化亜鉛、酸化タングステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、グラフェン等が挙げられる。その他、金（Au）、白金（Pt）、ニッケル（Ni）、タングステン（W）、クロム（Cr）、モリブデン（Mo）、鉄（Fe）、コバルト（Co）、銅（Cu）、パラジウム（Pd）、チタン（Ti）、または金属材料の窒化物（例えば、窒化チタン）等が挙げられる。

10

【0287】

これらの材料は、通常、スパッタリング法により成膜される。例えば、酸化インジウム - 酸化亜鉛は、酸化インジウムに対し1質量%以上10質量%以下の酸化亜鉛を加えたターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。また、例えば、酸化タングステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウムは、酸化インジウムに対し酸化タングステンを0.5質量%以上5質量%以下、酸化亜鉛を0.1質量%以上1質量%以下含有したターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。その他、真空蒸着法、塗布法、インクジェット法、スピンコート法などにより作製してもよい。

20

【0288】

陽極上に形成されるEL層のうち、陽極に接して形成される正孔注入層は、陽極の仕事関数に関係なく正孔（ホール）注入が容易である複合材料を用いて形成されるため、電極材料として可能な材料（例えば、金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物、その他、元素周期表の第1族または第2族に属する元素も含む）を用いることができる。

30

【0289】

仕事関数の小さい材料である、元素周期表の第1族または第2族に属する元素、すなわちリチウム（Li）及びセシウム（Cs）等のアルカリ金属、マグネシウム（Mg）、カルシウム（Ca）及びストロンチウム（Sr）等のアルカリ土類金属、並びにこれらを含む合金（例えば、MgAg、AlLi）、ユーロピウム（Eu）及びイッテルビウム（Yb）等の希土類金属並びにこれらを含む合金等を用いることもできる。なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、およびこれらを含む合金を用いて陽極を形成する場合には、真空蒸着法やスパッタリング法を用いることができる。さらに、銀ペーストなどを用いる場合には、塗布法やインクジェット法などを用いることができる。

40

【0290】

（陰極）

陰極には、仕事関数の小さい（具体的には3.8 eV以下）金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。このような陰極材料の具体例としては、元素周期表の第1族または第2族に属する元素、すなわちリチウム（Li）及びセシウム（Cs）等のアルカリ金属、マグネシウム（Mg）、カルシウム（Ca）及びストロンチウム（Sr）等のアルカリ土類金属、並びにこれらを含む合金（例えば、MgAg、AlLi）、ユーロピウム（Eu）及びイッテルビウム（Yb）等の希土類金属並びにこれらを含む合金等が挙げられる。

【0291】

50

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

【0292】

なお、電子注入層を設けることにより、仕事関数の大小に関わらず、Al、Ag、ITO、グラフェン、珪素もしくは酸化珪素を含有した酸化インジウム-酸化スズ等様々な導電性材料を用いて陰極を形成することができる。これらの導電性材料は、スパッタリング法やインクジェット法、スピンコート法などを用いて成膜することができる。

【0293】

(正孔注入層)

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

【0294】

また、正孔注入性の高い物質としては、低分子の有機化合物である4,4',4''-トリス(N,N-ジフェニルアミノ)トリフェニルアミン(略称:TDATA)、4,4',4''-トリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン(略称:MTDATA)、4,4'-ビス[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:DPAB)、4,4'-ビス(N-{4-[N'-(3-メチルフェニル)-N'-フェニルアミノ]フェニル}-N-フェニルアミノ)ビフェニル(略称:DNTPD)、1,3,5-トリス[N-(4-ジフェニルアミノフェニル)-N-フェニルアミノ]ベンゼン(略称:DPAB3)、3-[N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)-N-フェニルアミノ]-9-フェニルカルバゾール(略称:PCzPCA1)、3,6-ビス[N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)-N-フェニルアミノ]-9-フェニルカルバゾール(略称:PCzPCA2)、3-[N-(1-ナフチル)-N-(9-フェニルカルバゾール-3-イル)アミノ]-9-フェニルカルバゾール(略称:PCzPCN1)等の芳香族アミン化合物等やジピラジノ[2,3-f:20,30-h]キノキサリン-2,3,6,7,10,11-ヘキサカルボニトリル(HAT-CN)も挙げられる。

【0295】

また、正孔注入性の高い物質としては、高分子化合物(オリゴマー、 dendリマー、ポリマー等)を用いることもできる。例えば、ポリ(N-ビニルカルバゾール)(略称:PVK)、ポリ(4-ビニルトリフェニルアミン)(略称:PVTPA)、ポリ[N-(4-{N'-[4-(4-ジフェニルアミノ)フェニル]フェニル}-N'-フェニルアミノ)フェニル]メタクリルアミド(略称:PTPDMA)、ポリ[N,N'-ビス(4-ブチルフェニル)-N,N'-ビス(フェニル)ベンジジン](略称:Poly-TPD)などの高分子化合物が挙げられる。また、ポリ(3,4-エチレンジオキシチオフェン)/ポリ(スチレンスルホン酸)(PEDOT/PSS)、ポリアニリン/ポリ(スチレンスルホン酸)(PANI/PSS)等の酸を添加した高分子化合物を用いることもできる。

【0296】

(正孔輸送層)

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

10

20

30

40

50

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

【0297】

正孔輸送層には、CBP、9-[4-(N-カルバゾリル)]フェニル-10-フェニルアントラセン(CzPA)、9-フェニル-3-[4-(10-フェニル-9-アントリル)フェニル]-9H-カルバゾール(PCzPA)のようなカルバゾール誘導体や、t-BuDNA、DNA、DPAnthのようなアントラセン誘導体を用いても良い。ポリ(N-ビニルカルバゾール)(略称：PVK)やポリ(4-ビニルトリフェニルアミン)(略称：PVTPA)等の高分子化合物を用いることもできる。

10

【0298】

但し、電子よりも正孔の輸送性の高い物質であれば、これら以外のものを用いてもよい。なお、正孔輸送性の高い物質を含む層は、単層のものだけでなく、上記物質からなる層が二層以上積層したものとしてもよい。

【0299】

正孔輸送層を二層以上配置する場合、エネルギーギャップのより大きい材料を発光層に近い側に配置することが好ましい。このような材料として、後記する実施例で用いた、HT-2が挙げられる。

20

【0300】

(電子輸送層)

電子輸送層は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層には、1)アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体、2)イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、3)高分子化合物を使用することができる。具体的には低分子の有機化合物として、Alq、トリス(4-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(略称：Almq₃)、ビス(10-ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト)ベリリウム(略称：BeBq₂)、BALq、Znq、ZnPBO、ZnBTZなどの金属錯体等を用いることができる。また、金属錯体以外にも、2-(4-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(略称：PBD)、1,3-ビス[5-(p-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル]ベンゼン(略称：OXD-7)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-フェニル-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称：TAZ)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-(4-エチルフェニル)-5-(4-ビフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称：p-ETTAZ)、バソフェナントロリン(略称：BPhen)、バソキュプロイン(略称：BCP)、4,4'-ビス(5-メチルベンゾオキサゾール-2-イル)スチルベン(略称：BzOs)などの複素芳香族化合物も用いることができる。本実施態様においては、ベンゾイミダゾール化合物を好適に用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の電子移動度を有する物質である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を電子輸送層として用いてもよい。また、電子輸送層は、単層で構成されていてもよいし、上記物質からなる層が二層以上積層されて構成されていてもよい。

30

40

【0301】

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

50

【0302】

(電子注入層)

電子注入層は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層には、リチウム(Li)、セシウム(Cs)、カルシウム(Ca)、フッ化リチウム(LiF)、フッ化セシウム(CsF)、フッ化カルシウム(CaF₂)、リチウム酸化物(LiO_x)等のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を用いることができる。その他、電子輸送性を有する物質にアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を含有させたもの、具体的にはAlq中にマグネシウム(Mg)を含有させたもの等を用いてもよい。なお、この場合には、陰極からの電子注入をより効率良く行うことができる。

10

【0303】

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

20

(層形成方法)

本実施形態の有機EL素子の各層の形成方法としては、上記で特に言及した以外には制限されないが、真空蒸着法、スパッタリング法、プラズマ法、イオンプレーティング法などの乾式成膜法や、スピニング法、ディッピング法、フローコーティング法、インクジェット法などの湿式成膜法などの公知の方法を採用することができる。

【0304】

(膜厚)

本実施形態の有機EL素子の各有機層の膜厚は、上記で特に言及した以外には制限されないが、一般に膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じやすく、逆に厚すぎると高い印加電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常は数nmから1μmの範囲が好ましい。

30

【0305】

〔第二実施形態〕

第二実施形態の有機EL素子の構成について説明する。第二実施形態の説明において第一実施形態と同一の構成要素は、同一符号や名称を付す等して説明を省略もしくは簡略化する。また、第二実施形態では、特に言及されない材料や化合物については、第一実施形態で説明した材料や化合物と同様の材料や化合物を用いることができる。

【0306】

第二実施形態の有機EL素子は、発光層が、さらに蛍光発光性の化合物M1を含んでいる点で、第一実施形態の有機EL素子と異なる。その他の点については第一実施形態と同様である。

40

すなわち、第二実施形態において、発光層は、前記一般式(100)で表される化合物M3と、遅延蛍光性の化合物M2と、蛍光発光性の化合物M1とを含む。

この態様の場合、化合物M1は、ドーパント材料であることが好ましく、化合物M2は、ホスト材料であることが好ましく、化合物M3はホスト材料であることが好ましい。化合物M2及び化合物M3の一方を第一のホスト材料と称し、他方を第二のホスト材料と称する場合もある。

【0307】

50

(化合物 M 1)

本実施形態の発光層は、蛍光発光性の化合物 M 1 を含む。

本実施形態の化合物 M 1 は、燐光発光性の金属錯体ではない。本実施形態の化合物 M 1 は、重金属錯体ではないことが好ましい。また、本実施形態の化合物 M 1 は、金属錯体ではないことが好ましい。

【0308】

本実施形態の化合物 M 1 としては、蛍光発光性材料を用いることができる。蛍光発光性材料としては、具体的には、例えば、ビスアリアルアミノナフタレン誘導体、アリアル置換ナフタレン誘導体、ビスアリアルアミノアントラセン誘導体、アリアル置換アントラセン誘導体、ビスアリアルアミノピレン誘導体、アリアル置換ピレン誘導体、ビスアリアルアミノクリセン誘導体、アリアル置換クリセン誘導体、ビスアリアルアミノフルオランテン誘導体、アリアル置換フルオランテン誘導体、インデノペリレン誘導体、アセナフトフルオランテン誘導体、ホウ素原子を含む化合物、ピロメテンホウ素錯体化合物、ピロメテン骨格を有する化合物、ピロメテン骨格を有する化合物の金属錯体、ジケトピロロピロール誘導体、ペリレン誘導体、およびナフタセン誘導体などが挙げられる。

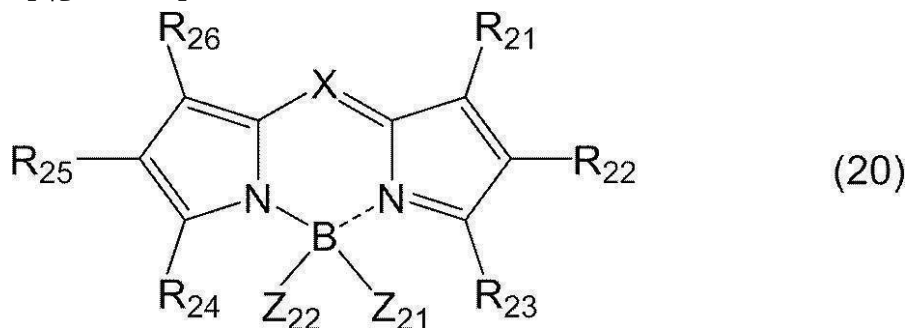
10

【0309】

本実施形態の化合物 M 1 は、下記一般式 (20) で表される化合物であることが好ましい。

【0310】

【化112】



20

【0311】

前記一般式 (20) において、

X は、窒素原子、又は Y と結合する炭素原子であり、

Y は、水素原子又は置換基であり、

R₂₁ ~ R₂₆ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R₂₁ 及び R₂₂ の組、R₂₂ 及び R₂₃ の組、R₂₄ 及び R₂₅ の組、並びに R₂₅ 及び R₂₆ の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての Y、及び R₂₁ ~ R₂₆ は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルオキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルチオ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリアル基、

ハロゲン原子、

30

40

50

カルボキシ基、
 置換もしくは無置換のエステル基、
 置換もしくは無置換のカルバモイル基、
 置換もしくは無置換のアミノ基、
 ニトロ基、
 シアノ基、
 置換もしくは無置換のシリル基、および
 置換もしくは無置換のシロキサニル基からなる群から選択され、
 Z_{21} および Z_{22} は、それぞれ独立に、置換基であるか、又は Z_{21} 及び Z_{22} が互
 いに結合して環を形成し、
 置換基としての Z_{21} 及び Z_{22} は、それぞれ独立に、
 ハロゲン原子、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルコキシ基、および
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基からなる群から選択
 される。

10

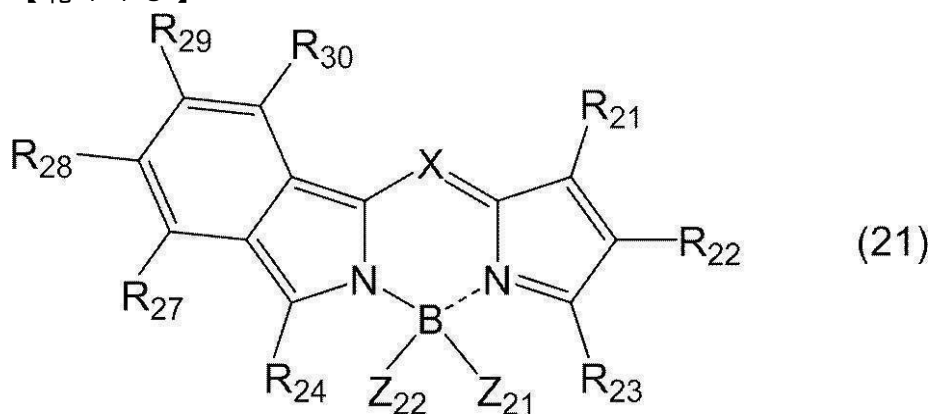
20

【0312】

前記一般式(20)において、例えば、 R_{25} 及び R_{26} の組が互いに結合して環を形
 成している場合、化合物 M1 は、下記一般式(21)で表される。

【0313】

【化113】



30

40

【0314】

前記一般式(21)において、 X 、 Y 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 Z_{21} 、および Z_{22} は、そ
 れぞれ、前記一般式(20)における X 、 Y 、 $R_{21} \sim R_{24}$ 、 Z_{21} 、および Z_{22} と
 同義であり、 $R_{27} \sim R_{30}$ は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、 R_{27}
 $\sim R_{30}$ が置換基である場合の置換基としては、 $R_{21} \sim R_{24}$ について列挙した置換基
 と同義である。

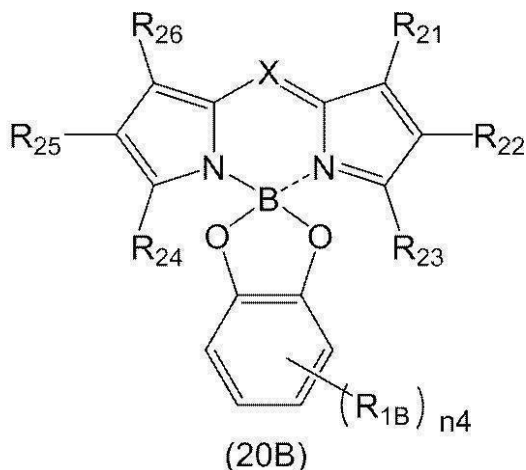
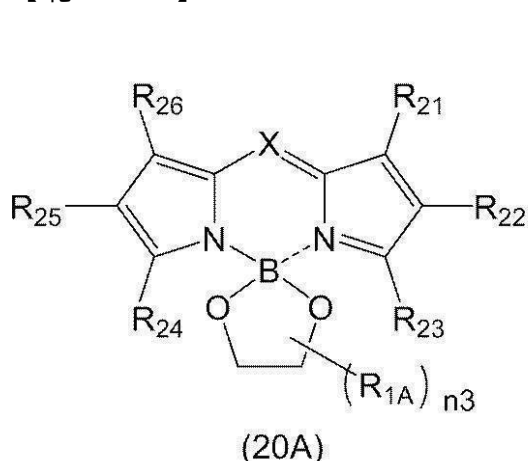
40

【0315】

前記一般式(20)において、 Z_{21} 及び Z_{22} が互いに結合して環を形成している場
 合、化合物 M1 は、例えば、下記一般式(20A)、または下記一般式(20B)で表さ
 れる。ただし、化合物 M1 は、以下の構造に限定されない。

【0316】

【化 1 1 4】



10

【0 3 1 7】

前記一般式(20A)において、X、Y、および $R_{21} \sim R_{26}$ は、それぞれ、前記一般式(20)におけるX、Y、および $R_{21} \sim R_{26}$ と同義であり、 R_{1A} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、 R_{1A} が置換基である場合の置換基としては、 $R_{21} \sim R_{26}$ について列挙した置換基と同義であり、 n_3 は4である。

前記一般式(20B)において、X、Y、および $R_{21} \sim R_{26}$ は、それぞれ、前記一般式(20)におけるX、Y、および $R_{21} \sim R_{26}$ と同義であり、 R_{1B} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、 R_{1B} が置換基である場合の置換基としては、 $R_{21} \sim R_{26}$ について列挙した置換基と同義であり、 n_4 は4である。

20

【0 3 1 8】

Z_{21} 及び Z_{22} のうち少なくともいずれか(好ましくは Z_{21} 及び Z_{22})は、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルコキシ基、及び置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

Z_{21} 及び Z_{22} のうち少なくともいずれかは、フッ素原子で置換された炭素数1~30のアルコキシ基、フッ素原子で置換された環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、及び炭素数1~30のフルオロアルキル基で置換された環形成炭素数6~30のアリールオキシ基からなる群から選択される基であることがより好ましい。

30

Z_{21} 及び Z_{22} のうち少なくともいずれかは、フッ素原子で置換された炭素数1~30のアルコキシ基であることがさらに好ましく、 Z_{21} 及び Z_{22} がフッ素原子で置換された炭素数1~30のアルコキシ基であることがよりさらに好ましい。

【0 3 1 9】

Z_{21} 及び Z_{22} が同じであることも好ましい。

【0 3 2 0】

一方、前記 Z_{21} および前記 Z_{22} のうち少なくともいずれかがフッ素原子であることも好ましく、前記 Z_{21} および前記 Z_{22} がフッ素原子であることもより好ましい。

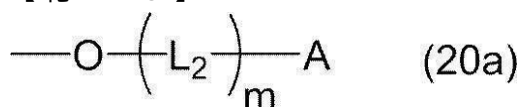
40

【0 3 2 1】

前記 Z_{21} および前記 Z_{22} のうち少なくともいずれかは、下記一般式(20a)で表される基であることも好ましい。

【0 3 2 2】

【化 1 1 5】



【0 3 2 3】

50

前記一般式(20a)において、Aは、置換もしくは無置換の炭素数1~6のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~6のハロゲン化アルキル基、または置換もしくは無置換の環形成炭素数6~12のアリール基であり、 L_2 は、置換もしくは無置換の炭素数1~6のアルキレン基、または置換もしくは無置換の環形成炭素数6~12のアリーレン基であり、mは、0、1、2、3、4、5、6、又は7であり、mが2、3、4、5、6、又は7である場合、複数の L_2 は、互いに同一または異なる。mは、0、1、又は2であることが好ましい。mが0の場合、Aは、O(酸素原子)に直接結合する。

【0324】

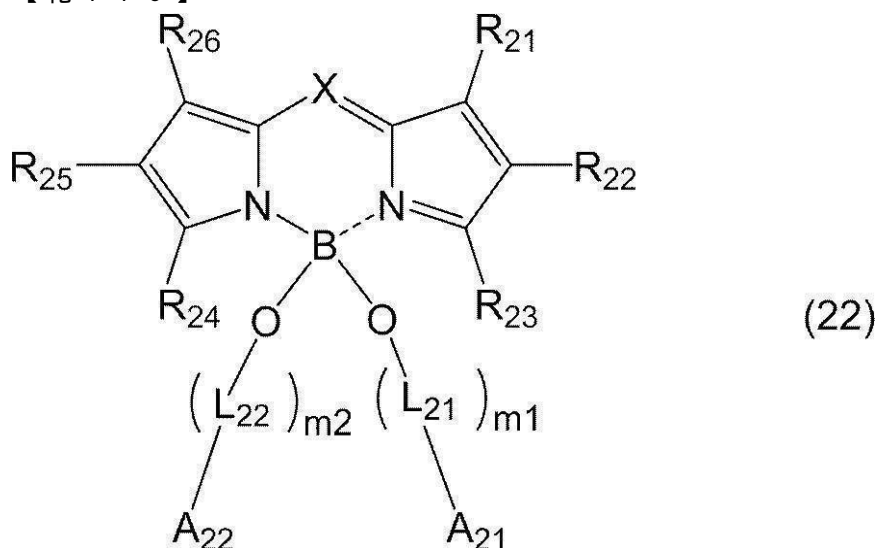
前記一般式(20)において、 Z_{21} および Z_{22} が前記一般式(20a)で表される基である場合、化合物M1は、下記一般式(22)で表される化合物である。

10

化合物M1は、下記一般式(22)で表される化合物であることも好ましい。

【0325】

【化116】



20

【0326】

前記一般式(22)において、X、XがYと結合する炭素原子であるときのY、 R_{21} ~ R_{26} は、それぞれ、前記一般式(20)におけるX、Y、 R_{21} ~ R_{26} と同義である。 A_{21} および A_{22} は、前記一般式(20a)におけるAと同義であり、互いに同一でも異なってもよい。 L_{21} および L_{22} は、前記一般式(20a)における L_2 と同義であり、互いに同一でも異なってもよい。m1およびm2は、それぞれ独立に、0、1、2、3、4、5、6、又は7であり、0、1、又は2であることが好ましい。m1が2、3、4、5、6、又は7である場合、複数の L_{21} は、互いに同一または異なり、m2が2、3、4、5、6、又は7である場合、複数の L_{22} は、互いに同一または異なる。m1が0の場合、 A_{21} は、O(酸素原子)に直接結合し、m2が0の場合、 A_{22} は、O(酸素原子)に直接結合する。

30

【0327】

前記一般式(20a)におけるAおよび L_2 のうち少なくともいずれかが、ハロゲン原子で置換されていることが好ましく、フッ素原子で置換されていることがより好ましい。

40

【0328】

前記一般式(20a)におけるAは、炭素数1~6のパーフルオロアルキル基、または環形成炭素数6~12のパーフルオロアリール基であることがより好ましく、炭素数1~6のパーフルオロアルキル基であることがさらに好ましい。

【0329】

前記一般式(20a)における L_2 は、炭素数1~6のパーフルオロアルキレン基、または環形成炭素数6~12のパーフルオロアリーレン基であることがより好ましく、炭素数1~6のパーフルオロアルキレン基であることがさらに好ましい。

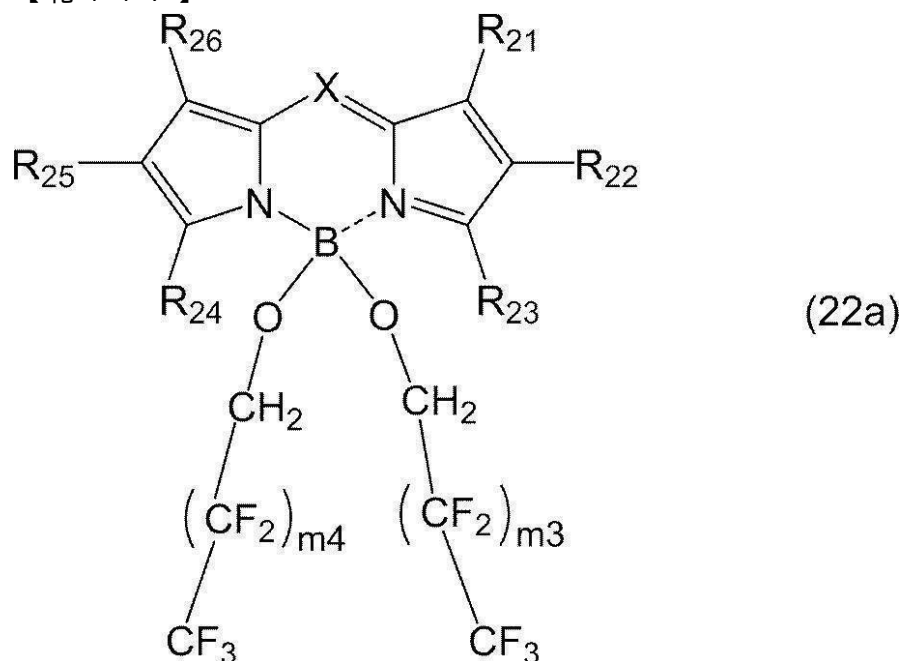
【0330】

50

すなわち、前記化合物 M 1 は、下記一般式 (2 2 a) で表される化合物であることも好ましい。

【 0 3 3 1 】

【 化 1 1 7 】



10

20

【 0 3 3 2 】

前記一般式 (2 2 a) において、

X は、前記一般式 (2 0) における X と同義であり、X が Y と結合する炭素原子であるときの Y は、前記一般式 (2 0) における Y と同義であり、

