

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号  
特許第7374187号  
(P7374187)

(45)発行日 令和5年11月6日(2023.11.6)

(24)登録日 令和5年10月26日(2023.10.26)

(51)国際特許分類

F I

H 1 0 K	85/60	(2023.01)	H 1 0 K	85/60	
C 0 9 K	11/06	(2006.01)	C 0 9 K	11/06	6 9 0
H 1 0 K	50/12	(2023.01)	H 1 0 K	50/12	
H 1 0 K	59/10	(2023.01)	H 1 0 K	59/10	
H 1 0 K	85/40	(2023.01)	H 1 0 K	85/40	

請求項の数 35 (全165頁) 最終頁に続く

(21)出願番号 特願2021-520795(P2021-520795)  
 (86)(22)出願日 令和2年5月19日(2020.5.19)  
 (86)国際出願番号 PCT/JP2020/019779  
 (87)国際公開番号 WO2020/235558  
 (87)国際公開日 令和2年11月26日(2020.11.26)  
 審査請求日 令和4年11月21日(2022.11.21)  
 (31)優先権主張番号 特願2019-94653(P2019-94653)  
 (32)優先日 令和1年5月20日(2019.5.20)  
 (33)優先権主張国・地域又は機関  
 日本国(JP)

(73)特許権者 000183646  
 出光興産株式会社  
 東京都千代田区大手町一丁目2番1号  
 (74)代理人 110000637  
 弁理士法人樹之下知的財産事務所  
 (72)発明者 塩見 拓史  
 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地  
 (72)発明者 中野 裕美  
 千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地  
 審査官 内村 駿介

最終頁に続く

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

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

陽極と、

陰極と、

前記陽極と前記陰極との間に含まれる発光層と、を有し、

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

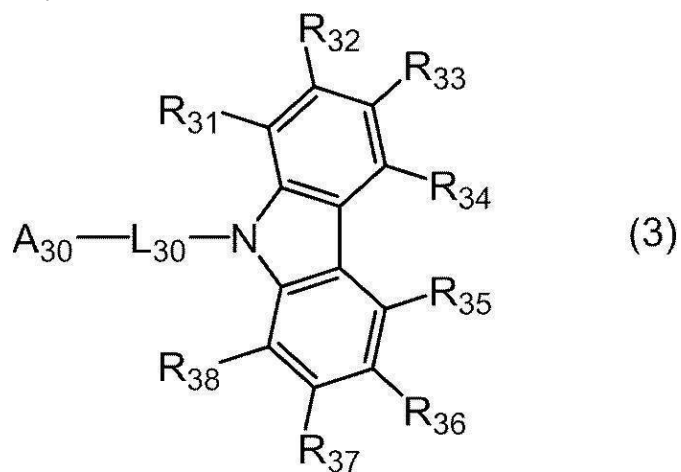
、を含み、

前記化合物M2の一重項エネルギーS1(M2)と、前記化合物M3の一重項エネルギーS1(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。

$$S_1(M3) > S_1(M2) \quad \dots (数1)$$

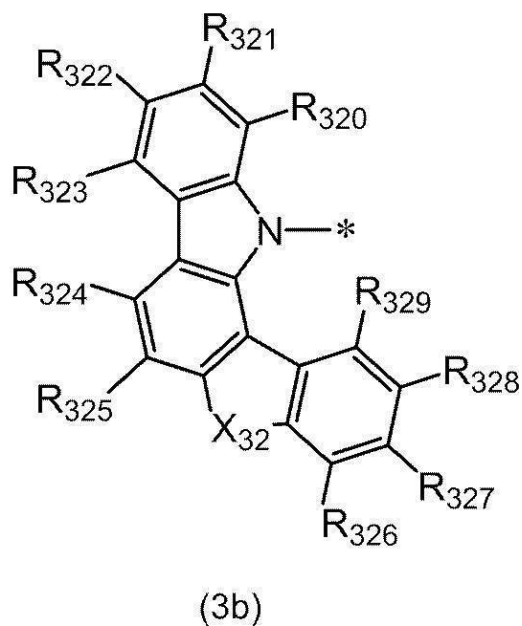
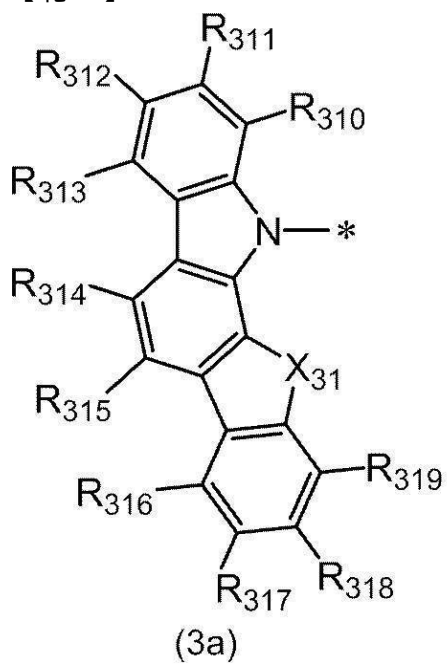
【化 1】



10

(前記一般式(3)において、 $A_{30}$ は、下記一般式(3a)、一般式(3b)、一般式(3c)、一般式(3d)、一般式(3e)又は一般式(3f)で表される基である。)

【化 2】



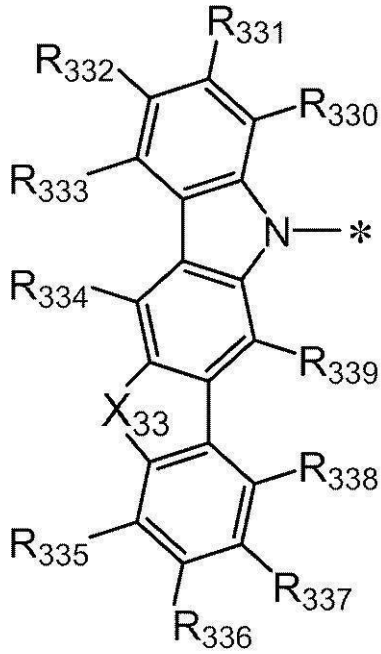
20

30

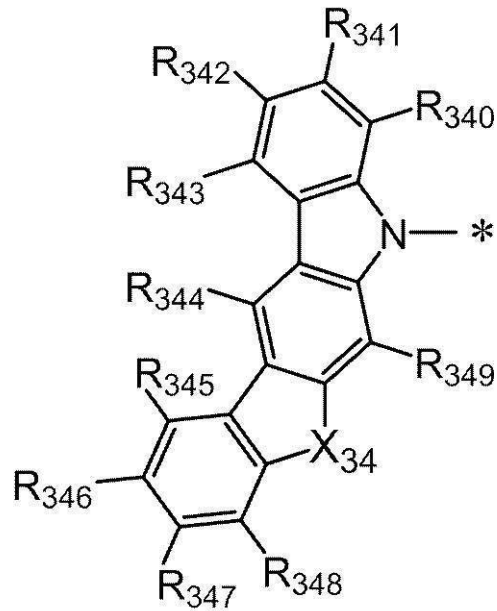
40

50

【化 3】



(3c)

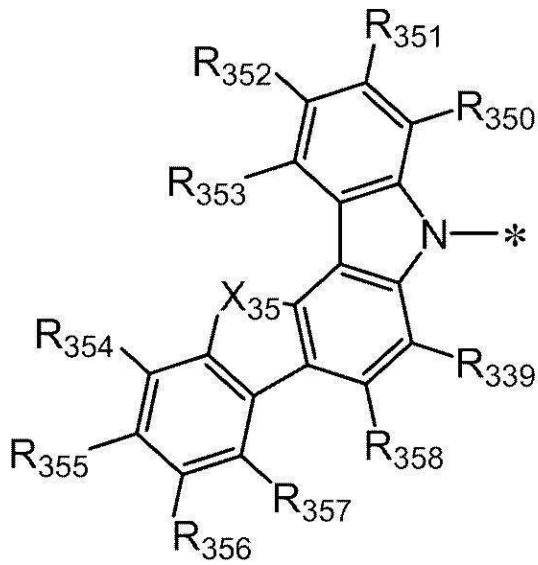


(3d)

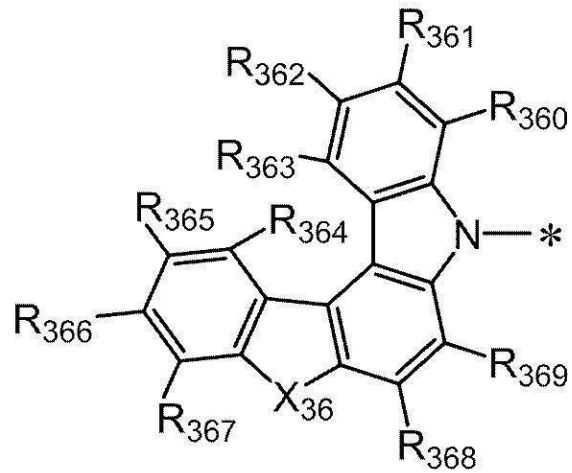
10

20

【化 4】



(3e)



(3f)

30

(前記一般式(3a)、一般式(3b)、一般式(3c)、一般式(3d)、一般式(3e)及び一般式(3f)において、

40

X<sub>31</sub>、X<sub>32</sub>、X<sub>33</sub>、X<sub>34</sub>、X<sub>35</sub>及びX<sub>36</sub>は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、又はSi、R<sub>372</sub>、R<sub>373</sub>であり、

R<sub>371</sub>、R<sub>372</sub>及びR<sub>373</sub>はそれぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、

R<sub>310</sub>~R<sub>319</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>310</sub>及びR<sub>311</sub>の組、R<sub>311</sub>及びR<sub>312</sub>の組、R<sub>312</sub>及びR<sub>313</sub>の組、R<sub>314</sub>及びR<sub>315</sub>の組、R<sub>316</sub>及びR<sub>317</sub>の組、R<sub>317</sub>及びR<sub>318</sub>の組、並びにR<sub>318</sub>及びR<sub>319</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

R<sub>320</sub>~R<sub>329</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>320</sub>及びR<sub>321</sub>の組、R<sub>321</sub>及びR<sub>322</sub>の組、R<sub>322</sub>及びR<sub>323</sub>の組、R<sub>324</sub>及びR<sub>3</sub>

50

25の組、R<sub>326</sub>及びR<sub>327</sub>の組、R<sub>327</sub>及びR<sub>328</sub>の組、並びにR<sub>328</sub>及びR<sub>329</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

R<sub>330</sub>～R<sub>339</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>330</sub>及びR<sub>331</sub>の組、R<sub>331</sub>及びR<sub>332</sub>の組、R<sub>332</sub>及びR<sub>333</sub>の組、R<sub>335</sub>及びR<sub>336</sub>の組、R<sub>336</sub>及びR<sub>337</sub>の組、並びにR<sub>337</sub>及びR<sub>338</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

R<sub>340</sub>～R<sub>349</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>340</sub>及びR<sub>341</sub>の組、R<sub>341</sub>及びR<sub>342</sub>の組、R<sub>342</sub>及びR<sub>343</sub>の組、R<sub>345</sub>及びR<sub>346</sub>の組、R<sub>346</sub>及びR<sub>347</sub>の組、並びにR<sub>347</sub>及びR<sub>348</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

R<sub>350</sub>～R<sub>359</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>350</sub>及びR<sub>351</sub>の組、R<sub>351</sub>及びR<sub>352</sub>の組、R<sub>352</sub>及びR<sub>353</sub>の組、R<sub>354</sub>及びR<sub>355</sub>の組、R<sub>355</sub>及びR<sub>356</sub>の組、R<sub>356</sub>及びR<sub>357</sub>の組、並びにR<sub>358</sub>及びR<sub>359</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

R<sub>360</sub>～R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>360</sub>及びR<sub>361</sub>の組、R<sub>361</sub>及びR<sub>362</sub>の組、R<sub>362</sub>及びR<sub>363</sub>の組、R<sub>364</sub>及びR<sub>365</sub>の組、R<sub>365</sub>及びR<sub>366</sub>の組、R<sub>366</sub>及びR<sub>367</sub>の組、並びにR<sub>368</sub>及びR<sub>369</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としてのR<sub>371</sub>、R<sub>372</sub>及びR<sub>373</sub>、並びに置換基としてのR<sub>310</sub>～R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub>～R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub>～R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub>～R<sub>349</sub>、R<sub>350</sub>～R<sub>359</sub>及びR<sub>360</sub>～R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基であり、

\*は、L<sub>30</sub>との結合位置を示す。) )

(前記一般式(3)において、

L<sub>30</sub>は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～22のアリーレン基、

2つの置換もしくは無置換の環形成炭素数6～22のアリーレン基が結合してなる基、又は

3つの置換もしくは無置換の環形成炭素数6～22のアリーレン基が結合してなる基であり、

R<sub>31</sub>～R<sub>38</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>31</sub>及び

10

20

30

40

50

R<sub>32</sub>の組、R<sub>32</sub>及びR<sub>33</sub>の組、R<sub>33</sub>及びR<sub>34</sub>の組、R<sub>35</sub>及びR<sub>36</sub>の組、R<sub>36</sub>及びR<sub>37</sub>の組、並びにR<sub>37</sub>及びR<sub>38</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

L<sub>30</sub>が置換基を有する場合の当該置換基、並びに置換基としてのR<sub>31</sub>～R<sub>38</sub>は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基である。) )

【請求項2】

請求項1に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記発光層は、さらに蛍光発光性の化合物M1を含み、

前記化合物M2の一重項エネルギーS<sub>1</sub>(M2)と、前記化合物M1の一重項エネルギーS<sub>1</sub>(M1)とが、下記数式(数2)の関係を満たす、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

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

【請求項3】

請求項1又は請求項2に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

前記化合物M3は、R<sub>31</sub>及びR<sub>32</sub>の組、R<sub>32</sub>及びR<sub>33</sub>の組、R<sub>33</sub>及びR<sub>34</sub>の組、R<sub>35</sub>及びR<sub>36</sub>の組、R<sub>36</sub>及びR<sub>37</sub>の組、並びにR<sub>37</sub>及びR<sub>38</sub>の組は、互いに結合しない構造であるか、又は

前記化合物M3が、下記一般式(31)、一般式(32)、一般式(33)、一般式(34)、一般式(35)又は一般式(36)で表される、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

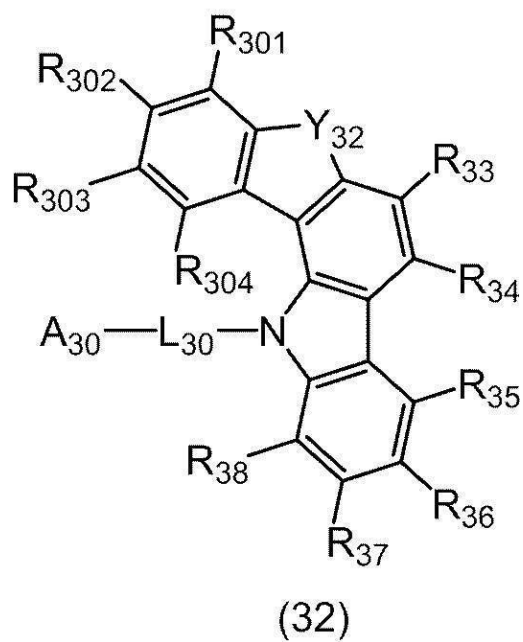
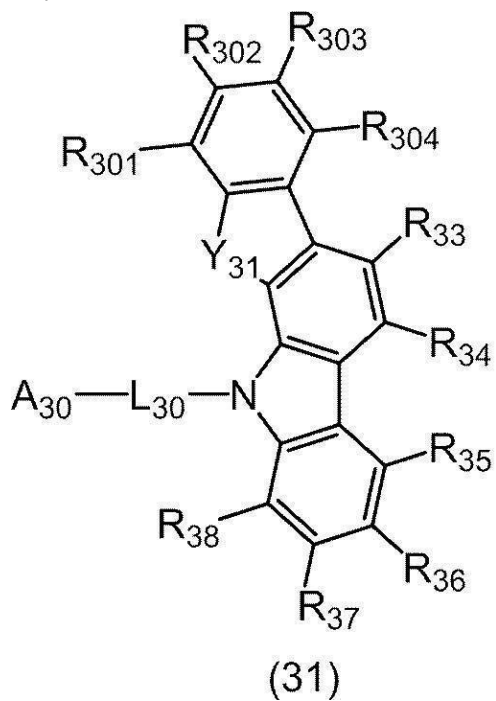
20

30

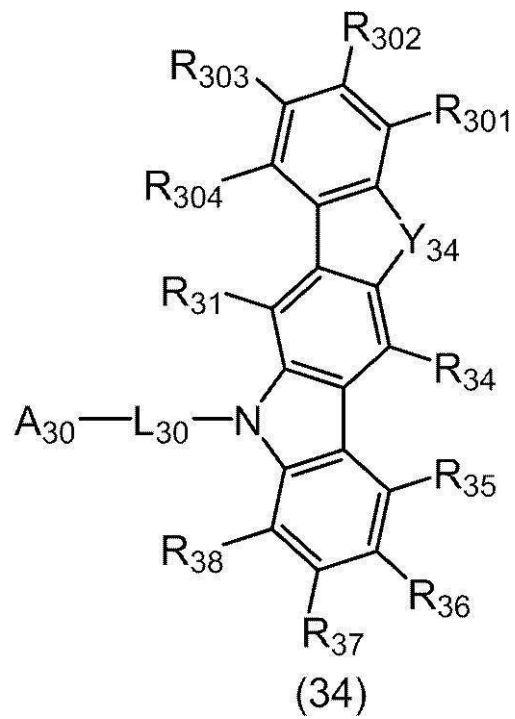
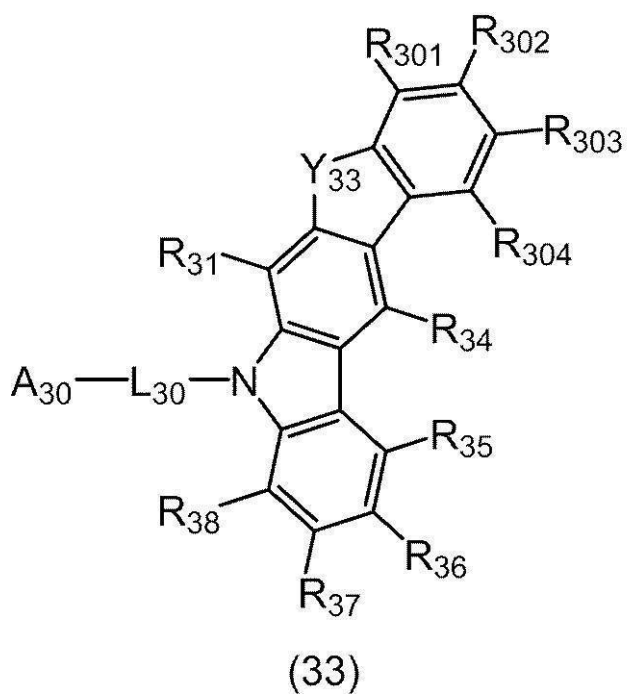
40

50

【化 5】



【化 6】



10

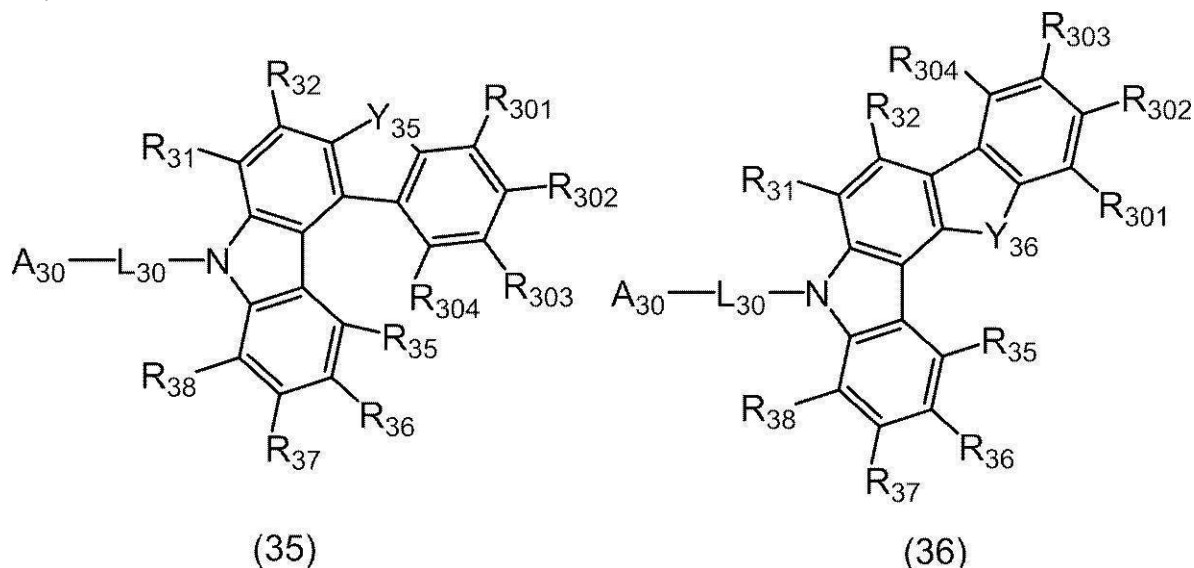
20

30

40

50

## 【化 7】



10

(前記一般式(31)~(36)において、

$Y_{31}$ 、 $Y_{32}$ 、 $Y_{33}$ 、 $Y_{34}$ 、 $Y_{35}$ 及び $Y_{36}$ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、 $NR_{374}$ 又は $SiR_{375}R_{376}$ であり、

20

$R_{374}$ 、 $R_{375}$ 及び $R_{376}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 $A_{30}$ 、 $L_{30}$ 、 $R_{31}$ ~ $R_{38}$ は、それぞれ、前記一般式(3)における $A_{30}$ 、 $L_{30}$ 、 $R_{31}$ ~ $R_{38}$ と同義であり、

$R_{301}$ ~ $R_{304}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は $R_{301}$ 及び $R_{302}$ の組、 $R_{302}$ 及び $R_{303}$ の組、並びに $R_{303}$ 及び $R_{304}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{301}$ ~ $R_{304}$ 、並びに置換基としての $R_{374}$ 、 $R_{375}$ 及び $R_{376}$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3~30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~60のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリールチオ基である。) )

30

40

## 【請求項 4】

請求項 3 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

50

$Y_{31}$ 、 $Y_{32}$ 、 $Y_{33}$ 、 $Y_{34}$ 、 $Y_{35}$  及び  $Y_{36}$  は、それぞれ独立に、酸素原子又は硫黄原子である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 5】

請求項 3 又は請求項 4 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

$R_{31} \sim R_{38}$  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 ~ 30 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、又は

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

10

【請求項 6】

請求項 3 から請求項 5 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

$R_{31} \sim R_{38}$  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 ~ 30 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 7】

20

請求項 3 から請求項 6 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

$R_{31} \sim R_{38}$  は、それぞれ独立に、

水素原子、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 8】

請求項 3 から請求項 7 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

$R_{31} \sim R_{38}$  は、水素原子である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

【請求項 9】

請求項 3 から請求項 8 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

$R_{31} \sim R_{38}$ 、並びに  $R_{301} \sim R_{304}$  は、それぞれ独立に、

水素原子、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 10】

請求項 3 から請求項 9 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

$R_{31} \sim R_{38}$ 、並びに  $R_{301} \sim R_{304}$  は、水素原子である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

40

【請求項 11】

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

$R_{31}$  及び  $R_{32}$  の組、 $R_{32}$  及び  $R_{33}$  の組、 $R_{33}$  及び  $R_{34}$  の組、 $R_{35}$  及び  $R_{36}$  の組、 $R_{36}$  及び  $R_{37}$  の組、並びに  $R_{37}$  及び  $R_{38}$  の組のうち少なくとも 1 組が互いに結合して環を形成する、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 12】

50

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

L<sub>30</sub>は、

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ピフェニレン基、又は

置換もしくは無置換のターフェニレン基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 3】

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

L<sub>30</sub>は、置換もしくは無置換のピフェニレン基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 4】

請求項 1 から請求項 1 3 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

L<sub>30</sub>が置換基を有する場合の当該置換基は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 5】

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

X<sub>31</sub>、X<sub>32</sub>、X<sub>33</sub>、X<sub>34</sub>、X<sub>35</sub> 及び X<sub>36</sub> は、それぞれ独立に、酸素原子又は S i R<sub>372</sub>R<sub>373</sub> である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 6】

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

X<sub>31</sub>、X<sub>32</sub>、X<sub>33</sub>、X<sub>34</sub>、X<sub>35</sub> 及び X<sub>36</sub> は、それぞれ独立に、酸素原子又は硫黄原子である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 7】

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

X<sub>31</sub>、X<sub>32</sub>、X<sub>33</sub>、X<sub>34</sub>、X<sub>35</sub> 及び X<sub>36</sub> は、酸素原子である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 1 8】

請求項 1 から請求項 1 7 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

R<sub>310</sub> 及び R<sub>311</sub> の組、R<sub>311</sub> 及び R<sub>312</sub> の組、R<sub>312</sub> 及び R<sub>313</sub> の組、R<sub>314</sub> 及び R<sub>315</sub> の組、R<sub>316</sub> 及び R<sub>317</sub> の組、R<sub>317</sub> 及び R<sub>318</sub> の組、並びに R<sub>318</sub> 及び R<sub>319</sub> の組は、互いに結合せず、

R<sub>320</sub> 及び R<sub>321</sub> の組、R<sub>321</sub> 及び R<sub>322</sub> の組、R<sub>322</sub> 及び R<sub>323</sub> の組、R<sub>324</sub> 及び R<sub>325</sub> の組、R<sub>326</sub> 及び R<sub>327</sub> の組、R<sub>327</sub> 及び R<sub>328</sub> の組、並びに R<sub>328</sub> 及び R<sub>329</sub> の組は、互いに結合せず、

R<sub>330</sub> 及び R<sub>331</sub> の組、R<sub>331</sub> 及び R<sub>332</sub> の組、R<sub>332</sub> 及び R<sub>333</sub> の組、R<sub>335</sub> 及び R<sub>336</sub> の組、R<sub>336</sub> 及び R<sub>337</sub> の組、並びに R<sub>337</sub> 及び R<sub>338</sub> の組は、互いに結合せず、

R<sub>340</sub> 及び R<sub>341</sub> の組、R<sub>341</sub> 及び R<sub>342</sub> の組、R<sub>342</sub> 及び R<sub>343</sub> の組、R<sub>345</sub> 及び R<sub>346</sub> の組、R<sub>346</sub> 及び R<sub>347</sub> の組、並びに R<sub>347</sub> 及び R<sub>348</sub> の組は、

10

20

30

40

50

互いに結合せず、

R<sub>350</sub>及びR<sub>351</sub>の組、R<sub>351</sub>及びR<sub>352</sub>の組、R<sub>352</sub>及びR<sub>353</sub>の組、R<sub>354</sub>及びR<sub>355</sub>の組、R<sub>355</sub>及びR<sub>356</sub>の組、R<sub>356</sub>及びR<sub>357</sub>の組、並びにR<sub>358</sub>及びR<sub>359</sub>の組は、互いに結合せず、

R<sub>360</sub>及びR<sub>361</sub>の組、R<sub>361</sub>及びR<sub>362</sub>の組、R<sub>362</sub>及びR<sub>363</sub>の組、R<sub>364</sub>及びR<sub>365</sub>の組、R<sub>365</sub>及びR<sub>366</sub>の組、R<sub>366</sub>及びR<sub>367</sub>の組、並びにR<sub>368</sub>及びR<sub>369</sub>の組は、互いに結合しない、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 19】

請求項 1 から請求項 18 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、 10

R<sub>310</sub>～R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub>～R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub>～R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub>～R<sub>349</sub>、R<sub>350</sub>～R<sub>359</sub>及びR<sub>360</sub>～R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～30 の複素環基、又は

置換もしくは無置換の炭素数 1～30 のアルキル基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 20】

請求項 18 又は請求項 19 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、 20

R<sub>310</sub>～R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub>～R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub>～R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub>～R<sub>349</sub>、R<sub>350</sub>～R<sub>359</sub>及びR<sub>360</sub>～R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～30 の複素環基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 21】

請求項 18 から請求項 20 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

R<sub>310</sub>～R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub>～R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub>～R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub>～R<sub>349</sub>、R<sub>350</sub>～R<sub>359</sub>及びR<sub>360</sub>～R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、 30

水素原子、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 22】

請求項 18 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において、

R<sub>310</sub>～R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub>～R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub>～R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub>～R<sub>349</sub>、R<sub>350</sub>～R<sub>359</sub>及びR<sub>360</sub>～R<sub>369</sub>は、水素原子である、 40

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 23】

請求項 1 から請求項 22 のいずれか一項に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子において、

A<sub>30</sub>は、前記一般式(3a)又は一般式(3d)で表される基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 24】

請求項 1 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において、

A<sub>30</sub>は、前記一般式(3a)で表される基である、

有機エレクトロルミネッセンス素子。 50

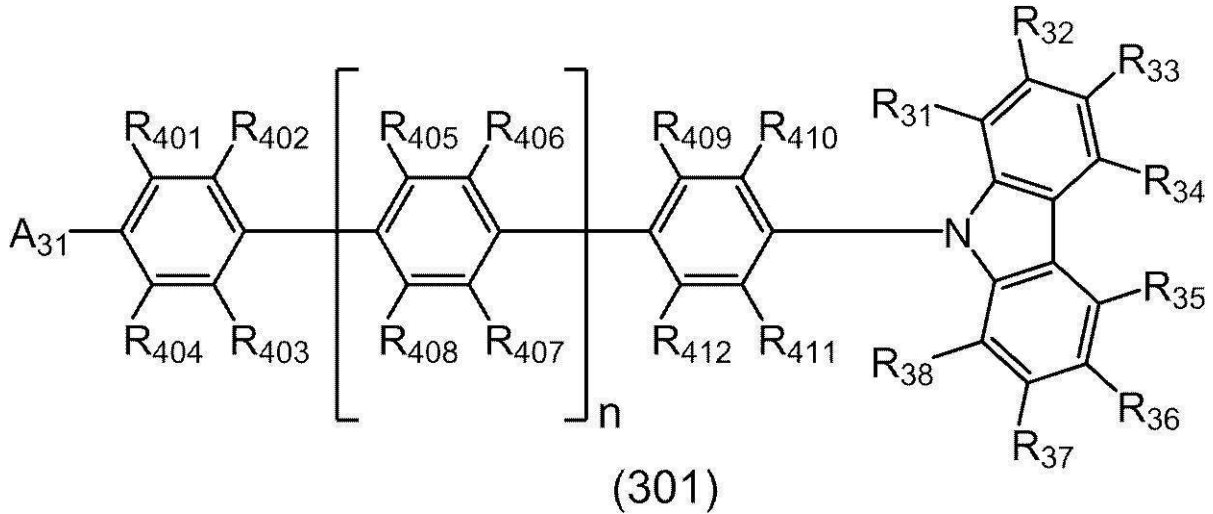
## 【請求項 25】

請求項 1 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を搭載した電子機器。

## 【請求項 26】

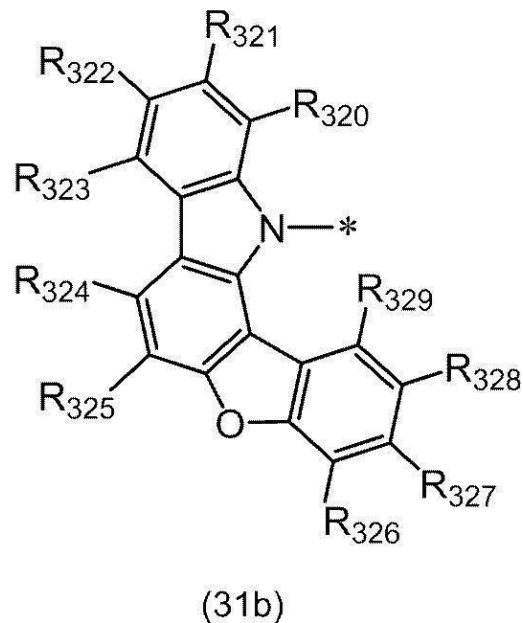
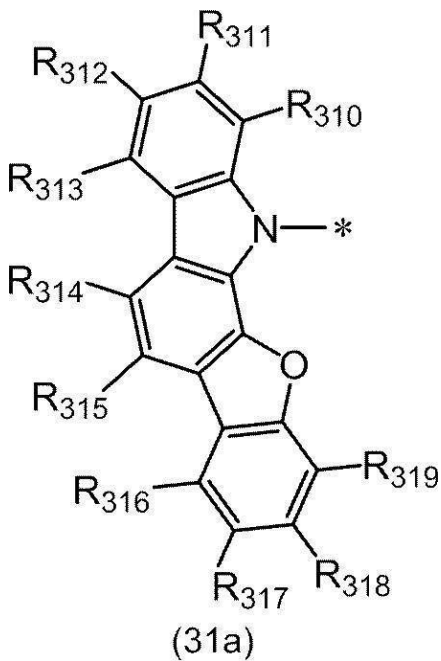
下記一般式 (301) で表される化合物。

## 【化 8】



(前記一般式 (301) において、 $A_{31}$  は、下記一般式 (31a)、一般式 (31b)、一般式 (31c)、一般式 (31d)、一般式 (31e) 又は一般式 (31f) で表される基である。)

## 【化 9】



10

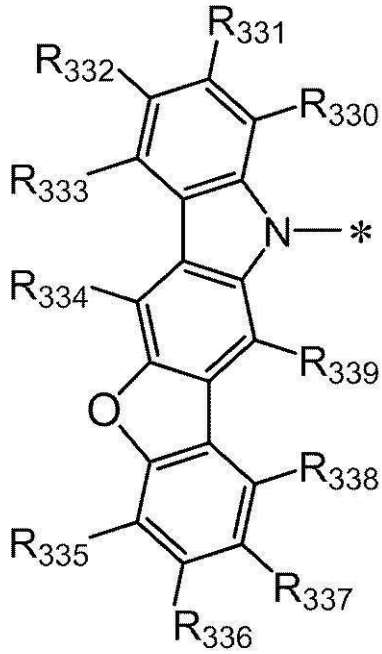
20

30

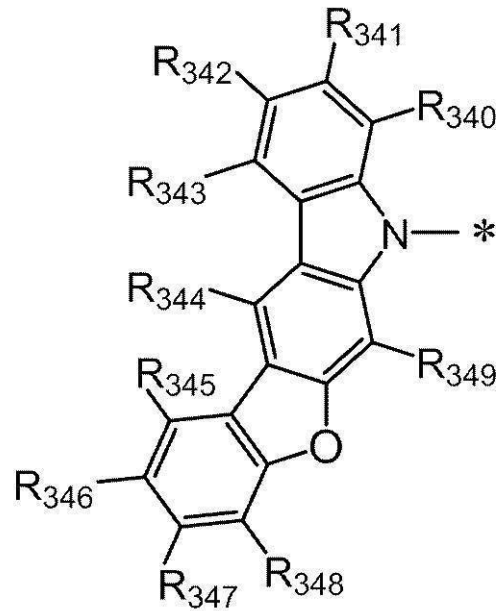
40

50

【化 1 0】



(31c)

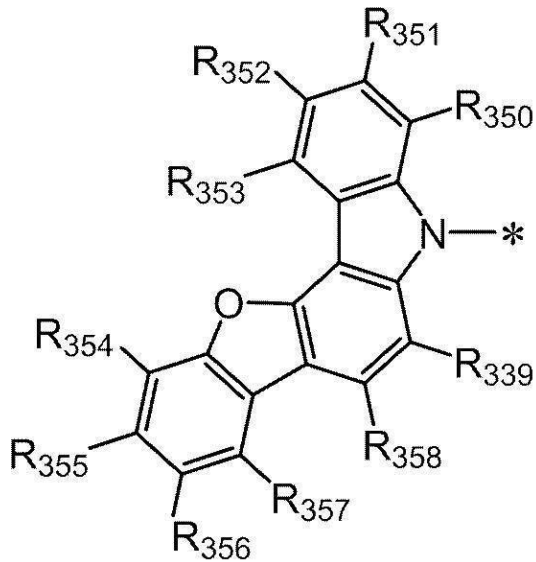


(31d)

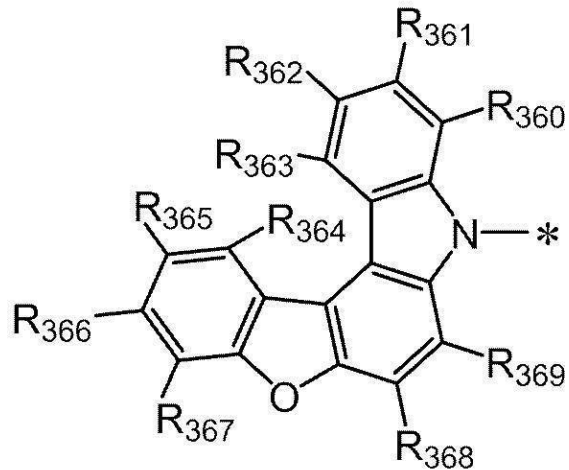
10

20

【化 1 1】



(31e)



(31f)

30

(前記一般式(31a)、一般式(31b)、一般式(31c)、一般式(31d)、一般式(31e)及び一般式(31f)において、

R<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>320</sub> ~ R<sub>329</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>330</sub> ~ R<sub>339</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>340</sub> ~ R<sub>349</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>350</sub> ~ R<sub>359</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>360</sub> ~ R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 置換基としてのR<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub> ~ R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub> ~ R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub> ~ R<sub>349</sub>、  
 R<sub>350</sub> ~ R<sub>359</sub>及びR<sub>360</sub> ~ R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、  
 ハロゲン原子、

40

50

- 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールシリル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールホスホリル基、  
 ヒドロキシ基、 10  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、  
 アミノ基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールアミノ基、  
 チオール基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基であり、  
 \* は、 $R_{401} \sim R_{404}$  が結合するベンゼン環との結合位置を示す。 )  
 ( 前記一般式 ( 301 ) において、 20  
 $R_{31} \sim R_{38}$  は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 $R_{401} \sim R_{412}$  は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 置換基としての  $R_{31} \sim R_{38}$  は、それぞれ独立に、  
 ハロゲン原子、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、 30  
 置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールシリル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールホスホリル基、  
 ヒドロキシ基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、  
 アミノ基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールアミノ基、  
 チオール基、 40  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基であり、  
 置換基としての  $R_{401} \sim R_{412}$  は、それぞれ独立に、  
 ハロゲン原子、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、  
 置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、 50

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールシリル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリールホスホリル基、  
 ヒドロキシ基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基、  
 チオール基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールチオ基であり、

n は、0、1、2 又は 3 であり、

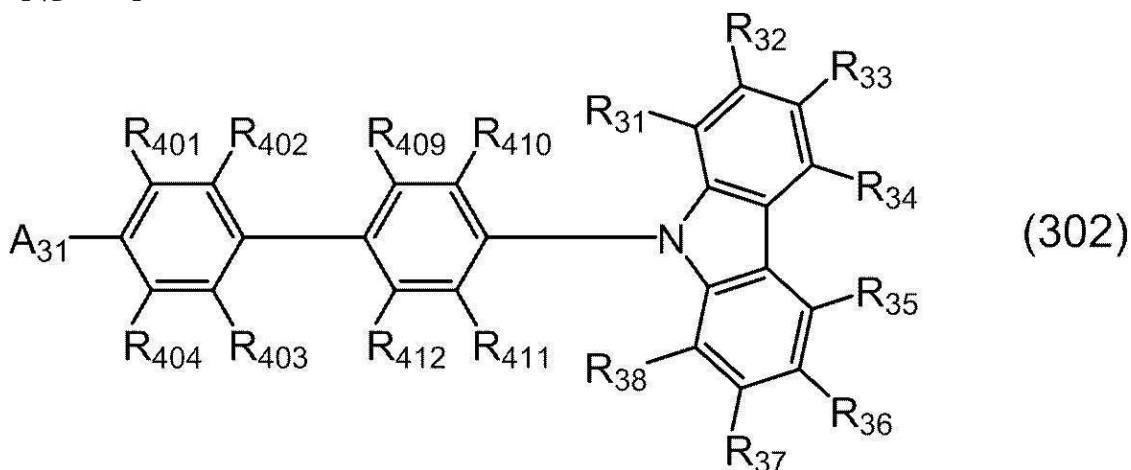
R<sub>405</sub> が複数存在する場合、複数の R<sub>405</sub> は、互いに同一であるか、又は異なり、  
 R<sub>406</sub> が複数存在する場合、複数の R<sub>406</sub> は、互いに同一であるか、又は異なり、  
 R<sub>407</sub> が複数存在する場合、複数の R<sub>407</sub> は、互いに同一であるか、又は異なり、  
 R<sub>408</sub> が複数存在する場合、複数の R<sub>408</sub> は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

【請求項 27】

下記一般式 (302) で表される、

請求項 26 に記載の化合物。

【化 12】



(前記一般式 (302) における A<sub>31</sub>、R<sub>401</sub> ~ R<sub>404</sub>、R<sub>409</sub> ~ R<sub>412</sub>、R<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub> は、それぞれ、前記一般式 (301) における A<sub>31</sub>、R<sub>401</sub> ~ R<sub>404</sub>、R<sub>409</sub> ~ R<sub>412</sub>、R<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub> と同義である。)

【請求項 28】

R<sub>401</sub> ~ R<sub>412</sub> 並びに R<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub> は、水素原子である、  
 請求項 26 又は請求項 27 に記載の化合物。

【請求項 29】

R<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub> ~ R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub> ~ R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub> ~ R<sub>349</sub>、R<sub>350</sub> ~ R<sub>359</sub> 及び R<sub>360</sub> ~ R<sub>369</sub> は、水素原子である、  
 請求項 26 から請求項 28 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 30】

下記一般式 (310) で表される化合物。

10

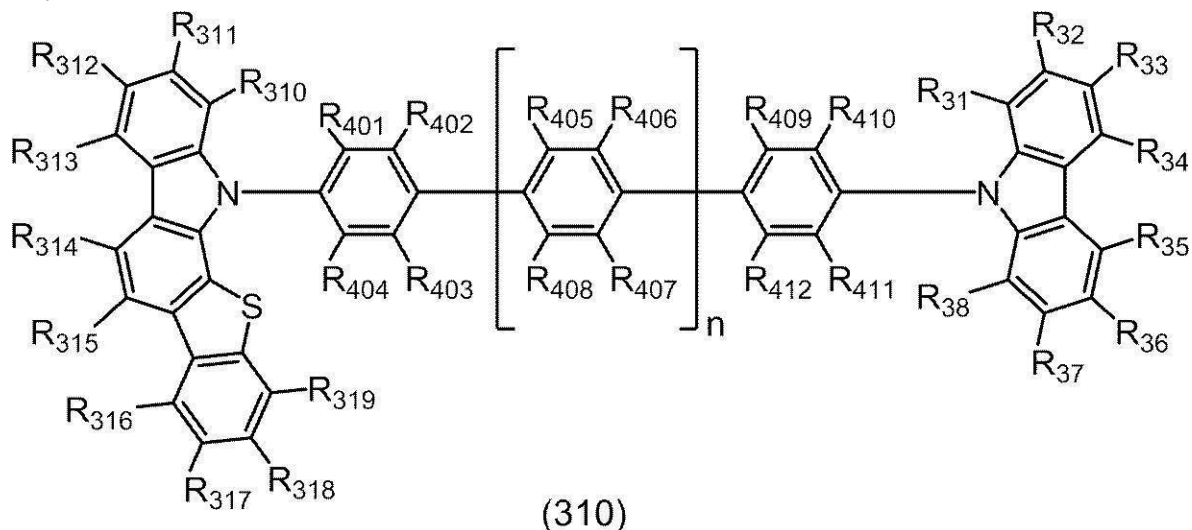
20

30

40

50

## 【化 1 3】



10

(前記一般式(310)において、

R<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、

R<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、

R<sub>401</sub> ~ R<sub>412</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、

置換基としてのR<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>、置換基としてのR<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub>並びに置換基としてのR<sub>401</sub> ~ R<sub>412</sub>は、それぞれ独立に、

20

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3 ~ 30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールチオ基であり、

30

40

nは、0、1、2又は3であり、

R<sub>405</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>405</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>406</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>406</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>407</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>407</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>408</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>408</sub>は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

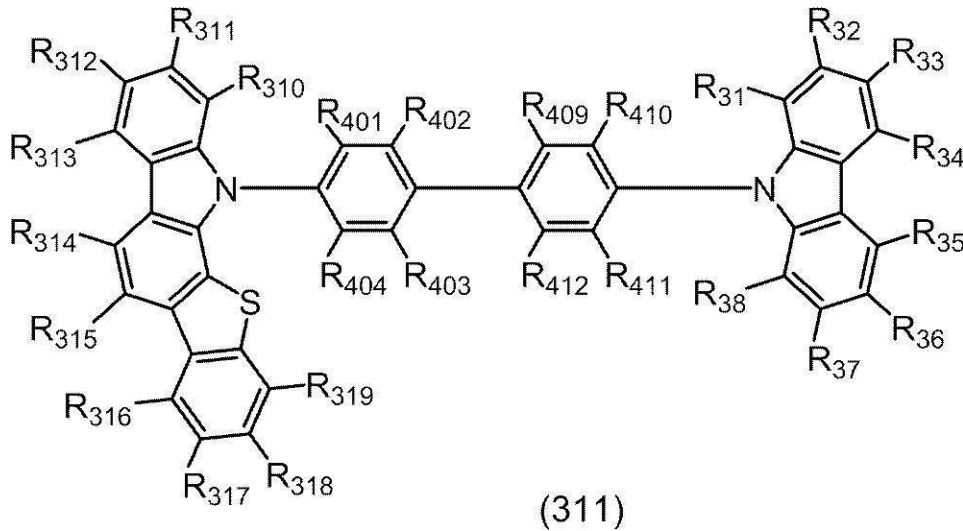
## 【請求項 3 1】

下記一般式(311)で表される、

請求項 3 0に記載の化合物。

50

【化 1 4】



10

(前記一般式(311)における $R_{310} \sim R_{319}$ 、 $R_{401} \sim R_{404}$ 、 $R_{409} \sim R_{412}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ、前記一般式(310)における $R_{310} \sim R_{319}$ 、 $R_{401} \sim R_{404}$ 、 $R_{409} \sim R_{412}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。)

【請求項 3 2】

20

$R_{401} \sim R_{412}$ 並びに $R_{31} \sim R_{38}$ は、水素原子である、  
請求項 3 0 又は請求項 3 1 に記載の化合物。

【請求項 3 3】

$R_{310} \sim R_{319}$ は、水素原子である、  
請求項 3 0 から請求項 3 2 のいずれか一項に記載の化合物。

【請求項 3 4】

陽極と、  
陰極と、  
前記陽極と前記陰極との間に含まれる発光層と、を有し、  
前記発光層は、遅延蛍光性の化合物 M 2 と、請求項 2 6 から請求項 3 3 のいずれか一項  
に記載の化合物と、を含む、  
有機エレクトロルミネッセンス素子。

30

【請求項 3 5】

請求項 3 4 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。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、有機エレクトロルミネッセンス素子、化合物及び電子機器に関する。

【背景技術】

【0002】

40

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。

【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

50

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( ST)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、TADF性化合物とも称する)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】

有機EL素子に関する文献として、特許文献1、2及び3、並びに非特許文献1が挙げられる。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0005】

【文献】中国特許出願公開第107793398号明細書

【文献】国際公開第2014/166585号

【文献】韓国公開特許第2014-143618号公報

【非特許文献】

【0006】

【文献】Nature Communications 2014, 5, 4016

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0007】

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EL素子の性能の更なる向上が要望されている。

【0008】

本発明の目的は、高性能化、特に発光効率を向上させることができる化合物及び有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子を備える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】

【0009】

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、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。

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

【0010】

10

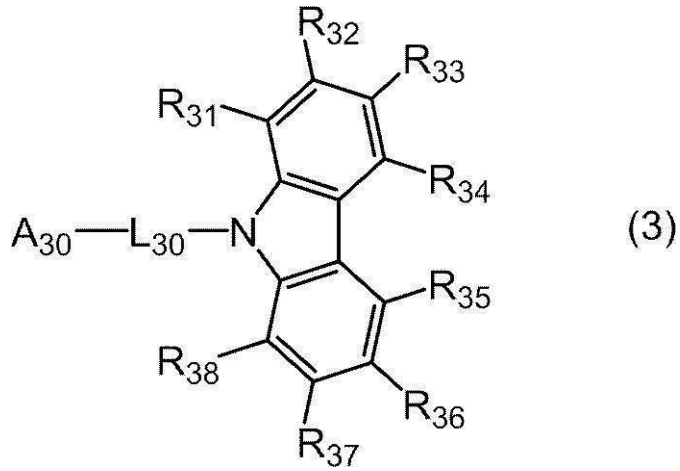
20

30

40

50

【化1】



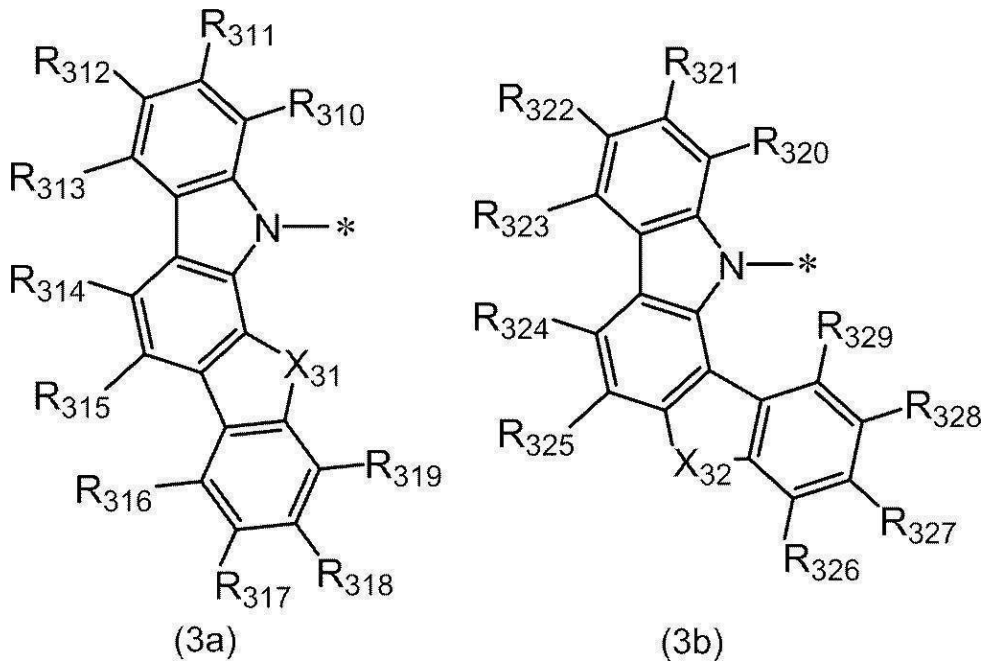
10

【0011】

(前記一般式(3)において、A<sub>30</sub>は、下記一般式(3a)、一般式(3b)、一般式(3c)、一般式(3d)、一般式(3e)又は一般式(3f)で表される基である。)

【0012】

【化2】



20

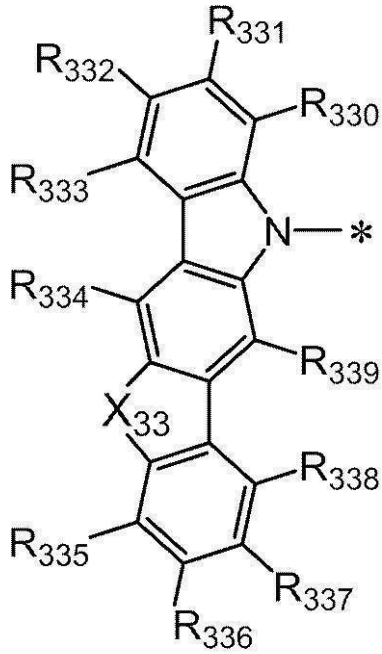
30

【0013】

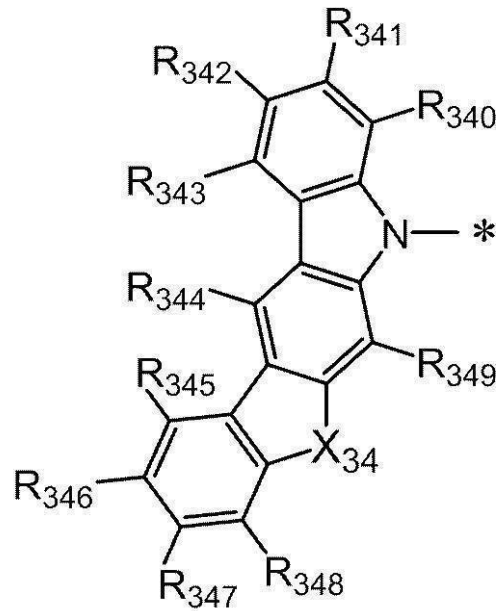
40

50

【化3】



(3c)



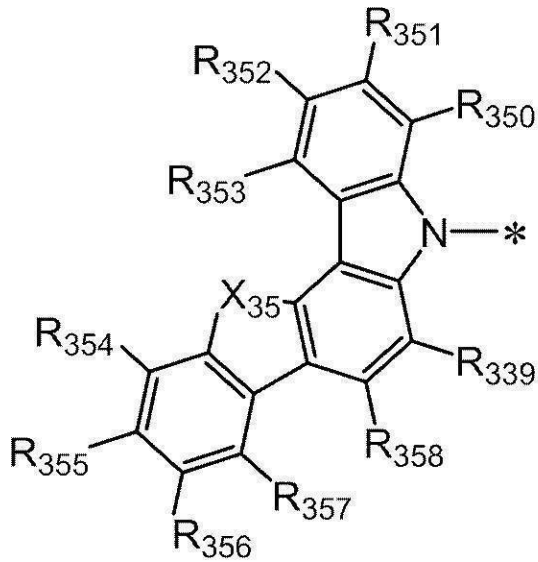
(3d)

10

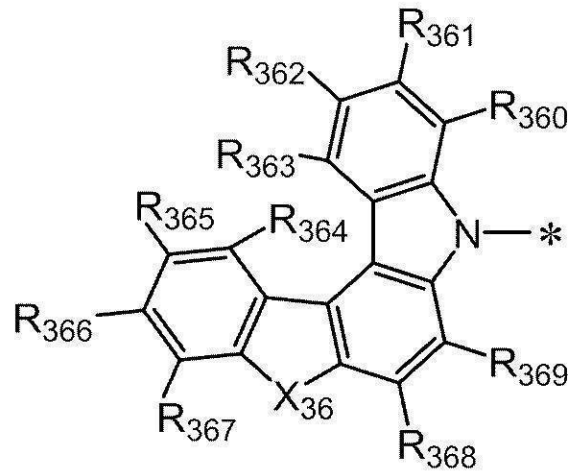
20

【0014】

【化4】



(3e)



(3f)

30

40

【0015】

(前記一般式(3a)、一般式(3b)、一般式(3c)、一般式(3d)、一般式(3e)及び一般式(3f)において、

$X_{31}$ 、 $X_{32}$ 、 $X_{33}$ 、 $X_{34}$ 、 $X_{35}$ 及び $X_{36}$ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、 $NR_{371}$ 又は $SiR_{372}R_{373}$ であり、

$R_{371}$ 、 $R_{372}$ 及び $R_{373}$ はそれぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、

$R_{310} \sim R_{319}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は $R_{310}$ 及び $R_{311}$ の組、 $R_{311}$ 及び $R_{312}$ の組、 $R_{312}$ 及び $R_{313}$ の組、 $R_{314}$ 及び $R_{315}$ の組、 $R_{316}$ 及び $R_{317}$ の組、 $R_{317}$ 及び $R_{318}$ の組、並びに $R_{318}$ 及び $R_{319}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

50

R<sub>320</sub> ~ R<sub>329</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>320</sub>及びR<sub>321</sub>の組、R<sub>321</sub>及びR<sub>322</sub>の組、R<sub>322</sub>及びR<sub>323</sub>の組、R<sub>324</sub>及びR<sub>325</sub>の組、R<sub>326</sub>及びR<sub>327</sub>の組、R<sub>327</sub>及びR<sub>328</sub>の組、並びにR<sub>328</sub>及びR<sub>329</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

R<sub>330</sub> ~ R<sub>339</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>330</sub>及びR<sub>331</sub>の組、R<sub>331</sub>及びR<sub>332</sub>の組、R<sub>332</sub>及びR<sub>333</sub>の組、R<sub>335</sub>及びR<sub>336</sub>の組、R<sub>336</sub>及びR<sub>337</sub>の組、並びにR<sub>337</sub>及びR<sub>338</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

R<sub>340</sub> ~ R<sub>349</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>340</sub>及びR<sub>341</sub>の組、R<sub>341</sub>及びR<sub>342</sub>の組、R<sub>342</sub>及びR<sub>343</sub>の組、R<sub>345</sub>及びR<sub>346</sub>の組、R<sub>346</sub>及びR<sub>347</sub>の組、並びにR<sub>347</sub>及びR<sub>348</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

10

R<sub>350</sub> ~ R<sub>359</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>350</sub>及びR<sub>351</sub>の組、R<sub>351</sub>及びR<sub>352</sub>の組、R<sub>352</sub>及びR<sub>353</sub>の組、R<sub>354</sub>及びR<sub>355</sub>の組、R<sub>355</sub>及びR<sub>356</sub>の組、R<sub>356</sub>及びR<sub>357</sub>の組、並びにR<sub>358</sub>及びR<sub>359</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

R<sub>360</sub> ~ R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>360</sub>及びR<sub>361</sub>の組、R<sub>361</sub>及びR<sub>362</sub>の組、R<sub>362</sub>及びR<sub>363</sub>の組、R<sub>364</sub>及びR<sub>365</sub>の組、R<sub>365</sub>及びR<sub>366</sub>の組、R<sub>366</sub>及びR<sub>367</sub>の組、並びにR<sub>368</sub>及びR<sub>369</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

20

置換基としてのR<sub>371</sub>、R<sub>372</sub>及びR<sub>373</sub>、並びに置換基としてのR<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub> ~ R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub> ~ R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub> ~ R<sub>349</sub>、R<sub>350</sub> ~ R<sub>359</sub>及びR<sub>360</sub> ~ R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3 ~ 30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールチオ基であり、

\*は、L<sub>30</sub>との結合位置を示す。)

(前記一般式(3)において、

L<sub>30</sub>は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 22のアリーレン基、

2つの置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 22のアリーレン基が結合してなる基、又は

3つの置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 22のアリーレン基が結合してなる基

30

40

50

であり、

R<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>31</sub>及びR<sub>32</sub>の組、R<sub>32</sub>及びR<sub>33</sub>の組、R<sub>33</sub>及びR<sub>34</sub>の組、R<sub>35</sub>及びR<sub>36</sub>の組、R<sub>36</sub>及びR<sub>37</sub>の組、並びにR<sub>37</sub>及びR<sub>38</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

L<sub>30</sub>が置換基を有する場合の当該置換基、並びに置換基としてのR<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub>は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3 ~ 30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキルチオ基、又は

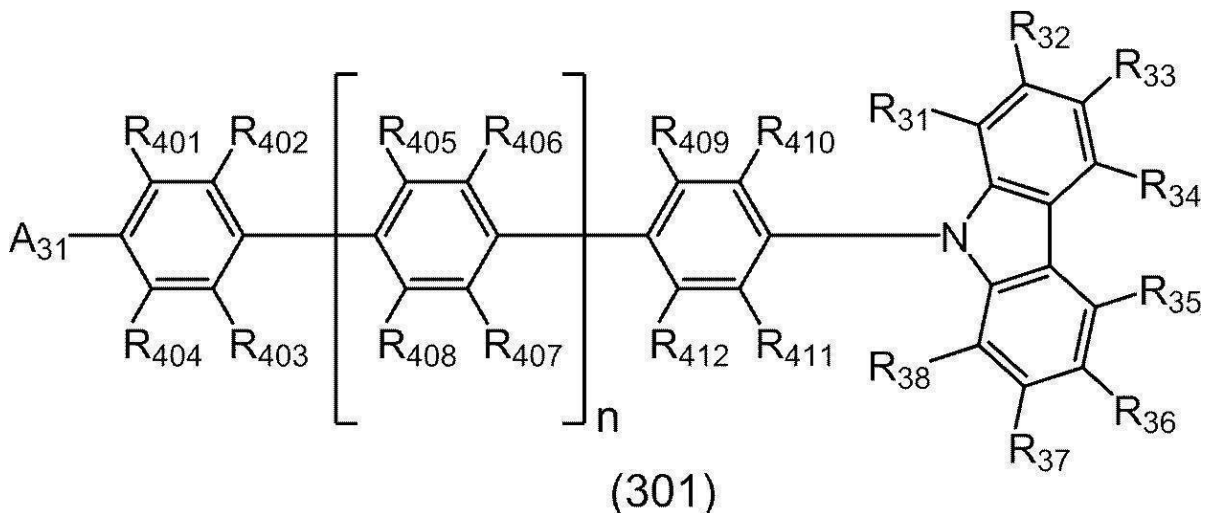
置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールチオ基である。) )

【0016】

本発明の一態様によれば、下記一般式(301)で表される化合物が提供される。

【0017】

【化5】

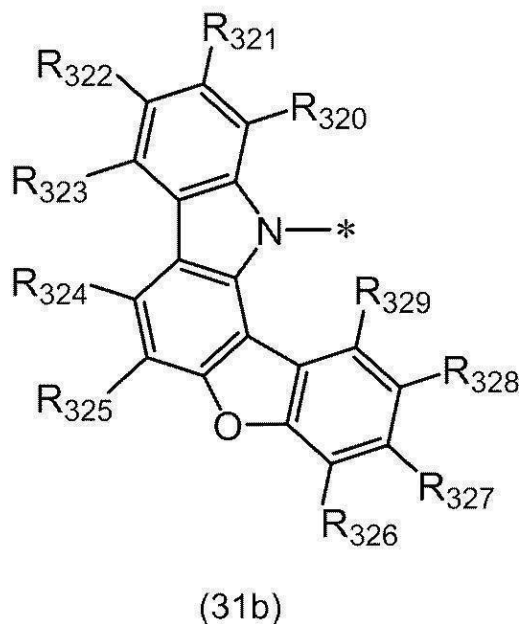
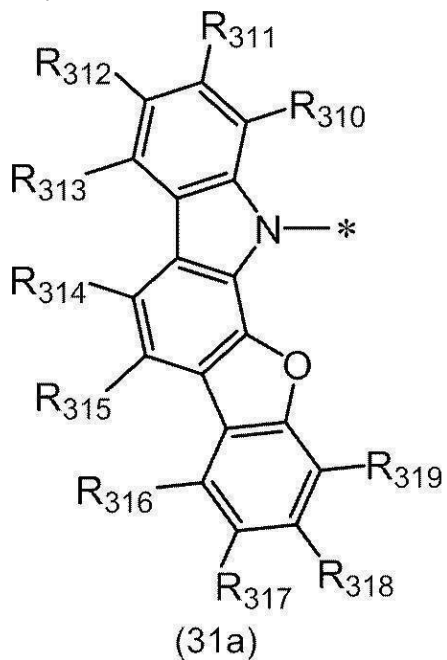


【0018】

(前記一般式(301)において、A<sub>31</sub>は、下記一般式(31a)、一般式(31b)、一般式(31c)、一般式(31d)、一般式(31e)又は一般式(31f)で表される基である。)

【0019】

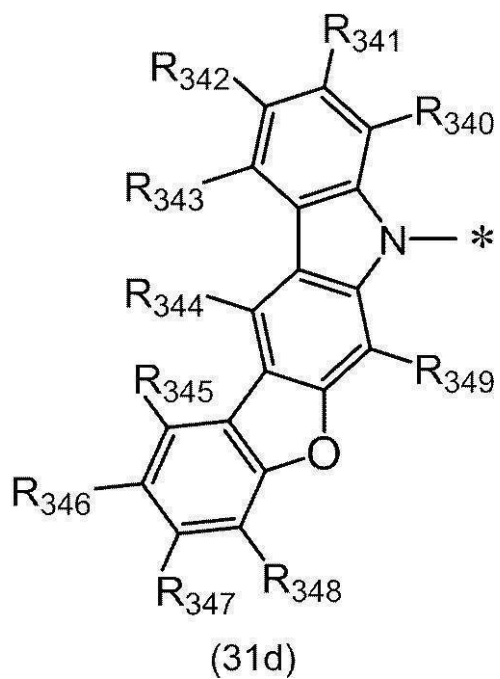
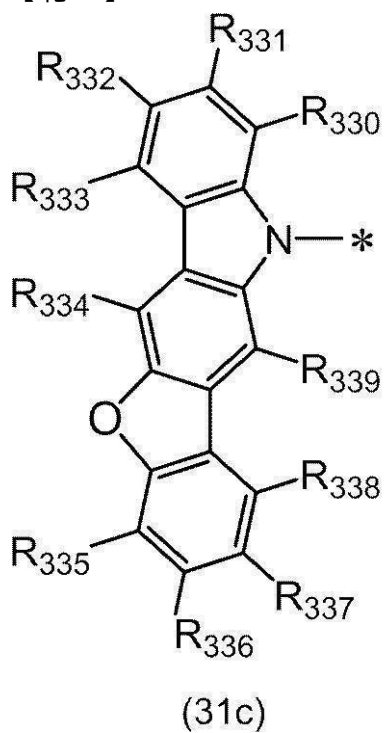
【化 6】



10

【 0 0 2 0 】

【化 7】



20

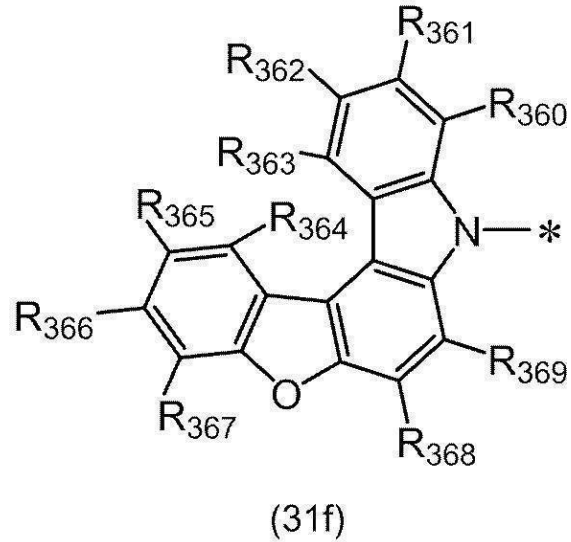
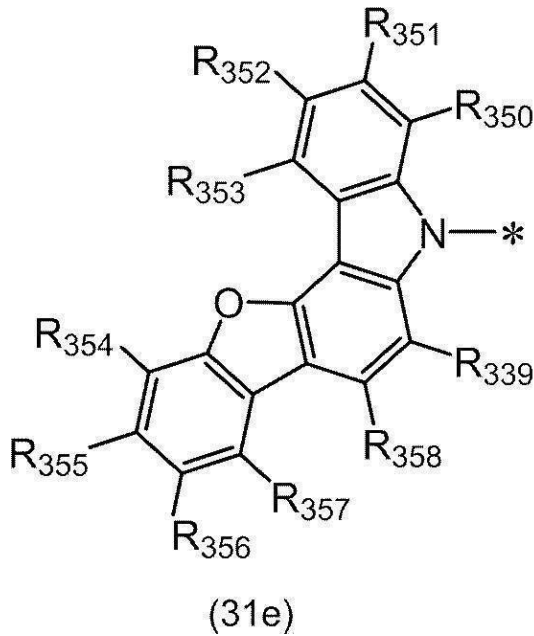
30

40

【 0 0 2 1 】

50

## 【化 8】



10

## 【 0 0 2 2 】

(前記一般式(31a)、一般式(31b)、一般式(31c)、一般式(31d)、一般式(31e)及び一般式(31f)において、

20

R<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>320</sub> ~ R<sub>329</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>330</sub> ~ R<sub>339</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>340</sub> ~ R<sub>349</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>350</sub> ~ R<sub>359</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>360</sub> ~ R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 置換基としてのR<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub> ~ R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub> ~ R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub> ~ R<sub>349</sub>、  
 R<sub>350</sub> ~ R<sub>359</sub>及びR<sub>360</sub> ~ R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、  
 ハロゲン原子、

30

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリール基、  
 置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 30の複素環基、  
 置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のハロゲン化アルキル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルケニル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキニル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数3 ~ 30のアルキルシリル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールシリル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールホスホリル基、  
 ヒドロキシ基、

40

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルコキシ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールオキシ基、  
 アミノ基、  
 置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキルアミノ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールアミノ基、  
 チオール基、  
 置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキルチオ基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールチオ基であり、  
 \*は、R<sub>401</sub> ~ R<sub>404</sub>が結合するベンゼン環との結合位置を示す。) )

(前記一般式(301)において、

50

R<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>401</sub> ~ R<sub>412</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 置換基としてのR<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub>並びに置換基としてのR<sub>401</sub> ~ R<sub>412</sub>は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3 ~ 30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールチオ基であり、

nは、0、1、2又は3であり、

R<sub>405</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>405</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>406</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>406</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>407</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>407</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

