

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2022年9月22日(22.09.2022)



(10) 国際公開番号

WO 2022/196634 A1

(51) 国際特許分類:

H01L 51/50 (2006.01) C07D 491/048 (2006.01)
C07D 209/82 (2006.01) C07D 493/04 (2006.01)
C07D 405/02 (2006.01) C07D 519/00 (2006.01)
C07D 405/14 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2022/011316

(22) 国際出願日: 2022年3月14日(14.03.2022)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

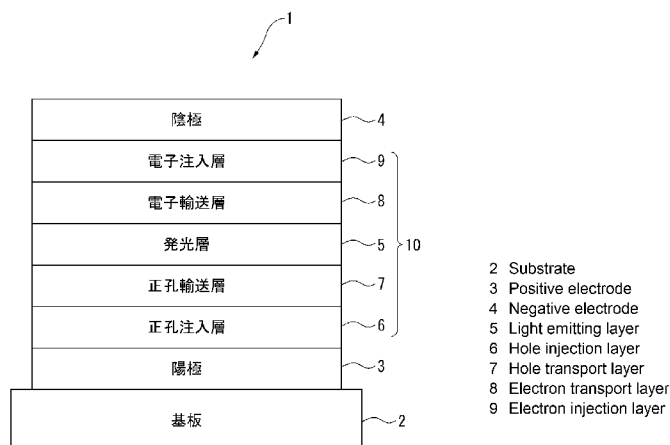
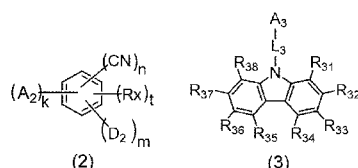
(30) 優先権データ:
特願 2021-041802 2021年3月15日(15.03.2021) JP

(71) 出願人: 出光興産株式会社(IDEMITSU KOSAN CO.,LTD.) [JP/JP]; 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 塩見 拓史(SHIOMI Takushi); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 松本 尚人(MATSUMOTO Hisato); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 甚出 行俊(JINDE Yukitoshi); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 岸野 賢悟(KISHINO Kengo); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 寺田 一輝(TERADA Kazuki); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目2番1号

(54) Title: ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT AND ELECTRONIC DEVICE

(54) 発明の名称: 有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器



(57) Abstract: An organic electroluminescent element (1) which comprises a positive electrode (3), a negative electrode (4), and a light emitting layer (5) that is interposed between the positive electrode (3) and the negative electrode (4), wherein: the light emitting layer (5) comprises a delayed fluorescent compound M2 that is represented by general formula (2) and a compound M3 that is represented by general formula (3); and the singlet energy $S_1(M2)$ of the compound M2 and the singlet energy $S_1(M3)$ of the compound M3 satisfy the relation of the numerical

号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 安川 圭一 (YASUKAWA Keichi); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目 2 番 1 号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP). 荻原 俊成 (OGIWARA Toshinari); 〒1008321 東京都千代田区大手町一丁目 2 番 1 号 出光興産株式会社内 Tokyo (JP).

(74) 代理人: 特許業務法人樹之下知的財産事務所 (KINOSHITA & ASSOCIATES); 〒1670051 東京都杉並区荻窪五丁目 2 6 番 1 3 号 3 階 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

formula (1) below. (1): $S_1(M3) > S_1(M2)$

(57) 要約: 陽極 (3) と、陰極 (4) と、陽極 (3) と陰極 (4) との間に含まれる発光層 (5) と、を有し、発光層 (5) は、下記一般式 (2) で表される遅延蛍光性の化合物 M 2 と、下記一般式 (3) で表される化合物 M 3 と、を含み、化合物 M 2 の一重項エネルギー $S_1(M2)$ と、化合物 M 3 の一重項エネルギー $S_1(M3)$ とが、下記数式 (数 1) の関係を満たす、有機エレクトロルミネッセンス素子 (1)。 $S_1(M3) > S_1(M2) \dots$ (数 1)

明 細 書

発明の名称：有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器 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及び電子機器に関する。

背景技術

[0002] 有機エレクトロルミネッセンス素子（以下、「有機EL素子」という場合がある。）に電圧を印加すると、陽極から正孔が発光層に注入され、また陰極から電子が発光層に注入される。そして、発光層において、注入された正孔と電子とが再結合し、励起子が形成される。このとき、電子スピンの統計則により、一重項励起子が25%の割合で生成し、及び三重項励起子が75%の割合で生成する。

一重項励起子からの発光を用いる蛍光型の有機EL素子は、携帯電話及びテレビ等のフルカラーディスプレイへ応用されつつあるが、内部量子効率25%が限界といわれている。そのため、有機EL素子の性能を向上するための検討が行われている。有機EL素子の性能としては、例えば、輝度、発光波長、色度、発光効率、駆動電圧、及び寿命が挙げられる。

[0003] 例えば、一重項励起子に加えて三重項励起子を利用して、有機EL素子をさらに効率的に発光させることが期待されている。このような背景から、熱活性化遅延蛍光（以下、単に「遅延蛍光」という場合がある。）を利用した高効率の蛍光型の有機EL素子が提案され、研究がなされている。

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

熱活性化遅延蛍光性（TADF性）を示す化合物（以下、遅延蛍光性化合物又はTADF性化合物と称する場合がある。）としては、例えば、分子内に、ドナー部位とアクセプター部位とが結合した化合物が知られている。

[0004] 例えば、特許文献1及び特許文献2には、遅延蛍光性化合物を用いた有機エレクトロルミネッセンス素子が記載されている。

先行技術文献

特許文献

[0005] 特許文献1：国際公開第2019／195104号

特許文献2：国際公開第2019／107934号

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0006] ディスプレイ等の電子機器の性能を向上させるために、有機エレクトロルミネッセンス素子の性能の更なる向上が要望されている。

[0007] 本発明の目的は、高性能な、特に長寿命かつ発光効率が高い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。

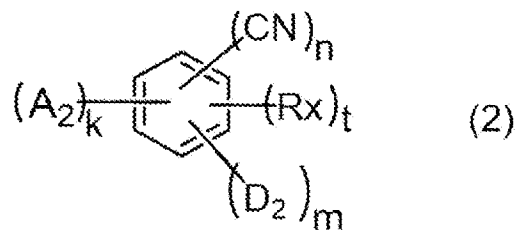
課題を解決するための手段

[0008] 本発明の一態様によれば、陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に含まれる発光層と、を有し、前記発光層は、下記一般式（2）で表される遅延蛍光性の化合物M2と、下記一般式（3）で表される化合物M3と、を含み、前記化合物M2の一重項エネルギー $S_1(M2)$ と、前記化合物M3の一重項エネルギー $S_1(M3)$ とが、下記数式（数1）の関係を満たす、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

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

[0009]

[化1]



[0010] (前記一般式(2)において、

A₂は、下記一般式(21)で表される基であり、D₂は、下記一般式(22)で表される基であり、

CNは、シアノ基であり、

kは、1、2、3又は4であり、

mは、1、2、3又は4であり、

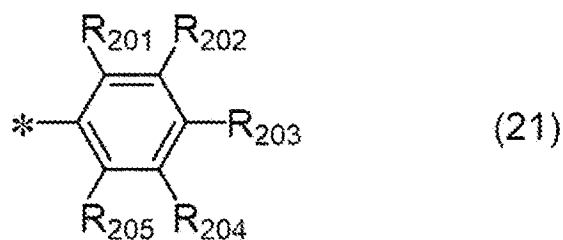
nは、1又は2であり、

tは、0、1、2又は3であり、

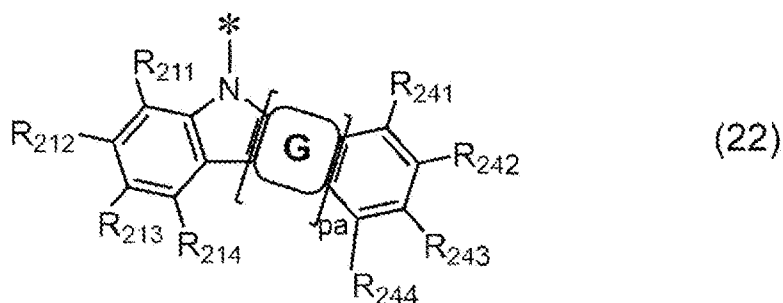
k + m + n + t = 6であり、

kが2、3又は4のとき、複数のA₂は、互いに同一であるか又は異なり、mが2、3又は4のとき、複数のD₂は、互いに同一であるか又は異なり、tが2又は3のとき、複数のR_xは、互いに同一であるか又は異なる。))

[0011] [化2]



[0012] [化3]



[0013] (前記一般式 (21) において、

$R_{201} \sim R_{205}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記一般式 (22) において、

$R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記一般式 (21) 及び (22) 中の * は、それぞれ、前記一般式 (2) 中のベンゼン環との結合位置を示す。)

(前記一般式 (2) の R_x 、前記一般式 (21) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{201} \sim R_{205}$ 、並びに前記一般式 (22) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

— Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903}) で表される基、

— O — (R_{904}) で表される基、

— S — (R_{905}) で表される基、

— N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

—C(=O)R₉₀₈ で表される基、

—COOR₉₀₉ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

—P(=O)(R₉₃₁)(R₉₃₂) で表される基、

—Ge(R₉₃₃)(R₉₃₄)(R₉₃₅) で表される基、

—B(R₉₃₆)(R₉₃₇) で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

前記一般式 (22) において、

環 G は、それぞれ独立に、下記一般式 (24) 及び一般式 (25) で表される環構造からなる群から選択されるいずれかの環構造であり、

環 G は、隣接する環と任意の位置で縮合し、

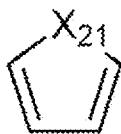
p a は、1、2、3 又は 4 であり、

p a が 2、3 又は 4 の場合、複数の環 G は、互いに同一であるか、又は異なる。))

[0014] [化4]



(24)



(25)

[0015] (前記一般式 (24) において、

R₂₁₉ 及び R₂₂₀ からなる組が、

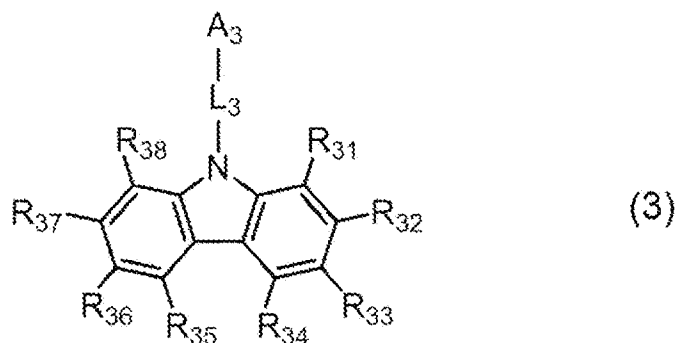
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、
前記一般式（２５）において、
 X_{21} は、硫黄原子または酸素原子であり、
置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{219} 及び R_{220} は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数１～５０のハロアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数２～５０のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数３～５０のシクロアルキル基、
－ $S_i(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基、
－ $O-(R_{904})$ で表される基、
－ $S-(R_{905})$ で表される基、
－ $N(R_{906})(R_{907})$ で表される基、
置換もしくは無置換の炭素数７～５０のアラルキル基、
－ $C(=O)R_{908}$ で表される基、
－ $COOR_{909}$ で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、
－ $P(=O)(R_{931})(R_{932})$ で表される基、
－ $Ge(R_{933})(R_{934})(R_{935})$ で表される基、
－ $B(R_{936})(R_{937})$ で表される基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数６～５０のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数５～５０の複素環基である。)

[0016]

[化5]



[0017] (前記一般式 (3) において、

 A_3 は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

 L_3 は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、及び置換
もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基からなる群から選
択される 2 つの基が結合して形成される 2 価の基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリーレン基及び置換もし
くは無置換の環形成原子数 5 ～ 30 の 2 価の複素環基からなる群から選択さ
れる 3 つの基が結合して形成される 2 価の基であり、

 $R_{31} \sim R_{38}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

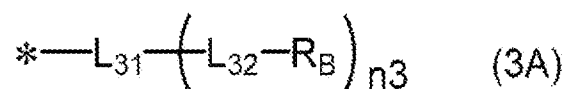
互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置
換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、
 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基、
 $-O-(R_{904})$ で表される基、
 $-S-(R_{905})$ で表される基、
 $-N(R_{906})(R_{907})$ で表される基、
 置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、
 $-C(=O)R_{908}$ で表される基、
 $-COOR_{909}$ で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 $-P(=O)(R_{931})(R_{932})$ で表される基、
 $-Ge(R_{933})(R_{934})(R_{935})$ で表される基、
 $-B(R_{936})(R_{937})$ で表される基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基、又は
 下記一般式 (3A) で表される基である。)

[0018] [化6]



[0019] (前記一般式 (3A) において、

R_B は、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

—S i (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

—O— (R₉₀₄) で表される基、

—S— (R₉₀₅) で表される基、

—N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

—C (=O) R₉₀₈ で表される基、

—C O O R₉₀₉ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

—P (=O) (R₉₃₁) (R₉₃₂) で表される基、

—G e (R₉₃₃) (R₉₃₄) (R₉₃₅) で表される基、

—B (R₉₃₆) (R₉₃₇) で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

R_B が複数存在するとき、複数の R_B は、互いに同一であるか又は異なり、

L₃₁ は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、当該アリーレン基から誘導される 3 価の基、4 価の基、5 価の基もしくは 6 価の基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基、当該複素環基から誘導される、3 価の基、4 価の基、5 価の基もしくは 6 価の基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基からなる群から選

択される2つの基が結合して形成される2価の基、当該2価の基から誘導される3価の基、4価の基、5価の基もしくは6価の基であり、

L_{32} は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の2価の複素環基であり、

n_3 は、1、2、3、4又は5であり、

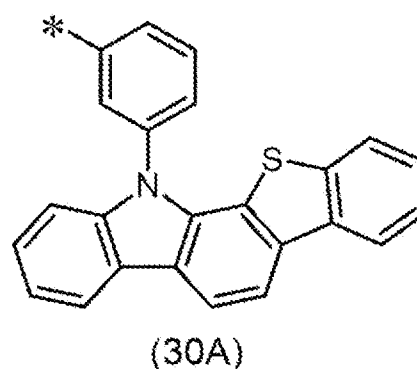
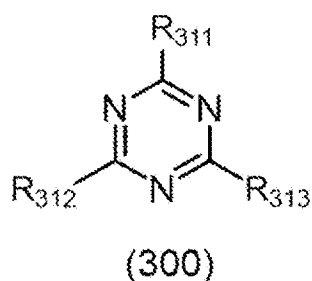
L_{31} が単結合の場合、 n_3 は1であり、 L_{32} が前記一般式(3)中における六員環の炭素原子と結合し、

L_{32} が複数存在するとき、複数の L_{32} は、互いに同一であるか又は異なり、

*)は、前記一般式(3)中における六員環の炭素原子との結合部位である。)

(但し、前記化合物M3が、下記一般式(300)で表される化合物M×3である場合は無い。)

[0020] [化7]



[0021] (前記一般式(300)において、

R_{311} がフェニル構造であり、

R_{312} がビフェニル構造であり、

R_{313} が前記一般式(30A)で表される構造である。)

(前記化合物M2及び前記化合物M3において、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{906} 、 R_{907} 、 R_{908} 、 R_{909} 、 R_{931} 、 R_{932} 、 R_{933} 、 R_{934}

、 R_{935} 、 R_{936} 及び R_{937} は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、
 R_{901} が複数存在する場合、複数の R_{901} は、互いに同一であるか又は異なり、
 R_{902} が複数存在する場合、複数の R_{902} は、互いに同一であるか又は異なり、
 R_{903} が複数存在する場合、複数の R_{903} は、互いに同一であるか又は異なり、
 R_{904} が複数存在する場合、複数の R_{904} は、互いに同一であるか又は異なり、
 R_{905} が複数存在する場合、複数の R_{905} は、互いに同一であるか又は異なり、
 R_{906} が複数存在する場合、複数の R_{906} は、互いに同一であるか又は異なり、
 R_{907} が複数存在する場合、複数の R_{907} は、互いに同一であるか又は異なり、
 R_{908} が複数存在する場合、複数の R_{908} は、互いに同一であるか又は異なり、
 R_{909} が複数存在する場合、複数の R_{909} は、互いに同一であるか又は異なり、
 R_{931} が複数存在する場合、複数の R_{931} は、互いに同一であるか又は異なり、
 R_{932} が複数存在する場合、複数の R_{932} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{933} が複数存在する場合、複数の R_{933} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{934} が複数存在する場合、複数の R_{934} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{935} が複数存在する場合、複数の R_{935} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{936} が複数存在する場合、複数の R_{936} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{937} が複数存在する場合、複数の R_{937} は、互いに同一であるか又は異なる。))

[0022] 本発明の一態様によれば、前述の本発明の一態様に係る有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器が提供される。

[0023] 本発明の一態様によれば、高性能な、特に長寿命かつ発光効率が高い有機エレクトロルミネッセンス素子を提供することができる。本発明の一態様によれば、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。

[図2]過渡PLを測定する装置の概略図である。

[図3]過渡PLの減衰曲線の一例を示す図である。

[図4]本発明の第一実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の発光層における化合物M3及び化合物M2のエネルギー準位の関係を示す図である。

[図5]本発明の第二実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の発光層における化合物M3、化合物M2及び化合物M1のエネルギー準位、並びにエネルギー移動の関係を示す図である。

発明を実施するための形態

[0025] [定義]

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

[0026] 本明細書において、化学構造式中、「R」等の記号や重水素原子を表す「D」が明示されていない結合可能位置には、水素原子、即ち、軽水素原子、重水素原子、又は三重水素原子が結合しているものとする。

[0027] 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、及び複素環化合物）の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記される「環形成炭素数」については、別途記載の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、ピリジン環は環形成炭素数5であり、フラン環は環形成炭素数4である。また、例えば、9, 9-ジフェニルフルオレニル基の環形成炭素数は13であり、9, 9'-スピロビフルオレニル基の環形成炭素数は25である。

また、ベンゼ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、ベンゼン環の環形成炭素数に含めない。そのため、アルキル基が置換しているベンゼン環の環形成炭素数は、6である。また、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、ナフタレン環の環形成炭素数に含めない。そのため、アルキル基が置換しているナフタレン環の環形成炭素数は、10である。

[0028] 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、及び環集合）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、及び複素環化合物）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（例えば、環を構成する原子の結

合を末端する水素原子)や、当該環が置換基によって置換される場合の置換基に含まれる原子は環形成原子数には含まない。以下で記される「環形成原子数」については、別途記載のない限り同様とする。例えば、ピリジン環の環形成原子数は6であり、キナゾリン環の環形成原子数は10であり、フラン環の環形成原子数は5である。例えば、ピリジン環に結合している水素原子、又は置換基を構成する原子の数は、ピリジン環形成原子数の数に含めない。そのため、水素原子、又は置換基が結合しているピリジン環の環形成原子数は、6である。また、例えば、キナゾリン環の炭素原子に結合している水素原子、又は置換基を構成する原子については、キナゾリン環の環形成原子数の数に含めない。そのため、水素原子、又は置換基が結合しているキナゾリン環の環形成原子数は10である。

[0029] 本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「炭素数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の炭素数を表し、置換されている場合の置換基の炭素数を含めない。ここで、「 YY 」は、「 XX 」よりも大きく、「 XX 」は、1以上の整数を意味し、「 YY 」は、2以上の整数を意味する。

[0030] 本明細書において、「置換もしくは無置換の原子数 $XX \sim YY$ の ZZ 基」という表現における「原子数 $XX \sim YY$ 」は、 ZZ 基が無置換である場合の原子数を表し、置換されている場合の置換基の原子数を含めない。ここで、「 YY 」は、「 XX 」よりも大きく、「 XX 」は、1以上の整数を意味し、「 YY 」は、2以上の整数を意味する。

[0031] 本明細書において、無置換の ZZ 基とは「置換もしくは無置換の ZZ 基」が「無置換の ZZ 基」である場合を表し、置換の ZZ 基とは「置換もしくは無置換の ZZ 基」が「置換の ZZ 基」である場合を表す。

本明細書において、「置換もしくは無置換の ZZ 基」という場合における「無置換」とは、 ZZ 基における水素原子が置換基と置き換わっていないことを意味する。「無置換の ZZ 基」における水素原子は、軽水素原子、重水素原子、又は三重水素原子である。

また、本明細書において、「置換もしくは無置換のZZ基」という場合における「置換」とは、ZZ基における1つ以上の水素原子が、置換基と置き換わっていることを意味する。「AA基で置換されたBB基」という場合における「置換」も同様に、BB基における1つ以上の水素原子が、AA基と置き換わっていることを意味する。

[0032] 「本明細書に記載の置換基」

以下、本明細書に記載の置換基について説明する。

[0033] 本明細書に記載の「無置換のアリール基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30、より好ましくは6～18である。

本明細書に記載の「無置換の複素環基」の環形成原子数は、本明細書に別途記載のない限り、5～50であり、好ましくは5～30、より好ましくは5～18である。

本明細書に記載の「無置換のアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～20、より好ましくは1～6である。

本明細書に記載の「無置換のアルケニル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、2～50であり、好ましくは2～20、より好ましくは2～6である。

本明細書に記載の「無置換のアルキニル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、2～50であり、好ましくは2～20、より好ましくは2～6である。

本明細書に記載の「無置換のシクロアルキル基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、3～50であり、好ましくは3～20、より好ましくは3～6である。

本明細書に記載の「無置換のアリーレン基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30、より好ましくは6～18である。

本明細書に記載の「無置換の2価の複素環基」の環形成原子数は、本明細書に別途記載のない限り、5～50であり、好ましくは5～30、より好ましくは5～18である。

本明細書に記載の「無置換のアルキレン基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～20、より好ましくは1～6である。

[0034] ・「置換もしくは無置換のアリール基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」の具体例（具体例群G1）としては、以下の無置換のアリール基（具体例群G1A）及び置換のアリール基（具体例群G1B）等が挙げられる。（ここで、無置換のアリール基とは「置換もしくは無置換のアリール基」が「無置換のアリール基」である場合を指し、置換のアリール基とは「置換もしくは無置換のアリール基」が「置換のアリール基」である場合を指す。）本明細書において、単に「アリール基」という場合は、「無置換のアリール基」と「置換のアリール基」の両方を含む。

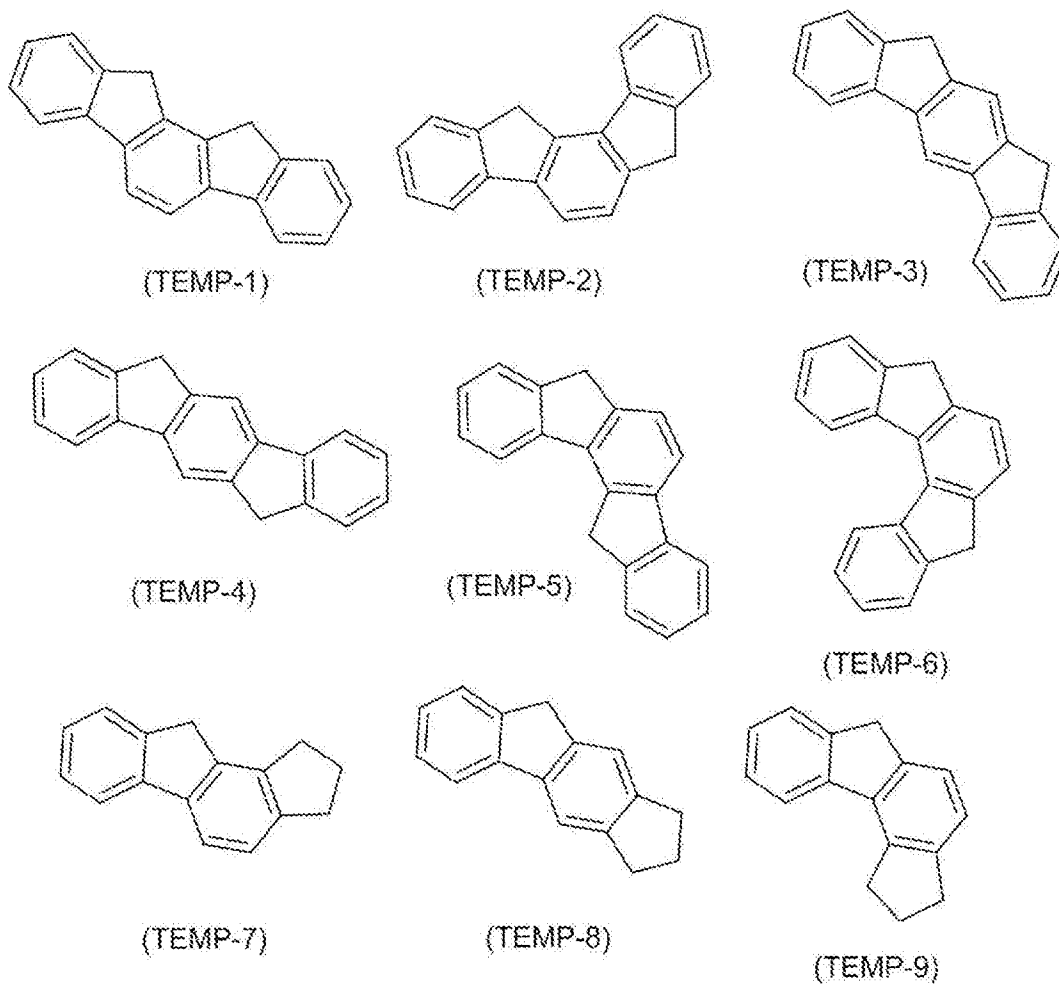
「置換のアリール基」は、「無置換のアリール基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアリール基」としては、例えば、下記具体例群G1Aの「無置換のアリール基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び下記具体例群G1Bの置換のアリール基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のアリール基」の例、及び「置換のアリール基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアリール基」には、下記具体例群G1Bの「置換のアリール基」におけるアリール基自体の炭素原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び下記具体例群G1Bの「置換のアリール基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0035] ・無置換のアリール基（具体例群G1A）：フェニル基、
p-ビフェニル基、
m-ビフェニル基、

o-ビフェニル基、
p-ターフェニル-4-イル基、
p-ターフェニル-3-イル基、
p-ターフェニル-2-イル基、
m-ターフェニル-4-イル基、
m-ターフェニル-3-イル基、
m-ターフェニル-2-イル基、
o-ターフェニル-4-イル基、
o-ターフェニル-3-イル基、
o-ターフェニル-2-イル基、
1-ナフチル基、
2-ナフチル基、
アントリル基、
ベンゾアントリル基、
フェナントリル基、
ベンゾフェナントリル基、
フェナレニル基、
ピレニル基、
クリセニル基、
ベンゾクリセニル基、
トリフェニレニル基、
ベンゾトリフェニレニル基、
テトラセニル基、
ペンタセニル基、
フルオレニル基、
9, 9'-スピロビフルオレニル基、
ベンゾフルオレニル基、
ジベンゾフルオレニル基、

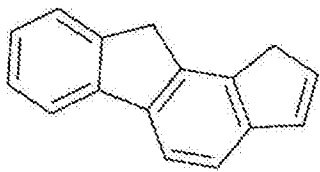
フルオランテニル基、
ベンゾフルオランテニル基、
ペリレニル基、及び下記一般式（TEMP-1）～（TEMP-15）で表
される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価のアリー
ル基。

[0036] [化8]

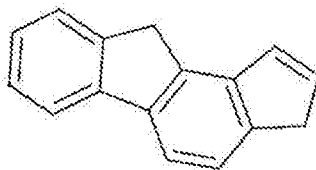


[0037]

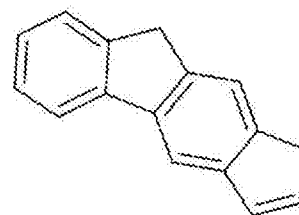
[化9]



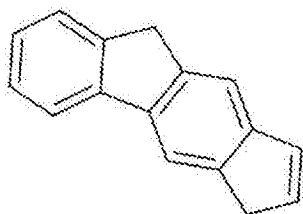
(TEMP-10)



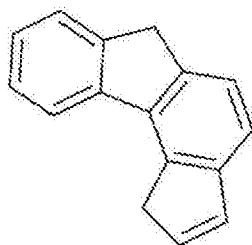
(TEMP-11)



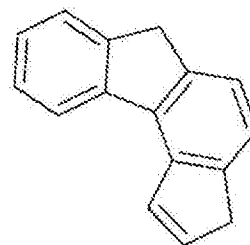
(TEMP-12)



(TEMP-13)



(TEMP-14)



(TEMP-15)

[0038] ・置換のアリール基（具体例群G 1 B）：o-トリル基、

m-トリル基、

p-トリル基、

パラ-キシリル基、

メタ-キシリル基、

オルト-キシリル基、

パラ-イソプロピルフェニル基、

メタ-イソプロピルフェニル基、

オルト-イソプロピルフェニル基、

パラ-t-ブチルフェニル基、

メタ-t-ブチルフェニル基、

オルト-t-ブチルフェニル基、

3, 4, 5-トリメチルフェニル基、

9, 9-ジメチルフルオレニル基、

9, 9-ジフェニルフルオレニル基、

9, 9-ビス(4-メチルフェニル)フルオレニル基、

9, 9-ビス(4-イソプロピルフェニル)フルオレニル基、

9, 9-ビス(4-tert-ブチルフェニル)フルオレニル基、
シアノフェニル基、
トリフェニルシリルフェニル基、
トリメチルシリルフェニル基、
フェニルナフチル基、
ナフチルフェニル基、及び前記一般式(TEMP-1)～(TEMP-15)
で表される環構造から誘導される1価の基の1つ以上の水素原子が置換基
と置き換わった基。

[0039] ・「置換もしくは無置換の複素環基」

本明細書に記載の「複素環基」は、環形成原子にヘテロ原子を少なくとも
1つ含む環状の基である。ヘテロ原子の具体例としては、窒素原子、酸素原
子、硫黄原子、ケイ素原子、リン原子、及びホウ素原子が挙げられる。

本明細書に記載の「複素環基」は、単環の基であるか、又は縮合環の基で
ある。

本明細書に記載の「複素環基」は、芳香族複素環基であるか、又は非芳香
族複素環基である。

本明細書に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」の具体例(具体例群
G2)としては、以下の無置換の複素環基(具体例群G2A)、及び置換の
複素環基(具体例群G2B)等が挙げられる。(ここで、無置換の複素環基
とは「置換もしくは無置換の複素環基」が「無置換の複素環基」である場合
を指し、置換の複素環基とは「置換もしくは無置換の複素環基」が「置換の
複素環基」である場合を指す。)本明細書において、単に「複素環基」とい
う場合は、「無置換の複素環基」と「置換の複素環基」の両方を含む。

「置換の複素環基」は、「無置換の複素環基」の1つ以上の水素原子が置
換基と置き換わった基を意味する。「置換の複素環基」の具体例は、下記具
体例群G2Aの「無置換の複素環基」の水素原子が置き換わった基、及び下
記具体例群G2Bの置換の複素環基の例等が挙げられる。尚、ここに列挙し
た「無置換の複素環基」の例や「置換の複素環基」の例は、一例に過ぎず、

本明細書に記載の「置換の複素環基」には、具体例群G 2 Bの「置換の複素環基」における複素環基自体の環形成原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G 2 Bの「置換の複素環基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0040] 具体例群G 2 Aは、例えば、以下の窒素原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 1）、酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 2）、硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 3）、及び下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の複素環基（具体例群G 2 A 4）を含む。

[0041] 具体例群G 2 Bは、例えば、以下の窒素原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 1）、酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 2）、硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 3）、及び下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から誘導される1価の複素環基の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基（具体例群G 2 B 4）を含む。

[0042] ・窒素原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 1）：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、
オキサゾリル基、
イソオキサゾリル基、
オキサジアゾリル基、
チアゾリル基、
イソチアゾリル基、
チアジアゾリル基、
ピリジル基、

ピリダジニル基、
ピリミジニル基、
ピラジニル基、
トリアジニル基、
インドリル基、
イソインドリル基、
インドリジニル基、
キノリジニル基、
キノリル基、
イソキノリル基、
シンノリル基、
フタラジニル基、
キナゾリニル基、
キノキサリニル基、
ベンゾイミダゾリル基、
インダゾリル基、
フェナントロリニル基、
フェナントリジニル基、
アクリジニル基、
フェナジニル基、
カルバゾリル基、
ベンゾカルバゾリル基、
モルホリノ基、
フェノキサジニル基、
フェノチアジニル基、
アザカルバゾリル基、及びジアザカルバゾリル基。

[0043] ・酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 2）：フリル基、
オキサゾリル基、

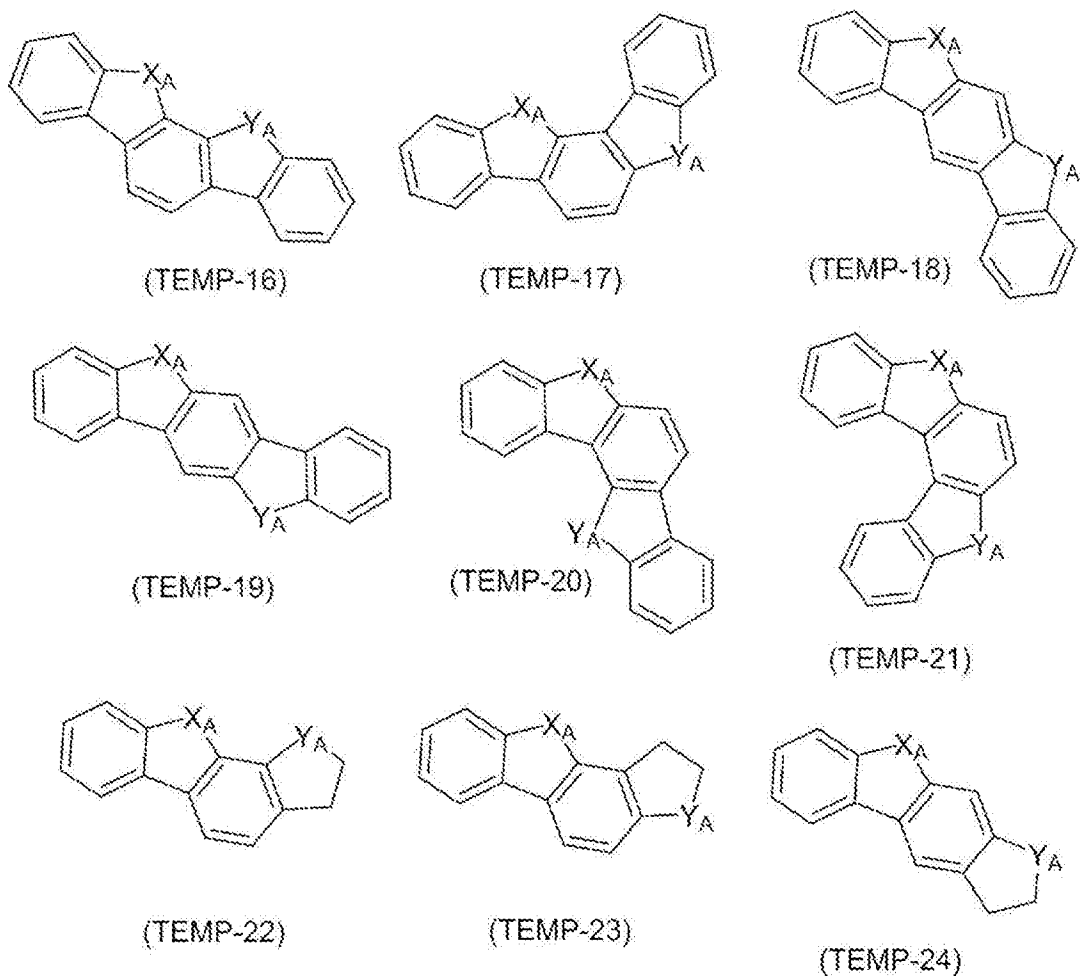
イソオキサゾリル基、
オキサジアゾリル基、
キサンテニル基、
ベンゾフラニル基、
イソベンゾフラニル基、
ジベンゾフラニル基、
ナフトベンゾフラニル基、
ベンゾオキサゾリル基、
ベンゾイソキサゾリル基、
フェノキサジニル基、
モルホリノ基、
ジナフトフラニル基、
アザジベンゾフラニル基、
ジアザジベンゾフラニル基、
アザナフトベンゾフラニル基、及びジアザナフトベンゾフラニル基。

[0044] ・硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群G 2 A 3）：チエニル基、
チアゾリル基、
イソチアゾリル基、
チアジアゾリル基、
ベンゾチオフェニル基（ベンゾチエニル基）、
イソベンゾチオフェニル基（イソベンゾチエニル基）、
ジベンゾチオフェニル基（ジベンゾチエニル基）、
ナフトベンゾチオフェニル基（ナフトベンゾチエニル基）、
ベンゾチアゾリル基、
ベンゾイソチアゾリル基、
フェノチアジニル基、
ジナフトチオフェニル基（ジナフトチエニル基）、
アザジベンゾチオフェニル基（アザジベンゾチエニル基）、

ジアザジベンゾチオフェニル基（ジアザジベンゾチエニル基）、
 アザナフトベンゾチオフェニル基（アザナフトベンゾチエニル基）、及びジ
 アザナフトベンゾチオフェニル基（ジアザナフトベンゾチエニル基）。

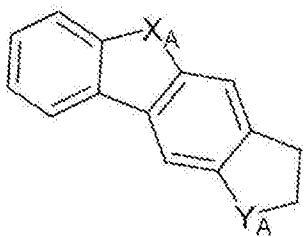
[0045] ・下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造か
 ら1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の複素環基（具体例群G
 2A4）：

[0046] [化10]

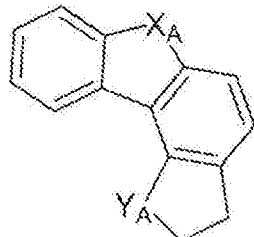


[0047]

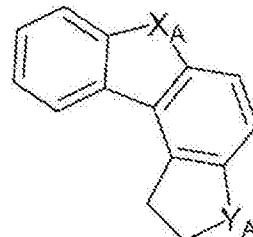
[化11]



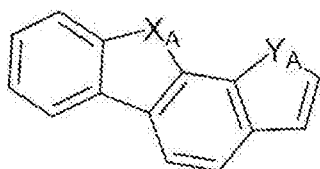
(TEMP-25)



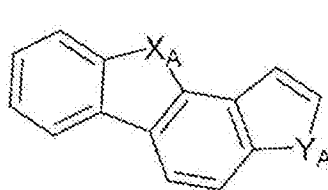
(TEMP-26)



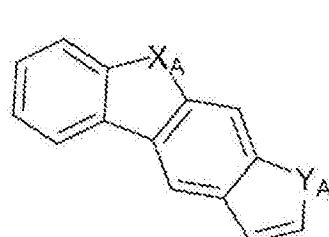
(TEMP-27)



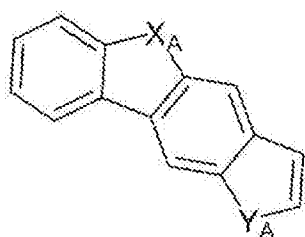
(TEMP-28)



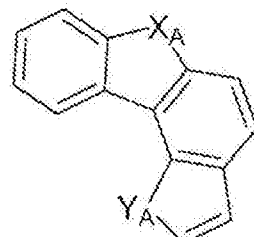
(TEMP-29)



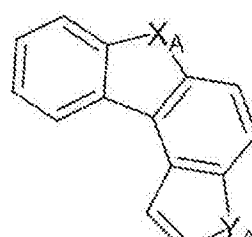
(TEMP-30)



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

[0048] 前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) において、 X_A 及び Y_A は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、NH、又は CH_2 である。ただし、 X_A 及び Y_A のうち少なくとも1つは、酸素原子、硫黄原子、又はNHである。

前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) において、 X_A 及び Y_A の少なくともいずれかがNH、又は CH_2 である場合、前記一般式 (TEMP-16) ~ (TEMP-33) で表される環構造から誘導される1価の複素環基には、これらNH、又は CH_2 から1つの水素原子を除いて得られる1価の基が含まれる。

[0049] ・窒素原子を含む置換の複素環基 (具体例群G2B1) : (9-フェニル)カルバゾリル基、

(9-ビフェニル)カルバゾリル基、
(9-フェニル)フェニルカルバゾリル基、
(9-ナフチル)カルバゾリル基、
ジフェニルカルバゾール-9-イル基、
フェニルカルバゾール-9-イル基、
メチルベンゾイミダゾリル基、
エチルベンゾイミダゾリル基、
フェニルトリアジニル基、
ビフェニルトリアジニル基、
ジフェニルトリアジニル基、
フェニルキナゾリニル基、及びビフェニルキナゾリニル基。

[0050] ・酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 2）：フェニルジベンゾフラニル基、
メチルジベンゾフラニル基、
t-ブチルジベンゾフラニル基、及びスピロ[9H-キサンテン-9, 9'-[9H]フルオレン]の1価の残基。

[0051] ・硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群G 2 B 3）：フェニルジベンゾチオフェニル基、
メチルジベンゾチオフェニル基、
t-ブチルジベンゾチオフェニル基、及びスピロ[9H-チオキサンテン-9, 9'-[9H]フルオレン]の1価の残基。

[0052] ・前記一般式(TEMP-16)～(TEMP-33)で表される環構造から誘導される1価の複素環基の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基（具体例群G 2 B 4）：

[0053] 前記「1価の複素環基の1つ以上の水素原子」とは、該1価の複素環基の環形成炭素原子に結合している水素原子、XA及びYAの少なくともいずれかがNHである場合の窒素原子に結合している水素原子、及びXA及びYAの一方がCH₂である場合のメチレン基の水素原子から選ばれる1つ以上の

水素原子を意味する。

[0054] ・「置換もしくは無置換のアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」の具体例（具体例群G 3）としては、以下の無置換のアルキル基（具体例群G 3 A）及び置換のアルキル基（具体例群G 3 B）が挙げられる。（ここで、無置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「無置換のアルキル基」である場合を指し、置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「置換のアルキル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキル基」という場合は、「無置換のアルキル基」と「置換のアルキル基」の両方を含む。

「置換のアルキル基」は、「無置換のアルキル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルキル基」（具体例群G 3 A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び置換のアルキル基（具体例群G 3 B）の例等が挙げられる。本明細書において、「無置換のアルキル基」におけるアルキル基は、鎖状のアルキル基を意味する。そのため、「無置換のアルキル基」は、直鎖である「無置換のアルキル基」、及び分岐状である「無置換のアルキル基」が含まれる。尚、ここに列挙した「無置換のアルキル基」の例や「置換のアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアルキル基」には、具体例群G 3 Bの「置換のアルキル基」におけるアルキル基自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G 3 Bの「置換のアルキル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0055] ・無置換のアルキル基（具体例群G 3 A）：メチル基、

エチル基、

n－プロピル基、

イソプロピル基、

n－ブチル基、

イソブチル基、

s-ブチル基、及びt-ブチル基。

[0056] ・置換のアルキル基（具体例群G 3 B）：ヘプタフルオロプロピル基（異性体を含む）、

ペンタフルオロエチル基、

2, 2, 2-トリフルオロエチル基、及びトリフルオロメチル基。

[0057] ・「置換もしくは無置換のアルケニル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルケニル基」の具体例（具体例群G 4）としては、以下の無置換のアルケニル基（具体例群G 4 A）、及び置換のアルケニル基（具体例群G 4 B）等が挙げられる。（ここで、無置換のアルケニル基とは「置換もしくは無置換のアルケニル基」が「無置換のアルケニル基」である場合を指し、「置換のアルケニル基」とは「置換もしくは無置換のアルケニル基」が「置換のアルケニル基」である場合を指す。

）本明細書において、単に「アルケニル基」という場合は、「無置換のアルケニル基」と「置換のアルケニル基」の両方を含む。

「置換のアルケニル基」は、「無置換のアルケニル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルケニル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルケニル基」（具体例群G 4 A）が置換基を有する基、及び置換のアルケニル基（具体例群G 4 B）の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のアルケニル基」の例や「置換のアルケニル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアルケニル基」には、具体例群G 4 Bの「置換のアルケニル基」におけるアルケニル基自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G 4 Bの「置換のアルケニル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0058] ・無置換のアルケニル基（具体例群G 4 A）：ビニル基、

アリル基、

1-ブテニル基、

2-ブテニル基、及び3-ブテニル基。

- [0059] ・置換のアルケニル基（具体例群G 4 B）：1, 3-ブタンジエニル基、
1-メチルビニル基、
1-メチルアリル基、
1, 1-ジメチルアリル基、
2-メチルアリル基、及び1, 2-ジメチルアリル基。

- [0060] ・「置換もしくは無置換のアルキニル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキニル基」の具体例（具体例群G 5）としては、以下の無置換のアルキニル基（具体例群G 5 A）等が挙げられる。（ここで、無置換のアルキニル基とは、「置換もしくは無置換のアルキニル基」が「無置換のアルキニル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキニル基」という場合は、「無置換のアルキニル基」と「置換のアルキニル基」の両方を含む。

「置換のアルキニル基」は、「無置換のアルキニル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキニル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルキニル基」（具体例群G 5 A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基等が挙げられる。

- [0061] ・無置換のアルキニル基（具体例群G 5 A）：エチニル基。

- [0062] ・「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」の具体例（具体例群G 6）としては、以下の無置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 A）、及び置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 B）等が挙げられる。（ここで、無置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「無置換のシクロアルキル基」である場合を指し、置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「置換のシクロアルキル基」である場合を指す。）本明細書において、単に「シクロアルキル基」という場合は、「無置換のシクロアルキル基」と「置換のシクロアルキル基」の両方を含む。

「置換のシクロアルキル基」は、「無置換のシクロアルキル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のシクロアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のシクロアルキル基」（具体例群G 6 A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 B）の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のシクロアルキル基」の例や「置換のシクロアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のシクロアルキル基」には、具体例群G 6 Bの「置換のシクロアルキル基」におけるシクロアルキル基自体の炭素原子に結合する1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び具体例群G 6 Bの「置換のシクロアルキル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

[0063] ・無置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 A）：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、

1－アダマンチル基、

2－アダマンチル基、

1－ノルボルニル基、及び2－ノルボルニル基。

[0064] ・置換のシクロアルキル基（具体例群G 6 B）：4－メチルシクロヘキシル基。

[0065] ・「 $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ 」で表される基」

本明細書に記載の $-Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基の具体例（具体例群G 7）としては、

$-Si(G1)(G1)(G1)$ 、

$-Si(G1)(G2)(G2)$ 、

$-Si(G1)(G1)(G2)$ 、

$-Si(G2)(G2)(G2)$ 、

$-Si(G3)(G3)(G3)$ 、及び $-Si(G6)(G6)(G6)$

が挙げられる。ここで、

G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2 は、具体例群 G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

G 6 は、具体例群 G 6 に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。

—S i (G 1) (G 1) (G 1) における複数の G 1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

—S i (G 1) (G 2) (G 2) における複数の G 2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

—S i (G 1) (G 1) (G 2) における複数の G 1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

—S i (G 2) (G 2) (G 2) における複数の G 2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

—S i (G 3) (G 3) (G 3) における複数の G 3 は、互いに同一であるか、又は異なる。

—S i (G 6) (G 6) (G 6) における複数の G 6 は、互いに同一であるか、又は異なる。

[0066] ・「—O—(R₉₀₄)で表される基」

本明細書に記載の—O—(R₉₀₄)で表される基の具体例（具体例群 G 8）としては、

—O (G 1) 、

—O (G 2) 、

—O (G 3) 、及び—O (G 6)

が挙げられる。

ここで、

G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2 は、具体例群 G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

G 6 は、具体例群 G 6 に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。

[0067] ・「 $-S-(R_{905})$ で表される基」

本明細書に記載の $-S-(R_{905})$ で表される基の具体例（具体例群 G 9）としては、

$-S(G 1)$ 、

$-S(G 2)$ 、

$-S(G 3)$ 、及び $-S(G 6)$

が挙げられる。

ここで、

G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2 は、具体例群 G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

G 6 は、具体例群 G 6 に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。

[0068] ・「 $-N(R_{906})(R_{907})$ で表される基」

本明細書に記載の $-N(R_{906})(R_{907})$ で表される基の具体例（具体例群 G 10）としては、

—N (G 1) (G 1)、
—N (G 2) (G 2)、
—N (G 1) (G 2)、
—N (G 3) (G 3)、及び—N (G 6) (G 6)

が挙げられる。

ここで、

G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G 2 は、具体例群 G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

G 6 は、具体例群 G 6 に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。

—N (G 1) (G 1) における複数の G 1 は、互いに同一であるか、又は異なる。

—N (G 2) (G 2) における複数の G 2 は、互いに同一であるか、又は異なる。

—N (G 3) (G 3) における複数の G 3 は、互いに同一であるか、又は異なる。

—N (G 6) (G 6) における複数の G 6 は、互いに同一であるか、又は異なる。

[0069] ・「ハロゲン原子」

本明細書に記載の「ハロゲン原子」の具体例（具体例群 G 1 1）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る。

[0070] ・「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」は、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に

結合している少なくとも1つの水素原子がフッ素原子と置き換わった基を意味し、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している全ての水素原子がフッ素原子で置き換わった基（パーフルオロ基）も含む。「無置換のフルオロアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～30であり、より好ましくは1～18である。「置換のフルオロアルキル基」は、「フルオロアルキル基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。尚、本明細書に記載の「置換のフルオロアルキル基」には、「置換のフルオロアルキル基」におけるアルキル鎖の炭素原子に結合する1つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び「置換のフルオロアルキル基」における置換基の1つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。「無置換のフルオロアルキル基」の具体例としては、前記「アルキル基」（具体例群G3）における1つ以上の水素原子がフッ素原子と置き換わった基の例等が挙げられる。

[0071] ・「置換もしくは無置換のハロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のハロアルキル基」は、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している少なくとも1つの水素原子がハロゲン原子と置き換わった基を意味し、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している全ての水素原子がハロゲン原子で置き換わった基も含む。「無置換のハロアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～30であり、より好ましくは1～18である。「置換のハロアルキル基」は、「ハロアルキル基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。尚、本明細書に記載の「置換のハロアルキル基」には、「置換のハロアルキル基」におけるアルキル鎖の炭素原子に結合する1つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び「置換のハロアルキル基」における置換基の1つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。「無置換のハロアルキル基」の具体

例としては、前記「アルキル基」（具体例群G 3）における1つ以上の水素原子がハロゲン原子と置き換わった基の例等が挙げられる。ハロアルキル基をハロゲン化アルキル基と称する場合がある。

[0072] ・「置換もしくは無置換のアルコキシ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルコキシ基」の具体例としては、 $-O$ （G 3）で表される基であり、ここで、G 3は、具体例群G 3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。「無置換のアルコキシ基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～30であり、より好ましくは1～18である。

[0073] ・「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」の具体例としては、 $-S$ （G 3）で表される基であり、ここで、G 3は、具体例群G 3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。「無置換のアルキルチオ基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～30であり、より好ましくは1～18である。

[0074] ・「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」の具体例としては、 $-O$ （G 1）で表される基であり、ここで、G 1は、具体例群G 1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。「無置換のアリールオキシ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

[0075] ・「置換もしくは無置換のアリールチオ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリールチオ基」の具体例としては、 $-S$ （G 1）で表される基であり、ここで、G 1は、具体例群G 1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。「無置換のアリールチオ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

[0076] ・「置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基」

本明細書に記載の「トリアルキルシリル基」の具体例としては、 $-Si(G3)(G3)(G3)$ で表される基であり、ここで、G3は、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。 $-Si(G3)(G3)(G3)$ における複数のG3は、互いに同一であるか、又は異なる。

「トリアルキルシリル基」の各アルキル基の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～20であり、より好ましくは1～6である。

[0077] ・「置換もしくは無置換のアラルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアラルキル基」の具体例としては、 $-(G3)-(G1)$ で表される基であり、ここで、G3は、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」であり、G1は、具体例群G1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。従って、「アラルキル基」は、「アルキル基」の水素原子が置換基としての「アリール基」と置き換わった基であり、「置換のアルキル基」の一態様である。「無置換のアラルキル基」は、「無置換のアリール基」が置換した「無置換のアルキル基」であり、「無置換のアラルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、7～50であり、好ましくは7～30であり、より好ましくは7～18である。

「置換もしくは無置換のアラルキル基」の具体例としては、ベンジル基、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、 α -ナフチルメチル基、1- α -ナフチルエチル基、2- α -ナフチルエチル基、1- α -ナフチルイソプロピル基、2- α -ナフチルイソプロピル基、 β -ナフチルメチル基、1- β -ナフチルエチル基、2- β -ナフチルエチル基、1- β -ナフチルイソプロピル基、及び2- β -ナフチルイソプロピル基等が挙げられる。

[0078] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリール基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはフェニル基、*p*-ビフェニル基、*m*-ビフェニル

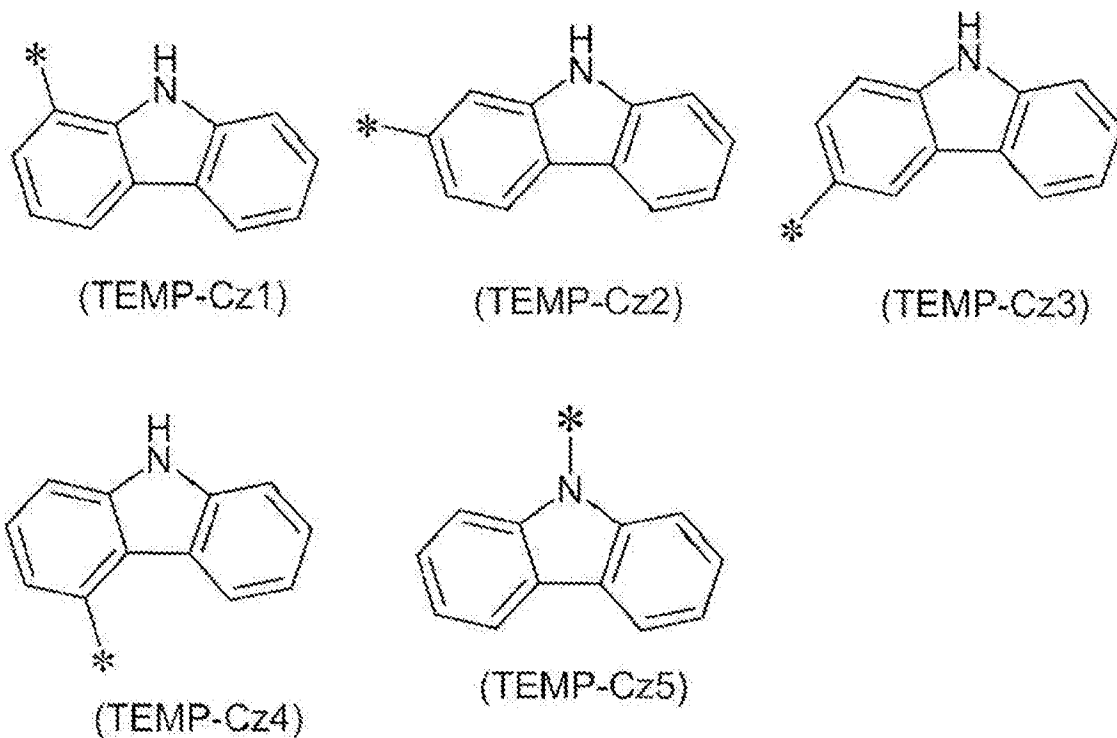
基、*o*-ビフェニル基、*p*-ターフェニル-4-イル基、*p*-ターフェニル-3-イル基、*p*-ターフェニル-2-イル基、*m*-ターフェニル-4-イル基、*m*-ターフェニル-3-イル基、*m*-ターフェニル-2-イル基、*o*-ターフェニル-4-イル基、*o*-ターフェニル-3-イル基、*o*-ターフェニル-2-イル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、ピレニル基、クリセニル基、トリフェニレニル基、フルオレニル基、9, 9'-スピロビフルオレニル基、9, 9'-ジメチルフルオレニル基、及び9, 9'-ジフェニルフルオレニル基等である。

[0079] 本明細書に記載の置換もしくは無置換の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリル基、キナゾリニル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリニル基、カルバゾリル基（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、又は9-カルバゾリル基）、ベンゾカルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジアザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ナフトベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフェニル基、ナフトベンゾチオフェニル基、アザジベンゾチオフェニル基、ジアザジベンゾチオフェニル基、（9-フェニル）カルバゾリル基（（9-フェニル）カルバゾール-1-イル基、（9-フェニル）カルバゾール-2-イル基、（9-フェニル）カルバゾール-3-イル基、又は（9-フェニル）カルバゾール-4-イル基）、（9-ビフェニル）カルバゾリル基、（9-フェニル）フェニルカルバゾリル基、ジフェニルカルバゾール-9-イル基、フェニルカルバゾール-9-イル基、フェニルトリアジニル基、ビフェニルトリアジニル基、ジフェニルトリアジニル基、フェニルジベンゾフラニル基、及びフェニルジベンゾチオフェニル基等である。

[0080] 本明細書において、カルバゾリル基は、本明細書に別途記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

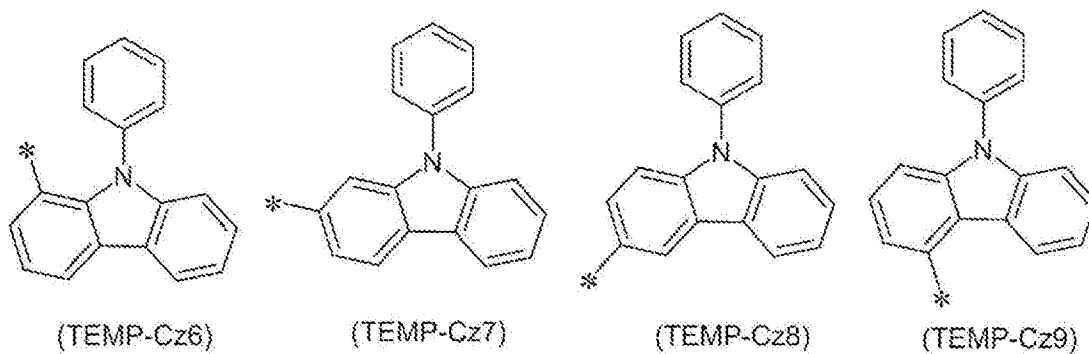
[0081]

[化12]



[0082] 本明細書において、（９－フェニル）カルバゾリル基は、本明細書に別途記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

[0083] [化13]