R₂₁ ~ R₂₆ は、それぞれ独立に、前記一般式 (2 0) における R₂₁ ~ R₂₆ とそれぞれ同義であり、

m₃ は、0 以上 4 以下であり、

m₄ は、0 以上 4 以下であり、

m₃ 及び m₄ は、互いに同一であるか又は異なる。

30

【 0 3 3 3 】

前記一般式 (2 0)、(2 1)、(2 2)、及び (2 2 a) において、

X は、Y と結合する炭素原子であり、

Y は、水素原子又は置換基であり、

置換基としての Y は、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基及び置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基からなる群から選択される置換基であることが好ましく、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であることがより好ましい。

【 0 3 3 4 】

前記一般式 (2 0)、(2 1)、(2 2)、及び (2 2 a) において、

より好ましい態様としては、

X は、Y と結合する炭素原子であり、

Y は、水素原子又は置換基であり、

置換基としての Y は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であり、

40

置換基としての Y が置換基を有する環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基である場合の当該置換基は、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

50

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルコキシ基、又は炭素数 1 ~ 30 のアルキル基で置換された環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基である態様が挙げられる。

【0335】

化合物 M1 は、前記 Z₂₁ と前記 Z₂₂ とが互いに結合して環を形成してもよいが、前記 Z₂₁ と前記 Z₂₂ とが互いに結合して環を形成しないことが好ましい。

【0336】

前記一般式 (20)、(22)、及び (22a) において、R₂₁、R₂₃、R₂₄、および R₂₆ のうち少なくともいずれかが置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基であることが好ましい。 10

前記一般式 (20)、(22)、及び (22a) において、R₂₁、R₂₃、R₂₄、および R₂₆ が置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基であることがより好ましい。この場合、R₂₂ および R₂₅ が水素原子であることが好ましい。

【0337】

前記一般式 (20)、(22)、及び (22a) において、R₂₁、R₂₃、R₂₄、および R₂₆ のうち少なくともいずれかが置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であることが好ましい。

前記一般式 (20)、(22)、及び (22a) において、R₂₁、R₂₃、R₂₄、および R₂₆ が置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であることがより好ましい。この場合、R₂₂ および R₂₅ が水素原子であることが好ましい。 20

【0338】

前記一般式 (20)、(22)、及び (22a) において、より好ましい態様としては、

R₂₁、R₂₃、R₂₄、及び R₂₆ は、それぞれ独立に、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 (好ましくは炭素数 1 ~ 6) のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 (好ましくは炭素数 1 ~ 6) のハロゲン化アルキル基、又は 30

炭素数 1 ~ 30 のアルキル基で置換された環形成炭素数 6 ~ 30 (好ましくは環形成炭素数 6 ~ 12) のアリール基であり、

R₂₂ 及び R₂₅ が水素原子である態様が挙げられる。

【0339】

前記一般式 (21) において、R₂₁、R₂₃、および R₂₄ のうち少なくともいずれかが置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基であることが好ましい。

【0340】

前記一般式 (21) において、R₂₁、R₂₃、および R₂₄ が置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基であることがより好ましい。この場合、R₂₂ は水素原子であることが好ましい 40

【0341】

前記一般式 (21) において、R₂₁、R₂₃、および R₂₄ のうち少なくともいずれかが置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であることが好ましい。

【0342】

前記一般式 (21) において、R₂₁、R₂₃、および R₂₄ が置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であることがより好ましい。この場合、R₂₂ は水素原子であることが好ましい。

【0343】

前記一般式 (21) において、

10

20

30

40

50

より好ましい態様としては、

R_{21} 、 R_{23} 、および R_{24} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～30（好ましくは炭素数1～6）のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30（好ましくは炭素数1～6）のハロゲン化アルキル基、又は

炭素数1～30のアルキル基で置換された環形成炭素数6～30（好ましくは環形成炭素数6～12）のアリール基であり、

R_{22} が水素原子である態様が挙げられる。

【0344】

化合物M1において、フッ素原子で置換されたアルコキシ基としては、例えば、2,2,2-トリフルオロエトキシ基、2,2-ジフルオロエトキシ基、2,2,3,3,3-ペンタフルオロ-1-プロポキシ基、2,2,3,3-テトラフルオロ-1-プロポキシ基、1,1,1,3,3,3-ヘキサフルオロ-2-プロポキシ基、2,2,3,3,4,4,4-ヘプタフルオロ-1-ブチルオキシ基、2,2,3,3,4,4-ヘキサフルオロ-1-ブチルオキシ基、ノナフルオロターシャリーブチルオキシ基、2,2,3,3,4,4,5,5,5-ノナフルオロペンタノキシ基、2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,6-ウンデカフルオロヘキサノキシ基、2,3-ビス(トリフルオロメチル)-2,3-ブタンジオキシ基、1,1,2,2-テトラ(トリフルオロメチル)エチレングリコキシ基、4,4,5,5,6,6,6-ヘプタフルオロヘキサン-1,2-ジオキシ基、および4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9,9-トリデカフルオロノナン-1,2-ジオキシ基等が挙げられる。

10

20

【0345】

化合物M1において、フッ素原子で置換されたアリールオキシ基、またはフルオロアルキル基で置換されたアリールオキシ基としては、例えば、ペンタフルオロフェノキシ基、3,4,5-トリフルオロフェノキシ基、4-トリフルオロメチルフェノキシ基、3,5-ビストリフルオロメチルフェノキシ基、3-フルオロ-4-トリフルオロメチルフェノキシ基、2,3,5,6-テトラフルオロ-4-トリフルオロメチルフェノキシ基、4-フルオロカテコラート基、4-トリフルオロメチルカテコラート基、および3,5-ビストリフルオロメチルカテコラート基等が挙げられる。

【0346】

化合物M1が蛍光発光性の化合物である場合、化合物M1は、主ピーク波長が、400nm以上700nm以下の発光を示すことが好ましい。

本明細書において、主ピーク波長とは、測定対象化合物が 10^{-6} モル/リットル以上 10^{-5} モル/リットル以下の濃度で溶解しているトルエン溶液について、測定した蛍光スペクトルにおける発光強度が最大となる蛍光スペクトルのピーク波長をいう。測定装置は、分光蛍光光度計（日立ハイテクサイエンス社製、F-7000）を用いる。

30

【0347】

化合物M1は、赤色の発光又は緑色の発光を示すことが好ましい。

本明細書において、赤色の発光とは、蛍光スペクトルの主ピーク波長が600nm以上660nm以下の範囲内である発光をいう。

化合物M1が赤色の蛍光発光性の化合物である場合、化合物M1の主ピーク波長は、好ましくは600nm以上660nm以下、より好ましくは600nm以上640nm以下、さらに好ましくは610nm以上630nm以下である。

本明細書において、緑色の発光とは、蛍光スペクトルの主ピーク波長が500nm以上560nm以下の範囲内である発光をいう。

化合物M1が緑色の蛍光発光性の化合物である場合、化合物M1の主ピーク波長は、好ましくは500nm以上560nm以下、より好ましくは500nm以上540nm以下、さらに好ましくは510nm以上540nm以下である。

本明細書において、青色の発光とは、蛍光スペクトルの主ピーク波長が430nm以上480nm以下の範囲内である発光をいう。

40

50

化合物 M 1 が青色の蛍光発光性の化合物である場合、化合物 M 1 の主ピーク波長は、好ましくは 430 nm 以上 480 nm 以下、より好ましくは 440 nm 以上 480 nm 以下である。

【0348】

有機 EL 素子から発光する光の主ピーク波長の測定は、以下のようにして行う。

電流密度が $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ となるように有機 EL 素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計 CS - 2000 (コニカミノルタ社製) で計測する。

得られた分光放射輝度スペクトルにおいて、発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長を測定し、これを主ピーク波長 (単位: nm) とする。

【0349】

・化合物 M 1 の製造方法

化合物 M 1 は、公知の方法により製造することができる。

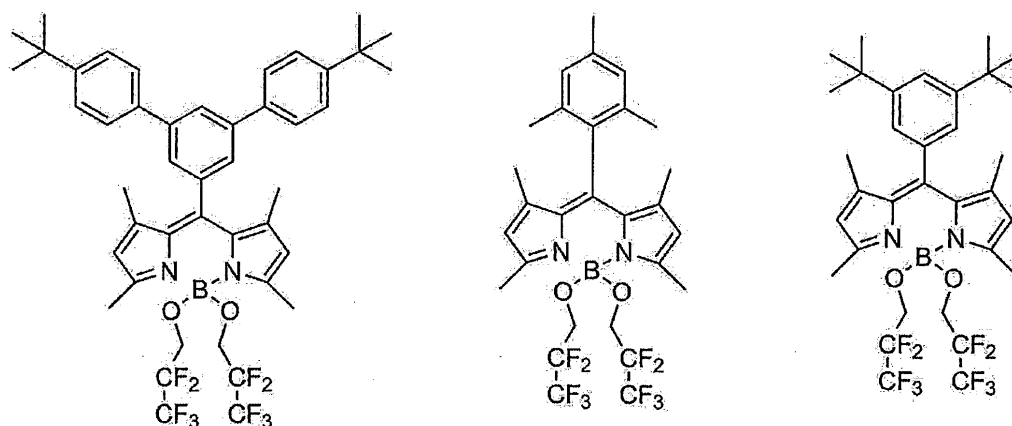
【0350】

本実施形態の化合物 M 1 の具体例を以下に示す。ただし、本発明は、これら化合物の具体例に限定されない。

なお、ピロメテン骨格中におけるホウ素原子と窒素原子との配位結合は、実線、破線、矢印、もしくは省略するなど、種々の表記方法がある。本明細書においては、実線で表すか、破線で表すか、又は記載を省略する。

【0351】

【化118】



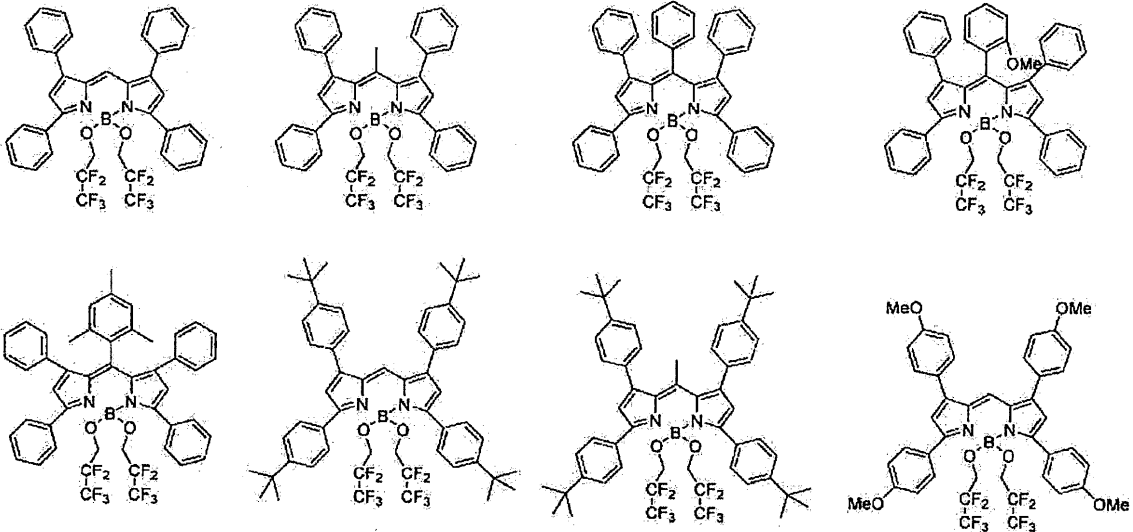
10

20

30

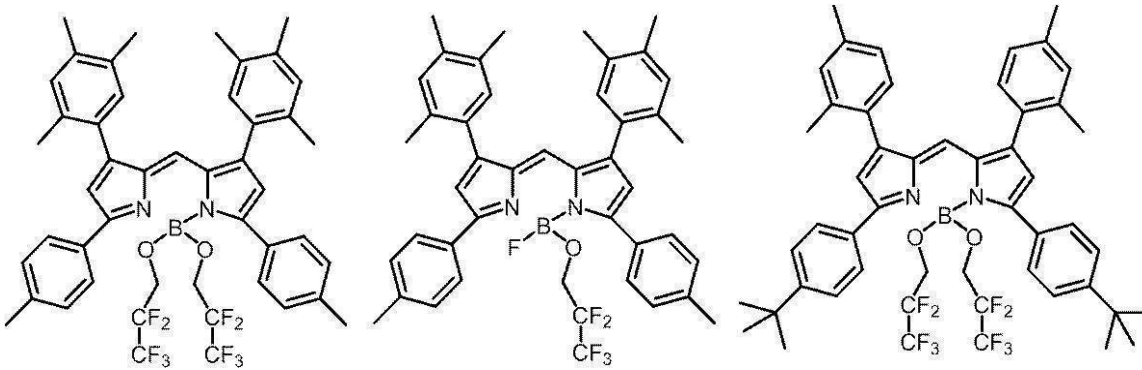
【0352】

【化 1 1 9】



10

【 0 3 5 3 】
【化 1 2 0】

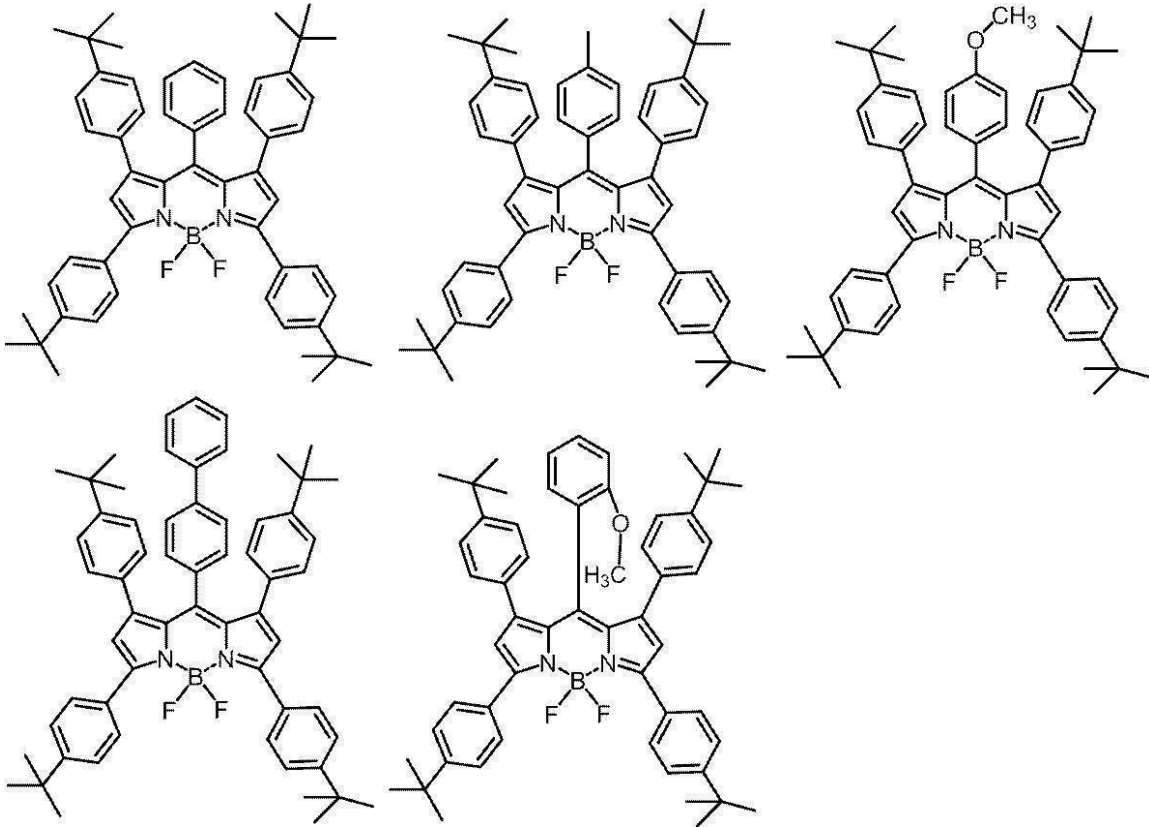


20

30

【 0 3 5 4 】

【化 1 2 1】

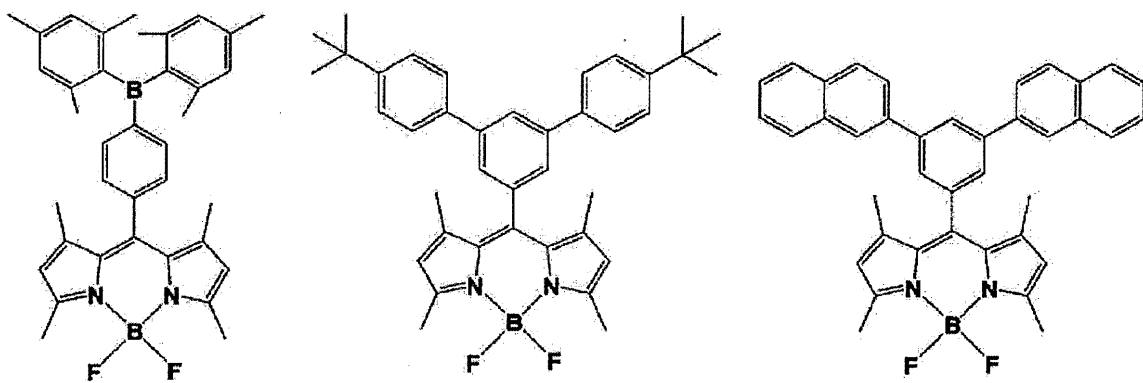


10

20

【 0 3 5 5】

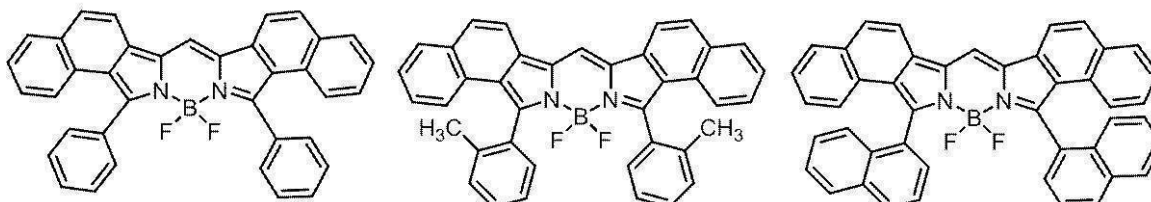
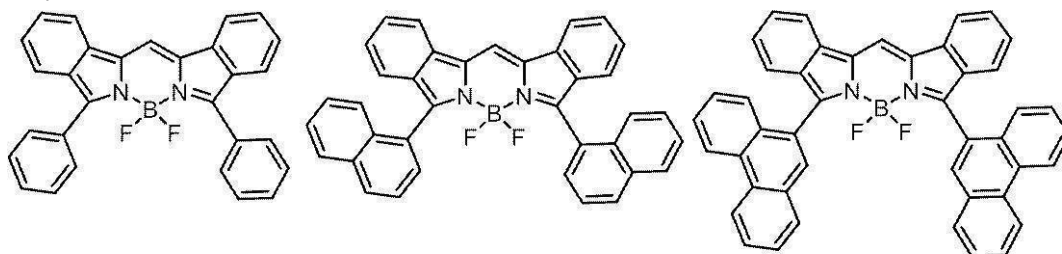
【化 1 2 2】



30

【 0 3 5 6】

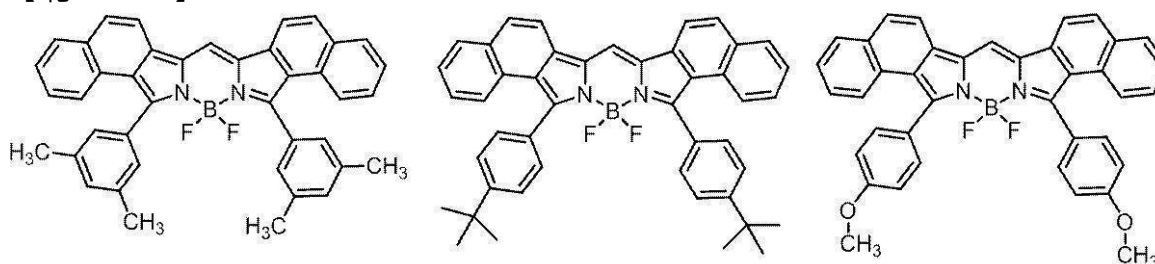
【化 1 2 3】



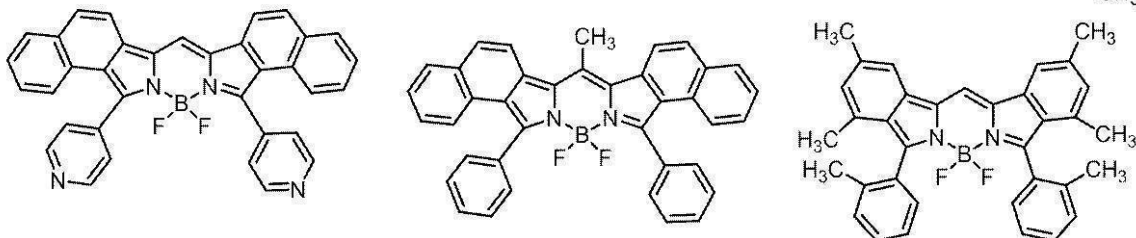
10

【 0 3 5 7】

【化 1 2 4】



20



30

【 0 3 5 8】

< 発光層における化合物 M 3、化合物 M 2、及び化合物 M 1 の関係 >

本実施形態の有機 EL 素子において、化合物 M 2 の一重項エネルギー $S_1(M 2)$ と、化合物 M 1 の一重項エネルギー $S_1(M 1)$ とは、下記数式 (数 2) の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(M 2) > S_1(M 1) \quad (\text{数 2})$$

【 0 3 5 9】

また、化合物 M 3 の一重項エネルギー $S_1(M 3)$ は、化合物 M 1 の一重項エネルギー $S_1(M 1)$ よりも大きいことが好ましい。

【 0 3 6 0】

化合物 M 3 の一重項エネルギー $S_1(M 3)$ と、化合物 M 2 の一重項エネルギー $S_1(M 2)$ と、化合物 M 1 の一重項エネルギー $S_1(M 1)$ とは、下記数式 (数 2 A) の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(M 3) > S_1(M 2) > S_1(M 1) \quad \dots (\text{数 2 A})$$

40

【 0 3 6 1】

本実施形態の有機 EL 素子を発光させたときに、発光層において、主に蛍光発光性の化合物 M 1 が発光していることが好ましい。

本実施形態の有機 EL 素子は、赤色発光または緑色発光することが好ましい。

【 0 3 6 2】

・発光層における化合物の含有率

50

発光層に含まれている化合物 M 3、化合物 M 2、及び化合物 M 1 の含有率は、例えば、以下の範囲であることが好ましい。

化合物 M 3 の含有率は、10 質量%以上 80 質量%以下であることが好ましい。

化合物 M 2 の含有率は、10 質量%以上 80 質量%以下であることが好ましく、10 質量%以上 60 質量%以下であることがより好ましく、20 質量%以上 60 質量%であることがさらに好ましい。

化合物 M 1 の含有率は、0.01 質量%以上 10 質量%以下であることが好ましく、0.01 質量%以上 5 質量%以下であることがより好ましく、0.01 質量%以上 1 質量%以下であることがさらに好ましい。