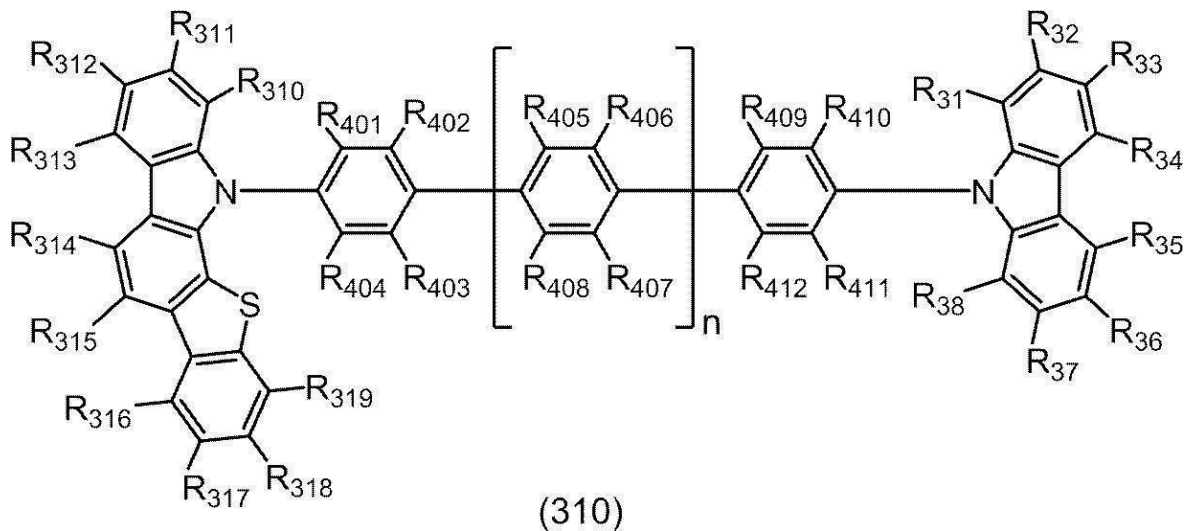
R<sub>408</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>408</sub>は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

【0023】

本発明の一態様によれば、下記一般式(310)で表される化合物が提供される。

【0024】

【化9】



【0025】

(前記一般式(310)において、

R<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、

R<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>401</sub> ~ R<sub>412</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 置換基としてのR<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>、置換基としてのR<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub>並びに置換基として  
 のR<sub>401</sub> ~ R<sub>412</sub>は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3 ~ 30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールチオ基であり、

nは、0、1、2又は3であり、

R<sub>405</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>405</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>406</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>406</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>407</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>407</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>408</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>408</sub>は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

#### 【0026】

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、遅延蛍光性の化合物M2と、前述の本発明のいずれかの態様に係る化合物と、を含む、有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

#### 【0027】

本発明の一態様によれば、前述の本発明のいずれかの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。

#### 【0028】

本発明の一態様によれば、高性能化、特に発光効率を向上させることができる化合物及び有機エレクトロルミネッセンス素子を提供すること、並びに当該有機エレクトロルミネッセンス素子を備える電子機器を提供することができる。

#### 【図面の簡単な説明】

#### 【0029】

【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、並びにエネルギー移動の関係を示す図である。

【図5】本発明の第二実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の発光層における化合物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

10

20

30

40

50

移動の関係を示す図である。

【発明を実施するための形態】

【0030】

〔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。

10

本実施形態の有機EL素子は、陽極と陰極との間に含まれる発光層を有する。

【0031】

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。

20

【0032】

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。

【0033】

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(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mium錯体、及び白金錯体等が挙げられる。

また、本実施形態の一態様においては、発光層は、金属錯体を含まないことも好ましい。

【0034】

本実施形態の有機EL素子において、発光層は、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、を含む。

30

この態様の場合、化合物M2は、ドーパント材料(ゲスト材料、エミッター、発光材料と称する場合もある。)であることが好ましく、化合物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。

【0035】

<発光層>

(化合物M3)

本実施形態の発光層は、下記一般式(3)で表される化合物M3を含む。

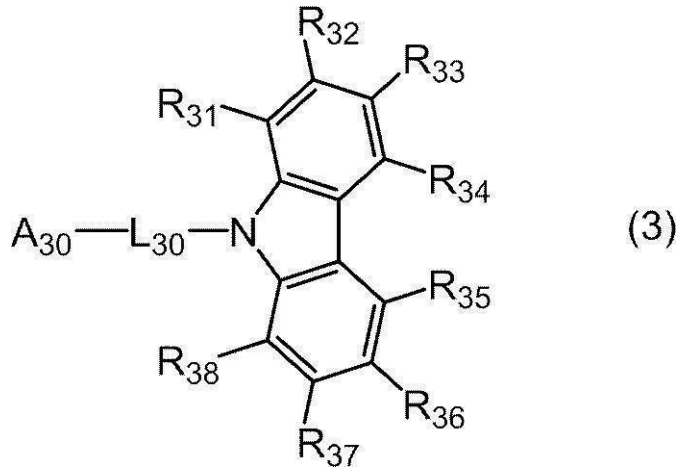
本実施形態の化合物M3は、熱活性化遅延蛍光性の化合物でもよいし、熱活性化遅延蛍光性を示さない化合物でもよいが、熱活性化遅延蛍光性を示さない化合物であることが好ましい。

40

【0036】

50

【化10】



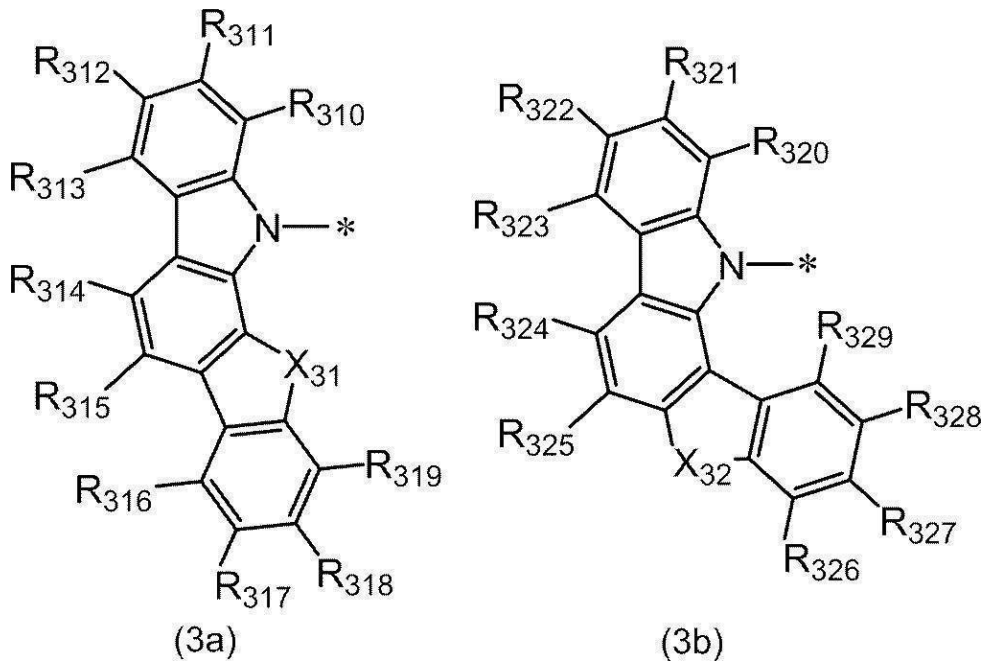
10

【0037】

(前記一般式(3)において、 $A_{30}$ は、下記一般式(3a)、一般式(3b)、一般式(3c)、一般式(3d)、一般式(3e)又は一般式(3f)で表される基である。)

【0038】

【化11】



20

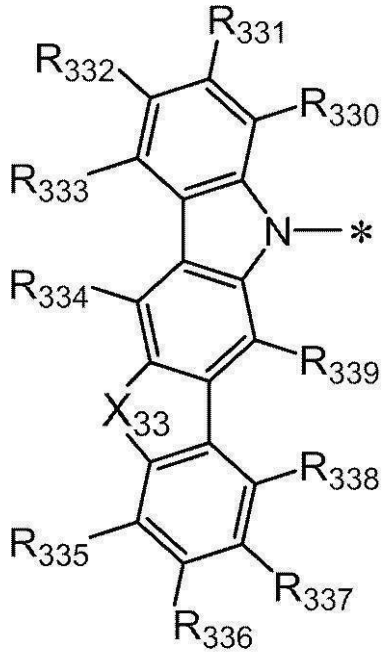
30

【0039】

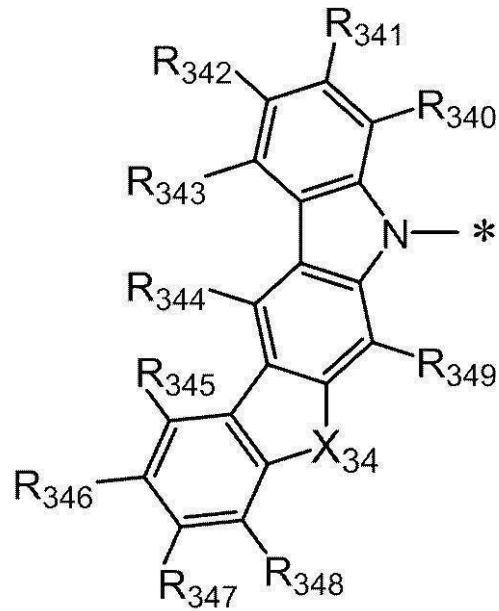
40

50

【化12】



(3c)



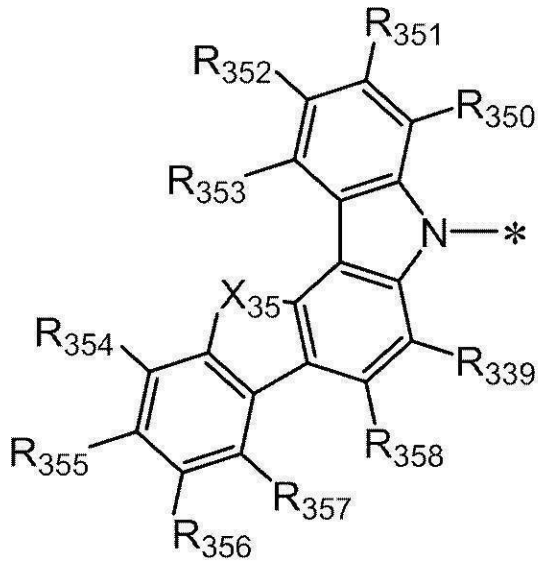
(3d)

10

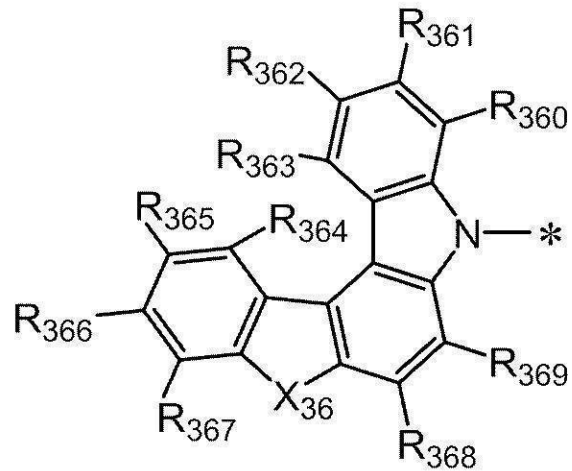
20

【0040】

【化13】



(3e)



(3f)

30

40

【0041】

(前記一般式(3a)、一般式(3b)、一般式(3c)、一般式(3d)、一般式(3e)及び一般式(3f)において、

$X_{31}$ 、 $X_{32}$ 、 $X_{33}$ 、 $X_{34}$ 、 $X_{35}$ 及び $X_{36}$ は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、 $NR_{371}$ 又は $SiR_{372}R_{373}$ であり、

$R_{371}$ 、 $R_{372}$ 及び $R_{373}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、

$R_{310} \sim R_{319}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は $R_{310}$ 及び $R_{311}$ の組、 $R_{311}$ 及び $R_{312}$ の組、 $R_{312}$ 及び $R_{313}$ の組、 $R_{314}$ 及び $R_{315}$ の組、 $R_{316}$ 及び $R_{317}$ の組、 $R_{317}$ 及び $R_{318}$ の組、並びに $R_{318}$ 及び $R_{319}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

50

$R_{320} \sim R_{329}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は $R_{320}$ 及び $R_{321}$ の組、 $R_{321}$ 及び $R_{322}$ の組、 $R_{322}$ 及び $R_{323}$ の組、 $R_{324}$ 及び $R_{325}$ の組、 $R_{326}$ 及び $R_{327}$ の組、 $R_{327}$ 及び $R_{328}$ の組、並びに $R_{328}$ 及び $R_{329}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

$R_{330} \sim R_{339}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は $R_{330}$ 及び $R_{331}$ の組、 $R_{331}$ 及び $R_{332}$ の組、 $R_{332}$ 及び $R_{333}$ の組、 $R_{335}$ 及び $R_{336}$ の組、 $R_{336}$ 及び $R_{337}$ の組、並びに $R_{337}$ 及び $R_{338}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

$R_{340} \sim R_{349}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は $R_{340}$ 及び $R_{341}$ の組、 $R_{341}$ 及び $R_{342}$ の組、 $R_{342}$ 及び $R_{343}$ の組、 $R_{345}$ 及び $R_{346}$ の組、 $R_{346}$ 及び $R_{347}$ の組、並びに $R_{347}$ 及び $R_{348}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

10

$R_{350} \sim R_{359}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は $R_{350}$ 及び $R_{351}$ の組、 $R_{351}$ 及び $R_{352}$ の組、 $R_{352}$ 及び $R_{353}$ の組、 $R_{354}$ 及び $R_{355}$ の組、 $R_{355}$ 及び $R_{356}$ の組、 $R_{356}$ 及び $R_{357}$ の組、並びに $R_{358}$ 及び $R_{359}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

$R_{360} \sim R_{369}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は $R_{360}$ 及び $R_{361}$ の組、 $R_{361}$ 及び $R_{362}$ の組、 $R_{362}$ 及び $R_{363}$ の組、 $R_{364}$ 及び $R_{365}$ の組、 $R_{365}$ 及び $R_{366}$ の組、 $R_{366}$ 及び $R_{367}$ の組、並びに $R_{368}$ 及び $R_{369}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

20

置換基としての $R_{371}$ 、 $R_{372}$ 及び $R_{373}$ 、並びに置換基としての $R_{310} \sim R_{319}$ 、 $R_{320} \sim R_{329}$ 、 $R_{330} \sim R_{339}$ 、 $R_{340} \sim R_{349}$ 、 $R_{350} \sim R_{359}$ 及び $R_{360} \sim R_{369}$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

30

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールアミノ基、

40

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基であり、

\*は、 $L_{30}$ との結合位置を示す。) )

(前記一般式(3)において、

$L_{30}$ は、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～22のアリーレン基、

2つの置換もしくは無置換の環形成炭素数6～22のアリーレン基が結合してなる基、又は

3つの置換もしくは無置換の環形成炭素数6～22のアリーレン基が結合してなる基

50

であり、

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

$L_{30}$ が置換基を有する場合の当該置換基、並びに置換基としての $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

10

置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3～30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、

20

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2～30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールチオ基である。) )

【0042】

化合物M3において、 $A_{30}$ は、前記一般式(3a)又は一般式(3d)で表される基であることが好ましい。

30

【0043】

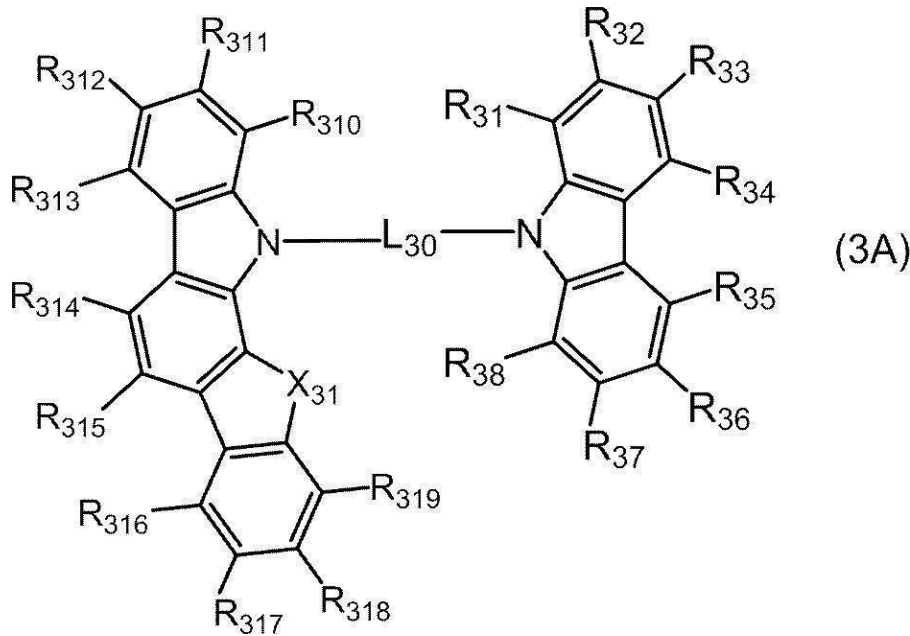
化合物M3において、 $A_{30}$ は、前記一般式(3a)で表される基であることがより好ましい。 $A_{30}$ が前記一般式(3a)で表される場合、化合物M3は、下記一般式(3A)で表される。

【0044】

40

50

【化14】



10

【0045】

前記一般式(3A)中の $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $L_{30}$ 、 $X_{31}$ 、 $R_{310} \sim R_{319}$ は、それぞれ、前記一般式(3)又は一般式(3a)中の $R_{31} \sim R_{38}$ 、 $L_{30}$ 、 $X_{31}$ 、 $R_{310} \sim R_{319}$ と同義である。

20

【0046】

化合物M3において、 $R_{31}$ 及び $R_{32}$ の組、 $R_{32}$ 及び $R_{33}$ の組、 $R_{33}$ 及び $R_{34}$ の組、 $R_{35}$ 及び $R_{36}$ の組、 $R_{36}$ 及び $R_{37}$ の組、並びに $R_{37}$ 及び $R_{38}$ の組は、互いに結合しないことも好ましい。すなわち、化合物M3において、 $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であることも好ましい。

【0047】

化合物M3において、 $R_{31}$ 及び $R_{32}$ の組、 $R_{32}$ 及び $R_{33}$ の組、 $R_{33}$ 及び $R_{34}$ の組、 $R_{35}$ 及び $R_{36}$ の組、 $R_{36}$ 及び $R_{37}$ の組、並びに $R_{37}$ 及び $R_{38}$ の組のうち少なくとも1組が互いに結合して環を形成することも好ましい。

30

【0048】

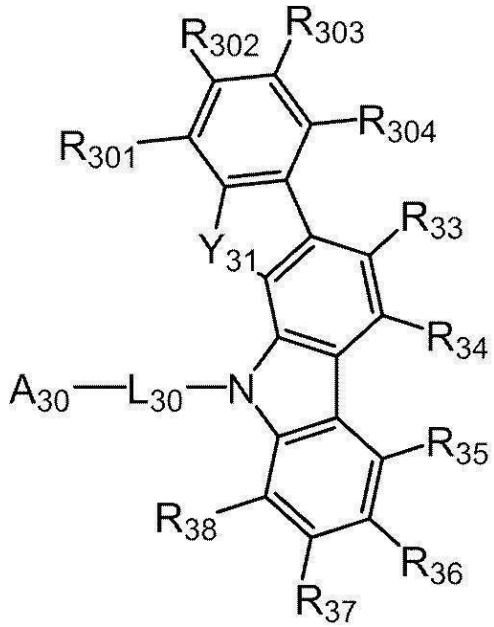
化合物M3が、下記一般式(31)、一般式(32)、一般式(33)、一般式(34)、一般式(35)又は一般式(36)で表されることも好ましい。

【0049】

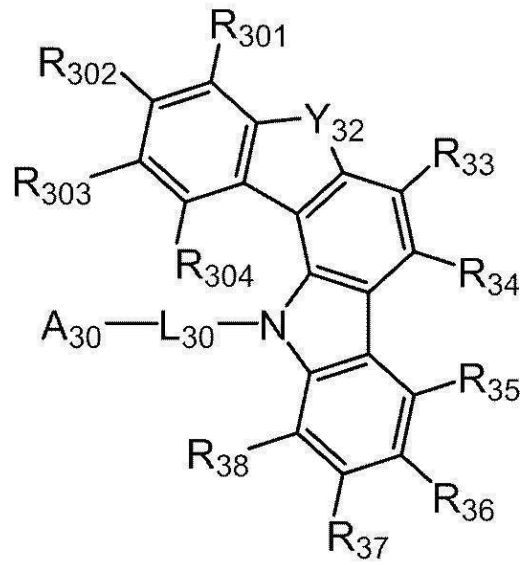
40

50

【化 1 5】



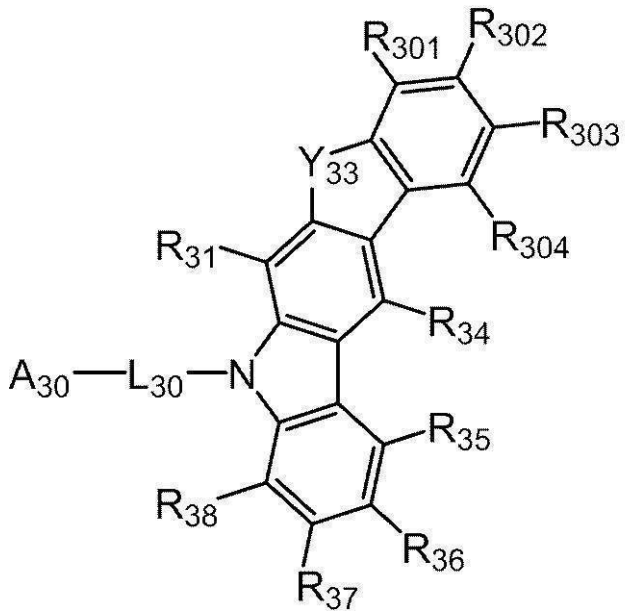
(31)



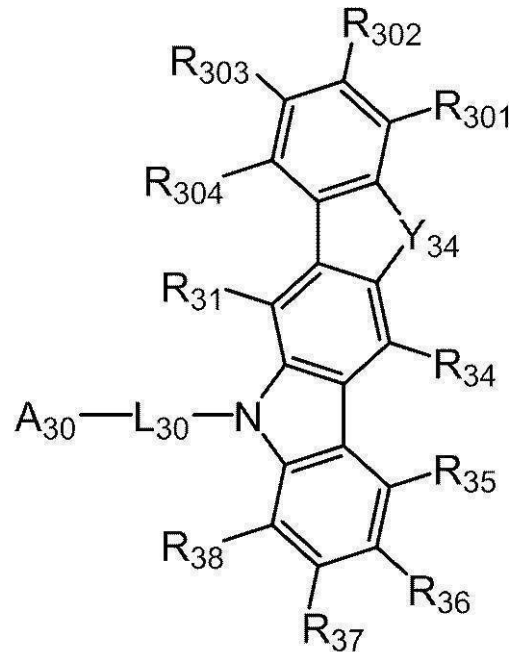
(32)

【 0 0 5 0】

【化 1 6】



(33)



(34)

【 0 0 5 1】

10

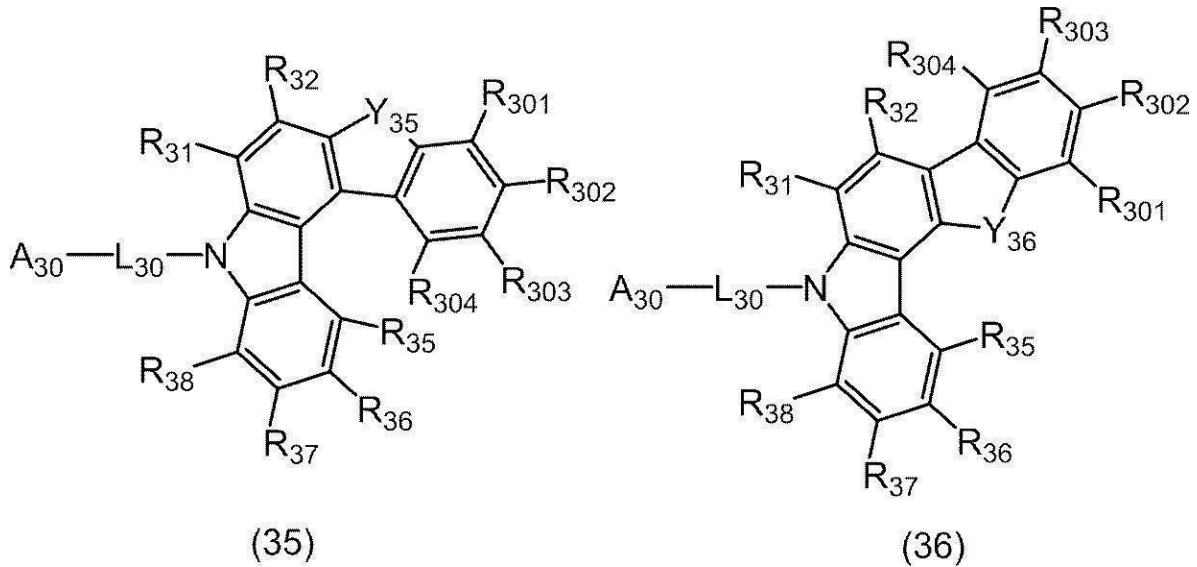
20

30

40

50

## 【化 17】



10

## 【0052】

(前記一般式(31)~(36)において、

Y<sub>31</sub>、Y<sub>32</sub>、Y<sub>33</sub>、Y<sub>34</sub>、Y<sub>35</sub>及びY<sub>36</sub>は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、NR<sub>374</sub>又はSiR<sub>375</sub>R<sub>376</sub>であり、

20

R<sub>374</sub>、R<sub>375</sub>及びR<sub>376</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、

A<sub>30</sub>、L<sub>30</sub>、R<sub>31</sub>~R<sub>38</sub>は、それぞれ、前記一般式(3)におけるA<sub>30</sub>、L<sub>30</sub>、R<sub>31</sub>~R<sub>38</sub>と同義であり、

R<sub>301</sub>~R<sub>304</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>301</sub>及びR<sub>302</sub>の組、R<sub>302</sub>及びR<sub>303</sub>の組、並びにR<sub>303</sub>及びR<sub>304</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としてのR<sub>301</sub>~R<sub>304</sub>、並びに置換基としてのR<sub>374</sub>、R<sub>375</sub>及びR<sub>376</sub>は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

30

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3~30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~60のアリールホスホリル基、

40

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリールチオ基である。) )

## 【0053】

50

化合物M3において、R<sub>301</sub>及びR<sub>302</sub>の組、R<sub>302</sub>及びR<sub>303</sub>の組、並びにR<sub>303</sub>及びR<sub>304</sub>の組は、いずれも互いに結合しないことが好ましい。

【0054】

化合物M3において、R<sub>301</sub>~R<sub>304</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基であることが好ましい。

【0055】

化合物M3において、R<sub>301</sub>~R<sub>304</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基であることがより好ましい。

10

【0056】

化合物M3において、R<sub>301</sub>~R<sub>304</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることがさらに好ましい。

【0057】

化合物M3において、R<sub>301</sub>~R<sub>304</sub>は、水素原子であることがよりさらに好ましい。

【0058】

化合物M3において、Y<sub>31</sub>、Y<sub>32</sub>、Y<sub>33</sub>、Y<sub>34</sub>、Y<sub>35</sub>及びY<sub>36</sub>は、それぞれ独立に、酸素原子又は硫黄原子であることが好ましい。

20

【0059】

化合物M3において、R<sub>31</sub>~R<sub>38</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基であることが好ましい。

【0060】

化合物M3において、R<sub>31</sub>~R<sub>38</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基であることがより好ましい。

【0061】

化合物M3において、R<sub>31</sub>~R<sub>38</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることがさらに好ましい。

30

【0062】

化合物M3において、R<sub>31</sub>~R<sub>38</sub>は、水素原子であることがよりさらに好ましい。

【0063】

化合物M3において、R<sub>31</sub>~R<sub>38</sub>、並びにR<sub>301</sub>~R<sub>304</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基であることが好ましい。

【0064】

化合物M3において、R<sub>31</sub>~R<sub>38</sub>、並びにR<sub>301</sub>~R<sub>304</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基であることがより好ましい。

40

【0065】

化合物M3において、R<sub>31</sub>~R<sub>38</sub>、並びにR<sub>301</sub>~R<sub>304</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることがさらに好ましい。

【0066】

化合物M3において、R<sub>31</sub>~R<sub>38</sub>、並びにR<sub>301</sub>~R<sub>304</sub>は、水素原子であることがよりさらに好ましい。

【0067】

50

化合物 M3 において、L<sub>30</sub> は、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ピフェニレン基、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。

【0068】

化合物 M3 において、L<sub>30</sub> は、置換もしくは無置換のピフェニレン基であることがより好ましい。

【0069】

化合物 M3 において、L<sub>30</sub> が置換基を有する場合の当該置換基（この置換基を置換基 F<sub>L</sub> と称する場合がある。）は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、又は置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基であることが好ましい。

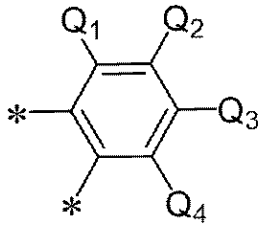
10

【0070】

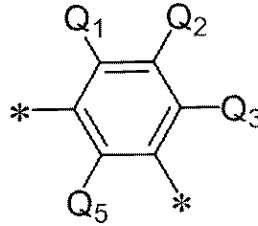
化合物 M3 において、L<sub>30</sub> は、下記一般式 (L30-1) ~ (L30-4)、(L30-4-2)、(L30-5) ~ (L30-11) で表される基からなる群から選択される少なくともいずれかの基であることも好ましい。

【0071】

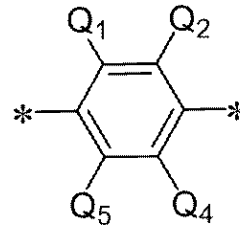
【化18】



(L30-1)

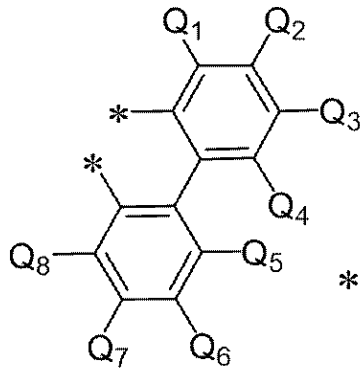


(L30-2)

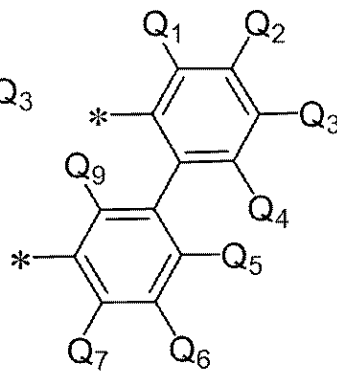


(L30-3)

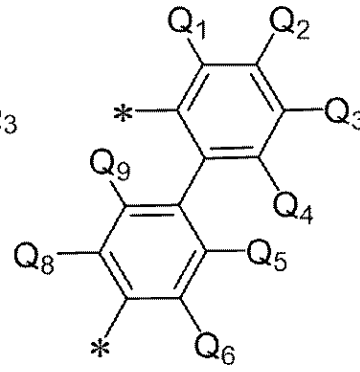
20



(L30-4)



(L30-4-2)



(L30-5)

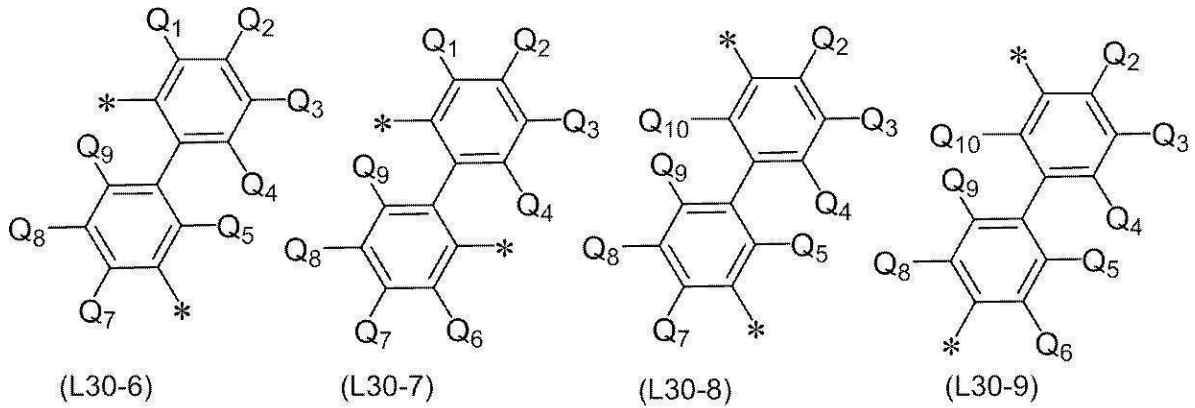
30

【0072】

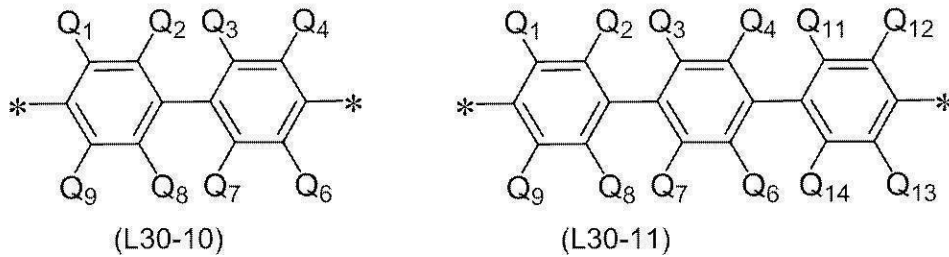
40

50

## 【化 19】



10



20

## 【0073】

前記一般式一般式(L30-1)~(L30-4)、(L30-4-2)、(L30-5)~(L30-11)中、Q<sub>1</sub>~Q<sub>14</sub>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Q<sub>1</sub>~Q<sub>14</sub>は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

シアノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5~30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3~30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~60のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリールチオ基である。

30

40

## 【0074】

置換基としてのQ<sub>1</sub>~Q<sub>14</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基であることが好ましい。

## 【0075】

化合物M3において、X<sub>31</sub>、X<sub>32</sub>、X<sub>33</sub>、X<sub>34</sub>、X<sub>35</sub>及びX<sub>36</sub>は、それぞれ独

50

立に、酸素原子、 $\text{NR}_{301}$ 又は $\text{SiR}_{302}\text{R}_{303}$ であることも好ましい。

【0076】

化合物M3において、 $\text{X}_{31}$ 、 $\text{X}_{32}$ 、 $\text{X}_{33}$ 、 $\text{X}_{34}$ 、 $\text{X}_{35}$ 及び $\text{X}_{36}$ は、それぞれ独立に、酸素原子又は硫黄原子であることも好ましい。

【0077】

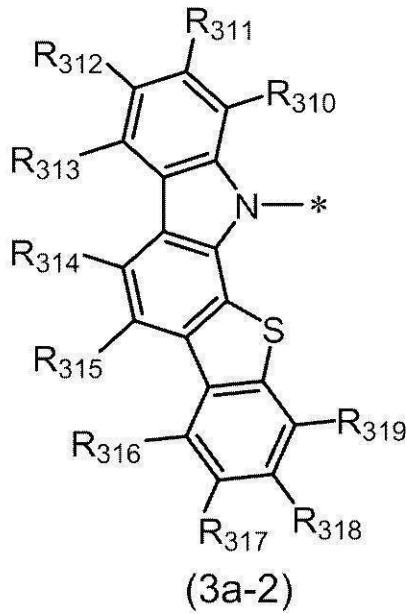
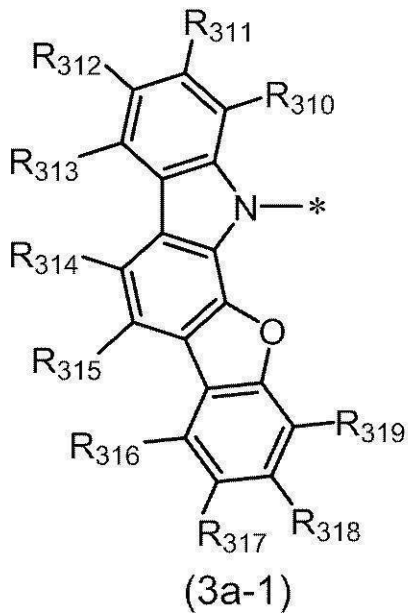
化合物M3において、 $\text{X}_{31}$ 、 $\text{X}_{32}$ 、 $\text{X}_{33}$ 、 $\text{X}_{34}$ 、 $\text{X}_{35}$ 及び $\text{X}_{36}$ は、酸素原子であることも好ましい。

【0078】

化合物M3において、 $\text{X}_{31}$ が酸素原子である場合、例えば、前記一般式(3a)は、下記一般式(3a-1)で表され、 $\text{X}_{31}$ が硫黄原子である場合、例えば、前記一般式(3a)は、下記一般式(3a-2)で表され、 $\text{X}_{31}$ が $\text{NR}_{371}$ である場合、例えば、前記一般式(3a)は、下記一般式(3a-3)で表され、 $\text{X}_{31}$ が $\text{SiR}_{372}\text{R}_{373}$ である場合、例えば、前記一般式(3a)は、下記一般式(3a-4)で表される。

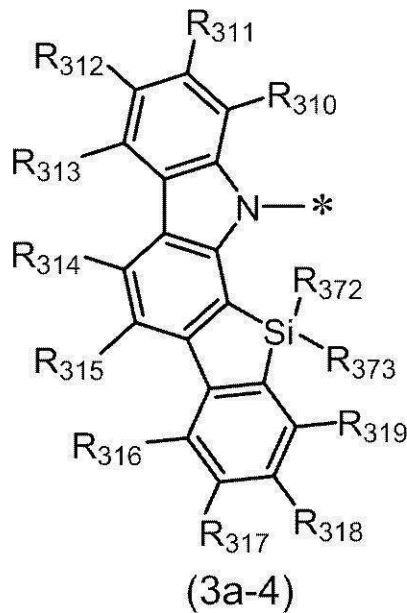
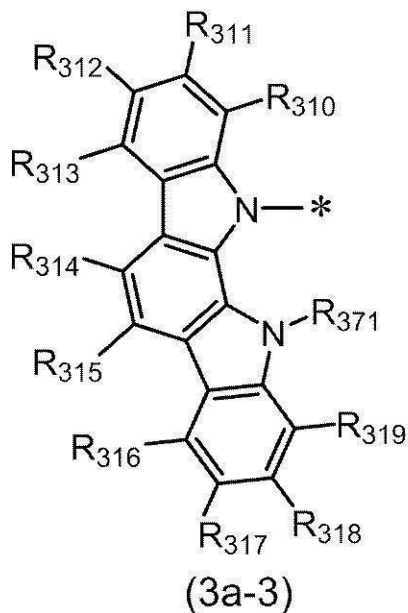
【0079】

【化20】



【0080】

【化21】



10

20

30

40

50

## 【0081】

化合物M3において、

R<sub>310</sub>及びR<sub>311</sub>の組、R<sub>311</sub>及びR<sub>312</sub>の組、R<sub>312</sub>及びR<sub>313</sub>の組、R<sub>314</sub>及びR<sub>315</sub>の組、R<sub>316</sub>及びR<sub>317</sub>の組、R<sub>317</sub>及びR<sub>318</sub>の組、並びにR<sub>318</sub>及びR<sub>319</sub>の組は、互いに結合せず、

R<sub>320</sub>及びR<sub>321</sub>の組、R<sub>321</sub>及びR<sub>322</sub>の組、R<sub>322</sub>及びR<sub>323</sub>の組、R<sub>324</sub>及びR<sub>325</sub>の組、R<sub>326</sub>及びR<sub>327</sub>の組、R<sub>327</sub>及びR<sub>328</sub>の組、並びにR<sub>328</sub>及びR<sub>329</sub>の組は、互いに結合せず、

R<sub>330</sub>及びR<sub>331</sub>の組、R<sub>331</sub>及びR<sub>332</sub>の組、R<sub>332</sub>及びR<sub>333</sub>の組、R<sub>335</sub>及びR<sub>336</sub>の組、R<sub>336</sub>及びR<sub>337</sub>の組、並びにR<sub>337</sub>及びR<sub>338</sub>の組は、互いに結合せず、

R<sub>340</sub>及びR<sub>341</sub>の組、R<sub>341</sub>及びR<sub>342</sub>の組、R<sub>342</sub>及びR<sub>343</sub>の組、R<sub>345</sub>及びR<sub>346</sub>の組、R<sub>346</sub>及びR<sub>347</sub>の組、並びにR<sub>347</sub>及びR<sub>348</sub>の組は、互いに結合せず、

R<sub>350</sub>及びR<sub>351</sub>の組、R<sub>351</sub>及びR<sub>352</sub>の組、R<sub>352</sub>及びR<sub>353</sub>の組、R<sub>354</sub>及びR<sub>355</sub>の組、R<sub>355</sub>及びR<sub>356</sub>の組、R<sub>356</sub>及びR<sub>357</sub>の組、並びにR<sub>358</sub>及びR<sub>359</sub>の組は、互いに結合せず、

R<sub>360</sub>及びR<sub>361</sub>の組、R<sub>361</sub>及びR<sub>362</sub>の組、R<sub>362</sub>及びR<sub>363</sub>の組、R<sub>364</sub>及びR<sub>365</sub>の組、R<sub>365</sub>及びR<sub>366</sub>の組、R<sub>366</sub>及びR<sub>367</sub>の組、並びにR<sub>368</sub>及びR<sub>369</sub>の組は、互いに結合しない、ことが好ましい。

## 【0082】

化合物M3において、R<sub>310</sub>～R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub>～R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub>～R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub>～R<sub>349</sub>、R<sub>350</sub>～R<sub>359</sub>及びR<sub>360</sub>～R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基であることが好ましい。

## 【0083】

化合物M3において、R<sub>310</sub>～R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub>～R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub>～R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub>～R<sub>349</sub>、R<sub>350</sub>～R<sub>359</sub>及びR<sub>360</sub>～R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であることがより好ましい。

## 【0084】

化合物M3において、R<sub>310</sub>～R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub>～R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub>～R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub>～R<sub>349</sub>、R<sub>350</sub>～R<sub>359</sub>及びR<sub>360</sub>～R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることがさらに好ましい。

## 【0085】

化合物M3において、R<sub>310</sub>～R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub>～R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub>～R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub>～R<sub>349</sub>、R<sub>350</sub>～R<sub>359</sub>及びR<sub>360</sub>～R<sub>369</sub>は、水素原子であることがよりさらに好ましい。

## 【0086】

・本実施形態の化合物M3の製造方法

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

## 【0087】

・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。

## 【0088】

10

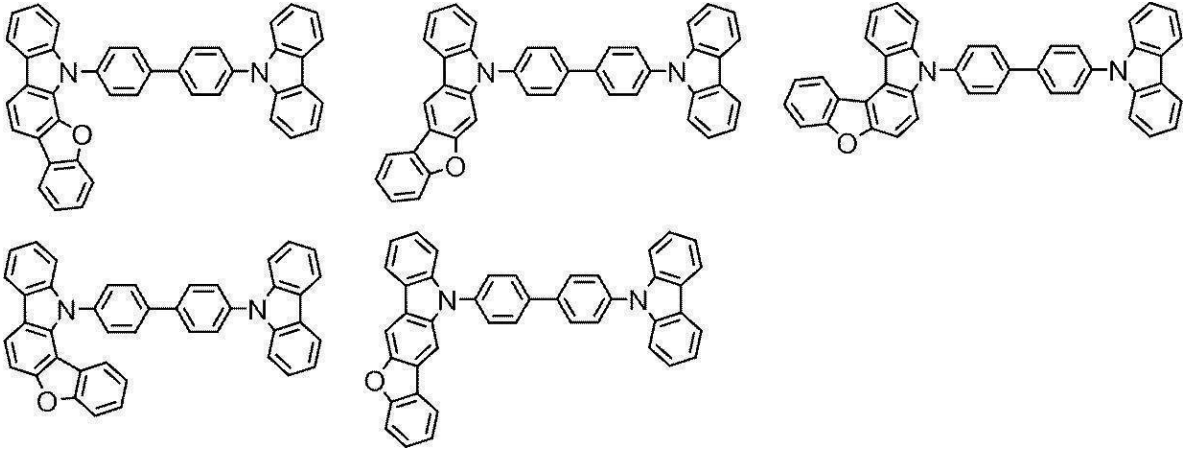
20

30

40

50

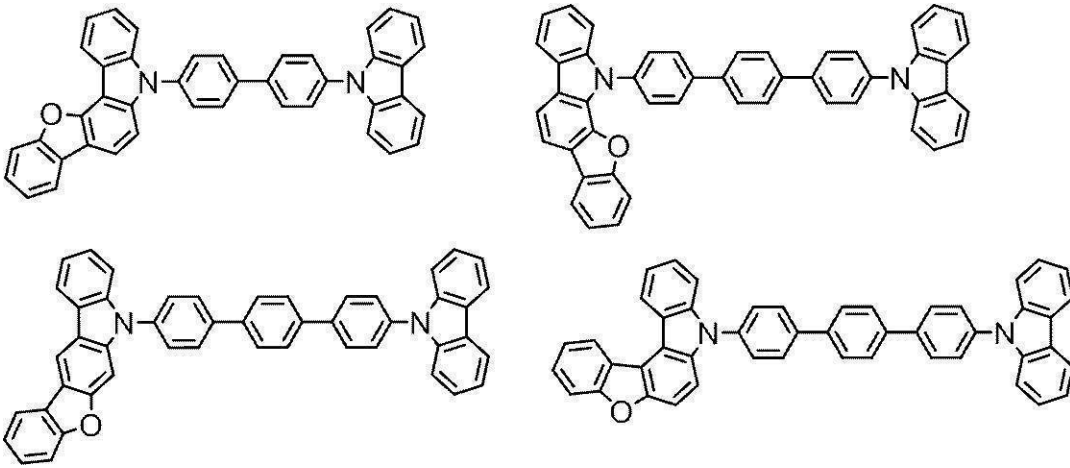
【化 2 2】



10

【 0 0 8 9】

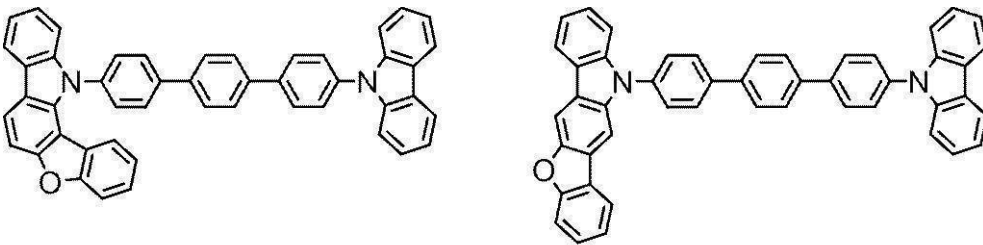
【化 2 3】



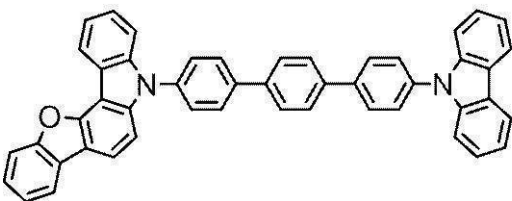
20

【 0 0 9 0】

【化 2 4】



30

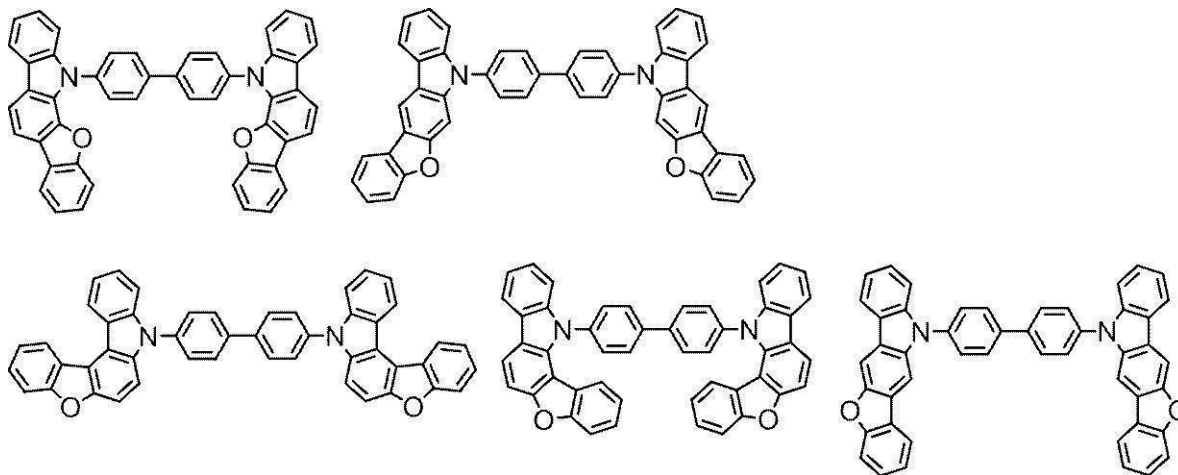


【 0 0 9 1】

40

50

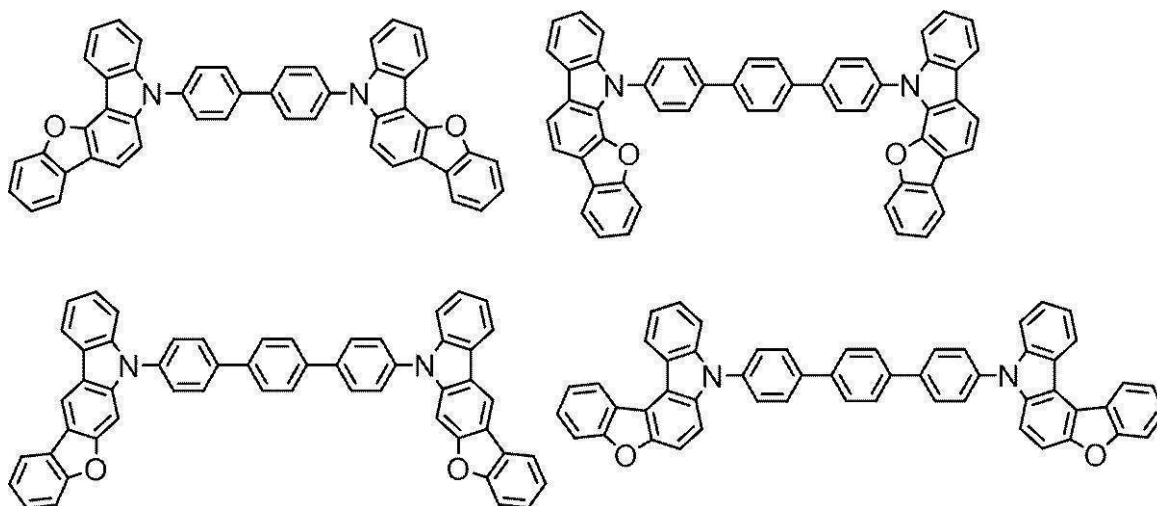
## 【化 2 5】



10

## 【 0 0 9 2】

## 【化 2 6】

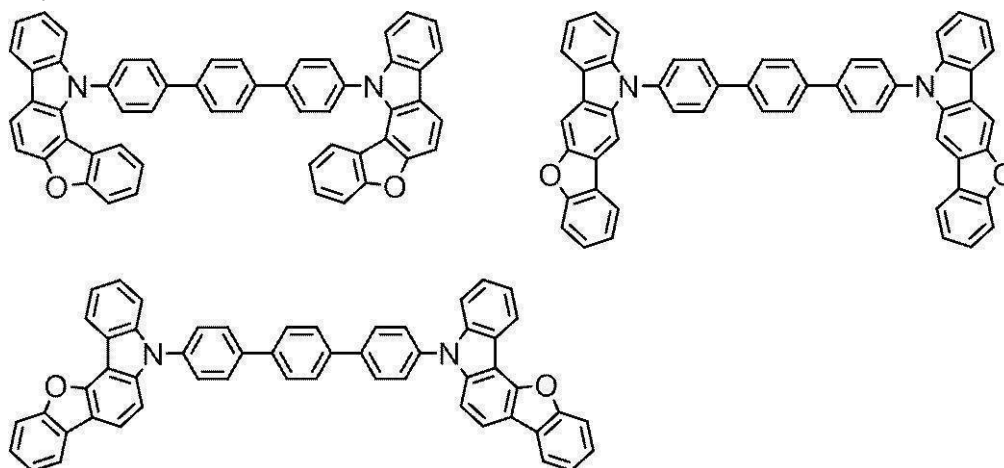


20

30

## 【 0 0 9 3】

## 【化 2 7】

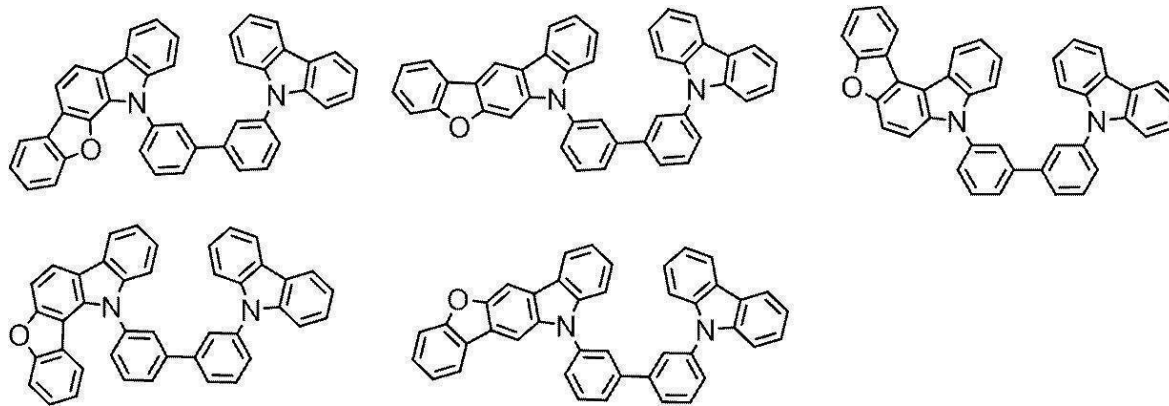


40

## 【 0 0 9 4】

50

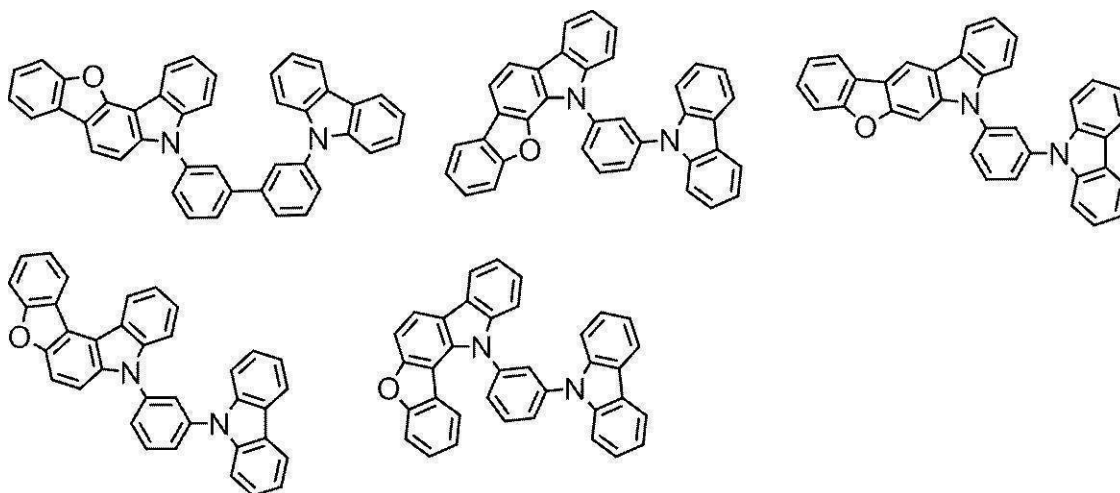
【化 2 8】



10

【 0 0 9 5】

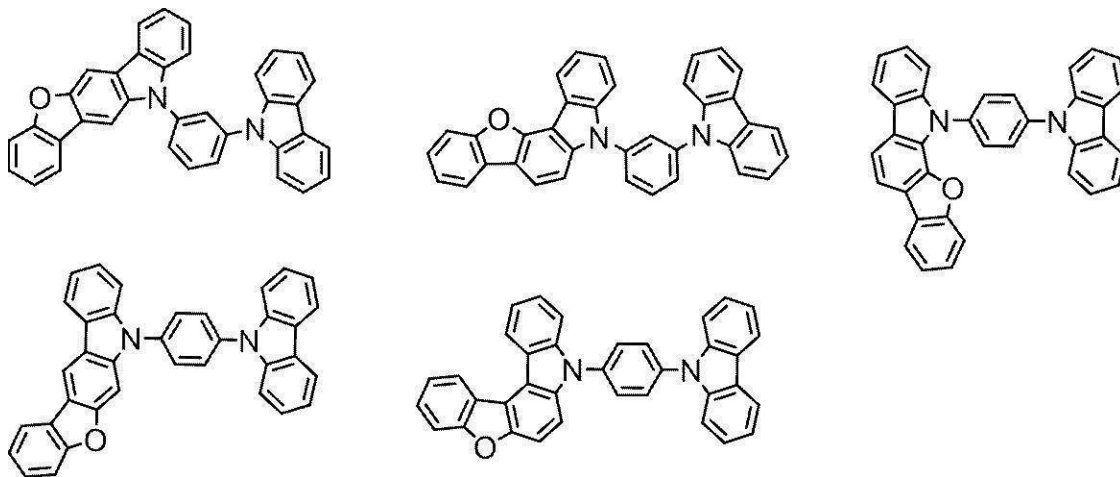
【化 2 9】



20

【 0 0 9 6】

【化 3 0】



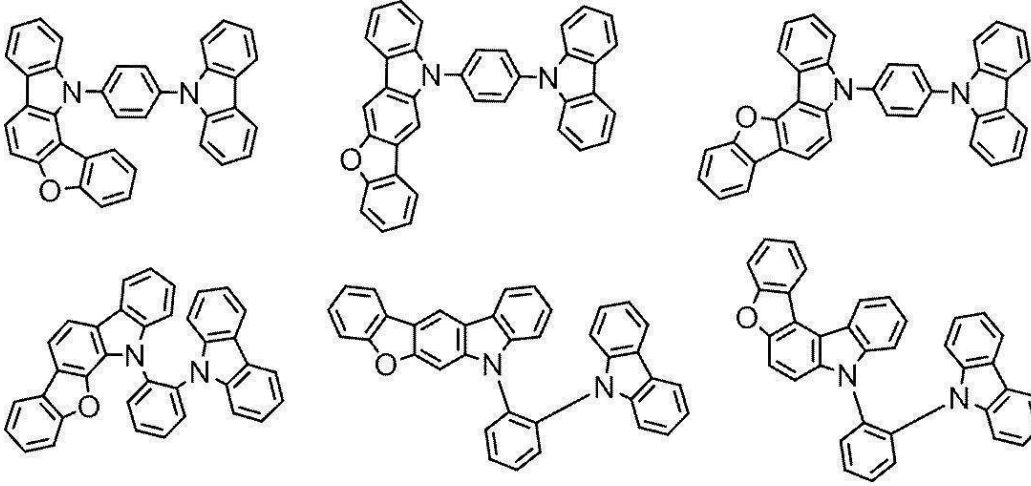
30

40

【 0 0 9 7】

50

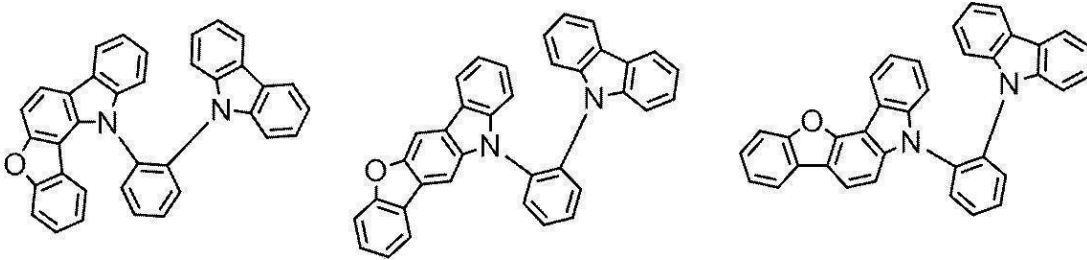
【化 3 1】



10

【 0 0 9 8】

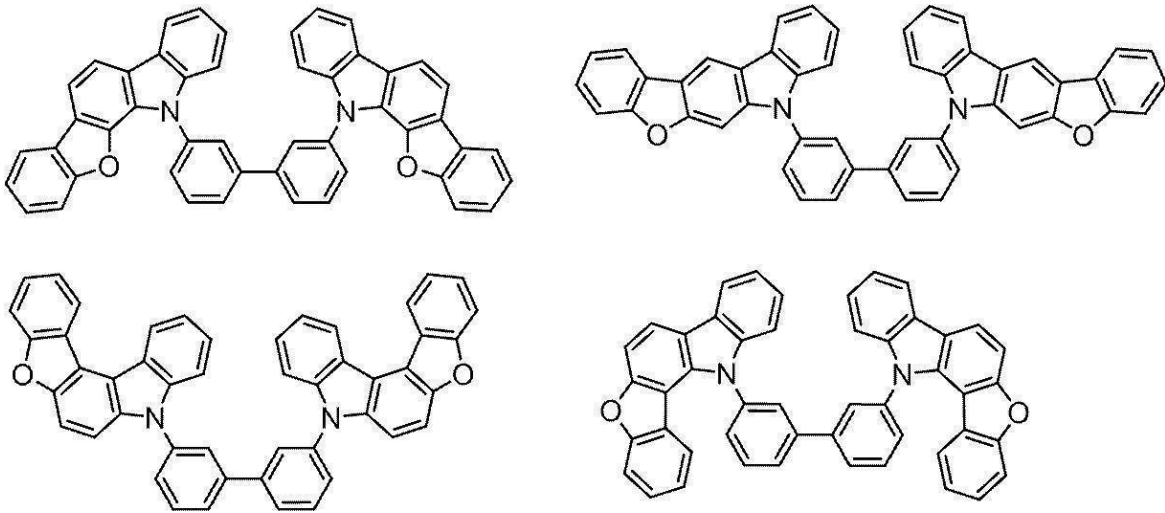
【化 3 2】



20

【 0 0 9 9】

【化 3 3】



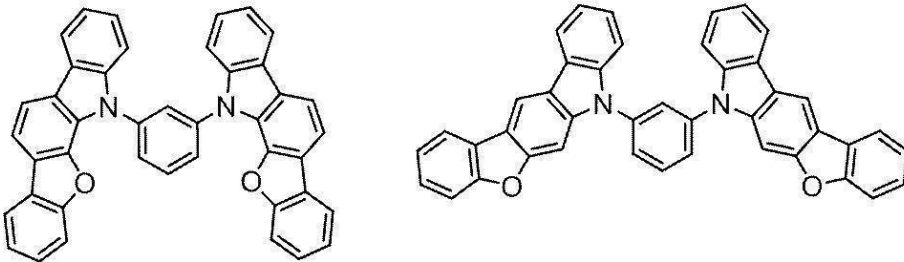
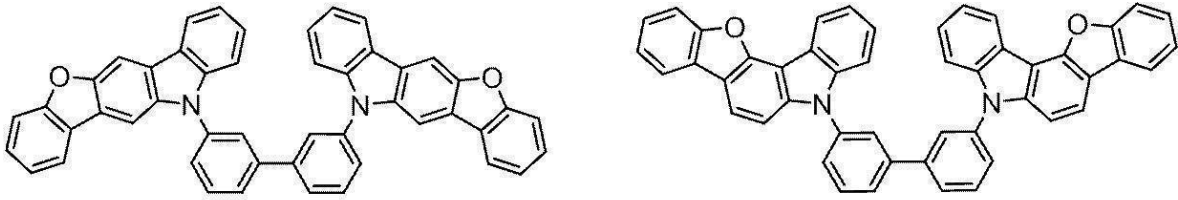
30

