

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2020-113558

(P2020-113558A)

(43) 公開日 令和2年7月27日(2020.7.27)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
H01L 51/50 (2006.01)	H05B 33/14	B 3K107
C07D 403/14 (2006.01)	H05B 33/22	A 4C063
C09K 11/06 (2006.01)	H05B 33/22	C
	C07D 403/14	CSP
	C09K 11/06	650
	審査請求 未請求	請求項の数 32 O L (全 100 頁)

(21) 出願番号 特願2017-66380 (P2017-66380)
 (22) 出願日 平成29年3月29日 (2017. 3. 29)

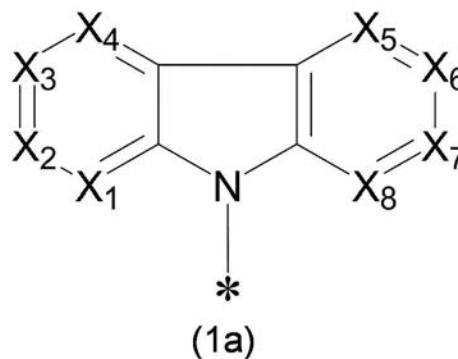
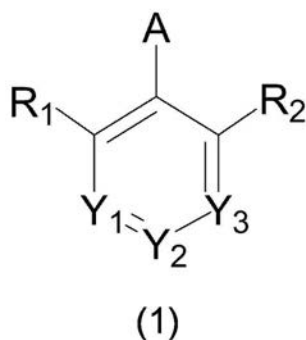
(71) 出願人 000183646
 出光興産株式会社
 東京都千代田区丸の内3丁目1番1号
 (74) 代理人 110000637
 特許業務法人樹之下知的財産事務所
 (72) 発明者 吉田 圭
 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
 (72) 発明者 齊藤 雅俊
 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
 (72) 発明者 荻原 俊成
 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
 (72) 発明者 吉崎 圭
 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
 (72) 発明者 河村 祐一郎
 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
 最終頁に続く

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

(57) 【要約】

【課題】 発光効率を向上させることが可能な化合物、及び有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること。

【解決手段】 陽極と、発光層と、陰極と、を含み、前記発光層は、下記一般式(1)で表される第一の化合物、及び蛍光発光性の第二の化合物を含み、前記第一の化合物の一重項エネルギー $S_1(M1)$ は、前記蛍光発光性第二の化合物の $S_1(FL)$ より大きい、有機エレクトロルミネッセンス素子。Aは、下記一般式(1a)等で表される基である。



【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

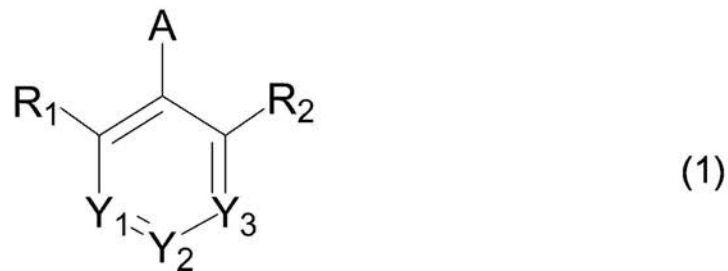
【請求項 1】

陽極と、発光層と、陰極と、を含み、
前記発光層は、下記一般式(1)で表される第一の化合物、及び蛍光発光性の化合物を含み、

前記第一の化合物の一重項エネルギー S_1 (M1) は、前記蛍光発光性の化合物の S_1 (FL) より大きい、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 1】



10

(前記一般式(1)において、

Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 は、それぞれ独立に、C-Ra又は窒素原子であり、

Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 のうち、少なくとも1つは窒素原子であり、

20

R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、

置換基としての R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1~30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1~30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2~30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、

30

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

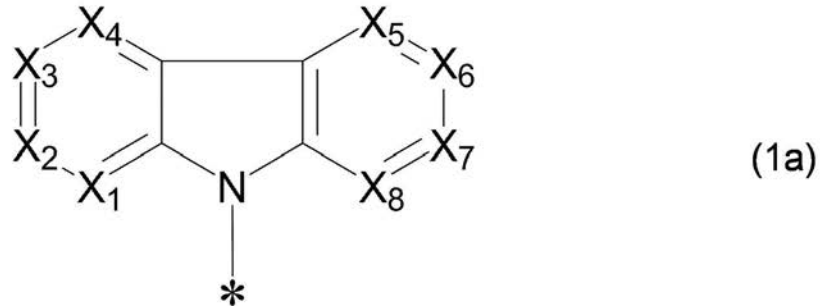
40

複数のRaは、互いに同一であるか、又は異なり、

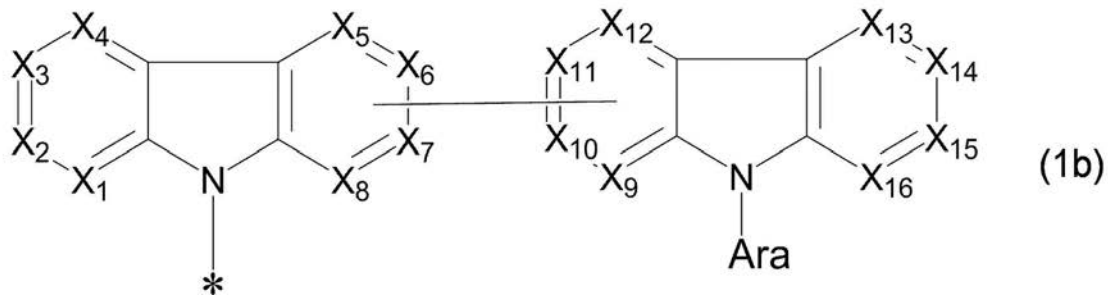
R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、

Aは、下記一般式(1a)、下記一般式(1b)、又は下記一般式(1c)で表される基である。))

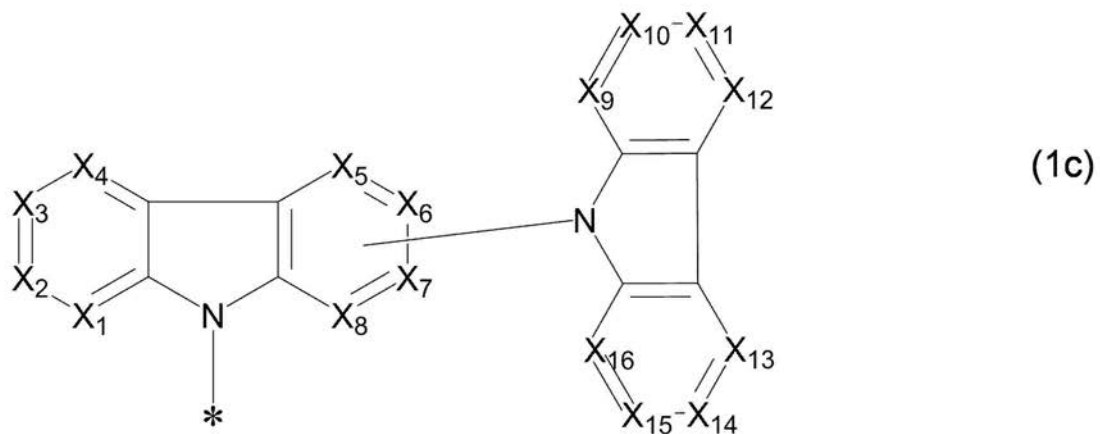
【化 2】



【化 3】



【化 4】



(前記一般式(1a)、前記一般式(1b)、及び前記一般式(1c)において、

$X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、

ただし、前記一般式(1b)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、

前記一般式(1c)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子であり、

Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、

置換基としてのRbは、

置換または無置換の炭素数1~30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1~30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2~30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

10

20

30

40

50

置換または無置換のホスホリル基、
 置換または無置換のシリル基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールカルボニル基、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 カルボキシ基、及び
 ハロゲン原子

からなる群から選択され、

複数の R b は、互いに同一であるか、又は異なり、

X₁ ~ X₈ のうち、複数が C - R b であって、R b が置換基である場合、R b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 10

X₉ ~ X₁₆ のうち、複数が C - R b であって、R b が置換基である場合、R b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

A r a は、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、
 置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、
 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のフルオロアルキル基、
 置換または無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、
 置換または無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、 20
 置換ホスホリル基、及び
 置換シリル基

からなる群から選択され、

* は、前記一般式 (1) で表される環構造中の炭素原子との結合部位を表す。)

【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、第二の化合物をさらに含み、

前記第二の化合物の一重項エネルギー S₁ (M 2) は、前記第一の化合物の S₁ (M 1) より大きい、

有機エレクトロルミネッセンス素子。 30

【請求項 3】

陽極と、発光層と、陰極と、を含み、

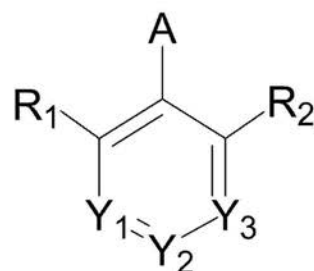
前記発光層は、第一の化合物と第二の化合物を含み、

前記第一の化合物は、下記一般式 (1) で表され、

前記第二の化合物の一重項エネルギー S₁ (M 2) は、前記第一の化合物の S₁ (M 1) より大きい、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【化 5】



(1)

(前記一般式 (1) において、

Y₁、Y₂、及び Y₃ は、それぞれ独立に、C - R a 又は窒素原子であり、

Y₁、Y₂、及び Y₃ のうち、少なくとも 1 つは窒素原子であり、

R₁、R₂、及び R a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、 50

置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、
 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、
 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、
 置換または無置換のアミノ基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、
 置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、
 置換または無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、
 置換または無置換のホスファニル基、
 置換または無置換のホスホリル基、
 置換または無置換のシリル基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールカルボニル基、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 カルボキシ基、及び
 ハロゲン原子

10

からなる群から選択され、

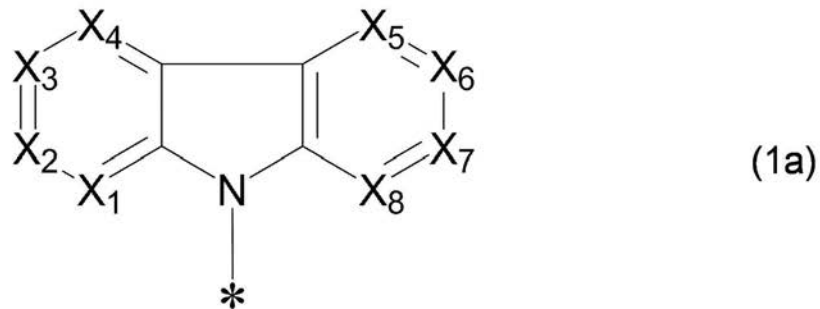
複数の R_a は、互いに同一であるか、又は異なり、

20

R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、

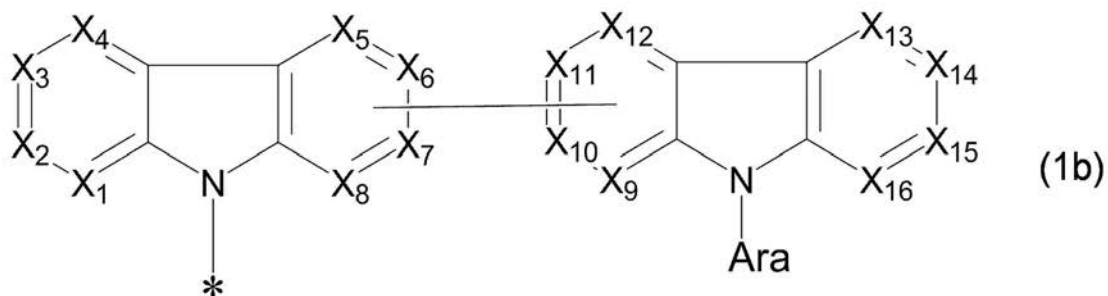
A は、下記一般式 (1a)、下記一般式 (1b)、又は下記一般式 (1c) で表される基である。))

【化 6】



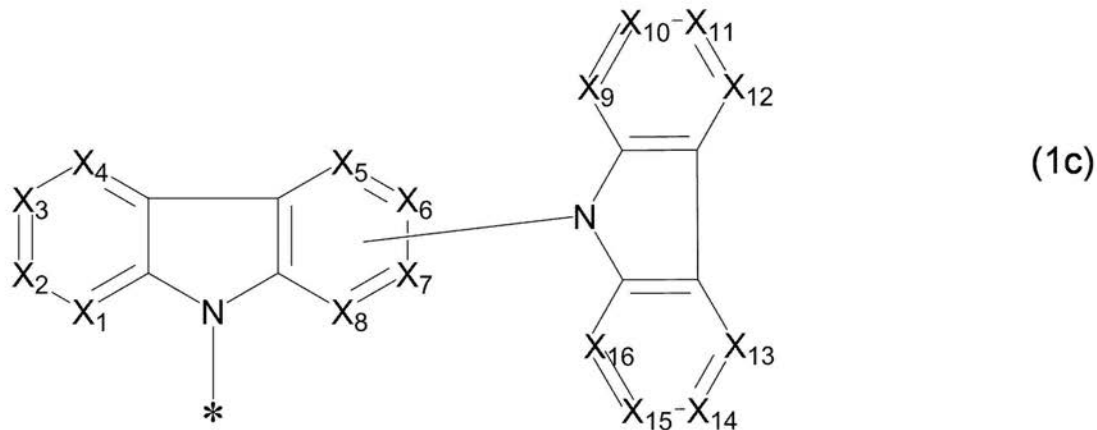
30

【化 7】



40

【化 8】



10

(前記一般式(1a)、前記一般式(1b)、及び前記一般式(1c)において、

$X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、

ただし、前記一般式(1b)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、

前記一般式(1c)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子であり、

20

Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、
置換基としてのRbは、

- 置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、
- 置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、
- 置換または無置換のアミノ基、
- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、
- 置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、
- 置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、
- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、
- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、
- 置換または無置換のホスファニル基、
- 置換または無置換のホスホリル基、
- 置換または無置換のシリル基、
- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、
- シアノ基、
- ニトロ基、
- カルボキシ基、及び
- ハロゲン原子

30

からなる群から選択され、

40

複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、

$X_1 \sim X_8$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

$X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

Ar aは、

- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、
- 置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、
- 置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数1～30のフルオロアルキル基、

50

置換または無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、
置換または無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、
置換ホスホリル基、及び
置換シリル基

からなる群から選択され、

* は、前記一般式 (1) で表される環構造中の炭素原子との結合部位を表す。)

【請求項 4】

請求項 1 から請求項 3 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、

前記第一の化合物は、熱活性遅延蛍光性の化合物である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

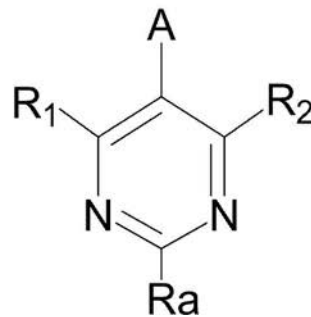
10

【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、

前記第一の化合物は、下記一般式 (11) 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 9】



20

(11)

(前記一般式 (11) において、

R a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、

R 1、及び R 2 は、それぞれ独立に、置換基であり、

置換基としての R 1、R 2、及び R a は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

A は、前記一般式 (1 a)、前記一般式 (1 b)、又は前記一般式 (1 c) で表される
基である。)

50

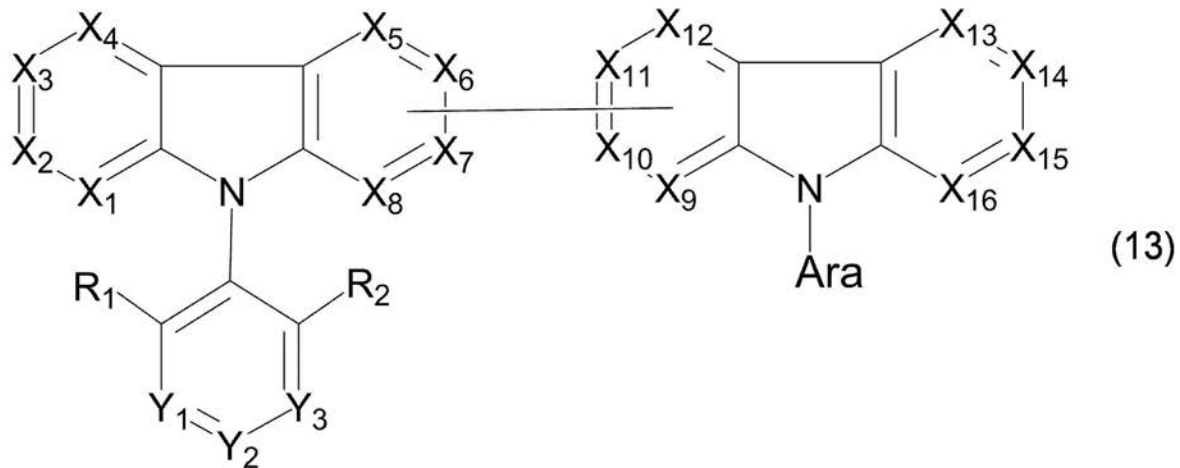
【請求項 6】

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、

前記第一の化合物は、下記一般式 (1 3) で表される化合物、又は下記一般式 (1 4) 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 1 0】



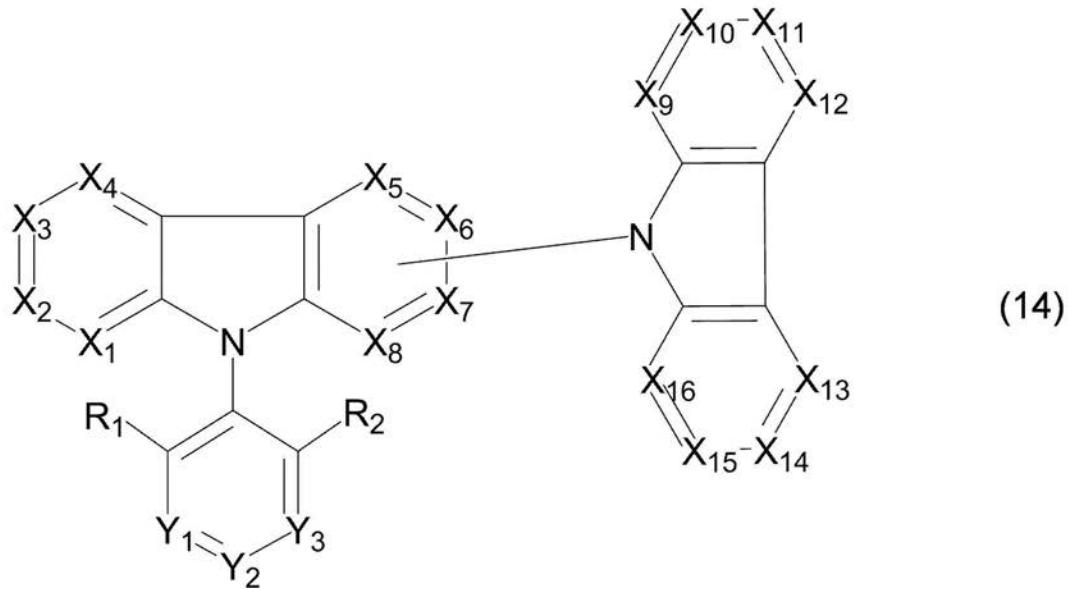
10

20

(前記一般式 (1 3) において、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 は、それぞれ独立に、C - R a 又は窒素原子であり、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 のうち、少なくとも1つは窒素原子であり、 R_1 、 R_2 、及びR a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及びR a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及びR a に関する置換基と同義であり、複数のR a は、互いに同一であるか、又は異なり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C - R b 又は窒素原子であり、ただし、前記一般式 (1 3) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子である。前記一般式 (1 3) において、R b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのR b は、前述したR b に関する置換基と同義であり、複数のR b は、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数のC - R b であって、R b が置換基である場合、R b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数のC - R b であって、R b が置換基である場合、R b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、A r a は、前述したA r a に関する置換基と同義である。)

30

【化 1 1】



10

(前記一般式(14)において、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 は、それぞれ独立に、C-Ra又は窒素原子であり、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 のうち、少なくとも1つは窒素原子であり、 R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及びRaに関する置換基と同義であり、複数のRaは、互いに同一であるか、又は異なり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、ただし、前記一般式(14)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子である。前記一般式(14)において、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数のRbがC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数のRbがC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成しない。)

20

30

【請求項7】

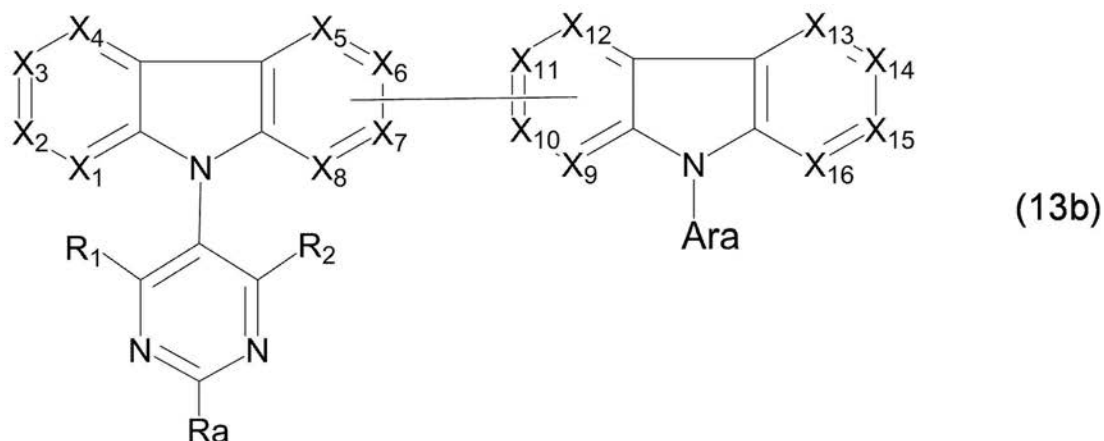
請求項6に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記第一の化合物は、前記一般式(13)で表される化合物である、
有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項8】

請求項6に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、
前記第一の化合物は、下記一般式(13b)で表される化合物、又は下記一般式(14a)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 1 2】

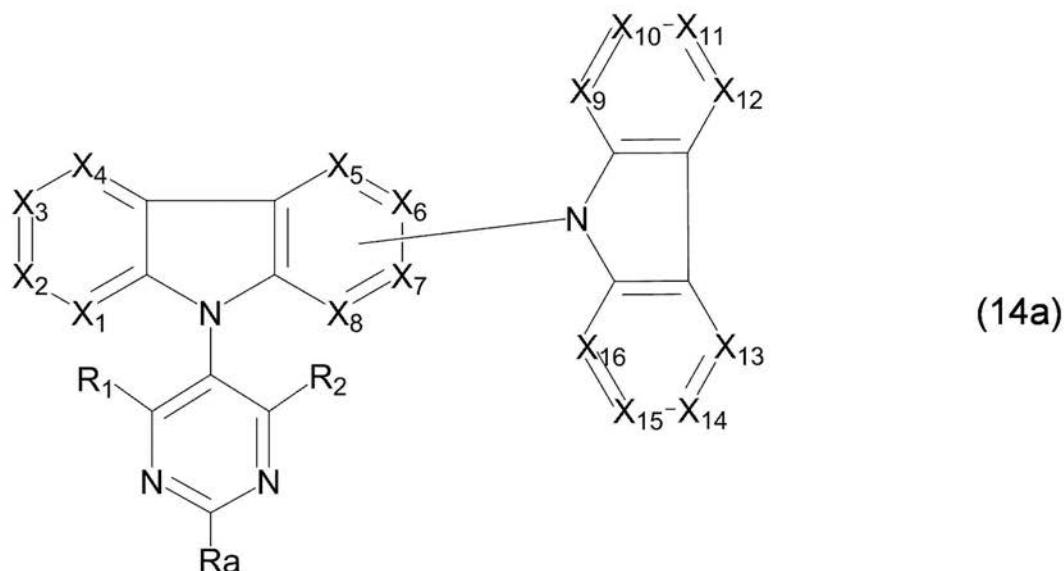


10

(前記一般式(13b)において、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、ただし、前記一般式(13b)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子である。前記一般式(13b)において、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、Araは、前述したAraに関する置換基と同義である。)

20

【化 1 3】



30

(前記一般式(14a)において、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、ただし、前記一般式(14a)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子である。前記一般式(14a)において、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一である

40

50

か、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数がC - R bであって、R bが置換基である場合、R b同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数がC - R bであって、R bが置換基である場合、R b同士が結合して環を形成するか、または環を形成しない。)

【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、

前記第一の化合物における A が、前記一般式 (1 b) で表される基であり、

R b は、水素原子、又は置換基である場合、

置換基としての R b は、

- 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、
- 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、
- 置換または無置換のアミノ基、
- 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、
- 置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、
- 置換または無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、
- 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、
- 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、
- 置換または無置換のホスファニル基、
- 置換または無置換のホスホリル基、
- 置換または無置換のシリル基、
- 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールカルボニル基、
- シアノ基、
- ニトロ基、
- カルボキシ基、及び
- ハロゲン原子

からなる群から選択される、

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、

前記第一の化合物における A が、前記一般式 (1 b) で表される基であり、

X_1 、 X_2 、 X_3 、及び X_4 が C - R b であり、R b が水素原子である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 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、

$X_1 \sim X_{16}$ は、C - R b であり、

複数の R b は、互いに同一であるか、又は異なり、

ただし、前記一般式 (1 b) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、

前記一般式 (1 c) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 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、

$X_1 \sim X_{16}$ は、C - R b であり、

R b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、
置換基としての R b は、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、及び
置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基

からなる群から選択され、

複数の R b は、互いに同一であるか、又は異なり、

ただし、前記一般式 (1 b) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、

前記一般式 (1 c) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 3】

請求項 1 から請求項 1 2 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、

$X_1 \sim X_{16}$ は、C - R b であり、

R b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、

置換基としての R b は、置換また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、

複数の R b は、互いに同一であるか、又は異なり、

ただし、前記一般式 (1 b) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、

前記一般式 (1 c) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 4】

請求項 1 から請求項 1 3 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、

$X_1 \sim X_{16}$ は、C - R b であり、

R b は、水素原子であり、

ただし、前記一般式 (1 b) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、

前記一般式 (1 c) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 5】

請求項 1 から請求項 1 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、

R a は、置換基であり、

置換基としての R a は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

10

20

30

40

50

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、
 置換または無置換のホスファニル基、
 置換または無置換のホスホリル基、
 置換または無置換のシリル基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールカルボニル基、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 カルボキシ基、及び
 ハロゲン原子

10

からなる群から選択され、
 複数の R a は、互いに同一であるか、又は異なる、
 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、

R₁、R₂、及び R a は、それぞれ独立に、置換また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。

20

【請求項 17】

請求項 1 から請求項 16 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、

R₁、R₂、及び R a は、それぞれ独立に、置換また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 18】

請求項 1 から請求項 17 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、

前記陽極と前記発光層との間に、正孔輸送層を含む、
 有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

【請求項 19】

請求項 1 から請求項 18 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、

前記陰極と前記発光層との間に、電子輸送層を含む、
 有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 20】

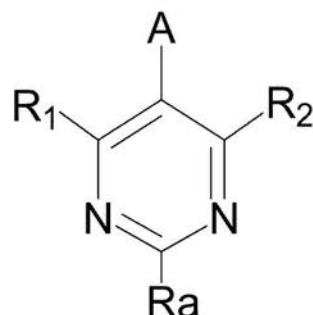
請求項 1 から請求項 19 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器。

【請求項 21】

下記一般式 (11) で表される化合物。

40

【化 14】



(11)

(前記一般式 (11) において、

50

R_aは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、
 R₁、及びR₂は、それぞれ独立に、置換基であり、
 置換基としてのR₁、R₂、及びR_aは、それぞれ独立に、
 置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、
 置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、
 置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、
 置換または無置換のアミノ基、
 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、
 置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、
 置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、
 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、
 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、
 置換または無置換のホスファニル基、
 置換または無置換のホスホリル基、
 置換または無置換のシリル基、
 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 カルボキシ基、及び
 ハロゲン原子

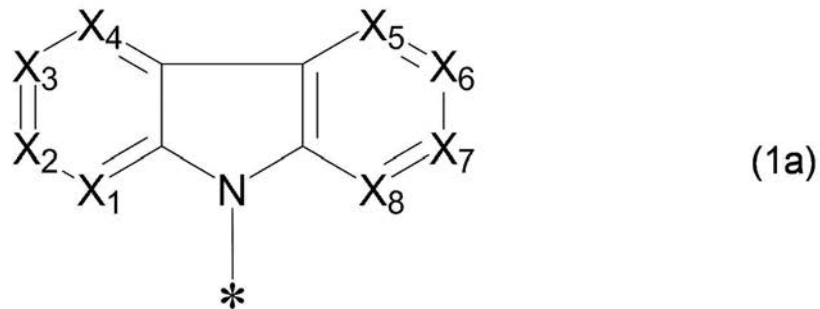
10

20

からなる群から選択され、

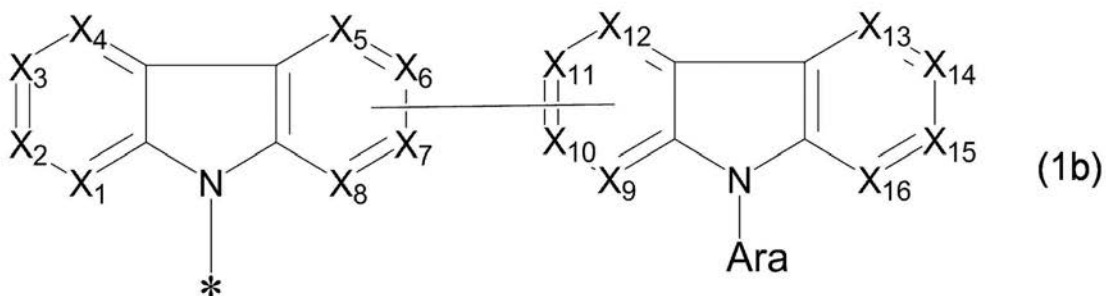
Aは、下記一般式(1a)、下記一般式(1b)、又は下記一般式(1c)で表される基である。))

【化15】



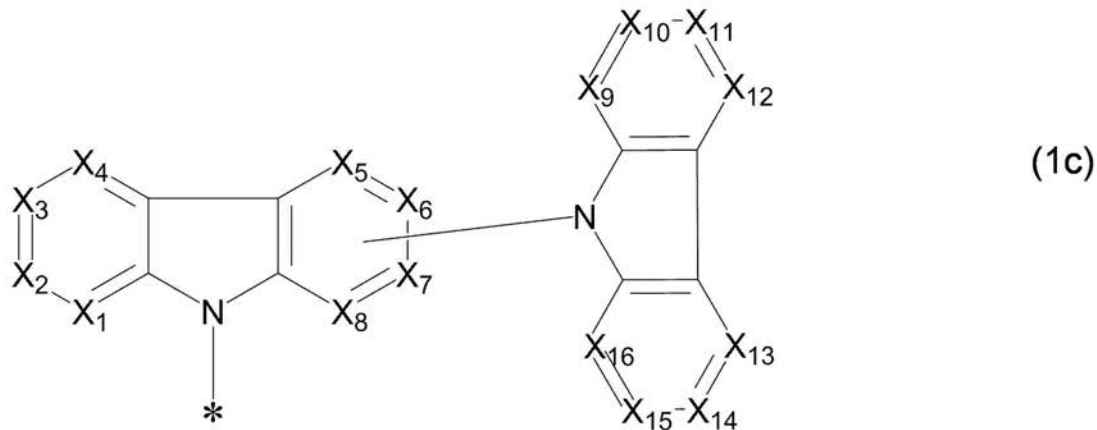
30

【化16】



40

【化 17】



10

(前記一般式(1a)、前記一般式(1b)、及び前記一般式(1c)において、

$X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、

ただし、前記一般式(1b)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、

前記一般式(1c)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子であり、

20

Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、
置換基としてのRbは、

- 置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、
- 置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、
- 置換または無置換のアミノ基、
- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、
- 置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、
- 置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、
- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、
- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、
- 置換または無置換のホスファニル基、
- 置換または無置換のホスホリル基、
- 置換または無置換のシリル基、
- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、
- シアノ基、
- ニトロ基、
- カルボキシ基、及び
- ハロゲン原子

30

からなる群から選択され、

40

複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、

$X_1 \sim X_8$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

$X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

Ar aは、

- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、
- 置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、
- 置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数1～30のフルオロアルキル基、

50

置換または無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、
置換または無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、
置換ホスホリル基、及び
置換シリル基