発光層における化合物 M 3、化合物 M 2、及び化合物 M 1 の合計含有率の上限は、100 質量%である。なお、本実施形態は、発光層に、化合物 M 3、化合物 M 2、及び化合物 M 1 以外の材料が含まれることを除外しない。

発光層は、化合物 M 3 を 1 種のみ含んでもよいし、2 種以上含んでもよい。発光層は、化合物 M 2 を 1 種のみ含んでもよいし、2 種以上含んでもよい。発光層は、化合物 M 1 を 1 種のみ含んでもよいし、2 種以上含んでもよい。

【0363】

図 5 は、発光層における化合物 M 3、化合物 M 2、及び化合物 M 1 のエネルギー準位の関係の一例を示す図である。図 5 において、S 0 は、基底状態を表す。S 1 (M 1) は、化合物 M 1 の最低励起一重項状態を表し、T 1 (M 1) は、化合物 M 1 の最低励起三重項状態を表す。S 1 (M 2) は、化合物 M 2 の最低励起一重項状態を表し、T 1 (M 2) は、化合物 M 2 の最低励起三重項状態を表す。S 1 (M 3) は、化合物 M 3 の最低励起一重項状態を表し、T 1 (M 3) は、化合物 M 3 の最低励起三重項状態を表す。図 5 中の S 1 (M 2) から S 1 (M 1) へ向かう破線の矢印は、化合物 M 2 の最低励起一重項状態から化合物 M 1 の最低励起一重項状態へのフェルスター型エネルギー移動を表す。

図 5 に示すように、化合物 M 2 として S T (M 2) の小さな化合物を用いると、最低励起三重項状態 T 1 (M 2) は、熱エネルギーにより、最低励起一重項状態 S 1 (M 2) に逆項間交差が可能である。そして、化合物 M 2 の最低励起一重項状態 S 1 (M 2) から化合物 M 1 へのフェルスター型エネルギー移動が生じ、最低励起一重項状態 S 1 (M 1) が生成する。この結果、化合物 M 1 の最低励起一重項状態 S 1 (M 1) からの蛍光発光を観測することができる。この T A D F メカニズムによる遅延蛍光を利用することによっても、理論的に内部量子効率を 100%まで高めることができると考えられている。

【0364】

第二実施形態の有機 E L 素子は、発光層に、遅延蛍光性の化合物 M 2 と、前記化合物 M 2 よりも大きな一重項エネルギーを有する化合物 M 3 (前記一般式 (100) で表される化合物 M 3) と、遅延蛍光性の化合物 M 2 よりも小さな一重項エネルギーを有する化合物 M 1 とを含んでいる。

第二実施形態によれば、高性能の有機 E L 素子、例えば、長寿命で発光する有機 E L 素子が実現される。

第二実施形態の有機 E L 素子は、表示装置および発光装置等の電子機器に使用できる。

【0365】

〔第三実施形態〕

〔電子機器〕

本実施形態に係る電子機器は、上述の実施形態のいずれかの有機 E L 素子を搭載している。電子機器としては、例えば、表示装置及び発光装置等が挙げられる。表示装置としては、例えば、表示部品 (例えば、有機 E L パネルモジュール等)、テレビ、携帯電話、タブレット、及びパーソナルコンピュータ等が挙げられる。発光装置としては、例えば、照明及び車両用灯具等が挙げられる。

【0366】

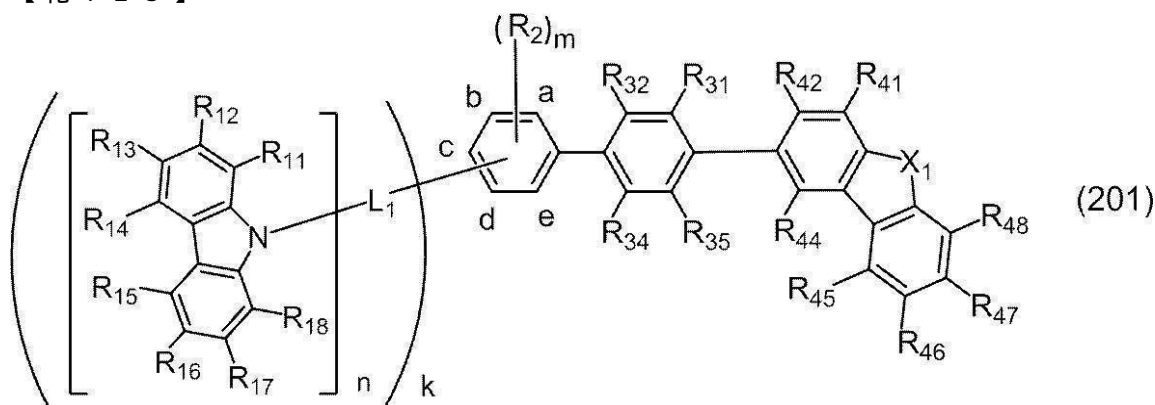
〔第四実施形態〕

〔化合物〕

第四実施形態の化合物は、下記一般式(201)、下記一般式(202)、又は下記一般式(203)で表される化合物である。

【0367】

【化125】



10

【0368】

前記一般式(201)において、 X_1 は酸素原子又は硫黄原子であり、 n は、1、2、又は3であり、 k は、1、2、又は3であり、 m は、2、3、又は4であり、 $k + m = 5$ であり、 $R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組が互いに結合せず、 n 及び k の少なくとも一方が2以上である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

20

L_1 は、単結合又は連結基であり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は1であり、 k が2以上である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なり、連結基としての L_1 は、

30

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基から誘導される基、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基から誘導される基からなる群から選択される2つの基が結合した基であり、

k が1であり、 m が4であるとき、4つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(201)に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、1つの L_1 は、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 又は e の位置の炭素原子と結合し、

k が2であり、 m が3であるとき、3つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(201)に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、2つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

40

k が3であり、 m が2であるとき、2つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(201)に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、3つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、ただし、 m が2以上の場合、複数の R_2 は互いに同一であるか又は異なり、

R_{41} 、 R_{42} 、 R_{44} 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_{41} 、 R_{42} 、 R_{44} 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、

50

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールアミノ基、

チオール基、

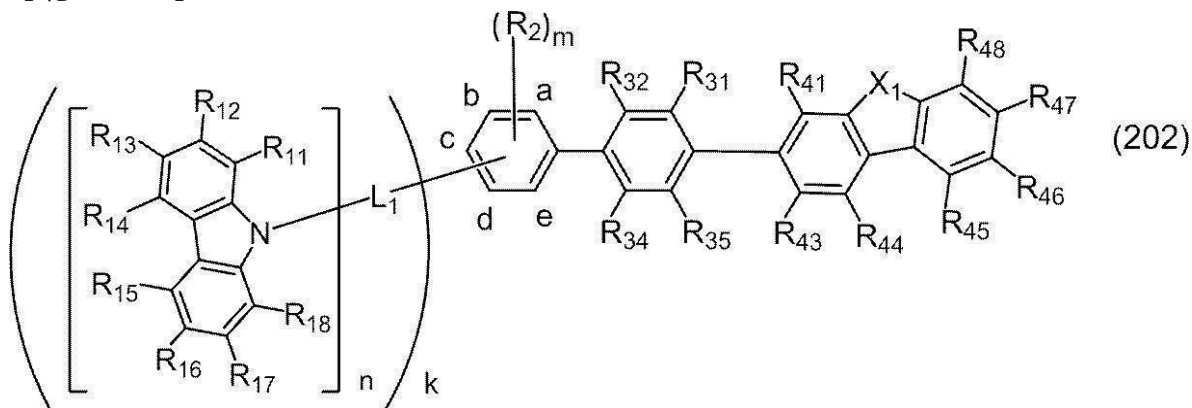
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基であり、

ただし、 $R_{11} \sim R_{18}$ のうち、少なくともいずれか 1 つ以上が無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基である。

【0369】

【化126】



【0370】

前記一般式(202)において、 X_1 は酸素原子又は硫黄原子であり、 n は、1、2、又は3であり、 k は、1、2、又は3であり、 m は、2、3、又は4であり、 $k + m = 5$ であり、 $R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組が互いに結合せず、 n 及び k の少なくとも一方が2以上である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

L_1 は、単結合又は連結基であり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は1であり、 k が2以上である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なり、連結基としての L_1 は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基、

10

20

30

40

50

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基から誘導される基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基、及び置
換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基から誘導される基からなる群から選
択される 2 つの基が結合した基であり、

k が 1 であり、m が 4 であるとき、4 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (202) に
示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、1 つの L_1 は、前記 R_2
と結合しない a、b、c、d 又は e の位置の炭素原子と結合し、

k が 2 であり、m が 3 であるとき、3 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (202) に
示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、2 つの L_1 は、それぞ
れ、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

k が 3 であり、m が 2 であるとき、2 つの R_2 は、それぞれ、前記一般式 (202) に
示す a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、3 つの L_1 は、それぞ
れ、前記 R_2 と結合しない a、b、c、d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換
基であり、ただし、m が 2 以上の場合、複数の R_2 は互いに同一であるか又は異なり、

R_{41} 、 R_{43} 、 R_{44} 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置
換基であるか、又は R_{43} 及び R_{44} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の
組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_{41} 、 R_{43} 、 R_{44} 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基であり、

ただし、 $R_{11} \sim R_{18}$ のうち、少なくともいずれか 1 つ以上が無置換の環形成炭素数
6 ~ 30 のアリール基である。

【0371】

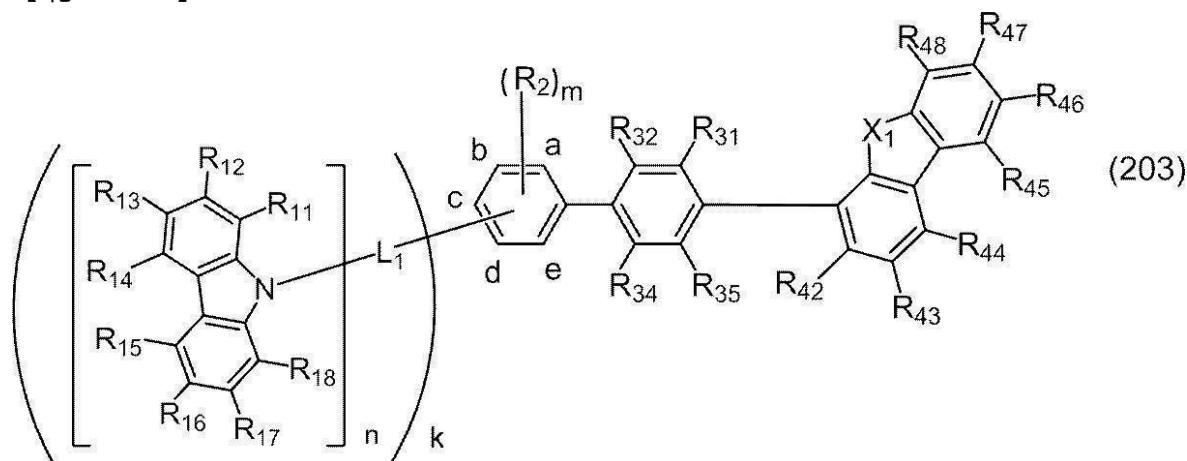
10

20

30

40

【化 1 2 7】



10

【0 3 7 2】

前記一般式(203)において、 X_1 は酸素原子又は硫黄原子であり、 n は、1、2、又は3であり、 k は、1、2、又は3であり、 m は、2、3、又は4であり、 $k + m = 5$ であり、 $R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組が互いに結合せず、 n 及び k の少なくとも一方が2以上である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{18} は互いに同一であるか又は異なり、

20

L_1 は、単結合又は連結基であり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は1であり、 k が2以上である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なり、連結基としての L_1 は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基から誘導される基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基から誘導される基からなる群から選択される2つの基が結合した基であり、

30

k が1であり、 m が4であるとき、4つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(203)に示すa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、1つの L_1 は、前記 R_2 と結合しないa、b、c、d又はeの位置の炭素原子と結合し、

k が2であり、 m が3であるとき、3つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(203)に示すa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、2つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しないa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、

k が3であり、 m が2であるとき、2つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(203)に示すa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、3つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しないa、b、c、d及びeの位置のいずれかの炭素原子と結合し、

40

R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、ただし、 m が2以上の場合、複数の R_2 は互いに同一であるか又は異なり、

$R_{42} \sim R_{44}$ 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{43} 及び R_{44} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 $R_{42} \sim R_{44}$ 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

50

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基であり、

ただし、 $R_{11} \sim R_{18}$ のうち、少なくともいずれか 1 つ以上が無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基である。

10

20

【0373】

[有機EL素子]

第四実施形態の一態様である有機EL素子は、第一実施形態の有機EL素子における化合物M3を、第四実施形態の化合物(前記一般式(201)~(203)のいずれかで表される化合物)に置き換えた有機EL素子である。

例えば、前記一般式(201)~(203)で表される化合物は、それぞれ、第一実施形態における化合物M3の一例として例示した一般式(201A)~(203A)で表される化合物と同義である。

すなわち、前記一般式(201)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_{41} 、 R_{42} 、 R_{44} 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、一般式(201A)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_{41} 、 R_{42} 、 R_{44} 及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義である。

30

前記一般式(202)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_{41} 、 R_{43} 、 R_{44} 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、一般式(202A)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_{41} 、 R_{43} 、 R_{44} 及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義である。

前記一般式(203)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 $R_{42} \sim R_{44}$ 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、一般式(203A)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 $R_{42} \sim R_{44}$ 及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義である。

40

第四実施形態の化合物は、高性能の有機EL素子、例えば長寿命で発光する有機EL素子を実現させることのできる化合物である。

したがって、第四実施形態の一態様である有機EL素子も、高性能であり、例えば長寿命で発光する。

【0374】

[第五実施形態]

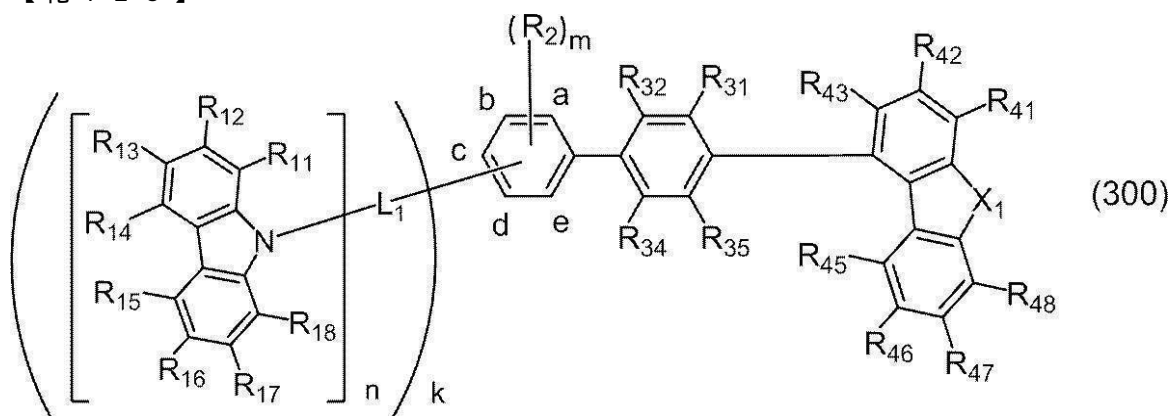
[化合物]

50

第五実施形態の化合物は、下記一般式(300)で表される化合物である。

【0375】

【化128】



10

【0376】

前記一般式(300)において、 X_1 は酸素原子又は硫黄原子であり、 n は、1、2、又は3であり、 k は、1、2、又は3であり、 m は、2、3、又は4であり、 $k + m = 5$ であり、 $R_{11} \sim R_{18}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、 n 及び k の少なくとも一方が2以上である場合、複数の R_{11} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{12} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{13} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{14} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{15} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{16} は互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{17} は互いに同一であるか又は異なり、

20

L_1 は、単結合又は連結基であり、 k が2以上である場合、複数の L_1 は互いに同一であるか又は異なり、ただし、 L_1 が単結合である場合、 n は1であり、

連結基としての L_1 は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基、
置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基から誘導される基、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基から誘導される基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基から誘導される基からなる群から選択される2つの基が結合した基であり、

30

k が1であり、 m が4であるとき、4つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(300)に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、1つの L_1 は、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 又は e の位置の炭素原子と結合し、

k が2であり、 m が3であるとき、3つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(300)に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、2つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

40

k が3であり、 m が2であるとき、2つの R_2 は、それぞれ、前記一般式(300)に示す a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、3つの L_1 は、それぞれ、前記 R_2 と結合しない a 、 b 、 c 、 d 及び e の位置のいずれかの炭素原子と結合し、

R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、ただし、 m が2以上の場合、複数の R_2 は互いに同一であるか又は異なり、

R_{41} 、 R_{42} 、 R_{43} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{11} \sim R_{18}$ 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 R_{41} 、 R

50

- 4 2、 R_{43} 、及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ独立に、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールシリル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールホスホリル基、
 ヒドロキシ基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、
 アミノ基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールアミノ基、
 チオール基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基である。

10

20

【0377】

[有機EL素子]

第五実施形態の一態様である有機EL素子は、第一実施形態の有機EL素子における化合物M3を、第五実施形態の化合物(前記一般式(300))で表される化合物)に置き換えた有機EL素子である。

例えば、前記一般式(300)で表される化合物は、第一実施形態における化合物M3の一例として例示した一般式(300A)で表される化合物と同義である。

すなわち、前記一般式(300)において、 X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 $R_{41} \sim R_{43}$ 及び $R_{45} \sim R_{48}$ は、それぞれ、一般式(300A)における X_1 、 $R_{11} \sim R_{18}$ 、 n 、 k 、 m 、 L_1 、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 、 R_{35} 、 $R_{41} \sim R_{43}$ 及び $R_{45} \sim R_{48}$ と同義である。

第五実施形態の化合物は、高性能の有機EL素子、例えば長寿命で発光する有機EL素子を実現させることのできる化合物である。

したがって、第五実施形態の一態様である有機EL素子も、高性能であり、例えば長寿命で発光する。

【0378】

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物の好ましい態様について説明する。

【0379】

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、並びに R_{17} 及び R_{18} のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、且つ、 R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{43} 及び R_{44} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48} の組が互いに結合しないことが好ましい。

40

【0380】

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 R_{11} 及び R_{12} の組、 R_{12} 及び R_{13} の組、 R_{13} 及び R_{14} の組、 R_{15} 及び R_{16} の組、 R_{16} 及び R_{17} の組、 R_{17} 及び R_{18} の組、 R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{43} 及び R_{44} の組、 R_{45} 及び R_{46} の組、 R_{46} 及び R_{47} の組、並びに R_{47} 及び R_{48}

50

R_8 の組が互いに結合しないことが好ましい。

【0381】

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、水素原子であり、

L_1 は、単結合であるか、又は

無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基、もしくは

無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基から誘導される基であることが好ましい。

【0382】

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 n は、1 又は 2 であることが好ましく、 n は 1 であることがより好ましい。

10

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 k は 1 又は 2 であることが好ましい。

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 n は 1 又は 2 であり、且つ k は 1 又は 2 であることもより好ましい。

【0383】

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 $\text{R}_{11} \sim \text{R}_{18}$ 及び $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基であることが好ましく、

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 $\text{R}_{11} \sim \text{R}_{18}$ 及び $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基であることがより好ましく、

20

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 $\text{R}_{11} \sim \text{R}_{18}$ 及び $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であることがさらに好ましく、

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 $\text{R}_{11} \sim \text{R}_{18}$ 及び $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換のフェニル基であることがよりさらに好ましい。

【0384】

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 $\text{R}_{11} \sim \text{R}_{18}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換のフェニル基であり、 $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子であることが好ましい。

30

【0385】

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 L_1 は、単結合であるか、又は無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基であることが好ましく、

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 L_1 は、単結合であるか、又は無置換のベンゼン環から誘導される基であることがより好ましい。

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 L_1 は、単結合であることがより好ましい。

40

【0386】

第四実施形態の化合物、及び第五実施形態の化合物において、 X_1 は、酸素原子であることが好ましい。

【0387】

第四実施形態の化合物において、 R_2 、 R_{31} 、 R_{32} 、 R_{34} 及び R_{35} は、水素原子であり、 n は、1 又は 2 であり、 k は、1 又は 2 であり、 $\text{R}_{11} \sim \text{R}_{18}$ 及び $\text{R}_{41} \sim \text{R}_{48}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であり、

ただし、 R_{41} 及び R_{42} の組、 R_{42} 及び R_{43} の組、 R_{43} 及び R_{44} の組、 R_4

50

5 及び R_{4 6} の組、R_{4 6} 及び R_{4 7} の組、並びに R_{4 7} 及び R_{4 8} の組が互いに結合せず、

L₁ は、単結合であるか、又は無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基であることが好ましい。

【0388】

第四実施形態の化合物において、R₂、R_{3 1}、R_{3 2}、R_{3 4} 及び R_{3 5} は、水素原子であり、n は、1 又は 2 であり、k は、1 又は 2 であり、R_{1 1} ~ R_{1 8} は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換のフェニル基であり、R_{4 1} ~ R_{4 8} は、水素原子であり、L₁ は、単結合であることも好ましい。

【0389】

第五実施形態の化合物において、R₂、R_{3 1}、R_{3 2}、R_{3 4} 及び R_{3 5} は、水素原子であり、n は、1 又は 2 であり、k は、1 又は 2 であり、R_{1 1} ~ R_{1 8}、R_{4 1} ~ R_{4 3} 及び R_{4 5} ~ R_{4 8} は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であり、

ただし、R_{1 1} 及び R_{1 2} の組、R_{1 2} 及び R_{1 3} の組、R_{1 3} 及び R_{1 4} の組、R_{1 5} 及び R_{1 6} の組、R_{1 6} 及び R_{1 7} の組、R_{1 7} 及び R_{1 8} の組、R_{4 1} 及び R_{4 2} の組、R_{4 2} 及び R_{4 3} の組、R_{4 5} 及び R_{4 6} の組、R_{4 6} 及び R_{4 7} の組、並びに R_{4 7} 及び R_{4 8} の組が互いに結合せず、L₁ は、単結合であるか、又は無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基から誘導される基であることが好ましい。

【0390】

第五実施形態の化合物において、R₂、R_{3 1}、R_{3 2}、R_{3 4} 及び R_{3 5} は、水素原子であり、n は、1 又は 2 であり、k は、1 又は 2 であり、R_{1 1} ~ R_{1 8} は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換のフェニル基であり、

ただし、R_{1 1} 及び R_{1 2} の組、R_{1 2} 及び R_{1 3} の組、R_{1 3} 及び R_{1 4} の組、R_{1 5} 及び R_{1 6} の組、R_{1 6} 及び R_{1 7} の組、並びに R_{1 7} 及び R_{1 8} の組が互いに結合せず、

R_{4 1} ~ R_{4 3} 及び R_{4 5} ~ R_{4 8} は、水素原子であり、L₁ は、単結合であることも好ましい。

【0391】

[第五実施形態 A]

[化合物]

第五実施形態 A の化合物は、下記一般式 (501) ~ (514) のいずれかで表される化合物である。

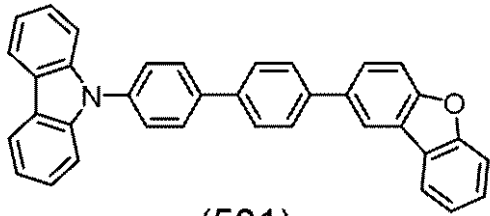
【0392】

10

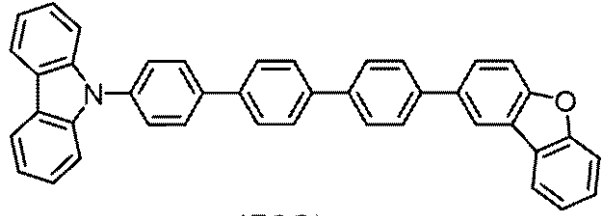
20

30

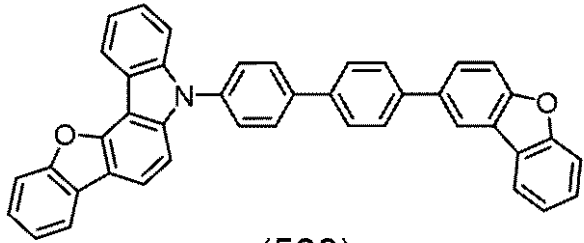
【化 1 2 9】



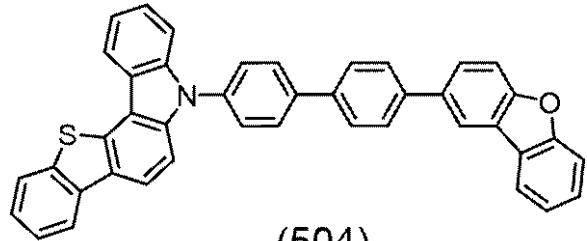
(501)