40

【 0 1 0 0】

50

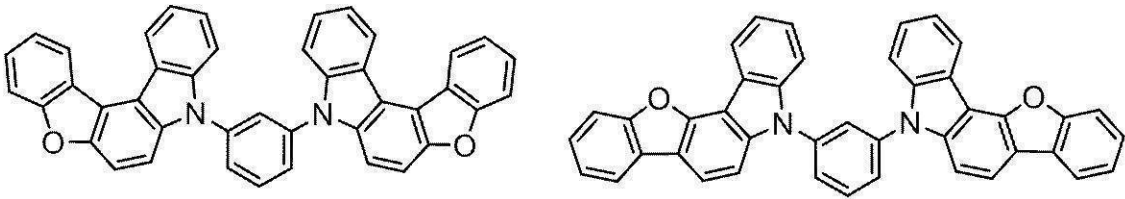
【化 3 4】



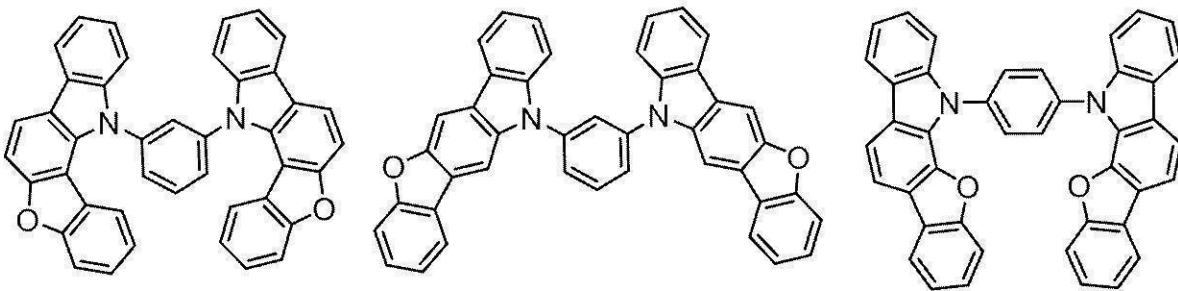
10

【 0 1 0 1】

【化 3 5】



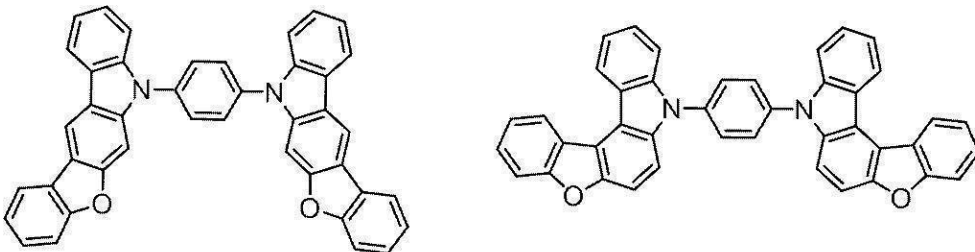
20



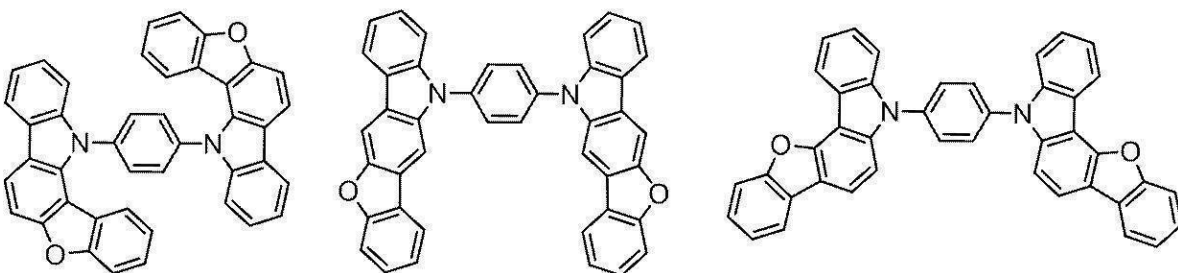
30

【 0 1 0 2】

【化 3 6】



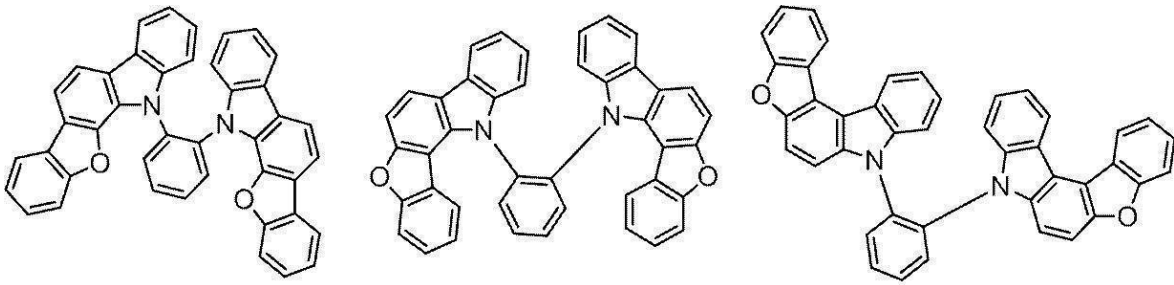
40



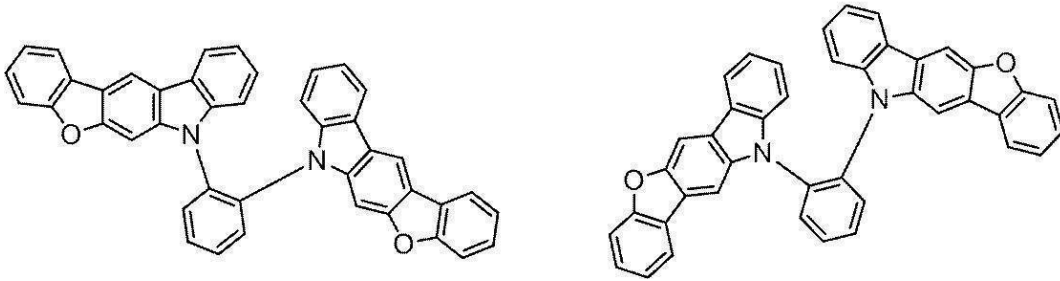
50

【 0 1 0 3 】

【 化 3 7 】

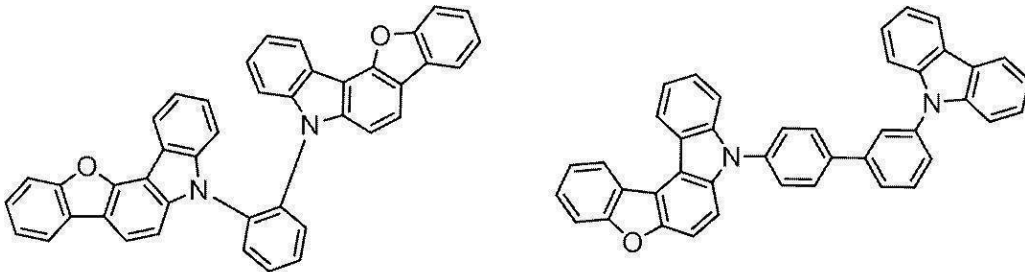


10

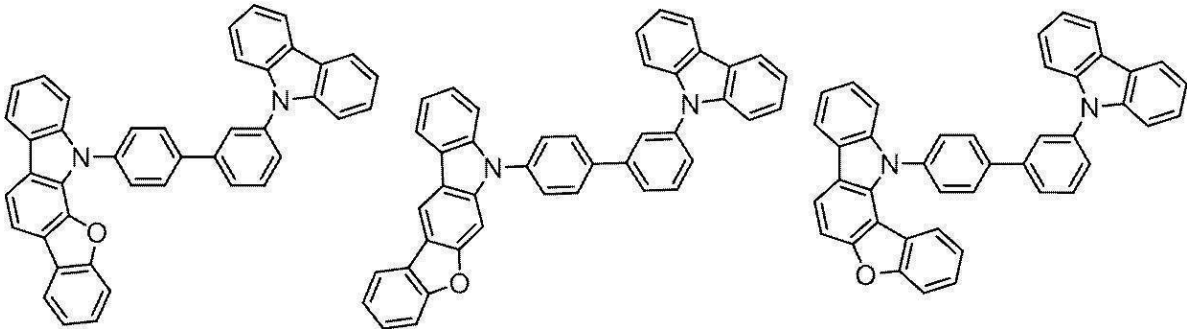


【 0 1 0 4 】

【 化 3 8 】



20



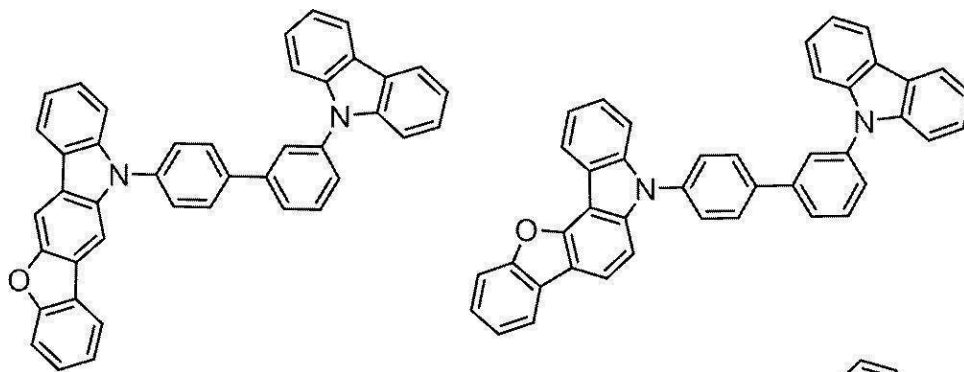
30

【 0 1 0 5 】

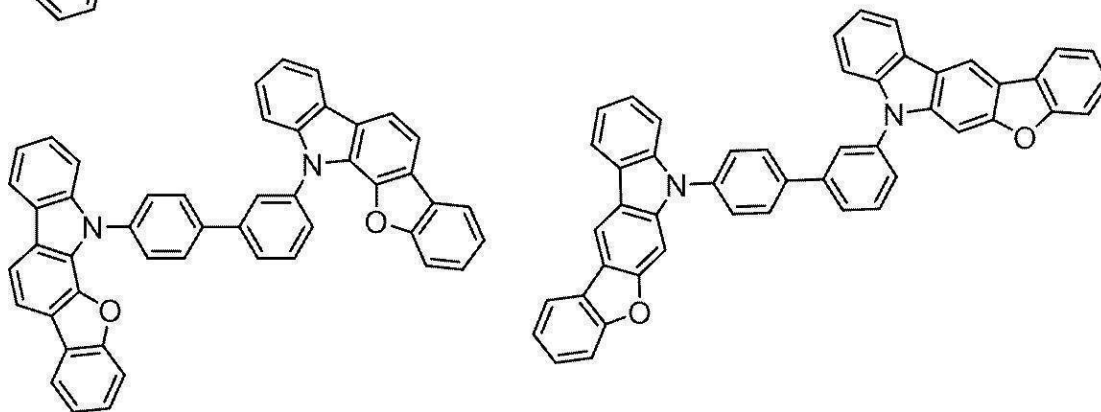
40

50

【化 3 9】



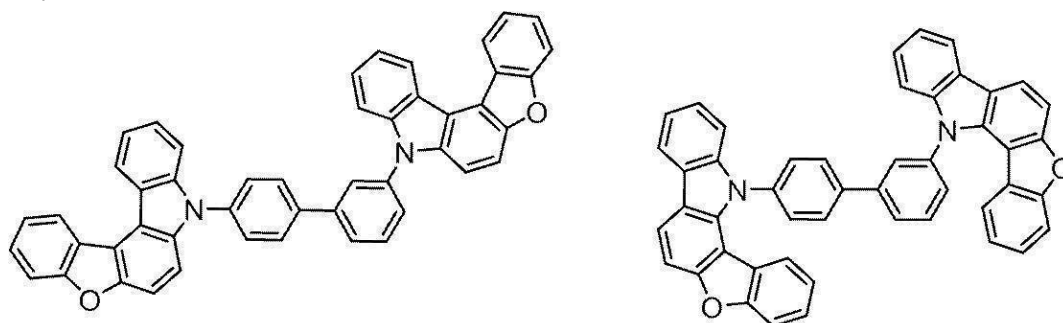
10



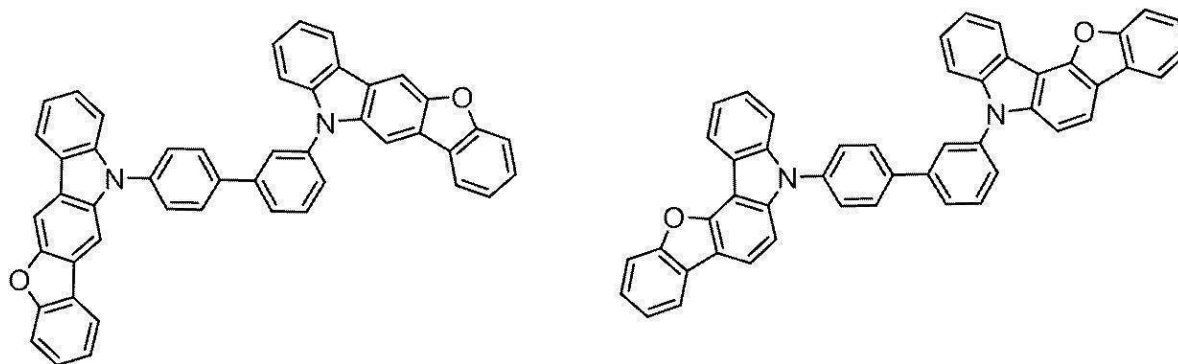
20

【 0 1 0 6】

【化 4 0】



30

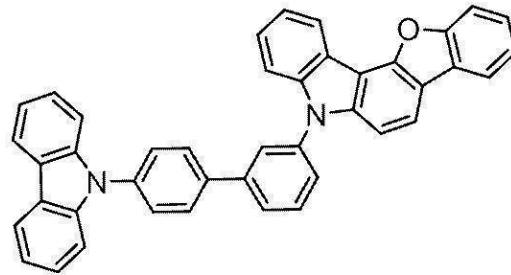
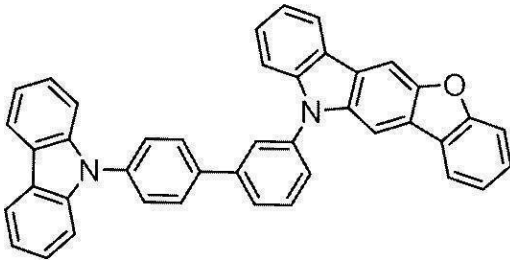
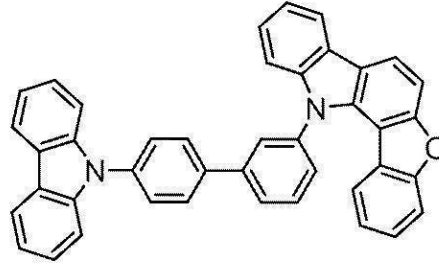
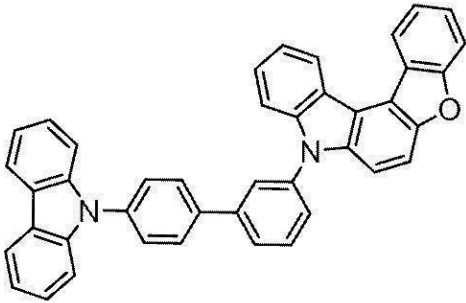
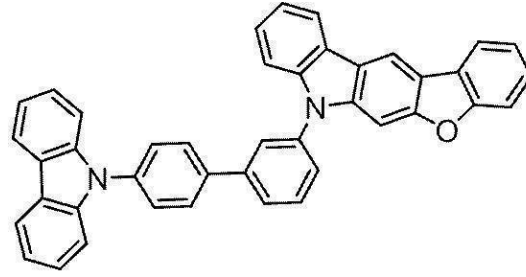
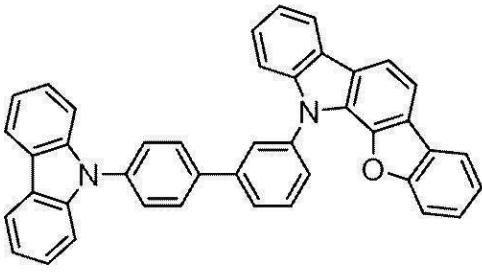


40

【 0 1 0 7】

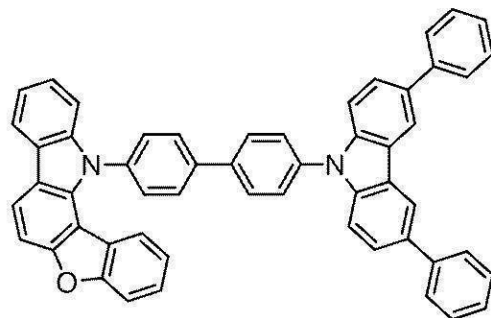
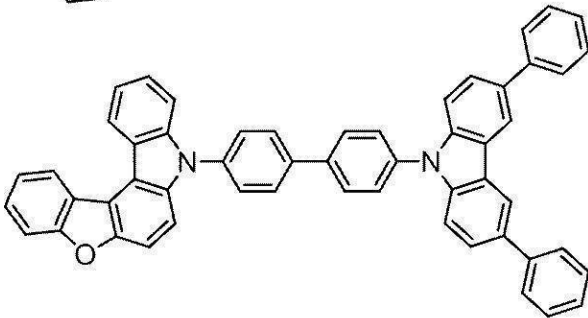
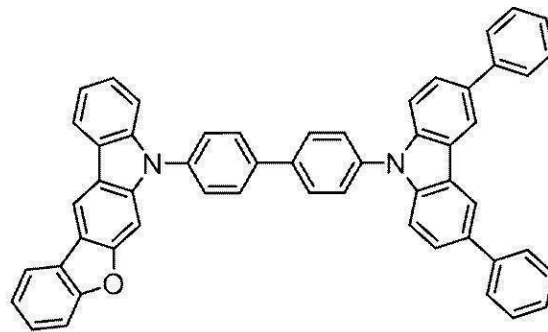
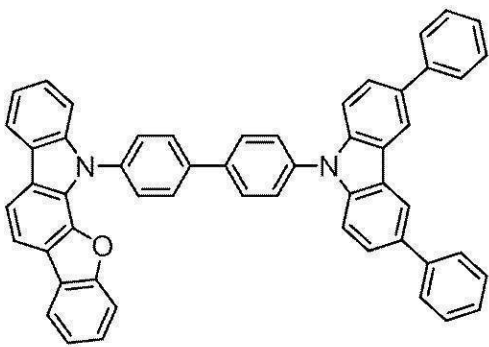
50

【化 4 1】



【 0 1 0 8】

【化 4 2】



【 0 1 0 9】

10

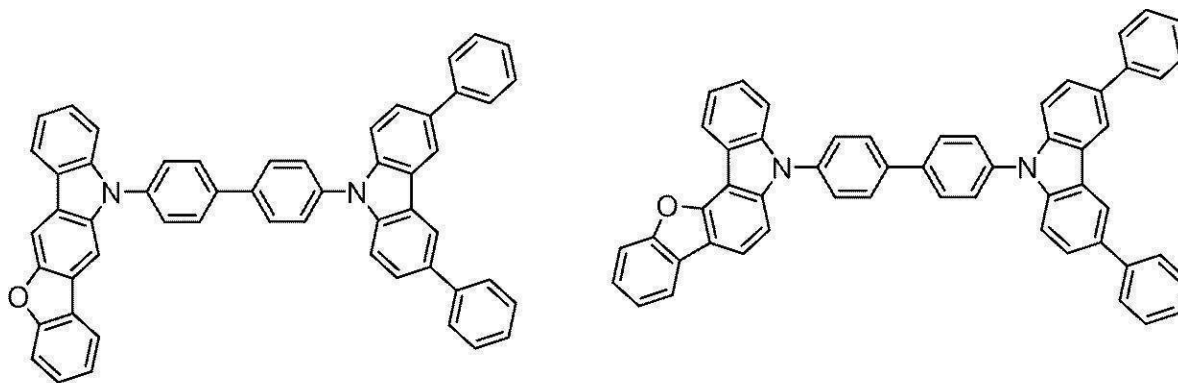
20

30

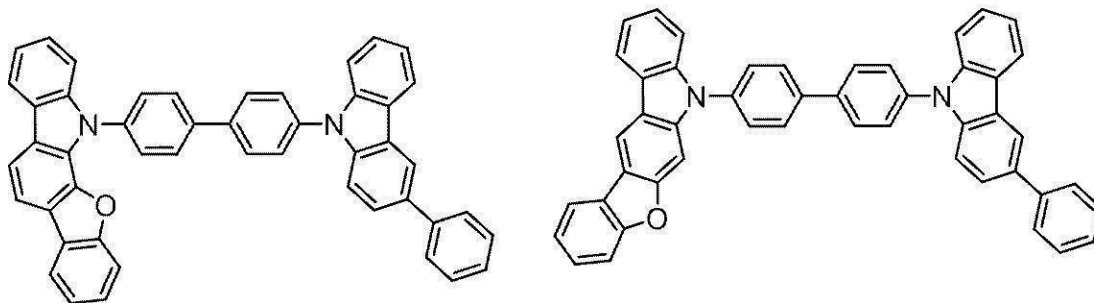
40

50

【化 4 3】



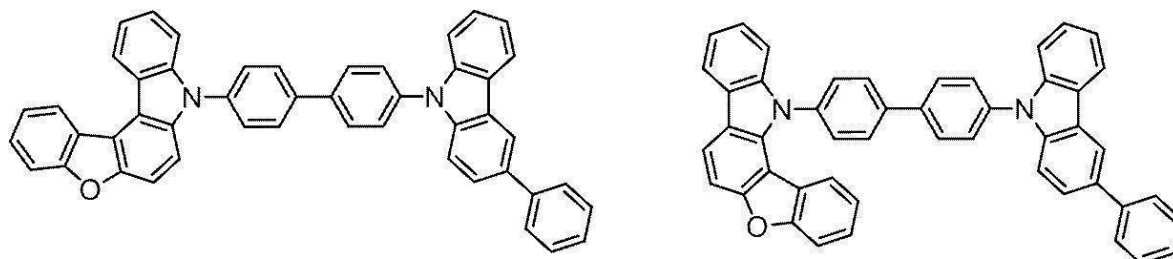
10



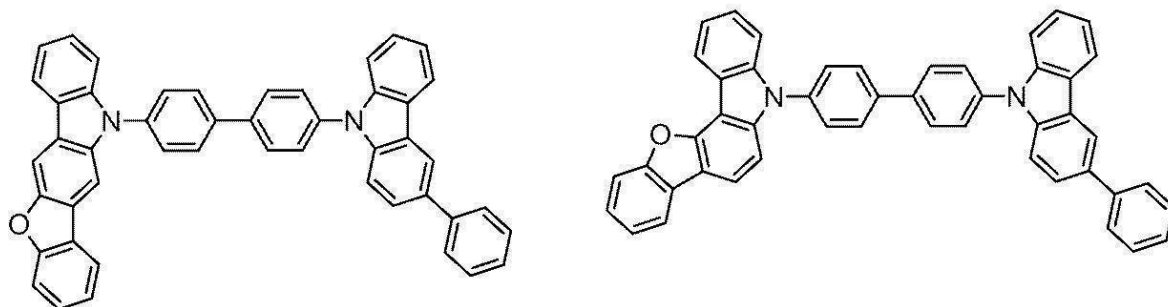
20

【 0 1 1 0】

【化 4 4】



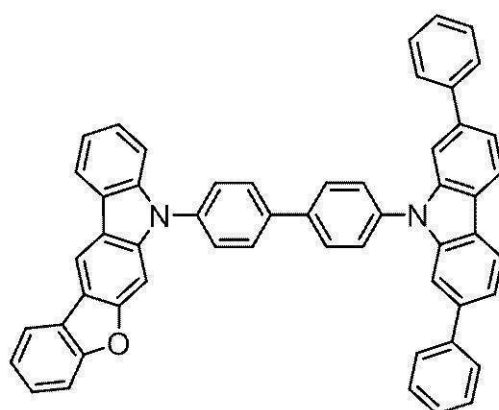
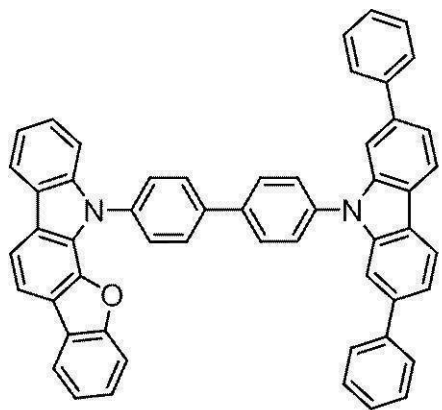
30



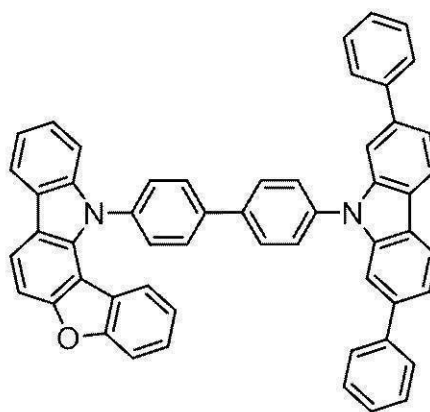
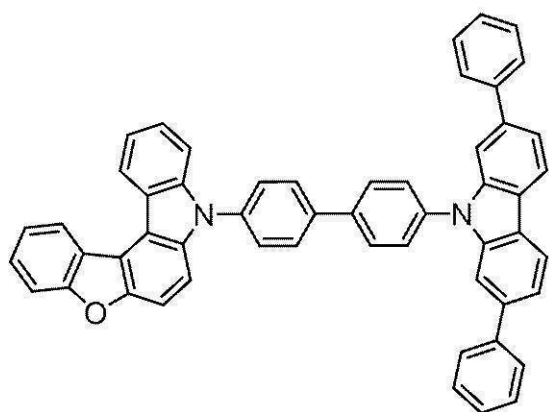
【 0 1 1 1】

40

【化 4 5】



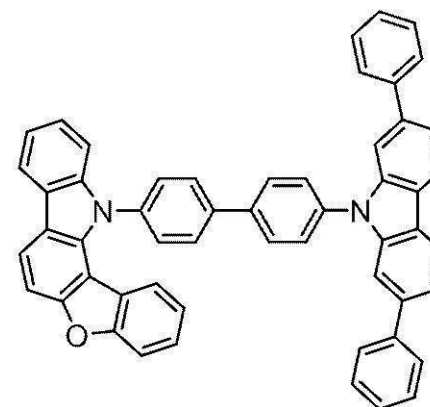
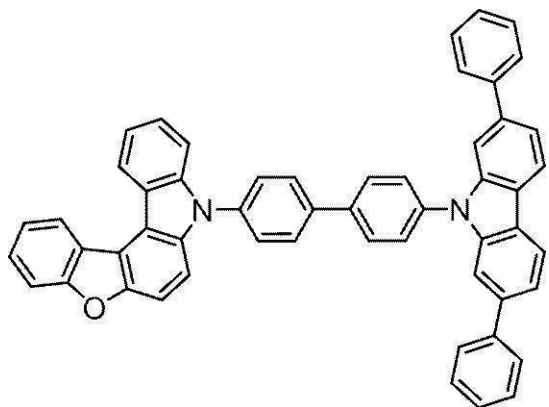
10



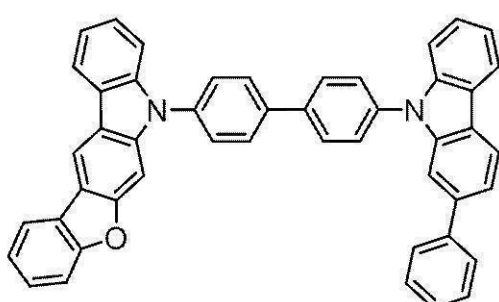
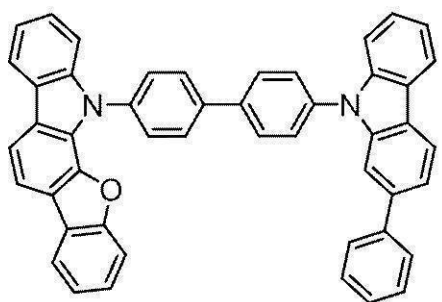
20

【 0 1 1 2】

【化 4 6】



30

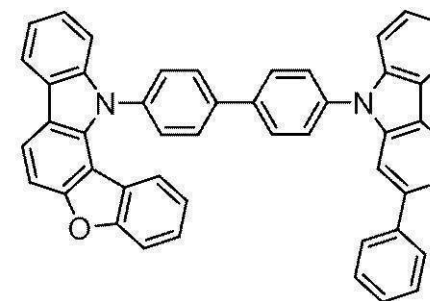
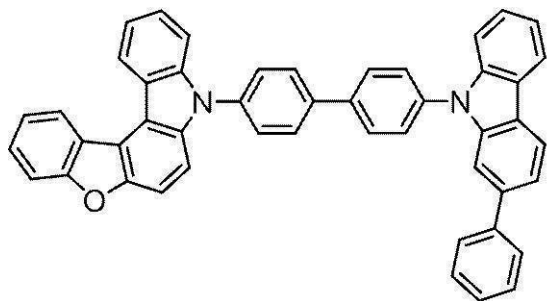
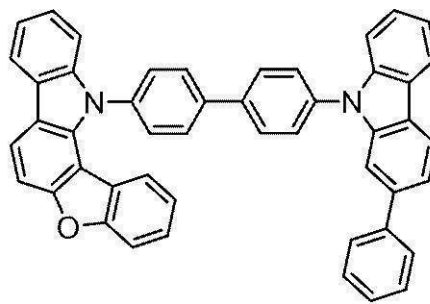
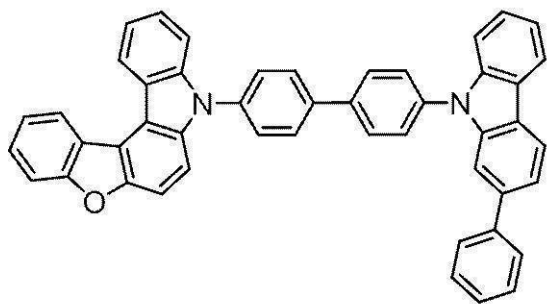


40

【 0 1 1 3】

50

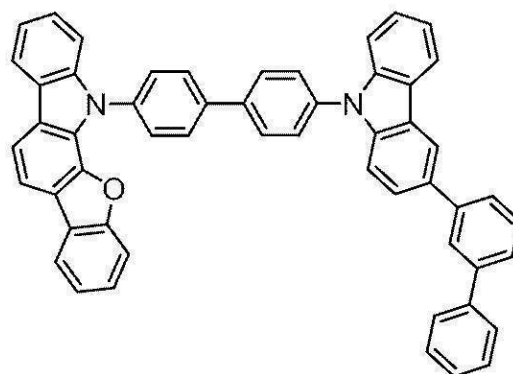
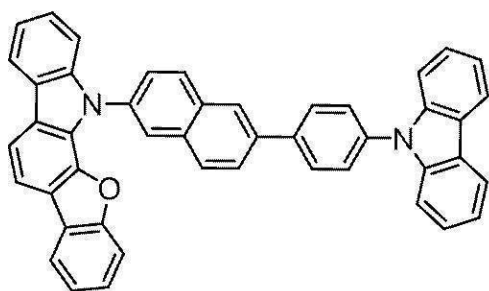
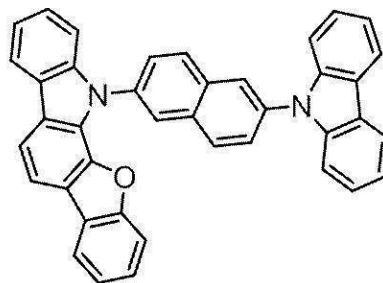
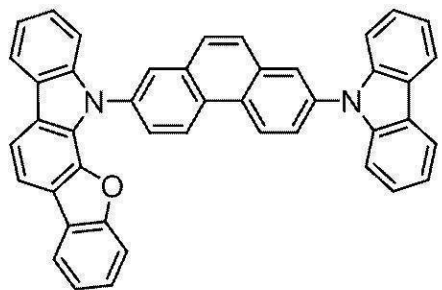
【化 4 7】



10

【 0 1 1 4 】

【化 4 8】



20

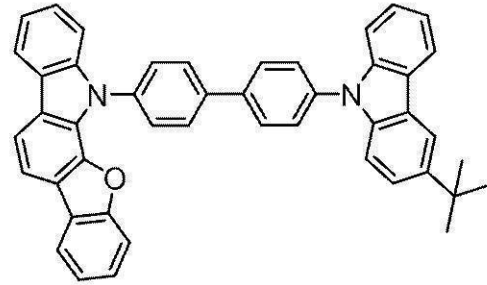
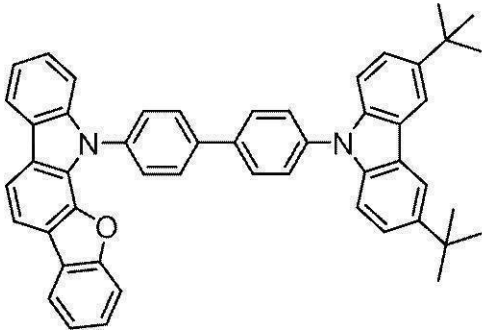
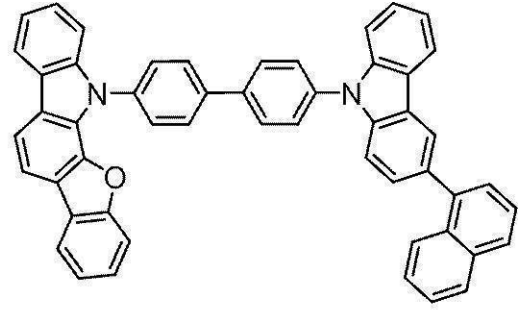
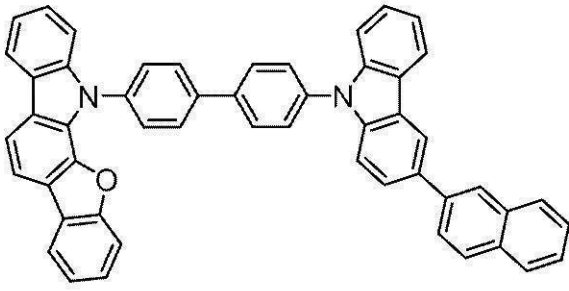
30

【 0 1 1 5 】

40

50

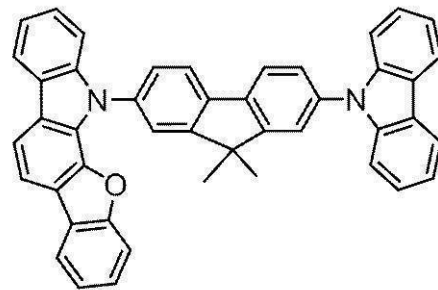
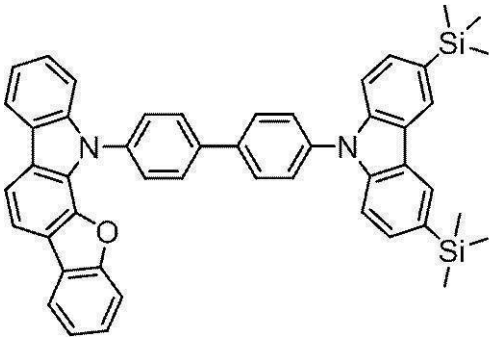
【化 4 9】



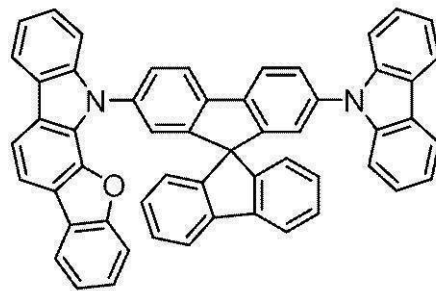
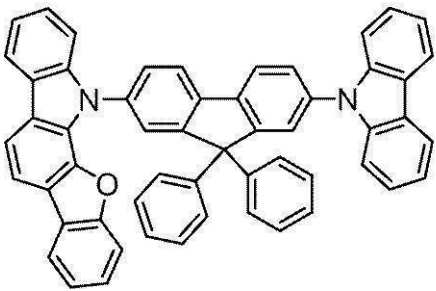
10

【 0 1 1 6】

【化 5 0】



20



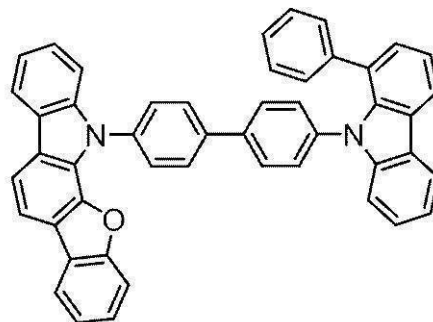
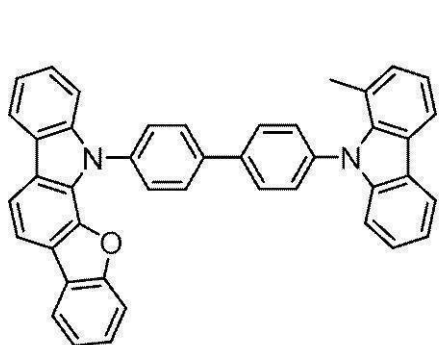
30

【 0 1 1 7】

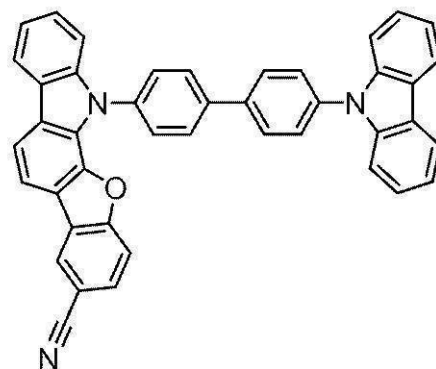
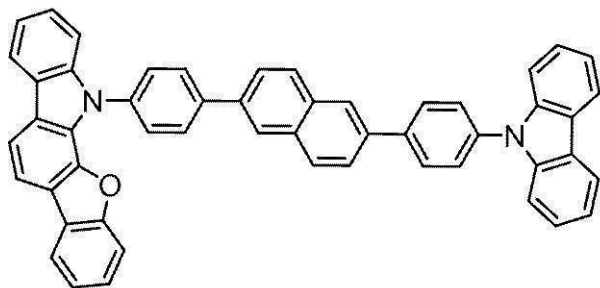
40

50

【化 5 1】



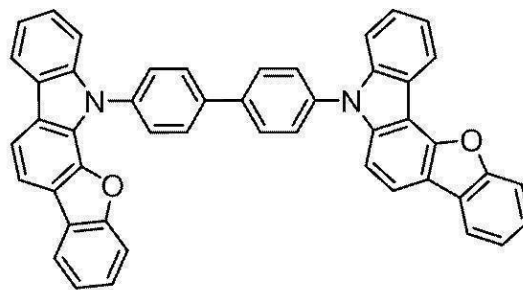
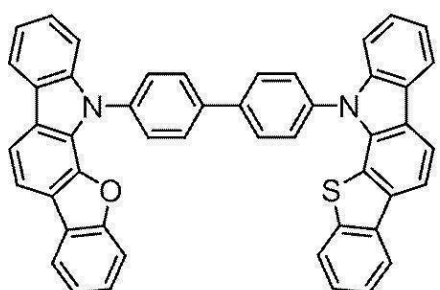
10



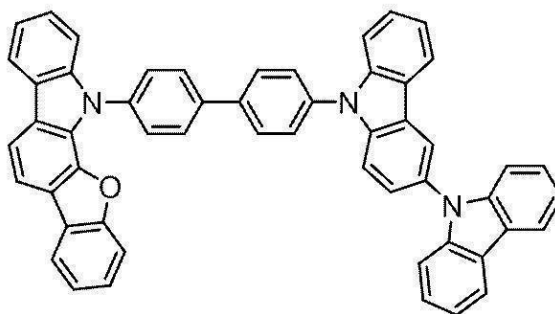
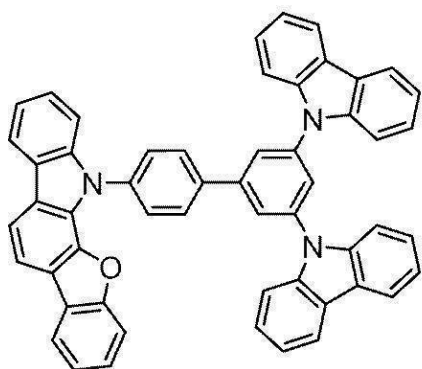
20

【 0 1 1 8】

【化 5 2】



30

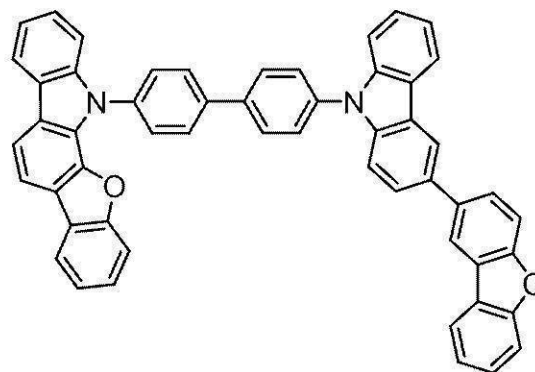
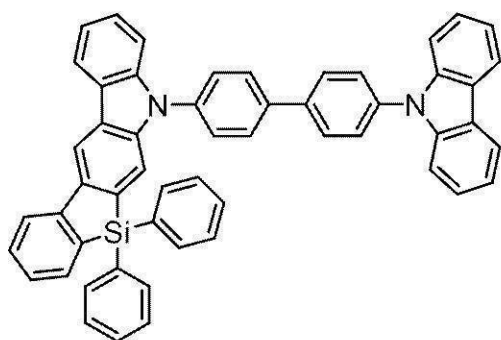
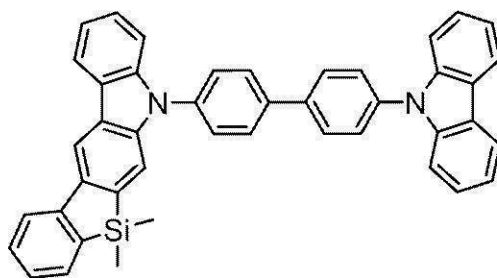
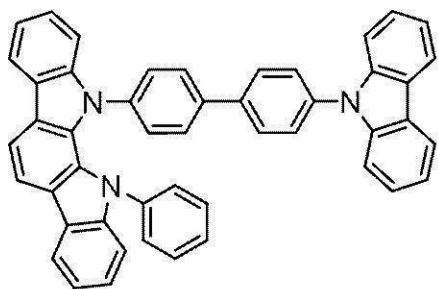


40

【 0 1 1 9】

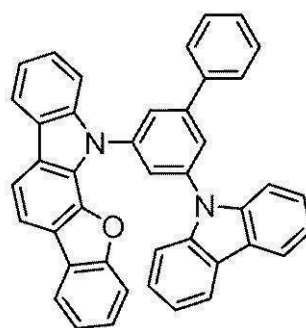
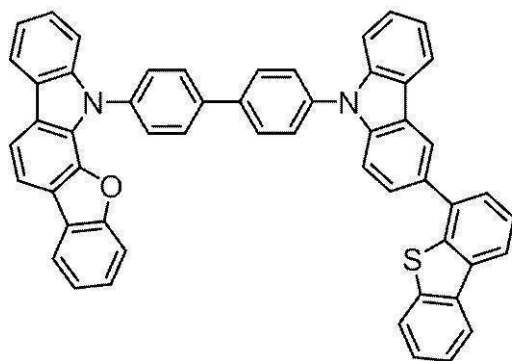
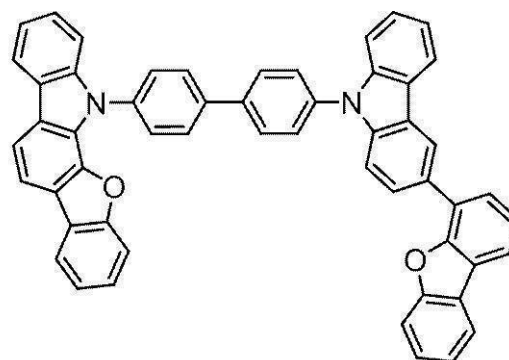
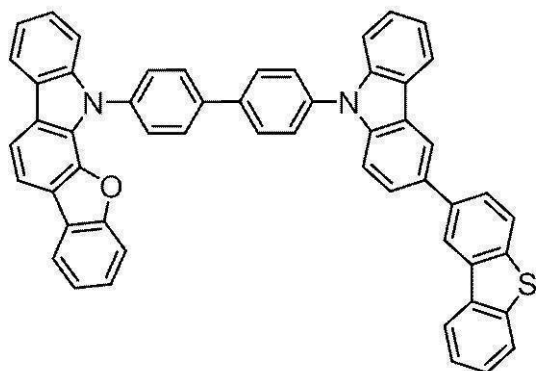
50

【化53】



【0120】

【化54】



【0121】

10

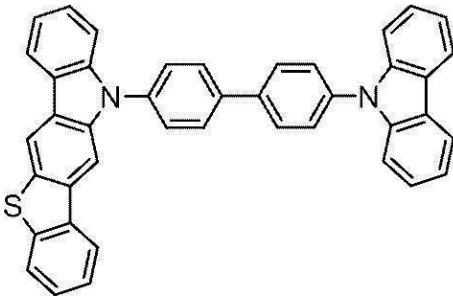
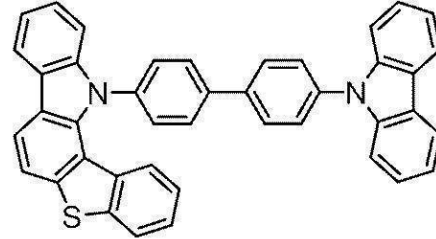
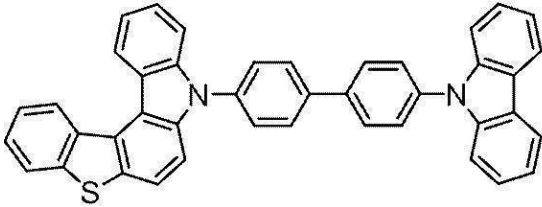
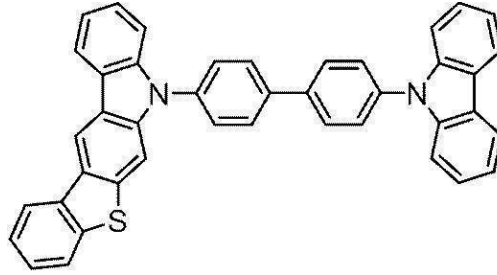
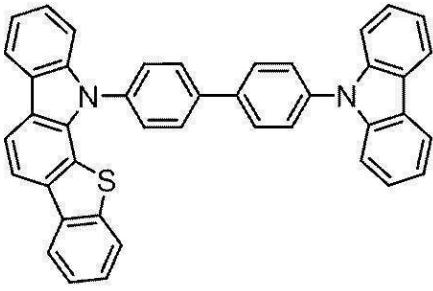
20

30

40

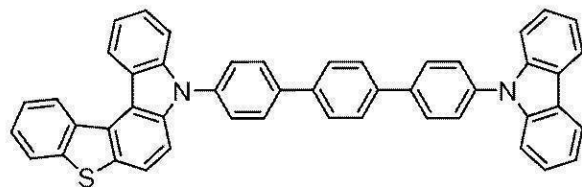
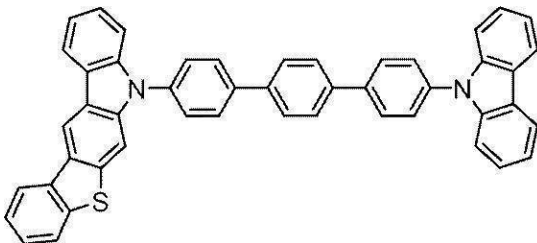
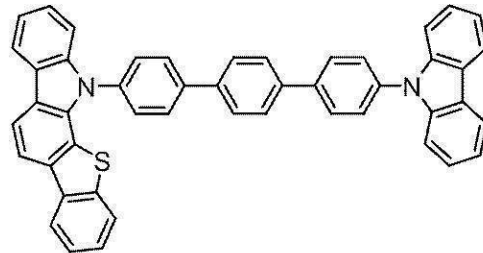
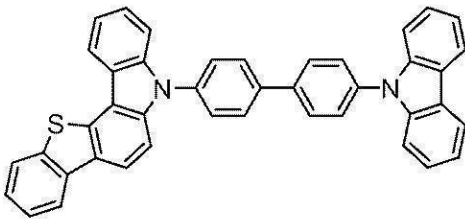
50

【化 5 5】



【 0 1 2 2】

【化 5 6】



【 0 1 2 3】

10

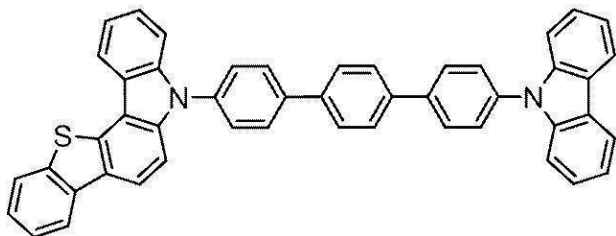
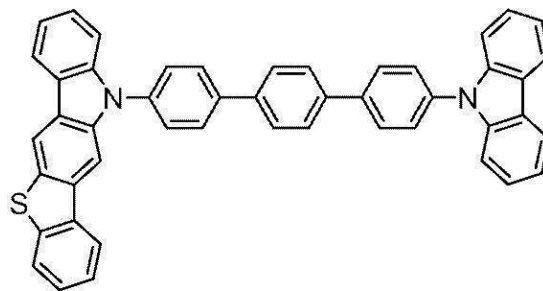
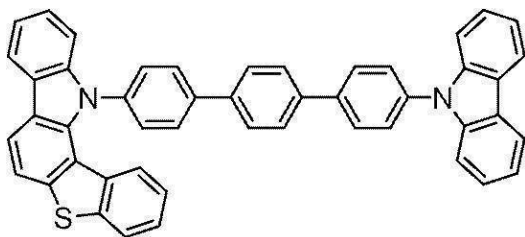
20

30

40

50

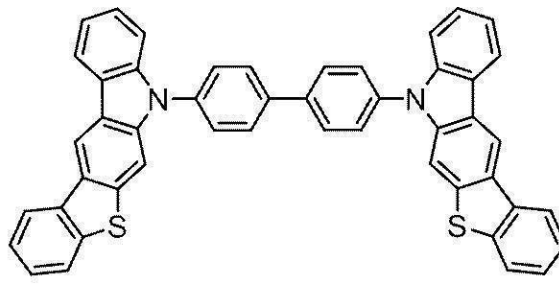
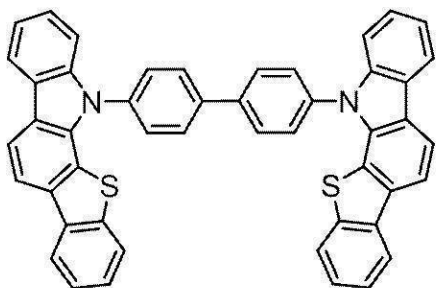
【化57】



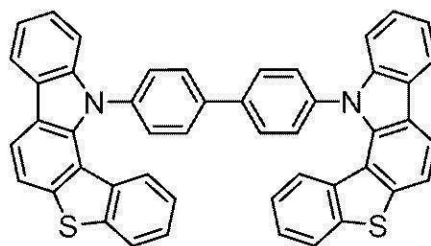
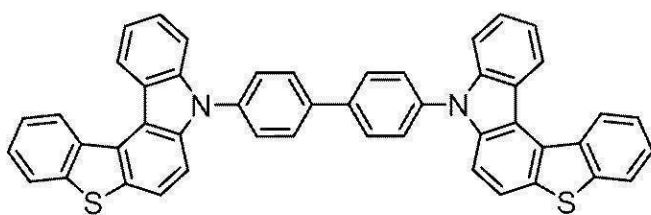
10

【0124】

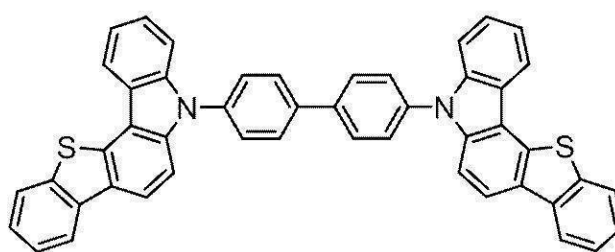
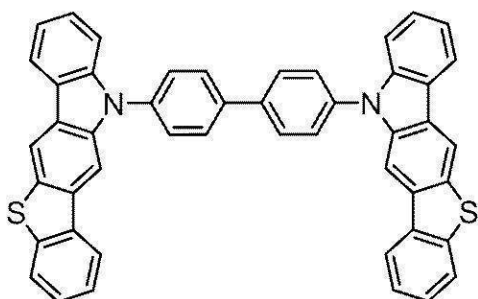
【化58】



20



30

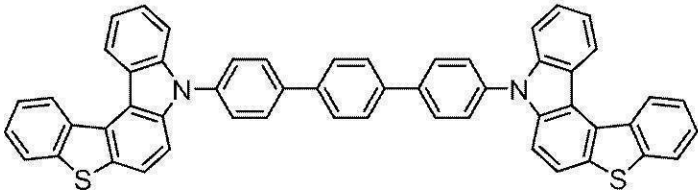
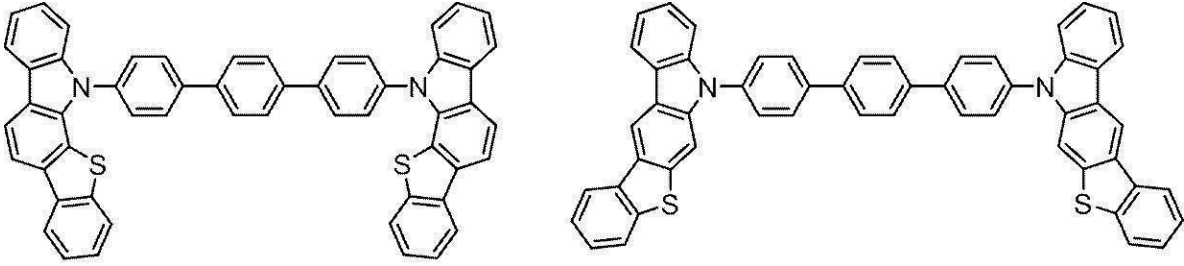


40

【0125】

50

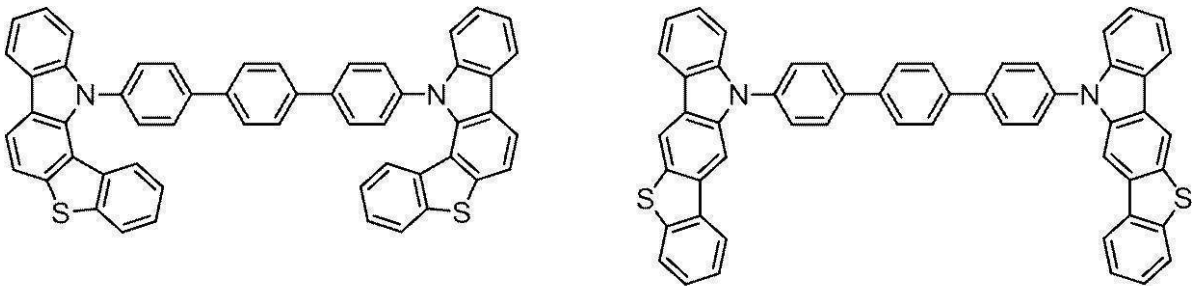
【化 5 9】



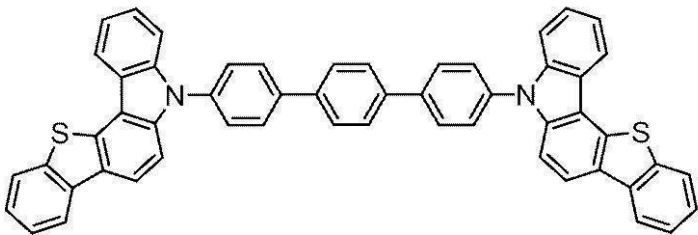
10

【 0 1 2 6】

【化 6 0】



20



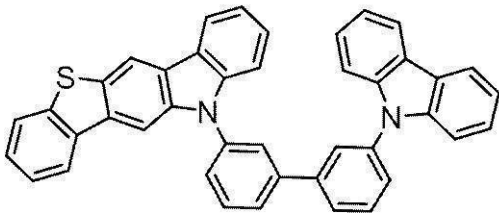
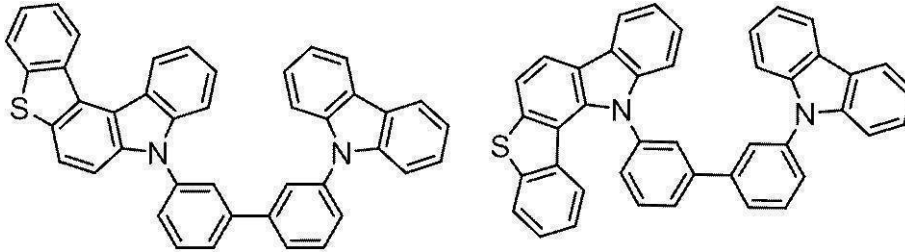
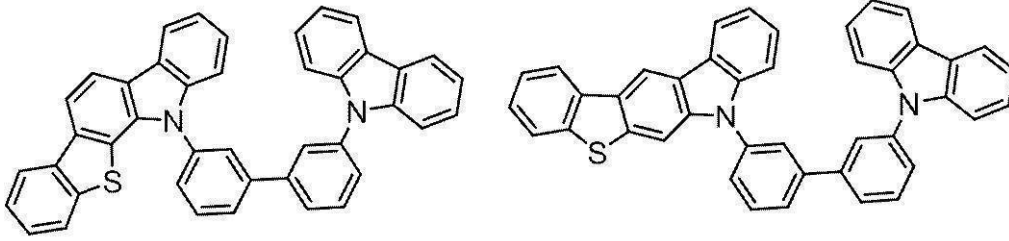
30

【 0 1 2 7】

40

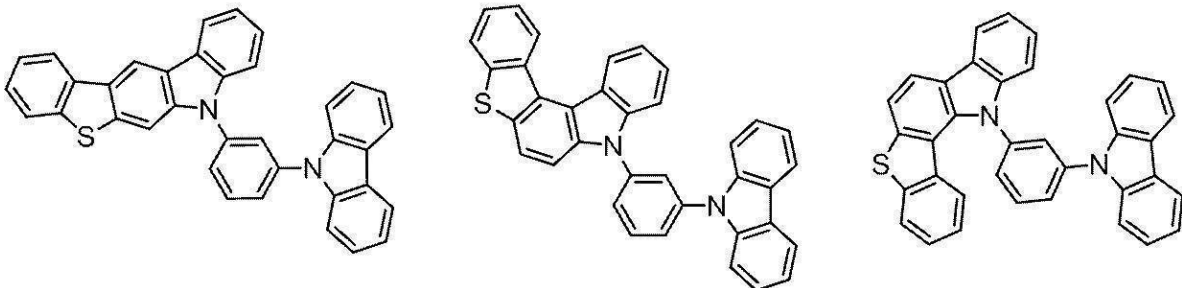
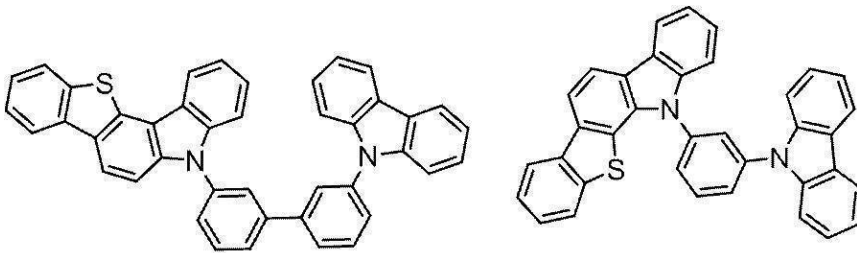
50

【化 6 1】



【 0 1 2 8】

【化 6 2】



【 0 1 2 9】

10

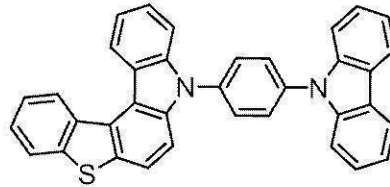
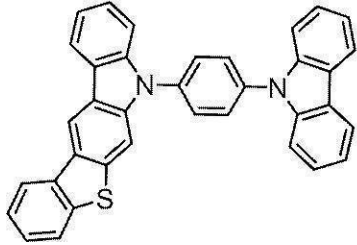
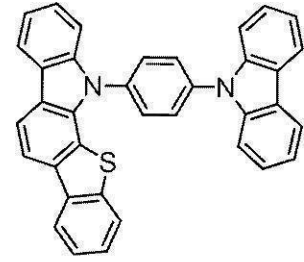
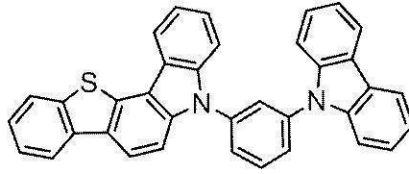
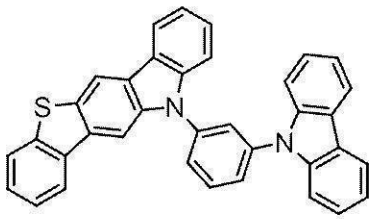
20

30

40

50

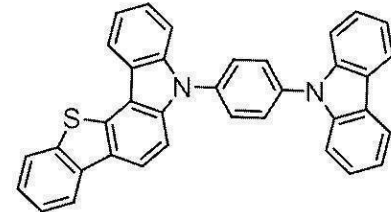
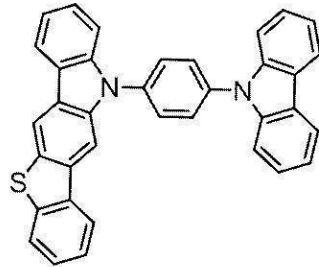
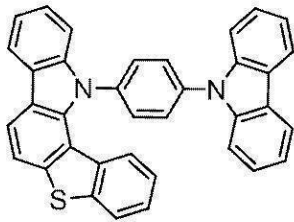
## 【化 6 3】



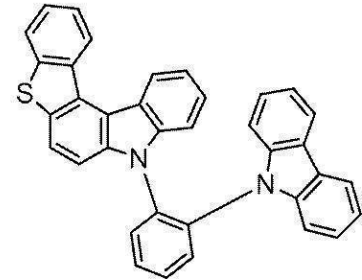
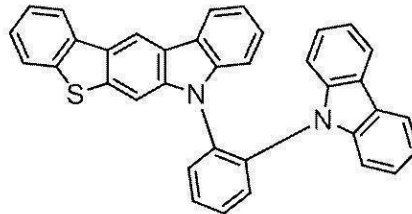
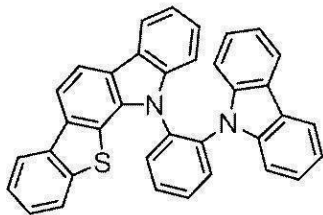
10

## 【 0 1 3 0】

## 【化 6 4】



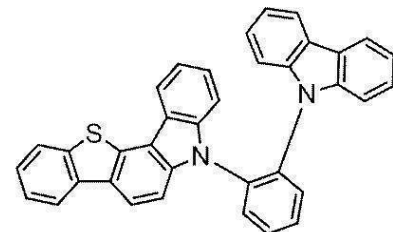
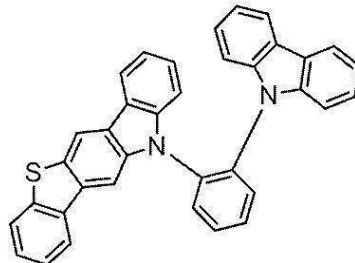
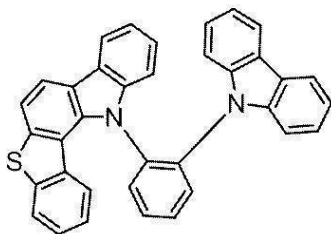
20



30

## 【 0 1 3 1】

## 【化 6 5】

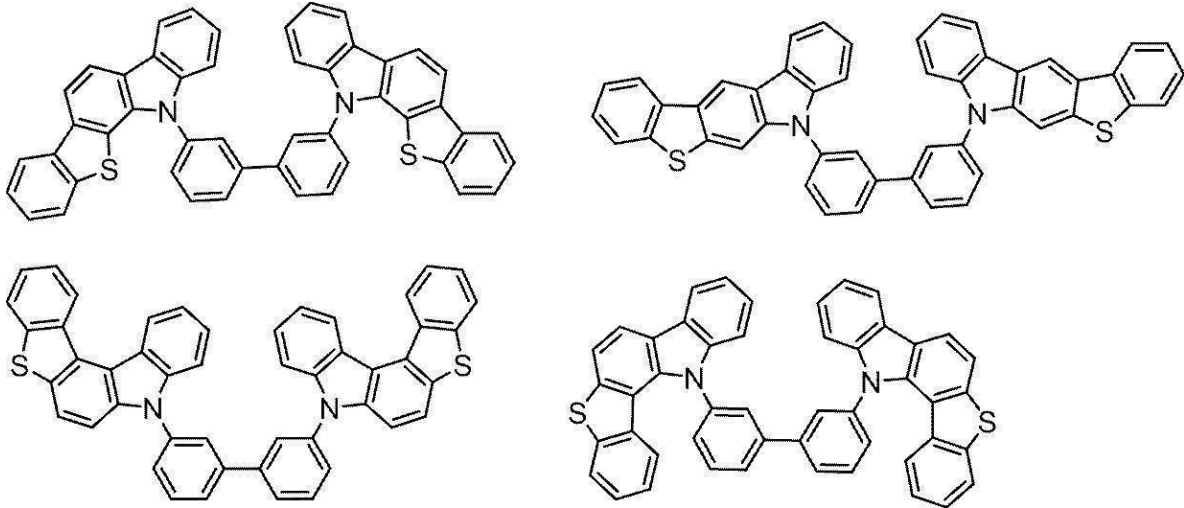


40

## 【 0 1 3 2】

50

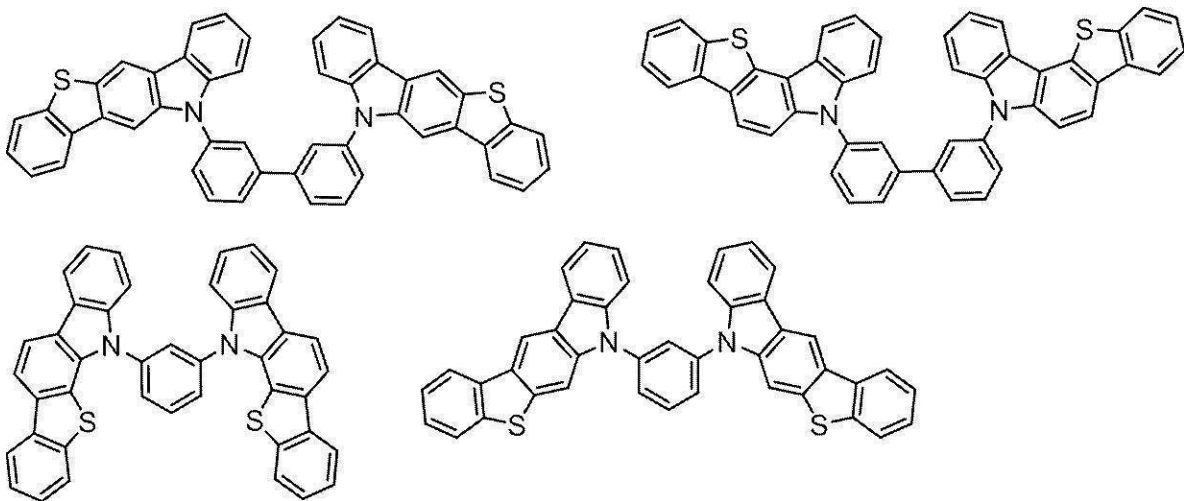
【化 6 6】



10

【 0 1 3 3】

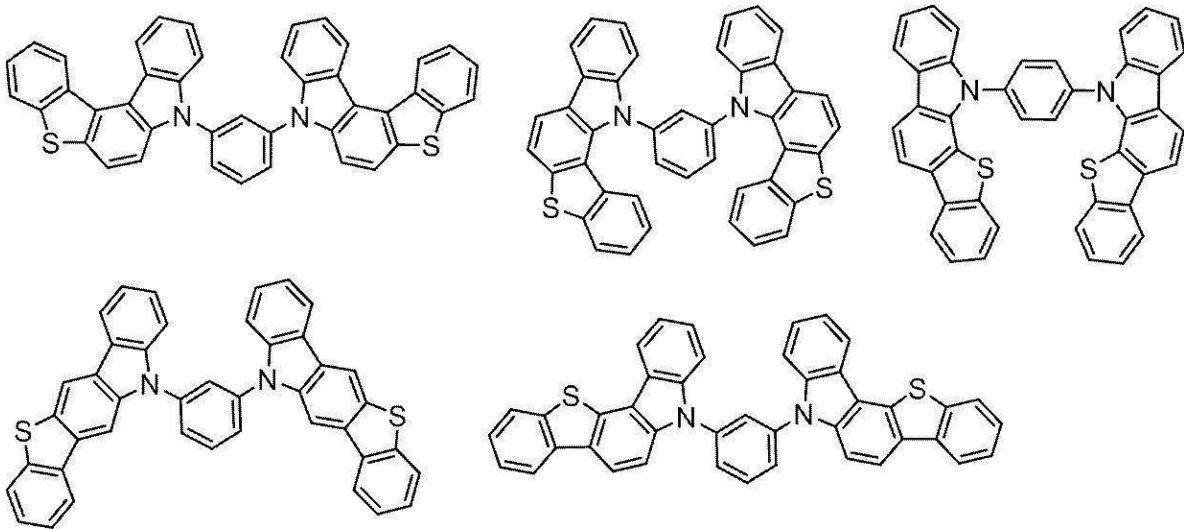
【化 6 7】



20

【 0 1 3 4】

【化 6 8】

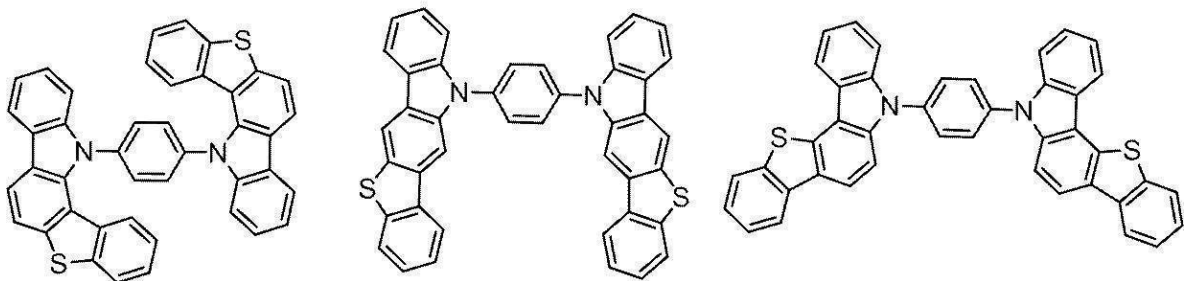
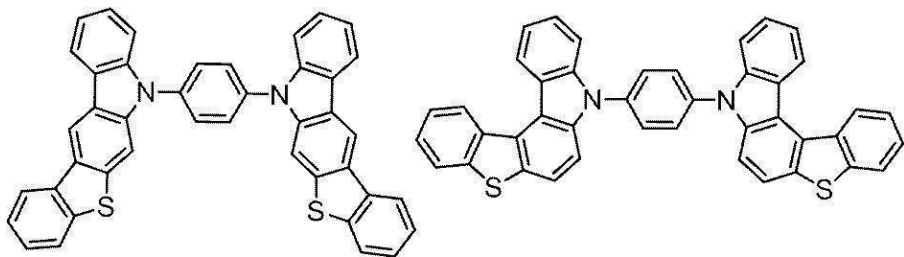


40

【 0 1 3 5】

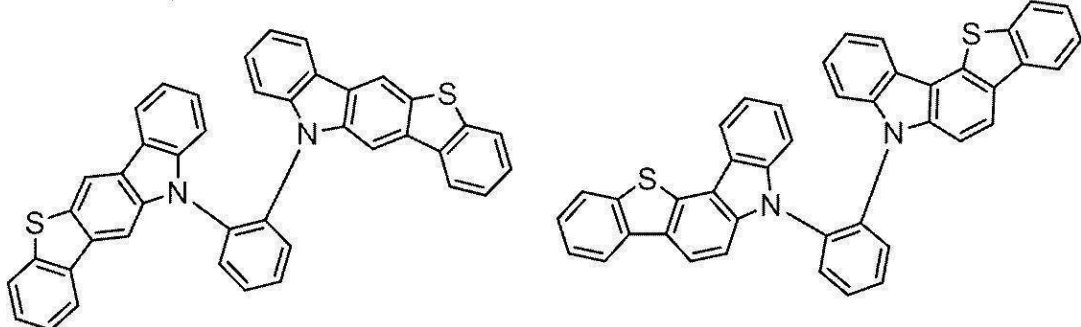
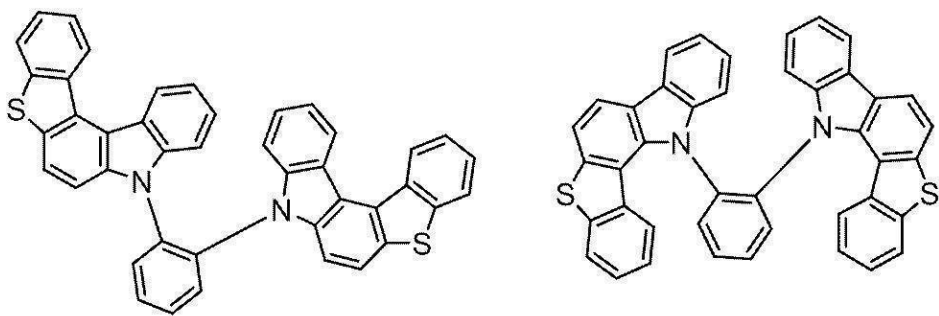
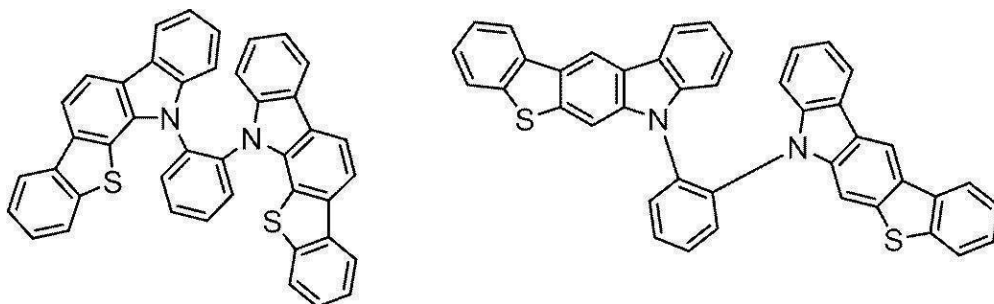
50