からなる群から選択され、

* は、前記一般式 (1 1) で表される環構造中の炭素原子との結合部位を表す。)

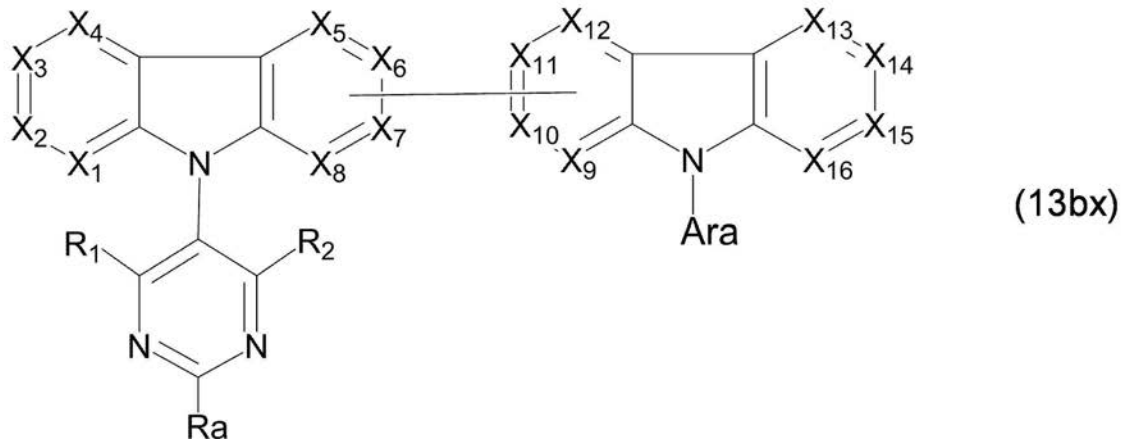
【請求項 2 2】

請求項 2 1 に記載の化合物において、

下記一般式 (1 3 b x) 又は下記一般式 (1 4 a x) で表される、
化合物。

10

【化 1 8】

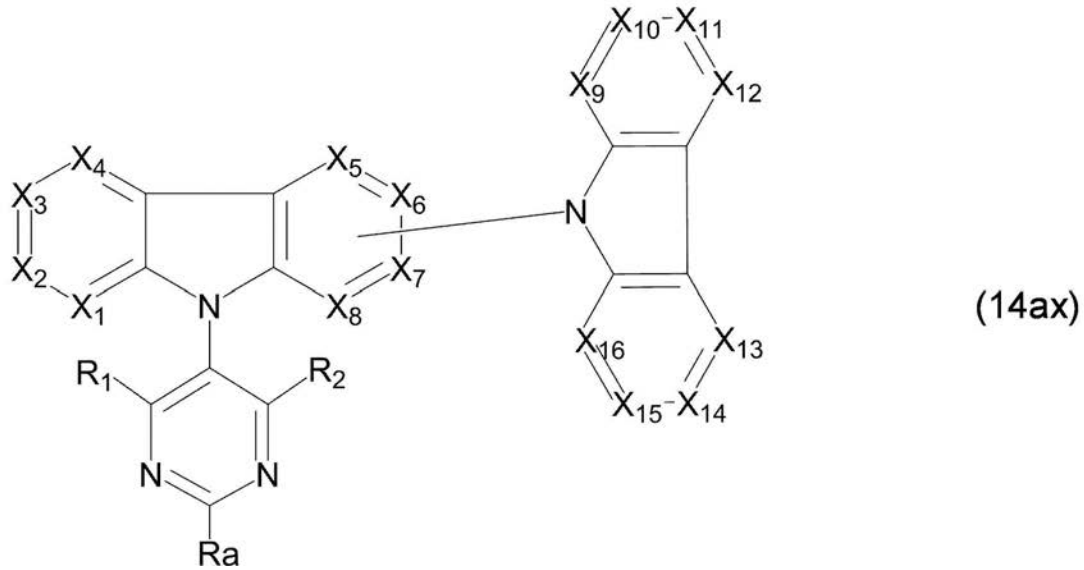


20

(前記一般式 (1 3 b x) において、 R_1 、及び R_2 は、それぞれ独立に、置換基であり、 R_a は、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C - R b 又は窒素原子であり、ただし、前記一般式 (1 3 b x) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子である。前記一般式 (1 3 b x) において、 R_b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_b は、前述した R_b に関する置換基と同義であり、複数の R_b は、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数のC - R b であって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数のC - R b であって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 Ara は、前述した Ara に関する置換基と同義である。)

30

【化 19】



10

(前記一般式(14ax)において、 R_1 、及び R_2 は、それぞれ独立に、置換基であり、 R_a は、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、ただし、前記一般式(14ax)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子である。前記一般式(14ax)において、 R_b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_b は、前述した R_b に関する置換基と同義であり、複数の R_b は、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数のC-Rbであって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数のC-Rbであって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成しない。)

20

【請求項 23】

請求項 22 に記載の化合物において、
前記一般式(13bx)で表される、
化合物。

30

【請求項 24】

請求項 21 から請求項 23 のいずれか一項に記載の化合物において、
A が、前記一般式(1b)で表される基であり、
 $X_1 \sim X_4$ のうち少なくともいずれかがC-Rbであり、
 R_b は、水素原子、又は置換基である場合、
置換基としての R_b は、

- 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、
- 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、
- 置換または無置換のアミノ基、
- 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、
- 置換または無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、
- 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、
- 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、
- 置換または無置換のホスファニル基、
- 置換または無置換のホスホリル基、
- 置換または無置換のシリル基、
- 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールカルボニル基、

40

50

シアノ基、
ニトロ基、
カルボキシ基、及び
ハロゲン原子

からなる群から選択される、
化合物。

【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化合物において、
A が、前記一般式 (1b) で表される基であり、
 X_1 、 X_2 、 X_3 、及び X_4 が C - R_b であり、R_b が水素原子である、
化合物。

10

【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化合物において、
 $X_1 \sim X_{16}$ は、C - R_b であり、
複数の R_b は、互いに同一であるか、又は異なり、
ただし、前記一般式 (1b) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$
のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$
のいずれかと結合する炭素原子であり、
前記一般式 (1c) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する
含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子である、
化合物。

20

【請求項 27】

請求項 21 から請求項 26 のいずれか一項に記載の化合物において、
 $X_1 \sim X_{16}$ は、C - R_b であり、
R_b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、
置換基としての R_b は、
置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、及び
置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基
からなる群から選択され、
複数の R_b は、互いに同一であるか、又は異なり、
ただし、前記一般式 (1b) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$
のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$
のいずれかと結合する炭素原子であり、
前記一般式 (1c) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する
含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子である、
化合物。

30

【請求項 28】

請求項 21 から請求項 27 のいずれか一項に記載の化合物において、
 $X_1 \sim X_{16}$ は、C - R_b であり、
R_b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、
置換基としての R_b は、置換また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、
複数の R_b は、互いに同一であるか、又は異なり、
ただし、前記一般式 (1b) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$
のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$
のいずれかと結合する炭素原子であり、
前記一般式 (1c) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する
含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子である、
化合物。

40

50

【請求項 29】

請求項 21 から請求項 28 のいずれか一項に記載の化合物において、
 $X_1 \sim X_{16}$ は、C - R b であり、
 R b は、水素原子であり、
 ただし、前記一般式 (1 b) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、
 前記一般式 (1 c) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子である、
 化合物。

10

【請求項 30】

請求項 21 から請求項 29 のいずれか一項に記載の化合物において、

R a は、置換基であり、

置換基としての R a は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

複数の R a は、互いに同一であるか、又は異なる、

化合物。

20

30

【請求項 31】

請求項 21 から請求項 30 のいずれか一項に記載の化合物において、

R_1 、 R_2 、及び R a は、それぞれ独立に、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基である、

化合物。

【請求項 32】

請求項 21 から請求項 31 のいずれか一項に記載の化合物において、

R_1 、 R_2 、及び R a は、それぞれ独立に、置換または無置換のフェニル基である、
 化合物。

40

【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、電子機器、及び化合物に関する。

【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

50

電圧を印加すると、陽極から発光層に正孔が注入され、陰極から発光層に電子が注入される。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。そのため、有機EL素子の効率を改善するための材料が期待されている。例えば、特許文献1、特許文献2、及び特許文献3には、有機EL素子用の材料が記載されている。

【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、遅延蛍光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)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_1) 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、261-262ページ』に記載されている。

特許文献1、特許文献2、及び特許文献3には、TADFメカニズムにより発光する有機EL素子について記載されていない。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0004】

【特許文献1】韓国公開特許第10-2016-0082067号公報

【特許文献2】国際公開第2015/056965号

【特許文献3】韓国公開特許第10-2013-0093195号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0005】

有機EL素子を用いたフルカラーディスプレイの性能を向上させるために、発光効率を向上させることが可能な化合物、及び有機EL素子が求められている。

【0006】

本発明の目的は、発光効率を向上させることが可能な化合物、及び有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、並びに当該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を提供することである。

【課題を解決するための手段】

【0007】

本発明の一態様によれば、陽極と、発光層と、陰極と、を含み、前記発光層は、下記一般式(1)で表される第一の化合物、及び蛍光発光性の化合物を含み、前記第一の化合物の一重項エネルギー $S_1(M1)$ は、前記蛍光発光性の化合物の $S_1(FL)$ より大きい、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

【0008】

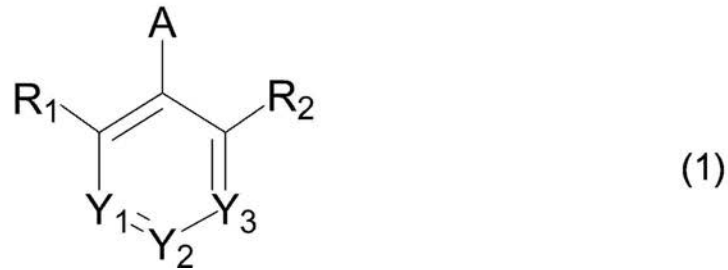
10

20

30

40

【化 1】



【 0 0 0 9 】

10

(前記一般式(1)において、

Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 は、それぞれ独立に、C-Ra又は窒素原子であり、

Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 のうち、少なくとも1つは窒素原子であり、

R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、

置換基としての R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1~30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1~30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、

20

置換または無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2~30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

30

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

からなる群から選択され、

複数のRaは、互いに同一であるか、又は異なり、

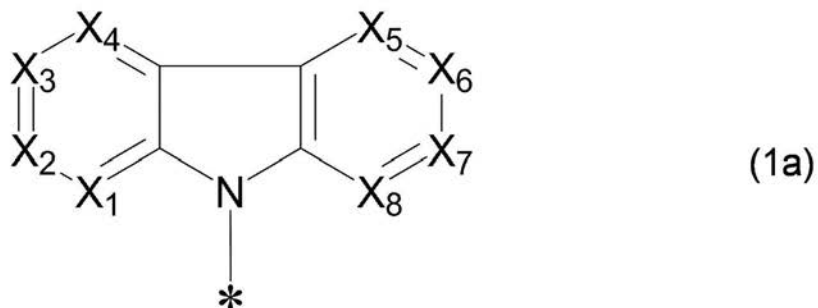
R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、

Aは、下記一般式(1a)、下記一般式(1b)、又は下記一般式(1c)で表される

基である。))

【 0 0 1 0 】

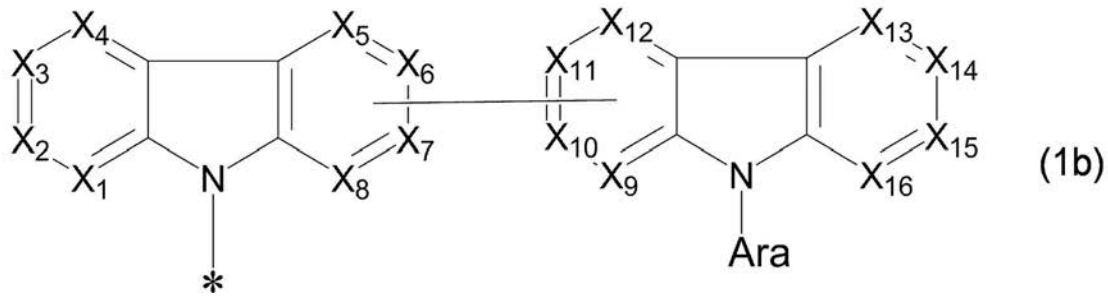
【化 2】



40

【 0 0 1 1 】

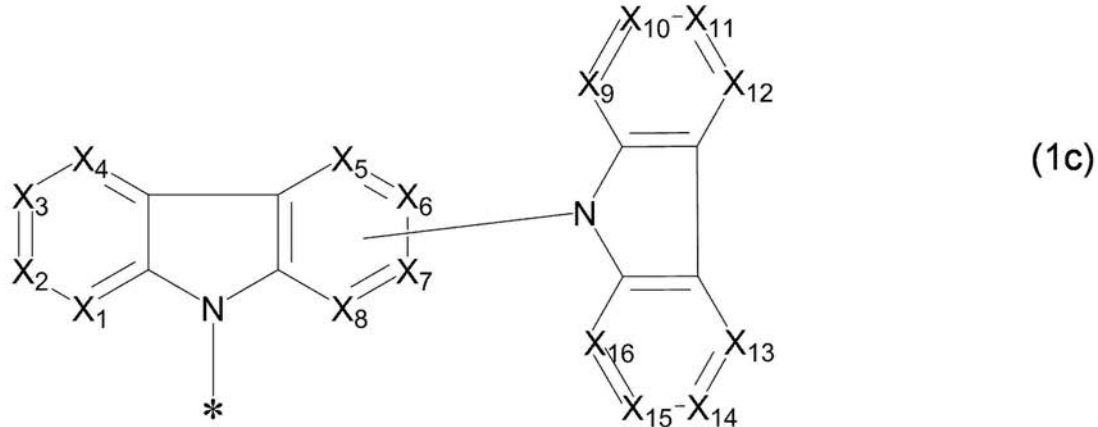
【化 3】



【 0 0 1 2 】

10

【化 4】



20

【 0 0 1 3 】

(前記一般式(1a)、前記一般式(1b)、及び前記一般式(1c)において、

$X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、

ただし、前記一般式(1b)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、

前記一般式(1c)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子であり、

30

Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、

置換基としてのRbは、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

40

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

カルボキシ基、及び

ハロゲン原子

50

からなる群から選択され、

複数の R b は、互いに同一であるか、又は異なり、

X₁ ~ X₈ のうち、複数の C - R b であって、R b が置換基である場合、R b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

X₉ ~ X₁₆ のうち、複数の C - R b であって、R b が置換基である場合、R b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

A r a は、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のフルオロアルキル基、

置換または無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、

置換または無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、

置換ホスホリル基、及び

置換シリル基

からなる群から選択され、

* は、前記一般式 (1) で表される環構造中の炭素原子との結合部位を表す。)

【 0 0 1 4 】

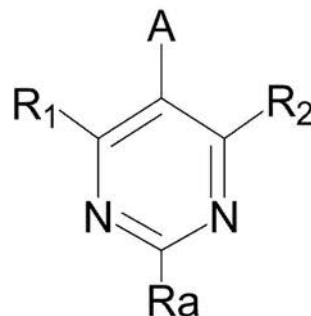
本発明の一態様によれば、陽極と、発光層と、陰極と、を含み、前記発光層は、第一の化合物と第二の化合物を含み、前記第一の化合物は、前記一般式 (1) で表され、前記第二の化合物の一重項エネルギー S₁ (M 2) は、前記第一の化合物の S₁ (M 1) より大きい有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

【 0 0 1 5 】

本発明の一態様によれば、下記一般式 (1 1) で表される化合物が提供される。

【 0 0 1 6 】

【 化 5 】



(11)

【 0 0 1 7 】

(前記一般式 (1 1) において、

R a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、

R₁、及び R₂ は、それぞれ独立に、置換基であり、

置換基としての R₁、R₂、及び R a は、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

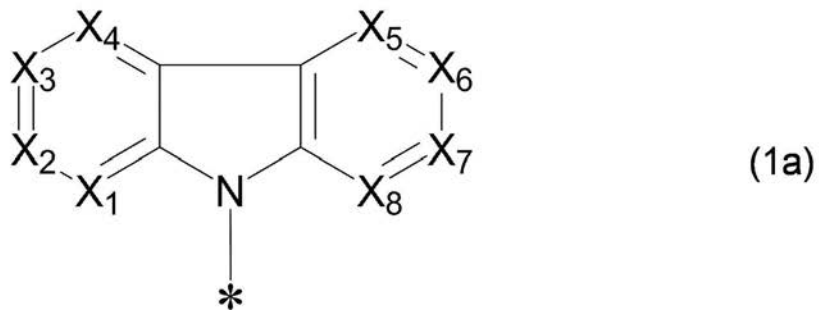
置換または無置換のホスホリル基、
置換または無置換のシリル基、
置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールカルボニル基、
シアノ基、
ニトロ基、
カルボキシ基、及び
ハロゲン原子

からなる群から選択され、

A は、下記一般式 (1 a)、下記一般式 (1 b)、又は下記一般式 (1 c) で表される基である。) 10

【0018】

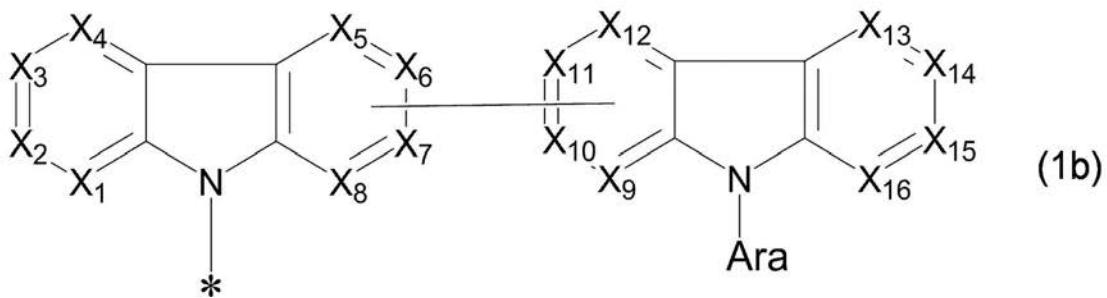
【化6】



20

【0019】

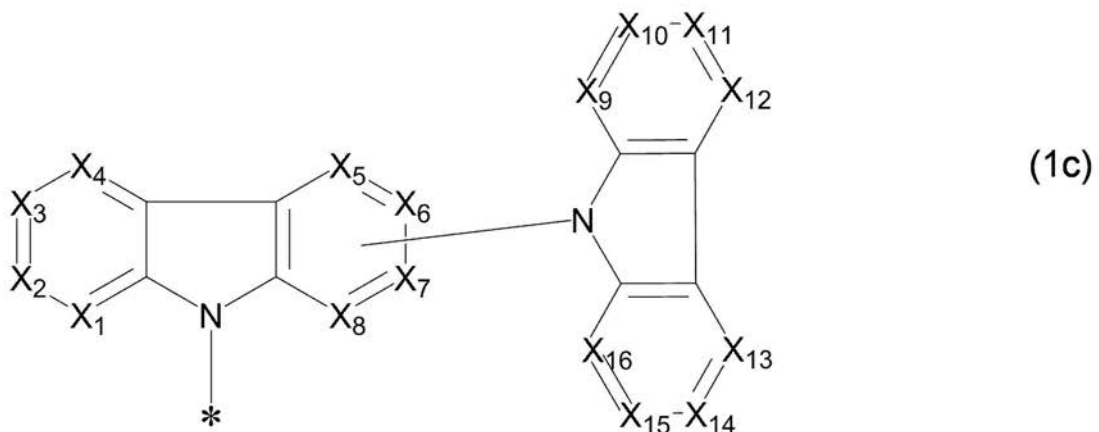
【化7】



30

【0020】

【化8】



40

【0021】

(前記一般式 (1 a)、前記一般式 (1 b)、及び前記一般式 (1 c) において、

X₁ ~ X₁₆ は、それぞれ独立に、C - R b 又は窒素原子であり、

ただし、前記一般式 (1 b) 中、X₅ ~ X₈ のうち、少なくとも一つは、X₉ ~ X₁₂ のいずれかと結合する炭素原子であり、X₉ ~ X₁₂ のうち、少なくとも一つは、X₅ ~ X₈ のいずれかと結合する炭素原子であり、

50

前記一般式(1c)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子であり、

R bは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのR bは、

- 置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、
- 置換または無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、
- 置換または無置換のアミノ基、
- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、
- 置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、
- 置換または無置換の炭素数2～30のアルケニル基、
- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、
- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基、
- 置換または無置換のホスファニル基、
- 置換または無置換のホスホリル基、
- 置換または無置換のシリル基、
- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基、
- シアノ基、
- ニトロ基、
- カルボキシ基、及び
- ハロゲン原子

10

20

からなる群から選択され、

複数のR bは、互いに同一であるか、又は異なり、

$X_1 \sim X_8$ のうち、複数がC-R bであって、R bが置換基である場合、R b同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

$X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数がC-R bであって、R bが置換基である場合、R b同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

A r aは、

- 置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、
- 置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基、
- 置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数1～30のフルオロアルキル基、
- 置換または無置換の環形成炭素数3～30のシクロアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数7～30のアラルキル基、
- 置換ホスホリル基、及び
- 置換シリル基

30

からなる群から選択され、

*は、前記一般式(11)で表される環構造中の炭素原子との結合部位を表す。)

【0022】

本発明の一態様によれば、前記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。

40

【発明の効果】

【0023】

本発明の一態様によれば、発光効率を向上させることが可能な化合物、及び有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、並びに当該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を提供することができる。

【図面の簡単な説明】

【0024】

【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。

50

【図 2】過渡 P L を測定する装置の概略図である。

【図 3】過渡 P L 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における第一の化合物、及び蛍光発光性の化合物の、エネルギー準位、及び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第一の化合物、蛍光発光性の化合物、及び第二の化合物の、エネルギー準位、及びエネルギー移動の関係を示す図である。

【図 6】本発明の第三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第一の化合物、及び第二の化合物の、エネルギー準位、及びエネルギー移動の関係を示す図である。

10

【発明を実施するための形態】

【0025】

本発明者らは、下記一般式(1)で表される化合物を以下に説明する実施形態等の有機 EL 素子に使用することで、有機 EL 素子が高効率化することを見出した。

【0026】

〔第一実施形態〕

【0027】

[有機 EL 素子]

(有機 EL 素子の素子構成)

20

以下、本実施形態に係る有機 EL 素子の素子構成について説明する。

本実施形態に係る有機素子は、一对の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。

【0028】

30

有機 EL 素子の代表的な素子構成としては、例えば、次の(a)~(f)等の構成を挙げることができる。

(a) 陽極 / 発光層 / 陰極

(b) 陽極 / 正孔注入・輸送層 / 発光層 / 陰極

(c) 陽極 / 発光層 / 電子注入・輸送層 / 陰極

(d) 陽極 / 正孔注入・輸送層 / 発光層 / 電子注入・輸送層 / 陰極

(e) 陽極 / 正孔注入・輸送層 / 発光層 / 障壁層 / 電子注入・輸送層 / 陰極

(f) 陽極 / 正孔注入・輸送層 / 障壁層 / 発光層 / 障壁層 / 電子注入・輸送層 / 陰極

上記の中で(d)の構成が好ましく用いられる。ただし、本発明は、これらの構成に限定されない。なお、上記「発光層」とは、発光機能を有する有機層である。前記「正孔注入・輸送層」は「正孔注入層、及び正孔輸送層のうち少なくともいずれか1つ」を意味する。前記「電子注入・輸送層」は「電子注入層、及び電子輸送層のうち少なくともいずれか1つ」を意味する。有機 EL 素子が、正孔注入層、及び正孔輸送層を有する場合には、正孔輸送層と陽極との間に正孔注入層が設けられていることが好ましい。また、有機 EL 素子が電子注入層、及び電子輸送層を有する場合には、電子輸送層と陰極との間に電子注入層が設けられていることが好ましい。また、正孔注入層、正孔輸送層、電子輸送層、及び電子注入層のそれぞれは、一層で構成されていてもよいし、複数の層で構成されていてもよい。

40

【0029】

図 1 に、本実施形態に係る有機 EL 素子の一例の概略構成を示す。

50

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、を有する。有機層10は、正孔注入層6、正孔輸送層7、発光層5、電子輸送層8、及び電子注入層9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、及び電子注入層9が、この順番で積層されている。

【0030】

(発光層)

有機EL素子1の発光層5は、第一の化合物、及び蛍光発光性の化合物を含む。

【0031】

第一の化合物は、ホスト材料(マトリックス材料と称する場合もある。)であることも好ましい。蛍光発光性の化合物は、ドーパント材料(ゲスト材料、エミッター、又は発光材料と称する場合もある。)であることも好ましい。

10

【0032】

発光層5は、金属錯体を含んでもよいが、重金属錯体を含まないことが好ましい。

発光層5は、燐光発光性の金属錯体を含まないことが好ましい。

【0033】

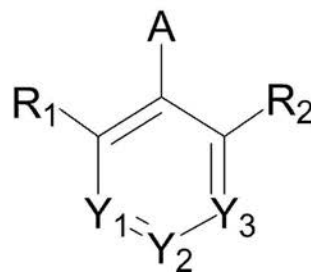
<第一の化合物>

本実施形態の有機EL素子においては、第一の化合物として、下記一般式(1)で表される化合物を用いる。

【0034】

【化9】

20



(1)

【0035】

(前記一般式(1)において、

Y₁、Y₂、及びY₃は、それぞれ独立に、C-R_a又は窒素原子であり、

Y₁、Y₂、及びY₃のうち、少なくとも1つは窒素原子であり、

R₁、R₂、及びR_aは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、

置換基としてのR₁、R₂、及びR_aは、それぞれ独立に、

置換または無置換の炭素数1~30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1~30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数2~30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

ニトロ基、

30

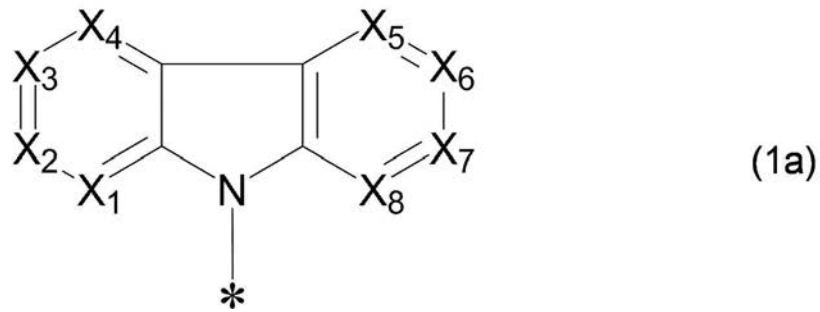
40

50

カルボキシ基、及び
ハロゲン原子
からなる群から選択され、
複数の R a は、互いに同一であるか、又は異なり、
R₁、及び R₂ の少なくとも一方が置換基であり、
A は、下記一般式 (1 a)、下記一般式 (1 b)、又は下記一般式 (1 c) で表される
基である。)

【 0 0 3 6 】

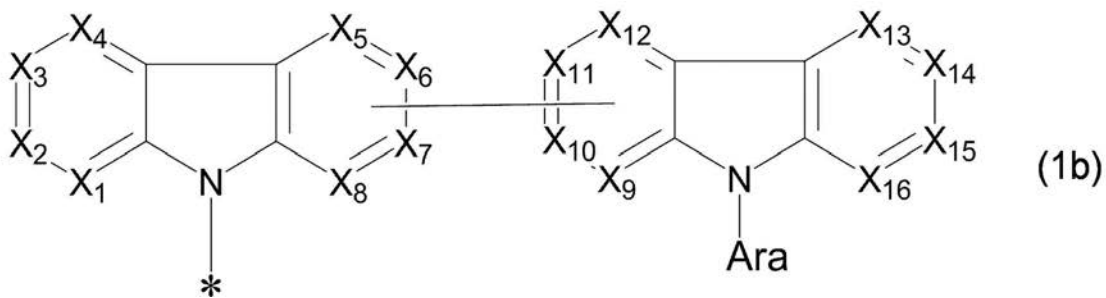
【 化 1 0 】



10

【 0 0 3 7 】

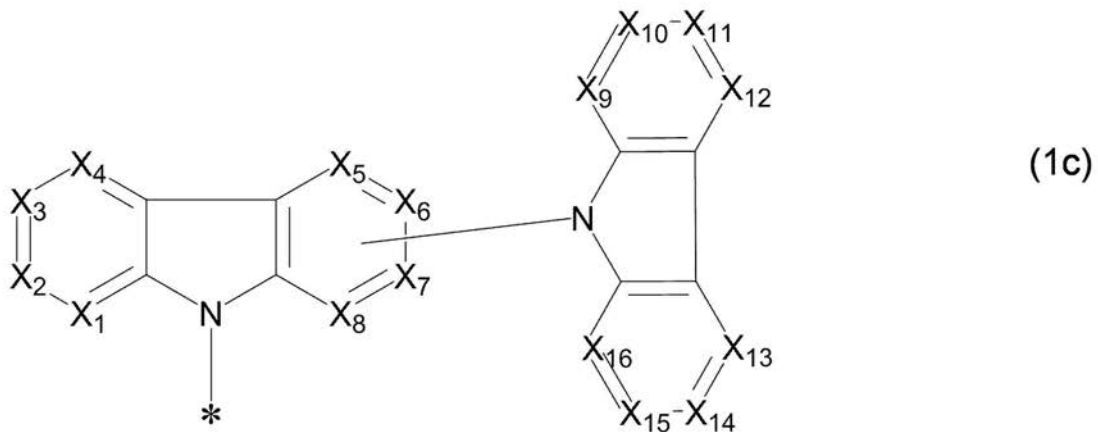
【 化 1 1 】



20

【 0 0 3 8 】

【 化 1 2 】



30

40

【 0 0 3 9 】

(前記一般式 (1 a)、前記一般式 (1 b)、及び前記一般式 (1 c) において、

X₁ ~ X₁₆ は、それぞれ独立に、C - R b 又は窒素原子であり、

ただし、前記一般式 (1 b) 中、X₅ ~ X₈ のうち、少なくとも一つは、X₉ ~ X₁₂ のいずれかと結合する炭素原子であり、X₉ ~ X₁₂ のうち、少なくとも一つは、X₅ ~ X₈ のいずれかと結合する炭素原子であり、

前記一般式 (1 c) 中、X₅ ~ X₈ のうち、少なくとも一つは、X₉ ~ X₁₆ を含有する含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子であり、

R b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、

50

置換基としての R b は、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、
 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、
 置換または無置換のアミノ基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、
 置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、
 置換または無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、
 置換または無置換のホスファニル基、
 置換または無置換のホスホリル基、
 置換または無置換のシリル基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールカルボニル基、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 カルボキシ基、及び
 ハロゲン原子

10

からなる群から選択され、

複数の R b は、互いに同一であるか、又は異なり、

20

$X_1 \sim X_8$ のうち、複数の R b が C - R b であって、R b が置換基である場合、R b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

$X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数の R b が C - R b であって、R b が置換基である場合、R b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、

A r a は、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、
 置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、
 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のフルオロアルキル基、
 置換または無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、
 置換または無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、
 置換ホスホリル基、及び
 置換シリル基

30

からなる群から選択され、

* は、前記一般式 (1) で表される環構造中の炭素原子との結合部位を表す。)

【 0 0 4 0 】

前記一般式 (1) において、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であるとは、 R_1 、及び R_2 が同時に水素原子にならないことを意味する。

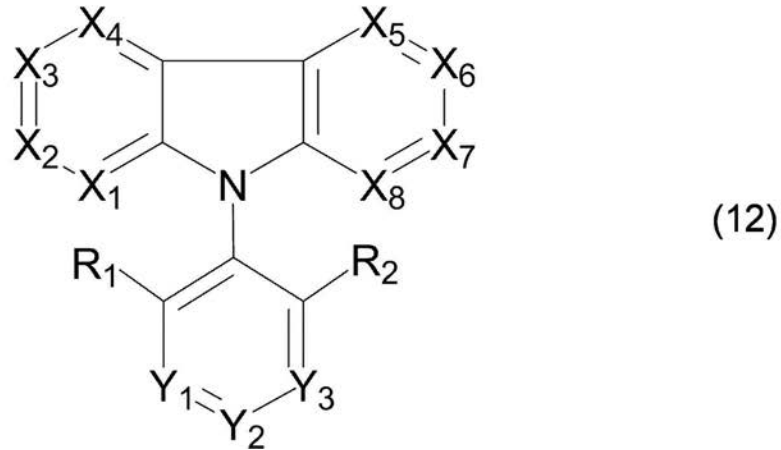
【 0 0 4 1 】

A が、前記一般式 (1 a) で表される基である場合、本実施形態の化合物は、下記一般式 (1 2) で表される。

40

【 0 0 4 2 】

【化 1 3】



10

【0043】

(前記一般式(12)において、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 は、それぞれ独立に、C-Ra又は窒素原子であり、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 のうち、少なくとも1つは窒素原子であり、 R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及びRaに関する置換基と同義であり、複数のRaは、互いに同一であるか、又は異なり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_8$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成しない。)