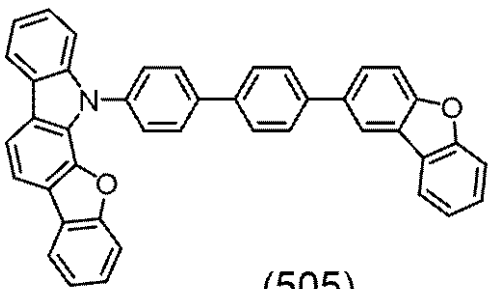
(502)



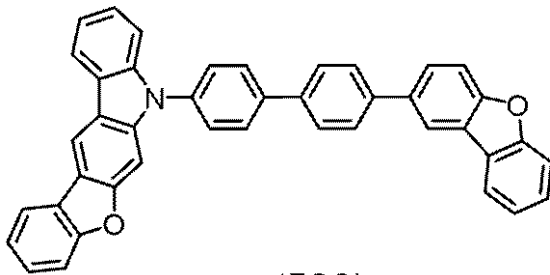
(503)



(504)



(505)



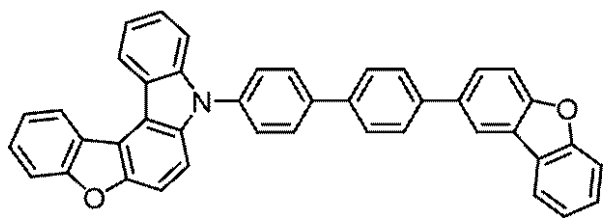
(506)

【 0 3 9 3】

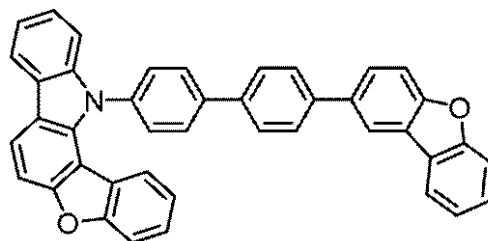
10

20

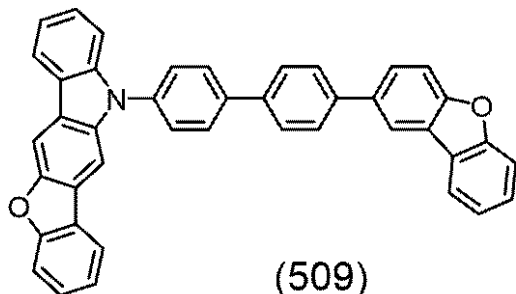
【化 1 3 0】



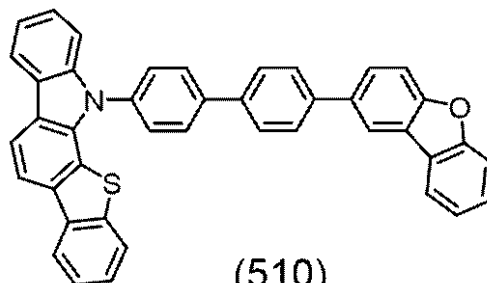
(507)



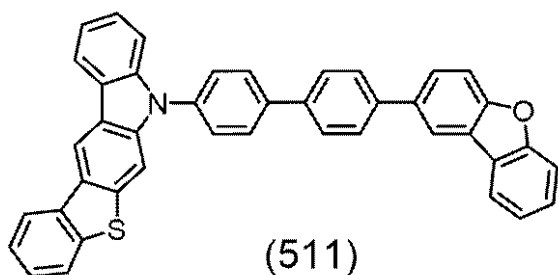
(508)



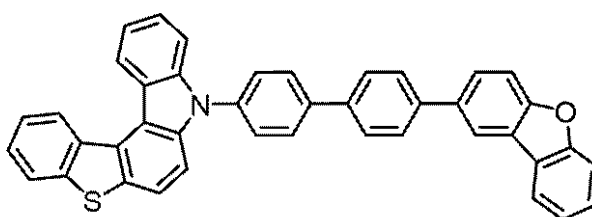
(509)



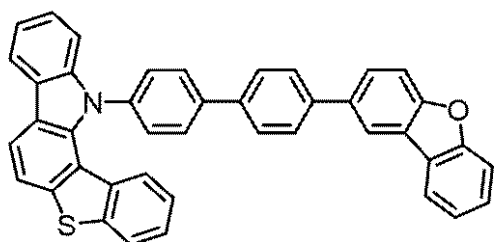
(510)



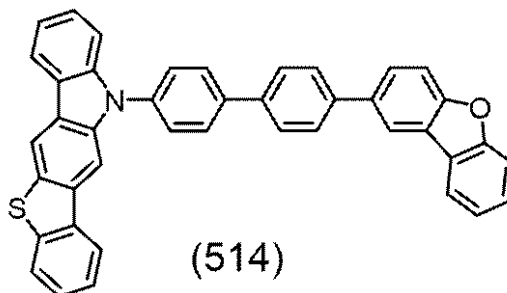
(511)



(512)



(513)



(514)

【 0 3 9 4】

〔有機 E L 素子〕

第五実施形態 A の一態様である有機 E L 素子は、第一実施形態の有機 E L 素子における化合物 M 3 を、第五実施形態 A の化合物（前記一般式（501）～（514）のいずれかで表される化合物）に置き換えた有機 E L 素子である。

前記一般式（501）～（514）で表される化合物は、第一実施形態における化合物 M 3 の一例である。

第五実施形態 A の化合物は、高性能の有機 E L 素子、例えば長寿命で発光する有機 E L 素子を実現させることのできる化合物である。

したがって、第五実施形態 A の一態様である有機 E L 素子も、高性能であり、例えば長寿命で発光する。

【 0 3 9 5】

〔第六実施形態〕

〔有機 E L 素子用材料〕

第六実施形態の有機 E L 素子用材料は、第四実施形態の化合物、第五実施形態の化合物及び第五実施形態 A の化合物の少なくともいずれかを含む。

すなわち、第六実施形態の有機 E L 素子用材料は、一般式（201）～（203）、（

10

20

30

40

50

300)及び(501)~(514)のいずれかで表される化合物の少なくともいずれかを含む。

第六実施形態の有機EL素子用材料によれば、高性能の有機EL素子、例えば長寿命で発光する有機EL素子及び電子機器を実現させることができる。

なお、第六実施形態の有機EL素子用材料は、さらにその他の化合物を含有していてもよい。第六実施形態の有機EL素子用材料が、さらにその他の化合物を含んでいる場合、該その他の化合物は、固体であっても液体であってもよい。

【0396】

〔実施形態の変形〕

なお、本発明は、上述の実施形態に限定されず、本発明の目的を達成できる範囲での変更、改良等は、本発明に含まれる。

10

【0397】

例えば、発光層は、1層に限られず、複数の発光層が積層されていてもよい。有機EL素子が複数の発光層を有する場合、少なくとも1つの発光層が上記実施形態で説明した条件を満たしていればよい。例えば、その他の発光層が、蛍光発光型の発光層であっても、三重項励起状態から直接基底状態への電子遷移による発光を利用した燐光発光型の発光層であってもよい。

また、有機EL素子が複数の発光層を有する場合、これらの発光層が互いに隣接して設けられていてもよいし、中間層を介して複数の発光ユニットが積層された、いわゆるタンデム型の有機EL素子であってもよい。

20

【0398】

また、例えば、発光層の陽極側、及び陰極側の少なくとも一方に障壁層を隣接させて設けてもよい。障壁層は、発光層に接して配置され、正孔、電子、及び励起子の少なくともいずれかを阻止することが好ましい。

例えば、発光層の陰極側で接して障壁層が配置された場合、当該障壁層は、電子を輸送し、かつ正孔が当該障壁層よりも陰極側の層(例えば、電子輸送層)に到達することを阻止する。有機EL素子が、電子輸送層を含む場合は、発光層と電子輸送層との間に当該障壁層を含むことが好ましい。

また、発光層の陽極側で接して障壁層が配置された場合、当該障壁層は、正孔を輸送し、かつ電子が当該障壁層よりも陽極側の層(例えば、正孔輸送層)に到達することを阻止する。有機EL素子が、正孔輸送層を含む場合は、発光層と正孔輸送層との間に当該障壁層を含むことが好ましい。

30

また、励起エネルギーが発光層からその周辺層に漏れ出さないように、障壁層を発光層に隣接させて設けてもよい。発光層で生成した励起子が、当該障壁層よりも電極側の層(例えば、電子輸送層及び正孔輸送層等)に移動することを阻止する。

発光層と障壁層とは接合していることが好ましい。

【0399】

その他、本発明の実施における具体的な構造、及び形状等は、本発明の目的を達成できる範囲で他の構造等としてもよい。

【0400】

本明細書において、「~」を用いて表される数値範囲は、「~」の前に記載される数値を下限値とし、「~」の後に記載される数値を上限値として含む範囲を意味する。

40

【0401】

本明細書において、R_x及びR_yが互いに結合して環を形成するとは、例えば、R_x及びR_yが炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子又はケイ素原子を含み、R_xに含まれる原子(炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子又はケイ素原子)と、R_yに含まれる原子(炭素原子、窒素原子、酸素原子、硫黄原子又はケイ素原子)とが、単結合、二重結合、三重結合、又は二価の連結基を介して結合し、環形成原子数が5以上の環(具体的には、複素環又は芳香族炭化水素環)を形成することを意味する。xは、数字、文字、又は、数字と文字との組み合わせである。yは、数字、文字、又は、数字と文字との組み合わせ

50

せである。

二価の連結基としては特に制限されないが、例えば、 $-O-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO_2-$ 、 $-S-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-NH-$ 、 $-NRa-$ 、及びこれらの連結基を2以上組み合わせさせた基等が挙げられる。

複素環の具体例としては、後述の「一般式中における各置換基についての説明」で例示した「ヘテロアリール基 Sub_2 」から結合手を除いた環構造（複素環）が挙げられる。これらの複素環は置換基を有していてもよい。

芳香族炭化水素環の具体例としては、後述の「一般式中における各置換基についての説明」で例示した「アリール基 Sub_1 」から結合手を除いた環構造（芳香族炭化水素環）が挙げられる。これらの芳香族炭化水素環は置換基を有していてもよい。

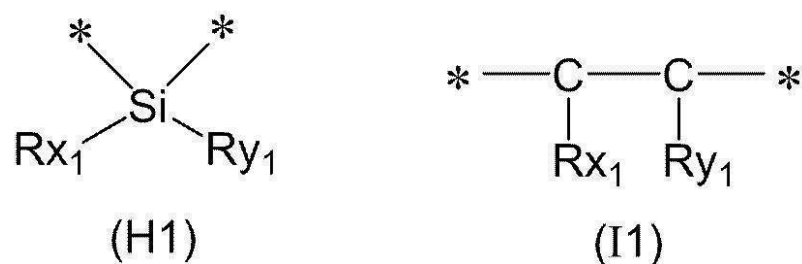
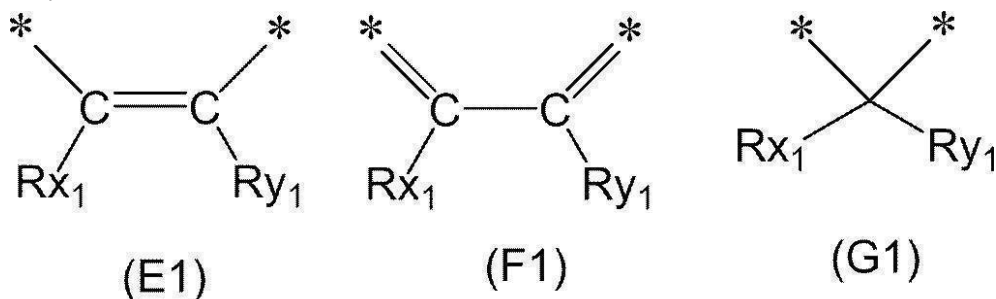
Ra としては、例えば、後述の「一般式中における各置換基についての説明」で例示した置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基 Sub_3 、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基 Sub_1 、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基 Sub_2 等が挙げられる。

例えば、 Rx 及び Ry が互いに結合して環を形成するとは、下記一般式 (E1) で表される分子構造において、 Rx_1 に含まれる原子と、 Ry_1 に含まれる原子とが、一般式 (E2) で表される環（環構造）Eを形成すること；一般式 (F1) で表される分子構造において、 Rx_1 に含まれる原子と、 Ry_1 に含まれる原子とが、一般式 (F2) で表される環Fを形成すること；一般式 (G1) で表される分子構造において、 Rx_1 に含まれる原子と、 Ry_1 に含まれる原子とが、一般式 (G2) で表される環Gを形成すること；一般式 (H1) で表される分子構造において、 Rx_1 に含まれる原子と、 Ry_1 に含まれる原子とが、一般式 (H2) で表される環Hを形成すること；一般式 (I1) で表される分子構造において、 Rx_1 に含まれる原子と、 Ry_1 に含まれる原子とが、一般式 (I2) で表される環Iを形成すること；を意味する。

一般式 (E1) ~ (I1) 中、* は、それぞれ独立に、一分子中の他の原子との結合位置を表す。一般式 (E1) 中の2つの* は一般式 (E2) 中の2つの* にそれぞれ対応し、一般式 (F1) 中の2つの* は一般式 (F2) 中の2つの* にそれぞれ対応し、一般式 (G1) 中の2つの* は一般式 (G2) 中の2つの* にそれぞれ対応し、一般式 (H1) 中の2つの* は一般式 (H2) 中の2つの* にそれぞれ対応し、一般式 (I1) 中の2つの* は一般式 (I2) 中の2つの* にそれぞれ対応する。

【0402】

【化131】



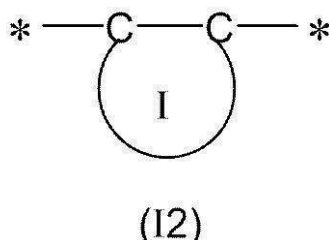
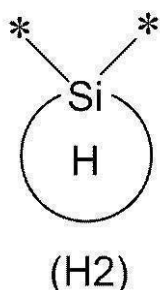
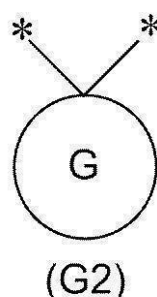
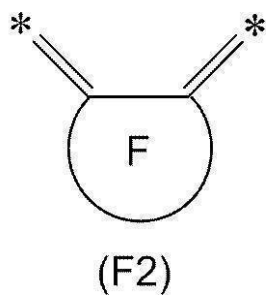
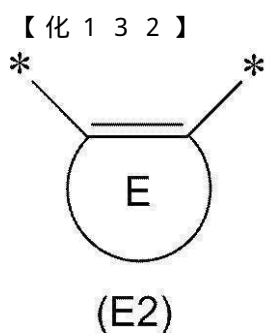
【0403】

10

20

30

40



10

【 0 4 0 4 】

一般式 (E 2) ~ (I 2) で表される分子構造において、E ~ I はそれぞれ環構造 (前記環形成原子数が 5 以上の環) を表す。一般式 (E 2) ~ (I 2) 中、* は、それぞれ独立に、一分子中の他の原子との結合位置を表す。一般式 (E 2) 中の 2 つの * は一般式 (E 1) 中の 2 つの * にそれぞれ対応する。一般式 (F 2) ~ (I 2) 中の 2 つの * についても同様に、一般式 (F 1) ~ (I 1) 中の 2 つの * にそれぞれ対応する。

20

【 0 4 0 5 】

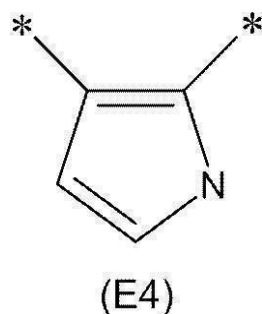
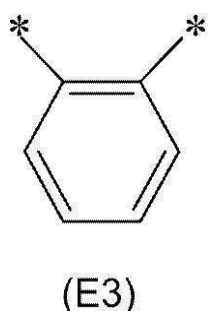
例えば、一般式 (E 1) において、 $R x_1$ 及び $R y_1$ が互いに結合して一般式 (E 2) 中の環 E を形成し、環 E が無置換のベンゼン環である場合、一般式 (E 1) で表される分子構造は、下記一般式 (E 3) で表される分子構造になる。ここで、一般式 (E 3) 中の 2 つの * は、それぞれ独立に、一般式 (E 2) および一般式 (E 1) 中の 2 つの * に対応する。

30

例えば、一般式 (E 1) において、 $R x_1$ 及び $R y_1$ が互いに結合して一般式 (E 2) 中の環 E を形成し、環 E が無置換のピロール環である場合、一般式 (E 1) で表される分子構造は、下記一般式 (E 4) で表される分子構造になる。ここで、一般式 (E 4) 中の 2 つの * は、それぞれ独立に、一般式 (E 2) および一般式 (E 1) 中の 2 つの * に対応する。一般式 (E 3) 及び (E 4) 中、* は、それぞれ独立に、一分子中の他の原子との結合位置を表す。

【 0 4 0 6 】

【化 1 3 3】



40

【 0 4 0 7 】

本明細書において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物 (例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物) の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置

50

換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記載される「環形成炭素数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が6であり、ナフタレン環は環形成炭素数が10であり、ピリジニル基は環形成炭素数が5であり、フラニル基は環形成炭素数4である。また、ベンゼン環やナフタレン環に置換基として例えばアルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、環形成炭素数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の炭素数は環形成炭素数の数に含めない。

【0408】

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

【0409】

・本明細書における一般式中における各置換基についての説明（各置換基の説明）

本明細書におけるアリール基（芳香族炭化水素基と称する場合がある。）は、例えば、アリール基 $S u b_1$ であり、アリール基 $S u b_1$ は、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、フルオレニル基、ピレニル基、クリセニル基、フルオランテニル基、ベンゾ[a]アントリル基、ベンゾ[c]フェナントリル基、トリフェニレニル基、ベンゾ[k]フルオランテニル基、ベンゾ[g]クリセニル基、ベンゾ[b]トリフェニレニル基、ピセニル基、及びペリレニル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【0410】

本明細書におけるアリール基 $S u b_1$ としては、環形成炭素数が、6～30であることが好ましく、6～20であることがより好ましく、6～14であることがさらに好ましく、6～12であることがよりさらに好ましい。上記アリール基 $S u b_1$ の中でもフェニル基、ピフェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、ターフェニル基、及びフルオレニル基が好ましい。1-フルオレニル基、2-フルオレニル基、3-フルオレニル基及び4-フルオレニル基については、9位の炭素原子に、後述する本明細書における置換もしくは無置換のアルキル基 $S u b_3$ や、置換もしくは無置換のアリール基 $S u b_1$ が置換されていることが好ましい。

【0411】

本明細書におけるヘテロアリール基（複素環基、ヘテロ芳香族環基、または芳香族複素環基と称する場合がある。）は、例えば、複素環基 $S u b_2$ である。複素環基 $S u b_2$ は、ヘテロ原子として、窒素、硫黄、酸素、ケイ素、セレン原子、及びゲルマニウム原子からなる群から選択される少なくともいずれかの原子を含む基である。複素環基 $S u b_2$ は、ヘテロ原子として、窒素、硫黄、及び酸素からなる群から選択される少なくともいずれかの原子を含む基であることが好ましい。

【0412】

本明細書における複素環基 $S u b_2$ は、例えば、ピリジル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリニル基、ナフチリジニル基、フタラジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、

10

20

30

40

50

トリアゾリル基、テトラゾリル基、インドリル基、ベンズイミダゾリル基、インダゾリル基、イミダゾピリジニル基、ベンズトリアゾリル基、カルバゾリル基、フリル基、チエニル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、イソキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾイソキサゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、ベンゾオキサジアゾリル基、ベンゾチアジアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、ピペリジニル基、ピロリジニル基、ピペラジニル基、モルホルル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、及びフェノキサジニル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【0413】

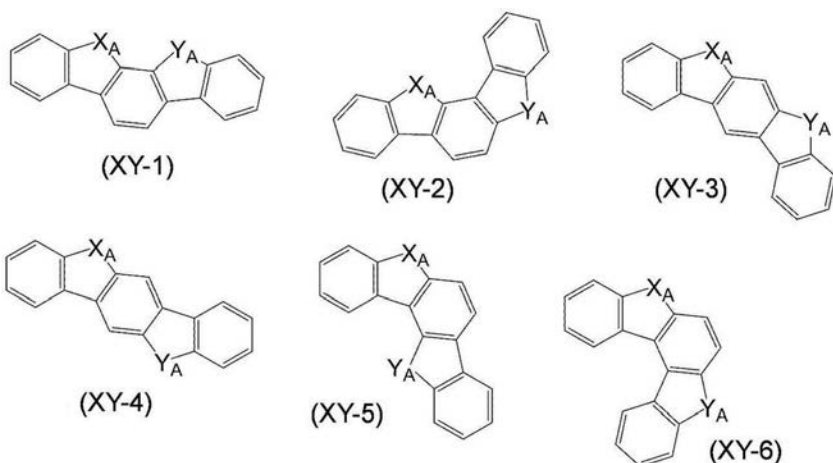
本明細書における複素環基 $S u b_2$ としては、環形成原子数が、5 ~ 30 であることが好ましく、5 ~ 20 であることがより好ましく、5 ~ 14 であることがさらに好ましい。上記複素環基 $S u b_2$ の中でも 1 - ジベンゾフラニル基、2 - ジベンゾフラニル基、3 - ジベンゾフラニル基、4 - ジベンゾフラニル基、1 - ジベンゾチエニル基、2 - ジベンゾチエニル基、3 - ジベンゾチエニル基、4 - ジベンゾチエニル基、1 - カルバゾリル基、2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基、4 - カルバゾリル基、及び 9 - カルバゾリル基がさらにより好ましい。1 - カルバゾリル基、2 - カルバゾリル基、3 - カルバゾリル基及び 4 - カルバゾリル基については、9 位の窒素原子に、本明細書における置換もしくは無置換のアリール基 $S u b_1$ や、置換もしくは無置換の複素環基 $S u b_2$ が置換していることが好ましい。

【0414】

また、本明細書において、複素環基 $S u b_2$ は、例えば、下記一般式 (XY-1) ~ (XY-18) で表される部分構造から誘導される基であってもよい。

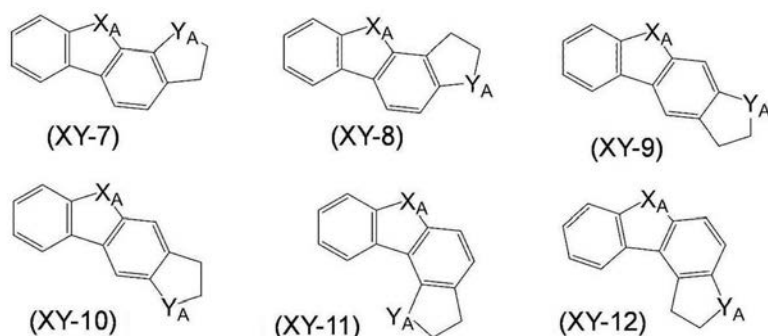
【0415】

【化134】



【0416】

【化135】



【0417】

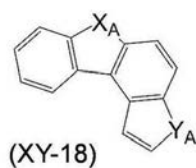
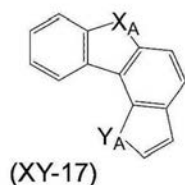
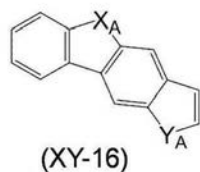
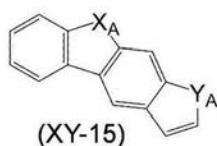
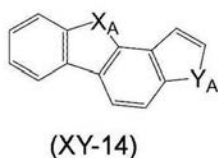
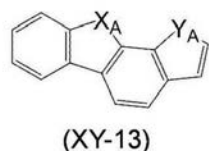
10