【化 6 9】



【 0 1 3 6】

【化 7 0】



【 0 1 3 7】

10

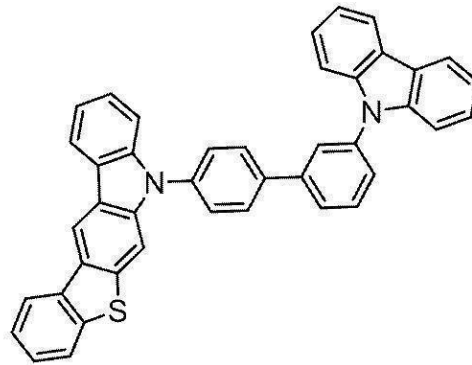
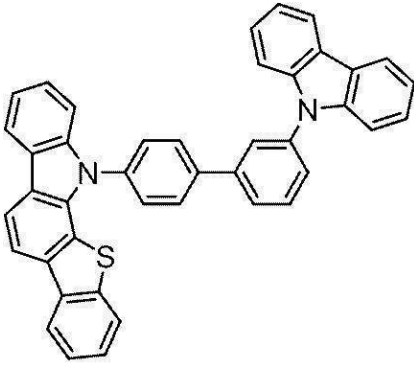
20

30

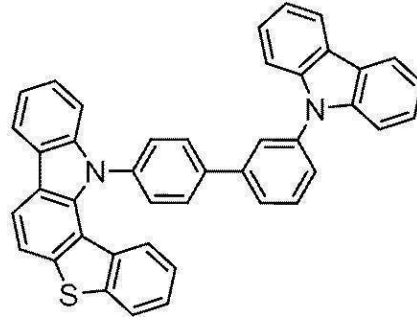
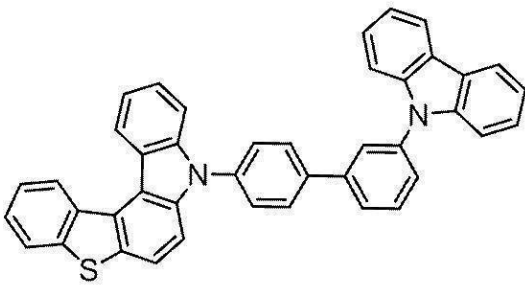
40

50

【化 7 1】



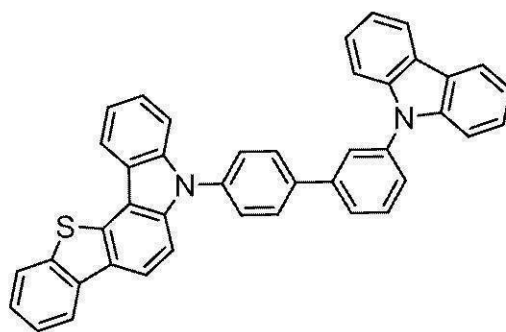
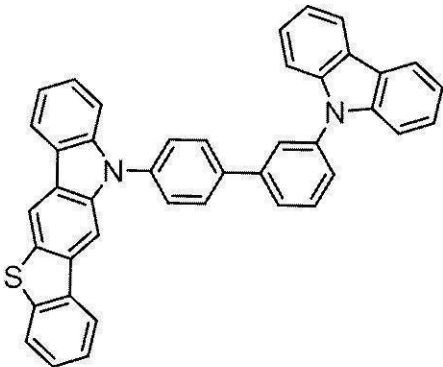
10



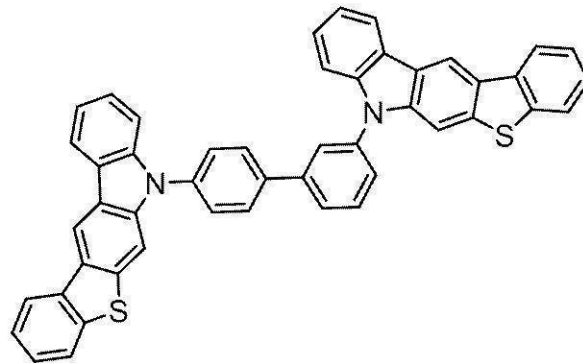
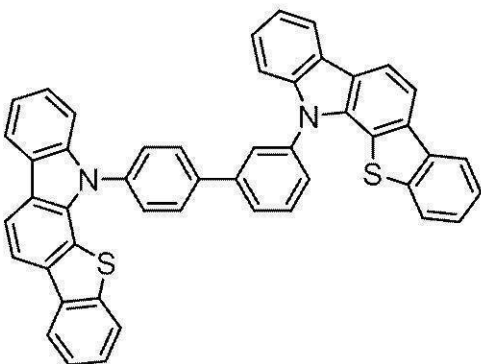
20

【 0 1 3 8】

【化 7 2】



30

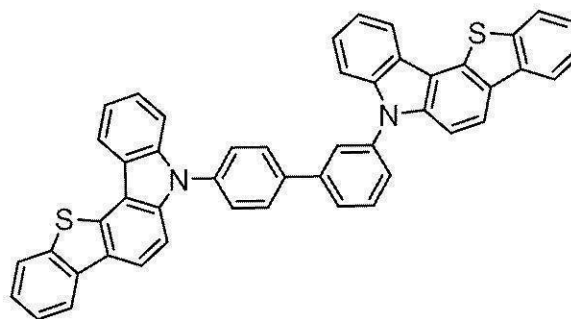
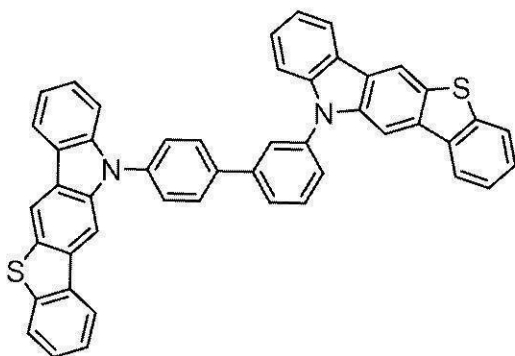
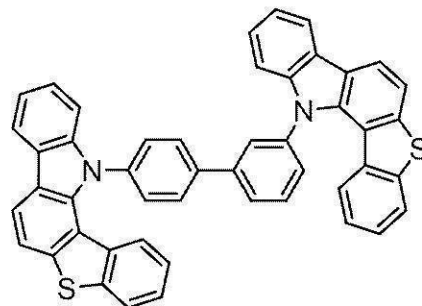
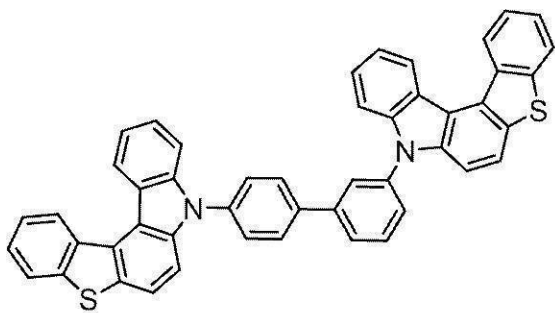


40

【 0 1 3 9】

50

【化73】

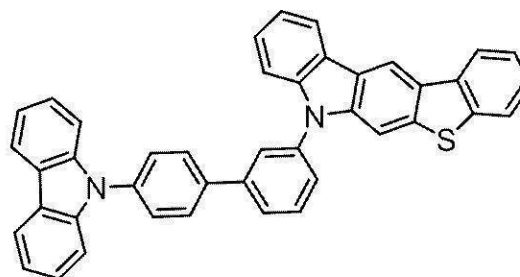
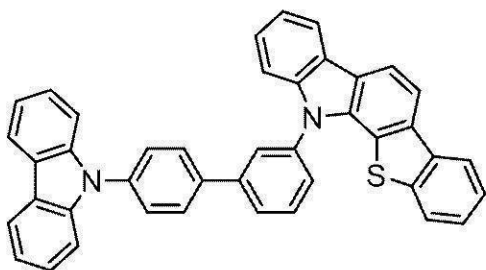


10

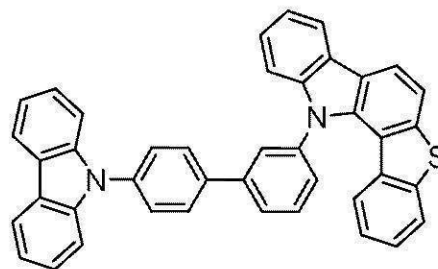
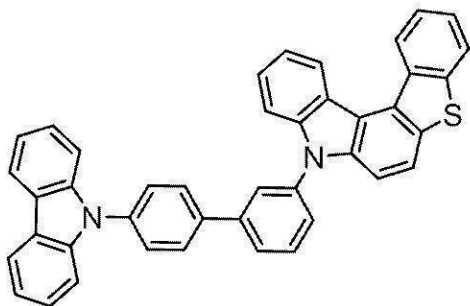
20

【0140】

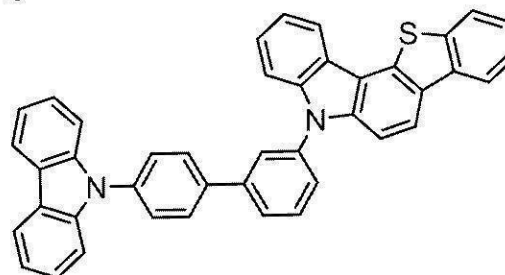
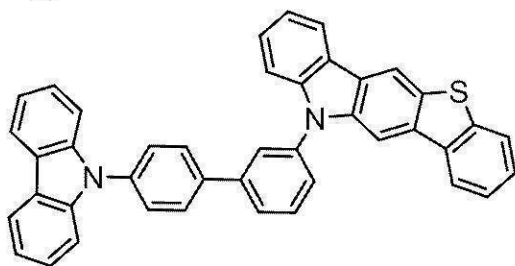
【化74】



30



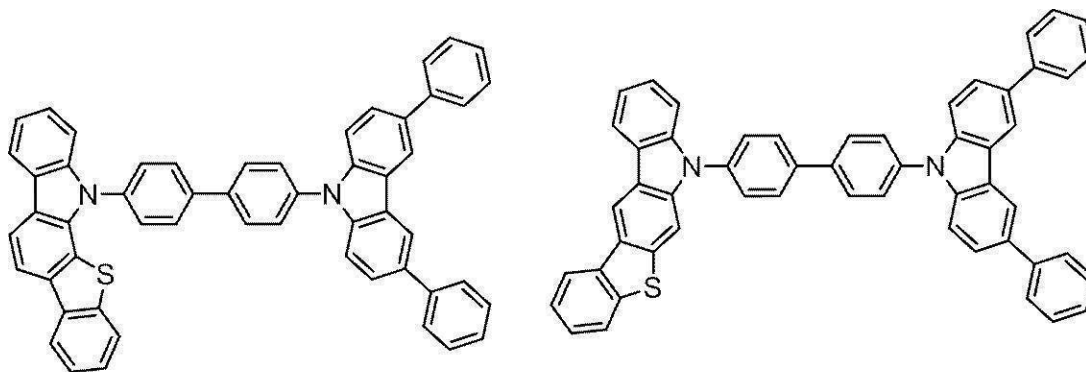
40



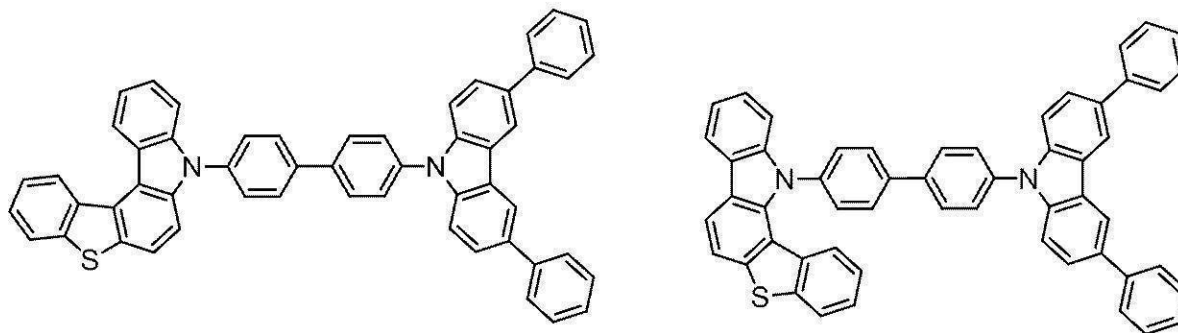
【0141】

50

【化 7 5】



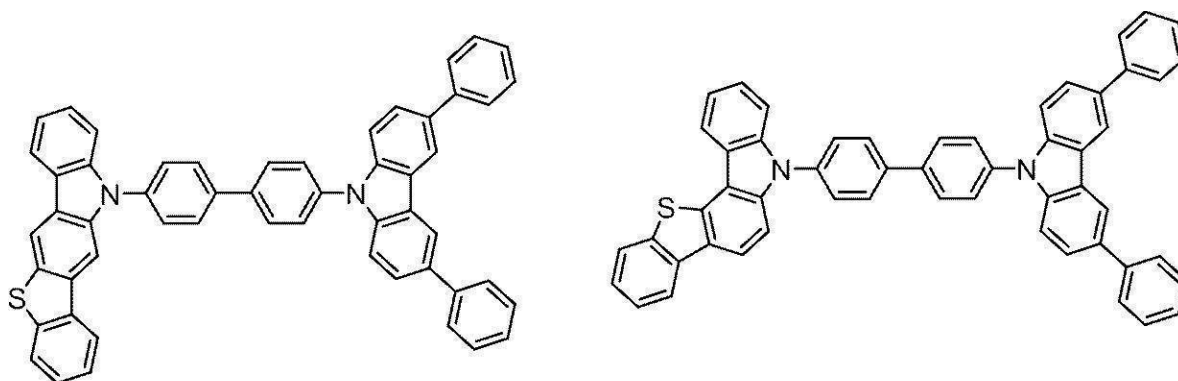
10



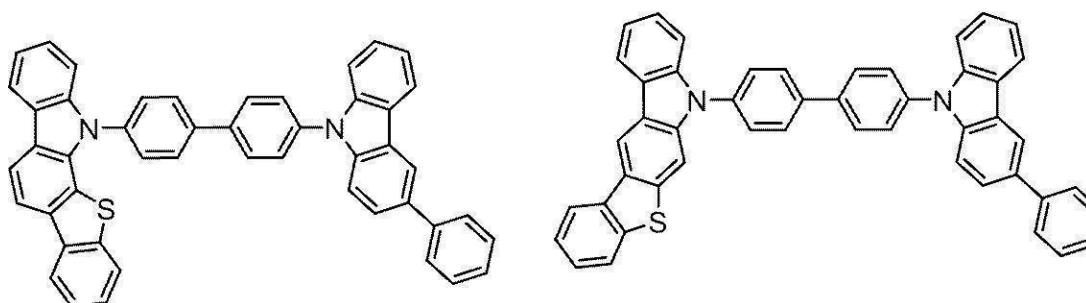
20

【 0 1 4 2】

【化 7 6】



30

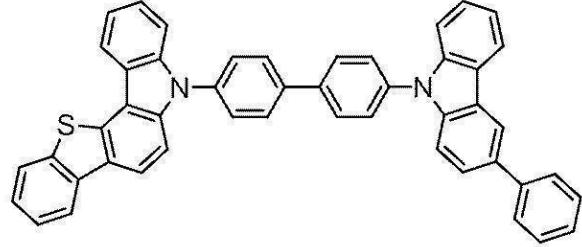
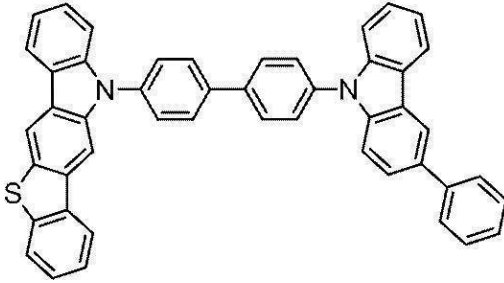
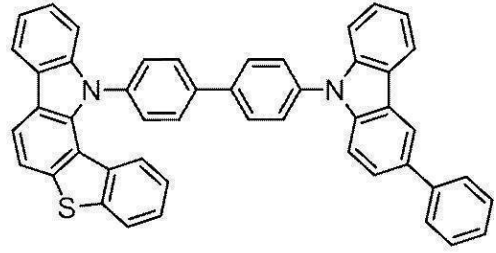
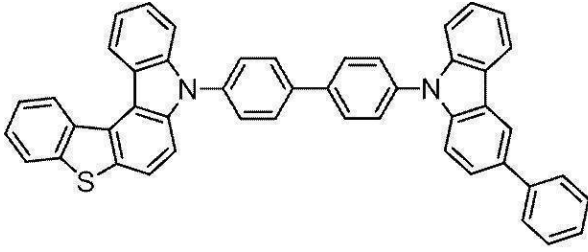


40

【 0 1 4 3】

50

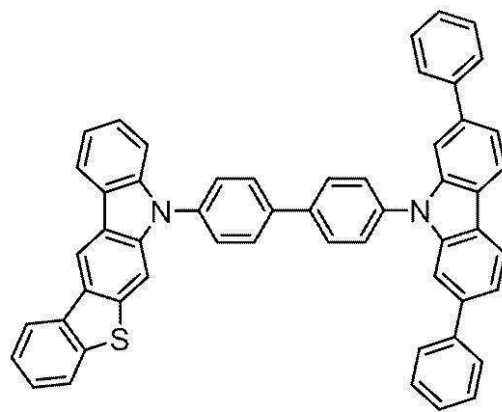
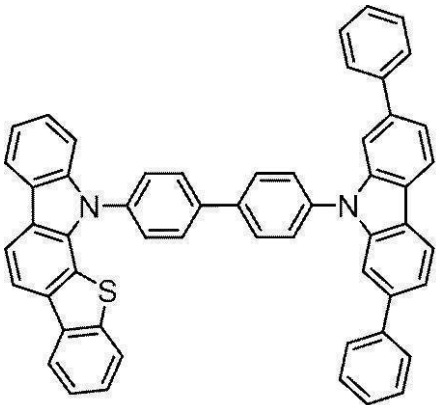
【化 7 7】



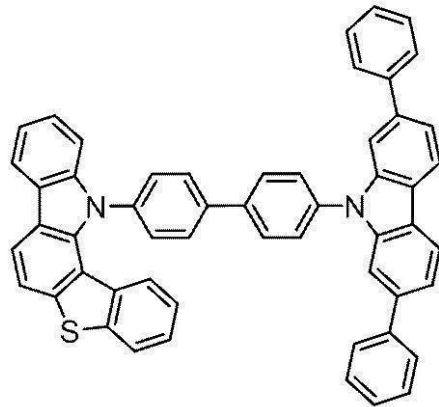
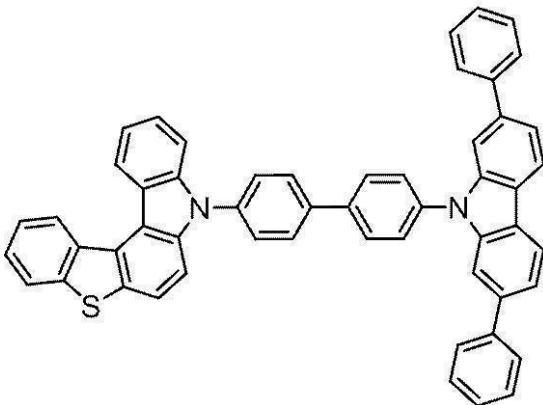
10

【 0 1 4 4】

【化 7 8】



20



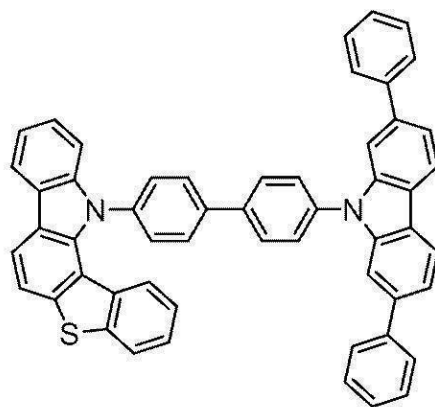
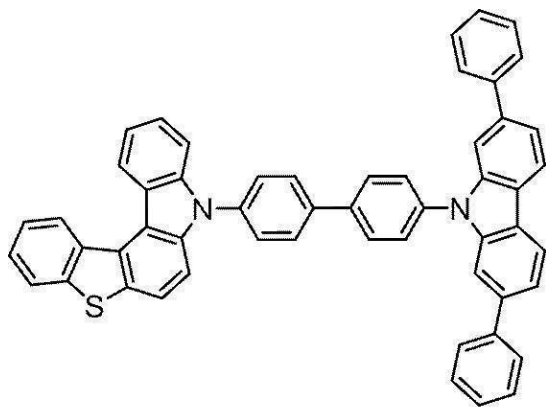
30

40

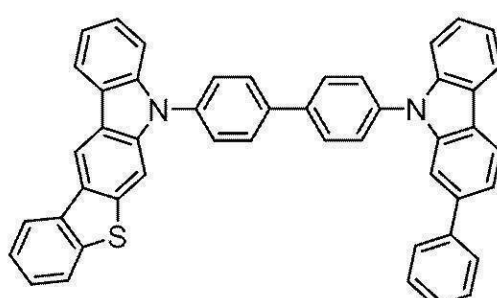
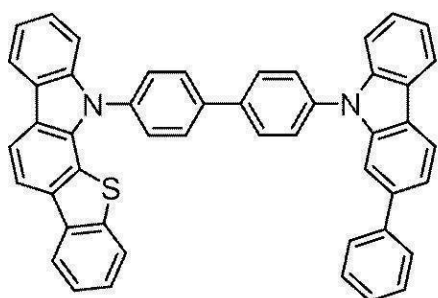
【 0 1 4 5】

50

【化79】



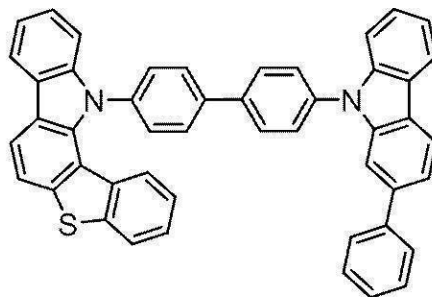
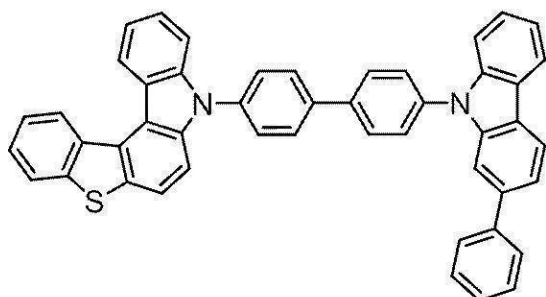
10



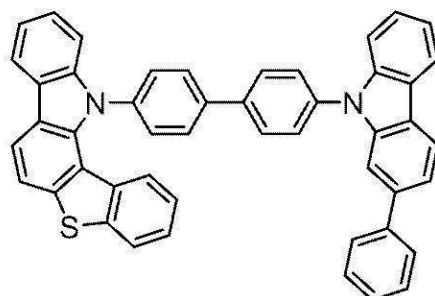
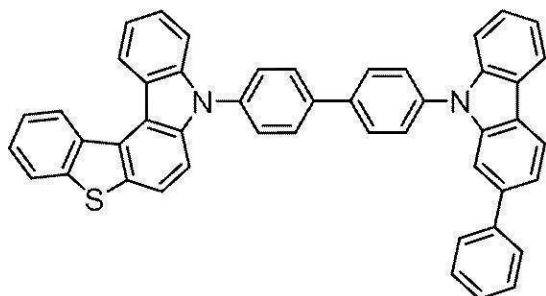
20

【0146】

【化80】



30

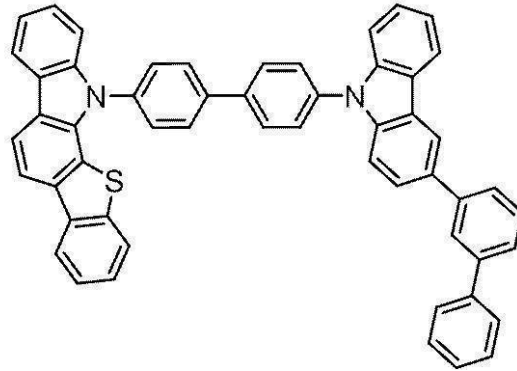
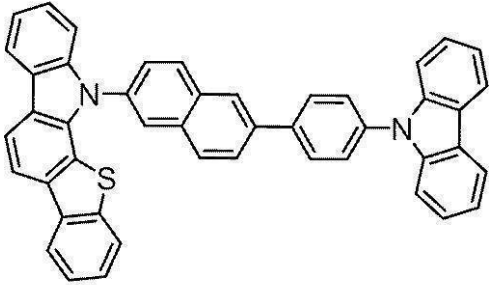
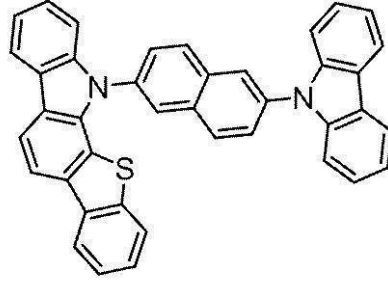
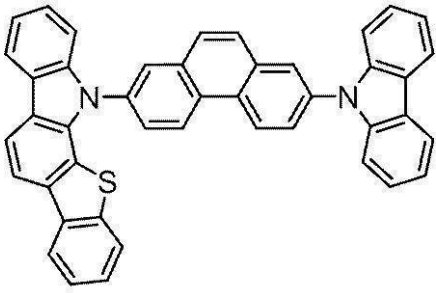


40

【0147】

50

【化 8 1】

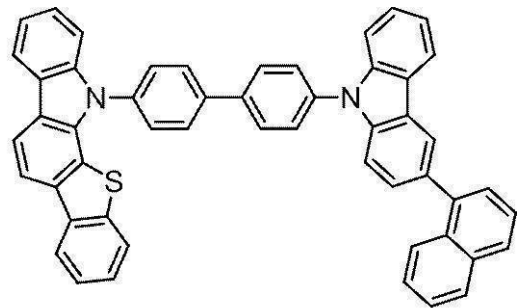
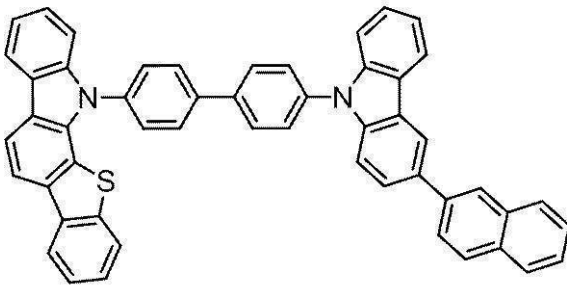


10

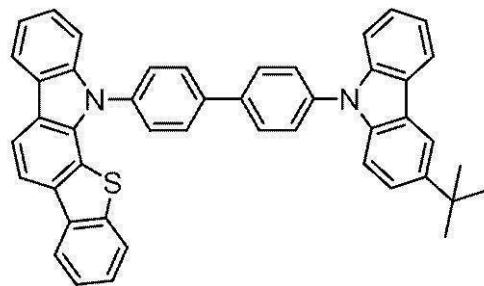
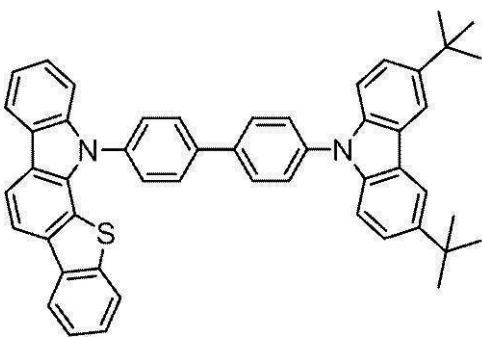
20

【 0 1 4 8】

【化 8 2】



30

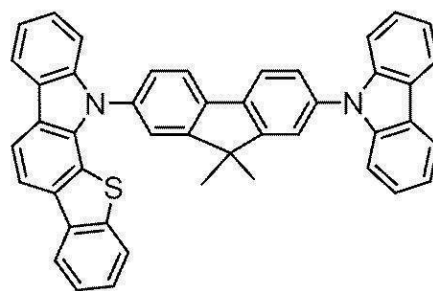
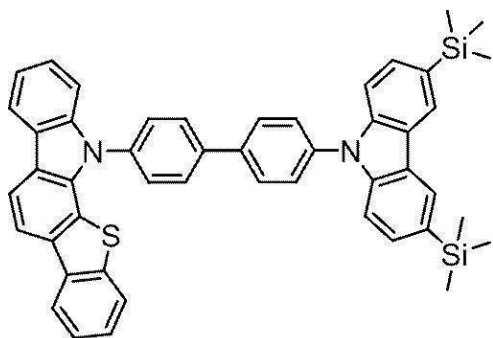


40

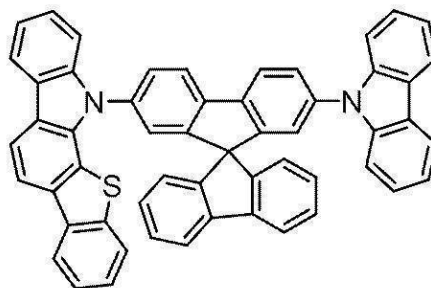
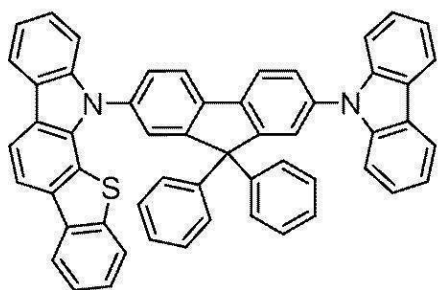
【 0 1 4 9】

50

【化 8 3】



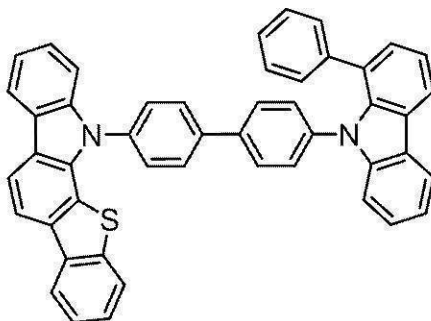
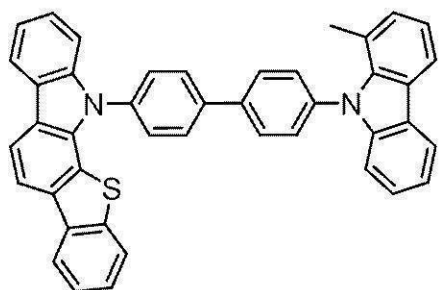
10



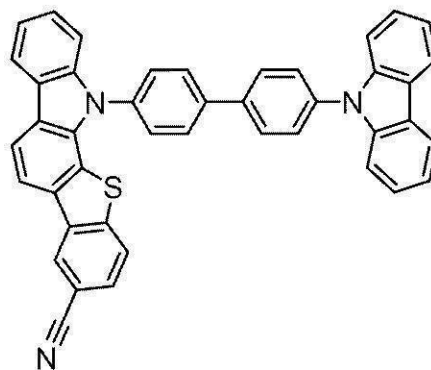
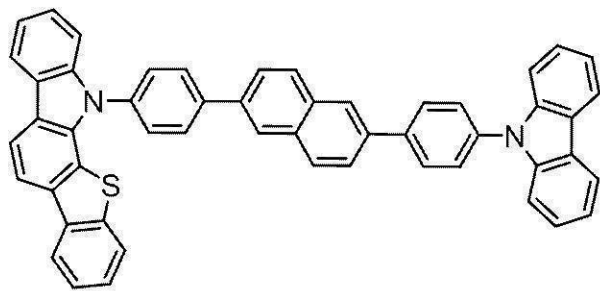
20

【 0 1 5 0】

【化 8 4】



30

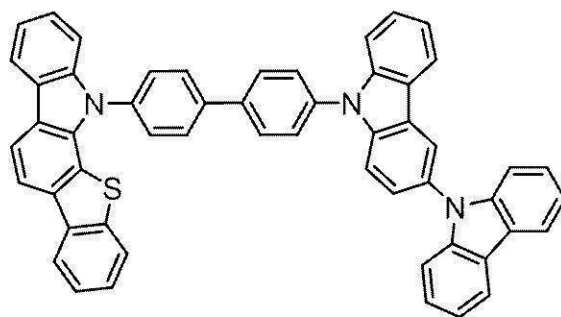
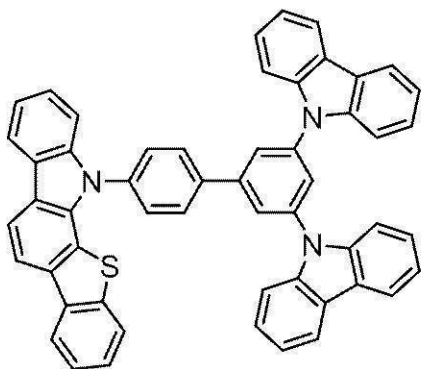
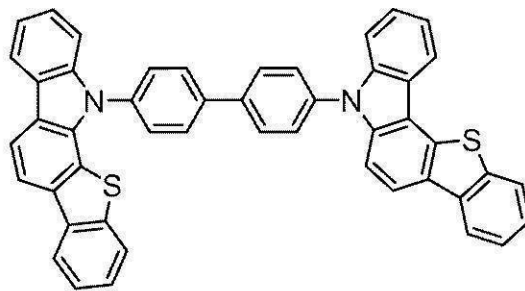
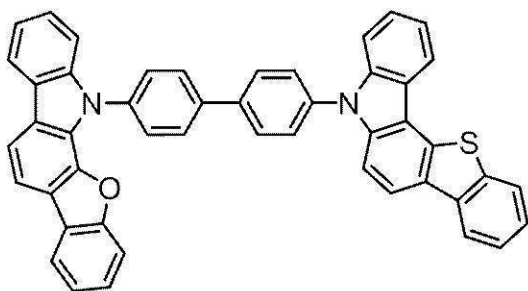


40

【 0 1 5 1】

50

【化 8 5】



【 0 1 5 2】

10

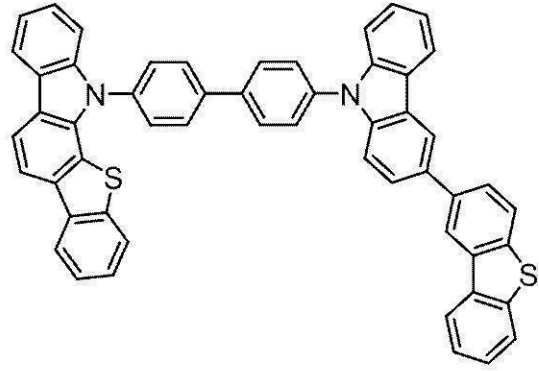
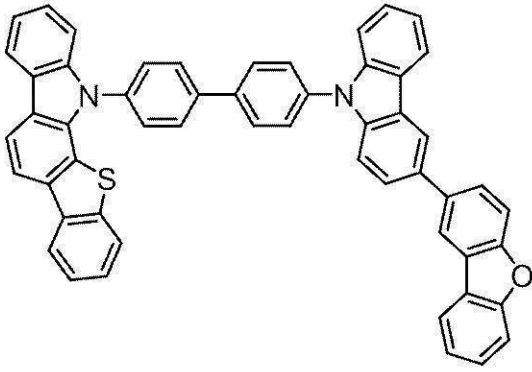
20

30

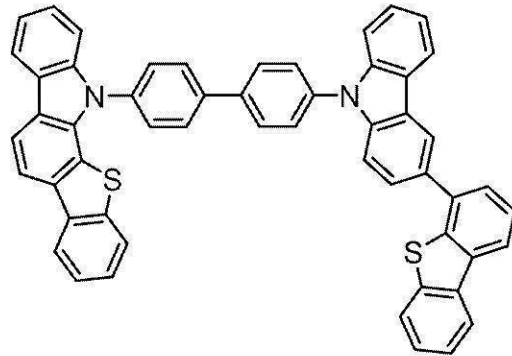
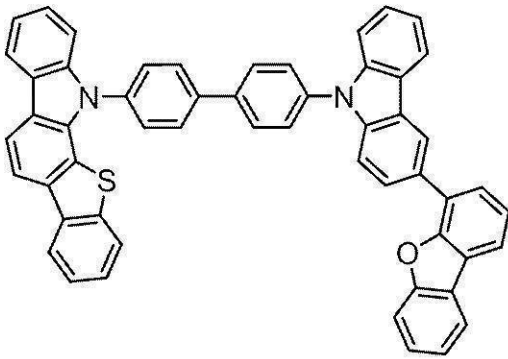
40

50

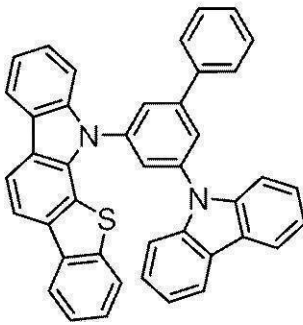
【化 8 6】



10



20



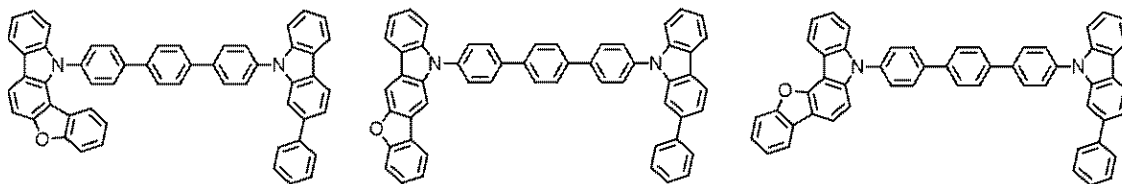
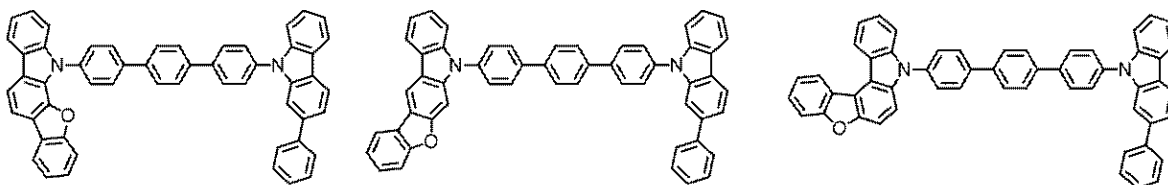
30

【 0 1 5 3】

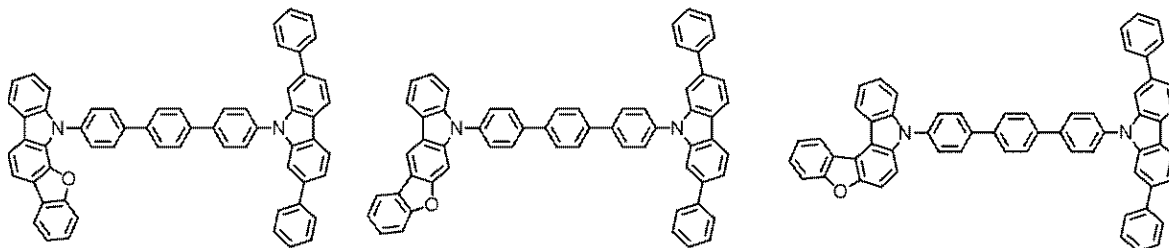
40

50

【化 8 7】



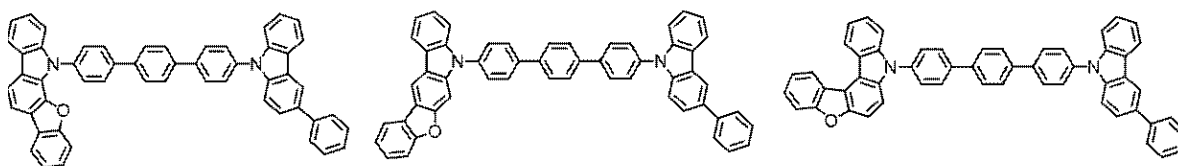
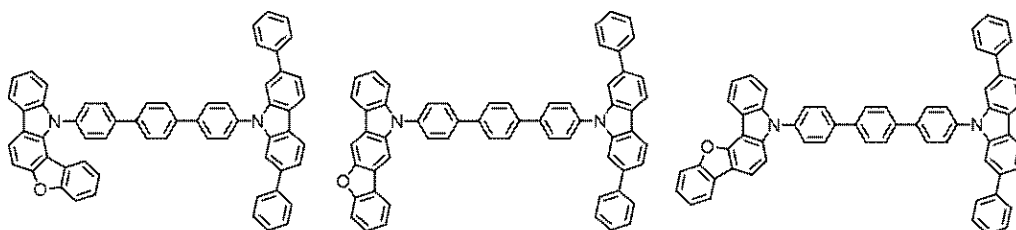
10



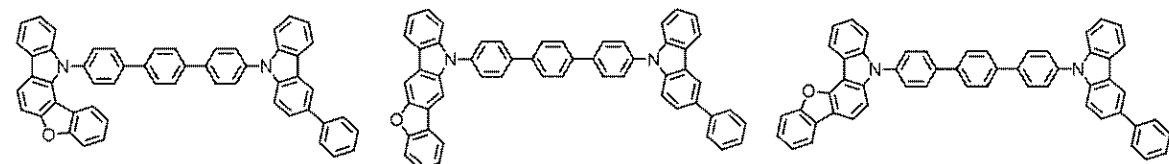
20

【 0 1 5 4】

【化 8 8】



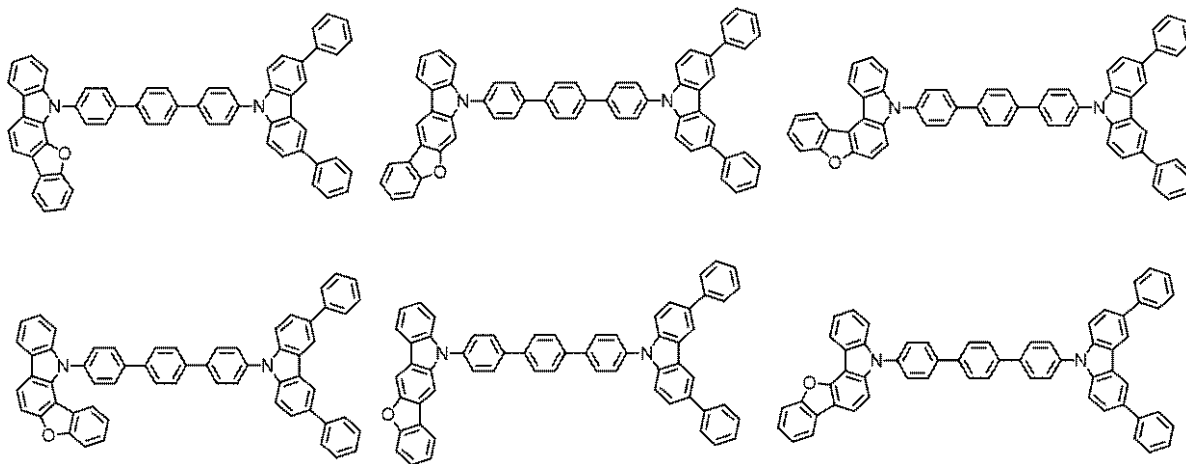
30



【 0 1 5 5】

40

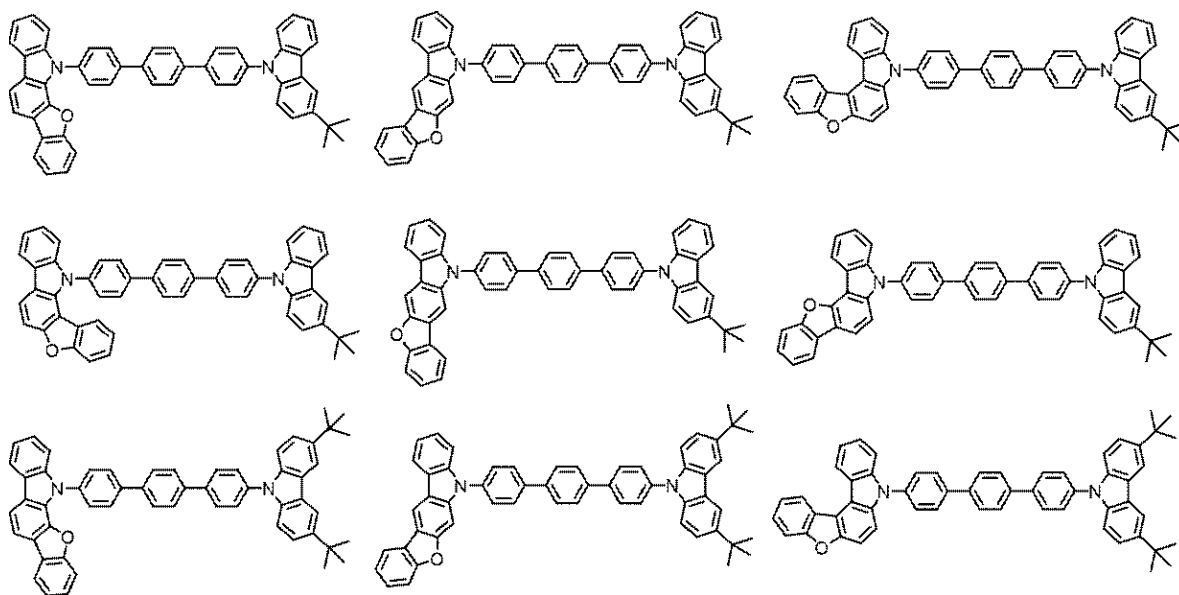
【化 8 9】



10

【 0 1 5 6】

【化 9 0】



20

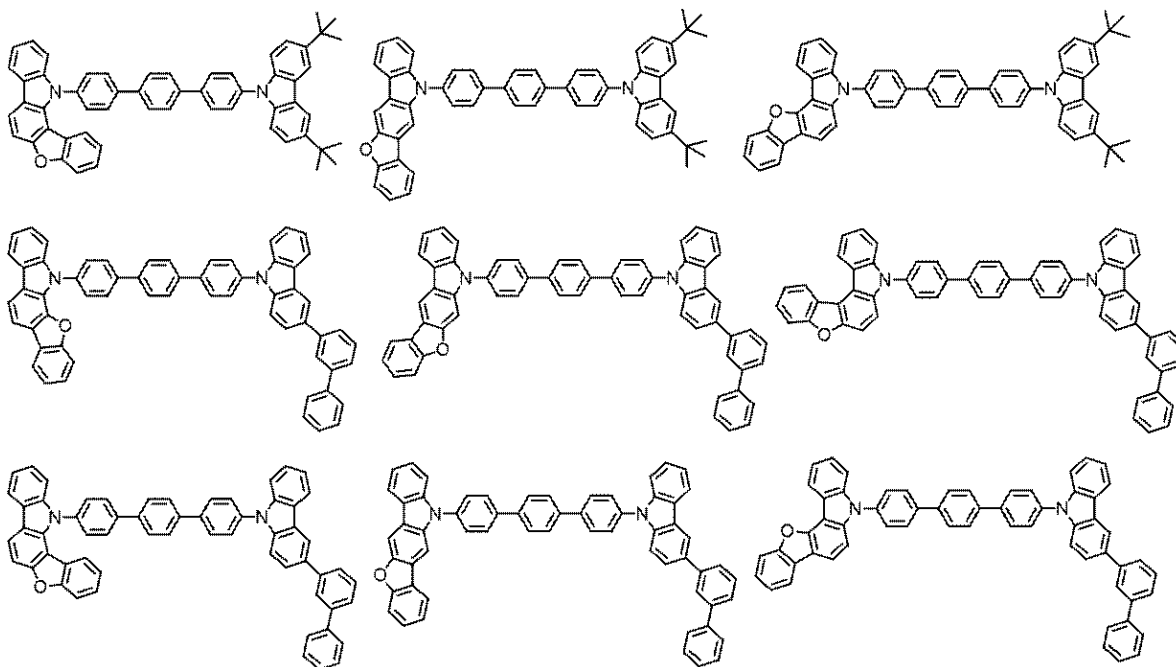
30

【 0 1 5 7】

40

50

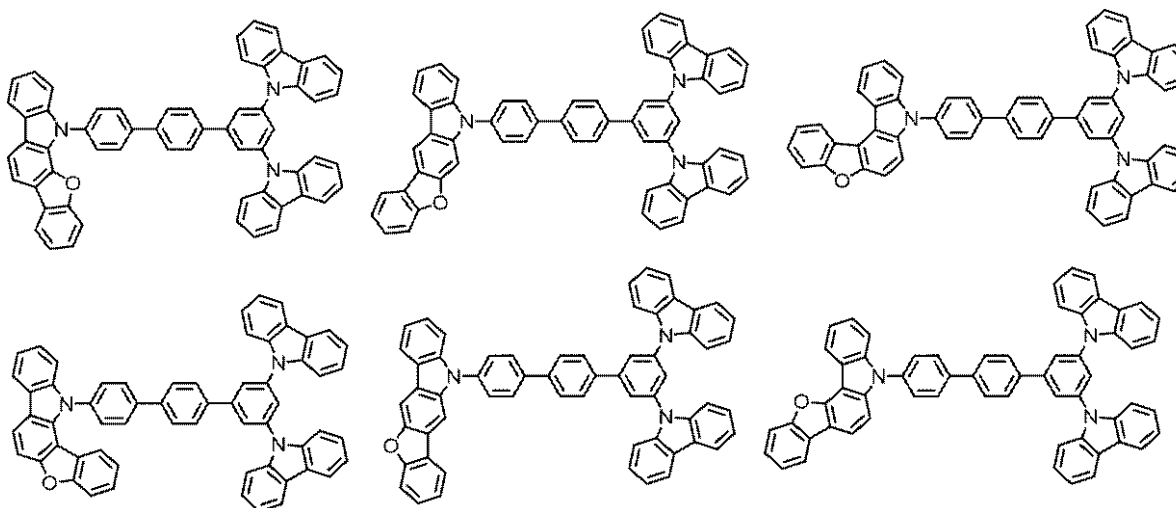
【化 9 1】



10

【 0 1 5 8】

【化 9 2】

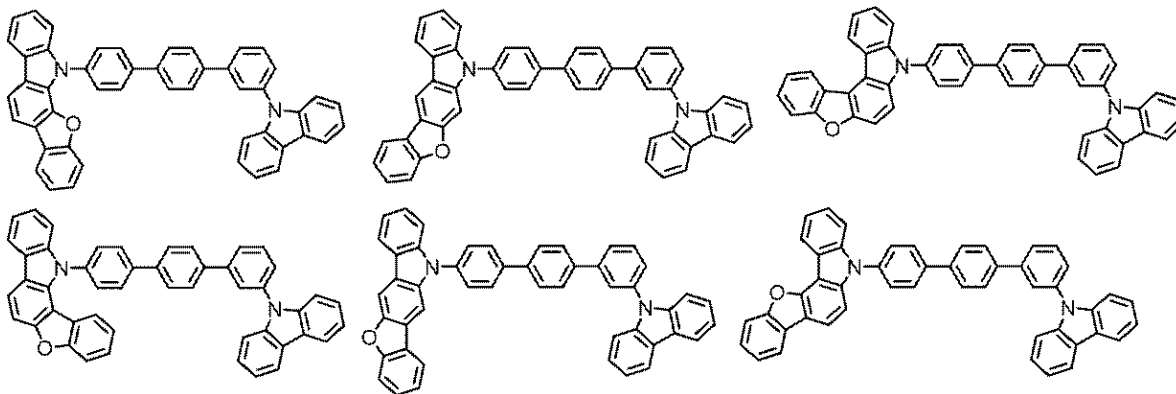


20

30

【 0 1 5 9】

【化 9 3】

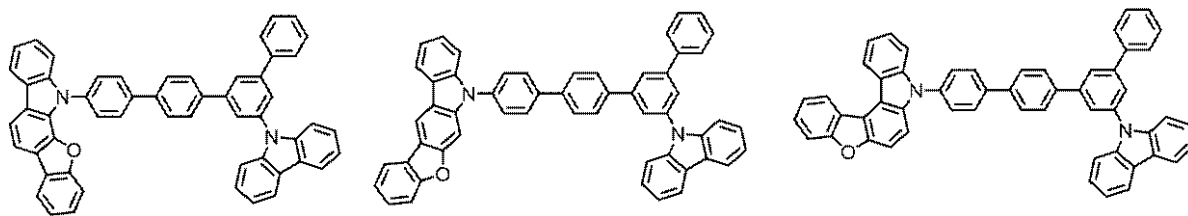


40

【 0 1 6 0】

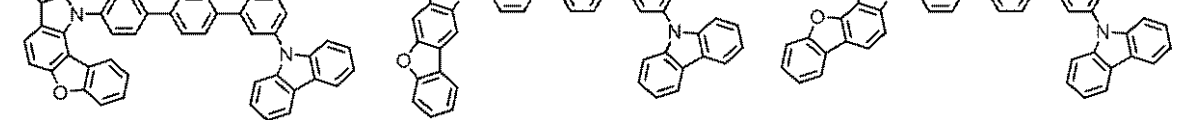
50

【化 9 4】



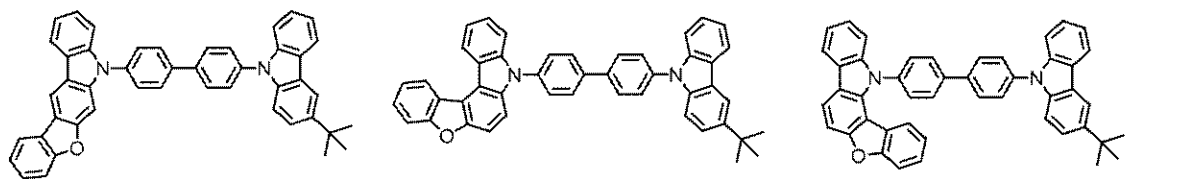
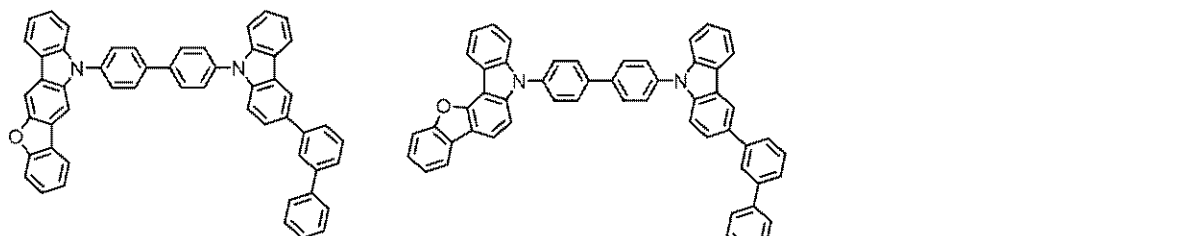
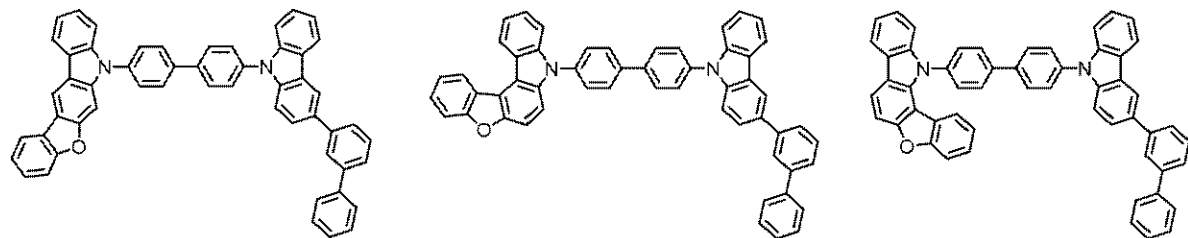
【 0 1 6 1】

【化 9 5】



【 0 1 6 1】

【化 9 5】



【 0 1 6 2】

10

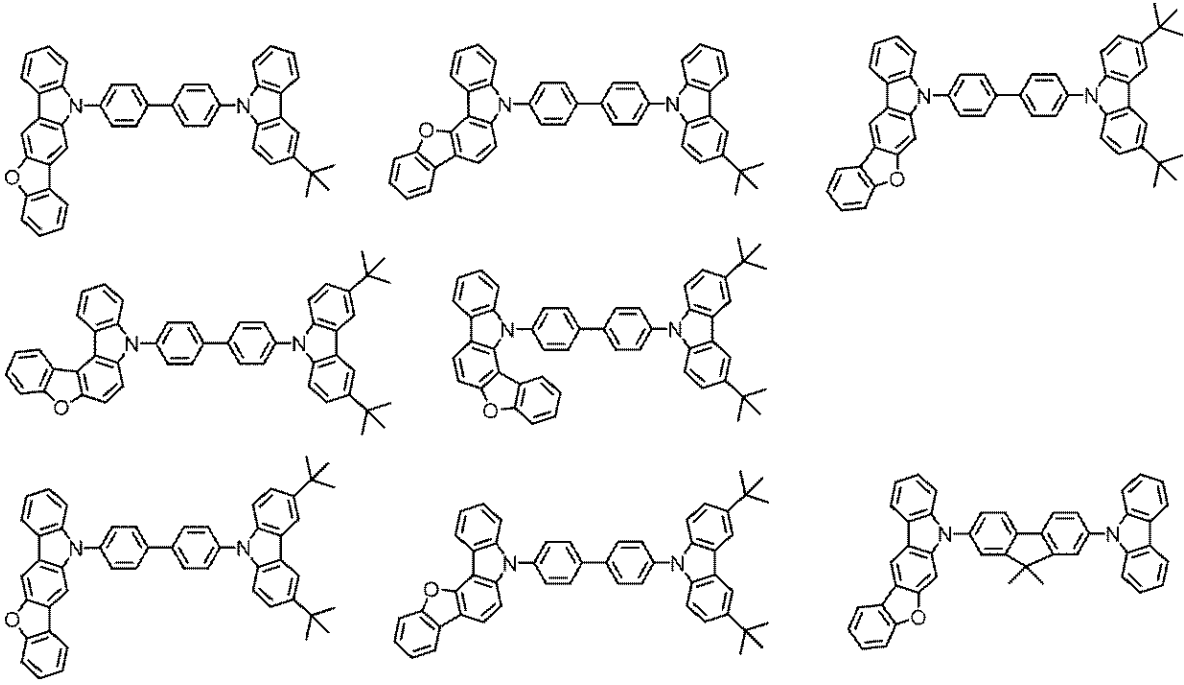
20

30

40

50

【化 9 6】

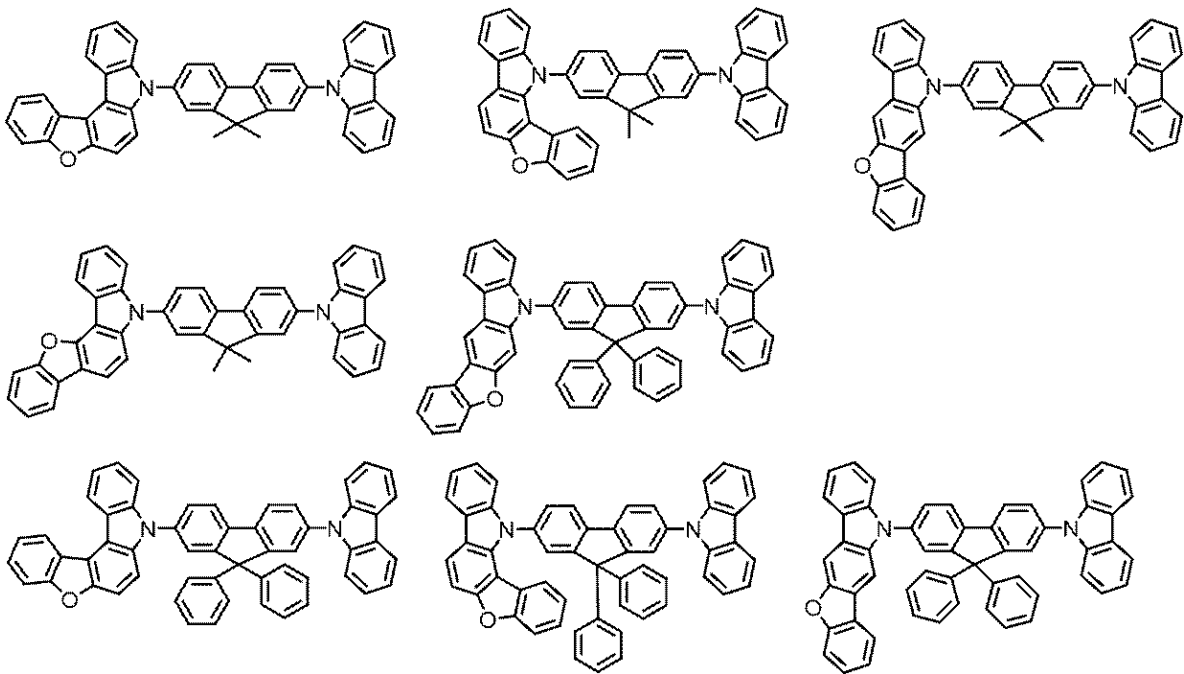


10

20

【 0 1 6 3】

【化 9 7】



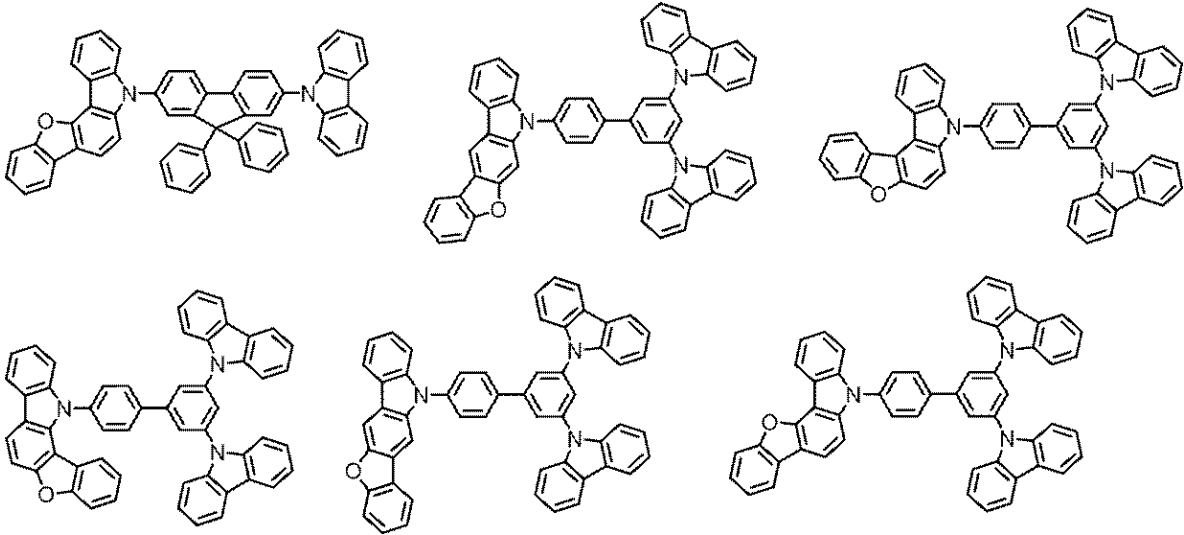
30

40

【 0 1 6 4】

50

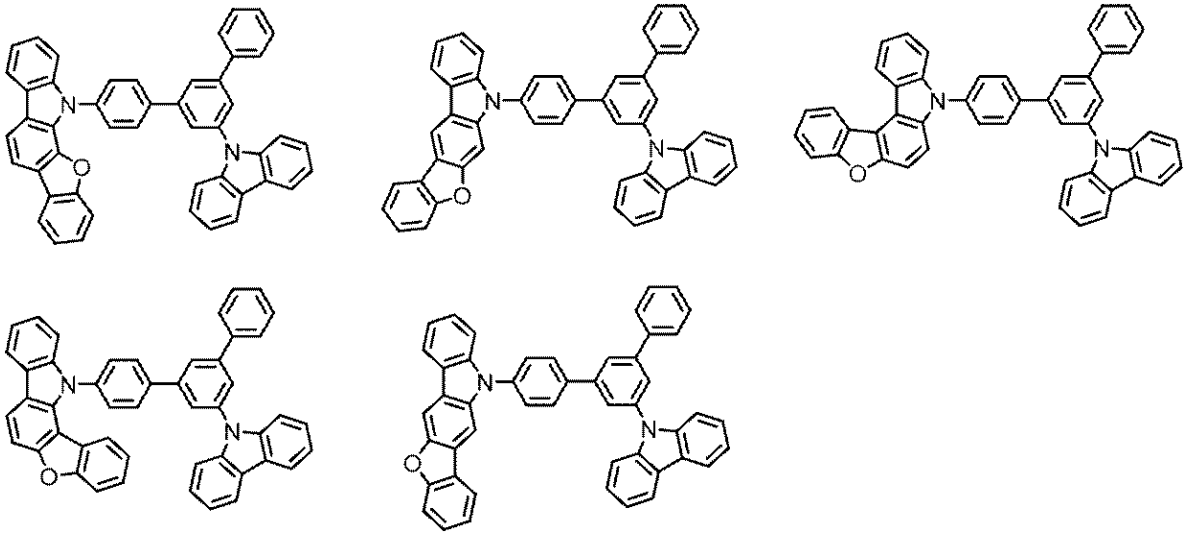
【化98】



10

【0165】

【化99】



20

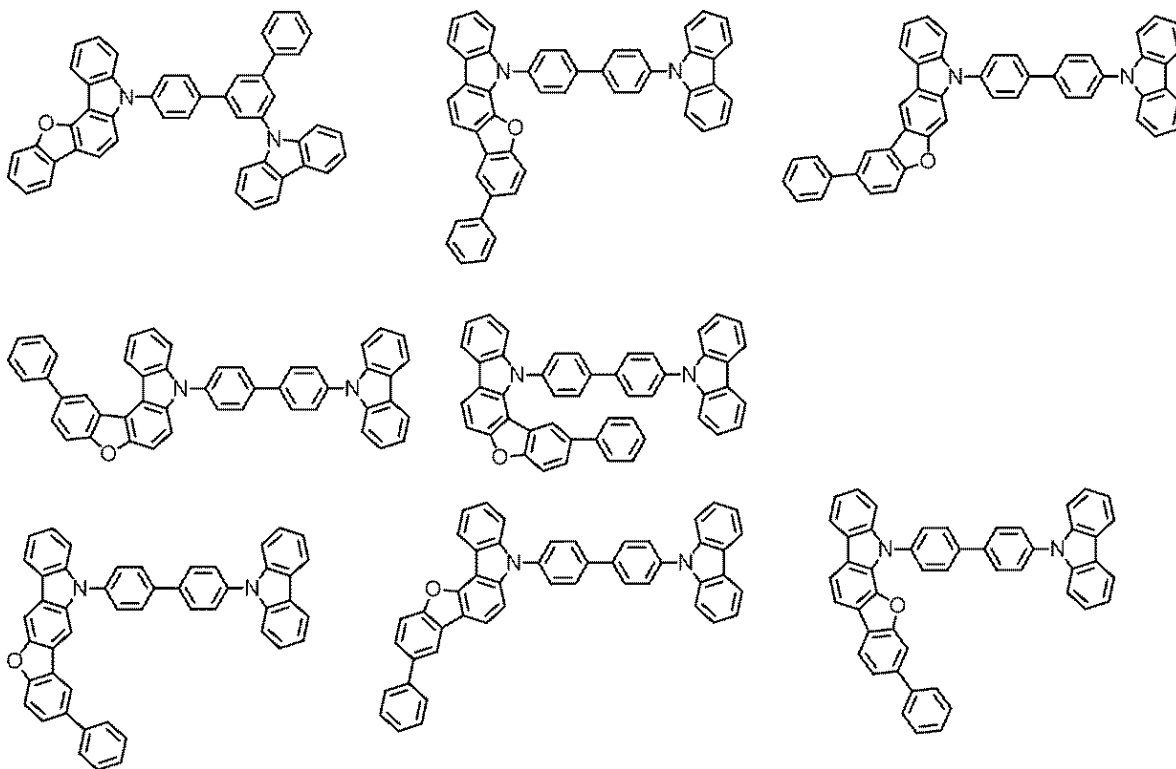
30

【0166】

40

50

【化100】

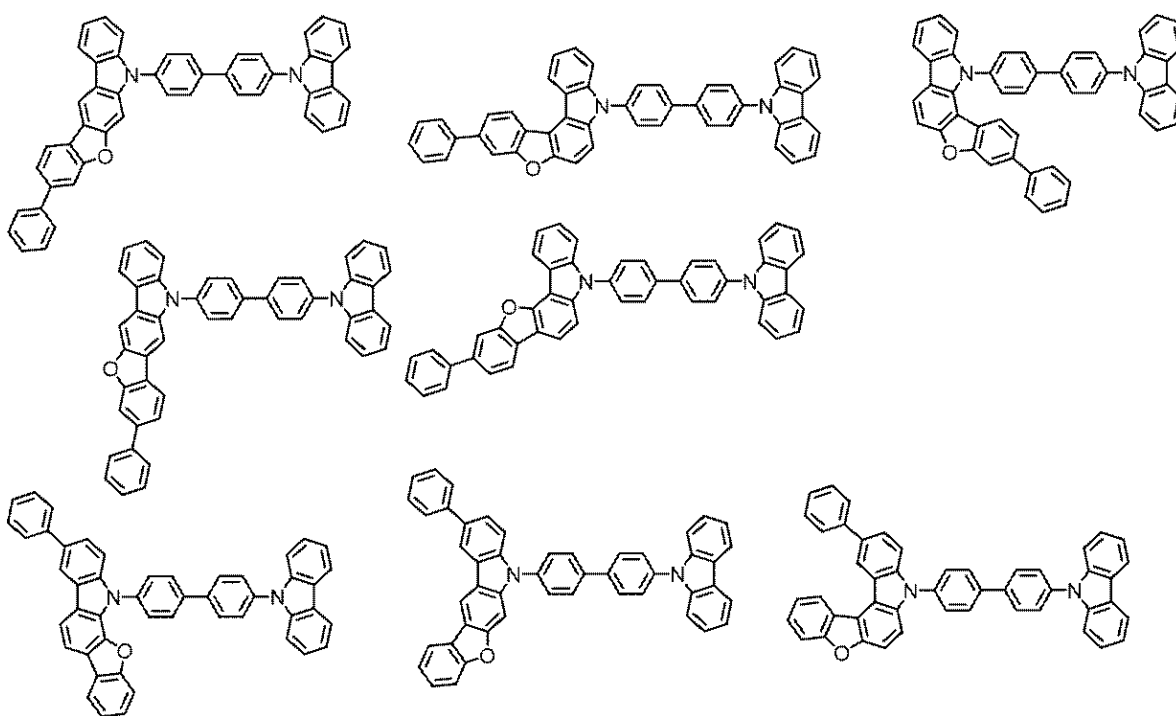


10

20

【0167】

【化101】



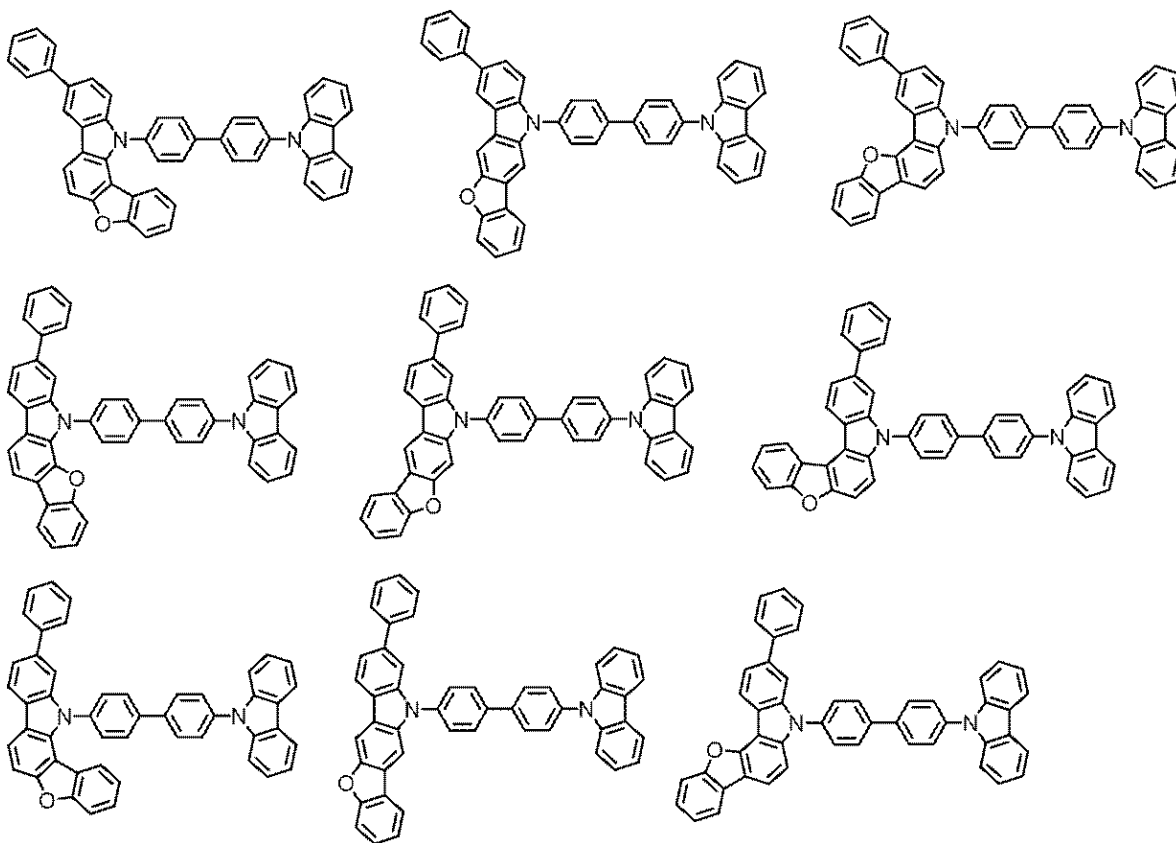
30

40

【0168】

50

【化 1 0 2】

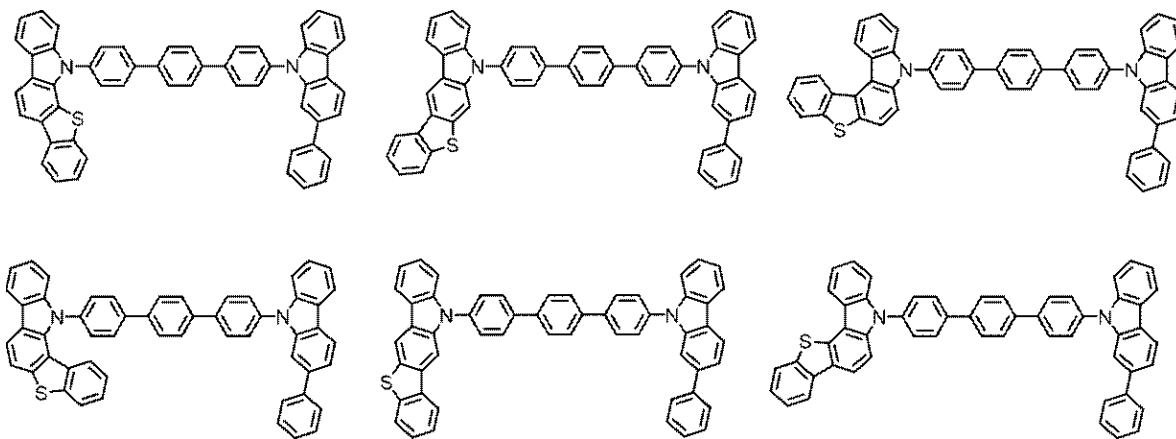


10

20

【 0 1 6 9】

【化 1 0 3】



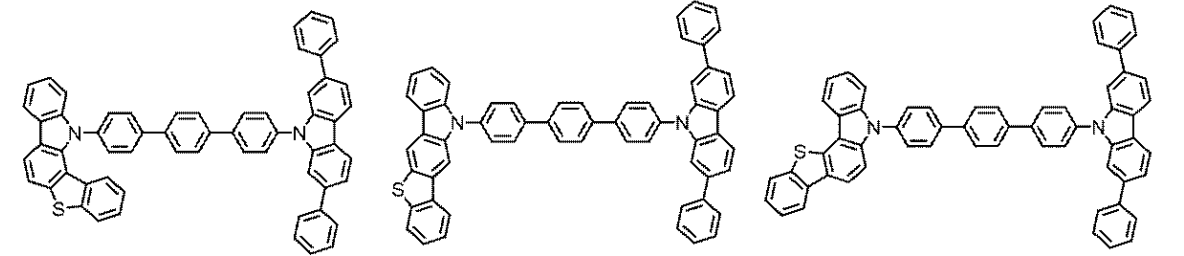
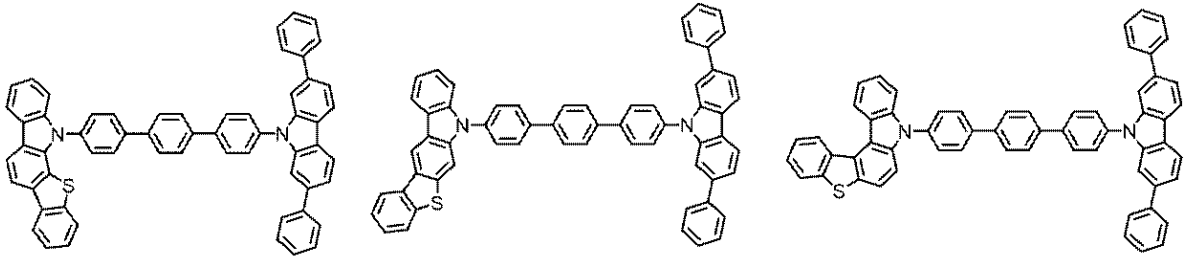
30