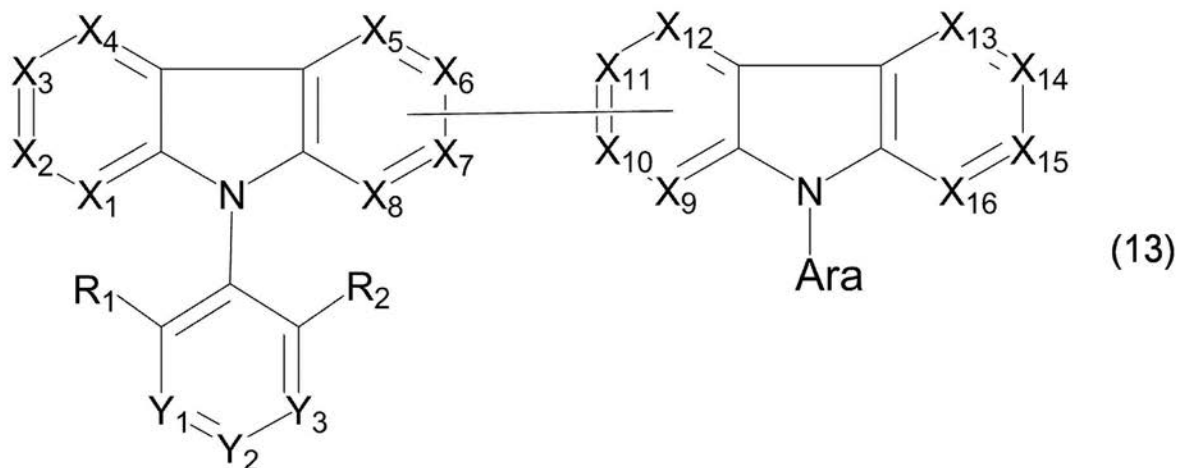
20

【0044】

Aが、前記一般式(1b)で表される基である場合、本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(13)で表される。

【0045】

【化 1 4】



30

40

【0046】

(前記一般式(13)において、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 は、それぞれ独立に、C-Ra又は窒素原子であり、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 のうち、少なくとも1つは窒素原子であり、 R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及びRaに関する置換基と同義であり、複数のRaは、互いに同一であるか、又は異なり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、ただし、前記一般式(13)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim$

50

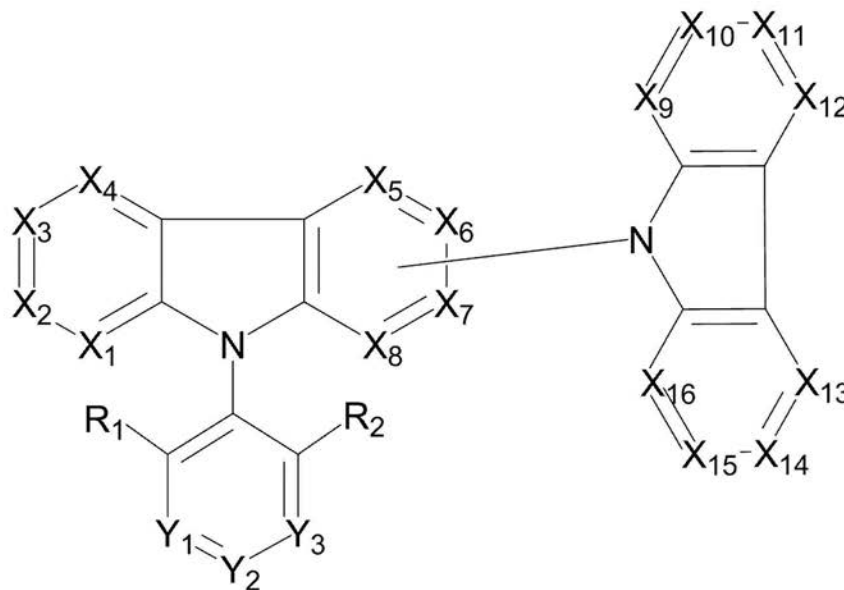
X_{12} のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子である。前記一般式(13)において、 R_b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_b は、前述した R_b に関する置換基と同義であり、複数の R_b は、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数の $C-R_b$ であって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数の $C-R_b$ であって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $A_r a$ は、前述した $A_r a$ に関する置換基と同義である。)

【0047】

A が、前記一般式(1c)で表される基である場合、本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(14)で表される。

【0048】

【化15】



10

20

(14)

【0049】

(前記一般式(14)において、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 は、それぞれ独立に、 $C-R_a$ 又は窒素原子であり、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 のうち、少なくとも一つは窒素原子であり、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、複数の R_a は、互いに同一であるか、又は異なり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、 $C-R_b$ 又は窒素原子であり、ただし、前記一般式(14)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子である。前記一般式(14)において、 R_b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_b は、前述した R_b に関する置換基と同義であり、複数の R_b は、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数の $C-R_b$ であって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数の $C-R_b$ であって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成しない。)

30

40

【0050】

本実施形態の第一の化合物において、A が、前記一般式(1b)、又は前記一般式(1c)で表される基であることが好ましく、A が、前記一般式(1b)で表される基であることがより好ましい。すなわち、本実施形態の第一の化合物は、前記一般式(13)、又は前記一般式(14)で表される化合物であることが好ましく、前記一般式(13)で表される化合物であることがより好ましい。

50

【0051】

本実施形態の第一の化合物において、Aが、前記一般式(1b)で表される基であり、Rbは、水素原子、又は置換基である場合、置換基としてのRbは、置換または無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換または無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、置換または無置換の炭素数1~30のアルキルチオ基、置換または無置換のアミノ基、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換または無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、置換または無置換の炭素数2~30のアルケニル基、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールチオ基、置換または無置換のホスファニル基、置換または無置換のホスホリル基、置換または無置換のシリル基、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールカルボニル基、シアノ基、ニトロ基、カルボキシ基、及びハロゲン原子からなる群から選択されることが好ましく、この場合において、置換基としてのRbは、置換または無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換または無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、置換または無置換の炭素数1~30のアルキルチオ基、置換または無置換のアミノ基、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換または無置換の炭素数2~30のアルケニル基、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールチオ基、置換または無置換のホスファニル基、置換または無置換のホスホリル基、置換または無置換のシリル基、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールカルボニル基、シアノ基、ニトロ基、カルボキシ基、及びハロゲン原子からなる群から選択されることがより好ましい。

10

20

【0052】

本実施形態の第一の化合物において、Aが、前記一般式(1b)で表される基であり、Rbは、水素原子、又は置換基である場合、置換基としてのRbは、置換または無置換のカルボゾリル基を含まないことも好ましく、置換または無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基を含まないこともより好ましい。

【0053】

本実施形態の第一の化合物において、Aが、前記一般式(1b)で表される基であり、X₁、X₂、X₃、及びX₄がC-Rbであり、Rbが水素原子であることが好ましい。

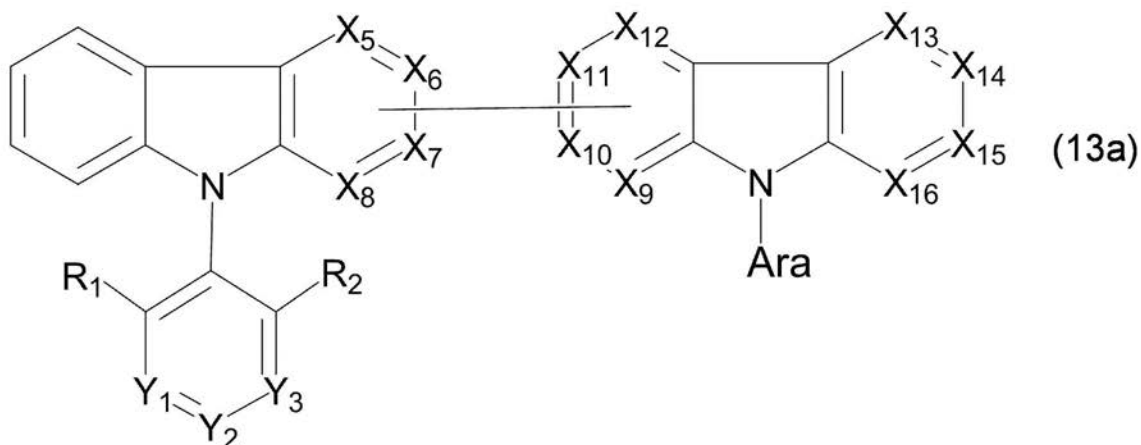
【0054】

Aが、前記一般式(1b)で表される基であり、X₁、X₂、X₃、及びX₄がC-Rbであり、Rbが水素原子である場合、本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(13a)で表される。

30

【0055】

【化16】



40

【0056】

(前記一般式(13a)において、Y₁、Y₂、及びY₃は、それぞれ独立に、C-Ra又は窒素原子であり、Y₁、Y₂、及びY₃のうち、少なくとも1つは窒素原子であり、R₁、R₂、及びRaは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基として

50

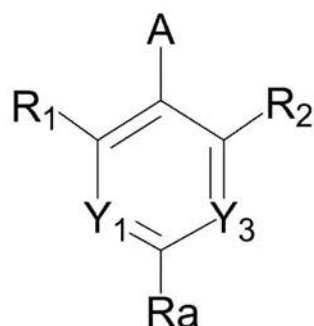
の R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、複数の R_a は、互いに同一であるか、又は異なり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_5 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、 $C - R_b$ 又は窒素原子であり、ただし、前記一般式 (13a) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子である。前記一般式 (13a) において、 R_b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_b は、前述した R_b に関する置換基と同義であり、複数の R_b は、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_5 \sim X_8$ のうち、複数の $C - R_b$ であって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数の $C - R_b$ であって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $A_r a$ は、前述した $A_r a$ に関する置換基と同義である。) 10

【0057】

本実施形態の第一の化合物は、下記一般式 (10A) で表されることが好ましい。

【0058】

【化17】



(10A)

20

【0059】

(前記一般式 (10A) において、 Y_1 、及び Y_3 は、それぞれ独立に、 $C - R_a$ 又は窒素原子であり、 Y_1 、及び Y_3 のうち、少なくとも一つは窒素原子であり、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、複数の R_a は、互いに同一であるか、又は異なり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 A は、前記一般式 (1a)、前記一般式 (1b)、又は前記一般式 (1c) で表される基である。) 30

【0060】

本実施形態の第一の化合物において、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 のうち、2つが窒素原子であり、残り1つが $C - R_a$ であることが好ましい。

本実施形態の第一の化合物において、 Y_1 、及び Y_3 が窒素原子であり、かつ Y_2 が $C - R_a$ であることが好ましい。

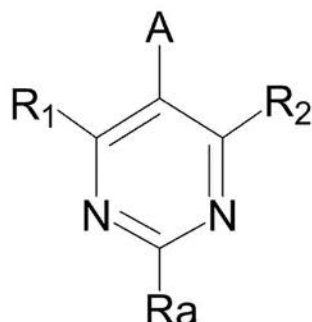
【0061】

本実施形態の第一の化合物は、下記一般式 (10B) で表されることが好ましい。

40

【0062】

【化 18】



(10B)

10

【0063】

(前記一般式(10B)において、R₁、R₂、及びRaは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのR₁、R₂、及びRaは、それぞれ独立に、前述したR₁、R₂、及びRaに関する置換基と同義であり、R₁、及びR₂の少なくとも一方が置換基であり、Aは、前記一般式(1a)、前記一般式(1b)、又は前記一般式(1c)で表される基である。)

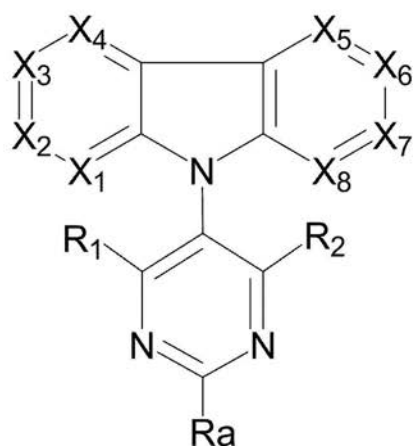
【0064】

前記一般式(12)において、Y₁、及びY₃が窒素原子であり、Y₂がC-Raである場合、本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(12a)で表される。

【0065】

20

【化 19】



(12a)

30

【0066】

(前記一般式(12a)において、R₁、R₂、及びRaは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのR₁、R₂、及びRaは、それぞれ独立に、前述したR₁、R₂、及びRaに関する置換基と同義であり、R₁、及びR₂の少なくとも一方が置換基であり、X₁~X₈は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、X₁~X₈のうち、複数のRbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成しない。)

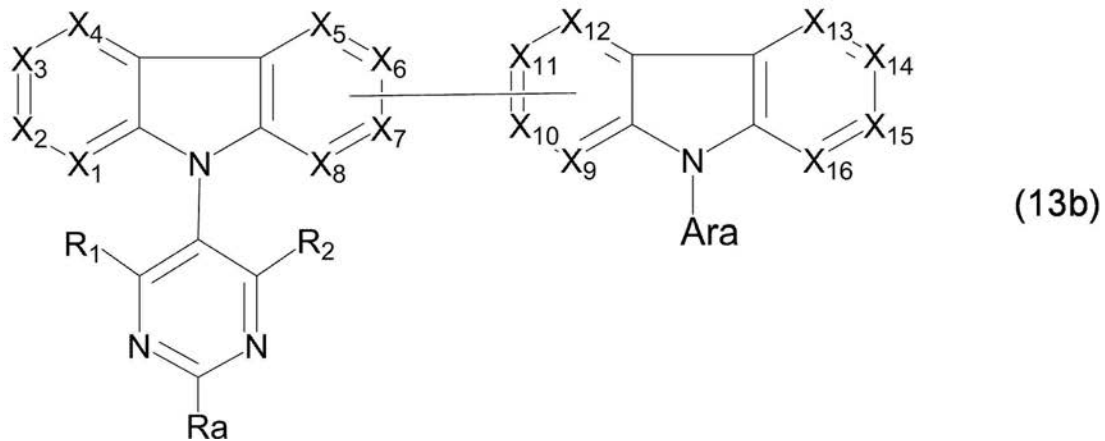
40

【0067】

前記一般式(13)において、Y₁、及びY₃が窒素原子であり、Y₂がC-Raである場合、本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(13b)で表される。

【0068】

【化20】



10

【0069】

(前記一般式(13b)において、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、ただし、前記一般式(13b)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子である。前記一般式(13b)において、 R_b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_b は、前述した R_b に関する置換基と同義であり、複数の R_b は、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数のC-Rbであって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数のC-Rbであって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 Ara は、前述した Ara に関する置換基と同義である。)

20

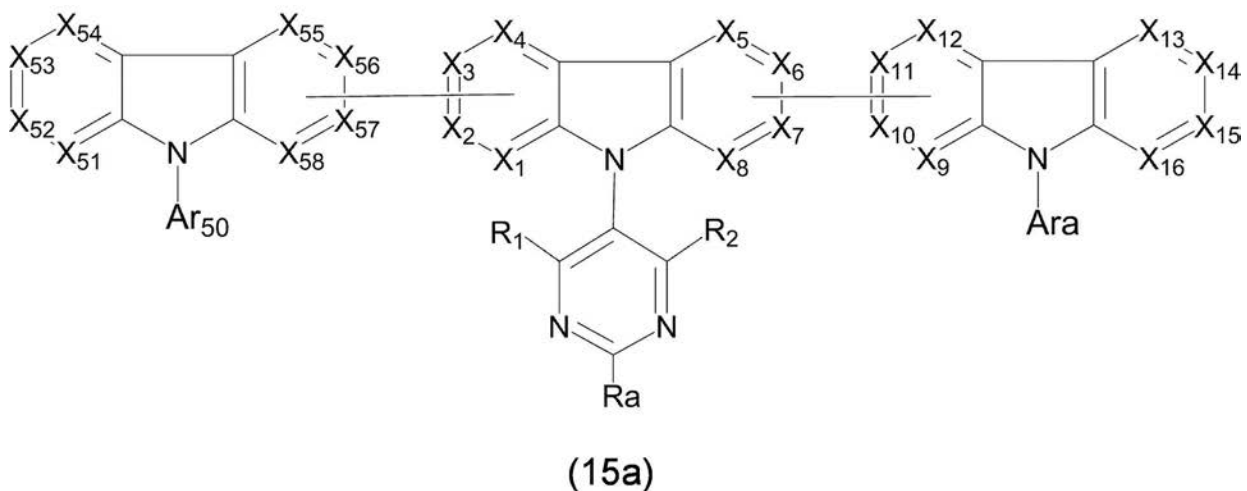
【0070】

本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(15a)で表される化合物であることも好ましい。

30

【0071】

【化21】



40

【0072】

(前記一般式(15a)において、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方

50

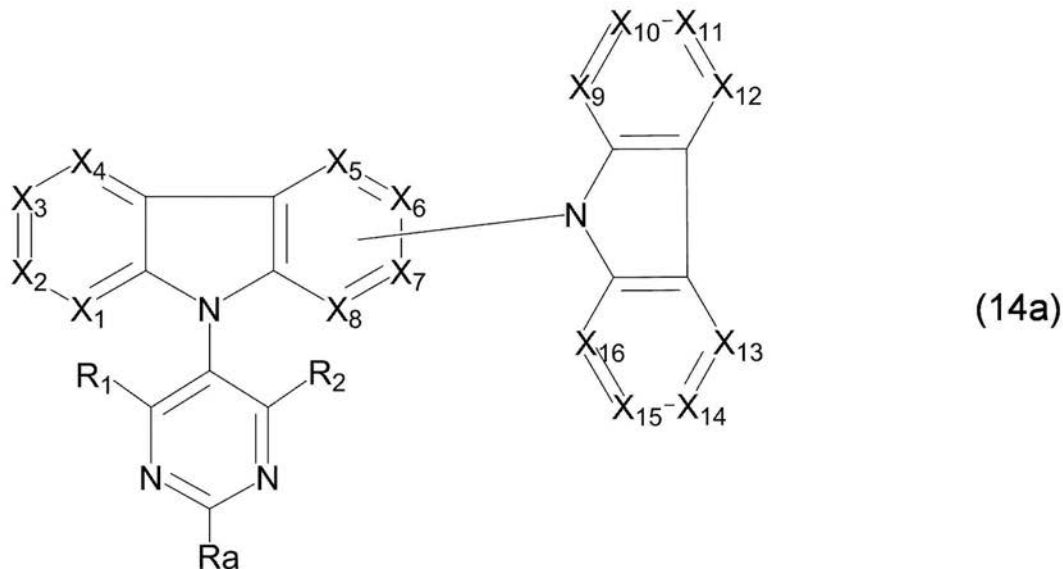
が置換基であり、 $X_1 \sim X_{16}$ 並びに $X_{51} \sim X_{58}$ は、それぞれ独立に、C - R b 又は窒素原子であり、ただし、前記一般式 (13b) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_1 \sim X_4$ のうち、少なくとも一つは、 $X_{55} \sim X_{58}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_{55} \sim X_{58}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_1 \sim X_4$ のいずれかと結合する炭素原子である。前記一般式 (13b) において、R b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R b は、前述した R b に関する置換基と同義であり、複数の R b は、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数の R b であって、R b が置換基である場合、R b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数の R b であって、R b が置換基である場合、R b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、A r a 及び A r ₅₀ は、それぞれ独立に、前述した A r a に関する置換基と同義である。) 10

【0073】

前記一般式 (14) において、 Y_1 、及び Y_3 が窒素原子であり、 Y_2 が C - R a である場合、本実施形態の第一の化合物は、下記一般式 (14a) で表される。

【0074】

【化22】



20

30

【0075】

(前記一般式 (14a) において、 R_1 、 R_2 、及び R a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R a に関する置換基と同義であり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C - R b 又は窒素原子であり、ただし、前記一般式 (14a) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子である。前記一般式 (14a) において、R b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R b は、前述した R b に関する置換基と同義であり、複数の R b は、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数の R b であって、R b が置換基である場合、R b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数の R b であって、R b が置換基である場合、R b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成しない。) 40

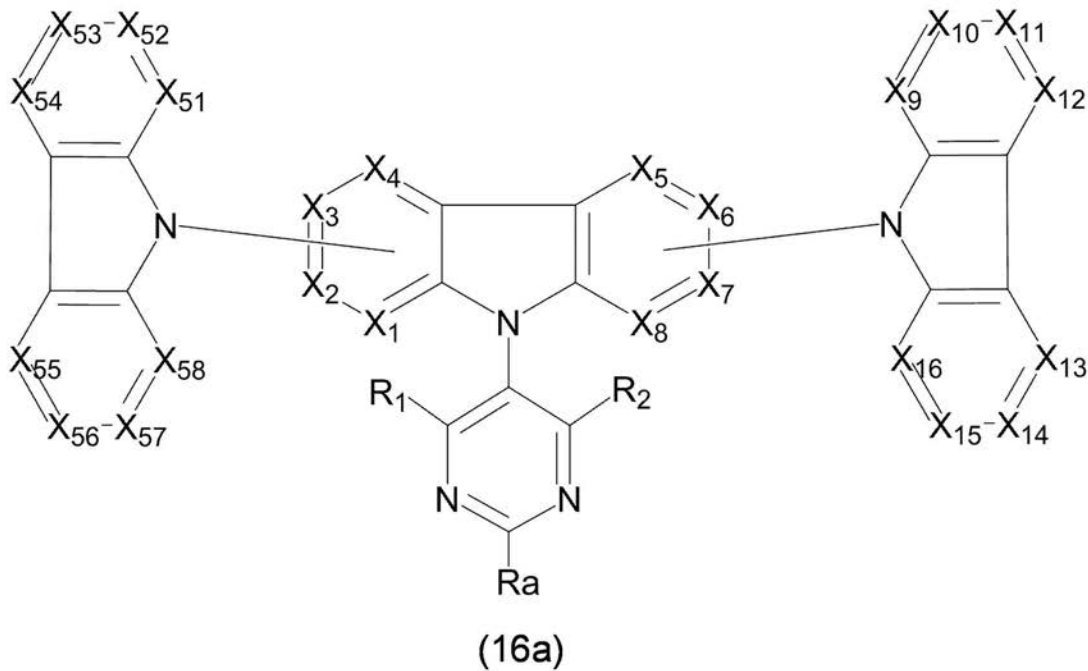
【0076】

本実施形態の第一の化合物は、下記一般式 (16a) で表される化合物であることも好ましい。

【0077】

50

【化 2 3】



10

【0078】

20

(前記一般式(16a)において、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_8$ 並びに $X_{51} \sim X_{58}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、ただし、前記一般式(16a)中、 $X_1 \sim X_4$ のうち、少なくとも一つは、 $X_{51} \sim X_{58}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子であり、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子である。前記一般式(16a)において、 R_b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_b は、前述した R_b に関する置換基と同義であり、複数の R_b は、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数のC-Rbであって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数のC-Rbであって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_{51} \sim X_{58}$ のうち、複数のC-Rbであって、 R_b が置換基である場合、 R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成しない。)

30

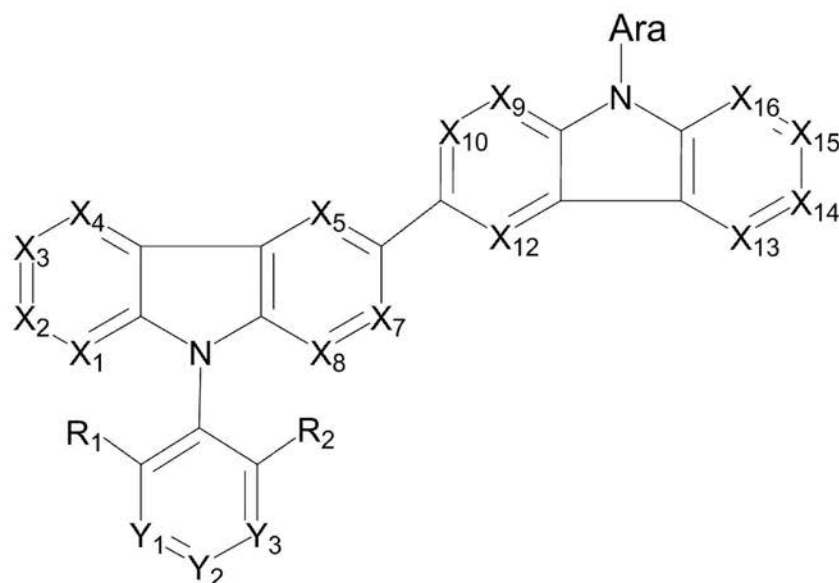
【0079】

前記一般式(13)、(13a)及び(13b)において、 X_6 が、 X_{11} と結合する炭素原子であり、 X_{11} が、 X_6 と結合する炭素原子であることが好ましい。前記一般式(13)において、 X_6 が、 X_{11} と結合する炭素原子であり、 X_{11} が、 X_6 と結合する炭素原子である場合、本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(13c)で表される。

40

【0080】

【化 2 4】



(13c)

10

【 0 0 8 1】

(前記一般式(13c)において、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 は、それぞれ独立に、C-Ra又は窒素原子であり、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 のうち、少なくとも1つは窒素原子であり、 R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及びRaに関する置換基と同義であり、複数のRaは、互いに同一であるか、又は異なり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_5$ 、 $X_7 \sim X_{10}$ 、並びに $X_{12} \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_5$ 、 X_7 、並びに X_8 のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 X_9 、 X_{10} 、並びに $X_{12} \sim X_{16}$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、Araは、前述したAraに関する置換基と同義である。)

20

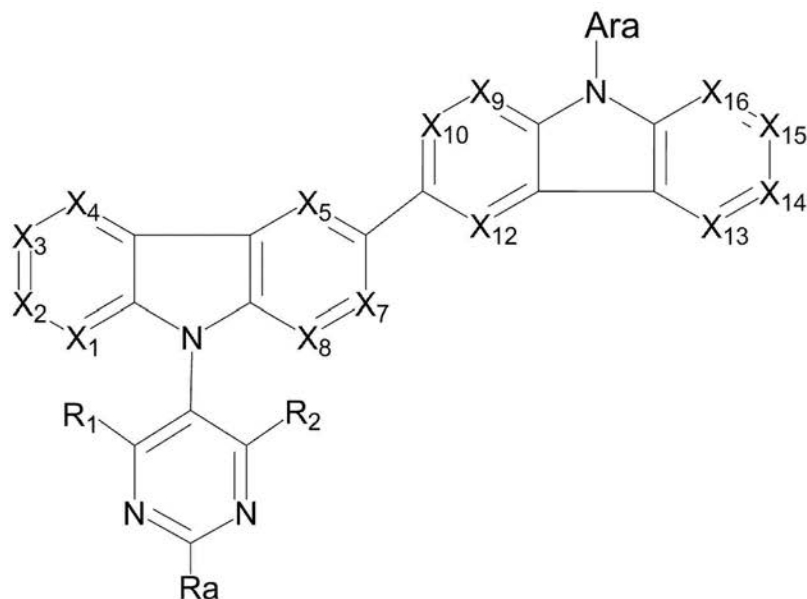
30

【 0 0 8 2】

前記一般式(13c)において、 Y_1 、及び Y_3 が窒素原子であり、かつ Y_2 がC-Raである場合、本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(13c)で表される。

【 0 0 8 3】

【化 2 5】



(13e)

10

【0084】

前記一般式(13e)中、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_5$ 、 $X_7 \sim X_{10}$ 、並びに $X_{12} \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_5$ 、 X_7 、並びに X_8 のうち、複数のRbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 X_9 、 X_{10} 、並びに $X_{12} \sim X_{16}$ のうち、複数のRbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、Araは、前述したAraに関する置換基と同義である。

20

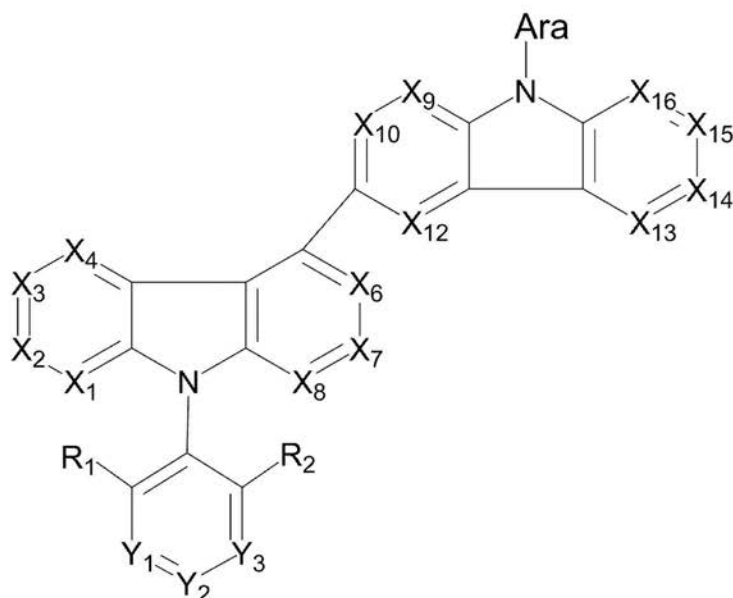
【0085】

前記一般式(13)、(13a)及び(13b)において、 X_5 が、 X_{11} と結合する炭素原子であり、 X_{11} が、 X_5 と結合する炭素原子であることが好ましい。前記一般式(13)において、 X_5 が、 X_{11} と結合する炭素原子であり、 X_{11} が、 X_5 と結合する炭素原子である場合、本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(13d)で表される。

30

【0086】

【化 2 6】



(13d)

10

【0087】

(前記一般式(13d)において、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 は、それぞれ独立に、C-Ra又は窒素原子であり、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 のうち、少なくとも1つは窒素原子であり、 R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及びRaに関する置換基と同義であり、複数のRaは、互いに同一であるか、又は異なり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_4$ 、 $X_6 \sim X_{10}$ 、並びに $X_{12} \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_4$ 、並びに $X_6 \sim X_8$ のうち、複数のRbがC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 X_9 、 X_{10} 、並びに $X_{12} \sim X_{16}$ のうち、複数のRbがC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、Araは、前述したAraに関する置換基と同義である。)

20

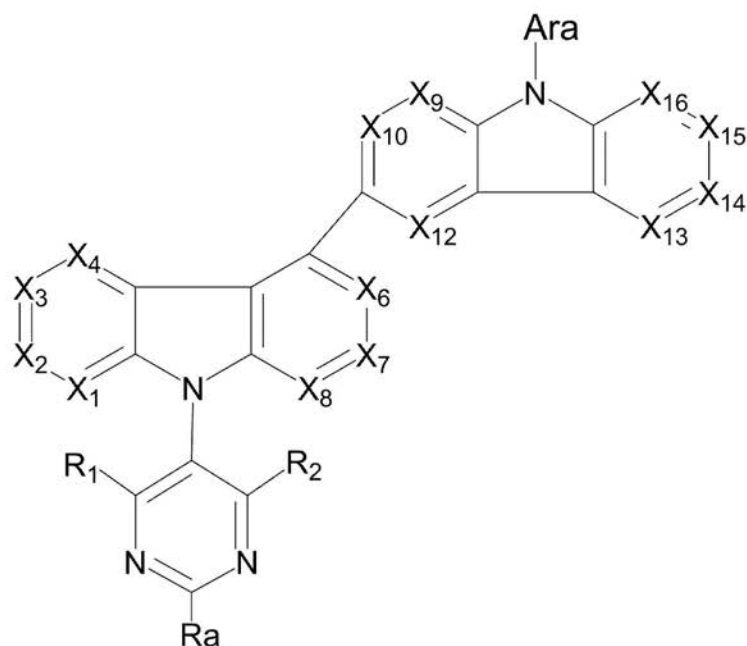
30

【0088】

前記一般式(13d)において、 Y_1 、及び Y_3 が窒素原子であり、かつ Y_2 がC-Raである場合、本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(13f)で表される。

【0089】

【化 27】



(13f)

10

【0090】

(前記一般式(13f)において、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_4$ 、 $X_6 \sim X_{10}$ 、並びに $X_{12} \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_4$ 、並びに $X_6 \sim X_8$ のうち、複数のRbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 X_9 、 X_{10} 、並びに $X_{12} \sim X_{16}$ のうち、複数のRbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、Araは、前述したAraに関する置換基と同義である。)