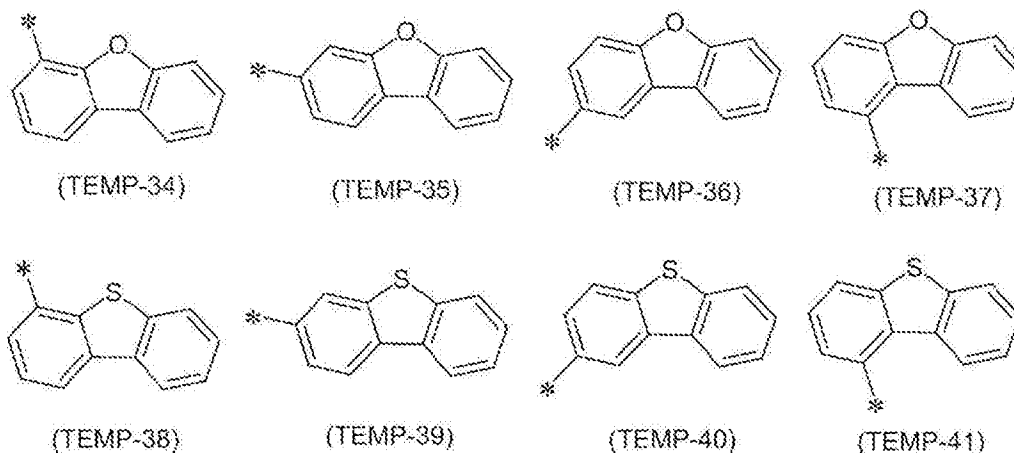


[0084] 前記一般式（TEMP-Cz1）～（TEMP-Cz9）中、*は、結合位置を表す。

[0085] 本明細書において、ジベンゾフラニル基、及びジベンゾチオフェニル基は、本明細書に別途記載のない限り、具体的には以下のいずれかの基である。

[0086]

[化14]



[0087] 前記一般式 (TEMP-34) ~ (TEMP-41) 中、*は、結合位置を表す。

[0088] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアルキル基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはメチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、及び*t*-ブチル基等である。

[0089] ・「置換もしくは無置換のアリーレン基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリーレン基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換のアリール基」からアリール環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換のアリーレン基」の具体例（具体例群G12）としては、具体例群G1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」からアリール環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基等が挙げられる。

[0090] ・「置換もしくは無置換の2価の複素環基」

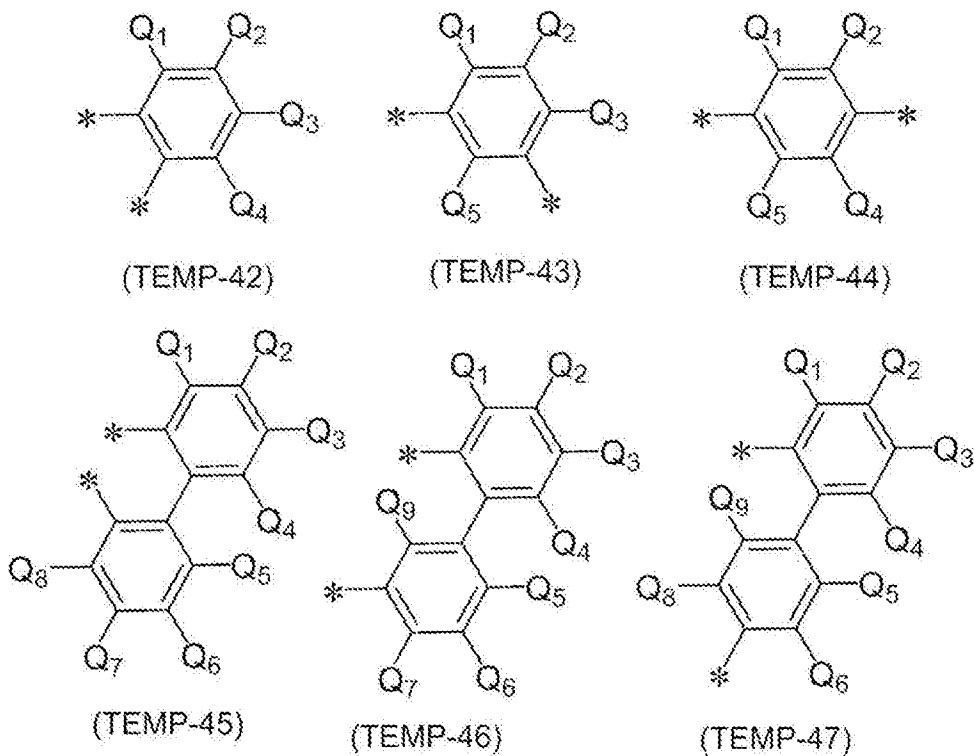
本明細書に記載の「置換もしくは無置換の2価の複素環基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換の複素環基」から複素環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換の2価の複素環基」の具体例（具体例群G13）としては、具体例群G2に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」から複素環上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基等が挙げられる。

[0091] ・「置換もしくは無置換のアルキレン基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキレン基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基である。「置換もしくは無置換のアルキレン基」の具体例（具体例群G 1 4）としては、具体例群G 3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の1つの水素原子を除くことにより誘導される2価の基等が挙げられる。

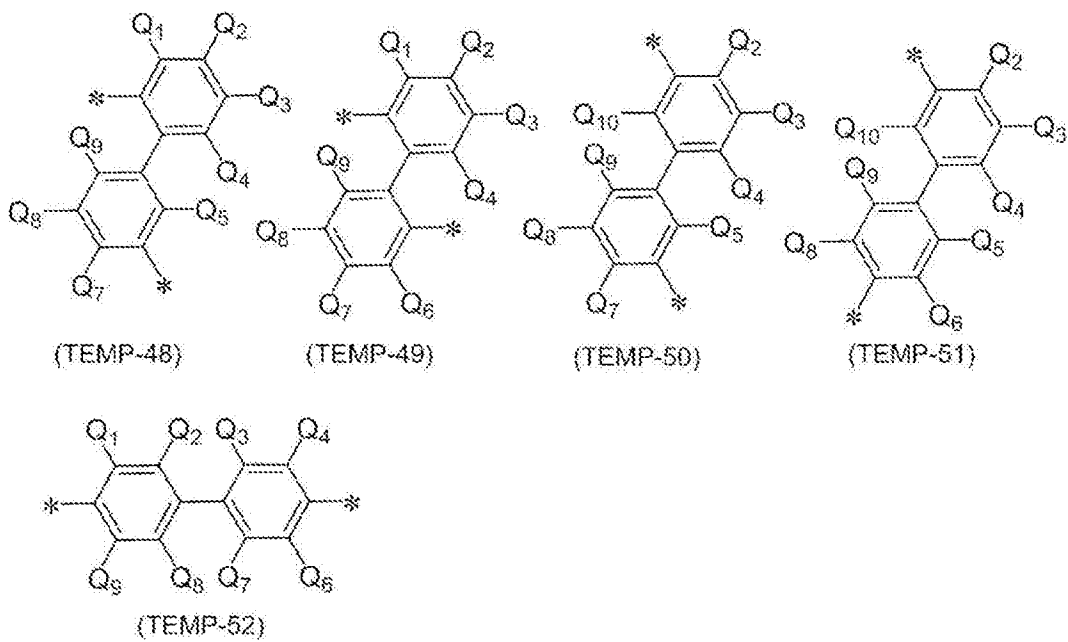
[0092] 本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリーレン基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式（TEMP-42）～（TEMP-68）のいずれかの基である。

[0093] [化15]



[0094]

[化16]

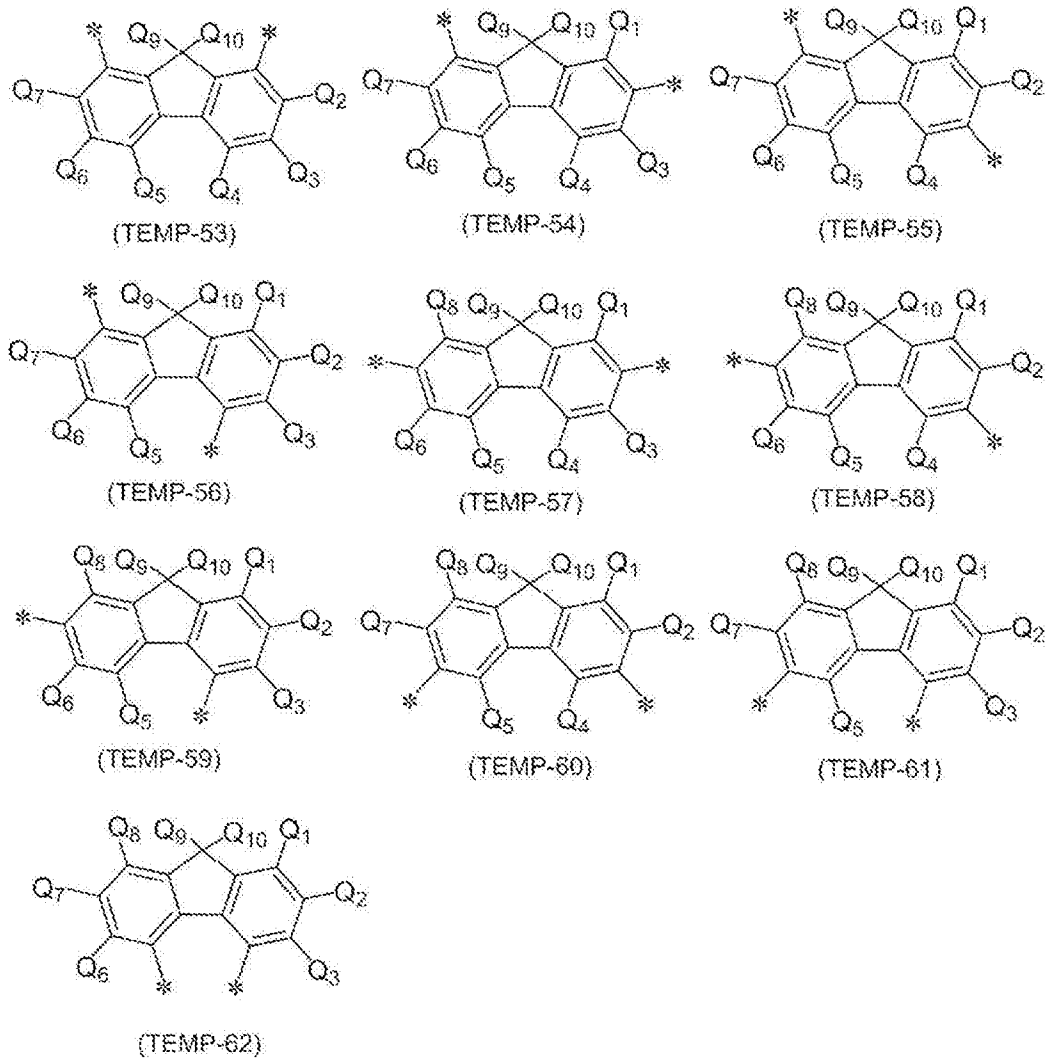


[0095] 前記一般式 (TEMP-42) ~ (TEMP-52) 中、 $Q_1 \sim Q_{10}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

前記一般式 (TEMP-42) ~ (TEMP-52) 中、* は、結合位置を表す。

[0096]

[化17]



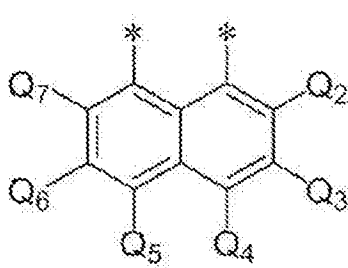
[0097] 前記一般式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中、 $Q_1 \sim Q_{10}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

式 Q_9 及び Q_{10} は、単結合を介して互いに結合して環を形成してもよい。

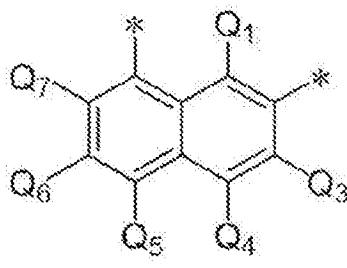
前記一般式 (TEMP-53) ~ (TEMP-62) 中、* は、結合位置を表す。

[0098]

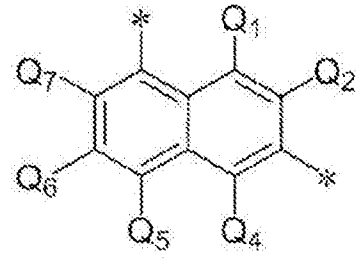
[化18]



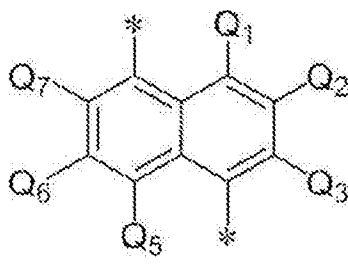
(TEMP-63)



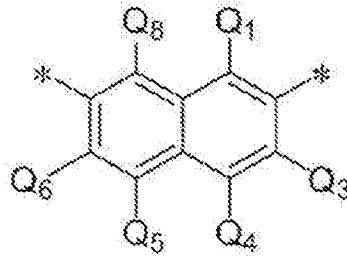
(TEMP-64)



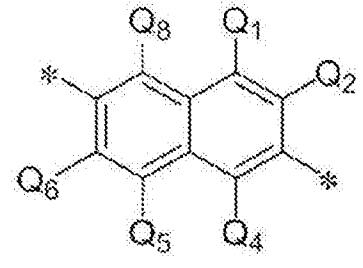
(TEMP-65)



(TEMP-66)



(TEMP-67)



(TEMP-68)

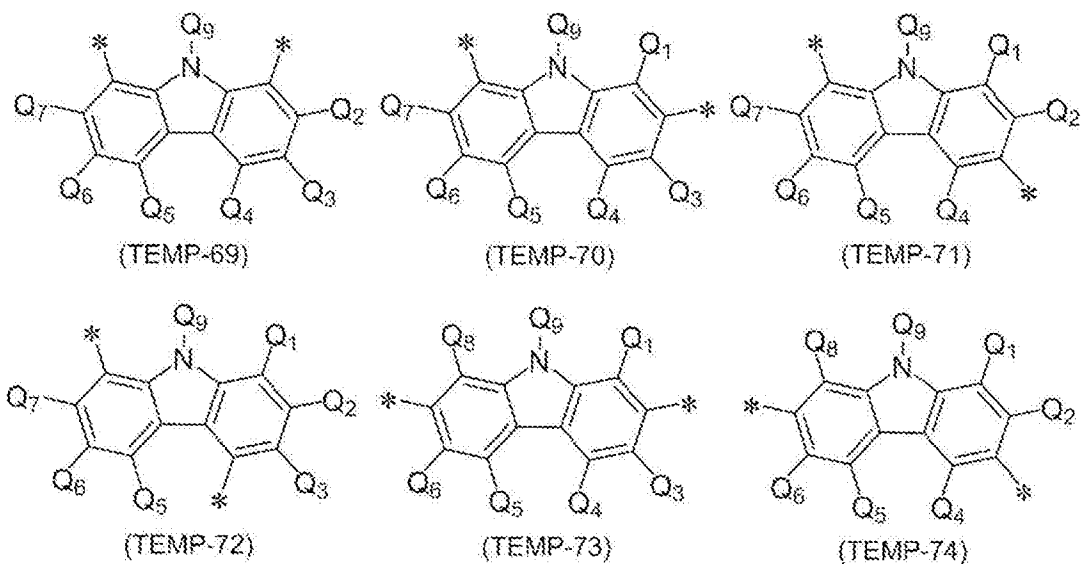
[0099] 前記一般式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中、 $Q_1 \sim Q_8$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

前記一般式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中、* は、結合位置を表す。

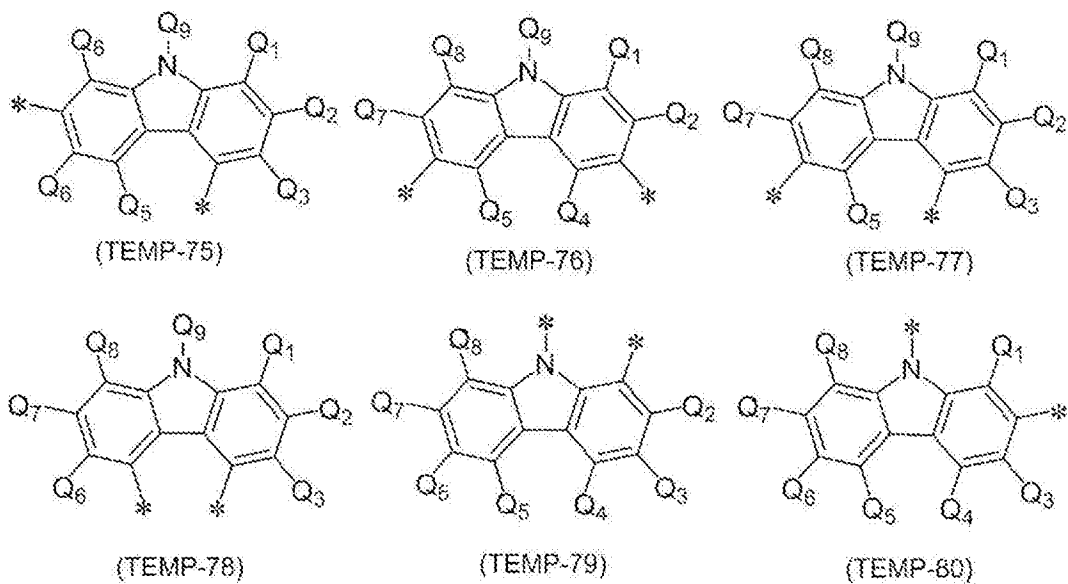
[0100] 本明細書に記載の置換もしくは無置換の2価の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-102) のいずれかの基である。

[0101]

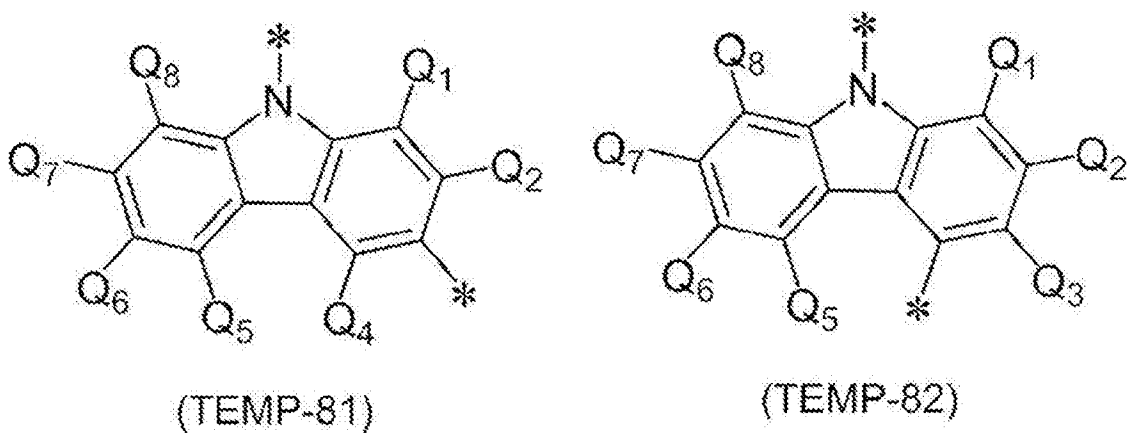
[化19]



[0102] [化20]

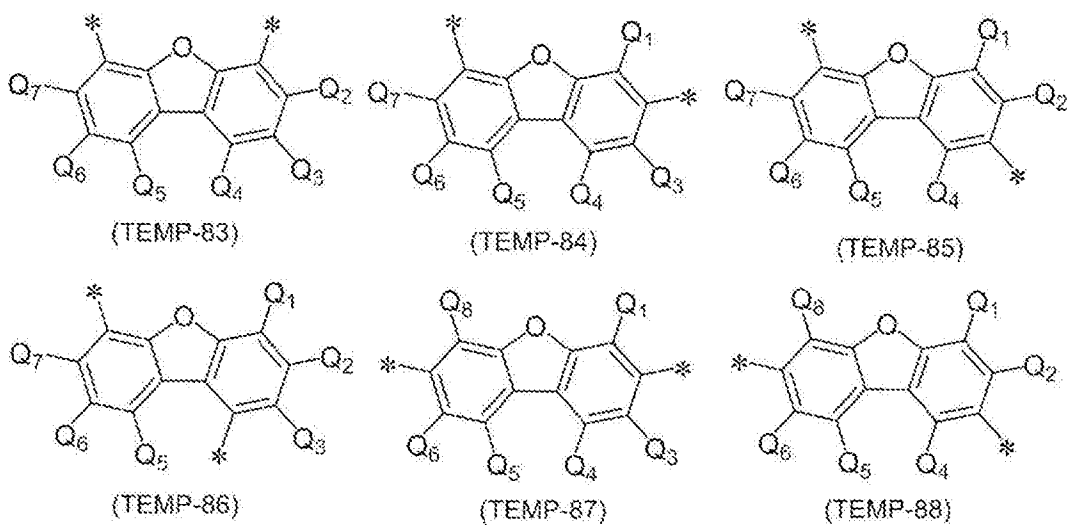


[0103] [化21]

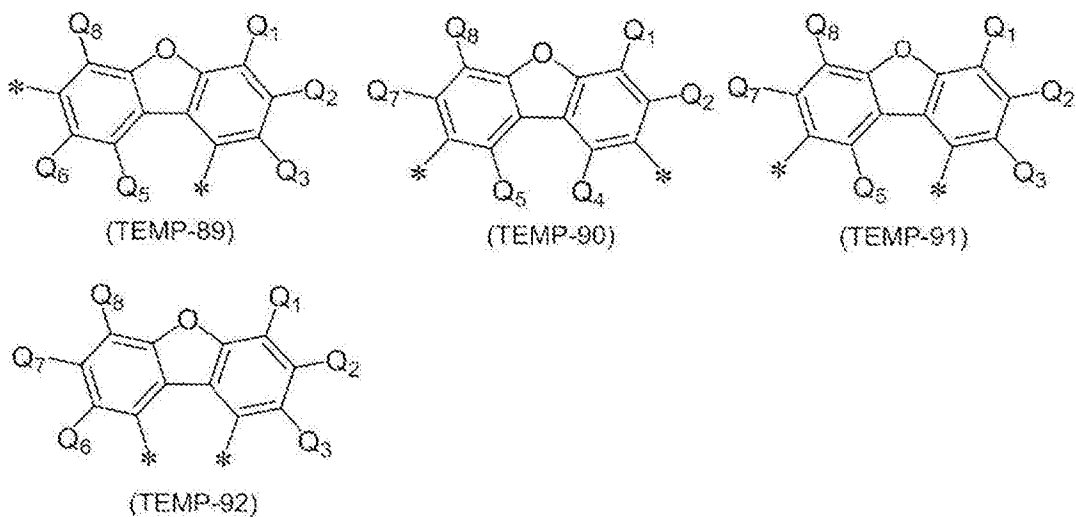


[0104] 前記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-82) 中、 $Q_1 \sim Q_9$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

[0105] [化22]

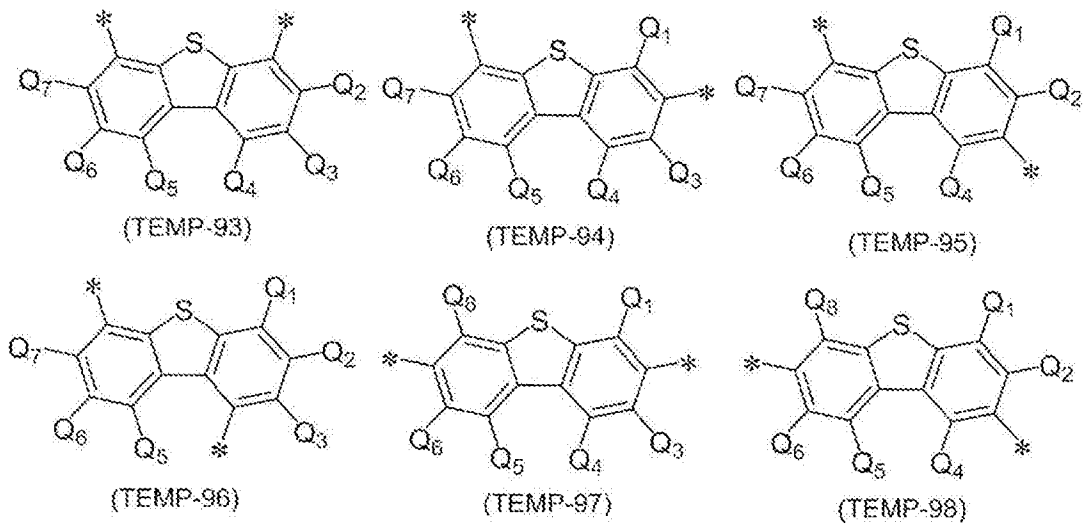


[0106] [化23]

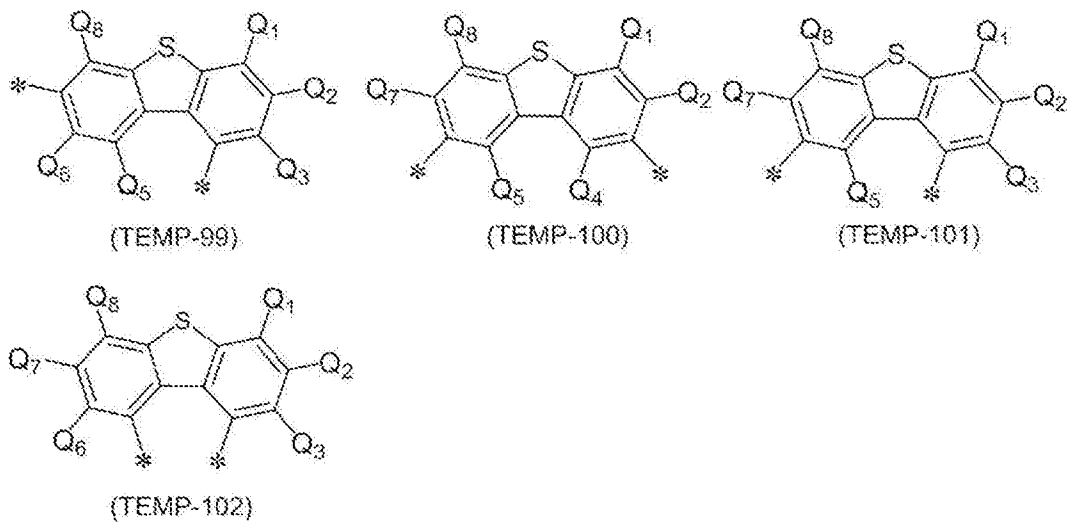


[0107]

[化24]



[0108] [化25]



[0109] 前記一般式 (TEMP-83) ~ (TEMP-102) 中、 $Q_1 \sim Q_8$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

[0110] 以上が、「本明細書に記載の置換基」についての説明である。

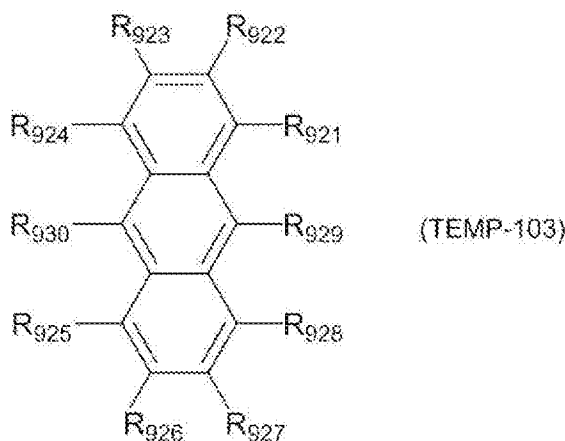
[0111] ・「結合して環を形成する場合」

本明細書において、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合せず」という場合は、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合と、「隣接する2つ以上からなる組の1

組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合と、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合しない」場合と、を意味する。

本明細書における、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、及び「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合（以下、これらの場合をまとめて「結合して環を形成する場合」と称する場合がある。）について、以下、説明する。母骨格がアントラセン環である下記一般式（TEMP-103）で表されるアントラセン化合物の場合を例として説明する。

[0112] [化26]

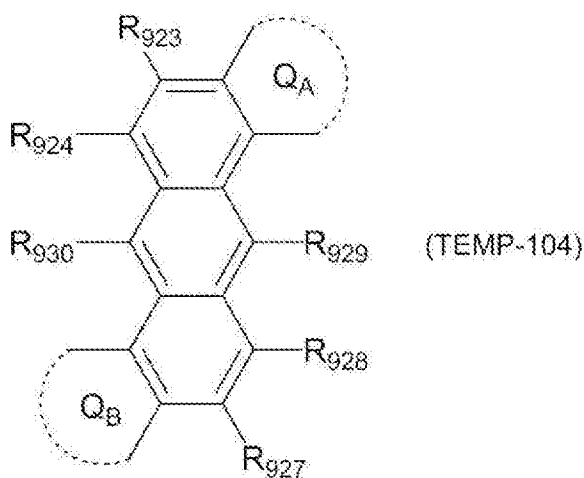


[0113] 例えば、R₉₂₁～R₉₃₀のうちの「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、環を形成する」場合において、1組となる隣接する2つからなる組とは、R₉₂₁とR₉₂₂との組、R₉₂₂とR₉₂₃との組、R₉₂₃とR₉₂₄との組、R₉₂₄とR₉₃₀との組、R₉₃₀とR₉₂₅との組、R₉₂₅とR₉₂₆との組、R₉₂₆とR₉₂₇との組、R₉₂₇とR₉₂₈との組、R₉₂₈とR₉₂₉との組、並びにR₉₂₉とR₉₂₁との組である。

[0114] 上記「1組以上」とは、上記隣接する2つ以上からなる組の2組以上が同時に環を形成してもよいことを意味する。例えば、R₉₂₁とR₉₂₂とが互いに結合して環Q_Aを形成し、同時にR₉₂₅とR₉₂₆とが互いに結合して環Q_Bを形

成した場合は、前記一般式（TEMP-103）で表されるアントラセン化合物は、下記一般式（TEMP-104）で表される。

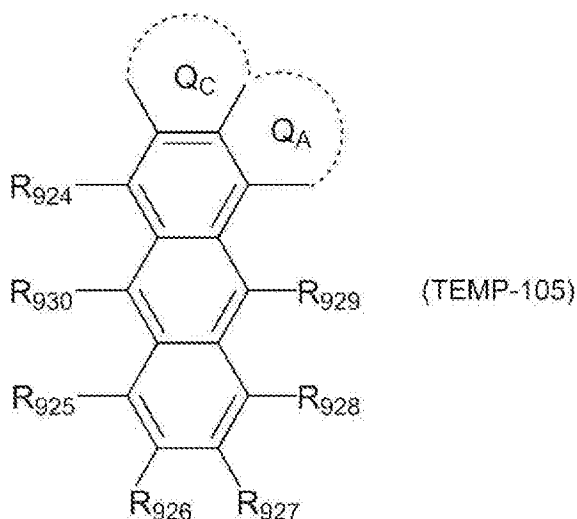
[0115] [化27]



[0116] 「隣接する2つ以上からなる組」が環を形成する場合とは、前述の例のように隣接する「2つ」からなる組が結合する場合だけではなく、隣接する「3つ以上」からなる組が結合する場合も含む。例えば、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して環 Q_A を形成し、かつ、 R_{922} と R_{923} とが互いに結合して環 Q_C を形成し、互いに隣接する3つ（ R_{921} 、 R_{922} 及び R_{923} ）からなる組が互いに結合して環を形成して、アントラセン母骨格に縮合する場合を意味し、この場合、前記一般式（TEMP-103）で表されるアントラセン化合物は、下記一般式（TEMP-105）で表される。下記一般式（TEMP-105）において、環 Q_A 及び環 Q_C は、 R_{922} を共有する。

[0117]

[化28]



[0118] 形成される「単環」、又は「縮合環」は、形成された環のみの構造として、飽和の環であっても不飽和の環であってもよい。「隣接する2つからなる組の1組」が「単環」、又は「縮合環」を形成する場合であっても、当該「単環」、又は「縮合環」は、飽和の環、又は不飽和の環を形成することができる。例えば、前記一般式（TEMP-104）において形成された環 Q_A 及び環 Q_B は、それぞれ、「単環」又は「縮合環」である。また、前記一般式（TEMP-105）において形成された環 Q_A 、及び環 Q_C は、「縮合環」である。前記一般式（TEMP-105）の環 Q_A と環 Q_C とは、環 Q_A と環 Q_C とが縮合することによって縮合環となっている。前記一般式（TEMP-104）の環 Q_A がベンゼン環であれば、環 Q_A は、単環である。前記一般式（TEMP-104）の環 Q_A がナフタレン環であれば、環 Q_A は、縮合環である。

[0119] 「不飽和の環」とは、芳香族炭化水素環、又は芳香族複素環を意味する。

「飽和の環」とは、脂肪族炭化水素環、又は非芳香族複素環を意味する。

芳香族炭化水素環の具体例としては、具体例群G1において具体例として挙げられた基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

芳香族複素環の具体例としては、具体例群G2において具体例として挙げられた芳香族複素環基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

脂肪族炭化水素環の具体例としては、具体例群G6において具体例として

挙げられた基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

「環を形成する」とは、母骨格の複数の原子のみ、あるいは母骨格の複数の原子とさらに1以上の任意の元素で環を形成することを意味する。例えば、前記一般式(TEMP-104)に示す、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して形成された環 Q_A は、 R_{921} が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、 R_{922} が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、1以上の任意の元素とで形成する環を意味する。具体例としては、 R_{921} と R_{922} とで環 Q_A を形成する場合において、 R_{921} が結合するアントラセン骨格の炭素原子と、 R_{922} とが結合するアントラセン骨格の炭素原子と、4つの炭素原子とで単環の不飽和の環を形成する場合、 R_{921} と R_{922} とで形成する環は、ベンゼン環である。

[0120] ここで、「任意の元素」は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは、炭素元素、窒素元素、酸素元素、及び硫黄元素からなる群から選択される少なくとも1種の元素である。任意の元素において(例えば、炭素元素、又は窒素元素の場合)、環を形成しない結合は、水素原子等で終端されてもよいし、後述する「任意の置換基」で置換されてもよい。炭素元素以外の任意の元素を含む場合、形成される環は複素環である。

単環または縮合環を構成する「1以上の任意の元素」は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは2個以上15個以下であり、より好ましくは3個以上12個以下であり、さらに好ましくは3個以上5個以下である。

本明細書に別途記載のない限り、「単環」、及び「縮合環」のうち、好ましくは「単環」である。

本明細書に別途記載のない限り、「飽和の環」、及び「不飽和の環」のうち、好ましくは「不飽和の環」である。

本明細書に別途記載のない限り、「単環」は、好ましくはベンゼン環である。

本明細書に別途記載のない限り、「不飽和の環」は、好ましくはベンゼン環である。

「隣接する2つ以上からなる組の1組以上」が、「互いに結合して、置換

もしくは無置換の単環を形成する」場合、又は「互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは、隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、母骨格の複数の原子と、1個以上15個以下の炭素元素、窒素元素、酸素元素、及び硫黄元素からなる群から選択される少なくとも1種の元素とからなる置換もしくは無置換の「不飽和の環」を形成する。

[0121] 上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基は、例えば後述する「任意の置換基」である。上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基である。

上記の「飽和の環」、又は「不飽和の環」が置換基を有する場合の置換基は、例えば後述する「任意の置換基」である。上記の「単環」、又は「縮合環」が置換基を有する場合の置換基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基である。

以上が、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、及び「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合（「結合して環を形成する場合」）についての説明である。

[0122] ・「置換もしくは無置換の」という場合の置換基

本明細書における一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基（本明細書において、「任意の置換基」と呼ぶことがある。）は、例えば、

無置換の炭素数1～50のアルキル基、

無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)、

—O—(R₉₀₄)、

—S— (R_{905})、

—N (R_{906}) (R_{907})、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、及び無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基からなる群から選択される基等であり、

ここで、 $R_{901} \sim R_{907}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5～50 の複素環基である。

R_{901} が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R_{901} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{902} が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R_{902} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{903} が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R_{903} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{904} が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R_{904} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{905} が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R_{905} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{906} が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R_{906} は、互いに同一であるか、又は異なり、

R_{907} が 2 個以上存在する場合、2 個以上の R_{907} は、互いに同一であるか又は異なる。

[0123] 一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、

炭素数 1～50 のアルキル基、

環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、及び環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基からなる群から選択される基である。

[0124] 一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、

炭素数 1 ～ 18 のアルキル基、

環形成炭素数 6 ～ 18 のアリール基、及び環形成原子数 5 ～ 18 の複素環基からなる群から選択される基である。

[0125] 上記任意の置換基の各基の具体例は、上述した「本明細書に記載の置換基」の項で説明した置換基の具体例である。

[0126] 本明細書において別途記載のない限り、隣接する任意の置換基同士で、「飽和の環」、又は「不飽和の環」を形成してもよく、好ましくは、置換もしくは無置換の飽和の 5 員環、置換もしくは無置換の飽和の 6 員環、置換もしくは無置換の不飽和の 5 員環、又は置換もしくは無置換の不飽和の 6 員環を形成し、より好ましくは、ベンゼン環を形成する。

本明細書において別途記載のない限り、任意の置換基は、さらに置換基を有してもよい。任意の置換基がさらに有する置換基としては、上記任意の置換基と同様である。

[0127] 本明細書において、「AA ～ BB」を用いて表される数値範囲は、「AA ～ BB」の前に記載される数値 AA を下限値とし、「AA ～ BB」の後に記載される数値 BB を上限値として含む範囲を意味する。

[0128] 〔第一実施形態〕

本発明の第一実施形態に係る有機 EL 素子の構成について説明する。

有機 EL 素子は、陽極及び陰極の両電極間に有機層を備える。この有機層は、有機化合物で構成される層を少なくとも一つ含む。あるいは、この有機層は、有機化合物で構成される複数の層が積層されてなる。有機層は、無機化合物をさらに含んでもよい。本実施形態の有機 EL 素子において、有機層のうち少なくとも一層は、発光層である。ゆえに、有機層は、例えば、一つの発光層で構成されていてもよいし、有機 EL 素子に採用され得る層を

含んでいてもよい。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。

[0129] 本実施形態の有機EL素子は、陽極と、陰極と、前記陽極と前記陰極との間に含まれる発光層と、を有し、前記発光層は、下記一般式（2）で表される遅延蛍光性の化合物M2と、下記一般式（3）で表される化合物M3と、を含み、前記化合物M2の一重項エネルギー $S_1(M2)$ と、前記化合物M3の一重項エネルギー $S_1(M3)$ とが、下記数式（数1）の関係を満たす。

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

[0130] 下記一般式（2）で表される遅延蛍光性の化合物M2は、当該一般式（2）のベンゼンが下記一般式（21）で表される基（例えば、フェニル基）で置換された構造を有することにより、当該一般式（2）のベンゼン環周りの共役が伸長し、分子が安定化する。化合物M2の分子が安定化するため、有機EL素子が長寿命化する。一方、この共役の伸長により化合物M2の電子輸送性が向上し、発光層内の電子が過多になることで、発光効率が低下する可能性がある。

本発明者らは、下記一般式（2）で表される遅延蛍光性の化合物M2と、下記一般式（3）のカルバゾールを含む化合物M3とを組み合わせ発光層に含有させることで、正孔が発光層へ適切に注入されて、発光効率が向上し、長寿命且つ高効率な有機EL素子を実現することを見出した。

[0131] 本実施形態において、化合物M2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。）であることが好ましく、化合物M3は、ホスト材料（マトリックス材料と称する場合もある。）であることが好ましい。

[0132] 図1に、本実施形態における有機EL素子の一例の概略構成を示す。

有機EL素子1は、透光性の基板2と、陽極3と、陰極4と、陽極3と陰極4との間に配置された有機層10と、を含む。有機層10は、陽極3側から順に、正孔注入層6、正孔輸送層7、発光層5、電子輸送層8、及び電子

注入層 9 が、この順番で積層されて構成される。

[0133] 本実施形態の一態様においては、発光層は、金属錯体を含んでもよい。

[0134] また、本実施形態の一態様においては、発光層は、燐光発光性材料（燐光発光性のドーパント材料）を含まないことが好ましい。

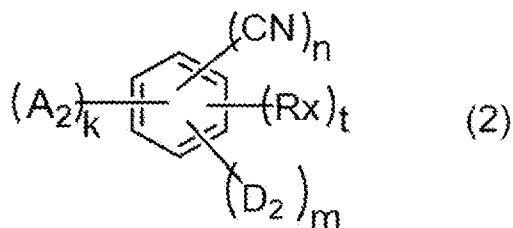
また、本実施形態の一態様においては、発光層は、重金属錯体及び燐光発光性の希土類金属錯体を含まないことが好ましい。ここで、重金属錯体としては、例えば、イリジウム錯体、オスミウム錯体、及び白金錯体等が挙げられる。

[0135] また、本実施形態の一態様においては、発光層は、燐光発光性の金属錯体を含まないことも好ましく、金属錯体を含まないことも好ましい。

[0136] （化合物 M 2）

本実施形態の有機 EL 素子の発光層は、下記一般式（2）で表される化合物 M 2 を含む。本実施形態の化合物 M 2 は、熱活性化遅延蛍光性の化合物である。

[0137] [化29]



[0138] （前記一般式（2）において、

A_2 は、下記一般式（2 1）で表される基であり、

D_2 は、下記一般式（2 2）で表される基であり、

CN は、シアノ基であり、

k は、1、2、3 又は 4 であり、

m は、1、2、3 又は 4 であり、

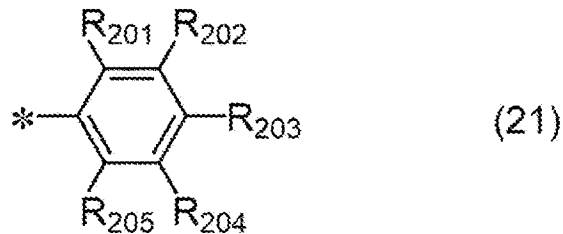
n は、1 又は 2 であり、

t は、0、1、2 又は 3 であり、

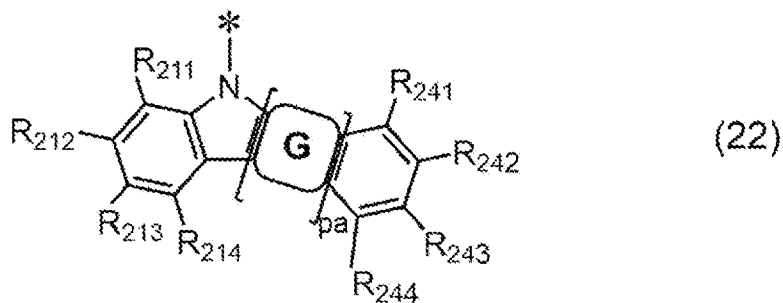
$k + m + n + t = 6$ であり、

k が 2、3 又は 4 のとき、複数の A_2 は、互いに同一であるか又は異なり、
 m が 2、3 又は 4 のとき、複数の D_2 は、互いに同一であるか又は異なり、
 t が 2 又は 3 のとき、複数の R_x は、互いに同一であるか又は異なる。）

[0139] [化30]



[0140] [化31]



[0141] (前記一般式 (21) において、

$R_{201} \sim R_{205}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
 互いに結合せず、

前記一般式 (22) において、

$R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の
 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
 互いに結合せず、

前記一般式 (21) 及び (22) 中の * は、それぞれ、前記一般式 (2)
 中のベンゼン環との結合位置を示す。）

[0142] (前記一般式 (2) の R_x 、前記一般式 (21) における前記置換もしくは

無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{201} \sim R_{205}$ 、並びに前記一般式 (22) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903}) で表される基、

—O—(R_{904}) で表される基、

—S—(R_{905}) で表される基、

—N(R_{906})(R_{907}) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

—C(=O) R_{908} で表される基、

—COOR $_{909}$ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

—P(=O)(R_{931})(R_{932}) で表される基、

—Ge(R_{933})(R_{934})(R_{935}) で表される基、

—B(R_{936})(R_{937}) で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

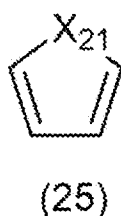
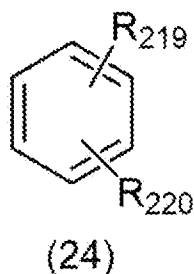
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

前記一般式 (22) において、

環 G は、それぞれ独立に、下記一般式 (24) 及び一般式 (25) で表される環構造からなる群から選択されるいずれかの環構造であり、

環 G は、隣接する環と任意の位置で縮合し、
 $p a$ は、1、2、3 又は 4 であり、
 $p a$ が 2、3 又は 4 の場合、複数の環 G は、互いに同一であるか、又は異なる。))

[0143] [化32]



[0144] (前記一般式 (24) において、

R_{219} 及び R_{220} からなる組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記一般式 (25) において、

X_{21} は、硫黄原子または酸素原子であり、

置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{219} 及び R_{220} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

— Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903}) で表される基、

— O — (R_{904}) で表される基、

— S — (R_{905}) で表される基、

—N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

—C (=O) R₉₀₈ で表される基、

—COOR₉₀₉ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

—P (=O) (R₉₃₁) (R₉₃₂) で表される基、

—Ge (R₉₃₃) (R₉₃₄) (R₉₃₅) で表される基、

—B (R₉₃₆) (R₉₃₇) で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基である。)

[0145] (化合物 M2 において、R₉₀₁、R₉₀₂、R₉₀₃、R₉₀₄、R₉₀₅、R₉₀₆、R₉₀₇、R₉₀₈、R₉₀₉、R₉₃₁、R₉₃₂、R₉₃₃、R₉₃₄、R₉₃₅、R₉₃₆ 及び R₉₃₇ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

R₉₀₁ が複数存在する場合、複数の R₉₀₁ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₂ が複数存在する場合、複数の R₉₀₂ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₃ が複数存在する場合、複数の R₉₀₃ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₀₄ が複数存在する場合、複数の R₉₀₄ は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{905} が複数存在する場合、複数の R_{905} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{906} が複数存在する場合、複数の R_{906} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{907} が複数存在する場合、複数の R_{907} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{908} が複数存在する場合、複数の R_{908} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{909} が複数存在する場合、複数の R_{909} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{931} が複数存在する場合、複数の R_{931} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{932} が複数存在する場合、複数の R_{932} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{933} が複数存在する場合、複数の R_{933} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{934} が複数存在する場合、複数の R_{934} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{935} が複数存在する場合、複数の R_{935} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{936} が複数存在する場合、複数の R_{936} は、互いに同一であるか又は異なり、

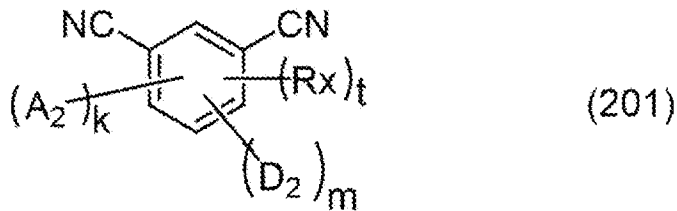
R_{937} が複数存在する場合、複数の R_{937} は、互いに同一であるか又は異なる。))

[0146] 前記一般式(2)における n は、2であることが好ましい。化合物M2は、ベンゼン環にシアノ基が2つ結合したジシアノベンゼン化合物であることも好ましい。

[0147] 化合物M2は、下記一般式(201)で表される化合物であることも好ま

しい。

[0148] [化33]



[0149] (前記一般式(201)において、

A_2 、 D_2 及び R_x は、それぞれ、前記一般式(2)における A_2 、 D_2 及び R_x と同義であり、

—CN及びNC—は、シアノ基を示し、

k は、1、2又は3であり、

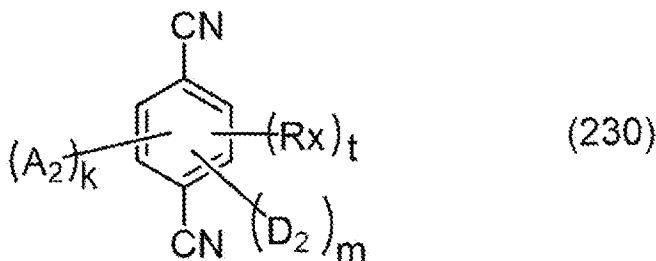
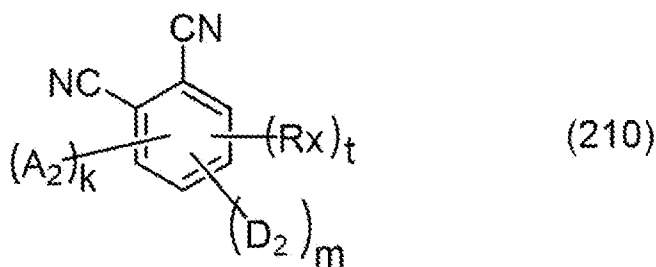
m は、1、2又は3であり、

t は、0、1又は2であり、

但し、 $k + m + t = 4$ である。)

[0150] 化合物M2は、下記一般式(210)又は一般式(230)で表される化合物であることも好ましい。

[0151] [化34]



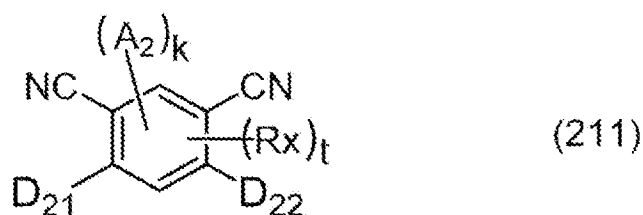
[0152] (前記一般式(210)及び一般式(230)において、 A_2 、 D_2 及び R_x は、それぞれ、前記一般式(2)における A_2 、 D_2 及び R_x と同義であり、

k は、1、2 又は 3 であり、
 m は、1、2 又は 3 であり、
 t は、0、1 又は 2 であり、
 但し、 $k + m + t = 4$ である。)

[0153] 化合物 M 2 における m は、2 であることが好ましい。

[0154] 化合物 M 2 は、下記一般式 (211) で表される化合物であることも好ましい。

[0155] [化35]



[0156] (前記一般式 (211) において、

D_{21} 及び D_{22} は、それぞれ独立に、前記一般式 (2) における D_2 と同義であり、

A_2 及び R_x は、それぞれ、前記一般式 (2) における A_2 及び R_x と同義であり、

—CN 及び NC— は、シアノ基を示し、

k は、1 又は 2 であり、

t は、0 又は 1 であり、

但し、 $k + t = 2$ である。)

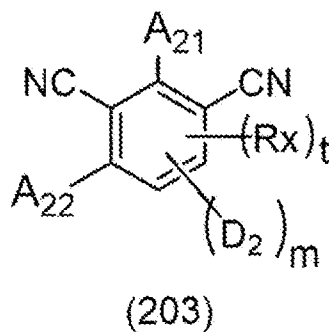
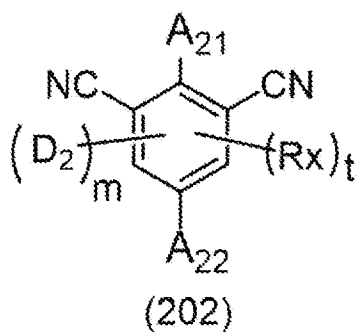
[0157] 化合物 M 2 において、 D_{21} 及び D_{22} は、互いに同一であるか又は異なる。

[0158] 化合物 M 2 における k は、1 又は 2 であることが好ましく、2 であることがより好ましい。

[0159] 化合物 M 2 は、下記一般式 (202) 又は一般式 (203) で表される化合物であることも好ましい。

[0160]

[化36]



[0161] (前記一般式(202)又は一般式(203)において、

A_{21} 及び A_{22} は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における A_2 と同義であり、

D_2 及び R_x は、それぞれ、前記一般式(2)における D_2 及び R_x と同義であり、

—CN及びNC—は、シアノ基を示し、

m は、1又は2であり、

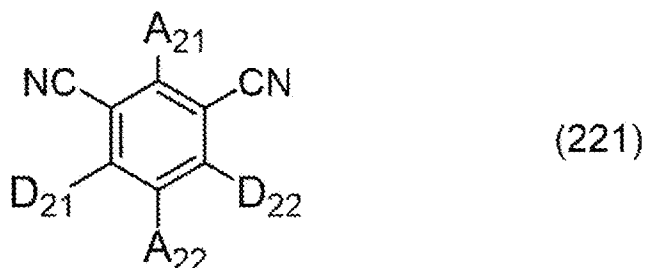
t は、0又は1であり、

但し、 $m + t = 2$ である。))

[0162] 化合物M2において、 A_{21} 及び A_{22} は、互いに同一であるか又は異なる。

[0163] 化合物M2は、下記一般式(221)で表される化合物であることも好ましい。

[0164] [化37]



[0165] (前記一般式(221)において、

A_{21} 及び A_{22} は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における A_2 と同義であり、

D_{21} 及び D_{22} は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における D_2 と同義で

あり、

—CN及びNC—は、シアノ基を示す。)

[0166] 化合物M2において、 R_x 、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{201} \sim R_{205}$ 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であることが好ましい。

[0167] 化合物M2において、 R_x 、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{201} \sim R_{205}$ 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基であることが好ましい。

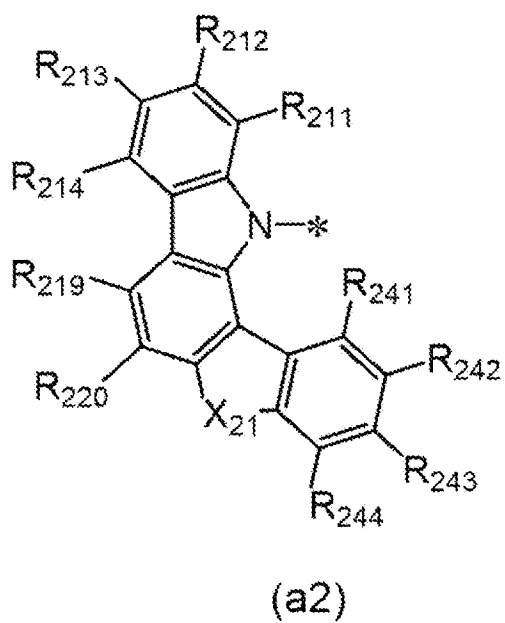
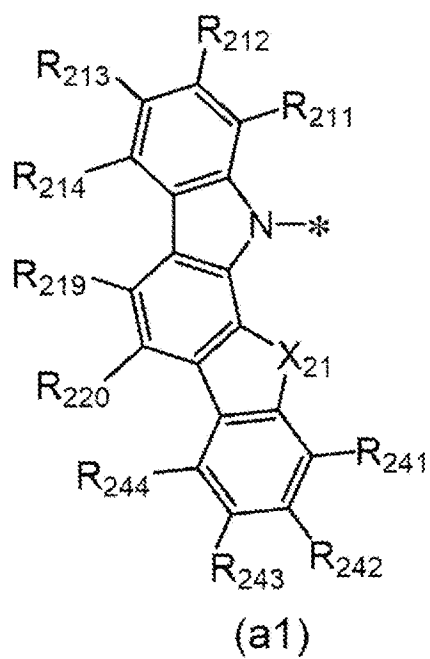
[0168] 化合物M2において、 R_x 、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{201} \sim R_{205}$ 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ は、水素原子であることが好ましい。

[0169] 化合物M2において、少なくとも1つの環Gは、前記一般式(25)で表される環構造であることが好ましい。

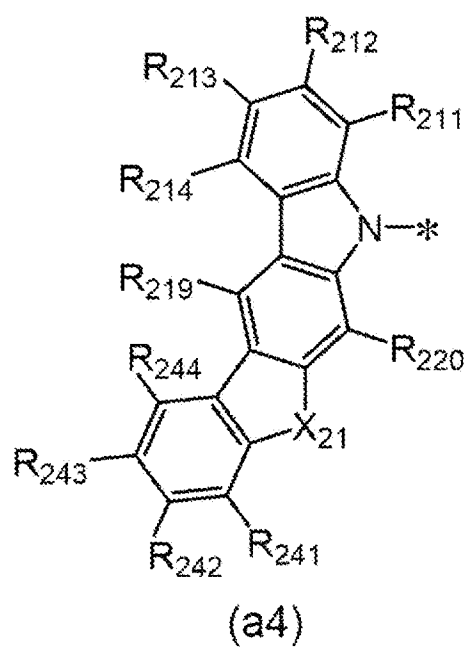
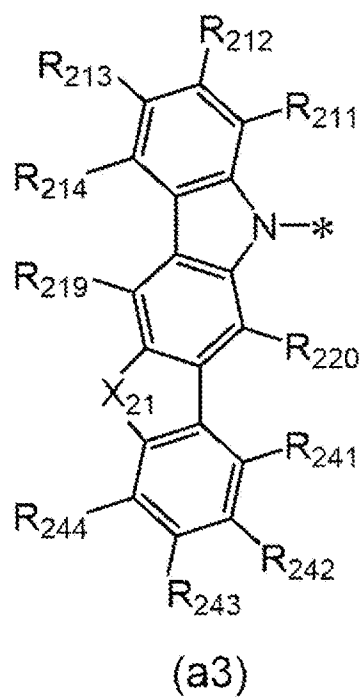
[0170] 前記一般式(22)で表される基は、下記一般式(a1)～(a6)からなる群から選択されるいずれかの基であることが好ましい。

[0171]

[化38]

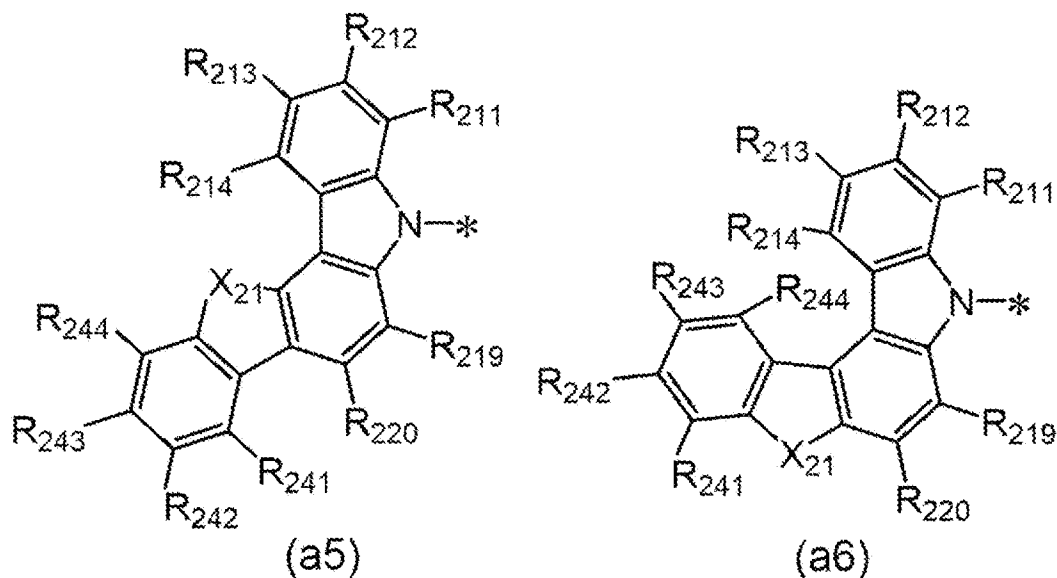


[0172] [化39]



[0173]

[化40]



[0174] (前記一般式 (a 1) ~ (a 6) において、

R₂₁₁ ~ R₂₁₄ 及び R₂₄₁ ~ R₂₄₄ は、それぞれ、前記一般式 (2 2) における R₂₁₁ ~ R₂₁₄ 及び R₂₄₁ ~ R₂₄₄ と同義であり、

X₂₁ は、前記一般式 (2 5) における X₂₁ と同義であり、

R₂₁₉ 及び R₂₂₀ は、それぞれ、前記一般式 (2 4) における R₂₁₉ 及び R₂₂₀ と同義であり、

前記一般式 (a 1) ~ (a 6) 中の * は、前記一般式 (2) 中のベンゼン環との結合位置を示す。)

[0175] 化合物 M 2 における X₂₁ は、硫黄原子であることが好ましい。

[0176] 前記一般式 (2 2) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R₂₁₁ ~ R₂₁₄ 及び R₂₄₁ ~ R₂₄₄、並びに

