

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号

特許第7547072号

(P7547072)

(45)発行日 令和6年9月9日(2024.9.9)

(24)登録日 令和6年8月30日(2024.8.30)

(51)国際特許分類

F I

C 0 7 F 5/02 (2006.01)

C 0 7 F 5/02

A C S P

C 0 9 K 11/06 (2006.01)

C 0 9 K 11/06

6 6 0

H 1 0 K 50/10 (2023.01)

H 0 5 B 33/14

B

請求項の数 8 (全83頁)

(21)出願番号 特願2020-76138(P2020-76138)
(22)出願日 令和2年4月22日(2020.4.22)
(65)公開番号 特開2021-172603(P2021-172603
A)
(43)公開日 令和3年11月1日(2021.11.1)
審査請求日 令和5年3月22日(2023.3.22)

(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 中野 裕美
千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
(72)発明者 松本 尚人
千葉県袖ヶ浦市上泉1280番地
(72)発明者 西前 祐一
スイス連邦 4058 バーゼル ポスト
ファッハ 2548 マッテンシュトラ
セ 22
審査官 前田 憲彦

最終頁に続く

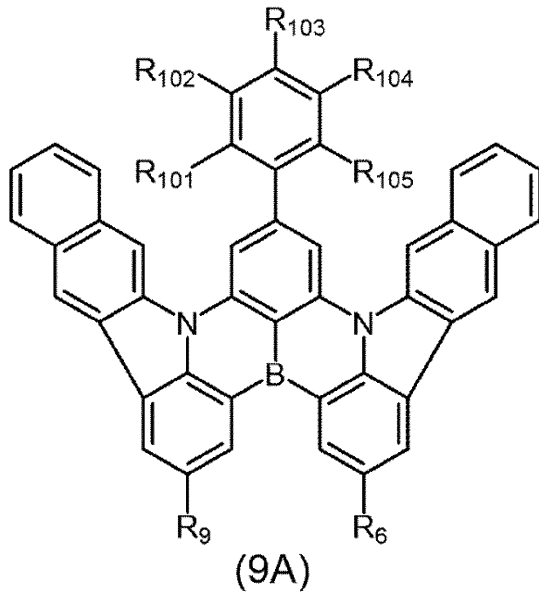
(54)【発明の名称】 化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子
及び電子機器

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

下記一般式(9A)で表される化合物。

【化 1】



(前記一般式 (9A) において、
R₆ および R₉ は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、
 無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、
 無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は
 無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、
R₁₀₁ ～ R₁₀₅ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が互いに結合せず、
R₁₀₁ ～ R₁₀₅ は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 ハロゲン原子、
 無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、
 無置換の環形成炭素数 3 ～ 25 のシクロアルキル基、
 無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基、又は
 無置換の環形成原子数 5 ～ 25 の複素環基である。)

【請求項 2】

前記一般式 (9A) において、
R₆ および R₉ は、それぞれ独立に、
 水素原子、
 無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、または
 無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基である、
 請求項 1 に記載の化合物。

【請求項 3】

請求項 1 又は請求項 2 に記載の化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子用材料。

【請求項 4】

陰極と、陽極と、前記陰極および前記陽極の間に含まれる有機層と、を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、
 前記有機層が発光層を含み、
 前記有機層の少なくとも 1 層が請求項 1 又は請求項 2 に記載の化合物を含む、
 有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 5】

前記発光層が前記化合物を含む、
 請求項 4 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 6】

前記発光層がさらに遅延蛍光性発光材料を含む、

請求項 4 又は請求項 5 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

【請求項 7】

前記遅延蛍光性発光材料の最低励起一重項エネルギー $S_1(H)$ と、前記化合物の最低励起一重項エネルギー $S_1(D)$ とが、下記数式 (数 1) を満たす、

請求項 6 に記載の有機エレクトロルミネッセンス素子。

$$S_1(H) > S_1(D) \cdots (\text{数 } 1)$$

【請求項 8】

請求項 4 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、化合物、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、有機エレクトロルミネッセンス素子及び電子機器に関する。

【背景技術】

【0002】

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

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

【0003】

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

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

熱活性化遅延蛍光性 (TADF 性) を示す化合物（以下、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 素子並びに有機 EL 素子に用いる化合物に関する文献として、例えば、特許文献 1、特許文献 2 及び特許文献 3 が挙げられる。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0005】

【文献】国際公開第 2015/102118 号

【文献】国際公開第 2018/095397 号

10

20

30

40

50

【文献】中国特許出願公開第 1 1 0 4 0 7 8 5 9 号明細書

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

本発明の目的は、有機 E L 素子の性能を向上させることができる化合物、当該化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子用材料、当該化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子及び当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供することである。

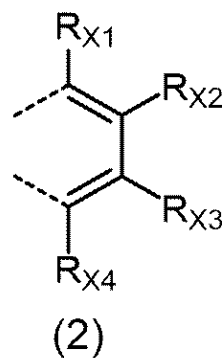
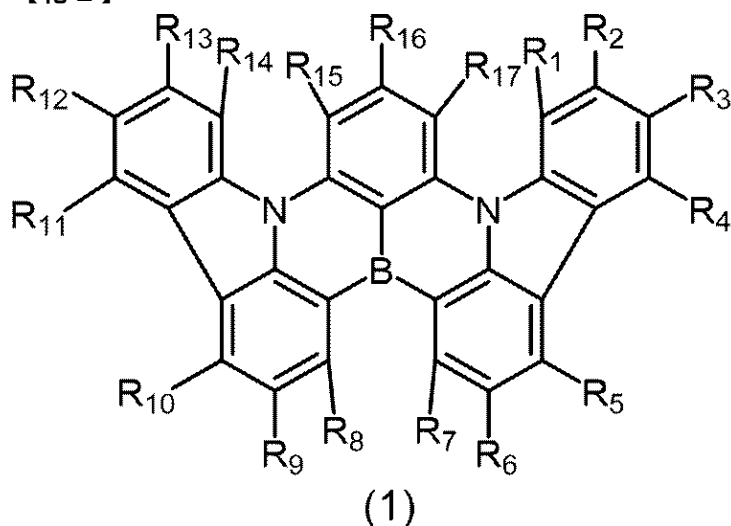
【課題を解決するための手段】

【0007】

本発明の一態様によれば、下記一般式（1）で表される化合物が提供される。

【0008】

【化1】



【0009】

（前記一般式（1）において、

$R_1 \sim R_{17}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

$R_1 \sim R_{17}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の少なくとも 1 組が互いに結合して、前記一般式（2）で表される環を形成し、前記一般式（2）における点線は、接合部位を意味し、

$R_{X1} \sim R_{X4}$ 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、かつ、前記一般式（2）で表される環を形成しない $R_1 \sim R_{17}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

— Si (R_{911}) (R_{912}) (R_{913}) で表される基、

— O — (R_{914}) で表される基、

— S — (R_{915}) で表される基、

— N (R_{916}) (R_{917}) で表される基、

— C (=O) R_{918} で表される基、

10

20

30

40

50

—COOR₉₁₉で表される基、
ハロゲン原子、
シアノ基、
ニトロ基、

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

R₁₅～R₁₇のうち少なくとも一つは、

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

R_{X1}が複数存在する場合、複数のR_{X1}は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{X2}が複数存在する場合、複数のR_{X2}は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{X3}が複数存在する場合、複数のR_{X3}は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{X4}が複数存在する場合、複数のR_{X4}は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₁₁～R₉₁₉は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基であり、

R₉₁₁が複数存在する場合、複数のR₉₁₁は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₁₂が複数存在する場合、複数のR₉₁₂は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₁₃が複数存在する場合、複数のR₉₁₃は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₁₄が複数存在する場合、複数のR₉₁₄は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₁₅が複数存在する場合、複数のR₉₁₅は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₁₆が複数存在する場合、複数のR₉₁₆は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₁₇が複数存在する場合、複数のR₉₁₇は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₁₈が複数存在する場合、複数のR₉₁₈は、互いに同一であるか又は異なり、

R₉₁₉が複数存在する場合、複数のR₉₁₉は、互いに同一であるか又は異なる。))

【0010】

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

【0011】

本発明の一態様によれば、陰極と、陽極と、前記陰極および前記陽極の間に含まれる有機層と、を有する有機エレクトロルミネッセンス素子であって、前記有機層が発光層を含み、前記有機層の少なくとも1層が、本発明の一態様に係る化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子が提供される。

【0012】

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

【発明の効果】

【0013】

本発明の一態様によれば、有機EL素子の性能を向上させることができる化合物を提供できる。また、本発明の一態様によれば、当該化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子用材料を提供できる。また、本発明の一態様によれば、当該化合物を含む有機エレクトロルミネッセンス素子を提供できる。また、本発明の一態様によれば、当該有機エレクトロルミネッセンス素子を搭載した電子機器を提供できる。

【図面の簡単な説明】

【0014】

【図1】本発明の第三実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の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 P L の減衰曲線の一例を示す図である。

【図 4】 本発明の第三実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の発光層における第一の化合物及び第二の化合物のエネルギー準位、並びにエネルギー移動の関係を示す図である。

【図 5】 本発明の第四実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子の一例の発光層における第一の化合物、第二の化合物及び第三の化合物のエネルギー準位、並びにエネルギー移動の関係を示す図である。

【発明を実施するための形態】

【0015】

【定義】

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

【0016】

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

【0017】

本明細書において、環形成炭素数とは、原子が環状に結合した構造の化合物（例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、及び複素環化合物）の当該環自体を構成する原子のうちの炭素原子の数を表す。当該環が置換基によって置換される場合、置換基に含まれる炭素は環形成炭素数には含まない。以下で記される「環形成炭素数」については、別途記載のない限り同様とする。例えば、ベンゼン環は環形成炭素数が 6 であり、ナフタレン環は環形成炭素数が 10 であり、ピリジン環は環形成炭素数 5 であり、フラン環は環形成炭素数 4 である。また、例えば、9,9-ジフェニルフルオレニル基の環形成炭素数は 13 であり、9,9'-スピロビフルオレニル基の環形成炭素数は 25 である。

また、ベンゼン環に置換基として、例えば、アルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、ベンゼン環の環形成炭素数に含めない。そのため、アルキル基が置換しているベンゼン環の環形成炭素数は、6 である。また、ナフタレン環に置換基として、例えば、アルキル基が置換している場合、当該アルキル基の炭素数は、ナフタレン環の環形成炭素数に含めない。そのため、アルキル基が置換しているナフタレン環の環形成炭素数は、10 である。

【0018】

本明細書において、環形成原子数とは、原子が環状に結合した構造（例えば、単環、縮合環、及び環集合）の化合物（例えば、単環化合物、縮合環化合物、架橋化合物、炭素環化合物、及び複素環化合物）の当該環自体を構成する原子の数を表す。環を構成しない原子（例えば、環を構成する原子の結合を終端する水素原子）や、当該環が置換基によって置換される場合の置換基に含まれる原子は環形成原子数には含まない。以下で記される「環形成原子数」については、別途記載のない限り同様とする。例えば、ピリジン環の環形成原子数は 6 であり、キナゾリン環の環形成原子数は 10 であり、フラン環の環形成原子数は 5 である。例えば、ピリジン環に結合している水素原子、又は置換基を構成する原子の数は、ピリジン環形成原子数の数に含めない。そのため、水素原子、又は置換基が結合しているピリジン環の環形成原子数は、6 である。また、例えば、キナゾリン環の炭素原子に結合している水素原子、又は置換基を構成する原子については、キナゾリン環の環形成原子数の数に含めない。そのため、水素原子、又は置換基が結合しているキナゾリン環の環形成原子数は 10 である。

【0019】

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

10

20

30

40

50

「 XX 」は、1以上の整数を意味し、「 YY 」は、2以上の整数を意味する。

【0020】

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

【0021】

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

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

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

【0022】

「本明細書に記載の置換基」

以下、本明細書に記載の置換基について説明する。

【0023】

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

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

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

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

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

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

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

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

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

【0024】

・「置換もしくは無置換のアリール基」

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

「置換のアリール基」は、「無置換のアリール基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアリール基」としては、例えば、下記具体例群G1A

10

20

30

40

50

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

【 0 0 2 5 】

・無置換のアリール基（具体例群 G 1 A ）：

フェニル基、

10

p-ビフェニル基、

m-ビフェニル基、

o-ビフェニル基、

p-ターフェニル-4-イル基、

p-ターフェニル-3-イル基、

p-ターフェニル-2-イル基、

m-ターフェニル-4-イル基、

m-ターフェニル-3-イル基、

m-ターフェニル-2-イル基、

o-ターフェニル-4-イル基、

20

o-ターフェニル-3-イル基、

o-ターフェニル-2-イル基、

1-ナフチル基、

2-ナフチル基、

アントリル基、

ベンゾアントリル基、

フェナントリル基、

ベンゾフェナントリル基、

フェナレニル基、

ピレニル基、

30

クリセニル基、

ベンゾクリセニル基、

トリフェニレニル基、

ベンゾトリフェニレニル基、

テトラセニル基、

ペンタセニル基、

フルオレニル基、

9, 9'-スピロビフルオレニル基、

ベンゾフルオレニル基、

ジベンゾフルオレニル基、

40

フルオランテニル基、

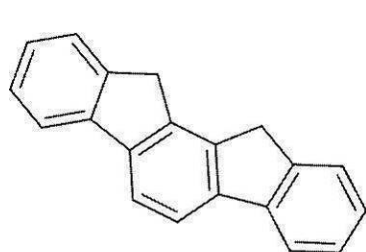
ベンゾフルオランテニル基、

ペリレニル基、及び

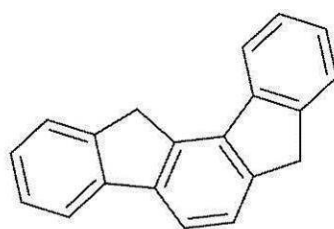
下記一般式 (TEMP-1) ~ (TEMP-15) で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価のアリール基。

【 0 0 2 6 】

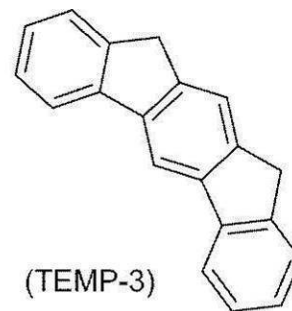
【化 2】



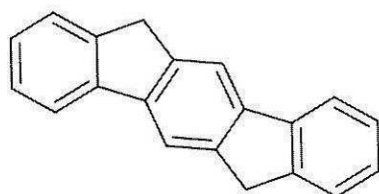
(TEMP-1)



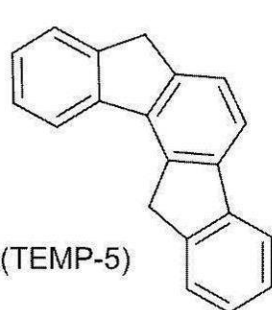
(TEMP-2)



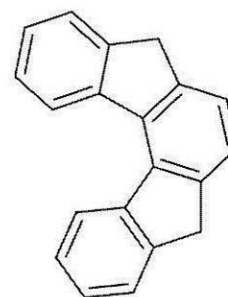
(TEMP-3)



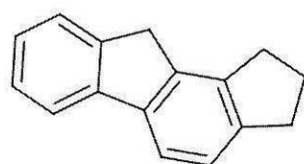
(TEMP-4)



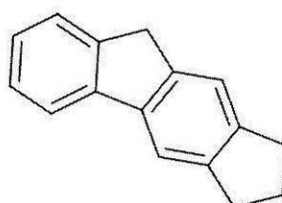
(TEMP-5)



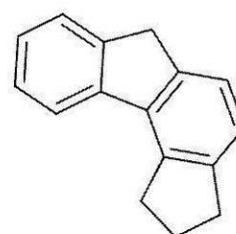
(TEMP-6)



(TEMP-7)



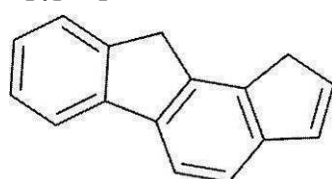
(TEMP-8)



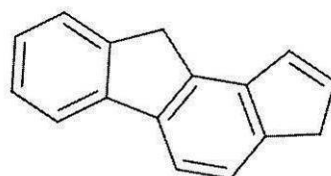
(TEMP-9)

【 0 0 2 7 】

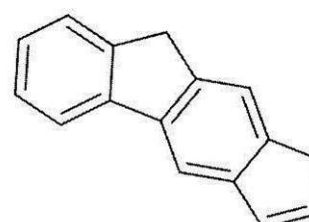
【化 3】



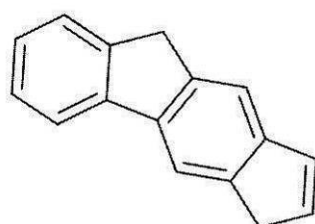
(TEMP-10)



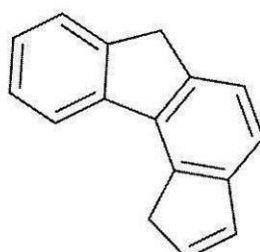
(TEMP-11)



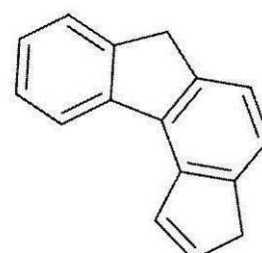
(TEMP-12)



(TEMP-13)



(TEMP-14)



(TEMP-15)

【 0 0 2 8 】

・置換のアリール基（具体例群 G 1 B）：

o-トリル基、
m-トリル基、
p-トリル基、
パラ-キシリル基、
メタ-キシリル基、
オルト-キシリル基、
パラ-イソプロピルフェニル基、
メタ-イソプロピルフェニル基、
オルト-イソプロピルフェニル基、
パラ-tert-ブチルフェニル基、
メタ-tert-ブチルフェニル基、
オルト-tert-ブチルフェニル基、
3, 4, 5-トリメチルフェニル基、
9, 9-ジメチルフルオレニル基、
9, 9-ジフェニルフルオレニル基、
9, 9-ビス(4-メチルフェニル)フルオレニル基、
9, 9-ビス(4-イソプロピルフェニル)フルオレニル基、
9, 9-ビス(4-tert-ブチルフェニル)フルオレニル基、
シアノフェニル基、

10

トリフェニルシリルフェニル基、
トリメチルシリルフェニル基、
フェニルナフチル基、
ナフチルフェニル基、及び

20

前記一般式(TEMP-1)～(TEMP-15)で表される環構造から誘導される1価の基の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基。

【0029】

・「置換もしくは無置換の複素環基」

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

30

本明細書に記載の「複素環基」は、単環の基であるか、又は縮合環の基である。

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

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

「置換の複素環基」は、「無置換の複素環基」の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換の複素環基」の具体例は、下記具体例群G2Aの「無置換の複素環基」の水素原子が置き換わった基、及び下記具体例群G2Bの置換の複素環基の例等が挙げられる。尚、ここに列举した「無置換の複素環基」の例や「置換の複素環基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換の複素環基」には、具体例群G2Bの「置換の複素環基」における複素環基自体の環形成原子に結合する水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G2Bの「置換の複素環基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

40

【0030】

具体例群G2Aは、例えば、以下の窒素原子を含む無置換の複素環基(具体例群G2A1)、酸素原子を含む無置換の複素環基(具体例群G2A2)、硫黄原子を含む無置換の

50

複素環基（具体例群 G 2 A 3）、及び下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 1 価の複素環基（具体例群 G 2 A 4）を含む。

【0031】

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

【0032】

・窒素原子を含む無置換の複素環基（具体例群 G 2 A 1）：

ピロリル基、

イミダゾリル基、

ピラゾリル基、

トリアゾリル基、

テトラゾリル基、

オキサゾリル基、

イソオキサゾリル基、

オキサジアゾリル基、

チアゾリル基、

イソチアゾリル基、

チアジアゾリル基、

ピリジル基、

ピリダジニル基、

ピリミジニル基、

ピラジニル基、

トリアジニル基、

インドリル基、

イソインドリル基、

インドリジニル基、

キノリジニル基、

キノリル基、

イソキノリル基、

シンノリル基、

フタラジニル基、

キナゾリニル基、

キノキサリニル基、

ベンゾイミダゾリル基、

インダゾリル基、

フェナントロリニル基、

フェナントリジニル基、

アクリジニル基、

フェナジニル基、

カルバゾリル基、

ベンゾカルバゾリル基、

モルホリノ基、

フェノキサジニル基、

フェノチアジニル基、

アザカルバゾリル基、及びジアザカルバゾリル基。

【0033】

10

20

30

40

50

・酸素原子を含む無置換の複素環基（具体例群 G 2 A 2）：

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

10

【0034】

20

・硫黄原子を含む無置換の複素環基（具体例群 G 2 A 3）：

チエニル基、
チアゾリル基、
イソチアゾリル基、
チアジアゾリル基、
ベンゾチオフェニル基（ベンゾチエニル基）、
イソベンゾチオフェニル基（イソベンゾチエニル基）、
ジベンゾチオフェニル基（ジベンゾチエニル基）、
ナフトベンゾチオフェニル基（ナフトベンゾチエニル基）、
ベンゾチアゾリル基、
ベンゾイソチアゾリル基、
フェノチアジニル基、
ジナフトチオフェニル基（ジナフトチエニル基）、
アザジベンゾチオフェニル基（アザジベンゾチエニル基）、
ジアザジベンゾチオフェニル基（ジアザジベンゾチエニル基）、
アザナフトベンゾチオフェニル基（アザナフトベンゾチエニル基）、及び
ジアザナフトベンゾチオフェニル基（ジアザナフトベンゾチエニル基）。

30

【0035】

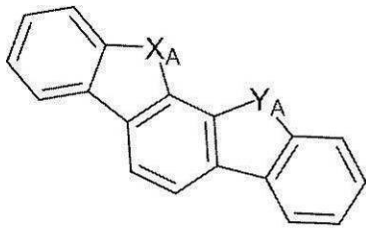
・下記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から1つの水素原子を除くことにより誘導される1価の複素環基（具体例群 G 2 A 4）：

40

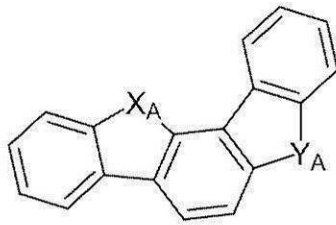
【0036】

50

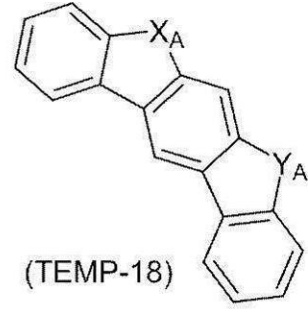
【化 4】



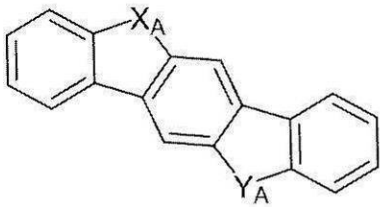
(TEMP-16)



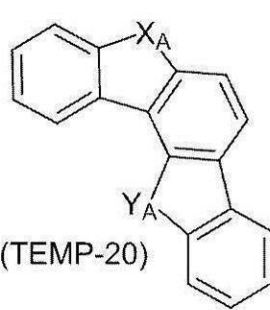
(TEMP-17)



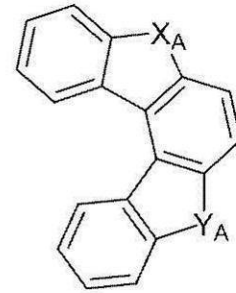
(TEMP-18)



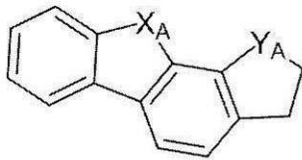
(TEMP-19)



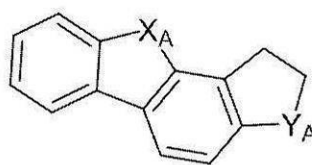
(TEMP-20)



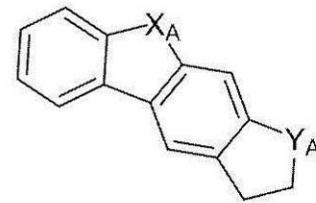
(TEMP-21)



(TEMP-22)



(TEMP-23)



(TEMP-24)

【 0 0 3 7 】

10

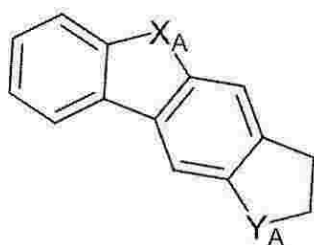
20

30

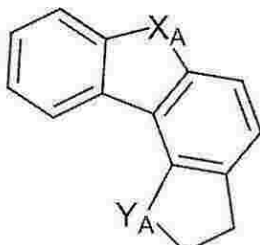
40

50

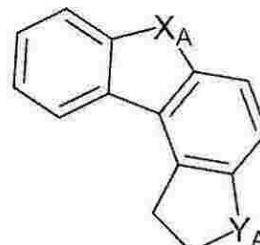
【化 5】



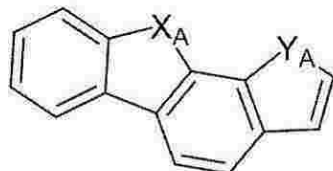
(TEMP-25)



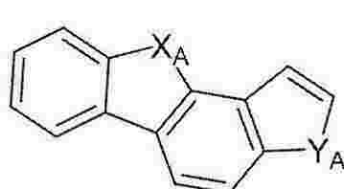
(TEMP-26)



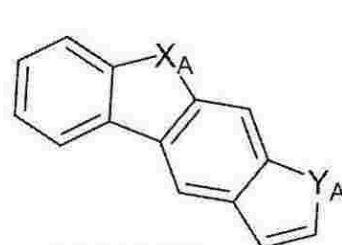
(TEMP-27)