20

30

40

【化 1 3 6】



10

【0 4 1 8】

前記一般式 (XY-1) ~ (XY-18) において、 X_A 及び Y_A は、それぞれ独立に、ヘテロ原子であり、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、ケイ素原子、またはゲルマニウム原子であることが好ましい。前記一般式 (XY-1) ~ (XY-18) で表される部分構造は、任意の位置で結合手を有して複素環基となり、この複素環基は、置換基を有していてもよい。

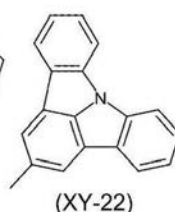
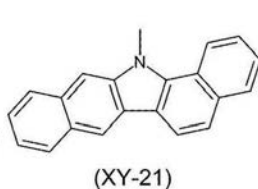
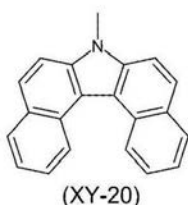
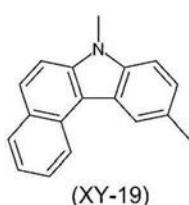
【0 4 1 9】

また、本明細書において、複素環基 Sub_2 は、例えば、下記一般式 (XY-19) ~ (XY-22) で表される基であってもよい。また、結合手の位置も適宜変更され得る。

20

【0 4 2 0】

【化 1 3 7】



30

【0 4 2 1】

本明細書におけるアルキル基は、直鎖のアルキル基、分岐鎖のアルキル基または環状のアルキル基のいずれであってもよい。

本明細書におけるアルキル基は、例えば、アルキル基 Sub_3 である。

本明細書における直鎖のアルキル基は、例えば、直鎖のアルキル基 $Sub_{3,1}$ である。

本明細書における分岐鎖のアルキル基は、例えば、分岐鎖のアルキル基 $Sub_{3,2}$ である。

本明細書における環状のアルキル基は、例えば、環状のアルキル基 $Sub_{3,3}$ である。

アルキル基 Sub_3 は、例えば、直鎖のアルキル基 $Sub_{3,1}$ 、分岐鎖のアルキル基 $Sub_{3,2}$ 、及び環状のアルキル基 $Sub_{3,3}$ からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

40

【0 4 2 2】

直鎖のアルキル基 $Sub_{3,1}$ または分岐鎖のアルキル基 $Sub_{3,2}$ は、例えば、メチル基、エチル基、 n -プロピル基、イソプロピル基、 n -ブチル基、 s -ブチル基、イソブチル基、 t -ブチル基、 n -ペンチル基、 n -ヘキシル基、 n -ヘプチル基、 n -オクチル基、 n -ノニル基、 n -デシル基、 n -ウンデシル基、 n -ドデシル基、 n -トリデシル基、 n -テトラデシル基、 n -ペンタデシル基、 n -ヘキサデシル基、 n -ヘプタデシル基、 n -オクタデシル基、ネオペンチル基、アミル基、イソアミル基、1-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基、及び3-メチルペンチル基からなる群から選択される少なくともい

50

ずれかの基である。

【0423】

本明細書における直鎖のアルキル基 $S u b_{31}$ または分岐鎖のアルキル基 $S u b_{32}$ の炭素数は、1 ~ 30 であることが好ましく、1 ~ 20 であることがより好ましく、1 ~ 10 であることがさらに好ましく、1 ~ 6 であることがよりさらに好ましい。上記直鎖のアルキル基 $S u b_{31}$ または分岐鎖のアルキル基 $S u b_{32}$ としては、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、*s*-ブチル基、イソブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*n*-ヘキシル基、アミル基、イソアミル基、及びネオペンチル基がさらにより好ましい。

【0424】

本明細書における環状のアルキル基 $S u b_{33}$ は、例えば、シクロアルキル基 $S u b_{331}$ である。

【0425】

本明細書におけるシクロアルキル基 $S u b_{331}$ は、例えば、シクロプロピル基、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、4-メチルシクロヘキシル基、アダマンチル基、及びノルボルニル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。シクロアルキル基 $S u b_{331}$ の環形成炭素数は、3 ~ 30 であることが好ましく、3 ~ 20 であることがより好ましく、3 ~ 10 であることがさらに好ましく、5 ~ 8 であることがよりさらに好ましい。シクロアルキル基 $S u b_{331}$ の中でも、シクロペンチル基やシクロヘキシル基がさらにより好ましい。

【0426】

本明細書におけるハロゲン化アルキル基は、例えば、ハロゲン化アルキル基 $S u b_4$ であり、ハロゲン化アルキル基 $S u b_4$ は、例えば、アルキル基 $S u b_3$ が1以上のハロゲン原子、好ましくはフッ素原子で置換されたアルキル基である。

【0427】

本明細書におけるハロゲン化アルキル基 $S u b_4$ は、例えば、フルオロメチル基、ジフルオロメチル基、トリフルオロメチル基、フルオロエチル基、トリフルオロメチルメチル基、トリフルオロエチル基、及びペンタフルオロエチル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【0428】

本明細書における置換シリル基は、例えば、置換シリル基 $S u b_5$ であり、置換シリル基 $S u b_5$ は、例えば、アルキルシリル基 $S u b_{51}$ 及びアリーールシリル基 $S u b_{52}$ からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【0429】

本明細書におけるアルキルシリル基 $S u b_{51}$ は、例えば、上記アルキル基 $S u b_3$ を有するトリアルキルシリル基 $S u b_{511}$ である。

トリアルキルシリル基 $S u b_{511}$ は、例えば、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリ-*n*-ブチルシリル基、トリ-*n*-オクチルシリル基、トリエチルシリル基、ジメチルエチルシリル基、ジメチルイソプロピルシリル基、ジメチル-*n*-プロピルシリル基、ジメチル-*n*-ブチルシリル基、ジメチル-*t*-ブチルシリル基、ジエチルイソプロピルシリル基、ビニルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基、及びトリエチルシリル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。トリアルキルシリル基 $S u b_{511}$ における3つのアルキル基 $S u b_3$ は、互いに同一でも異なってもよい。

【0430】

本明細書におけるアリーールシリル基 $S u b_{52}$ は、例えば、ジアルキルアリーールシリル基 $S u b_{521}$ 、アルキルジアリーールシリル基 $S u b_{522}$ 、及びトリアリーールシリル基 $S u b_{523}$ からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【0431】

ジアルキルアリーールシリル基 $S u b_{521}$ は、例えば、上記アルキル基 $S u b_3$ を2つ

10

20

30

40

50

有し、上記アリアル基 Sub_1 を1つ有するジアルキルアリアルシリル基である。ジアルキルアリアルシリル基 Sub_{521} の炭素数は、8 ~ 30であることが好ましい。

【0432】

アルキルジアリアルシリル基 Sub_{522} は、例えば、上記アルキル基 Sub_3 を1つ有し、上記アリアル基 Sub_1 を2つ有するアルキルジアリアルシリル基である。アルキルジアリアルシリル基 Sub_{522} の炭素数は、13 ~ 30であることが好ましい。

【0433】

トリアリアルシリル基 Sub_{523} は、例えば、上記アリアル基 Sub_1 を3つ有するトリアリアルシリル基である。トリアリアルシリル基 Sub_{523} の炭素数は、18 ~ 30であることが好ましい。

10

【0434】

本明細書における置換もしくは無置換のアルキルスルホニル基は、例えば、アルキルスルホニル基 Sub_6 であり、アルキルスルホニル基 Sub_6 は、 $-SO_2R_w$ で表される。 $-SO_2R_w$ における R_w は、置換もしくは無置換の上記アルキル基 Sub_3 を表す。

【0435】

本明細書におけるアラルキル基（アリアルアルキル基と称する場合がある）は、例えば、アラルキル基 Sub_7 である。アラルキル基 Sub_7 におけるアリアル基は、例えば、上記アリアル基 Sub_1 及び上記ヘテロアリアル基 Sub_2 の少なくとも一方を含む。

【0436】

本明細書におけるアラルキル基 Sub_7 は、アリアル基 Sub_1 を有する基であることが好ましく、 $-Z_3-Z_4$ と表される。この Z_3 は、例えば、上記アルキル基 Sub_3 に対応するアルキレン基等である。この Z_4 は、例えば、上記アリアル基 Sub_1 である。このアラルキル基 Sub_7 は、アリアル部分が炭素数6 ~ 30（好ましくは6 ~ 20、より好ましくは6 ~ 12）、アルキル部分が炭素数1 ~ 30（好ましくは1 ~ 20、より好ましくは1 ~ 10、さらに好ましくは1 ~ 6）であることが好ましい。このアラルキル基 Sub_7 は、例えば、ベンジル基、2-フェニルプロパン-2-イル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-t-ブチル基、-ナフチルメチル基、1--ナフチルエチル基、2--ナフチルエチル基、1--ナフチルイソプロピル基、2--ナフチルイソプロピル基、-ナフチルメチル基、1--ナフチルエチル基、2--ナフチルエチル基、1--ナフチルイソプロピル基、及び2--ナフチルイソプロピル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

20

30

【0437】

本明細書におけるアルコキシ基は、例えば、アルコキシ基 Sub_8 であり、アルコキシ基 Sub_8 は、 $-OZ_1$ と表される。この Z_1 は、例えば、上記アルキル基 Sub_3 である。アルコキシ基 Sub_8 は、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペンチルオキシ基、及びヘキシルオキシ基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。アルコキシ基 Sub_8 の炭素数は、1 ~ 30であることが好ましく、1 ~ 20であることがより好ましい。

【0438】

本明細書におけるハロゲン化アルコキシ基は、例えば、ハロゲン化アルコキシ基 Sub_9 であり、ハロゲン化アルコキシ基 Sub_9 は、例えば、上記アルコキシ基 Sub_8 が1以上のハロゲン原子、好ましくはフッ素原子で置換されたアルコキシ基である。

40

【0439】

本明細書におけるアリアルオキシ基（アリアルアルコキシ基と称する場合がある）は、例えば、アリアルアルコキシ基 Sub_{10} である。アリアルアルコキシ基 Sub_{10} におけるアリアル基は、アリアル基 Sub_1 及びヘテロアリアル基 Sub_2 の少なくとも一方を含む。

【0440】

本明細書におけるアリアルアルコキシ基 Sub_{10} は、 $-OZ_2$ と表される。この Z_2

50

のは、例えば、アリアル基 $S u b_{10}$ またはヘテロアリアル基 $S u b_{20}$ である。アリアルアルコキシ基 $S u b_{10}$ の環形成炭素数は、6 ~ 30 であることが好ましく、6 ~ 20 であることがより好ましい。このアリアルアルコキシ基 $S u b_{10}$ としては、例えば、フェノキシ基が挙げられる。

【0441】

本明細書における置換アミノ基は、例えば、置換アミノ基 $S u b_{11}$ であり、置換アミノ基 $S u b_{11}$ は、例えば、アリアルアミノ基 $S u b_{111}$ 及びアルキルアミノ基 $S u b_{112}$ からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

アリアルアミノ基 $S u b_{111}$ は、 $-NHR_{v1}$ 、または $-N(R_{v1})_2$ と表される。この R_{v1} は、例えば、アリアル基 $S u b_{10}$ である。 $-N(R_{v1})_2$ における2つの R_{v1} は、同一または異なる。

アルキルアミノ基 $S u b_{112}$ は、 $-NHR_{v2}$ 、または $-N(R_{v2})_2$ と表される。この R_{v2} は、例えば、アルキル基 $S u b_{30}$ である。 $-N(R_{v2})_2$ における2つの R_{v2} は、同一または異なる。

【0442】

本明細書におけるアルケニル基は、例えば、アルケニル基 $S u b_{12}$ であり、アルケニル基 $S u b_{12}$ は、直鎖または分岐鎖のいずれかであり、例えば、ビニル基、プロペニル基、ブテニル基、オレイル基、エイコサペンタエニル基、ドコサヘキサエニル基、スチリル基、2,2-ジフェニルビニル基、1,2,2-トリフェニルビニル基、及び2-フェニル-2-プロペニルからなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【0443】

本明細書におけるアルキニル基は、例えば、アルキニル基 $S u b_{13}$ であり、アルキニル基 $S u b_{13}$ は、直鎖または分岐鎖のいずれであってもよく、例えば、エチニル、プロピニル、および2-フェニルエチニルからなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【0444】

本明細書におけるアルキルチオ基は、例えば、アルキルチオ基 $S u b_{14}$ である。

アルキルチオ基 $S u b_{14}$ は、 $-SR_{v3}$ と表される。この R_{v3} は、例えば、アルキル基 $S u b_{30}$ である。アルキルチオ基 $S u b_{14}$ の炭素数は、1 ~ 30 であることが好ましく、1 ~ 20 であることがより好ましい。

本明細書におけるアリアルチオ基は、例えば、アリアルチオ基 $S u b_{15}$ である。

アリアルチオ基 $S u b_{15}$ は、 $-SR_{v4}$ と表される。この R_{v4} は、例えば、アリアル基 $S u b_{10}$ である。アリアルチオ基 $S u b_{15}$ の環形成炭素数は、6 ~ 30 であることが好ましく、6 ~ 20 であることがより好ましい。

【0445】

本明細書におけるハロゲン原子としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、及びヨウ素原子等が挙げられ、フッ素原子が好ましい。

【0446】

本明細書における置換ホスフィノ基は、例えば、置換ホスフィノ基 $S u b_{16}$ であり、置換ホスフィノ基 $S u b_{16}$ は、例えば、フェニルホスファニル基である。

【0447】

本明細書におけるアリアルカルボニル基は、例えば、アリアルカルボニル基 $S u b_{17}$ であり、アリアルカルボニル基 $S u b_{17}$ は、 $-COY'$ と表される。この Y' は、例えば、アリアル基 $S u b_{10}$ である。本明細書におけるアリアルカルボニル基 $S u b_{17}$ は、例えば、フェニルカルボニル基、ジフェニルカルボニル基、ナフチルカルボニル基、及びトリフェニルカルボニル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【0448】

本明細書におけるアシル基は、例えば、アシル基 $S u b_{18}$ であり、アシル基 $S u b_{18}$ は、 $-COR'$ と表される。この R' は、例えば、アルキル基 $S u b_{30}$ である。本明細書におけるアシル基 $S u b_{18}$ は、例えば、アセチル基及びプロピオニル基からなる群か

10

20

30

40

50

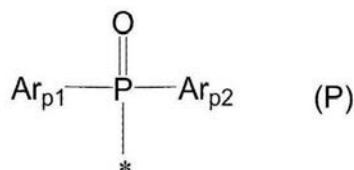
ら選択される少なくともいずれかの基である。

【0449】

本明細書における置換ホスホリル基は、例えば、置換ホスホリル基 $Su b_{19}$ であり、置換ホスホリル基 $Su b_{19}$ は、下記一般式 (P) で表される。

【0450】

【化138】



10

【0451】

前記一般式 (P) において、 Ar_{p1} 及び Ar_{p2} は、上記アルキル基 $Su b_3$ 、及び上記アリール基 $Su b_1$ からなる群から選択されるいずれかの置換基である。

【0452】

本明細書におけるエステル基は、例えば、エステル基 $Su b_{20}$ であり、エステル基 $Su b_{20}$ は、例えば、アルキルエステル基である。

本明細書におけるアルキルエステル基は、例えば、アルキルエステル基 $Su b_{201}$ であり、アルキルエステル基 $Su b_{201}$ は、 $-C(=O)OR^E$ で表される。 R^E は、例えば、置換もしくは無置換の上記アルキル基 $Su b_3$ である。

20

【0453】

本明細書におけるシロキサニル基は、例えば、シロキサニル基 $Su b_{21}$ であり、シロキサニル基 $Su b_{21}$ は、エーテル結合を介したケイ素化合物基である。シロキサニル基 $Su b_{21}$ は、例えば、トリメチルシロキサニル基である。

【0454】

本明細書におけるカルバモイル基は、 $-CONH_2$ で表される。

本明細書における置換のカルバモイル基は、例えば、カルバモイル基 $Su b_{22}$ であり、カルバモイル基 $Su b_{22}$ は、 $-CONH-Ar^C$ 、または $-CONH-R^C$ で表される。 Ar^C は、例えば、置換もしくは無置換の上記アリール基 $Su b_1$ (好ましくは環形成炭素数 6 ~ 10) 及び上記ヘテロアリール基 $Su b_2$ (好ましくは環形成原子数 5 ~ 14) からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。 Ar^C は、アリール基 $Su b_1$ とヘテロアリール基 $Su b_2$ とが結合した基であってもよい。

30

R^C は、例えば、置換もしくは無置換の上記アルキル基 $Su b_3$ (好ましくは炭素数 1 ~ 6) である。

【0455】

本明細書において、「環形成炭素」とは飽和環、不飽和環、または芳香環を構成する炭素原子を意味する。「環形成原子」とはヘテロ環 (飽和環、不飽和環、及び芳香環を含む) を構成する炭素原子及びヘテロ原子を意味する。

【0456】

また、本明細書において、水素原子とは、中性子数の異なる同位体、すなわち、軽水素 (Protium)、重水素 (Deuterium)、三重水素 (Tritium) を包含する。

40

【0457】

以下、アルキル基 $Su b_3$ とは、「各置換基の説明」で説明した直鎖のアルキル基 $Su b_{31}$ 、分岐鎖のアルキル基 $Su b_{32}$ 、及び環状のアルキル基 $Su b_{33}$ のいずれか 1 以上の基を意味する。

同様に、置換シリル基 $Su b_5$ とは、アルキルシリル基 $Su b_{51}$ 及びアリールシリル基 $Su b_{52}$ のいずれか 1 以上の基を意味する。

同様に、置換アミノ基 $Su b_{11}$ とは、アリールアミノ基 $Su b_{111}$ 及びアルキルア

50

ミノ基 $S_{ub\ 1\ 1\ 2}$ のいずれか 1 以上の基を意味する。

【0458】

本明細書において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基としては、例えば置換基 $R_{F\ 1}$ であり、置換基 $R_{F\ 1}$ は、アリール基 $S_{ub\ 1}$ 、ヘテロアリール基 $S_{ub\ 2}$ 、アルキル基 $S_{ub\ 3}$ 、ハロゲン化アルキル基 $S_{ub\ 4}$ 、置換シリル基 $S_{ub\ 5}$ 、アルキルスルホニル基 $S_{ub\ 6}$ 、アラルキル基 $S_{ub\ 7}$ 、アルコキシ基 $S_{ub\ 8}$ 、ハロゲン化アルコキシ基 $S_{ub\ 9}$ 、アリールアルコキシ基 $S_{ub\ 10}$ 、置換アミノ基 $S_{ub\ 11}$ 、アルケニル基 $S_{ub\ 12}$ 、アルキニル基 $S_{ub\ 13}$ 、アルキルチオ基 $S_{ub\ 14}$ 、アリールチオ基 $S_{ub\ 15}$ 、置換ホスフィノ基 $S_{ub\ 16}$ 、アリールカルボニル基 $S_{ub\ 17}$ 、アシル基 $S_{ub\ 18}$ 、置換ホスホリル基 $S_{ub\ 19}$ 、エステル基 $S_{ub\ 20}$ 、シロキサニル基 $S_{ub\ 21}$ 、カルバモイル基 $S_{ub\ 22}$ 、無置換のアミノ基、無置換のシリル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシ基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択される少なくとも一種の基である。

10

【0459】

本明細書において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基 $R_{F\ 1}$ は、ジアリールホウ素基 ($Ar_{B\ 1} Ar_{B\ 2} B-$) であってもよい。この $Ar_{B\ 1}$ 及び $Ar_{B\ 2}$ の例としては、上述のアリール基 $S_{ub\ 1}$ が挙げられる。 $Ar_{B\ 1} Ar_{B\ 2} B-$ における $Ar_{B\ 1}$ 及び $Ar_{B\ 2}$ は同一または異なる。

【0460】

置換基 $R_{F\ 1}$ の具体例及び好ましい基としては、「各置換基の説明」中の置換基 (例えば、アリール基 $S_{ub\ 1}$ 、ヘテロアリール基 $S_{ub\ 2}$ 、アルキル基 $S_{ub\ 3}$ 、ハロゲン化アルキル基 $S_{ub\ 4}$ 、置換シリル基 $S_{ub\ 5}$ 、アルキルスルホニル基 $S_{ub\ 6}$ 、アラルキル基 $S_{ub\ 7}$ 、アルコキシ基 $S_{ub\ 8}$ 、ハロゲン化アルコキシ基 $S_{ub\ 9}$ 、アリールアルコキシ基 $S_{ub\ 10}$ 、置換アミノ基 $S_{ub\ 11}$ 、アルケニル基 $S_{ub\ 12}$ 、アルキニル基 $S_{ub\ 13}$ 、アルキルチオ基 $S_{ub\ 14}$ 、アリールチオ基 $S_{ub\ 15}$ 、置換ホスフィノ基 $S_{ub\ 16}$ 、アリールカルボニル基 $S_{ub\ 17}$ 、アシル基 $S_{ub\ 18}$ 、置換ホスホリル基 $S_{ub\ 19}$ 、エステル基 $S_{ub\ 20}$ 、シロキサニル基 $S_{ub\ 21}$ 、及びカルバモイル基 $S_{ub\ 22}$) の具体例及び好ましい基と同様の基が挙げられる。

20

【0461】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基 $R_{F\ 1}$ は、アリール基 $S_{ub\ 1}$ 、ヘテロアリール基 $S_{ub\ 2}$ 、アルキル基 $S_{ub\ 3}$ 、ハロゲン化アルキル基 $S_{ub\ 4}$ 、置換シリル基 $S_{ub\ 5}$ 、アルキルスルホニル基 $S_{ub\ 6}$ 、アラルキル基 $S_{ub\ 7}$ 、アルコキシ基 $S_{ub\ 8}$ 、ハロゲン化アルコキシ基 $S_{ub\ 9}$ 、アリールアルコキシ基 $S_{ub\ 10}$ 、置換アミノ基 $S_{ub\ 11}$ 、アルケニル基 $S_{ub\ 12}$ 、アルキニル基 $S_{ub\ 13}$ 、アルキルチオ基 $S_{ub\ 14}$ 、アリールチオ基 $S_{ub\ 15}$ 、置換ホスフィノ基 $S_{ub\ 16}$ 、アリールカルボニル基 $S_{ub\ 17}$ 、アシル基 $S_{ub\ 18}$ 、置換ホスホリル基 $S_{ub\ 19}$ 、エステル基 $S_{ub\ 20}$ 、シロキサニル基 $S_{ub\ 21}$ 、カルバモイル基 $S_{ub\ 22}$ 、無置換のアミノ基、無置換のシリル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシ基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択される少なくとも一種の基 (以下、置換基 $R_{F\ 2}$ とも称する) によってさらに置換されてもよい。また、これらの置換基 $R_{F\ 2}$ は複数が互いに結合して環を形成してもよい。

30

40

【0462】

「置換もしくは無置換の」という場合における「無置換」とは前記置換基 $R_{F\ 1}$ で置換されておらず、水素原子が結合していることを意味する。

【0463】

なお、本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「炭素数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の炭素数を表し、置換されている場合の置換基 $R_{F\ 1}$ の炭素数は含めない。

【0464】

本明細書において、「置換もしくは無置換の原子数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現に

50

おける「原子数 X X ~ Y Y」は、Z Z 基が無置換である場合の原子数を表し、置換されている場合の置換基 R_{F 1} の原子数は含めない。

【0465】

本明細書において説明する化合物、またはその部分構造において、「置換もしくは無置換の」という場合についても、前記と同様である。

【0466】

本明細書において、置換基同士が互いに結合して環が構築される場合、当該環の構造は、飽和環、不飽和環、芳香族炭化水素環、または複素環である。

【0467】

本明細書において、連結基における芳香族炭化水素基としては、例えば、上述した一価のアリール基 S u b₁ から、1つ以上の原子を除いて得られる二価以上の基が挙げられる。

本明細書において、連結基における複素環基としては、例えば、上述した一価のヘテロアリール基 S u b₂ から、1つ以上の原子を除いて得られる二価以上の基が挙げられる。