20

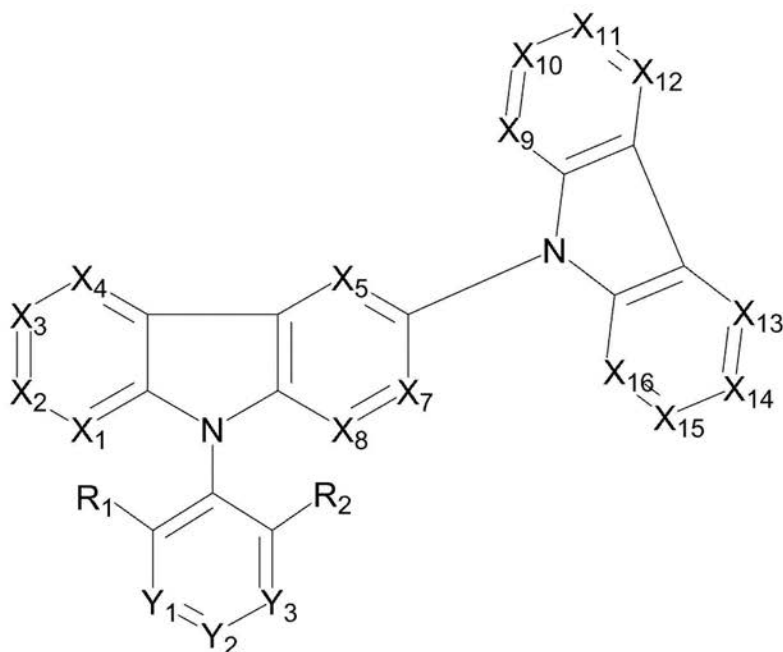
30

【0091】

前記一般式(14)、及び(14a)において、 X_6 が、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子であることが好ましい。前記一般式(14)において、 X_6 が、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子である場合、本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(14b)で表される。

【0092】

【化 2 8】



(14b)

10

【0093】

(前記一般式(14b)において、Y₁、Y₂、及びY₃は、それぞれ独立に、C-R_a又は窒素原子であり、Y₁、Y₂、及びY₃のうち、少なくとも1つは窒素原子であり、R₁、R₂、及びR_aは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのR₁、R₂、及びR_aは、それぞれ独立に、前述したR₁、R₂、及びR_aに関する置換基と同義であり、複数のR_aは、互いに同一であるか、又は異なり、R₁、及びR₂の少なくとも一方が置換基であり、X₁~X₅、並びにX₇~X₁₆は、それぞれ独立に、C-R_b又は窒素原子であり、R_bは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのR_bは、前述したR_bに関する置換基と同義であり、複数のR_bは、互いに同一であるか、又は異なり、X₁~X₅、並びにX₇~X₈のうち、複数のR_bであって、R_bが置換基である場合、R_b同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、X₉~X₁₆のうち、複数のR_bであって、R_bが置換基である場合、R_b同士が結合して環を形成するか、または環を形成しない。)

20

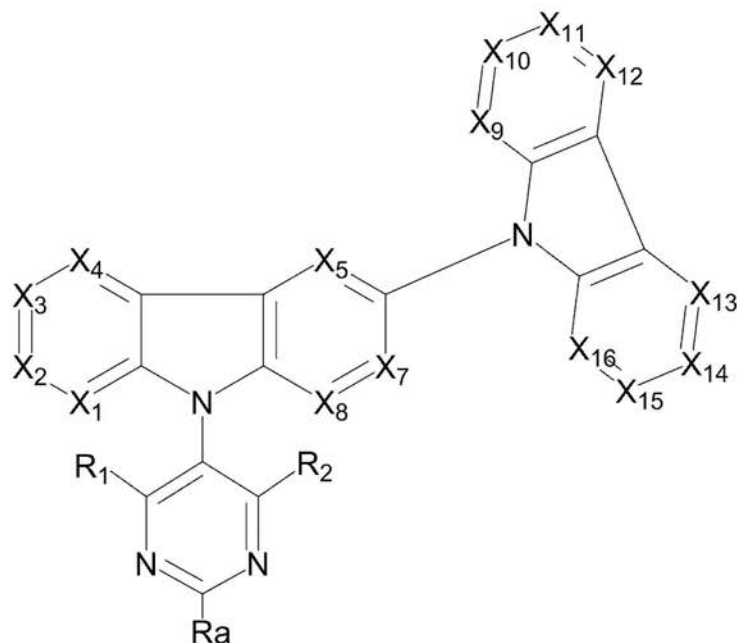
30

【0094】

前記一般式(14b)において、Y₁、及びY₃が窒素原子であり、かつY₂がC-R_aである場合、本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(14c)で表される。

【0095】

【化 2 9】



(14c)

10

【0096】

(前記一般式(14c)において、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_5$ 、並びに $X_7 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_5$ 、並びに $X_7 \sim X_8$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成しない。)

20

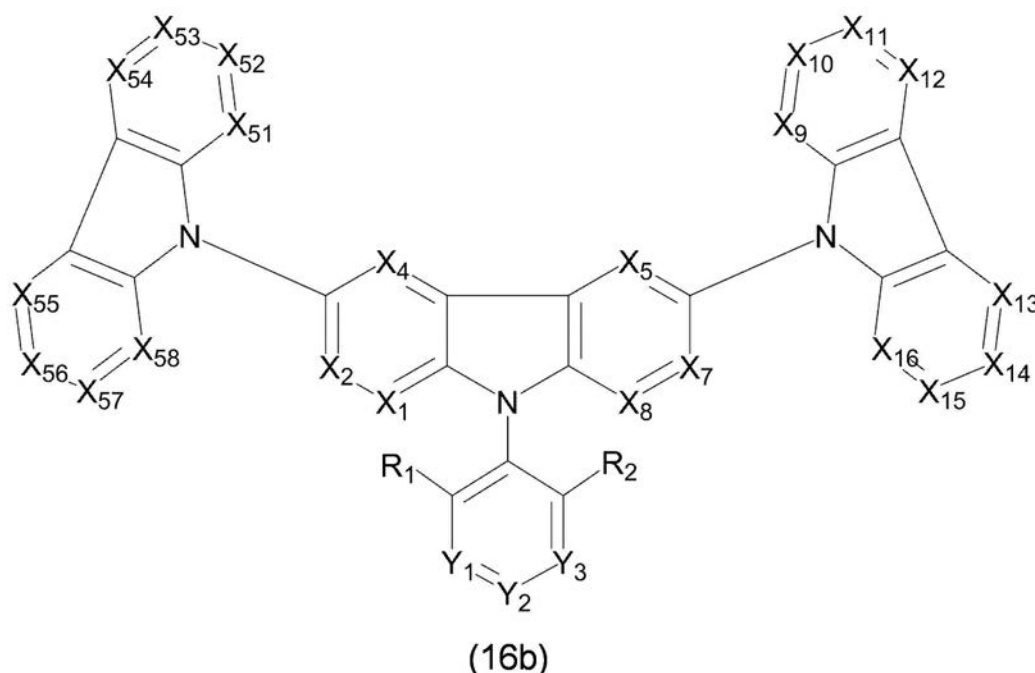
【0097】

本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(16b)で表される化合物であることも好ましい。

30

【0098】

【化 3 0】



10

【 0 0 9 9】

20

(前記一般式(16b)において、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 は、それぞれ独立に、C-Ra又は窒素原子であり、 Y_1 、 Y_2 、及び Y_3 のうち、少なくとも1つは窒素原子であり、 R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及びRaは、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及びRaに関する置換基と同義であり、複数のRaは、互いに同一であるか、又は異なり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_5$ 、 $X_7 \sim X_{16}$ 、並びに $X_{51} \sim X_{58}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、 X_1 、 X_2 、 X_4 、 X_5 、 X_7 、及び X_8 のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_{51} \sim X_{58}$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成しない。)

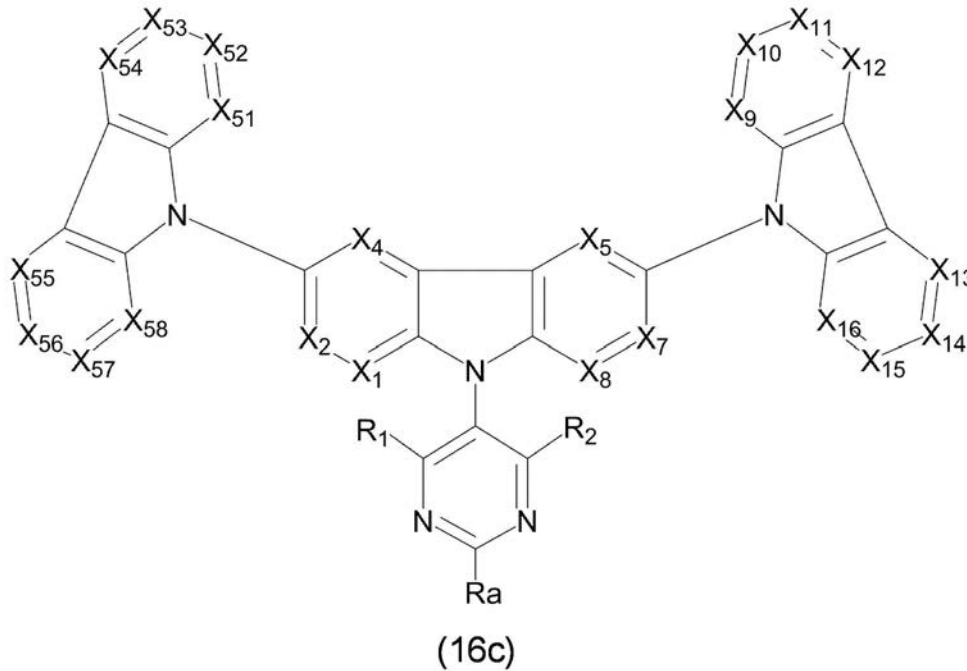
30

【 0 1 0 0】

前記一般式(16b)において、 Y_1 、及び Y_3 が窒素原子であり、かつ Y_2 がC-Raである場合、本実施形態の第一の化合物は、下記一般式(16c)で表される。

【 0 1 0 1】

【化 3 1】



10

【0102】

20

(前記一般式(16c)において、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_5$ 、 $X_7 \sim X_{16}$ 、並びに $X_{51} \sim X_{58}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、 X_1 、 X_2 、 X_4 、 X_5 、 X_7 、及び X_8 のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_{51} \sim X_{58}$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成しない。)

30

【0103】

本実施形態の第一の化合物は、前記一般式(10B)で表される化合物であることが好ましく、前記一般式(12a)で表される化合物であることがより好ましく、前記一般式(13b)、前記一般式(14a)、又は前記一般式(16a)で表される化合物であることがさらに好ましく、前記一般式(13e)、前記一般式(13f)、前記一般式(14c)、又は前記一般式(16c)であることがさらにより好ましく、前記一般式(13e)表される化合物であることが特に好ましい。

【0104】

40

本実施形態の第一の化合物において、 $X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rbであることが好ましい。この場合、複数のRbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なる。ただし、前記一般式(1b)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、前記一般式(1c)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子である。

【0105】

本実施形態の第一の化合物において、 $X_{51} \sim X_{58}$ は、それぞれ独立に、C-Rbで

50

あることが好ましい。この場合、複数の R b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R b は、前述した R b に関する置換基と同義であり、複数の R b は、互いに同一であるか、又は異なる。ただし、前記一般式 (1 5 a) 中、 $X_{55} \sim X_{58}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_{11} \sim X_{14}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_{11} \sim X_{14}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_{55} \sim X_{58}$ のいずれかと結合する炭素原子である。

【 0 1 0 6 】

本実施形態の第一の化合物において、 $X_{11} \sim X_{16}$ は、C - R b であり、R b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R b は、置換または無置換の炭素数 1 ~ 3 0 のアルキル基、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 のアリール基、及び置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 3 0 のヘテロアリール基からなる群から選択され、複数の R b は、互いに同一であるか、又は異なることが好ましい。ただし、前記一般式 (1 b) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、前記一般式 (1 c) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子である。

10

【 0 1 0 7 】

本実施形態の第一の化合物において、 $X_{11} \sim X_{16}$ は、C - R b であり、R b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R b は、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 のアリール基からなる群から選択され、複数の R b は、互いに同一であるか、又は異なることが好ましい。ただし、前記一般式 (1 b) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、前記一般式 (1 c) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子である。

20

【 0 1 0 8 】

本実施形態の第一の化合物において、 $X_{11} \sim X_{16}$ は、C - R b であり、R b は、水素原子であることが好ましい。ただし、前記一般式 (1 b) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、前記一般式 (1 c) 中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子である。

30

【 0 1 0 9 】

本実施形態の第一の化合物において、 R_1 、及び R_2 が置換基であることが好ましい。

【 0 1 1 0 】

本実施形態の第一の化合物において、 R_1 、及び R_2 は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素数 1 ~ 3 0 のアルキル基、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 のアリール基、置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 3 0 のヘテロアリール基、シアノ基であることが好ましく、 R_1 、及び R_2 は、それぞれ独立に、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 のアリール基であることがより好ましく、 R_1 、及び R_2 は、それぞれ独立に、置換または無置換のフェニル基であることがさらに好ましい。

40

【 0 1 1 1 】

本実施形態の第一の化合物において、R a は、置換基であり、置換基としての R a は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素数 1 ~ 3 0 のアルキル基、置換または無置換の炭素数 1 ~ 3 0 のアルコキシ基、置換または無置換の炭素数 1 ~ 3 0 のアルキルチオ基、置換または無置換のアミノ基、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 のアリール基、置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 3 0 のヘテロアリール基、置換または無置換の炭素数 2 ~ 3 0 のアルケニル基、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 のアリールオキシ基、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 のアリールチオ基、置換または無置換のホスファニル基、置換または無置換のホスホリル基、置換または無置換のシリル基、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 3 0 のアリールカルボニル基、シアノ基、ニトロ基、カル

50

ボキシ基、及びハロゲン原子からなる群から選択され、複数の R a は、互いに同一であるか、又は異なることが好ましい。

【0112】

本実施形態の第一の化合物において、R a は、置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、シアノ基であることが好ましく、R a は、置換また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く、R a は、置換または無置換のフェニル基であることがより好ましい。

【0113】

本実施形態の第一の化合物において、Y₁ 及び Y₃ が窒素原子であることが好ましい。

10

【0114】

本実施形態の第一の化合物において、Y₂ が C - R a であることが好ましい。

【0115】

本実施形態の第一の化合物において、R₁、R₂ 及び R a が同時に置換基であることが好ましい。

【0116】

本実施形態の第一の化合物において、R₁、R₂ 及び R a が同時に置換基であり、かつ Y₁ 及び Y₃ が窒素原子であることが好ましい。

【0117】

本実施形態の第一の化合物において、R₁、R₂、及び R a は、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、シアノ基であることが好ましく、R₁、R₂、及び R a は、それぞれ独立に、置換また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く、R₁、R₂、及び R a は、それぞれ独立に、置換または無置換のフェニル基であることがさらに好ましい。

20

【0118】

本実施形態の第一の化合物において、A r a は、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、及び置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基からなる群から選択されることが好ましく、置換また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く、

30

A r a は、置換また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。

【0119】

本実施形態の第一の化合物において、複数の R b が置換基である場合、R b 同士は環を形成しないことが好ましい。

本実施形態の第一の化合物において、一般式中の A で表される骨格は、カルバゾール環骨格を基本骨格として有している。

A で表される骨格中のカルバゾール環を拡張した場合、A で表される骨格の平面性が向上する。平面性が向上した骨格を有する化合物を用いて薄膜を形成した場合、薄膜中で分子間相互作用が強まり、化合物のエネルギーギャップが小さくなることがある。ここで、カルバゾール環を拡張した場合とは、R b 同士が結合して環を形成した場合に相当する。

40

有機 EL 素子に用いる青色発光を示す化合物としては、一重項エネルギーギャップの大きな化合物が必要とされる。一重項エネルギーギャップの大きな化合物とするには、A で表される骨格は、環を拡張していない単環のカルバゾール環で構成されることが好ましい。ここで、環を拡張していない単環のカルバゾール環とは、R b 同士が結合していない（環を形成していない）場合に相当する。

【0120】

・熱活性遅延蛍光性

遅延蛍光（熱活性化遅延蛍光）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 E₁₃ を小さくすることがで

50

きれば、通常は遷移確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效率で生じ、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。本実施形態に係る化合物としては、このようなメカニズムで発生する熱活性化遅延蛍光性を示す化合物であることが好ましい。

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

【0121】

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、三重項励起子を經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經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、三重項励起子を經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。

【0122】

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。

本実施形態の過渡 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、本実施形態で説明する装置に限定されない。

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。

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。

【0123】

例えば、マトリックス材料として、下記参考化合物 HX-1 を用い、ドーピング材料として下記参考化合物 DX-1 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。

【0124】

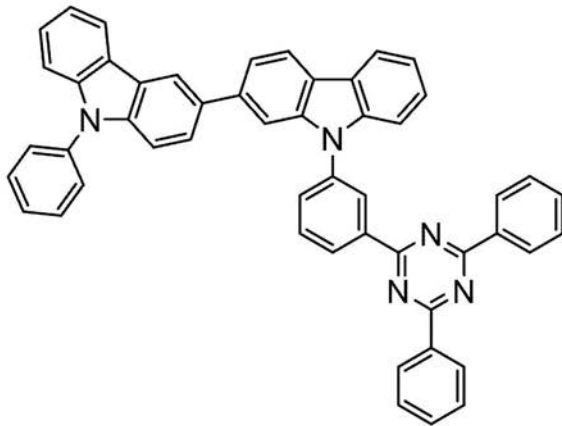
10

20

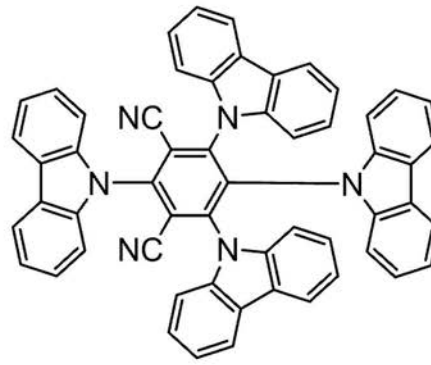
30

40

【化 3 2】



(参考化合物 HX-1)



(参考化合物 DX-1)

10

【0125】

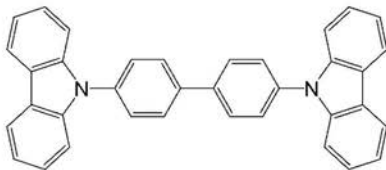
ここでは、前述の薄膜試料 A、及び薄膜試料 B を用いて減衰曲線を解析した。薄膜試料 B は、マトリックス材料として下記参考化合物 HX - 2 を用い、ドーピング材料として前記参考化合物 DX - 1 を用いて、上述のようにして薄膜試料を作製した。

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

20

【0126】

【化 3 3】



(参考化合物 HX-2)

【0127】

上記したように過渡 PL 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

本実施形態における遅延蛍光発光量は、図 2 の装置を用いて求めることができる。前述の本実施形態に係る化合物は、当該本実施形態に係る化合物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。本実施形態においては、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。

40

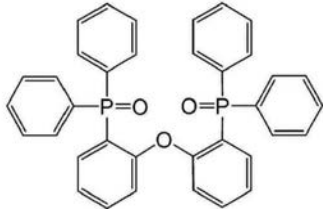
Prompt 発光と Delay 発光の量は、“Nature 492, 234-238, 2012”に記載された方法と同様の方法により求めることができる。なお、Prompt 発光と Delay 発光の量の算出に使用される装置は、前記の文献に記載の装置に限定されない。

また、遅延蛍光性の測定に用いられる試料は、例えば、本実施形態に係る化合物と下記化合物 TH - 2 とを、本実施形態に係る化合物の割合が 12 質量%となるように石英基板上に共蒸着し、膜厚 100 nm の薄膜を形成した試料を使用することができる。

50

【 0 1 2 8 】

【 化 3 4 】



TH-2

【 0 1 2 9 】

(化合物の製造方法)

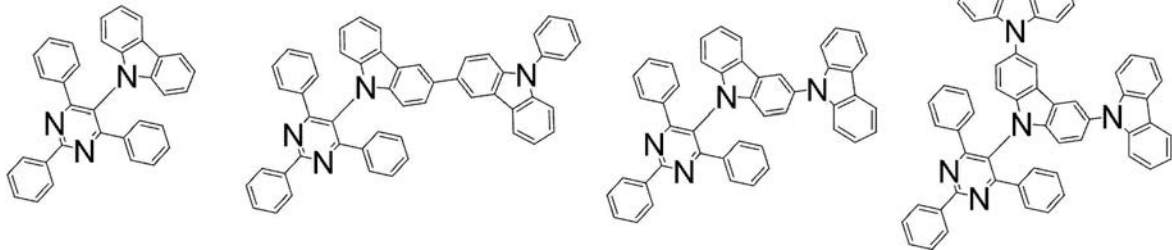
本実施形態に係る化合物は、例えば、後述する実施例に記載の方法により製造することができる。また、本実施形態に係る化合物は、後述する実施例で説明する反応に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることで、製造することができる。

【 0 1 3 0 】

本実施形態に係る化合物の具体例を以下に示す。本実施形態に係る化合物は、これらの具体例に限定されない。

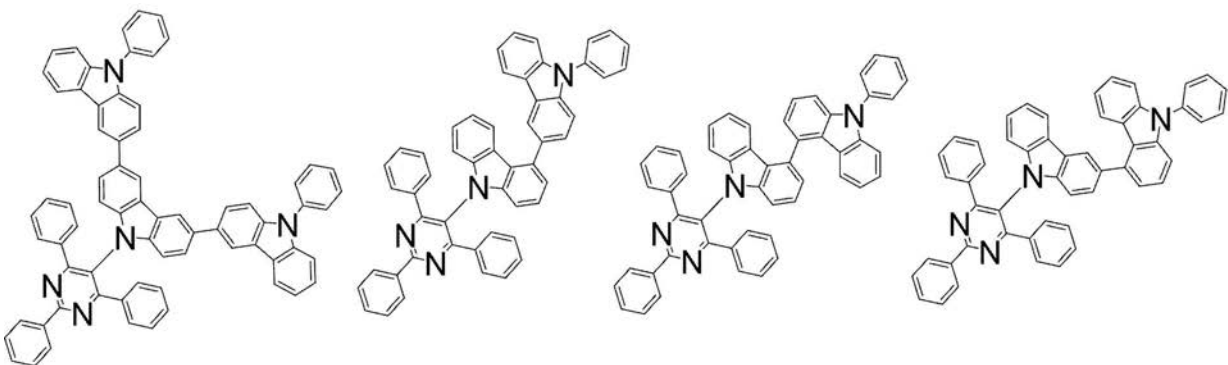
【 0 1 3 1 】

【 化 3 5 】



【 0 1 3 2 】

【 化 3 6 】



【 0 1 3 3 】

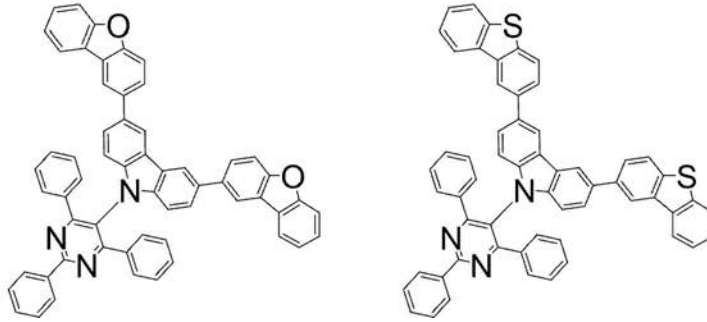
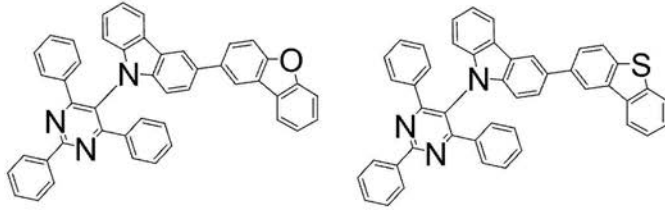
10