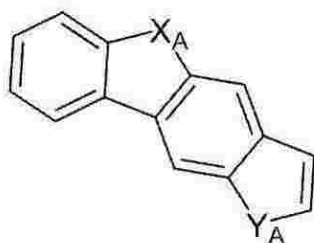
(TEMP-28)



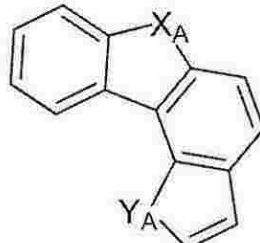
(TEMP-29)



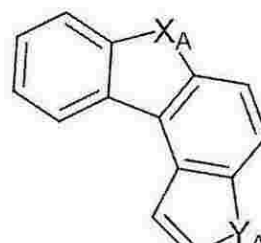
(TEMP-30)



(TEMP-31)



(TEMP-32)



(TEMP-33)

【0038】

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

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

【0039】

・窒素原子を含む置換の複素環基（具体例群G2B1）：

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

フェニルキナゾリニル基、及び
ビフェニルキナゾリニル基。

【0040】

・酸素原子を含む置換の複素環基（具体例群G2B2）：

フェニルジベンゾフラニル基、

メチルジベンゾフラニル基、

ｾｰﾌﾞチルジベンゾフラニル基、及び

スピロ〔9H-キサンテン-9, 9'-〔9H〕フルオレン〕の1価の残基。

【0041】

・硫黄原子を含む置換の複素環基（具体例群G2B3）：

フェニルジベンゾチオフェニル基、

メチルジベンゾチオフェニル基、

ｾｰﾌﾞチルジベンゾチオフェニル基、及び

スピロ〔9H-チオキサンテン-9, 9'-〔9H〕フルオレン〕の1価の残基。

【0042】

・前記一般式（TEMP-16）～（TEMP-33）で表される環構造から誘導される1価の複素環基の1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基（具体例群G2B4）：

【0043】

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

【0044】

・「置換もしくは無置換のアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」の具体例（具体例群G3）としては、以下の無置換のアルキル基（具体例群G3A）及び置換のアルキル基（具体例群G3B）が挙げられる。（ここで、無置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「無置換のアルキル基」である場合を指し、置換のアルキル基とは「置換もしくは無置換のアルキル基」が「置換のアルキル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキル基」という場合は、「無置換のアルキル基」と「置換のアルキル基」の両方を含む。

「置換のアルキル基」は、「無置換のアルキル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルキル基」（具体例群G3A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び置換のアルキル基（具体例群G3B）の例等が挙げられる。本明細書において、「無置換のアルキル基」におけるアルキル基は、鎖状のアルキル基を意味する。そのため、「無置換のアルキル基」は、直鎖である「無置換のアルキル基」、及び分岐状である「無置換のアルキル基」が含まれる。尚、ここに列挙した「無置換のアルキル基」の例や「置換のアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアルキル基」には、具体例群G3Bの「置換のアルキル基」におけるアルキル基自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G3Bの「置換のアルキル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

【0045】

・無置換のアルキル基（具体例群G3A）：

メチル基、

エチル基、

n-プロピル基、

イソプロピル基、

n-ブチル基、

イソブチル基、

s-ブチル基、及び

10

20

30

40

50

ターブチル基。

【0046】

・置換のアルキル基（具体例群G3B）：
ヘプタフルオロプロピル基（異性体を含む）、
ペンタフルオロエチル基、
2, 2, 2-トリフルオロエチル基、及び
トリフルオロメチル基。

【0047】

・「置換もしくは無置換のアルケニル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルケニル基」の具体例（具体例群G4）としては、以下の無置換のアルケニル基（具体例群G4A）、及び置換のアルケニル基（具体例群G4B）等が挙げられる。（ここで、無置換のアルケニル基とは「置換もしくは無置換のアルケニル基」が「無置換のアルケニル基」である場合を指し、「置換のアルケニル基」とは「置換もしくは無置換のアルケニル基」が「置換のアルケニル基」である場合を指す。）本明細書において、単に「アルケニル基」という場合は、「無置換のアルケニル基」と「置換のアルケニル基」の両方を含む。

「置換のアルケニル基」は、「無置換のアルケニル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルケニル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルケニル基」（具体例群G4A）が置換基を有する基、及び置換のアルケニル基（具体例群G4B）の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のアルケニル基」の例や「置換のアルケニル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のアルケニル基」には、具体例群G4Bの「置換のアルケニル基」におけるアルケニル基自体の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び具体例群G4Bの「置換のアルケニル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

【0048】

・無置換のアルケニル基（具体例群G4A）：

ビニル基、
アリル基、
1-ブテニル基、
2-ブテニル基、及び
3-ブテニル基。

【0049】

・置換のアルケニル基（具体例群G4B）：

1, 3-ブタンジエニル基、
1-メチルビニル基、
1-メチルアリル基、
1, 1-ジメチルアリル基、
2-メチルアリル基、及び
1, 2-ジメチルアリル基。

【0050】

・「置換もしくは無置換のアルキニル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキニル基」の具体例（具体例群G5）としては、以下の無置換のアルキニル基（具体例群G5A）等が挙げられる。（ここで、無置換のアルキニル基とは、「置換もしくは無置換のアルキニル基」が「無置換のアルキニル基」である場合を指す。）以下、単に「アルキニル基」という場合は、「無置換のアルキニル基」と「置換のアルキニル基」の両方を含む。

「置換のアルキニル基」は、「無置換のアルキニル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のアルキニル基」の具体例としては、下記の「無置換のアルキニル基」（具体例群G5A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基等が挙げられる。

【0051】

・無置換のアルキニル基（具体例群G5A）：

エチニル基

【0052】

・「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」の具体例（具体例群G6）としては、以下の無置換のシクロアルキル基（具体例群G6A）、及び置換のシクロアルキル基（具体例群G6B）等が挙げられる。（ここで、無置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「無置換のシクロアルキル基」である場合を指し、置換のシクロアルキル基とは「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」が「置換のシクロアルキル基」である場合を指す。）本明細書において、単に「シクロアルキル基」という場合は、「無置換のシクロアルキル基」と「置換のシクロアルキル基」の両方を含む。

「置換のシクロアルキル基」は、「無置換のシクロアルキル基」における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。「置換のシクロアルキル基」の具体例としては、下記の「無置換のシクロアルキル基」（具体例群G6A）における1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び置換のシクロアルキル基（具体例群G6B）の例等が挙げられる。尚、ここに列挙した「無置換のシクロアルキル基」の例や「置換のシクロアルキル基」の例は、一例に過ぎず、本明細書に記載の「置換のシクロアルキル基」には、具体例群G6Bの「置換のシクロアルキル基」におけるシクロアルキル基自体の炭素原子に結合する1つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基、及び具体例群G6Bの「置換のシクロアルキル基」における置換基の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。

【0053】

・無置換のシクロアルキル基（具体例群G6A）：

シクロプロピル基、

シクロブチル基、

シクロペンチル基、

シクロヘキシル基、

1-アダマンチル基、

2-アダマンチル基、

1-ノルボルニル基、及び

2-ノルボルニル基。

【0054】

・置換のシクロアルキル基（具体例群G6B）：

4-メチルシクロヘキシル基。

【0055】

・「-Si(R901)(R902)(R903)で表される基」

本明細書に記載の-Si(R901)(R902)(R903)で表される基の具体例（具体例群G7）としては、

-Si(G1)(G1)(G1)、

-Si(G1)(G2)(G2)、

-Si(G1)(G1)(G2)、

-Si(G2)(G2)(G2)、

-Si(G3)(G3)(G3)、及び

-Si(G6)(G6)(G6)

が挙げられる。ここで、

G1は、具体例群G1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。

G2は、具体例群G2に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。

G3は、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。

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

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

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

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

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

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

10

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

【 0 0 5 6 】

・「－O－(R 9 0 4) で表される基」

本明細書に記載の－O－(R 9 0 4) で表される基の具体例（具体例群 G 8 ）としては、

－O (G 1) 、

－O (G 2) 、

－O (G 3) 、及び

－O (G 6)

20

が挙げられる。

ここで、

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

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

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

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

【 0 0 5 7 】

・「－S－(R 9 0 5) で表される基」

本明細書に記載の－S－(R 9 0 5) で表される基の具体例（具体例群 G 9 ）としては、

－S (G 1) 、

－S (G 2) 、

－S (G 3) 、及び

－S (G 6)

30

が挙げられる。

ここで、

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

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

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

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

【 0 0 5 8 】

40

・「－N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基」

本明細書に記載の－N (R 9 0 6) (R 9 0 7) で表される基の具体例（具体例群 G 1 0 ）としては、

－N (G 1) (G 1) 、

－N (G 2) (G 2) 、

－N (G 1) (G 2) 、

－N (G 3) (G 3) 、及び

－N (G 6) (G 6)

が挙げられる。

ここで、

50

- G 1 は、具体例群 G 1 に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。
G 2 は、具体例群 G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」である。
G 3 は、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。
G 6 は、具体例群 G 6 に記載の「置換もしくは無置換のシクロアルキル基」である。
－ N (G 1) (G 1) における複数の G 1 は、互いに同一であるか、又は異なる。
－ N (G 2) (G 2) における複数の G 2 は、互いに同一であるか、又は異なる。
－ N (G 3) (G 3) における複数の G 3 は、互いに同一であるか、又は異なる。
－ N (G 6) (G 6) における複数の G 6 は、互いに同一であるか、又は異なる。

【 0 0 5 9 】

・「ハロゲン原子」

本明細書に記載の「ハロゲン原子」の具体例（具体例群 G 1 1）としては、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、及びヨウ素原子等が挙げられる。

【 0 0 6 0 】

・「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のフルオロアルキル基」は、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している少なくとも 1 つの水素原子がフッ素原子と置き換わった基を意味し、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している全ての水素原子がフッ素原子で置き換わった基（パーフルオロ基）も含む。「無置換のフルオロアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50 であり、好ましくは 1～30 であり、より好ましくは 1～18 である。「置換のフルオロアルキル基」は、「フルオロアルキル基」の 1 つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。尚、本明細書に記載の「置換のフルオロアルキル基」には、「置換のフルオロアルキル基」におけるアルキル鎖の炭素原子に結合する 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び「置換のフルオロアルキル基」における置換基の 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。「無置換のフルオロアルキル基」の具体例としては、前記「アルキル基」（具体例群 G 3）における 1 つ以上の水素原子がフッ素原子と置き換わった基の例等が挙げられる。

【 0 0 6 1 】

・「置換もしくは無置換のハロアルキル基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のハロアルキル基」は、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している少なくとも 1 つの水素原子がハロゲン原子と置き換わった基を意味し、「置換もしくは無置換のアルキル基」におけるアルキル基を構成する炭素原子に結合している全ての水素原子がハロゲン原子で置き換わった基も含む。「無置換のハロアルキル基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50 であり、好ましくは 1～30 であり、より好ましくは 1～18 である。「置換のハロアルキル基」は、「ハロアルキル基」の 1 つ以上の水素原子が置換基と置き換わった基を意味する。尚、本明細書に記載の「置換のハロアルキル基」には、「置換のハロアルキル基」におけるアルキル鎖の炭素原子に結合する 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基、及び「置換のハロアルキル基」における置換基の 1 つ以上の水素原子がさらに置換基と置き換わった基も含まれる。「無置換のハロアルキル基」の具体例としては、前記「アルキル基」（具体例群 G 3）における 1 つ以上の水素原子がハロゲン原子と置き換わった基の例等が挙げられる。ハロアルキル基をハロゲン化アルキル基と称する場合がある。

【 0 0 6 2 】

・「置換もしくは無置換のアルコキシ基」

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

【0063】

・「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキルチオ基」の具体例としては、 $-S$ (G3) で表される基であり、ここで、G3は、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。「無置換のアルキルチオ基」の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～30であり、より好ましくは1～18である。

【0064】

・「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリールオキシ基」の具体例としては、 $-O$ (G1) で表される基であり、ここで、G1は、具体例群G1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。「無置換のアリールオキシ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

【0065】

・「置換もしくは無置換のアリールチオ基」

本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアリールチオ基」の具体例としては、 $-S$ (G1) で表される基であり、ここで、G1は、具体例群G1に記載の「置換もしくは無置換のアリール基」である。「無置換のアリールチオ基」の環形成炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、6～50であり、好ましくは6～30であり、より好ましくは6～18である。

【0066】

・「置換もしくは無置換のトリアルキルシリル基」

本明細書に記載の「トリアルキルシリル基」の具体例としては、 $-Si$ (G3) (G3) (G3) で表される基であり、ここで、G3は、具体例群G3に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」である。 $-Si$ (G3) (G3) (G3) における複数のG3は、互いに同一であるか、又は異なる。「トリアルキルシリル基」の各アルキル基の炭素数は、本明細書に別途記載のない限り、1～50であり、好ましくは1～20であり、より好ましくは1～6である。

【0067】

・「置換もしくは無置換のアラルキル基」

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

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

【0068】

本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリール基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはフェニル基、p-ビフェニル基、m-ビフェニル基、o-ビフェニル基、p-ターフェニル-4-イル基、p-ターフェニル-3-イル基、p-ターフェニル-2-

10

20

30

40

50

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

【0069】

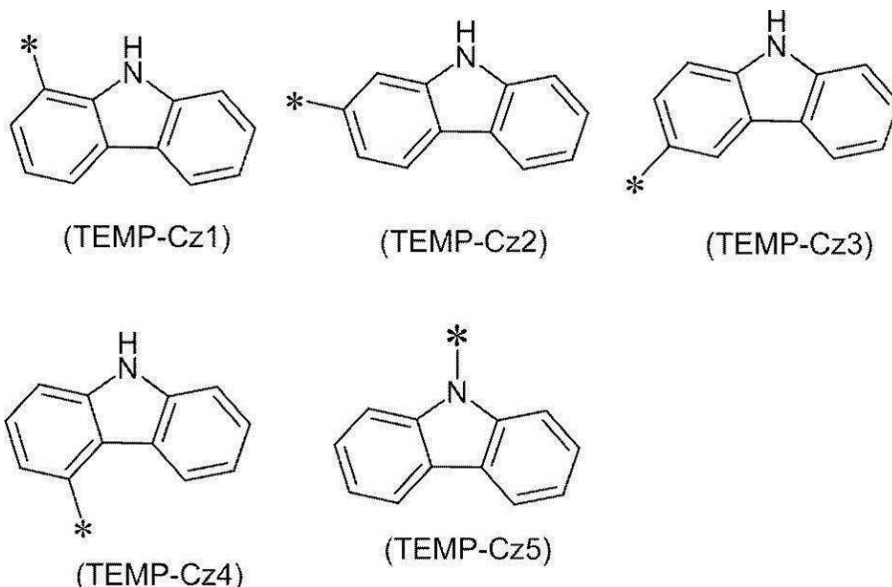
本明細書に記載の置換もしくは無置換の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくはピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、キノリル基、イソキノリル基、キナゾリニル基、ベンゾイミダゾリル基、フェナントロリニル基、カルバゾリル基（1-カルバゾリル基、2-カルバゾリル基、3-カルバゾリル基、4-カルバゾリル基、又は9-カルバゾリル基）、ベンゾカルバゾリル基、アザカルバゾリル基、ジアザカルバゾリル基、ジベンゾフラニル基、ナフトベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、ジアザジベンゾフラニル基、ジベンゾチオフエニル基、ナフトベンゾチオフエニル基、アザジベンゾチオフエニル基、ジアザジベンゾチオフ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

【0070】

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

【0071】

【化6】



【0072】

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

【0073】

10

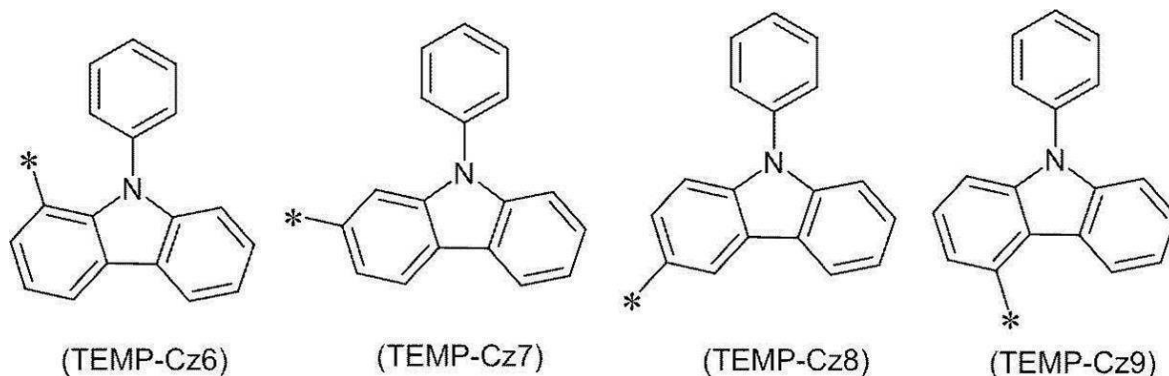
20

30

40

50

【化 7】



10

【0074】

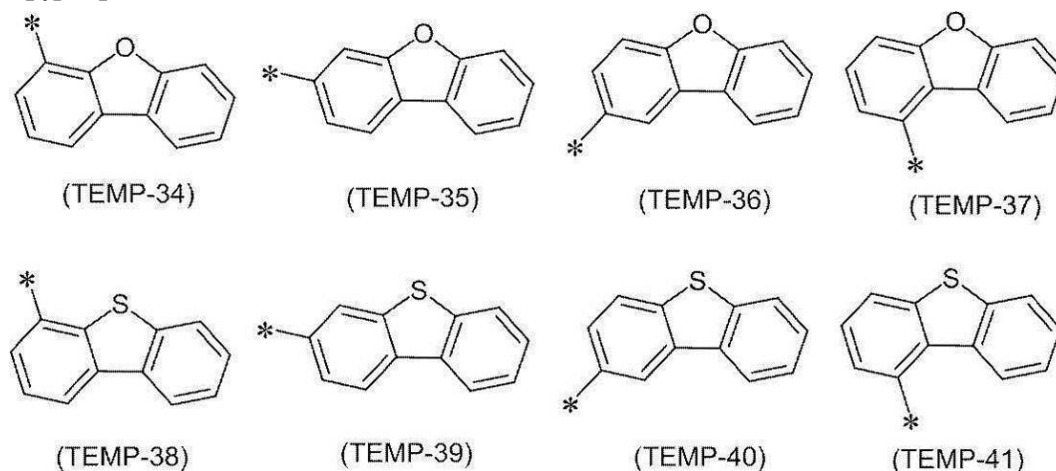
前記一般式 (TEMP-Cz1) ~ (TEMP-Cz9) 中、* は、結合位置を表す。

【0075】

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

【0076】

【化 8】



20

30

【0077】

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

【0078】

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

【0079】

・「置換もしくは無置換のアリーレン基」

40

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

【0080】

・「置換もしくは無置換の2価の複素環基」

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

50

群 G 1 3) としては、具体例群 G 2 に記載の「置換もしくは無置換の複素環基」から複素環上の 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 2 価の基等が挙げられる。

【 0 0 8 1 】

・「置換もしくは無置換のアルキレン基」

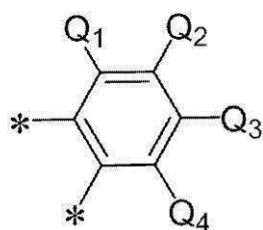
本明細書に記載の「置換もしくは無置換のアルキレン基」は、別途記載のない限り、上記「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 2 価の基である。「置換もしくは無置換のアルキレン基」の具体例（具体例群 G 1 4）としては、具体例群 G 3 に記載の「置換もしくは無置換のアルキル基」からアルキル鎖上の 1 つの水素原子を除くことにより誘導される 2 価の基等が挙げられる。

【 0 0 8 2 】

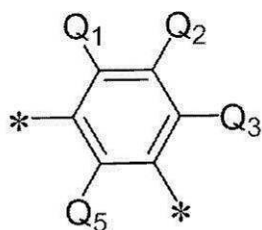
本明細書に記載の置換もしくは無置換のアリーレン基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式 (TEMP-42) ~ (TEMP-68) のいずれかの基である。

【 0 0 8 3 】

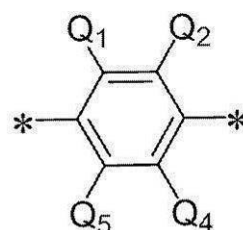
【化 9】



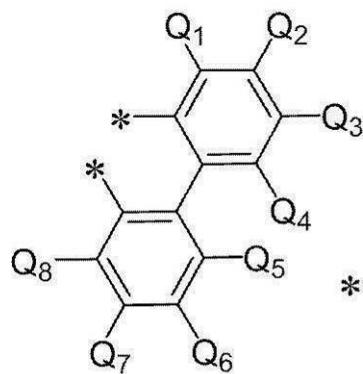
(TEMP-42)



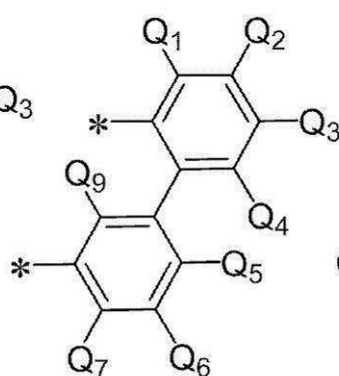
(TEMP-43)



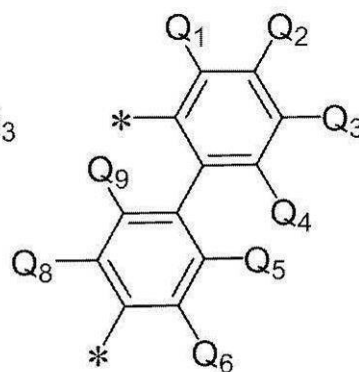
(TEMP-44)



(TEMP-45)



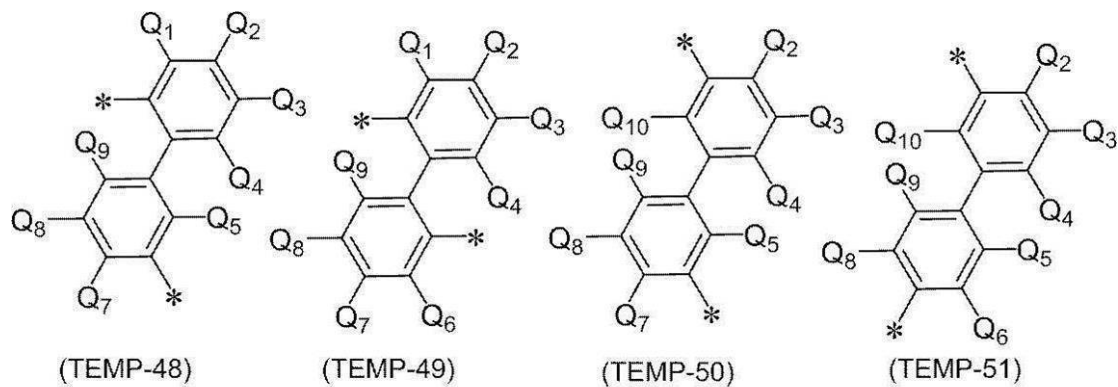
(TEMP-46)



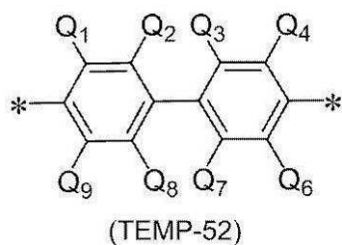
(TEMP-47)

【 0 0 8 4 】

【化 10】



10



【0085】

前記一般式 (TEMP-42) ~ (TEMP-52) 中、Q₁ ~ Q₁₀ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

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

【0086】

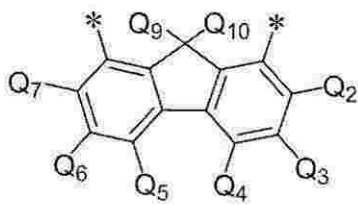
20

30

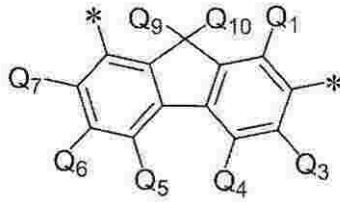
40

50

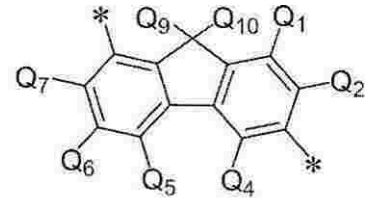
【化 1 1】



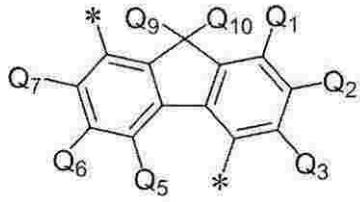
(TEMP-53)



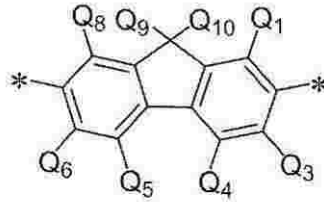
(TEMP-54)



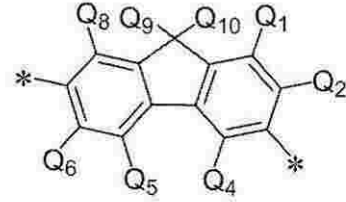
(TEMP-55)



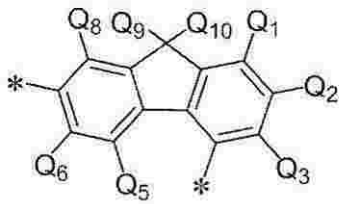
(TEMP-56)



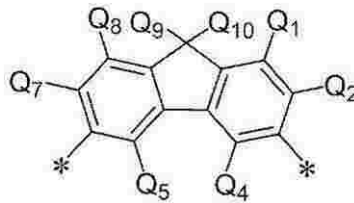
(TEMP-57)