前記一般式 (2 4) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R₂₁₉ 及び R₂₂₀ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であることが好ましい。

[0177] 前記一般式 (22) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ 、並びに

前記一般式 (24) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{219} 及び R_{220} は、それぞれ独立に、

水素原子、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基であることが好ましい。

[0178] 前記一般式 (22) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ 、並びに

前記一般式 (24) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{219} 及び R_{220} は、水素原子であることが好ましい。

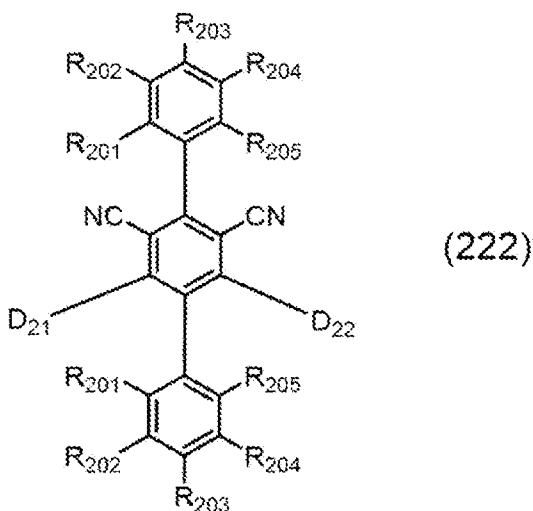
[0179] 化合物 M2 における D_2 は、前記一般式 (a1) ～ (a6) で表される基からなる群から選択されるいずれかの基であることが好ましい。

化合物 M2 における D_{21} 及び D_{22} は、それぞれ独立に、前記一般式 (a1) ～ (a6) で表される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。

[0180] 化合物 M2 は、下記一般式 (222) で表される化合物であることも好ましい。

[0181]

[化41]



[0182] (前記一般式(222)において、 $R_{201} \sim R_{205}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(21)における $R_{201} \sim R_{205}$ と同義であり、 D_{21} 及び D_{22} は、それぞれ独立に、前記一般式(2)における D_2 と同義である。)

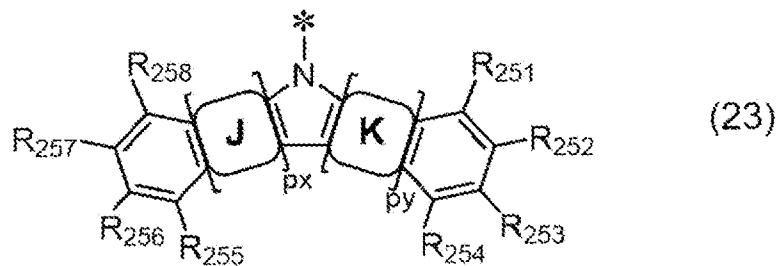
[0183] 化合物M2において、複数の R_{201} は、互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{202} は、互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{203} は、互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{204} は、互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{205} は、互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{211} は、互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{212} は、互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{213} は、互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{214} は、互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{241} は、互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{242} は、互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{243} は、互いに同一であるか又は異なり、複数の R_{244} は、互いに同一であるか又は異なる。

[0184] 前記一般式(22)において、 $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、又は互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成してもよい。

[0185] 化合物M2は、前記一般式(2)において、 D_2 の定義を以下の代替定義の通り変更した化合物であってもよい。

D_2 の代替定義： D_2 は、前記一般式（22）で表される基及び下記一般式（23）で表される基からなる群から選択されるいずれかの基である。

[0186] [化42]



[0187]（前記一般式（23）における $R_{251} \sim R_{258}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{251} \sim R_{258}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R_{901})(R_{902})(R_{903})で表される基、

—O—(R_{904})で表される基、

—S—(R_{905})で表される基、

—N(R_{906})(R_{907})で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O) R_{908} で表される基、

—COOR $_{909}$ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

—P(=O)(R₉₃₁)(R₉₃₂)で表される基、

—Ge(R₉₃₃)(R₉₃₄)(R₉₃₅)で表される基、

—B(R₉₃₆)(R₉₃₇)で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

前記一般式(23)において、

環J及び環Kは、それぞれ独立に、前記一般式(24)及び一般式(25)で表される環構造からなる群から選択されるいずれかの環構造であり、

環J及び環Kは、隣接する環と任意の位置で縮合し、

p_x及びp_yは、それぞれ独立に、1、2、3又は4であり、

p_xが2、3又は4の場合、複数の環Jは、互いに同一であるか、又は異なり、

p_yが2、3又は4の場合、複数の環Kは、互いに同一であるか、又は異なり、

前記一般式(23)中の*は、前記一般式(2)中のベンゼン環との結合位置を示す。)

[0188] 本実施形態の有機EL素子は、化合物M3と前記一般式(2)におけるD₂が以上のD₂代替定義である場合の化合物M2とを発光層に含有する有機EL素子でもよい。

[0189] 化合物M2において、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR₂₅₁～R₂₅₈は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であることが好ましい。

[0190] 化合物M2において、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、

前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{251} \sim R_{258}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基であることが好ましい。

[0191] 化合物 M2 において、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{251} \sim R_{258}$ は、水素原子であることが好ましい。

[0192] 前記一般式 (23) 中の p_x 及び p_y が、2 であって、少なくとも 1 つの環 J は、前記一般式 (25) で表される環構造であり、少なくとも 1 つの環 K は、前記一般式 (25) で表される環構造であることが好ましい。

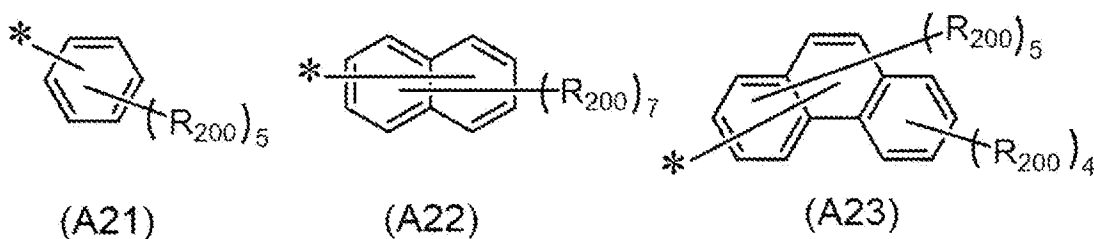
前記一般式 (23) 中の p_x が 2 であり、2 つの環 J は、前記一般式 (24) で表される環構造及び前記一般式 (25) で表される環構造であることが好ましい。

前記一般式 (23) 中の p_y が 2 であり、2 つの環 K は、前記一般式 (24) で表される環構造及び前記一般式 (25) で表される環構造であることが好ましい。

[0193] 化合物 M2 における A_2 は、下記一般式 (A21) ～ (A25) で表される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。

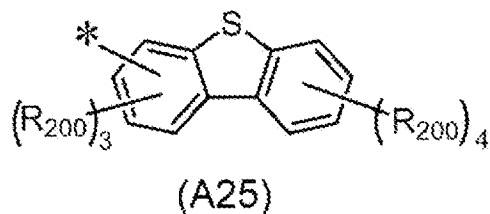
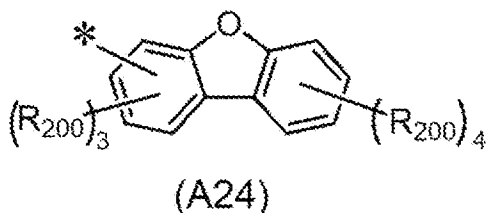
化合物 M2 における A_{21} 及び A_{22} は、それぞれ独立に、下記一般式 (A21) ～ (A25) で表される基からなる群から選択されるいずれかの基であることが好ましい。

[0194] [化43]



[0195]

[化44]



[0196] (前記一般式 (A 2 1) ~ (A 2 5) において、

複数の R_{200} のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{200} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基、

— Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903}) で表される基、

— O — (R_{904}) で表される基、

— S — (R_{905}) で表される基、

— N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 50 のアラルキル基、

— C (=O) R_{908} で表される基、

— COO R_{909} で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、
前記一般式 (A 2 1) ～ (A 2 5) 中の*は、それぞれ、前記一般式 (2)
) 中のベンゼン環との結合位置を示す。)

[0197] 化合物 M 2 における A₂ は、前記一般式 (A 2 1)、(A 2 4) 及び (A 2 5) で表される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。

化合物 M 2 における A₂₁ 及び A₂₂ は、それぞれ独立に、前記一般式 (A 2 1)、(A 2 4) 及び (A 2 5) で表される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。

[0198] 化合物 M 2 における A₂ は、前記一般式 (A 2 1) で表される基であることが好ましい。

化合物 M 2 における A₂₁ 及び A₂₂ は、前記一般式 (A 2 1) で表される基であることが好ましい。

[0199] 化合物 M 2 において、複数の R₂₀₀ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組は、いずれも、互いに結合しないことも好ましい。

[0200] 化合物 M 2 における A₂ は、前記一般式 (A 2 1) で表される基であり、前記一般式 (A 2 1) 中の前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R₂₀₀ が水素原子であることが好ましい。

[0201] 前記一般式 (A 2 1) ～ (A 2 5) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R₂₀₀ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であることが好ましい。

[0202] 前記一般式 (A 2 1) ～ (A 2 5) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R₂₀₀ は

、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基であることが好ましい。

[0203] 前記一般式 (A 2 1) ～ (A 2 5) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{200} は、水素原子であることが好ましい。

[0204] 化合物 M 2 において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、

無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルケニル基、

無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルキニル基、

無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基、

— Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903}) で表される基、

— O — (R_{904}) で表される基、

— S — (R_{905}) で表される基、

— N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

— C (=O) R_{908} で表される基、

— C O O R_{909} で表される基、

— P (=O) (R_{931}) (R_{932}) で表される基、

— Ge (R_{933}) (R_{934}) (R_{935}) で表される基、

— B (R_{936}) (R_{937}) で表される基、

— S (=O)₂ R_{938} で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基、又は

無置換の環形成原子数 5 ～ 25 の複素環基であり、

$R_{901} \sim R_{909}$ 、並びに $R_{931} \sim R_{938}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基、又は

無置換の環形成原子数 5 ～ 25 の複素環基であることが好ましい。

[0205] 化合物M2において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、ハロゲン原子、無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5 ～ 25 の複素環基であることが好ましい。

[0206] 化合物M2において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、無置換の炭素数 1 ～ 10 のアルキル基、無置換の環形成炭素数 6 ～ 12 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5 ～ 12 の複素環基であることが好ましい。

[0207] 化合物M2において、「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であることも好ましい。

[0208] 本明細書において、 $-O-(R_{904})$ で表される基は、 R_{904} が水素原子の場合、ヒドロキシ基である。

本明細書において、 $-S-(R_{905})$ で表される基は、 R_{905} が水素原子の場合、チオール基である。

本明細書において、 $-P(=O)(R_{931})(R_{932})$ で表される基は、 R_{931} 及び R_{932} が置換基の場合、置換ホスフィンオキシド基であり、 R_{931} 及び R_{932} がアリール基の場合、アリールホスホリル基である。

本明細書において、 $-Ge(R_{933})(R_{934})(R_{935})$ で表される基は、 R_{933} 、 R_{934} 及び R_{935} が置換基の場合、置換ゲルマニウム基である。

本明細書において、 $-B(R_{936})(R_{937})$ で表される基は、 R_{936} 及び R_{937} が置換基の場合、置換ボリル基である。

[0209] (遅延蛍光性)

遅延蛍光については、「有機半導体のデバイス物性」(安達千波矢編、講談社発行)の261～268ページで解説されている。その文献の中で、蛍

光発光材料の励起一重項状態と励起三重項状態のエネルギー差 ΔE_{13} を小さくすることができれば、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効率で生じ、熱活性化遅延蛍光 (Thermally Activated delayed Fluorescence, TADF) が発現すると説明されている。さらに、当該文献中の図 10、38 で、遅延蛍光の発生メカニズムが説明されている。本実施形態における化合物 M2 は、このようなメカニズムで発生する熱活性化遅延蛍光を示す化合物であることが好ましい。

[0210] 一般に、遅延蛍光の発光は過渡 PL (Photo Luminescence) 測定により確認できる。

[0211] 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。

[0212] 図 2 には、過渡 PL を測定するための例示的装置の概略図が示されている。図 2 を用いた過渡 PL の測定方法、および遅延蛍光の挙動解析の一例を説明する。

[0213] 図 2 の過渡 PL 測定装置 100 は、所定波長の光を照射可能なパルスレーザー部 101 と、測定試料を収容する試料室 102 と、測定試料から放射さ

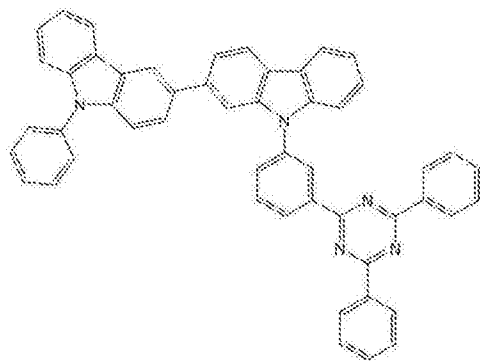
れた光を分光する分光器 103 と、2次元像を結像するためのストリークカメラ 104 と、2次元像を取り込んで解析するパーソナルコンピュータ 105 とを備える。なお、過渡 PL の測定は、図 2 に記載の装置に限定されない。

[0214] 試料室 102 に收容される試料は、マトリックス材料に対し、ドーピング材料が 12 質量%の濃度でドーブされた薄膜を石英基板に成膜することで得られる。

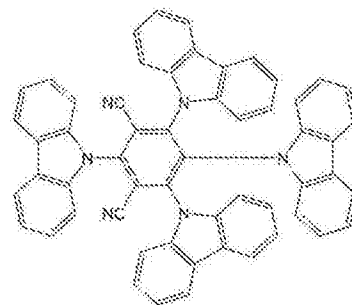
[0215] 試料室 102 に收容された薄膜試料に対し、パルスレーザー部 101 からパルスレーザーを照射してドーピング材料を励起させる。励起光の照射方向に対して 90 度の方向へ発光を取り出し、取り出した光を分光器 103 で分光し、ストリークカメラ 104 内で 2次元像を結像する。その結果、縦軸が時間に対応し、横軸が波長に対応し、輝点が発光強度に対応する 2次元画像を得ることができる。この 2次元画像を所定の時間軸で切り出すと、縦軸が発光強度であり、横軸が波長である発光スペクトルを得ることができる。また、当該 2次元画像を波長軸で切り出すと、縦軸が発光強度の対数であり、横軸が時間である減衰曲線（過渡 PL）を得ることができる。

[0216] 例えば、マトリックス材料として、下記参考化合物 H1 を用い、ドーピング材料として下記参考化合物 D1 を用いて上述のようにして薄膜試料 A を作製し、過渡 PL 測定を行った。

[0217] [化45]



(参考化合物 H1)

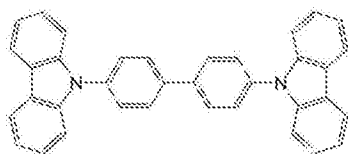


(参考化合物 D1)

[0218] ここでは、前述の薄膜試料A、および薄膜試料Bを用いて減衰曲線を解析した。薄膜試料Bは、マトリックス材料として下記参考化合物H2を用い、ドーピング材料として前記参考化合物D1を用いて、上述のようにして薄膜試料を作製した。

[0219] 図3には、薄膜試料Aおよび薄膜試料Bについて測定した過渡PLから得た減衰曲線が示されている。

[0220] [化46]



(参考化合物 H2)

[0221] 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。

[0222] 具体的には、遅延蛍光性の材料からの発光としては、P r o m p t 発光（即時発光）と、D e l a y 発光（遅延発光）とが存在する。P r o m p t 発光（即時発光）とは、当該遅延蛍光性の材料が吸収する波長のパルス光（パルスレーザーから照射される光）で励起された後、当該励起状態から即座に観察される発光である。D e l a y 発光（遅延発光）とは、当該パルス光による励起後、即座には観察されず、その後観察される発光である。

[0223] また、本明細書では、化合物M2の遅延蛍光性の測定には、次に示す方法により作製した試料を用いる。例えば、化合物M2をトルエンに溶解し、自己吸収の寄与を取り除くため励起波長において吸光度が0.05以下の希薄溶液を調製する。また酸素による消光を防ぐため、試料溶液を凍結脱気した

後にアルゴン雰囲気下で蓋付きのセルに封入することで、アルゴンで飽和された酸素フリーの試料溶液とする。

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

[0224] Prompt 発光と Delay 発光の量とその比は、“Nature 492, 234-238, 2012”（参考文献1）に記載された方法と同様の方法により求めることができる。なお、Prompt 発光と Delay 発光の量の算出に使用される装置は、前記参考文献1に記載の装置、または図2に記載の装置に限定されない。

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

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

[0225] ΔST

本実施形態では、最低励起一重項エネルギー S_1 と、77 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} との差 ($S_1 - T_{77K}$) を ΔST として定義する。

[0226] 化合物M2の最低励起一重項エネルギー S_1 (M2) と、化合物M2の77 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} (M2) との差 ΔST (M2) は、好ましくは0.3 eV未満、より好ましくは0.2 eV未満、さらに好ましくは0.1 eV未満であり、よりさらに好ましくは0.01 eV未満である。すなわち、 ΔST (M2) は、下記数式(数10)、(数11)、(数12)又は(数13)の関係を満たすことが好ましい。

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

0)

$$\Delta S T (M 2) = S_1 (M 2) - T_{77K} (M 2) < 0.2 \text{ eV} \quad \dots (\text{数 } 1)$$

1)

$$\Delta S T (M 2) = S_1 (M 2) - T_{77K} (M 2) < 0.1 \text{ eV} \quad \dots (\text{数 } 1)$$

2)

$$\Delta S T (M 2) = S_1 (M 2) - T_{77K} (M 2) < 0.01 \text{ eV} \quad \dots (\text{数 } 1)$$

3)

[0227] ・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、熱活性化遅延蛍光性の化合物は、 $\Delta S T$ が小さい化合物であることが好ましい。 $\Delta S T$ が小さいと、低温（77 [K]）状態でも、項間交差、及び逆項間交差が起こりやすく、励起一重項状態と励起三重項状態とが混在する。その結果、上記と同様にして測定されるスペクトルは、励起一重項状態、及び励起三重項状態の両者からの発光を含んでおり、いずれの状態から発光したのかについて峻別することは困難であるが、基本的には三重項エネルギーの値が支配的と考えられる。

そのため、本実施形態では、通常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 $\lambda_{\text{edge}} \text{ [nm]}$ 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 $T_{77\text{K}}$ とする。

$$\text{換算式 (F 1)} : T_{77\text{K}} \text{ [eV]} = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$$

[0228] 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。

[0229] ・最低励起一重項エネルギー S_1

溶液を用いた最低励起一重項エネルギー S_1 の測定方法 (溶液法と称する場合がある。) としては、下記の方法が挙げられる。

測定対象となる化合物の $10 \mu\text{mol/L}$ トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温 (300 K) でこの試料の吸収スペクトル (縦軸: 吸収強度

、横軸：波長とする。）を測定する。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 λ_{edge} [nm] を次に示す換算式（F2）に代入して最低励起一重項エネルギーを算出する。

$$\text{換算式（F2）： } S_1 [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$$

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

[0230] 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。

[0231] ・化合物M2の製造方法

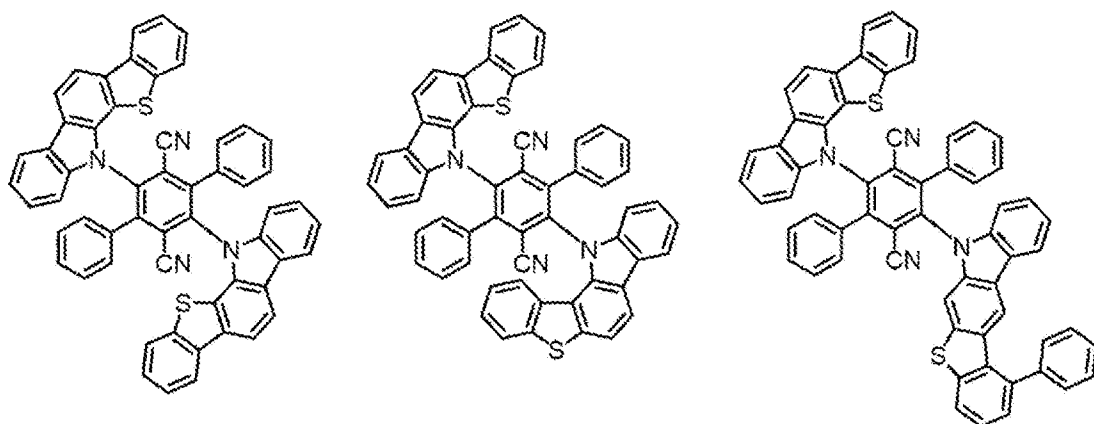
本実施形態に係る化合物M2は、後述する実施例に記載の合成方法に従って、又は当該合成方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることで、製造できる。

[0232] ・化合物M2の具体例

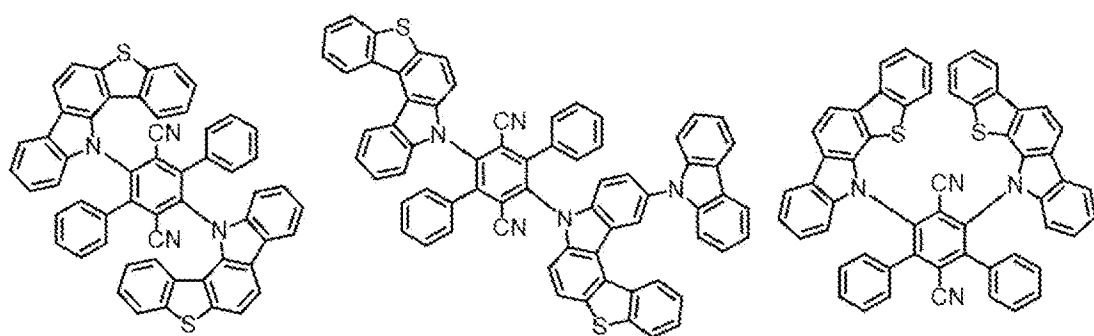
本実施形態の化合物M2の具体例としては、例えば、以下の化合物が挙げられる。ただし、本発明は、これら化合物の具体例に限定されない。本明細書において、重水素原子は、化学式中でDと表記し、軽水素原子は、Hと表記するか又は記載を省略する。

[0233]

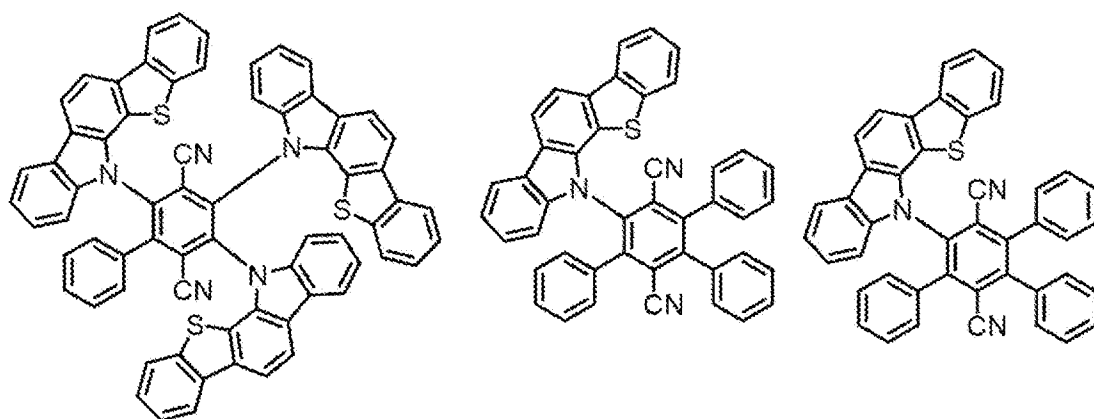
[化47]



[0234] [化48]

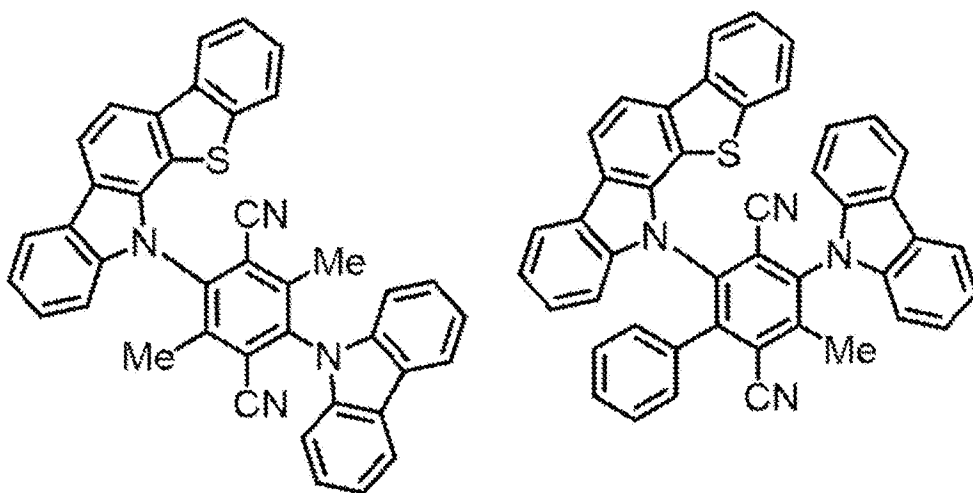


[0235] [化49]

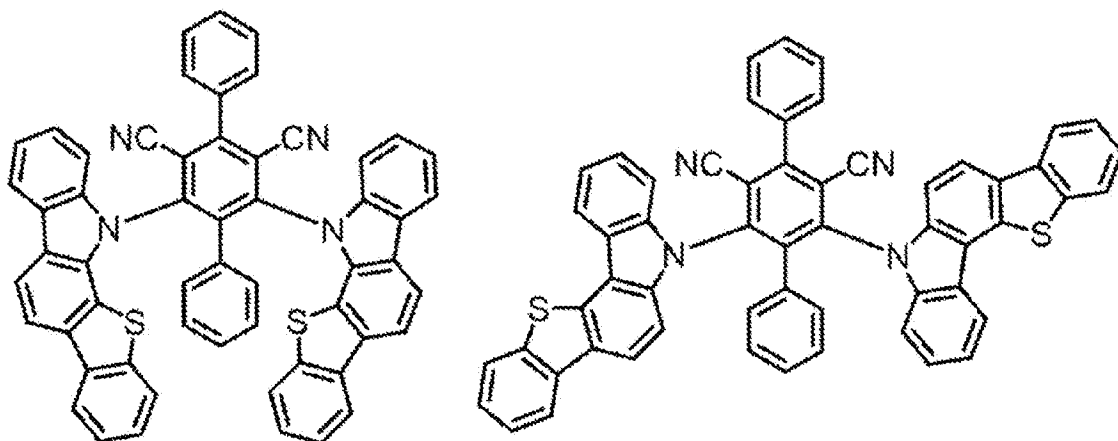


[0236]

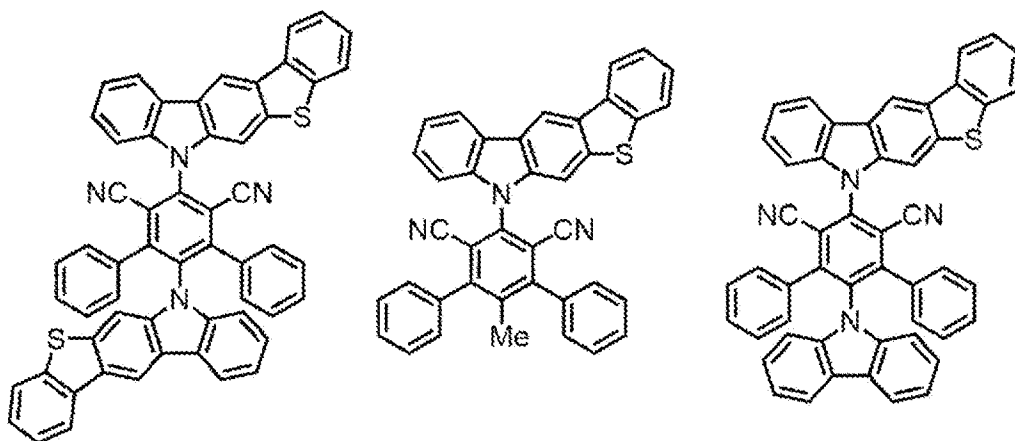
[化50]



[0237] [化51]

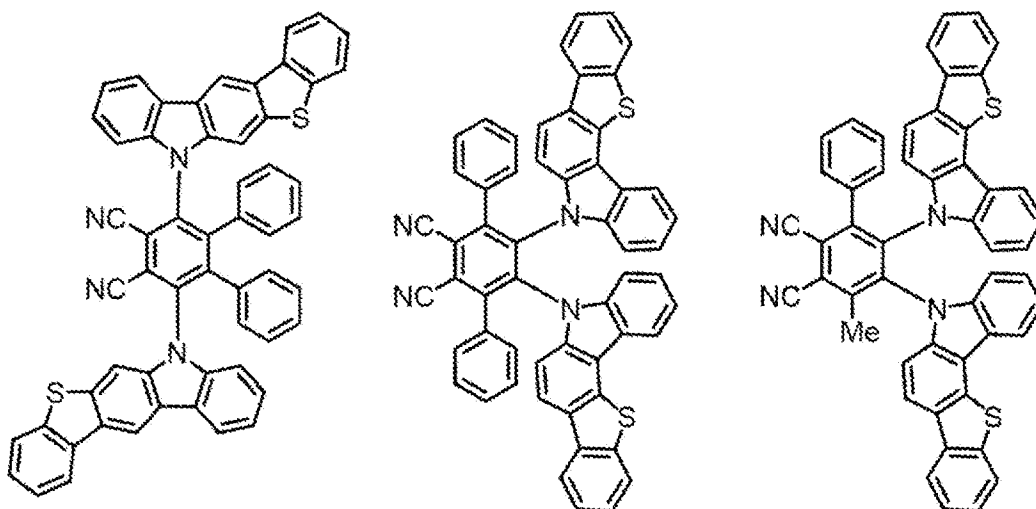


[0238] [化52]

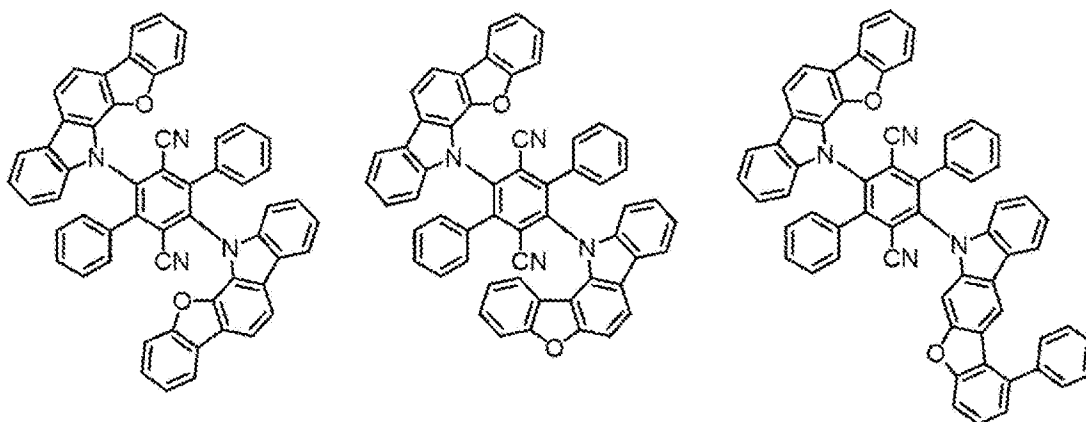


[0239]

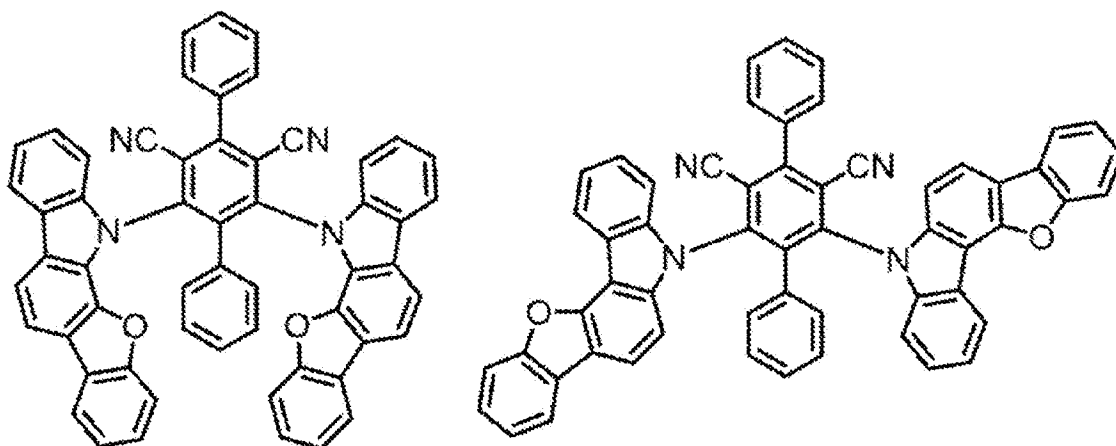
[化53]



[0240] [化54]

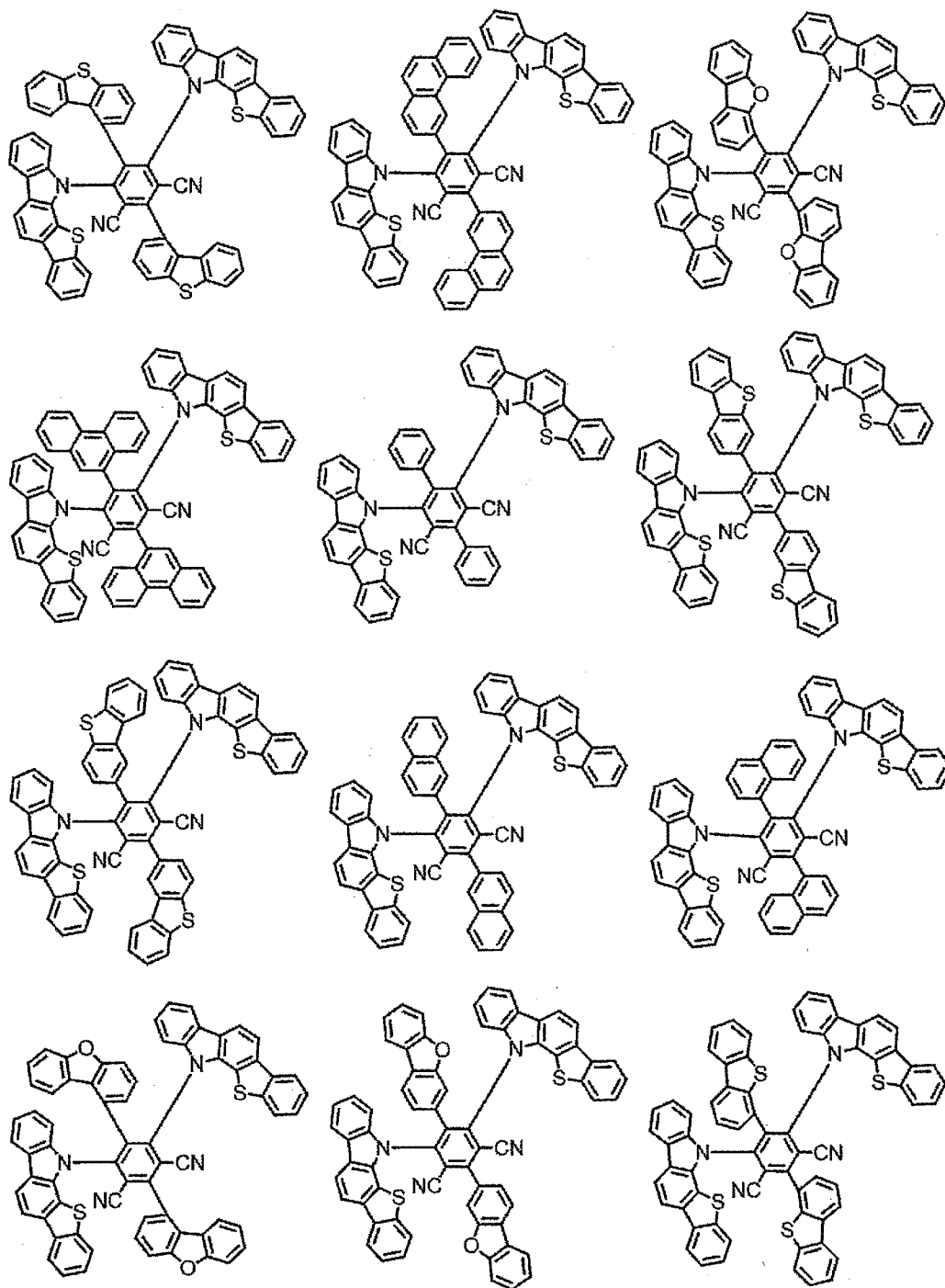


[0241] [化55]



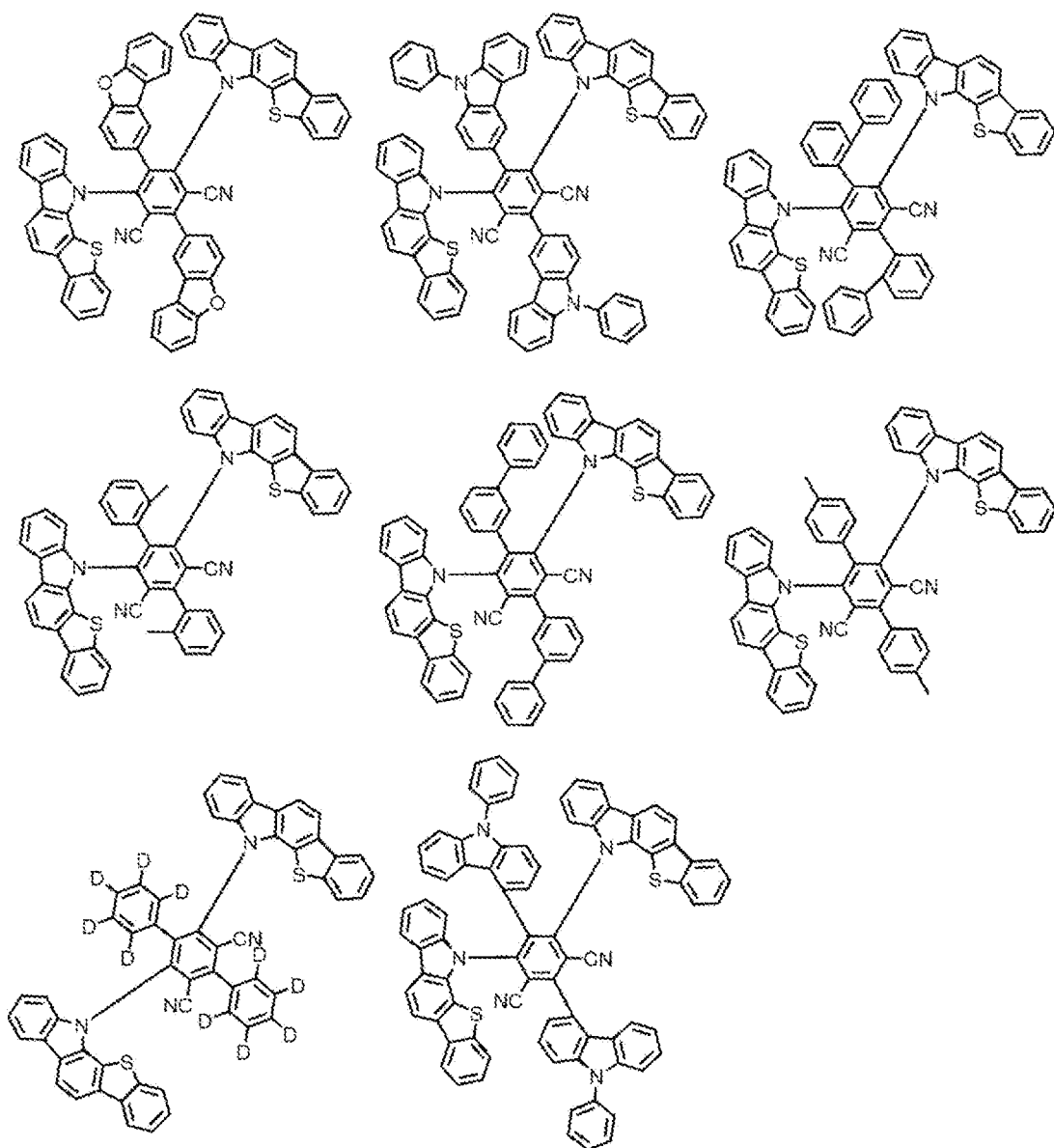
[0242]

[化56]



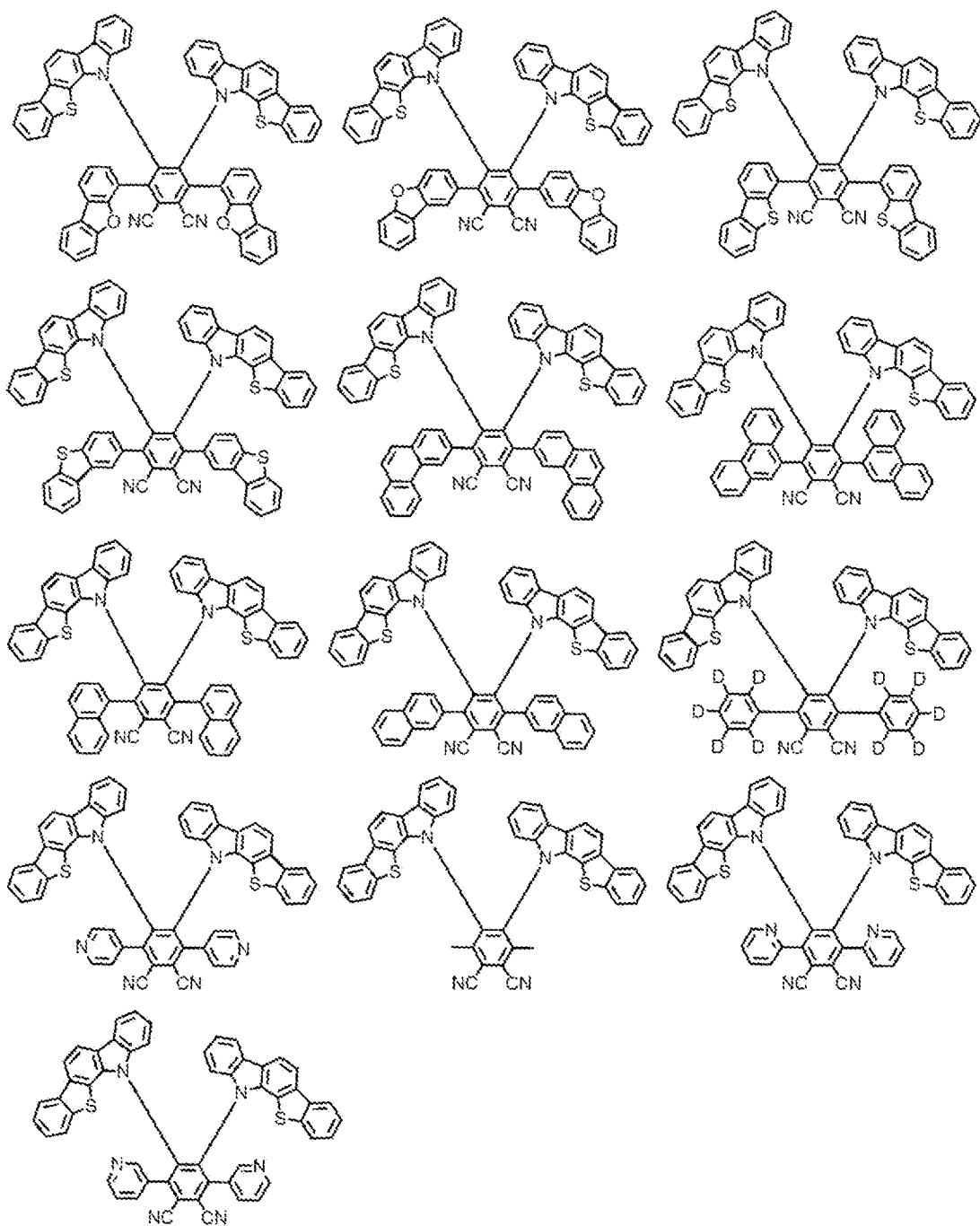
[0243]

[化57]



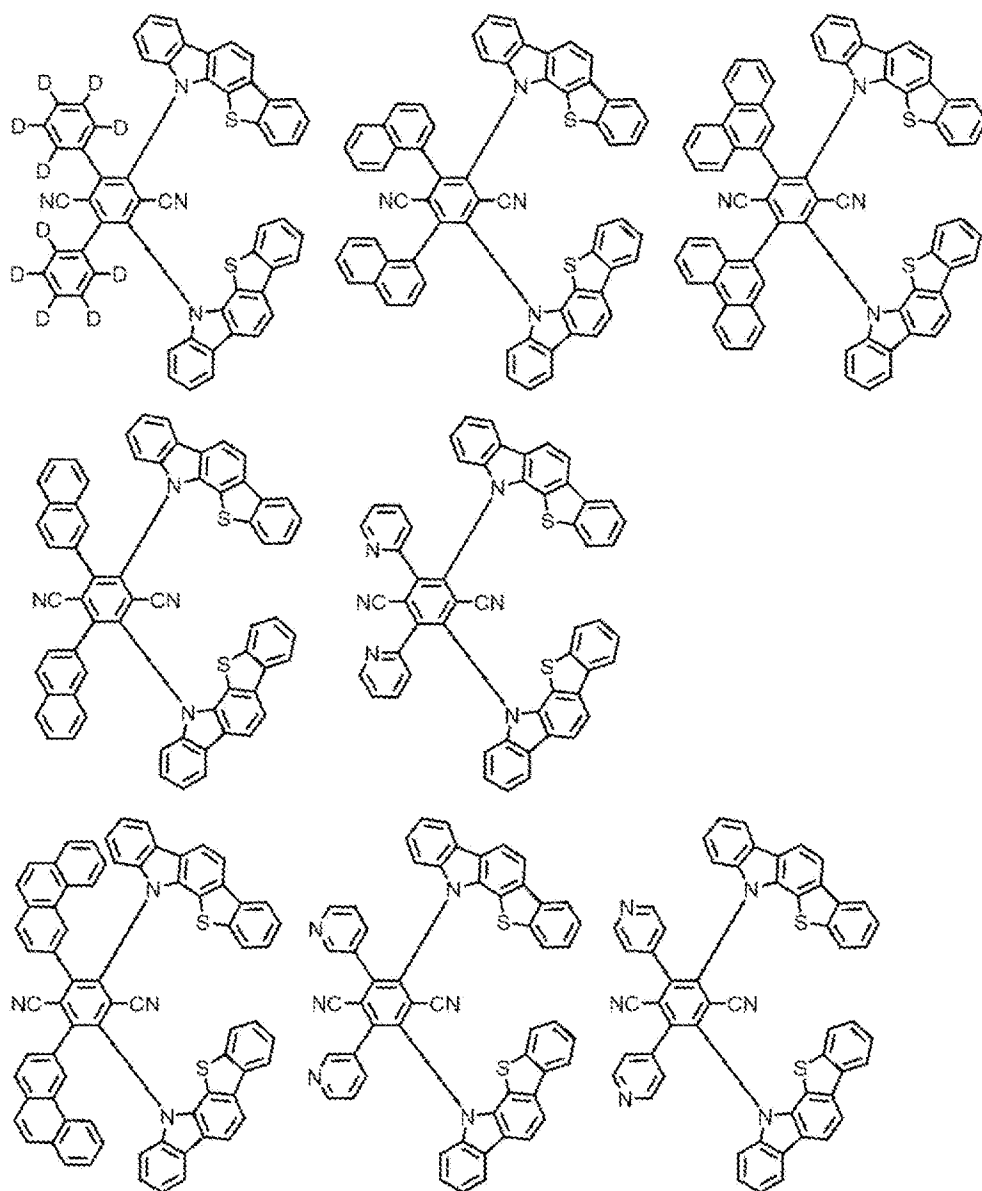
[0244]

[化58]



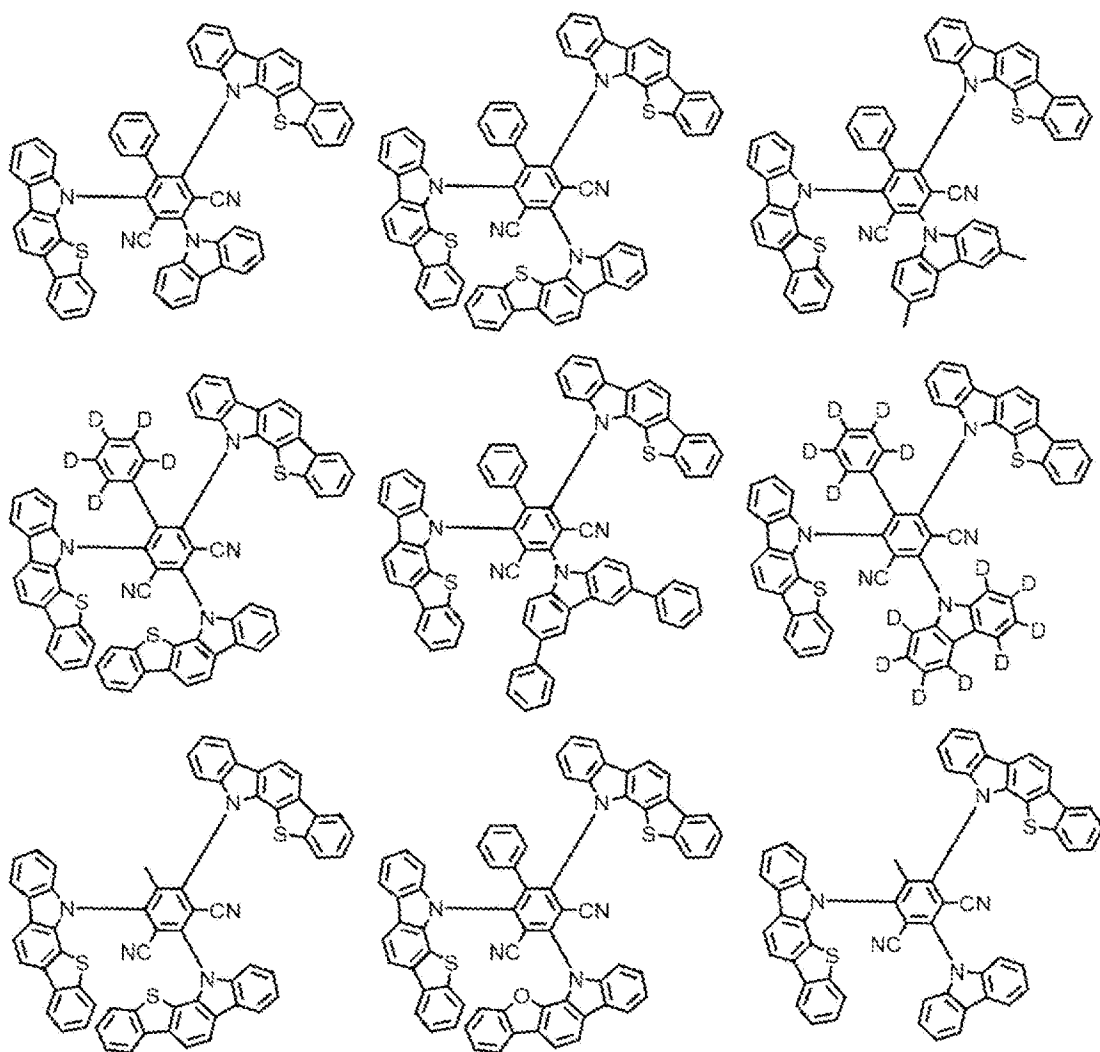
[0245]

[化59]



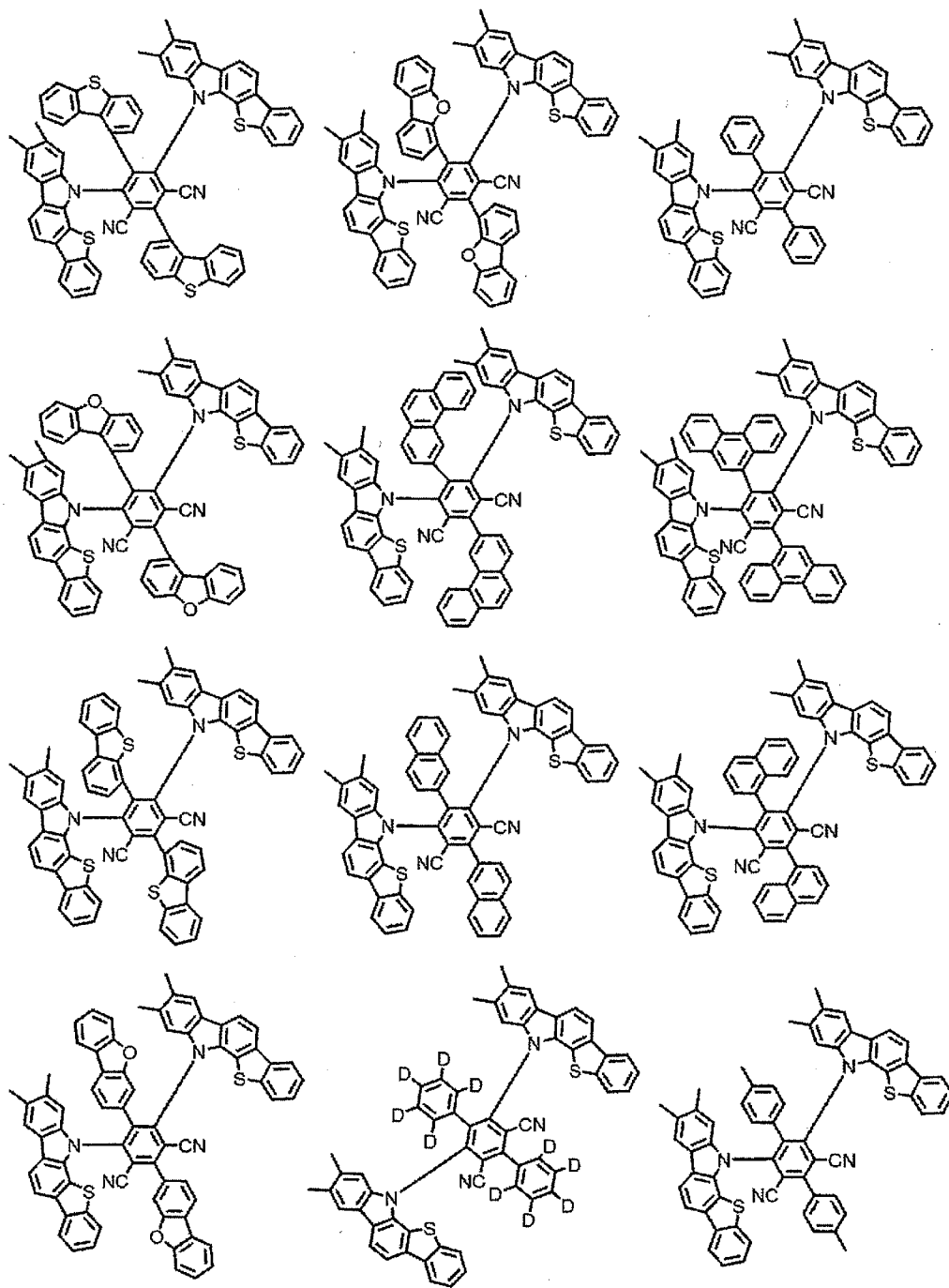
[0246]

[化60]



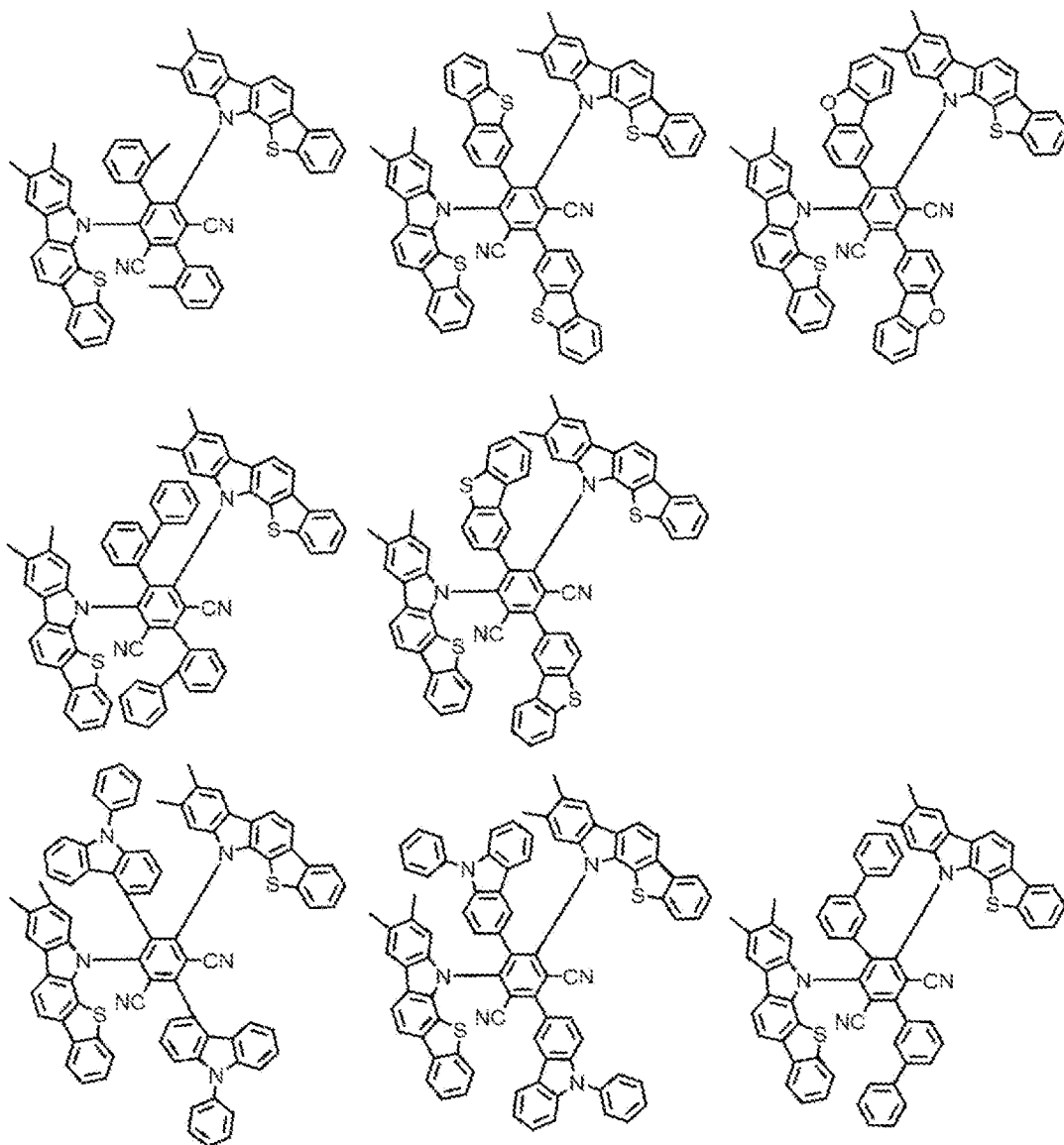
[0247]