【 0 1 7 0】

40

50

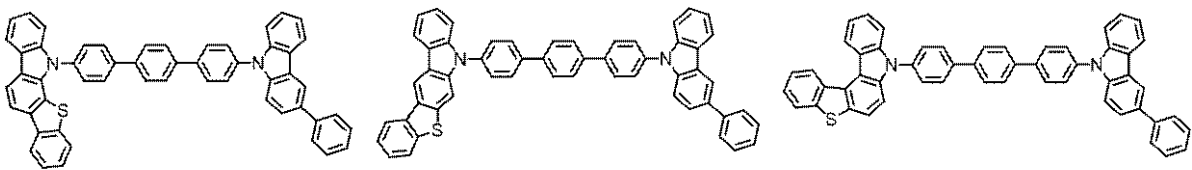
【化104】



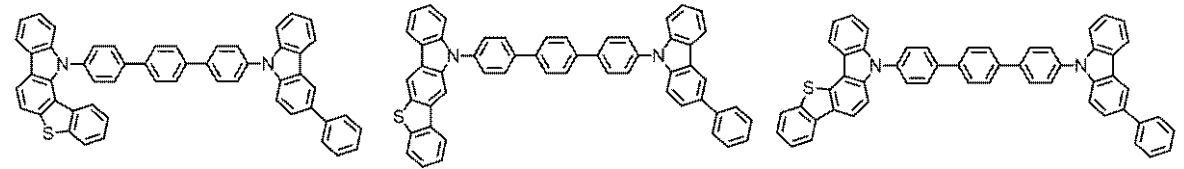
10

【0171】

【化105】

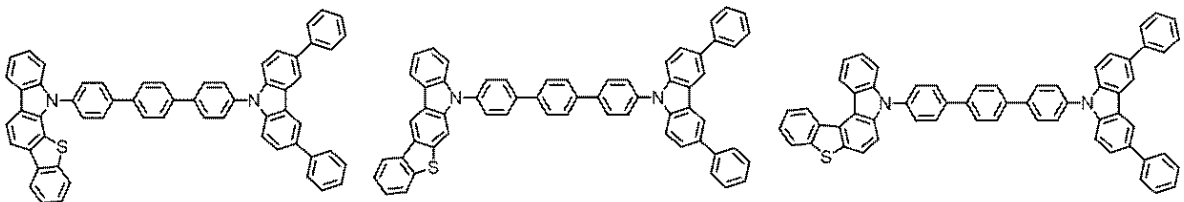


20

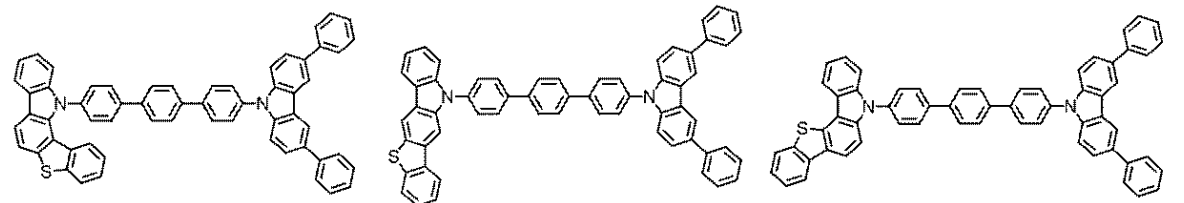


【0172】

【化106】



30

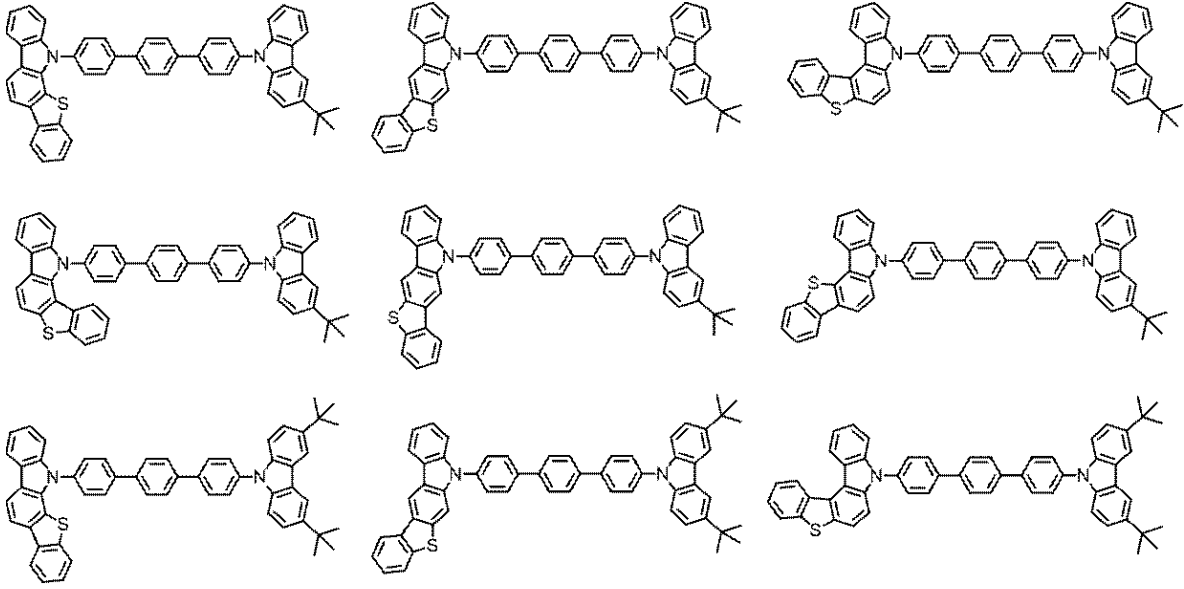


40

【0173】

50

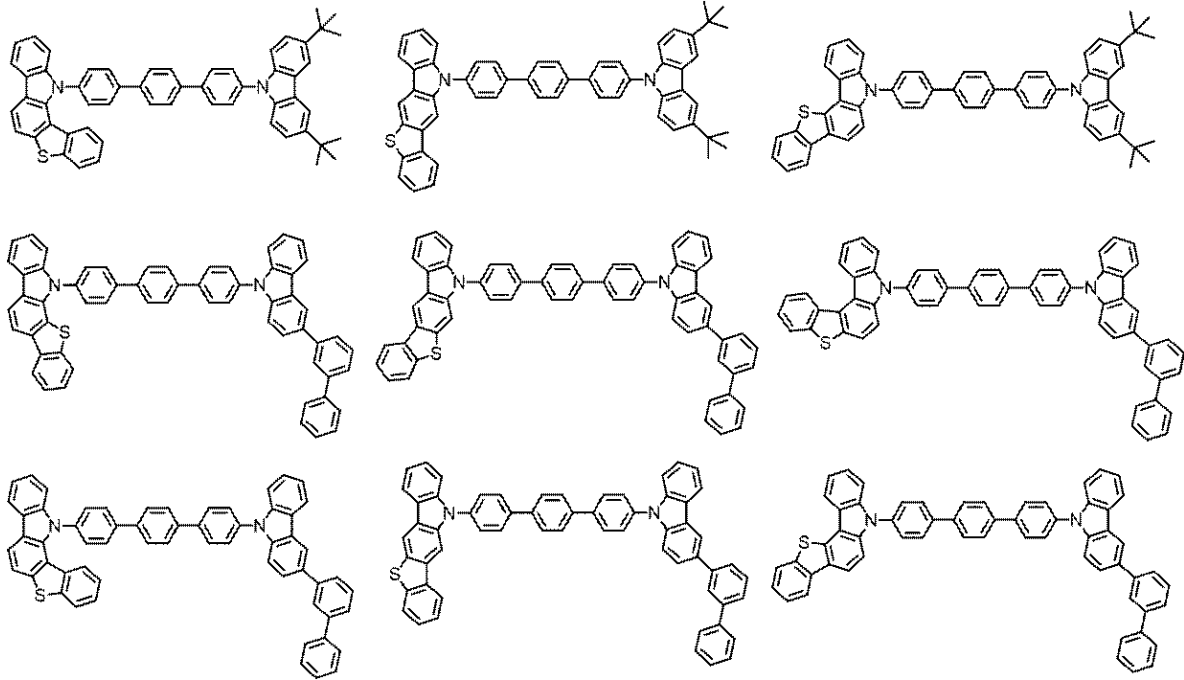
【化107】



10

【0174】

【化108】



20

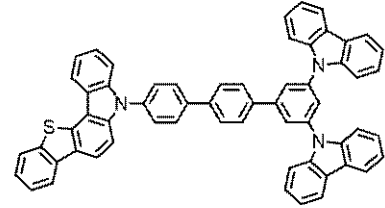
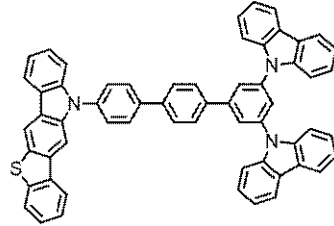
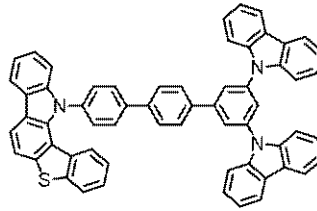
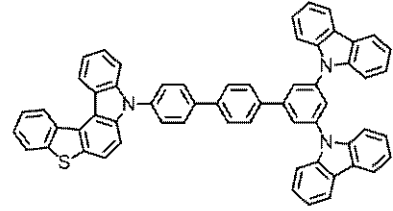
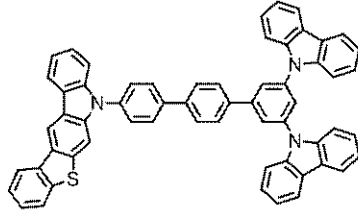
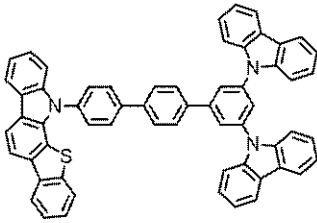
30

【0175】

40

50

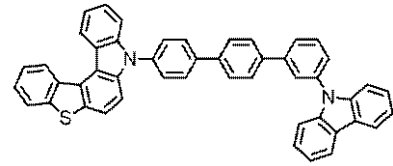
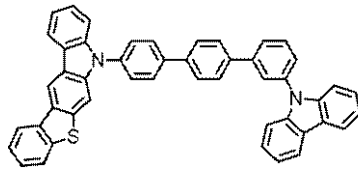
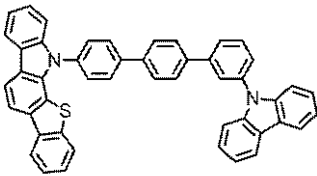
【化109】



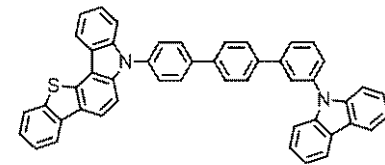
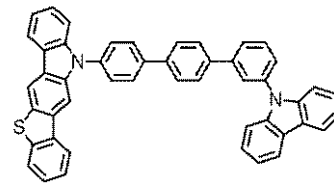
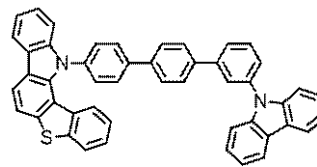
10

【0176】

【化110】

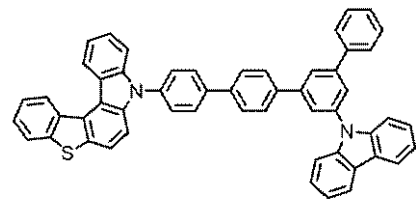
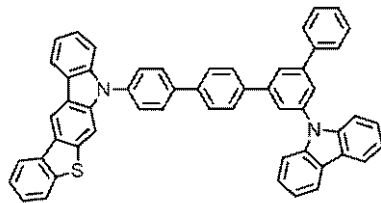
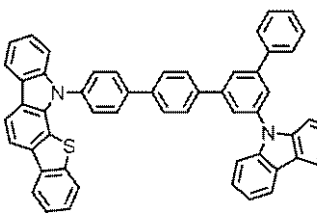


20

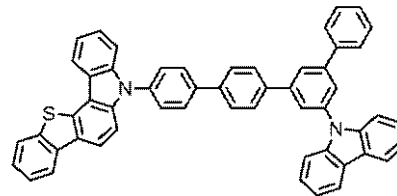
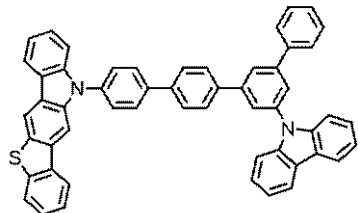
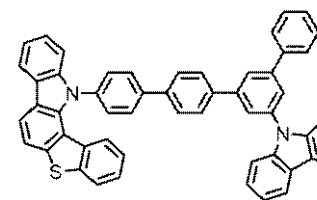


【0177】

【化111】



30

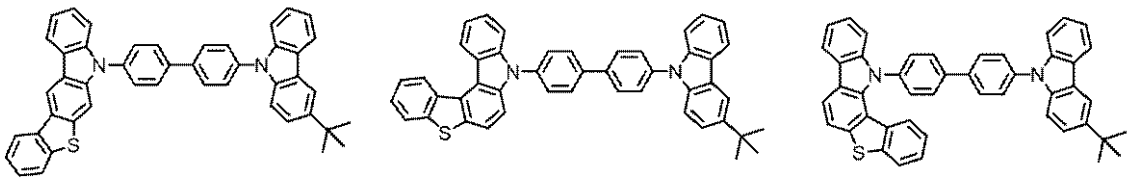
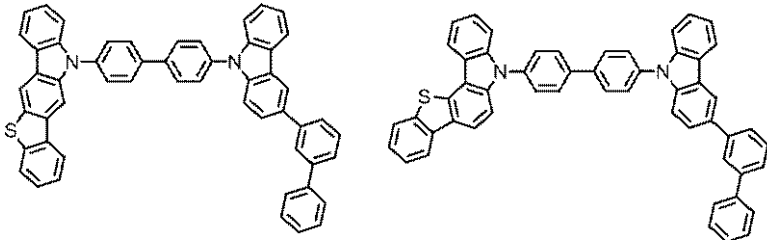
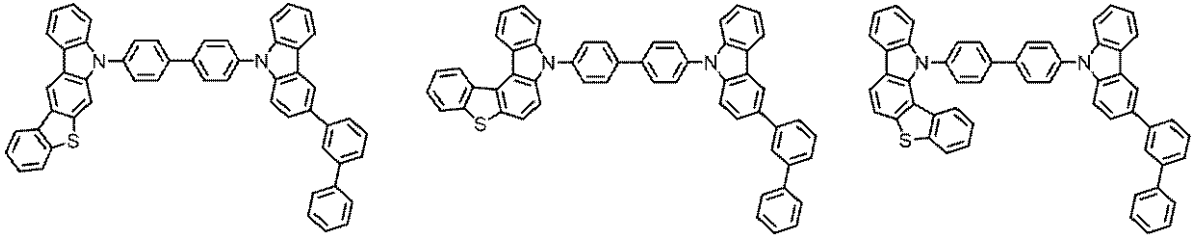


40

【0178】

50

【化 1 1 2】

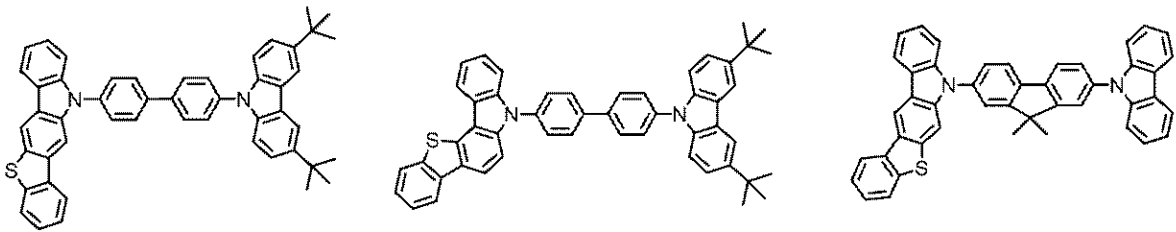
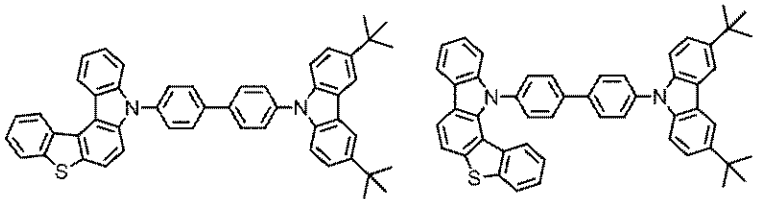
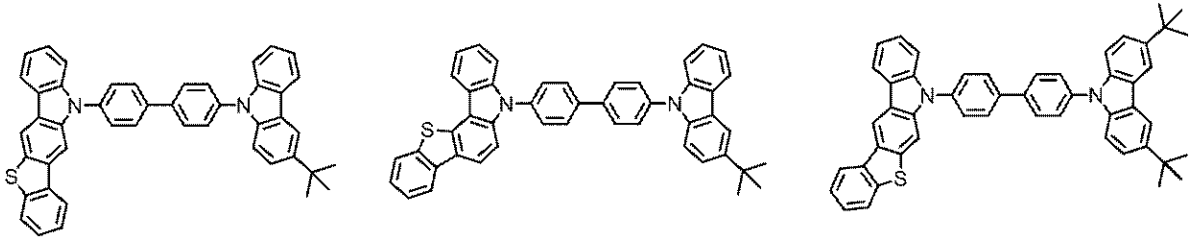


10

20

【 0 1 7 9 】

【化 1 1 3】



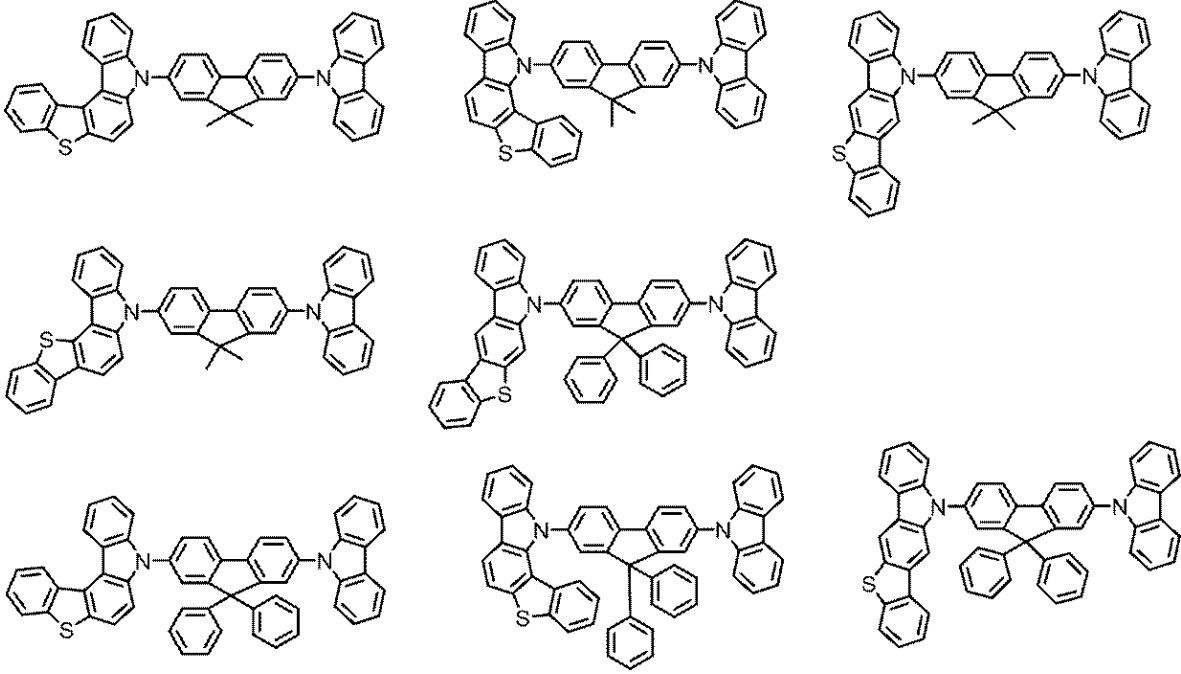
30

40

【 0 1 8 0 】

50

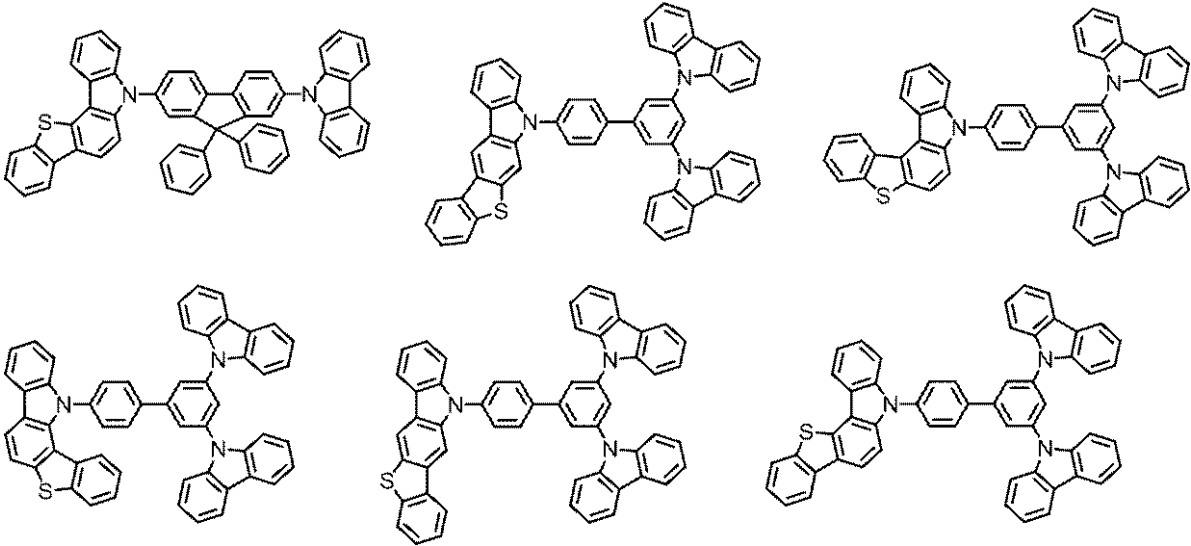
【化 1 1 4】



10

【 0 1 8 1】

【化 1 1 5】



20

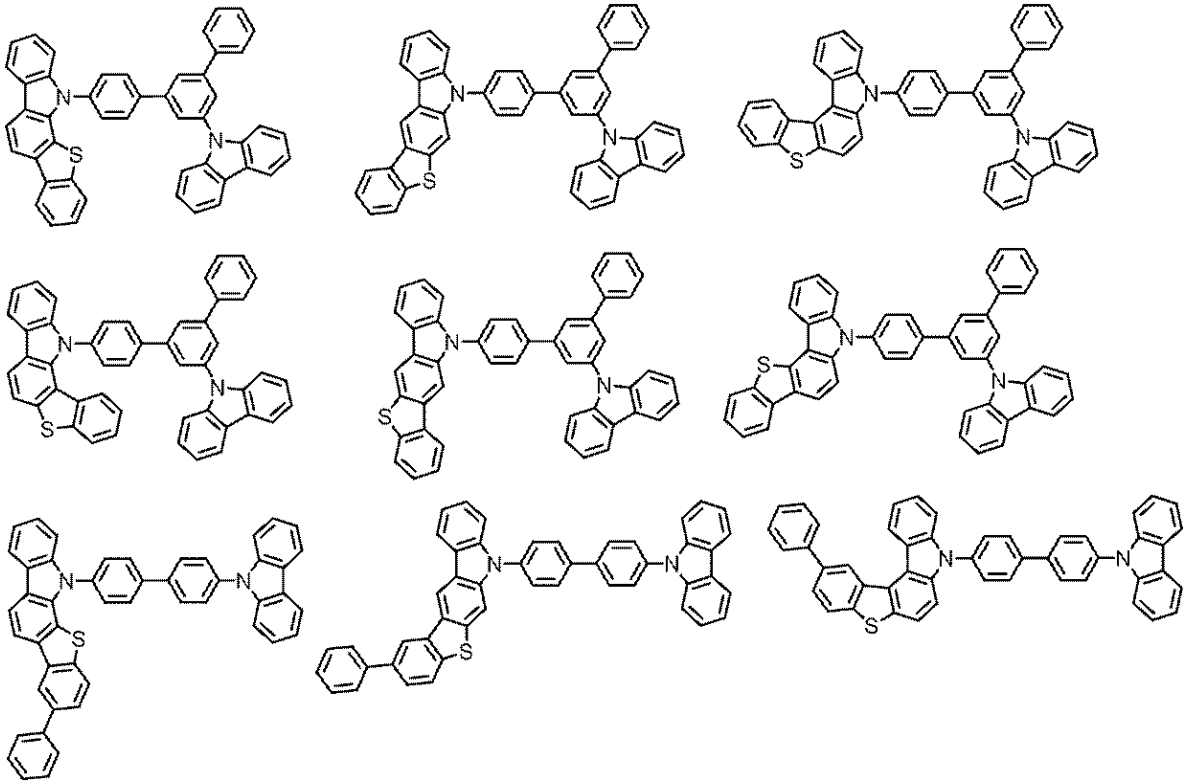
30

【 0 1 8 2】

40

50

【化 1 1 6】

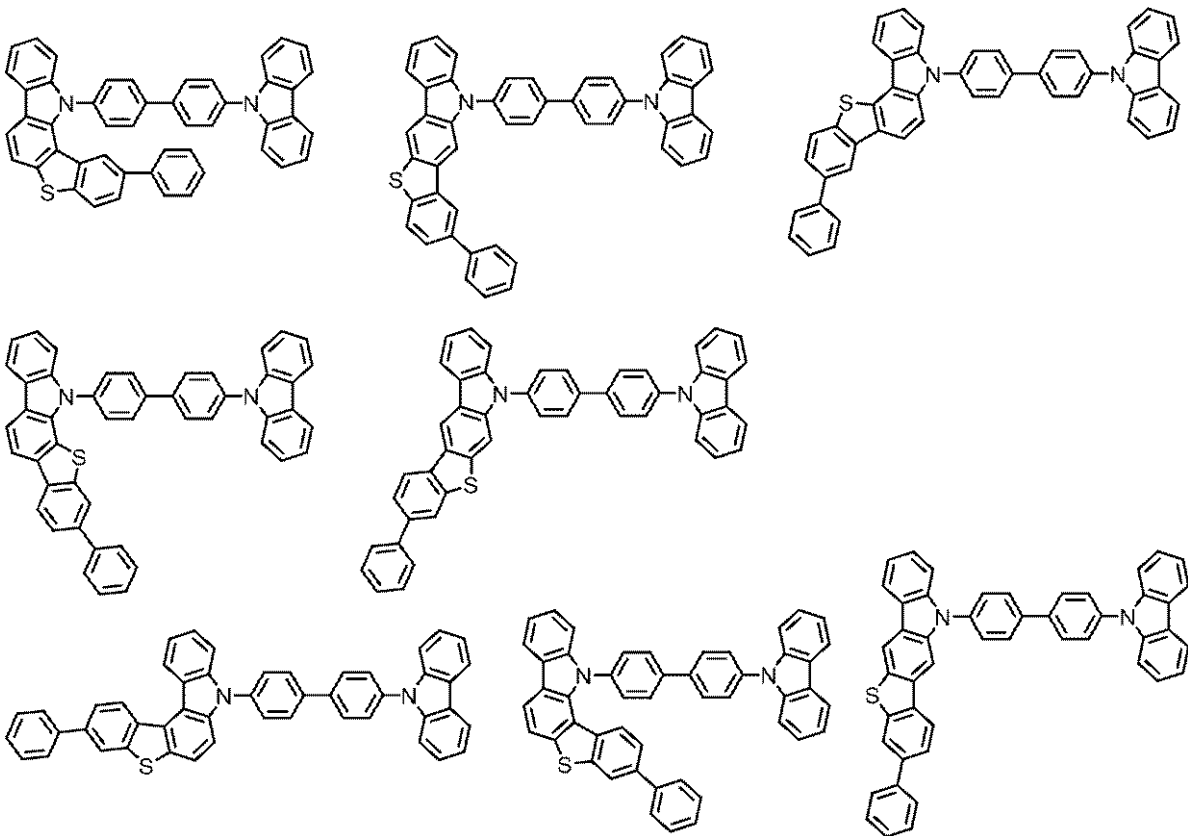


10

20

【 0 1 8 3】

【化 1 1 7】



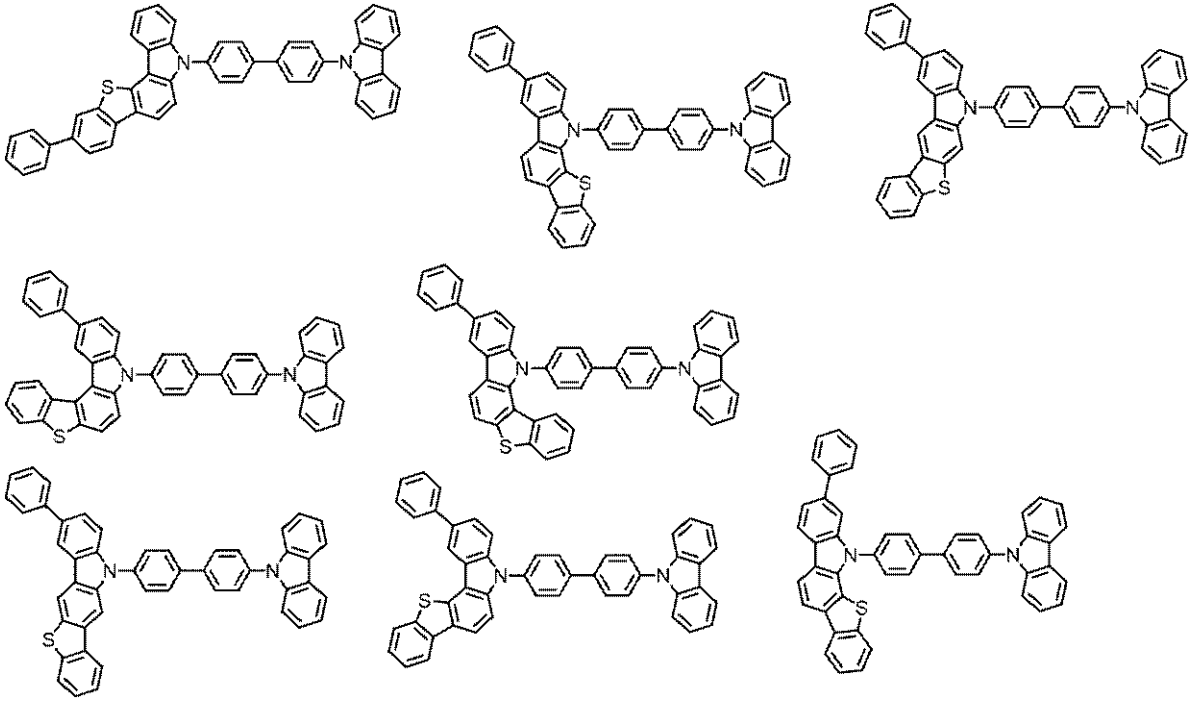
30

40

【 0 1 8 4】

50

## 【化 1 1 8】

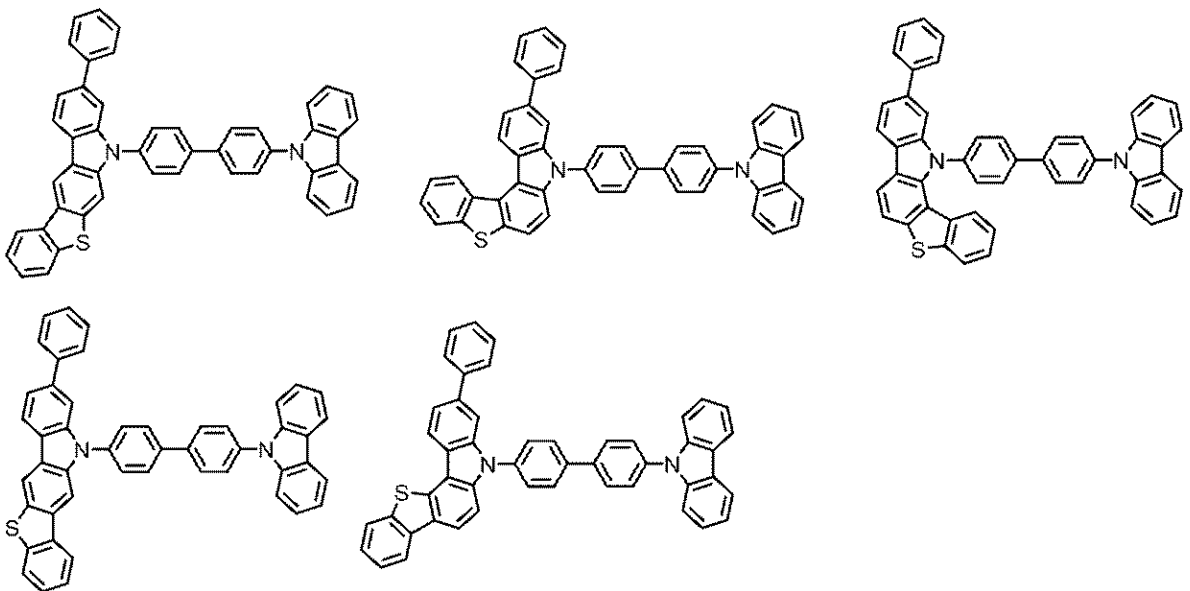


10

20

## 【 0 1 8 5】

## 【化 1 1 9】



30

## 【 0 1 8 6】

## (化合物 M 2)

本実施形態の発光層は、遅延蛍光性の化合物 M 2 を含む。

## 【 0 1 8 7】

## ・遅延蛍光性

遅延蛍光については、「有機半導体のデバイス物性」(安達千波矢編、講談社発行)の 261 ~ 268 ページで解説されている。その文献の中で、蛍光発光材料の励起一重項状態と励起三重項状態のエネルギー差  $E_{13}$  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效率で生じ、熱活性化遅延蛍光 (Thermally Activated delayed Fluorescence, TADF) が発現すると説明されている。さらに、当該文献中の図 10.38 で、遅延蛍光の発生メカニズムが説明されている。本実施形態における化合物 M 2 は、

40

50

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。

【0188】

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。

【0189】

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

10

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

【0190】

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、及び遅延蛍光の挙動解析の一例を説明する。

【0191】

20

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。

【0192】

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

【0193】

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

30

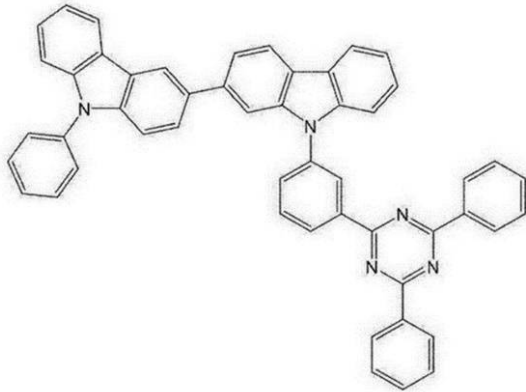
【0194】

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。

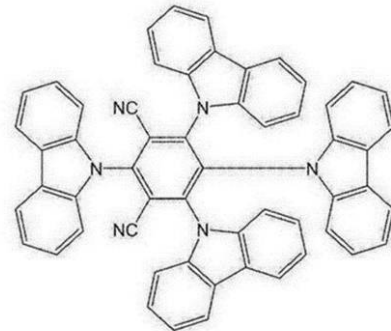
40

【0195】

【化 1 2 0】



(参考化合物 H1)



(参考化合物 D1)

10

【0 1 9 6】

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

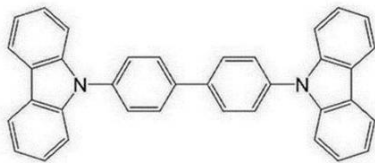
【0 1 9 7】

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

20

【0 1 9 8】

【化 1 2 1】



(参考化合物 H2)

30

【0 1 9 9】

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

【0 2 0 0】

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

40

【0 2 0 1】

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

【0 2 0 2】

50

また、本実施形態では、化合物 M 2 の遅延蛍光性の測定には、次に示す方法により作製した試料を用いる。例えば、化合物 M 2 をトルエンに溶解し、自己吸収の寄与を取り除くた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 F P - 8 6 0 0 (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。

10

## 【0203】

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 M 2) 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 M 2 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 M 2 の Prompt 発光と Delay 発光の量とその比の測定と同様である。

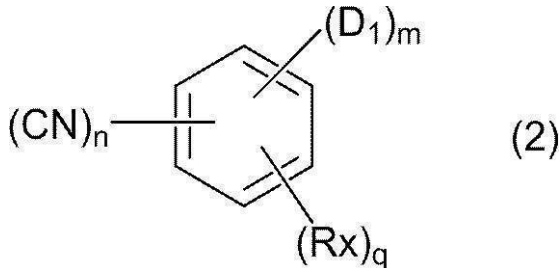
20

## 【0204】

化合物 M 2 としては、例えば、下記一般式 (2) で表される化合物が挙げられる。

## 【0205】

## 【化 1 2 2】



30

## 【0206】

前記一般式 (2) において、

n は、1、2、3 又は 4 であり、

m は、1、2、3 又は 4 であり、

q は、0、1、2、3 又は 4 であり、

$m + n + q = 6$  であり、

CN は、シアノ基であり、

40

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

$R_x$  は、水素原子もしくは置換基であるか、又は隣接する  $R_x$  同士が互いに結合して環を形成し、 $R_x$  が複数ある場合、複数の  $R_x$  は、互いに同一であるか又は異なり、

置換基としての  $R_x$  は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、

置換もしくは無置換のアミノ基、

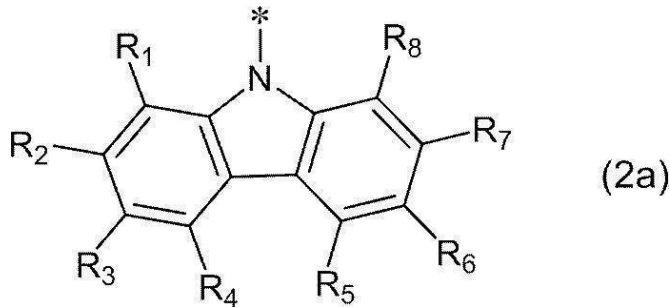
置換もしくは無置換のカルボニル基、

50

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、または  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリアルシリル基であり、  
 CN、D<sub>1</sub> 及び R<sub>x</sub> は、それぞれ 6 員環の炭素原子に結合する。

【0207】

【化123】



10

【0208】

前記一般式(2a)において、R<sub>1</sub> ~ R<sub>8</sub> は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R<sub>1</sub> 及び R<sub>2</sub> の組、R<sub>2</sub> 及び R<sub>3</sub> の組、R<sub>3</sub> 及び R<sub>4</sub> の組、R<sub>5</sub> 及び R<sub>6</sub> の組、R<sub>6</sub> 及び R<sub>7</sub> の組、並びに R<sub>7</sub> 及び R<sub>8</sub> の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

20

置換基としての R<sub>1</sub> ~ R<sub>8</sub> は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリアルシリル基、

ヒドロキシ基、

30

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルオキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリアルアミノ基、

チオール基、

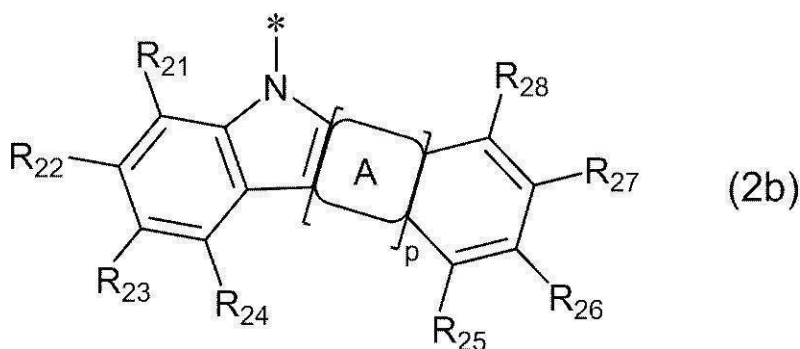
置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルチオ基である。

\* は、前記一般式(2)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

【0209】

【化124】



40

50

## 【0210】

前記一般式(2b)において、

$R_{21} \sim R_{28}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は $R_{21}$ 及び $R_{22}$ の組、 $R_{22}$ 及び $R_{23}$ の組、 $R_{23}$ 及び $R_{24}$ の組、 $R_{25}$ 及び $R_{26}$ の組、 $R_{26}$ 及び $R_{27}$ の組、並びに $R_{27}$ 及び $R_{28}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{21} \sim R_{28}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(2a)における $R_1 \sim R_8$ と同義であり、

Aは、下記一般式(211)又は下記一般式(212)で表される環構造を示し、この環構造Aは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、

pは、1、2、3又は4であり、

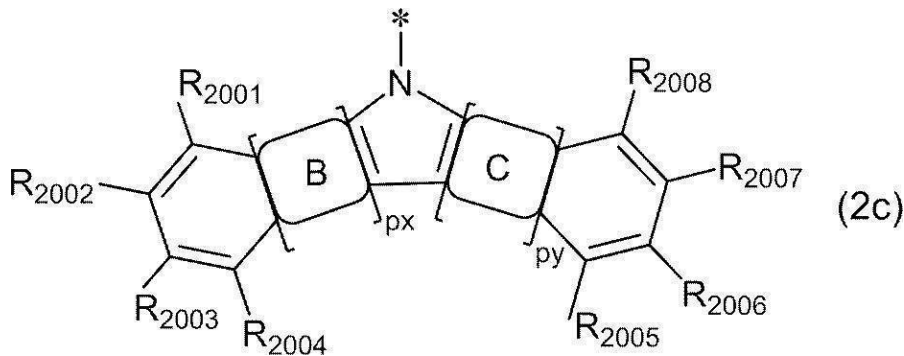
pが2、3又は4である場合、複数の環構造Aは、互いに同一であるか又は異なり、

\*は、前記一般式(2)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

10

## 【0211】

## 【化125】



20

## 【0212】

前記一般式(2c)において、

$R_{2001} \sim R_{2008}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は $R_{2001}$ 及び $R_{2002}$ の組、 $R_{2002}$ 及び $R_{2003}$ の組、 $R_{2003}$ 及び $R_{2004}$ の組、 $R_{2005}$ 及び $R_{2006}$ の組、 $R_{2006}$ 及び $R_{2007}$ の組、並びに $R_{2007}$ 及び $R_{2008}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{2001} \sim R_{2008}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(2a)における置換基としての $R_1 \sim R_8$ と同義であり、

Bは、下記一般式(211)又は下記一般式(212)で表される環構造を示し、この環構造Bは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、

$p_x$ は、1、2、3又は4であり、

$p_x$ が2、3又は4である場合、複数の環構造Bは、互いに同一であるか又は異なり、

Cは、下記一般式(211)又は下記一般式(212)で表される環構造を示し、この環構造Cは、隣接する環構造と任意の位置で縮合し、

$p_y$ は、1、2、3又は4であり、

$p_y$ が2、3又は4である場合、複数の環構造Cは、互いに同一であるか又は異なり、

\*は、前記一般式(2)中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

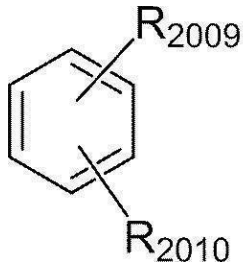
30

40

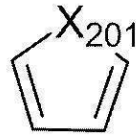
## 【0213】

50

【化 1 2 6】



(211)



(212)

【0 2 1 4】

前記一般式(211)において、 $R_{2009}$ 及び $R_{2010}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、隣接する環構造の一部と互いに結合して環を形成するか、又は $R_{2009}$ 及び $R_{2010}$ の組が互いに結合して環を形成し、

前記一般式(212)において、 $X_{201}$ は、 $CR_{2011}R_{2012}$ 、 $NR_{2013}$ 、硫黄原子、もしくは酸素原子であり、 $R_{2011}$ 、 $R_{2012}$ 及び $R_{2013}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は $R_{2011}$ 及び $R_{2012}$ が互いに結合して環を形成し、

置換基としての $R_{2009}$ 、 $R_{2010}$ 、 $R_{2011}$ 、 $R_{2012}$ 及び $R_{2013}$ は、それぞれ独立に、前記一般式(2a)における置換基としての $R_1 \sim R_8$ と同義である。

【0 2 1 5】

一般式(211)において、 $R_{2009}$ 及び $R_{2010}$ は、それぞれ独立に、隣接する環構造の一部と互いに結合して環を形成するとは、具体的には、以下の(I)~(IV)のいずれかをいう。

また、一般式(211)において、 $R_{2009}$ 及び $R_{2010}$ の組が互いに結合して環を形成するとは、具体的には、以下の(V)をいう。

【0 2 1 6】

(I)一般式(211)で表される環構造同士が隣接する場合に、隣接する2つの環のうち、一方の環の $R_{2009}$ 及び他方の環の $R_{2009}$ の組、一方の環の $R_{2009}$ 及び他方の環の $R_{2010}$ の組、並びに一方の環の $R_{2010}$ 及び他方の環の $R_{2010}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成すること。

【0 2 1 7】

(II)一般式(211)で表される環構造と、一般式(2b)における $R_{25} \sim R_{28}$ を有するベンゼン環とが隣接する場合に、隣接する2つの環のうち、一方の環の $R_{2009}$ 及び他方の環の $R_{25}$ の組、一方の環の $R_{2009}$ 及び他方の環の $R_{28}$ の組、一方の環の $R_{2010}$ 及び他方の環の $R_{25}$ の組、並びに一方の環の $R_{2010}$ 及び他方の環の $R_{28}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成すること。

【0 2 1 8】

(III)一般式(211)で表される環構造と、一般式(2c)における $R_{2001} \sim R_{2004}$ を有するベンゼン環とが隣接する場合に、隣接する2つの環のうち、一方の環の $R_{2009}$ 及び他方の環の $R_{2001}$ の組、一方の環の $R_{2009}$ 及び他方の環の $R_{2004}$ の組、一方の環の $R_{2010}$ 及び他方の環の $R_{2001}$ の組、並びに一方の環の $R_{2010}$ 及び他方の環の $R_{2004}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成すること。

【0 2 1 9】

(IV)一般式(211)で表される環構造と、一般式(2c)における $R_{2005} \sim R_{2008}$ を有するベンゼン環とが隣接する場合に、隣接する2つの環のうち、一方の環の $R_{2009}$ 及び他方の環の $R_{2005}$ の組、一方の環の $R_{2009}$ 及び他方の環の $R_{2008}$ の組、一方の環の $R_{2010}$ 及び他方の環の $R_{2005}$ の組、並びに一方の環の $R_{2010}$ 及び他方の環の $R_{2008}$ の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成すること。

【0 2 2 0】

(V)一般式(211)で表される環構造の $R_{2009}$ 及び $R_{2010}$ の組が互いに結合し

10

20

30

40

50

て環を形成すること。すなわち、(V)は、同じ環に結合するR<sub>2009</sub>及びR<sub>2010</sub>の組が互いに結合して環を形成することをいう。

【0221】

本実施形態の化合物M<sub>2</sub>において、R<sub>x</sub>は、それぞれ独立に、

水素原子、

無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

無置換の環形成原子数5～30の複素環基、または

無置換の炭素数1～30のアルキル基であり、

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

10

【0222】

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

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

【0223】

本実施形態の化合物M<sub>2</sub>において、R<sub>x</sub>は、それぞれ独立に、

水素原子、

無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

無置換のジベンゾフラニル基、または

無置換のジベンゾチエニル基であることがより好ましい。

本実施形態の化合物M<sub>2</sub>において、R<sub>x</sub>は、水素原子であることがさらに好ましい。

20

【0224】

本実施形態の化合物M<sub>2</sub>において、置換基としてのR<sub>1</sub>～R<sub>8</sub>、R<sub>21</sub>～R<sub>28</sub>、R<sub>2001</sub>～R<sub>2008</sub>、R<sub>2009</sub>～R<sub>2010</sub>、及びR<sub>2011</sub>～R<sub>2013</sub>は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、

無置換の環形成原子数5～30の複素環基、または

無置換の炭素数1～30のアルキル基であることが好ましい。

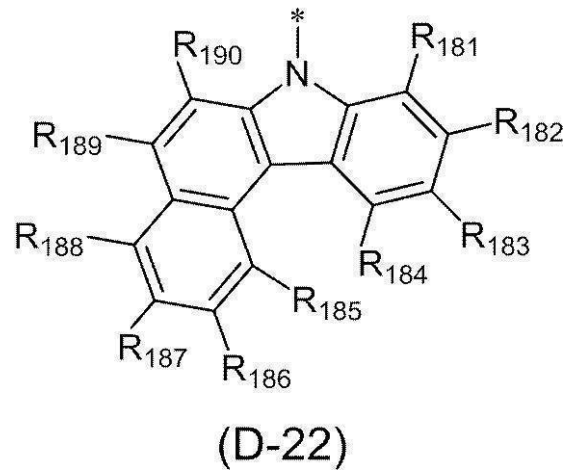
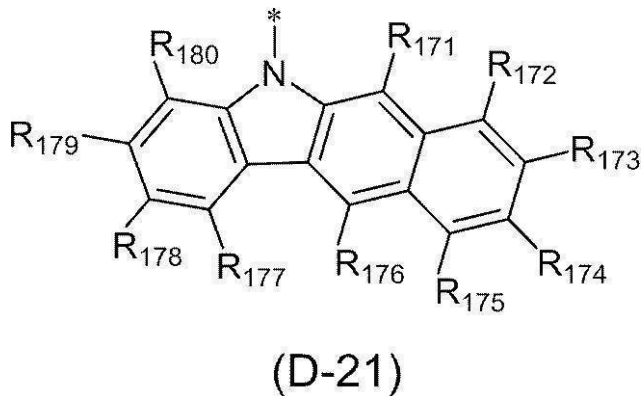
30

【0225】

本実施形態の化合物M<sub>2</sub>において、前記D<sub>1</sub>は、下記一般式(D-21)、(D-22)、(D-23)又は(D-24)で表される基であることも好ましい。

【0226】

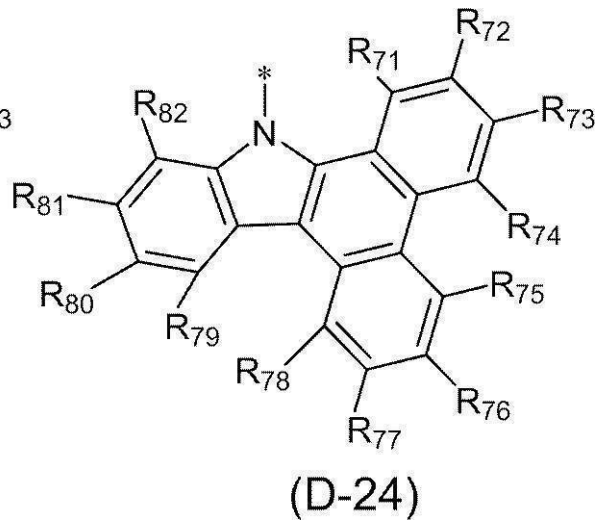
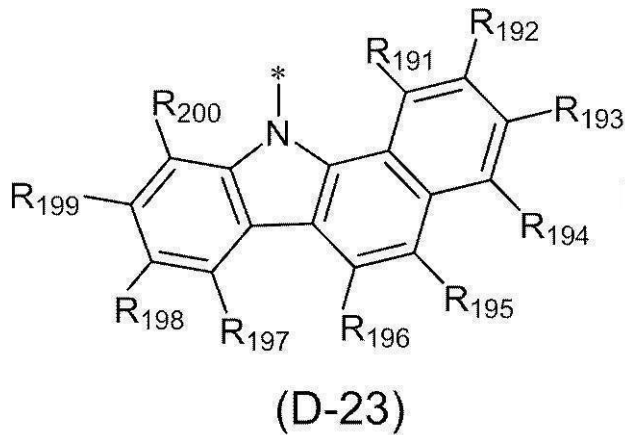
【化127】



40

50

## 【化 1 2 8】



10

## 【0 2 2 7】

前記一般式 (D - 2 1) ~ (D - 2 4) において、R 1 7 1 ~ R 2 0 0 及び R 7 1 ~ R 8 2 は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は R 1 7 1 及び R 1 7 2 の組、R 1 7 2 及び R 1 7 3 の組、R 1 7 3 及び R 1 7 4 の組、R 1 7 4 及び R 1 7 5 の組、R 1 7 5 及び R 1 7 6 の組、R 1 7 7 及び R 1 7 8 の組、R 1 7 8 及び R 1 7 9 の組、R 1 7 9 及び R 1 8 0 の組、R 1 8 1 及び R 1 8 2 の組、R 1 8 2 及び R 1 8 3 の組、R 1 8 3 及び R 1 8 4 の組、R 1 8 5 及び R 1 8 6 の組、R 1 8 6 及び R 1 8 7 の組、R 1 8 7 及び R 1 8 8 の組、R 1 8 8 及び R 1 8 9 の組、R 1 8 9 及び R 1 9 0 の組、R 1 9 1 及び R 1 9 2 の組、R 1 9 2 及び R 1 9 3 の組、R 1 9 3 及び R 1 9 4 の組、R 1 9 4 及び R 1 9 5 の組、R 1 9 5 及び R 1 9 6 の組、R 1 9 7 及び R 1 9 8 の組、R 1 9 8 及び R 1 9 9 の組、R 1 9 9 及び R 2 0 0 の組、R 7 1 及び R 7 2 の組、R 7 2 及び R 7 3 の組、R 7 3 及び R 7 4 の組、R 7 5 及び R 7 6 の組、R 7 6 及び R 7 7 の組、R 7 7 及び R 7 8 の組、R 7 9 及び R 8 0 の組、R 8 0 及び R 8 1 の組、並びに R 8 1 及び R 8 2 の組のいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

20

置換基としての R 1 7 1 ~ R 2 0 0 及び R 7 1 ~ R 8 2 は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

30

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 4 のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 1 4 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 3 0 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 6 のアルキルシリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のハロゲン化アルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 4 のアリールオキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 1 2 のアルキルアミノ基、

40

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキルチオ基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 1 4 のアリールチオ基である。

\* は、前記一般式 ( 2 ) 中におけるベンゼン環の炭素原子との結合部位を表す。

## 【0 2 2 8】

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

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

## 【0 2 2 9】

50

本実施形態の化合物 M 2 において、置換基としての R<sub>171</sub> ~ R<sub>200</sub> 及び R<sub>71</sub> ~ R<sub>82</sub> は、それぞれ独立に、

無置換の環形成炭素数 6 ~ 14 のアリール基、  
無置換の環形成原子数 5 ~ 14 の複素環基、または  
無置換の炭素数 1 ~ 6 のアルキル基であることが好ましい。

【0230】

本実施形態の化合物 M 2 において、R<sub>171</sub> ~ R<sub>200</sub> 及び R<sub>71</sub> ~ R<sub>82</sub> は、水素原子であることも好ましい。

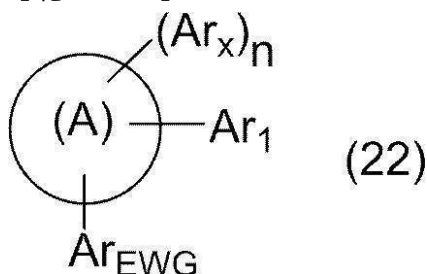
【0231】

化合物 M 2 としては、例えば、下記一般式 (22) で表される化合物が挙げられる。

10

【0232】

【化129】



20

【0233】

前記一般式 (22) 中、Ar<sub>1</sub> は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のフルオロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、置換ホスフォルル基、置換シリル基、シアノ基、ニトロ基、カルボキシ基、及び下記一般式 (1a) ~ (1j) 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。

【0234】

前記一般式 (22) 中、Ar<sub>EWG</sub> は、環内に窒素原子を 1 個以上含む置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、または 1 個以上のシアノ基で置換されている環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基である。

30

【0235】

前記一般式 (22) 中、Ar<sub>x</sub> は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、置換基としての Ar<sub>x</sub> は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のフルオロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、置換ホスフォルル基、置換シリル基、シアノ基、ニトロ基、カルボキシ基、及び下記一般式 (1a) ~ (1j) 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。

40

【0236】

前記一般式 (22) 中、n は、0、1、2、3、4 又は 5 であり、n が 2、3、4 又は 5 である場合、複数の Ar<sub>x</sub> は、互いに同一であるか、または異なる。

【0237】

前記一般式 (22) 中、環 (A) は、5 員環、6 員環、または 7 員環である。環 (A) は、芳香族炭化水素環であっても、複素環であってもよい。Ar<sub>1</sub>、及び Ar<sub>x</sub> は、それぞれ、環 (A) を構成する元素に結合する。

【0238】

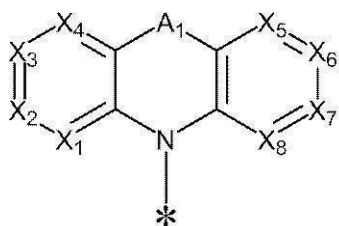
前記一般式 (22) 中、Ar<sub>1</sub> 及び Ar<sub>x</sub> の少なくともいずれかは、下記一般式 (1a

50

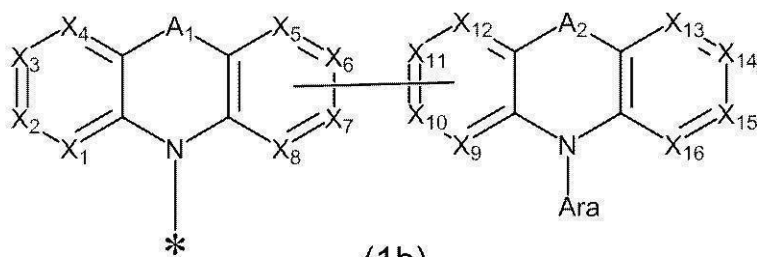
) ~ (1j) で表される基からなる群から選択されるいずれかの基である。

【0239】

【化130】



(1a)

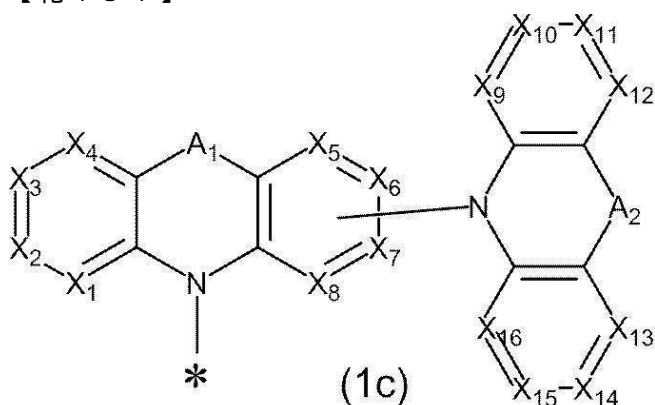


(1b)

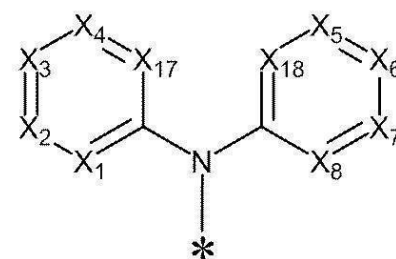
10

【0240】

【化131】



(1c)

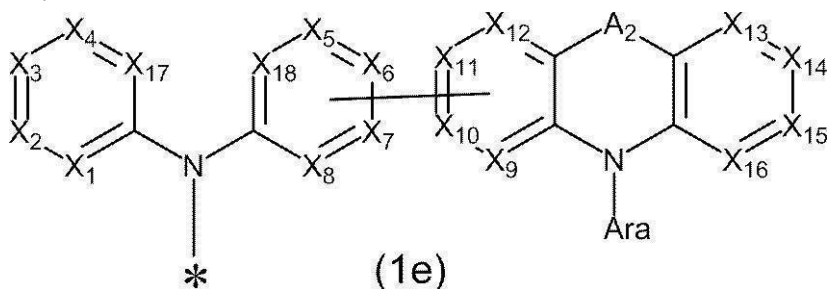


(1d)