(TEMP-58)



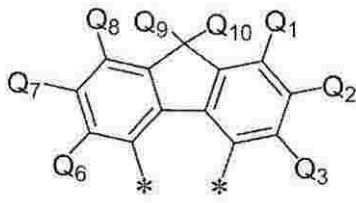
(TEMP-59)



(TEMP-60)



(TEMP-61)



(TEMP-62)

【 0 0 8 7】

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

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

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

【 0 0 8 8】

10

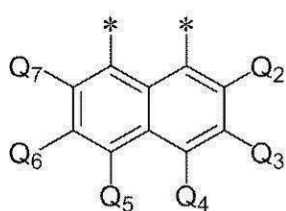
20

30

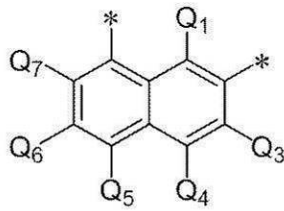
40

50

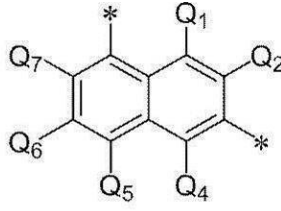
【化 1 2】



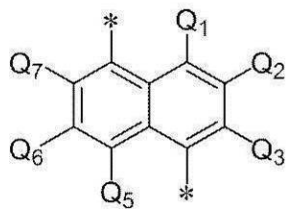
(TEMP-63)



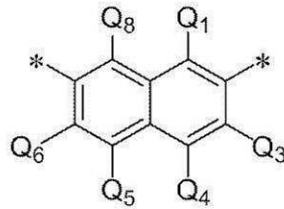
(TEMP-64)



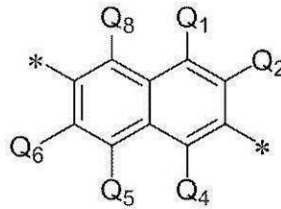
(TEMP-65)



(TEMP-66)



(TEMP-67)



(TEMP-68)

10

【 0 0 8 9 】

前記一般式 (TEMP-63) ~ (TEMP-68) 中、Q₁ ~ Q₈ は、それぞれ独立に、水素原子、又は置換基である。

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

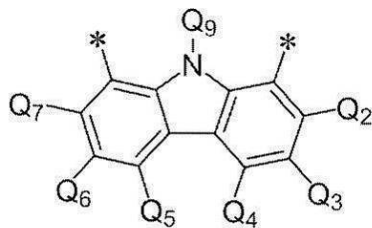
20

【 0 0 9 0 】

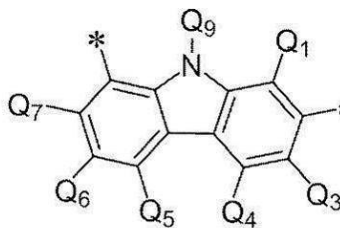
本明細書に記載の置換もしくは無置換の2価の複素環基は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは下記一般式 (TEMP-69) ~ (TEMP-102) のいずれかの基である。

【 0 0 9 1 】

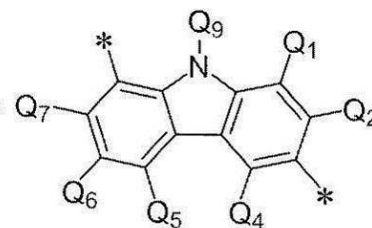
【化 1 3】



(TEMP-69)

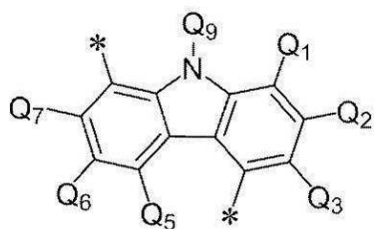


(TEMP-70)

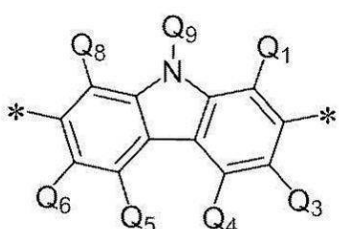


(TEMP-71)

30



(TEMP-72)



(TEMP-73)



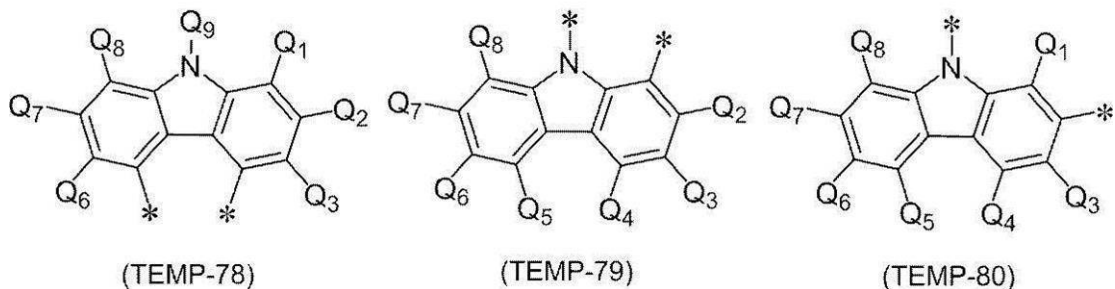
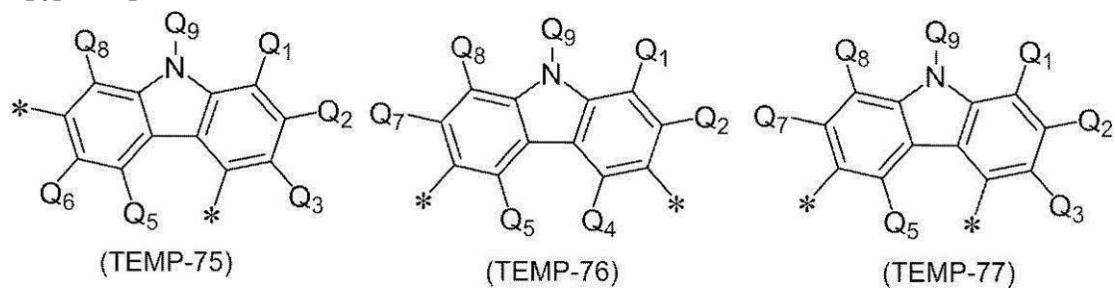
(TEMP-74)

40

【 0 0 9 2 】

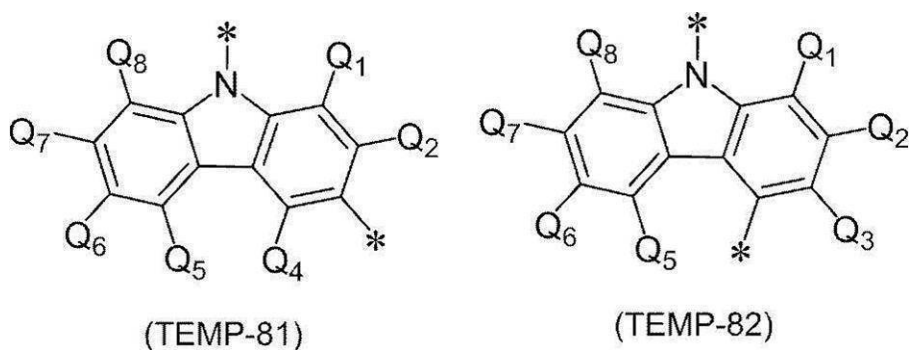
50

【化 1 4】



【 0 0 9 3】

【化 1 5】

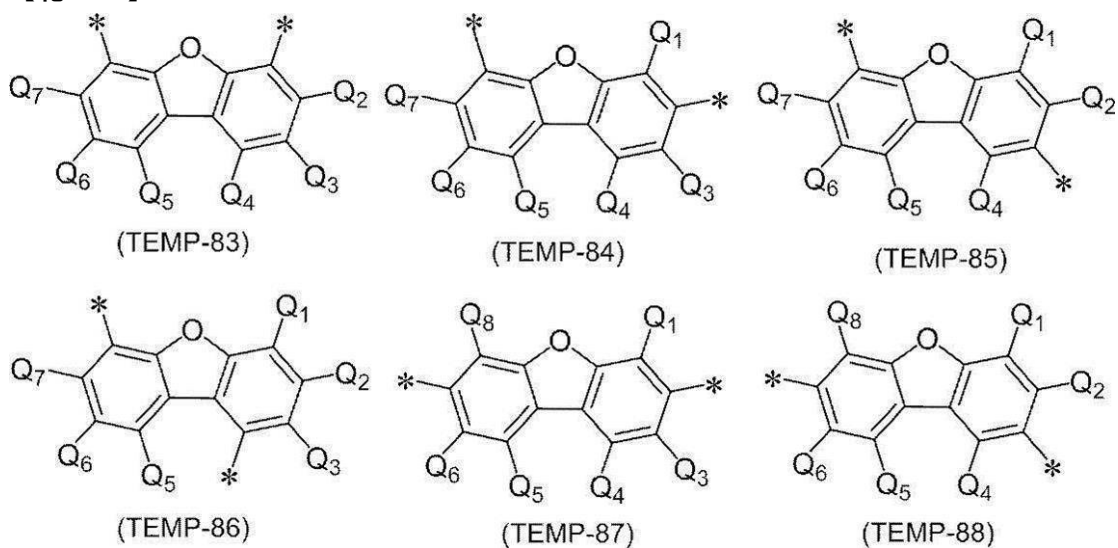


【 0 0 9 4】

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

【 0 0 9 5】

【化 1 6】



10

20

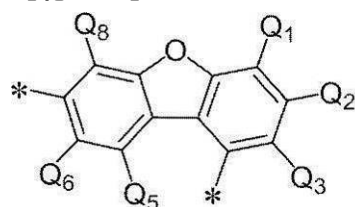
30

40

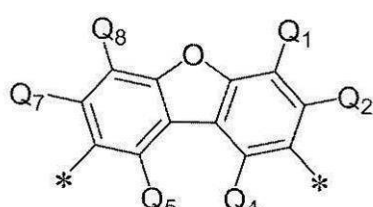
50

【 0 0 9 6 】

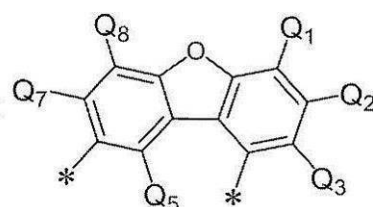
【 化 1 7 】



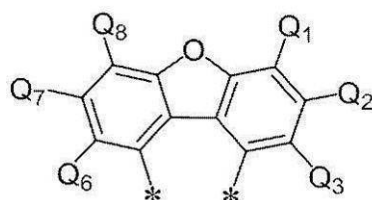
(TEMP-89)



(TEMP-90)



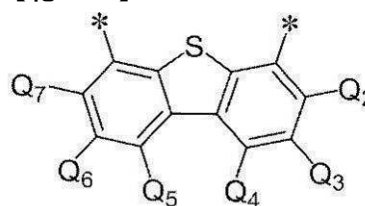
(TEMP-91)



(TEMP-92)

【 0 0 9 7 】

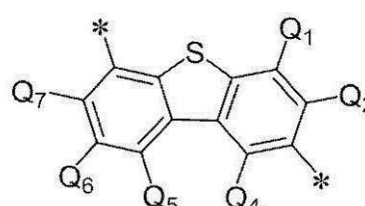
【 化 1 8 】



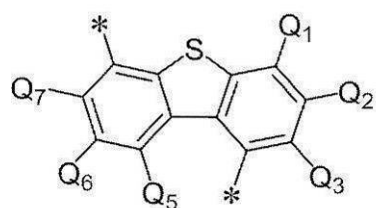
(TEMP-93)



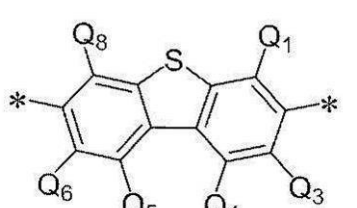
(TEMP-94)



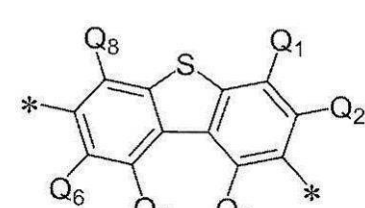
(TEMP-95)



(TEMP-96)



(TEMP-97)



(TEMP-98)

【 0 0 9 8 】

10

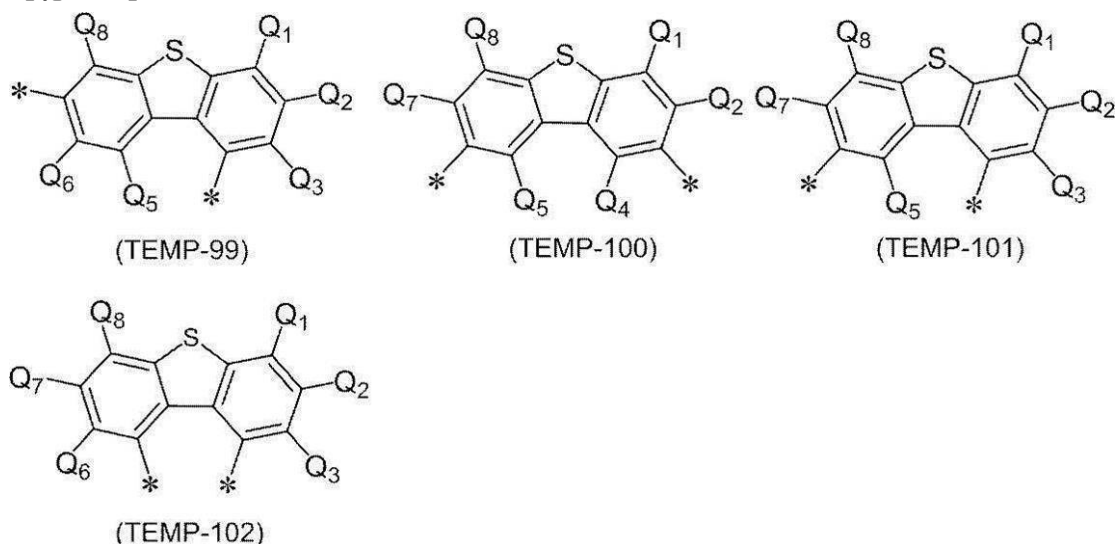
20

30

40

50

【化 19】



10

【0099】

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

【0100】

以上が、「本明細書に記載の置換基」についての説明である。

【0101】

・「結合して環を形成する場合」

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

30

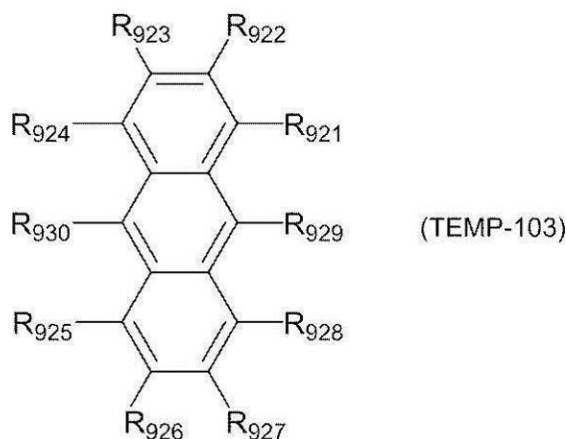
本明細書における、「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成する」場合、及び「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成する」場合（以下、これらの場合をまとめて「結合して環を形成する場合」と称する場合がある。）について、以下、説明する。母骨格がアントラセン環である下記一般式 (TEMP-103) で表されるアントラセン化合物の場合を例として説明する。

【0102】

40

50

【化 2 0】



10

【0103】

例えば、 $R_{921} \sim R_{930}$ のうちの「隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、互いに結合して、環を形成する」場合において、1組となる隣接する2つからなる組とは、 R_{921} と R_{922} との組、 R_{922} と R_{923} との組、 R_{923} と R_{924} との組、 R_{924} と R_{930} との組、 R_{930} と R_{925} との組、 R_{925} と R_{926} との組、 R_{926} と R_{927} との組、 R_{927} と R_{928} との組、 R_{928} と R_{929} との組、並びに R_{929} と R_{921} との組である。

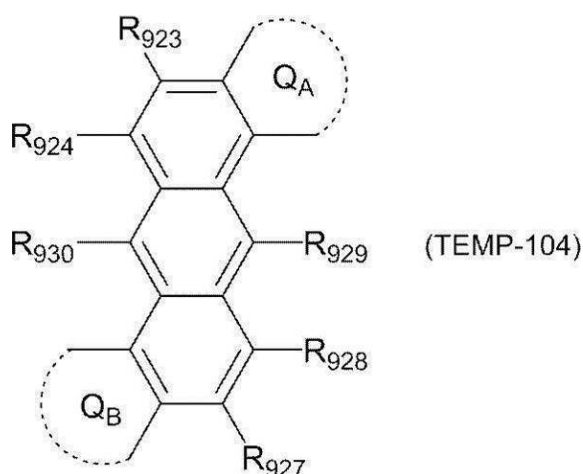
20

【0104】

上記「1組以上」とは、上記隣接する2つ以上からなる組の2組以上が同時に環を形成してもよいことを意味する。例えば、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して環 Q_A を形成し、同時に R_{925} と R_{926} とが互いに結合して環 Q_B を形成した場合は、前記一般式（TEMP-103）で表されるアントラセン化合物は、下記一般式（TEMP-104）で表される。

【0105】

【化 2 1】



30

40

【0106】

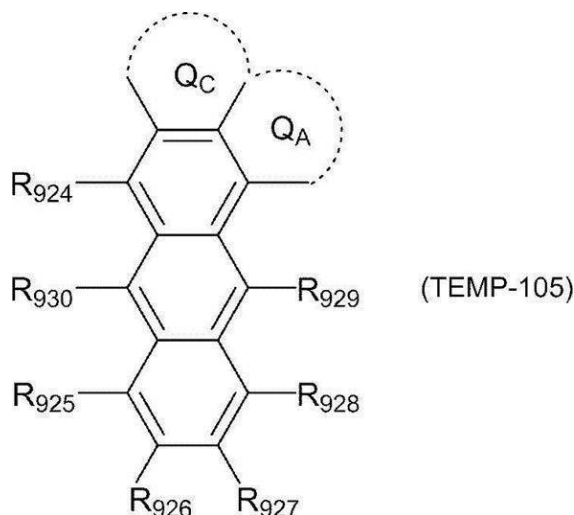
「隣接する2つ以上からなる組」が環を形成する場合とは、前述の例のように隣接する「2つ」からなる組が結合する場合だけでなく、隣接する「3つ以上」からなる組が結合する場合も含む。例えば、 R_{921} と R_{922} とが互いに結合して環 Q_A を形成し、かつ、 R_{922} と R_{923} とが互いに結合して環 Q_C を形成し、互いに隣接する3つ（ R_{921} 、 R_{922} 及び R_{923} ）からなる組が互いに結合して環を形成して、アントラセン母骨格に縮合する場合を意味し、この場合、前記一般式（TEMP-103）で表されるアント

50

ラセン化合物は、下記一般式（TEMP-105）で表される。下記一般式（TEMP-105）において、環 Q_A 及び環 Q_C は、 R_{922} を共有する。

【0107】

【化22】



【0108】

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

【0109】

「不飽和の環」とは、芳香族炭化水素環、又は芳香族複素環を意味する。「飽和の環」とは、脂肪族炭化水素環、又は非芳香族複素環を意味する。

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

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

脂肪族炭化水素環の具体例としては、具体例群G6において具体例として挙げられた基が水素原子によって終端された構造が挙げられる。

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

【0110】

ここで、「任意の元素」は、本明細書に別途記載のない限り、好ましくは、炭素元素、窒素元素、酸素元素、及び硫黄元素からなる群から選択される少なくとも1種の元素である。任意の元素において（例えば、炭素元素、又は窒素元素の場合）、環を形成しない結

合は、水素原子等で終端されてもよいし、後述する「任意の置換基」で置換されてもよい。炭素元素以外の任意の元素を含む場合、形成される環は複素環である。

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

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

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

本明細書に別途記載のない限り、「単環」は、好ましくはベンゼン環である。

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

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

【0111】

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

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

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

【0112】

・「置換もしくは無置換の」という場合の置換基

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

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

—Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)、

—O—(R₉₀₄)、

—S—(R₉₀₅)、

—N(R₉₀₆)(R₉₀₇)、

ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、

無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、及び

無置換の環形成原子数5～50の複素環基

からなる群から選択される基等であり、

ここで、R₉₀₁～R₉₀₇は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数1～50のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数3～50のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数6～50のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数5～50の複素環基である。

R₉₀₁が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₁は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₂が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₂は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₃が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₃は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₄が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₄は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₅が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₅は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₆が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₆は、互いに同一であるか、又は異なり、

R₉₀₇が2個以上存在する場合、2個以上のR₉₀₇は、互いに同一であるか又は異なる。

【0113】

一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、炭素数1～50のアルキル基、環形成炭素数6～50のアリール基、及び環形成原子数5～50の複素環基からなる群から選択される基である。

【0114】

一実施形態においては、前記「置換もしくは無置換の」という場合の置換基は、炭素数1～18のアルキル基、環形成炭素数6～18のアリール基、及び環形成原子数5～18の複素環基からなる群から選択される基である。

【0115】

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

【0116】

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

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

【0117】

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

【0118】

〔第一実施形態〕

(化合物)

本実施形態に係る化合物は、下記一般式(1)で表される。本実施形態に係る化合物を、一般式(1)で表される化合物と称する場合がある。

【0119】

10

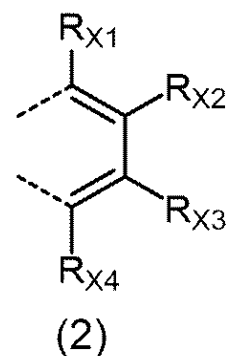
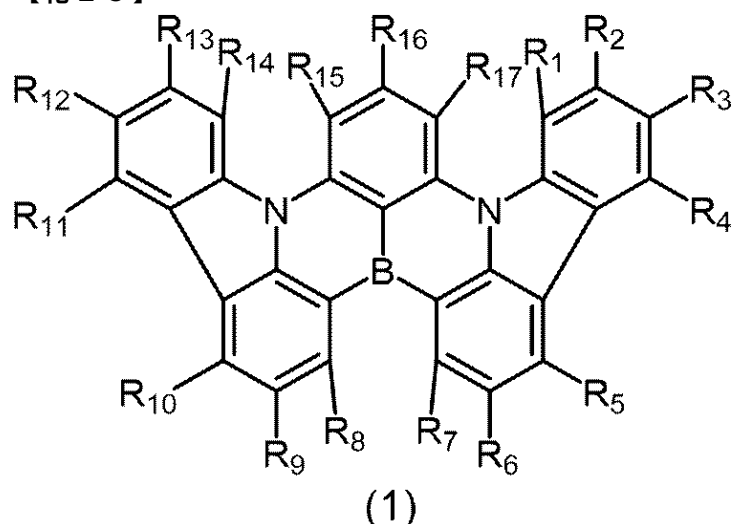
20

30

40

50

【化 2 3】



【0 1 2 0】

(前記一般式 (1) において、

 $R_1 \sim R_{17}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、

互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、

互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は

互いに結合せず、

$R_1 \sim R_{17}$ のうちの隣接する 2 つ以上からなる組の少なくとも 1 組が互いに結合して、前記一般式 (2) で表される環を形成し、前記一般式 (2) における点線は、接合部位を意味し、

$R_{X1} \sim R_{X4}$ 、並びに前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成せず、かつ、前記一般式 (2) で表される環を形成しない $R_1 \sim R_{17}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルケニル基、

置換もしくは無置換の炭素数 2 ～ 50 のアルキニル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 3 ～ 50 のシクロアルキル基、

置換もしくは無置換の炭素数 7 ～ 50 のアラルキル基、

-Si(R_{911})(R_{912})(R_{913})で表される基、-O-(R_{914})で表される基、-S-(R_{915})で表される基、-N(R_{916})(R_{917})で表される基、-C(=O) R_{918} で表される基、-COO R_{919} で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

 $R_{15} \sim R_{17}$ のうち少なくとも一つは、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基を示す。

 R_{X1} が複数存在する場合、複数の R_{X1} は、互いに同一であるか又は異なり、 R_{X2} が複数存在する場合、複数の R_{X2} は、互いに同一であるか又は異なり、 R_{X3} が複数存在する場合、複数の R_{X3} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{x4} が複数存在する場合、複数の R_{x4} は、互いに同一であるか又は異なり、

$R_{911} \sim R_{919}$ は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1 ～ 50 のアルキル基、

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6 ～ 50 のアリール基、又は

置換もしくは無置換の環形成原子数 5 ～ 50 の複素環基であり、

R_{911} が複数存在する場合、複数の R_{911} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{912} が複数存在する場合、複数の R_{912} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{913} が複数存在する場合、複数の R_{913} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{914} が複数存在する場合、複数の R_{914} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{915} が複数存在する場合、複数の R_{915} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{916} が複数存在する場合、複数の R_{916} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{917} が複数存在する場合、複数の R_{917} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{918} が複数存在する場合、複数の R_{918} は、互いに同一であるか又は異なり、

R_{919} が複数存在する場合、複数の R_{919} は、互いに同一であるか又は異なる。))

【0121】

本実施形態に係る化合物において、 R_2 および R_3 からなる組、 R_6 および R_7 からなる組、 R_8 および R_9 からなる組、並びに R_{12} および R_{13} からなる組の少なくとも 1 つの組が互いに結合して、前記一般式 (2) で表される環を形成することが好ましい。

本実施形態に係る化合物において、 R_6 および R_7 からなる組及び R_8 および R_9 からなる組が同時に前記一般式 (2) で表される環を形成しないことが好ましい。