【実施例】

【0468】

以下、本発明に係る実施例を説明する。本発明はこれらの実施例によって何ら限定されない。

【0469】

<化合物>

実施例 1 ~ 16 の有機 E L 素子の製造に用いた化合物、及び合成実施例 1 ~ 16 で合成した化合物を以下に示す。

化合物 1 ~ 16 は、一般式 (100) で表される化合物 M3 である。

化合物 3 ~ 4 及び化合物 14 ~ 15 は、一般式 (201) で表される化合物にも該当する。

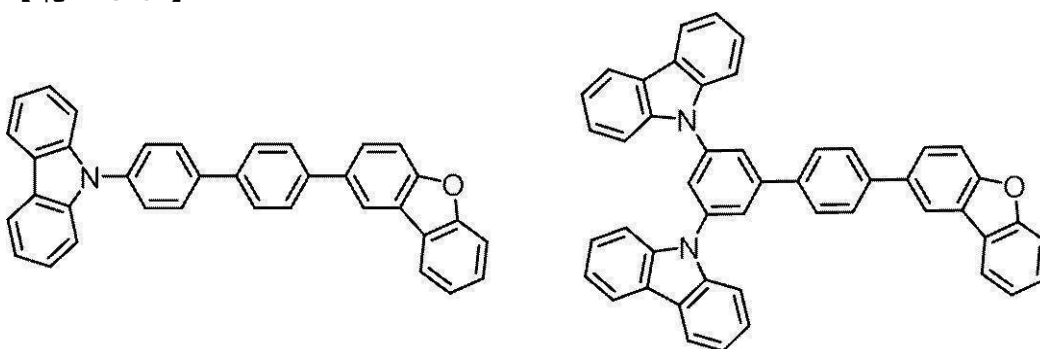
化合物 9 は、一般式 (300) で表される化合物にも該当する。

化合物 10 は、一般式 (202) で表される化合物にも該当する。

化合物 11 は、一般式 (203) で表される化合物にも該当する。

【0470】

【化139】



化合物1

化合物2

【0471】

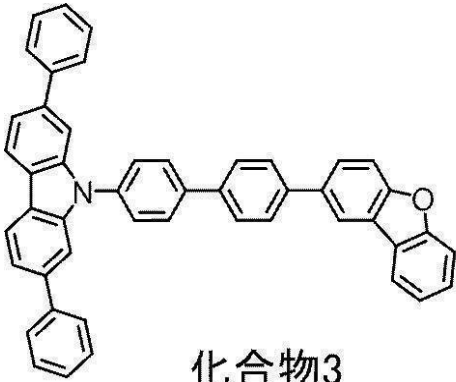
10

20

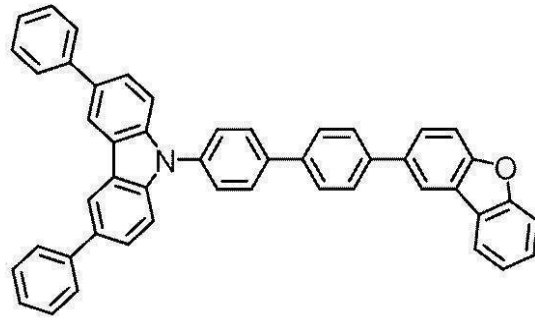
30

40

【化 1 4 0】



化合物3

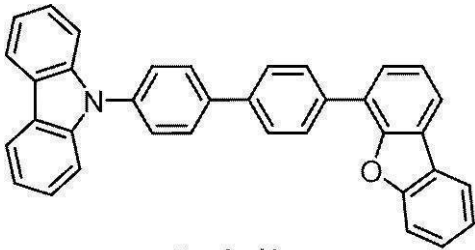


化合物4

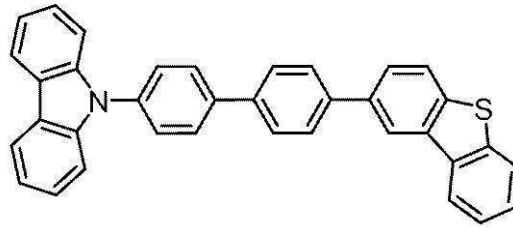
10

【 0 4 7 2】

【化 1 4 1】



化合物5

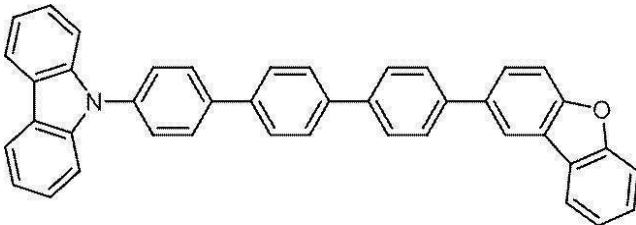


化合物6

20

【 0 4 7 3】

【化 1 4 2】

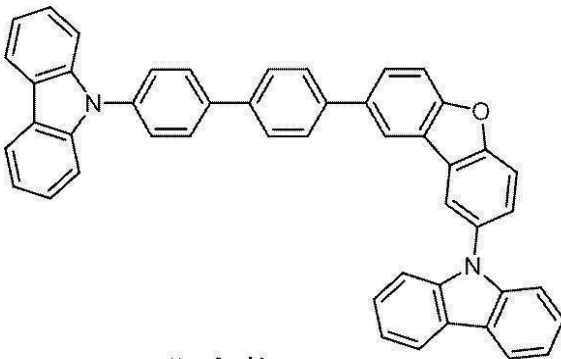


化合物7

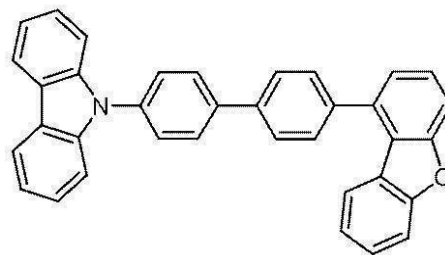
30

【 0 4 7 4】

【化 1 4 3】



化合物8

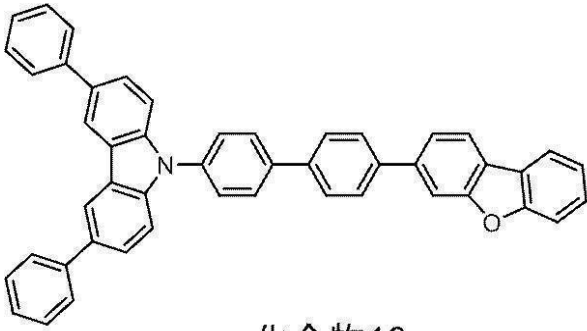


化合物9

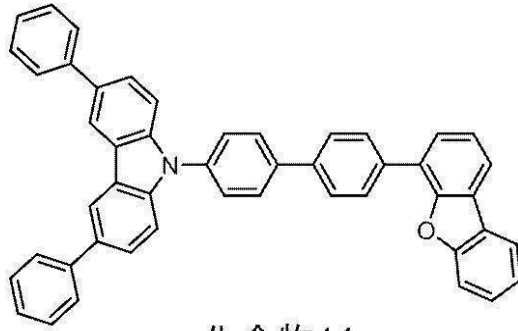
40

【 0 4 7 5】

【化 1 4 4】



化合物10

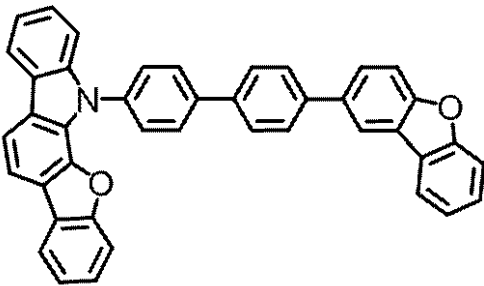


化合物11

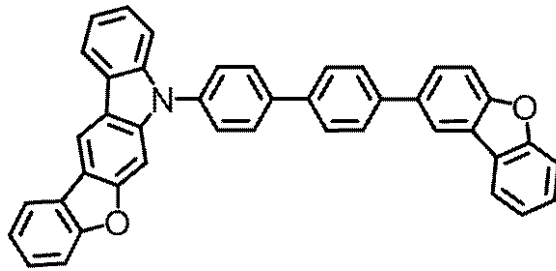
10

【 0 4 7 6】

【化 1 4 5】

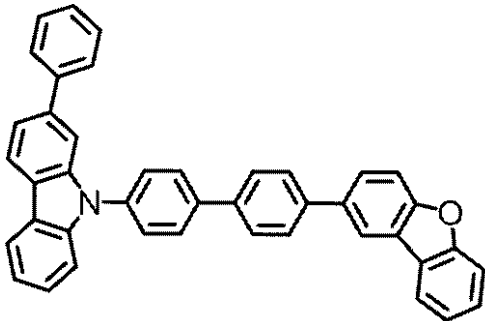


化合物12

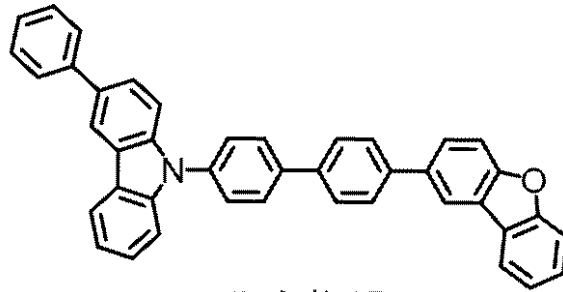


化合物13

20

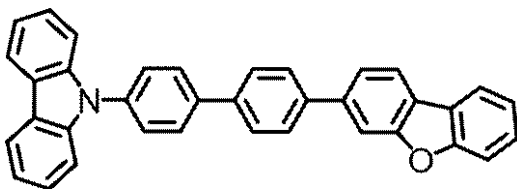


化合物14



化合物15

30



化合物16

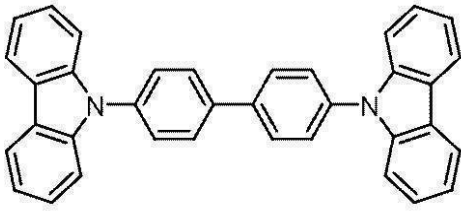
40

【 0 4 7 7】

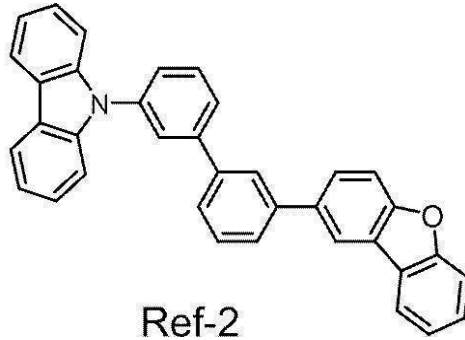
比較例 1 ~ 6 の有機 E L 素子の製造に用いた、比較化合物 R e f - 1、及び R e f - 2 を以下に示す。

【 0 4 7 8】

【化146】



Ref-1



Ref-2

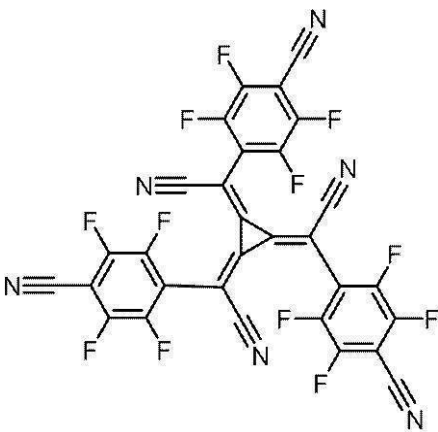
10

【0479】

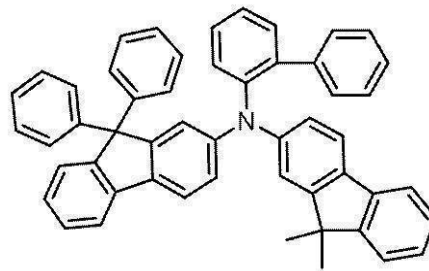
実施例1～16及び比較例1～6の有機EL素子の製造に用いた、他の化合物を以下に示す。

【0480】

【化147】



HA

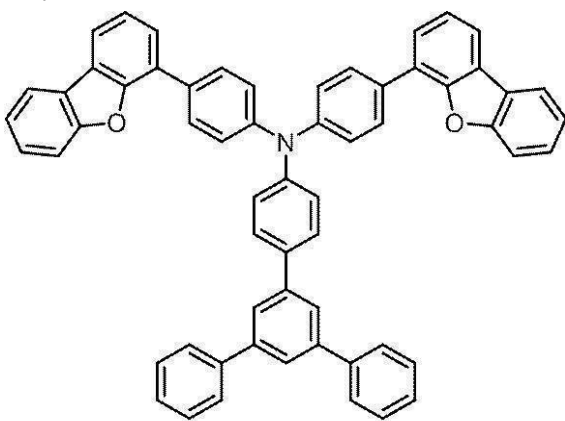


HT

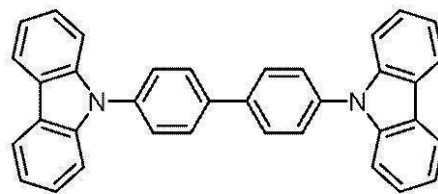
20

【0481】

【化148】



EBL



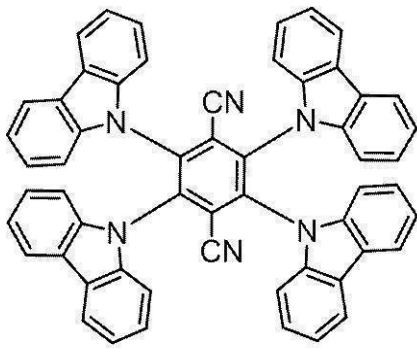
CBP

30

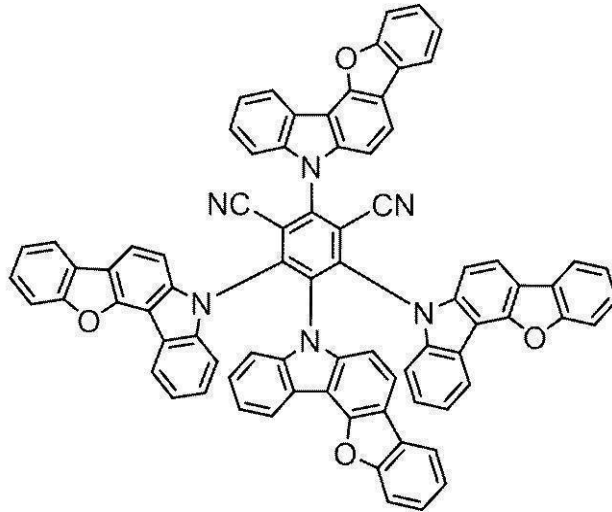
40

【0482】

【化 1 4 9】



TADF-1

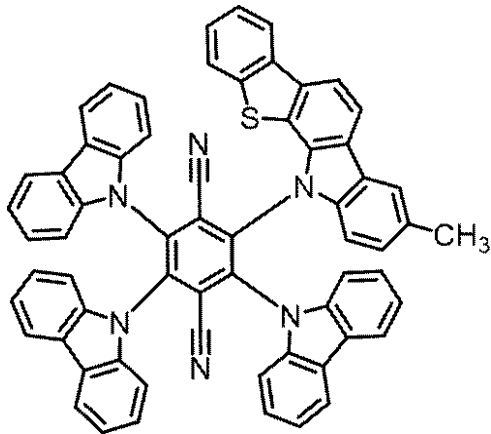


TADF-2

10

【 0 4 8 3】

【化 1 5 0】



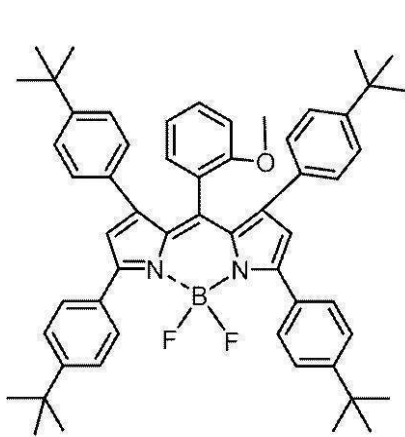
TADF-3

20

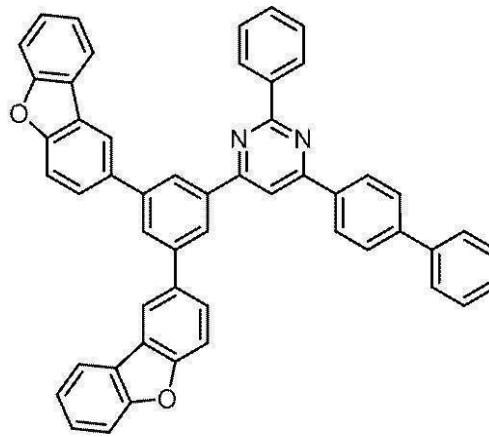
30

【 0 4 8 4】

【化 1 5 1】



RD

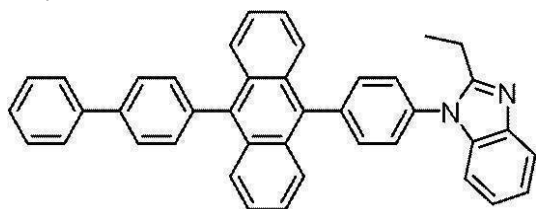


HBL

40

【 0 4 8 5】

【化 1 5 2】



ET

【 0 4 8 6 】

10

< 有機 E L 素子の作製 1 >

〔実施例 1〕

25 mm × 75 mm × 1.1 mm 厚の I T O 透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）を、イソプロピルアルコール中で 5 分間超音波洗浄を行った後、U V オゾン洗浄を 1 分間行った。I T O の膜厚は、130 nm とした。

洗浄後の透明電極ライン付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物 H T と化合物 H A とを共蒸着し、膜厚 10 nm の正孔注入層を形成した。正孔注入層における化合物 H T の濃度を 97 質量%とし、化合物 H A の濃度を 3 質量%とした。

次に、正孔注入層上に、化合物 H T を蒸着し、膜厚 200 nm の正孔輸送層を形成した。

20

次に、この正孔輸送層上に、化合物 E B L を蒸着し、膜厚 10 nm の電子障壁層を形成した。

次に、この電子障壁層上に、蛍光発光性の化合物 M 1 としての化合物 R D と、遅延蛍光性の化合物 M 2 としての化合物 T A D F - 1 と、化合物 M 3 としての化合物 1 とを共蒸着し、膜厚 25 nm の発光層を形成した。発光層における化合物 R D の濃度を 1 質量%とし、化合物 T A D F - 1 の濃度を 25 質量%とし、化合物 1 の濃度を 74 質量%とした。

次に、この発光層上に、化合物 H B L を蒸着し、膜厚 10 nm の正孔障壁層を形成した。

次に、この正孔障壁層上に、化合物 E T を蒸着し、膜厚 30 nm の電子輸送層を形成した。

30

次に、この電子輸送層上に、フッ化リチウム（L i F）を蒸着し、膜厚 1 nm の電子注入性電極（陰極）を形成した。

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

実施例 1 の有機 E L 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

I T O (130) / H T : H A (10, 97% : 3%) / H T (200) / E B L (10) / 化合物 1 : T A D F - 1 : R D (25, 74% : 25% : 1%) / H B L (10) / E T (30) / L i F (1) / A l (80)

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：nm）を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字（97% : 3%）は、正孔注入層における化合物 H T 及び化合物 H A の割合（質量%）を示し、パーセント表示された数字（74% : 25% : 1%）は、発光層における化合物 M 3、化合物 M 2、及び化合物 M 1 の割合（質量%）を示す。以下、同様の表記とする。

40

【 0 4 8 7 】

〔比較例 1 ~ 2〕

比較例 1 ~ 2 の有機 E L 素子は、実施例 1 における化合物 1 を、表 1 の化合物 M 3 の欄に記載の化合物に置き換えたこと以外、実施例 1 と同様にして作製した。

【 0 4 8 8 】

< 評価 1 >

実施例 1 及び比較例 1 ~ 2 で作製した有機 E L 素子について、以下の評価を行った。測

50

定結果を表 1 に示す。

なお、比較例 1 ~ 2 の発光層で使用した R e f - 1 及び R e f - 2 は、便宜上、化合物 M 3 の欄に記載している。

【 0 4 8 9 】

・ 駆動電圧

電流密度が $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ となるように陽極と陰極との間に通電したときの電圧（単位：V）を計測した。

【 0 4 9 0 】

・ 外部量子効率 E Q E

電流密度が $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ となるように素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計 C S - 2 0 0 0（コニカミノルタ株式会社製）で計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、ランバシアン放射を行ったと仮定し外部量子効率 E Q E（単位：%）を算出した。

10

【 0 4 9 1 】

・ 寿命 L T 9 5

分光放射輝度計 C S - 2 0 0（コニカミノルタ株式会社製）を用いて、電流密度が $50 \text{ mA} / \text{cm}^2$ となるように素子に電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が 9 5 % となるまでの時間（単位：h r）を測定した。

【 0 4 9 2 】

・ 主ピーク波長 λ_p

有機 E L 素子の電流密度が $10 \text{ mA} / \text{cm}^2$ となるように素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計 C S - 2 0 0 0（コニカミノルタ株式会社製）で計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、主ピーク波長 λ_p （単位：nm）を算出した。

20

【 0 4 9 3 】

【表 1】

	発光層			電子障壁層	評価			
	化合物 M3	化合物 M2	化合物 M1	化合物	λ_p [nm]	駆動電圧 [V]	EQE [%]	LT95 [h]
実施例1	化合物1	TADF-1	RD	EBL	621	4.33	16.6	82
比較例1	Ref-1	TADF-1	RD	EBL	621	4.41	15.6	52
比較例2	Ref-2	TADF-1	RD	EBL	621	5.18	14.5	48

30

【 0 4 9 4 】

・ 表 1 の説明

λ_p は、有機 E L 素子の主ピーク波長 [nm] を表す。表 2 及び表 3 も同様である。

【 0 4 9 5 】

表 1 に示すように、実施例 1 の有機 E L 素子は、化合物 M 3 としての化合物 1 に代えて化合物 R e f - 1 を用いた比較例 1 の有機 E L 素子、及び、化合物 M 3 としての化合物 1 に代えて化合物 R e f - 2 を用いた比較例 2 の有機 E L 素子に比べ、長い L T 9 5 の値を示した。したがって、実施例 1 の有機 E L 素子によれば、長寿命で発光した。

40

また、実施例 1 の有機 E L 素子は、比較例 1、2 の有機 E L 素子に比べ、駆動電圧が低く、かつ外部量子効率 E Q E も高い値を示した。

【 0 4 9 6 】

< 有機 E L 素子の作製 2 >

〔実施例 2〕

2 5 mm × 7 5 mm × 1 . 1 mm 厚の I T O 透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）を、イソプロピルアルコール中で 5 分間超音波洗浄を行った後、U V

50

オゾン洗浄を1分間行った。ITOの膜厚は、130nmとした。

洗浄後の透明電極ライン付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HTと化合物HAとを共蒸着し、膜厚10nmの正孔注入層を形成した。正孔注入層における化合物HTの濃度を97質量%とし、化合物HAの濃度を3質量%とした。

次に、正孔注入層上に、化合物HTを蒸着し、膜厚200nmの正孔輸送層を形成した。

次に、この正孔輸送層上に、化合物CBPを蒸着し、膜厚10nmの電子障壁層を形成した。

次に、この電子障壁層上に、蛍光発光性の化合物M1としての化合物RDと、遅延蛍光性の化合物M2としての化合物TADF-1と、化合物M3としての化合物1とを共蒸着し、膜厚25nmの発光層を形成した。発光層における化合物RDの濃度を1質量%とし、化合物TADF-1の濃度を25質量%とし、化合物1の濃度を74質量%とした。

次に、この発光層上に、化合物HBLを蒸着し、膜厚10nmの正孔障壁層を形成した。

次に、この正孔障壁層上に、化合物ETを蒸着し、膜厚30nmの電子輸送層を形成した。

次に、この電子輸送層上に、フッ化リチウム(LiF)を蒸着し、膜厚1nmの電子注入性電極(陰極)を形成した。

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

実施例2の有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HT:HA(10,97%:3%)/HT(200)/CBP(10)/化合物1:TADF-1:RD(25,74%:25%:1%)/HBL(10)/ET(30)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚(単位:nm)を示す。

【0497】

〔実施例3~4〕

実施例3~4の有機EL素子は、実施例2における化合物1を、表2の化合物M3の欄に記載の化合物に置き換えたこと以外、実施例2と同様にして作製した。

【0498】

〔比較例3~4〕

比較例3~4の有機EL素子は、実施例2における化合物1を、表2の化合物M3の欄に記載の化合物に置き換えたこと以外、実施例2と同様にして作製した。

【0499】

<評価2>

実施例2~4及び比較例3~4で作製した有機EL素子について、実施例1と同様の方法で、有機EL素子の主ピーク波長 λ_p 、及び寿命LT95を測定した。結果を表2に示す。