20

【0241】

【化132】

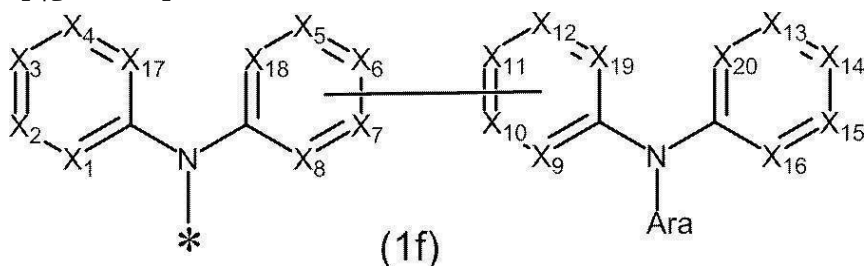


(1e)

30

【0242】

【化133】



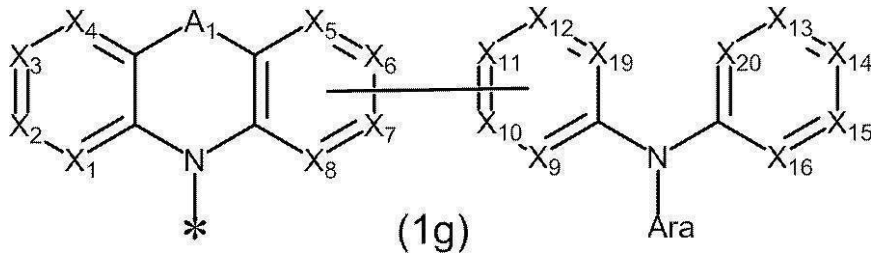
(1f)

40

【0243】

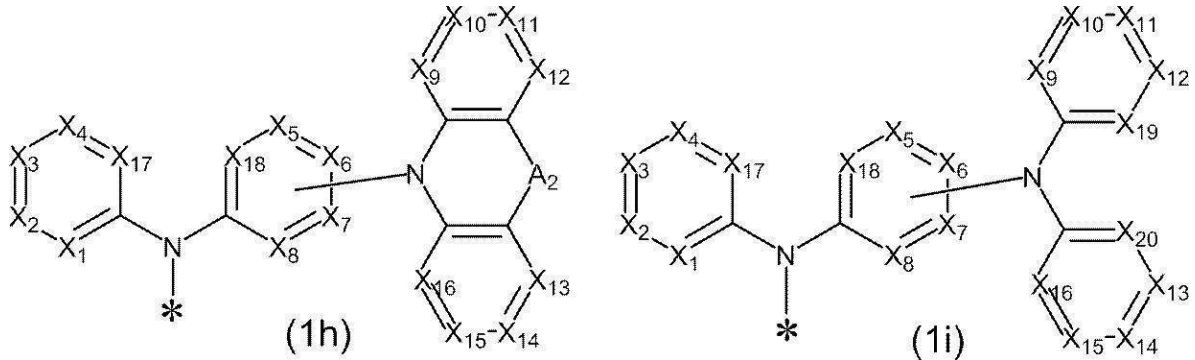
50

【化 1 3 4】



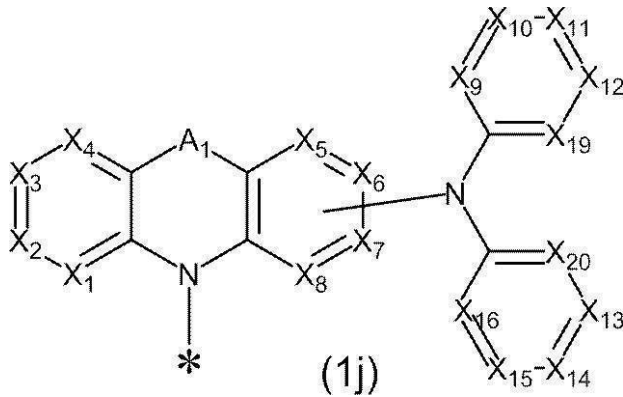
【 0 2 4 4】

【化 1 3 5】



【 0 2 4 5】

【化 1 3 6】



【 0 2 4 6】

前記一般式(1a)~(1j)中、 $X_1 \sim X_{20}$ は、それぞれ独立に、窒素原子(N)または $R_{A1}$ が結合する炭素原子(C- $R_{A1}$ )である。

前記一般式(1b)において、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかは、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかと結合する炭素原子である。

前記一般式(1c)において、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかは、 $A_2$ を含む環における窒素原子と結合する炭素原子である。

前記一般式(1e)において、 $X_5 \sim X_8$ 及び $X_{18}$ のいずれかは、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ のいずれかは、 $X_5 \sim X_8$ 及び $X_{18}$ のいずれかと結合する炭素原子である。

前記一般式(1f)において、 $X_5 \sim X_8$ 及び $X_{18}$ のいずれかは、 $X_9 \sim X_{12}$ 及び $X_{19}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ 及び $X_{19}$ のいずれかは、 $X_5 \sim X_8$ 及び $X_{18}$ のいずれかと結合する炭素原子である。

前記一般式(1g)において、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかは、 $X_9 \sim X_{12}$ 及び $X_{19}$ のいずれかと結合する炭素原子であり、 $X_9 \sim X_{12}$ 及び $X_{19}$ のいずれかは、 $X_5 \sim X_8$ のい

10

20

30

40

50

れかと結合する炭素原子である。

前記一般式(1h)において、 $X_5 \sim X_8$ 及び $X_{18}$ のいずれかは、 $A_2$ を含む環における窒素原子と結合する炭素原子である。

前記一般式(1i)において、 $X_5 \sim X_8$ 及び $X_{18}$ のいずれかは、 $X_9 \sim X_{12}$ 及び $X_{19}$ を含む環と $X_{13} \sim X_{16}$ 及び $X_{20}$ を含む環とを連結する窒素原子と結合する炭素原子である。

前記一般式(1j)において、 $X_5 \sim X_8$ のいずれかは、 $X_9 \sim X_{12}$ 及び $X_{19}$ を含む環と $X_{13} \sim X_{16}$ 及び $X_{20}$ を含む環とを連結する窒素原子と結合する炭素原子である。

$R_{A1}$ は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は複数の $R_{A1}$ 同士からなる組のうちいずれか1つ以上の組が互いに直接結合して環を形成するかもしくはヘテロ原子を介して環を形成し、

置換基としての $R_{A1}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のフルオロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~30のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数7~30のアラルキル基、置換ホスフォルル基、置換シリル基、シアノ基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択されるいずれかの基である。

置換基としての複数の $R_{A1}$ は、互いに同一であるか、または異なる。

前記一般式(1a)において、 $X_1 \sim X_8$ が、 $R_{A1}$ が結合する炭素原子( $C - R_{A1}$ )である場合、複数の $R_{A1}$ は、環を形成しない方が好ましい。

#### 【0247】

前記一般式(1a)~(1j)中、\*は、環(A)との結合部位を表す。

#### 【0248】

前記一般式(1a)~(1j)中、 $A_1$ 及び $A_2$ は、それぞれ独立に、単結合、酸素原子(O)、硫黄原子(S)、 $C(R_{2021})(R_{2022})$ 、 $Si(R_{2023})(R_{2024})$ 、 $C(=O)$ 、 $S(=O)$ 、 $SO_2$ 、または $N(R_{2025})$ である。 $R_{2021} \sim R_{2025}$ は、それぞれ独立に、水素原子、または置換基であり、置換基としての $R_{2021} \sim R_{2025}$ 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のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のフルオロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~30のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数7~30のアラルキル基、置換ホスフォルル基、置換シリル基、シアノ基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択されるいずれかの基である。

#### 【0249】

前記一般式(1a)~(1j)中、 $A_{ra}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のフルオロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~30のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数7~30のアラルキル基、置換ホスフォルル基、及び置換シリル基からなる群から選択されるいずれかの基である。 $A_{ra}$ として好ましくは、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、または置換もしくは無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基である。

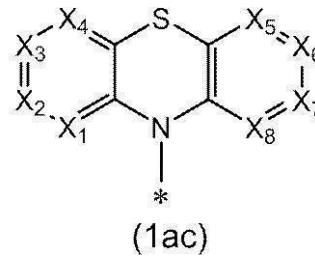
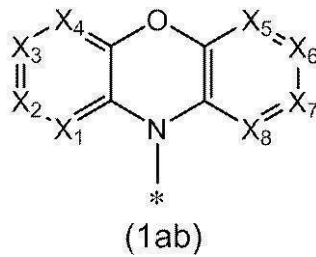
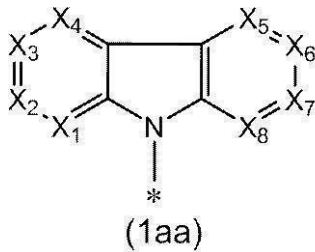
#### 【0250】

前記一般式(1a)は、 $A_1$ が単結合である場合に下記一般式(1aa)で表され、 $A_1$ がOである場合に下記一般式(1ab)で表され、 $A_1$ がSである場合に下記一般式(1ac)で表され、 $A_1$ が $C(R_{2021})(R_{2022})$ である場合に下記一般式(1ad)で表され、 $A_1$ が $Si(R_{2023})(R_{2024})$ である場合に下記一般式(1ae)で表され、 $A_1$ が $C(=O)$ である場合に下記一般式(1af)で表され、 $A_1$ が $S(=O)$ である場合に下記一般式(1ag)で表され、 $A_1$ が $SO_2$ である場合に下記一般式(1ah)で表され、 $A_1$ が $N(R_{2025})$ である場合に下記一般式(1ai)で表さる

。これら下記一般式(1aa)~(1ai)において、 $X_1 \sim X_8$ 、及び $R_{2021} \sim R_{2025}$ は、前述と同義である。前記一般式(1b)、(1c)、(1e)、(1g)~(1j)についても、 $A_1$ 及び $A_2$ による環同士の連結態様は、下記一般式(1aa)~(1ai)と同様である。下記一般式(1aa)において、 $X_1 \sim X_8$ が、 $R_{A1}$ が結合する炭素原子(C- $R_{A1}$ )である場合、置換基としての複数の $R_{A1}$ は、環を形成しない方が好ましい。

【0251】

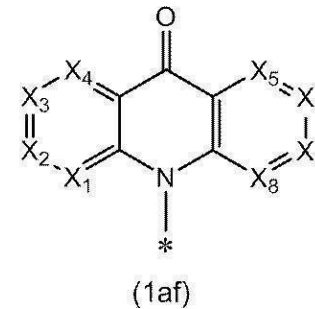
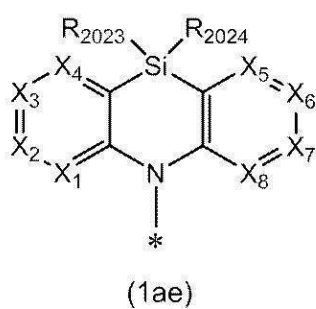
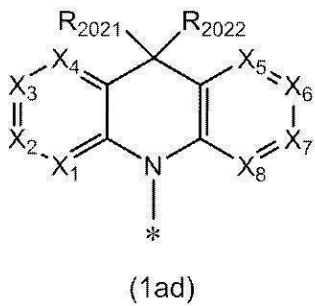
【化137】



10

【0252】

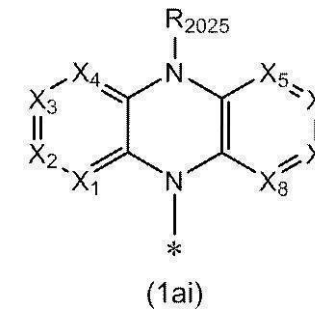
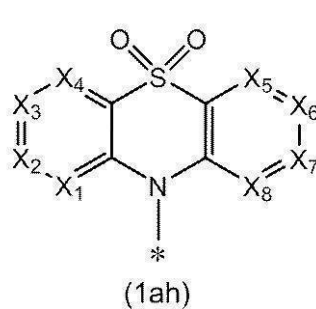
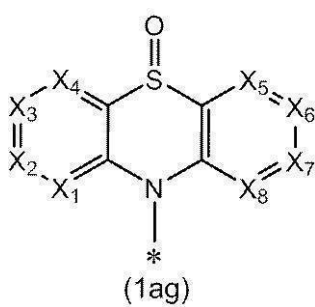
【化138】



20

【0253】

【化139】



30

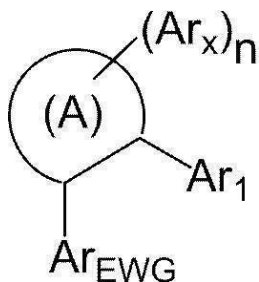
【0254】

化合物M2は、下記一般式(221)で表されることが好ましい。

40

【0255】

【化140】



50

## 【0256】

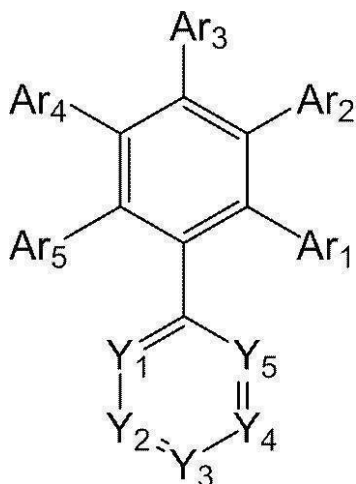
前記一般式(221)中の、 $Ar_1$ 、 $Ar_{EWG}$ 、 $Ar_x$ 、 $n$ 及び環(A)は、それぞれ、前記一般式(22)中の、 $Ar_1$ 、 $Ar_{EWG}$ 、 $Ar_x$ 、 $n$ 及び環(A)と同義である。

## 【0257】

化合物M2は、下記一般式(222)で表されることも好ましい。

## 【0258】

## 【化141】



(222)

10

20

## 【0259】

前記一般式(222)中、 $Y_1 \sim Y_5$ は、それぞれ独立に、窒素原子(N)、シアノ基が結合する炭素原子(C-CN)または $R_{A2}$ が結合する炭素原子(C- $R_{A2}$ )であり、 $Y_1 \sim Y_5$ のうち、少なくとも1つは、NまたはC-CNである。複数の $R_{A2}$ は、互いに同一であるか、または異なる。 $R_{A2}$ は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、置換基としての $R_{A2}$ は、置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のフルオロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~30のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数7~30のアラルキル基、置換ホスフォルル基、置換シリル基、シアノ基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択される基であり、

30

複数の $R_{A2}$ は、互いに同一であるか、または異なる。

## 【0260】

前記一般式(222)中、 $Ar_1$ は、前記一般式(22)中の $Ar_1$ と同義である。

## 【0261】

前記一般式(222)中、 $Ar_2 \sim Ar_5$ は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、置換基としての $Ar_2 \sim Ar_5$ 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のヘテロアリール基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1~30のフルオロアルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数3~30のシクロアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数7~30のアラルキル基、置換ホスフォルル基、置換シリル基、シアノ基、ニトロ基、カルボキシ基、及び前記一般式(1a)~(1c)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。

40

## 【0262】

前記一般式(222)中、 $Ar_1 \sim Ar_5$ のうち少なくとも一つは、前記一般式(1a)~(1c)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。

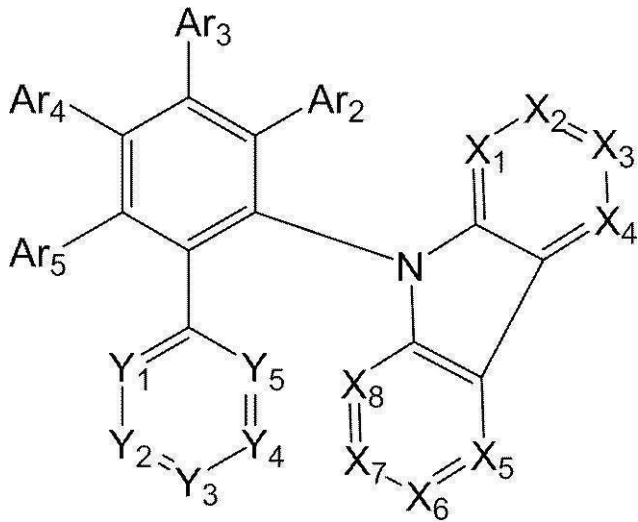
## 【0263】

化合物M2は、下記一般式(11aa)、下記一般式(11bb)、または下記一般式(11cc)で表される化合物であることも好ましい。

## 【0264】

50

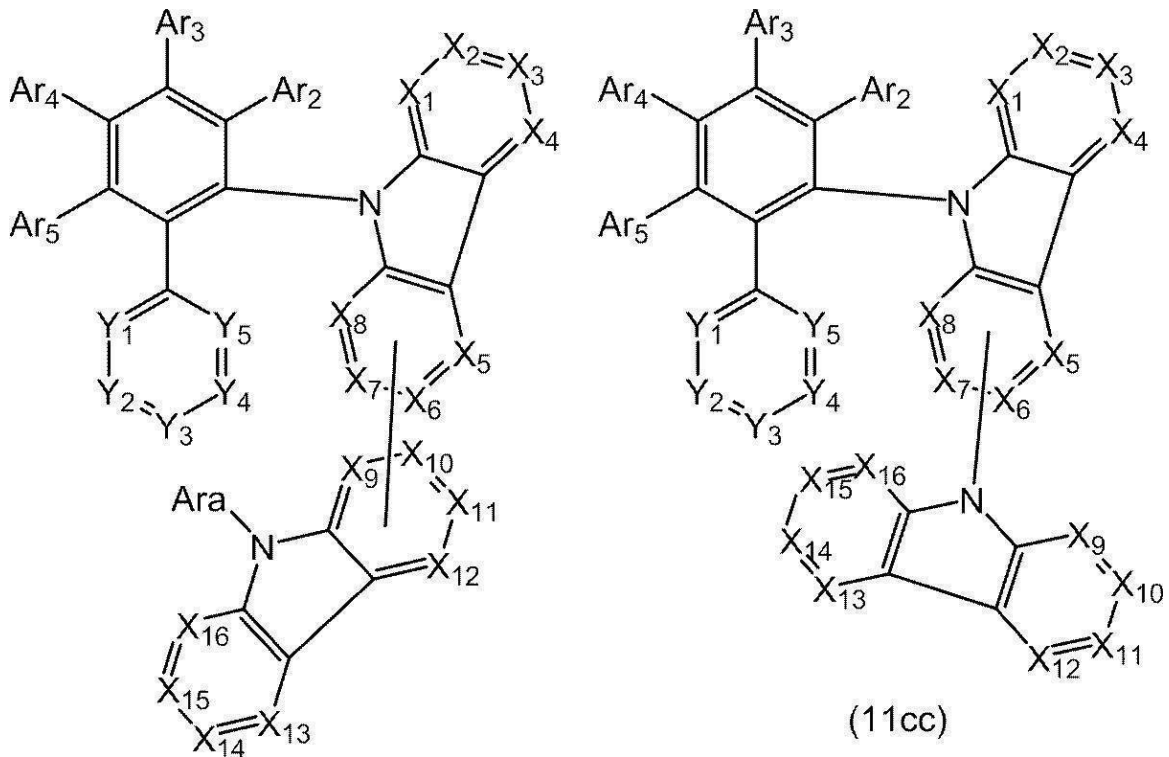
【化 1 4 2】



(11aa)

【 0 2 6 5】

【化 1 4 3】



(11bb)

(11cc)

【 0 2 6 6】

前記一般式(11aa)、(11bb)及び(11cc)中、 $Y_1 \sim Y_5$ 、 $Ar_2$ 、 $Ar_2 \sim Ar_5$ 、 $X_1 \sim X_{16}$ 、 $Ar_1$ 、及び $Ara$ は、それぞれ前述した $Y_1 \sim Y_5$ 、 $Ar_2$ 、 $Ar_2 \sim Ar_5$ 、 $X_1 \sim X_{16}$ 、 $Ar_1$ 、及び $Ara$ と同じ意味を表す。

【 0 2 6 7】

化合物M2としては、例えば、下記一般式(23)で表される化合物が挙げられる。

【 0 2 6 8】

10

20

30

40

50

【化 1 4 4】



【 0 2 6 9 】

前記一般式 ( 2 3 ) において、

Az は、

- 置換または無置換のピリジン環、
- 置換または無置換のピリミジン環、
- 置換または無置換のトリアジン環、及び
- 置換または無置換のピラジン環

10

からなる群から選択される環構造であり、

c は 0、1、2、3、4 又は 5 であり、

c が 0 のとき、Cz と Az とが単結合で結合し、

c が 1、2、3、4 又は 5 のとき、L<sub>23</sub> は、

- 置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリーレン基、及び
- 置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリーレン基

からなる群から選択される連結基であり、

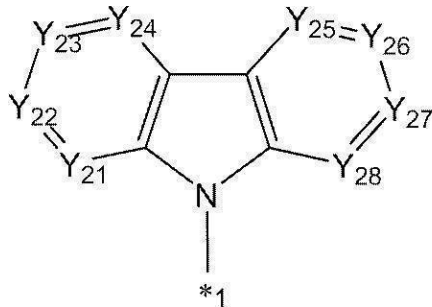
c が 2、3、4 又は 5 のとき、複数の L<sub>23</sub> は、互いに同一であるかまたは異なり、複数の L<sub>23</sub> 同士が結合して環を形成するかまたは環を形成せず、

20

Cz は、下記一般式 ( 2 3 a ) で表される。

【 0 2 7 0 】

【化 1 4 5】



(23a)

30

【 0 2 7 1 】

前記一般式 ( 2 3 a ) において、

Y<sub>21</sub> 乃至 Y<sub>28</sub> は、それぞれ独立に、窒素原子または C R<sub>A3</sub> であり、R<sub>A3</sub> は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は複数の R<sub>A3</sub> 同士からなる組のうちいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、置換基としての R<sub>A3</sub> は、それぞれ独立に、

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

40

からなる群から選択される基であり、

50

複数の  $R_{A3}$  は、互いに同一であるかまたは異なり、  
 \* 1 は、 $L_{23}$  で表される連結基の構造中の炭素原子との結合部位、または  $A_z$  で表される環構造中の炭素原子との結合部位を表す。

【0272】

$Y_{21}$  乃至  $Y_{28}$  は、 $CR_{A3}$  であることも好ましい。

【0273】

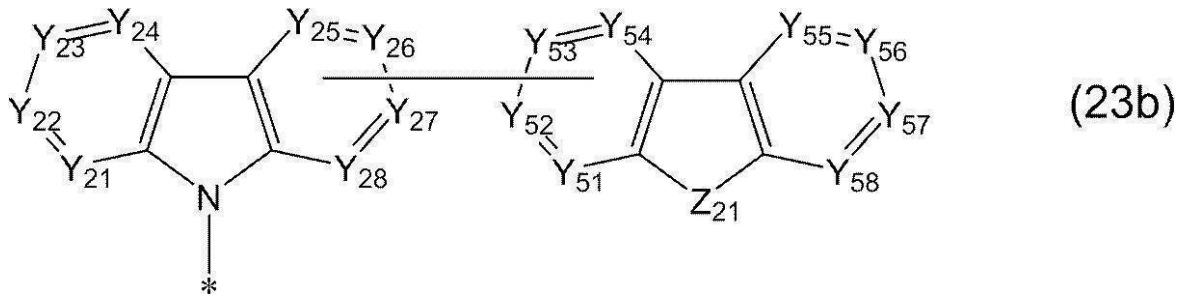
前記一般式 (23) における  $c$  は、0 または 1 であることが好ましい。

【0274】

前記  $C_z$  は、下記一般式 (23b)、一般式 (23c) または一般式 (23d) で表されることも好ましい。

【0275】

【化146】

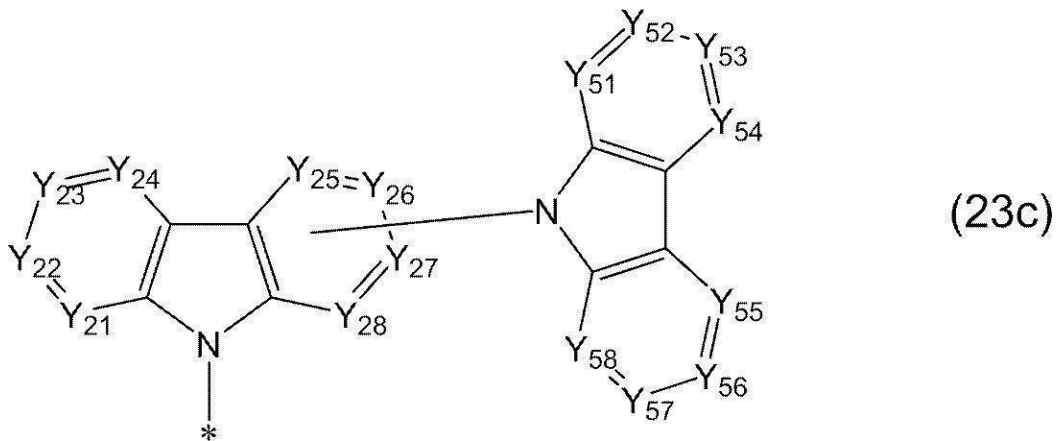


10

20

【0276】

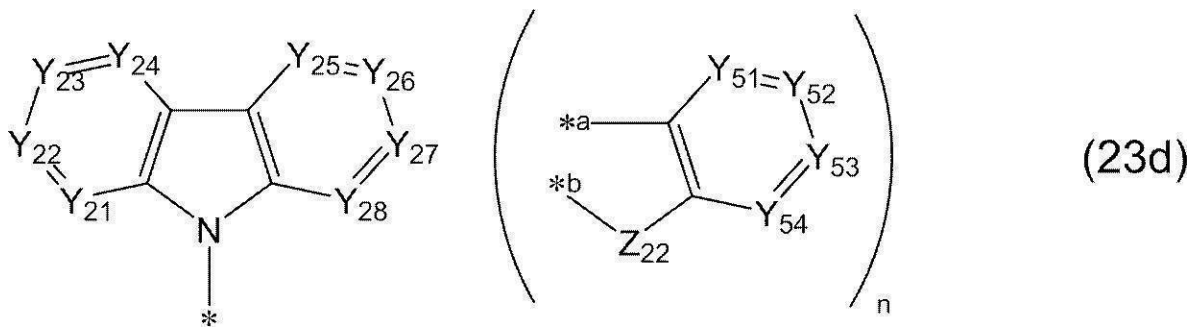
【化147】



30

【0277】

【化148】



40

【0278】

前記一般式 (23b)、一般式 (23c) 及び一般式 (23d) において、 $Y_{21}$  乃至  $Y_{28}$ 、及び  $Y_{51}$  乃至  $Y_{58}$  は、それぞれ独立に、窒素原子または  $CR_{A4}$  であり、  
 ただし、前記一般式 (23b) 中、 $Y_{25}$  乃至  $Y_{28}$  のうち、少なくとも一つは、 $Y_{51}$

50

乃至  $Y_{54}$  のいずれかと結合する炭素原子であり、 $Y_{51}$  乃至  $Y_{54}$  のうち、少なくとも一つは、 $Y_{25}$  乃至  $Y_{28}$  のいずれかと結合する炭素原子であり、

前記一般式 (23c) 中、 $Y_{25}$  乃至  $Y_{28}$  のうち、少なくとも一つは、 $Y_{51}$  乃至  $Y_{58}$  を含有する含窒素縮合環の 5 員環中の窒素原子と結合する炭素原子であり、

前記一般式 (23d) 中、\*a 及び \*b は、それぞれ、 $Y_{21}$  乃至  $Y_{28}$  のうちのいずれかとの結合部位を表し、 $Y_{25}$  乃至  $Y_{28}$  のうち、少なくとも一つは、\*a で表される結合部位であり、 $Y_{25}$  乃至  $Y_{28}$  のうち、少なくとも一つは、\*b で表される結合部位であり、

n は、1、2、3 又は 4 であり、

$R_{A4}$  は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は複数の  $R_{A4}$  同士からなる組のうちいずれか 1 つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての  $R_{A4}$  は、それぞれ独立に、

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

からなる群から選択されるいずれかの置換基であり、

複数の  $R_{A4}$  は、互いに同一であるかまたは異なり、

$Z_{21}$  及び  $Z_{22}$  は、それぞれ独立に、酸素原子、硫黄原子、 $NR_{45}$ 、及び  $CR_{46}R_{47}$  からなる群から選択されるいずれか一種であり、

$R_{45}$  は、水素原子もしくは置換基であり、

$R_{46}$  及び  $R_{47}$  は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又は  $R_{46}$  及び  $R_{47}$  の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としての  $R_{45}$ 、 $R_{46}$  及び  $R_{47}$  は、それぞれ独立に、

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

からなる群から選択されるいずれかの置換基であり、

複数の  $R_{45}$  は、互いに同一であるかまたは異なり、

複数の  $R_{46}$  は、互いに同一であるかまたは異なり、

複数の  $R_{47}$  は、互いに同一であるかまたは異なり、

\* は、 $A_z$  で表される環構造中の炭素原子との結合部位を表す。

#### 【0279】

$Z_{21}$  は、 $NR_{45}$  であることが好ましい。

$Z_{21}$  が  $NR_{45}$  である場合、 $R_{45}$  は、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のア

10

20

30

40

50

リール基であることが好ましい。

【0280】

$Z_{22}$ は、 $NR_{45}$ であることが好ましい。

$Z_{22}$ が $NR_{45}$ である場合、 $R_{45}$ は、置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることが好ましい。

【0281】

$Y_{51}$ 乃至 $Y_{58}$ は、 $CR_{A4}$ であることが好ましく、ただし、この場合、 $Y_{51}$ 乃至 $Y_{58}$ のうち、少なくともいずれかが、前記一般式(23a)で表される環構造と結合する炭素原子である。

【0282】

$Cz$ は、前記一般式(23d)で表され、 $n$ は、1であることも好ましい。

【0283】

$Az$ は、置換または無置換のピリミジン環、及び置換または無置換のトリアジン環からなる群から選択される環構造であることが好ましい。

$Az$ は、置換基を有するピリミジン環、及び置換基を有するトリアジン環からなる群から選択される環構造であり、これらピリミジン環、及びトリアジン環が有する置換基は、置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、及び置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基からなる群から選択される基であることがより好ましく、置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることがさらに好ましい。

【0284】

$Az$ としてのピリミジン環及びトリアジン環が、置換または無置換のアリール基を置換基として有する場合、当該アリール基の環形成炭素数は、6～20であることが好ましく、6～14であることがより好ましく、6～12であることがさらに好ましい。

【0285】

$Az$ が、置換または無置換のアリール基を置換基として有する場合、当該置換基は、置換または無置換のフェニル基、置換または無置換のビフェニル基、置換または無置換のナフチル基、置換または無置換のフェナントリル基、置換または無置換のターフェニル基、及び置換または無置換のフルオレニル基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることが好ましく、置換または無置換のフェニル基、置換または無置換のビフェニル基、及び置換または無置換のナフチル基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることがより好ましい。

$Az$ が、置換または無置換のヘテロアリール基を置換基として有する場合、当該置換基は、置換または無置換のカルバゾリル基、置換または無置換のジベンゾフラニル基、及び置換または無置換のジベンゾチオフェニル基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることが好ましい。

【0286】

$RA_4$ は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、置換基としての $RA_4$ は、置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、及び置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることが好ましい。

置換基としての $RA_4$ が置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基である場合、置換基としての $RA_4$ は、置換または無置換のフェニル基、置換または無置換のビフェニル基、置換または無置換のナフチル基、置換または無置換のフェナントリル基、置換または無置換のターフェニル基、及び置換または無置換のフルオレニル基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることが好ましく、置換または無置換のフェニル基、置換または無置換のビフェニル基、及び置換または無置換のナフチル基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることがより好ましい。

置換基としての $RA_4$ が置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基である場合、置換基としての $RA_4$ は、置換または無置換のカルバゾリル基、置換または無置換のジベンゾフラニル基、及び置換または無置換のジベンゾチオフェニル基からなる

10

20

30

40

50

群から選択されるいずれかの置換基であることが好ましい。

【 0 2 8 7 】

置換基としての  $R_{45}$ 、 $R_{46}$  及び  $R_{47}$  は、それぞれ独立に、置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、及び置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基からなる群から選択されるいずれかの置換基であることが好ましい。

【 0 2 8 8 】

・本実施形態の化合物 M 2 の製造方法

本実施形態の化合物 M 2 は、公知の方法により製造することができる。

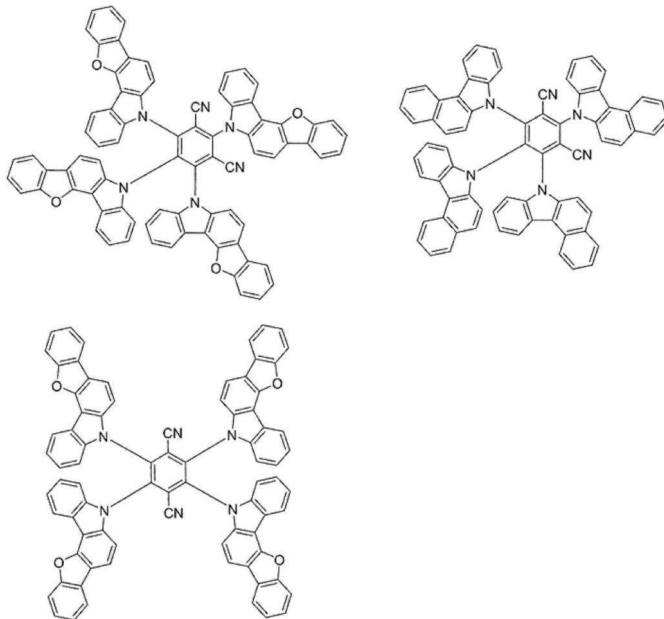
【 0 2 8 9 】

・化合物 M 2 の具体例

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

【 0 2 9 0 】

【 化 1 4 9 】



【 0 2 9 1 】

10

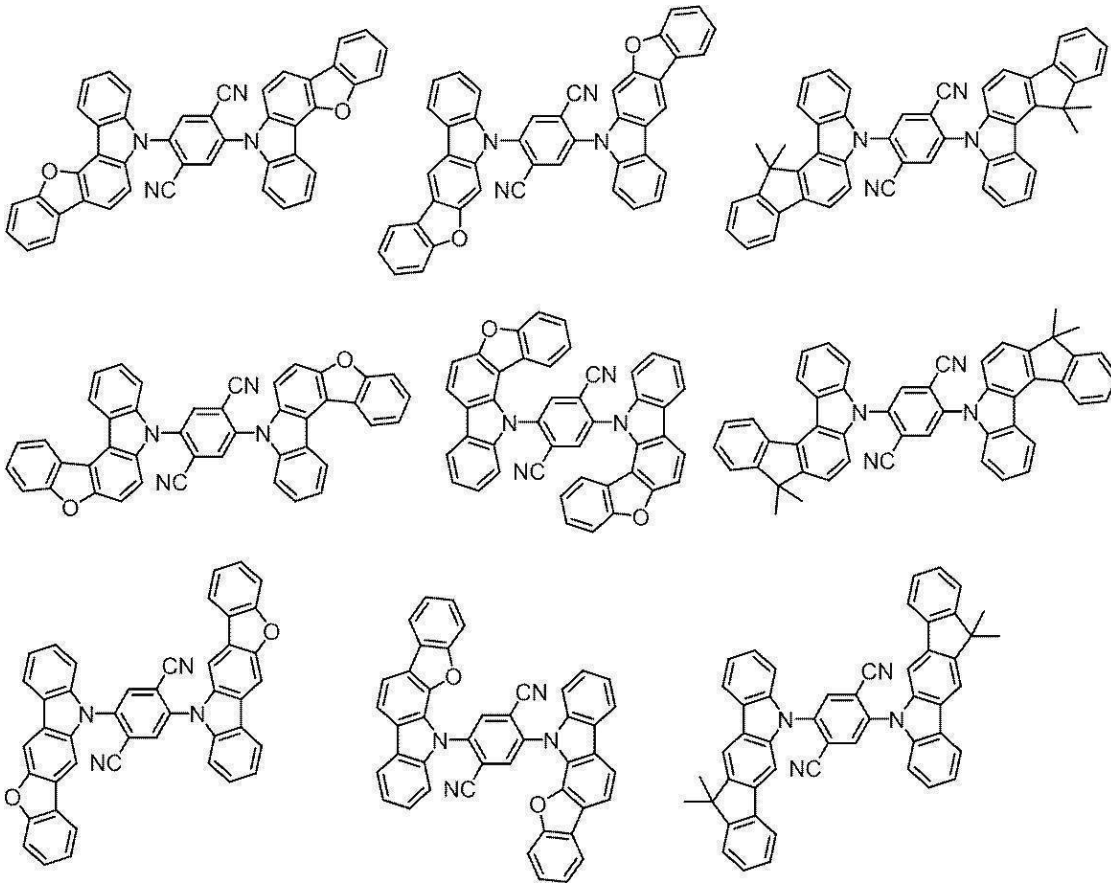
20

30

40

50

【化 1 5 0】

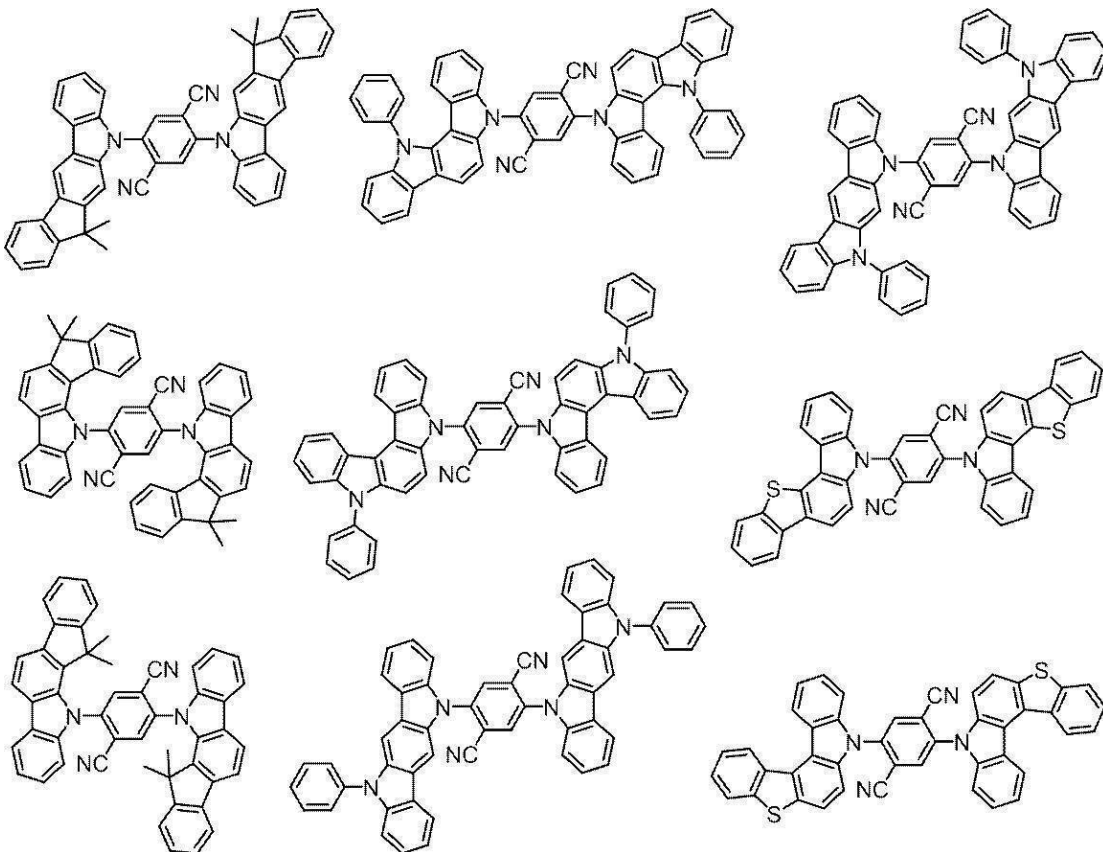


10

20

【 0 2 9 2】

【化 1 5 1】



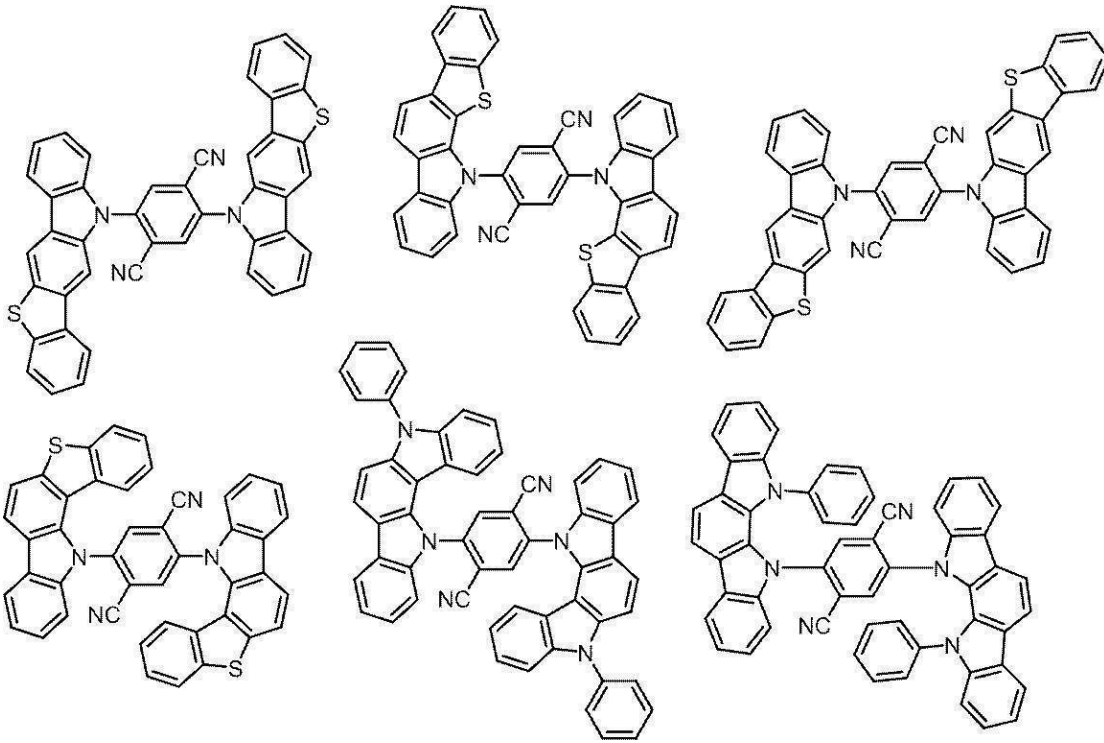
30

40

50

【 0 2 9 3 】

【 化 1 5 2 】

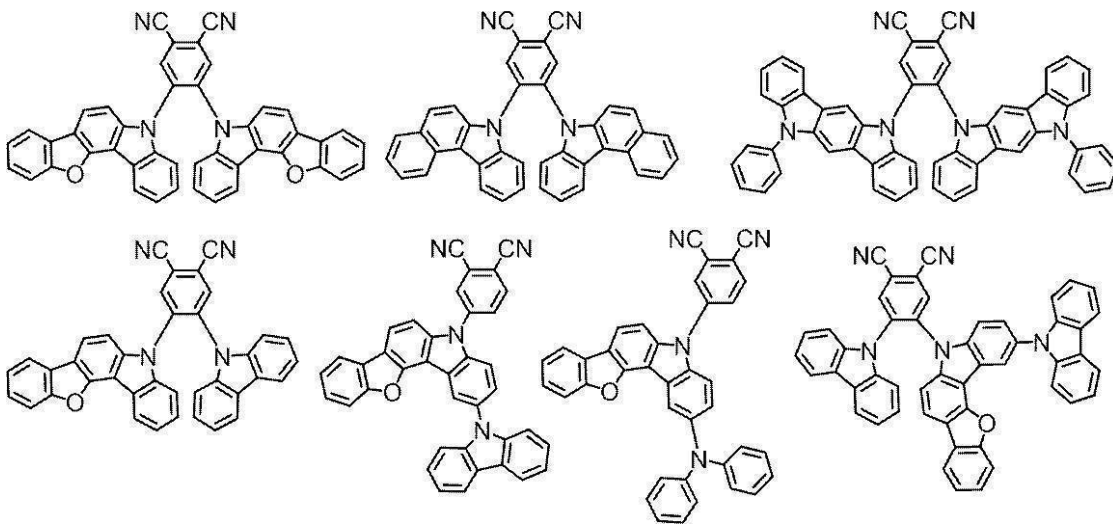


10

20

【 0 2 9 4 】

【 化 1 5 3 】



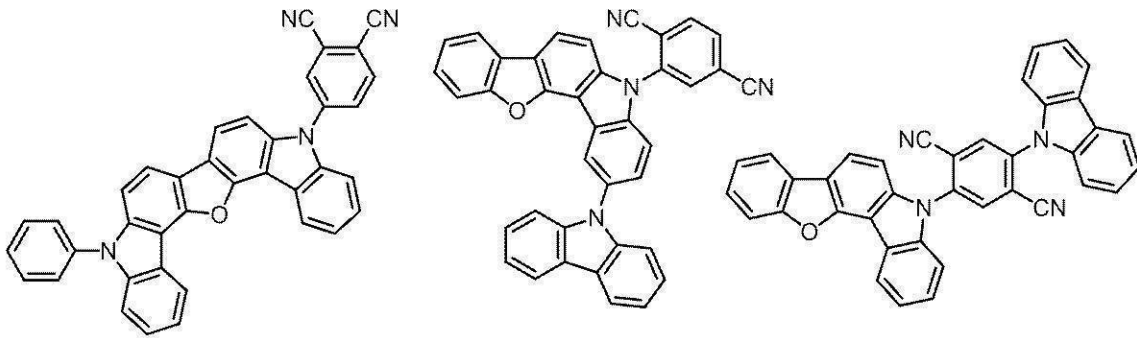
30

【 0 2 9 5 】

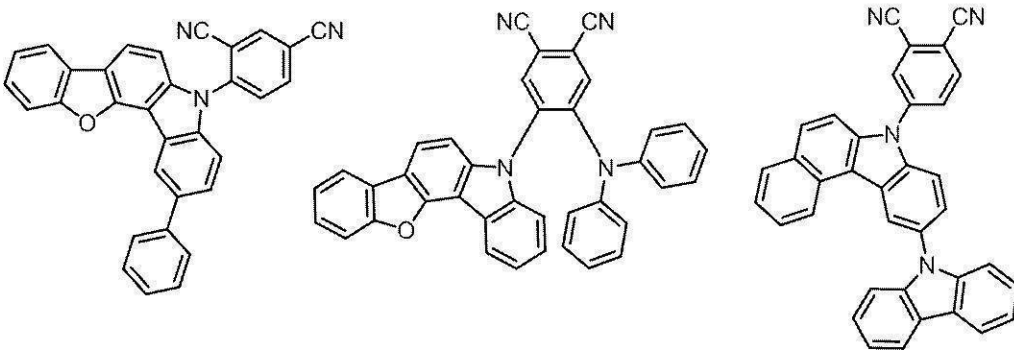
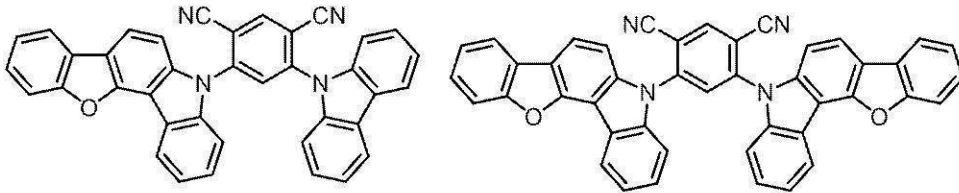
40

50

【化 1 5 4】



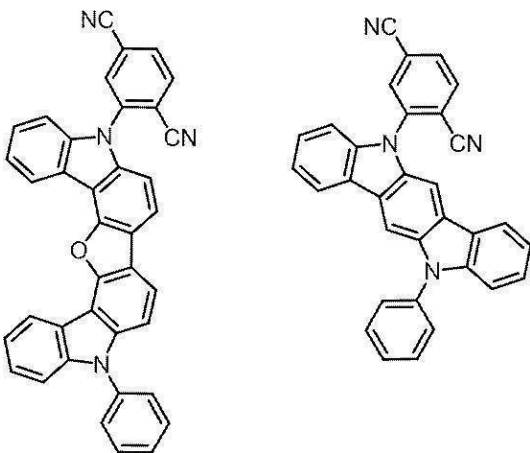
10



20

【 0 2 9 6】

【化 1 5 5】



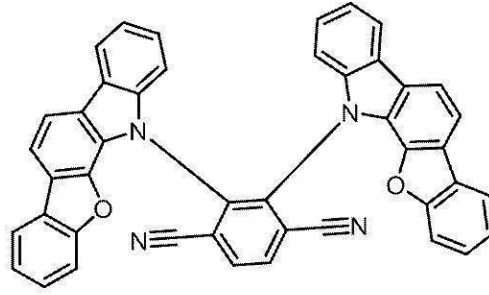
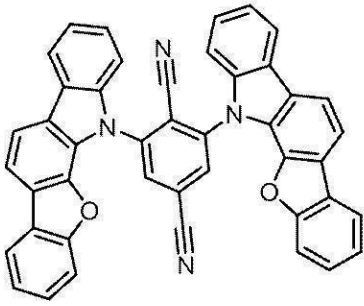
30

【 0 2 9 7】

40

50

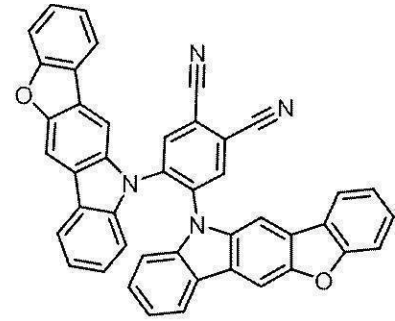
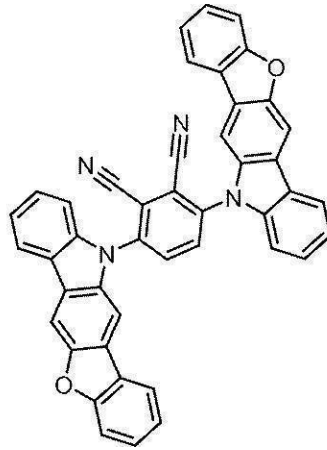
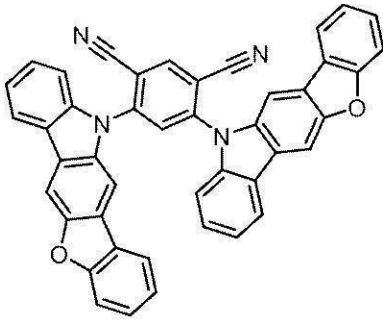
【化 1 5 6】



10

【 0 2 9 8】

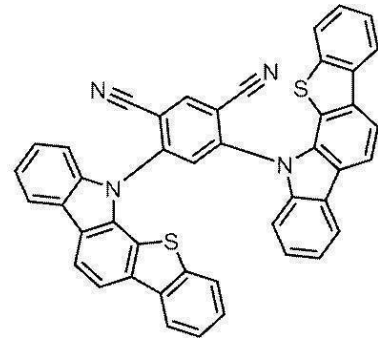
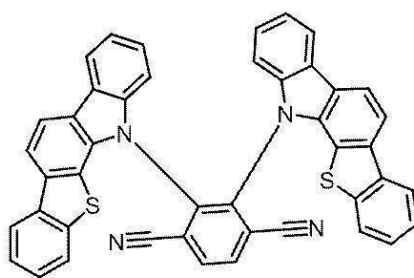
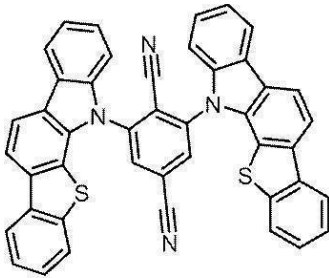
【化 1 5 7】



20

【 0 2 9 9】

【化 1 5 8】



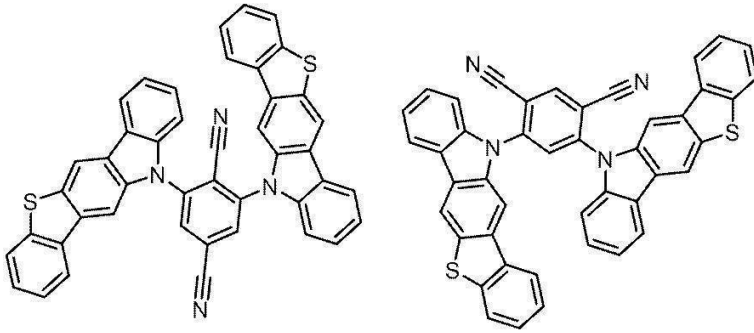
30

【 0 3 0 0】

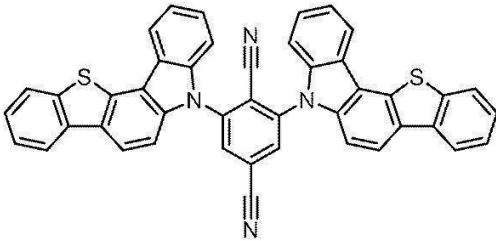
40

50

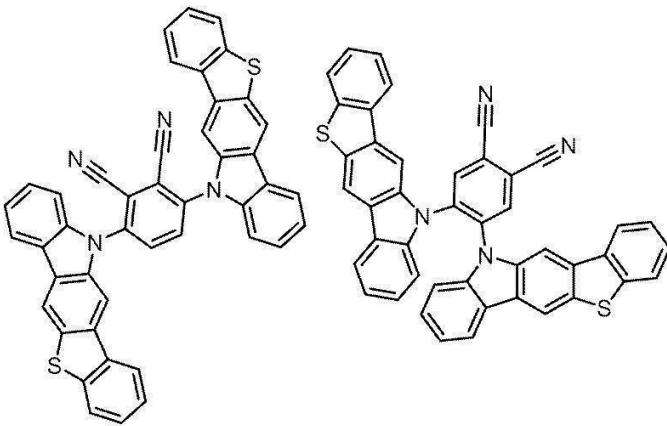
【化 1 5 9】



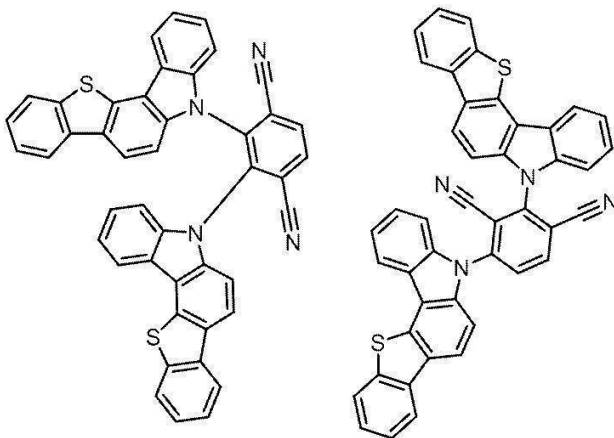
10



20



30

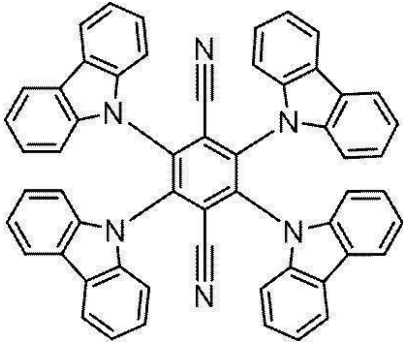


40

【 0 3 0 1】

50

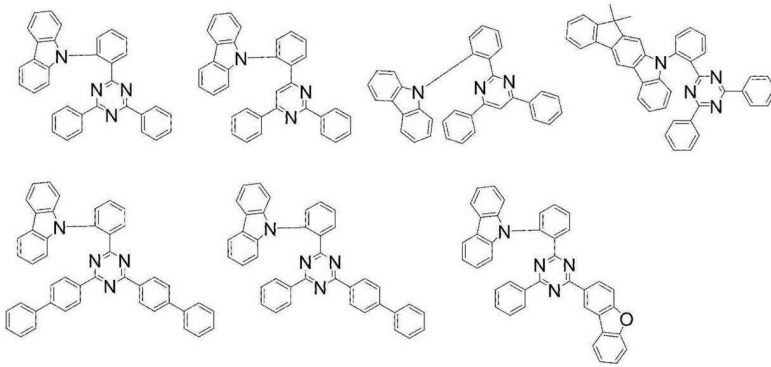
【化 1 6 0】



10

【 0 3 0 2】

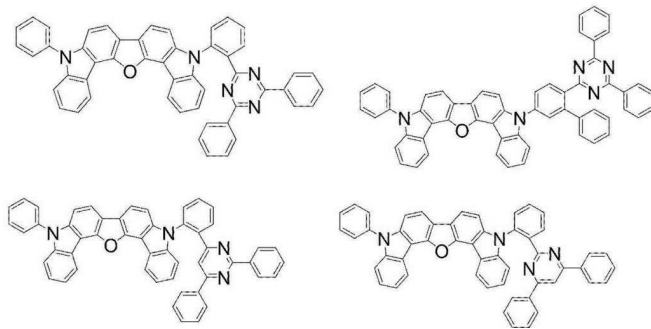
【化 1 6 1】



20

【 0 3 0 3】

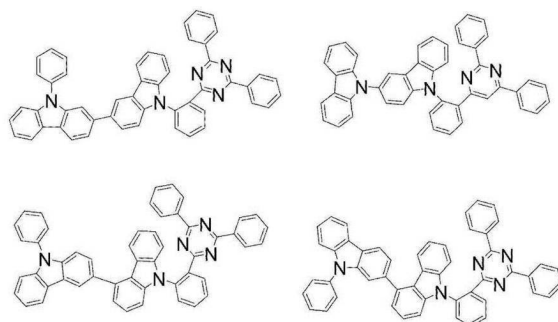
【化 1 6 2】



30

【 0 3 0 4】

【化 1 6 3】

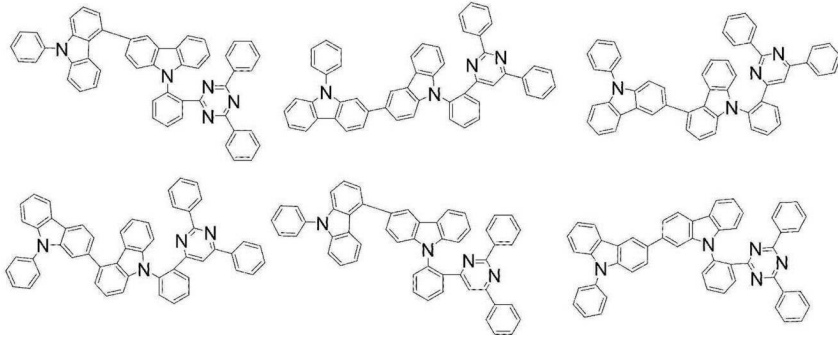


40

【 0 3 0 5】

50

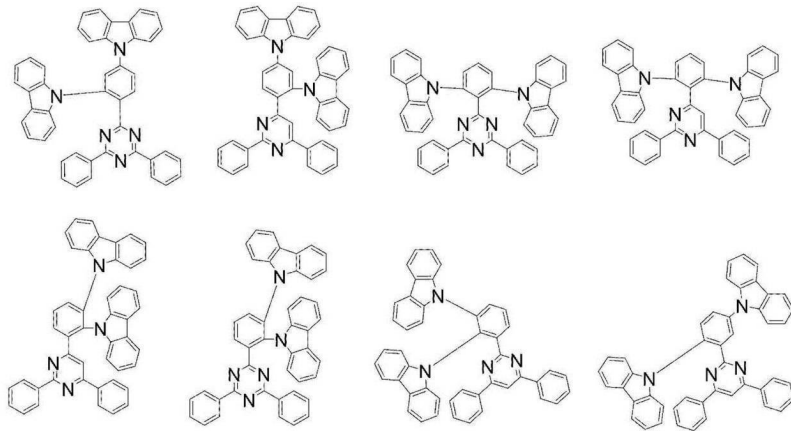
【化 1 6 4】



10

【 0 3 0 6】

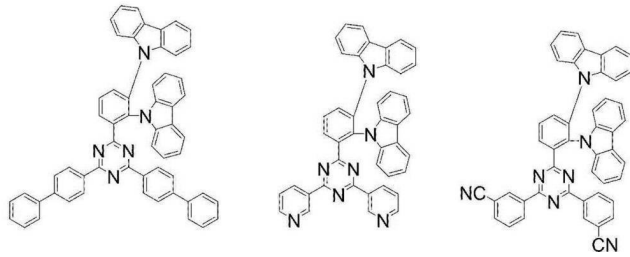
【化 1 6 5】



20

【 0 3 0 7】

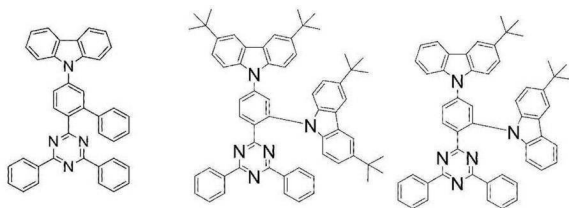
【化 1 6 6】



30

【 0 3 0 8】

【化 1 6 7】

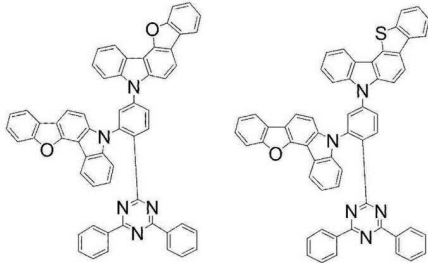


40

【 0 3 0 9】

50

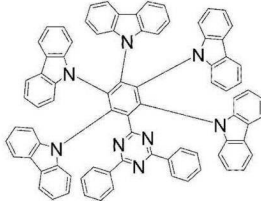
【化 1 6 8】



【 0 3 1 0】

10

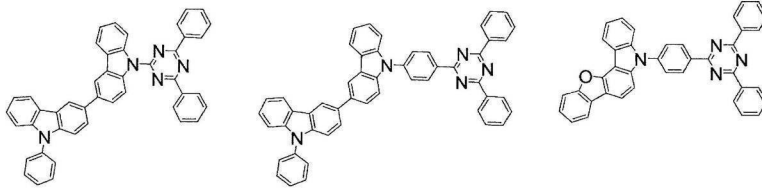
【化 1 6 9】



【 0 3 1 1】

【化 1 7 0】

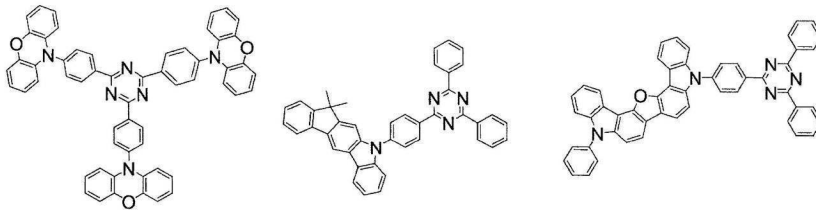
20



【 0 3 1 2】

【化 1 7 1】

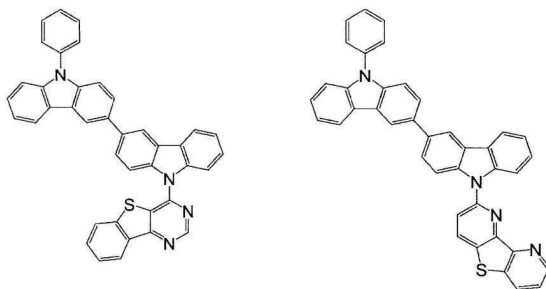
30



【 0 3 1 3】

【化 1 7 2】

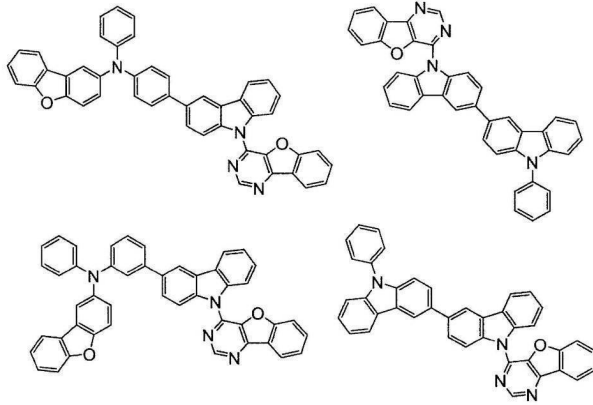
40



【 0 3 1 4】

50

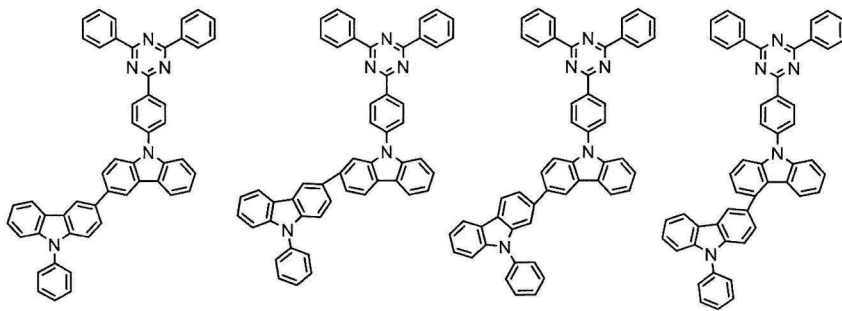
【化 1 7 3】



10

【 0 3 1 5】

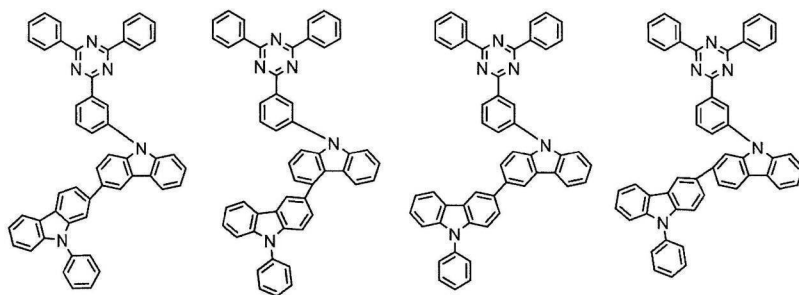
【化 1 7 4】



20

【 0 3 1 6】

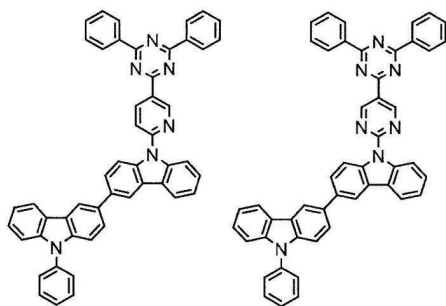
【化 1 7 5】



30

【 0 3 1 7】

【化 1 7 6】

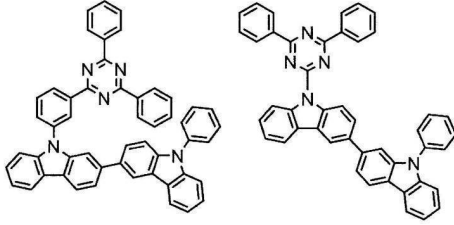


40

【 0 3 1 8】

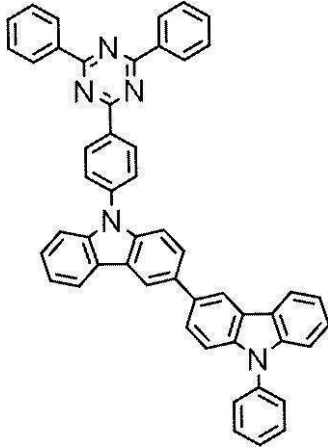
50

## 【化 1 7 7】



## 【 0 3 1 9】

## 【化 1 7 8】

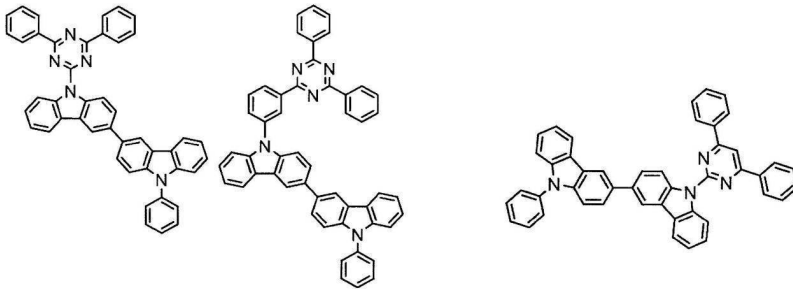


10

20

## 【 0 3 2 0】

## 【化 1 7 9】



30

## 【 0 3 2 1】

< 発光層における化合物 M 3 及び化合物 M 2 の関係 >

本実施形態の有機 EL 素子において、化合物 M 2 の一重項エネルギー  $S_1(M 2)$  と、化合物 M 3 の一重項エネルギー  $S_1(M 3)$  とは、下記数式 (数 1) の関係を満たす。

$$S_1(M 3) > S_1(M 2) \quad \dots (数 1)$$

## 【 0 3 2 2】

化合物 M 3 の 77 [ K ] におけるエネルギーギャップ  $T_{77K}(M 3)$  は、化合物 M 2 の 77 [ K ] におけるエネルギーギャップ  $T_{77K}(M 2)$  よりも大きいことが好ましい。すなわち、下記数式 (数 1 1) の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{77K}(M 3) > T_{77K}(M 2) \quad \dots (数 1 1)$$