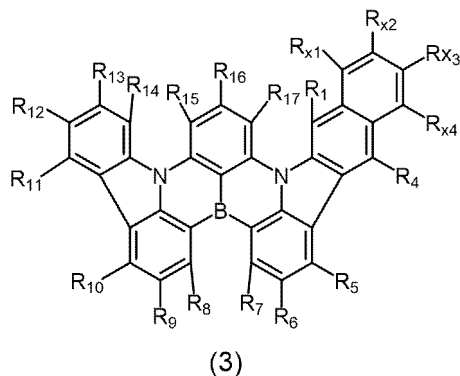
R_2 および R_3 からなる組が互いに結合して、前記一般式 (2) で表される環を形成した場合、本実施形態に係る化合物は、下記一般式 (3) で表される。

【0122】

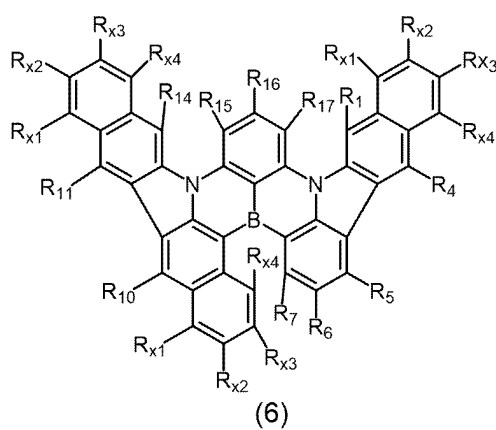
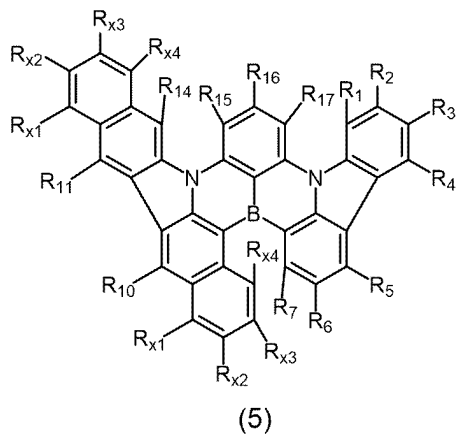
本実施形態に係る化合物は、下記一般式 (3)、一般式 (4)、一般式 (5) 又は一般式 (6) で表されることも好ましい。

【0123】

【化24】



【化 2 5】



10

【 0 1 2 5】

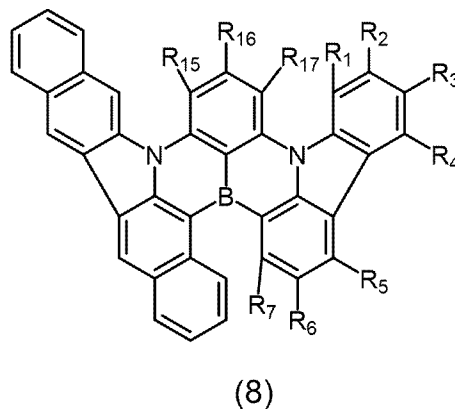
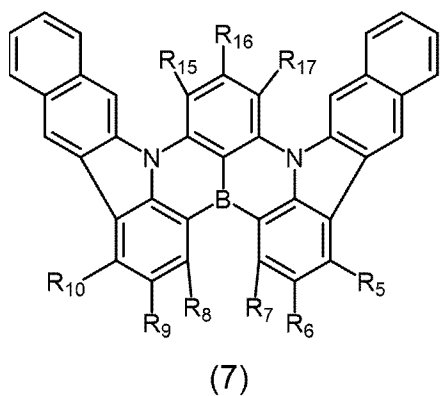
(前記一般式 (3) ~ (6) において、 $R_1 \sim R_{17}$ 及び $R_{x1} \sim R_{x4}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1) で定義した通りである。)

【 0 1 2 6】

本実施形態に係る化合物は、下記一般式 (7) 又は一般式 (8) で表されることも好ましい。

【 0 1 2 7】

【化 2 6】



20

30

【 0 1 2 8】

(前記一般式 (7) および一般式 (8) において、 $R_1 \sim R_{10}$ および $R_{15} \sim R_{17}$ は、それぞれ独立に、前記一般式 (1) で定義した通りである。)

【 0 1 2 9】

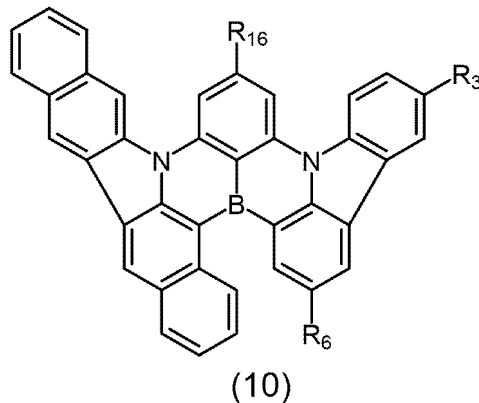
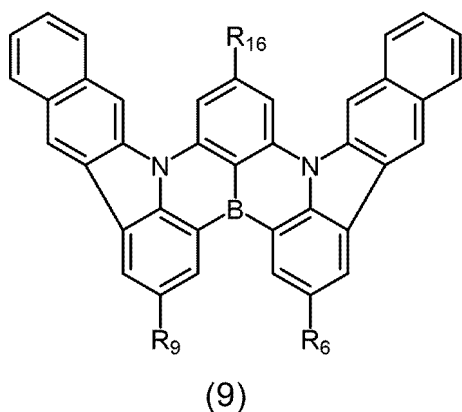
本実施形態に係る化合物は、下記一般式 (9) 又は下記一般式 (10) で表されることも好ましい。

【 0 1 3 0】

40

50

【化 2 7】



10

【0 1 3 1】

(前記一般式 (9) および (10) において、 R_3 、 R_6 、 R_9 および R_{16} は、それぞれ独立に、前記一般式 (1) で定義した通りである。)

【0 1 3 2】

前記一般式 (9) または前記一般式 (10) において、

R_3 、 R_6 および R_9 は、それぞれ独立に、

水素原子、

置換もしくは無置換の炭素数 1～25 のアルキル基、または

置換もしくは無置換の環形成炭素数 6～25 のアリール基であり、

R_{16} 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、または

置換もしくは無置換の環形成原子数 5～12 の複素環基であることが好ましい。

20

【0 1 3 3】

本実施形態に係る化合物において、 R_{16} は、

置換もしくは無置換のフェニル基、

置換もしくは無置換のナフチル基、または

置換もしくは無置換のジベンゾフラニル基であることが好ましい。

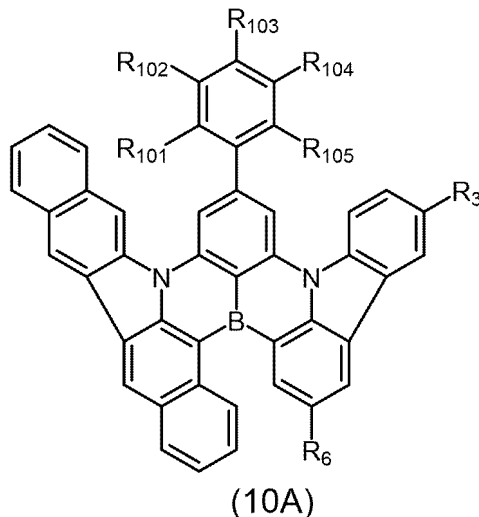
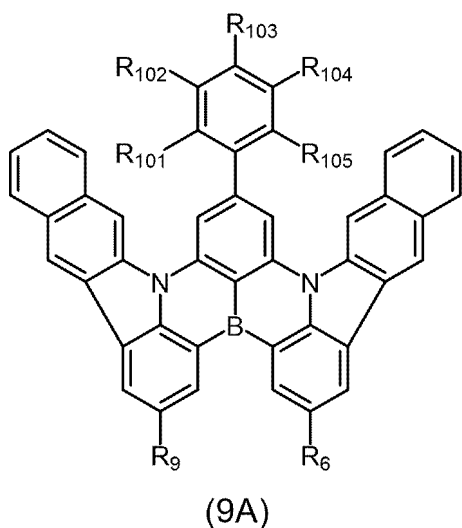
30

【0 1 3 4】

本実施形態に係る化合物は、下記一般式 (9A) 又は下記一般式 (10A) で表されることも好ましい。

【0 1 3 5】

【化 2 8】



40

50

【0136】

(前記一般式(9A)および(10A)において、

R₃、R₆およびR₉は、それぞれ独立に、前記一般式(1)で定義した通りであり、
R₁₀₁～R₁₀₅のうちの隣接する2つ以上からなる組の1組以上が、
互いに結合して、置換もしくは無置換の単環を形成するか、
互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は
互いに結合せず、

前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ、前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR₁₀₁～R₁₀₅は、それぞれ独立に、

水素原子、

無置換の炭素数1～25のアルキル基、

無置換の炭素数2～25のアルケニル基、

無置換の炭素数2～25のアルキニル基、

無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル基、

—Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

—O—(R₉₀₄)で表される基、

—S—(R₉₀₅)で表される基、

—N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、

無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O)R₉₀₈で表される基、

—COOR₉₀₉で表される基、

—S(=O)₂R₉₄₁で表される基、

—P(=O)(R₉₄₂)(R₉₄₃)で表される基、

—Ge(R₉₄₄)(R₉₄₅)(R₉₄₆)で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

無置換の環形成炭素数6～25のアリール基、又は

無置換の環形成原子数5～25の複素環基であり、

R₉₀₁～R₉₀₉、並びにR₉₄₁～R₉₄₆は、それぞれ独立に、

水素原子、

無置換の炭素数1～25のアルキル基、

無置換の環形成炭素数6～25のアリール基、又は

無置換の環形成原子数5～25の複素環基である、)

【0137】

本実施形態において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、

無置換の炭素数1～25のアルキル基、

無置換の炭素数2～25のアルケニル基、

無置換の炭素数2～25のアルキニル基、

無置換の環形成炭素数3～25のシクロアルキル基、

—Si(R₉₀₁)(R₉₀₂)(R₉₀₃)で表される基、

—O—(R₉₀₄)で表される基、

—S—(R₉₀₅)で表される基、

—N(R₉₀₆)(R₉₀₇)で表される基、

無置換の炭素数7～50のアラルキル基、

—C(=O)R₉₀₈で表される基、

—COOR₉₀₉で表される基、

—S(=O)₂R₉₄₁で表される基、

—P(=O)(R₉₄₂)(R₉₄₃)で表される基、

—Ge(R₉₄₄)(R₉₄₅)(R₉₄₆)で表される基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、

無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基、又は

無置換の環形成原子数 5 ～ 25 の複素環基であり、

R₉₀₁ ～ R₉₀₉、並びに R₉₄₁ ～ R₉₄₆ は、それぞれ独立に、

水素原子、

無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基、又は

無置換の環形成原子数 5 ～ 25 の複素環基であることが好ましい。

10

【0138】

本実施形態において、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、

ハロゲン原子、

無置換の炭素数 1 ～ 25 のアルキル基、

無置換の環形成炭素数 6 ～ 25 のアリール基、又は

無置換の環形成原子数 5 ～ 25 の複素環基であることが好ましい。

【0139】

本実施形態に係る化合物は、「置換もしくは無置換の」という場合における置換基が、

フッ素原子、

無置換の炭素数 1 ～ 10 のアルキル基、

無置換の環形成炭素数 6 ～ 12 のアリール基、又は

無置換の環形成原子数 5 ～ 12 の複素環基であることが好ましい。

20

【0140】

本実施形態において、「置換もしくは無置換」と記載された基は、いずれも「無置換」の基であることも好ましい。

【0141】

・化合物の主ピーク波長

本実施形態に係る化合物の主ピーク波長は、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 530 nm 以下である。

30

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

【0142】

・本実施形態に係る化合物の製造方法

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

【0143】

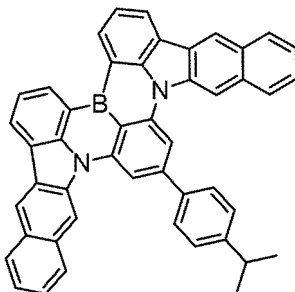
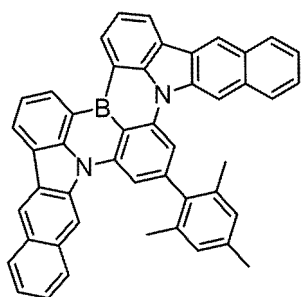
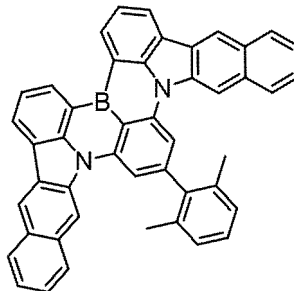
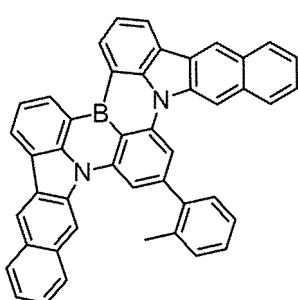
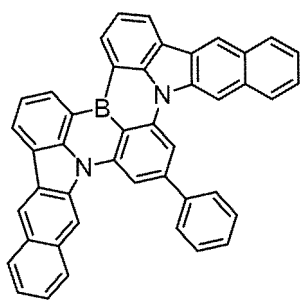
・本実施形態に係る化合物の具体例

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

40

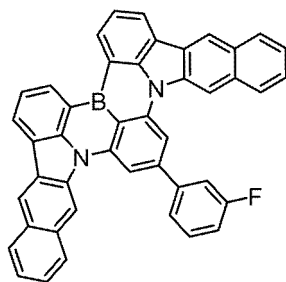
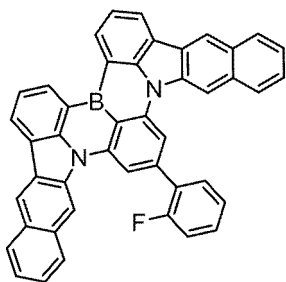
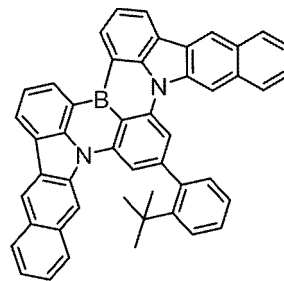
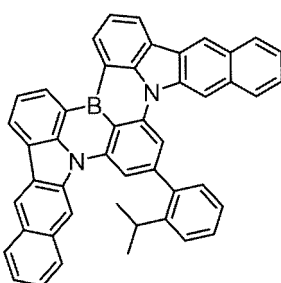
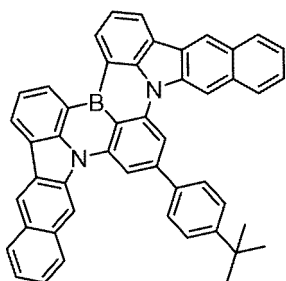
【0144】