[化61]



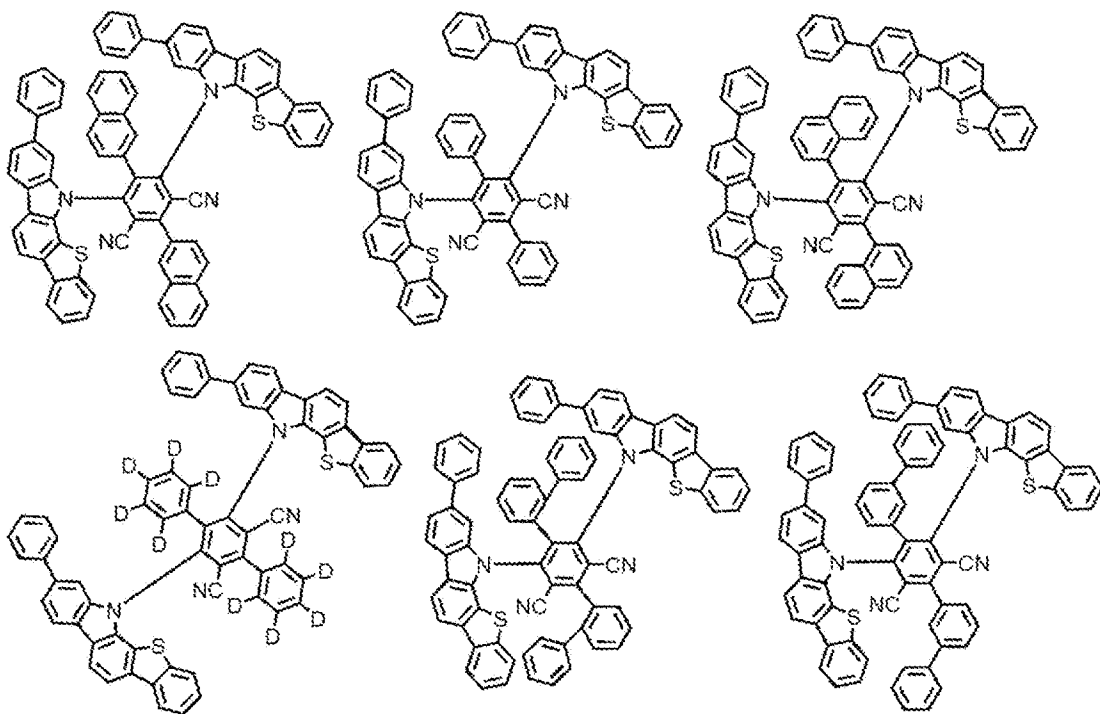
[0248]

[化62]

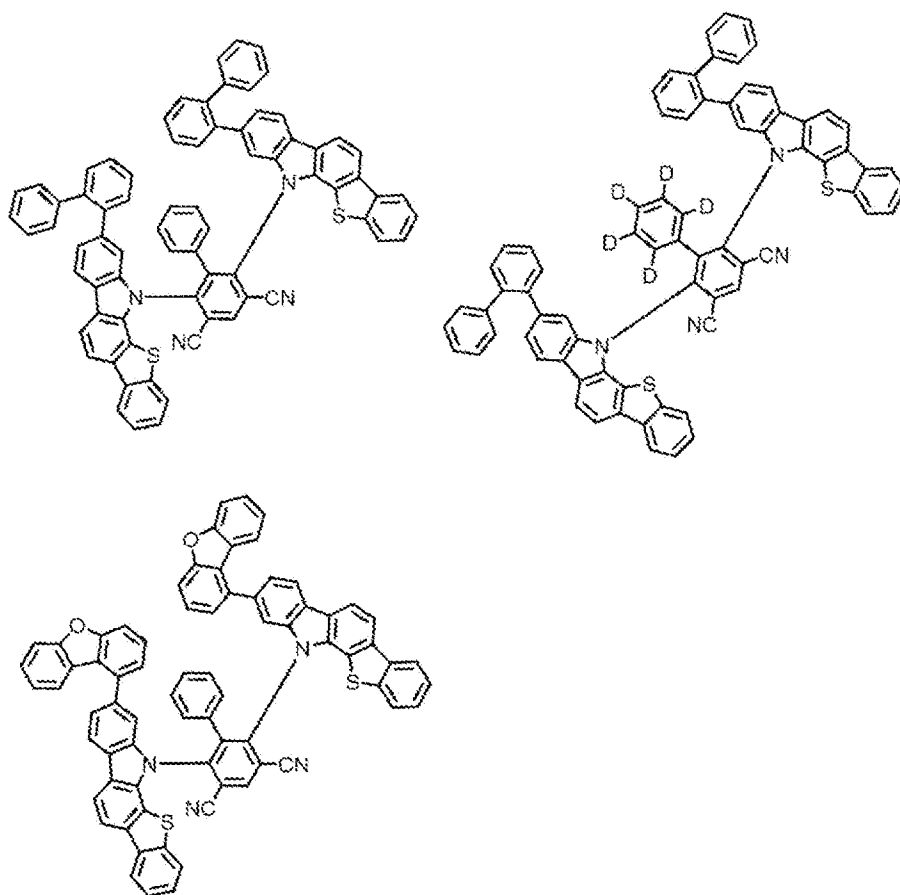


[0249]

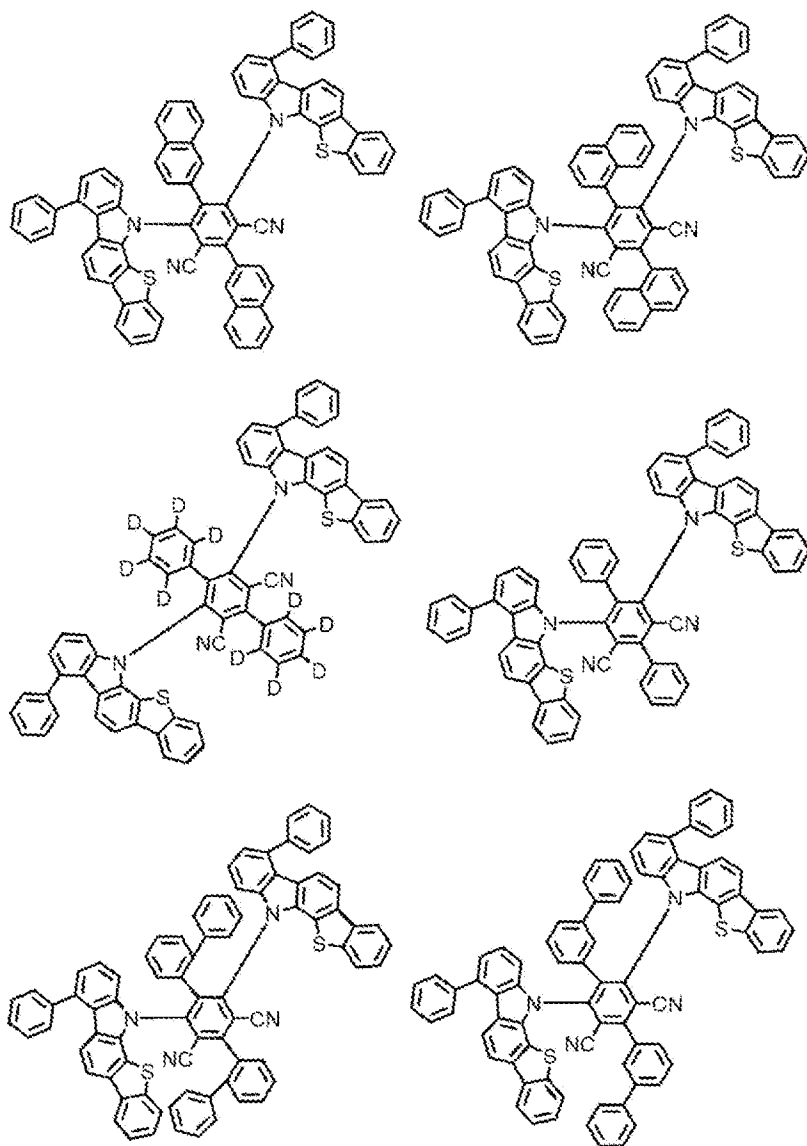
[化63]



[0250] [化64]

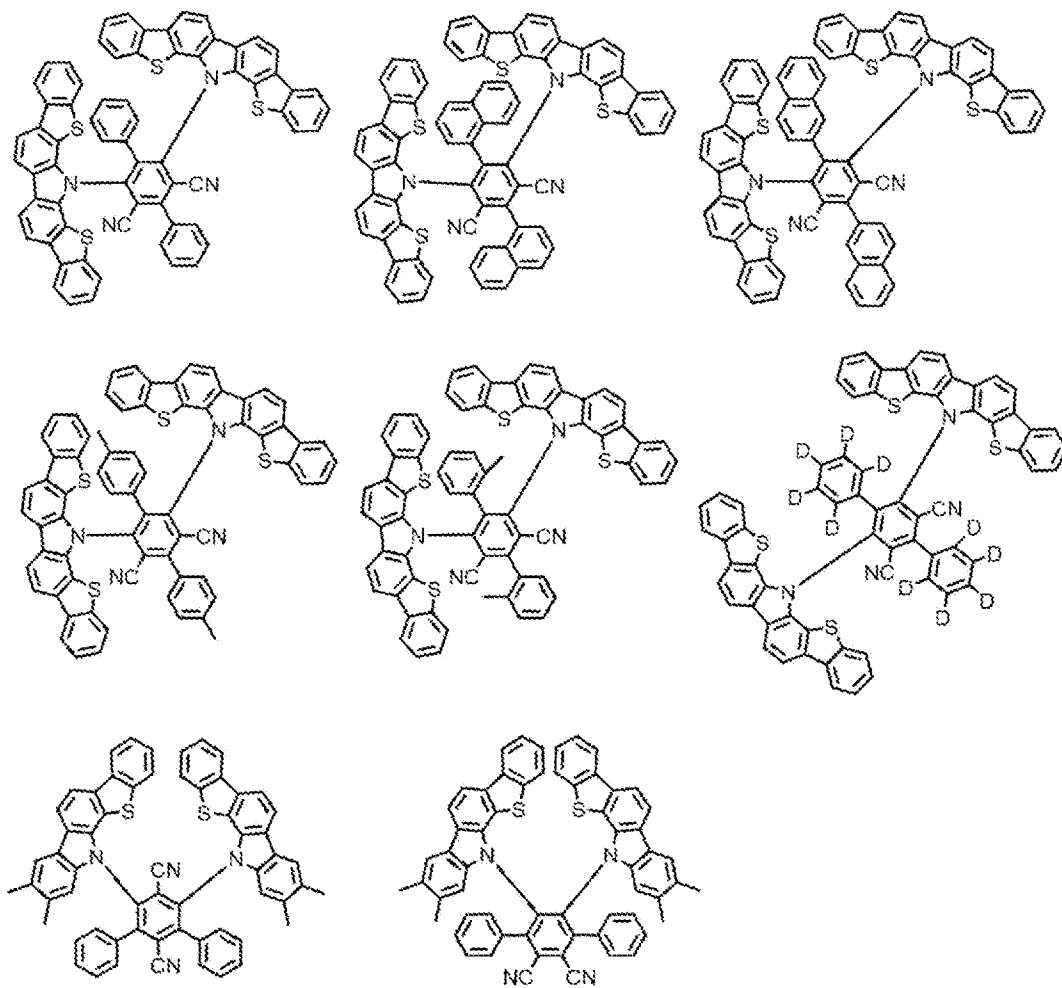


[0251] [化65]



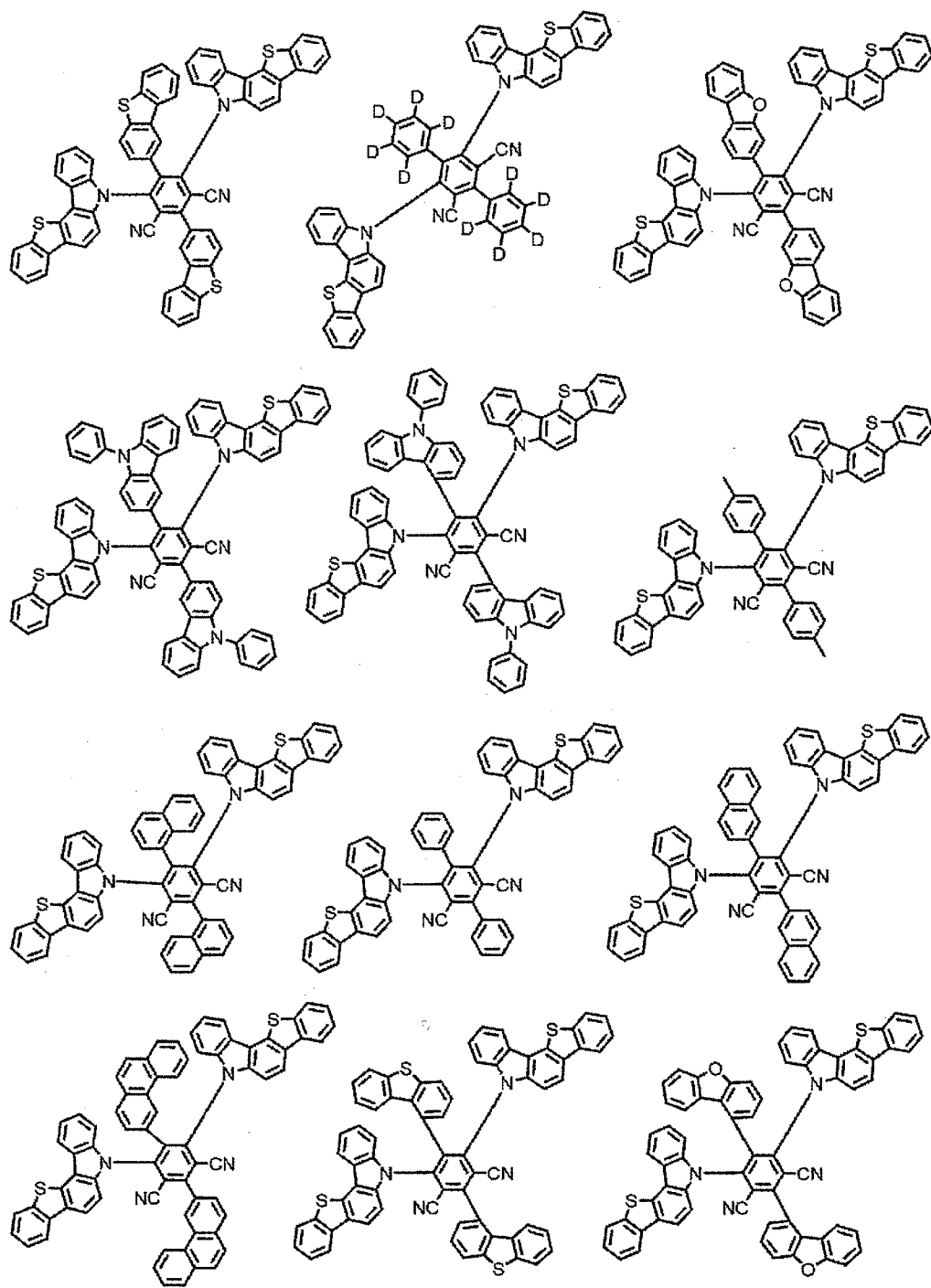
[0252]

[化66]



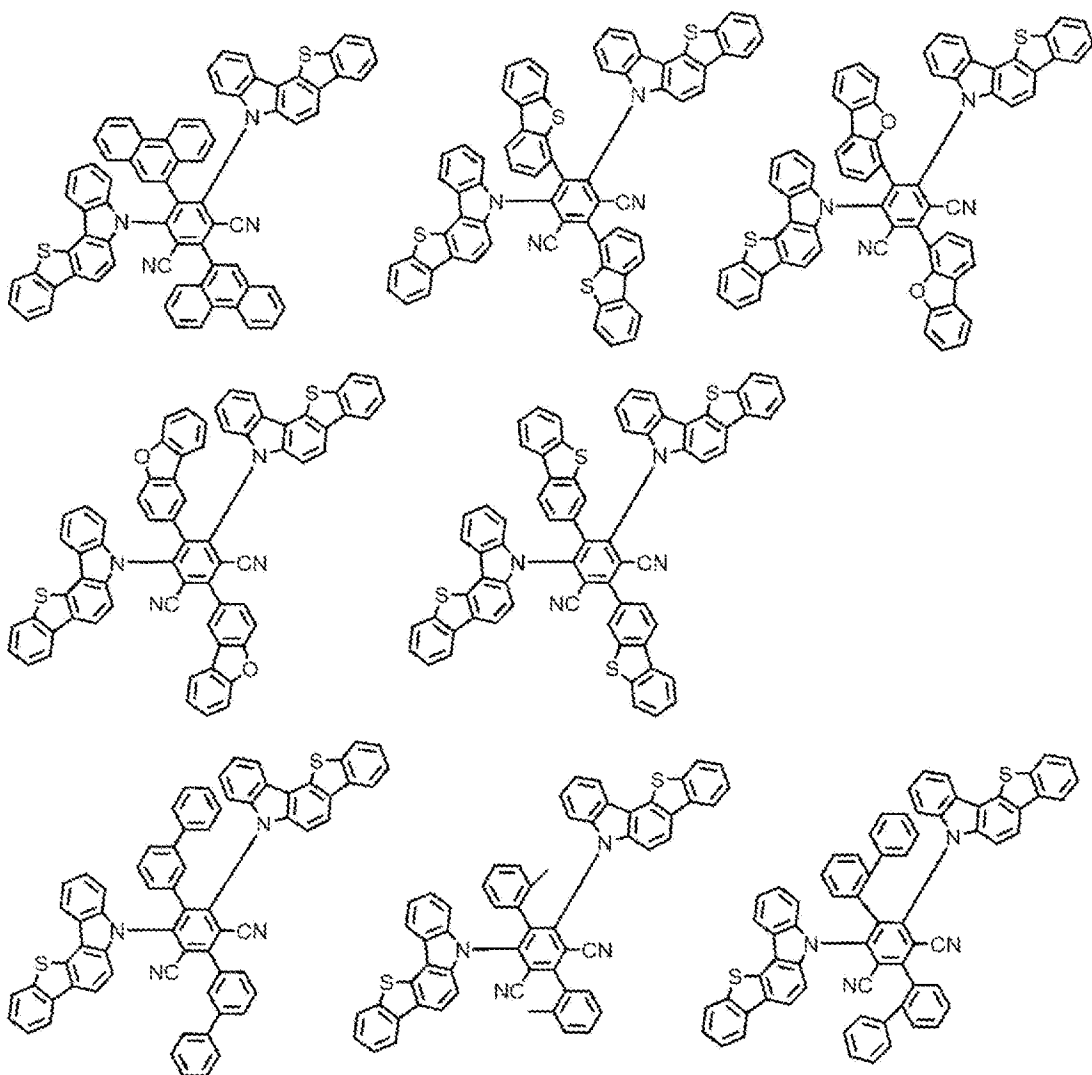
[0253]

[化67]



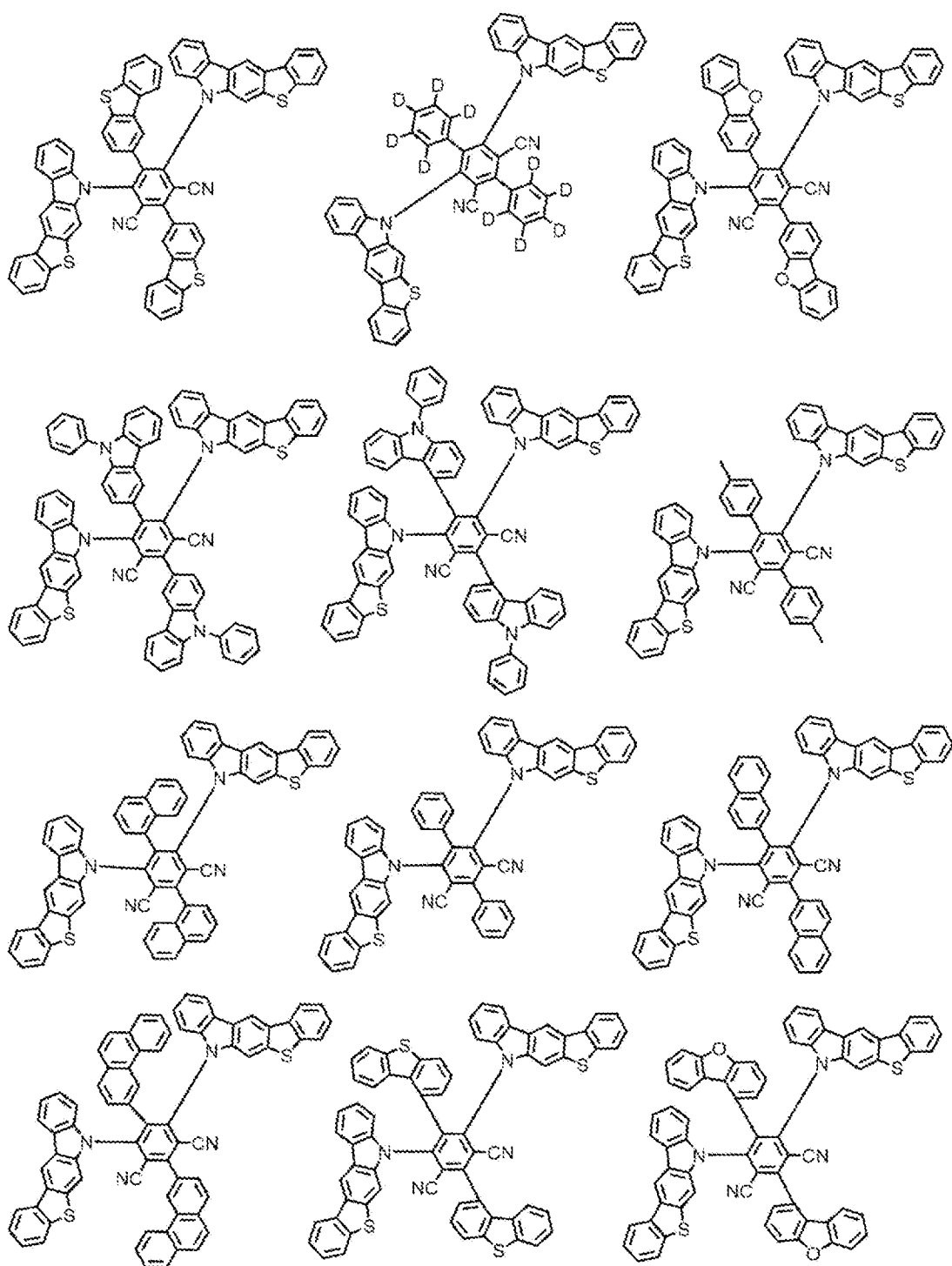
[0254]

[化68]



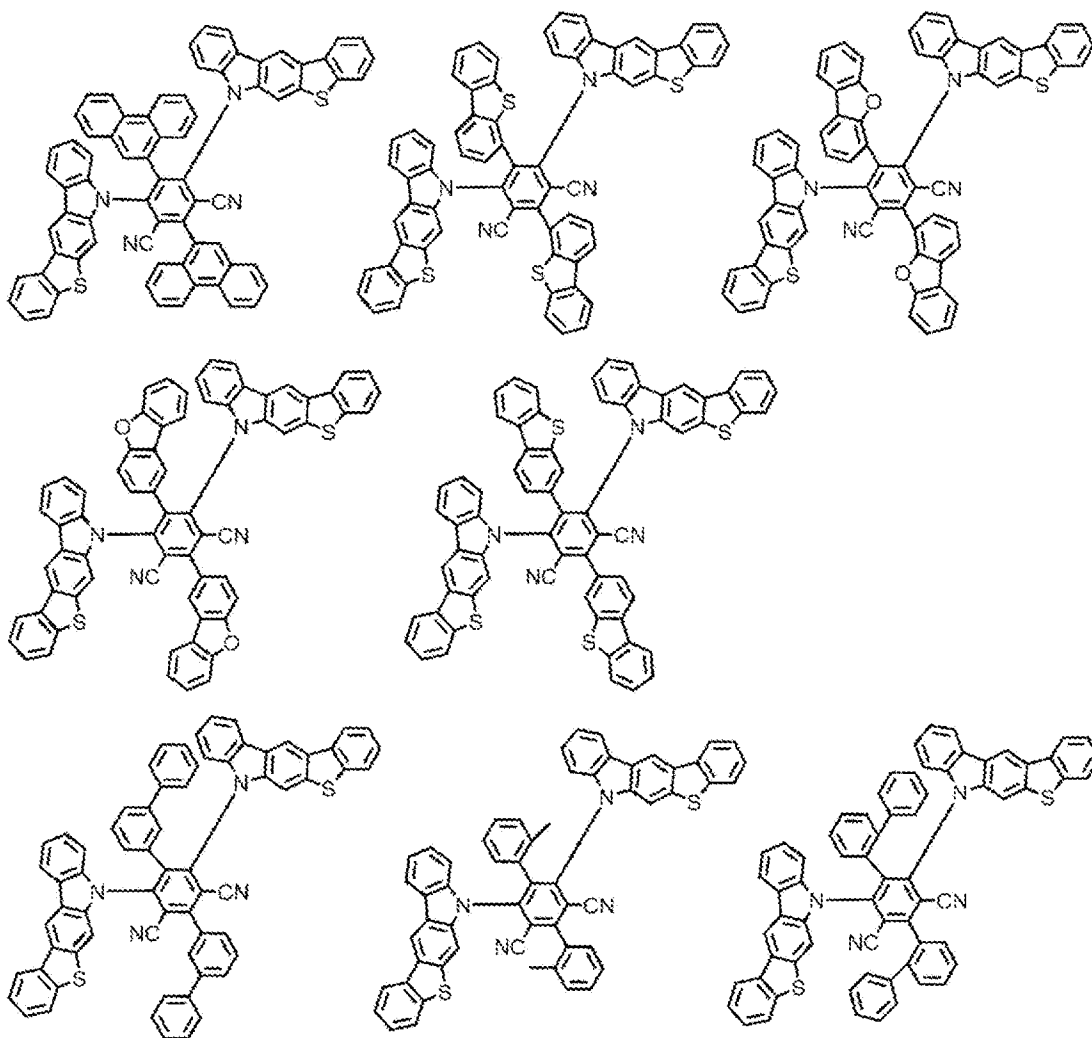
[0255]

[化69]

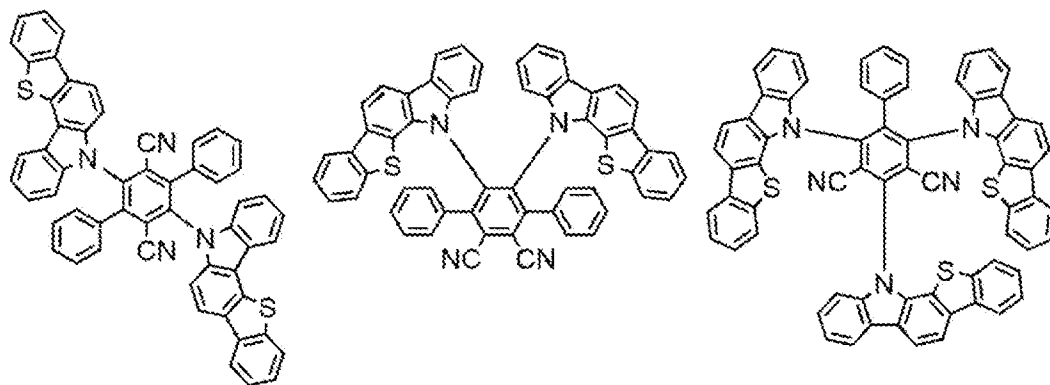


[0256]

[化70]

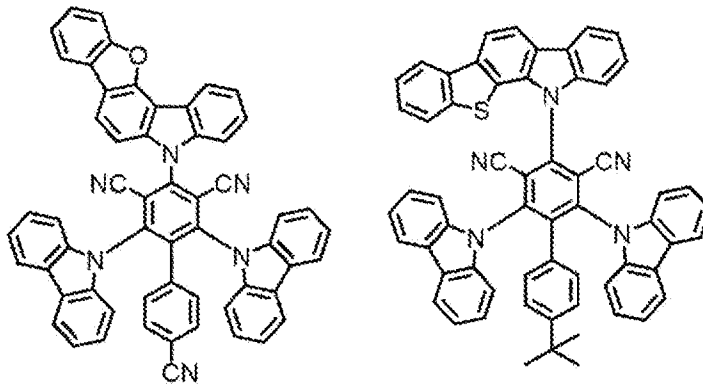


[0257] [化71]



[0258]

[化72]

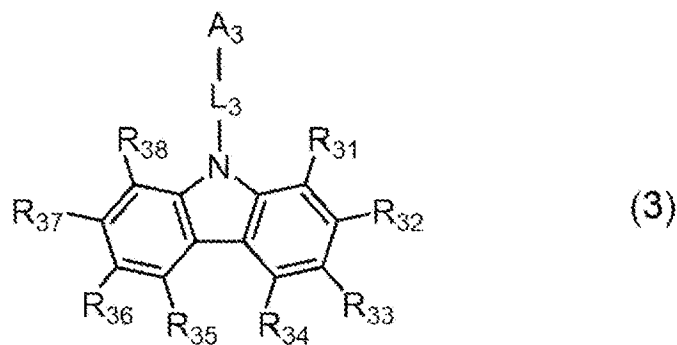


[0259] (化合物M3)

本実施形態の有機EL素子の発光層は、下記一般式(3)で表される化合物M3を含む。

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

[0260] [化73]



[0261] (前記一般式(3)において、

A_3 は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

L_3 は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基からなる群から選択される 2 つの基が結合して形成される 2 価の基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリーレン基及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 30 の 2 価の複素環基からなる群から選択される 3 つの基が結合して形成される 2 価の基であり、

$R_{31} \sim R_{38}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

$-\text{Si}(R_{901})(R_{902})(R_{903})$ で表される基、

$-\text{O}-R_{904}$ で表される基、

$-\text{S}-R_{905}$ で表される基、

$-\text{N}(R_{906})(R_{907})$ で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

$-\text{C}(=\text{O})R_{908}$ で表される基、

$-\text{COOR}_{909}$ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

—P(=O)(R₉₃₁)(R₉₃₂)で表される基、

—Ge(R₉₃₃)(R₉₃₄)(R₉₃₅)で表される基、

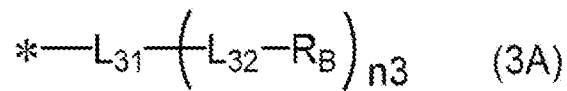
—B(R₉₃₆)(R₉₃₇)で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基、又は

下記一般式(3A)で表される基である。)

[0262] [化74]



[0263] (前記一般式(3A)において、

R_Bは、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

—Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

—O—(R₉₀₄)で表される基、

—S—(R₉₀₅)で表される基、

—N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O)R₉₀₈で表される基、

—COOR₉₀₉で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

—P(=O)(R₉₃₁)(R₉₃₂)で表される基、

— $G_e(R_{933})(R_{934})(R_{935})$ で表される基、

— $B(R_{936})(R_{937})$ で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

R_B が複数存在するとき、複数の R_B は、互いに同一であるか又は異なり、

L_{31} は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、当該アリーレン基から誘導される 3 価の基、4 価の基、5 価の基もしくは 6 価の基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基、当該複素環基から誘導される、3 価の基、4 価の基、5 価の基もしくは 6 価の基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基からなる群から選択される 2 つの基が結合して形成される 2 価の基、当該 2 価の基から誘導される 3 価の基、4 価の基、5 価の基もしくは 6 価の基であり、

L_{32} は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基であり、

n_3 は、1、2、3、4 又は 5 であり、

L_{31} が単結合の場合、 n_3 は 1 であり、 L_{32} が前記一般式 (3) 中における六員環の炭素原子と結合し、

L_{32} が複数存在するとき、複数の L_{32} は、互いに同一であるか又は異なり

、

* は、前記一般式 (3) 中における六員環の炭素原子との結合部位である

。))

[0264] (前記化合物 M3 において、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{906}

、 R_{907} 、 R_{908} 、 R_{909} 、 R_{931} 、 R_{932} 、 R_{933} 、 R_{934} 、 R_{935} 、 R_{936} 及び R_{937} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R_{901} が複数存在する場合、複数の R_{901} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{902} が複数存在する場合、複数の R_{902} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{903} が複数存在する場合、複数の R_{903} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{904} が複数存在する場合、複数の R_{904} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{905} が複数存在する場合、複数の R_{905} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{906} が複数存在する場合、複数の R_{906} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{907} が複数存在する場合、複数の R_{907} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{908} が複数存在する場合、複数の R_{908} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{909} が複数存在する場合、複数の R_{909} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{931} が複数存在する場合、複数の R_{931} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{932} が複数存在する場合、複数の R_{932} は、互いに同一であるか又は異なり、

り、

R_{933} が複数存在する場合、複数の R_{933} は、互いに同一であるか又は異なり、

り、

R_{934} が複数存在する場合、複数の R_{934} は、互いに同一であるか又は異なり、

り、

R_{935} が複数存在する場合、複数の R_{935} は、互いに同一であるか又は異なり、

り、

R_{936} が複数存在する場合、複数の R_{936} は、互いに同一であるか又は異なり、

り、

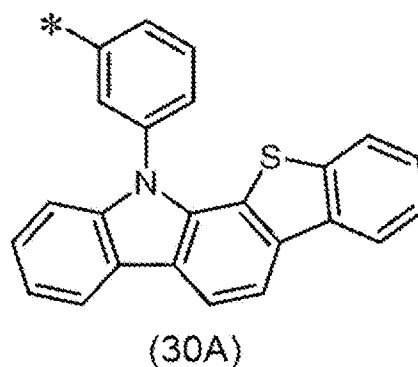
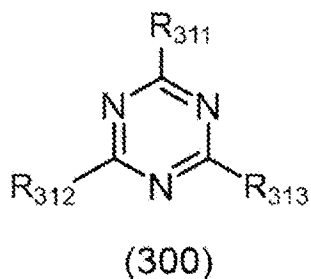
R_{937} が複数存在する場合、複数の R_{937} は、互いに同一であるか又は異なる。))

[0265] 本実施形態に係る有機EL素子は、次の条件 (PRV-1) ~ (PRV-8) のいずれかの条件を満たしてもよい。

[0266] ・条件 (PRV-1)

化合物M3が、下記一般式 (300) で表される化合物Mx3である場合は無い。

[0267] [化75]



[0268] (前記一般式 (300) において、

R_{311} がフェニル構造であり、

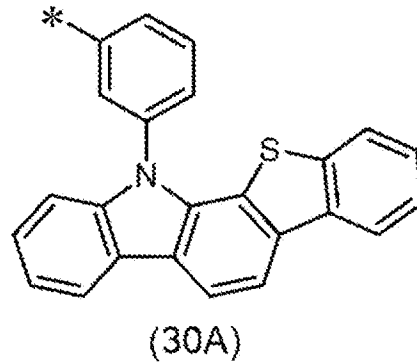
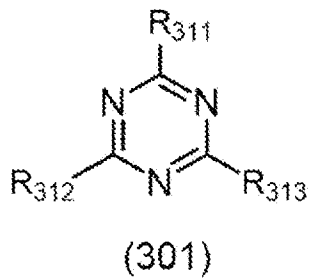
R_{312} がビフェニル構造であり、

R_{313} が前記一般式 (30A) で表される構造である。)

[0269] ・条件 (PRV-2)

化合物M3が、下記一般式(301)で表される化合物M₃₂である場合は無い。

[0270] [化76]



[0271] (前記一般式(301)において、

R₃₁₁がフェニル構造であり、

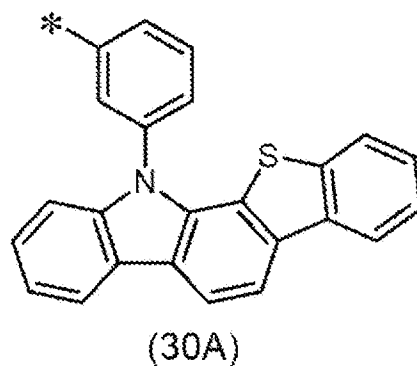
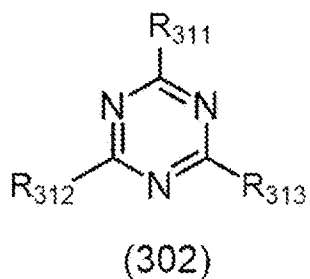
R₃₁₂がビフェニル構造であり、

R₃₁₃が前記一般式(30A)で表される構造である。)

[0272] ・条件(PRV-3)

化合物M3が、下記一般式(302)で表される化合物M₃₃である場合は無い。

[0273] [化77]



[0274] (前記一般式(302)において、

R₃₁₁がフェニル構造を含み、

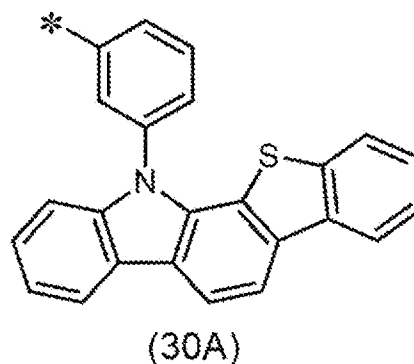
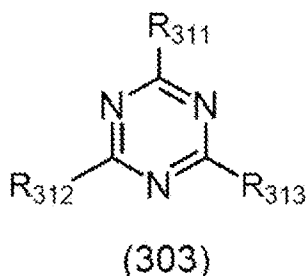
R₃₁₂がビフェニル構造を含み、

R₃₁₃が前記一般式(30A)で表される構造を含む。)

[0275] ・条件（PRV-4）

化合物M3が、下記一般式（303）で表される化合物Mx34である場合は無い。

[0276] [化78]



[0277] （前記一般式（303）において、

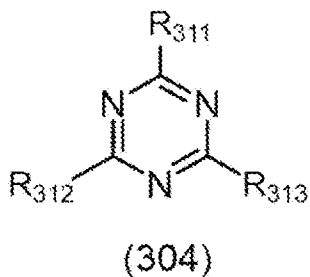
R_{311} 、 R_{312} 及び R_{313} のうちの1つが前記一般式（30A）で表される構造であり、

R_{311} 、 R_{312} 及び R_{313} のうちの残りの2つは、それぞれ独立に、前記一般式（3）における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。）

[0278] ・条件（PRV-5）

化合物M3が、下記一般式（304）で表される化合物Mx35である場合は無い。

[0279] [化79]



[0280] （前記一般式（304）において、 R_{311} 、 R_{312} 及び R_{313} は、それぞれ独立に、前記一般式（3）における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義で

ある。)

[0281] ・条件 (PRV-6)

化合物M3が、前記一般式(30A)で表される構造を有する化合物M_x36である場合は無い。

[0282] ・条件 (PRV-7)

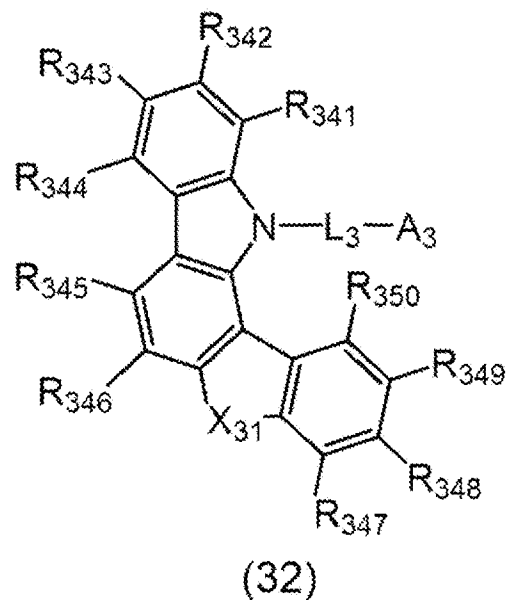
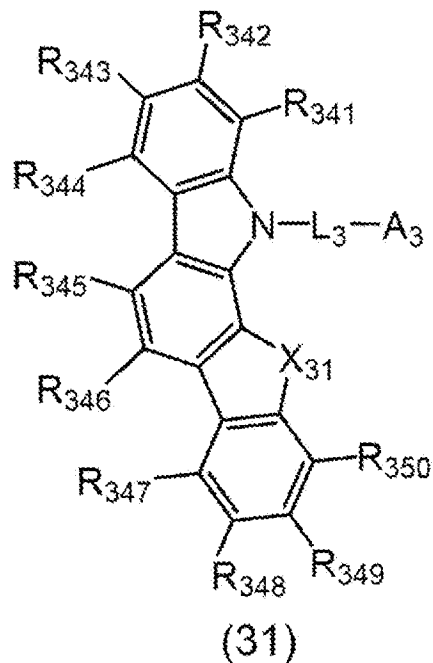
発光層は、化合物M2の一重項エネルギーS₁(M2)よりも大きな一重項エネルギーを有する化合物を、化合物M3以外、含有しない。

[0283] ・条件 (PRV-8)

発光層は、前記一般式(300)で表される化合物M_x3を含有しない。

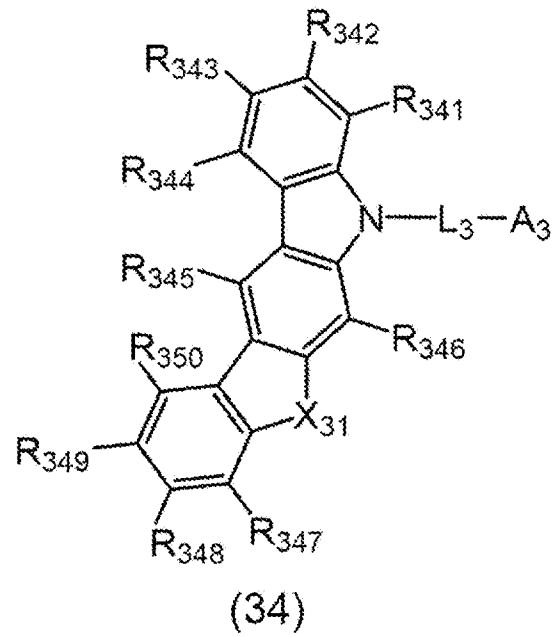
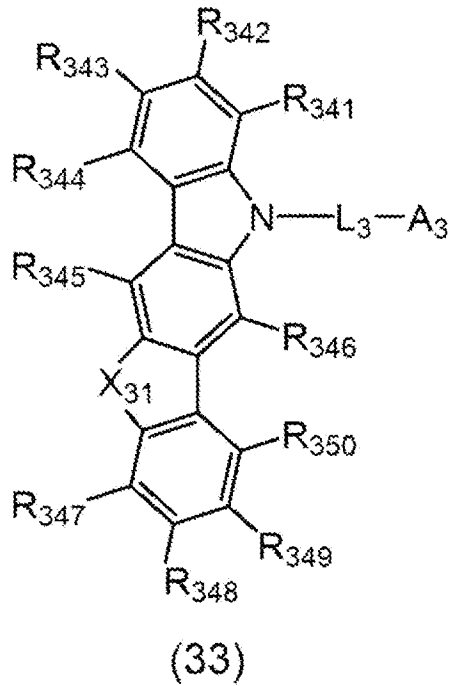
[0284] 化合物M3は、下記一般式(31)~(36)のいずれかで表される化合物であることも好ましい。

[0285] [化80]

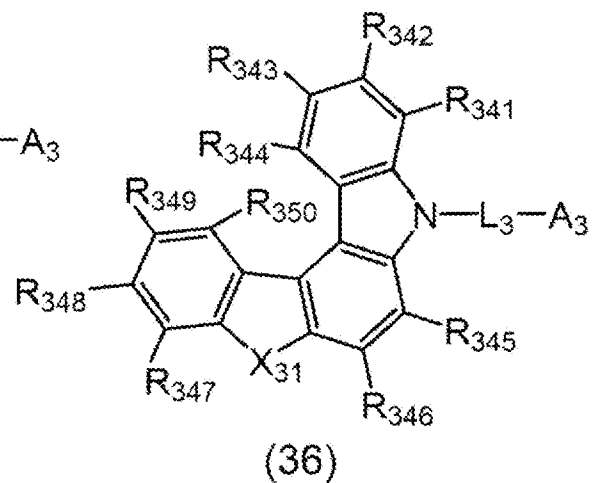
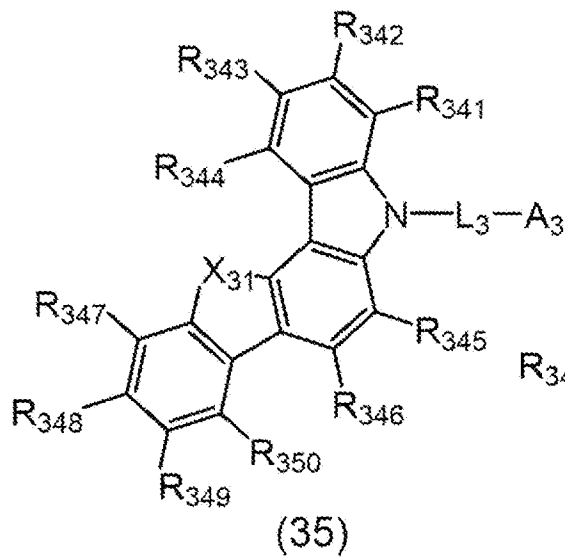


[0286]

[化81]



[0287] [化82]



[0288] (前記一般式(31)～(36)において、

A_3 及び L_3 は、それぞれ、前記一般式(3)における A_3 及び L_3 と同義であり、

$R_{341} \sim R_{350}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

X_{31} は、硫黄原子、酸素原子、 NR_{352} 又は $CR_{353}R_{354}$ であり、

R_{353} 及び R_{354} からなる組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{341} \sim R_{350}$ と、 R_{352} と、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{353} 及び R_{354} とは、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。)

[0289] 化合物M3において、 R_{352} は、置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であることが好ましい。

[0290] 化合物M3において、 R_{353} 及び R_{354} からなる組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{353} 及び R_{354} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

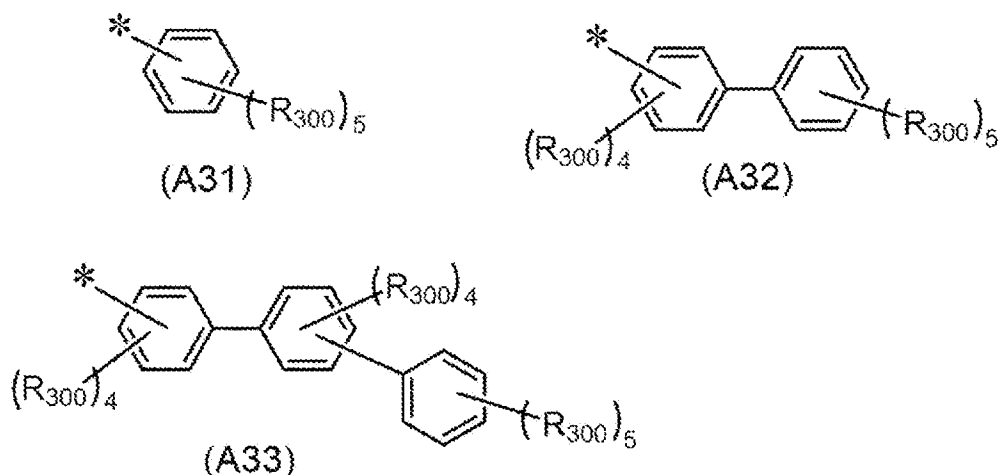
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であることが好ましい。

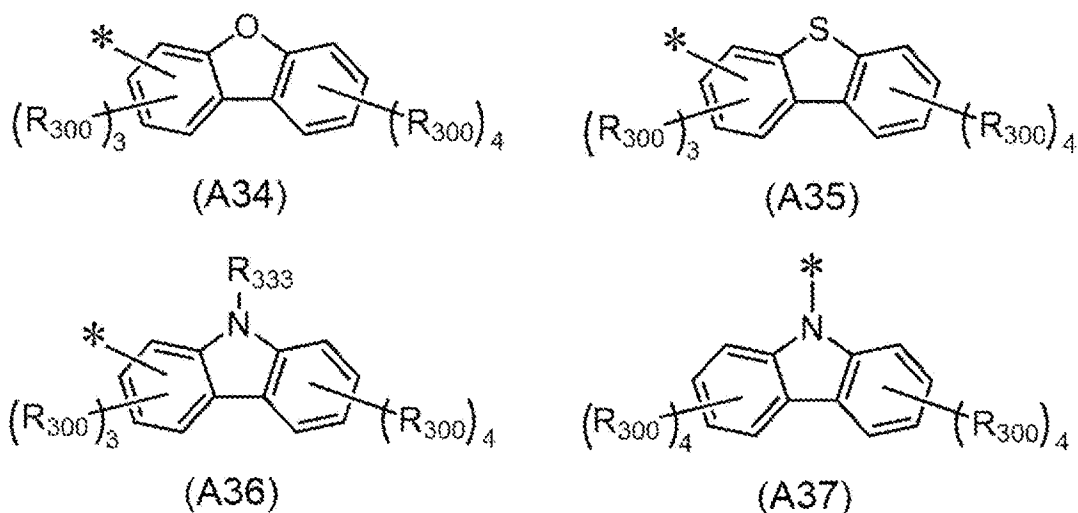
[0291] 化合物M3において、 X_{31} は、硫黄原子又は酸素原子であることが好ましい。

[0292] 化合物M3において、 A_3 は、下記一般式(A31)～(A37)のいずれかで表される基であることが好ましい。

[0293] [化83]



[0294] [化84]



[0295] (前記一般式(A31)～(A37)において、
 複数の R_{300} のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
 互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{300} 、並びに R_{333} は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環

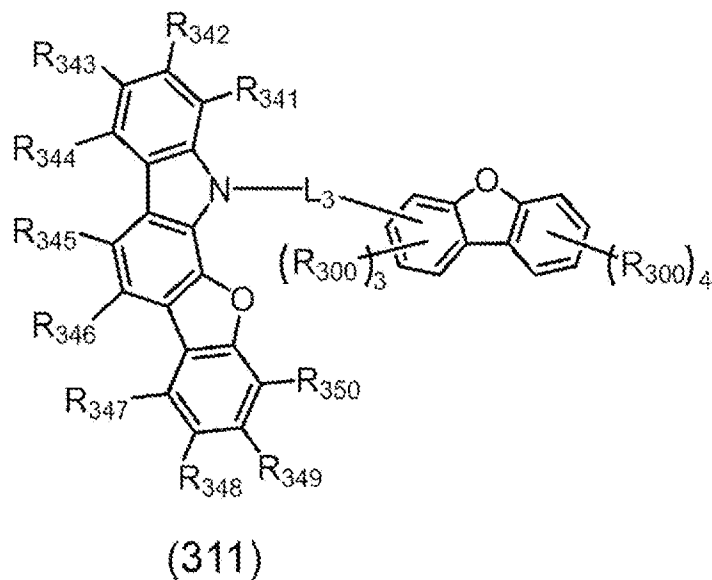
を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義であり、

前記一般式 (A 3 1) ~ (A 3 7) 中の * は、それぞれ、前記化合物 M 3 の L_3 との結合位置を示す。)

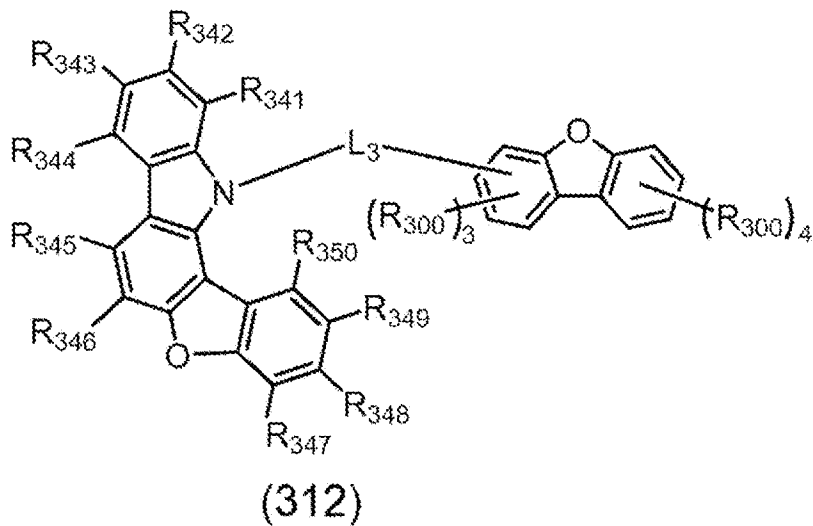
[0296] 化合物 M 3 において、 A_3 は、前記一般式 (A 3 4)、(A 3 5) 又は (A 3 7) で表される基であることも好ましい。

[0297] 化合物 M 3 は、下記一般式 (3 1 1) ~ (3 1 6) のいずれかで表される化合物であることも好ましい。

[0298] [化85]

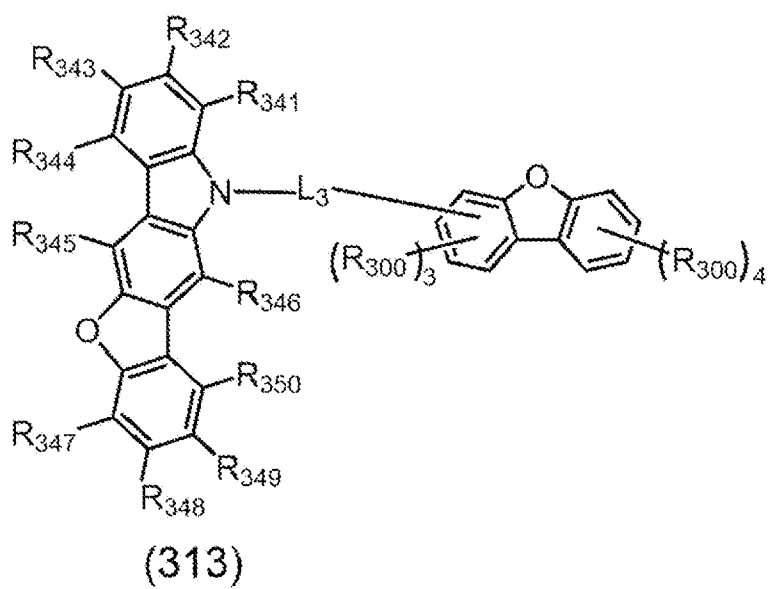


[0299] [化86]

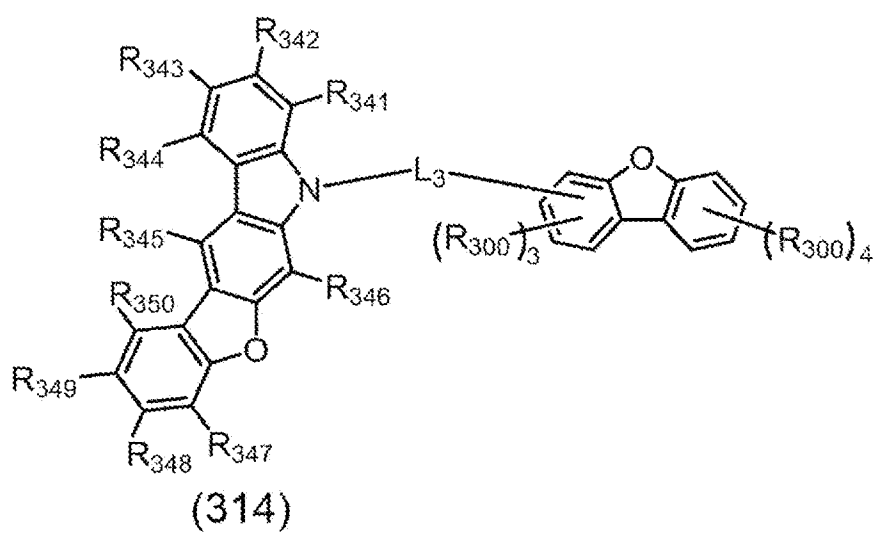


[0300]

[化87]

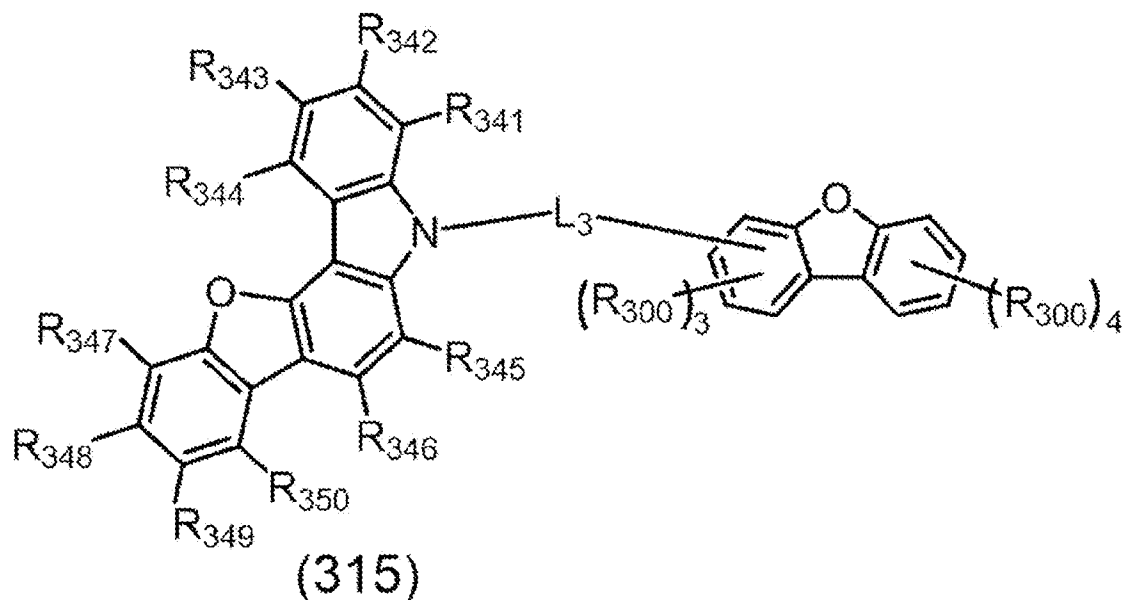


[0301] [化88]

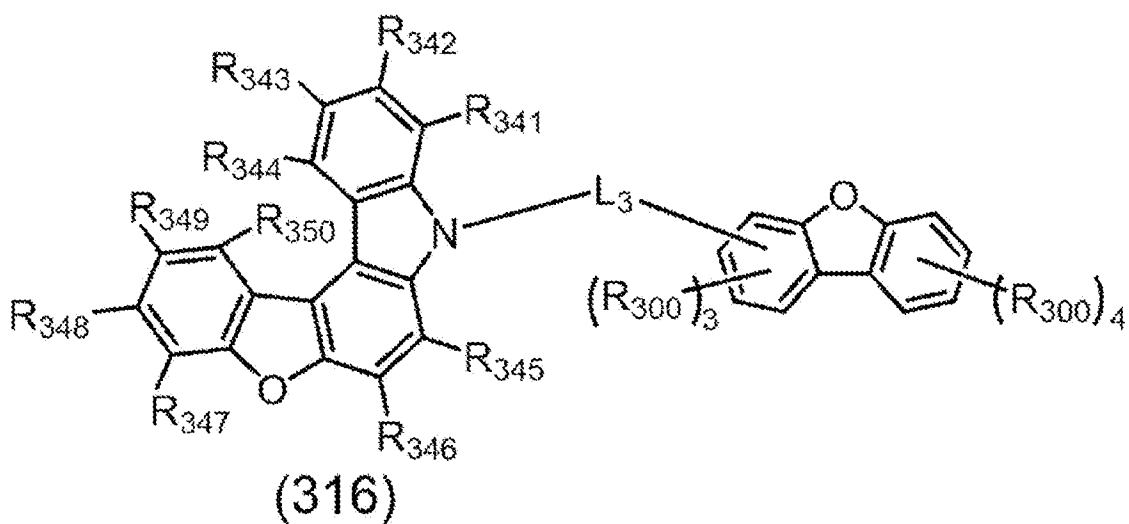


[0302]