## 【 0 3 2 3】

本実施形態の有機 EL 素子を発光させたときに、発光層において、化合物 M 3 が主に発光していないことが好ましい。

## 【 0 3 2 4】

・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

40

50

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

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

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

そのため、本実施形態では、通常の三重項エネルギーTと測定手法は同じであるが、その厳密な意味において異なることを区別するため、次のようにして測定される値をエネルギーギャップ $T_{77K}$ と称する。測定対象となる化合物をEPA ( ジエチルエーテル : イソペンタン : エタノール = 5 : 5 : 2 ( 容積比 ) ) 中に、濃度が $10 \mu\text{mol/L}$ となるように溶解し、この溶液を石英セル中に入れて測定試料とする。この測定試料について、低温 ( 77 [ K ] ) で燐光スペクトル ( 縦軸 : 燐光発光強度、横軸 : 波長とする。 ) を測定し、この燐光スペクトルの短波長側の立ち上がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値  $edge [ \text{nm} ]$  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 $T_{77K}$ とする。

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

【 0 3 2 5 】

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

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

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

【 0 3 2 6 】

・一重項エネルギー $S_1$

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

測定対象となる化合物の $10 \mu\text{mol/L}$ トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温 ( 300 K ) でこの試料の吸収スペクトル ( 縦軸 : 吸収強度、横軸 : 波長とする。 ) を測定する。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値  $edge [ \text{nm} ]$  を次に示す換算式 ( F 2 ) に代入して一重項エネルギーを算出する。

$$\text{換算式 ( F 2 ) : } S_1 [ \text{eV} ] = 1239.85 / edge$$

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。

【 0 3 2 7 】

10

20

30

40

50

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。

#### 【0328】

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

10

#### 【0329】

本実施形態において、化合物 M2 の一重項エネルギー  $S_1(M2)$  と、化合物 M2 の 77 [ K ] におけるエネルギーギャップ  $T_{77K}(M2)$  との差  $ST(M2)$  は、好ましくは 0.3 eV 未満、より好ましくは 0.2 eV 未満、さらに好ましくは 0.1 eV 未満、よりさらに好ましくは 0.01 eV 未満である。すなわち、 $ST(M2)$  は、下記数式 (数1A) ~ (数1D) の関係を満たすことが好ましい。

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

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

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

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

20

#### 【0330】

##### ・発光層の膜厚

本実施形態に係る有機 EL 素子における発光層の膜厚は、好ましくは 5 nm 以上 50 nm 以下、より好ましくは 7 nm 以上 50 nm 以下、最も好ましくは 10 nm 以上 50 nm 以下である。5 nm 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、50 nm 以下であると、駆動電圧の上昇が抑制されやすい。

#### 【0331】

##### ・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。

30

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。

40

#### 【0332】

図4は、発光層における化合物 M3、及び化合物 M2 のエネルギー準位、並びにエネルギー移動の関係を示す図である。

図4において、 $S_0$  は、基底状態を表す。 $S_1(M2)$  は、化合物 M2 の最低励起一重項状態を表し、 $T_1(M2)$  は、化合物 M2 の最低励起三重項状態を表す。 $S_1(M3)$  は、化合物 M3 の最低励起一重項状態を表し、 $T_1(M3)$  は、化合物 M3 の最低励起三重項状態を表す。

図4中の破線の矢印は、各励起状態間のエネルギー移動を表す。化合物 M3 の最低励起一重項状態  $S_1$  からのフェルスター移動、または最低励起三重項状態  $T_1$  からのデクスター移動により、化合物 M2 の最低励起一重項状態  $S_1$  または最低励起三重項状態  $T_1$  に、

50

それぞれエネルギー移動する。

さらに、化合物 M 2 として S T ( M 2 ) の小さな材料を用いると、化合物 M 2 の最低励起三重項状態 T 1 は熱エネルギーによって最低励起一重項状態 S 1 に逆項間交差することが可能である。この結果、化合物 M 2 の最低励起一重項状態 S 1 からの蛍光発光を観測することができる。この T A D F 機構による遅延蛍光を利用することによっても、理論的に内部効率を 1 0 0 % まで高めることができると考えられている。

【 0 3 3 3 】

本実施形態の有機 E L 素子は、発光層に、遅延蛍光性の化合物 M 2 と、前記化合物 M 2 よりも大きな一重項エネルギーを有する化合物 M 3 と、を含んでいる。

本実施形態によれば、高性能の有機 E L 素子、例えば、高効率で発光する有機 E L 素子が実現される。

10

【 0 3 3 4 】

本実施形態の有機 E L 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。

【 0 3 3 5 】

有機 E L 素子の構成についてさらに説明する。

【 0 3 3 6 】

( 基板 )

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

20

【 0 3 3 7 】

( 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 e V 以上 ) 金属、合金、電気伝導性化合物、及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 ( I T O : I n d i u m T i n O x i d e ) 、珪素もしくは酸化珪素を含有した酸化インジウム - 酸化スズ、酸化インジウム - 酸化亜鉛、酸化タングステン、及び酸化亜鉛を含有した酸化インジウム、グラフェン等が挙げられる。その他、金 ( A u ) 、白金 ( P t ) 、ニッケル ( N i ) 、タングステン ( W ) 、クロム ( C r ) 、モリブデン ( M o ) 、鉄 ( F e ) 、コバルト ( C o ) 、銅 ( C u ) 、パラジウム ( P d ) 、チタン ( T i ) 、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。

30

【 0 3 3 8 】

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 1 0 質量 % 以下の酸化亜鉛を加えたターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。また、例えば、酸化タングステン、及び酸化亜鉛を含有した酸化インジウムは、酸化インジウムに対し酸化タングステンを 0 . 5 質量 % 以上 5 質量 % 以下、酸化亜鉛を 0 . 1 質量 % 以上 1 質量 % 以下含有したターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。その他、真空蒸着法、塗布法、インクジェット法、スピコート法などにより作製してもよい。

40

【 0 3 3 9 】

陽極上に形成される E L 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、及びこれらの混合物、その他、元素周期表の第 1 族または第 2 族に属する元素も含む ) を用いることができる。

【 0 3 4 0 】

50

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、及びマグネシウム(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、及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)等の希土類金属及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、及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。

【0341】

(陰極)

陰極には、仕事関数の小さい(具体的には3.8eV以下)金属、合金、電気伝導性化合物、及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、及びマグネシウム(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、及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)等の希土類金属及びこれらを含む合金等が挙げられる。

【0342】

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。

【0343】

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

【0344】

(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。

【0345】

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

【0346】

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

10

20

30

40

50

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。

#### 【0347】

##### (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 $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の正孔移動度を有する物質である。

#### 【0348】

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

#### 【0349】

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

#### 【0350】

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

#### 【0351】

##### (電子輸送層)

電子輸送層は、電子輸送性の高い物質を含む層である。電子輸送層には、1)アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、亜鉛錯体等の金属錯体、2)イミダゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、アジン誘導体、カルバゾール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、3)高分子化合物を使用することができる。具体的には低分子の有機化合物として、Alq、トリス(4-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(略称:Almq<sub>3</sub>)、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<sub>2</sub>)、BAIq、Znq、ZnPBO、ZnBTZなどの金属錯体等を用いることができる。また、金属錯体以外にも、2-(4-ビフェニル)-5-(4-tert-ブチルフェニル)-1,3,4-オキサジアゾール(略称:PBD)、1,3-ビス[5-(ptert-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

10

20

30

40

50

(略称：OXD-7)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-フェニル-5-(4-ピフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称：TAZ)、3-(4-tert-ブチルフェニル)-4-(4-エチルフェニル)-5-(4-ピフェニル)-1,2,4-トリアゾール(略称：p-ETTAZ)、バソフェナントロリン(略称：BPhen)、バソキュプロイン(略称：BCP)、4,4'-ビス(5-メチルベンゾオキサゾール-2-イル)スチルベン(略称：BzOs)などの複素芳香族化合物も用いることができる。本実施態様においては、ベンゾイミダゾール化合物を好適に用いることができる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 以上の電子移動度を有する物質である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を電子輸送層として用いてもよい。また、電子輸送層は、単層で構成されていてもよいし、上記物質からなる層が二層以上積層されて構成されていてもよい。

10

## 【0352】

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。

## 【0353】

## (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<sub>2</sub>)、リチウム酸化物(LiO<sub>x</sub>)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。

20

## 【0354】

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、電子注入性及び電子輸送性に優れている。この場合、有機化合物としては、発生した電子の輸送に優れた材料であることが好ましく、具体的には、例えば上述した電子輸送層を構成する物質(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：TF)等の有機化合物を用いることもできる。

30

## 【0355】

## (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。

40

## 【0356】

## (膜厚)

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

## 【0357】

50

本発明者らは、前記一般式(3)で表される化合物M3を、遅延蛍光性の化合物M2と共に用いることにより、高性能の有機EL素子を実現できることを見出した。

化合物M3は、正孔注入性部位及び正孔輸送部位の少なくともいずれかの部位であるといえるカルバゾールと、カルバゾールよりも正孔注入性及び正孔輸送性の少なくともいずれかが高いA30(好ましくはベンゾフロカルバゾール)との両方を有するため、A30を有さずカルバゾールのみを有する化合物(例えば、CBP)よりも適度に正孔注入性及び正孔輸送性の少なくともいずれかが高くなる。

本実施形態においては、適切に正孔注入性及び正孔輸送性の少なくともいずれかを高めた化合物M3を、発光層に含ませることによって、適切な量の正孔を発光層に供給でき、正孔と電子の量を合わせることができると考えられる。その結果、素子を高効率化できると考えられる。一般的に、遅延蛍光性の化合物は、STを小さくするために、分子内にLUMO(最低空分子軌道)のエネルギー準位の絶対値が大きな部位が導入されることが多く、連動して分子全体のHOMO(最高被占軌道)のエネルギー準位の絶対値も大きくなることが多い。しかし、HOMOのエネルギー準位の絶対値が大きいと発光層への正孔注入が阻害され、適切な量の正孔を発光層に供給できなくなることがある。

本実施形態では、遅延蛍光性の化合物M2と共に、適切に正孔注入性及び正孔輸送性の少なくともいずれかを高めた化合物M3を発光層に含ませるので、発光層への正孔注入が阻害されるのが抑制され、適切な量の正孔を発光層に供給でき、その結果、素子の高効率化が実現すると考えられる。

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

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

【0358】

〔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。

【0359】

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

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M3と、遅延蛍光性の化合物M2と、蛍光発光性の化合物M1とを含む。

この態様の場合、化合物M1は、ドーパント材料であることが好ましく、化合物M2は、ホスト材料であることが好ましく、化合物M3は、ドーパント材料ではないことが好ましい。

【0360】

(化合物M1)

本実施形態の発光層は、蛍光発光性の化合物M1を含む。

本実施形態の化合物M1は、燐光発光性の金属錯体ではない。本実施形態の化合物M1は、重金属錯体ではないことが好ましい。また、本実施形態の化合物M1は、金属錯体ではないことが好ましい。

【0361】

本実施形態の化合物M1としては、蛍光発光性材料を用いることができる。蛍光発光性材料としては、具体的には、例えば、ビスアリアルアミノナフタレン誘導体、アリアル置換ナフタレン誘導体、ビスアリアルアミノアントラセン誘導体、アリアル置換アントラセン誘導体、ビスアリアルアミノピレン誘導体、アリアル置換ピレン誘導体、ビスアリアルアミノクリセン誘導体、アリアル置換クリセン誘導体、ビスアリアルアミノフルオランテン誘導体、アリアル置換フルオランテン誘導体、インデノペリレン誘導体、アセナフトフ

10

20

30

40

50

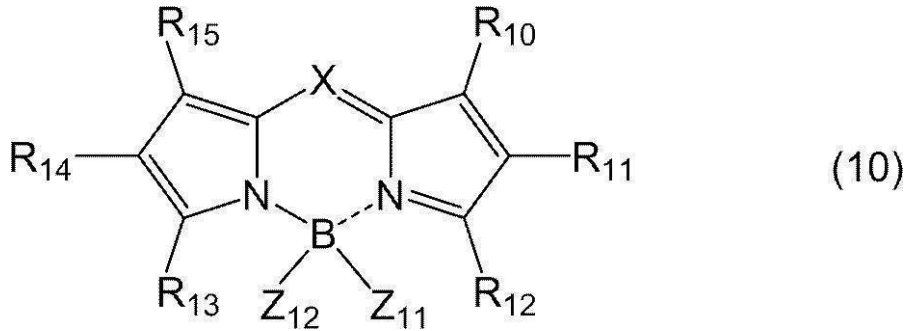
ルオランテン誘導体、ホウ素原子を含む化合物、ピロメテンホウ素錯体化合物、ピロメテン骨格を有する化合物、ピロメテン骨格を有する化合物の金属錯体、ジケトピロロピロール誘導体、ペリレン誘導体、及びナフタセン誘導体などが挙げられる。

【0362】

本実施形態の化合物M1は、下記一般式(10)で表される化合物であることが好ましい。

【0363】

【化180】



10

【0364】

前記一般式(10)において、

Xは、窒素原子、又はYと結合する炭素原子であり、

Yは、水素原子又は置換基であり、

R<sub>10</sub>~R<sub>15</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であるか、又はR<sub>10</sub>及びR<sub>11</sub>の組、R<sub>11</sub>及びR<sub>12</sub>の組、R<sub>13</sub>及びR<sub>14</sub>の組、並びにR<sub>14</sub>及びR<sub>15</sub>の組のいずれか1つ以上の組が互いに結合して環を形成し、

置換基としてのY、及びR<sub>10</sub>~R<sub>15</sub>は、それぞれ独立に、

- 置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、
- 置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルキル基、
- 置換もしくは無置換の環形成炭素数3~30のシクロアルキル基、
- 置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基、
- 置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルコキシ基、
- 置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルコキシ基、
- 置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキルチオ基、
- 置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリールオキシ基、
- 置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリールチオ基、
- 置換もしくは無置換の炭素数2~30のアルケニル基、
- 置換もしくは無置換の炭素数7~30のアラルキル基、
- 置換もしくは無置換の環形成原子数5~30のヘテロアリール基、

30

ハロゲン原子、

カルボキシ基、

置換もしくは無置換のエステル基、

置換もしくは無置換のカルバモイル基、

置換もしくは無置換のアミノ基、

ニトロ基、

シアノ基、

置換もしくは無置換のシリル基、及び

置換もしくは無置換のシロキサニル基からなる群から選択され、

Z<sub>11</sub>及びZ<sub>12</sub>は、それぞれ独立に、置換基であるか、又はZ<sub>11</sub>及びZ<sub>12</sub>が互いに結合して環を形成し、

置換基としてのZ<sub>11</sub>及びZ<sub>12</sub>は、それぞれ独立に、

40

50

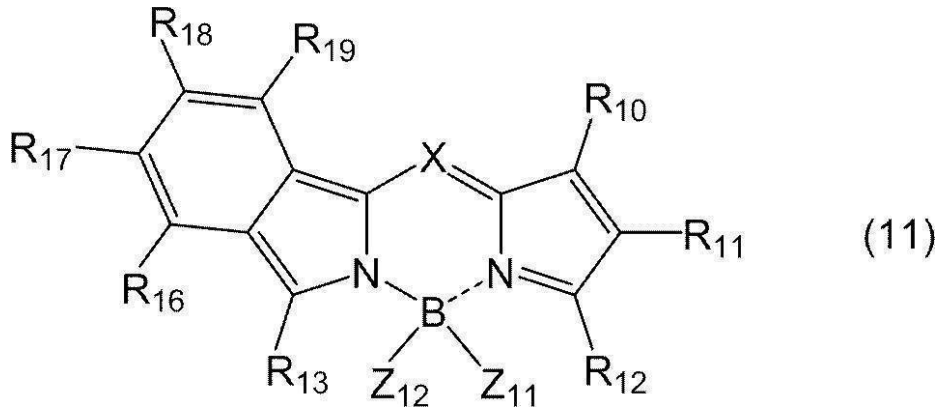
ハロゲン原子、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、  
 置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルコキシ基、及び  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリールオキシ基からなる群から選択される。

【0365】

前記一般式(10)において、例えば、 $R_{14}$ 及び $R_{15}$ の組が互いに結合して環を形成している場合、化合物M1は、下記一般式(11)で表される。

【0366】

【化181】



【0367】

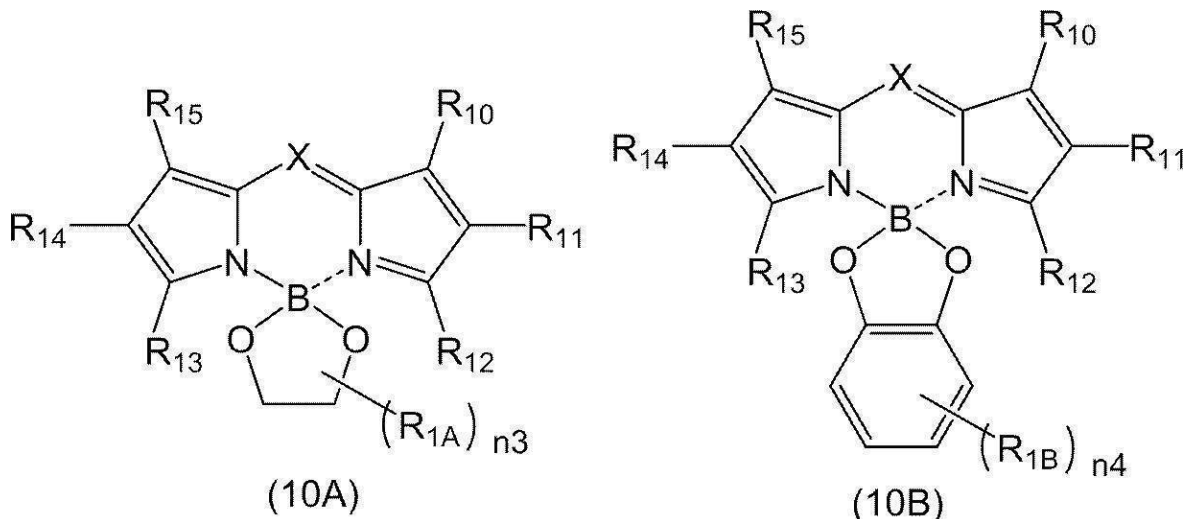
前記一般式(11)において、X、Y、 $R_{10}$ ~ $R_{13}$ 、 $Z_{11}$ 、及び $Z_{12}$ は、それぞれ、前記一般式(10)におけるX、Y、 $R_{10}$ ~ $R_{13}$ 、 $Z_{11}$ 、及び $Z_{12}$ と同義であり、 $R_{16}$ ~ $R_{19}$ は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、置換基としての $R_{16}$ ~ $R_{19}$ は、それぞれ独立に、置換基としての $R_{10}$ ~ $R_{13}$ と同義である。

【0368】

前記一般式(10)において、 $Z_{11}$ 及び $Z_{12}$ が互いに結合して環を形成している場合、化合物M1は、例えば、下記一般式(10A)、または下記一般式(10B)で表される。ただし、化合物M1は、以下の構造に限定されない。

【0369】

【化182】



【0370】

10

20

30

40

50

前記一般式(10A)において、X、Y、及びR<sub>10</sub>～R<sub>15</sub>は、それぞれ、前記一般式(10)におけるX、Y、及びR<sub>10</sub>～R<sub>15</sub>と同義であり、R<sub>1A</sub>は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、置換基としてのR<sub>1A</sub>は、置換基としてのR<sub>10</sub>～R<sub>15</sub>と同義であり、n<sub>3</sub>は4である。

前記一般式(10B)において、X、Y、及びR<sub>10</sub>～R<sub>15</sub>は、それぞれ、前記一般式(10)におけるX、Y、及びR<sub>10</sub>～R<sub>15</sub>と同義であり、R<sub>1B</sub>は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、置換基としてのR<sub>1B</sub>は、置換基としてのR<sub>10</sub>～R<sub>15</sub>と同義であり、n<sub>4</sub>は4である。

【0371】

Z<sub>11</sub>及びZ<sub>12</sub>のうち少なくともいずれか(好ましくはZ<sub>11</sub>及びZ<sub>12</sub>の両方)は、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルキル基、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルコキシ基、置換もしくは無置換の炭素数1～30のハロゲン化アルコキシ基、及び置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリールオキシ基からなる群から選択される基であることが好ましい。

10

Z<sub>11</sub>及びZ<sub>12</sub>のうち少なくともいずれかは、フッ素原子で置換された炭素数1～30のアルコキシ基、フッ素原子で置換された環形成炭素数6～30のアリールオキシ基、及び炭素数1～30のフルオロアルキル基で置換された環形成炭素数6～30のアリールオキシ基からなる群から選択される基であることがより好ましい。

Z<sub>11</sub>及びZ<sub>12</sub>のうち少なくともいずれかは、フッ素原子で置換された炭素数1～30のアルコキシ基であることがさらに好ましく、Z<sub>11</sub>及びZ<sub>12</sub>がフッ素原子で置換された炭素数1～30のアルコキシ基であることがよりさらに好ましい。

20

【0372】

Z<sub>11</sub>及びZ<sub>12</sub>が同じであることも好ましい。

【0373】

一方、前記Z<sub>11</sub>及び前記Z<sub>12</sub>のうち少なくともいずれかがフッ素原子であることも好ましく、前記Z<sub>11</sub>及び前記Z<sub>12</sub>がフッ素原子であることもより好ましい。

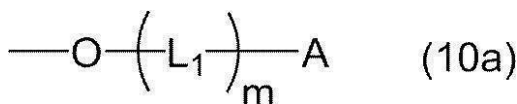
【0374】

前記Z<sub>11</sub>及び前記Z<sub>12</sub>のうち少なくともいずれかは、下記一般式(10a)で表される基であることも好ましい。

30

【0375】

【化183】



【0376】

前記一般式(10a)において、Aは、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキル基、置換もしくは無置換の炭素数1～6のハロゲン化アルキル基、または置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリール基であり、L<sub>1</sub>は、置換もしくは無置換の炭素数1～6のアルキレン基、または置換もしくは無置換の環形成炭素数6～12のアリーレン基であり、mは、0、1、2、3、4、5、6、又は7であり、mが2、3、4、5、6、又は7である場合、複数のL<sub>1</sub>は、互いに同一または異なる。mは、0、1、又は2であることが好ましい。mが0の場合、Aは、O(酸素原子)に直接結合する。

40

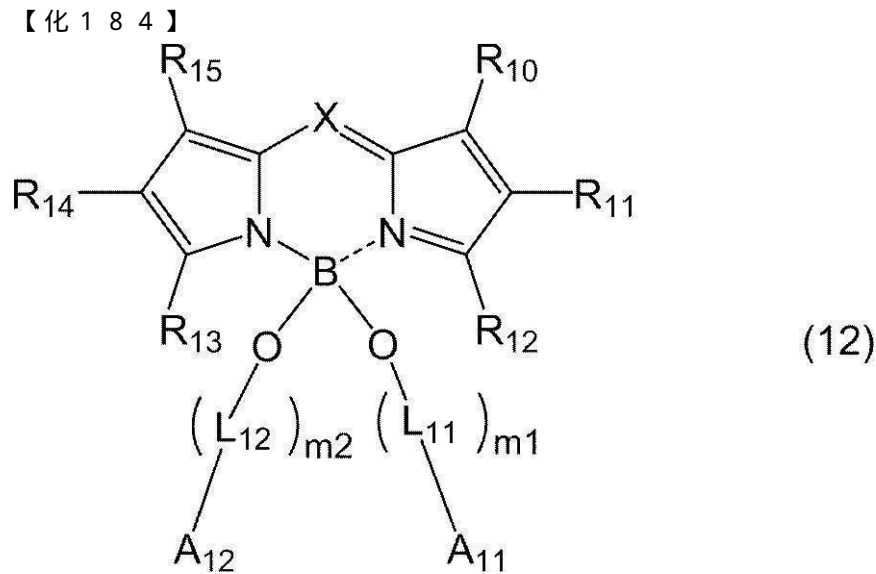
【0377】

前記一般式(10)において、Z<sub>11</sub>及びZ<sub>12</sub>が前記一般式(10a)で表される基である場合、化合物M<sub>1</sub>は、下記一般式(12)で表される化合物である。

化合物M<sub>1</sub>は、下記一般式(12)で表される化合物であることも好ましい。

【0378】

50



10

## 【0379】

前記一般式(12)において、X、XがYと結合する炭素原子であるときのY、R<sub>10</sub>～R<sub>15</sub>は、それぞれ、前記一般式(10)におけるX、Y、R<sub>10</sub>～R<sub>15</sub>と同義である。A<sub>11</sub>及びA<sub>12</sub>は、前記一般式(10a)におけるAと同義であり、互いに同一でも異なってもよい。L<sub>11</sub>及びL<sub>12</sub>は、前記一般式(10a)におけるL<sub>1</sub>と同義であり、互いに同一でも異なってもよい。m<sub>1</sub>及びm<sub>2</sub>は、それぞれ独立に、0、1、2、3、4、5、6、又は7であり、0、1、又は2であることが好ましい。m<sub>1</sub>が2、3、4、5、6、又は7である場合、複数のL<sub>11</sub>は、互いに同一または異なり、m<sub>2</sub>が2、3、4、5、6、又は7である場合、複数のL<sub>12</sub>は、互いに同一または異なる。m<sub>1</sub>が0の場合、A<sub>11</sub>は、O(酸素原子)に直接結合し、m<sub>2</sub>が0の場合、A<sub>12</sub>は、O(酸素原子)に直接結合する。

20

## 【0380】

前記一般式(10a)におけるA及びL<sub>1</sub>のうち少なくともいづれかが、ハロゲン原子で置換されていることが好ましく、フッ素原子で置換されていることがより好ましい。

30

## 【0381】

前記一般式(10a)におけるAは、炭素数1～6のパーフルオロアルキル基、または環形成炭素数6～12のパーフルオロアリール基であることがより好ましく、炭素数1～6のパーフルオロアルキル基であることがさらに好ましい。

## 【0382】

前記一般式(10a)におけるL<sub>1</sub>は、炭素数1～6のパーフルオロアルキレン基、または環形成炭素数6～12のパーフルオロアリーレン基であることがより好ましく、炭素数1～6のパーフルオロアルキレン基であることがさらに好ましい。

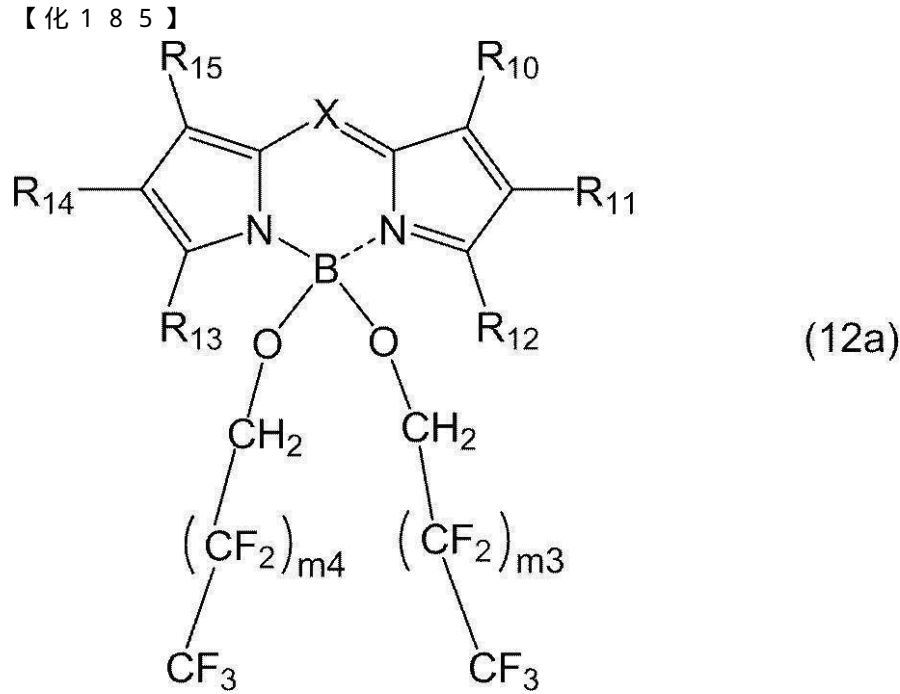
## 【0383】

すなわち、前記化合物M<sub>1</sub>は、下記一般式(12a)で表される化合物であることも好ましい。

40

## 【0384】

50



10

## 【 0 3 8 5 】

20

前記一般式 ( 1 2 a ) において、

X は、前記一般式 ( 1 0 ) における X と同義であり、X が Y と結合する炭素原子であるときの Y は、前記一般式 ( 1 0 ) における Y と同義であり、

R<sub>10</sub> ~ R<sub>15</sub> は、それぞれ独立に、前記一般式 ( 1 0 ) における R<sub>10</sub> ~ R<sub>15</sub> とそれぞれ同義であり、

m<sub>3</sub> は、0、1、2、3 又は 4 であり、

m<sub>4</sub> は、0、1、2、3 又は 4 であり、

m<sub>3</sub> 及び m<sub>4</sub> は、互いに同一であるか又は異なる。

## 【 0 3 8 6 】

30

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

X は、Y と結合する炭素原子であり、

Y は、水素原子又は置換基であり、

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

## 【 0 3 8 7 】

40

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

より好ましい態様としては、

X は、Y と結合する炭素原子であり、

Y は、水素原子又は置換基であり、

置換基としての Y は、置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基であり、置換基としての Y が置換基を有する環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基である場合の当該置換基は、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルコキシ基、又は

炭素数 1 ~ 30 のアルキル基で置換された環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基である態様が挙げられる。

50

## 【0388】

化合物M1は、前記Z<sub>11</sub>と前記Z<sub>12</sub>とが互いに結合して環を形成してもよいが、前記Z<sub>11</sub>と前記Z<sub>12</sub>とが互いに結合して環を形成しないことが好ましい。

## 【0389】

前記一般式(10)、(12)、及び(12a)において、R<sub>10</sub>、R<sub>12</sub>、R<sub>13</sub>、及びR<sub>15</sub>のうち少なくともいずれかが置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルキル基であることが好ましい。

前記一般式(10)、(12)、及び(12a)において、R<sub>10</sub>、R<sub>12</sub>、R<sub>13</sub>、及びR<sub>15</sub>が置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルキル基であることがより好ましい。この場合、R<sub>11</sub>及びR<sub>14</sub>が水素原子であることが好ましい。

10

## 【0390】

前記一般式(10)、(12)、及び(12a)において、R<sub>10</sub>、R<sub>12</sub>、R<sub>13</sub>、及びR<sub>15</sub>のうち少なくともいずれかが置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることが好ましい。

前記一般式(10)、(12)、及び(12a)において、R<sub>10</sub>、R<sub>12</sub>、R<sub>13</sub>、及びR<sub>15</sub>が置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることがより好ましい。この場合、R<sub>11</sub>及びR<sub>14</sub>が水素原子であることが好ましい。

## 【0391】

前記一般式(10)、(12)、及び(12a)において、  
より好ましい態様としては、  
R<sub>10</sub>、R<sub>12</sub>、R<sub>13</sub>、及びR<sub>15</sub>は、それぞれ独立に、  
置換もしくは無置換の炭素数1~30(好ましくは炭素数1~6)のアルキル基、  
置換もしくは無置換の炭素数1~30(好ましくは炭素数1~6)のハロゲン化アルキル基、又は

20

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

R<sub>11</sub>及びR<sub>14</sub>が水素原子である態様が挙げられる。

## 【0392】

前記一般式(11)において、R<sub>10</sub>、R<sub>12</sub>、及びR<sub>13</sub>のうち少なくともいずれかが置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルキル基であることが好ましい。

30

## 【0393】

前記一般式(11)において、R<sub>10</sub>、R<sub>12</sub>、及びR<sub>13</sub>が置換もしくは無置換の炭素数1~30のアルキル基、又は置換もしくは無置換の炭素数1~30のハロゲン化アルキル基であることがより好ましい。この場合、R<sub>11</sub>は水素原子であることが好ましい。

## 【0394】

前記一般式(11)において、R<sub>10</sub>、R<sub>12</sub>、及びR<sub>13</sub>のうち少なくともいずれかが置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることが好ましい。

40

## 【0395】

前記一般式(11)において、R<sub>10</sub>、R<sub>12</sub>、及びR<sub>13</sub>が置換もしくは無置換の環形成炭素数6~30のアリール基であることがより好ましい。この場合、R<sub>11</sub>は水素原子であることが好ましい。

## 【0396】

前記一般式(11)において、  
より好ましい態様としては、  
R<sub>10</sub>、R<sub>12</sub>、及びR<sub>13</sub>は、それぞれ独立に、  
置換もしくは無置換の炭素数1~30(好ましくは炭素数1~6)のアルキル基、  
置換もしくは無置換の炭素数1~30(好ましくは炭素数1~6)のハロゲン化アルキ

50

ル基、又は

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

R<sub>11</sub> が水素原子である態様が挙げられる。

【0397】

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

10

【0398】

化合物 M 1 において、フッ素原子で置換されたアリールオキシ基、またはフルオロアルキル基で置換されたアリールオキシ基としては、例えば、ペンタフルオロフェノキシ基、3, 4, 5 - トリフルオロフェノキシ基、4 - トリフルオロメチルフェノキシ基、3, 5 - ビストリフルオロメチルフェノキシ基、3 - フルオロ - 4 - トリフルオロメチルフェノキシ基、2, 3, 5, 6 - テトラフルオロ - 4 - トリフルオロメチルフェノキシ基、4 - フルオロカテコラート基、4 - トリフルオロメチルカテコラート基、及び 3, 5 - ビストリフルオロメチルカテコラート基等が挙げられる。

20

【0399】

化合物 M 1 が蛍光発光性の化合物である場合、化合物 M 1 は、主ピーク波長が、400 nm 以上 700 nm 以下の発光を示すことが好ましい。

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

30

【0400】

化合物 M 1 は、赤色の発光又は緑色の発光を示すことが好ましい。

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

化合物 M 1 が赤色の蛍光発光性の化合物である場合、化合物 M 1 の主ピーク波長は、好ましくは 600 nm 以上 660 nm 以下、より好ましくは 600 nm 以上 640 nm 以下、さらに好ましくは 610 nm 以上 630 nm 以下である。

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

40

化合物 M 1 が緑色の蛍光発光性の化合物である場合、化合物 M 1 の主ピーク波長は、好ましくは 500 nm 以上 560 nm 以下、より好ましくは 500 nm 以上 540 nm 以下、さらに好ましくは 510 nm 以上 540 nm 以下である。

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

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

【0401】

50

有機EL素子から発光する光の主ピーク波長の測定は、以下のようにして行う。

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

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

【0402】

・化合物M1の製造方法

化合物M1は、公知の方法により製造することができる。

【0403】

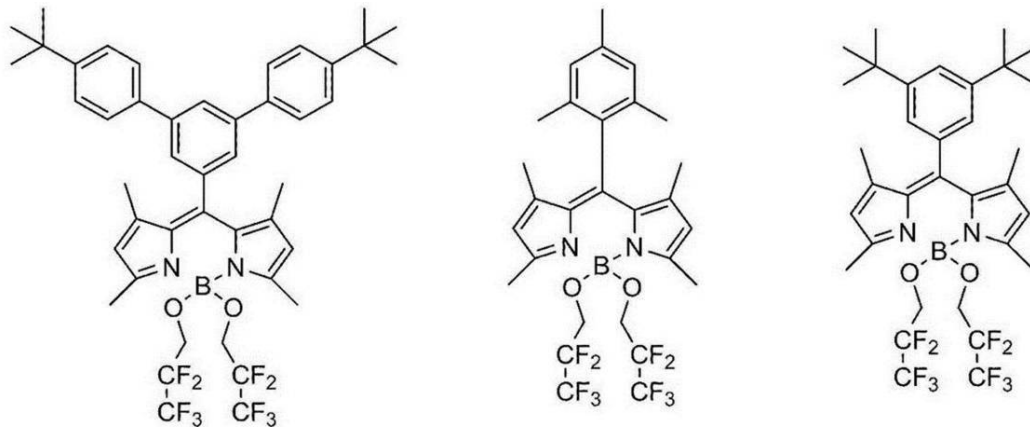
・化合物M1の具体例

本実施形態の化合物M1の具体例を以下に示す。ただし、本発明は、これら化合物の具体例に限定されない。

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

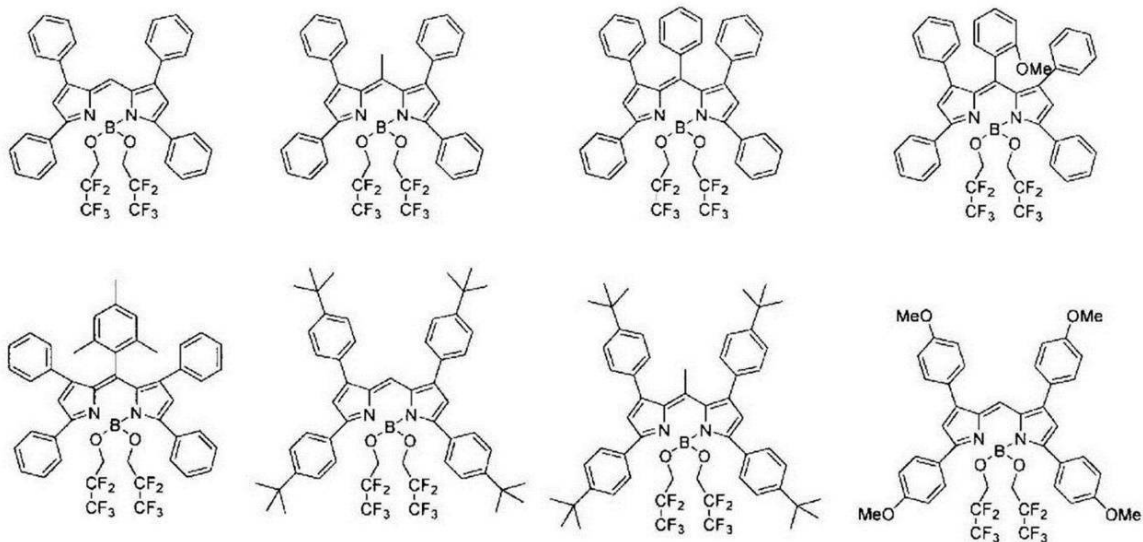
【0404】

【化186】



【0405】

【化187】



【0406】

10

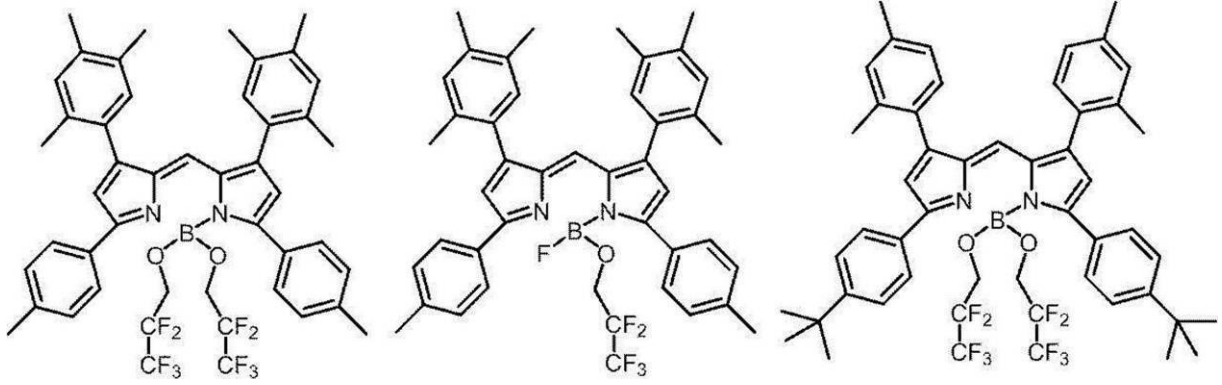
20

30

40

50

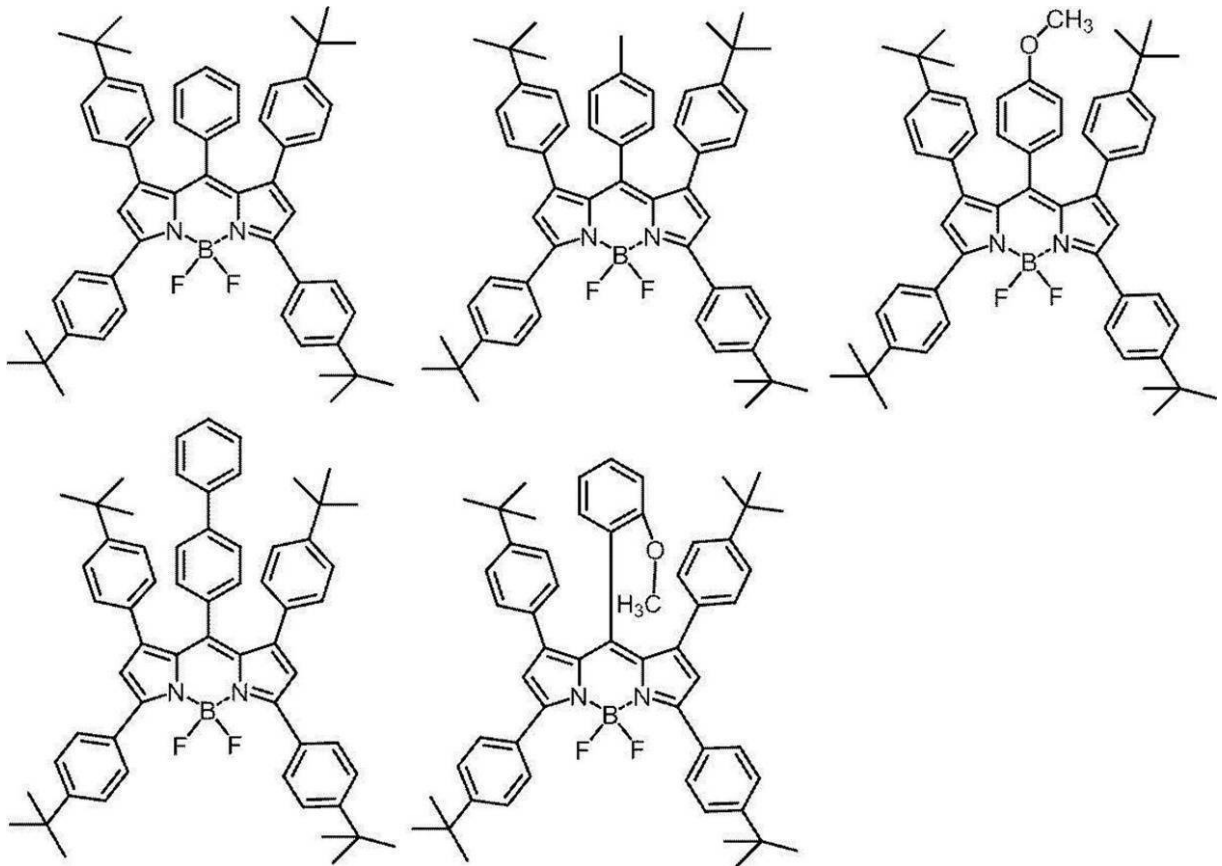
【化188】



10

【0407】

【化189】

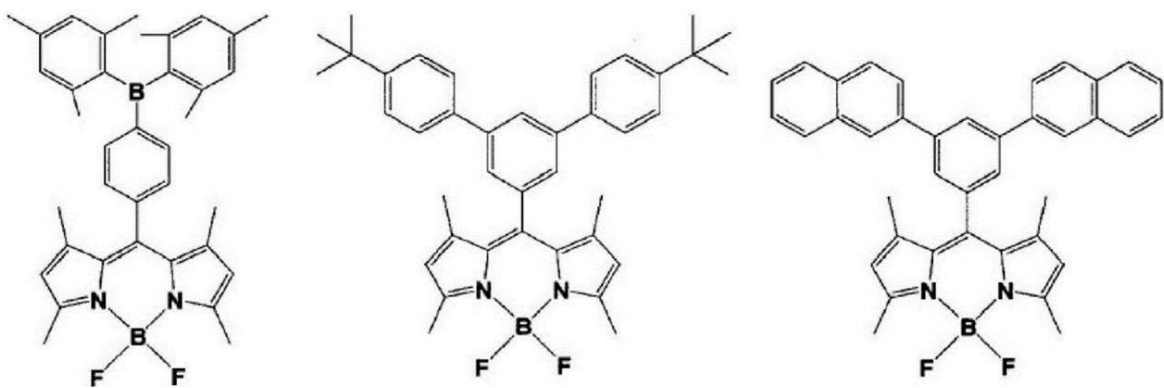


20

30

【0408】

【化190】

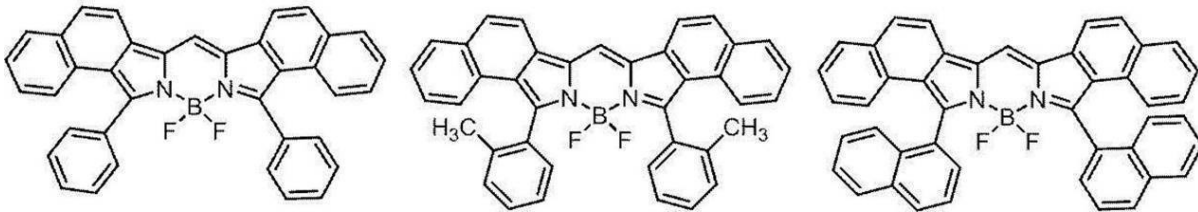
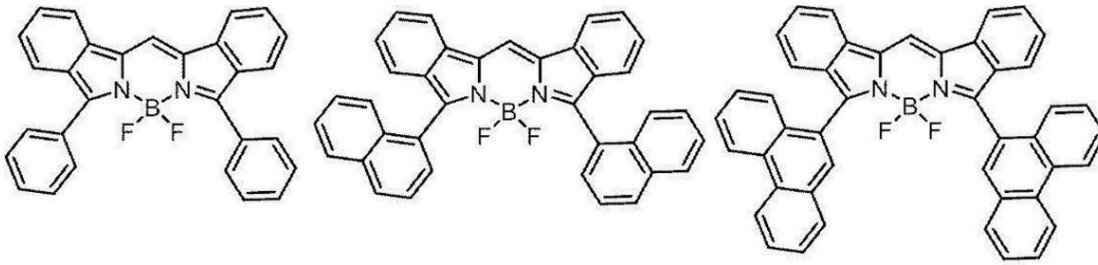


40

50

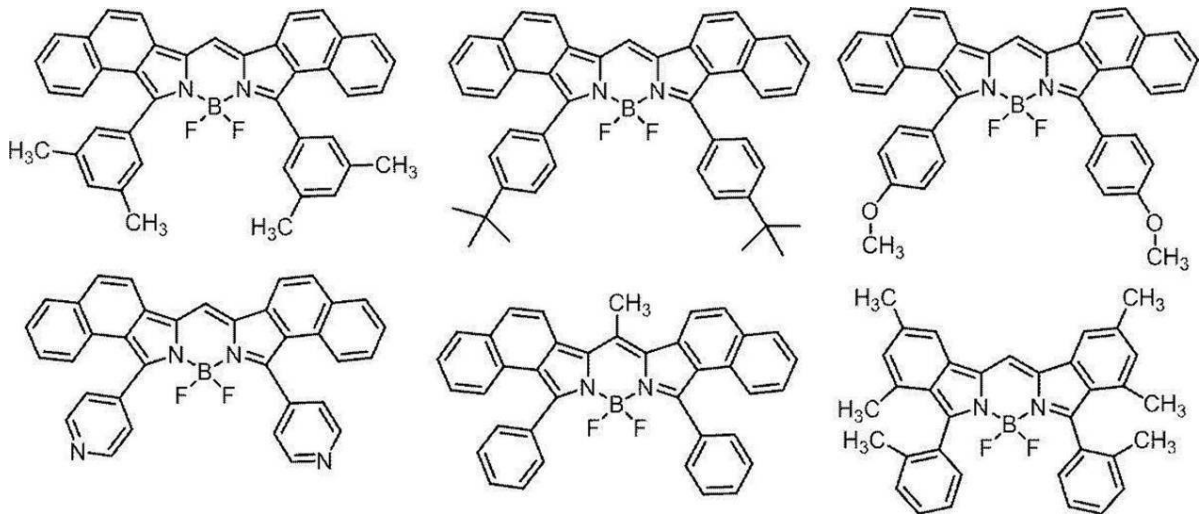
【 0 4 0 9 】

【 化 1 9 1 】



【 0 4 1 0 】

【 化 1 9 2 】



【 0 4 1 1 】

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

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

$$S_1(M 2) > S_1(M 1) \quad \dots ( 数 2 )$$

【 0 4 1 2 】

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

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

【 0 4 1 3 】

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

$$S_1(M 3) > S_1(M 2) > S_1(M 1) \quad \dots ( 数 2 B )$$

【 0 4 1 4 】

本実施形態の有機 E L 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

10

20

30

40

50

合物 M 1 が発光していることが好ましい。

本実施形態の有機 E L 素子は、赤色発光または緑色発光することが好ましい。

【 0 4 1 5 】

・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 M 3、化合物 M 2、及び化合物 M 1 の含有率は、例えば、以下の範囲であることが好ましい。

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

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

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

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

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

【 0 4 1 6 】

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

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

【 0 4 1 7 】

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

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

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

【 0 4 1 8 】

〔 第三実施形態 〕

〔 化合物 〕

第三実施形態の化合物は、下記一般式 ( 3 0 1 ) で表される化合物である。第三実施形態の化合物の具体例として、第一実施形態の M 3 の具体例示の内、下記一般式 ( 3 0 1 ) に該当する化合物を援用する。

【 0 4 1 9 】

10

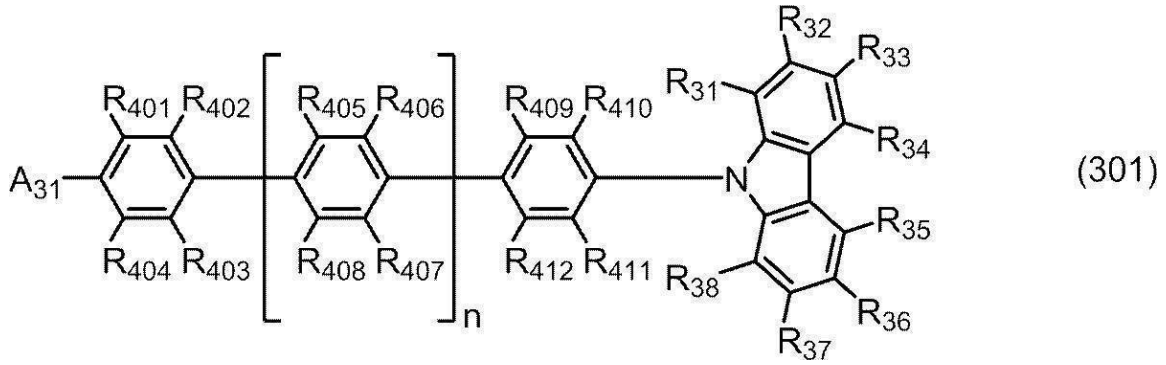
20

30

40

50

【化 1 9 3】



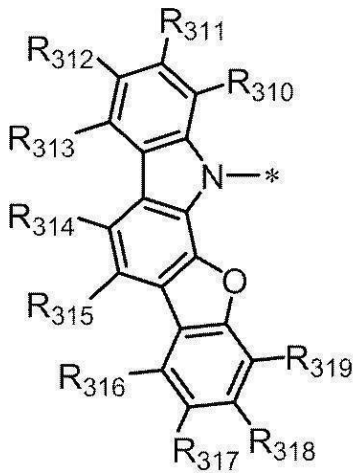
10

【 0 4 2 0】

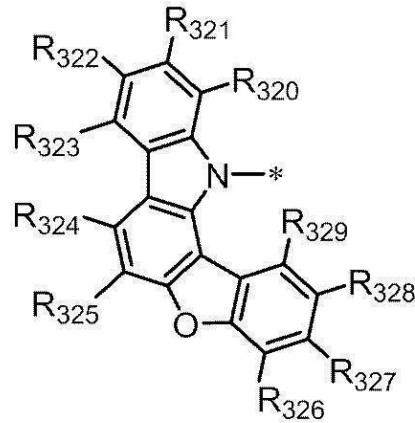
(前記一般式(301)において、A<sub>31</sub>は、下記一般式(31a)、一般式(31b)、一般式(31c)、一般式(31d)、一般式(31e)又は一般式(31f)で表される基である。)

【 0 4 2 1】

【化 1 9 4】



(31a)



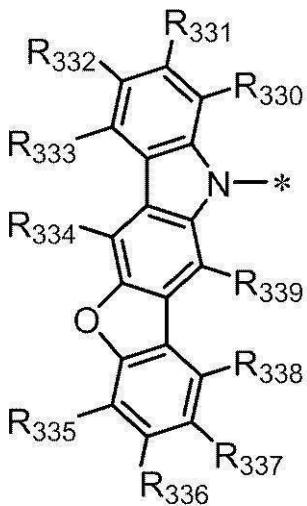
(31b)

20

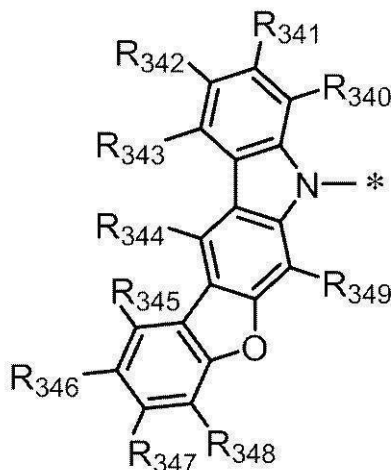
30

【 0 4 2 2】

【化 1 9 5】



(31c)



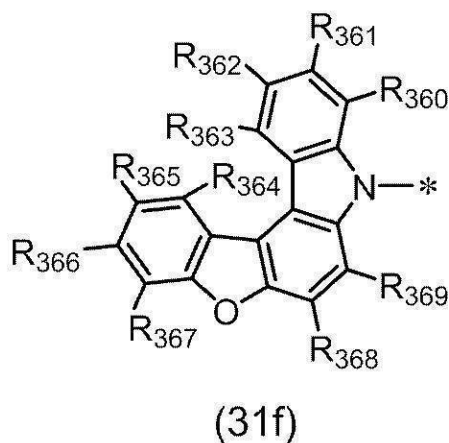
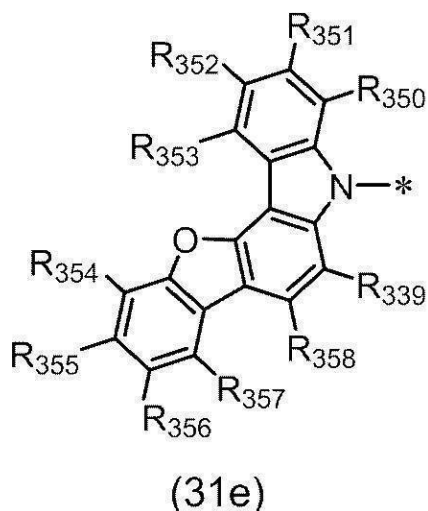
(31d)

40

50

【 0 4 2 3 】

【 化 1 9 6 】



10

【 0 4 2 4 】

(前記一般式(31a)、一般式(31b)、一般式(31c)、一般式(31d)、一般式(31e)及び一般式(31f)において、

R<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>320</sub> ~ R<sub>329</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>330</sub> ~ R<sub>339</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>340</sub> ~ R<sub>349</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>350</sub> ~ R<sub>359</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>360</sub> ~ R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 置換基としてのR<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>、R<sub>320</sub> ~ R<sub>329</sub>、R<sub>330</sub> ~ R<sub>339</sub>、R<sub>340</sub> ~ R<sub>349</sub>、  
 R<sub>350</sub> ~ R<sub>359</sub>及びR<sub>360</sub> ~ R<sub>369</sub>は、それぞれ独立に、  
 ハロゲン原子、

20

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリール基、  
 置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 30の複素環基、  
 置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のハロゲン化アルキル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルケニル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキニル基、  
 置換もしくは無置換の炭素数3 ~ 30のアルキルシリル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールシリル基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールホスホリル基、  
 ヒドロキシ基、

30

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルコキシ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールオキシ基、  
 アミノ基、

40

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキルアミノ基、  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールアミノ基、  
 チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキルチオ基、又は  
 置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールチオ基であり、  
 \*は、R<sub>401</sub> ~ R<sub>404</sub>が結合するベンゼン環との結合位置を示す。) )

(前記一般式(301)において、

R<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>401</sub> ~ R<sub>412</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、

50

置換基としての  $R_{31} \sim R_{38}$  並びに置換基としての  $R_{401} \sim R_{412}$  は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアル基、

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ~ 30 の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 3 ~ 30 のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリアルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリアルホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ~ 30 のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 60 のアリアルアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリアルチオ基であり、

$n$  は、0、1、2 又は 3 であり、

$R_{405}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{405}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$R_{406}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{406}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$R_{407}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{407}$  は、互いに同一であるか、又は異なり、

$R_{408}$  が複数存在する場合、複数の  $R_{408}$  は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

【0425】

前記一般式 (31a) において、 $R_{310}$  及び  $R_{311}$  の組、 $R_{311}$  及び  $R_{312}$  の組、 $R_{312}$  及び  $R_{313}$  の組、 $R_{314}$  及び  $R_{315}$  の組、 $R_{316}$  及び  $R_{317}$  の組、 $R_{317}$  及び  $R_{318}$  の組、並びに  $R_{318}$  及び  $R_{319}$  の組は、互いに結合しない。

【0426】

前記一般式 (31b) において、 $R_{320}$  及び  $R_{321}$  の組、 $R_{321}$  及び  $R_{322}$  の組、 $R_{322}$  及び  $R_{323}$  の組、 $R_{324}$  及び  $R_{325}$  の組、 $R_{326}$  及び  $R_{327}$  の組、 $R_{327}$  及び  $R_{328}$  の組、並びに  $R_{328}$  及び  $R_{329}$  の組は、互いに結合しない。

【0427】

前記一般式 (31c) において、 $R_{330}$  及び  $R_{331}$  の組、 $R_{331}$  及び  $R_{332}$  の組、 $R_{332}$  及び  $R_{333}$  の組、 $R_{335}$  及び  $R_{336}$  の組、 $R_{336}$  及び  $R_{337}$  の組、並びに  $R_{337}$  及び  $R_{338}$  の組は、互いに結合しない。

【0428】

前記一般式 (31d) において、 $R_{340}$  及び  $R_{341}$  の組、 $R_{341}$  及び  $R_{342}$  の組、 $R_{342}$  及び  $R_{343}$  の組、 $R_{345}$  及び  $R_{346}$  の組、 $R_{346}$  及び  $R_{347}$  の組、並びに  $R_{347}$  及び  $R_{348}$  の組は、互いに結合しない。

【0429】

前記一般式 (31e) において、 $R_{350}$  及び  $R_{351}$  の組、 $R_{351}$  及び  $R_{352}$  の組、 $R_{352}$  及び  $R_{353}$  の組、 $R_{354}$  及び  $R_{355}$  の組、 $R_{355}$  及び  $R_{356}$  の組、 $R_{356}$  及び  $R_{357}$  の組、並びに  $R_{358}$  及び  $R_{359}$  の組は、互いに結合しない。

【0430】

前記一般式 (31f) において、 $R_{360}$  及び  $R_{361}$  の組、 $R_{361}$  及び  $R_{362}$  の組、 $R_{362}$  及び  $R_{363}$  の組、 $R_{364}$  及び  $R_{365}$  の組、 $R_{365}$  及び  $R_{366}$  の組、 $R_{366}$  及び  $R_{367}$  の組、並びに  $R_{368}$  及び  $R_{369}$  の組は、互いに結合しない。

10

20

30

40

50

## 【0431】

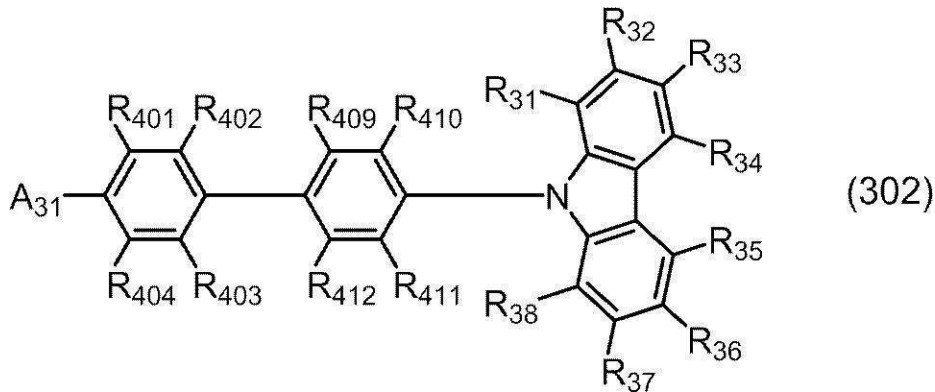
第三実施形態の化合物において、 $n$ は、0又は1であることが好ましい。

## 【0432】

第三実施形態の化合物は、下記一般式(302)で表されることが好ましい。

## 【0433】

## 【化197】



10

## 【0434】

(前記一般式(302)における $A_{31}$ 、 $R_{401} \sim R_{404}$ 、 $R_{409} \sim R_{412}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ、前記一般式(301)における $A_{31}$ 、 $R_{401} \sim R_{404}$ 、 $R_{409} \sim R_{412}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。)

20

## 【0435】

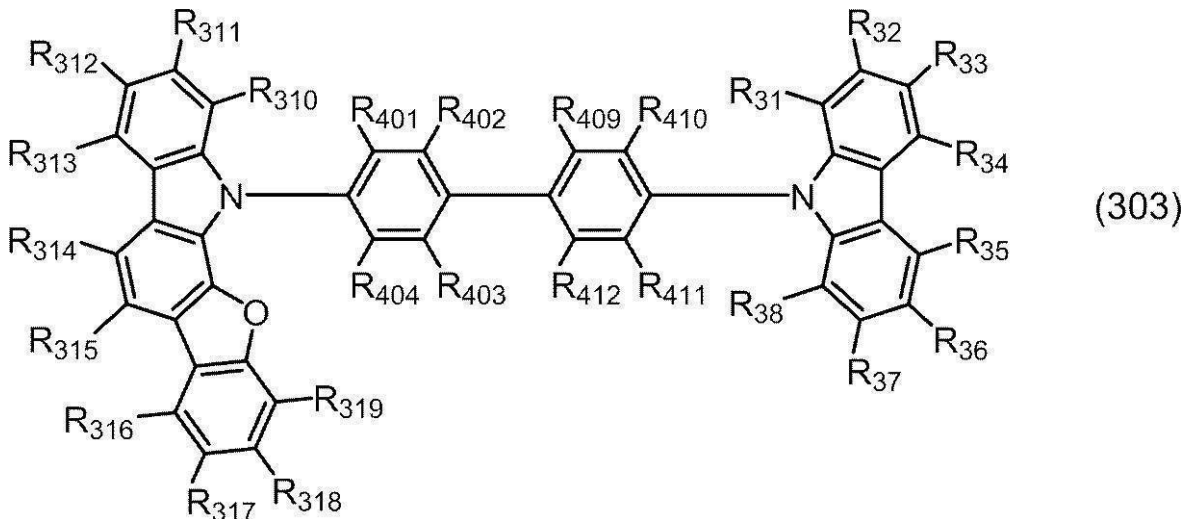
第三実施形態の化合物において、 $A_{30}$ は、前記一般式(31a)又は一般式(31d)で表される基であることが好ましい。

## 【0436】

第三実施形態の化合物は、下記一般式(303)で表されることが好ましい。

## 【0437】

## 【化198】



30

## 【0438】

(前記一般式(303)における $R_{401} \sim R_{404}$ 、 $R_{409} \sim R_{412}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ、前記一般式(301)における $R_{401} \sim R_{404}$ 、 $R_{409} \sim R_{412}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。)

## 【0439】

第三実施形態の化合物において、 $R_{31} \sim R_{38}$ 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6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基であること

50

が好ましい。

【0440】

第三実施形態の化合物において、 $R_{31} \sim R_{38}$ 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6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であることがより好ましい。

【0441】

第三実施形態の化合物において、 $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることがさらに好ましい。

【0442】

第三実施形態の化合物において、 $R_{31} \sim R_{38}$ は、水素原子であることがよりさらに好ましい。

10

【0443】

第三実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基であることが好ましい。

【0444】

第三実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であることがより好ましい。

20

【0445】

第三実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることがさらに好ましい。

【0446】

第三実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ は、水素原子であることがよりさらに好ましい。

【0447】

第三実施形態の化合物において、 $R_{310} \sim R_{319}$ 、 $R_{320} \sim R_{329}$ 、 $R_{330} \sim R_{339}$ 、 $R_{340} \sim R_{349}$ 、 $R_{350} \sim R_{359}$ 及び $R_{360} \sim R_{369}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基であることが好ましい。

30

【0448】

第三実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ 並びに $R_{31} \sim R_{38}$ 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6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基であることが好ましい。

【0449】

第三実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ 並びに $R_{31} \sim R_{38}$ 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6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であることがより好ましい。

40

【0450】

第三実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ 並びに $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることがさらに好ましい。

【0451】

第三実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ 並びに $R_{31} \sim R_{38}$ は、水素原子であることがよりさらに好ましい。

【0452】

第三実施形態の化合物において、 $R_{310} \sim R_{319}$ 、 $R_{320} \sim R_{329}$ 、 $R_{330} \sim R$

50

339、R340～R349、R350～R359及びR360～R369は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であることがより好ましい。

【0453】

第三実施形態の化合物において、R310～R319、R320～R329、R330～R339、R340～R349、R350～R359及びR360～R369は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることがさらに好ましい。

【0454】

第三実施形態の化合物において、R310～R319、R320～R329、R330～R339、R340～R349、R350～R359及びR360～R369は、水素原子であることがよりさらに好ましい。

【0455】

なお、第三実施形態の化合物は、第一実施形態で説明した化合物M3の一態様に係る化合物にも相当する。そのため、第三実施形態の化合物の具体例も、第一実施形態で説明した化合物M3の具体例中に示されている。

【0456】

[有機EL素子]

第三実施形態の一態様である有機EL素子は、第一実施形態の有機EL素子における化合物M3を、第三実施形態の化合物に置き換えた有機EL素子である。

【0457】

第三実施形態の化合物は、有機EL素子の高性能化が可能であり、例えば、有機EL素子の発光効率を向上させることができる。

したがって、第三実施形態の一態様である有機EL素子も、高性能であり、例えば、発光効率が高い。

【0458】

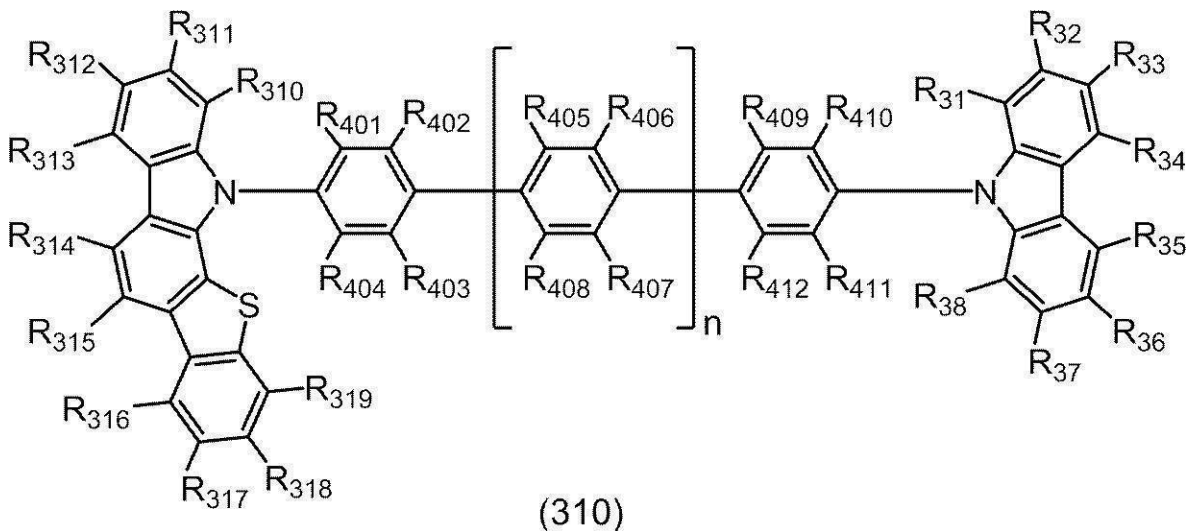
[第四実施形態]

[化合物]

第四実施形態の化合物は、下記一般式(310)で表される化合物である。第四実施形態の化合物の具体例として、第一実施形態のM3の具体例示の内、下記一般式(310)に該当する化合物を援用する。

【0459】

【化199】



【0460】

(前記一般式(310)において、

R<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 R<sub>401</sub> ~ R<sub>412</sub>は、それぞれ独立に、水素原子もしくは置換基であり、  
 置換基としてのR<sub>310</sub> ~ R<sub>319</sub>、置換基としてのR<sub>31</sub> ~ R<sub>38</sub>並びに置換基として  
 のR<sub>401</sub> ~ R<sub>412</sub>は、それぞれ独立に、

ハロゲン原子、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリール基、

置換もしくは無置換の環形成原子数5 ~ 30の複素環基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のハロゲン化アルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキニル基、

置換もしくは無置換の炭素数3 ~ 30のアルキルシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールシリル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールホスホリル基、