【化 2 9】



【 0 1 4 5】

【化 3 0】



【 0 1 4 6】

10

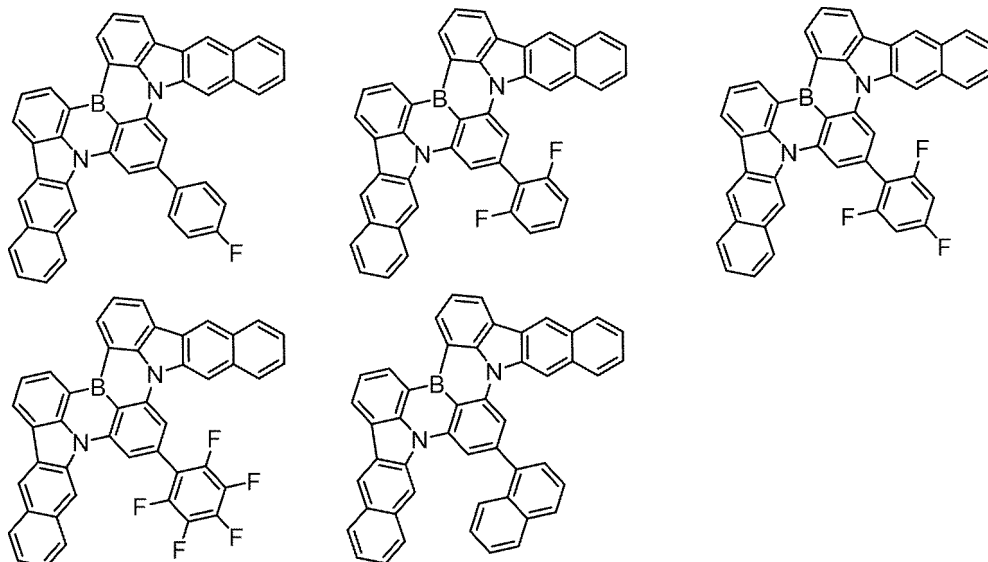
20

30

40

50

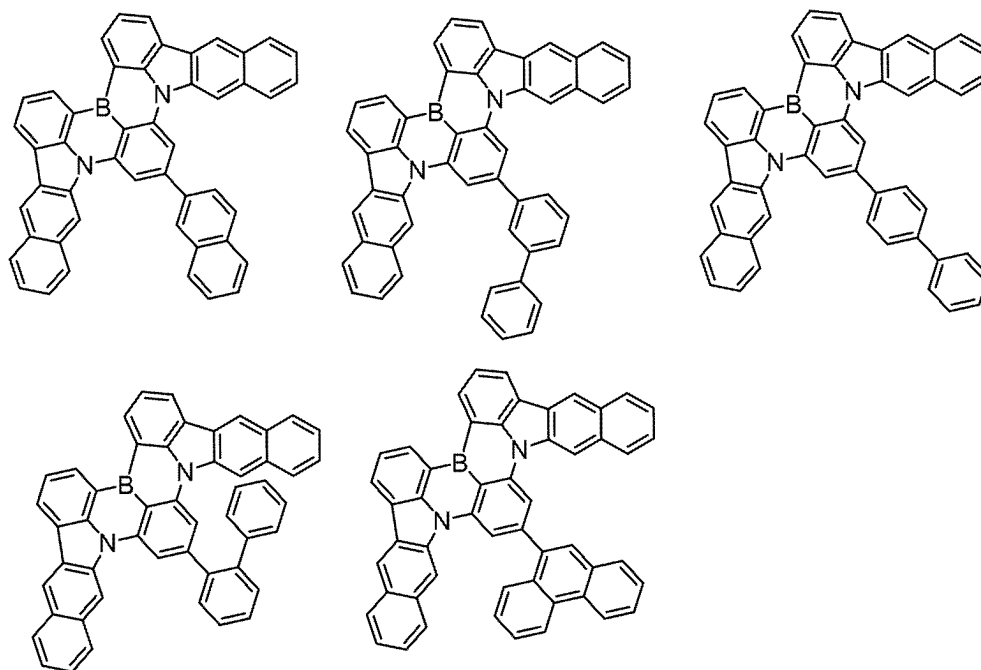
【化 3 1】



10

【 0 1 4 7】

【化 3 2】



20

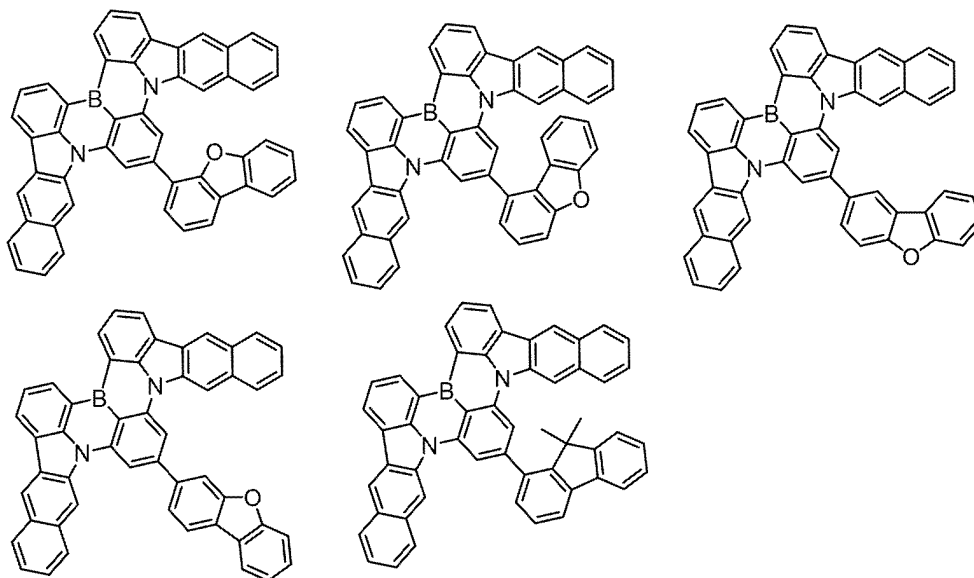
30

【 0 1 4 8】

40

50

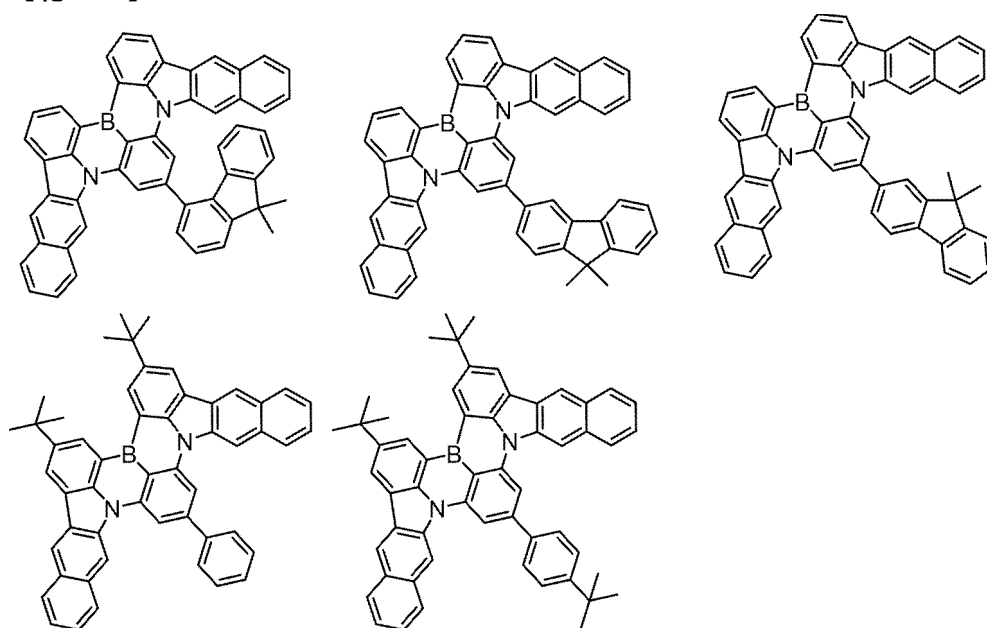
【化 3 3】



10

【 0 1 4 9】

【化 3 4】



20

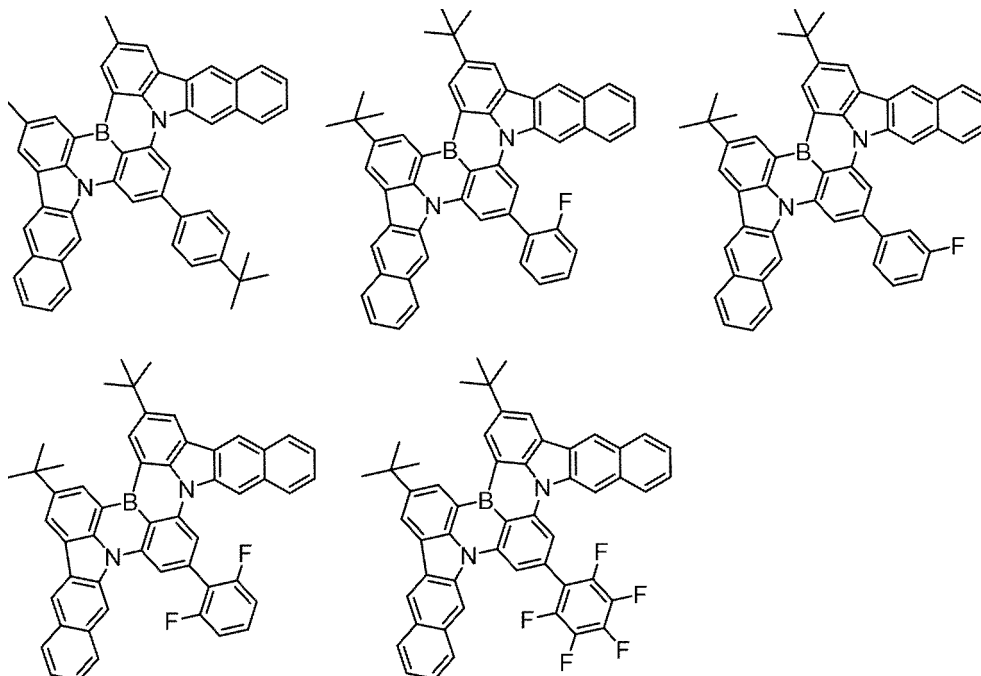
30

【 0 1 5 0】

40

50

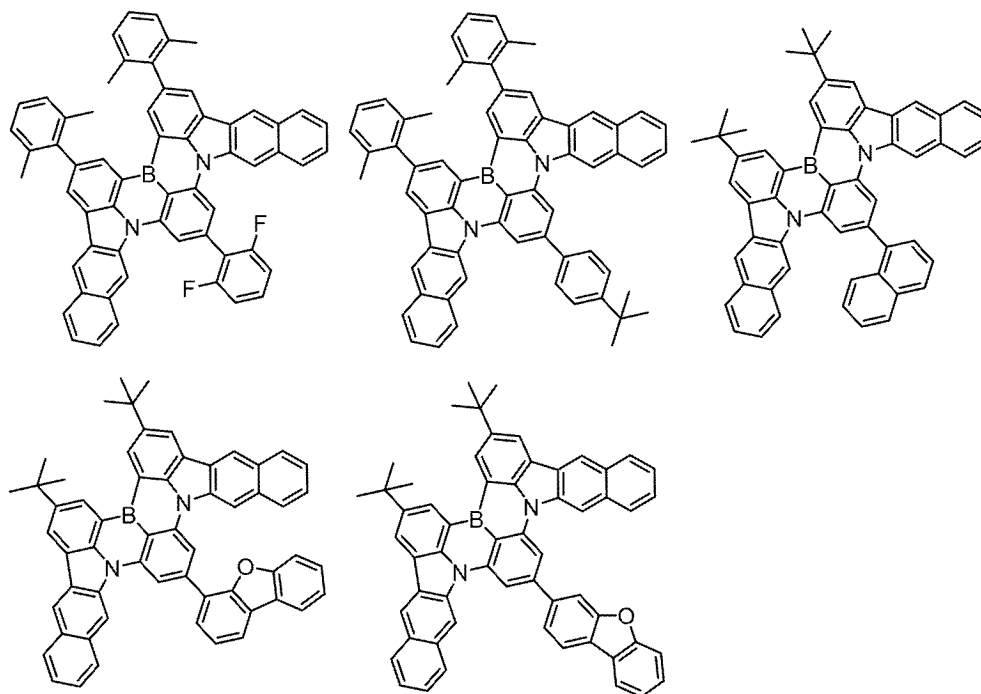
【化 3 5】



10

【 0 1 5 1】

【化 3 6】



20

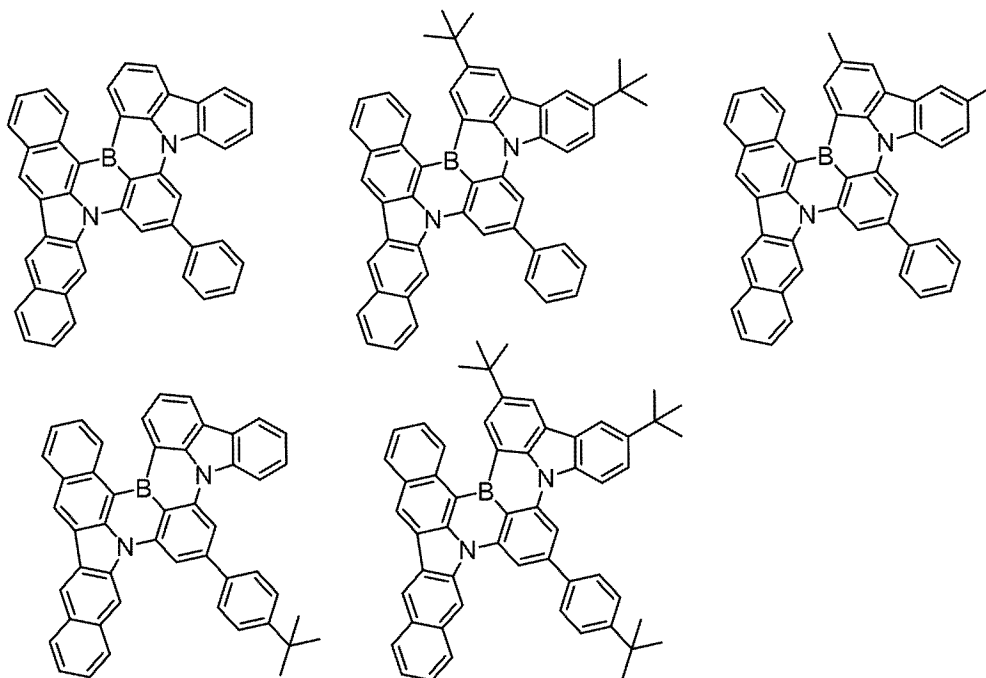
30

【 0 1 5 2】

40

50

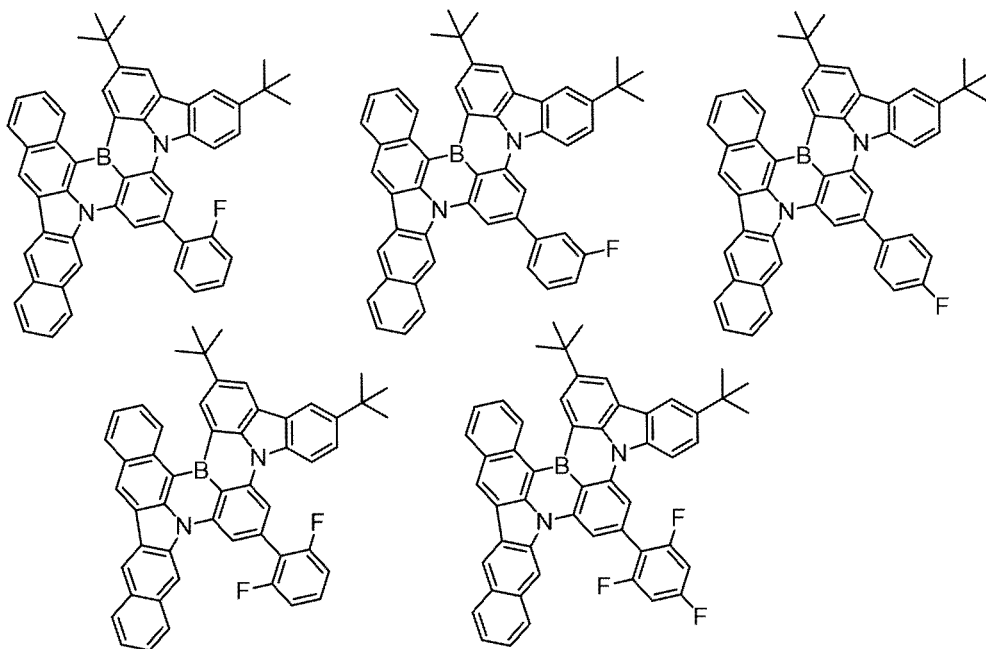
【化 3 7】



10

【 0 1 5 3】

【化 3 8】



20

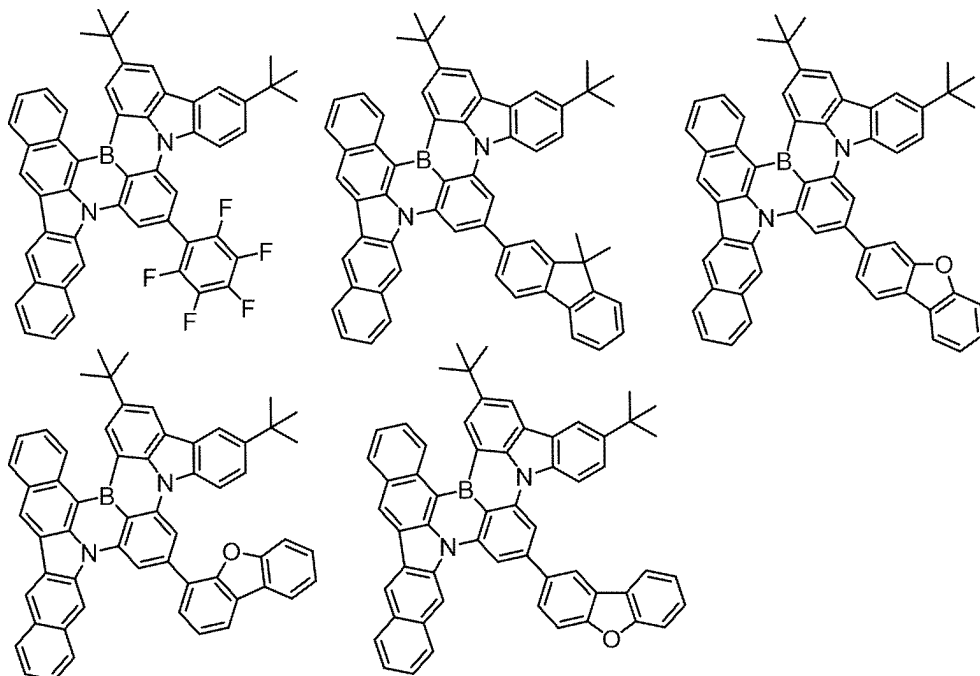
30

【 0 1 5 4】

40

50

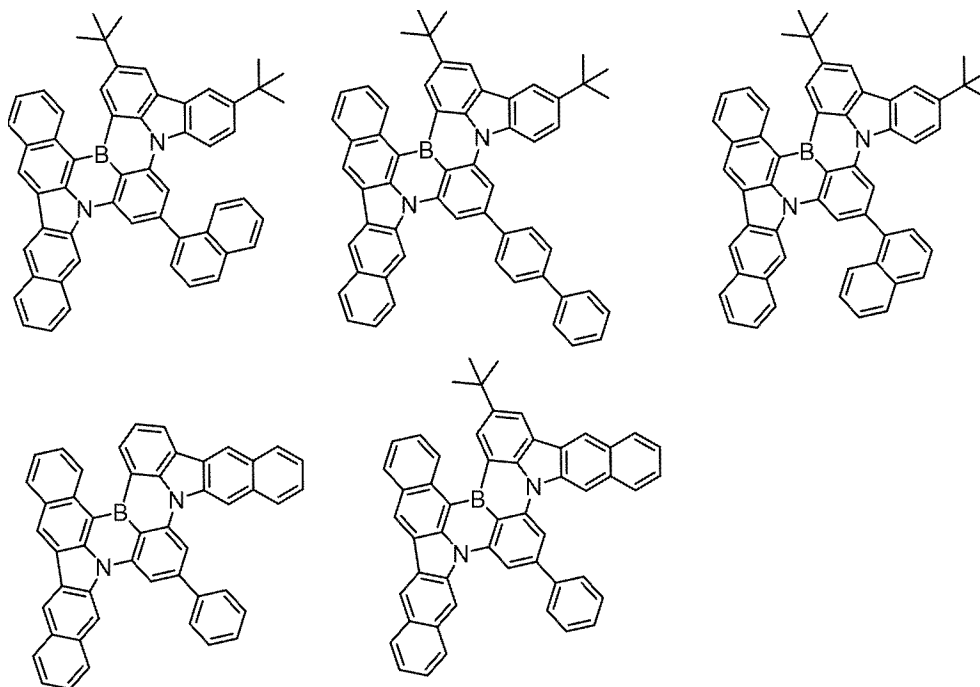
【化 3 9】



10

【 0 1 5 5】

【化 4 0】



20

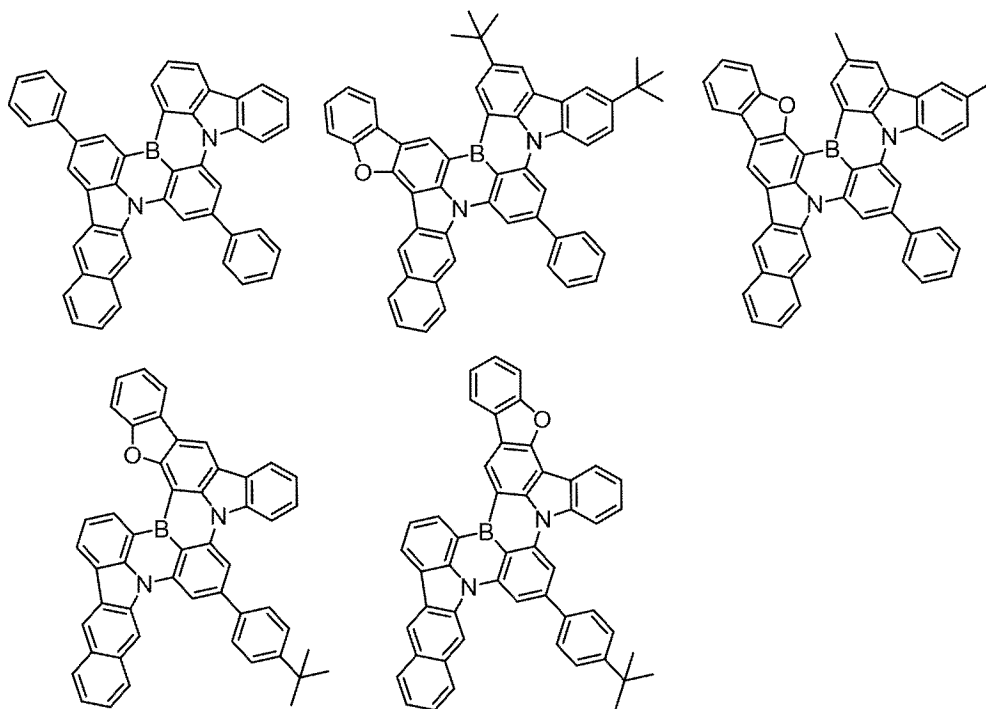
30

【 0 1 5 6】

40

50

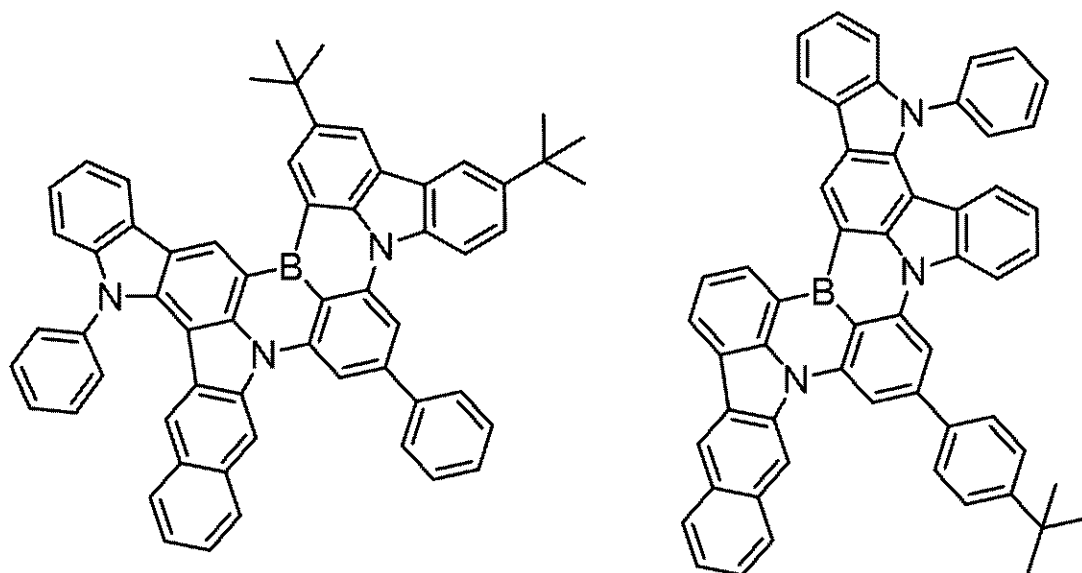
【化 4 1】



10

【 0 1 5 7】

【化 4 2】



20

30

【 0 1 5 8】

本実施形態に係る化合物によれば、有機EL素子の性能を向上させることができる。一実施形態によれば、駆動電圧を低下させ、EQEを向上させ、主ピーク半値幅が狭い光を素子から放射させることができる。

40

〔第二実施形態〕

(有機エレクトロルミネッセンス素子用材料)

本実施形態に係る有機エレクトロルミネッセンス素子用材料は、第一実施形態に係る化合物を含有する。一態様としては、第一実施形態に係る化合物のみを含む有機エレクトロルミネッセンス素子用材料が挙げられ、別の態様としては、第一実施形態に係る化合物と、第一実施形態における化合物とは異なる他の化合物とを含む有機エレクトロルミネッセンス素子用材料が挙げられる。

本実施形態の有機エレクトロルミネッセンス素子材料において、第一実施形態に係る化

50

化合物がドーパント材料であることが好ましい。この場合、有機エレクトロルミネッセンス素子用材料は、ドーパント材料としての第一実施形態に係る化合物と、例えば、ホスト材料等の他の化合物とを含んでいてもよい。

【0159】

〔第三実施形態〕

（有機エレクトロルミネッセンス素子）

本実施形態に係る有機EL素子について説明する。

本実施形態に係る有機EL素子は、陰極と、陽極と、前記陰極および前記陽極の間に含まれる有機層と、を有する。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いてもよい。有機層の少なくとも1層が第一実施形態に係る化合物（前記一般式（1）で表される化合物）を含む。

10

【0160】

有機層は、例えば、一つの発光層で構成されていてもよいし、有機EL素子に採用され得る層を含んでいてもよい。有機EL素子に採用され得る層としては、特に限定されないが、例えば、正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層、及び障壁層からなる群から選択される少なくともいずれかの層が挙げられる。

【0161】

図1に、本実施形態に係る有機EL素子の一例の概略構成を示す。

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

【0162】

（発光層）

本実施形態に係る有機EL素子の有機層は、発光層を含む。

発光層が第一実施形態に係る化合物（前記一般式（1）で表される化合物）を含むことが好ましい。

【0163】

発光層がさらに遅延蛍光性発光材料を含むことも好ましい。

30

【0164】

発光層が、第一実施形態に係る化合物及び遅延蛍光性発光材料を含む場合、遅延蛍光性発光材料の最低励起一重項エネルギー $S_1(H)$ と、第一実施形態に係る化合物（前記一般式（1）で表される化合物）の最低励起一重項エネルギー $S_1(D)$ とが、下記数式（数1）を満たすことが好ましい。

$$S_1(H) > S_1(D) \cdots (\text{数1})$$

【0165】

本実施形態に係る有機EL素子において、発光層は、第一の化合物及び第二の化合物を含むことが好ましい。発光層における第一の化合物は、第一実施形態に係る化合物であることが好ましい。

40

この態様の場合、第二の化合物は、ホスト材料（マトリックス材料と称する場合もある。）であることが好ましく、第一の化合物は、ドーパント材料（ゲスト材料、エミッター、又は発光材料と称する場合もある。）であることも好ましい。

本明細書において、「ホスト材料」とは、例えば、「層の50質量%以上」含まれる材料である。したがって、例えば、発光層は、第二の化合物を、当該発光層の全質量の50質量%以上、含有する。また、例えば、「ホスト材料」は、層の60質量%以上、層の70質量%以上、層の80質量%以上、層の90質量%以上、又は層の95質量%以上含まれていてもよい。

【0166】

本実施形態の有機EL素子において、第一の化合物の最低励起一重項エネルギー S_1 （

50

M1) と、第二の化合物の最低励起一重項エネルギー $S_1(M2)$ とが、下記数式(数3)の関係を満たすことが好ましい。

$$S_1(M2) > S_1(M1) \cdots (\text{数3})$$

【0167】

第一の化合物の77[K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M1)$ は、第二の化合物の77[K]におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M2)$ よりも小さいことが好ましい。すなわち、下記数式(数5)の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{77K}(M2) > T_{77K}(M1) \cdots (\text{数5})$$

【0168】

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、第一の化合物としての第一実施形態に係る化合物が主に発光していることが好ましい。

10

【0169】

一実施形態において、発光層は、金属錯体を含んでもよい。

また、一実施形態において、発光層は、金属錯体を含まないことも好ましい。

また、一実施形態において、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、一実施形態において、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。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。

【0170】

20

本実施形態において、発光層が第一実施形態に係る化合物を含む場合、当該発光層は、燐光発光性の金属錯体を含まないことが好ましく、燐光発光性の金属錯体以外の金属錯体も含まないことが好ましい。

【0171】

(第一の化合物)

第一の化合物は、第一実施形態に係る化合物であることが好ましい。

一実施形態において、第一の化合物は、遅延蛍光性を示さない蛍光発光性の化合物である。

【0172】

(第二の化合物)

30

第二の化合物は、特に限定されないが、本実施形態の有機EL素子において、第二の化合物が遅延蛍光性発光材料であることが好ましい。

【0173】

本実施形態の有機EL素子において、第二の化合物としての遅延蛍光性発光材料がホスト材料であることが好ましい。

本実施形態の有機EL素子において、第二の化合物としての遅延蛍光性発光材料がホスト材料であり、第一の化合物としての第一実施形態に係る化合物がドーパント材料であることが好ましい。

【0174】

(遅延蛍光性)

40

遅延蛍光については、「有機半導体のデバイス物性」(安達千波矢編、講談社発行)の261~268ページで解説されている。その文献の中で、蛍光発光材料の励起一重項状態と励起三重項状態のエネルギー差 ΔE_{13} を小さくすることができれば、通常は遷移確率が低い励起三重項状態から励起一重項状態への逆エネルギー移動が高効率で生じ、熱活性化遅延蛍光(Thermally Activated delayed Fluorescence, TADF)が発現すると説明されている。さらに、当該文献中の図10.38で、遅延蛍光の発生メカニズムが説明されている。本実施形態における遅延蛍光性発光材料は、このようなメカニズムで発生する熱活性化遅延蛍光を示す化合物であることが好ましい。

【0175】

50

一般に、遅延蛍光の発光は過渡 P L (P h o t o L u m i n e s c e n c e) 測定により確認できる。

【 0 1 7 6 】

過渡 P L 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 P L 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 P L 発光の減衰挙動（過渡特性）を測定する手法である。T A D F 材料における P L 発光は、最初の P L 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 P L 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 P L 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。

【 0 1 7 7 】

図 2 には、過渡 P L 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 P L の測定方法、および遅延蛍光の挙動解析の一例を説明する。

【 0 1 7 8 】

図 2 の過渡 P L 測定装置 1 0 0 は、所定波長の光を照射可能なパルスレーザー部 1 0 1 と、測定試料を収容する試料室 1 0 2 と、測定試料から放射された光を分光する分光器 1 0 3 と、2 次元像を結像するためのストリークカメラ 1 0 4 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 1 0 5 とを備える。なお、過渡 P L の測定は、図 2 に記載の装置に限定されない。

20

【 0 1 7 9 】

試料室 1 0 2 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 1 2 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。

【 0 1 8 0 】

試料室 1 0 2 に収容された薄膜試料に対し、パルスレーザー部 1 0 1 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 9 0 度の方向へ発光を取り出し、取り出した光を分光器 1 0 3 で分光し、ストリークカメラ 1 0 4 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 P L）を得ることができる。

30

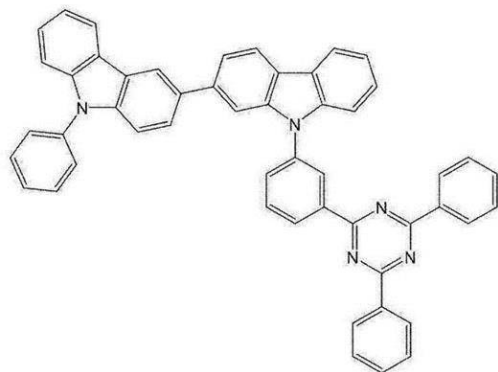
【 0 1 8 1 】

例えば、マトリックス材料として、下記参考化合物 H 1 を用い、ドーピング材料として下記参考化合物 D 1 を用いて上述のようにして薄膜試料 A を作製し、過渡 P L 測定を行った。

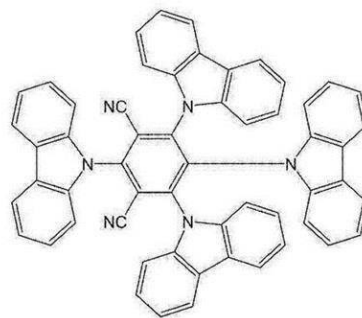
【 0 1 8 2 】

40

【化 4 3】



(参考化合物 H1)



(参考化合物 D1)

10

【0183】

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

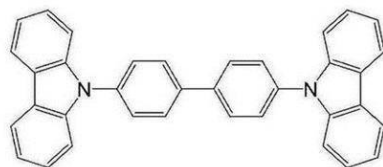
【0184】

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

20

【0185】

【化 4 4】



(参考化合物 H2)

30

【0186】

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。

【0187】

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

【0188】

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

【0189】

また、本明細書では、遅延蛍光性発光材料の遅延蛍光性の測定には、次に示す方法によ

50

り作製した試料を用いる。例えば、遅延蛍光性発光材料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。

【0190】

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（遅延蛍光性発光材料）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。

本明細書における遅延蛍光性発光材料以外の化合物のPrompt発光とDelay発光の量とその比の測定も、遅延蛍光性発光材料のPrompt発光とDelay発光の量とその比の測定と同様である。

【0191】

・ ΔST

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

【0192】

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

$$\Delta ST (H) = S_1 (H) - T_{77K} (H) < 0.3 \text{ eV} \quad \cdots (\text{数} 10)$$

$$\Delta ST (H) = S_1 (H) - T_{77K} (H) < 0.2 \text{ eV} \quad \cdots (\text{数} 11)$$

$$\Delta ST (H) = S_1 (H) - T_{77K} (H) < 0.1 \text{ eV} \quad \cdots (\text{数} 12)$$

【0193】

・三重項エネルギーと77 [K]におけるエネルギーギャップとの関係

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

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

ここで、本実施形態に係る化合物の内、熱活性化遅延蛍光性の化合物は、 ΔST が小さい化合物であることが好ましい。 ΔST 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

10

20

30

40

50

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 λ_{edge} [nm] に基づいて、次の換算式（F1）から算出されるエネルギー量を 77 [K] におけるエネルギーギャップ T_{77K} とする。

換算式（F1）： $T_{77K} [\text{eV}] = 1239.85 / \lambda_{\text{edge}}$
 【0194】

10

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。

20

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。

【0195】

・最低励起一重項エネルギー S_1

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

測定対象となる化合物の $10 \mu\text{mol/L}$ トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温（300 K）でこの試料の吸収スペクトル（縦軸：吸収強度、横軸：波長とする。）を測定する。この吸収スペクトルの長波長側の立ち下がりに対して接線を引き、その接線と横軸との交点の波長値 λ_{edge} [nm] を次に示す換算式（F2）に代入して最低励起一重項エネルギーを算出する。