[化89]



[0303] [化90]



[0304] (前記一般式 (311) ~ (316) において、

L_3 は、前記一般式 (3) における L_3 と同義であり、

複数の R_{300} のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

$R_{341} \sim R_{350}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

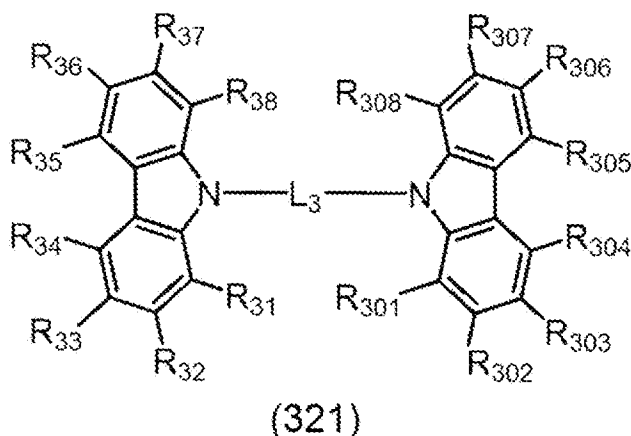
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{300} 、並びに、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{341} \sim R_{350}$ は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。)

[0305] 化合物M3は、下記一般式(321)で表される化合物であることも好ましい。

[0306] [化91]



[0307] (前記一般式(321)において、

L_3 は、前記一般式(3)における L_3 と同義であり、

$R_{31} \sim R_{38}$ 、並びに $R_{301} \sim R_{308}$ は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。)

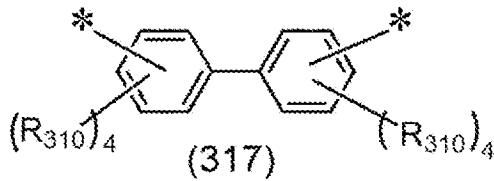
[0308] 化合物M3において、 L_3 は、単結合又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基であることが好ましい。

[0309] 化合物M3において、 L_3 は、単結合、置換もしくは無置換のフェニレン基、置換もしくは無置換のビフェニレン基、又は置換もしくは無置換のターフェニレン基であることが好ましい。

[0310] 化合物M3において、 L_3 は、下記一般式(317)で表される基であるこ

とが好ましい。

[0311] [化92]



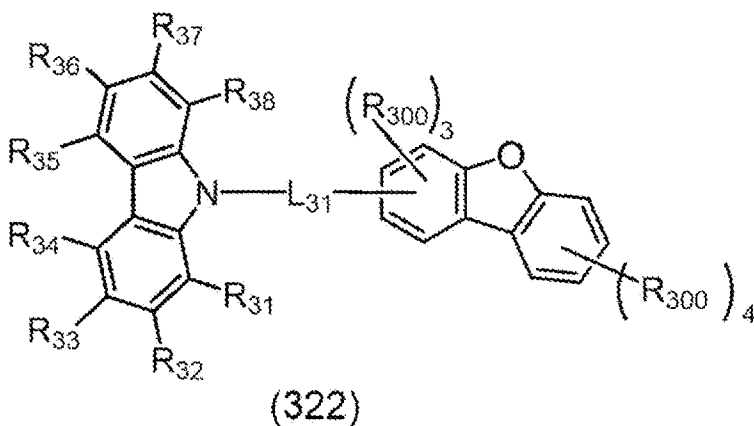
[0312] (前記一般式(317)において、 R_{310} は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義であり、*は、それぞれ独立に、結合位置を示す。)

[0313] 化合物M3において、 L_3 は、下記一般式(318)又は一般式(319)で表される2価の基を含むことも好ましい。

化合物M3において、 L_3 は、下記一般式(318)又は一般式(319)で表される2価の基であることも好ましい。

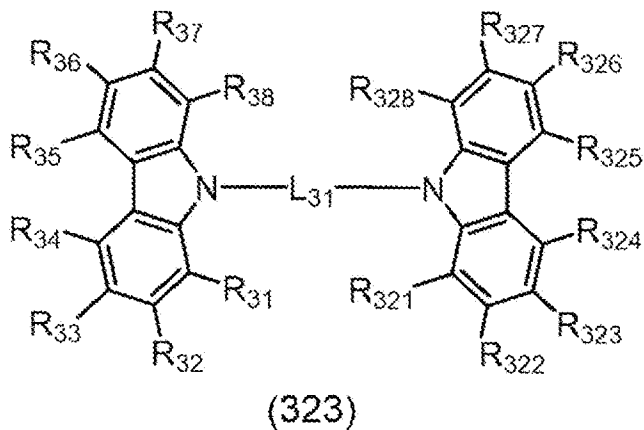
[0314] 化合物M3は、下記一般式(322)又は一般式(323)で表される化合物であることも好ましい。

[0315] [化93]



[0316]

[化94]



[0317] (前記一般式 (322) 及び一般式 (323) において、

 L_{31} は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の2価の複素環基、又は

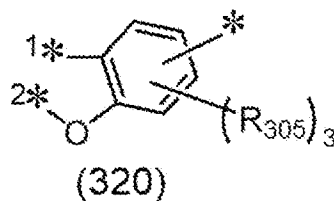
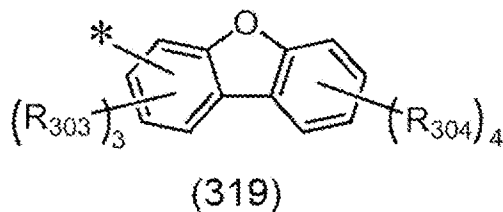
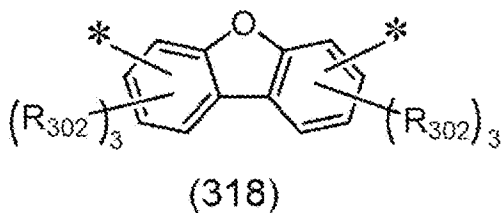
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の2価の複素環基からなる群から選択される2つの基が結合して形成される2価の基であり、

但し、 L_{31} は、下記一般式 (318) 又は一般式 (319) で表される2価の基を含み、

$R_{31} \sim R_{38}$ 、 R_{300} 、並びに $R_{321} \sim R_{328}$ は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。)

[0318]

[化95]



[0319] (前記一般式(319)において、

複数の R_{304} のうちの隣接する2つからなる組が、互いに結合して、前記一般式(320)で表される環を形成し、

前記一般式(320)において、1*及び2*は、それぞれ独立に、 R_{304} が結合している環との結合位置を示し、

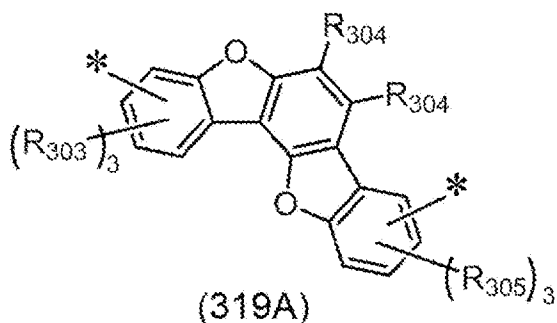
前記一般式(318)における R_{302} 、前記一般式(318)における R_{303} 、前記一般式(319)における R_{303} 、前記一般式(320)で表される環を形成しない R_{304} 、並びに前記一般式(320)における R_{305} は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義であり、

前記一般式(318)～(320)における*は、それぞれ、結合位置を示す。)

[0320] 化合物M3において、 L_3 又は L_{31} としての前記一般式(319)で表される基は、例えば、下記一般式(319A)で表される基である。

[0321]

[化96]

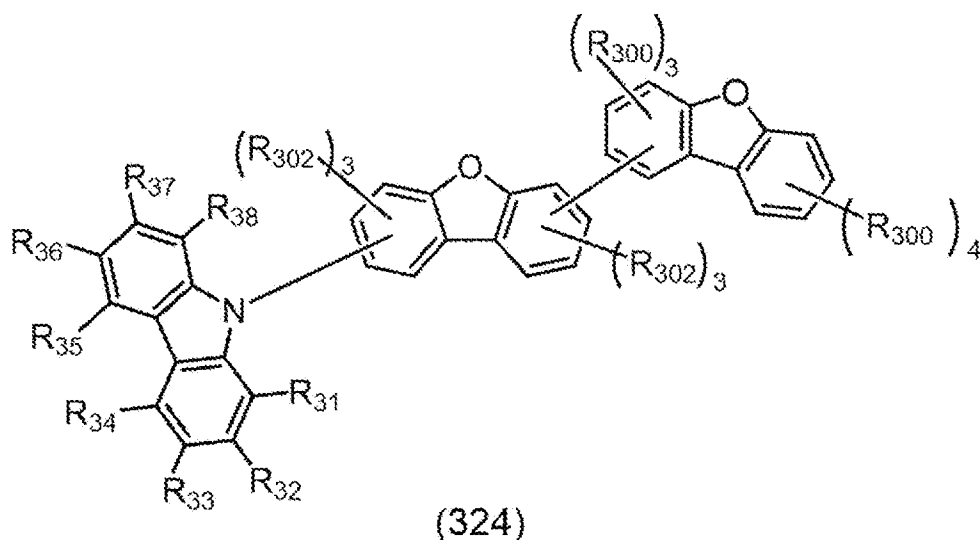


[0322] (前記一般式(319A)において、 R_{303} 、 R_{304} 及び R_{305} は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義であり、前記一般式(319A)における*は、それぞれ、結合位置を示す。)

[0323] 化合物M3は、前記一般式(322)で表される化合物であり、 L_{31} は、前記一般式(318)で表される基であることも好ましい。

[0324] 化合物M3は、下記一般式(324)で表される化合物であることも好ましい。

[0325] [化97]



[0326] (前記一般式(324)において、 $R_{31} \sim R_{38}$ 、 R_{300} 、並びに R_{302} は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。)

[0327] 前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基、又は

前記一般式 (3A) で表される基であり、

前記一般式 (3A) における R_B は、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であることが好ましい。

[0328] 前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

前記一般式 (3A) で表される基であり、

前記一般式 (3A) における R_B は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基であることが好ましい。

[0329] 前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換のフェニル基、又は

前記一般式 (3A) で表される基であり、

前記一般式 (3A) における R_B は、置換もしくは無置換のフェニル基であることが好ましい。

[0330] 化合物 M3 は、ピリジン環、ピリミジン環、及びトリアジン環を有さない化合物であることも好ましい。

[0331] 化合物M3において、 L_{31} は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基、当該アリーレン基から誘導される3価の基、4価の基、5価の基もしくは6価の基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基からなる群から選択される2つの基が結合して形成される2価の基、当該2価の基から誘導される3価の基、4価の基、5価の基もしくは6価の基であり、

L_{32} は、

単結合、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基であることが好ましい。

[0332] 化合物M3において、 L_{31} は、

単結合、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基であり、

n_3 は、1であり、

L_{32} は、

単結合、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基であることが好ましい。

[0333] 化合物M3において、 L_{31} は、

単結合、

置換もしくは無置換のフェニレン基、

置換もしくは無置換のビフェニレン基、又は

置換もしくは無置換のフェニレン基及び置換もしくは無置換のビフェニレン基からなる群から選択される2つの基が結合して形成される2価の基、当該2価の基から誘導される3価の基、4価の基、5価の基もしくは6価の基であり、

n_3 は、1 であり、

L_{32} は、

単結合、

置換もしくは無置換のフェニレン基、又は

置換もしくは無置換のビフェニレン基であることが好ましい。

[0334] 化合物 M3 において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、

無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルケニル基、

無置換の炭素数 2 ～ 25 のアルキニル基、

無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基、

—S i (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

—O— (R₉₀₄) で表される基、

—S— (R₉₀₅) で表される基、

—N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

—C (=O) R₉₀₈ で表される基、

—C O O R₉₀₉ で表される基、

—P (=O) (R₉₃₁) (R₉₃₂) で表される基、

—G e (R₉₃₃) (R₉₃₄) (R₉₃₅) で表される基、

—B (R₉₃₆) (R₉₃₇) で表される基、

—S (=O)₂ R₉₃₈ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基、又は

無置換の環形成原子数 5 ～ 25 の複素環基であり、

R₉₀₁ ～ R₉₀₉、並びに R₉₃₁ ～ R₉₃₈ は、それぞれ独立に、

水素原子、
無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、
無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基、又は
無置換の環形成原子数 5 ～ 25 の複素環基であることが好ましい。

[0335] 化合物M3において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、ハロゲン原子、無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5 ～ 25 の複素環基であることが好ましい。

[0336] 化合物M3において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、無置換の炭素数 1 ～ 10 のアルキル基、無置換の環形成炭素数 6 ～ 12 のアリール基、又は無置換の環形成原子数 5 ～ 12 の複素環基であることが好ましい。

[0337] 化合物M3において、「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であることも好ましい。

[0338] ・化合物M3の製造方法

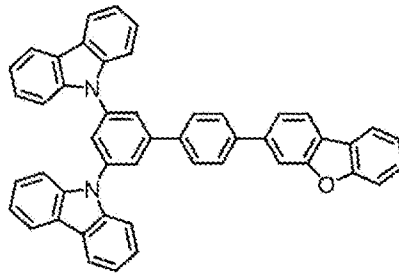
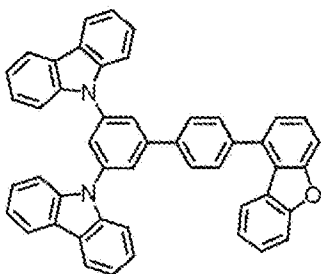
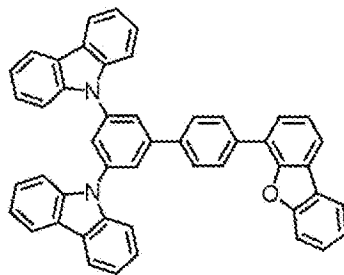
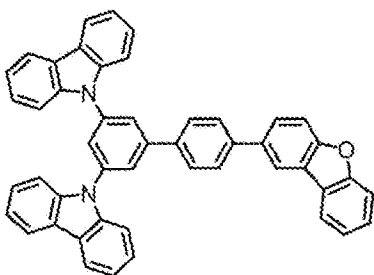
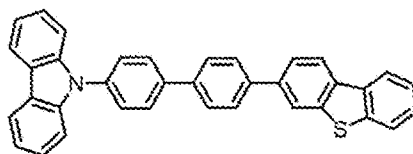
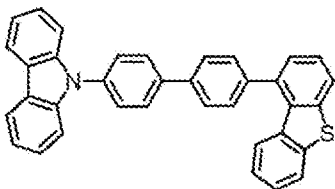
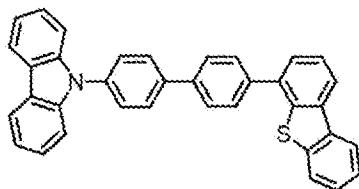
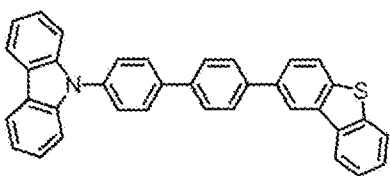
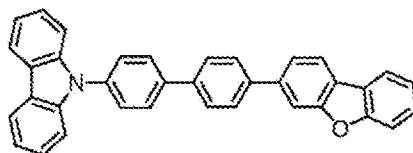
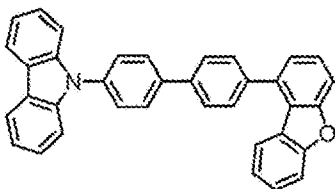
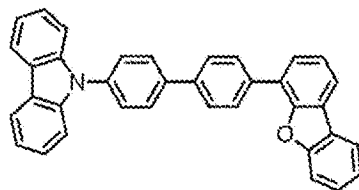
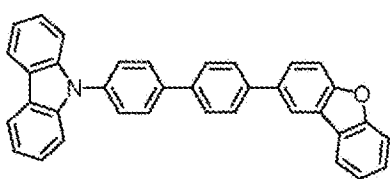
本実施形態に係る化合物M3は、公知の方法により製造することができる。

[0339] ・化合物M3の具体例

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

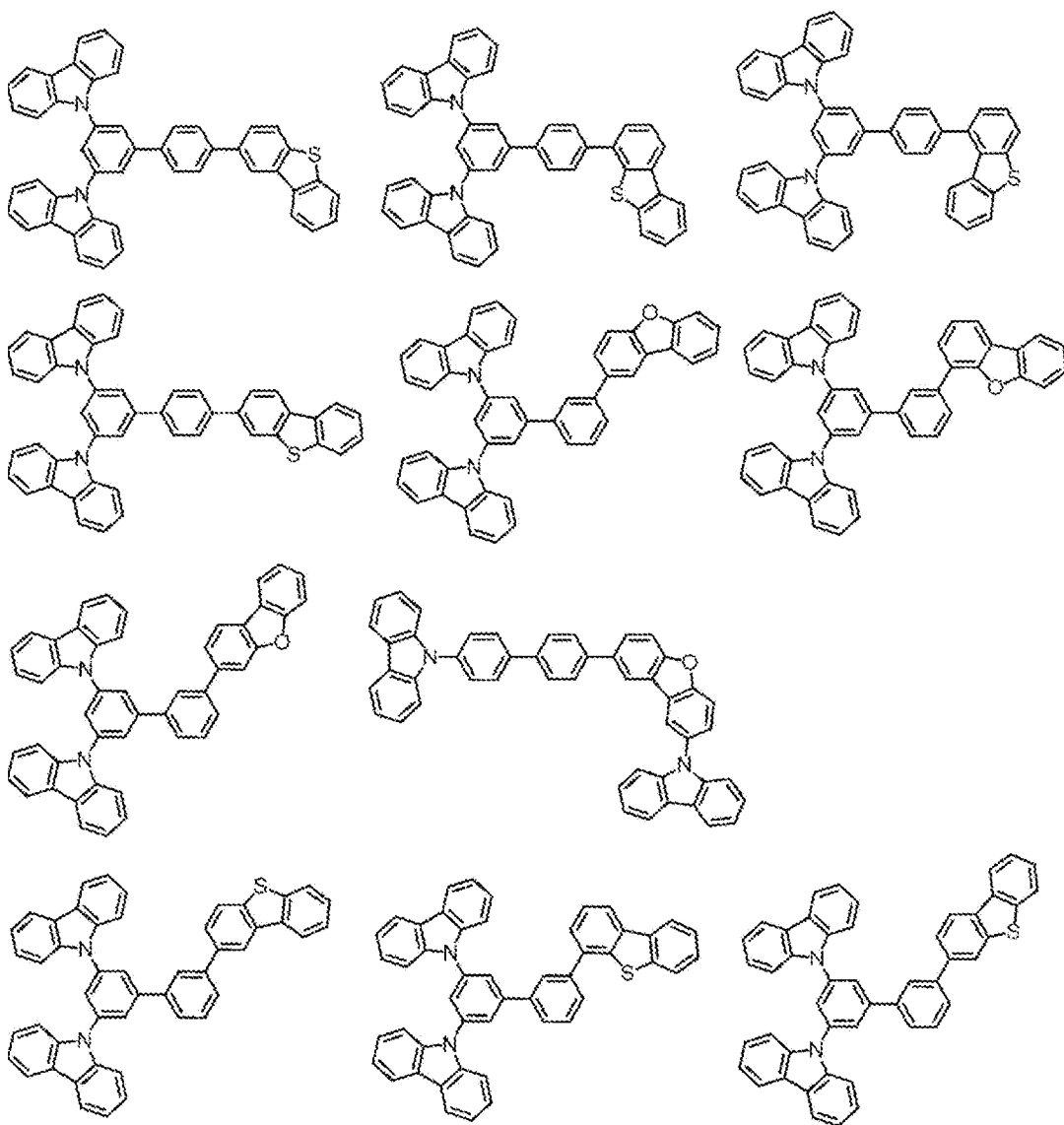
[0340]

[化99]



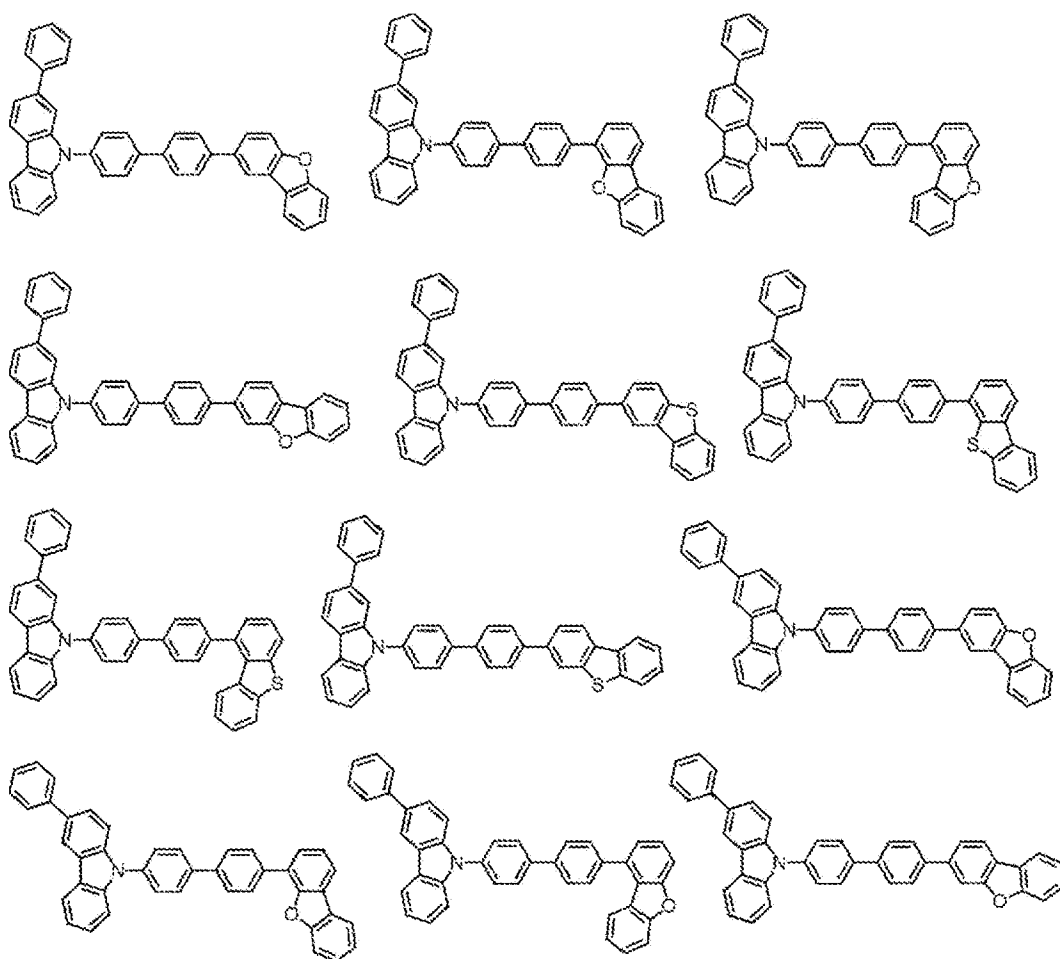
[0342]

[化100]



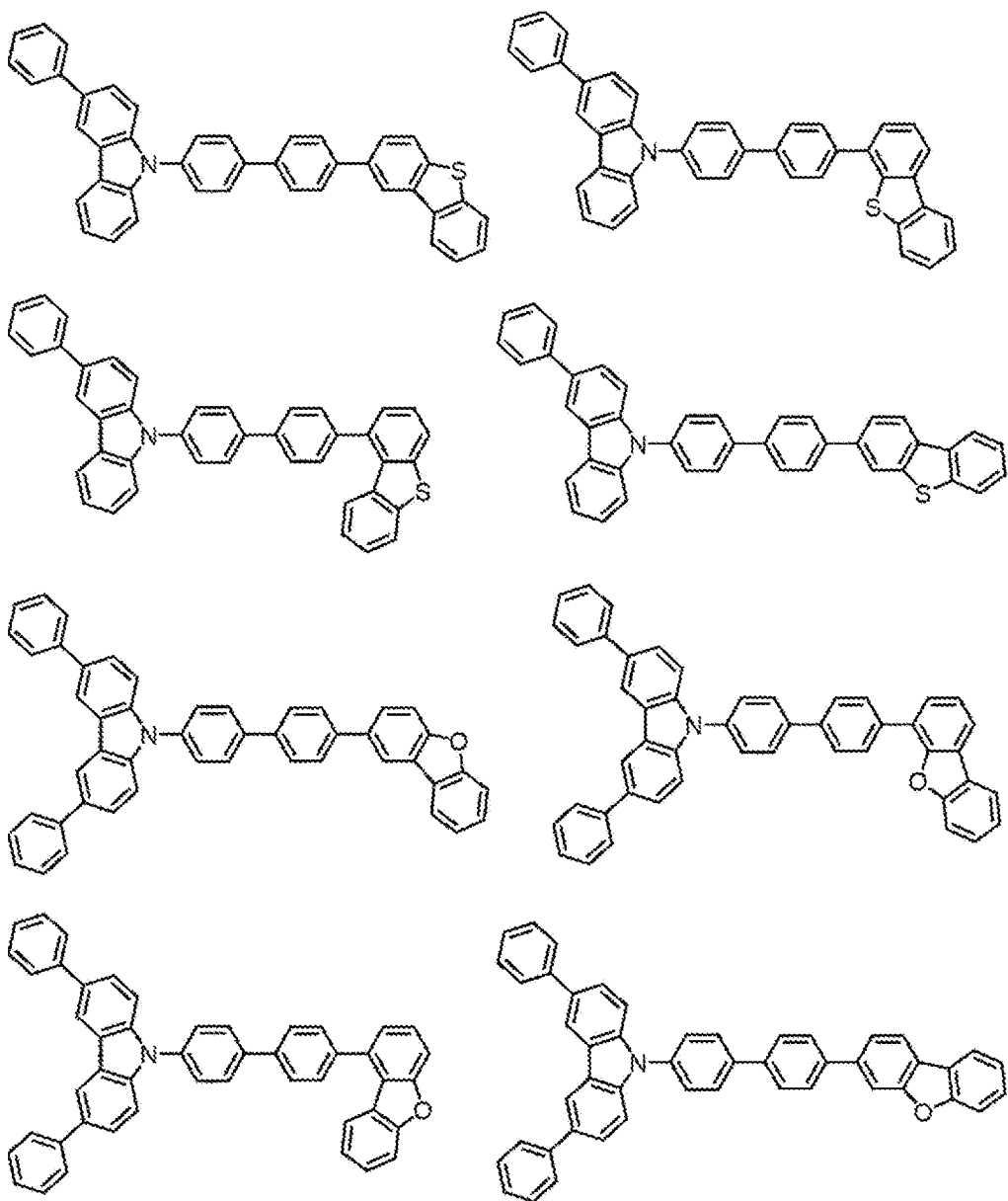
[0343]

[化101]



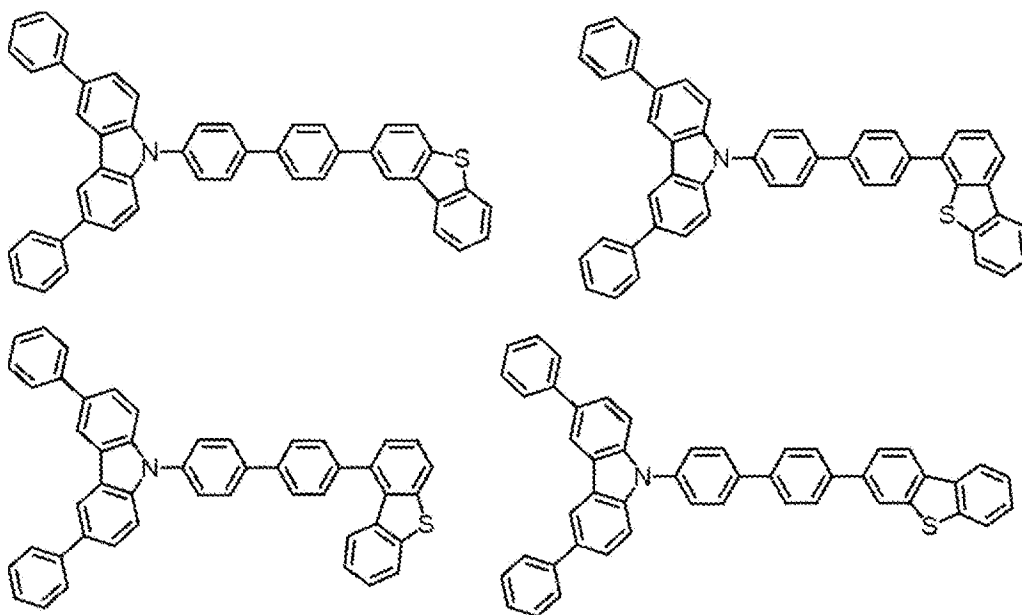
[0344]

[化102]

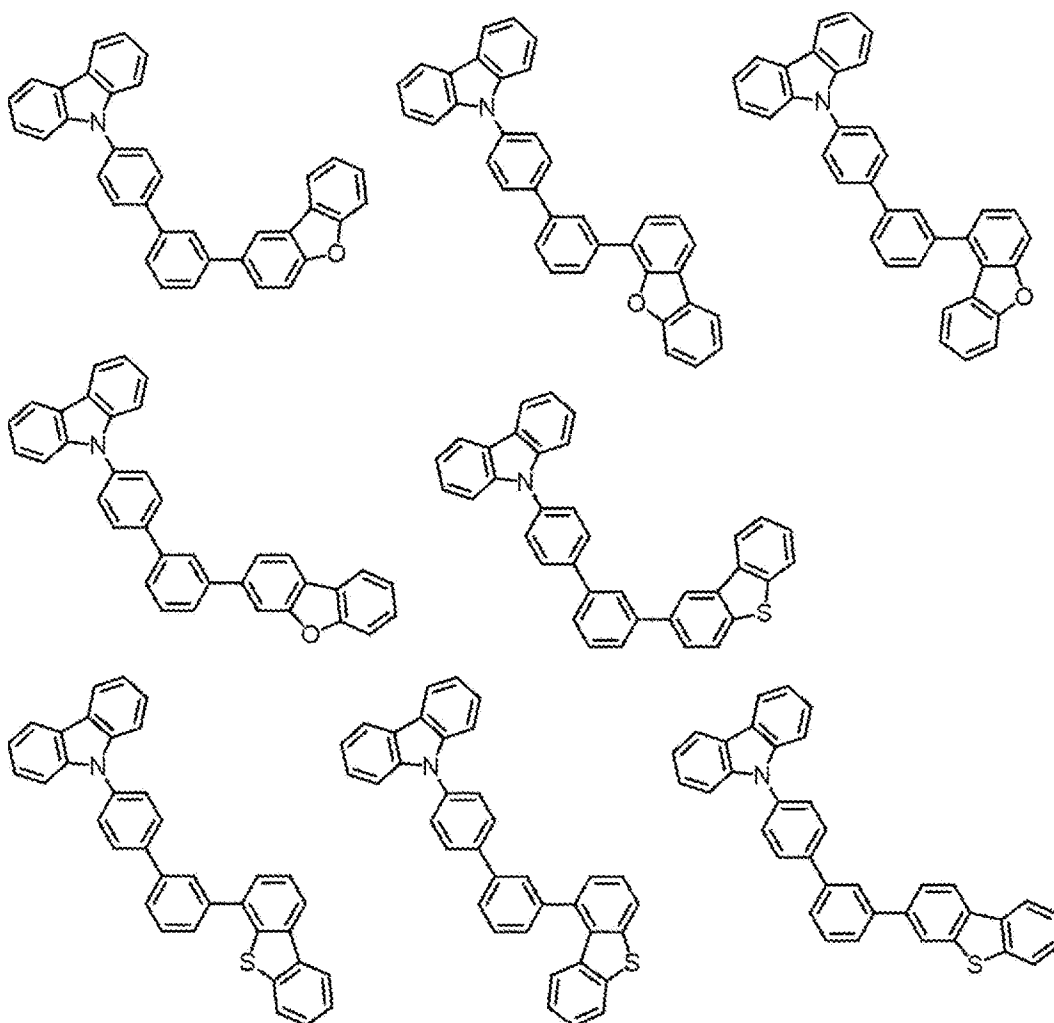


[0345]

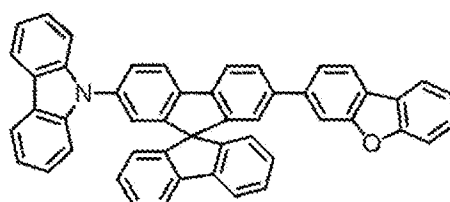
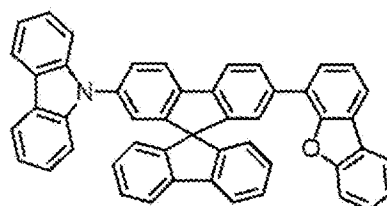
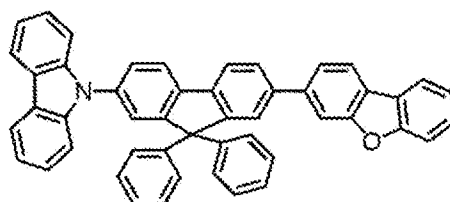
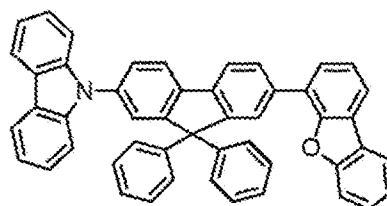
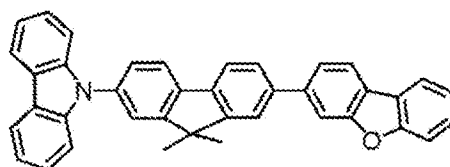
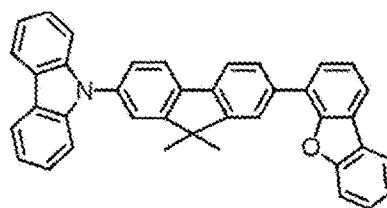
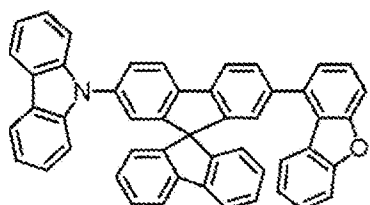
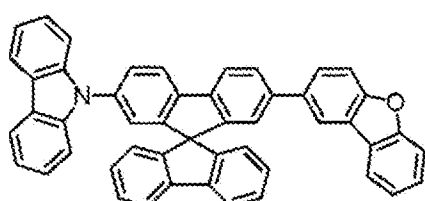
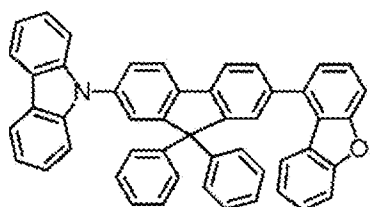
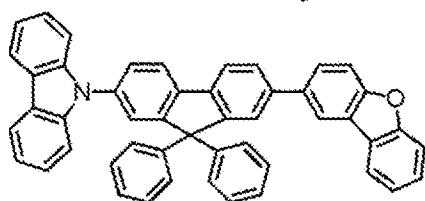
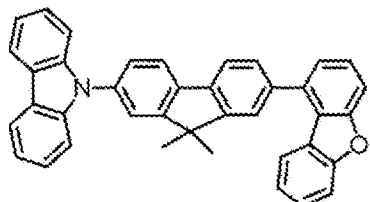
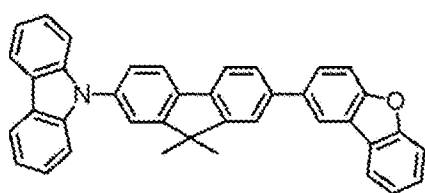
[化103]



[0346] [化104]

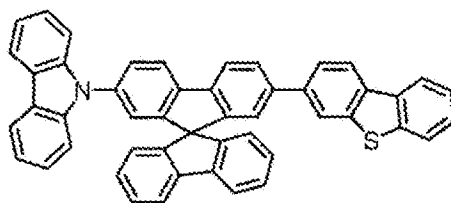
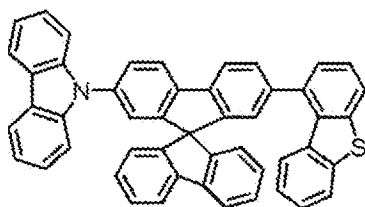
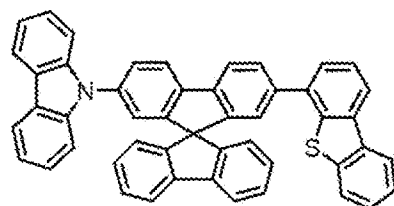
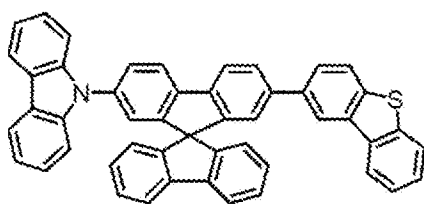
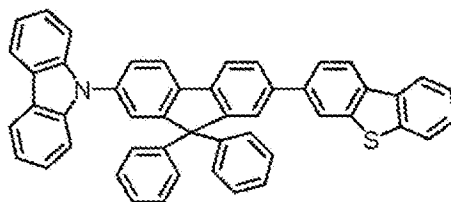
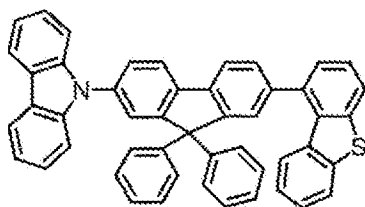
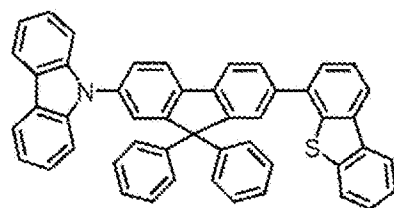
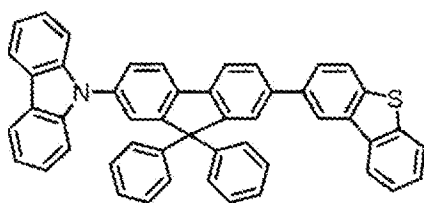
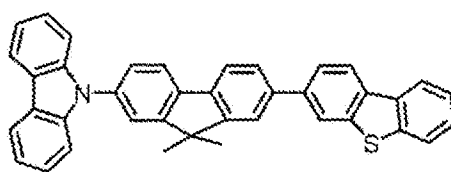
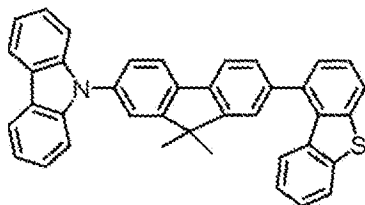
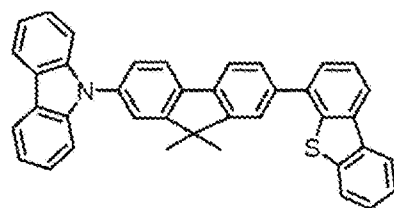
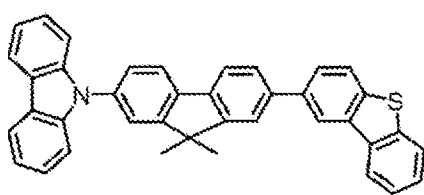


[0347] [化105]



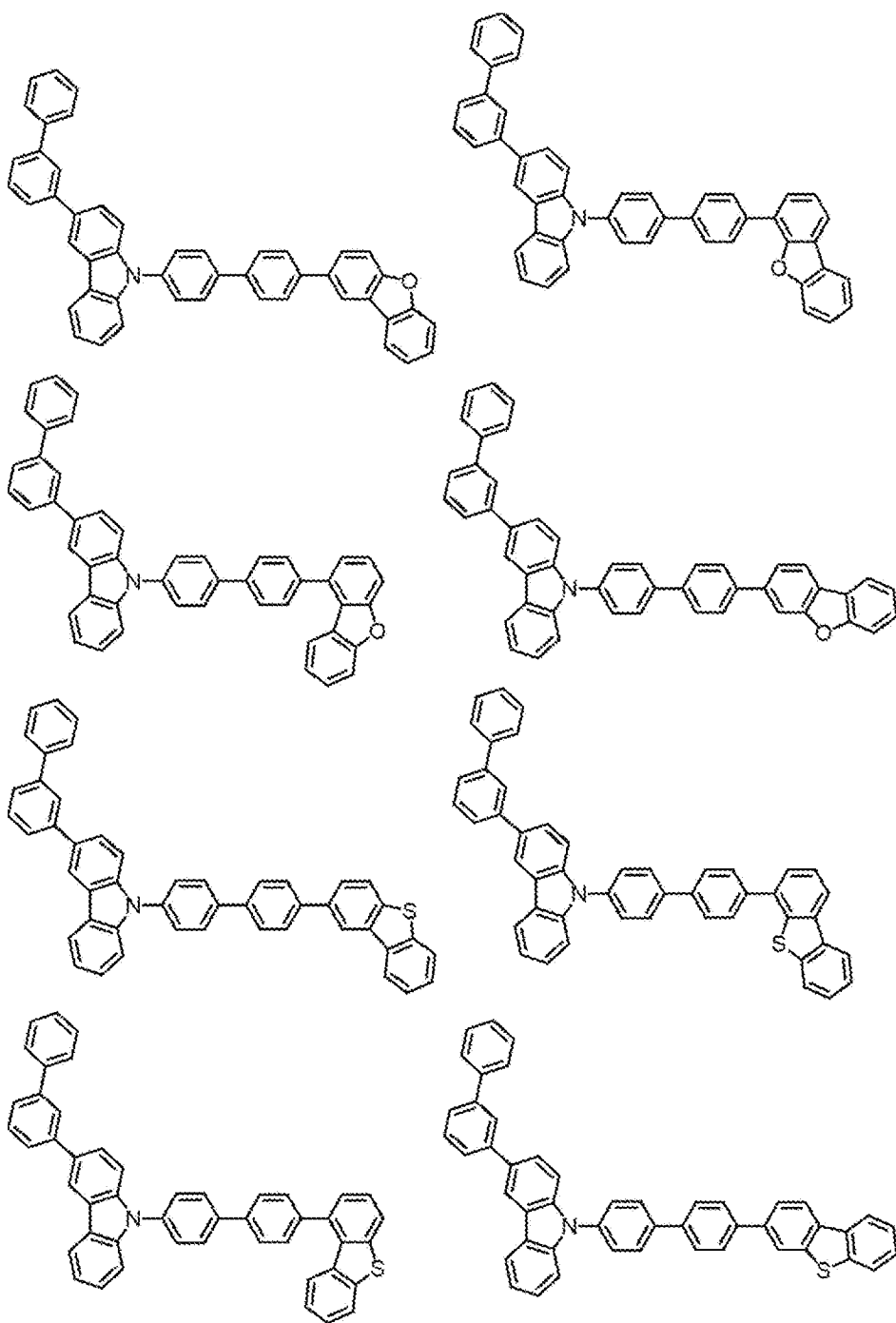
[0348]

[化106]



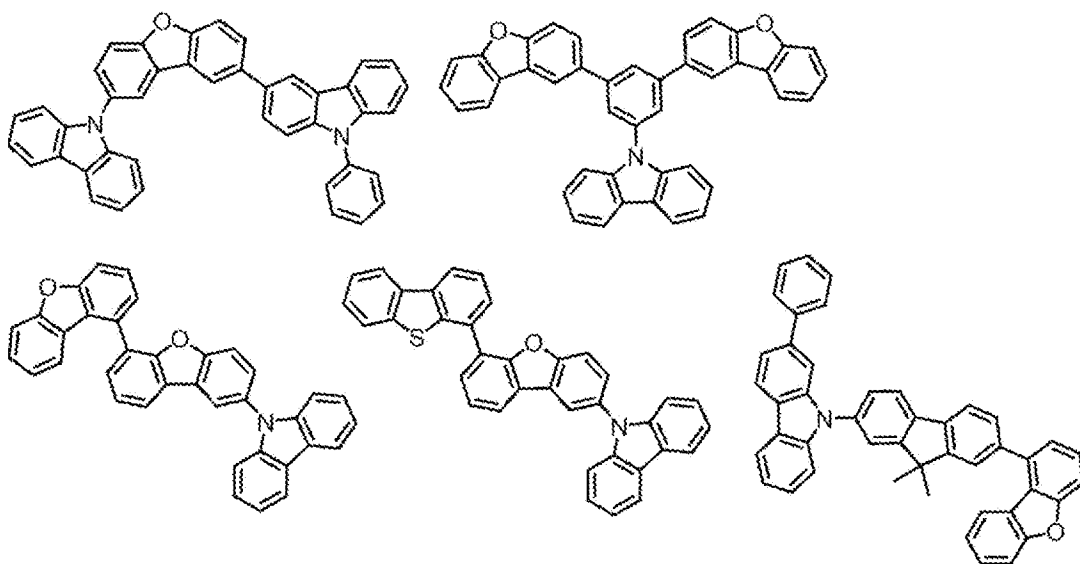
[0349]

[化107]

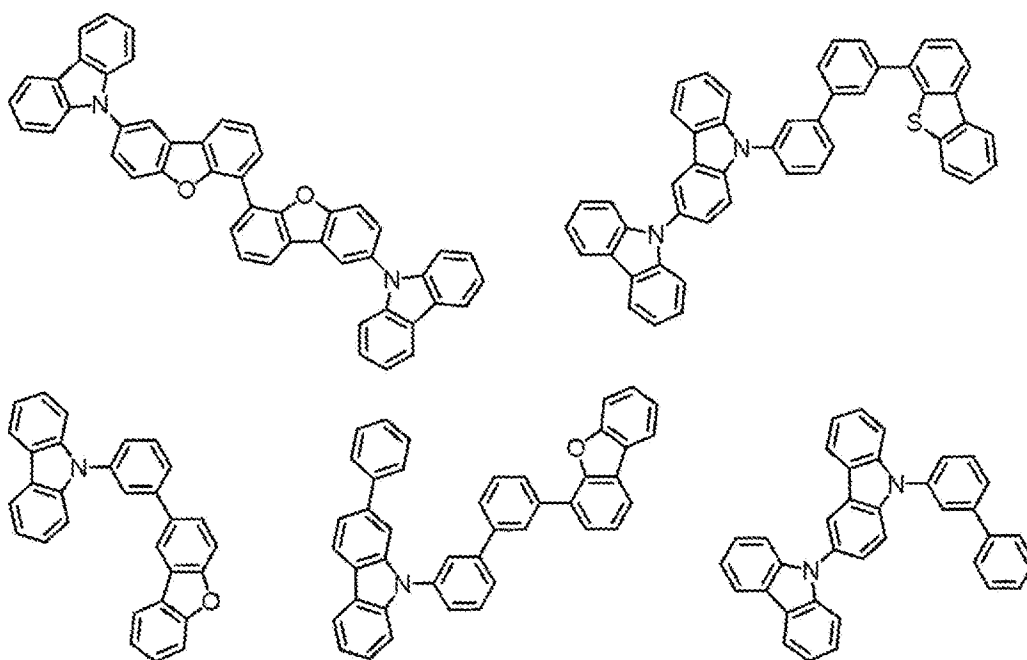


[0350]

[化108]

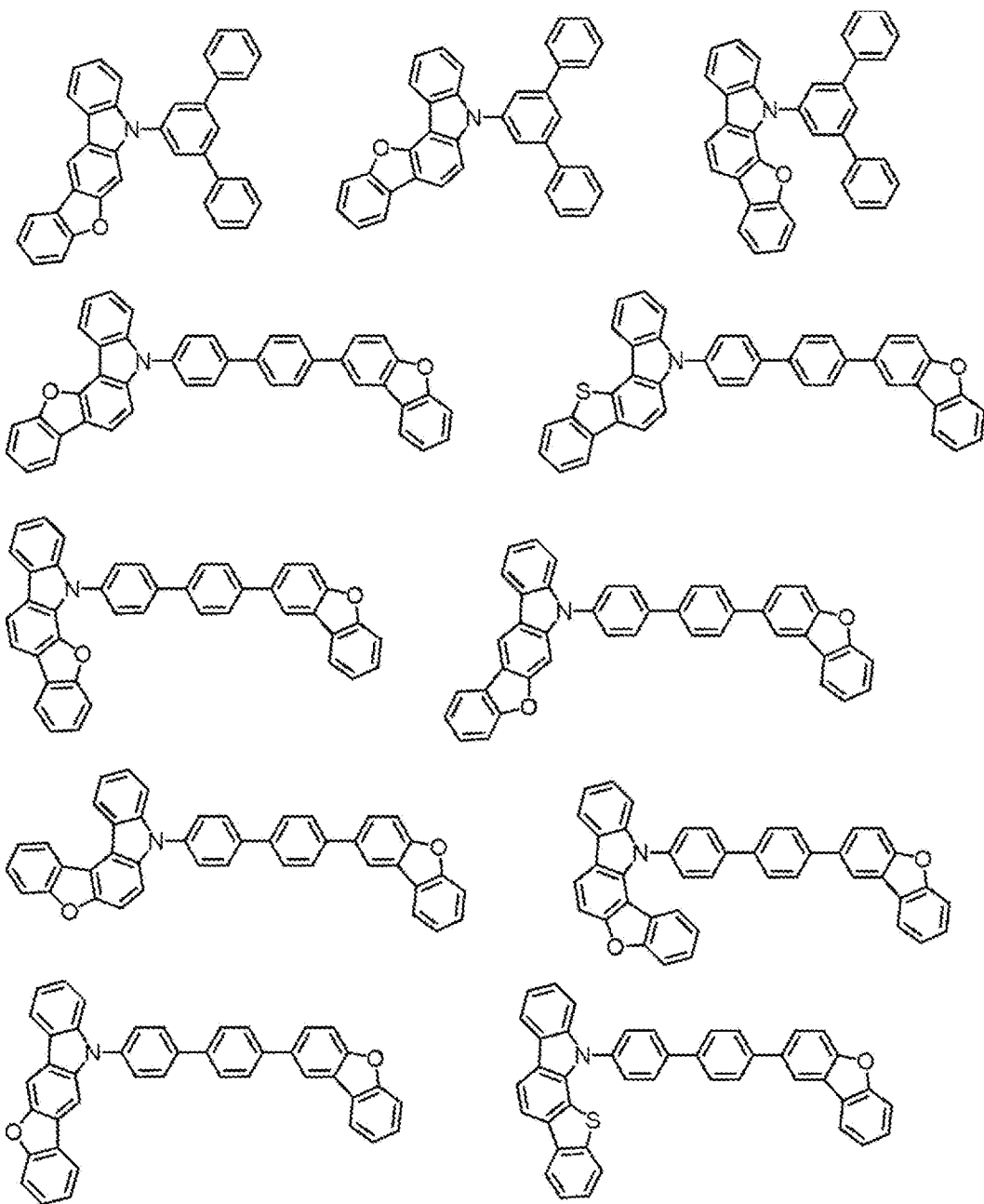


[0351] [化109]



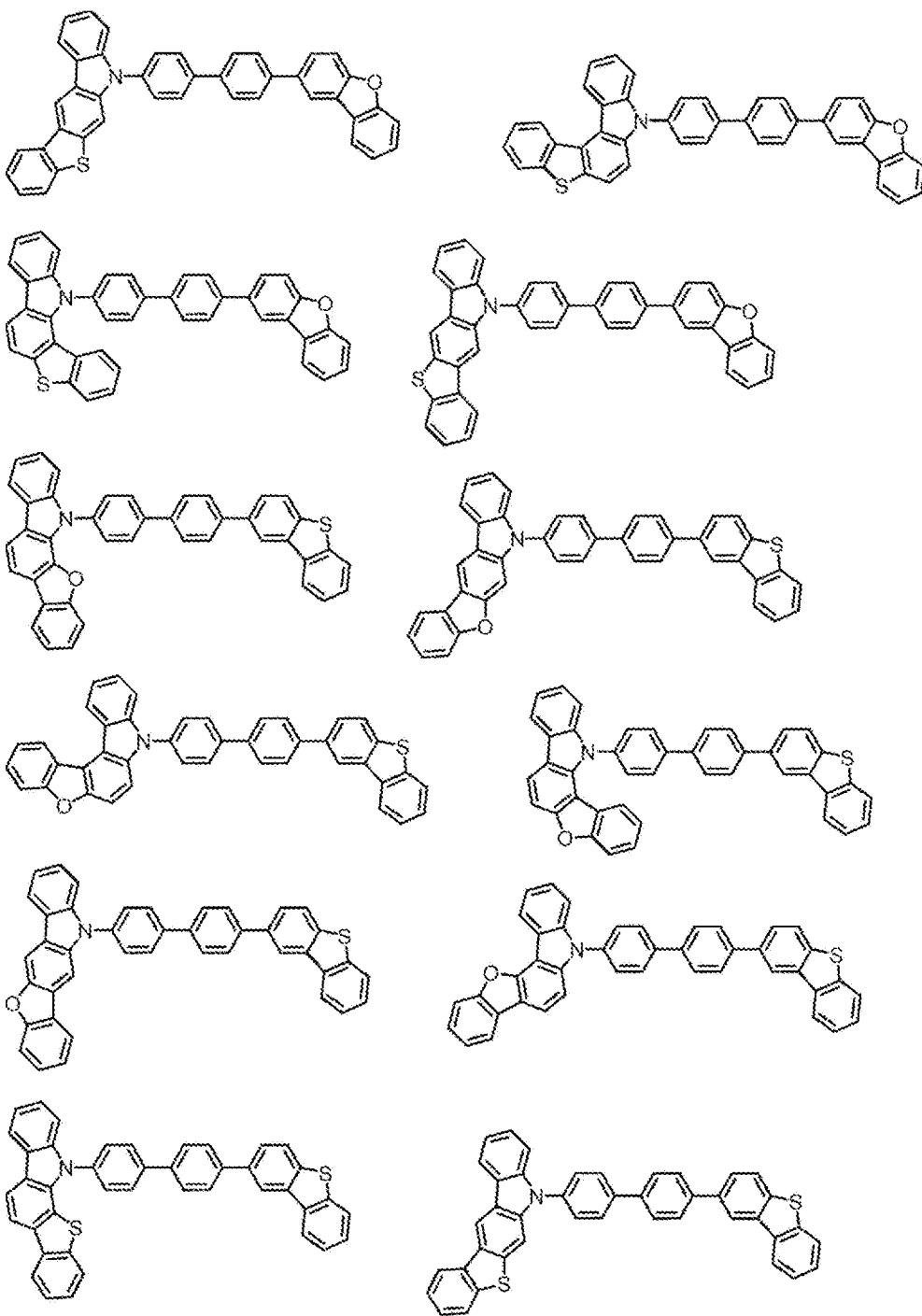
[0352]

[化110]



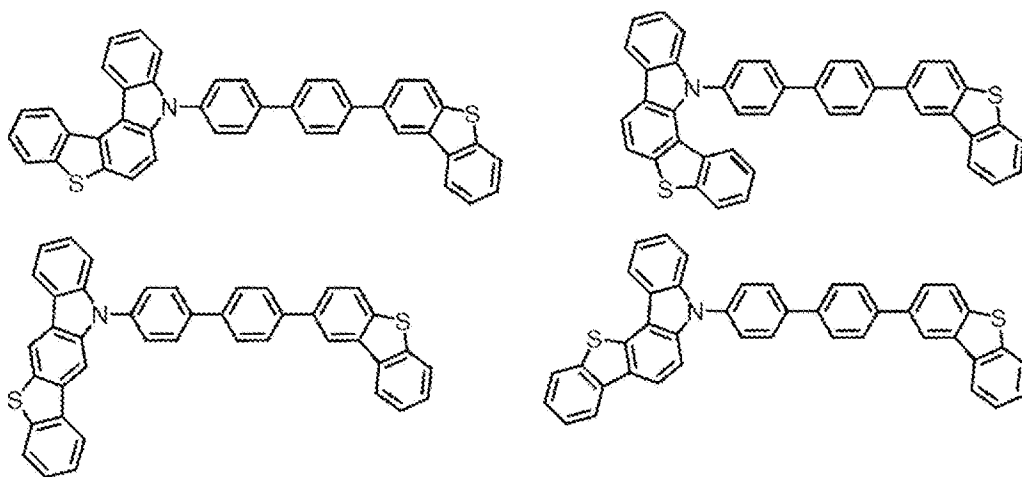
[0353]

[化111]

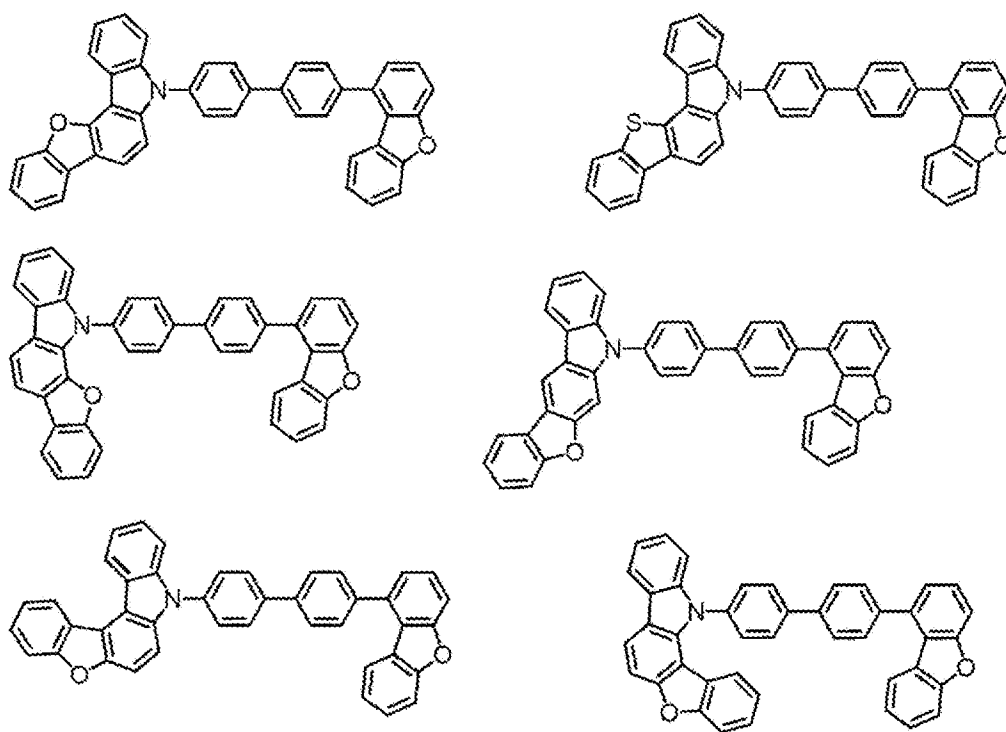


[0354]