20

30

40

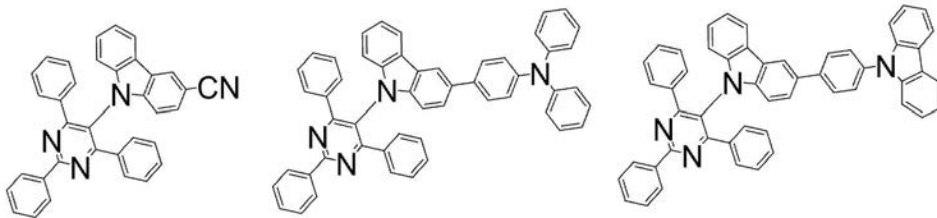
【化 3 7】



10

【 0 1 3 4】

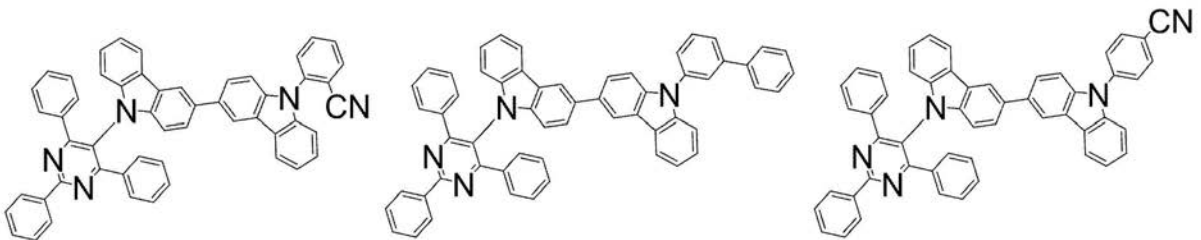
【化 3 8】



20

【 0 1 3 5】

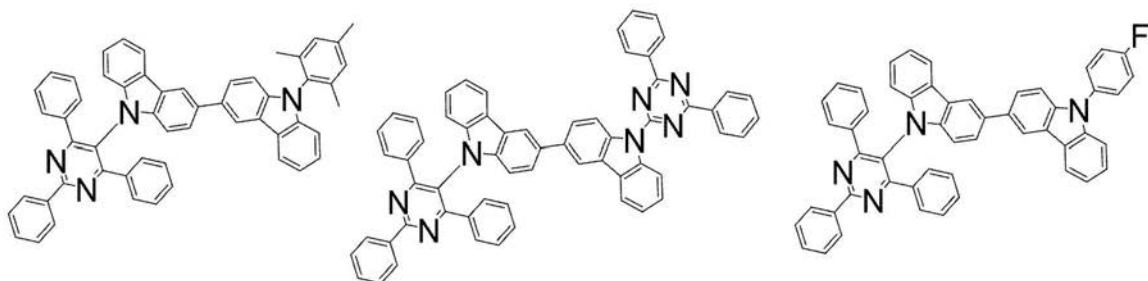
【化 3 9】



30

【 0 1 3 6】

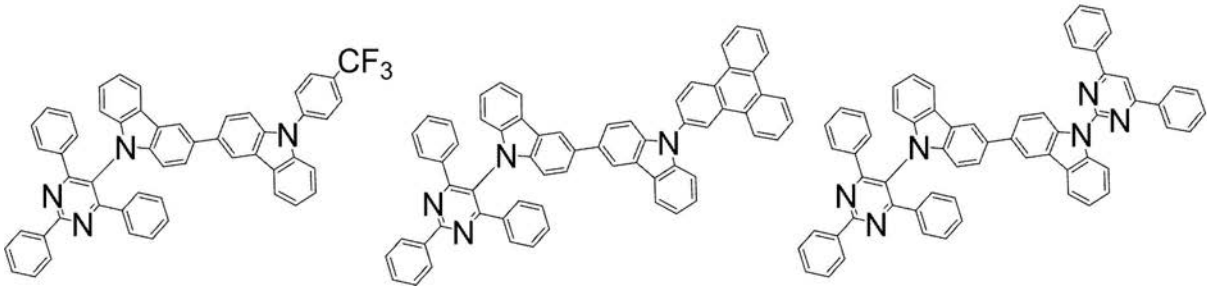
【化 4 0】



40

【 0 1 3 7】

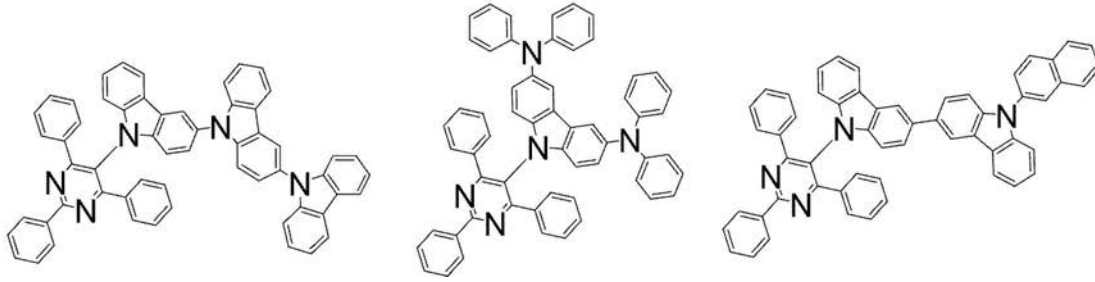
【化 4 1】



【 0 1 3 8】

10

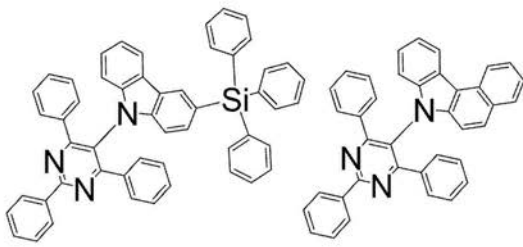
【化 4 2】



【 0 1 3 9】

20

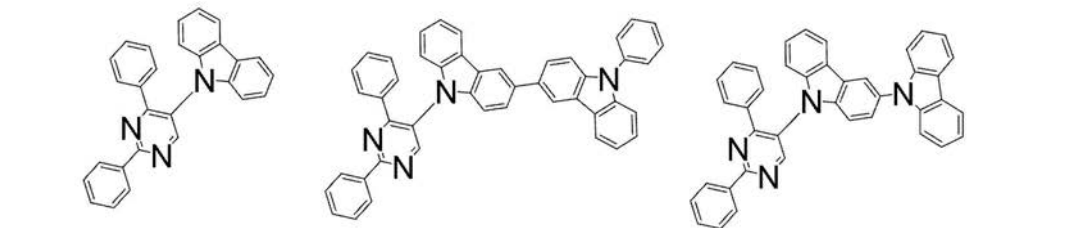
【化 4 3】



【 0 1 4 0】

30

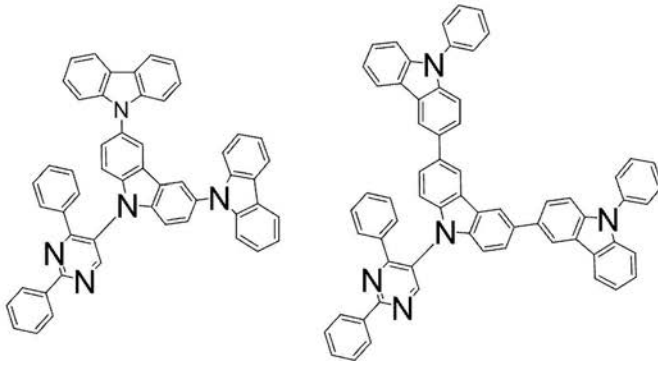
【化 4 4】



40

【 0 1 4 1】

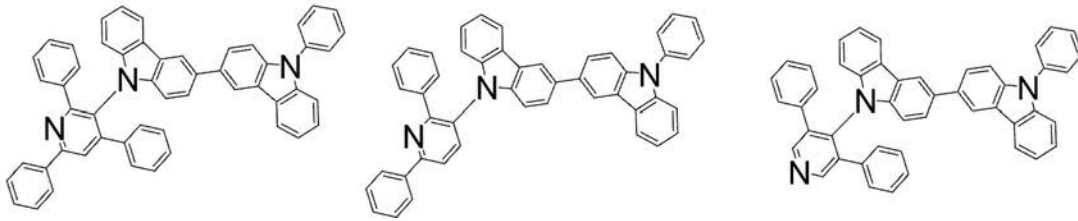
【化 4 5】



10

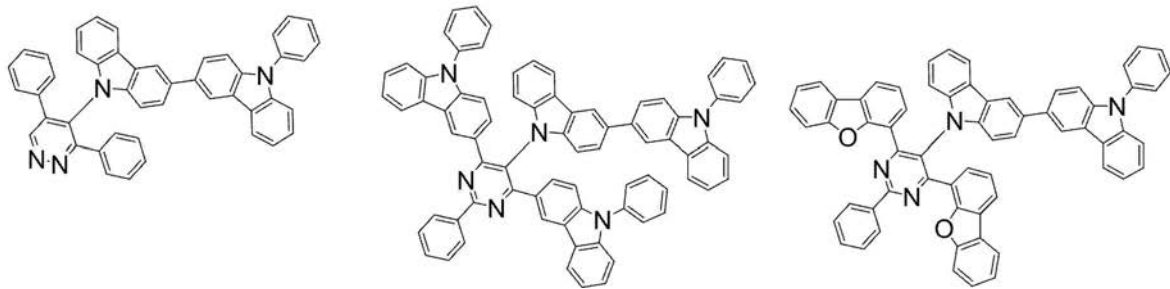
【 0 1 4 2】

【化 4 6】



【 0 1 4 3】

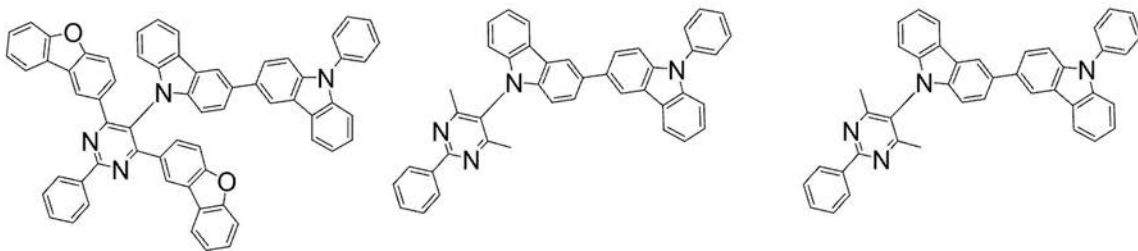
【化 4 7】



20

【 0 1 4 4】

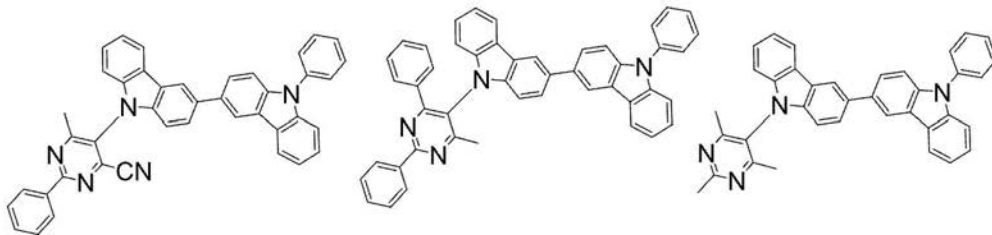
【化 4 8】



30

【 0 1 4 5】

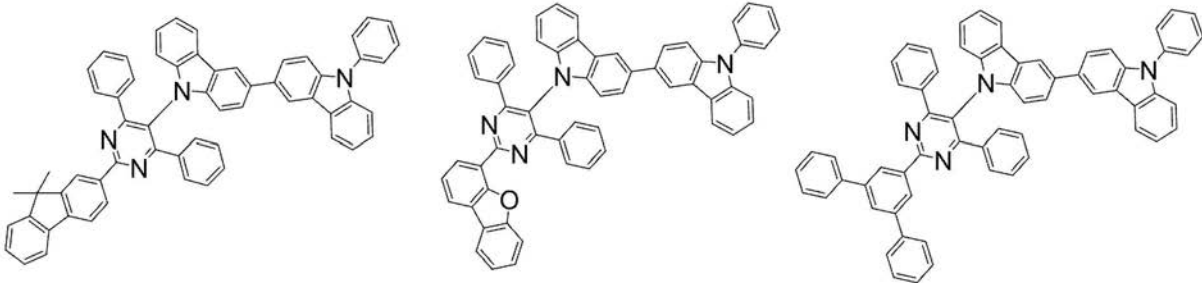
【化 4 9】



40

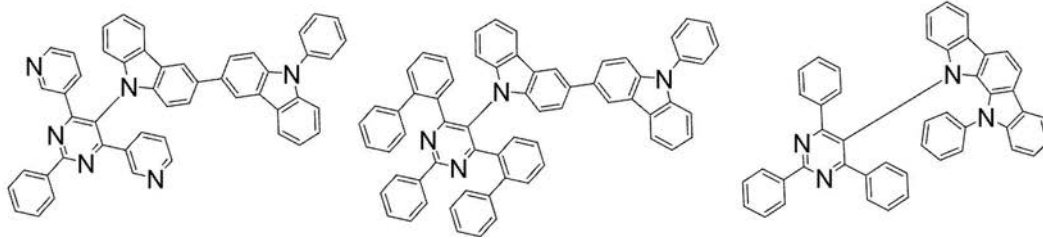
【 0 1 4 6】

【化50】



【0147】

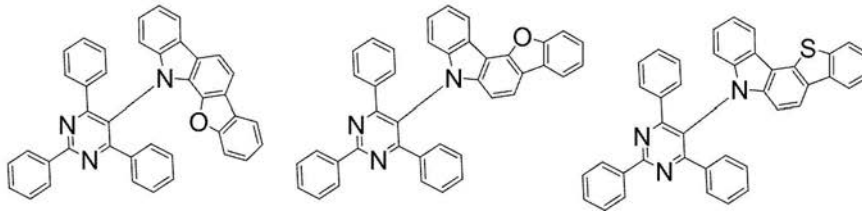
【化51】



10

【0148】

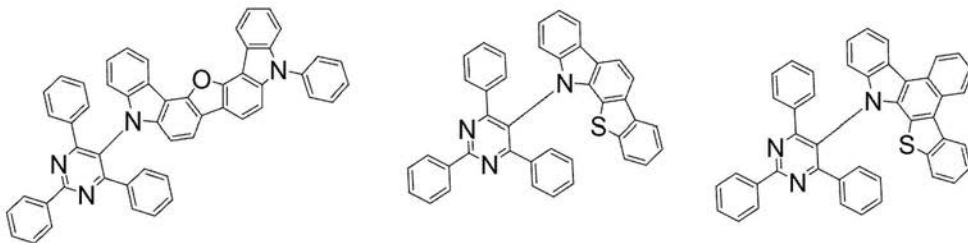
【化52】



20

【0149】

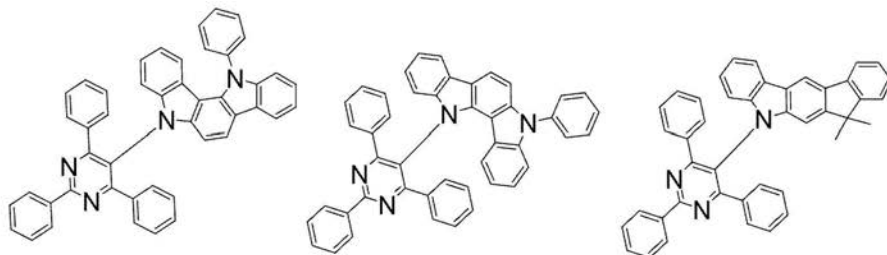
【化53】



30

【0150】

【化54】



40

【0151】

本実施形態の第一の化合物は、熱活性遅延蛍光性の化合物であることが好ましい。そのため、本実施形態の有機EL素子においては、前述の本実施形態の第一の化合物の中から熱活性遅延蛍光性の化合物を選択して用いることが好ましい。

【0152】

熱活性遅延蛍光性を向上させるためには、最低励起一重項状態のエネルギーと最低励起

50

三重項状態のエネルギーとの差 (S T) が小さいことが好ましい。

また、有機化合物において、 S T を小さくするためには、分子内の最高被占軌道 (H O M O) と最低空軌道 (L U M O) とを混在させずに局在化させることが好ましい。

本実施形態に係る第一の化合物においては、主として、 H O M O は一般式中の A で表される骨格に局在し、 L U M O は一般式中の Y₁、 Y₂ 及び Y₃ を含む含窒素ヘテロ芳香環に局在していると考えられる。

R₁ 及び R₂ の一方に置換基がある場合、一般式中の A で表される骨格及び前記含窒素ヘテロ芳香環に挟れが生じるため、 H O M O と L U M O との混在が抑制されると考えられる。

さらに R₁ 及び R₂ の両方に置換基がある場合は、混在の抑制がさらに強まり、 S T を小さくすることに大きく寄与すると考えられる。

また、本実施形態に係る第一の化合物においては、一般式中の A で表される骨格と前記含窒素ヘテロ芳香環とが直接結合しているため、 R₁ 及び R₂ はその結合の近傍に存在している。そのため、 R₁ 及び R₂ の少なくともいずれかの置換基による挟れが分子全体に寄与する効果が大きく、 H O M O と L U M O との混在の抑制に効果的であると考えられる。

【 0 1 5 3 】

< 蛍光発光性の化合物 >

本実施形態の有機 E L 素子においては、蛍光発光性の化合物を用いる。本実施形態蛍光発光性の化合物は、特に限定されない。

【 0 1 5 4 】

蛍光発光性の化合物の主ピーク波長の範囲は、 4 3 0 n m 以上 4 8 0 n m 以下であることが好ましく、 4 4 5 n m 以上 4 8 0 n m 以下であることがより好ましい。本明細書において、主ピーク波長とは、測定対象化合物が 1 0⁻⁶ m o l / L 以上 1 0⁻⁵ m o l / L 以下の濃度で溶解しているトルエン溶液について、測定した発光スペクトルにおける発光強度が最大となる発光スペクトルのピーク波長をいう。

蛍光発光性の化合物は、青色の蛍光発光を呈する化合物であることが好ましい。

蛍光発光性の化合物は、発光量子収率の高い化合物であることが好ましい。

【 0 1 5 5 】

本実施形態の蛍光発光性の化合物としては、蛍光発光性材料を用いることができる。青色の発光を呈する蛍光発光性化合物としては、例えば、ピレン誘導体、スチリルアミン誘導体、クリセン誘導体、フルオランテン誘導体、フルオレン誘導体、ジアミン誘導体、及びトリアリールアミン誘導体等が挙げられる。緑色の発光を呈する蛍光発光性化合物としては、例えば、クマリン誘導体、ピロメテンホウ素錯体、及び芳香族アミン誘導体等が挙げられる。赤色の発光を呈する蛍光発光性化合物としては、例えば、テトラセン誘導体、ペリフランテン誘導体、ピロメテンホウ素錯体、及びジアミン誘導体等が挙げられる。

【 0 1 5 6 】

本実施形態の蛍光発光性の化合物は、下記一般式 (2 0) で表される化合物であることも好ましい。

【 0 1 5 7 】

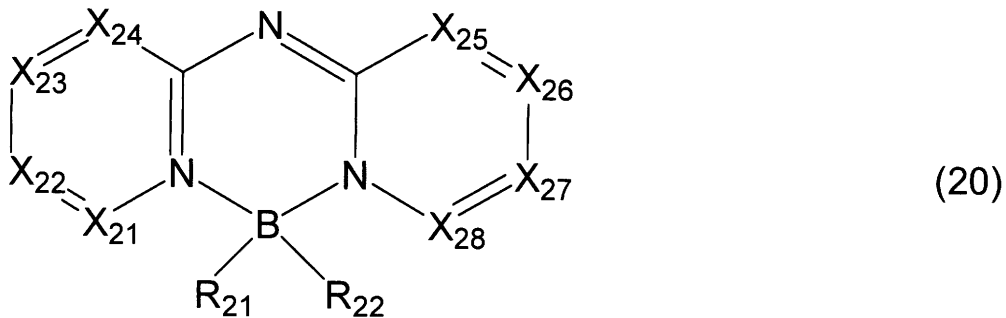
10

20

30

40

【化 5 5】



10

【 0 1 5 8 】

前記一般式(20)において、 R_{21} 及び R_{22} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、置換基としての R_{21} 及び R_{22} は、それぞれ独立に、ハロゲン原子、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換または無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、置換または無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換または無置換の炭素数1~30のフルオロアルキル基、置換または無置換の環形成炭素数3~30のシクロアルキル基、置換または無置換の炭素数7~30のアラルキル基、置換ホスホリル基、置換シリル基、シアノ基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択されるいずれかの基であり、置換基としての R_{21} 及び R_{22} は、互いに直接結合して環を形成するか、又は環を形成せず、 $X_{21} \sim X_{28}$ は、それぞれ独立に、 R_{23} と結合する炭素原子($C - R_{23}$)または窒素原子であり、 R_{23} は、水素原子または置換基であり、置換基としての R_{23} は、ハロゲン原子、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換または無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、置換または無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換または無置換の炭素数1~30のフルオロアルキル基、置換または無置換の環形成炭素数3~30のシクロアルキル基、置換または無置換の炭素数7~30のアラルキル基、置換ホスホリル基、置換シリル基、シアノ基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択されるいずれかの基であり、置換基としての複数の R_{23} は、互いに同一であるか、または異なり、置換基としての複数の R_{23} は、互いに直接結合して環を形成するか、ヘテロ原子を介して環を形成するか、又は環を形成しない。置換基としての R_{21} 及び R_{22} が結合して形成される環、及び置換基としての複数の R_{23} が結合して形成される環は、5員環、6員環、または7員環であることが好ましく、脂肪族環であっても、芳香族炭化水素環であっても、複素環であってもよく、さらに置換基を有していてもよく、複数の環は、互いに同一であるか、または異なる。

20

30

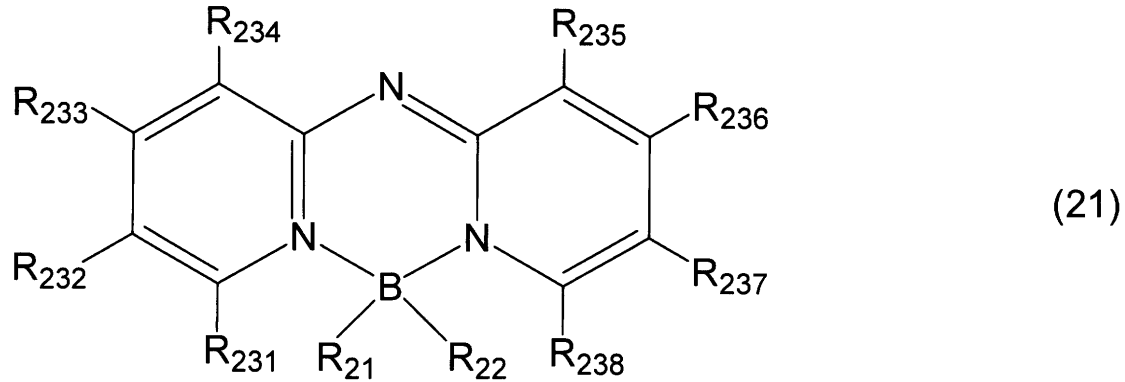
【 0 1 5 9 】

本実施形態において、 $X_{21} \sim X_{28}$ は、それぞれ独立に、 R_{23} と結合する炭素原子であることも好ましい。この場合、蛍光発光性の化合物は、下記一般式(21)で表される。下記一般式(21)において、 $R_{231} \sim R_{238}$ は、それぞれ独立に、前述の R_{23} と同義であり、 R_{21} 及び R_{22} は、前述の R_{21} 及び R_{22} と同義である。

【 0 1 6 0 】

40

【化56】



10

【0161】

本実施形態において、 $R_{231} \sim R_{234}$ のうちいずれかは、置換基であり、置換基同士が結合して環を形成しているか、または $R_{235} \sim R_{238}$ のうちいずれかは、置換基であり、置換基同士が結合して環を形成していることが好ましい。

【0162】

本実施形態において、 $R_{231} \sim R_{234}$ のうちのいずれかの置換基同士が結合して環を形成し、さらに、 $R_{235} \sim R_{238}$ のうちのいずれかの置換基同士が結合して環を形成していることも好ましい。この置換基同士が結合して形成する環は、芳香族炭化水素6員環であることが好ましい。この芳香族炭化水素6員環は、さらに置換基を有していてもよい。

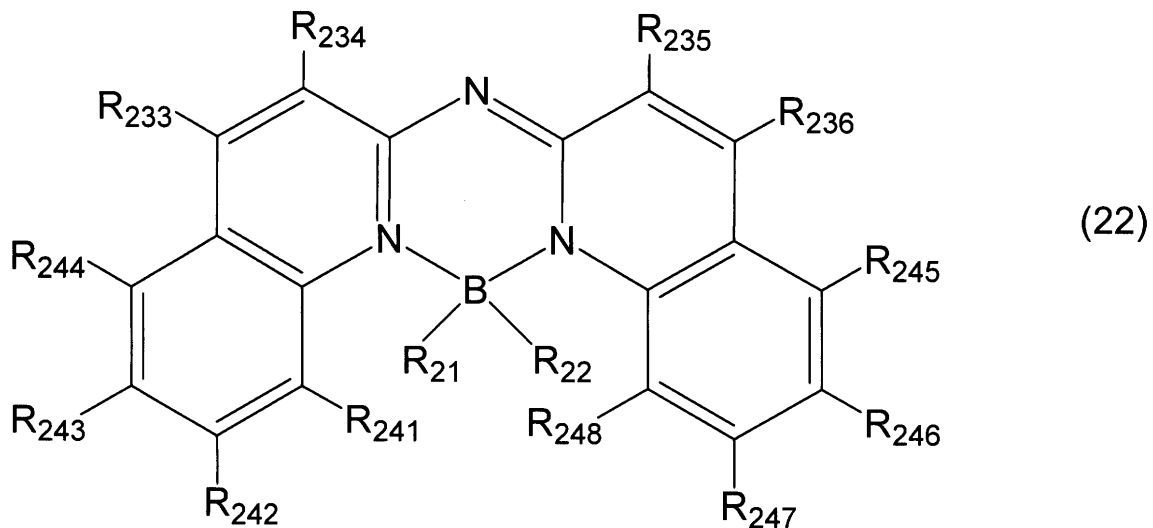
20

【0163】

本実施形態において、蛍光発光性の化合物は、下記一般式(22)で表される化合物であることも好ましい。

【0164】

【化57】



30

40

【0165】

前記一般式(22)において、 $R_{233} \sim R_{236}$ 、及び $R_{241} \sim R_{248}$ は、それぞれ独立に、前述の R_{23} と同義であり、 R_{21} 及び R_{22} は、前述の R_{21} 及び R_{22} と同義である。

前記一般式(22)において、 R_{241} 、 R_{242} 、 R_{244} 、 R_{245} 、 R_{247} 及び R_{248} は、水素原子であり、 R_{243} 及び R_{246} は、置換基であることが好ましい。置換基としての R_{243} 及び R_{246} は、それぞれ独立に、ハロゲン原子、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換または無置換の環形成原子数5~30

50

のヘテロアリール基、置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のフルオロアルキル基、置換または無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、置換または無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、置換ホスホリル基、置換シリル基、シアノ基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択されるいずれかの基であり、置換基としての R_{243} 及び R_{246} は、それぞれ独立に、ハロゲン原子、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、及び置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基からなる群から選択されるいずれかの基であることが好ましく、置換また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。

【0166】

本実施形態において、 R_{21} 及び R_{22} は、それぞれ独立に、ハロゲン原子、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、及び置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキ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、ハロゲン原子であることがより好ましく、フッ素原子であることがさらに好ましい。

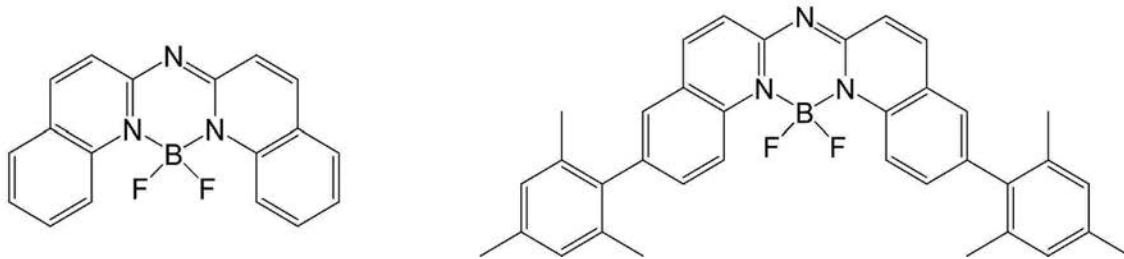
10

【0167】

本実施形態に係る蛍光発光性の化合物の具体的な例を以下に示す。なお、本発明に係る蛍光発光性の化合物は、これらの例に限定されない。

【0168】

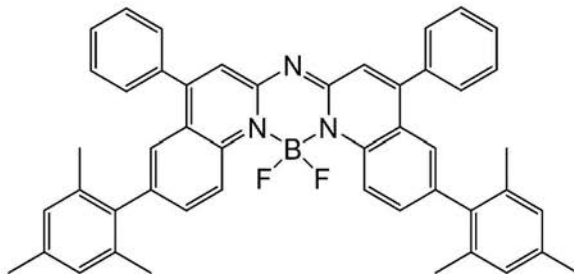
【化58】



20

【0169】

【化59】



30

【0170】

< 発光層における第一の化合物、及び蛍光発光性の化合物の関係 >

本実施形態の有機 EL 素子 1 において、第一の化合物の一重項エネルギー $S_1(M1)$ と、蛍光発光性の化合物の一重項エネルギー $S_1(FL)$ とが、下記数式 (数 1) の関係を満たす。

40

$$S_1(M1) > S_1(FL) \quad \dots (\text{数 } 1)$$

【0171】

第一の化合物の T_{77K} におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M1)$ は、蛍光発光性の化合物の T_{77K} におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(FL)$ よりも大きいことが好ましい。すなわち、下記数式 (数 4) の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{77K}(M1) > T_{77K}(FL) \quad \dots (\text{数 } 4)$$

【0172】

本実施形態の有機 EL 素子 1 を発光させたときに、発光層 5 において、主に蛍光発光性の化合物が発光していることが好ましい。

【0173】

50

・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、STが小さい化合物であることが好ましい。ST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、通常の三重項エネルギー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 (F 1) 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。

$$\text{換算式 (F 1) : } T_{77K} [\text{eV}] = 1239.85 / e_{d g e} [\text{nm}]$$

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。

【 0 1 7 5 】

・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 : 発光強度、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 $e_{d g e} [\text{nm}]$ を次に示す換算式 (F 2) に代入して一重項エネルギーを算出する。

$$\text{換算式 (F 2) : } S_1 [\text{eV}] = 1239.85 / e_{d g e} [\text{nm}]$$

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 : U 3 3 1

10

20

30

40

50

0) が挙げられるが、これに限定されない。

【0176】

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。

【0177】

・発光層における化合物の含有率

発光層5に含まれている第一の化合物、及び蛍光発光性の化合物の含有率は、例えば、以下の範囲であることが好ましい。

第一の化合物の含有率は、90質量%以上99.9質量%以下であることが好ましく、95質量%以上99.9質量%以下であることがより好ましく、99質量%以上99.9質量%以下であることがさらに好ましい。

蛍光発光性の化合物の含有率は、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。

なお、本実施形態は、発光層5に、第一の化合物、及び蛍光発光性の化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

【0178】

・発光層の膜厚

発光層5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、さらに好ましくは10nm以上50nm以下である。発光層5の膜厚が5nm以上であれば発光層5を形成し易く、色度を調整し易い。また、発光層5の膜厚が50nm以下であれば、駆動電圧の上昇を抑制できる。

【0179】

・TADFメカニズム

図4は、発光層における第一の化合物、及び蛍光発光性の化合物のエネルギー準位の関係の一例を示す図である。図4において、S0は、基底状態を表す。S1(M1)は、第一の化合物の最低励起一重項状態を表す。T1(M1)は、第一の化合物の最低励起三重項状態を表す。S1(FL)は、蛍光発光性の化合物の最低励起一重項状態を表す。T1(FL)は、蛍光発光性の化合物の最低励起三重項状態を表す。

図4中のS1(M1)からS1(FL)へ向かう破線の矢印は、第一の化合物の最低励起一重項状態から蛍光発光性の化合物へのフェルスター型エネルギー移動を表す。

図4に示すように、第一の化合物としてST(M1)の小さな化合物を用いると、最低励起三重項状態T1(M1)は、熱エネルギーにより、最低励起一重項状態S1(M1)に逆項間交差が可能である。そして、第一の化合物の最低励起一重項状態S1(M1)から蛍光発光性の化合物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S1(FL)が生成する。この結果、蛍光発光性の化合物の最低励起一重項状態S1(FL)からの蛍光発光を観測することができる。このTADF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。ST(M1)は、第一の化合物のSTを表記したものであり、 $S_1(M1) = T_{77K}(M1)$ によって算出できる。

【0180】

(基板)

基板2は、有機EL素子1の支持体として用いられる。基板2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

10

20

30

40

50

、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。

【0181】

(陽極)

基板2上に形成される陽極3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、及びこれらの混合物等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)、珪素また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、及び酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、並びに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)、及びこれら金属材料の窒化物(例えば、窒化チタン)等が挙げられる。

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、及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、及びスピンコート法等により作製してもよい。

陽極3上に形成される有機層のうち、陽極3に接して形成される正孔注入層6は、陽極3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。そのため、その他電極材料として使用可能な材料(例えば、金属、合金、電気伝導性化合物、及びこれらの混合物、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)を陽極3として用いることもできる。

仕事関数の小さい材料である、元素周期表の第1族に属する元素、元素周期表の第2族に属する元素、希土類金属、及びこれらを含む合金等を陽極3として用いることもできる。元素周期表の第1族に属する元素としては、アルカリ金属が挙げられる。元素周期表の第2族に属する元素としては、アルカリ土類金属が挙げられる。アルカリ金属としては、例えば、リチウム(Li)、及びセシウム(Cs)等が挙げられる。アルカリ土類金属としては、例えば、マグネシウム(Mg)、カルシウム(Ca)、ストロンチウム(Sr)等が挙げられる。希土類金属としては、例えば、ユーロピウム(Eu)、及びイッテルビウム(Yb)等が挙げられる。これらの金属を含む合金としては、例えば、MgAg、及びAlLi等が挙げられる。

なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、及びこれらを含む合金を用いて陽極3を形成する場合には、真空蒸着法またはスパッタリング法を用いることができる。さらに、銀ペースト等を用いる場合には、塗布法、及びインクジェット法等を用いることができる。

【0182】

(正孔注入層)

正孔注入層6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、例えば、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、及びマンガン酸化物等を用いることができる。

また、正孔注入性の高い物質としては、例えば、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

10

20

30

40

50

フェニル) - N - フェニルアミノ] ビフェニル (略称: DPAB)、4, 4' - ビス (N - { 4 - [N' - (3 - メチルフェニル) - N' - フェニルアミノ] フェニル } - N - フェニルアミノ) ビフェニル (略称: DNTPD)、1, 3, 5 - トリス [N - (4 - ジフェニルアミノフェニル) - N - フェニルアミノ] ベンゼン (略称: DPA3B)、3 - [N - (9 - フェニルカルバゾール - 3 - イル) - N - フェニルアミノ] - 9 - フェニルカルバゾール (略称: PCzPCA1)、3, 6 - ビス [N - (9 - フェニルカルバゾール - 3 - イル) - N - フェニルアミノ] - 9 - フェニルカルバゾール (略称: PCzPCA2)、及び 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、並びにジピラジノ [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) 等も挙げられる。

また、正孔注入性の高い物質としては、高分子化合物を用いることもできる。高分子化合物としては、例えば、オリゴマー、 dendrimer、及びポリマー等が挙げられる。具体的には、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)、及びポリ [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) 等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エン) / ポリ (スチレンスルホン酸) (PEDOT / PSS)、及びポリアニリン / 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。

【0183】

(正孔輸送層)

正孔輸送層7は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層7には、例えば、芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、及び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)、N, N' - ビス (3 - メチルフェニル) - N, N' - ジフェニル - [1, 1' - ビフェニル] - 4, 4' - ジアミン (略称: TPD)、4 - フェニル - 4' - (9 - フェニルフルオレン - 9 - イル) トリフェニルアミン (略称: BAFLP)、4, 4' - ビス [N - (9, 9 - ジメチルフルオレン - 2 - イル) - N - フェニルアミノ] ビフェニル (略称: DF LDP Bi)、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)、及び 4, 4' - ビス [N - (スピロ - 9, 9' - ビフルオレン - 2 - イル) - N - フェニルアミノ] ビフェニル (略称: BSPB) 等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。

正孔輸送層7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)、及び 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、並びに t - BuDNA、DNA、及び DPAnth のようなアントラセン誘導体等を用いてもよい。ポリ (N - ビニルカルバゾール) (略称: PVK)、及びポリ (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。

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

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含む層を、発光層5に近い側に配置することが好ましい。

【0184】

(電子輸送層)

10

20

30

40

50

電子輸送層 8 は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層 8 には、(1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、及び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、及びフェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、並びに(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、及びZnBTZ等の金属錯体等を用いることができる。また、金属錯体以外にも、2-(4-ピフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(略称: PBD)、1,3-ビス[5-(p-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール-2-イル]ベンゼン(略称: OXD-7)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-フェニル-5-(4-ピフェニル)-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-ピフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称: p-ETT AZ)、バソフェナントロリン(略称: BPhen)、バソキュプロイン(略称: BCP)、及び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)等の複素芳香族化合物も用いることができる。本実施形態においては、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 8 として用いてもよい。また、電子輸送層 8 は、単層だけでなく、上記物質からなる層が二層以上積層した層としてもよい。

また、電子輸送層 8 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)、及びポリ[(9,9-ジオクチルフルオレン-2,7-ジイル)-co-(2,2'-ビピリジン-6,6'-ジイル)](略称: PF-BPy)等を用いることができる。

【0185】

(電子注入層)

電子注入層 9 は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層 9 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)、及びリチウム酸化物(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物質、具体的にはAlq中にマグネシウム(Mg)を含有させた物質等を用いてもよい。なお、この場合には、陰極 4 からの電子注入をより効率よく行うことができる。

あるいは、電子注入層 9 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、及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 8 を構成する物質(金属錯体、及び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、アルカリ土類金属、または希土類金属が好ましく、例えば、リチウム、セシウム、マグネシウム、カルシウム、エルビウム、及び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、またはアルカリ土類金属酸化物を電子供与体として用いることも好ましく、例えば、リチウム酸化物、カルシウム酸化物、及び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、テトラチアフルパレン(略称: TTF)等の有機化合物を用いることもできる。

【0186】

(陰極)

10

20

30

40

50

陰極 4 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、及びこれらの混合物等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 族に属する元素、元素周期表の第 2 族に属する元素、希土類金属、及びこれらを含む合金等が挙げられる。元素周期表の第 1 族に属する元素としては、アルカリ金属が挙げられる。元素周期表の第 2 族に属する元素としては、アルカリ土類金属が挙げられる。アルカリ金属としては、例えば、リチウム（Li）、及びセシウム（Cs）等が挙げられる。アルカリ土類金属としては、例えば、マグネシウム（Mg）、カルシウム（Ca）、及びストロンチウム（Sr）等が挙げられる。希土類金属としては、例えば、ユーロピウム（Eu）、及びイッテルビウム（Yb）等が挙げられる。これらの金属を含む合金としては、例えば、MgAg、及び AlLi 等が挙げられる。

10

なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、及びこれらを含む合金を用いて陰極 4 を形成する場合には、真空蒸着法またはスパッタリング法を用いることができる。また、銀ペースト等を用いる場合には、塗布法、及びインクジェット法等を用いることができる。

なお、電子注入層 9 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、及び珪素また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 4 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、インクジェット法、及びスピンコート法等を用いて成膜することができる。

【0187】

（層形成方法）

本実施形態の有機 EL 素子 1 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ず、乾式成膜法、及び湿式成膜法等の公知の方法を採用できる。乾式成膜法としては、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等が挙げられる。湿式成膜法としては、スピンコーティング法、ディッピング法、フローコーティング法、インクジェット法等が挙げられる。

20

【0188】

（膜厚）

本実施形態の有機 EL 素子 1 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。一般に、ピンホール等の欠陥を生じ難くするため、かつ高い印加電圧が必要となることによる効率の悪化を防止するため、通常、膜厚は、数 nm から 1 μm の範囲が好ましい。

30

【0189】

本明細書において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物（例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物）の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記載される「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、フランニル基は環形成炭素数 4 である。また、ベンゼン環、及び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。

40

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、及び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、及び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、及び置換基を構成する原子については、環形成原子数の数に

50

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。

次に前記一般式に記載の各置換基について説明する。

【0190】

本明細書における環形成炭素数6～30のアリール基（芳香族炭化水素基と称する場合がある。）としては、例えば、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アントリル基、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、及びペリレニル基等が挙げられる。