30

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

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

【0196】

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。

40

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。

【0197】

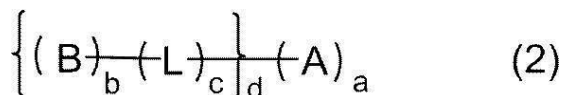
・一般式（2）で表される化合物

本実施形態において、遅延蛍光性発光材料は、遅延蛍光性を有する化合物であれば特に限定されない。一実施形態において、遅延蛍光性発光材料は、下記一般式（2）で表される化合物である。

【0198】

50

【化 4 5】



【0199】

前記一般式(2)において、

Aはアクセプター性(電子受容性)部位であり、下記一般式(a-1)～(a-7)から選ばれる部分構造を有する基である。Aが複数存在する場合、複数のAは互いに同一または異なり、A同士が結合して飽和または不飽和の環を形成してもよく、

Bはドナー性(電子供与性)部位であり、下記一般式(b-1)～(b-6)から選ばれる部分構造を有する。Bが複数存在する場合、複数のBは互いに同一または異なり、B同士が結合して飽和または不飽和の環を形成してもよく、

a, b, および d は、それぞれ独立に、1、2、3、4、又は5であり、

c は 0、1、2、3、4、又は5であり、

c が 0 のとき、A と B とは単結合またはスピロ結合で結合し、

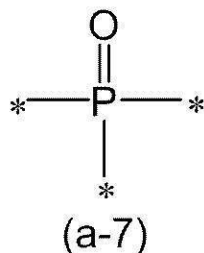
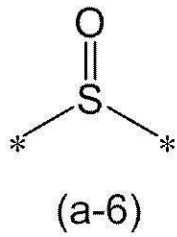
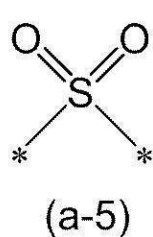
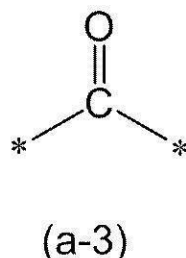
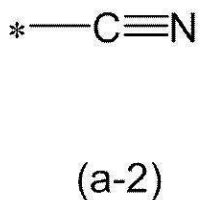
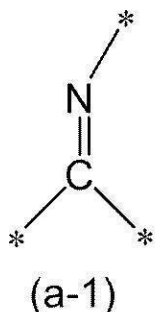
c が 1、2、3、4 又は 5 のとき、L は、

置換または無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基、および

置換または無置換の環形成原子数 5～30 の複素環基からなる群から選択される連結基であり、L が複数存在する場合、複数の L は互いに同一または異なり、L 同士が結合して飽和または不飽和の環を形成してもよい。

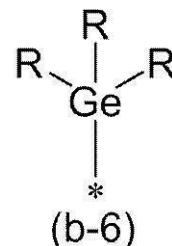
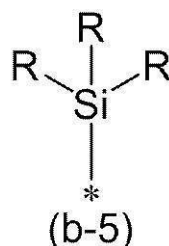
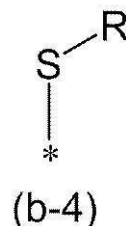
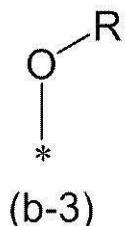
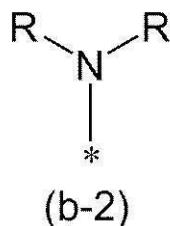
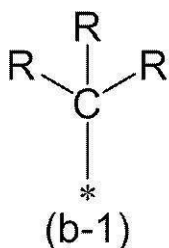
【0200】

【化 4 6】



【0201】

【化 4 7】



【0202】

前記一般式(b-1)～(b-6)において、

複数の R のうち隣接する 2 つ以上からなる組の 1 組以上が、互いに結合して、置換もし

くは無置換の単環を形成するか、互いに結合して、置換もしくは無置換の縮合環を形成するか、又は互いに結合せず、前記置換もしくは無置換の単環を形成せず、かつ前記置換もしくは無置換の縮合環を形成しないR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、

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環形成炭素数3～30のアルキル基であり、

Rが複数存在する場合、複数のRは互いに同一または異なる。

【0203】

前記一般式(2)で表される化合物の結合様式の一例として、例えば下記表1に示す結合様式が挙げられる。

【0204】

【表1】

No.	a	b	c	d	結合様式
(1A)	1	1	0	1	B—A
(1B)	1	1	1	1	B—L—A
(1C)	2	1	0	1	B—A—A , $\begin{array}{c} A \\ B \diagup \diagdown \\ A \end{array}$
(1D)	1	2	0	1	B—B—A , $\begin{array}{c} B \\ B \diagup \diagdown \\ A \end{array}$
(1E)	2	1	1	1	B—L—A—A , $\begin{array}{c} A \\ B-L \diagup \diagdown \\ A \end{array}$
(1F)	1	2	1	1	B—B—L—A , $\begin{array}{c} B \\ B \diagup \diagdown \\ L-A \end{array}$
(1G)	1	1	2	1	B—L—L—A
(1H)	1	1	1	2	$\begin{array}{c} B-L \diagup \diagdown A \\ B-L \diagup \diagdown \end{array}$, B—L—B—L—A

【0205】

・遅延蛍光性発光材料の製造方法

遅延蛍光性発光材料は、公知の方法により製造できる。また、遅延蛍光性発光材料は、公知の方法に倣い、目的物に合わせた既知の代替反応及び原料を用いることによっても、製造できる。

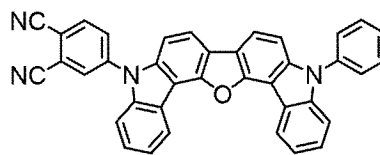
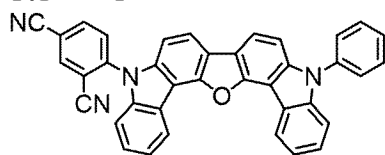
【0206】

・遅延蛍光性発光材料の具体例

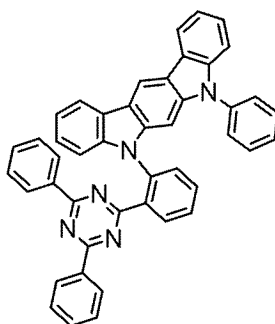
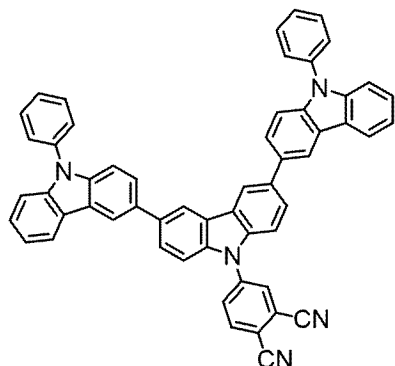
遅延蛍光性発光材料の具体例としては、例えば、以下の化合物挙げられる。ただし、本発明は、これら遅延蛍光性発光材料の具体例に限定されない。

【0207】

【化48】



10



20

【0208】

(TADF機構(メカニズム))

図4は、発光層における、遅延蛍光性発光材料である場合の第二の化合物M2及び第一実施形態の化合物である場合の第一の化合物M1のエネルギー準位の関係の一例を示す図である。図4において、S0は、基底状態を表す。S1(M1)は、第一の化合物M1の最低励起一重項状態を表す。T1(M1)は、第一の化合物M1の最低励起三重項状態を表す。S1(M2)は、第二の化合物M2の最低励起一重項状態を表す。T1(M2)は、第二の化合物M2の最低励起三重項状態を表す。

図4中のS1(M2)からS1(M1)へ向かう破線の矢印は、第二の化合物M2の最低励起一重項状態から第一の化合物M1へのフェルスター型エネルギー移動を表す。

30

図4に示すように、第二の化合物M2としてΔST(M2)の小さな化合物(遅延蛍光性発光材料)を用いると、最低励起三重項状態T1(M2)は、熱エネルギーにより、最低励起一重項状態S1(M2)に逆項間交差が可能である。そして、第二の化合物M2の最低励起一重項状態S1(M2)から第一の化合物M1へのフェルスター型エネルギー移動が生じ、最低励起一重項状態S1(M1)が生成する。この結果、第一の化合物M1の最低励起一重項状態S1(M1)からの蛍光発光を観測することができる。このTADF機構による遅延蛍光を利用することによっても、理論的に内部効率を100%まで高めることができると考えられている。

【0209】

ホスト材料としての第二の化合物は、ドーパント材料よりも最低空軌道準位(LUMO準位)が高く、最高被占有軌道準位(HOMO準位)が低い化合物でもよい。ホスト材料としては、(1)アルミニウム錯体、ベリリウム錯体、若しくは亜鉛錯体等の金属錯体、(2)オキサジアゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、若しくはフェナントロリン誘導体等の複素環化合物、(3)アントラセン誘導体、フェナントレン誘導体、ピレン誘導体、若しくはクリセン誘導体等の縮合芳香族化合物、(3)カルバゾール誘導体等の縮合複素環化合物、(4)トリアリールアミン誘導体、若しくは縮合多環芳香族アミン誘導体等の芳香族アミン化合物が挙げられる。

40

【0210】

本実施形態の有機EL素子は、緑色発光することが好ましい。

本実施形態の有機EL素子が緑色発光する場合、有機EL素子から発光する光の主ピー

50

ク波長は、500 nm以上560 nm以下であることが好ましい。

【0211】

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

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

【0212】

・発光層の膜厚

本実施形態の有機EL素子における発光層の膜厚は、好ましくは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。

【0213】

・発光層における化合物の含有率

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

第一の化合物の含有率は、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2質量%以下であることがさらに好ましい。

第二の化合物の含有率は、10質量%以上80質量%以下であることが好ましく、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。

なお、本実施形態は、発光層に、第一の化合物及び第二の化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

発光層は、第一の化合物を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、第二の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

【0214】

（基板）

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

【0215】

（陽極）

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

これらの材料は、通常、スパッタリング法により成膜される。例えば、酸化インジウム－酸化亜鉛は、酸化インジウムに対し1質量%以上10質量%以下の酸化亜鉛を加えたターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。また、例えば、酸化タングステン、および酸化亜鉛を含有した酸化インジウムは、酸化インジウムに対

10

20

30

40

50

し酸化タングステンを0.5質量%以上5質量%以下、酸化亜鉛を0.1質量%以上1質量%以下含有したターゲットを用いることにより、スパッタリング法で形成することができる。その他、真空蒸着法、塗布法、インクジェット法、スピンコート法などにより作製してもよい。

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

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

【0216】

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

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

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

【0217】

（正孔注入層）

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

また、正孔注入性の高い物質としては、低分子の有機化合物である4,4',4''-トリス（N,N-ジフェニルアミノ）トリフェニルアミン（略称：TDATA）、4,4',4''-トリス〔N-（3-メチルフェニル）-N-フェニルアミノ〕トリフェニルアミン（略称：MTDATA）、4,4'-ビス〔N-（4-ジフェニルアミノフェニル）-N-フェニルアミノ〕ビフェニル（略称：DPAB）、4,4'-ビス（N-〔4-〔N'-（3-メチルフェニル）-N'-フェニルアミノ〕フェニル〕-N-フェニルアミノ）ビフェニル（略称：DNTPD）、1,3,5-トリス〔N-（4-ジフェニルアミノフェニル）-N-フェニルアミノ〕ベンゼン（略称：DPA3B）、3-〔N-（9-フェニルカルバゾール-3-イル）-N-フェニルアミノ〕-9-フェニルカルバゾール（略称：PCzPCA1）、3,6-ビス〔N-（9-フェニルカルバゾール-3-イル）-N-フェニルアミノ〕-9-フェニルカルバゾール（略称：PCzPCA2）、3-〔N-（1-ナフチル）-N-（9-フェニルカルバゾール-3-イル）アミノ〕-9-フェニルカル

バザール（略称：PCzPCN1）等の芳香族アミン化合物等も挙げられる。

また、正孔注入性の高い物質としては、高分子化合物（オリゴマー、デンドリマー、ポリマー等）を用いることもできる。例えば、ポリ（N-ビニルカルバザール）（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。

10

【0218】

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

20

正孔輸送層には、CBP、CzPA、PCzPAのようなカルバザール誘導体や、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-ビニルカルバザール）（略称：PVK）やポリ（4-ビニルトリフェニルアミン）（略称：PVTPA）等の高分子化合物を用いることもできる。

但し、電子よりも正孔の輸送性の高い物質であれば、これら以外の物質を用いてもよい。なお、正孔輸送性の高い物質を含む層は、単層であっても、上記物質からなる層が二層以上積層された層であってもよい。

30

【0219】

（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、カルバザール誘導体、フェナントロリン誘導体等の複素芳香族化合物、3）高分子化合物を使用することができる。具体的には低分子の有機化合物として、Alq、トリス（4-メチル-8-キノリノラト）アルミニウム（略称：Almq₃）、ビス（10-ヒドロキシベンゾ〔h〕キノリナト）ベリリウム（略称：BeBq₂）、BALq、Znq、ZnPBO、ZnBTZなどの金属錯体等を用いることができる。また、金属錯体以外にも、2-（4-ビフェニリル）-5-（4-tert-ブチルフェニル）-1, 3, 4-オキサジアゾール（略称：PBD）、1, 3-ビス〔5-（p-tert-ブチルフェニル）-1, 3, 4-オキサジアゾール-2-イル〕ベンゼン（略称：OXD-7）、3-（4-tert-ブチルフェニル）-4-フェニル-5-（4-ビフェニリル）-1, 2, 4-トリアゾール（略称：TAZ）、3-（4-tert-ブチルフェニル）-4-（4-エチルフェニル）-5-（4-ビフェニリル）-1, 2, 4-トリアゾール（略称：p-ETTAZ）、バソフェナントロリン（略称：BPhen）、バソキュプロイン（略称：BCP）、4, 4'-ビス（5-メチルベンゾオキサゾール-2-イル）スチルベン（略称：BzOs）などの複素芳香族化合物も用いることがで

40

50

きる。ここに述べた物質は、主に $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 以上の電子移動度を有する物質である。なお、正孔輸送性よりも電子輸送性の高い物質であれば、上記以外の物質を電子輸送層として用いてもよい。また、電子輸送層は、単層であっても、上記物質からなる層が二層以上積層された層であってもよい。

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

【0220】

(電子注入層)

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

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

【0221】

(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。

【0222】

(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。

【0223】

本実施形態に係る有機EL素子は、第一実施形態の化合物を含むので、性能が向上する。一実施形態によれば、駆動電圧が低く、EQEが高く、素子から放射される光の主ピーク半値幅が狭い有機EL素子を提供できる。

【0224】

(第四実施形態)

(有機エレクトロルミネッセンス素子)

第四実施形態に係る有機EL素子の構成について説明する。第四実施形態の説明において第三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

10

20

30

40

50

略化する。また、第四実施形態では、特に言及されない材料や化合物については、第三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。

【0225】

第四実施形態に係る有機EL素子は、発光層が、さらに第三の化合物を含んでいる点で、第三実施形態に係る有機EL素子と異なる。その他の点については第三実施形態と同様である。

【0226】

第四実施形態において、発光層は、第一の化合物と、第二の化合物と、第三の化合物とを含む態様であることが好ましい。この態様の場合、第一の化合物が、第一実施形態の化合物であることがより好ましく、第二の化合物が、遅延蛍光性発光材料であることがさらに好ましい。また、この態様の場合、第一の化合物は、ドーパント材料であることが好ましく、第二の化合物は、ホスト材料であることが好ましい。また、第三の化合物は、ドーパント材料ではないことが好ましい。例えば、第四実施形態の発光層は、第二の化合物および第三の化合物を、合計で、当該発光層の全質量の50質量%以上、含有し、層の60質量%以上、層の70質量%以上、層の80質量%以上、層の90質量%以上、又は層の95質量%以上含有していてもよい。

【0227】

(第三の化合物)

第三の化合物は、遅延蛍光性の化合物でもよいし、遅延蛍光性を示さない化合物でもよい。

【0228】

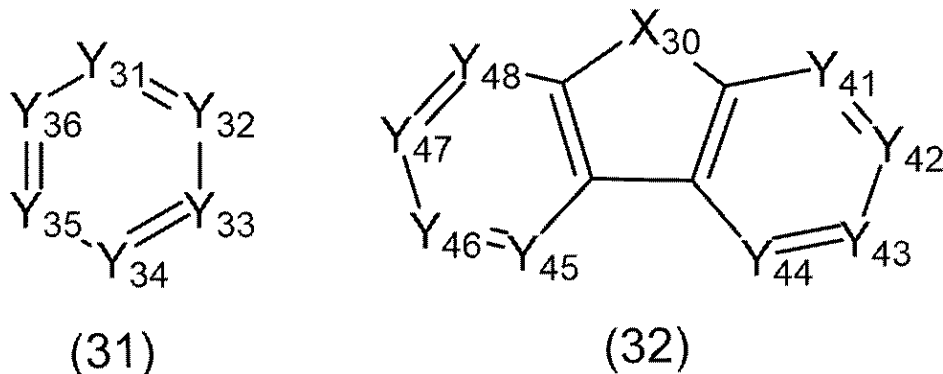
第三の化合物としては、特に限定されないが、アミン化合物以外の化合物であることが好ましい。すなわち、第三の化合物は、置換もしくは無置換のアミノ基を含まないことが好ましい。また、例えば、第三の化合物としては、カルバゾール誘導体、ジベンゾフラン誘導体、ジベンゾチオフェン誘導体を用いることができるが、これら誘導体に限定されない。

【0229】

第三の化合物は、一つの分子中に下記一般式(31)で表される部分構造、下記一般式(32)で表される部分構造、下記一般式(33A)で表される部分構造、及び下記一般式(34A)で表される部分構造のうち少なくともいずれかを含む化合物であることも好ましい。

【0230】

【化49】



【0231】

10

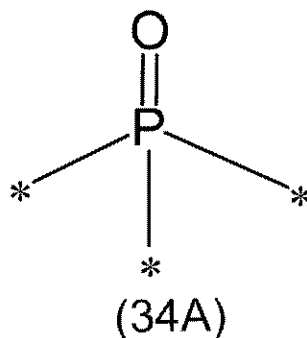
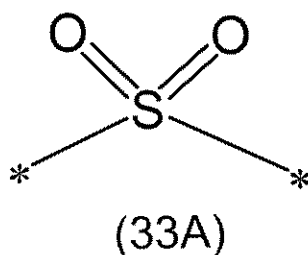
20

30

40

50

【化50】



10

【0232】

前記一般式(31)において、

$Y_{31} \sim Y_{36}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

ただし、 $Y_{31} \sim Y_{36}$ のうち少なくともいずれかは、第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

前記一般式(32)において、

$Y_{41} \sim Y_{48}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

20

ただし、 $Y_{41} \sim Y_{48}$ のうち少なくともいずれかは、第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

X_{30} は、第三の化合物の分子中における他の原子と結合する窒素原子、または酸素原子、もしくは硫黄原子である。

前記一般式(33A)及び(34A)中、*は、それぞれ独立に、第三の化合物の分子中における他の原子又は他の構造との結合箇所を表す。

【0233】

第三の化合物は、一つの分子中に前記一般式(31)で表される部分構造及び前記一般式(32)で表される部分構造を合計で、2個以上10個以下有することが好ましく、4個以上8個以下有することがより好ましい。

30

【0234】

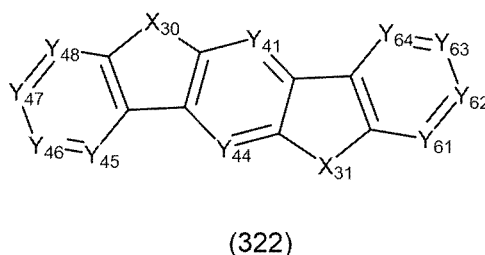
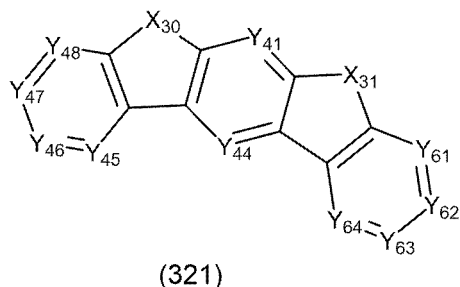
前記一般式(32)において、 $Y_{41} \sim Y_{48}$ のうち少なくとも2つが第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、当該炭素原子を含む環構造が構築されていることも好ましい。

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

【0235】

【化51】

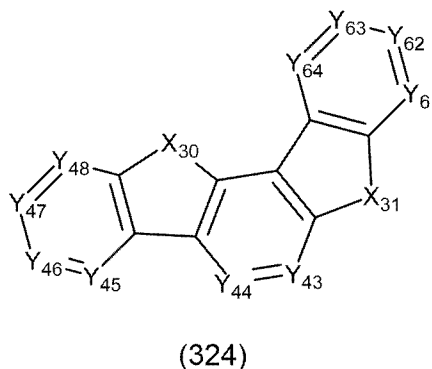
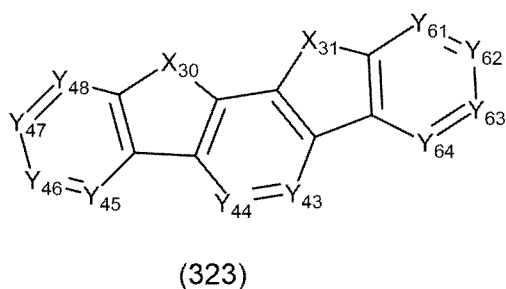
40



【0236】

50

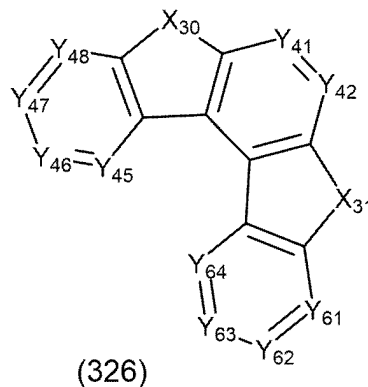
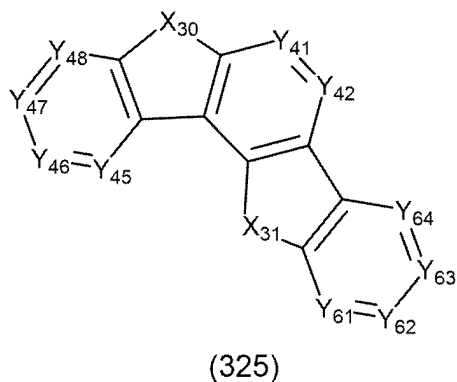
【化 5 2】



10

【 0 2 3 7】

【化 5 3】



20

【 0 2 3 8】

前記一般式（3 2 1）～（3 2 6）において、

X_{30} は、それぞれ独立に、第三の化合物の分子中における他の原子と結合する窒素原子、または酸素原子、もしくは硫黄原子であり、

$Y_{41} \sim Y_{48}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

30

X_{31} は、それぞれ独立に、第三の化合物の分子中における他の原子と結合する窒素原子、酸素原子、硫黄原子、または第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子であり、

$Y_{61} \sim Y_{64}$ は、それぞれ独立に、窒素原子、または第三の化合物の分子中における他の原子と結合する炭素原子である。

本実施形態においては、第三の化合物は、前記一般式（3 2 1）～（3 2 6）のうち前記一般式（3 2 3）で表される部分構造を有することが好ましい。

【 0 2 3 9】

前記一般式（3 1）で表される部分構造は、下記一般式（3 3）で表される基、及び下記一般式（3 4）で表される基からなる群から選択される少なくともいずれかの基として第三の化合物に含まれることが好ましい。

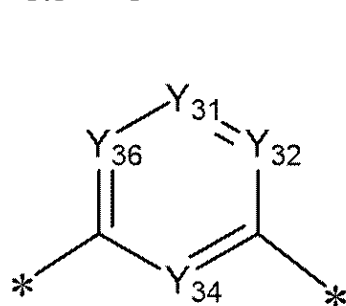
40

第三の化合物は、下記一般式（3 3）、及び下記一般式（3 4）で表される部分構造のうち少なくともいずれかの部分構造を有することも好ましい。下記一般式（3 3）、及び下記一般式（3 4）で表される部分構造のように結合箇所が互いにメタ位に位置するため、第三の化合物の 7 7 [K] におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M3)$ を高く保つことができる。

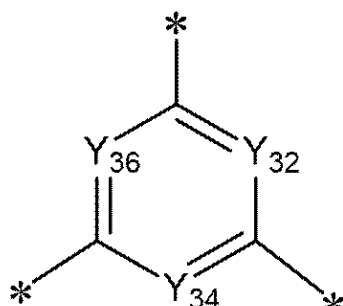
【 0 2 4 0】

50

【化 5 4】



(33)



(34)

10

【0 2 4 1】

前記一般式 (3 3) において、 Y_{31} 、 Y_{32} 、 Y_{34} 、及び Y_{36} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{31} である。

前記一般式 (3 4) において、 Y_{32} 、 Y_{34} 、及び Y_{36} は、それぞれ独立に、窒素原子または CR_{31} である。

前記一般式 (3 3)、及び (3 4) において、

R_{31} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、

置換基としての R_{31} は、それぞれ独立に、

置換または無置換の環形成炭素数 6～30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5～30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 1～30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1～30 のフルオロアルキル基、

置換または無置換の環形成炭素数 3～30 のシクロアルキル基、

置換または無置換の炭素数 7～30 のアラルキル基、

置換または無置換のシリル基、

置換ゲルマニウム基、

置換ホスフィンオキシド基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、及び

置換または無置換のカルボキシ基

からなる群から選択される。

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

前記一般式 (3 3)、及び前記一般式 (3 4) において、* は、それぞれ独立に、第三の化合物の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。

【0 2 4 2】

前記一般式 (3 3) において、 Y_{31} 、 Y_{32} 、 Y_{34} 、及び Y_{36} は、それぞれ独立に、 CR_{31} であることが好ましく、複数の R_{31} は、互いに同一であるか、または異なる。