[化112]

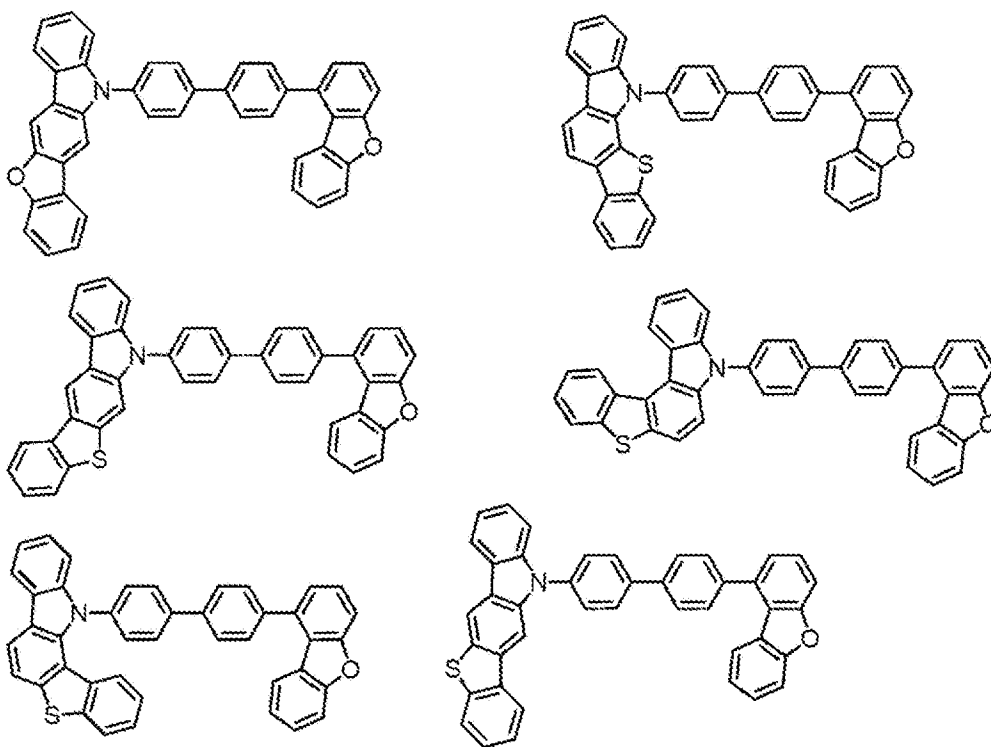


[0355] [化113]

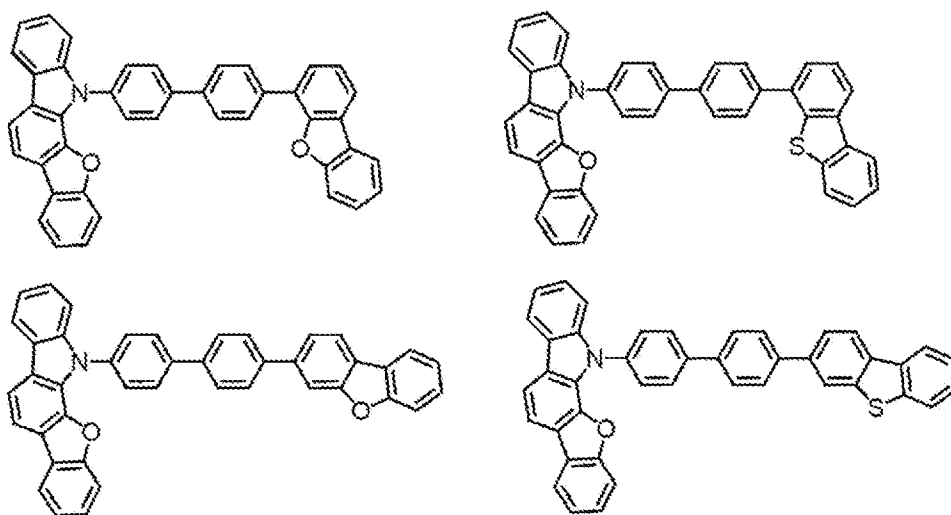


[0356]

[化114]

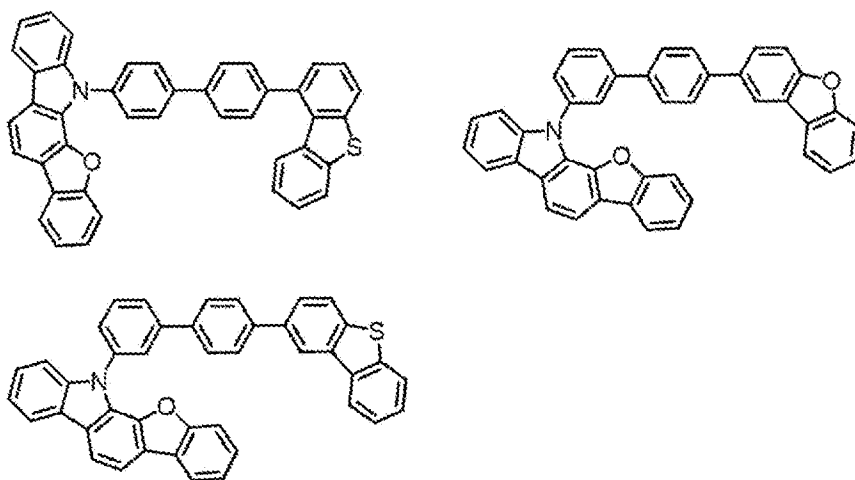


[0357] [化115]

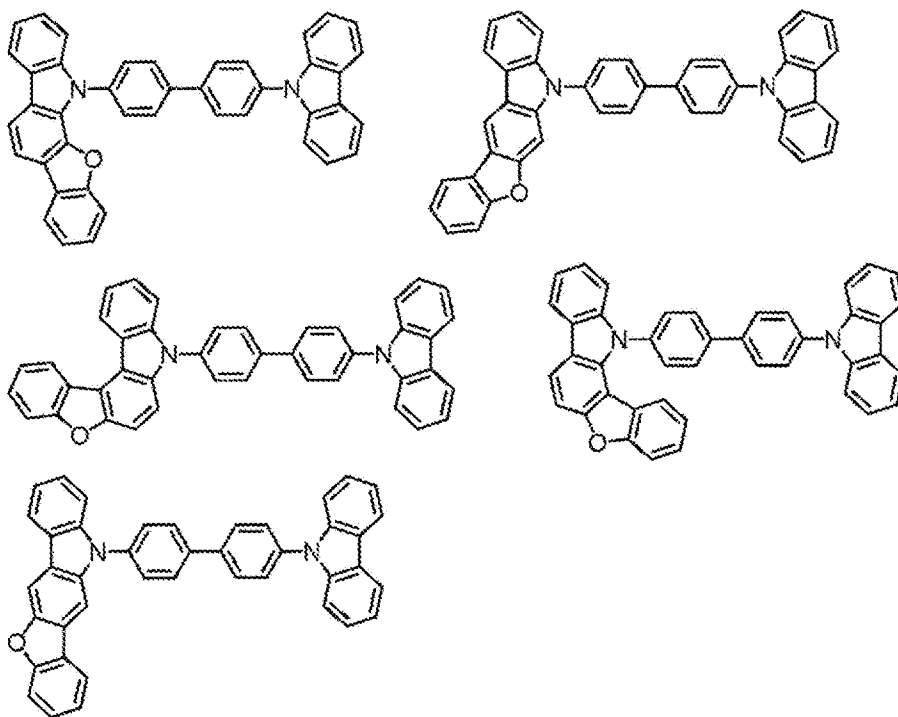


[0358]

[化116]

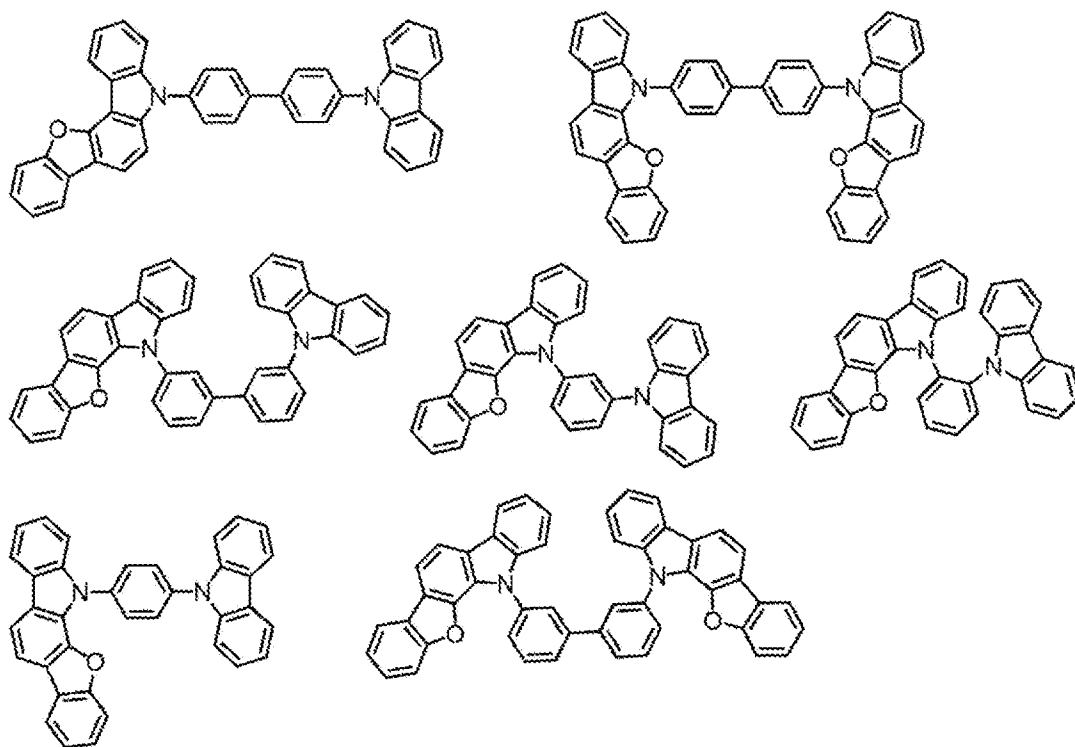


[0359] [化117]

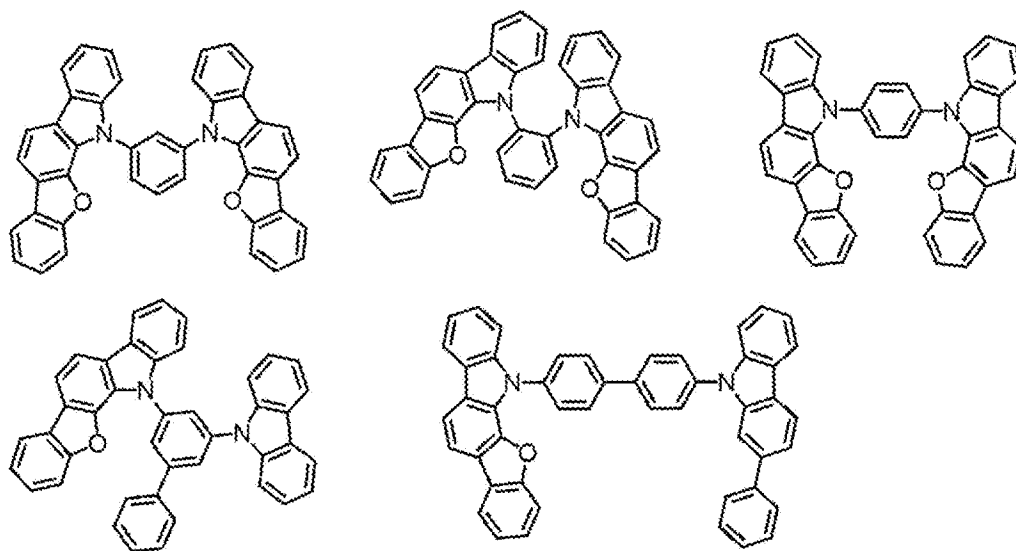


[0360]

[化118]

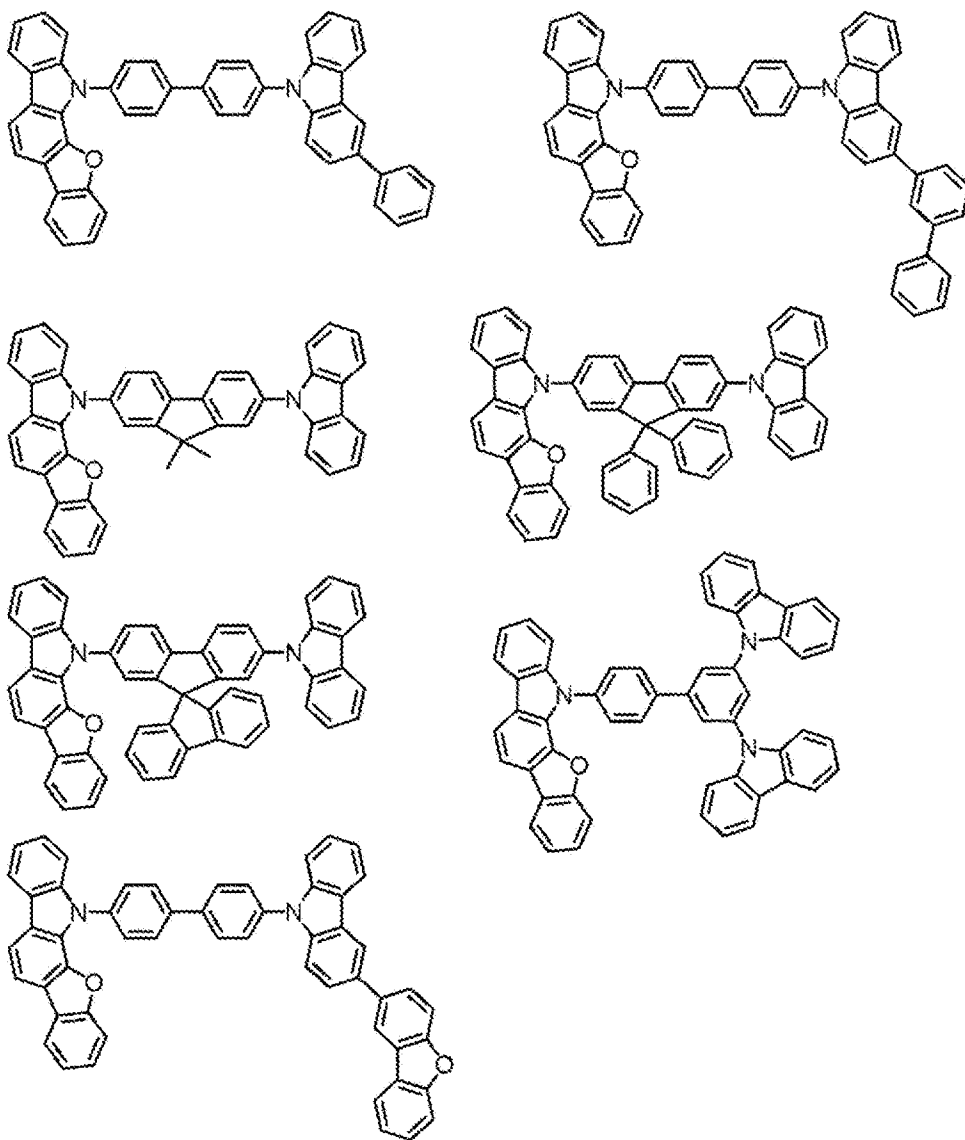


[0361] [化119]



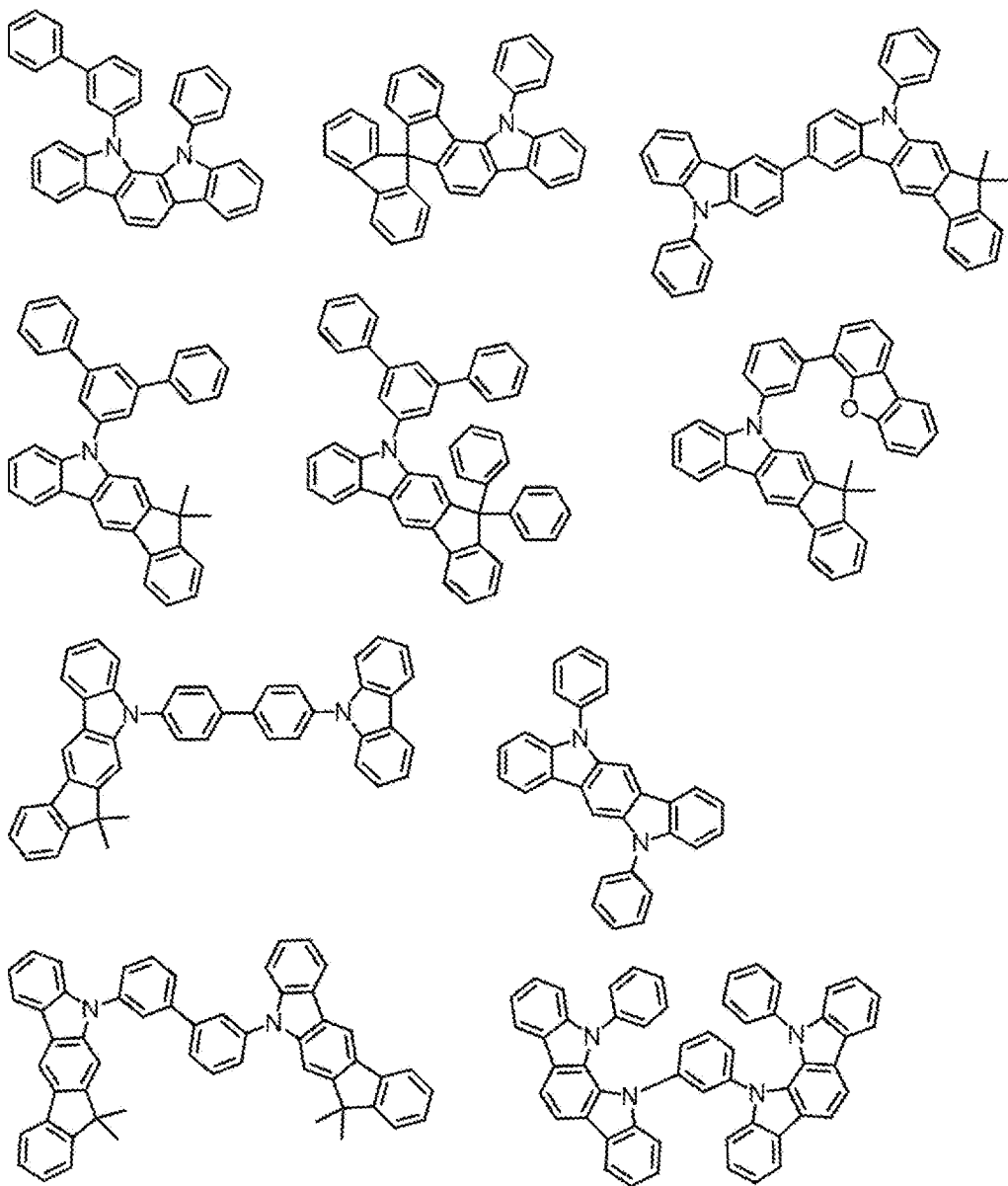
[0362]

[化120]



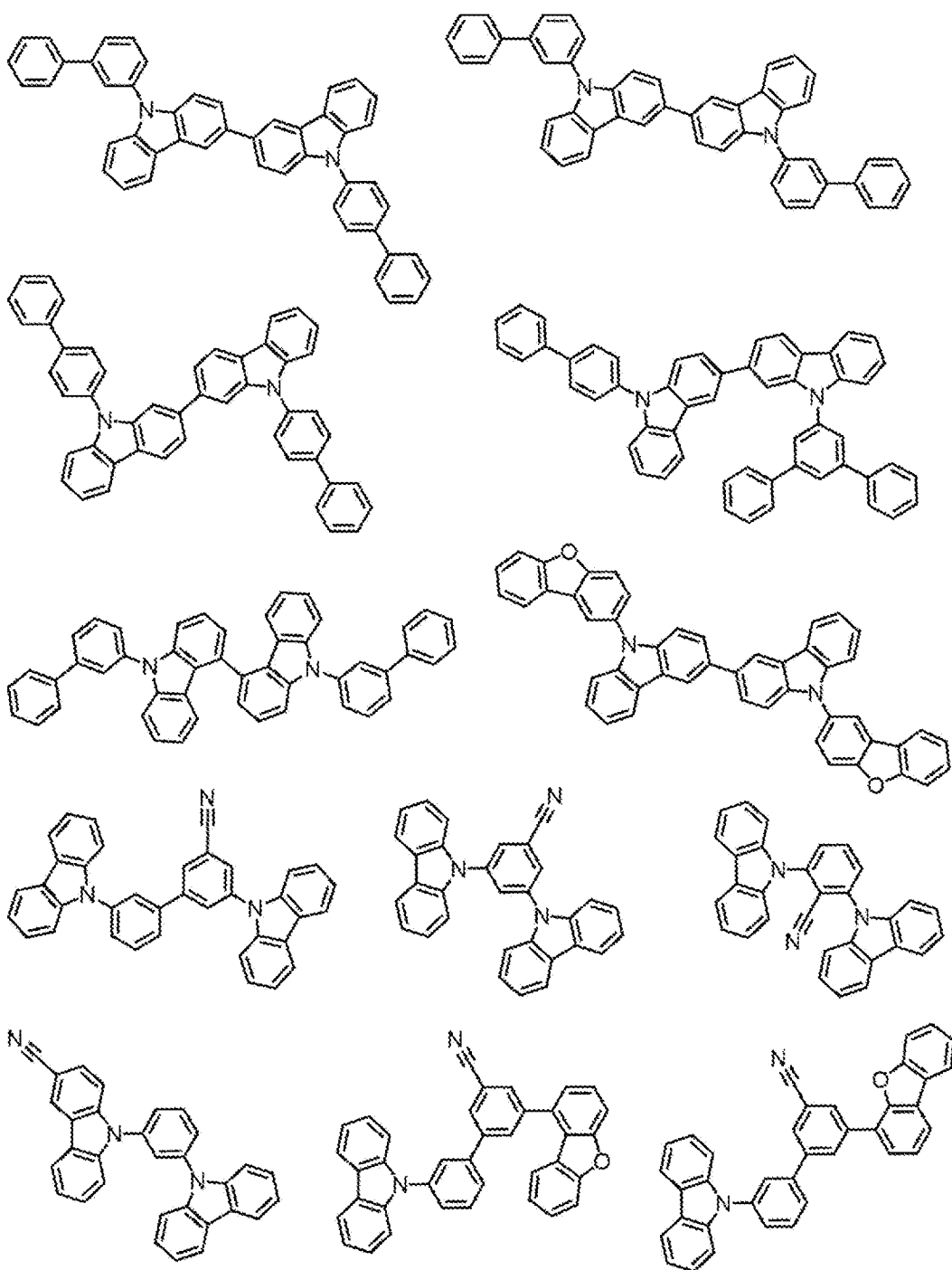
[0363]

[化121]



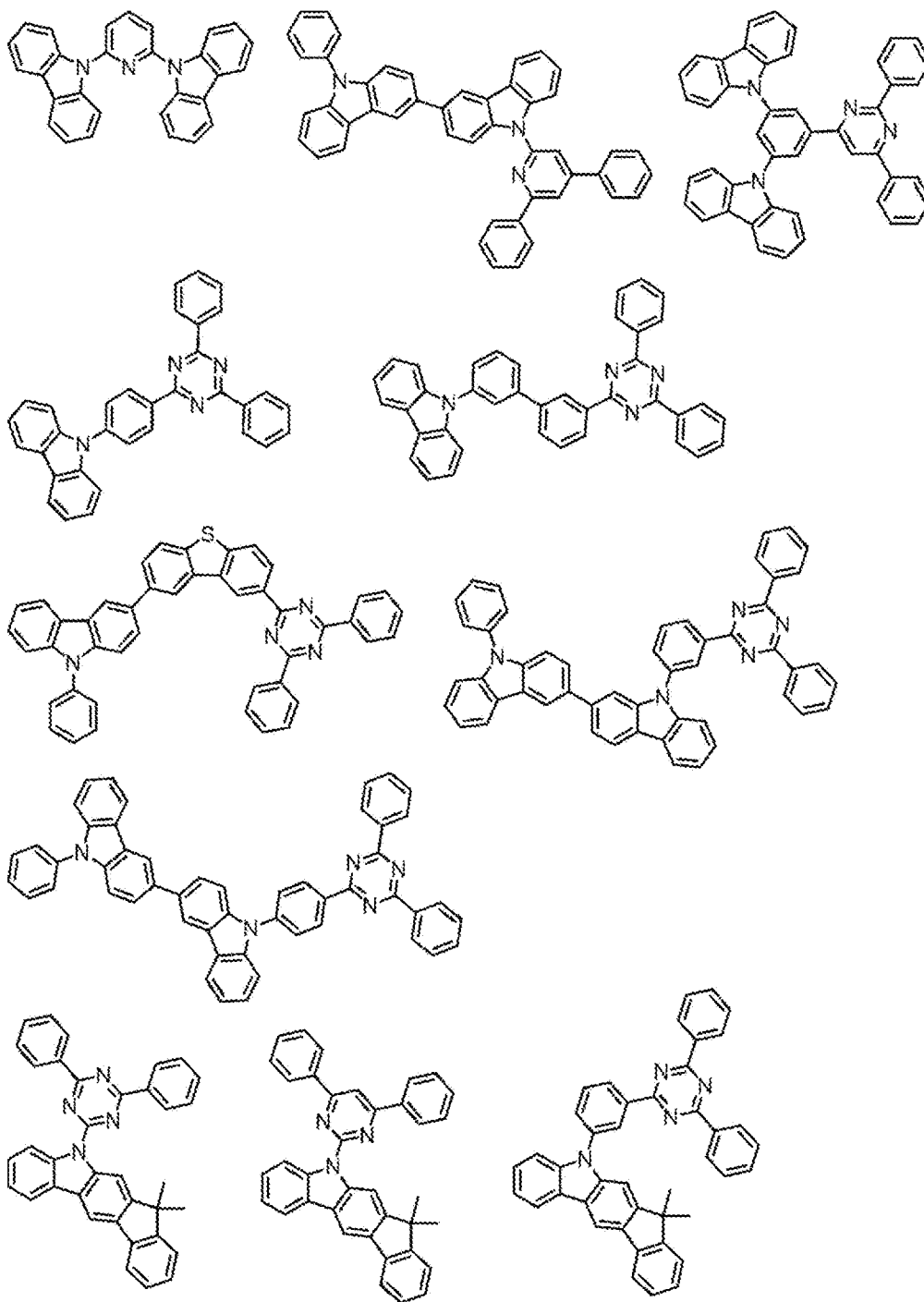
[0364]

[化122]



[0365]

[化123]



[0366] (発光層における化合物M2及び化合物M3の関係)

本実施形態の有機EL素子において、化合物M2の最低励起一重項エネルギー S_1 (M2)と、化合物M3の最低励起一重項エネルギー S_1 (M3)とが、前記数式(数1)の関係を満たす。

[0367] 化合物M3の77[K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M3)$ は、化合物M2の77[K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M2)$ よりも大きいことが好ましい。すなわち、下記数式(数5)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{77K}(M3) > T_{77K}(M2) \quad \dots (\text{数5})$$

[0368] 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、主に化合物M2が発光していることが好ましい。

[0369] (TADF機構(メカニズム))

図4は、発光層における化合物M3及び化合物M2のエネルギー準位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(M2)は、化合物M2の最低励起一重項状態を表し、T1(M2)は、化合物M2の最低励起三重項状態を表す。S1(M3)は、化合物M3の最低励起一重項状態を表し、T1(M3)は、化合物M3の最低励起三重項状態を表す。図4に示すように、化合物M2として $\Delta ST(M2)$ の小さな材料を用いると、化合物M2の最低励起三重項状態T1(M2)は熱エネルギーによって最低励起一重項状態S1(M2)に逆項間交差することが可能である。

この化合物M2で生じる逆項間交差を利用することで、発光層が、化合物M2の最低励起一重項状態S1(M2)よりも小さい最低励起一重項状態S1の蛍光ドーパントを含まない場合は、化合物M2の最低励起一重項状態S1(M2)からの発光を観測することができる。このTADF機構による遅延蛍光を利用することによっても、理論的に内部量子効率を100%まで高めることができると考えられている。

[0370] ・発光層の膜厚

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

制されやすい。

[0371] (発光層における化合物の含有率)

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

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

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

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

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

[0372] 有機EL素子の構成についてさらに説明する。

[0373] (基板)

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

[0374] (陽極)

基板上に形成される陽極には、仕事関数の大きい(具体的には4.0 eV以上)金属、合金、電気伝導性化合物、およびこれらの混合物などを用いることが好ましい。具体的には、例えば、酸化インジウム-酸化スズ(ITO

: Indium Tin Oxide)、珪素若しくは酸化珪素を含有した酸化インジウム－酸化スズ、酸化インジウム－酸化亜鉛、酸化タングステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、グラフェン等が挙げられる。この他、金 (Au)、白金 (Pt)、ニッケル (Ni)、タングステン (W)、クロム (Cr)、モリブデン (Mo)、鉄 (Fe)、コバルト (Co)、銅 (Cu)、パラジウム (Pd)、チタン (Ti)、または金属材料の窒化物 (例えば、窒化チタン) 等が挙げられる。

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

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

仕事関数の小さい材料である、元素周期表の第1族または第2族に属する元素、すなわちリチウム (Li) やセシウム (Cs) 等のアルカリ金属、およびマグネシウム (Mg)、カルシウム (Ca)、ストロンチウム (Sr) 等のアルカリ土類金属、およびこれらを含む合金 (例えば、MgAg、AlLi)、ユーロピウム (Eu)、イッテルビウム (Yb) 等の希土類金属およびこれらを含む合金等を用いることもできる。なお、アルカリ金属、アルカリ土類金属、およびこれらを含む合金を用いて陽極を形成する場合には、

真空蒸着法やスパッタリング法を用いることができる。さらに、銀ペーストなどを用いる場合には、塗布法やインクジェット法などを用いることができる。

[0375] (陰極)

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

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

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

[0376] (正孔注入層)

正孔注入層は、正孔注入性の高い物質を含む層である。正孔注入性の高い物質としては、モリブデン酸化物、チタン酸化物、バナジウム酸化物、レニウム酸化物、ルテニウム酸化物、クロム酸化物、ジルコニウム酸化物、ハフニウム酸化物、タンタル酸化物、銀酸化物、タングステン酸化物、マンガン酸化物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、低分子の有機化合物である4, 4

’，4’ ’ートリス（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’ ’ートリス〔N－（3－メチルフェニル）－N－フェニルアミノ〕トリフェニルアミン（略称：MTDATA）、4，4’－ビス〔N－（4－ジフェニルアミノフェニル）－N－フェニルアミノ〕ビフェニル（略称：DPAB）、4，4’－ビス（N－{4－〔N’－（3－メチルフェニル）－N’－フェニルアミノ〕フェニル}－N－フェニルアミノ）ビフェニル（略称：DNTPD）、1，3，5－トリス〔N－（4－ジフェニルアミノフェニル）－N－フェニルアミノ〕ベンゼン（略称：DPA3B）、3－〔N－（9－フェニルカルバゾール－3－イル）－N－フェニルアミノ〕－9－フェニルカルバゾール（略称：PCzPCA1）、3，6－ビス〔N－（9－フェニルカルバゾール－3－イル）－N－フェニルアミノ〕－9－フェニルカルバゾール（略称：PCzPCA2）、3－〔N－（1－ナフチル）－N－（9－フェニルカルバゾール－3－イル）アミノ〕－9－フェニルカルバゾール（略称：PCzPCN1）等の芳香族アミン化合物等も挙げられる。

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

[0377] （正孔輸送層）

正孔輸送層は、正孔輸送性の高い物質を含む層である。正孔輸送層には、

芳香族アミン化合物、カルバゾール誘導体、アントラセン誘導体等を使用することができる。具体的には、4, 4'-ビス[N-(1-ナフチル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:NPB)やN, N'-ビス(3-メチルフェニル)-N, N'-ジフェニル-[1, 1'-ビフェニル]-4, 4'-ジアミン(略称:TPD)、4-フェニル-4'-(9-フェニルフルオレン-9-イル)トリフェニルアミン(略称:BAFLP)、4, 4'-ビス[N-(9, 9-ジメチルフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:DFLDPBi)、4, 4', 4''-トリス(N, N-ジフェニルアミノ)トリフェニルアミン(略称:TDATA)、4, 4', 4''-トリス[N-(3-メチルフェニル)-N-フェニルアミノ]トリフェニルアミン(略称:MTDATA)、4, 4'-ビス[N-(スピロ-9, 9'-ビフルオレン-2-イル)-N-フェニルアミノ]ビフェニル(略称:BSPB)などの芳香族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 $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{Vs})$ 以上の正孔移動度を有する物質である。

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

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、単層であっても、上記物質からなる層が二層以上積層された層であってもよい。

[0378] (電子輸送層)

電子輸送層は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層には、1) アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体、2) イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、3) 高分子化合物

を使用することができる。具体的には低分子の有機化合物として、 Alq_3 、トリス（４－メチル－８－キノリノラト）アルミニウム（略称： $Almq_3$ ）、ビス（１０－ヒドロキシベンゾ[h]キノリナト）ベリリウム（略称： $BeBq_2$ ）、 $BAlq_3$ 、 Znq 、 $ZnPBO$ 、 $ZnBTZ$ などの金属錯体等を用いることができる。また、金属錯体以外にも、２－（４－ビフェニリル）－５－（４－tert-ブチルフェニル）－１，３，４－オキサジアゾール（略称： PBD ）、１，３－ビス〔５－（p-tert-ブチルフェニル）－１，３，４－オキサジアゾール－２－イル〕ベンゼン（略称： $OXD-7$ ）、３－（４－tert-ブチルフェニル）－４－フェニル－５－（４－ビフェニリル）－１，２，４－トリアゾール（略称： TAZ ）、３－（４－tert-ブチルフェニル）－４－（４－エチルフェニル）－５－（４－ビフェニリル）－１，２，４－トリアゾール（略称： $p-EtTAZ$ ）、バソフェナントロリン（略称： $BPhen$ ）、バソキュプロイン（略称： BCP ）、４，４’－ビス（５－メチルベンゾオキサゾール－２－イル）スチルベン（略称： $BzOs$ ）などの複素芳香族化合物も用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{Vs})$ 以上の電子移動度を有する物質である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を電子輸送層として用いてもよい。また、電子輸送層は、単層であっても、上記物質からなる層が二層以上積層された層であってもよい。

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

[0379]（電子注入層）

電子注入層は、電子注入性の高い物質を含む層である。電子注入層には、リチウム（ Li ）、セシウム（ Cs ）、カルシウム（ Ca ）、フッ化リチウム（ LiF ）、フッ化セシウム（ CsF ）、フッ化カルシウム（ CaF_2 ）、

リチウム酸化物 (LiO_x) 等のようなアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を用いることができる。その他、電子輸送性を有する物質にアルカリ金属、アルカリ土類金属、またはそれらの化合物を含有させたもの、具体的には Alq 中にマグネシウム (Mg) を含有させたもの等を用いてもよい。なお、この場合には、陰極からの電子注入をより効率良く行うことができる。

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

[0380] (層形成方法)

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

[0381] (膜厚)

本実施形態の有機 EL 素子の各有機層の膜厚は、上記で特に言及した以外には制限されないが、一般に膜厚が薄すぎるとピンホール等の欠陥が生じや

すく、逆に厚すぎると高い印加電圧が必要となり効率が悪くなるため、通常は数 nm から 1 μ m の範囲が好ましい。

[0382] 本実施形態によれば、高性能な、特に長寿命かつ発光効率が高い有機 EL 素子を提供できる。本実施形態に係る有機 EL 素子は、表示装置および発光装置等の電子機器に使用できる。

[0383] [第二実施形態]

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

[0384] 第二実施形態の有機 EL 素子は、発光層が、さらに蛍光発光性の化合物 M 1 を含んでいる点で、第一実施形態の有機 EL 素子と異なる。その他の点については第一実施形態と同様である。

すなわち、第二実施形態において、発光層は、前記一般式 (3) で表される化合物 M 3 と、前記一般式 (2) で表される遅延蛍光性の化合物 M 2 と、蛍光発光性の化合物 M 1 とを含む。化合物 M 1 は、熱活性化遅延蛍光性を示さない化合物であることが好ましい。

この態様の場合、化合物 M 1 は、ドーパント材料であることが好ましく、化合物 M 2 は、ホスト材料であることが好ましく、化合物 M 3 は、ドーパント材料ではないことが好ましい。

[0385] (化合物 M 1)

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

[0386] 本実施形態の化合物 M 1 としては、蛍光発光性材料を用いることができる。蛍光発光性材料としては、具体的には、例えば、ビスアリールアミノナフタレン誘導体、アリール置換ナフタレン誘導体、ビスアリールアミノアント

ラセン誘導体、アリール置換アントラセン誘導体、ビスアリールアミノピレン誘導体、アリール置換ピレン誘導体、ビスアリールアミノクリセン誘導体、アリール置換クリセン誘導体、ビスアリールアミノフルオランテン誘導体、アリール置換フルオランテン誘導体、インデノペリレン誘導体、アセナフトフルオランテン誘導体、ハウ素原子を含む化合物、ピロメテンハウ素錯体化合物、ピロメテン骨格を有する化合物、ピロメテン骨格を有する化合物の金属錯体、ジケトピロロピロール誘導体、ペリレン誘導体、及びナフタセン誘導体などが挙げられる。

[0387] 化合物M1は、最大ピーク波長が、400nm以上700nm以下の発光を示す化合物であることが好ましい。

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

[0388] 化合物M1は、赤色の発光又は緑色の発光を示すことが好ましい。

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

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

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

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

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

化合物M1が青色の蛍光発光性の化合物である場合、化合物M1の最大ピーク波長は、好ましくは430nm以上480nm以下、より好ましくは440nm以上480nm以下である。

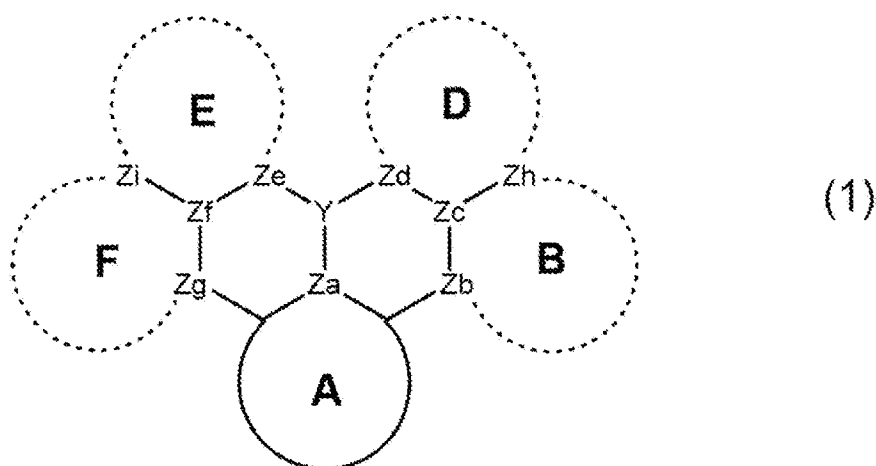
[0389] 有機EL素子からから発光する光の最大ピーク波長の測定は、以下のように行う。

電流密度が10mA/cm²となるように有機EL素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計CS-2000（コニカミノルタ社製）で計測する。

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

[0390] 化合物M1は、下記一般式（1）で表される化合物であることも好ましい。

[0391] [化124]



[0392] （前記一般式（1）において、

環A、環B、環D、環E及び環Fは、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール環、及び

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環からなる群から選

択される環構造であり、

環B及び環Dの一方が存在するか、又は環B及び環Dの両方が存在し、
環B及び環Dの両方が存在する場合、環B及び環Dは、Z cとZ hとを繋ぐ結合を共有し、

環E及び環Fの一方が存在するか、又は環E及び環Fの両方が存在し、
環E及び環Fの両方が存在する場合、環E及び環Fは、Z fとZ iとを繋ぐ結合を共有し、

Z aは、窒素原子又は炭素原子であり、

Z bは、

環Bが存在する場合、窒素原子又は炭素原子であり、

環Bが存在しない場合、酸素原子、硫黄原子、NR b、C (R b₁) (R b₂) 又はS i (R b₃) (R b₄) であり、

Z cは、窒素原子又は炭素原子であり、

Z dは、

環Dが存在する場合、窒素原子又は炭素原子であり、

環Dが存在しない場合、酸素原子、硫黄原子又はNR dであり、

Z eは、

環Eが存在する場合、窒素原子又は炭素原子であり、

環Eが存在しない場合、酸素原子、硫黄原子又はNR eであり、

Z fは、窒素原子又は炭素原子であり、

Z gは、

環Fが存在する場合、窒素原子又は炭素原子であり、

環Fが存在しない場合、酸素原子、硫黄原子、NR g、C (R g₁) (R g₂) 又はS i (R g₃) (R g₄) であり、

Z hは、窒素原子又は炭素原子であり、

Z iは、窒素原子又は炭素原子であり、

Yは、ホウ素原子、リン原子、S i R h、P=O又はP=Sであり、

R b、R b₁、R b₂、R b₃、R b₄、R d、R e、R g、R g₁、R g₂、

R_{g3} 、 R_{g4} 及び R_h 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 、 R_{b1} 、 R_{b2} 、 R_{b3} 、 R_{b4} 、 R_d 、 R_e 、 R_g 、
 R_{g1} 、 R_{g2} 、 R_{g3} 、 R_{g4} 及び R_h は、それぞれ独立に、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、
 置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、
 置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数3～30のシクロアルキル基、
 $-Si(R_{g11})(R_{g12})(R_{g13})$ で表される基、
 $-O-(R_{g14})$ で表される基、
 $-S-(R_{g15})$ で表される基、又は
 $-N(R_{g16})(R_{g17})$ で表される基であり、
 ただし、 Y と Z_a との結合、 Y と Z_d との結合、並びに Y と Z_e との結合
 は、いずれも単結合である。)

[0393] Y と Z_a との結合、 Y と Z_d との結合、並びに Y と Z_e との結合は、いずれも単結合であり、この単結合は、共有結合であり、配位結合ではない。

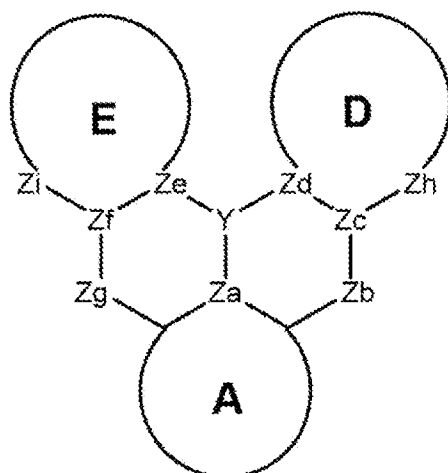
[0394] 本明細書において、複素環としては、例えば、前述の「本明細書に記載の置換基」で例示した「複素環基」から結合手を除いた環構造（複素環）が挙げられる。これらの複素環は置換基を有していてもよいし、無置換でもよい。

本明細書において、アリール環としては、例えば、前述の「本明細書に記載の置換基」で例示した「アリール基」から結合手を除いた環構造（アリール環）が挙げられる。これらのアリール環は置換基を有していてもよいし、無置換でもよい。

[0395] 本実施形態において、化合物M1は、下記一般式(11)で表される化合物であることも好ましい。

[0396]

[化125]



(11)

[0397] (前記一般式 (11)において、

環A、環D及び環Eは、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール環、及び

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環からなる群から選択される環構造であり、

Zaは、窒素原子又は炭素原子であり、

Zbは、酸素原子、硫黄原子、NR_b、C(R_{b1})(R_{b2})又はSi(R_{b3})(R_{b4})であり、

Zcは、窒素原子又は炭素原子であり、

Zdは、窒素原子又は炭素原子であり、

Zeは、窒素原子又は炭素原子であり、

Zfは、窒素原子又は炭素原子であり、

Zgは、酸素原子、硫黄原子、NR_g、C(R_{g1})(R_{g2})又はSi(R_{g3})(R_{g4})であり、

Zhは、窒素原子又は炭素原子であり、

Ziは、窒素原子又は炭素原子であり、

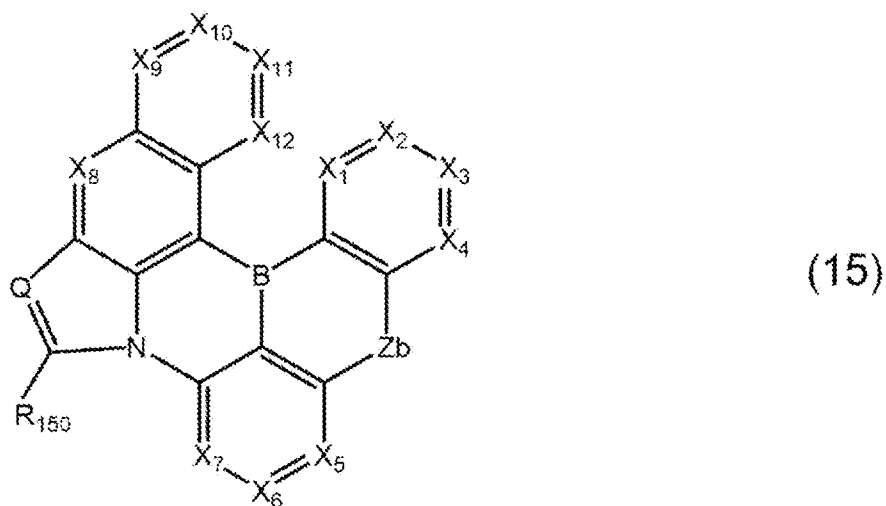
Yは、ホウ素原子、リン原子、SiRh、P=O又はP=Sであり、

R_b、R_{b1}、R_{b2}、R_{b3}、R_{b4}、R_g、R_{g1}、R_{g2}、R_{g3}、R_{g4}及びRhは、それぞれ独立に、前記一般式(1)におけるR_b、R_{b1}、R_b

2、 Rb_3 、 Rb_4 、 Rg 、 Rg_1 、 Rg_2 、 Rg_3 、 Rg_4 及び Rh と同義である。)

[0398] 本実施形態において、化合物M1は、下記一般式(15)で表される化合物であることも好ましい。

[0399] [化126]



[0400] (前記一般式(15)において、

Zb は、酸素原子、硫黄原子、 NRb 、 $C(Rb_1)(Rb_2)$ 又は $Si(Rb_3)(Rb_4)$ であり、

X_1 は、 CR_{121} であるか、窒素原子であるか、または X_{12} と単結合で結合する炭素原子であり、

X_2 は、 CR_{122} または窒素原子であり、

X_3 は、 CR_{123} または窒素原子であり、

X_4 は、 CR_{124} または窒素原子であり、

X_5 は、 CR_{125} または窒素原子であり、

X_6 は、 CR_{126} または窒素原子であり、

X_7 は、 CR_{127} または窒素原子であり、

X_8 は、 CR_{128} または窒素原子であり、

X_9 は、 CR_{129} または窒素原子であり、

X_{10} は、 CR_{130} または窒素原子であり、

X_{11} は、 CR_{131} または窒素原子であり、

X_{12} は、 CR_{132} であるか、窒素原子であるか、または X_1 と単結合で結合する炭素原子であり、

Q は、 CR_Q または窒素原子であり、

$R_{122} \sim R_{131}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

R_{124} 、 R_{125} 、 R_b 、 R_{b1} 、 R_{b2} 、 R_{b3} 及び R_{b4} のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

R_{124} 、 R_{125} 、 R_b 、 R_{b1} 、 R_{b2} 、 R_{b3} 及び R_{b4} のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が互いに結合して形成された単環又は縮合環における少なくとも一つの水素は、

炭素数1～50のアルキル基、

環形成炭素数6～50のアリール基、

環形成原子数5～50の複素環基、

—O— (R_{151}) で表される基、及び

—N (R_{152}) (R_{153}) 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置換基で置換されているか、もしくは置換されておらず、当該置換基における少なくとも一つの水素は、環形成炭素数6～50のアリール基または炭素数1～50のアルキル基で置換されているか、もしくは置換されておらず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{121} \sim R_{132}$ 、 R_{150} 及び R_Q は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

— S i (R ₉₅₁) (R ₉₅₂) (R ₉₅₃) で表される基、

— O — (R ₉₅₄) で表される基、

— S — (R ₉₅₅) で表される基、

— N (R ₉₅₆) (R ₉₅₇) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

— C (= O) R ₉₅₈ で表される基、

— C O O R ₉₅₉ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R _b、R _{b1}、R _{b2}、R _{b3} 及び R _{b4} は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、または

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

R ₁₅₁ ～ R ₁₅₃ 並びに R ₉₅₁ ～ R ₉₅₉ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

R_{151} が複数存在する場合、複数の R_{151} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{152} が複数存在する場合、複数の R_{152} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{153} が複数存在する場合、複数の R_{153} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{951} が複数存在する場合、複数の R_{951} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{952} が複数存在する場合、複数の R_{952} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{953} が複数存在する場合、複数の R_{953} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{954} が複数存在する場合、複数の R_{954} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{955} が複数存在する場合、複数の R_{955} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{956} が複数存在する場合、複数の R_{956} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{957} が複数存在する場合、複数の R_{957} は、互いに同一であるか又は異なり、

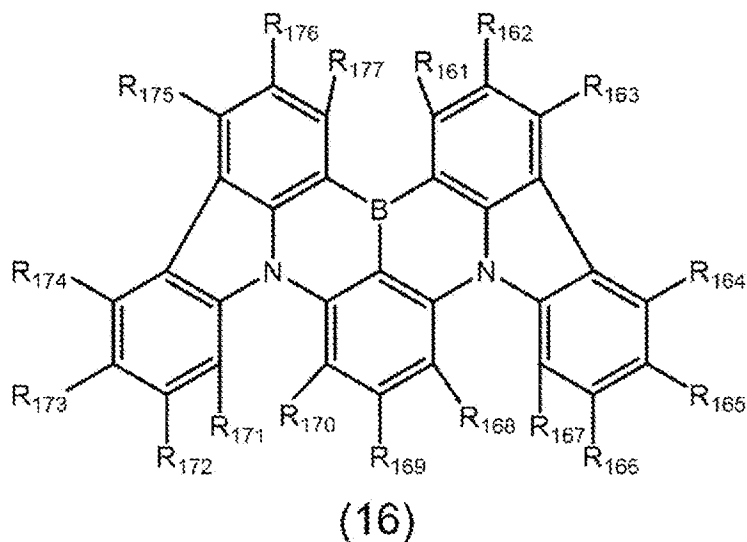
R_{958} が複数存在する場合、複数の R_{958} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{959} が複数存在する場合、複数の R_{959} は、互いに同一であるか又は異なる。))

[0401] 本実施形態において、化合物M1は、下記一般式(16)で表される化合物であることも好ましい。

[0402]

[化127]



[0403] (前記一般式(16)において、

$R_{161} \sim R_{177}$ のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{161} \sim R_{177}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～50のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—Si(R_{961})(R_{962})(R_{963})で表される基、

—O—(R_{964})で表される基、

—S—(R_{965})で表される基、

—N(R_{966})(R_{967})で表される基、

—C(=O) R_{968} で表される基、

—COOR₉₆₉で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R₉₆₁～R₉₆₉は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R₉₆₁が複数存在する場合、複数のR₉₆₁は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₆₂が複数存在する場合、複数のR₉₆₂は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₆₃が複数存在する場合、複数のR₉₆₃は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₆₄が複数存在する場合、複数のR₉₆₄は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₆₅が複数存在する場合、複数のR₉₆₅は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₆₆が複数存在する場合、複数のR₉₆₆は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₆₇が複数存在する場合、複数のR₉₆₇は、互いに同一であるか又は異なり、

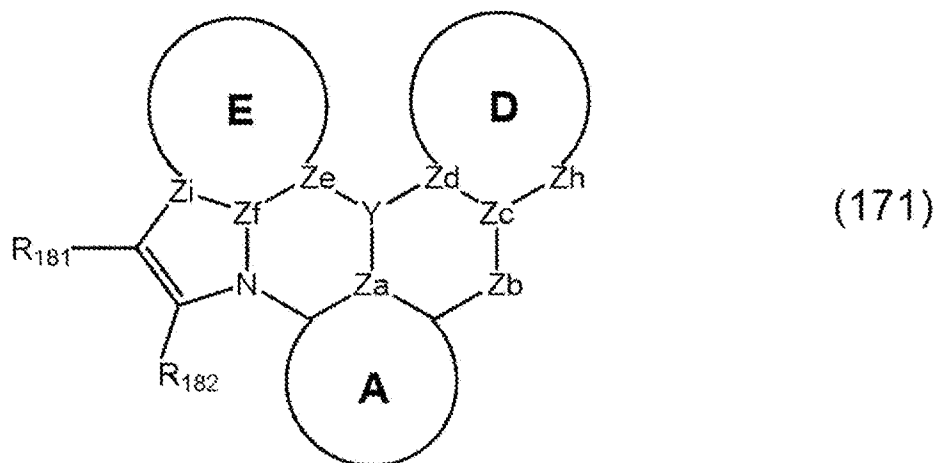
R₉₆₈が複数存在する場合、複数のR₉₆₈は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₆₉が複数存在する場合、複数のR₉₆₉は、互いに同一であるか又は異なり、

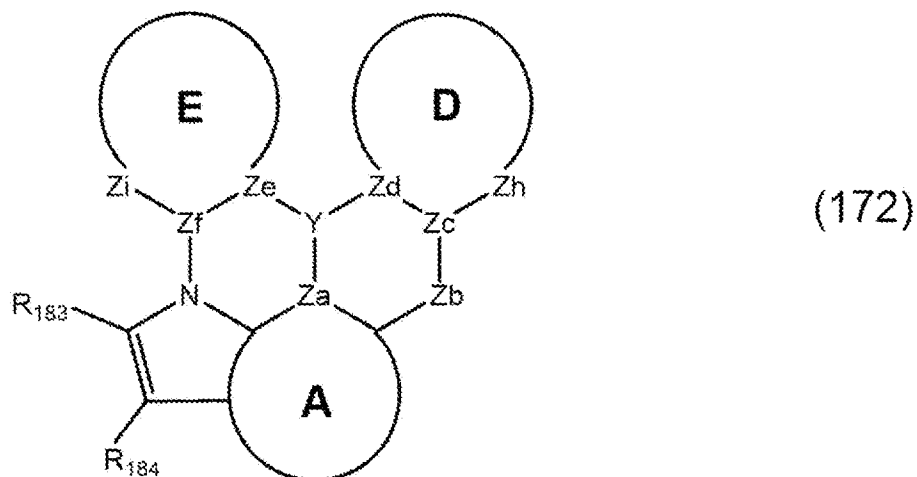
る。)

[0404] 本実施形態において、化合物M1は、下記一般式(171)又は一般式(172)で表される化合物であることも好ましい。

[0405] [化128]



[0406] [化129]



[0407] (前記一般式 (171) 及び一般式 (172) において、

環 A、環 D 及び環 E は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール環、及び

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 30 の複素環からなる群から選
 択される環構造であり、

Z a は、窒素原子又は炭素原子であり、

Z^bは、酸素原子、硫黄原子又はN R^bであり、

Z c は、窒素原子又は炭素原子であり、

Z d は、炭素原子又は窒素原子であり、

Z e は、炭素原子又は窒素原子であり、

Z f は、窒素原子又は炭素原子であり、

Z h は、窒素原子又は炭素原子であり、

Z i は、窒素原子又は炭素原子であり、

Y は、ホウ素原子、リン原子、S i R h、P=O又はP=Sであり、

R b 及び R h 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 及び R h は、それぞれ独立に、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～30 の複素環基、及び

置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基からなる群から選択

され、

R₁₈₁ 及び R₁₈₂ からなる組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

R₁₈₃ 及び R₁₈₄ からなる組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R₁₈₁～R₁₈₄ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1～50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2～50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3～50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 7～50 のアラルキル基、

—S i (R₉₇₁) (R₉₇₂) (R₉₇₃) で表される基、

—O— (R₉₇₄) で表される基、

—S— (R₉₇₅) で表される基、

—N (R₉₇₆) (R₉₇₇) で表される基、

—C (=O) R₉₇₈ で表される基、

—C O O R₉₇₉ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

R₉₇₁ ～ R₉₇₉ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

R₉₇₁ が複数存在する場合、複数の R₉₇₁ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₇₂ が複数存在する場合、複数の R₉₇₂ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₇₃ が複数存在する場合、複数の R₉₇₃ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₇₄ が複数存在する場合、複数の R₉₇₄ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₇₅ が複数存在する場合、複数の R₉₇₅ は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₇₆ が複数存在する場合、複数の R₉₇₆ は、互いに同一であるか又は異なり、

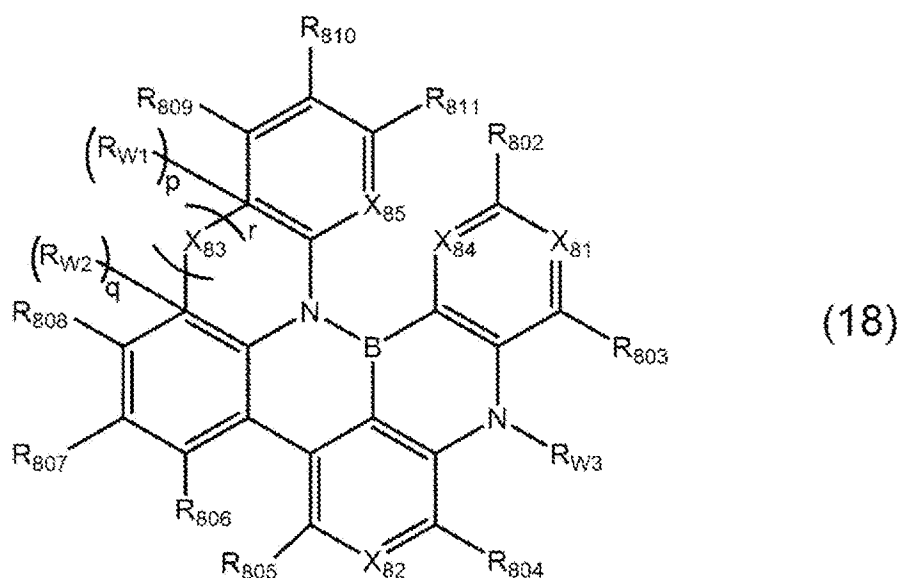
R_{977} が複数存在する場合、複数の R_{977} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{978} が複数存在する場合、複数の R_{978} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{979} が複数存在する場合、複数の R_{979} は、互いに同一であるか又は異なる。))

[0408] 本実施形態において、化合物M1は、下記一般式(18)で表される化合物であることも好ましい。

[0409] [化130]



[0410] (前記一般式(18)において、

r は、0又は1であり、

r が0のとき、 p 及び q は、1であって、 R_{W1} 及び R_{W2} が存在し、

r が1のとき、 p 及び q は、0であって、 R_{W1} 及び R_{W2} が存在せず、

X_{81} は、窒素原子又は CR_{191} であり、

X_{82} は、窒素原子又は CR_{192} であり、

X_{83} は、単結合、酸素原子、硫黄原子、 $Si(R_{193})(R_{194})$ 、 $C(R_{195})(R_{196})$ 又は BR_{197} であり、