本明細書におけるアリール基としては、特筆する場合を除き、環形成炭素数が6～20であることが好ましく、6～14であることがより好ましく、6～12であることがさらに好ましい。上記アリール基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、フルオレニル基がさらにより好ましい。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または無置換の炭素数1～30のアルキル基、及び置換または無置換の環形成炭素数6～18のアリール基からなる群から選択される少なくとも一種の基が置換されていることが好ましい。

【0191】

本明細書における環形成原子数5～30のヘテロアリール基（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、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ことが好ましく、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ことがより好ましい。

本明細書における環形成原子数5～30の複素環基としては、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、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、モルホリル基、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等が挙げられる。

本明細書における複素環基の環形成原子数は、5～20であることが好ましく、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または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、及び置換または無置換の環形成原子数5～30の複素環基からなる群から選択される少なくとも一種の基が置換していることが好ましい。

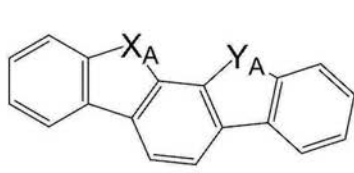
【0192】

また、本明細書において、複素環基は、例えば、下記一般式(XY-1)～(XY-1

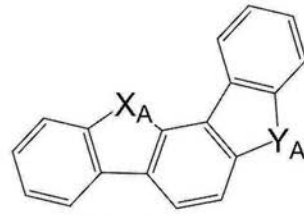
8) で表される部分構造から誘導される基であってもよい。

【0193】

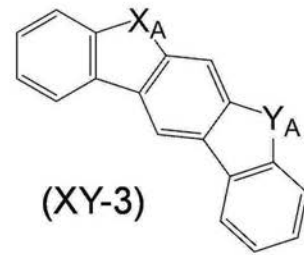
【化60】



(XY-1)

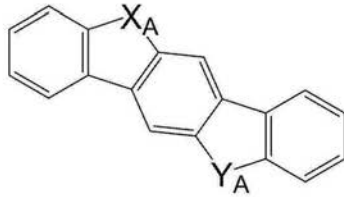


(XY-2)

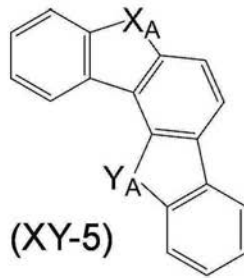


(XY-3)

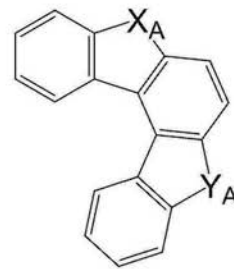
10



(XY-4)



(XY-5)

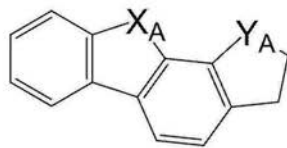


(XY-6)

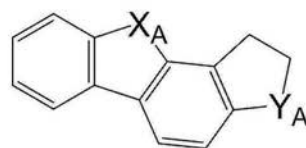
20

【0194】

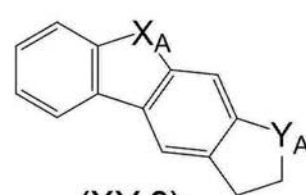
【化61】



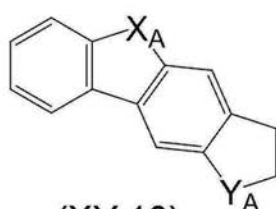
(XY-7)



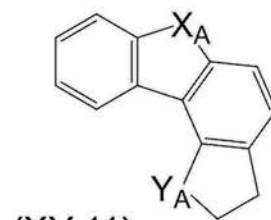
(XY-8)



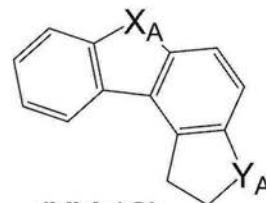
(XY-9)



(XY-10)



(XY-11)

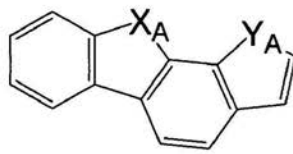


(XY-12)

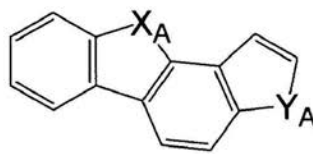
30

【0195】

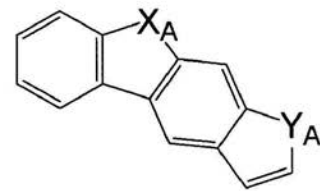
【化62】



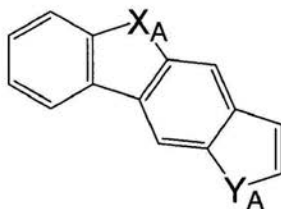
(XY-13)



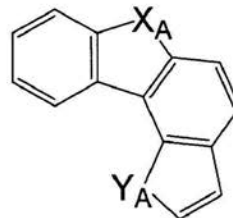
(XY-14)



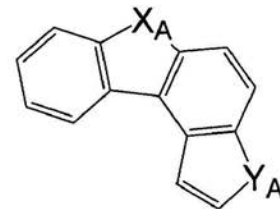
(XY-15)



(XY-16)



(XY-17)



(XY-18)

【0196】

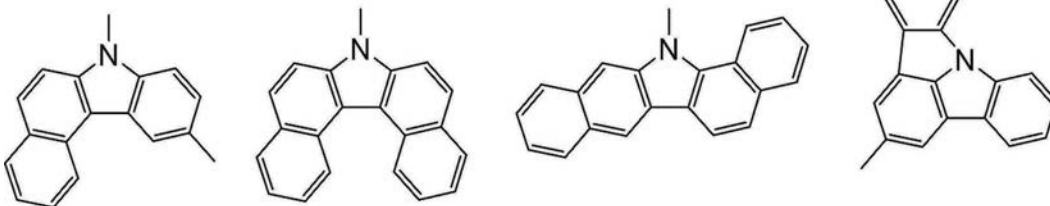
前記一般式(XY-1)~(XY-18)において、X_A、及びY_Aは、それぞれ独立に、ヘテロ原子であり、酸素原子、硫黄原子、セレン原子、ケイ素原子、またはゲルマニウム原子であることが好ましい。前記一般式(XY-1)~(XY-18)で表される部分構造は、任意の位置で結合手を有して複素環基となり、この複素環基は、置換基を有していてもよい。

【0197】

また、本明細書において、置換または無置換のカルbazolリル基としては、例えば、下記式で表されるような、カルbazol環に対してさらに環が縮合した基も含み得る。このような基も置換基を有していてもよい。また、結合手の位置も適宜変更され得る。

【0198】

【化63】



【0199】

本明細書における炭素数1~30のアルキル基としては、直鎖、分岐鎖または環状のいずれであってもよい。また、ハロゲン化アルキル基であってもよい。

直鎖または分岐鎖のアルキル基としては、例えば、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、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-メチルペンチル基等が挙げられる。

本明細書における直鎖または分岐鎖のアルキル基の炭素数は、1~10であることが好ましく、1~6であることがさらに好ましい。上記直鎖または分岐鎖のアルキル基の中で

10

20

30

40

50

もメチル基、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。

【0200】

本明細書における環状のアルキル基としては、例えば、環形成炭素数3~30のシクロアルキル基が挙げられる。

本明細書における環形成炭素数3~30のシクロアルキル基としては、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等が挙げられる。シクロアルキル基の環形成炭素数は、3~10であることが好ましく、5~8であることがさらにより好ましい。上記シクロアルキル基の中でも、シクロペンチル基またはシクロヘキシル基がさらにより好ましい。

10

【0201】

本明細書におけるアルキル基がハロゲン原子で置換されたハロゲン化アルキル基としては、例えば、上記炭素数1~30のアルキル基が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基が挙げられる。

本明細書における炭素数1~30のハロゲン化アルキル基としては、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、ペンタフルオロエチル基等が挙げられる。

【0202】

本明細書における置換シリル基としては、例えば、炭素数3~30のアルキルシリル基、及び環形成炭素数6~30のアリールシリル基が挙げられる。

本明細書における炭素数3~30のアルキルシリル基としては、上記炭素数1~30のアルキル基で例示したアルキル基を有するトリアルキルシリル基が挙げられ、具体的には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等が挙げられる。トリアルキルシリル基における3つのアルキル基は、互いに同一でも異なってもよい。

20

30

【0203】

本明細書における環形成炭素数6~30のアリールシリル基としては、例えば、ジアルキルアリールシリル基、アルキルジアリールシリル基、及びトリアリールシリル基が挙げられる。

ジアルキルアリールシリル基は、例えば、上記炭素数1~30のアルキル基で例示したアルキル基を2つ有し、上記環形成炭素数6~30のアリール基を1つ有するジアルキルアリールシリル基が挙げられる。ジアルキルアリールシリル基の炭素数は、8~30であることが好ましい。

アルキルジアリールシリル基は、例えば、上記炭素数1~30のアルキル基で例示したアルキル基を1つ有し、上記環形成炭素数6~30のアリール基を2つ有するアルキルジアリールシリル基が挙げられる。アルキルジアリールシリル基の炭素数は、13~30であることが好ましい。

40

トリアリールシリル基は、例えば、上記環形成炭素数6~30のアリール基を3つ有するトリアリールシリル基が挙げられる。トリアリールシリル基の炭素数は、18~30であることが好ましい。

【0204】

本明細書において、アラルキル基(アリールアルキル基と称する場合がある)におけるアリール基は、芳香族炭化水素基、または複素環基である。

本明細書における炭素数7~30のアラルキル基としては、環形成炭素数6~30のアリール基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 の例とし

50

て、上記炭素数 1 ~ 30 のアルキル基に対応するアルキレン基等が挙げられる。この Z₄ の例として、例えば、上記環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基の例が挙げられる。このアラルキル基は、アリール部分が炭素数 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。このアラルキル基としては、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等が挙げられる。

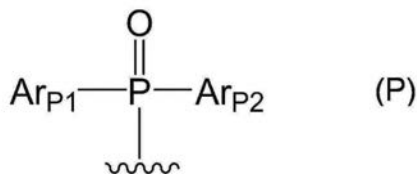
10

【0205】

本明細書における置換ホスホリル基は、下記一般式 (P) で表される。

【0206】

【化64】



20

【0207】

前記一般式 (P) において、Ar_{P1}、及び Ar_{P2} は、それぞれ独立に、置換基であり、炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、及び環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることが好ましく、炭素数 1 ~ 10 のアルキル基、及び環形成炭素数 6 ~ 20 のアリール基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることがより好ましく、炭素数 1 ~ 6 のアルキル基、及び環形成炭素数 6 ~ 14 のアリール基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることがさらに好ましい。

【0208】

本明細書における炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基は、-OZ₁ と表される。この Z₁ の例として、上記炭素数 1 ~ 30 のアルキル基が挙げられる。アルコキシ基は、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等が挙げられる。アルコキシ基の炭素数は、1 ~ 20 であることが好ましい。

30

アルコキシ基がハロゲン原子で置換されたハロゲン化アルコキシ基としては、例えば、上記炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基が 1 以上のフッ素原子で置換された基が挙げられる。

【0209】

本明細書において、アリールオキシ基 (アリールアルコキシ基と称する場合がある) におけるアリール基は、ヘテロアリール基も含む。

本明細書における環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールアルコキシ基は、-OZ₂ と表される。この Z₂ の例として、例えば、上記環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基等が挙げられる。アリールアルコキシ基の環形成炭素数は、6 ~ 20 であることが好ましい。このアリールアルコキシ基としては、例えば、フェノキシ基が挙げられる。

40

【0210】

本明細書における置換アミノ基は、-NHR_v、または -N(R_v)₂ と表される。この R_v の例として、例えば、上記炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、及び上記環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基等が挙げられる。

【0211】

本明細書における炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基としては、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-プロペニル基等が挙げられる。

50

【0212】

本明細書における置換ホスファニル基としては、例えば、フェニルホスファニル基等が挙げられる。

【0213】

本明細書における環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基は、 $-COY'$ と表される。この Y' の例として、上記アリール基が挙げられる。

本明細書における環形成炭素数6～30のアリールカルボニル基としては、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等が挙げられる。

【0214】

本明細書における炭素数1～30のアルキルチオ基、及び環形成炭素数6～30のアリールチオ基は、 $-SR_v$ と表される。この R_v の例として、上記炭素数1～30のアルキル基、及び上記環形成炭素数6～30のアリール基が挙げられる。アルキルチオ基の炭素数は、1～20であることが好ましく、アリールチオ基の環形成炭素数は、6～20であることが好ましい。

10

【0215】

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。

【0216】

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。

20

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。

【0217】

本明細書において、「置換または無置換の」という場合における置換基としては、環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～30のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、環形成炭素数3～30のシクロアルキル基、炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、炭素数3～30のアルキルシリル基、環形成炭素数6～30のアリールシリル基、炭素数1～30のアルコキシ基、炭素数6～30のアリールオキシ基、置換アミノ基、炭素数1～30のアルキルチオ基、環形成炭素数6～30のアリールチオ基、炭素数7～30のアラルキル基、炭素数2～30のアルケニル基（直鎖または分岐鎖のアルケニル基）、ハロゲン原子の他に、炭素数2～30のアルキニル基、シアノ基、ヒドロキシル基、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が挙げられる。

30

【0218】

本明細書において、「置換または無置換の」という場合における置換基としては、環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～30のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ基からなる群から選択される少なくとも一種の基が好ましく、さらには、各置換基の説明において好ましいとした具体的な置換基が好ましい。

40

【0219】

本明細書において、「置換または無置換の」という場合における置換基は、環形成炭素数6～30のアリール基、環形成原子数5～30のヘテロアリール基、炭素数1～30のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、環形成炭素数3～30のシクロアルキル基、炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、炭素数3～30のアルキルシリル基、環形成炭素数6～30のアリールシリル基、炭素数1～30のアルコキシ基、環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、置換アミノ基、炭素数1～30のアルキルチオ基、環形成炭素数6～30のアリールチオ基、炭素数7～30のアラルキル基、炭素数2～30のアル

50

ケニル基、炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシル基、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によってさらに置換されてもよい。また、これらの置換基は複数が互いに結合して環を形成してもよい。

【0220】

本明細書において、「置換または無置換の」という場合における置換基に、さらに置換する置換基としては、環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、炭素数 1 ~ 30 のアルキル基（直鎖または分岐鎖のアルキル基）、ハロゲン原子、及びシアノ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ことが好ましく、各置換基の説明において好ましいとした具体的な置換基から選択される少なくとも一種の基であることがさらに好ましい。

10

【0221】

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

なお、本明細書において、「置換または無置換の炭素数 $XX \sim YY$ 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の炭素数は含めない。

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

20

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、「置換または無置換の」という場合についても、前記と同様である。

【0222】

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。

【0223】

本明細書において、連結基における芳香族炭化水素基、及び複素環基等としては、上述した一価の基から、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。

【0224】

本実施形態に係る有機 EL 素子によれば、発光効率を向上させることができる。

30

【0225】

（電子機器）

本実施形態の電子機器は、本実施形態の有機 EL 素子を搭載している。電子機器としては、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（有機 EL 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。

【0226】

〔第二実施形態〕

第二実施形態に係る有機 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、及び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、及び化合物については、第一実施形態で説明した材料、及び化合物と同様の材料、及び化合物を用いることができる。

40

【0227】

第二実施形態に係る有機 EL 素子は、発光層が、第二の化合物をさらに含んでいる点で、第一実施形態に係る有機 EL 素子と異なる。本実施形態に係る有機 EL 素子の発光層は、第一の化合物と、第二の化合物と、蛍光発光性の化合物を含む。

その他の点については第一実施形態と同様である。

【0228】

50

本実施形態に係る有機EL素子の発光層は、金属錯体を含んでもよいが、重金属錯体を含まないことが好ましい。

本実施形態に係る有機EL素子の発光層は、燐光発光性の金属錯体を含まないことが好ましい。

【0229】

<第一の化合物>

本実施形態において、第一の化合物は、第一実施形態で説明した化合物を用いることができる。

【0230】

本実施形態の第一の化合物は、前記一般式(10B)で表される化合物であることが好ましく、前記一般式(12a)で表される化合物であることがより好ましく、前記一般式(13b)、前記一般式(14a)、又は前記一般式(16a)で表される化合物であることがさらに好ましく、前記一般式(13e)、前記一般式(13f)、前記一般式(14c)、又は前記一般式(16c)であることがさらにより好ましく、前記一般式(13e)表される化合物であることが特に好ましい。

10

【0231】

<第二の化合物>

第二の化合物の一重項エネルギー $S_1(M2)$ と、第一の化合物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。

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

20

【0232】

第二の化合物は、熱活性遅延蛍光性の化合物でもよいし、熱活性遅延蛍光性を示さない化合物でもよい。

【0233】

第二の化合物は、ホスト材料(マトリックス材料と称する場合もある。)であることも好ましい。第一の化合物、及び第二の化合物がホスト材料である場合、例えば、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。

【0234】

第二の化合物としては、特に限定されないが、アミン化合物以外の化合物であることが好ましい。また、例えば、第二の化合物としては、カルバゾール誘導体、ジベンゾフラン誘導体、及びジベンゾチオフェン誘導体からなる群から選択される誘導体を用いることができるが、これら誘導体に限定されない。

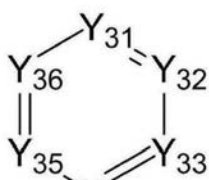
30

【0235】

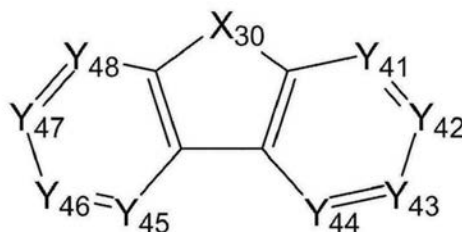
第二の化合物は、一つの分子中に下記一般式(31)で表される部分構造、及び下記一般式(32)で表される部分構造のうち少なくともいずれかを含む化合物であることも好ましい。

【0236】

【化65】



(31)



(32)

40

【0237】

前記一般式(31)において、

$Y_{31} \sim Y_{36}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または第二の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

50

ただし、 $Y_{31} \sim Y_{36}$ のうち少なくともいずれかは、第二の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

前記一般式(32)において、

$Y_{41} \sim Y_{48}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または第二の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

ただし、 $Y_{41} \sim Y_{48}$ のうち少なくともいずれかは、第二の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

X_{30} は、第二の化合物の分子中における他の原子と結合する窒素原子、または酸素原子、もしくは硫黄原子である。

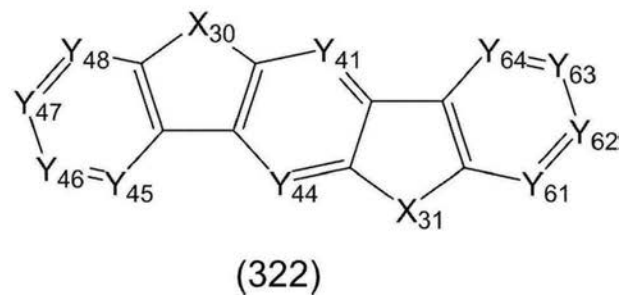
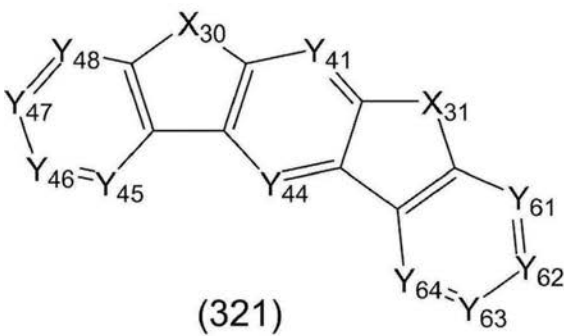
【0238】

前記一般式(32)において、 $Y_{41} \sim Y_{48}$ のうち少なくとも2つが第二の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、当該炭素原子を含む環構造が構築されていることも好ましい。

例えば、前記一般式(32)で表される部分構造が、下記一般式(321)、一般式(322)、一般式(323)、一般式(324)、一般式(325)、及び一般式(326)で表される部分構造からなる群から選択されるいずれかの部分構造であることが好ましい。

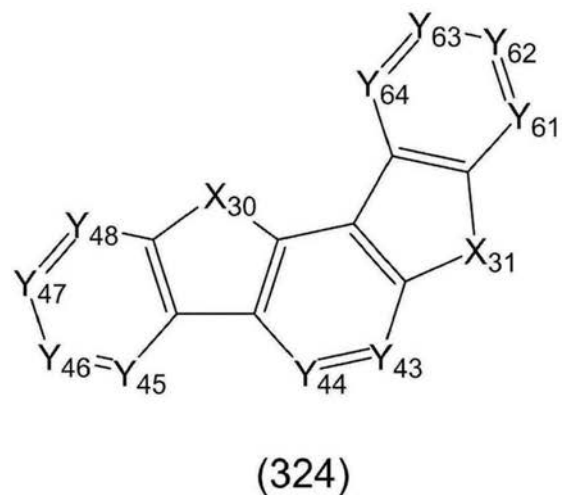
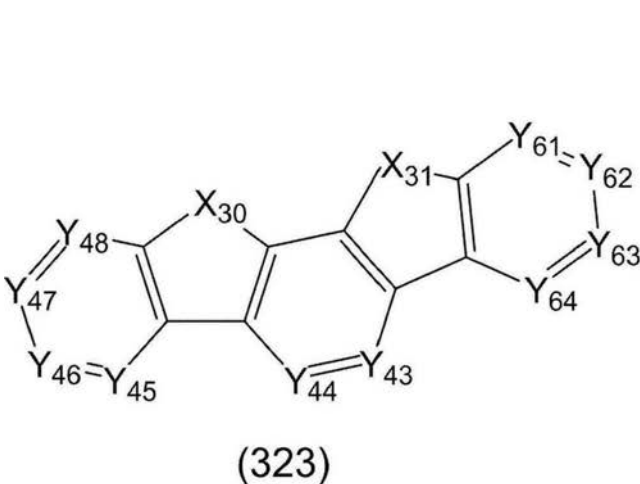
【0239】

【化66】



【0240】

【化67】



【0241】

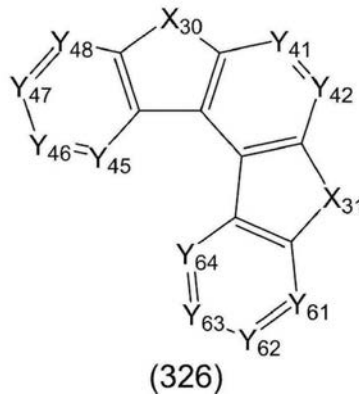
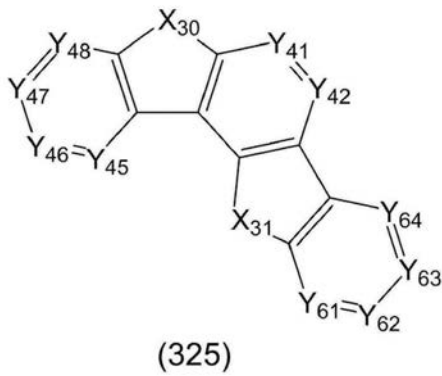
10

20

30

40

【化 6 8】



10

【 0 2 4 2】

前記一般式(321)~(326)において、

X_{30} は、それぞれ独立に、第二の化合物の分子中における他の原子と結合する窒素原子、または酸素原子、もしくは硫黄原子であり、

$Y_{41} \sim Y_{48}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または第二の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

X_{31} は、それぞれ独立に、第二の化合物の分子中における他の原子と結合する窒素原子、酸素原子、硫黄原子、または第二の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

20

$Y_{61} \sim Y_{64}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または第二の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子である。

本実施形態においては、第二の化合物は、前記一般式(321)~(326)のうち前記一般式(323)で表される部分構造を有することが好ましい。

【 0 2 4 3】

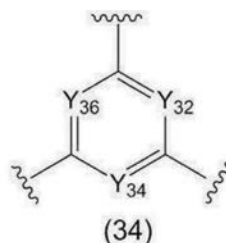
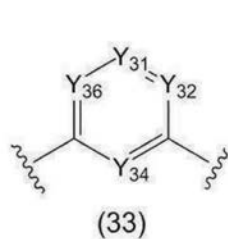
前記一般式(31)で表される部分構造は、下記一般式(33)で表される基、及び下記一般式(34)で表される基からなる群から選択される少なくともいずれかの基として第二の化合物に含まれることが好ましい。

第二の化合物は、下記一般式(33)、及び下記一般式(34)で表される部分構造のうち少なくともいずれかの部分構造を有することも好ましい。下記一般式(33)、及び下記一般式(34)で表される部分構造のように結合箇所が互いにメタ位に位置するため、第二の化合物の77[K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M2)$ を高く保つことができる。

30

【 0 2 4 4】

【化 6 9】



40

【 0 2 4 5】

前記一般式(33)において、 Y_{31} 、 Y_{32} 、 Y_{34} 、及び Y_{36} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{31} である。

前記一般式(34)において、 Y_{32} 、 Y_{34} 、及び Y_{36} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{31} である。

前記一般式(33)、及び(34)において、

R_{31} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、

50

置換基としての R_{31} は、それぞれ独立に、

- 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、
- 置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、
- 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のフルオロアルキル基、
- 置換または無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、
- 置換または無置換のシリル基、
- 置換ゲルマニウム基、
- 置換ホスフィンオキシド基、
- ハロゲン原子、
- シアノ基、
- ニトロ基、及び

置換または無置換のカルボキシ基

からなる群から選択される。

ただし、前記 R_{31} における置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基は、非縮合環であることが好ましい。

前記一般式 (33)、及び前記一般式 (34) において、波線部分は、第二の化合物の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。

【0246】

前記一般式 (33) において、 Y_{31} 、 Y_{32} 、 Y_{34} 、及び Y_{36} は、それぞれ独立に、 CR_{31} であることが好ましく、複数の R_{31} は、互いに同一であるか、または異なる。

また、前記一般式 (34) において、 Y_{32} 、 Y_{34} 、及び Y_{36} は、それぞれ独立に、 CR_{31} であることが好ましく、複数の R_{31} は、互いに同一であるか、または異なる。

【0247】

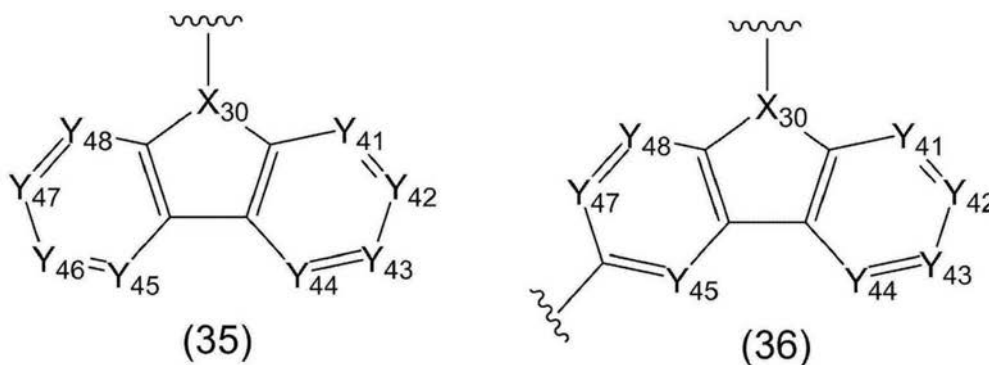
置換ゲルマニウム基は、 $-Ge(R_{301})_3$ で表されることが好ましい。 R_{301} は、それぞれ独立に、置換基である。置換基 R_{301} は、置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、または置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基であることが好ましい。複数の R_{301} は、互いに同一であるかまたは異なる。

【0248】

前記一般式 (32) で表される部分構造は、下記一般式 (35) ~ (39)、及び下記一般式 (30a) で表される基からなる群から選択される少なくともいずれかの基として第二の化合物に含まれることが好ましい。

【0249】

【化70】



【0250】

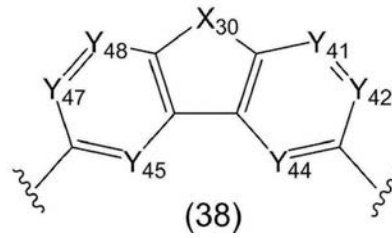
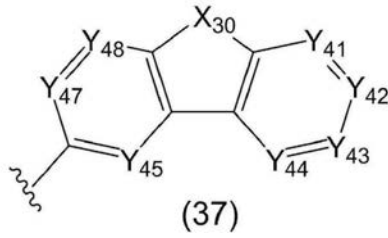
10

20

30

40

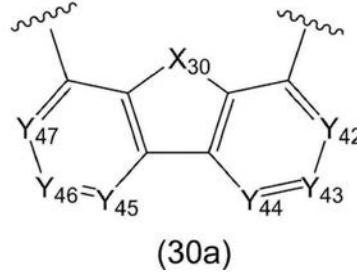
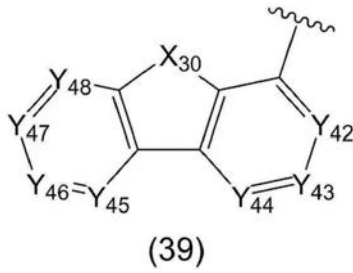
【化 7 1】



【 0 2 5 1】

【化 7 2】

10



【 0 2 5 2】

前記一般式(35)において、 Y_{41} 乃至 Y_{48} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{32} である。 20

前記一般式(36)、及び(37)において、 Y_{41} ~ Y_{45} 、 Y_{47} 、及び Y_{48} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{32} である。

前記一般式(38)において、 Y_{41} 、 Y_{42} 、 Y_{44} 、 Y_{45} 、 Y_{47} 、及び Y_{48} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{32} である。

前記一般式(39)において、 Y_{42} ~ Y_{48} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{32} である。

前記一般式(30a)において、 Y_{42} ~ Y_{47} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{32} である。

前記一般式(35)~(39)、及び(30a)において、 R_{32} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、置換基としての R_{32} は、

30

- 置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、
- 置換または無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、
- 置換または無置換の炭素数1~30のアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数1~30のフルオロアルキル基、
- 置換または無置換の環形成炭素数3~30のシクロアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数7~30のアラルキル基、
- 置換または無置換のシリル基、
- 置換ゲルマニウム基、
- 置換ホスフィンオキシド基、
- ハロゲン原子、
- シアノ基、
- ニトロ基、及び

40

置換または無置換のカルボキシ基

からなる群から選択され、

複数の R_{32} は、互いに同一であるかまたは異なる。

前記一般式(35)、及び(36)において、 X_{30} は、窒素原子である。

前記一般式(37)~(39)、及び(30a)において、

X_{30} は、 NR_{33} 、酸素原子、または硫黄原子であり、

50

R_{33} は、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、
 置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、
 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のフルオロアルキル基、
 置換または無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、
 置換または無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、
 置換または無置換のシリル基、
 置換ゲルマニウム基、
 置換ホスフィンオキシド基、
 フッ素原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、及び

置換または無置換のカルボキシ基

からなる群から選択され、

複数の R_{33} は、互いに同一であるかまたは異なる。

ただし、前記 R_{33} における置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基は、非縮合環であることが好ましい。

前記一般式 (35) ~ (39)、及び (30a) において、波線部分は、第二の化合物の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。

【0253】

前記一般式 (35) において、 $Y_{41} \sim Y_{48}$ は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、前記一般式 (36)、及び前記一般式 (37) において、 $Y_{41} \sim Y_{45}$ 、 Y_{47} 、及び Y_{48} は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、前記一般式 (38) において、 Y_{41} 、 Y_{42} 、 Y_{44} 、 Y_{45} 、 Y_{47} 、及び Y_{48} は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、前記一般式 (39) において、 $Y_{42} \sim Y_{48}$ は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、前記一般式 (30a) において、 $Y_{42} \sim Y_{47}$ は、それぞれ独立に、 CR_{32} であることが好ましく、複数の R_{32} は、互いに同一であるかまたは異なる。

【0254】

第二の化合物において、 X_{30} は、酸素原子または硫黄原子であることが好ましく、酸素原子であることがより好ましい。

【0255】

第二の化合物において、 R_{31} 、及び R_{32} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であって、置換基としての R_{31} 、及び置換基としての R_{32} は、それぞれ独立に、フッ素原子、シアノ基、置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、及び置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基からなる群から選択されるいずれかの基であることが好ましい。 R_{31} 、及び R_{32} は、水素原子、シアノ基、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、または置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基であることがより好ましい。ただし、置換基としての R_{31} 、及び置換基としての R_{32} が置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基である場合、当該アリール基は、非縮合環であることが好ましい。