なお、比較例3~4の発光層で使用したRef-1及びRef-2は、便宜上、化合物M3の欄に記載している。

10

20

30

40

【表 2】

	発光層			電子障壁層	評価	
	化合物 M3	化合物 M2	化合物 M1	化合物	λ_p [nm]	LT95 [h]
実施例2	化合物1	TADF-1	RD	CBP	621	121
実施例3	化合物2	TADF-1	RD	CBP	621	145
実施例4	化合物3	TADF-1	RD	CBP	621	148
比較例3	Ref-1	TADF-1	RD	CBP	621	80
比較例4	Ref-2	TADF-1	RD	CBP	621	78

10

【0500】

表 2 に示すように、実施例 2 ~ 4 の有機 EL 素子は、化合物 M 3 としての化合物 1 ~ 3 に代えて化合物 R e f - 1 を用いた比較例 3 の有機 EL 素子、及び、化合物 M 3 としての化合物 1 ~ 3 に代えて化合物 R e f - 2 を用いた比較例 4 の有機 EL 素子に比べ、長い LT 95 の値を示した。したがって、実施例 2 ~ 4 の有機 EL 素子によれば、長寿命で発光した。

20

【0501】

< 有機 EL 素子の作製 3 >

〔実施例 5〕

25 mm × 75 mm × 1.1 mm 厚の I T O 透明電極（陽極）付きガラス基板（ジオマテック株式会社製）を、イソプロピルアルコール中で 5 分間超音波洗浄を行った後、U V オゾン洗浄を 1 分間行った。I T O の膜厚は、130 nm とした。

洗浄後の透明電極ライン付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物 H T と化合物 H A とを共蒸着し、膜厚 10 nm の正孔注入層を形成した。正孔注入層における化合物 H T の濃度を 97 質量%とし、化合物 H A の濃度を 3 質量%とした。

30

次に、正孔注入層上に、化合物 H T を蒸着し、膜厚 200 nm の正孔輸送層を形成した。

次に、この正孔輸送層上に、化合物 E B L を蒸着し、膜厚 10 nm の電子障壁層を形成した。

次に、この電子障壁層上に、蛍光発光性の化合物 M 1 としての化合物 R D と、遅延蛍光性の化合物 M 2 としての化合物 T A D F - 2 と、化合物 M 3 としての化合物 1 とを共蒸着し、膜厚 25 nm の発光層を形成した。発光層における化合物 R D の濃度を 1 質量%とし、化合物 T A D F - 2 の濃度を 25 質量%とし、化合物 1 の濃度を 74 質量%とした。

40

次に、この発光層上に、化合物 H B L を蒸着し、膜厚 10 nm の正孔障壁層を形成した。

次に、この正孔障壁層上に、化合物 E T を蒸着し、膜厚 30 nm の電子輸送層を形成した。

次に、この電子輸送層上に、フッ化リチウム（L i F）を蒸着し、膜厚 1 nm の電子注入性電極（陰極）を形成した。

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

実施例 5 の有機 EL 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) / HT:HA (10, 97%:3%) / HT (200) / EBL (10) / 化合物 1:TADF-2:RD (25, 74%:25%:1%) / HBL (10) / ET (30) / LiF (1) / Al (80)

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：nm）を示す。

50

【 0 5 0 2 】

< 評価 3 >

実施例 5 で作製した有機 E L 素子について、実施例 1 と同様の方法で、有機 E L 素子の主ピーク波長 λ_p 、駆動電圧、外部量子効率 E Q E、及び寿命 L T 9 5 を測定した。結果を表 3 に示す。

【 0 5 0 3 】

【表 3】

	発光層			電子障壁層	評価			
	化合物 M3	化合物 M2	化合物 M1	化合物	λ_p [nm]	駆動電圧 [V]	EQE [%]	LT95 [h]
実施例5	化合物1	TADF-2	RD	EBL	619	4.13	15.7	75

10

【 0 5 0 4 】

表 3 に示すように、実施例 5 の有機 E L 素子は、長い L T 9 5 の値を示した。したがって、実施例 5 の有機 E L 素子によれば、長寿命で発光した。

【 0 5 0 5 】

< 有機 E L 素子の作製 4 >

〔実施例 6〕

実施例 6 の有機 E L 素子は、実施例 1 における化合物 M 2 を、表 4 の化合物 M 2 の欄に記載の化合物に置き換えたこと以外、実施例 1 と同様にして作製した。

20

実施例 6 の有機 E L 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) / HT : HA (10, 97% : 3%) / HT (200) / EBL (10) / 化合物 1 : TADF - 3 : RD (25, 74% : 25% : 1%) / HBL (10) / ET (30) / LiF (1) / Al (80)

なお、括弧内の数字は、膜厚 (単位 : nm) を示す。

【 0 5 0 6 】

〔実施例 7 ~ 1 6 〕

実施例 7 ~ 1 6 の有機 E L 素子は、実施例 6 における化合物 1 を、表 4 の化合物 M 3 の欄に記載の化合物に置き換えたこと以外、実施例 6 と同様にして作製した。

【 0 5 0 7 】

〔比較例 5 ~ 6 〕

比較例 5 ~ 6 の有機 E L 素子は、実施例 6 における化合物 1 を、表 4 の化合物 M 3 の欄に記載の化合物に置き換えたこと以外、実施例 6 と同様にして作製した。

30

【 0 5 0 8 】

< 評価 4 >

実施例 6 ~ 1 6 及び比較例 5 ~ 6 で作製した有機 E L 素子について、実施例 1 と同様の方法で、有機 E L 素子の主ピーク波長 λ_p 、駆動電圧、外部量子効率 E Q E、及び寿命 L T 9 5 を測定した。結果を表 4 に示す。

なお、比較例 5 ~ 6 の発光層で使用した R e f - 1 及び R e f - 2 は、便宜上、化合物 M 3 の欄に記載している。

40

【表 4】

	発光層			電子障壁層 化合物	評価			
	化合物 M3	化合物 M2	化合物 M1		λ_p [nm]	駆動 電圧 [V]	EQE [%]	LT95 [h]
実施例6	化合物1	TADF-3	RD	EBL	621	4.35	16.8	185
実施例7	化合物4	TADF-3	RD	EBL	621	4.30	16.0	154
実施例8	化合物5	TADF-3	RD	EBL	621	4.41	16.6	179
実施例9	化合物6	TADF-3	RD	EBL	621	4.43	16.5	185
実施例10	化合物7	TADF-3	RD	EBL	621	4.39	16.0	188
実施例11	化合物9	TADF-3	RD	EBL	621	4.41	16.6	178
実施例12	化合物12	TADF-3	RD	EBL	621	4.12	16.2	195
実施例13	化合物13	TADF-3	RD	EBL	621	4.02	16.0	195
実施例14	化合物14	TADF-3	RD	EBL	621	4.40	16.2	180
実施例15	化合物15	TADF-3	RD	EBL	621	4.33	16.2	161
実施例16	化合物16	TADF-3	RD	EBL	621	4.36	16.1	170
比較例5	Ref-1	TADF-3	RD	EBL	621	4.44	16.0	130
比較例6	Ref-2	TADF-3	RD	EBL	621	4.82	14.7	118

10

20

【0509】

表4に示すように、実施例6～16の有機EL素子は、比較例5～6の有機EL素子に比べ、LT95が大きく改善した。また、実施例6～16の有機EL素子は、比較例6の有機EL素子に比べ、駆動電圧が大きく低減し、かつ外部量子効率EQEが大きく改善した。

【0510】

<化合物の評価>

各例の発光層で使用した化合物、及び後述の合成実施例で合成した化合物の物性値は、以下の方法で測定した。

30

【0511】

・熱活性遅延蛍光性

(化合物TADF-1の遅延蛍光性)

遅延蛍光性は図2に示す装置を利用して過渡PLを測定することにより確認した。前記化合物TADF-1をトルエンに溶解し、自己吸収の寄与を取り除くため励起波長において吸光度が0.05以下の希薄溶液を調製した。また酸素による消光を防ぐため、試料溶液を凍結脱気した後にアルゴン雰囲気下で蓋付きのセルに封入することで、アルゴンで飽和された酸素フリーの試料溶液とした。

40

上記試料溶液の蛍光スペクトルを分光蛍光光度計FP-8600(日本分光社製)で測定し、また同条件で9,10-ジフェニルアントラセンのエタノール溶液の蛍光スペクトルを測定した。両スペクトルの蛍光面積強度を用いて、Morris et al. J. Phys. Chem. 80(1976)969中の(1)式により全蛍光量子収率を算出した。

前記化合物TADF-1が吸収する波長のパルス光(パルスレーザーから照射される光)で励起された後、当該励起状態から即座に観察されるPrompt発光(即時発光)と、当該励起後、即座には観察されず、その後観察されるDelay発光(遅延発光)とが存在する。本実施例における遅延蛍光発光とは、Delay発光(遅延発光)の量がPrompt発光(即時発光)の量に対して5%以上を意味する。具体的には、Prompt

50

発光（即時発光）の量を X_p とし、Delay 発光（遅延発光）の量を X_D としたときに、 X_D / X_p の値が 0.05 以上であることを意味する。

Prompt 発光と Delay 発光の量とその比は、“Nature 492, 234-238, 2012”（参考文献 1）に記載された方法と同様の方法により求めることができる。なお、Prompt 発光と Delay 発光の量の算出に使用される装置は、前記参考文献 1 に記載の装置、または図 2 に記載の装置に限定されない。

化合物 TADF-1 について、Delay 発光（遅延発光）の量が Prompt 発光（即時発光）の量に対して 5% 以上あることが確認された。具体的には、化合物 TADF-1 について、 X_D / X_p の値が 0.05 以上であることが確認された。

【0512】

（化合物 TADF-2 及び TADF-3 の遅延蛍光性）

化合物 TADF-1 に代えて、化合物 TADF-2 を用いたこと以外、上記と同様にして化合物 TADF-2 の遅延蛍光性を確認した。化合物 TADF-2 について、 X_D / X_p の値が 0.05 以上であることが確認された。

化合物 TADF-1 に代えて、化合物 TADF-3 を用いたこと以外、上記と同様にして化合物 TADF-3 の遅延蛍光性を確認した。化合物 TADF-3 について、 X_D / X_p の値が 0.05 以上であることが確認された。

【0513】

・一重項エネルギー S_1

化合物 1~16、化合物 TADF-1、TADF-2、TADF-3、化合物 RD、Ref-1、及び Ref-2 の一重項エネルギー S_1 は、前述の溶液法により測定した。測定結果を表 5~7 に示す。

【0514】

・77 [K] におけるエネルギーギャップ

化合物 TADF-1、TADF-2 及び TADF-3 の 77 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} を前述の方法により測定し、ST を算出した。結果を表 6 に示す。

【0515】

・化合物の主ピーク波長

化合物 TADF-1、TADF-2、TADF-3、及び化合物 RD の主ピーク波長は、以下の方法により測定した。測定結果を表 6 及び表 7 に示す。

測定対象となる化合物の $5 \mu\text{mol/L}$ トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温（300 K）でこの試料の発光スペクトル（縦軸：発光強度、横軸：波長とする。）を測定した。本実施例では、発光スペクトルを日立社製の分光光度計（装置名：F-7000）で測定した。なお、発光スペクトル測定装置は、ここで用いた装置に限定されない。発光スペクトルにおいて、発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長を主ピーク波長とした。

【0516】

10

20

30

【表5】

		S_1 [eV]
化合物M3	化合物1	3.50
	化合物2	3.57
	化合物3	3.36
	化合物4	3.03
	化合物5	3.46
	化合物6	3.49
	化合物7	3.44
	化合物9	3.45
	化合物12	3.41
	化合物13	3.38
	化合物14	3.40
	化合物15	3.42
化合物16	3.41	
比較化合物	Ref-1	3.52
	Ref-2	3.55

10

20

30

【0517】

【表6】

		S_1 [eV]	ΔST [eV]	λ [nm]
化合物M2	TADF-1	2.37	<0.01	531
	TADF-2	2.44	<0.01	536
	TADF-3	2.32	<0.01	545

40

【0518】

・表6の説明

「<0.01」は、 ST が0.01 eV未満であることを表す。

【0519】

【表 7】

		S ₁ [eV]	λ [nm]
化合物M1	RD	2.02	609

【0520】

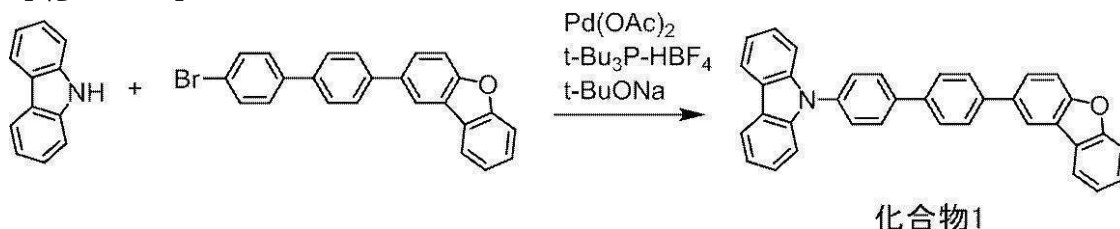
< 化合物の合成 >

・ 合成実施例 1 : 化合物 1 の合成

【0521】

10

【化153】



【0522】

窒素雰囲気下、カルバゾール (1.84 g、11.0 mmol)、2-(4'-プロモ-[1,1'-ビフェニル]-4-イル)ジベンゾ[b,d]フラン (4.39 g、11.0 mmol)、酢酸パラジウム (49.4 mg、0.22 mmol)、トリ-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート (t-Bu₃P-HBF₄) (122.7 mg、0.44 mmol)、及びナトリウム tert-ブトキシド (t-BuONa) (2.11 g、22.0 mmol) の混合物に、キシレン (50 mL) を加え、130 で 8 時間攪拌した。反応終了後、固体をろ取し、トルエンを用いて再結晶させ、化合物 1 を得た (3.31 g、収率 62%)。LC-MS (Liquid chromatography mass spectrometry) の分析により、化合物 1 と同定した。

20

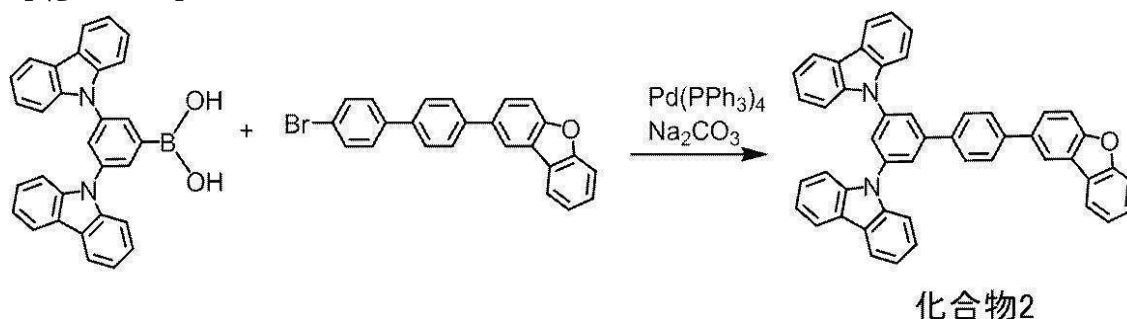
【0523】

・ 合成実施例 2 : 化合物 2 の合成

【0524】

30

【化154】



【0525】

窒素雰囲気下、(3,5-ジ(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル)ボロン酸 (4.98 g、11.0 mmol)、2-(4'-プロモ-[1,1'-ビフェニル]-4-イル)ジベンゾ[b,d]フラン (4.39 g、11.0 mmol)、テトラキストリフェニルホスフィンパラジウム (635.6 mg、0.55 mmol)、及び炭酸ナトリウム (2.33 g、22.0 mmol) の混合物に、1,2-ジメトキシエタン (70 mL) と水 (35 mL) とを加え、85 で 8 時間攪拌した。反応終了後、固体をろ取し、トルエンを用いて再結晶させ、化合物 2 を得た (5.01 g、収率 70%)。LC-MS の分析により、化合物 2 と同定した。

40

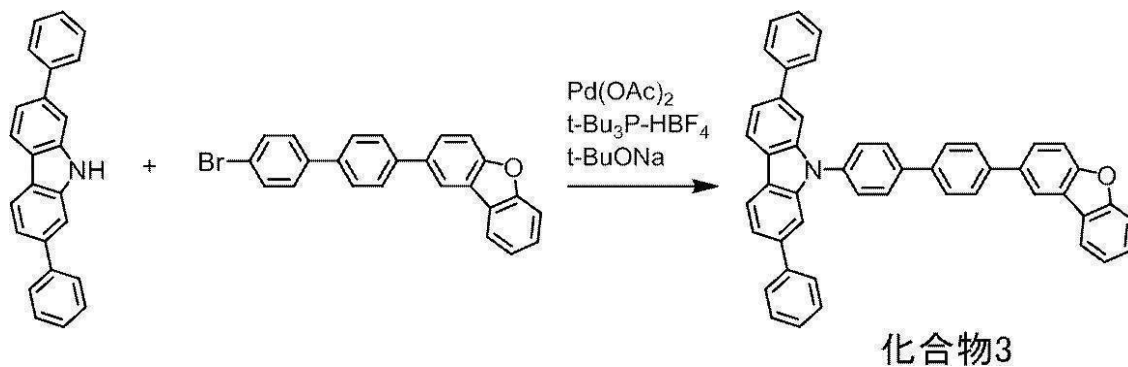
【0526】

・ 合成実施例 3 : 化合物 3 の合成

50

【 0 5 2 7 】

【 化 1 5 5 】



10

【 0 5 2 8 】

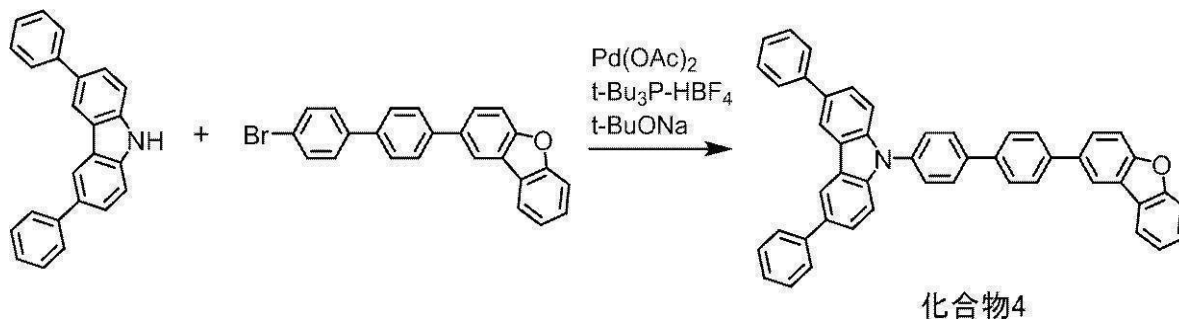
合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、カルバゾールの代わりに 2,7-ジフェニル-9H-カルバゾールを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 3 を得た。収率は 59% であった。LC-MS の分析により、化合物 3 と同定した。

【 0 5 2 9 】

・合成実施例 4 : 化合物 4 の合成

【 0 5 3 0 】

【 化 1 5 6 】



20

【 0 5 3 1 】

合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、カルバゾールの代わりに 3,6-ジフェニル-9H-カルバゾールを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 4 を得た。収率は 65% であった。LC-MS の分析により、化合物 4 と同定した。

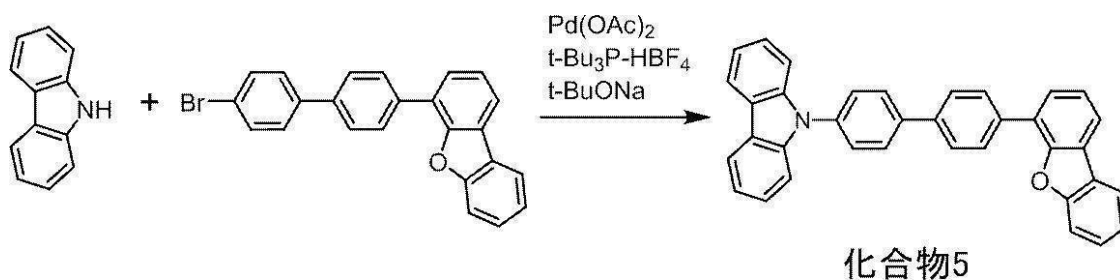
30

【 0 5 3 2 】

・合成実施例 5 : 化合物 5 の合成

【 0 5 3 3 】

【 化 1 5 7 】



40

【 0 5 3 4 】

合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、2-(4'-プロモ-[1,1'-ビフェニル]-4-イル)ジベンゾ[b,d]フランの代わりに 4-(4'-プロモ-[1,1'-ビフェニル]-4-イル)ジベンゾ[b,d]フランを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 5 を得た。収率は 52% であった。LC-MS の分析により、化合物 5 と同定した。

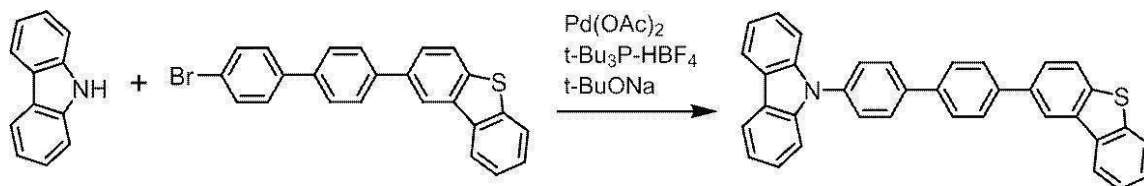
【 0 5 3 5 】

50

・合成実施例 6 : 化合物 6 合成

【 0 5 3 6 】

【 化 1 5 8 】



化合物6

10

【 0 5 3 7 】

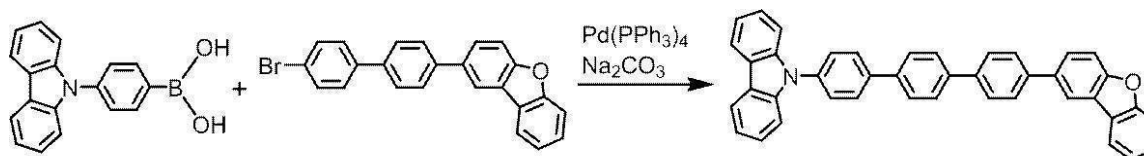
合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、2 - (4 ' - プロモ - [1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - イル) ジベンゾ [b , d] フランの代わりに 2 - (4 ' - プロモ - [1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - イル) ジベンゾ [b , d] チオフェンを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 6 を得た。収率は 6 5 % であった。LC - MS の分析により、化合物 6 と同定した。

【 0 5 3 8 】

・合成実施例 7 : 化合物 7 合成

【 0 5 3 9 】

【 化 1 5 9 】



化合物7

20

【 0 5 4 0 】

合成実施例 2 の化合物 2 の合成において、(3 , 5 - ジ (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) ボロン酸の代わりに (4 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) ボロン酸を用いた他は合成実施例 2 と同様に合成し、化合物 7 を得た。収率は 4 3 % であった。LC - MS の分析により、化合物 7 と同定した。

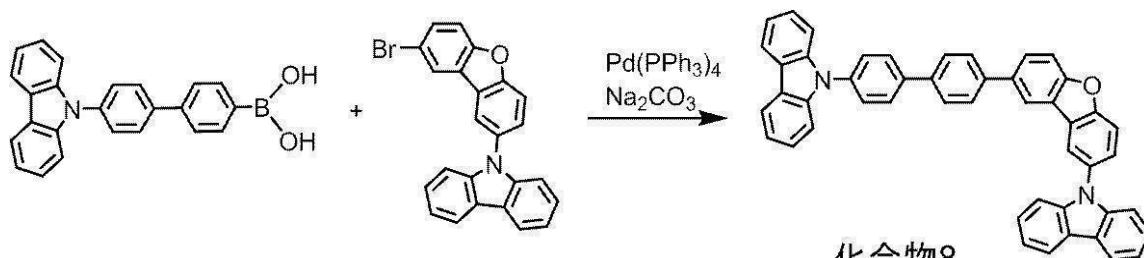
30

【 0 5 4 1 】

・合成実施例 8 : 化合物 8 の合成

【 0 5 4 2 】

【 化 1 6 0 】



化合物8

40

【 0 5 4 3 】

合成実施例 2 の化合物 2 の合成において、(3 , 5 - ジ (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) ボロン酸の代わりに (4 ' - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) - [1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - イル) ボロン酸を用い、2 - (4 ' - プロモ - [1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - イル) ジベンゾ [b , d] フランの代わりに 9 - (8 - プロモジベンゾ [b , d] フラン - 2 - イル) - 9 H - カルバゾールを用いた他は合成実施例 2 と同様に合成し、化合物 8 を得た。収率は 5 7 % であった。LC - MS の分析により、化合物 8 と同定した。