また、前記一般式 (3 4) において、 Y_{32} 、 Y_{34} 、及び Y_{36} は、それぞれ独立に、 CR_{31} であることが好ましく、複数の R_{31} は、互いに同一であるか、または異なる。

【0 2 4 3】

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

【0 2 4 4】

前記一般式 (3 2) で表される部分構造は、下記一般式 (3 5)～(3 9)、及び下記

20

30

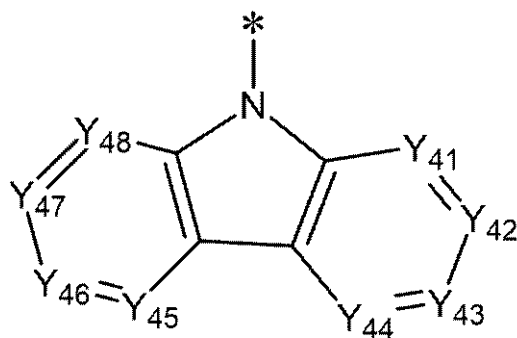
40

50

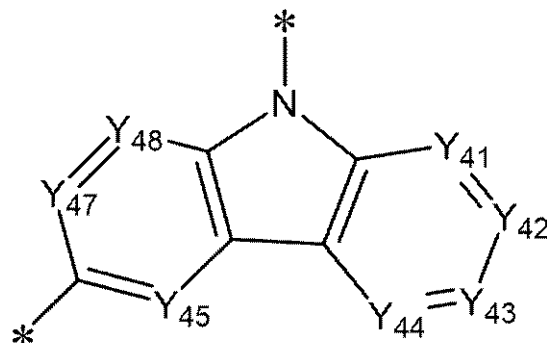
一般式(30a)で表される基からなる群から選択される少なくともいずれかの基として第三の化合物に含まれることが好ましい。

【0245】

【化55】



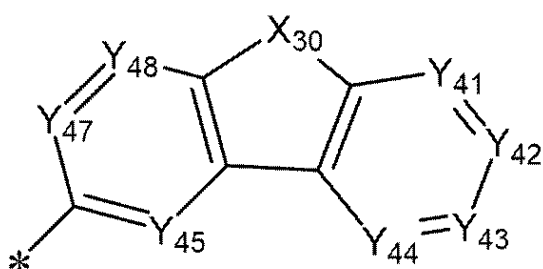
(35)



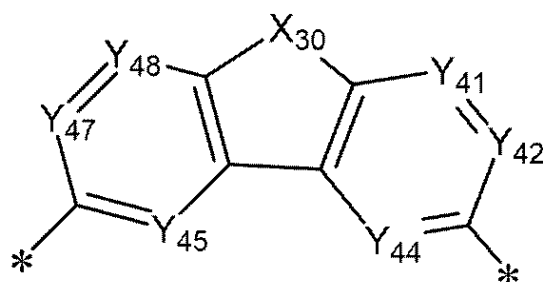
(36)

【0246】

【化56】



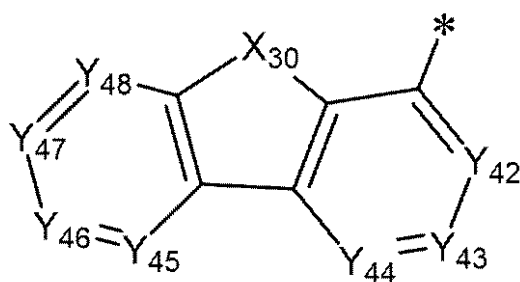
(37)



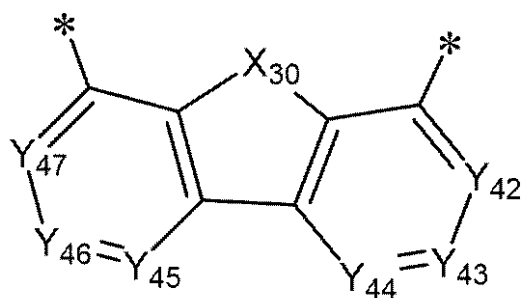
(38)

【0247】

【化57】



(39)



(30a)

【0248】

前記一般式(35)において、Y41乃至Y48は、それぞれ独立に、窒素原子またはCR32である。

前記一般式(36)、及び(37)において、Y41～Y45、Y47、及びY48は、それぞれ独立に、窒素原子またはCR32である。

前記一般式(38)において、Y41、Y42、Y44、Y45、Y47、及びY48は、それぞれ独立に、窒素原子またはCR32である。

前記一般式(39)において、Y42～Y48は、それぞれ独立に、窒素原子またはCR32である。

10

20

30

40

50

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

前記一般式 (35) ~ (39)、及び (30a) において、

R_{32} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であり、

置換基としての R_{32} は、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のフルオロアルキル基、

置換または無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、

置換または無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、

置換または無置換のシリル基、

置換ゲルマニウム基、

置換ホスフィンオキシド基、

ハロゲン原子、

シアノ基、

ニトロ基、及び

置換または無置換のカルボキシ基

からなる群から選択され、

複数の R_{32} は、互いに同一であるかまたは異なる。

前記一般式 (37) ~ (39)、及び (30a) において、

X_{30} は、 NR_{33} 、酸素原子、または硫黄原子であり、

R_{33} は、

置換または無置換の環形成炭素数 6 ~ 30 のアリール基、

置換または無置換の環形成原子数 5 ~ 30 のヘテロアリール基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のアルキル基、

置換または無置換の炭素数 1 ~ 30 のフルオロアルキル基、

置換または無置換の環形成炭素数 3 ~ 30 のシクロアルキル基、

置換または無置換の炭素数 7 ~ 30 のアラルキル基、

置換または無置換のシリル基、

置換ゲルマニウム基、

置換ホスフィンオキシド基、

フッ素原子、

シアノ基、

ニトロ基、及び

置換または無置換のカルボキシ基

からなる群から選択され、

複数の R_{33} は、互いに同一であるかまたは異なる。

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

前記一般式 (35) ~ (39)、及び (30a) において、* は、それぞれ独立に、第三の化合物の分子中における他の原子または他の構造との結合箇所を表す。

【0249】

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

かまたは異なる。

【0250】

第三の化合物において、 X_{30} は、酸素原子または硫黄原子であることが好ましく、酸素原子であることがより好ましい。

【0251】

第三の化合物において、 R_{31} 、及び R_{32} は、それぞれ独立に、水素原子または置換基であって、置換基としての R_{31} 、及び置換基としての R_{32} は、それぞれ独立に、フッ素原子、シアノ基、置換または無置換の炭素数1～30のアルキル基、置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、及び置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基からなる群から選択されるいずれかの基であることが好ましい。 R_{31} 、及び R_{32} は、水素原子、シアノ基、置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基、または置換または無置換の環形成原子数5～30のヘテロアリール基であることがより好ましい。ただし、置換基としての R_{31} 、及び置換基としての R_{32} が置換または無置換の環形成炭素数6～30のアリール基である場合、当該アリール基は、非縮合環であることが好ましい。

10

【0252】

第三の化合物は、芳香族炭化水素化合物、または芳香族複素環化合物であることも好ましい。

【0253】

第三の化合物における置換基の例は、例えば、以下のとおりであるが、本発明は、これらの例に限定されない。

20

【0254】

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

30

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

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

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

【0255】

ヘテロアリール基（複素環基、ヘテロ芳香族環基、または芳香族複素環基と称する場合がある。）の具体例としては、ピロリル基、ピラゾリル基、ピラジニル基、ピリミジニル基、ピリダジニル基、ピリジル基、トリアジニル基、インドリル基、イソインドリル基、イミダゾリル基、ベンズイミダゾリル基、インダゾリル基、イミダゾ[1,2-a]ピリジニル基、フリル基、ベンゾフラニル基、イソベンゾフラニル基、ジベンゾフラニル基、アザジベンゾフラニル基、チオフェニル基、ベンゾチエニル基、ジベンゾチエニル基、アザジベンゾチエニル基、キノリル基、イソキノリル基、キノキサリニル基、キナゾリニル基、ナフチリジニル基、カルバゾリル基、アザカルバゾリル基、フェナントリジニル基、アクリジニル基、フェナントロリニル基、フェナジニル基、フェノチアジニル基、フェノキサジニル基、オキサゾリル基、オキサジアゾリル基、フラザニル基、ベンズオキサゾリル基、チエニル基、チアゾリル基、チアジアゾリル基、ベンズチアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基等が挙げられ、好ましくは、ジベンゾフラニル基、ジベンゾチエニル基、カルバゾリル基、ピリジル基、ピリミジニル基、トリアジニル基、アザジベンゾフ

40

50

ラニル基、及びアザジベンゾチエニル基等を挙げることができる。

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

【0256】

第三の化合物において、置換シリル基は、置換または無置換のトリアルキルシリル基、置換または無置換のアリールアルキルシリル基、及び置換または無置換のトリアリールシリル基からなる群から選択されることも好ましい。

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

10

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

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

【0257】

第三の化合物において、置換ホスフィンオキシド基は、置換または無置換のジアリールホスフィンオキシド基であることも好ましい。

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

20

【0258】

第三の化合物において、置換カルボキシ基としては、例えば、ベンゾイルオキシ基等が挙げられる。

【0259】

・第三の化合物の製造方法

第三の化合物は、例えば、国際公開第2012/153780号、及び国際公開第2013/038650号等に記載の方法により製造することができる。また、例えば、目的物に合わせた既知の代替反応、及び原料を用いることで、第三の化合物を製造できる。

【0260】

30

・第三の化合物の具体例

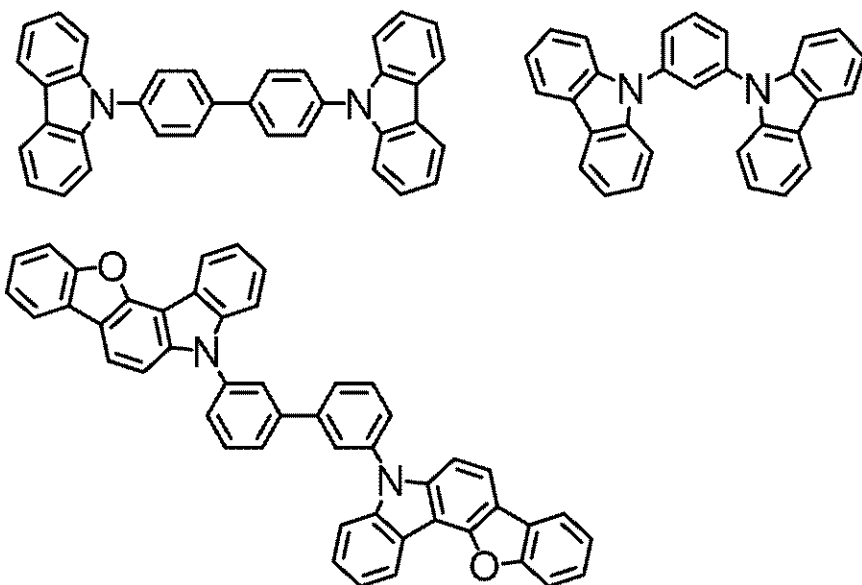
本実施形態に係る第三の化合物の具体例を以下に示す。なお、本発明における第三の化合物は、これらの具体例に限定されない。

【0261】

40

50

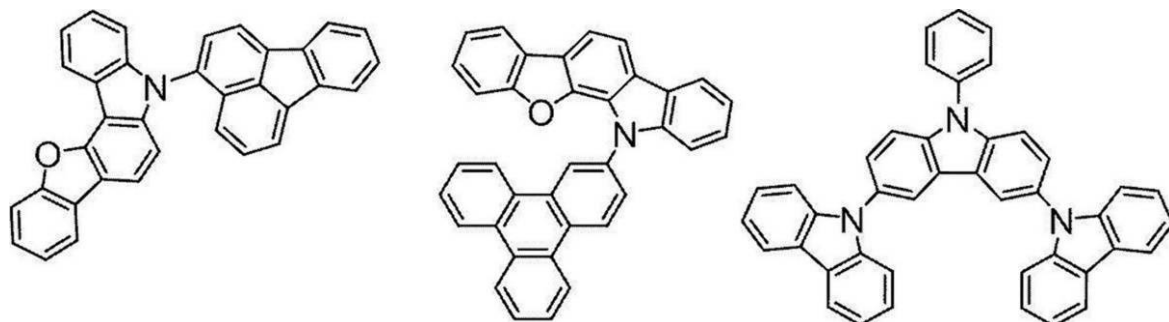
【化 5 8】



10

【 0 2 6 2】

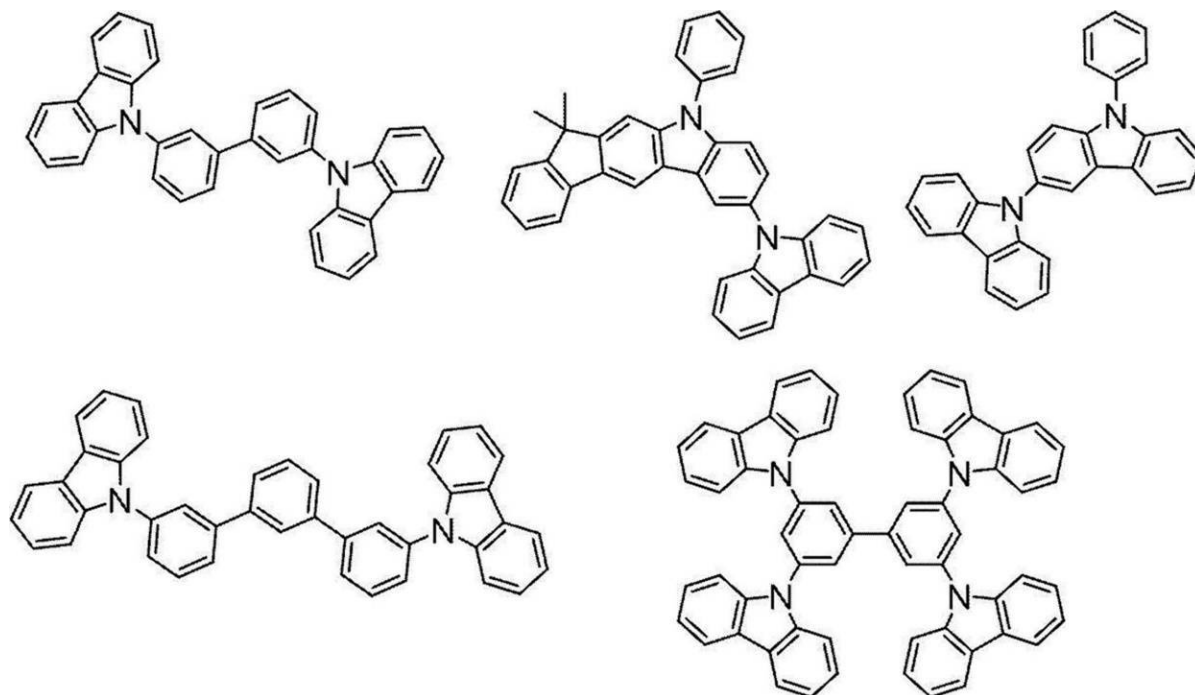
【化 5 9】



20

【 0 2 6 3】

【化 6 0】



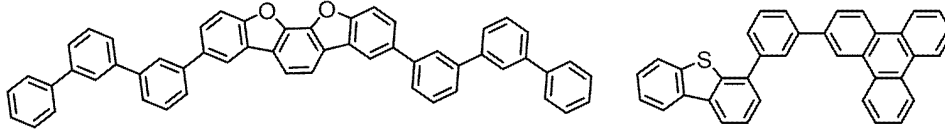
30

40

【 0 2 6 4】

50

【化 6 1】



【0 2 6 5】

(発光層における第一の化合物、第二の化合物、及び第三の化合物の関係)

本実施形態の有機 EL 素子において、発光層が、第二の化合物と、第三の化合物とを含む場合、第二の化合物の最低励起一重項エネルギー $S_1(M2)$ と、第三の化合物の最低励起一重項エネルギー $S_1(M3)$ とは、下記数式 (数 2) の関係を満たすことが好ましい。

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

【0 2 6 6】

第三の化合物の T_{77K} におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M3)$ は、第一の化合物の T_{77K} におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M1)$ よりも大きいことが好ましい。

第三の化合物の T_{77K} におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M3)$ は、第二の化合物の T_{77K} におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M2)$ よりも大きいことが好ましい。

【0 2 6 7】

第一の化合物の最低励起一重項エネルギー $S_1(M1)$ と、第二の化合物の最低励起一重項エネルギー $S_1(M2)$ と、第三の化合物の最低励起一重項エネルギー $S_1(M3)$ とは、下記数式 (数 2 A) の関係を満たすことが好ましい。

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

【0 2 6 8】

第一の化合物の T_{77K} におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M1)$ と、第二の化合物の T_{77K} におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M2)$ と、第三の化合物の T_{77K} におけるエネルギーギャップ $T_{77K}(M3)$ とは、下記数式 (数 2 B) の関係を満たすことが好ましい。

$$T_{77K}(M3) > T_{77K}(M2) > T_{77K}(M1) \cdots (\text{数 } 2 B)$$

【0 2 6 9】

本実施形態の有機 EL 素子を発光させたときに、発光層において、主に第一実施形態の化合物が発光していることが好ましい。

本実施形態の有機 EL 素子は、第三実施形態の有機 EL 素子と同様に、緑色発光することが好ましい。

本実施形態の有機 EL 素子が緑色発光する場合、有機 EL 素子から発光する光の主ピーク波長は、500 nm 以上 560 nm 以下であることが好ましい。

有機 EL 素子から発光する光の主ピーク波長は、第三実施形態の有機 EL 素子と同様の方法で測定することができる。

【0 2 7 0】

・発光層における化合物の含有率

発光層が第一の化合物、第二の化合物、及び第三の化合物を含んでいる場合、当該発光層中の第一の化合物、第二の化合物、及び第三の化合物の含有率は、例えば、以下の範囲であることが好ましい。

第一の化合物の含有率は、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 2 質量% 以下であることがさらに好ましい。

第二の化合物の含有率は、10 質量% 以上 80 質量% 以下であることが好ましく、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。

10

20

30

40

50

第三の化合物の含有率は、10質量%以上80質量%以下であることが好ましい。

発光層における第一の化合物、第二の化合物、及び第三の化合物の合計含有率の上限は、100質量%である。なお、本実施形態は、発光層に、第一の化合物、第二の化合物、及び第三の化合物以外の材料が含まれることを除外しない。

発光層は、第一の化合物を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、第二の化合物を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、第三の化合物を1種のみ含んでもよいし、2種以上含んでもよい。

【0271】

図5は、発光層における第一の化合物、第二の化合物、及び第三の化合物のエネルギー準位の関係の一例を示す図である。図5において、S0は、基底状態を表す。S1(M1)は、第一の化合物の最低励起一重項状態を表し、T1(M1)は、第一の化合物の最低励起三重項状態を表す。S1(M2)は、第二の化合物の最低励起一重項状態を表し、T1(M2)は、第二の化合物の最低励起三重項状態を表す。S1(M3)は、第三の化合物の最低励起一重項状態を表し、T1(M3)は、第三の化合物の最低励起三重項状態を表す。図5中のS1(M2)からS1(M1)へ向かう破線の矢印は、第二の化合物の最低励起一重項状態から第一の化合物へのフェルスター型エネルギー移動を表す。

図5に示すように、第二の化合物としてΔST(M2)の小さな化合物(遅延蛍光発光性材料)を用いると、最低励起三重項状態T1(M2)は、熱エネルギーにより、最低励起一重項状態S1(M2)に逆項間交差が可能である。そして、第二の化合物の最低励起一重項状態S1(M2)から第一の化合物へのフェルスター型エネルギー移動が生じ、最低励起一重項状態S1(M1)が生成する。この結果、第一の化合物の最低励起一重項状態S1(M1)からの蛍光発光を観測することができる。このTADFメカニズムによる遅延蛍光を利用することによっても、理論的に内部量子効率を100%まで高めることができると考えられている。

【0272】

本実施形態に係る有機EL素子は、第一実施形態の化合物を含むので、性能が向上する。一実施形態によれば、駆動電圧が低く、EQEが高く、素子から放射される光の主ピーク半値幅が狭い有機EL素子を提供できる。

【0273】

〔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。

【0274】

〔実施形態の変更〕

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、改良などは、本発明に含まれる。

【0275】

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つの有機層が上記実施形態で説明した条件を満たしていればよく、少なくとも1つの発光層が、第一実施形態の化合物を含んでいることが好ましい。複数の発光層のうち1つの発光層が、第一実施形態の化合物を含んでいる場合、例えば、その他の発光層が、蛍光発光型の発光層であっても、三重項励起状態から直接基底状態への電子遷移による発光を利用した燐光発光型の発光層であってもよい。

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

【0276】

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

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

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

10

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

発光層と障壁層とは接合していることが好ましい。

【0277】

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

【実施例】

20

【0278】

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

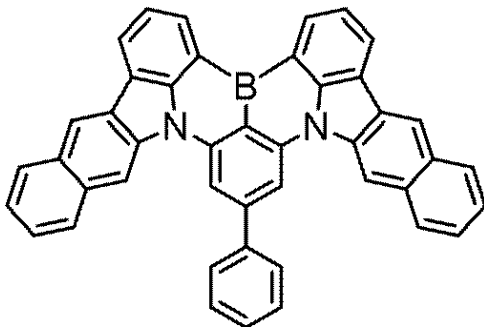
【0279】

<化合物>

実施例1の有機EL素子の製造に用いた一般式(1)で表される化合物を以下に示す。

【0280】

【化62】



30

GD-1

【0281】

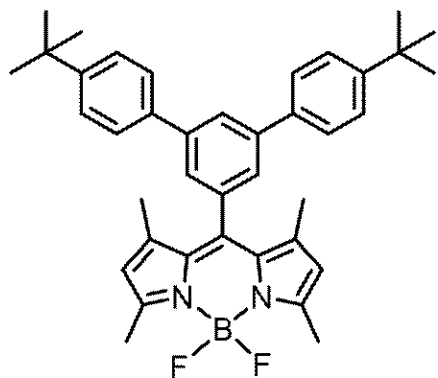
40

比較例1の有機EL素子の製造に用いた比較化合物を以下に示す。

【0282】

50

【化 6 3】



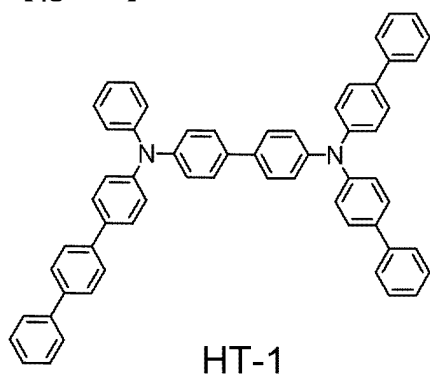
Ref-1

【 0 2 8 3】

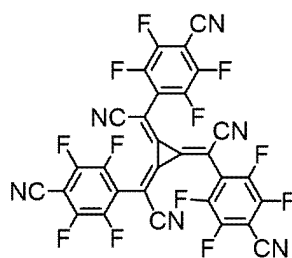
実施例及び比較例に係る有機 E L 素子の製造に用いたその他の化合物を以下に示す。

【 0 2 8 4】

【化 6 4】



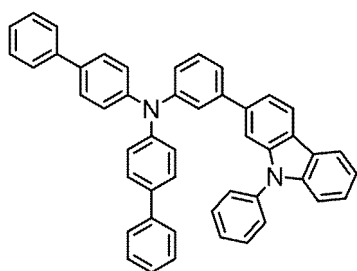
HT-1



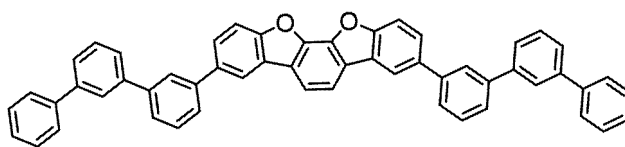
HA

【 0 2 8 5】

【化 6 5】



HT-2



D-1

【 0 2 8 6】

10

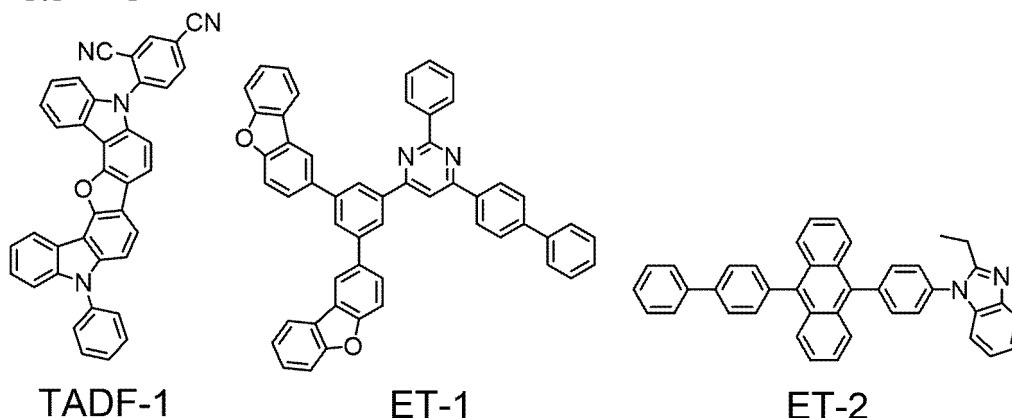
20

30

40

50

【化 6 6】



10

【 0 2 8 7】

<有機 E L 素子の作製>

有機 E L 素子を以下のように作製し、評価した。

【 0 2 8 8】

(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。

20

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

次に、正孔注入層上に、化合物 HT-1 を蒸着し、正孔注入層上に膜厚 110 nm の第一正孔輸送層を形成した。

次に、この第一正孔輸送層上に、化合物 HT-2 を蒸着し、膜厚 10 nm の第二正孔輸送層を形成した。

次に、この第二正孔輸送層上に、第一の化合物としての化合物 GD-1 と、第二の化合物としての化合物 TADF-1 と、第三の化合物としての化合物 D-1 とを共蒸着し、膜厚 25 nm の発光層を形成した。発光層における化合物 TADF-1 の濃度を 25 質量%とし、化合物 GD-1 の濃度を 1 質量%とし、化合物 D-1 の濃度を 74 質量%とした。