【0256】

第二の化合物は、芳香族炭化水素化合物、または芳香族複素環化合物であることも好ましい。また、第二の化合物は、分子中に縮合芳香族炭化水素環を有していないことが好ましい。

【0257】

・第二の化合物の製造方法

第二の化合物は、例えば、国際公開第 2012/153780 号、及び国際公開第 20

10

20

30

40

50

13/038650号等に記載の方法により製造することができる。また、例えば、目的物に合わせた既知の代替反応、及び原料を用いることで、第二の化合物を製造できる。

【0258】

第二の化合物における置換基の例は、例えば、以下のとおりであるが、本発明は、これらの例に限定されない。

【0259】

アリール基（芳香族炭化水素基と称する場合がある。）の具体例としては、フェニル基、トリル基、キシリル基、ナフチル基、フェナントリル基、ピレニル基、クリセニル基、ベンゾ[*c*]フェナントリル基、ベンゾ[*g*]クリセニル基、ベンゾアントリル基、トリフェニレニル基、フルオレニル基、9,9-ジメチルフルオレニル基、ベンゾフルオレニル基、ジベンゾフルオレニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、クォーターフェニル基、フルオランテニル基等が挙げられ、好ましくはフェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、クォーターフェニル基、ナフチル基、トリフェニレニル基、及びフルオレニル基等を挙げることができる。

置換基を有するアリール基としては、トリル基、キシリル基、及び9,9-ジメチルフルオレニル基等を挙げることができる。

具体例が示すように、アリール基は、縮合アリール基、及び非縮合アリール基の両方を含む。

アリール基としては、フェニル基、ピフェニル基、ターフェニル基、クォーターフェニル基、ナフチル基、トリフェニレニル基、及びフルオレニル基が好ましい。

【0260】

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。）の具体例としては、ピロリル基、ピラゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、ピリジル基、トリアジニル基、インドリル基、イソインドリル基、イミダゾリル基、ベンズイミダゾリル基、インダゾリル基、イミダゾ[1,2-*a*]ピリジニル基、フリル基、ベンゾフラニル基、イソベンゾフラニル基、ジベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、チオフェニル基、ベンゾチエニル基、ジベンゾチエニル基、アザジベンゾチエニル基、キノリル基、イソキノリル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、ナフチリジニル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、フェノキサジニル基、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、フラザニル基、ベンズオキサゾリル基、チエニル基、チアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンズチアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基等が挙げられ、好ましくは、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルバゾリル基、ピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、アザジベンゾフラニル基、及びアザジベンゾチエニル基等を挙げることができる。

ヘテロアリール基としては、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルバゾリル基、ピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、アザジベンゾフラニル基、アザジベンゾチエニル基が好ましく、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、アザジベンゾフラニル基、及びアザジベンゾチエニル基がさらに好ましい。

【0261】

第二の化合物において、置換シリル基は、置換または無置換のトリアルキルシリル基、置換または無置換のアリールアルキルシリル基、及び置換または無置換のトリアリールシリル基からなる群から選択されることも好ましい。

置換または無置換のトリアルキルシリル基の具体例としては、トリメチルシリル基、及びトリエチルシリル基を挙げることができる。

置換若しくは無置換のアリールアルキルシリル基の具体例としては、ジフェニルメチルシリル基、ジトリルメチルシリル基、及びフェニルジメチルシリル基等を挙げることができる。

置換または無置換のトリアリールシリル基の具体例としては、トリフェニルシリル基、及びトリトリルシリル基等を挙げることができる。

【0262】

第二の化合物において、置換ホスフィンオキシド基は、置換または無置換のジアリールホスフィンオキシド基であることも好ましい。

置換または無置換のジアリールホスフィンオキシド基の具体例としては、ジフェニルホスフィンオキシド基、及びジトリルホスフィンオキシド基等を挙げることができる。

【0263】

第二の化合物において、置換カルボキシ基としては、例えば、ベンゾイルオキシ基等が挙げられる。

【0264】

< 発光層における第一の化合物、蛍光発光性の化合物、及び第二の化合物の関係 >

発光層における第一の化合物、蛍光発光性の化合物、及び第二の化合物は、前記数式(数1)、及び前記数式(数2)の関係を満たすことが好ましい。すなわち、下記数式(数3)の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(M2) > S_1(M1) > S_1(FL) \quad \dots (数3)$$

【0265】

第二の化合物の $\Gamma_{\Gamma K}$ におけるエネルギーギャップ $T_{\Gamma K}(M2)$ は、第一の化合物の $\Gamma_{\Gamma K}$ におけるエネルギーギャップ $T_{\Gamma K}(M1)$ よりも大きいことが好ましい。すなわち、下記数式(数5)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{\Gamma K}(M2) > T_{\Gamma K}(M1) \quad \dots (数5)$$

【0266】

第二の化合物の $\Gamma_{\Gamma K}$ におけるエネルギーギャップ $T_{\Gamma K}(M2)$ は、蛍光発光性の化合物の $\Gamma_{\Gamma K}$ におけるエネルギーギャップ $T_{\Gamma K}(FL)$ よりも大きいことが好ましい。すなわち、下記数式(数6)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{\Gamma K}(M2) > T_{\Gamma K}(FL) \quad \dots (数6)$$

【0267】

発光層における第一の化合物、蛍光発光性の化合物、及び第二の化合物は、前記数式(数4)、及び前記数式(数5)の関係を満たすことが好ましい。すなわち、下記数式(数7)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{\Gamma K}(M2) > T_{\Gamma K}(M1) > T_{\Gamma K}(FL) \quad \dots (数7)$$

【0268】

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が発光していることが好ましい。

【0269】

・発光層における化合物の含有率

発光層に含まれている第一の化合物、蛍光発光性の化合物、及び第二の化合物の含有率は、例えば、以下の範囲であることが好ましい。

第一の化合物の含有率は、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。

蛍光発光性の化合物の含有率は、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。

第二の化合物の含有率は、10質量%以上80質量%以下であることが好ましい。

発光層における第一の化合物、蛍光発光性の化合物、及び第二の化合物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、第一の化合物、蛍光発光性の化合物、及び第二の化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

【0270】

図5は、発光層における第一の化合物、蛍光発光性の化合物、及び第二の化合物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。 $S_1(M1)$ は、第一の化合物の最低励起一重項状態を表し、 $T_1(M1)$ は、第一の化合物

10

20

30

40

50

の最低励起三重項状態を表す。S₁(FL)は、蛍光発光性の化合物の最低励起一重項状態を表し、T₁(FL)は、蛍光発光性の化合物の最低励起三重項状態を表す。S₁(M₂)は、第二の化合物の最低励起一重項状態を表し、T₁(M₂)は、第二の化合物の最低励起三重項状態を表す。図5中のS₁(M₁)からS₁(FL)へ向かう破線の矢印は、第一の化合物の最低励起一重項状態から蛍光発光性の化合物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、第一の化合物としてST(M₁)の小さな化合物を用いると、最低励起三重項状態T₁(M₁)は、熱エネルギーにより、最低励起一重項状態S₁(M₁)に逆項間交差が可能である。そして、第一の化合物の最低励起一重項状態S₁(M₁)から蛍光発光性の化合物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S₁(FL)が生成する。この結果、蛍光発光性の化合物の最低励起一重項状態S₁(FL)からの蛍光発光を観測することができる。このTADF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。

【0271】

本実施形態に係る有機EL素子によれば、発光効率を向上させることができる。

【0272】

第二実施形態の有機EL素子は、発光層に、第一の化合物と、蛍光発光性の化合物と、第一の化合物よりも大きな一重項エネルギーを有する第二の化合物と、を含んでおり、発光効率が向上する。発光効率が向上する理由としては、第二の化合物が含まれていること

【0273】

第二実施形態に係る有機EL素子は、第一の実施形態に係る有機EL素子と同様に、表示装置、及び発光装置等の電子機器に使用できる。

【0274】

〔第三実施形態〕

第三実施形態に係る有機EL素子の構成について説明する。第三実施形態の説明において第一実施形態又は第二実施形態と同一の構成要素は、同一符号、及び名称を付す等して説明を省略もしくは簡略化する。また、第三実施形態では、特に言及されない材料、及び化合物については、第一実施形態又は第二実施形態で説明した材料、及び化合物と同様の材料、及び化合物を用いることができる。

【0275】

第三実施形態の有機EL素子は、発光層を構成する化合物が第一実施形態、及び第二実施形態に係る有機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。

【0276】

本実施形態の有機EL素子における発光層は、第一の化合物と第二の化合物を含み、前記第一の化合物は、前記一般式(1)で表され、第二の化合物の一重項エネルギーS₁(M₂)は、第一の化合物のS₁(M₁)より大きい。

【0277】

本実施形態に係る有機EL素子の発光層は、金属錯体を含んでもよいが、重金属錯体を含まないことが好ましい。

本実施形態に係る有機EL素子の発光層は、燐光発光性の金属錯体を含まないことが好ましい。

【0278】

本実施形態の有機EL素子における発光層は、第一実施形態とは異なり、蛍光発光性の化合物を含有しない。

【0279】

<第一の化合物>

本実施形態の第一の化合物としては、第一実施形態で説明した第一の化合物を用いることができる。

10

20

30

40

50

【0280】

本実施形態において、第一の化合物は、ドーパント材料（ゲスト材料、エミッター、又は発光材料と称する場合もある。）であることも好ましい。

【0281】

本実施形態の第一の化合物は、熱活性遅延蛍光性の化合物であることが好ましい。そのため、本実施形態の有機EL素子においては、前述の本実施形態の第一の化合物の中から熱活性遅延蛍光性の化合物を選択して用いることが好ましい。

【0282】

本実施形態の有機EL素子を駆動させた場合に、第一の化合物が主として発光することが好ましい。

10

【0283】

本実施形態の有機EL素子における発光層は、第一の化合物の一重項エネルギー S_1 （ M_1 ）よりも小さな一重項エネルギーの化合物を含有しないことが好ましい。

【0284】

本実施形態の第一の化合物は、前記一般式（10B）で表される化合物であることが好ましく、前記一般式（12a）で表される化合物であることがより好ましく、前記一般式（13b）、前記一般式（14a）、又は前記一般式（16a）で表される化合物であることがさらに好ましく、前記一般式（13e）、前記一般式（13f）、前記一般式（14c）、又は前記一般式（16c）であることがさらにより好ましく、前記一般式（13e）表される化合物であることが特に好ましい。

20

【0285】

本実施形態の有機EL素子における発光層は、第一の化合物の一重項エネルギー S_1 （ M_1 ）より大きな一重項エネルギーの化合物をさらに含むことが好ましい。

第一の化合物の一重項エネルギー S_1 （ M_1 ）より大きな一重項エネルギーの化合物としては、第二実施形態で説明した第二の化合物を用いることが好ましい。

【0286】

<第二の化合物>

第二の化合物は、熱活性遅延蛍光性の化合物でもよいし、熱活性遅延蛍光性を示さない化合物でもよい。

第二の化合物は、ホスト材料（マトリックス材料と称する場合もある。）であることも好ましい。

30

【0287】

本実施形態においても、第一の化合物の一重項エネルギー S_1 （ M_1 ）と、第二の化合物の一重項エネルギー S_1 （ M_2 ）とが、前記数式（数2）の関係を満たすことが好ましい。

【0288】

・TADFメカニズム

本実施形態の有機EL素子では、第一の化合物として ST （ M_1 ）が小さい化合物を用いることが好ましい。 ST （ M_1 ）が小さければ、外部から与えられる熱エネルギーによって、第一の化合物の三重項準位から第一の化合物の一重項準位への逆項間交差が起こり易くなる。

40

図6は、発光層における第一の化合物、及び第二の化合物のエネルギー準位の関係の一例を示すものである。図6において、 S_0 は、基底状態を表し、 S_1 （ M_2 ）は、第二の化合物の最低励起一重項状態を表し、 T_1 （ M_2 ）は、第二の化合物の最低励起三重項状態を表し、 S_1 （ M_1 ）は、第一の化合物の最低励起一重項状態を表し、 T_1 （ M_1 ）は、第一の化合物の最低励起三重項状態を表す。図6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。第二の化合物の最低励起三重項状態 T_1 （ M_2 ）からのデクスター移動により、第一の化合物にエネルギー移動が生じ、最低励起一重項状態 S_1 （ M_1 ）または最低励起三重項状態 T_1 （ M_1 ）が生成する。さらに、第一の化合物として ST （ M_1 ）の小さな材料を用いると、第一の化合物の最低励起三重項状態 T_1 （ M_1 ）は熱工

50

エネルギーによって最低励起一重項状態 $S_1 (M_1)$ に逆項間交差することが可能である。この結果、第一の化合物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 TADF メカニズムによる遅延蛍光を利用することによっても、理論的に内部効率を 100% まで高めることができると考えられている。

【0289】

本実施形態において、第二の化合物の T_{77K} [K] におけるエネルギーギャップ $T_{77K} (M_2)$ は、第一の化合物の T_{77K} [K] におけるエネルギーギャップ $T_{77K} (M_1)$ よりも大きいことが好ましい。

【0290】

・発光層における化合物の含有率

本実施形態の発光層に含まれている第一の化合物、及び第二の化合物の含有率は、例えば、以下の範囲であることが好ましい。

第一の化合物の含有率は、1質量%以上90質量%以下であることが好ましく、5質量%以上70質量%であることがより好ましく、10質量%以上50質量%以下であることがさらに好ましい。

第二の化合物の含有率は、10質量%以上99質量%であることが好ましく、30質量%以上95質量%であることがより好ましく、50質量%以上90質量%以下であることがさらに好ましい。

【0291】

本実施形態に係る有機 EL 素子によれば、発光効率を向上させることができる。

【0292】

第三実施形態に係る有機 EL 素子は、第一の実施形態に係る有機 EL 素子と同様に、表示装置、及び発光装置等の電子機器に使用できる。

【0293】

〔第四実施形態〕

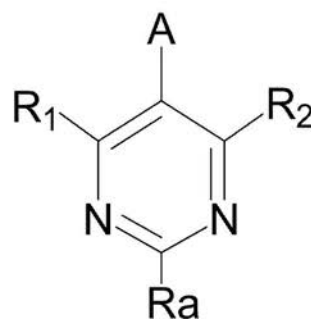
本発明者らは、下記一般式 (11) で表される化合物を有機 EL 素子に使用することで、有機 EL 素子が高効率化することを見出した。

【0294】

本実施形態に係る化合物は、下記一般式 (11) で表される化合物である。

【0295】

【化73】



(11)

【0296】

(前記一般式 (11) において、

- R_a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、
- R₁、及び R₂ は、それぞれ独立に、置換基であり、
- 置換基としての R₁、R₂、及び R_a は、それぞれ独立に、
- 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、
- 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、
- 置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、
- 置換または無置換のアミノ基、
- 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

10

20

30

40

50

置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、
 置換または無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基、
 置換または無置換のホスファニル基、
 置換または無置換のホスホリル基、
 置換または無置換のシリル基、
 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールカルボニル基、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 カルボキシ基、及び
 ハロゲン原子

10

からなる群から選択され、

A は、前記一般式 (1 a)、前記一般式 (1 b)、又は前記一般式 (1 c) で表される基である。))

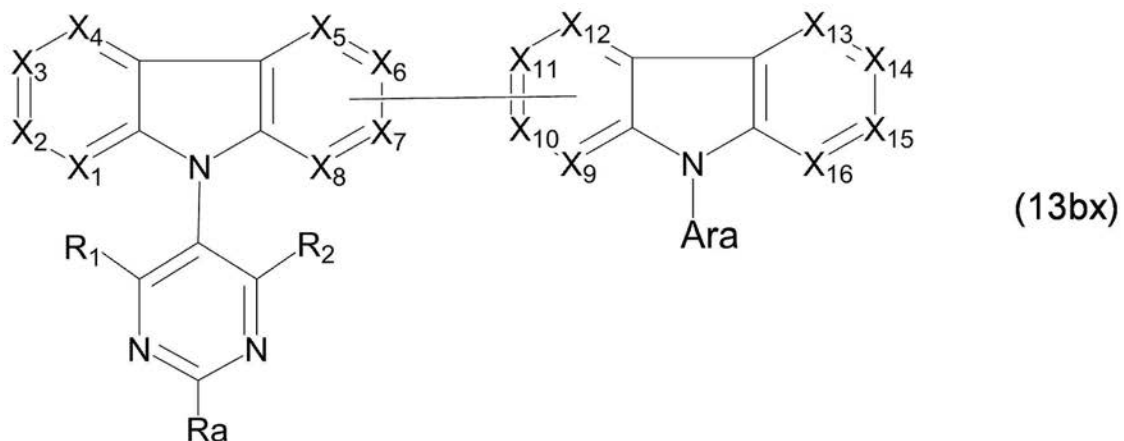
【 0 2 9 7 】

本実施形態に係る化合物は、下記一般式 (1 3 b x) 又は下記一般式 (1 4 a x) で表されることが好ましい。

【 0 2 9 8 】

【 化 7 4 】

20



30

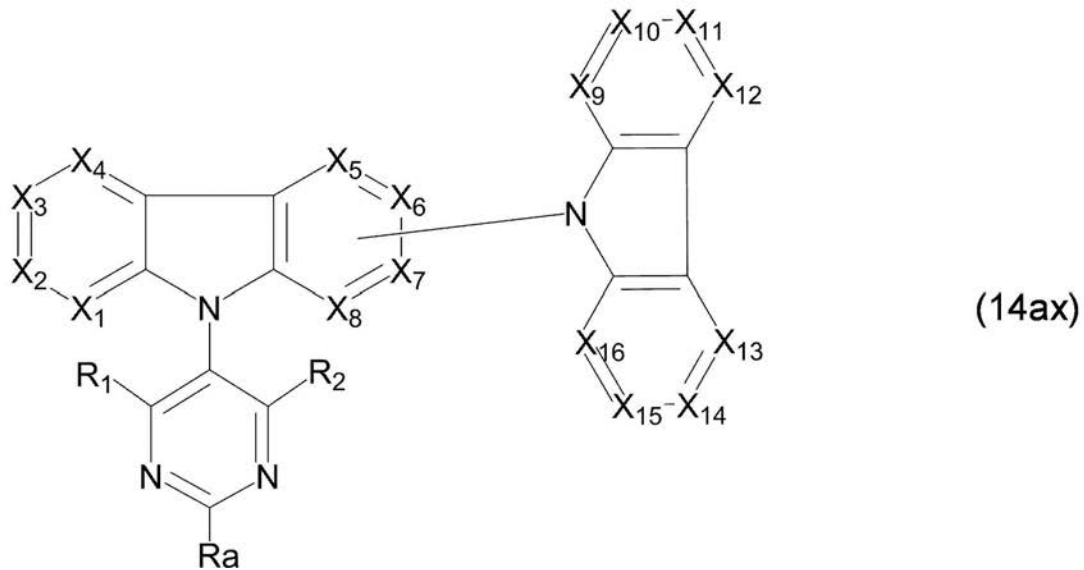
【 0 2 9 9 】

(前記一般式 (1 3 b x) において、R₁、及び R₂ は、それぞれ独立に、置換基であり、R_a は、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R₁、R₂、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R₁、R₂、及び R_a に関する置換基と同義であり、R₁、及び R₂ の少なくとも一方が置換基であり、X₁ ~ X₁₆ は、それぞれ独立に、C - R_b 又は窒素原子であり、ただし、前記一般式 (1 3 b x) 中、X₅ ~ X₈ のうち、少なくとも一つは、X₉ ~ X₁₂ のいずれかと結合する炭素原子であり、X₉ ~ X₁₂ のうち、少なくとも一つは、X₅ ~ X₈ のいずれかと結合する炭素原子である。前記一般式 (1 3 b x) において、R_b は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_b は、前述した R_b に関する置換基と同義であり、複数の R_b は、互いに同一であるか、又は異なり、X₁ ~ X₈ のうち、複数の R_b が C - R_b であって、R_b が置換基である場合、R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、X₉ ~ X₁₆ のうち、複数の R_b が C - R_b であって、R_b が置換基である場合、R_b 同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、Ara は、前述した Ara に関する置換基と同義である。)

40

【 0 3 0 0 】

【化 7 5】



10

【0301】

(前記一般式(14ax)において、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としての R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、前述した R_1 、 R_2 、及び R_a に関する置換基と同義であり、 R_1 、及び R_2 の少なくとも一方が置換基であり、 $X_1 \sim X_{16}$ は、それぞれ独立に、C-Rb又は窒素原子であり、ただし、前記一般式(14ax)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子である。前記一般式(14ax)において、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、前述したRbに関する置換基と同義であり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、 $X_1 \sim X_8$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成せず、 $X_9 \sim X_{16}$ のうち、複数のC-Rbであって、Rbが置換基である場合、Rb同士が結合して環を形成するか、または環を形成しない。)

20

【0302】

本実施形態に係る化合物は、前記一般式(13bx)で表されることがより好ましい。

30

【0303】

本実施形態に係る化合物において、

Aが、前記一般式(1b)で表される基であり、

$X_1 \sim X_4$ のうち少なくともいずれかがC-Rbであり、

Rbは、水素原子、又は置換基である場合、

置換基としてのRbは、

置換または無置換の炭素数1~30のアルキル基、

置換または無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、

置換または無置換の炭素数1~30のアルキルチオ基、

置換または無置換のアミノ基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、

置換または無置換の炭素数2~30のアルケニル基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールチオ基、

置換または無置換のホスファニル基、

置換または無置換のホスホリル基、

置換または無置換のシリル基、

置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールカルボニル基、

シアノ基、

40

50

ニトロ基、
カルボキシ基、及び
ハロゲン原子

からなる群から選択される、ことが好ましい。

【0304】

本実施形態に係る化合物において、Aが、前記一般式(1b)で表される基であり、 X_1 、 X_2 、 X_3 、及び X_4 がC-Rbであり、Rbが水素原子であることがより好ましい。

【0305】

本実施形態に係る化合物において、 $X_1 \sim X_{16}$ は、C-Rbであり、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、ただし、前記一般式(1b)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、前記一般式(1c)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子であることが好ましい。

10

【0306】

本実施形態に係る化合物において、 $X_1 \sim X_{16}$ は、C-Rbであり、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、置換または無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、及び置換または無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基からなる群から選択され、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、ただし、前記一般式(1b)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、前記一般式(1c)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子であることが好ましい。

20

【0307】

本実施形態に係る化合物において、 $X_1 \sim X_{16}$ は、C-Rbであり、Rbは、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基であり、置換基としてのRbは、置換また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、複数のRbは、互いに同一であるか、又は異なり、ただし、前記一般式(1b)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、前記一般式(1c)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子であることが好ましい。

30

【0308】

本実施形態に係る化合物において、 $X_1 \sim X_{16}$ は、C-Rbであり、Rbは、水素原子であり、ただし、前記一般式(1b)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のうち、少なくとも一つは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子であり、前記一般式(1c)中、 $X_5 \sim X_8$ のうち、少なくとも一つは、 $X_9 \sim X_{16}$ を含有する含窒素縮合環の5員環中の窒素原子と結合する炭素原子であることが好ましい。

40

【0309】

本実施形態に係る化合物において、Raは、置換基であり、置換基としてのRaは、それぞれ独立に、置換または無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換または無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、置換または無置換の炭素数1~30のアルキルチオ基、置換または無置換のアミノ基、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換または無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、置換または無置換の炭素数2~30のアルケニル基、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、置換または無置換の環形成炭素数6~30のアリールチオ基、置換または無置換のホスファニル基、置換または無置換のホスホリル基、置換または無置換のシリル基、置換また

50

は無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールカルボニル基、シアノ基、ニトロ基、カルボキシ基、及びハロゲン原子からなる群から選択され、複数の R_a は、互いに同一であるか、又は異なることが好ましい。

【0310】

本実施形態の化合物において、 R_1 、 R_2 及び R_a が同時に置換基であることが好ましい。

【0311】

本実施形態に係る化合物において、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、置換また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。

【0312】

本実施形態に係る化合物において、 R_1 、 R_2 、及び R_a は、それぞれ独立に、置換または無置換のフェニル基であることが好ましい。

10

【0313】

前記一般式 (11) で表される化合物は、前記一般式 (1) における R_1 、及び R_2 の両方が置換基であり、 Y_1 及び Y_3 が窒素原子であり、かつ Y_2 が C - R_a であることを特定した化合物に相当する。

本実施形態に係る化合物としては、前記実施形態で説明した第一の化合物のいずれかの態様において、一般式中の R_1 、及び R_2 の両方が置換基であり、 Y_1 及び Y_3 が窒素原子であり、かつ Y_2 が C - R_a であるという条件を当てはめた場合の化合物も用いることができる。また、前記実施形態で説明した第一の化合物のいずれかの態様において、一般式中の R_1 、及び R_2 の両方が置換基であり、 Y_1 及び Y_3 が窒素原子であり、かつ Y_2 が C - R_a である化合物も用いることができる。

20

また、本実施形態に係る化合物のより具体的な例としては、例えば、前記実施形態で説明した第一の化合物の具体例の内、本実施形態に係る化合物としての条件を満たす化合物が挙げられる。

【0314】

本実施形態の化合物において、複数の R_b が置換基である場合、 R_b 同士は環を形成しないことが好ましい。

【0315】

本実施形態の化合物としては、前記一般式 (12a) で表される化合物であって、前記一般式 (12a) 中の R_1 、及び R_2 の両方が置換基である化合物が好ましい。

30

【0316】

本実施形態の化合物としては、前記一般式 (13bx) で表される化合物、前記一般式 (14ax) で表される化合物、又は前記一般式 (16a) で表される化合物であって、前記一般式 (16a) 中の R_1 、及び R_2 の両方が置換基である化合物がより好ましい。

【0317】

本実施形態の化合物としては、前記一般式 (13e)、前記一般式 (13f)、前記一般式 (14c)、又は前記一般式 (16c) で表される化合物であって、前記一般式 (13e)、前記一般式 (13f)、前記一般式 (14c)、又は前記一般式 (16c) 中の R_1 、及び R_2 の両方が置換基である化合物がさらに好ましい。

40

【0318】

本実施形態の化合物としては、前記一般式 (13e) で表される化合物であって、前記一般式 (13e) 中の R_1 、及び R_2 の両方が置換基である化合物がさらにより好ましい。

【0319】

本実施形態に係る化合物によれば、有機 EL 素子の発光効率を向上させることができる。例えば、本実施形態に係る化合物を有機 EL 素子の発光層に用いることにより、有機 EL 素子の発光効率を向上させることができる。

【0320】

〔実施形態の変形〕

50

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。

【0321】

例えば、第一の実施形態及び第二の実施形態の有機EL素子の発光層に含まれる第一の化合物は、熱活性遅延蛍光性を示さない化合物であってもよい。

【0322】

また、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。

【0323】

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。

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。

【0324】

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。

【実施例】

【0325】

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。

【0326】

<化合物>

有機EL素子の製造に用いた化合物を以下に示す。

【0327】

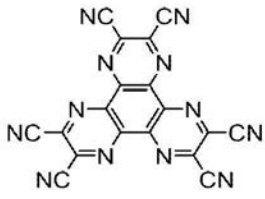
10

20

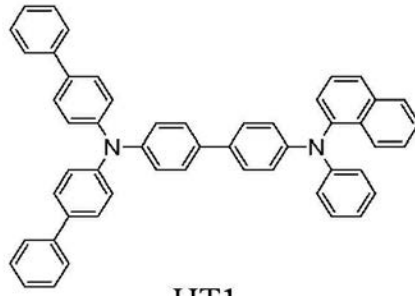
30

40

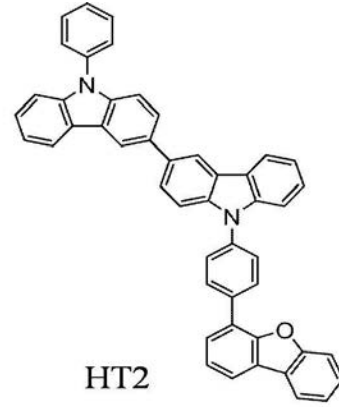
【化 7 6】



HI



HT1

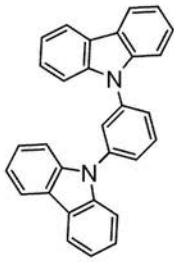


HT2

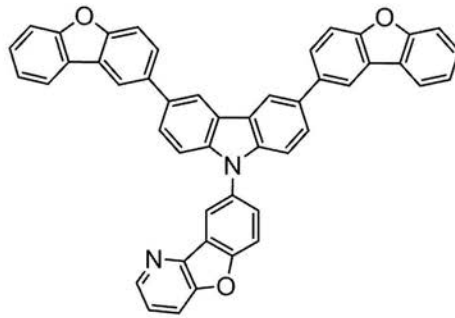
10

【 0 3 2 8】

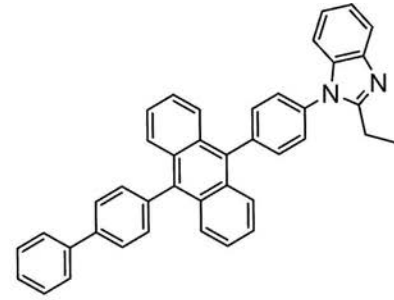
【化 7 7】



mCP



ET1

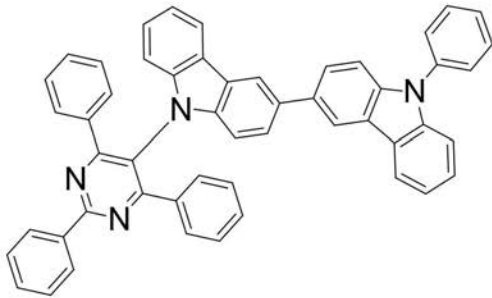


ET2

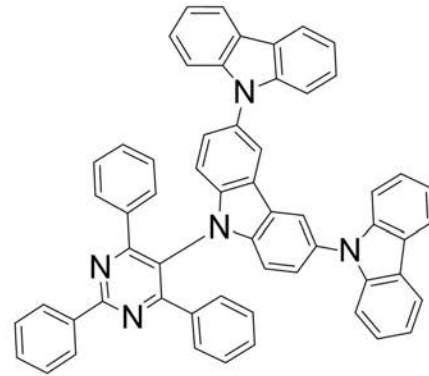
20

【 0 3 2 9】

【化 7 8】



TADF1

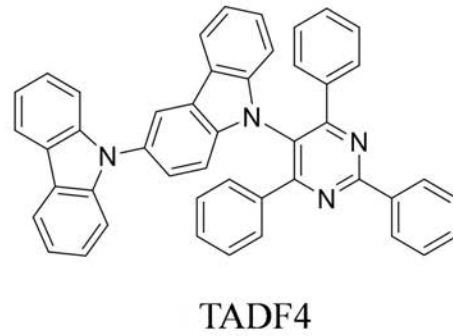
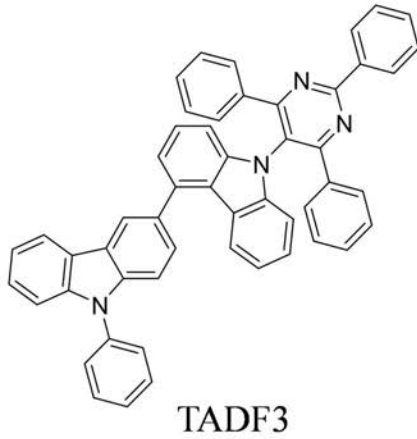


TADF2

30

【 0 3 3 0】

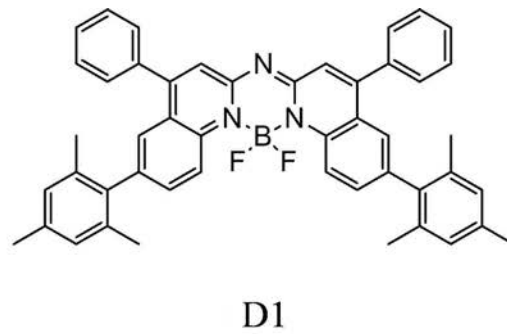
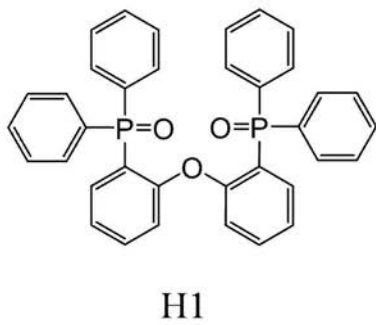
【化79】