ヒドロキシ基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルコキシ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールオキシ基、

アミノ基、

置換もしくは無置換の炭素数2 ~ 30のアルキルアミノ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 60のアリールアミノ基、

チオール基、

置換もしくは無置換の炭素数1 ~ 30のアルキルチオ基、又は

置換もしくは無置換の環形成炭素数6 ~ 30のアリールチオ基であり、

nは、0、1、2又は3であり、

R<sub>405</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>405</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>406</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>406</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>407</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>407</sub>は、互いに同一であるか、又は異なり、

R<sub>408</sub>が複数存在する場合、複数のR<sub>408</sub>は、互いに同一であるか、又は異なる。) )

【0461】

第四実施形態の化合物において、R<sub>310</sub>及びR<sub>311</sub>の組、R<sub>311</sub>及びR<sub>312</sub>の組、  
 R<sub>312</sub>及びR<sub>313</sub>の組、R<sub>313</sub>及びR<sub>314</sub>の組、R<sub>314</sub>及びR<sub>315</sub>の組、R<sub>315</sub>  
 及びR<sub>316</sub>の組、R<sub>316</sub>及びR<sub>317</sub>の組、R<sub>317</sub>及びR<sub>318</sub>の組、並びにR<sub>318</sub>及  
 びR<sub>319</sub>の組は、互いに結合しない。

【0462】

第四実施形態の化合物において、nは、0又は1であることが好ましい。

【0463】

第四実施形態の化合物は、下記一般式(311)で表されることが好ましい。

【0464】

10

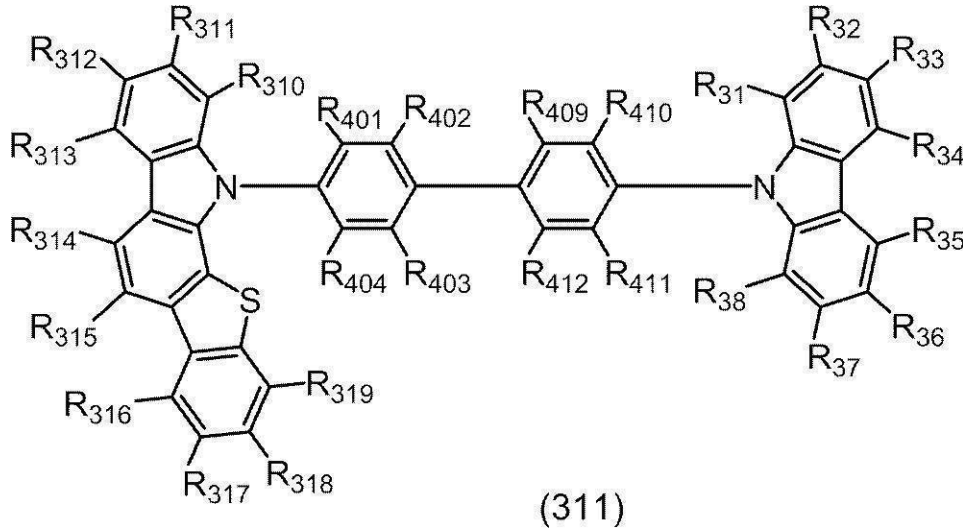
20

30

40

50

【化 2 0 0】



10

【 0 4 6 5】

(前記一般式(311)における $R_{310} \sim R_{319}$ 、 $R_{401} \sim R_{404}$ 、 $R_{409} \sim R_{412}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ、前記一般式(310)における $R_{310} \sim R_{319}$ 、 $R_{401} \sim R_{404}$ 、 $R_{409} \sim R_{412}$ 、 $R_{31} \sim R_{38}$ と同義である。)

20

【 0 4 6 6】

第四実施形態の化合物において、 $R_{31} \sim R_{38}$ 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6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基であることが好ましい。

【 0 4 6 7】

第四実施形態の化合物において、 $R_{31} \sim R_{38}$ 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6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であることがより好ましい。

【 0 4 6 8】

第四実施形態の化合物において、 $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることがさらに好ましい。

30

【 0 4 6 9】

第四実施形態の化合物において、 $R_{31} \sim R_{38}$ は、水素原子であることがよりさらに好ましい。

【 0 4 7 0】

第四実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基であることが好ましい。

40

【 0 4 7 1】

第四実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であることがより好ましい。

【 0 4 7 2】

第四実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることがさらに好ましい。

【 0 4 7 3】

第四実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ は、水素原子であることがよりさらに好ましい。

50

## 【0474】

第四実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ 並びに $R_{31} \sim R_{38}$ 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6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基であることが好ましい。

## 【0475】

第四実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ 並びに $R_{31} \sim R_{38}$ 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6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であることがより好ましい。

## 【0476】

第四実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ 並びに $R_{31} \sim R_{38}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることがさらに好ましい。

10

## 【0477】

第四実施形態の化合物において、 $R_{401} \sim R_{412}$ 並びに $R_{31} \sim R_{38}$ は、水素原子であることがよりさらに好ましい。

## 【0478】

第四実施形態の化合物において、 $R_{310} \sim R_{319}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基、又は置換もしくは無置換の炭素数1～30のアルキル基であることがさらに好ましい。

20

## 【0479】

第四実施形態の化合物において、 $R_{310} \sim R_{319}$ は、それぞれ独立に、水素原子、置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、又は置換もしくは無置換の環形成原子数5～30の複素環基であることがより好ましい。

## 【0480】

第四実施形態の化合物において、 $R_{310} \sim R_{319}$ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換もしくは無置換の環形成炭素数6～30のアリール基であることがさらに好ましい。

## 【0481】

第四実施形態の化合物において、 $R_{310} \sim R_{319}$ は、水素原子であることがよりさらに好ましい。

30

## 【0482】

なお、第四実施形態の化合物は、第一実施形態で説明した化合物M3の一態様に係る化合物にも相当する。そのため、第四実施形態の化合物の具体例も、第一実施形態で説明した化合物M3の具体例中に示されている。

## 【0483】

## 〔有機EL素子〕

第四実施形態の一態様である有機EL素子は、第一実施形態の有機EL素子における化合物M3を、第四実施形態の化合物に置き換えた有機EL素子である。

## 【0484】

第四実施形態の化合物は、有機EL素子の高性能化が可能であり、例えば、有機EL素子の発光効率を向上させることができる。

40

したがって、第四実施形態の一態様である有機EL素子も、高性能であり、例えば、発光効率が高い。

## 【0485】

## 〔第五実施形態〕

## 〔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

50

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。

【0486】

〔第六実施形態〕

〔有機EL素子用材料〕

第六実施形態の有機EL素子用材料は、第三実施形態の化合物、及び第四実施形態の化合物の少なくともいずれかを含む。

第六実施形態の有機EL素子用材料によれば、有機EL素子の高性能化が可能であり、例えば、有機EL素子の発光効率を向上させることができる。

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

10

【0487】

〔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。

【0488】

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。

20

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。

【0489】

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。

30

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。

40

発光層と障壁層とは接合していることが好ましい。

【0490】

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。

【0491】

〔その他の説明〕

【0492】

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

【0493】

50

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

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

10

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

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

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

20

例えば、 $R_x$  及び  $R_y$  が互いに結合して環を形成するとは、下記一般式 (E1) で表される分子構造において、 $R_{x1}$  に含まれる原子と、 $R_{y1}$  に含まれる原子とが、一般式 (E2) で表される環（環構造）Eを形成すること；一般式 (F1) で表される分子構造において、 $R_{x1}$  に含まれる原子と、 $R_{y1}$  に含まれる原子とが、一般式 (F2) で表される環Fを形成すること；一般式 (G1) で表される分子構造において、 $R_{x1}$  に含まれる原子と、 $R_{y1}$  に含まれる原子とが、一般式 (G2) で表される環Gを形成すること；一般式 (H1) で表される分子構造において、 $R_{x1}$  に含まれる原子と、 $R_{y1}$  に含まれる原子とが、一般式 (H2) で表される環Hを形成すること；一般式 (I1) で表される分子構造において、 $R_{x1}$  に含まれる原子と、 $R_{y1}$  に含まれる原子とが、一般式 (I2) で表される環Iを形成すること；を意味する。

30

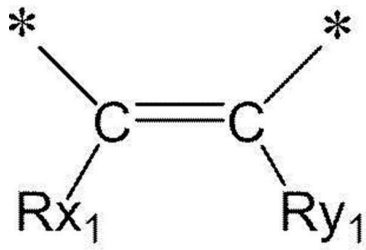
一般式 (E1) ~ (I1) 中、\* は、それぞれ独立に、一分子中の他の原子との結合位置を表す。一般式 (E1) 中の2つの\* は一般式 (E2) 中の2つの\* にそれぞれ対応し、一般式 (F1) 中の2つの\* は一般式 (F2) 中の2つの\* にそれぞれ対応し、一般式 (G1) 中の2つの\* は一般式 (G2) 中の2つの\* にそれぞれ対応し、一般式 (H1) 中の2つの\* は一般式 (H2) 中の2つの\* にそれぞれ対応し、一般式 (I1) 中の2つの\* は一般式 (I2) 中の2つの\* にそれぞれ対応する。

【0494】

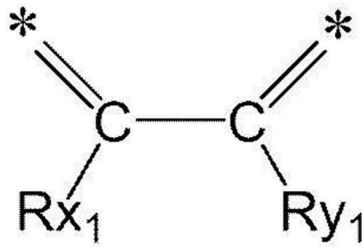
40

50

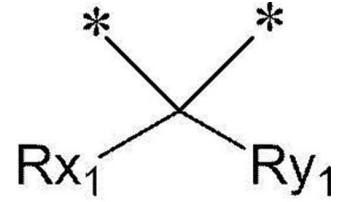
【化201】



(E1)

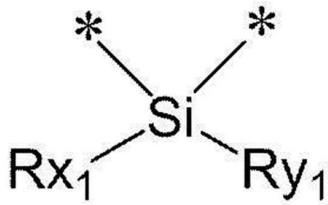


(F1)

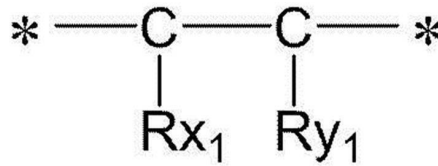


(G1)

10



(H1)

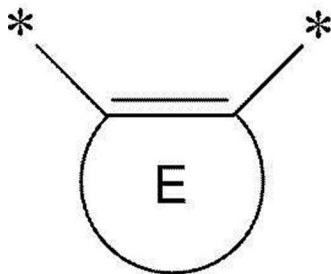


(I1)

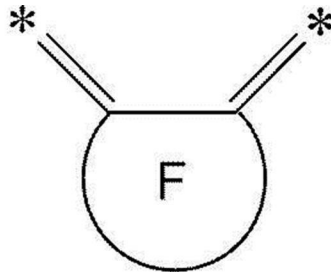
20

【0495】

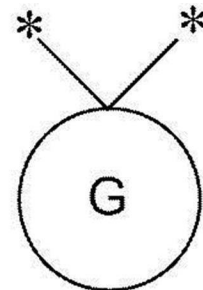
【化202】



(E2)

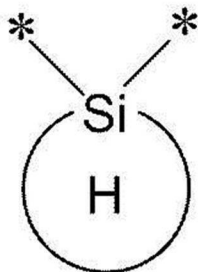


(F2)

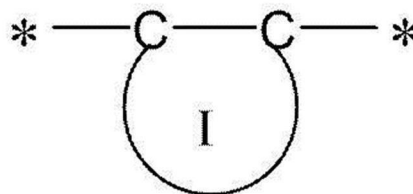


(G2)

30



(H2)



(I2)

40

【0496】

一般式(E2)~(I2)で表される分子構造において、E~Iはそれぞれ環構造(前記環形成原子数が5以上の環)を表す。一般式(E2)~(I2)中、\*は、それぞれ独立に、一分子中の他の原子との結合位置を表す。一般式(E2)中の2つの\*は一般式(E1)中の2つの\*にそれぞれ対応する。一般式(F2)~(I2)中の2つの\*につい

50

ても同様に、一般式 ( F 1 ) ~ ( I 1 ) 中の 2 つの \* にそれぞれ対応する。

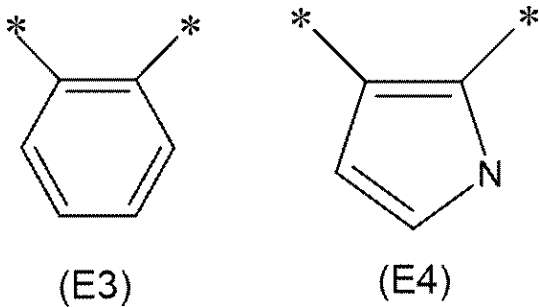
【 0 4 9 7 】

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

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

【 0 4 9 8 】

【 化 2 0 3 】



【 0 4 9 9 】

本明細書において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物（例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、複素環化合物）の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記載される「環形成炭素数」については、特筆しない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が 6 であり、ナフタレン環は環形成炭素数が 10 であり、ピリジニル基は環形成炭素数が 5 であり、フランニル基は環形成炭素数 4 である。また、ベンゼン環やナフタレン環に置換基として例えばアルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、環形成炭素数の数に含めない。また、フルオレン環に置換基として例えばフルオレン環が結合している場合（スピロフルオレン環を含む）、置換基としてのフルオレン環の炭素数は環形成炭素数の数に含めない。

【 0 5 0 0 】

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

【 0 5 0 1 】

・本明細書における一般式中における各置換基についての説明（各置換基の説明）

本明細書におけるアール基（芳香族炭化水素基と称する場合がある。）は、例えば、

10

20

30

40

50

アリール基  $S u b_1$  であり、アリール基  $S u b_1$  は、フェニル基、ビフェニル基、ターフェニル基、ナフチル基、アントリル基、フェナントリル基、フルオレニル基、ピレニル基、クリセニル基、フルオランテニル基、ベンゾ[ a ]アントリル基、ベンゾ[ c ]フェナントリル基、トリフェニレニル基、ベンゾ[ k ]フルオランテニル基、ベンゾ[ g ]クリセニル基、ベンゾ[ b ]トリフェニレニル基、ピセニル基、及びペリレニル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【 0 5 0 2 】

本明細書におけるアリール基  $S u b_1$  としては、環形成炭素数が、6 ~ 30 であることが好ましく、6 ~ 22 であることがより好ましく、6 ~ 20 であることがさらに好ましく、6 ~ 14 であることがよりさらに好ましく、6 ~ 12 であることがさらになお好ましい。上記アリール基  $S u b_1$  の中でもフェニル基、ビフェニル基、ナフチル基、フェナントリル基、ターフェニル基、及びフルオレニル基が好ましい。1 - フルオレニル基、2 - フルオレニル基、3 - フルオレニル基及び4 - フルオレニル基については、9 位の炭素原子に、後述する本明細書における置換もしくは無置換のアルキル基  $S u b_3$  や、置換もしくは無置換のアリール基  $S u b_1$  が置換されていることが好ましい。

10

【 0 5 0 3 】

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

20

【 0 5 0 4 】

本明細書における複素環基  $S u b_2$  は、例えば、ピリジル基、ピリミジニル基、ピラジニル基、ピリダジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリニル基、ナフチリジニル基、フタラジニル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、ピロリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、インドリル基、ベンズイミダゾリル基、インダゾリル基、イミダゾピリジニル基、ベンズトリアゾリル基、カルバゾリル基、フリル基、チエニル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、イソキサゾリル基、イソチアゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾイソキサゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、ベンゾオキサジアゾリル基、ベンゾチアジアゾリル基、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、ピベリジニル基、ピロリジニル基、ピベラジニル基、モルホルル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、及びフェノキサジニル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

30

【 0 5 0 5 】

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

40

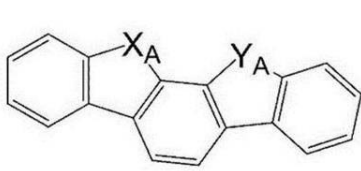
【 0 5 0 6 】

また、本明細書において、複素環基  $S u b_2$  は、例えば、下記一般式 ( X Y - 1 ) ~ ( X Y - 1 8 ) で表される部分構造から誘導される基であってもよい。

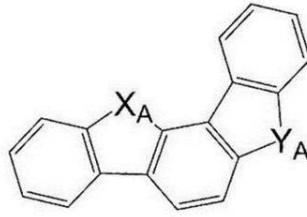
50

【 0 5 0 7 】

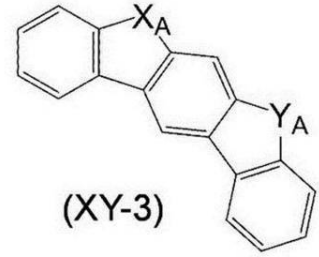
【 化 2 0 4 】



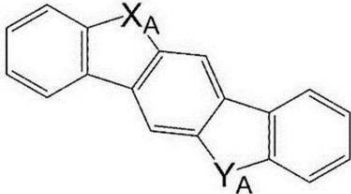
(XY-1)



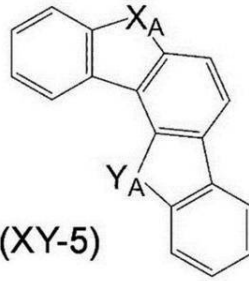
(XY-2)



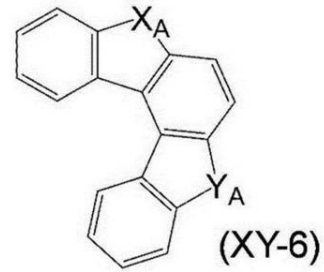
(XY-3)



(XY-4)



(XY-5)



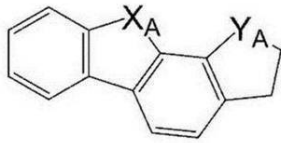
(XY-6)

10

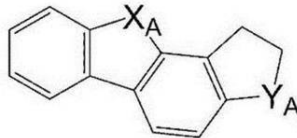
20

【 0 5 0 8 】

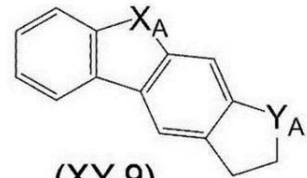
【 化 2 0 5 】



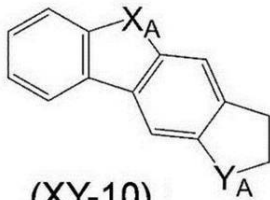
(XY-7)



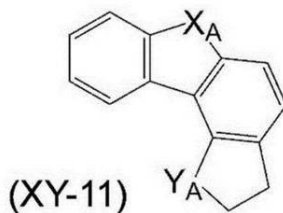
(XY-8)



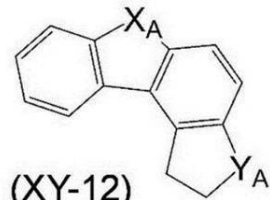
(XY-9)



(XY-10)



(XY-11)



(XY-12)

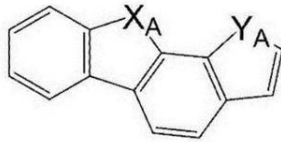
30

【 0 5 0 9 】

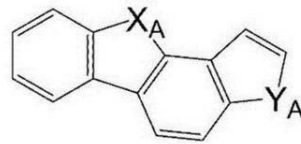
40

50

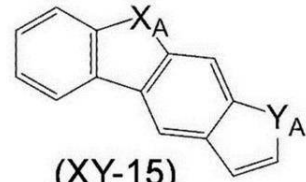
## 【化206】



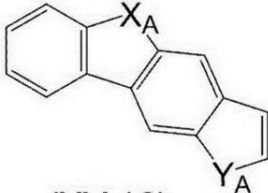
(XY-13)



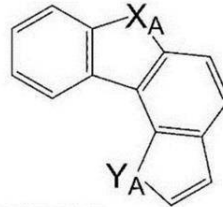
(XY-14)



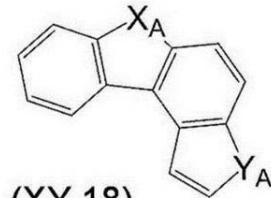
(XY-15)



(XY-16)



(XY-17)



(XY-18)

10

## 【0510】

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

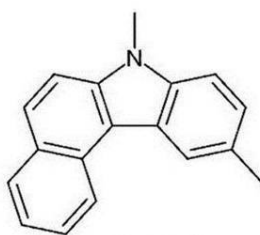
20

## 【0511】

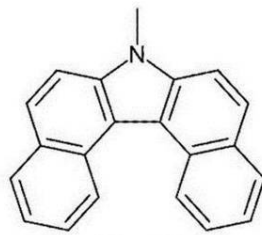
また、本明細書において、複素環基Sub<sub>2</sub>は、例えば、下記一般式(XY-19)~(XY-22)で表される基であってもよい。また、結合手の位置も適宜変更され得る。

## 【0512】

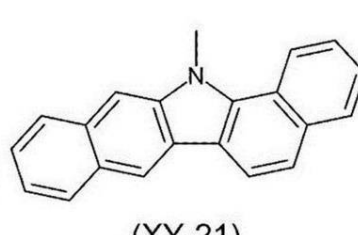
## 【化207】



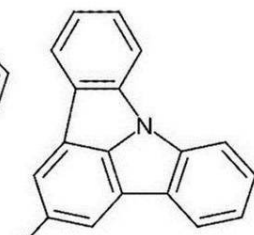
(XY-19)



(XY-20)



(XY-21)



(XY-22)

30

## 【0513】

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

40

本明細書におけるアルキル基は、例えば、アルキル基Sub<sub>3</sub>である。

本明細書における直鎖のアルキル基は、例えば、直鎖のアルキル基Sub<sub>31</sub>である。

本明細書における分岐鎖のアルキル基は、例えば、分岐鎖のアルキル基Sub<sub>32</sub>である。

本明細書における環状のアルキル基は、例えば、環状のアルキル基Sub<sub>33</sub>である。

アルキル基Sub<sub>3</sub>は、例えば、直鎖のアルキル基Sub<sub>31</sub>、分岐鎖のアルキル基Sub<sub>32</sub>、及び環状のアルキル基Sub<sub>33</sub>からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

## 【0514】

50

直鎖のアルキル基  $S u b_{31}$  または分岐鎖のアルキル基  $S u b_{32}$  は、例えば、メチル基、エチル基、 $n$ -プロピル基、イソプロピル基、 $n$ -ブチル基、 $s$ -ブチル基、イソブチル基、 $t$ -ブチル基、 $n$ -ペンチル基、 $n$ -ヘキシル基、 $n$ -ヘプチル基、 $n$ -オクチル基、 $n$ -ノニル基、 $n$ -デシル基、 $n$ -ウンデシル基、 $n$ -ドデシル基、 $n$ -トリデシル基、 $n$ -テトラデシル基、 $n$ -ペンタデシル基、 $n$ -ヘキサデシル基、 $n$ -ヘプタデシル基、 $n$ -オクタデシル基、ネオペンチル基、アミル基、イソアミル基、1-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、1-ペンチルヘキシル基、1-ブチルペンチル基、1-ヘプチルオクチル基、及び3-メチルペンチル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【0515】

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

【0516】

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

【0517】

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

【0518】

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

【0519】

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

【0520】

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

【0521】

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

トリアルキルシリル基  $S u b_{511}$  は、例えば、トリメチルシリル基、トリエチルシリル基、トリ- $n$ -ブチルシリル基、トリ- $n$ -オクチルシリル基、トリエイソブチルシリル基、ジメチルエチルシリル基、ジメチルイソプロピルシリル基、ジメチル- $n$ -プロピルシリル基、ジメチル- $n$ -ブチルシリル基、ジメチル- $t$ -ブチルシリル基、ジエチルイソプロピルシリル基、ビニルジメチルシリル基、プロピルジメチルシリル基、及びトリエイソプロピルシリル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。トリアルキ

10

20

30

40

50

ルシリル基  $S u b_{511}$  における3つのアルキル基  $S u b_3$  は、互いに同一でも異なってもよい。

【0522】

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

【0523】

ジアルキルアリールシリル基  $S u b_{521}$  は、例えば、上記アルキル基  $S u b_3$  を2つ有し、上記アリール基  $S u b_1$  を1つ有するジアルキルアリールシリル基である。ジアルキルアリールシリル基  $S u b_{521}$  の炭素数は、8 ~ 30であることが好ましい。

10

【0524】

アルキルジアリールシリル基  $S u b_{522}$  は、例えば、上記アルキル基  $S u b_3$  を1つ有し、上記アリール基  $S u b_1$  を2つ有するアルキルジアリールシリル基である。アルキルジアリールシリル基  $S u b_{522}$  の炭素数は、13 ~ 30であることが好ましい。

【0525】

トリアリールシリル基  $S u b_{523}$  は、例えば、上記アリール基  $S u b_1$  を3つ有するトリアリールシリル基である。トリアリールシリル基  $S u b_{523}$  の炭素数は、18 ~ 30であることが好ましい。

【0526】

本明細書における置換もしくは無置換のアルキルスルホニル基は、例えば、アルキルスルホニル基  $S u b_6$  であり、アルキルスルホニル基  $S u b_6$  は、 $-S O_2 R_w$  で表される。 $-S O_2 R_w$  における  $R_w$  は、置換もしくは無置換の上記アルキル基  $S u b_3$  を表す。

20

【0527】

本明細書におけるアラルキル基（アリールアルキル基と称する場合がある）は、例えば、アラルキル基  $S u b_7$  である。アラルキル基  $S u b_7$  におけるアリール基は、例えば、上記アリール基  $S u b_1$  及び上記ヘテロアリール基  $S u b_2$  の少なくとも一方を含む。

【0528】

本明細書におけるアラルキル基  $S u b_7$  は、アリール基  $S u b_1$  を有する基であることが好ましく、 $-Z_3-Z_4$  と表される。この  $Z_3$  は、例えば、上記アルキル基  $S u b_3$  に対応するアルキレン基等である。この  $Z_4$  は、例えば、上記アリール基  $S u b_1$  である。このアラルキル基  $S u b_7$  は、アリール部分が炭素数6 ~ 30（好ましくは6 ~ 20、より好ましくは6 ~ 12）、アルキル部分が炭素数1 ~ 30（好ましくは1 ~ 20、より好ましくは1 ~ 10、さらに好ましくは1 ~ 6）であることが好ましい。このアラルキル基  $S u b_7$  は、例えば、ベンジル基、2-フェニルプロパン-2-イル基、1-フェニルエチル基、2-フェニルエチル基、1-フェニルイソプロピル基、2-フェニルイソプロピル基、フェニル-t-ブチル基、-ナフチルメチル基、1- -ナフチルエチル基、2- -ナフチルエチル基、1- -ナフチルイソプロピル基、2- -ナフチルイソプロピル基、-ナフチルメチル基、1- -ナフチルエチル基、2- -ナフチルエチル基、1- -ナフチルイソプロピル基、及び2- -ナフチルイソプロピル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

30

40

【0529】

本明細書におけるアルコキシ基は、例えば、アルコキシ基  $S u b_8$  であり、アルコキシ基  $S u b_8$  は、 $-O Z_1$  と表される。この  $Z_1$  は、例えば、上記アルキル基  $S u b_3$  である。アルコキシ基  $S u b_8$  は、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、ブトキシ基、ペンチルオキシ基、及びヘキシルオキシ基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。アルコキシ基  $S u b_8$  の炭素数は、1 ~ 30であることが好ましく、1 ~ 20であることがより好ましい。

【0530】

本明細書におけるハロゲン化アルコキシ基は、例えば、ハロゲン化アルコキシ基  $S u b_9$  であり、ハロゲン化アルコキシ基  $S u b_9$  は、例えば、上記アルコキシ基  $S u b_8$  が1以

50

上のハロゲン原子、好ましくはフッ素原子で置換されたアルコキシ基である。

【0531】

本明細書におけるアリーロキシ基（アリーロキシ基と称する場合がある）は、例えば、アリーロキシ基  $S u b_{10}$  である。アリーロキシ基  $S u b_{10}$  におけるアリーロキシ基は、アリーロキシ基  $S u b_1$  及びヘテロアリーロキシ基  $S u b_2$  の少なくとも一方を含む。

【0532】

本明細書におけるアリーロキシ基  $S u b_{10}$  は、 $-OZ_2$  と表される。この  $Z_2$  は、例えば、アリーロキシ基  $S u b_1$  またはヘテロアリーロキシ基  $S u b_2$  である。アリーロキシ基  $S u b_{10}$  の環形成炭素数は、 $6 \sim 30$  であることが好ましく、 $6 \sim 20$  であることがより好ましい。このアリーロキシ基  $S u b_{10}$  としては、例えば、フェノキシ基が挙げられる。

10

【0533】

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

アリーロアミノ基  $S u b_{111}$  は、 $-NHR_{V1}$ 、または  $-N(R_{V1})_2$  と表される。この  $R_{V1}$  は、例えば、アリーロキシ基  $S u b_1$  である。 $-N(R_{V1})_2$  における2つの  $R_{V1}$  は、同一または異なる。

アルキルアミノ基  $S u b_{112}$  は、 $-NHR_{V2}$ 、または  $-N(R_{V2})_2$  と表される。この  $R_{V2}$  は、例えば、アルキル基  $S u b_3$  である。 $-N(R_{V2})_2$  における2つの  $R_{V2}$  は、同一または異なる。

20

【0534】

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

【0535】

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

30

【0536】

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

アルキルチオ基  $S u b_{14}$  は、 $-SR_{V3}$  と表される。この  $R_{V3}$  は、例えば、アルキル基  $S u b_3$  である。アルキルチオ基  $S u b_{14}$  の炭素数は、 $1 \sim 30$  であることが好ましく、 $1 \sim 20$  であることがより好ましい。

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

アリーロチオ基  $S u b_{15}$  は、 $-SR_{V4}$  と表される。この  $R_{V4}$  は、例えば、アリーロキシ基  $S u b_1$  である。アリーロチオ基  $S u b_{15}$  の環形成炭素数は、 $6 \sim 30$  であることが好ましく、 $6 \sim 20$  であることがより好ましい。

40

【0537】

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

【0538】

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

【0539】

本明細書におけるアリーロカルボニル基は、例えば、アリーロカルボニル基  $S u b_{17}$

50

であり、アリアルカルボニル基  $S u b_{17}$  は、 $-C O Y'$  と表される。この  $Y'$  は、例えば、アリアル基  $S u b_1$  である。本明細書におけるアリアルカルボニル基  $S u b_{17}$  は、例えば、フェニルカルボニル基、ジフェニルカルボニル基、ナフチルカルボニル基、及びトリフェニルカルボニル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【0540】

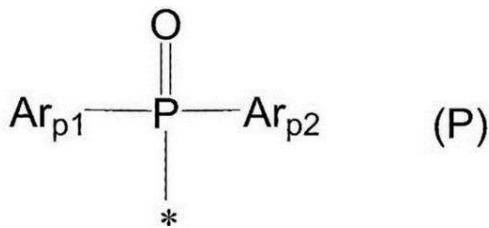
本明細書におけるアシル基は、例えば、アシル基  $S u b_{18}$  であり、アシル基  $S u b_{18}$  は、 $-C O R'$  と表される。この  $R'$  は、例えば、アルキル基  $S u b_3$  である。本明細書におけるアシル基  $S u b_{18}$  は、例えば、アセチル基及びプロピオニル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

【0541】

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

【0542】

【化208】



【0543】

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

【0544】

本明細書におけるエステル基は、例えば、エステル基  $S u b_{20}$  であり、エステル基  $S u b_{20}$  は、例えば、アルキルエステル基及びアリアルエステル基からなる群から選択される少なくともいずれかの基である。

本明細書におけるアルキルエステル基は、例えば、アルキルエステル基  $S u b_{201}$  であり、アルキルエステル基  $S u b_{201}$  は、 $-C(=O)O R^E$  で表される。 $R^E$  は、例えば、置換もしくは無置換の上記アルキル基  $S u b_3$  (好ましくは炭素数 1 ~ 10) である。

本明細書におけるアリアルエステル基は、例えば、アリアルエステル基  $S u b_{202}$  であり、アリアルエステル基  $S u b_{202}$  は、 $-C(=O)O R^A r$  で表される。 $R^A r$  は、例えば、置換もしくは無置換の上記アリアル基  $S u b_1$  である。

【0545】

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

【0546】

本明細書におけるカルバモイル基は、 $-C O N H_2$  で表される。

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

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

【0547】

10

20

30

40

50

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

## 【0548】

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

## 【0549】

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

10

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

同様に、置換アミノ基  $S u b_{11}$  とは、アリアルアミノ基  $S u b_{111}$  及びアルキルアミノ基  $S u b_{112}$  のいずれか1以上の基を意味する。

## 【0550】

本明細書において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基としては、例えば置換基  $R_{F1}$  であり、置換基  $R_{F1}$  は、アリアル基  $S u b_1$ 、ヘテロアリアル基  $S u b_2$ 、アルキル基  $S u b_3$ 、ハロゲン化アルキル基  $S u b_4$ 、置換シリル基  $S u b_5$ 、アルキルスルホニル基  $S u b_6$ 、アラルキル基  $S u b_7$ 、アルコキシ基  $S u b_8$ 、ハロゲン化アルコキシ基  $S u b_9$ 、アリアルアルコキシ基  $S u b_{10}$ 、置換アミノ基  $S u b_{11}$ 、アルケニル基  $S u b_{12}$ 、アルキニル基  $S u b_{13}$ 、アルキルチオ基  $S u b_{14}$ 、アリアルチオ基  $S u b_{15}$ 、置換ホスフィノ基  $S u b_{16}$ 、アリアルカルボニル基  $S u b_{17}$ 、アシル基  $S u b_{18}$ 、置換ホスホリル基  $S u b_{19}$ 、エステル基  $S u b_{20}$ 、シロキサニル基  $S u b_{21}$ 、カルバモイル基  $S u b_{22}$ 、無置換のアミノ基、無置換のシリル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシ基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択される少なくとも一種の基である。

20

## 【0551】

本明細書において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基  $R_{F1}$  は、ジアリアルホウ素基 ( $A r_{B1} A r_{B2} B -$ ) であってもよい。この  $A r_{B1}$  及び  $A r_{B2}$  の例としては、上述のアリアル基  $S u b_1$  が挙げられる。 $A r_{B1} A r_{B2} B -$  における  $A r_{B1}$  及び  $A r_{B2}$  は同一または異なる。

30

## 【0552】

置換基  $R_{F1}$  の具体例及び好ましい基としては、「各置換基の説明」中の置換基（例えば、アリアル基  $S u b_1$ 、ヘテロアリアル基  $S u b_2$ 、アルキル基  $S u b_3$ 、ハロゲン化アルキル基  $S u b_4$ 、置換シリル基  $S u b_5$ 、アルキルスルホニル基  $S u b_6$ 、アラルキル基  $S u b_7$ 、アルコキシ基  $S u b_8$ 、ハロゲン化アルコキシ基  $S u b_9$ 、アリアルアルコキシ基  $S u b_{10}$ 、置換アミノ基  $S u b_{11}$ 、アルケニル基  $S u b_{12}$ 、アルキニル基  $S u b_{13}$ 、アルキルチオ基  $S u b_{14}$ 、アリアルチオ基  $S u b_{15}$ 、置換ホスフィノ基  $S u b_{16}$ 、アリアルカルボニル基  $S u b_{17}$ 、アシル基  $S u b_{18}$ 、置換ホスホリル基  $S u b_{19}$ 、エステル基  $S u b_{20}$ 、シロキサニル基  $S u b_{21}$ 、及びカルバモイル基  $S u b_{22}$ ）の具体例及び好ましい基と同様の基が挙げられる。

40

## 【0553】

「置換もしくは無置換の」という場合における置換基  $R_{F1}$  は、アリアル基  $S u b_1$ 、ヘテロアリアル基  $S u b_2$ 、アルキル基  $S u b_3$ 、ハロゲン化アルキル基  $S u b_4$ 、置換シリル基  $S u b_5$ 、アルキルスルホニル基  $S u b_6$ 、アラルキル基  $S u b_7$ 、アルコキシ基  $S u b_8$ 、ハロゲン化アルコキシ基  $S u b_9$ 、アリアルアルコキシ基  $S u b_{10}$ 、置換アミノ基  $S u b_{11}$ 、アルケニル基  $S u b_{12}$ 、アルキニル基  $S u b_{13}$ 、アルキルチオ基  $S u b_{14}$ 、アリアルチオ基  $S u b_{15}$ 、置換ホスフィノ基  $S u b_{16}$ 、アリアルカルボニル基  $S u b_{17}$ 、アシル基  $S u b_{18}$ 、置換ホスホリル基  $S u b_{19}$ 、エステル基  $S u b_{20}$ 、シロ

50

キサニル基  $S u b_{21}$ 、カルバモイル基  $S u b_{22}$ 、無置換のアミノ基、無置換のシリル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヒドロキシ基、ニトロ基、及びカルボキシ基からなる群から選択される少なくとも一種の基（以下、置換基  $R_{F2}$  と称する）によってさらに置換されてもよい。また、これらの置換基  $R_{F2}$  は複数が互いに結合して環を形成してもよい。

【0554】

「置換もしくは無置換の」という場合における「無置換」とは前記置換基  $R_{F1}$  で置換されておらず、水素原子が結合していることを意味する。

【0555】

なお、本明細書において、「置換もしくは無置換の炭素数  $X X \sim Y Y$  の  $Z Z$  基」という表現における「炭素数  $X X \sim Y Y$ 」は、 $Z Z$  基が無置換である場合の炭素数を表し、置換されている場合の置換基  $R_{F1}$  の炭素数は含めない。

10

【0556】

本明細書において、「置換もしくは無置換の原子数  $X X \sim Y Y$  の  $Z Z$  基」という表現における「原子数  $X X \sim Y Y$ 」は、 $Z Z$  基が無置換である場合の原子数を表し、置換されている場合の置換基  $R_{F1}$  の原子数は含めない。

【0557】

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

【0558】

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

20

【0559】

本明細書において、連結基における芳香族炭化水素基としては、例えば、上述した一価のアリール基  $S u b_1$  から、1つ以上の原子を除いて得られる二価以上の基が挙げられる。

本明細書において、連結基における複素環基としては、例えば、上述した一価のヘテロアリール基  $S u b_2$  から、1つ以上の原子を除いて得られる二価以上の基が挙げられる。

【実施例】

【0560】

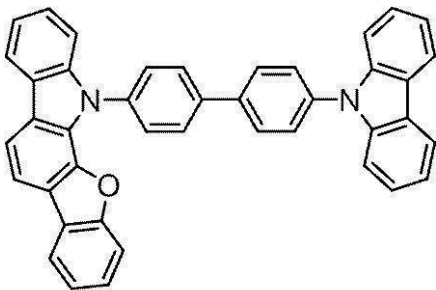
<化合物>

実施例1～実施例4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。

30

【0561】

【化209】



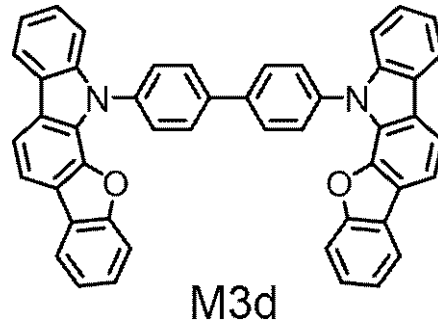
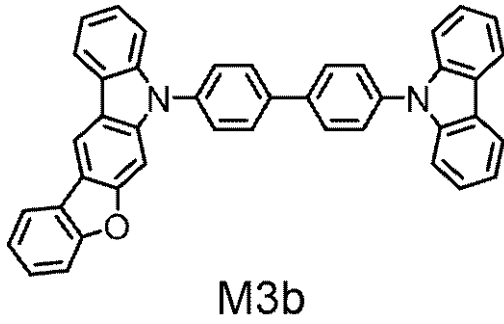
M3a

40

【0562】

50

【化 2 1 0】



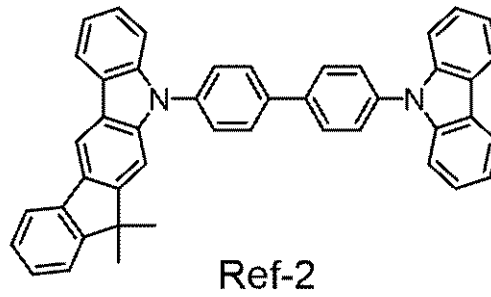
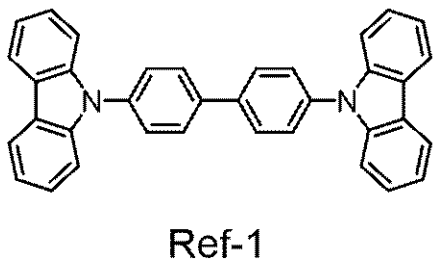
10

【 0 5 6 3】

比較例 1 ~ 比較例 3 に係る有機 E L 素子の製造に用いた比較化合物の構造を以下に示す。

【 0 5 6 4】

【化 2 1 1】



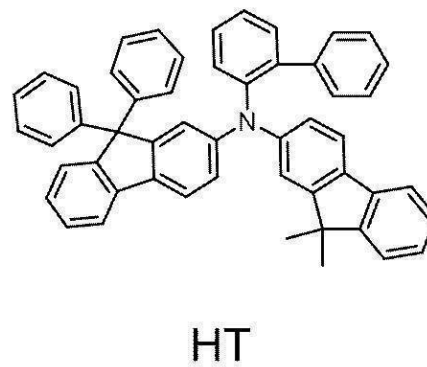
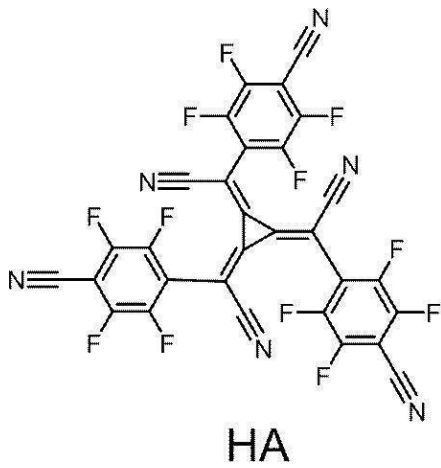
20

【 0 5 6 5】

実施例 1 ~ 実施例 4 及び比較例 1 ~ 比較例 3 に係る有機 E L 素子の製造に用いた、他の化合物の構造を以下に示す。

【 0 5 6 6】

【化 2 1 2】



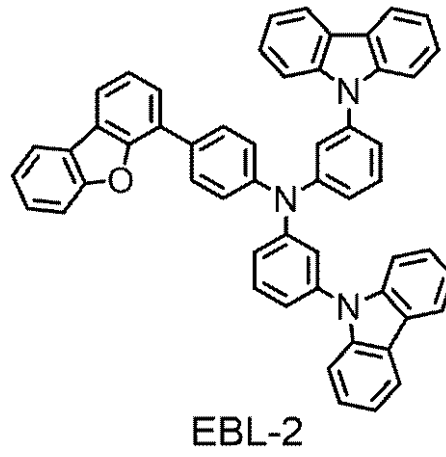
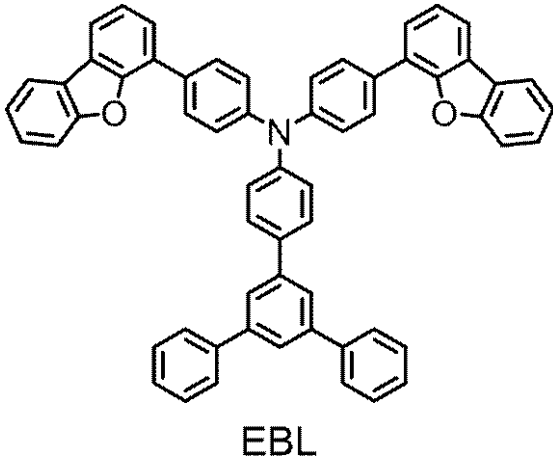
30

40

【 0 5 6 7】

50

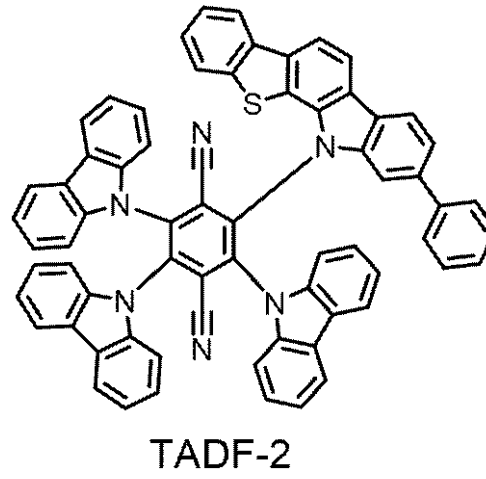
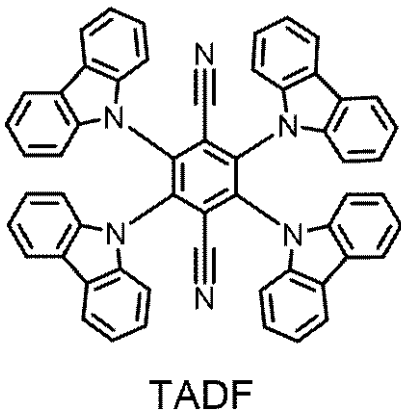
【化 2 1 3】



10

【 0 5 6 8】

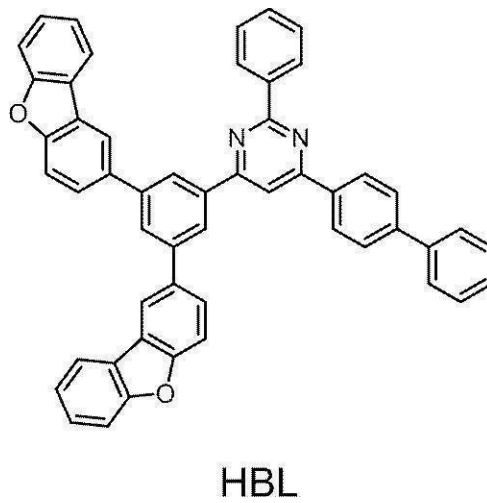
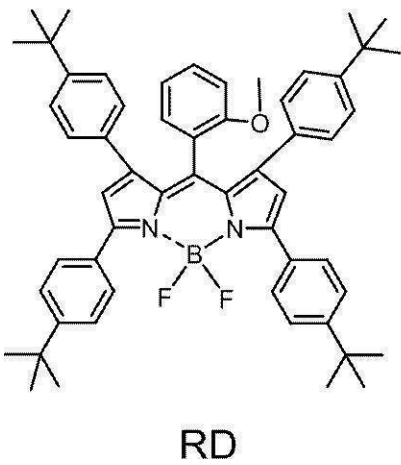
【化 2 1 4】



20

【 0 5 6 9】

【化 2 1 5】

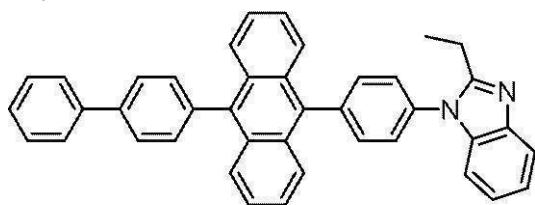


40

【 0 5 7 0】

50

## 【化 2 1 6】



ET

## 【 0 5 7 1】

<有機EL素子の作製>

有機EL素子を以下のように作製し、評価した。

## 【 0 5 7 2】

〔実施例1〕

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

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

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

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

次に、この電子障壁層上に、化合物M3としての化合物M3aと、化合物M2としての化合物TADFと、化合物M1としての化合物RDと、を共蒸着し、膜厚25 nmの発光層を形成した。発光層における化合物M3aの濃度を74質量%とし、化合物TADFの濃度を25質量%とし、化合物RD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10 nmの正孔障壁層を形成した。

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

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

そして、この電子注入性電極上に、金属アルミニウム（Al）を蒸着し、膜厚80 nm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。

ITO(130)/HT:HA(10,97%:3%)/HT(200)/EBL(10)/M3a:TADF:RD(25,74%:25%:1%)/HBL(10)/ET(30)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：nm）を示す。

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M3a、化合物TADF及び化合物RDの割合（質量%）を示す。以下、同様の表記とする。

## 【 0 5 7 3】

〔比較例1〕

比較例1に係る有機EL素子は、実施例1に係る有機EL素子の発光層における化合物M3aを表1に記載の化合物に変更したこと以外、実施例1と同様にして作製した。

## 【 0 5 7 4】

<有機EL素子の評価>

実施例1～実施例4及び比較例1～比較例3で作製した有機EL素子について、以下の

評価を行った。評価結果を表 1 又は表 2 に示す。なお、比較例 1 及び比較例 2 で使用した比較化合物 R e f - 1 並びに比較例 3 で使用した比較化合物 R e f - 2 は、便宜上、化合物 M 3 の欄に記載した。

【 0 5 7 5 】

・主ピーク波長 (  $\lambda_p$  )

有機 E L 素子の電流密度が  $10 \text{ mA/cm}^2$  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 C S - 2 0 0 0 (コニカミノルタ株式会社製) で計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、主ピーク波長  $\lambda_p$  (単位: nm) を求めた。

【 0 5 7 6 】

・駆動電圧

電流密度が  $10 \text{ mA/cm}^2$  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。

【 0 5 7 7 】

・外部量子効率 E Q E

電流密度が  $10 \text{ mA/cm}^2$  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 C S - 2 0 0 0 (コニカミノルタ株式会社製) で計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、ランバシアン放射を行ったと仮定し外部量子効率 E Q E (単位: %) を算出した。

【 0 5 7 8 】

【表 1】

	化合物M3		化合物M2		化合物M1		素子評価結果 (@10mA/cm <sup>2</sup> )		
	種類	S <sub>1</sub> [eV]	種類	S <sub>1</sub> [eV]	種類	S <sub>1</sub> [eV]	$\lambda_p$ [nm]	電圧V [V]	EQE [%]
実施例1	M3a	3.42	TADF	2.38	RD	2.02	621	4.41	18.2
比較例1	Ref-1	3.52	TADF	2.38	RD	2.02	621	4.41	15.6

【 0 5 7 9 】

上記の表 1 及び表 2 中、S<sub>1</sub> [ e V ] は、各実施例、比較例の発光層において使用した化合物の物性値を表す。例えば、実施例 1 において、化合物 M 3 a の S<sub>1</sub> は 3 . 4 2 e V 、化合物 T A D F の S<sub>1</sub> は 2 . 3 8 e V であることを示す。

なお、比較例 1 の R e f - 1 は化合物 M 3 の一般式に該当しないが、便宜的に実施例 1 の M 3 a と同じ列に表中では表記する。

【 0 5 8 0 】

実施例 1 に係る有機 E L 素子は、比較例 1 に係る有機 E L 素子に比べて、高効率で発光した。

【 0 5 8 1 】

< 有機 E L 素子の作製 >

〔実施例 2〕

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

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

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

10

20

30

40

50

次に、この正孔輸送層上に、化合物 E B L - 2 を蒸着し、膜厚 1 0 n m 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 M 3 としての化合物 M 3 a と、化合物 M 2 としての化合物 T A D F - 2 と、化合物 M 1 としての化合物 R D と、を共蒸着し、膜厚 2 5 n m の発光層を形成した。発光層における化合物 M 3 a の濃度を 7 4 質量%とし、化合物 T A D F - 2 の濃度を 2 5 質量%とし、化合物 R D の濃度を 1 質量%とした。

次に、この発光層上に、化合物 H B L を蒸着し、膜厚 1 0 n m の正孔障壁層を形成した。

次に、この正孔障壁層上に、化合物 E T を蒸着し、膜厚 3 0 n m の電子輸送層を形成した。

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

10

そして、この電子注入性電極上に、金属アルミニウム ( A l ) を蒸着し、膜厚 8 0 n m の金属 A l 陰極を形成した。

実施例 1 に係る有機 E L 素子の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO(130)/HT:HA(10,97%:3%)/HT(200)/EBL-2(10)/M3a:TADF-2:RD(25,74%:25%:1%)/HBL(10)/ET(30)/LiF(1)/Al(80)

なお、括弧内の数字は、膜厚 ( 単位 : n m ) 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 ( 9 7 % : 3 % ) は、正孔注入層における化合物 H T 及び化合物 H A の割合 ( 質量 % ) を示し、パーセント表示された数字 ( 7 4 % : 2 5 % : 1 % ) は、発光層における化合物 M 3 a 、化合物 T A D F - 2 及び化合物 R D の割合 ( 質量 % ) を示す。以下、同様の表記とする。

20

【 0 5 8 2 】

〔 実施例 3 及び実施例 4 〕

実施例 3 及び実施例 4 に係る有機 E L 素子は、それぞれ、実施例 2 に係る有機 E L 素子の発光層における化合物 M 3 a を表 2 に記載の化合物に変更したこと以外、実施例 2 と同様にして作製した。

【 0 5 8 3 】

〔 比較例 2 及び比較例 3 〕

比較例 2 及び比較例 3 に係る有機 E L 素子は、それぞれ、実施例 2 に係る有機 E L 素子の発光層における化合物 M 3 a を表 2 に記載の化合物に変更したこと以外、実施例 2 と同様にして作製した。

30

【 0 5 8 4 】

< 有機 E L 素子の評価 >

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

【 0 5 8 5 】

40

50

【表 2】

	化合物M3		化合物M2		化合物M1		素子評価結果 (@10mA/cm <sup>2</sup> )	
	種類	S <sub>1</sub> [eV]	種類	S <sub>1</sub> [eV]	種類	S <sub>1</sub> [eV]	λ <sub>p</sub> [nm]	EQE [%]
実施例2	M3a	3.42	TADF-2	2.34	RD	2.02	621	19.5
実施例3	M3b	3.39	TADF-2	2.34	RD	2.02	621	18.9
実施例4	M3d	3.42	TADF-2	2.34	RD	2.02	621	17.7
比較例2	Ref-1	3.52	TADF-2	2.34	RD	2.02	621	16.0
比較例3	Ref-2	3.34	TADF-2	2.34	RD	2.02	621	12.4

## 【0586】

なお、比較例2のRef-1及び比較例3のRef-2は、化合物M3の一般式に該当しないが、便宜的に実施例2～実施例4の化合物M3と同じ列に表中では表記する。

## 【0587】

実施例2～実施例4に係る有機EL素子は、比較例2～比較例3に係る有機EL素子に比べて、高効率で発光した。

## 【0588】

<化合物の評価>

実施例1～実施例4及び比較例1～比較例3で使用した化合物の物性値を以下の方法で測定した。

## 【0589】

(遅延蛍光性)

・化合物TADF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が吸収する波長のパルス光(パルスレーザーから照射される光)で励起された後、当該励起状態から即座に観察されるPrompt発光(即時発光)と、当該励起後、即座には観察されず、その後観察されるDelay発光(遅延発光)とが存在する。本実施例における遅延蛍光発光とは、Delay発光(遅延発光)の量がPrompt発光(即時発光)の量に対して5%以上を意味する。具体的には、Prompt発光(即時発光)の量をX<sub>p</sub>とし、Delay発光(遅延発光)の量をX<sub>D</sub>としたときに、X<sub>D</sub>/X<sub>p</sub>の値が0.05以上であることを意味する。

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

10

20

30

40

50

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 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 % 以上あることが確認された。

また、化合物 T A D F - 2 についても、化合物 T A D F と同様に測定した結果、化合物 T A D F - 2 の 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 % 以上あることが確認された。

具体的には、化合物 T A D F 及び T A D F - 2 について、どちらも、 $X_D / X_P$  の値が 0 . 0 5 以上であった。

【 0 5 9 0 】

（一重項エネルギー  $S_1$ ）

化合物 M 3 a、化合物 M 3 b、化合物 M 3 d、化合物 T A D F、化合物 T A D F - 2、化合物 R D、比較化合物 R e f - 1 及び比較化合物 R e f - 2 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 又は表 2 に示す。

また、後述の合成例の化合物 M 3 c 及び M 3 e の一重項エネルギーも同様にして測定したところ、それぞれ 3 . 3 5 e V 及び 3 . 4 6 e V であった。

【 0 5 9 1 】

（77 [ K ] におけるエネルギーギャップ）

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

【 0 5 9 2 】

（ S T ）

測定した一重項エネルギー  $S_1$  と 77 [ K ] におけるエネルギーギャップ  $T_{77K}$  とに基づいて、 S T を算出した。化合物 T A D F 及び化合物 T A D F - 2 の S T は、いずれも、0 . 0 1 未満と確認した。

【 0 5 9 3 】

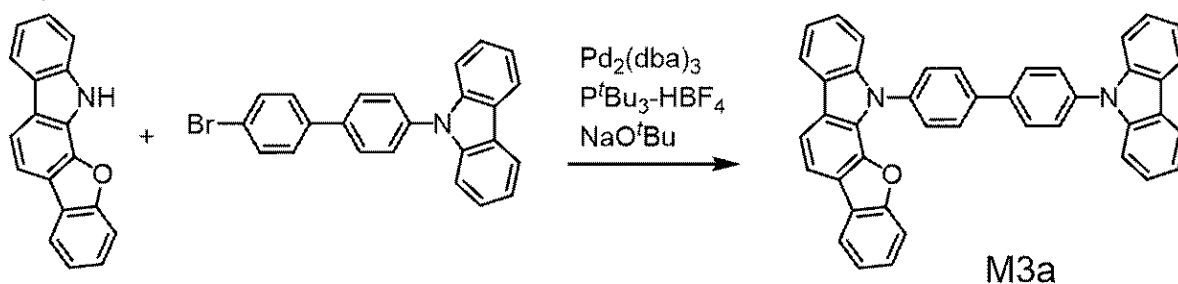
[ 合成実施例 1 : 化合物 M 3 a の合成 ]

（ 1 - 1 ）化合物 M 3 a の合成

化合物 M 3 a の合成スキームを以下に示す。

【 0 5 9 4 】

【 化 2 1 7 】



【 0 5 9 5 】

窒素雰囲気下、12 H - ベンゾフロ [ 2 , 3 - a ] カルバゾール ( 2 6 . 6 g , 1 0 3 m m o l )、9 - ( 4 ' - ブロモ - [ 1 , 1 ' - ビフェニル ] - 4 - イル ) - 9 H - カルバゾール ( 4 1 . 2 g , 1 0 3 m m o l )、トリス ( ジベンジリデンアセトン ) ジパラジウム ( 1 . 9 0 g , 2 . 0 7 m m o l )、トリ - t e r t - ブチルホスホニウムテトラフルオロボラート ( 1 . 2 0 g , 4 . 1 4 m m o l )、及びナトリウム t e r t - ブトキシド ( 1 1 . 9 g , 1 2 4 m m o l ) の混合物にキシレン ( 6 7 5 m L ) を加え、130 で 8 時間攪拌した。反応終了後、固体を濾取した。濾取した固体をトルエンを用いて再結晶させ、化合物 M 3 a を得た ( 5 1 . 5 g 、収率 8 7 % )。L C - M S ( L i q u i d c h r o m a t o g r a p h y m a s s s p e c t r o m e t r y ) の分析により、化合物 M 3 a と同定した。

【 0 5 9 6 】

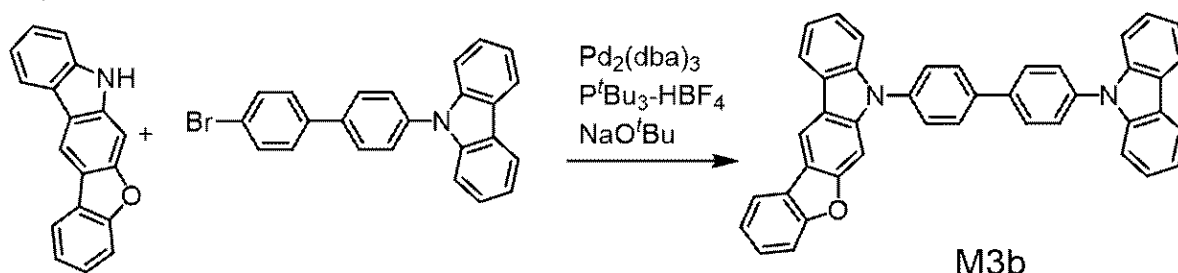
## [ 合成実施例 2 : 化合物 M 3 b の合成 ]

## ( 1 - 2 ) 化合物 M 3 b の合成

化合物 M 3 b の合成スキームを以下に示す。

【 0 5 9 7 】

【 化 2 1 8 】



10

【 0 5 9 8 】

窒素雰囲気下、7H-ベンゾフロ[2,3-b]カルバゾール(25.8g, 100mmol)、9-(4'-プロモ-[1,1'-ビフェニル]-4-イル)-9H-カルバゾール(40.0g, 100mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(1.83g, 2.00mmol)、トリ-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボレート(1.16g, 4.00mmol)、及びナトリウムtert-ブトキシド(11.5g, 120mmol)の混合物にキシレン(650mL)を加え、130℃で8時間撹拌した。反応終了後、固体を濾取した。濾取した固体をトルエンを用いて再結晶させ、化合物M3bを得た(45.7g、収率79%)。LC-MS(Liquid chromatography mass spectrometry)の分析により、化合物M3bと同定した。

20

【 0 5 9 9 】

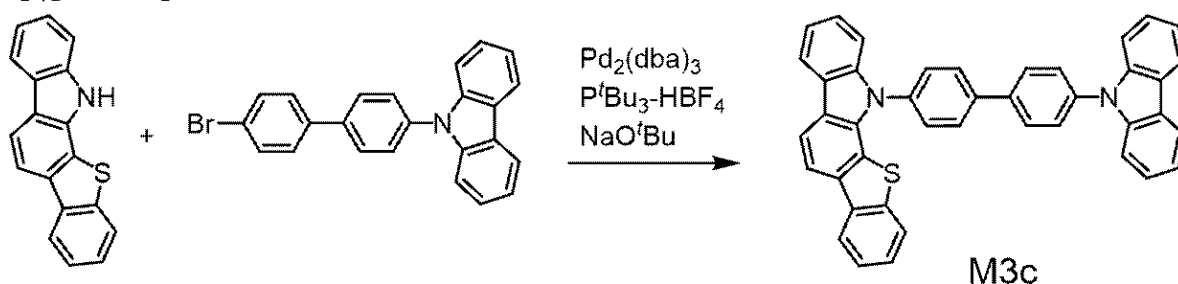
## [ 合成実施例 3 : 化合物 M 3 c の合成 ]

## ( 1 - 3 ) 化合物 M 3 c の合成

化合物 M 3 c の合成スキームを以下に示す。

【 0 6 0 0 】

【 化 2 1 9 】



30

【 0 6 0 1 】

窒素雰囲気下、12H-[1]ベンゾチエノ[2,3-a]カルバゾール(27.3g, 100mmol)、9-(4'-プロモ-[1,1'-ビフェニル]-4-イル)-9H-カルバゾール(40.0g, 100mmol)、トリス(ジベンジリデンアセトン)ジパラジウム(1.83g, 2.00mmol)、トリ-tert-ブチルホスホニウムテトラフルオロボレート(1.16g, 4.00mmol)、及びナトリウムtert-ブトキシド(11.5g, 120mmol)の混合物にキシレン(650mL)を加え、130℃で8時間撹拌した。反応終了後、固体を濾取した。濾取した固体をトルエンを用いて再結晶させ、化合物M3cを得た(42.5g、収率72%)。LC-MS(Liquid chromatography mass spectrometry)の分析により、化合物M3cと同定した。

40

【 0 6 0 2 】

50

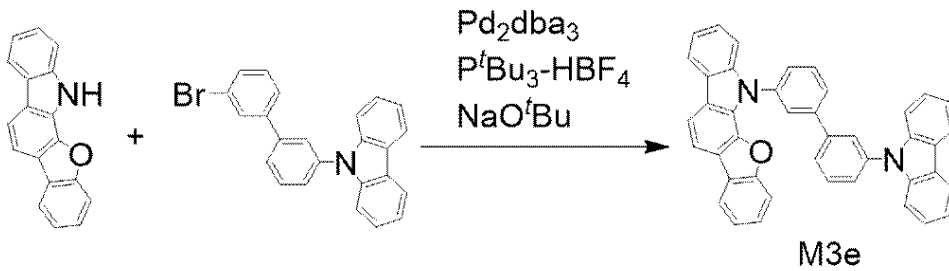
[ 合成実施例 4 : 化合物 M 3 d の合成 ]

( 1 - 4 ) 化合物 M 3 e の合成

化合物 M 3 e の合成スキームを以下に示す。

【 0 6 0 3 】

【 化 2 2 0 】



10

【 0 6 0 4 】

合成実施例 1 において、9 - ( 4 ' - プロモ - [ 1 , 1 ' - ビフェニル ] - 4 - イル ) - 9 H - カルバゾールの代わりに 9 - ( 3 ' - プロモ - [ 1 , 1 ' - ビフェニル ] - 3 - イル ) - 9 H - カルバゾールを用いた他は合成実施例 1 と同様に合成し、化合物 M 3 e を得た。収率は 6 3 % であった。LC - MS ( Liquid chromatography mass spectrometry ) の分析により、化合物 M 3 e と同定した。

【 符号の説明 】

20

【 0 6 0 5 】

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。

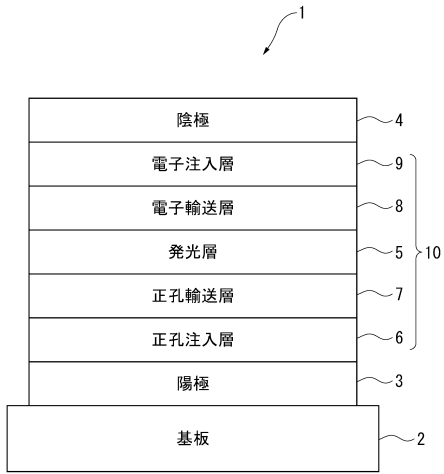
30

40

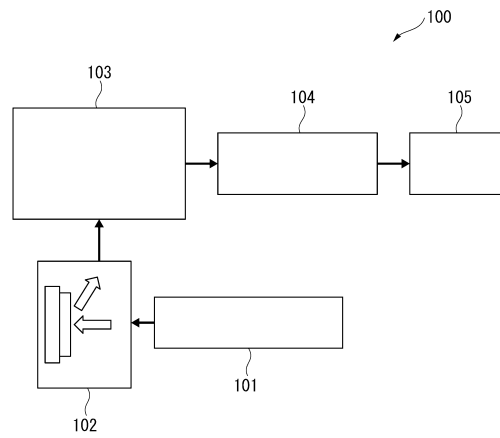
50

【図面】

【図 1】



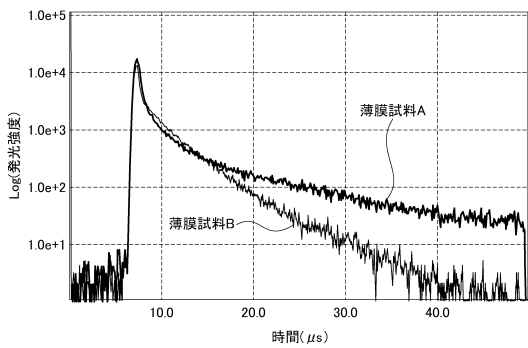
【図 2】



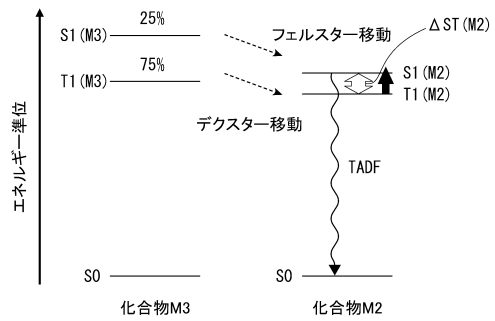
10

20

【図 3】



【図 4】

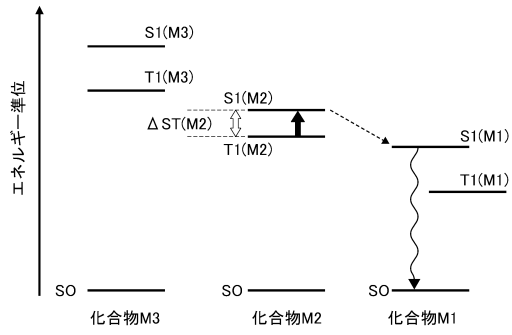


30

40

50

【 図 5 】



10

20

30

40

50

## フロントページの続き

## (51)国際特許分類

F I

H 1 0 K 101/20 (2023.01)	H 1 0 K 101:20
H 1 0 K 101/30 (2023.01)	H 1 0 K 101:30
H 1 0 K 101/40 (2023.01)	H 1 0 K 101:40

## (56)参考文献

国際公開第 2 0 1 5 / 0 2 2 9 8 7 ( W O , A 1 )  
米国特許出願公開第 2 0 1 8 / 0 0 8 3 2 0 1 ( U S , A 1 )  
国際公開第 2 0 1 1 / 0 4 9 0 6 3 ( W O , A 1 )  
米国特許出願公開第 2 0 1 8 / 0 1 3 0 9 5 5 ( U S , A 1 )  
特開 2 0 1 9 - 0 9 6 8 7 6 ( J P , A )

## (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)

H 1 0 K 5 0 / 1 0  
C 0 9 K 1 1 / 0 6  
H 1 0 K 5 0 / 1 2  
H 1 0 K 5 9 / 1 0  
H 1 0 K 8 5 / 4 0  
H 1 0 K 8 5 / 6 0  
H 1 0 K 1 0 1 / 2 0  
H 1 0 K 1 0 1 / 3 0  
H 1 0 K 1 0 1 / 4 0  
C 0 9 K 1 1 / 0 6  
C A p l u s / R E G I S T R Y ( S T N )