X_{84} は、 R_{801} であるか、又は X_{85} と単結合で結合する炭素原子であり、

X_{85} は、 R_{812} であるか、又は X_{84} と単結合で結合する炭素原子であり、
 R_{191} 、 R_{192} 、 R_{193} 、 R_{194} 、 R_{195} 、 R_{196} 、 R_{197} 、 R_{801} 、 R_{802} 、
 R_{803} 、 R_{804} 、 R_{805} 、 R_{806} 、 R_{807} 、 R_{808} 、 R_{809} 、 R_{810} 、 R_{811} 、 R_{812} 、 R_{W1} 、 R_{W2} 及び R_{W3} のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{W3} は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基、又は

置換もしくは無置換の炭素数1～5のアルキル基であり、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{191} 、 R_{192} 、 R_{193} 、 R_{194} 、 R_{195} 、 R_{196} 、 R_{197} 、 R_{801} 、 R_{802} 、 R_{803} 、 R_{804} 、 R_{805} 、 R_{806} 、 R_{807} 、 R_{808} 、 R_{809} 、 R_{810} 、 R_{811} 、 R_{812} 、 R_{W1} 及び R_{W2} は、それぞれ独立に、

水素原子、

重水素原子、

—Si(R_{981})(R_{982})(R_{983})で表される基、

—O—(R_{984})で表される基、

—S—(R_{985})で表される基、

—N(R_{986})(R_{987})で表される基、

—B(R_{988})(R_{989})で表される基、

—OSO₂(R_{990})で表される基、

シアノ基、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のフルオロアルキル基、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のチオアルコキシ基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、
置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

$R_{981} \sim R_{990}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

R_{981} が複数存在する場合、複数の R_{981} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{982} が複数存在する場合、複数の R_{982} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{983} が複数存在する場合、複数の R_{983} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{984} が複数存在する場合、複数の R_{984} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{985} が複数存在する場合、複数の R_{985} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{986} が複数存在する場合、複数の R_{986} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{987} が複数存在する場合、複数の R_{987} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{988} が複数存在する場合、複数の R_{988} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{989} が複数存在する場合、複数の R_{989} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{990} が複数存在する場合、複数の R_{990} は、互いに同一であるか又は異なる。))

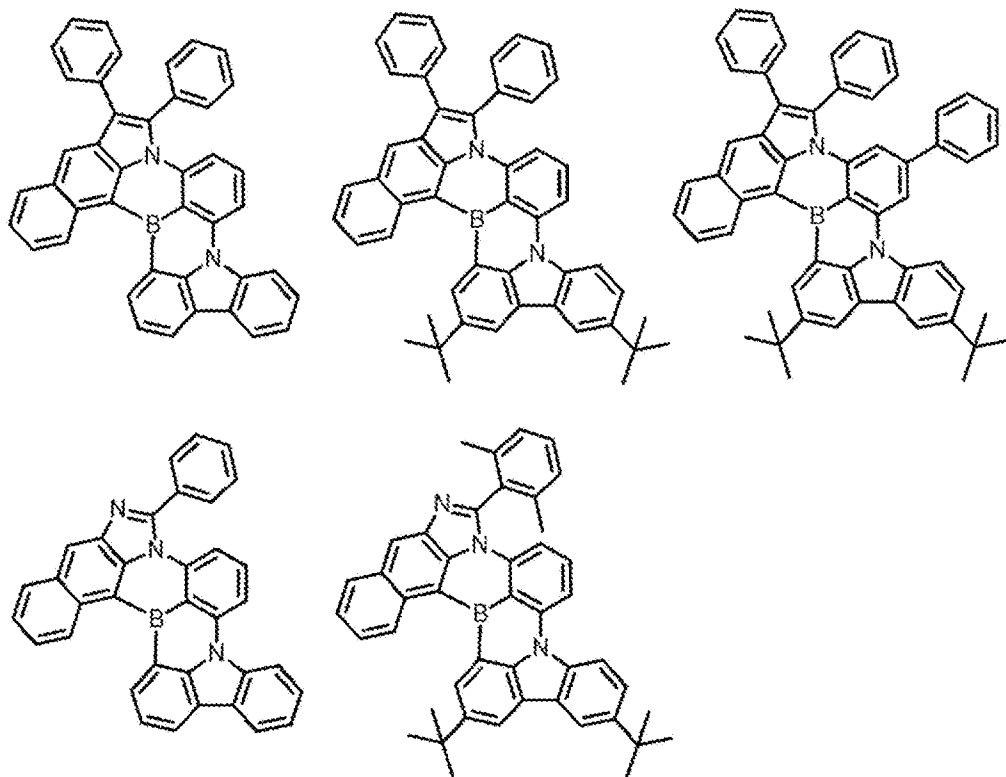
[0411] ・化合物M 1 の製造方法

本実施形態に係る化合物M 1 は、後述する実施例に記載の合成方法に従って、又は当該合成方法に倣い、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、製造できる。

[0412] ・化合物M 1 の具体例

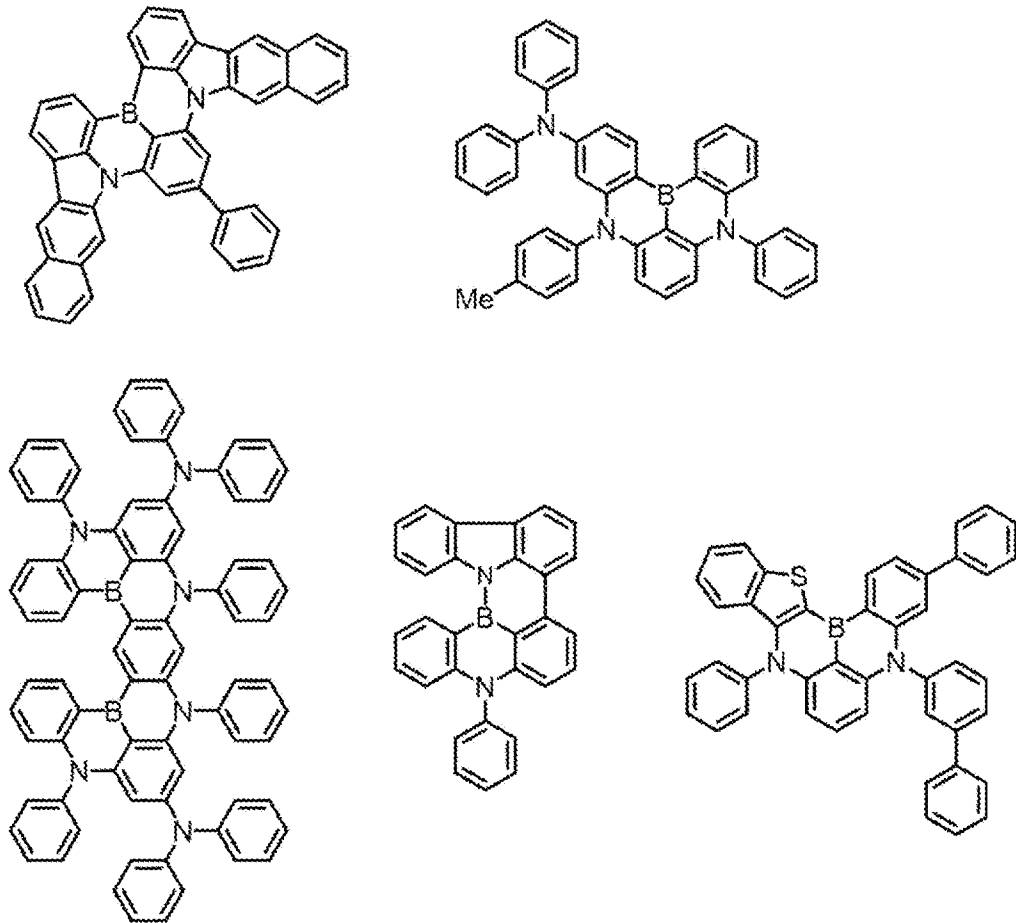
本実施形態の化合物M 1 の具体例としては、例えば、以下の化合物が挙げられる。ただし、本発明は、これら化合物の具体例に限定されない。

[0413] [化131]



[0414]

[化132]



[0415] (発光層における化合物M3、化合物M2、及び化合物M1の関係)

本実施形態の有機EL素子において、化合物M2の一重項エネルギー S_1 (M2)と、化合物M1の一重項エネルギー S_1 (M1)とが、下記数式(数2)の関係を満たすことが好ましい。

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

[0416] また、化合物M3の一重項エネルギー S_1 (M3)は、化合物M1の一重項エネルギー S_1 (M1)よりも大きいことが好ましい。

$$S_1(M3) > S_1(M1) \quad \cdots (\text{数} 2A)$$

[0417] 化合物M3の一重項エネルギー S_1 (M3)と、化合物M2の一重項エネルギー S_1 (M2)と、化合物M1の一重項エネルギー S_1 (M1)とは、下記数式(数2B)の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(M3) > S_1(M2) > S_1(M1) \quad \cdots (\text{数} 2B)$$

[0418] 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M1が発光していることが好ましい。

本実施形態の有機EL素子は、赤色発光または緑色発光することが好ましい。

[0419] (発光層における化合物の含有率)

発光層に含まれている化合物M3、化合物M2、及び化合物M1の含有率は、例えば、以下の範囲であることが好ましい。

化合物M3の含有率は、10質量%以上80質量%以下であることが好ましい。

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

化合物M1の含有率は、0.01質量%以上10質量%以下であることが好ましく、0.01質量%以上5質量%以下であることがより好ましく、0.01質量%以上1質量%以下であることがさらに好ましい。

発光層における化合物M3、化合物M2、及び化合物M1の合計含有率の上限は、100質量%である。なお、本実施形態は、発光層に、化合物M3、化合物M2、及び化合物M1以外の材料が含まれることを除外しない。

発光層は、化合物M3を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。発光層は、化合物M2を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。発光層は、化合物M1を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

[0420] 図5は、発光層における化合物M3、化合物M2、及び化合物M1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、S0は、基底状態を表す。S1(M1)は、化合物M1の最低励起一重項状態を表し、T1(M1)は、化合物M1の最低励起三重項状態を表す。S1(M2)は、化合物M2の最低励起一重項状態を表し、T1(M2)は、化合物M2の最低励起三重項状態を表す。S1(M3)は、化合物M3の最低励起一重項状態を

表し、 $T_1(M_3)$ は、化合物 M_3 の最低励起三重項状態を表す。図5中の $S_1(M_2)$ から $S_1(M_1)$ へ向かう破線の矢印は、化合物 M_2 の最低励起一重項状態から化合物 M_1 の最低励起一重項状態へのフェルスター型エネルギー移動を表す。

図5に示すように、化合物 M_2 として $\Delta ST(M_2)$ の小さな化合物を用いると、最低励起三重項状態 $T_1(M_2)$ は、熱エネルギーにより、最低励起一重項状態 $S_1(M_2)$ に逆項間交差が可能である。そして、化合物 M_2 の最低励起一重項状態 $S_1(M_2)$ から化合物 M_1 へのフェルスター型エネルギー移動が生じ、最低励起一重項状態 $S_1(M_1)$ が生成する。この結果、化合物 M_1 の最低励起一重項状態 $S_1(M_1)$ からの蛍光発光を観測することができる。この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。

[0421] 第二実施形態によれば、高性能な、特に長寿命かつ発光効率が高い有機EL素子を提供できる。第二実施形態の有機EL素子は、表示装置及び発光装置等の電子機器に使用できる。

[0422] [第三実施形態]

[電子機器]

本実施形態に係る電子機器は、上述の実施形態のいずれかの有機EL素子を搭載している。電子機器としては、例えば、表示装置及び発光装置等が挙げられる。表示装置としては、例えば、表示部品（例えば、有機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。

[0423] [実施形態の変形]

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

[0424] 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。

[0425] 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。

[0426] 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。

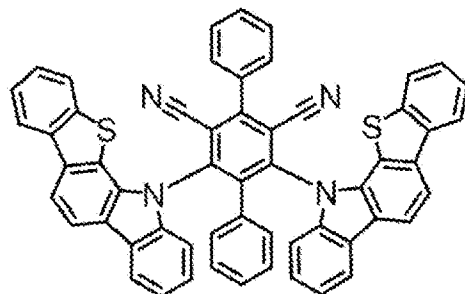
実施例

[0427] 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。

[0428] <化合物>

実施例 1 ～ 10 に係る有機 EL 素子の製造に用いた一般式 (2) で表される化合物の構造を以下に示す。

[0429] [化133]

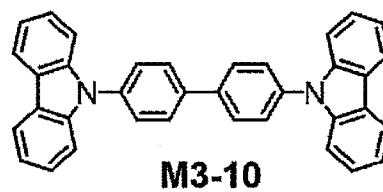
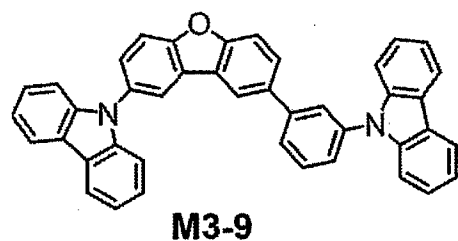
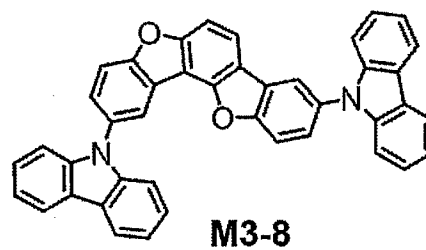
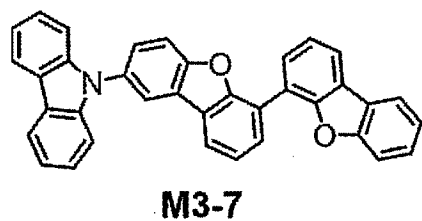
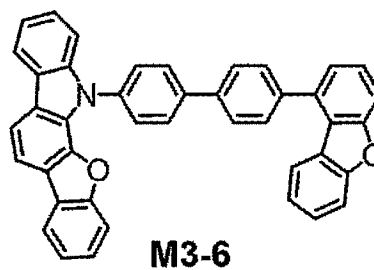
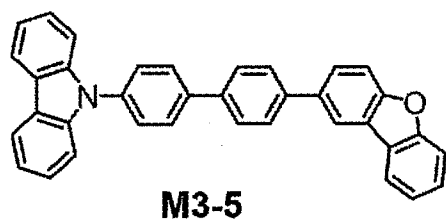
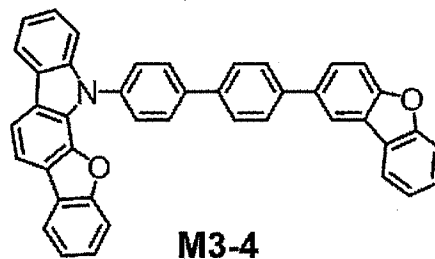
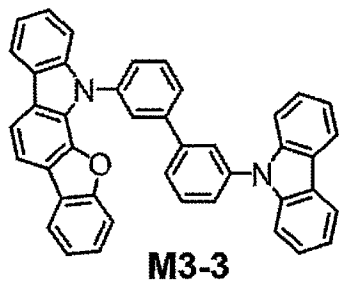
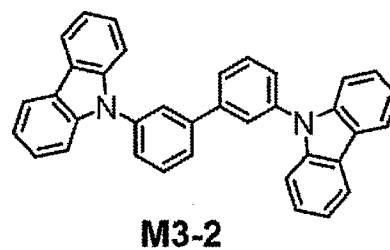
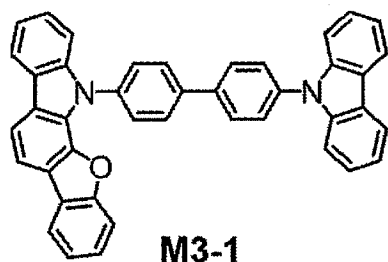


TADF-1

[0430] 実施例 1 ～ 10 に係る有機 EL 素子の製造に用いた一般式 (3) で表される化合物の構造を以下に示す。

[0431]

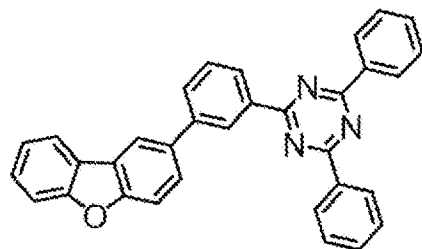
[化134]



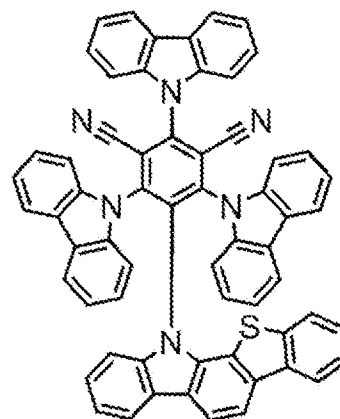
[0432] 比較例 1 ～ 2 に係る有機 EL 素子の製造に用いた比較化合物の構造を以下に示す。

[0433]

[化135]



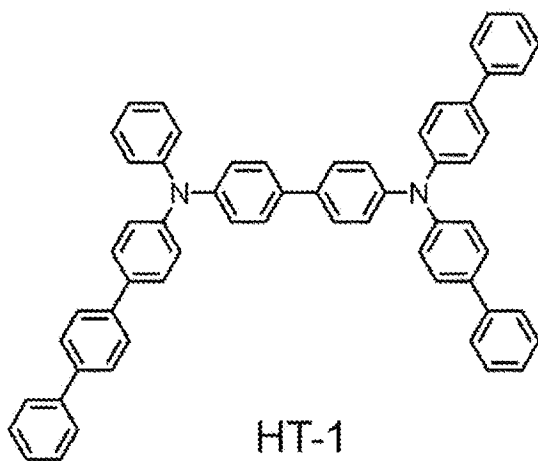
Ref-1



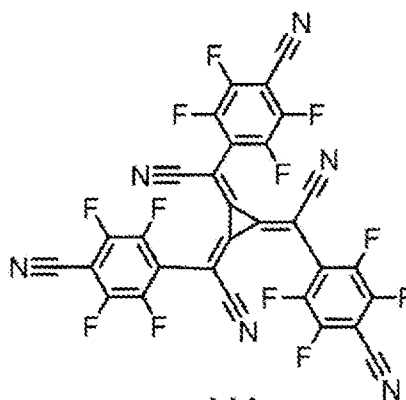
Ref-T1

[0434] 実施例 1 ～ 10 及び比較例 1 ～ 2 に係る有機 EL 素子の製造に用いた、他の化合物の構造を以下に示す。

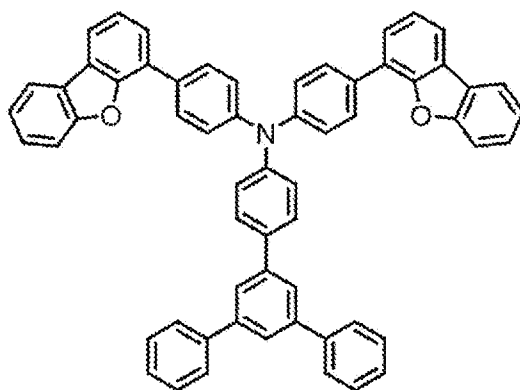
[0435] [化136]



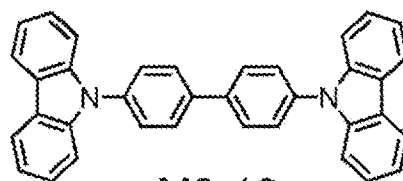
HT-1



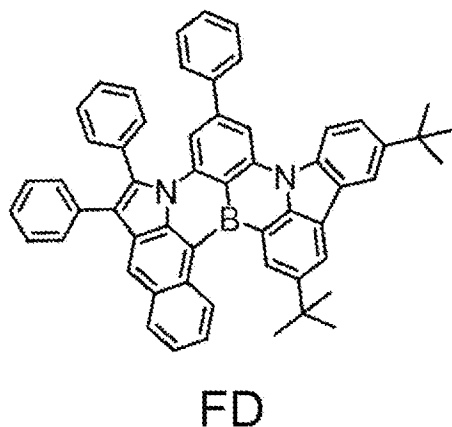
HA



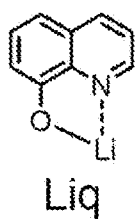
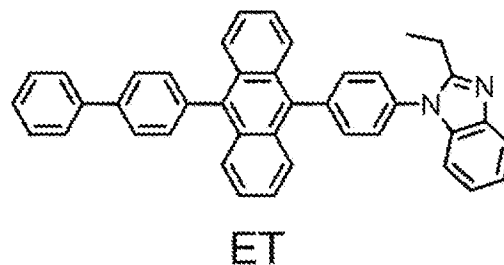
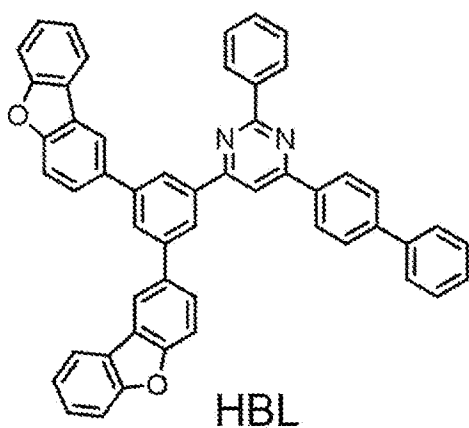
HT-2

M3-10
(再掲)

[0436] [化137]



[0437] [化138]



[0438] <有機EL素子の作製1>

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

[0439] (実施例1)

25mm×75mm×1.1mm厚のITO透明電極(陽極)付きガラス基板(ジオマテック株式会社製)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1分間行った。ITOの膜厚は、130nmとした。

洗浄後の透明電極ライン付き前記ガラス基板を真空蒸着装置の基板ホルダーに装着し、まず透明電極ラインが形成されている側の面上に透明電極を覆うようにして化合物HT-1と化合物HAとを共蒸着し、膜厚10nmの正孔注入層を形成した。正孔注入層における化合物HT-1の濃度を97質量%とし、化合物HAの濃度を3質量%とした。

次に、この正孔注入層上に、化合物HT-1を蒸着し、膜厚110nmの第1正孔輸送層を形成した。

次に、この第1正孔輸送層上に、化合物HT-2を蒸着し、膜厚5nmの第2正孔輸送層を形成した。

次に、この第2正孔輸送層上に、化合物M3-10を蒸着し、膜厚5nmの電子障壁層を形成した。

次に、この電子障壁層上に、化合物M3としての化合物M3-1と、化合物M2としての化合物TADF-1と、化合物M1としての化合物FD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M3-1の濃度を74質量%とし、化合物TADF-1の濃度を25質量%とし、化合物FDの濃度を1質量%とした。

次に、この発光層上に、化合物HBLを蒸着し、膜厚5nmの正孔障壁層を形成した。

次に、この正孔障壁層上に、化合物ETを蒸着し、膜厚50nmの電子輸送層を形成した。

次に、この電子輸送層上に、LiFを蒸着し、膜厚1nmの電子注入層を形成した。

そして、この電子注入層上に、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に係る有機EL素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

IT0(130)/HT-1:HA(10, 97%:3%)/HT-1(110)/HT-2(5)/M3-10(5)/M3-1:TADF-1:FD
(25, 74%:25%:1%)/HBL(5)/ET(50)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：nm）を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字（97%：3%）は、正孔注入層における化合物HT-1及び化合物HAの割合（質量%）を示し、パーセント表示された数字（74%：25%：1%）は、発光層における化合物M3-1、化合物TADF-1及び化合物FDの割合（質量%）を示す。以下、同様の表記とする。

[0440]（実施例2～10）

実施例2～10に係る有機EL素子は、それぞれ、実施例1の発光層中の化合物M3としての化合物M3-1を表1に記載の化合物M3に変更したこと以外、実施例1と同様にして作製した。

[0441]（比較例1）

比較例1に係る有機EL素子は、実施例1の発光層中の化合物M3としての化合物M3-1を表1に記載の比較化合物Ref-1に変更したこと以外、実施例1と同様にして作製した。

[0442]（比較例2）

比較例2に係る有機EL素子は、実施例5の発光層中の化合物M2としての化合物TADF-1を表1に記載の比較化合物Ref-T1に変更したこと以外、実施例5と同様にして作製した。

[0443]＜有機EL素子の評価＞

作製した有機EL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。なお、比較例1で使用した比較化合物Ref-1は、化合物M3に該当しないが、便宜的に実施例1～10の化合物M3と同じ列に表記する。比較例2で使用した比較化合物Ref-T1は、化合物M2に該当しないが、便宜的に実施例1～10の化合物M2と同じ列に表記する。また、各実施例の発光層で使用した化合物M3、化合物M2及び化合物M1の一重項エネルギー S_1 又はエネルギーギャップ T_{77K} も表1に示す。

[0444] (最大ピーク波長 λ_p)

電流密度が 10 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-2000 (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、最大ピーク波長 λ_p (単位: nm) を求めた。

[0445] (駆動電圧)

電流密度が 10 mA/cm^2 となるように陽極と陰極との間に通電したときの電圧 (単位: V) を計測した。

[0446] (外部量子効率 EQE)

電流密度が 10 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-2000 (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 EQE (単位: %) を算出した。

[0447] (寿命 LT95)

作製した有機 EL 素子に、電流密度が 50 mA/cm^2 となるように電圧を印加し、初期輝度に対して輝度が 95% となるまでの時間 (LT95 (単位: 時間)) を寿命として測定した。輝度は、分光放射輝度計 CS-2000 (コニカミノルタ株式会社製) を用いて測定した。

[0448]

[表1]

	発光層									素子評価			
	化合物M3			化合物M2			化合物M1			λ_p [nm]	電圧 [V]	EQE [%]	LT95 [hr]
	名称	S_1 [eV]	T_{77K} [eV]	名称	S_1 [eV]	ΔST [eV]	名称	S_1 [eV]	λ [nm]				
実施例1	M3-1	3.42	2.89	TADF-1	2.66	<0.01	FD	2.39	512	520	4.1	18.6	41
実施例2	M3-2	3.56	2.96	TADF-1	2.66	<0.01	FD	2.39	512	519	4.4	16.6	36
実施例3	M3-3	3.46	2.89	TADF-1	2.66	<0.01	FD	2.39	512	520	4.5	17.5	47
実施例4	M3-4	3.41	2.72	TADF-1	2.66	<0.01	FD	2.39	512	520	4.0	16.1	44
実施例5	M3-5	3.50	2.74	TADF-1	2.66	<0.01	FD	2.39	512	520	4.1	15.4	51
実施例6	M3-6	3.42	2.79	TADF-1	2.66	<0.01	FD	2.39	512	520	4.2	15.8	39
実施例7	M3-7	3.53	2.92	TADF-1	2.66	<0.01	FD	2.39	512	520	4.4	13.6	63
実施例8	M3-8	3.51	2.98	TADF-1	2.66	<0.01	FD	2.39	512	520	4.4	16.4	31
実施例9	M3-9	3.54	3.03	TADF-1	2.66	<0.01	FD	2.39	512	521	4.6	16.1	43
実施例10	M3-10	3.52	2.80	TADF-1	2.66	<0.01	FD	2.39	512	520	4.1	17.7	31
比較例1	Ref-1	3.51	2.97	TADF-1	2.66	<0.01	FD	2.39	512	520	4.6	9.4	13
比較例2	M3-5	3.50	2.74	Ref-T1	2.57	<0.01	FD	2.39	512	520	4.7	10.6	13

[0449] 実施例1～実施例10の有機EL素子は、比較例1及び比較例2の有機EL素子に比べて、長寿命かつ高いEQEで発光した。

[0450] <化合物の評価>

(熱活性化遅延蛍光性)

・化合物TADF-1の遅延蛍光性

遅延蛍光性は図2に示す装置を利用して過渡PLを測定することにより確認した。前記化合物TADF-1をトルエンに溶解し、自己吸収の寄与を取り除くため励起波長において吸光度が0.05以下の希薄溶液を調製した。また酸素による消光を防ぐため、試料溶液を凍結脱気した後にアルゴン雰囲気下で蓋付きのセルに封入することで、アルゴンで飽和された酸素フリーの試料溶液とした。

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

前記化合物TADF-1が吸収する波長のパルス光（パルスレーザーから

照射される光)で励起された後、当該励起状態から即座に観察される P r o m p t 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 D e l a y 発光 (遅延発光)とが存在する。本実施例における遅延蛍光発光とは、D e l a y 発光 (遅延発光)の量が P r o m p t 発光 (即時発光)の量に対して5%以上を意味する。具体的には、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。

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

化合物T A D F - 1について、D e l a y 発光 (遅延発光)の量がP r o m p t 発光 (即時発光)の量に対して5%以上であることが確認された。

具体的には、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。

[0451] ・比較化合物R e f - T 1の遅延蛍光性

化合物T A D F - 1に代えて、比較化合物R e f - T 1を用いたこと以外、上記と同様にして比較化合物R e f - T 1の遅延蛍光性を確認した。

比較化合物R e f - T 1について、 X_D/X_P の値は、0.05以上であった。

[0452] (一重項エネルギー S_1)

化合物M3-1、M3-2、M3-3、M3-4、M3-5、M3-6、M3-7、M3-8、M3-9、M3-10、化合物T A D F - 1、化合物F D、比較化合物R e f - 1及び比較化合物R e f - T 1の一重項エネルギー S_1 を、前述の溶液法により測定した。測定結果を、表1に示す。

[0453] (エネルギーギャップ T_{77K})

化合物M3-1、M3-2、M3-3、M3-4、M3-5、M3-6、

M3-7、M3-8、M3-9、M3-10、化合物TADF-1及び化合物Ref-T1の T_{77K} を測定した。 T_{77K} は、前述の「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」で記載したエネルギーギャップ T_{77K} の測定方法により測定した。

[0454] (ΔST)

測定した最低励起一重項エネルギー S_1 と77[K]におけるエネルギーギャップ T_{77K} とに基づいて、 ΔST を算出した。化合物TADF-1及び化合物Ref-T1の ΔST の値を、表1に示す。表において、「 <0.01 」の表記は、 ΔST が 0.01 eV 未満であったことを示す。

[0455] (化合物の最大ピーク波長 λ)

測定対象となる化合物の $5\text{ }\mu\text{mol/L}$ トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温(300K)でこの試料の蛍光スペクトル(縦軸: 蛍光発光強度、横軸: 波長とする。)を測定した。本実施例では、蛍光スペクトルを株式会社日立ハイテクサイエンス製の分光蛍光光度計(装置名: F-7000)で測定した。なお、蛍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。蛍光スペクトルにおいて、発光強度が最大となる蛍光スペクトルのピーク波長を化合物の最大ピーク波長 λ とした。化合物M1について、化合物の最大ピーク波長を測定し、表1に記載した。

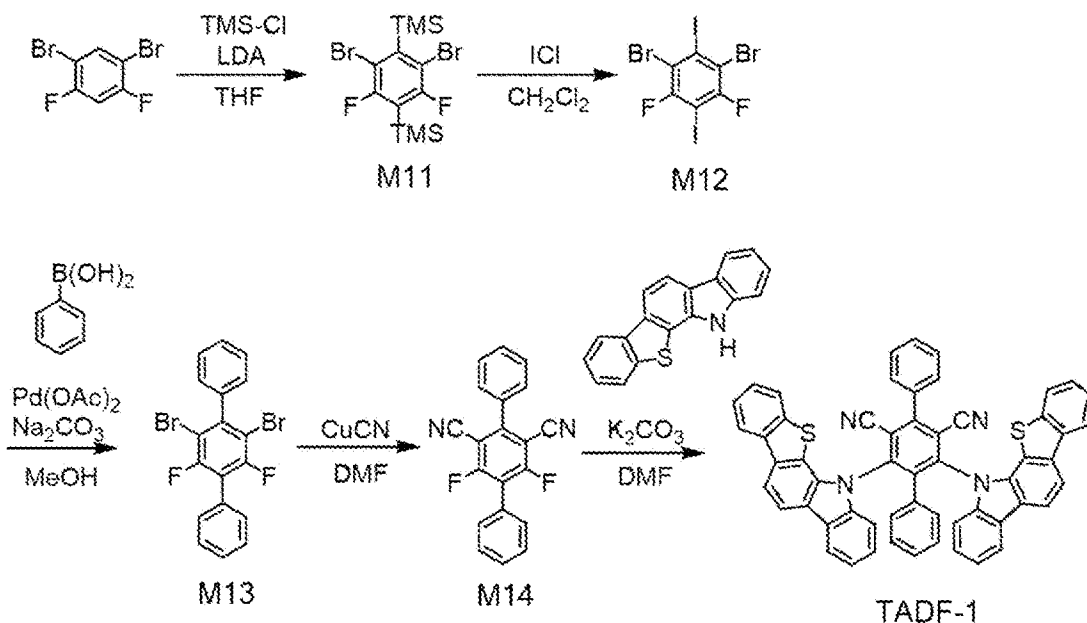
[0456] <化合物の合成>

(合成実施例1) 化合物TADF-1の合成

化合物TADF-1の合成方法を以下に説明する。

[0457]

[化139]



[0458] 窒素雰囲気下、1000mLの三口フラスコに、1,5-ジブロモ-2,4-ジフルオロベンゼン(50g, 184mmol)、クロロトリメチルシラン(60g, 552mmol)、及びTHF(200mL)を入れた。ドライアイス/アセトンバスで、三口フラスコ内の材料を-78℃まで冷却してから、リチウムジイソプロピルアミドを230mL(2M, THF溶液)滴下した。-78℃で2時間攪拌し、その後、室温に戻し、更に2時間攪拌した。攪拌後、三口フラスコに水(200mL)を加えてから、酢酸エチルで有機層を抽出し、抽出した有機層を水および食塩水で洗浄、硫酸マグネシウムで乾燥した後、溶媒をロータリーエバポレーターで減圧除去した。得られた中間体M11(73g, 175mmol、収率95%)は、精製せずに次の反応に使用した。クロロトリメチルシランは、TMS-Clと略記する場合がある。中間体M11の化学式中、TMSは、トリメチルシリル基である。LDAは、リチウムジイソプロピルアミド(Lithium Diisopropyl Amide)の略称である。

[0459] 窒素雰囲気下、1000mLのナスフラスコに、中間体M11(73g, 175mmol)とジクロロメタン(200mL)を入れた。一塩化ヨウ素(85g, 525mmol)をジクロロメタン(200mL)に溶解し、0

℃で滴下した後、40℃で4時間攪拌した。攪拌後、室温に戻し、飽和亜硫酸水素ナトリウム水溶液（100 mL）を加え、ジクロロメタンにより有機層を抽出し、抽出した有機層を水及び食塩水で洗浄し、洗浄後の有機層を硫酸マグネシウムで乾燥し、乾燥させた有機層をロータリーエバポレーターで濃縮した。濃縮後に得られた化合物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーによって精製して、中間体M12（65 g, 124 mmol、収率71%）を得た。

[0460] 窒素雰囲気下で、500 mLの三口フラスコに、中間体M12（22 g, 42 mmol）、フェニルボロン酸（12.8 g, 105 mmol）、酢酸パラジウム（0.47 g, 2.1 mmol）、炭酸ナトリウム（22 g, 210 mmol）、及びメタノール（150 mL）を入れて、80℃で4時間攪拌した。攪拌後、反応溶液を室温まで放冷してから、酢酸エチルで有機層を抽出し、抽出した有機層を水及び食塩水で洗浄して、洗浄後の有機層をロータリーエバポレーターで濃縮した。濃縮後に得られた化合物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して、中間体M13（10 g, 24 mmol、収率56%）を得た。なお、精製後の化合物の構造をASAP/MSにより同定した。ASAP/MSは、Atmospheric Pressure Solid Analysis Probe Mass Spectrometryの略称である。

[0461] 窒素雰囲気下で、200 mLの三口フラスコに、中間体M13（10 g, 24 mmol）、シアン化銅（10.6 g, 118 mmol）、及びDMF（15 mL）を入れて、150℃で8時間加熱攪拌した。攪拌後、室温まで冷却した後、反応溶液を10 mLのアンモニア水に注いだ。次に、塩化メチレンにより有機層を抽出し、抽出した有機層を水と食塩水で洗浄し、洗浄した有機層を硫酸マグネシウムで乾燥した。乾燥後、ロータリーエバポレーターで溶媒を減圧除去し、減圧除去後に得られた化合物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製して、中間体M14（5.8 g, 18.34 mmol、収率78%）を得た。DMFは、N,N-ジメチルホルムアミドの略

称である。

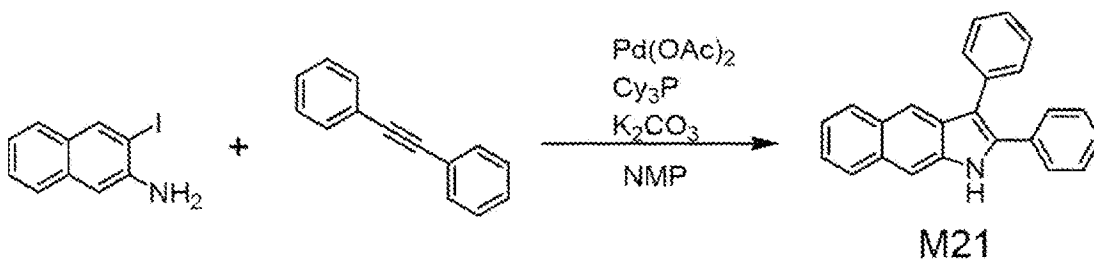
[0462] 窒素雰囲気下、100 mLの三口フラスコに、中間体M14 (1.0 g、3.2 mmol)、12H-[1]Benzothieno[2,3-a]carbazole (1.9 g、7 mmol)、炭酸カリウム (1.3 g、9.50 mmol) 及びDMF 30 mLを入れて、120℃で6時間撹拌した。撹拌後、析出した固体をろ取し、シリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、化合物TADF-1 (1.8 g、2.2 mmol、収率69%)を得た。得られた化合物は、ASAP-MSの分析により化合物TADF-1と同一した。

[0463] (合成実施例2) 化合物FDの合成

化合物FDの合成方法を以下に説明する。

[0464] [中間体M21の製造]

[0465] [化140]

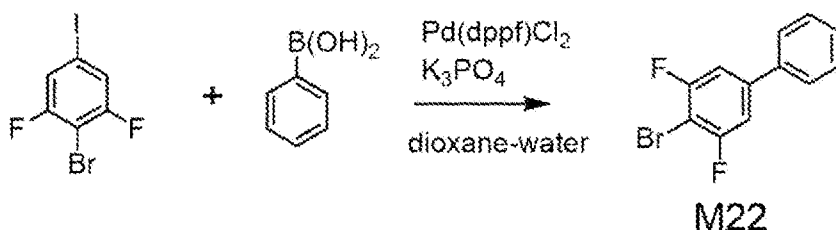


[0466] アルゴン雰囲気下、2-アミノ-3-ヨードナフタレン (4.28 g)、1,2-ジフェニルアセチレン (3.40 g)、酢酸パラジウム (I) (178 mg)、トリシクロヘキシルホスフィン (446 mg)、炭酸カリウム (5.49 g) およびN-メチルピロリドン (360 mL) の混合物を110℃で5時間撹拌した。得られた混合物を室温に冷却し、一部のN-メチルピロリドンを減圧留去した後、t-ブチルメチルエーテルで希釈し、水に加えた。水層をt-ブチルメチルエーテルで抽出し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、硫酸マグネシウムで乾燥させ溶媒を減圧留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、中間体M21を2.78 g (収率55%) 得た。反応スキーム中、Pd(OAc)₂は、酢酸パラジウム (I) であり、Cy₃Pは、トリシクロヘキシルホスフィンであり、

NMPは、N-メチルピロリドンである。

[0467] [中間体M22の製造]

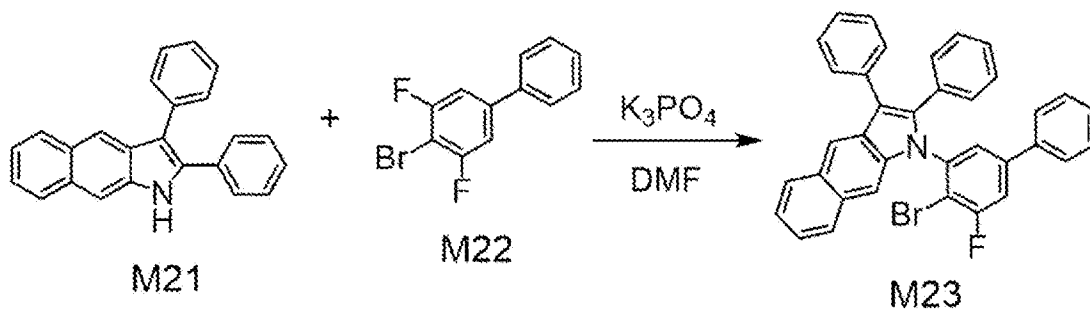
[0468] [化141]



[0469] アルゴン雰囲気下、2-ブロモ-1,3-ジフルオロ-5-ヨードベンゼン (47.8 g)、フェニルボロン酸 (18.29 g)、リン酸三カリウム (39.8 g)、[1,1-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)ジクロリド (1.09 g)、1,4-ジオキサン (250 mL)、及び水 (125 mL) の混合物を室温で4時間攪拌した。得られた混合物にトルエン (250 mL) および水 (200 mL) を加えて、水層をトルエンで抽出し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、硫酸マグネシウムで乾燥させ溶媒を減圧留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、中間体M22を35.1 g (収率87%) 得た。反応スキーム中、Pd(dppf)Cl₂は、[1,1-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)ジクロリドである。

[0470] [中間体M23の製造]

[0471] [化142]

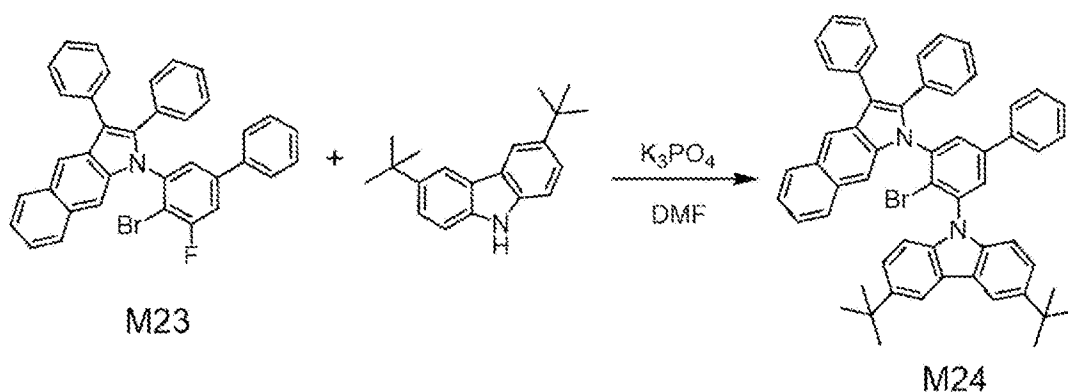


[0472] アルゴン雰囲気下、中間体M21 (6.39 g)、中間体M22 (10.76 g)、リン酸三カリウム (21.23 g)、及びジメチルホルムアミド (140 mL) の混合物を105℃で48時間攪拌した。一部のジメチルホ

ホルムアミドを減圧留去した後、水に入れ、*t*-ブチルメチルエーテルで抽出した。有機層を飽和食塩水で洗浄した後、硫酸マグネシウムで乾燥させ溶媒を減圧留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、中間体M23を6.2 g（収率55%）得た。反応スキーム中、DMFは、ジメチルホルムアミドである。

[0473] [中間体M24の製造]

[0474] [化143]

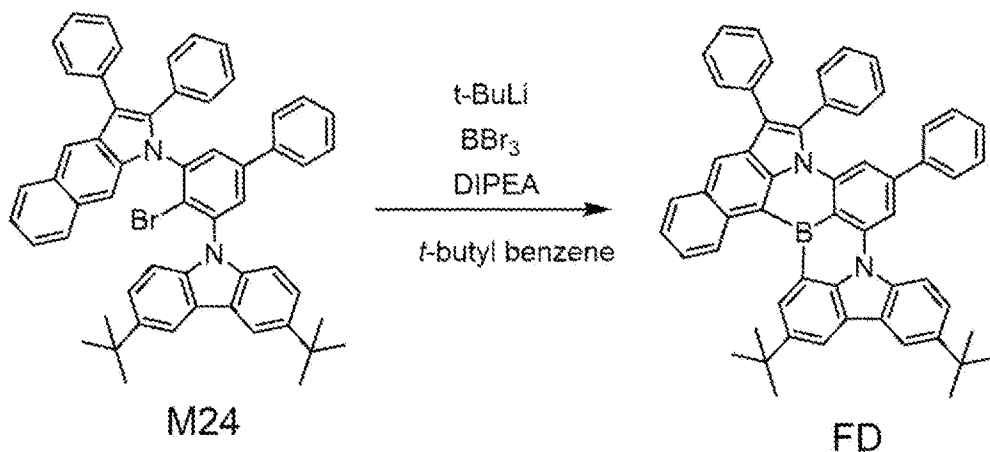


[0475] アルゴン雰囲気下、中間体M23（6.14 g）、3,6-ジ-*tert*-ブチル-9H-カルバゾール（3.32 g）、リン酸三カリウム（6.88 g）、及びジメチルホルムアミド（96 mL）の混合物を105℃で20時間攪拌した。一部のジメチルホルムアミドを減圧留去し、得られた混合物を150 mLの水に入れ攪拌させた。析出した固体を濾取し、水で洗浄した後に減圧乾燥させた。さらに、得られた固体を220 mLのエタノールに懸濁させて1時間加熱還流させた後、固体を濾取することにより、中間体M24を7.31 g（収率82%）得た。

[0476] [化合物FDの製造]

[0477]

[化144]



[0478] アルゴン雰囲気下、中間体M24（2.23g）をtert-ブチルベンゼン（33mL）に加え、−20℃に冷却した後、1.9Mのtert-ブチルリチウムペンタン溶液（2.8mL）を滴下した。滴下後、70℃まで昇温して30分攪拌した後、tert-ブチルベンゼンよりも低沸点の成分を減圧留去した。−55℃まで冷却して三臭化ホウ素（0.57mL）を加えて、室温まで昇温し1時間攪拌した。その後、0℃に冷却してN,N-ジイソプロピルエチルアミン（1.19mL）を加え、発熱が収まるまで室温で攪拌した後、130℃まで昇温して終夜攪拌した。tert-ブチルベンゼンを減圧留去した後、残渣をフラッシュクロマトグラフィーにて精製し、橙色化合物を350mg得た。この橙色化合物は、マススペクトル分析の結果、目的物（化合物FD）であり、分子量756.8に対し、757.4 [M+H]⁺であった。反応スキーム中、t-BuLiは、tert-ブチルリチウムであり、DIPEAは、N,N-ジイソプロピルエチルアミンである。

符号の説明

[0479] 1…有機EL素子、2…基板、3…陽極、4…陰極、5…発光層、6…正孔注入層、7…正孔輸送層、8…電子輸送層、9…電子注入層。

請求の範囲

[請求項1]

陽極と、

陰極と、

前記陽極と前記陰極との間に含まれる発光層と、を有し、

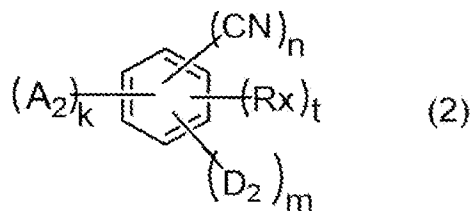
前記発光層は、下記一般式（2）で表される遅延蛍光性の化合物M2と、下記一般式（3）で表される化合物M3と、を含み、

前記化合物M2の一重項エネルギー S_1 （M2）と、前記化合物M3の一重項エネルギー S_1 （M3）とが、下記数式（数1）の関係を満たす、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

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

[化1]



（前記一般式（2）において、

 A_2 は、下記一般式（21）で表される基であり、 D_2 は、下記一般式（22）で表される基であり、 CN は、シアノ基であり、 k は、1、2、3又は4であり、 m は、1、2、3又は4であり、 n は、1又は2であり、 t は、0、1、2又は3であり、 $k + m + n + t = 6$ であり、

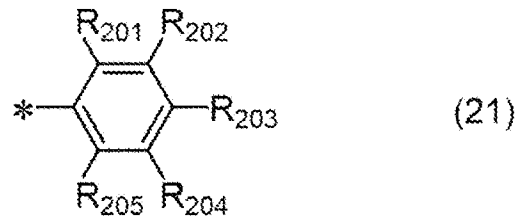
k が2、3又は4のとき、複数の A_2 は、互いに同一であるか又は異なり、

m が2、3又は4のとき、複数の D_2 は、互いに同一であるか又は

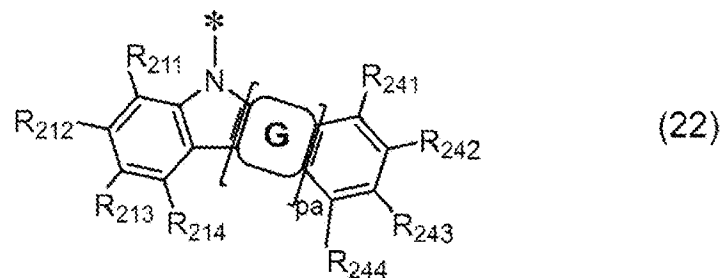
異なり、

t が 2 又は 3 のとき、複数の R_x は、互いに同一であるか又は異なる。))

[化2]



[化3]



(前記一般式 (21) において、

$R_{201} \sim R_{205}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が

、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記一般式 (22) において、

$R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記一般式 (2 1) 及び (2 2) 中の*は、それぞれ、前記一般式 (2) 中のベンゼン環との結合位置を示す。))

(前記一般式 (2) の R_x 、前記一般式 (2 1) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{201} \sim R_{205}$ 、並びに前記一般式 (2 2) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基

、

— Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903}) で表される基、

— O — (R_{904}) で表される基、

— S — (R_{905}) で表される基、

— N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

— C (=O) R_{908} で表される基、

— COOR₉₀₉ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

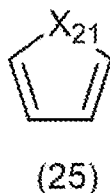
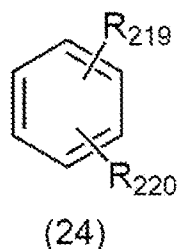
ニトロ基、

— P (=O) (R_{931}) (R_{932}) で表される基、

— Ge (R_{933}) (R_{934}) (R_{935}) で表される基、

$-B(R_{936})(R_{937})$ で表される基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、
 前記一般式 (22) において、
 環 G は、それぞれ独立に、下記一般式 (24) 及び一般式 (25)
 で表される環構造からなる群から選択されるいずれかの環構造であり、
 、
 環 G は、隣接する環と任意の位置で縮合し、
 p a は、1、2、3 又は 4 であり、
 p a が 2、3 又は 4 の場合、複数の環 G は、互いに同一であるか、
 又は異なる。)

[化4]



(前記一般式 (24) において、
 R_{219} 及び R_{220} からなる組が、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
 互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又
 は
 互いに結合せず、
 前記一般式 (25) において、
 X_{21} は、硫黄原子または酸素原子であり、
 置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、置換もしくは無置換
 の縮合環を形成しない R_{219} 及び R_{220} は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基

、

— Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

— O — (R₉₀₄) で表される基、

— S — (R₉₀₅) で表される基、

— N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

— C (=O) R₉₀₈ で表される基、

— COOR₉₀₉ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

— P (=O) (R₉₃₁) (R₉₃₂) で表される基、

— Ge (R₉₃₃) (R₉₃₄) (R₉₃₅) で表される基、

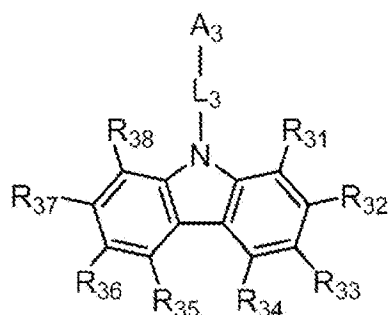
— B (R₉₃₆) (R₉₃₇) で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基である。

)

[化5]



(3)

(前記一般式 (3) において、

A_3 は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

L_3 は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基からなる群から選択される 2 つの基が結合して形成される 2 価の基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 30 のアリーレン基及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 30 の 2 価の複素環基からなる群から選択される 3 つの基が結合して形成される 2 価の基であり、

$R_{31} \sim R_{38}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

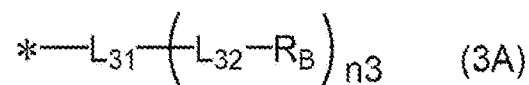
置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基

、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、
 - O - (R₉₀₄) で表される基、
 - S - (R₉₀₅) で表される基、
 - N (R₉₀₆) (R₉₀₇) で表される基、
 置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、
 - C (=O) R₉₀₈ で表される基、
 - COOR₉₀₉ で表される基、
 ハロゲン原子、
 シアノ基、
 ニトロ基、
 - P (=O) (R₉₃₁) (R₉₃₂) で表される基、
 - Ge (R₉₃₃) (R₉₃₄) (R₉₃₅) で表される基、
 - B (R₉₃₆) (R₉₃₇) で表される基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基、又は
 下記一般式 (3A) で表される基である。)

[化6]



(前記一般式 (3A) において、

R_B は、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のハロアルキル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基

、

- Si (R₉₀₁) (R₉₀₂) (R₉₀₃) で表される基、

—O— (R_{904}) で表される基、

—S— (R_{905}) で表される基、

—N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

—C (=O) R_{908} で表される基、

—COOR₉₀₉ で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

—P (=O) (R_{931}) (R_{932}) で表される基、

—Ge (R_{933}) (R_{934}) (R_{935}) で表される基、

—B (R_{936}) (R_{937}) で表される基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

R_B が複数存在するとき、複数の R_B は、互いに同一であるか又は異なり、

L_{31} は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、当該アリーレン基から誘導される 3 価の基、4 価の基、5 価の基もしくは 6 価の基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基、当該複素環基から誘導される、3 価の基、4 価の基、5 価の基もしくは 6 価の基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基からなる群から選択される 2 つの基が結合して形成される 2 価の基、当該 2 価の基から誘導される 3 価の基、4 価の基、5 価の基もしくは 6 価

の基であり、

L_{32} は、

単結合、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の2価の複素環基であり、

n_3 は、1、2、3、4又は5であり、

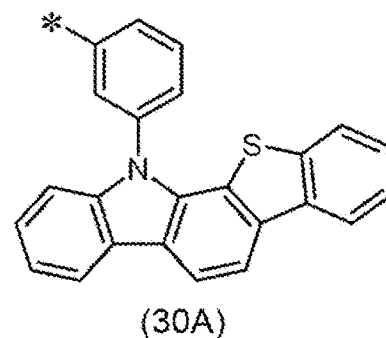
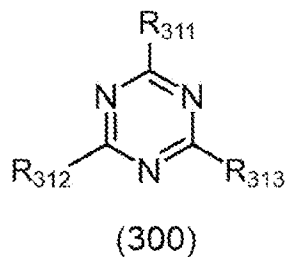
L_{31} が単結合の場合、 n_3 は1であり、 L_{32} が前記一般式(3)中における六員環の炭素原子と結合し、

L_{32} が複数存在するとき、複数の L_{32} は、互いに同一であるか又は異なり、

*は、前記一般式(3)中における六員環の炭素原子との結合部位である。)

(但し、前記化合物M3が、下記一般式(300)で表される化合物Mx3である場合は無い。)

[化7]



(前記一般式(300)において、

R_{311} がフェニル構造であり、

R_{312} がビフェニル構造であり、

R_{313} が前記一般式(30A)で表される構造である。)

(前記化合物M2及び前記化合物M3において、 R_{901} 、 R_{902} 、 R_{903} 、 R_{904} 、 R_{905} 、 R_{906} 、 R_{907} 、 R_{908} 、 R_{909} 、 R_{931} 、 R_{932} 、 R_{933} 、 R_{934} 、 R_{935} 、 R_{936} 及び R_{937} は、それぞれ独立に、
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基

、
置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、
 R_{901} が複数存在する場合、複数の R_{901} は、互いに同一であるか
又は異なり、

R_{902} が複数存在する場合、複数の R_{902} は、互いに同一であるか
又は異なり、

R_{903} が複数存在する場合、複数の R_{903} は、互いに同一であるか
又は異なり、

R_{904} が複数存在する場合、複数の R_{904} は、互いに同一であるか
又は異なり、

R_{905} が複数存在する場合、複数の R_{905} は、互いに同一であるか
又は異なり、

R_{906} が複数存在する場合、複数の R_{906} は、互いに同一であるか
又は異なり、

R_{907} が複数存在する場合、複数の R_{907} は、互いに同一であるか
又は異なり、

R_{908} が複数存在する場合、複数の R_{908} は、互いに同一であるか
又は異なり、

R_{909} が複数存在する場合、複数の R_{909} は、互いに同一であるか
又は異なり、

R_{931} が複数存在する場合、複数の R_{931} は、互いに同一であるか

又は異なり、

R_{932} が複数存在する場合、複数の R_{932} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{933} が複数存在する場合、複数の R_{933} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{934} が複数存在する場合、複数の R_{934} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{935} が複数存在する場合、複数の R_{935} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{936} が複数存在する場合、複数の R_{936} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{937} が複数存在する場合、複数の R_{937} は、互いに同一であるか又は異なる。))

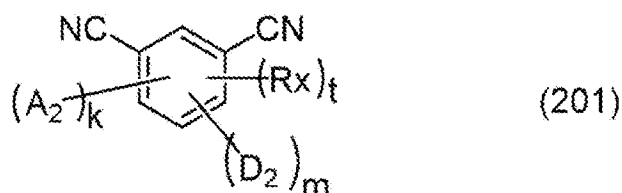
[請求項2] 前記一般式(2)におけるnは、2である、

請求項1に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項3] 前記化合物M2は、下記一般式(201)で表される化合物である、

請求項1又は請求項2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化8]



(前記一般式(201)において、

A_2 、 D_2 及び R_x は、それぞれ、前記一般式(2)における A_2 、 D_2 及び R_x と同義であり、

—CN及びNC—は、シアノ基を示し、

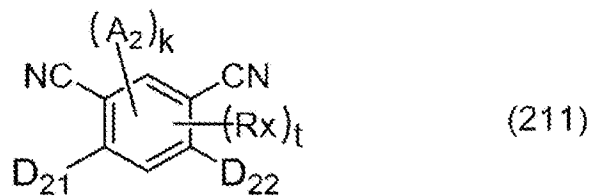
kは、1、2又は3であり、

m は、1、2 又は 3 であり、
 t は、0、1 又は 2 であり、
 但し、 $k + m + t = 4$ である。）

[請求項4] 前記化合物 M 2 における m は、2 である、
 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。

[請求項5] 前記化合物 M 2 は、下記一般式 (211) で表される化合物である、
 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。

[化9]



(前記一般式 (211) において、

D_{21} 及び D_{22} は、それぞれ独立に、前記一般式 (2) における D_2 と同義であり、

A_2 及び R_x は、それぞれ、前記一般式 (2) における A_2 及び R_x と同義であり、

—CN 及び NC— は、シアノ基を示し、

k は、1 又は 2 であり、

t は、0 又は 1 であり、

但し、 $k + t = 2$ である。）

[請求項6] 前記化合物 M 2 における k は、1 又は 2 である、
 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。