10

【0331】

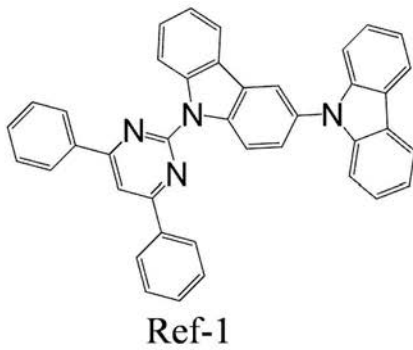
【化80】



20

【0332】

【化81】



30

【0333】

< 化合物の合成 >

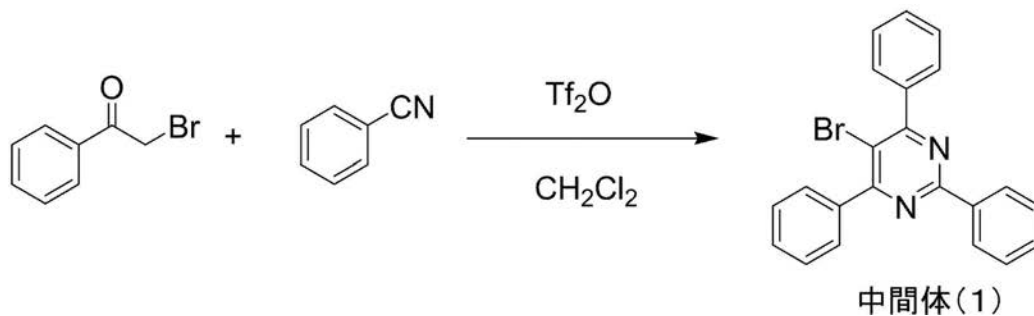
・ 合成実施例1：化合物TADF1の合成

(1-1) 中間体(1)の合成

40

【0334】

【化82】



50

【0335】

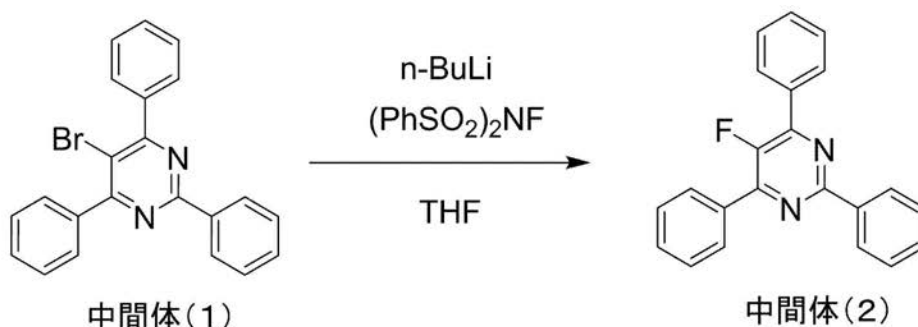
三口フラスコにベンズニトリル 18.2 g (177 mmol)、トリフルオロメタンスルホン酸無水物 24.9 g (88 mmol)、及び脱水ジクロロメタン 100 mL を加えて、窒素雰囲気下、室温で攪拌した。次いで、脱水ジクロロメタン 100 mL に溶解したフェナシルプロミド 16.0 g (80 mmol) を 1 時間かけて滴下装入した。引き続き、室温で 72 時間攪拌した。反応溶液にジクロロメタン 200 mL を加え、有機相を炭酸ナトリウム水溶液で有機相が中性を示すまで洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、溶媒を減圧下で留去した。析出した固体をエタノールで懸濁洗浄することにより精製し、白色固体として中間体 (1) を 22.8 g (収率 73%) 得た。

【0336】

(1-2) 中間体 (2) の合成

【0337】

【化83】



10

20

【0338】

四口フラスコに、中間体 (1) 10.0 g (25.8 mmol) を入れた後、容器内を窒素置換し、脱水テトラヒドロフラン (THF) 350 mL を加えて溶解させ、-65 で攪拌した。次いで、n-ブチルリチウム (2.6 M ヘキサン溶液) 12 mL を -60 以下に保ちながら滴下装入し、30 分間攪拌した後、THF 70 mL に溶解した N-フルオロベンゼンスルホンイミド 16.3 g (51.6 mmol) を滴下装入した。-65 で 1 時間攪拌した後、徐々に室温に戻しながら 3 時間攪拌した。メタノールを 30 mL 加えた後、反応溶液を減圧下で濃縮し、析出した固体をエタノールで懸濁洗浄することにより精製し、白色固体として中間体 (2) を 5.4 g (収率 64%) 得た。

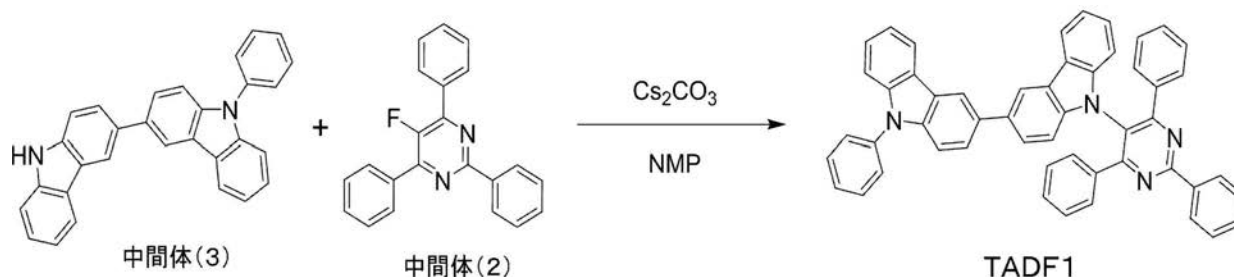
30

【0339】

(1-3) TADF1 の合成

【0340】

【化84】



40

【0341】

三口フラスコに、中間体 (3) 0.45 g (1.1 mmol)、中間体 (2) 0.3 g (0.92 mmol)、炭酸セシウム 0.92 g (2.8 mmol)、及び N-メチルピロリドン (NMP) 10 mL を加えて、160 で 2 日間加熱攪拌した。反応溶液を水に注ぎ、析出した固体を濾集した。得られた固体を、メタノールで懸濁洗浄し、さらにエタノールで懸濁洗浄することにより精製し、白色固体として TADF1 を 0.5 g (収率 76%) 得た。FD-MS 分析の結果、分子量 714 に対して $m/e = 714$ であり、目的

50

物であることを同定した。

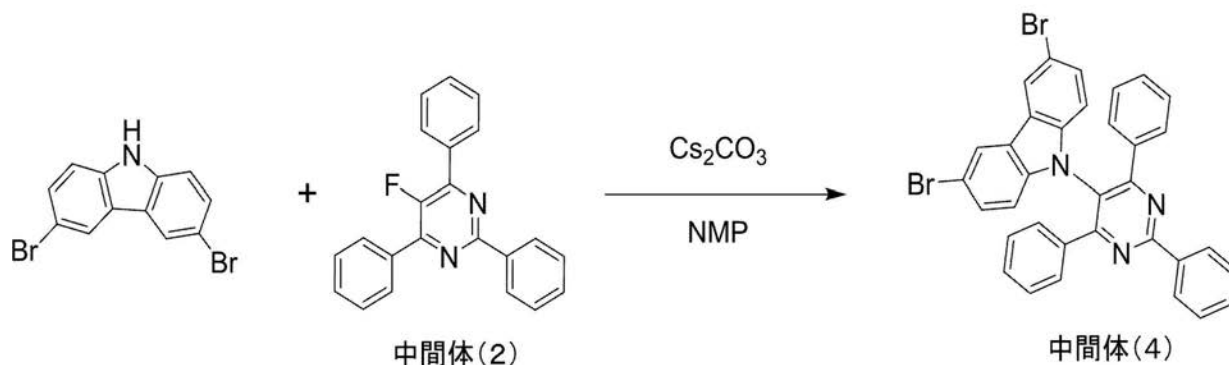
【0342】

・合成実施例2：化合物TADF2の合成

(2-1) 中間体(4)の合成

【0343】

【化85】



10

【0344】

三口フラスコに、3,6-ジブromoカルバゾール1.0g(3.0mmol)、中間体(2)1.0g(3.0mmol)、炭酸セシウム3.0g(9.2mmol)、及びNMP15mLを加えて、160で8時間加熱攪拌した。反応溶液を水に注ぎ、析出した固体を濾集した。得られた固体を、エタノールで懸濁洗浄することにより精製し、白色固体として中間体(4)を1.5g(収率78%)得た。

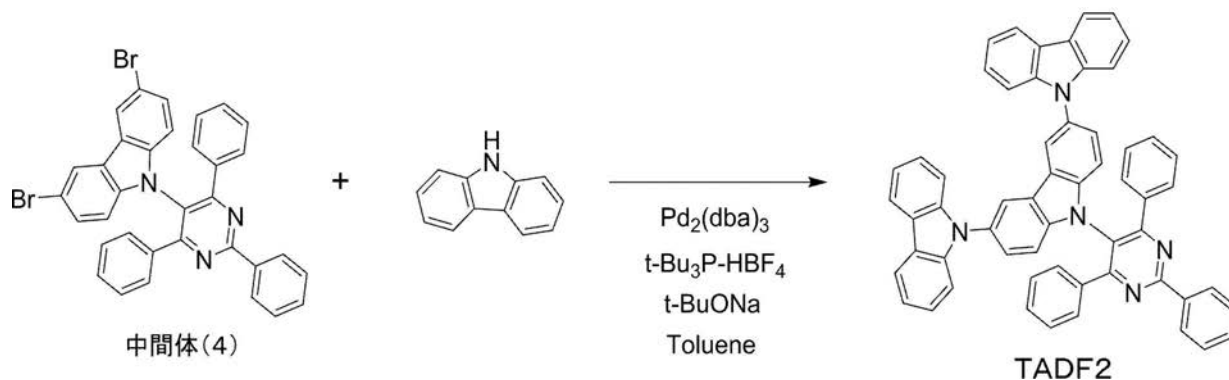
20

【0345】

(2-2) TADF2の合成

【0346】

【化86】



30

【0347】

三口フラスコに、アルゴン雰囲気下にて、中間体(4)1.5g(2.4mmol)、カルバゾール0.87g(5.2mmol)、Pd₂(dba)₃87mg(0.095mmol)、t-Bu₃P-HBF₄0.11g(0.38mmol)、及びt-BuONa1.1g(11.4mmol)を加えた後、トルエン25mLを加えて、100で8時間加熱攪拌した。反応溶液にトルエン500mLを加えて、シリカゲルを通して不溶物を濾去した後、濾液を減圧下で濃縮した。得られた固体を、エタノールで懸濁洗浄し、トルエンで再結晶することにより精製し、白色固体としてTADF2を1.2g(収率62%)得た。FD-MS分析の結果、分子量803に対してm/e=803であり、目的物であることを同定した。

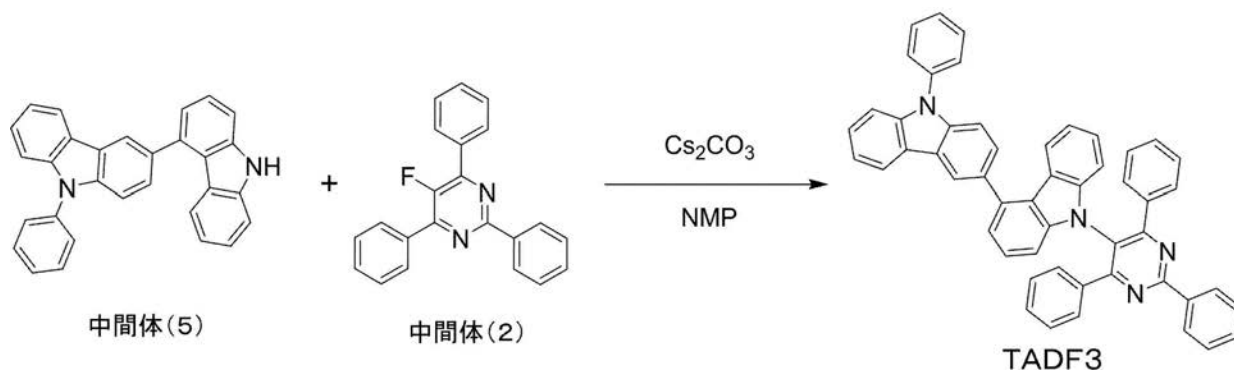
40

【0348】

・合成実施例3：化合物TADF3の合成

【0349】

【化 8 7】



10

【0350】

三口フラスコに、中間体(5) 1.1 g (2.7 mmol)、中間体(2) 1.0 g (3.1 mmol)、炭酸セシウム 3.0 g (9.2 mmol)、及びN-メチルピロリドン(NMP) 15 mLを加えて、160 で8時間加熱攪拌した。反応溶液を水に注ぎ、析出した固体を濾集した。得られた固体を、メタノールで懸濁洗浄し、さらにエタノールで繰り返し懸濁洗浄することにより精製し、白色固体としてTADF3を1.7 g (収率78%)得た。FD-MS分析の結果、分子量714に対して $m/e = 714$ であり、目的物であることを同定した。

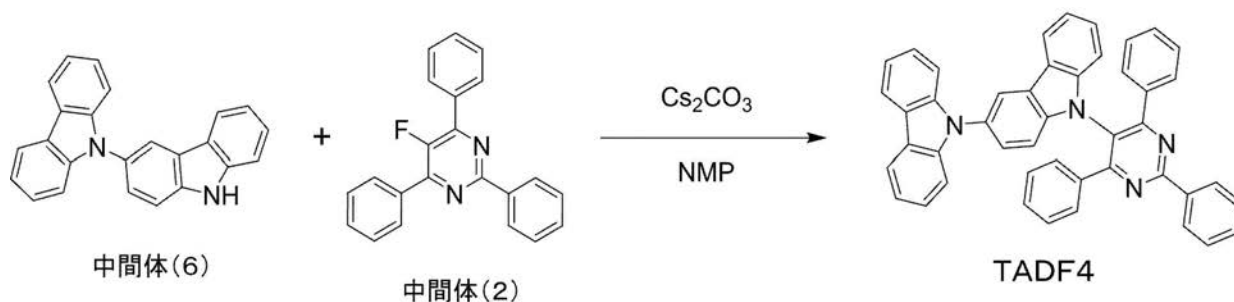
【0351】

20

・合成実施例4：化合物TADF4の合成

【0352】

【化 8 8】



30

【0353】

三口フラスコに、中間体(6) 1.5 g (4.5 mmol)、中間体(2) 1.2 g (3.7 mmol)、炭酸セシウム 3.6 g (11.0 mmol)、及びN-メチルピロリドン(NMP) 20 mLを加えて、160 で8時間加熱攪拌した。反応溶液を水に注ぎ、析出した固体を濾集した。得られた固体を、メタノールで懸濁洗浄し、さらにエタノールで繰り返し懸濁洗浄することにより精製し、白色固体としてTADF4を1.7 g (収率72%)得た。FD-MS分析の結果、分子量638に対して $m/e = 638$ であり、目的物であることを同定した。

【0354】

40

<化合物の評価>

化合物の性質を測定する方法を以下に示す。

【0355】

・熱活性遅延蛍光性

熱活性遅延蛍光性は図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TADF1と前記化合物TH-2とを、化合物TADF1の割合が12質量%となるように石英基板上に共蒸着し、膜厚100 nmの薄膜を形成して試料を作製した。前記化合物TADF1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

50

在する。本実施例における遅延蛍光発光とは、P r o m p t 発光（即時発光）の量を X_p とし、D e l a y 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。

化合物 T A D F 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。

P r o m p t 発光と D e l a y 発光の量は、“N a t u r e 492, 234-238, 2012” 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、図 2 の装置、及び文献に記載された装置に限定されない。

化合物 T A D F 2、T A D F 3、及び T A D F 4 についても、化合物 T A D F 1 と同様にして確認した結果、化合物 T A D F 2、T A D F 3、及び T A D F 4 についても、 X_D / X_p の値が 0.05 以上であることが確認された。

【0356】

・一重項エネルギー S_1

化合物 T A D F 1、T A D F 2、T A D F 3、T A D F 4、及び D 1 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。

化合物 T A D F 1 の一重項エネルギー S_1 は、3.0 eV であった。

化合物 T A D F 2 の一重項エネルギー S_1 は、3.1 eV であった。

化合物 T A D F 3 の一重項エネルギー S_1 は、3.1 eV であった。

化合物 T A D F 4 の一重項エネルギー S_1 は、3.1 eV であった。

化合物 D 1 の一重項エネルギー S_1 は、2.7 eV であった。

【0357】

化合物 H 1 の一重項エネルギーは、文献（APPLIED PHYSICS LETTERS 101, 093306 (2012)）に記載されているように、4.0 eV である。

【0358】

・77 [K] におけるエネルギーギャップ

化合物 T A D F 1、T A D F 2、T A D F 3、T A D F 4、及び D 1 の 77 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} は、前述の方法により測定した。

化合物 T A D F 1 の T_{77K} は、2.8 eV であった。

化合物 T A D F 2 の T_{77K} は、2.8 eV であった。

化合物 T A D F 3 の T_{77K} は、2.8 eV であった。

化合物 T A D F 4 の T_{77K} は、2.8 eV であった。

化合物 D 1 の T_{77K} は、2.5 eV であった。

【0359】

・化合物の主ピーク波長

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。

化合物 D 1 の主ピーク波長は、462 nm であった。

【0360】

<有機 EL 素子の作製>

有機 EL 素子を以下のように作製し、評価した。

【0361】

（実施例 1）

25 mm \times 75 mm \times 1.1 mm 厚の ITO 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、UV オゾン洗浄を 30 分間行った。ITO 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HIを蒸着し、膜厚5nmの正孔注入層を形成した。

次に、正孔注入層上に、化合物HT1を蒸着し、HI膜上に膜厚80nmの第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物HT2を蒸着し、膜厚10nmの第二正孔輸送層を形成した。

さらに、この第二正孔輸送層上に、mCPを蒸着し、膜厚5nmの第三正孔輸送層を形成した。

次に、この第三正孔輸送層上に、第一の化合物としての化合物TADF1と、蛍光発光性の化合物としての化合物D1と、第二の化合物としての化合物H1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TADF1の濃度を12質量%とし、化合物D1の濃度を1質量%とし、化合物H1の濃度を87質量%とした。

次に、この発光層上に、化合物ET1を蒸着し、膜厚5nmの第一電子輸送層を形成した。

次に、この第一電子輸送層上に、化合物ET2を蒸着し、膜厚20nmの第二電子輸送層を形成した。

次に、この第二電子輸送層上に、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1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)/HI(5)/HT1(80)/HT2(10)/mCP(5)/H1:TADF1:D1(25, 87%:12%:1%)/ET1(5)/ET2(20)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚(単位: nm)を示す。また、同じく括弧内において、パーセント表示された数字は、発光層における第二の化合物、第一の化合物、及び蛍光発光性の化合物の割合(質量%)を示す。

【0362】

(実施例2)

実施例2の有機EL素子は、実施例1の発光層における化合物TADF1の濃度を24質量%とし、化合物D1の濃度を1質量%とし、化合物H1の濃度を75質量%としたこと以外、実施例1と同様にして作製した。

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)/HI(5)/HT1(80)/HT2(10)/mCP(5)/H1:TADF1:D1(25, 75%:24%:1%)/ET1(5)/ET2(20)/LiF(1)/Al(80)

【0363】

(実施例3)

実施例3の有機EL素子は、実施例1の発光層における化合物TADF1の濃度を50質量%とし、化合物D1の濃度を1質量%とし、化合物H1の濃度を49質量%としたこと以外、実施例1と同様にして作製した。

実施例3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)/HI(5)/HT1(80)/HT2(10)/mCP(5)/H1:TADF1:D1(25, 49%:50%:1%)/ET1(5)/ET2(20)/LiF(1)/Al(80)

【0364】

(実施例4)

実施例4の有機EL素子は、実施例2の発光層における化合物TADF1に代えて、化合物TADF2を用いたこと以外、実施例2と同様にして作製した。

実施例4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)/HI(5)/HT1(80)/HT2(10)/mCP(5)/H1:TADF2:D1(25, 75%:24%:1%)/ET1(5)/ET2(20)/LiF(1)/Al(80)

【0365】

10

20

30

40

50

(実施例 5)

実施例 5 の有機 E L 素子は、実施例 3 の発光層における化合物 T A D F 1 に代えて、化合物 T A D F 2 を用いたこと以外、実施例 3 と同様にして作製した。

実施例 5 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) /HI (5) /HT1 (80) /HT2 (10) /mCP (5) /H1:TADF2:D1 (25, 49%:50%:1%) /ET1 (5) /ET2 (20) /LiF (1) /Al (80)

【0366】

(実施例 6)

実施例 6 の有機 E L 素子は、実施例 2 の発光層における化合物 T A D F 1 に代えて、化合物 T A D F 3 を用いたこと以外、実施例 2 と同様にして作製した。

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) /HI (5) /HT1 (80) /HT2 (10) /mCP (5) /H1:TADF3:D1 (25, 75%:24%:1%) /ET1 (5) /ET2 (20) /LiF (1) /Al (80)

【0367】

(実施例 7)

実施例 7 の有機 E L 素子は、実施例 3 の発光層における化合物 T A D F 1 に代えて、化合物 T A D F 3 を用いたこと以外、実施例 3 と同様にして作製した。

実施例 7 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) /HI (5) /HT1 (80) /HT2 (10) /mCP (5) /H1:TADF3:D1 (25, 49%:50%:1%) /ET1 (5) /ET2 (20) /LiF (1) /Al (80)

【0368】

(実施例 8)

実施例 8 の有機 E L 素子は、実施例 2 の発光層における化合物 T A D F 1 に代えて、化合物 T A D F 4 を用いたこと以外、実施例 2 と同様にして作製した。

実施例 8 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) /HI (5) /HT1 (80) /HT2 (10) /mCP (5) /H1:TADF4:D1 (25, 75%:24%:1%) /ET1 (5) /ET2 (20) /LiF (1) /Al (80)

【0369】

(実施例 9)

実施例 9 の有機 E L 素子は、実施例 3 の発光層における化合物 T A D F 1 に代えて、化合物 T A D F 4 を用いたこと以外、実施例 3 と同様にして作製した。

実施例 9 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) /HI (5) /HT1 (80) /HT2 (10) /mCP (5) /H1:TADF4:D1 (25, 49%:50%:1%) /ET1 (5) /ET2 (20) /LiF (1) /Al (80)

【0370】

<有機 E L 素子の評価>

作製した有機 E L 素子について、以下の評価を行った。評価結果を表 1 に示す。

【0371】

・外部量子効率 E Q E、及び主ピーク波長 λ_p

電流密度が 0.1 mA/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 CS - 1000 (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。

また、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) を求めた。

【0372】

10

20

30

40

【表 1】

	第一の化合物	割合(%)	EQE (%)	主ピーク波長 λ_p (nm)
			@0.1mA/cm ²	
実施例1	TADF1	12	11.1	463
実施例2	TADF1	24	14.0	464
実施例3	TADF1	50	14.3	465
実施例4	TADF2	24	11.4	463
実施例5	TADF2	50	12.1	465
実施例6	TADF3	24	8.3	463
実施例7	TADF3	50	10.2	464
実施例8	TADF4	24	12.5	463
実施例9	TADF4	50	11.9	464

10

【0373】

第一の化合物として前記一般式(1)で表される化合物と、蛍光発光性の化合物と、を
発光層に含む実施例1~9の有機EL素子は、高い発光効率を示した。

20

【0374】

(実施例10)

25mm×75mm×1.1mm厚のITO透明電極(陽極)付きガラス基板(ジオマ
テック株式会社製)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、UV
オゾン洗浄を30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HIを
蒸着し、膜厚5nmの正孔注入層を形成した。

次に、正孔注入層上に、化合物HT1を蒸着し、HI膜上に膜厚80nmの第一正孔輸
送層を形成した。

30

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物HT2を蒸着し、膜厚10nmの第二正孔輸
送層を形成した。

さらに、この第二正孔輸送層上に、mCPを蒸着し、膜厚5nmの第三正孔輸送層を形
成した。

次に、この第三正孔輸送層上に、第一の化合物としての化合物TADF1と、第二の化
合物としての化合物H1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TADF1の濃度を12質量%とし、化合物H1の濃度を88質量%とした。

次に、この発光層上に、化合物ET1を蒸着し、膜厚5nmの第一電子輸送層を形成し
た。

40

次に、この第一電子輸送層上に、化合物ET2を蒸着し、膜厚20nmの第二電子輸
送層を形成した。

次に、この第二電子輸送層上に、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10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)/HI(5)/HT1(80)/HT2(10)/mCP(5)/H1:TADF1(25, 88%:12%)/ET1(5)
) /ET2(20)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚(単位: nm)を示す。また、同じく括弧内において、パ

50

ーセント表示された数字は、発光層における第二の化合物、及び第一の化合物の割合（質量％）を示す。

【0375】

（実施例11）

実施例11の有機EL素子は、実施例10の発光層における化合物TADF1に代えて、化合物TADF2を用い、化合物TADF2の濃度を24質量％とし、化合物H1の濃度を76質量％としたこと以外、実施例10と同様にして作製した。

実施例11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)/HI(5)/HT1(80)/HT2(10)/mCP(5)/H1:TADF2(25, 76%:24%)/ET1(5)/ET2(20)/LiF(1)/Al(80)

10

【0376】

（実施例12）

実施例12の有機EL素子は、実施例11の発光層における化合物TADF2に代えて、化合物TADF4を用いこと以外、実施例11と同様にして作製した。

実施例12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)/HI(5)/HT1(80)/HT2(10)/mCP(5)/H1:TADF4(25, 76%:24%)/ET1(5)/ET2(20)/LiF(1)/Al(80)

【0377】

（比較例1）

比較例1の有機EL素子は、実施例11の発光層における化合物TADF2に代えて、化合物Ref-1を用いたこと以外、実施例11と同様にして作製した。

20

比較例1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)/HI(5)/HT1(80)/HT2(10)/mCP(5)/H1:ref-1(25, 76%:24%)/ET1(5)/ET2(20)/LiF(1)/Al(80)

【0378】

<有機EL素子の評価>

作製した有機EL素子の外部量子効率EQE、及び主ピーク波長 λ_p について、前述と同様の方法により評価を行った。評価結果を表2に示す。

【0379】

【表2】

30

	第一の化合物	割合(%)	EQE(%)	主ピーク波長 λ_p (nm)
			@0.1mA/cm ²	
実施例10	TADF1	12	15.2	473
実施例11	TADF2	24	9.8	467
実施例12	TADF4	24	8.7	468
比較例1	Ref-1	24	6.6	472

40

【0380】

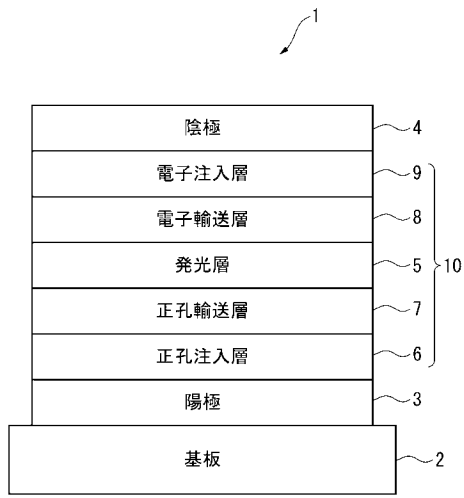
第一の化合物として前記一般式(1)で表される化合物と、第一の化合物の S_1 (M1)より大きい一重項エネルギー S_1 (M2)の第二の化合物とを発光層に含む実施例10~12の有機EL素子は、比較例1の有機EL素子に比べて、高い発光効率を示した。

【符号の説明】

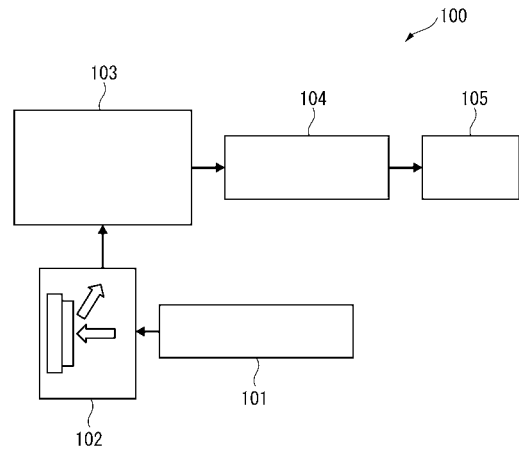
【0381】

1...有機EL素子、3...陽極、4...陰極、5...発光層、7...正孔輸送層、8...電子輸送層。

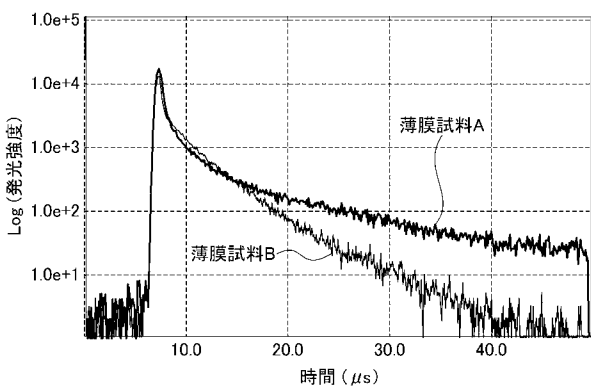
【 図 1 】



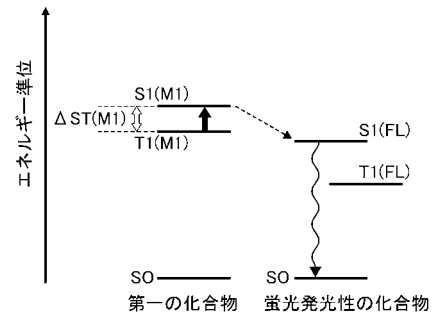
【 図 2 】



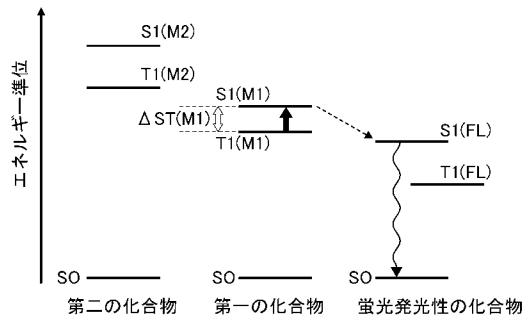
【 図 3 】



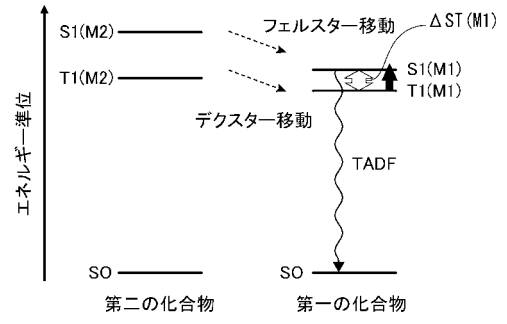
【 図 4 】



【 図 5 】



【 図 6 】



フロントページの続き

Fターム(参考) 3K107 AA01 BB01 BB02 CC04 DD53 DD59 DD66 DD68 DD69 DD71
DD74 FF19
4C063 AA03 AA05 BB02 CC29 DD08 EE10

专利名称(译)	有机电致发光器件,电子器件和化合物		
公开(公告)号	JP2020113558A	公开(公告)日	2020-07-27
申请号	JP2017066380	申请日	2017-03-29
[标]申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
申请(专利权)人(译)	出光兴产株式会社		
[标]发明人	吉田 圭 齊藤 雅俊 荻原 俊成 吉崎 圭 河村 祐一郎		
发明人	吉田 圭 齊藤 雅俊 荻原 俊成 吉崎 圭 河村 祐一郎		
IPC分类号	H01L51/50 C07D403/14 C09K11/06		
FI分类号	H05B33/14.B H05B33/22.A H05B33/22.C C07D403/14.CSP C09K11/06.650		
F-TERM分类号	3K107/AA01 3K107/BB01 3K107/BB02 3K107/CC04 3K107/DD53 3K107/DD59 3K107/DD66 3K107/DD68 3K107/DD69 3K107/DD71 3K107/DD74 3K107/FF19 4C063/AA03 4C063/AA05 4C063/BB02 4C063/CC29 4C063/DD08 4C063/EE10		

摘要(译)

要解决的问题:提供一种能够提高发光效率的化合物以及一种有机电致发光器件。包括阳极,发光层和阴极,并且该发光层包括由以下通式(1)表示的第一化合物和荧光第二化合物,以及 (M1),第一化合物的单线态能量S₁ (M1)大于第二荧光化合物的S₁(FL)。A是由以下通式(1a)等表示的基团。[选择图]无

二の化合物のS₁ (FL)より大き
一般式(1a)等で表される基であ