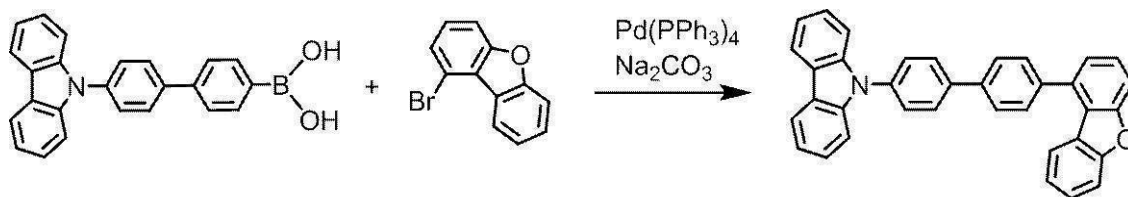
50

【0544】

・合成実施例9：化合物9の合成

【0545】

【化161】



化合物9

10

【0546】

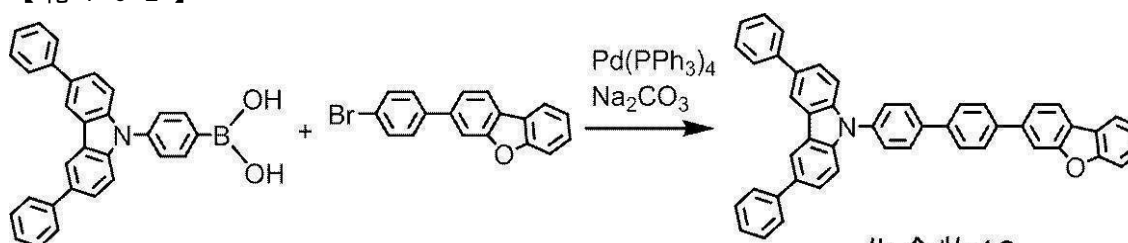
合成実施例2の化合物2の合成において、(3,5-ジ(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4'-(9H-カルバゾール-9-イル)-[1,1'-ビフェニル]-4-イル)ボロン酸を用い、2-(4'-プロモ-[1,1'-ビフェニル]-4-イル)ジベンゾ[b,d]フランの代わりに1-プロモジベンゾ[b,d]フランを用いた他は合成実施例2と同様に合成し、化合物9を得た。収率は26%であった。LC-MSの分析により、化合物9と同定した。

【0547】

・合成実施例10：化合物10の合成

【0548】

【化162】



化合物10

20

【0549】

合成実施例2の化合物2の合成において、(3,5-ジ(9H-カルバゾール-9-イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4-(3,6-ジフェニル-9H-カルバゾール-9-イル)フェニル)ボロン酸を用い、2-(4'-プロモ-[1,1'-ビフェニル]-4-イル)ジベンゾ[b,d]フランの代わりに3-(4-プロモフェニル)ジベンゾ[b,d]フランを用いた他は合成実施例2と同様に合成し、化合物10を得た。収率は46%であった。LC-MSの分析により、化合物10と同定した。

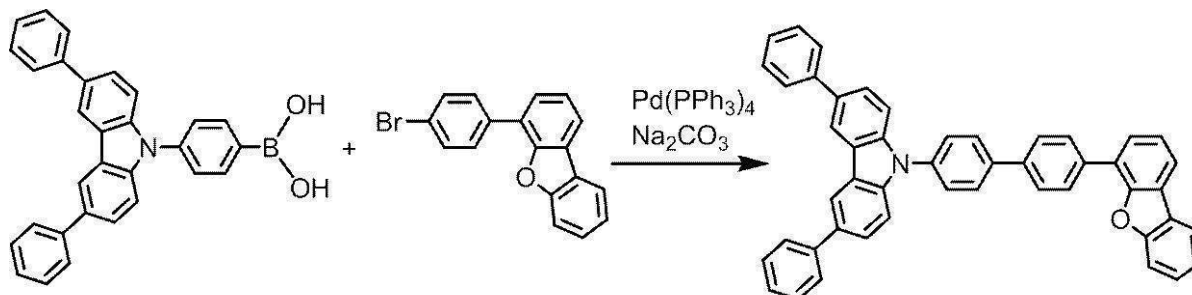
30

【0550】

・合成実施例11：化合物11の合成

【0551】

【化163】



化合物11

40

【0552】

50

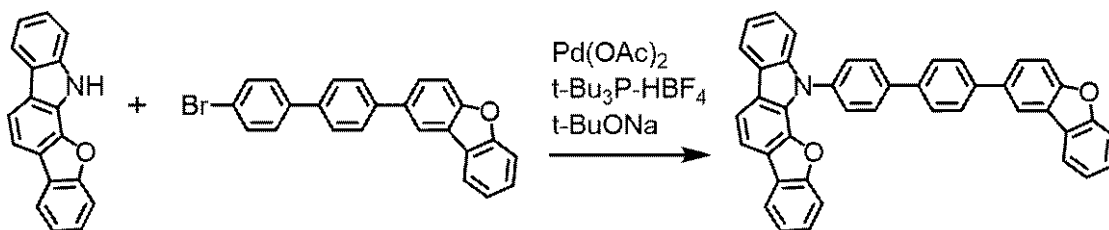
合成実施例 2 の化合物 2 の合成において、(3, 5 - ジ(9H - カルバゾール - 9 - イル)フェニル)ボロン酸の代わりに(4 - (3, 6 - ジフェニル - 9H - カルバゾール - 9 - イル)フェニル)ボロン酸を用い、2 - (4' - ブロモ - [1, 1' - ビフェニル] - 4 - イル)ジベンゾ[*b, d*]フランの代わりに4 - (4 - ブロモフェニル)ジベンゾ[*b, d*]フランを用いた他は合成実施例 2 と同様に合成し、化合物 11 を得た。収率は 55% であった。LC - MS の分析により、化合物 11 と同定した。

【0553】

・合成実施例 12 : 化合物 12 の合成

【0554】

【化164】



化合物12

10

【0555】

合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、カルバゾールの代わりに12H - ベンゾフロ[2, 3 - *a*]カルバゾールを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 12 を得た。収率は 61% であった。LC - MS の分析により、化合物 12 と同定した。

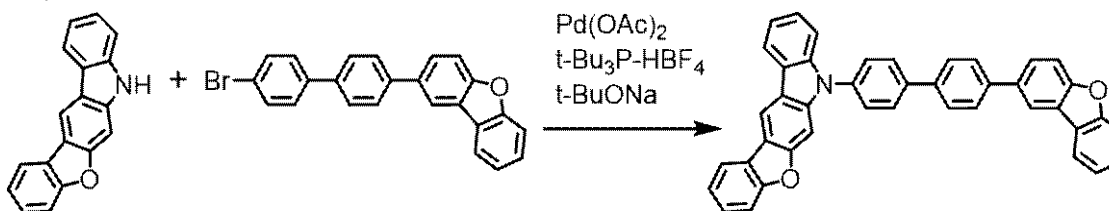
20

【0556】

・合成実施例 13 : 化合物 13 の合成

【0557】

【化165】



化合物13

30

【0558】

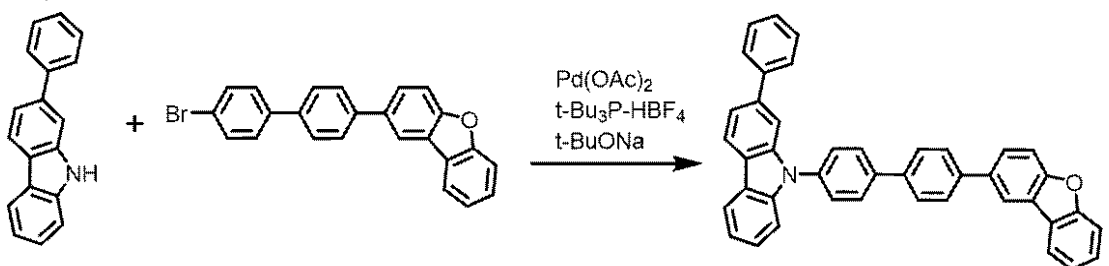
合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、カルバゾールの代わりに7H - ベンゾフロ[2, 3 - *b*]カルバゾールを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 13 を得た。収率は 59% であった。LC - MS の分析により、化合物 13 と同定した。

【0559】

・合成実施例 14 : 化合物 14 の合成

【0560】

【化166】



化合物14

40

【0561】

50

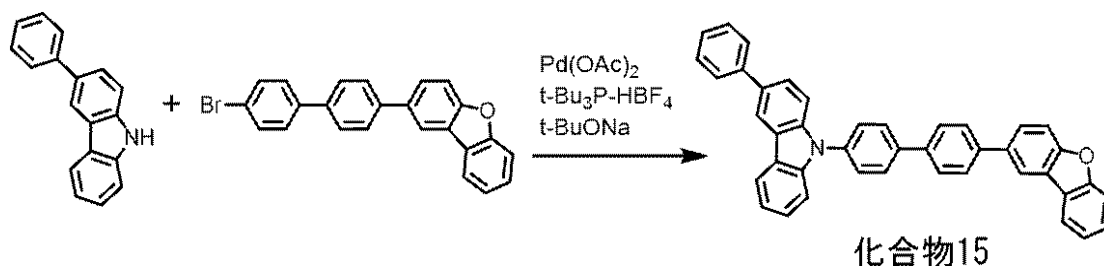
合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、カルバゾールの代わりに 2 - フェニル - 9 H - カルバゾールを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 1 4 を得た。収率は 6 5 % であった。LC - MS の分析により、化合物 1 4 と同定した。

【 0 5 6 2 】

・ 合成実施例 1 5 : 化合物 1 5 の合成

【 0 5 6 3 】

【 化 1 6 7 】



10

【 0 5 6 4 】

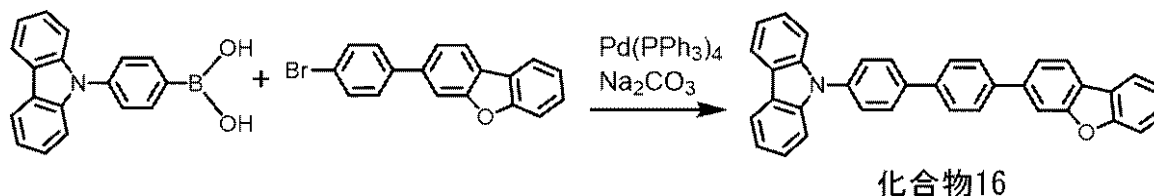
合成実施例 1 の化合物 1 の合成において、カルバゾールの代わりに 3 - フェニル - 9 H - カルバゾールを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 1 5 を得た。収率は 6 1 % であった。LC - MS の分析により、化合物 1 5 と同定した。

【 0 5 6 5 】

・ 合成実施例 1 6 : 化合物 1 6 の合成

【 0 5 6 6 】

【 化 1 6 8 】



20

【 0 5 6 7 】

合成実施例 2 の化合物 2 の合成において、(3 , 5 - ジ (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) ボロン酸の代わりに (4 - (9 H - カルバゾール - 9 - イル) フェニル) ボロン酸を用い、2 - (4 ' - プロモ - [1 , 1 ' - ビフェニル] - 4 - イル) ジベンゾ [b , d] フランの代わりに 3 - (4 - プロモフェニル) ジベンゾ [b , d] フランを用いた他は合成実施例 2 と同様に合成し、化合物 1 6 を得た。収率は 5 0 % であった。LC - MS の分析により、化合物 1 6 と同定した。

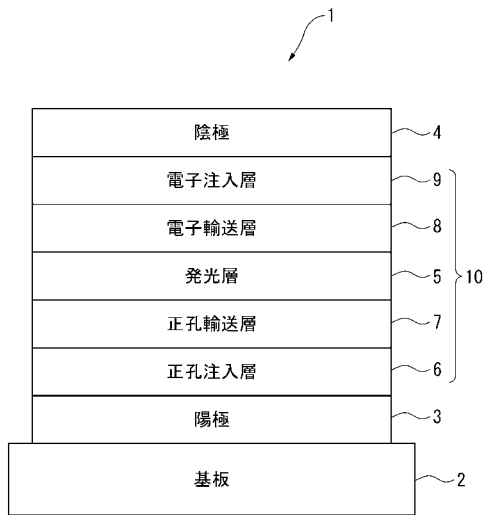
30

【 符号の説明 】

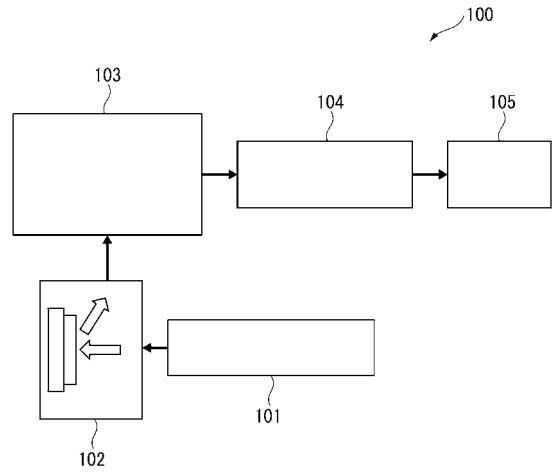
【 0 5 6 8 】

1 ... 有機 EL 素子、2 ... 基板、3 ... 陽極、4 ... 陰極、5 ... 発光層、6 ... 正孔注入層、7 ... 正孔輸送層、8 ... 電子輸送層、9 ... 電子注入層。

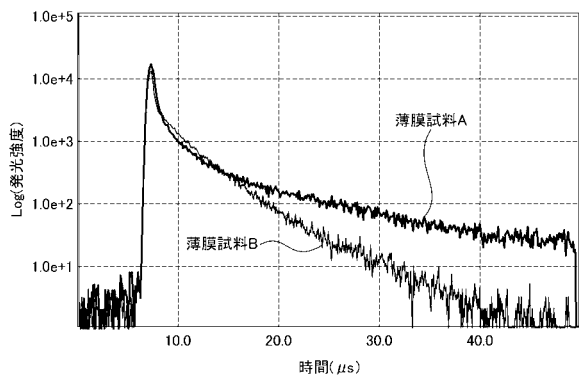
【 図 1 】



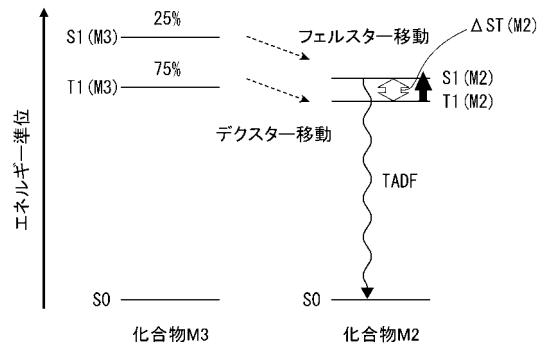
【 図 2 】



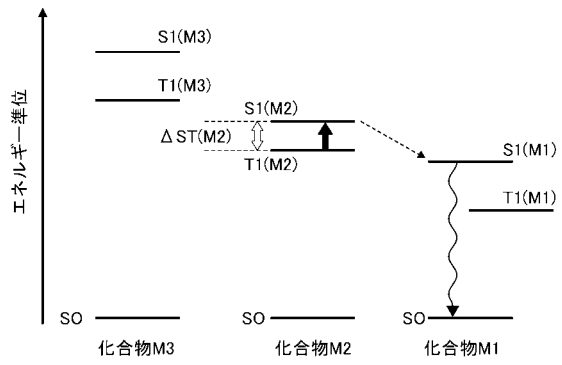
【 図 3 】



【 図 4 】



【 図 5 】



【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/JP2019/048468
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER Int.Cl. C07D405/10(2006.01)i, C07D405/14(2006.01)i, C07D409/10(2006.01)i, C07D491/048(2006.01)i, C07D495/04(2006.01)i, C09K11/06(2006.01)i, H01L51/50(2006.01)i FI: H05B33/14B, C09K11/06690, C07D409/10, C07D405/10CSP, C07D491/048, C07D495/04103, C07D405/14 According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) Int.Cl. C07D405/10, C07D405/14, C07D409/10, C07D491/048, C07D495/04, C09K11/06, H01L51/50 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Published examined utility model applications of Japan 1922-1996 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2020 Registered utility model specifications of Japan 1996-2020 Published registered utility model applications of Japan 1994-2020 Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAplus/REGISTRY (STN)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X A	US 2017/0369439 A1 (SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD.) 28.12.2017 (2017-12-28), claim 22, pages 60 (239), 64 (279), paragraphs [0037]-[0043], [0128], [0205]-[0210], [0558]	1-2, 4, 6-7, 9-16, 30, 32, 34-36, 42 3, 5, 8, 17- 29, 31, 33, 37-41
X	KR 10-2015-0077219 A (DOOSAN CORPORATION) 07.07.2015 (2015-07-07), pages 4, 5, compounds 29, 30, 59, 60	29, 32-38, 42
X	KR 10-2016-0027940 A (LG CHEM LTD.) 10.03.2016 (2016-03-10), pages 7, 166, 195, 423, 453	29, 32-38, 42
P, X	WO 2019/191665 A1 (KYULUX, INC.) 03.10.2019 (2019- 10-03), pages 115, 201, 202, 233	30, 32, 34-36, 42
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C.		<input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "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) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed		"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 "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 "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 "&" document member of the same patent family
Date of the actual completion of the international search 13.02.2020		Date of mailing of the international search report 25.02.2020
Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915, Japan		Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2019/048468

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
P, X	CN 109232382 A (CHANGCHUN HAIPU RUNSI TECHNOLOGY) 18.01.2019 (2019-01-18), page 6, paragraph [0162]	30, 32-34, 36, 42
P, X	KR 10-2019-0078117 A (HEESUNG MATERIAL LTD.) 04.07.2019 (2019-07-04), pages 43, 44 (596-598), paragraphs [0285], [0353]	30, 32, 34-36, 42

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2019/048468

US 2017/0369439 A1	28.12.2017	EP 3263569 A1 claim 16, pages 31 (239), 32 (279), paragraphs [0009], [0010], [0058], [0084]-[0089], [0258] KR 10-2018-0001290 A
KR 10-2015-0077219 A	07.07.2015	WO 2015/099453 A1 pages 12, 13, compounds 29, 30, 59, 60
KR 10-2016-0027940 A	10.03.2016	(Family: none)
WO 2019/191665 A1	03.10.2019	(Family: none)
CN 109232382 A	18.01.2019	(Family: none)
KR 10-2019-0078117 A	04.07.2019	WO 2019/132484 A1 pages 58, 59 (596-598), paragraphs [0297], [0364]

国際調査報告

国際出願番号

PCT/JP2019/048468

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） C07D 405/10(2006.01)i; C07D 405/14(2006.01)i; C07D 409/10(2006.01)i; C07D 491/048(2006.01)i; C07D 495/04(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i; H01L 51/50(2006.01)i FI: H05B33/14 B; C09K11/06 690; C07D409/10; C07D405/10 CSP; C07D491/048; C07D495/04 103; C07D405/14		
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）） C07D405/10; C07D405/14; C07D409/10; C07D491/048; C07D495/04; C09K11/06; H01L51/50 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 日本国実用新案公報 1922-1996年 日本国公開実用新案公報 1971-2020年 日本国実用新案登録公報 1996-2020年 日本国登録実用新案公報 1994-2020年 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/REGISTRY (STN)		
C. 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 請求項の番号
X A	US 2017/0369439 A1 (SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD.) 28.12.2017 (2017-12-28) 請求項22, 60頁 (239), 64頁 (279), 段落 [0037] ~ [0043] [0128] [0205] ~ [0210] [0558]	1-2, 4, 6-7, 9-16, 30, 32, 34-36, 42 3, 5, 8, 17-29, 31, 33, 37-41
X	KR 10-2015-0077219 A (DOOSAN CORPORATION) 07.07.2015 (2015-07-07) 4-5頁 (化合物29, 30, 59, 60)	29, 32-38, 42
X	KR 10-2016-0027940 A (LG CHEM LTD.) 10.03.2016 (2016-03-10) 7, 166, 195, 423, 453頁	29, 32-38, 42
P, X	WO 2019/191665 A1 (KYULUX, INC.) 03.10.2019 (2019-10-03) 115, 201-202, 233頁	30, 32, 34-36, 42
P, X	CN 109232382 A (CHANGCHUN HAIPU RUNSI TECHNOLOGY) 18.01.2019 (2019-01-18) 6頁、段落 [0162]	30, 32-34, 36, 42
P, X	KR 10-2019-0078117 A (HEESUNG MATERIAL LTD.) 04.07.2019 (2019-07-04) 43-44頁 (596-598), 段落 [0285] [0353]	30, 32, 34-36, 42
<input type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。		<input checked="" type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。
* 引用文献のカテゴリー "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 "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 "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） "O" 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 "P" 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献	"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抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの "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 "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 "Z" 同一パテントファミリー文献	
国際調査を完了した日 13.02.2020	国際調査報告の発送日 25.02.2020	
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	権限のある職員（特許庁審査官） 藤岡 善行 20 9225 電話番号 03-3581-1101 内線 3271	

国際調査報告
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2019/048468

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
US 2017/0369439 A1	28.12.2017	EP 3263569 A1 請求項16, 31頁(239), 32 頁(279), 段落 [0009] [0010] [0058] [0084] ~ [0089] [0258] KR 10-2018-0001290 A	
KR 10-2015-0077219 A	07.07.2015	WO 2015/099453 A1 12-13頁(化合物 29, 30, 59, 60)	
KR 10-2016-0027940 A	10.03.2016	(ファミリーなし)	
WO 2019/191665 A1	03.10.2019	(ファミリーなし)	
CN 109232382 A	18.01.2019	(ファミリーなし)	
KR 10-2019-0078117 A	04.07.2019	WO 2019/132484 A1 58-59頁(596-598), 段落 [0297] [0364]	

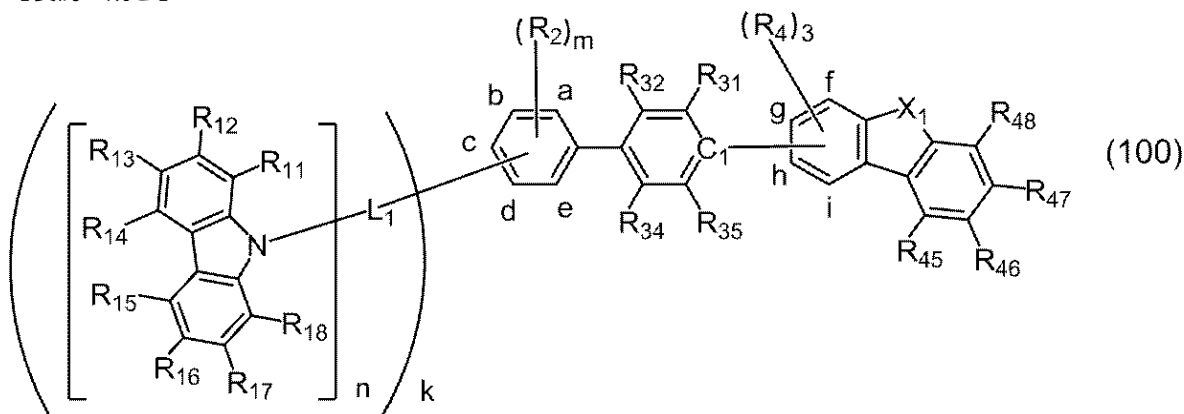
フロントページの続き

(51) Int. Cl. F I テーマコード (参考)
C 0 7 D 407/14 **(2006.01)** C 0 7 D 407/14

(81) 指定国・地域 AP(BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), EA(AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, T J, TM), EP(AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, R O, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OA(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, G T, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX , MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT

Fターム(参考) 4C063 AA01 AA03 BB06 CC76 CC94 DD08 EE10

【要約の続き】



(注) この公表は、国際事務局 (W I P O) により国際公開された公報を基に作成したものである。なおこの公表に係る日本語特許出願 (日本語実用新案登録出願) の国際公開の効果は、特許法第 1 8 4 条の 1 0 第 1 項 (実用新案法第 4 8 条の 1 3 第 2 項) により生ずるものであり、本掲載とは関係ありません。