30

次に、この発光層上に、化合物 ET-1 を蒸着し、膜厚 5 nm の第一電子輸送層を形成した。

次に、この第一電子輸送層上に、化合物 ET-2 を蒸着し、膜厚 50 nm の第二電子輸送層を形成した。

次に、この第二電子輸送層上に、フッ化リチウム (LiF) を蒸着し、膜厚 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。

40

実施例 1 の素子構成を略式的に示すと、次のとおりである。

ITO (130) / HT-1:HA (10,97%:3%) / HT-1 (110) / HT-2 (10) / D-1:TADF-1:GD-1 (25,74%:25%:1%) / ET-1 (5) / ET-2 (50) / LiF (1) / Al (80)

なお、括弧内の数字は、膜厚（単位：nm）を示す。

同じく括弧内において、パーセント表示された数字（97%：3%）は、正孔注入層における化合物 HT-1 及び化合物 HA の割合（質量%）を示し、パーセント表示された数字（74%：25%：1%）は、発光層における第三の化合物、第二の化合物、及び第一の化合物の割合（質量%）を示す。以下、同様の表記とする。

【 0 2 8 9】

50

(比較例 1)

比較例 1 の有機 EL 素子は、実施例 1 における化合物 GD-1 を表 2 に記載の第一の化合物に置き換えたこと以外、実施例 1 と同様にして作成した。

【0290】

<有機 EL 素子の評価>

作製した有機 EL 素子について、以下の評価を行った。評価結果を表 2 に示す。また、各実施例の発光層で使用した一般式 (1) の化合物の最低励起一重項エネルギー S_1 及び主ピーク波長、第二の化合物の熱活性遅延蛍光性 (ΔST 及び $Delay/Prompt$ 比)、及び最低励起一重項エネルギー S_1 、並びに第三の化合物の最低励起一重項エネルギー S_1 も表 2 に示す。

【0291】

・駆動電圧 (V)

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

【0292】

・CIE1931 色度

有機 EL 素子の電流密度が 10 mA/cm^2 となるように素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計 CS-2000 (コニカミノルタ株式会社製) で計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、 CIE_x 及び CIE_y を算出した。

【0293】

・外部量子効率 EQE

有機 EL 素子の電流密度が 10 mA/cm^2 となるように素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計 CS-2000 (コニカミノルタ株式会社製) で計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、ランバシアン放射を行ったと仮定し外部量子効率 EQE (単位: %) を算出した。

【0294】

・主ピーク波長 (λ_p) 及び発光半値幅 FWHM

有機 EL 素子の電流密度が 10 mA/cm^2 となるように素子に電圧を印加した時の分光放射輝度スペクトルを分光放射輝度計 CS-2000 (コニカミノルタ株式会社製) で計測した。得られた分光放射輝度スペクトルから、主ピーク波長 λ_p (単位: nm) を求めた。また、得られた分光放射輝度スペクトルから、発光半値幅 FWHM (単位: nm) を測定した。

【0295】

10

20

30

40

50

【表 2】

発光層										素子評価結果					
	第一の化合物			第二の化合物				第三の化合物		駆動電圧 [V]	CIE _x	CIE _y	EQE [%]	λ _p [nm]	FWHM [nm]
	名称	S ₁ [eV]	λ _p [nm]	名称	S ₁ [eV]	ΔST [eV]	Delay /Prompt	名称	S ₁ [eV]						
実施例1	GD-1	2.44	504	TADF-1	2.82	<0.01	> 0.05	D-1	3.63	3.92	0.217	0.686	9.13	515	25
比較例1	Ref-1	2.39	515	TADF-1	2.82	<0.01	> 0.05	D-1	3.63	4.30	0.256	0.674	3.98	521	32

【0296】

実施例1に係る有機EL素子と比較例1に係る有機EL素子とを対比すると、実施例1の方が、駆動電圧が低く、EQEが高く、半値幅が狭かった。一般式（1）で表される化合物において、一般式（2）で表される環を有し、かつ、R₁₅～R₁₇で表される特定の位置に置換基を導入することにより、細い発光スペクトルを維持しつつ緑色で効率的に発光させることができることがわかる。

【0297】

<化合物の評価>

表2中に記載した化合物の物性値は、以下の方法で測定した。

【0298】

(遅延蛍光性)

・化合物TADF-1の遅延蛍光性

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

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

10

前記化合物TADF-1が吸収する波長のパルス光（パルスレーザーから照射される光）で励起された後、当該励起状態から即座に観察されるPrompt発光（即時発光）と、当該励起後、即座には観察されず、その後観察されるDelay発光（遅延発光）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_P とし、Delay発光（遅延発光）の量を X_D としたときに、 X_D/X_P の値が0.05以上であることを意味する。

20

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

化合物TADF-1について、Delay発光（遅延発光）の量がPrompt発光（即時発光）の量に対して5%以上あることが確認された。

具体的には、化合物TADF-1について、 X_D/X_P の値が0.05以上であった。表1中、「Delay/Prompt」は、「 X_D/X_P 」の値を意味し、 X_D/X_P の値が「>0.05」は、0.05を超える値であったことを意味する。

30

【0299】

・ ΔST

化合物GD-1、Ref-1、TADF-1及びD-1の最低励起一重項エネルギー S_1 を、前述の溶液法により測定した。化合物TADF-1の77[K]におけるエネルギーギャップ T_{77K} を前述の「三重項エネルギーと77[K]におけるエネルギーギャップとの関係」で記載したエネルギーギャップ T_{77K} の測定方法により測定した。

測定した最低励起一重項エネルギー S_1 と77[K]におけるエネルギーギャップ T_{77K} とに基づいて、化合物TADF-1の ΔST を算出した。

【0300】

・化合物の主ピーク波長

測定対象となる化合物の5 $\mu\text{mol/L}$ トルエン溶液を調製して石英セルに入れ、常温（300K）でこの試料の蛍光スペクトル（縦軸：蛍光発光強度、横軸：波長とする。）を測定した。本実施例では、蛍光スペクトルを日立社製の分光蛍光光度計（装置名：F-7000）で測定した。なお、蛍光スペクトル測定装置は、ここで用いた装置に限定されない。蛍光スペクトルにおいて、発光強度が最大となる蛍光スペクトルのピーク波長を化合物の主ピーク波長とした。

40

【0301】

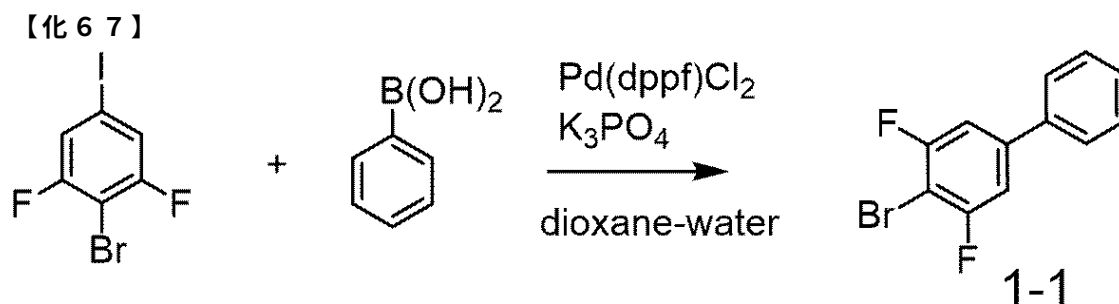
<化合物の合成>

(合成例1) 化合物GD-1の合成

[中間体1-1の製造]

【0302】

50



【0303】

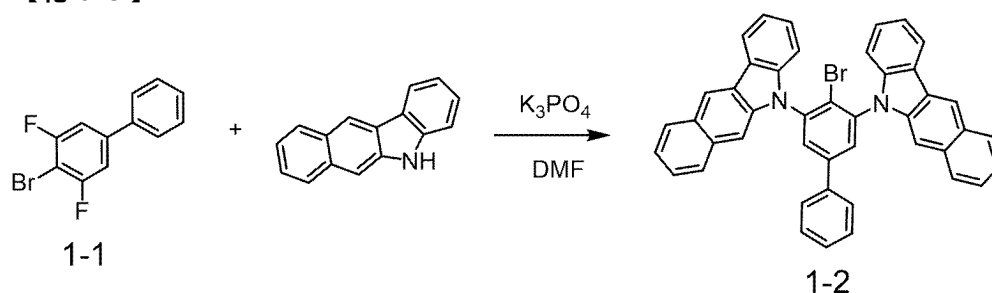
アルゴン雰囲気下、2-ブromo-1,3-ジフルオロ-5-ヨードベンゼン (47.8 g)、フェニルボロン酸 (18.29 g)、リン酸三カリウム (39.8 g)、[1,1-ビス(ジフェニルホスフィノ)フェロセン]パラジウム(II)ジクロリド (1.09 g)、1,4-ジオキサン (250 mL)、及び水 (125 mL) の混合物を室温で4時間攪拌した。得られた混合物にトルエン (250 mL) および水 (200 mL) を加えて、水層をトルエンで抽出し、有機層を飽和食塩水で洗浄した後、硫酸マグネシウムで乾燥させ溶媒を減圧留去した。得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製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

【0304】

[中間体 1-2 の製造]

【0305】

【化 6 8】



【0306】

窒素雰囲気下、中間体 1-1 (2.69 g)、ベンゾ[b]カルバゾール (4.34 g)、リン酸三カリウム (12.7 g)、及びジメチルホルムアミド (50 mL) の混合物を 140 °C で 3.5 時間攪拌した。室温に冷却後、水 (200 mL) に加えて、析出した固体を濾別し、水で洗浄した。得られた固体をジクロロメタンに溶解後、シリカゲルに吸着させて、シリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、中間体 1-2 を 3.16 g (収率 47%) 得た。反応スキーム中、DMF は、ジメチルホルムアミドである。

【0307】

[化合物 GD-1 の製造]

【0308】

10

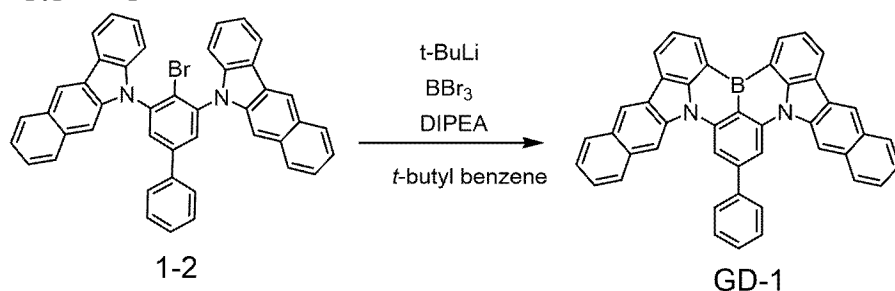
20

30

40

50

【化 6 9】



【 0 3 0 9 】

アルゴン雰囲気下、中間体 1-2 (1.2 g) を *t*-ブチルベンゼン (18 mL) に加え、0℃に冷却した後、1.9 M の *t*-ブチルリチウムペンタン溶液 (1.9 mL) を滴下した。滴下後、45℃まで昇温して15分攪拌した後、反応混合物を-55℃まで冷却して、三臭化ホウ素 (0.43 mL) を加えて、室温まで昇温し1時間攪拌した。その後、0℃に冷却して *N,N*-ジイソプロピルエチルアミン (0.79 mL) を加え、発熱が収まるまで室温で攪拌した後、145℃まで昇温して2.5時間攪拌した。室温に冷却後、1 N の酢酸カリウム水溶液を加え、析出した固体を濾取し、水及びエタノールで洗浄した。濾取した固体を塩化メチレンに懸濁させて、固体を濾取した後、塩化メチレンでさらに洗浄し、橙色固体を527 mg (収率49%) 得た。この橙色固体は、マスペクトル分析の結果、目的物であり、分子量592.51に対し、593.3 [M+H]⁺であった。

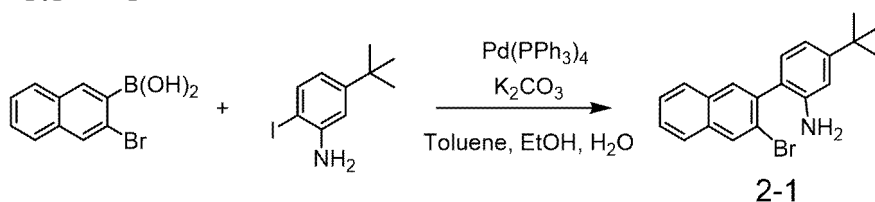
【 0 3 1 0 】

(合成例 2) 化合物 2 の合成

[中間体 2-1 の製造]

【 0 3 1 1 】

【化 7 0】



【 0 3 1 2 】

アルゴン雰囲気下、3-ブロモ-2-ナフタレンボロン酸 (24.09 g) および炭酸カリウム (12.44 g) をトルエン (140 mL) に加えた。そこに、4-*t*-ブチル-2-ヨードアニリン (16.51 g)、エタノール (70 mL) および水 (35 mL) を加えた。さらに、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0) (2.08 g) を加え、65℃で7時間攪拌した。室温に冷却後、トルエン (50 mL) および水 (200 mL) を加え、水層をトルエンで抽出した。分離した有機層を水および飽和食塩水で洗い、硫酸ナトリウムで乾燥させた。固体を濾別した後、反応溶液を減圧下で濃縮して、得られた残渣を塩化メチレンを用いたシリカゲルクロマトグラフィーにて精製し、中間体 2-1 を18.89 g (収率89%) 得た。反応スキーム中、Pd(PPh₃)₄ は、テトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)である。

【 0 3 1 3 】

[中間体 2-2 の製造]

【 0 3 1 4 】

10

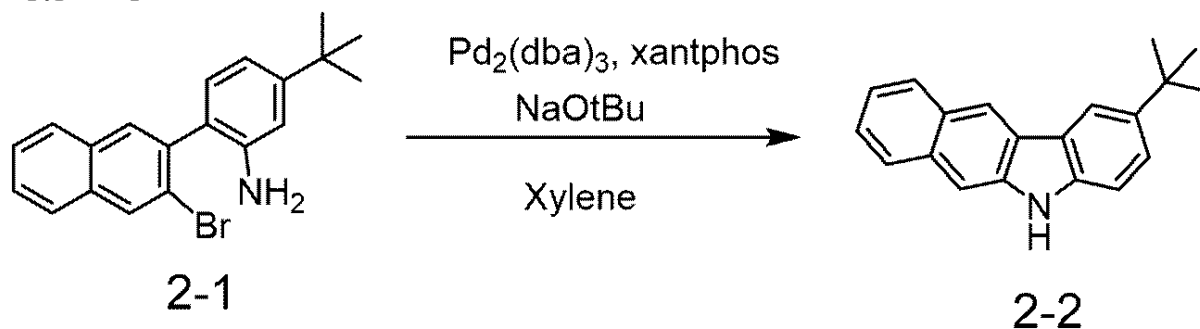
20

30

40

50

【化 7 1】



10

【0 3 1 5】

アルゴン雰囲気下、中間体 2-1 (18.07 g) およびナトリウム *t*-ブトキシド (6.86 g) をキシレン (250 mL) に加えた。そこに、キサントホス (1.18 g) およびトリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) (0.93 g) を加え、110℃で7時間攪拌した。室温に冷却後、200 mL の水を反応混合物に加え、100 mL のトルエンを用いて抽出した。分離した有機層を水および飽和食塩水で洗い、硫酸ナトリウムで乾燥させた。固体を濾別した後、反応溶液を減圧下で濃縮して、得られた残渣をトルエンから再結晶化させた。析出した結晶を濾取した後、ヘプタンで洗浄し、減圧下で乾燥することにより、中間体 2-2 を 11.67 g (収率 84%) 得た。反応スキーム中、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ は、トリス (ジベンジリデンアセトン) ジパラジウム (0) であり、NaOtBu は、ナトリウム *t*-ブトキシドである。

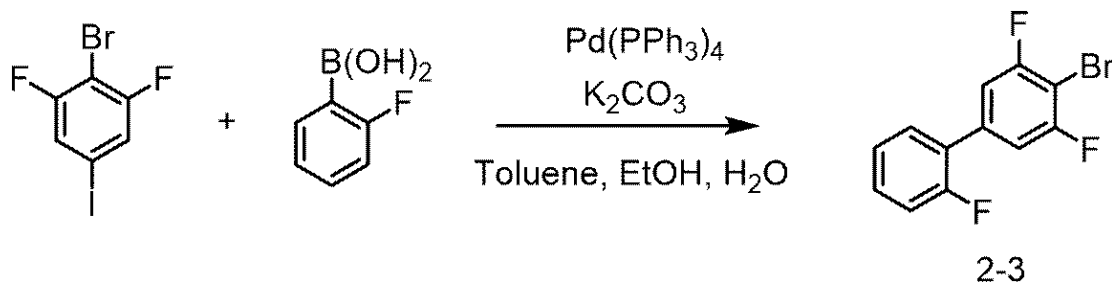
20

【0 3 1 6】

【中間体 2-3 の製造】

【0 3 1 7】

【化 7 2】



30

【0 3 1 8】

アルゴン雰囲気下、2-ブロモ-1,3-ジフルオロ-5-ヨードベンゼン (7.97 g)、2-フルオロフェニルボロン酸 (3.67 g) および炭酸カリウム (5.18 g) をトルエン (60 mL)、エタノール (30 mL) および水 (15 mL) の混合溶媒に加えた。さらに、テトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) (0.87 g) を加え、65℃で6時間攪拌した。室温に冷却後、トルエン (20 mL) および水 (100 mL) を加え、水層をトルエンで抽出した。分離した有機層を水および飽和食塩水で洗い、硫酸ナトリウムで乾燥させた。固体を濾別した後、反応溶液を減圧下で濃縮して、得られた残渣を塩化メチレンを用いたシリカゲルクロマトグラフィーにて精製し、中間体 2-3 を 3.07 g (収率 43%) 得た。

40

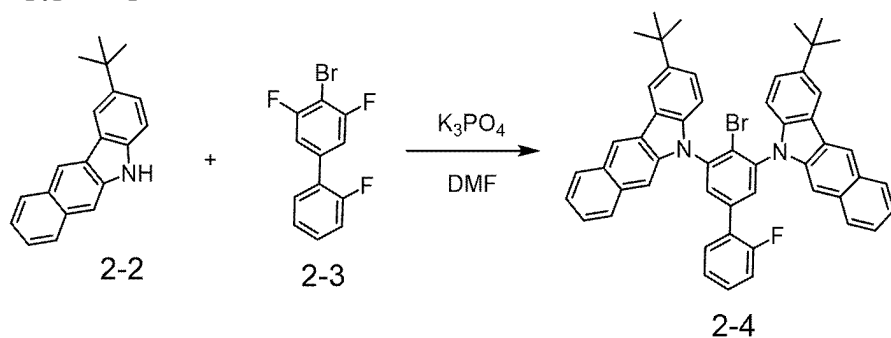
【0 3 1 9】

【中間体 2-4 の製造】

【0 3 2 0】

50

【化 7 3】



10

【0 3 2 1】

窒素雰囲気下、中間体 2-2 (4.48 g)、中間体 2-3 (2.30 g)、リン酸三カリウム (13.58 g)、及びジメチルホルムアミド (50 mL) の混合物を 100℃ で 15 時間攪拌した。室温に冷却後、水 (400 mL) に加えて、析出した固体を濾別し、水で洗浄した。得られた固体をジクロロメタンに溶解後、シリカゲルに吸着させて、塩化メチレンを用いたシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、中間体 2-4 を 4.88 g (収率 76%) 得た。

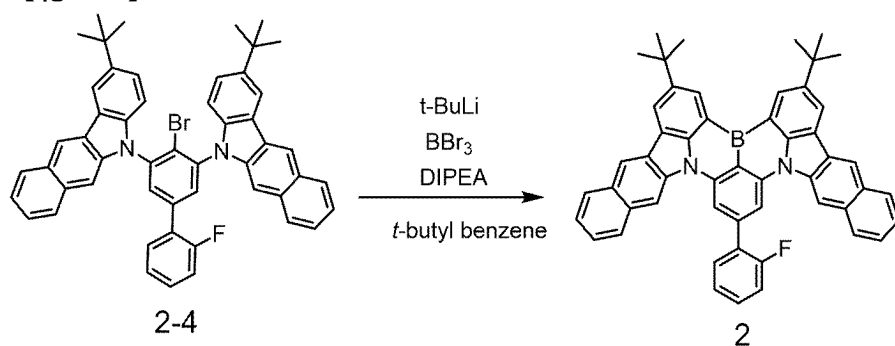
【0 3 2 2】

【化合物 2 の製造】

20

【0 3 2 3】

【化 7 4】



30

【0 3 2 4】

アルゴン雰囲気下、中間体 2-4 (4.76 g) を *t*-ブチルベンゼン (74 mL) に加え、-10℃ に冷却した後、1.9 M の *t*-ブチルリチウムペンタン溶液 (6.32 mL) を滴下した。滴下後、70℃ まで昇温して 30 分攪拌した後、反応混合物を -55℃ まで冷却して、三臭化ホウ素 (1.25 mL) を加えて、室温まで昇温し 1 時間攪拌した。その後、0℃ に冷却して *N,N*-ジイソプロピルエチルアミン (2.62 mL) を加え、発熱が収まるまで室温で攪拌した後、145℃ まで昇温して 19 時間攪拌した。室温に冷却後、200 mL の酢酸エチルおよび 100 mL の水を加え、析出した固体を濾取し、水及び酢酸エチルで洗浄した。濾取した固体を減圧下で乾燥させ、橙色固体を 1.45 g (収率 33%) 得た。この橙色固体は、マスペクトル分析の結果、目的物であり、分子量 722.71 に対し、723.3 [M+H]⁺ であった。

40

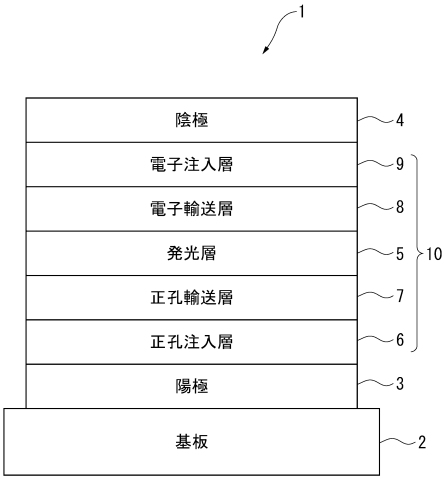
【符号の説明】

【0 3 2 5】

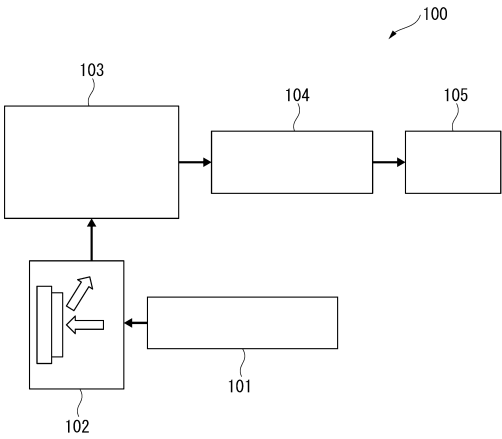
1…有機 EL 素子、2…基板、3…陽極、4…陰極、5…発光層、6…正孔注入層、7…正孔輸送層、8…電子輸送層、9…電子注入層。

50

【図面】
【図 1】



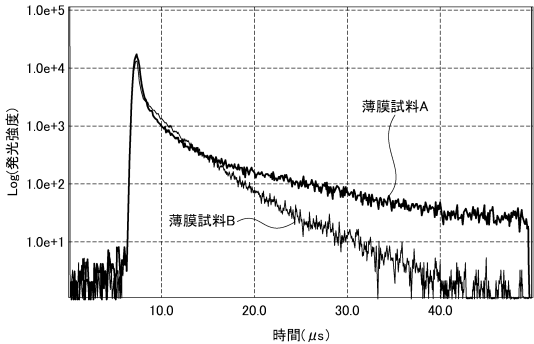
【図 2】



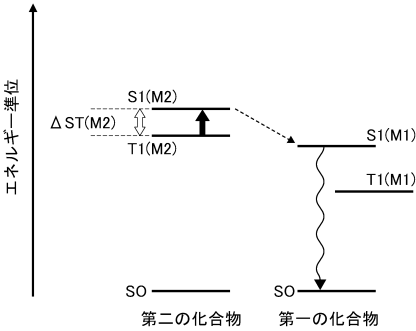
10

20

【図 3】



【図 4】

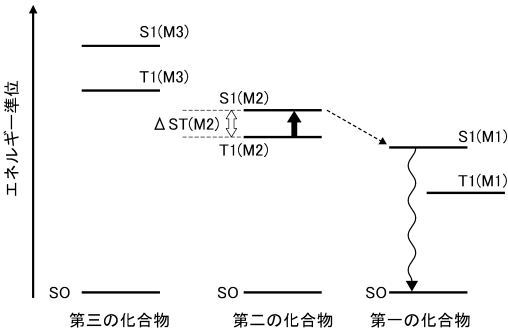


30

40

50

【図 5】



10

20

30

40

50

フロントページの続き

- (56)参考文献 米国特許出願公開第2020/0066997 (US, A1)
 欧州特許出願公開第03564249 (EP, A1)
 中国特許出願公開第110407859 (CN, A)
 中国特許出願公開第110790782 (CN, A)
 中国特許出願公開第110627822 (CN, A)
- (58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)
 C07F 5/
 C09K 11/
 H10K 50/
 CAplus/REGISTRY (STN)