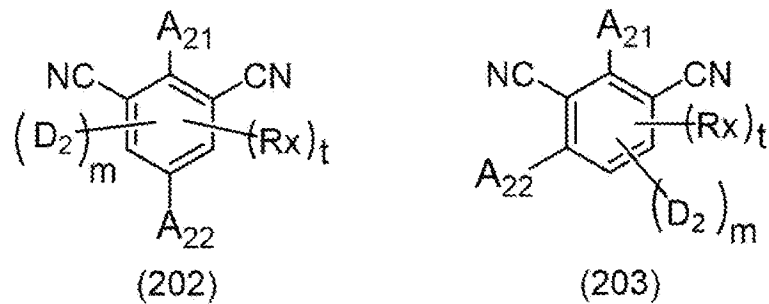
[請求項7] 前記化合物 M 2 における k は、2 である、
 請求項 1 から請求項 5 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミ

ネッセンス素子。

[請求項8] 前記化合物M2は、下記一般式(202)又は一般式(203)で表される化合物である、

請求項6又は請求項7に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化10]



(前記一般式(202)又は一般式(203)において、

A₂₁及びA₂₂は、それぞれ独立に、前記一般式(2)におけるA₂と同義であり、

D₂及びR_xは、それぞれ、前記一般式(2)におけるD₂及びR_xと同義であり、

—CN及びNC—は、シアノ基を示し、

mは、1又は2であり、

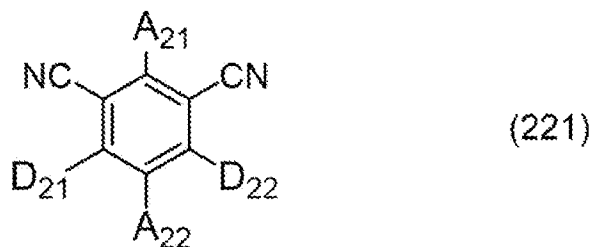
tは、0又は1であり、

但し、m + t = 2である。)

[請求項9] 前記化合物M2は、下記一般式(221)で表される化合物である、

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。

[化11]



(前記一般式 (221) において、

A_{21} 及び A_{22} は、それぞれ独立に、前記一般式 (2) における A_2 と同義であり、

D_{21} 及び D_{22} は、それぞれ独立に、前記一般式 (2) における D_2 と同義であり、

—CN 及び —NC— は、シアノ基を示す。)

[請求項10]

R_x 、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{201} \sim R_{205}$ 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基である、

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。

[請求項11]

R_x 、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{201} \sim R_{205}$ 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基である

、

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。

[請求項12]

R_x 、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{201} \sim R_{205}$ 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ は、水素原子である、

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。

[請求項13]

少なくとも1つの環Gは、前記一般式(25)で表される環構造である、

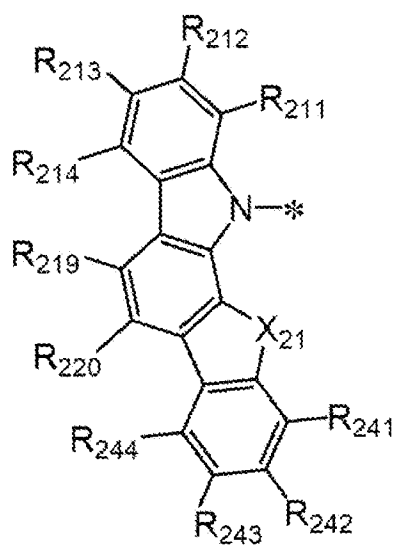
請求項1から請求項12のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項14]

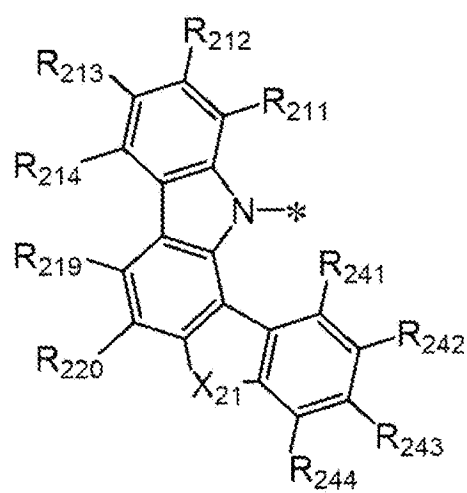
前記一般式(22)で表される基は、下記一般式(a1)～(a6)からなる群から選択されるいずれかの基である、

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

[化12]

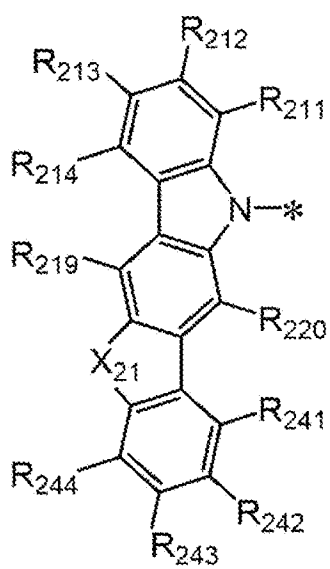


(a1)

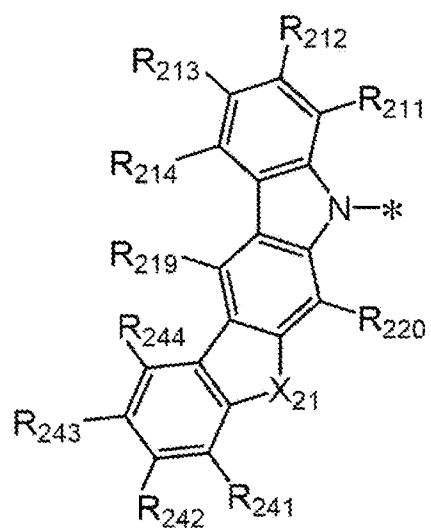


(a2)

[化13]

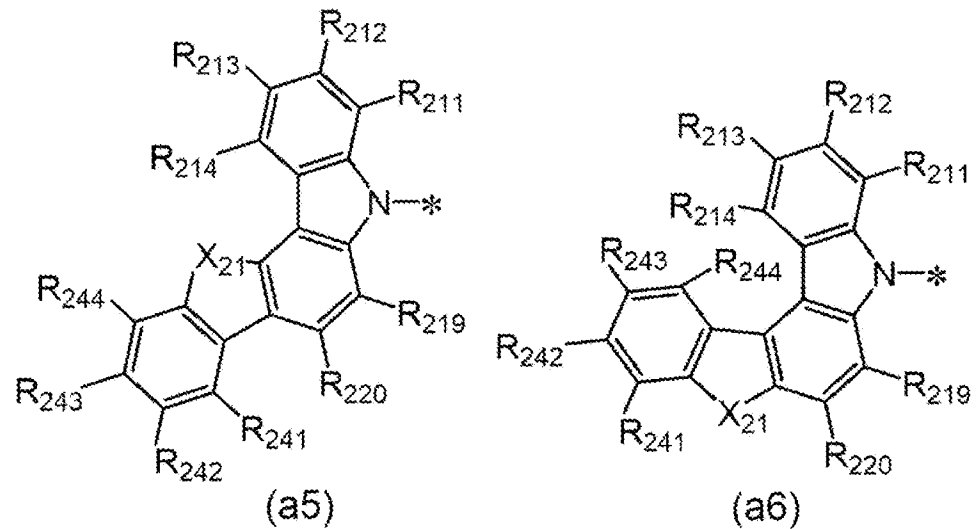


(a3)



(a4)

[化14]



(前記一般式 (a 1) ~ (a 6) において、

$R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ は、それぞれ、前記一般式 (2 2) における $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ と同義であり、

X_{21} は、前記一般式 (2 5) における X_{21} と同義であり、

R_{219} 及び R_{220} は、それぞれ、前記一般式 (2 4) における R_{219} 及び R_{220} と同義であり、

前記一般式 (a 1) ~ (a 6) 中の $*$ は、前記一般式 (2) 中のベンゼン環との結合位置を示す。)

[請求項15]

前記化合物 M 2 における X_{21} は、硫黄原子である、

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。

[請求項16]

前記一般式 (2 2) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim R_{214}$ 及び $R_{241} \sim R_{244}$ 、並びに

前記一般式 (2 4) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{219} 及び R_{220} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基である、
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。

[請求項17] 前記一般式 (22) における前記置換もしくは無置換の単環を形成
せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim$
 R_{214} 及び $R_{241} \sim R_{244}$ 、並びに
前記一般式 (24) における前記置換もしくは無置換の単環を形成
せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{219} 及
び R_{220} は、それぞれ独立に、

水素原子、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である
、
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。

[請求項18] 前記一般式 (22) における前記置換もしくは無置換の単環を形成
せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{211} \sim$
 R_{214} 及び $R_{241} \sim R_{244}$ 、並びに
前記一般式 (24) における前記置換もしくは無置換の単環を形成
せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{219} 及
び R_{220} は、水素原子である、

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。

[請求項19] 前記化合物 M2 における A_2 は、下記一般式 (A21) ～ (A25)
) で表される基からなる群から選択されるいずれかの基である、
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。

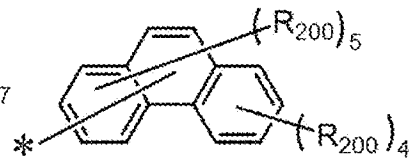
[化15]



(A21)

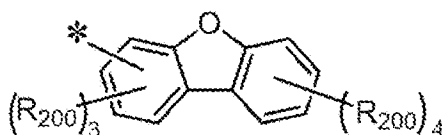


(A22)

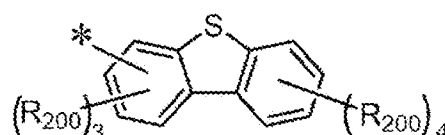


(A23)

[化16]



(A24)



(A25)

(前記一般式 (A 2 1) ~ (A 2 5) において、

複数の R_{200} のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又

は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは

は無置換の縮合環を形成しない R_{200} は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 50 のハロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 50 のシクロアルキル基

、

— Si (R_{901}) (R_{902}) (R_{903}) で表される基、

— O — (R_{904}) で表される基、

— S — (R_{905}) で表される基、

— N (R_{906}) (R_{907}) で表される基、

置換もしくは無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O)R₉₀₈で表される基、

—COOR₉₀₉で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

前記一般式(A21)～(A25)中の*は、それぞれ、前記一般式(2)中のベンゼン環との結合位置を示す。)

[請求項20] 前記化合物M2におけるA₂は、前記一般式(A21)、(A24)及び(A25)で表される基からなる群から選択されるいずれかの基である、

請求項19に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項21] 前記化合物M2におけるA₂は、前記一般式(A21)で表される基である、

請求項19又は請求項20に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項22] 前記化合物M2におけるA₂は、前記一般式(A21)で表される基であり、

前記一般式(A21)中の前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR₂₀₀が水素原子である、

請求項19又は請求項20に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項23] 前記一般式(A21)～(A25)における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR₂₀₀は、それぞれ独立に、

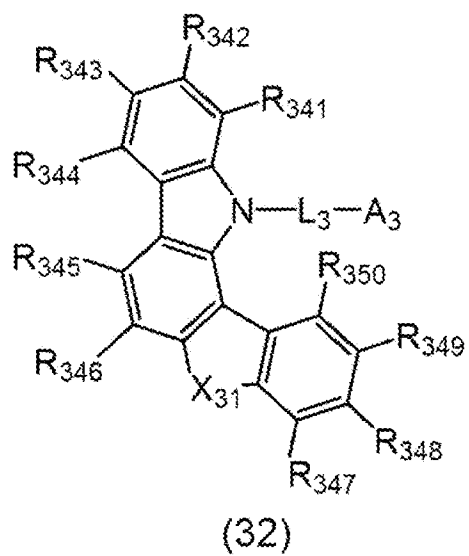
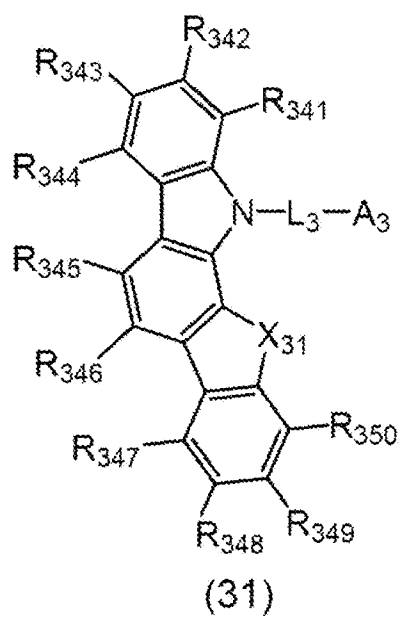
水素原子、
置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は
置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基である、
請求項 19 から請求項 21 のいずれか一項に記載の有機エレクトロ
ルミネッセンス素子。

[請求項24] 前記一般式 (A 21) ～ (A 25) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{200} は、それぞれ独立に、
水素原子、又は
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である、
、
請求項 19 から請求項 23 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。

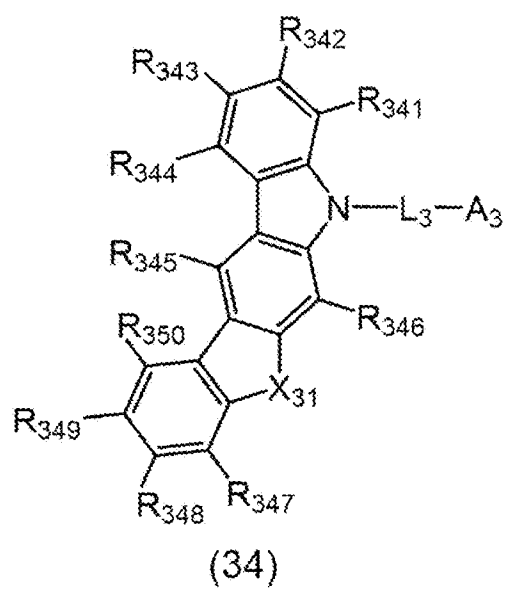
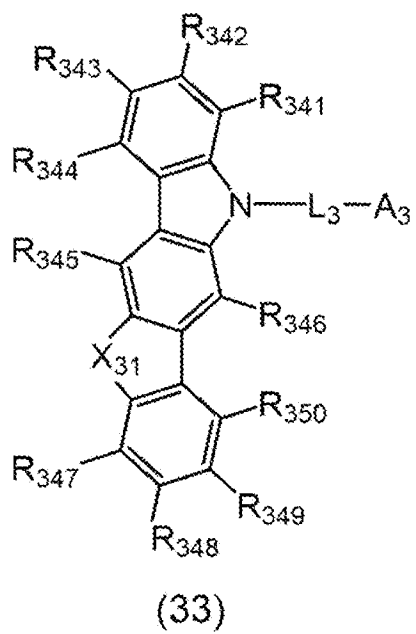
[請求項25] 前記一般式 (A 21) ～ (A 25) における前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{200} は、水素原子である、
請求項 19 から請求項 24 のいずれか一項に記載の有機エレクトロ
ルミネッセンス素子。

[請求項26] 前記化合物 M3 は、下記一般式 (31) ～ (36) のいずれかで表される化合物である、
請求項 1 から請求項 25 のいずれか一項に記載の有機エレクトロル
ミネッセンス素子。

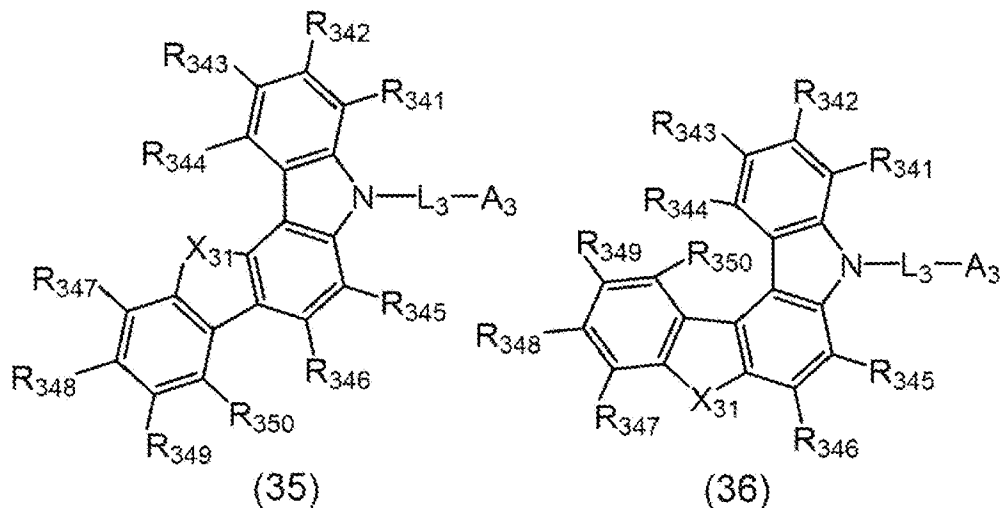
[化17]



[化18]



[化19]



(前記一般式 (31) ~ (36) において、

A_3 及び L_3 は、それぞれ、前記一般式 (3) における A_3 及び L_3 と同義であり、

$R_{341} \sim R_{350}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が

、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

X_{31} は、硫黄原子、酸素原子、 NR_{352} 又は $CR_{353}R_{354}$ であり

、

R_{353} 及び R_{354} からなる組が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{341} \sim R_{350}$ と、 R_{352} と、前記置

換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{353} 及び R_{354} とは、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。)

[請求項27] 前記化合物M3において、 X_{31} は、硫黄原子又は酸素原子である

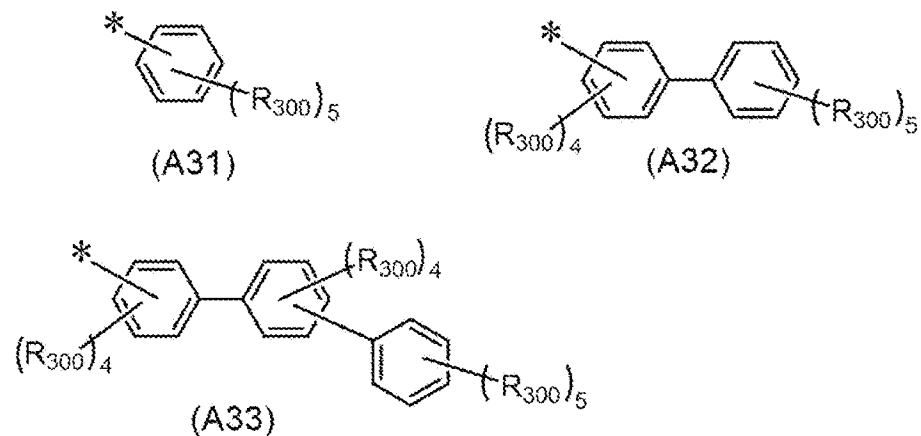
、

請求項26に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

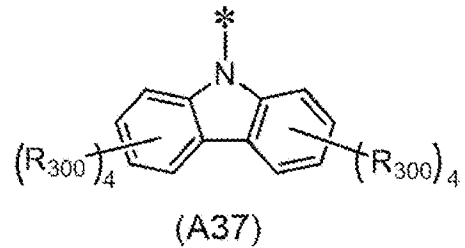
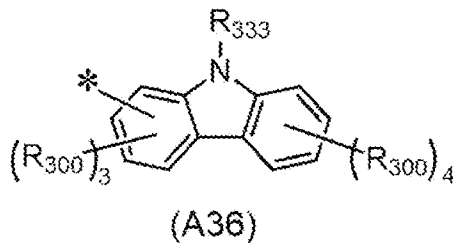
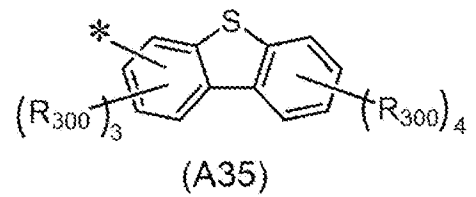
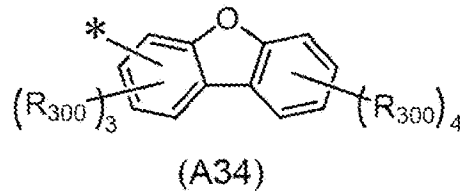
[請求項28] 前記化合物M3において、 A_3 は、下記一般式(A31)～(A37)のいずれかで表される基である、

請求項1から請求項27のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化20]



[化21]



(前記一般式 (A 3 1) ~ (A 3 7) において、

複数の R_{300} のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{300} 、並びに R_{333} は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義であり、

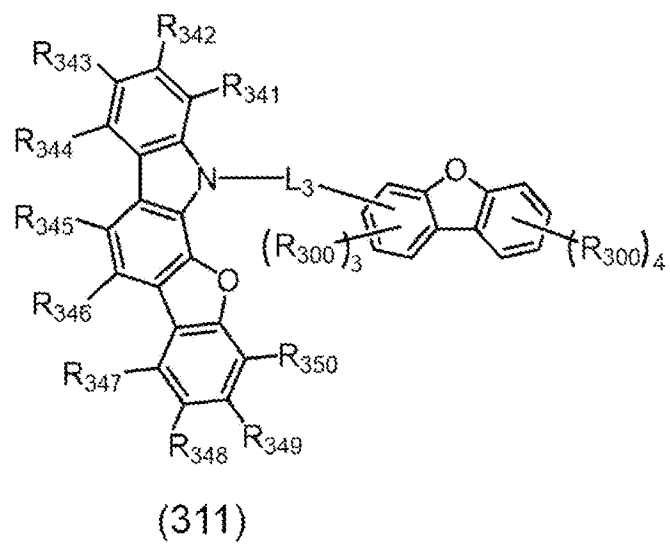
前記一般式 (A 3 1) ~ (A 3 7) 中の * は、それぞれ、前記化合物 M 3 の L_3 との結合位置を示す。))

[請求項29]

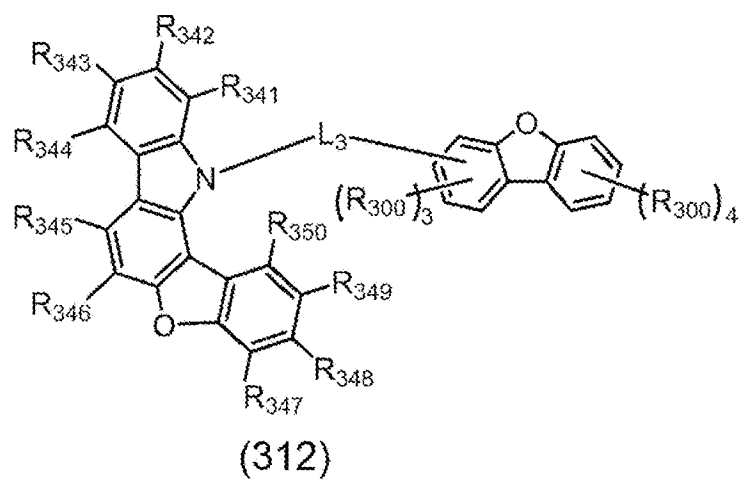
前記化合物 M 3 は、下記一般式 (3 1 1) ~ (3 1 6) のいずれかで表される化合物である、

請求項 1 から請求項 2 5 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

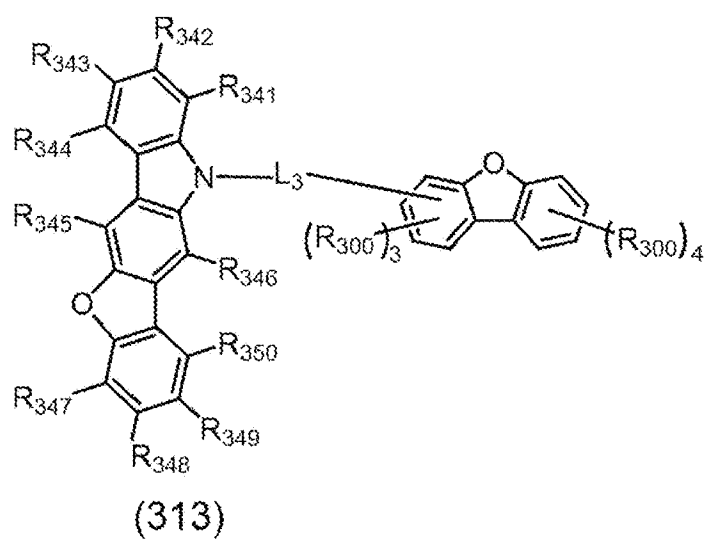
[化22]



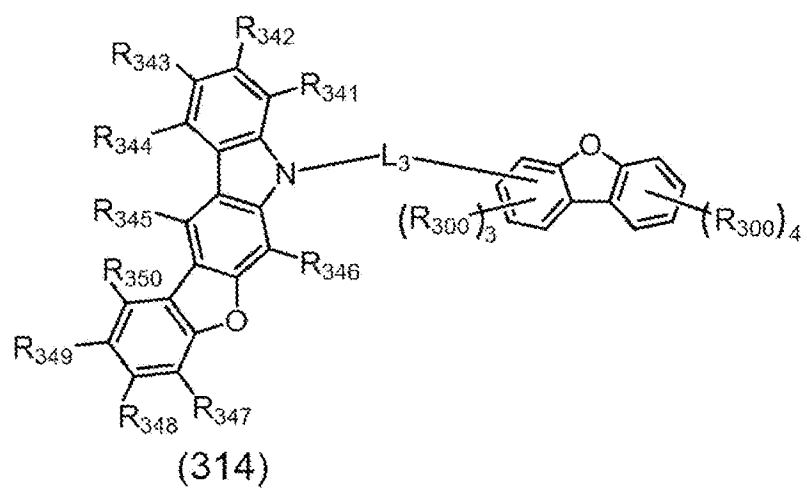
[化23]



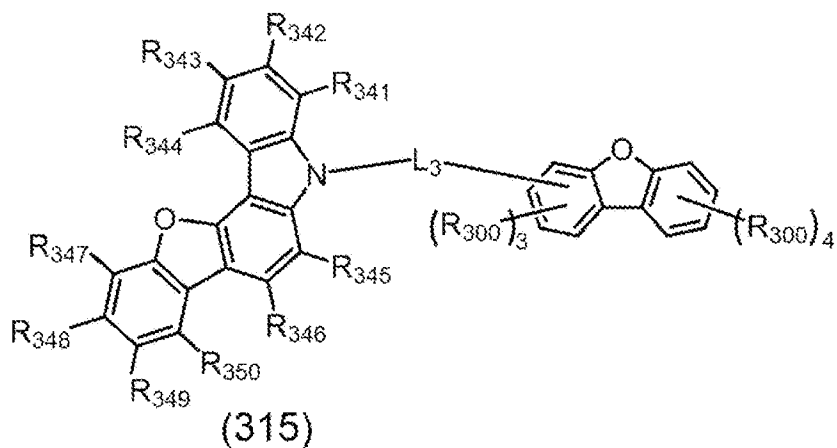
[化24]



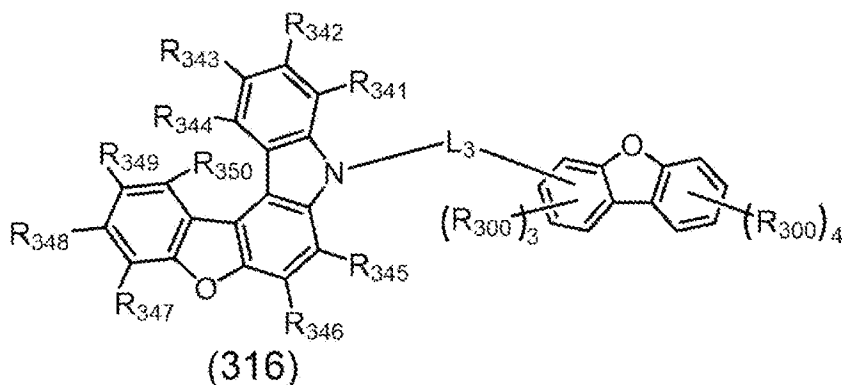
[化25]



[化26]



[化27]



(前記一般式 (311) ~ (316) において、

L_3 は、前記一般式 (3) における L_3 と同義であり、

複数の R_{300} のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

$R_{341} \sim R_{350}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が

、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又

は

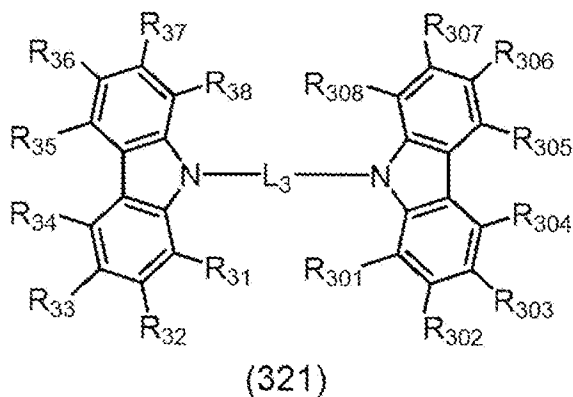
互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない R_{300} 、並びに、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{341} \sim R_{350}$ は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。)

[請求項30] 前記化合物M3は、下記一般式(321)で表される化合物である、

請求項1から請求項25のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[化28]



(前記一般式(321)において、

L_3 は、前記一般式(3)における L_3 と同義であり、

$R_{31} \sim R_{38}$ 、並びに $R_{301} \sim R_{308}$ は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。)

[請求項31] 前記化合物M3において、 L_3 は、単結合又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリーレン基である、

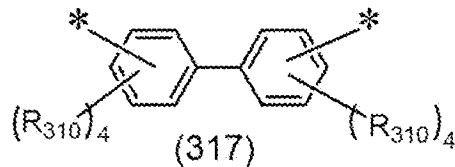
請求項1から請求項30のいずれか一項に記載の有機エレクトロル

ミネッセンス素子。

[請求項32] 前記化合物M3において、 L_3 は、
 単結合、
 置換もしくは無置換のフェニレン基、
 置換もしくは無置換のビフェニレン基、又は
 置換もしくは無置換のターフェニレン基である、
 請求項1から請求項31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。

[請求項33] 前記化合物M3において、 L_3 は、下記一般式(317)で表され
 る基である、
 請求項1から請求項32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。

[化29]

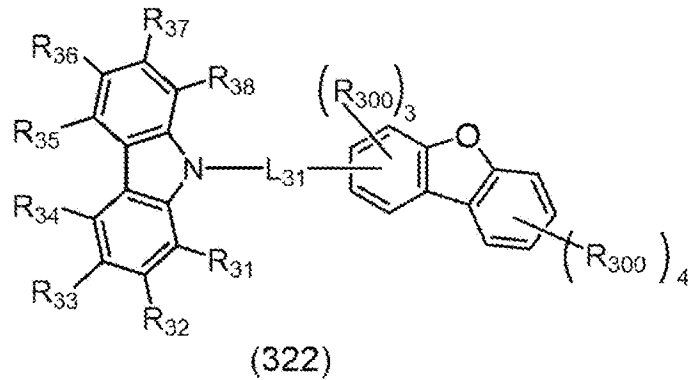


(前記一般式(317)において、

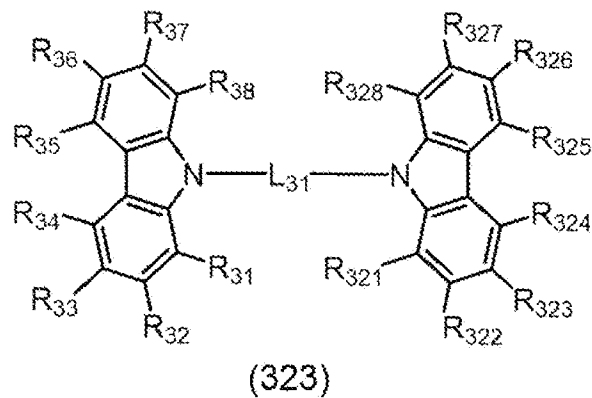
R_{310} は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成
 せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim$
 R_{38} と同義であり、*は、それぞれ独立に、結合位置を示す。)

[請求項34] 前記化合物M3は、下記一般式(322)又は一般式(323)で
 表される化合物である、
 請求項1から請求項25のいずれか一項に記載の有機エレクトロル
 ミネッセンス素子。

[化30]



[化31]



(前記一般式 (322) 及び一般式 (323) において、

L_{31} は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基、

又は

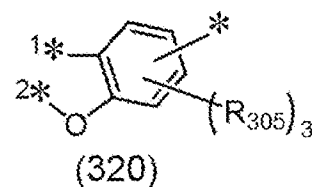
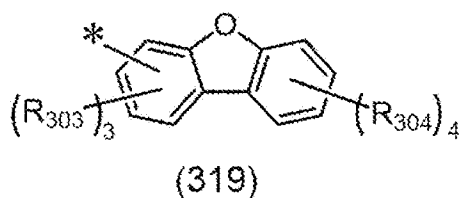
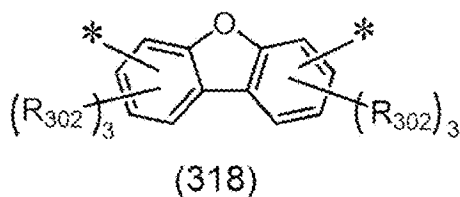
置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリーレン基、及び置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の 2 価の複素環基からなる群から選択される 2 つの基が結合して形成される 2 価の基であり、

但し、 L_{31} は、下記一般式 (318) 又は一般式 (319) で表される 2 価の基を含み、

$R_{31} \sim R_{38}$ 、 R_{300} 、並びに $R_{321} \sim R_{328}$ は、それぞれ独立に、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。)

[化32]



(前記一般式 (319) において、

複数の R_{304} のうちの隣接する2つからなる組が、互いに結合して、前記一般式 (320) で表される環を形成し、

前記一般式 (320) において、1*及び2*は、それぞれ独立に、 R_{304} が結合している環との結合位置を示し、

前記一般式 (318) における R_{302} 、前記一般式 (318) における R_{303} 、前記一般式 (319) における R_{303} 、前記一般式 (320) で表される環を形成しない R_{304} 、並びに前記一般式 (320) における R_{305} は、それぞれ独立に、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ と同義であり、

前記一般式 (318) ~ (320) における*は、それぞれ、結合位置を示す。)

[請求項35]

前記化合物M3は、前記一般式 (322) で表される化合物であり、

L_{31} は、前記一般式 (318) で表される基である、

請求項34に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項36] 前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基、又は

前記一般式 (3 A) で表される基であり、

前記一般式 (3 A) における R_B は、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基である、

請求項 1 から請求項 35 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。

[請求項37] 前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

前記一般式 (3 A) で表される基であり、

前記一般式 (3 A) における R_B は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基である、

請求項 1 から請求項 36 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。

[請求項38] 前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しない $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換のフェニル基、又は

前記一般式 (3 A) で表される基であり、

前記一般式 (3 A) における R_B は、置換もしくは無置換のフェニ

ル基である、

請求項 1 から請求項 37 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。

[請求項39] 前記化合物M3は、ピリジン環、ピリミジン環、及びトリアジン環を有さない化合物である、

請求項 1 から請求項 38 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。

[請求項40] 前記発光層は、さらに、蛍光発光性の化合物M1を含み、

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

請求項 1 から請求項 39 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。

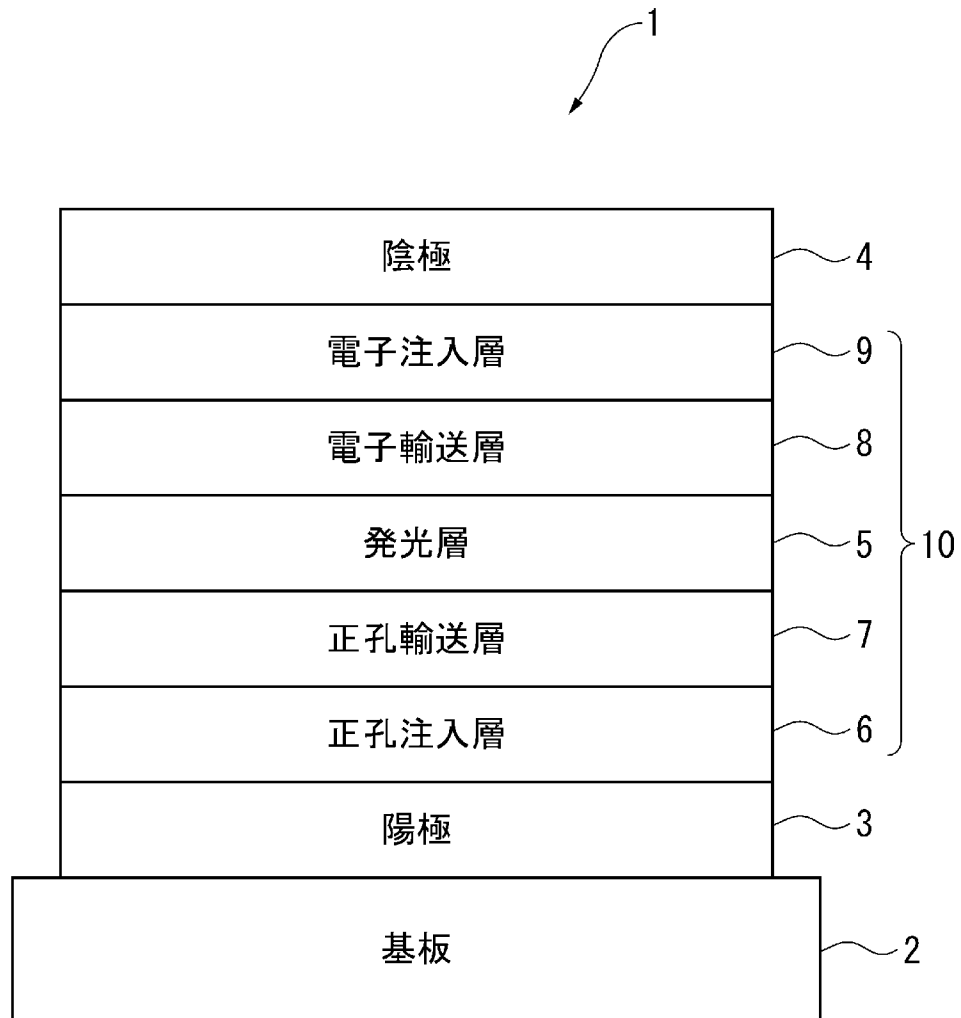
$$S_1(M2) > S_1(M1) \quad \dots (\text{数 } 2)$$

[請求項41] 前記発光層は、燐光発光性の金属錯体を含まない、

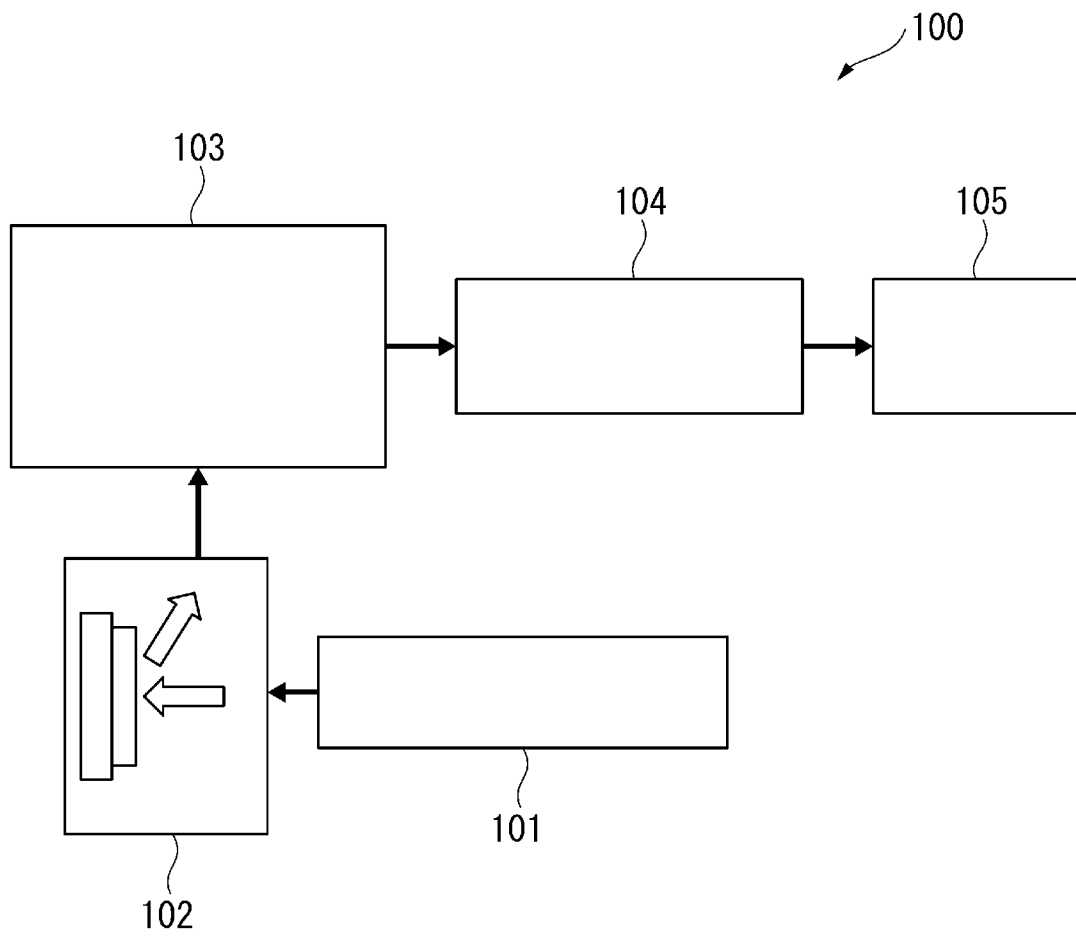
請求項 1 から請求項 40 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

[請求項42] 請求項 1 から請求項 41 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。

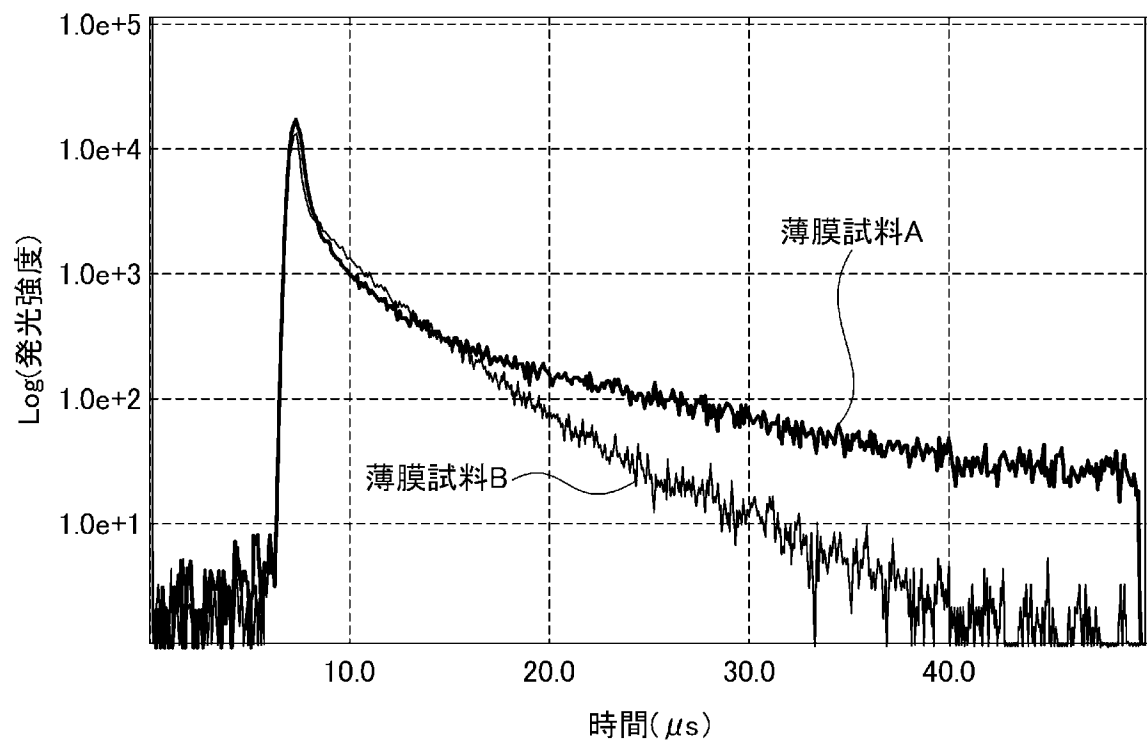
[図1]



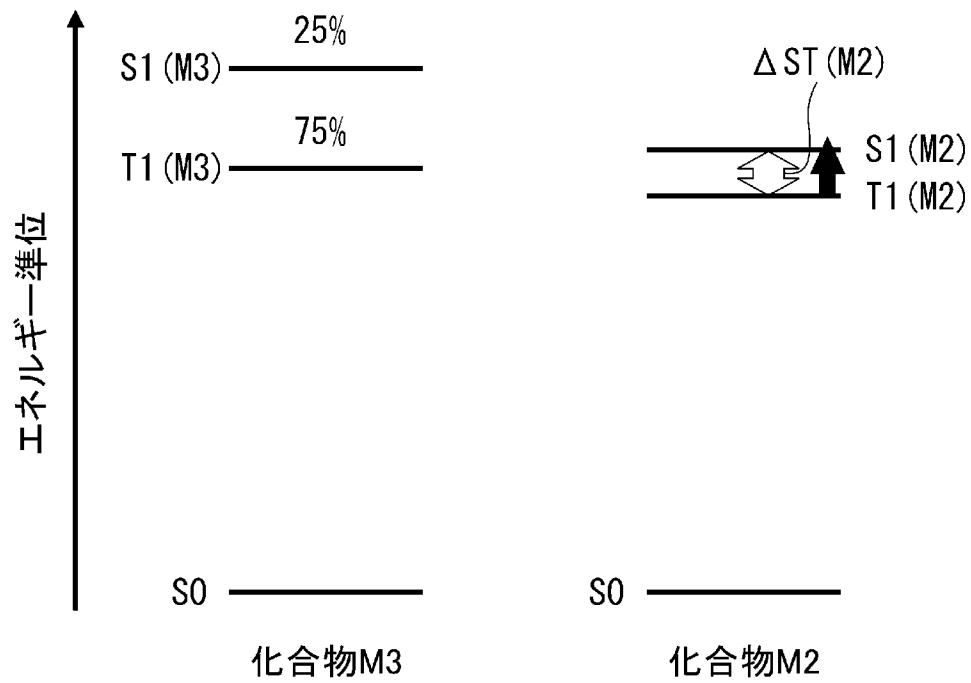
[図2]



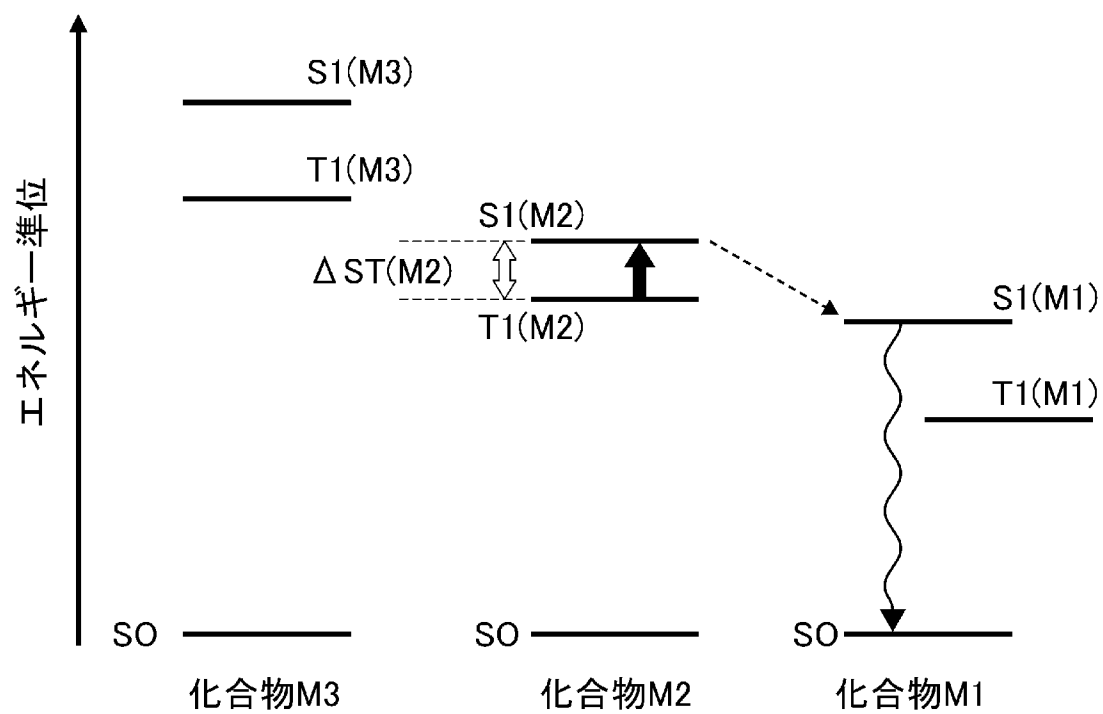
[図3]



[図4]



[図5]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/011316

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

H01L 51/50(2006.01)i; **C07D 209/82**(2006.01)i; **C07D 405/02**(2006.01)i; **C07D 405/14**(2006.01)i; **C07D 491/048**(2006.01)i; **C07D 493/04**(2006.01)i; **C07D 519/00**(2006.01)i; **C09K 11/06**(2006.01)i

FI: H05B33/14 B; C09K11/06 660; C09K11/06 690; C07D519/00; C07D491/048; C07D209/82; C07D405/02; C07D405/14; C07D493/04 101A

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

H01L51/50; C07D209/82; C07D405/02; C07D405/14; C07D491/048; C07D493/04; C07D519/00; C09K11/06

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2022
Registered utility model specifications of Japan 1996-2022
Published registered utility model applications of Japan 1994-2022

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CAPLUS/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	WO 2020/085765 A1 (LG CHEM, LTD.) 30 April 2020 (2020-04-30) claims, paragraphs [0147]-[0177], [0203]-[0212], [0425]-[0429]	1-3, 6, 10-42
A		4-5, 7-9
Y	WO 2020/022378 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 30 January 2020 (2020-01-30) claims 28-29, paragraphs [0237]-[0459], [0826]-[0893]	1-3, 6, 10-42
Y	WO 2017/099160 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 15 June 2017 (2017-06-15) claim 16, paragraphs [0167], [0231]-[0232], [0272]	1-3, 6, 10-42
A	JP 2020-525438 A (KYULUX INC) 27 August 2020 (2020-08-27) entire text	1-42
A	US 2017/0186974 A1 (SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD.) 29 June 2017 (2017-06-29) entire text	1-42
P, X	WO 2021/235549 A1 (KYULUX INC) 25 November 2021 (2021-11-25) claims, paragraphs [0053]-[0076], [0084]-[0119]	1-6, 8, 10-14, 16-25, 30-39, 41-42



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date

“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

24 May 2022

Date of mailing of the international search report

31 May 2022

Name and mailing address of the ISA/JP

**Japan Patent Office (ISA/JP)
3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915
Japan**

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/011316

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
P, X	WO 2021/066059 A1 (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 08 April 2021 (2021-04-08) claims, paragraphs [0113]-[0258], [0346]-[0443]	1-28, 30-34, 36-42

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2022/011316

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
WO	2020/085765	A1	30 April 2020	CN	112218861	A	
				KR	10-2020-0045433	A	
WO	2020/022378	A1	30 January 2020	US	2021/0143341	A1	
				claims 28-29, paragraphs [0195]-[0410], [0709]-[0825]			
				EP	3696167	A1	
				CN	111372918	A	
				KR	10-2021-0038406	A	
WO	2017/099160	A1	15 June 2017	US	2018/0375058	A1	
				claim 16, paragraphs [0253]-[0254], [0370]-[0371], [0419]			
				EP	3389107	A1	
				CN	108369992	A	
				KR	10-2018-0090273	A	
JP	2020-525438	A	27 August 2020	WO	2018/237385	A1	
				entire text			
				US	2020/0115364	A1	
				US	2020/0115376	A1	
				US	2020/0119287	A1	
				EP	3642303	A1	
				KR	10-2020-0019694	A	
				CN	110914378	A	
				KR	10-2020-0023371	A	
				CN	110997866	A	
US	2017/0186974	A1	29 June 2017	KR	10-2017-0076474	A	
WO	2021/235549	A1	25 November 2021	WO	2021/157593	A1	
				WO	2021/157642	A1	
WO	2021/066059	A1	08 April 2021	(Family: none)			

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） H01L 51/50(2006.01)i; C07D 209/82(2006.01)i; C07D 405/02(2006.01)i; C07D 405/14(2006.01)i; C07D 491/048(2006.01)i; C07D 493/04(2006.01)i; C07D 519/00(2006.01)i; C09K 11/06(2006.01)i FI: H05B33/14 B; C09K11/06 660; C09K11/06 690; C07D519/00; C07D491/048; C07D209/82; C07D405/02; C07D405/14; C07D493/04 101A																										
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） H01L51/50; C07D209/82; C07D405/02; C07D405/14; C07D491/048; C07D493/04; C07D519/00; C09K11/06 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2022年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2022年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2022年</td> </tr> </table> 国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語） CAplus/REGISTRY (STN)			日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2022年	日本国実用新案登録公報	1996-2022年	日本国登録実用新案公報	1994-2022年																
日本国実用新案公報	1922-1996年																									
日本国公開実用新案公報	1971-2022年																									
日本国実用新案登録公報	1996-2022年																									
日本国登録実用新案公報	1994-2022年																									
C. 関連すると認められる文献 <table border="1"> <thead> <tr> <th>引用文献の カテゴリー*</th> <th>引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示</th> <th>関連する 請求項の番号</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Y</td> <td>WO 2020/085765 A1 (LG CHEM, LTD.) 30.04.2020 (2020 - 04 - 30) [請求の範囲], 段落[0147]-[0177], [0203]-[0212], [0425]-[0429]</td> <td>1-3, 6, 10-42</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td></td> <td>4-5, 7-9</td> </tr> <tr> <td>Y</td> <td>WO 2020/022378 A1 (出光興産株式会社) 30.01.2020 (2020 - 01 - 30) 請求項28-29, 段落[0237]-[0459], [0826]-[0893]</td> <td>1-3, 6, 10-42</td> </tr> <tr> <td>Y</td> <td>WO 2017/099160 A1 (出光興産株式会社) 15.06.2017 (2017 - 06 - 15) 請求項16, 段落[0167], [0231]-[0232], [0272]</td> <td>1-3, 6, 10-42</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>JP 2020-525438 A (株式会社K y u l u x) 27.08.2020 (2020 - 08 - 27) 全文</td> <td>1-42</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>US 2017/0186974 A1 (SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD.) 29.06.2017 (2017 - 06 - 29) 全文</td> <td>1-42</td> </tr> <tr> <td>P, X</td> <td>WO 2021/235549 A1 (株式会社K y u l u x) 25.11.2021 (2021 - 11 - 25) 請求の範囲, 段落[0053]-[0076], [0084]-[0119]</td> <td>1-6, 8, 10-14, 16- 25, 30-39, 41-42</td> </tr> </tbody> </table>			引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号	Y	WO 2020/085765 A1 (LG CHEM, LTD.) 30.04.2020 (2020 - 04 - 30) [請求の範囲], 段落[0147]-[0177], [0203]-[0212], [0425]-[0429]	1-3, 6, 10-42	A		4-5, 7-9	Y	WO 2020/022378 A1 (出光興産株式会社) 30.01.2020 (2020 - 01 - 30) 請求項28-29, 段落[0237]-[0459], [0826]-[0893]	1-3, 6, 10-42	Y	WO 2017/099160 A1 (出光興産株式会社) 15.06.2017 (2017 - 06 - 15) 請求項16, 段落[0167], [0231]-[0232], [0272]	1-3, 6, 10-42	A	JP 2020-525438 A (株式会社K y u l u x) 27.08.2020 (2020 - 08 - 27) 全文	1-42	A	US 2017/0186974 A1 (SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD.) 29.06.2017 (2017 - 06 - 29) 全文	1-42	P, X	WO 2021/235549 A1 (株式会社K y u l u x) 25.11.2021 (2021 - 11 - 25) 請求の範囲, 段落[0053]-[0076], [0084]-[0119]	1-6, 8, 10-14, 16- 25, 30-39, 41-42
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号																								
Y	WO 2020/085765 A1 (LG CHEM, LTD.) 30.04.2020 (2020 - 04 - 30) [請求の範囲], 段落[0147]-[0177], [0203]-[0212], [0425]-[0429]	1-3, 6, 10-42																								
A		4-5, 7-9																								
Y	WO 2020/022378 A1 (出光興産株式会社) 30.01.2020 (2020 - 01 - 30) 請求項28-29, 段落[0237]-[0459], [0826]-[0893]	1-3, 6, 10-42																								
Y	WO 2017/099160 A1 (出光興産株式会社) 15.06.2017 (2017 - 06 - 15) 請求項16, 段落[0167], [0231]-[0232], [0272]	1-3, 6, 10-42																								
A	JP 2020-525438 A (株式会社K y u l u x) 27.08.2020 (2020 - 08 - 27) 全文	1-42																								
A	US 2017/0186974 A1 (SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD.) 29.06.2017 (2017 - 06 - 29) 全文	1-42																								
P, X	WO 2021/235549 A1 (株式会社K y u l u x) 25.11.2021 (2021 - 11 - 25) 請求の範囲, 段落[0053]-[0076], [0084]-[0119]	1-6, 8, 10-14, 16- 25, 30-39, 41-42																								
☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☒ パテントファミリーに関する別紙を参照。																										
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献																										
国際調査を完了した日 24.05.2022		国際調査報告の発送日 31.05.2022																								
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号		権限のある職員（特許庁審査官） 横川 美穂 20 4749 電話番号 03-3581-1101 内線 3271																								

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
P, X	WO 2021/066059 A1 (出光興産株式会社) 08.04.2021 (2021 - 04 - 08) 請求の範囲, 段落[0113]-[0258], [0346]-[0443]	1-28, 30-34, 36-42

国際調査報告
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2022/011316

引用文献			公表日	パテントファミリー文献			公表日
WO	2020/085765	A1	30.04.2020	CN	112218861	A	
				KR	10-2020-0045433	A	
WO	2020/022378	A1	30.01.2020	US	2021/0143341	A1	
				Claims 28-29, [0195]-[0410], [0709]-[0825]			
				EP	3696167	A1	
				CN	111372918	A	
				KR	10-2021-0038406	A	
WO	2017/099160	A1	15.06.2017	US	2018/0375058	A1	
				Claim16, [0253]-[0254], [0370]-[0371], [0419]			
				EP	3389107	A1	
				CN	108369992	A	
				KR	10-2018-0090273	A	
JP	2020-525438	A	27.08.2020	WO	2018/237385	A1	
				全文			
				US	2020/0115364	A1	
				US	2020/0115376	A1	
				US	2020/0119287	A1	
				EP	3642303	A1	
				KR	10-2020-0019694	A	
				CN	110914378	A	
				KR	10-2020-0023371	A	
				CN	110997866	A	
US	2017/0186974	A1	29.06.2017	KR	10-2017-0076474	A	
WO	2021/235549	A1	25.11.2021	WO	2021/157593	A1	
				WO	2021/157642	A1	
WO	2021/066059	A1	08.04.2021	(ファミリーなし)			